

Fluctuation theorems under divergent entropy production and their applications for fundamental problems in statistical physics

その他のタイトル	発散するエントロピー生成の下での揺らぎの定理とその統計物理学の基礎的問題への応用
学位授与年月日	2018-03-22
URL	http://doi.org/10.15083/00077919

論文審査の結果の要旨

氏名 村下 湧音

本論文は、非平衡系においてエントロピー生成が発散する状況でのゆらぎの定理とその統計物理学の基礎問題への応用について述べたもので、7章 125 頁からなる。1990 年代に非平衡系に関するゆらぎの定理が発見され、その後、様々な状況への拡張がなされた。ゆらぎの定理は、システムが負のエントロピーを生成する確率が正のエントロピーを生成する確率に比べて、指数関数的に小さいことを表している。ゆらぎの定理から熱力学第二法則が導出され、平衡に近い極限では、オンサーガー関係や Green・久保関係式が導かれることから、平衡から遠く離れた系で成り立つ一般的な法則であると考えられている。本博士論文では、ゆらぎの定理をエントロピー生成が発散するような2つの極限的な状況について考察したものである。その一つは、確率測度の特異性により負のエントロピー生成が発散する場合であり、著者が絶対不可逆性と名付けた状況に関するものである。他の一つは、システムが複数の熱浴と接しており、過減衰極限ではエントロピー生成が正に発散する場合である。著者はこれらの場合でも絶対不可逆な場合の確率を適切に差し引くことで、ゆらぎの定理が成り立つことを明らかにしている。また、筆者はこれらの結果を、統計力学における2つの基本的なパラドックス、すなわち Gibbs のパラドックスと Loschmidt のパラドックスに適用することで、これらパラドックスを解決するための道筋を与えている。

1 章では、歴史的な背景を概観し、本論文の概要と構成について述べている。

2 章は、ゆらぎの定理の解説となっている。ゆらぎの定理の発見をレビューし、定常状態と過渡状態について成り立つことを述べている。また、仕事に関するゆらぎの定理や Jarzynski 等式、Crooks のゆらぎの定理などについて述べ、それらの関係式が全て、元のプロセスの確率と参照プロセスの確率の比がエントロピー生成によって定量化できるという共通の構造を持っていることについて述べている。

3 章では、絶対不可逆性がある場合のゆらぎの定理について述べている。自由膨張の場合を例に、ゆらぎの定理が適用できない場合について述べ、その原因が逆過程に対応する順過程が存在しないことに起因し、エントロピー生成が負に発散するためであることを明らかにしている。著者は、このような状況を絶対不可逆性と呼び、それを回避する方法として、ルベグの分解定理を用いて絶対不可逆な場合の寄与を分離することにより、ゆらぎの定理が成り立つことを明らかにしている。

4 章では、システムが複数の熱浴と接触する場合の過減衰近似におけるゆらぎの定理について述べている。このような状況では、一般に熱力学量の評価が速度の緩和時間の逆数に比例して増大するため、従来のナイーブな過減衰近似は正しい結果を与えないが、著者は熱力学量の生成母関数の特異摂動を行うことで、位置の自由度に関してゆらぎの定理が成り立つ

ことを導いている。

5章では、Gibbsのパラドックスを絶対不可逆性の概念から議論している。Gibbsパラドックスの一側面として、熱力学エントロピーと統計力学エントロピーの関係について、熱力学極限で示量性を満たす条件を課すことで解決する方法が知られていたが、有限の自由度の場合に関する証明は存在しなかった。著者は、この問題が絶対不可逆性のある場合に相当することを看破し、著者らの方法により適切に扱う事で、少数自由度の場合でもGibbsのパラドックスが回避できることを明らかにした。

6章では、Loschmidtのパラドックスについて絶対不可逆性の観点から議論している。著者は、Bunimovichビリヤード系を取り上げ、位相空間の構造のフラクタル性からLoschmidtのパラドックスを解釈することを試みている。システムはハミルトン系であり、相空間の体積は保存されるものの、初期値の集合をある部分空間に取り数値計算すると、その短時間の時間発展がフラクタル構造を持つことをRényi -0 ダイバージェンスと呼ばれる量を導入することで明らかにしている。時間反転した場合にエントロピー生成が負になる軌道はこれらのフラクタルな集合上に存在するため、エントロピー生成が負になる初期値が選ばれる確率は、正になる軌道の初期値が選ばれる確率に比べて圧倒的に少なくなることを議論している。

7章は結論であり、本論文による成果のまとめと関連する仕事や将来への課題について述べている。

なお、本論文の内容は、論文提出者が主体となって証明と解析、および数値計算を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。したがって、本論文は、統計物理学における基本概念に関して新たな知見を与えるものであり、博士(理学)の学位を授与するに値すると認める。