24pYC-4

非平衡定常測度における弱カノニカル性

佐々真一（東大総合文化）、田崎晴明（学習院大理）

Weak canonicality in Nonequilibrium Steady Measures

Shin-ichi Sasa (U. Tokyo), Hal Tasaki (Gakushuin U.)

われわれは、非平衡定常状態の熱力学 (SST) についての考察を進める中で、非平衡定常状態が持つと期待されるいくつかの性質に注目し、それらがミクロにみた系の測度にどのような制約を加えることになるかを検討してきた。とくに SST での第二法則に深く関連する弱カノニカル性という概念を提唱したい。詳細についてはプレプリント (`cond-mat/0411052`) の付録を参照されたい。

一辺が L の立方体状の空間に N 個の粒子がとじこめられた系を考える。粒子の位置座標を $\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N$ とし、これらをまとめて $X = (\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ と書く。今、X は何らかの定常な確率過程（たとえば、格子ガスの川崎ルール、連続系の over-damped Langevin 方程式）で時間発展すると仮定する。ここでは、とくに、外場に駆動された流れのある系、外力によって「ずり」の生じた系、熱伝導のある系、など、非平衡定常状態を実現するような系を念頭に置いている。（非平衡定常状態に対応する）定常測度を $P_0(X)$ と書く。

ここで、系に一体のポテンシャル $u(\mathbf{r})$ を新たに加える。とうぜん、時間発展のルールも変更される。新しい定常測度を $P_{u(\cdot)}(X)$ と書く。

定義：ある定数 β があり、一体ポテンシャルの集合 $\mathcal{U}$ に属する任意の $u(\cdot)$ について、

$$P_{u(\cdot)}(X) = C[u(\cdot)] \, \exp[-\beta \sum_{i=1}^{N} u(\mathbf{r}_i)] \, P_0(X) \tag{1}$$

が成立するとき（$C[u(\cdot)]$ は規格化定数）、この系は**ポテンシャルの集合 $\mathcal{U}$ に関して、弱カノニカル性 (weak canonicality) をもつ**という。

確率過程が平衡にある系を記述しているなら、$P_0(X)$ や $P_{u(\cdot)}(X)$ はカノニカル分布になるので、(1) はつねに成立する。この場合、$\mathcal{U}$ はすべての一体ポテンシャルの集合にとることができる。**流れのある非平衡定常状態においても、ポテンシャルの集合 $\mathcal{U}$ を適切にとれば、弱カノニカル性 (1) が成立するのではないか**というのがわれわれの予想である。たとえば、x 軸方向の外場によって流れが駆動されている系の場合、$u(y, z)$ のように x に依存しない任意のポテンシャルの集合を $\mathcal{U}$ とすれば、弱カノニカル性が成立するのではないかと期待される。この予想は、もっとも単純な非平衡格子ガスである ASEP(asymmetric exclusion process) については、厳密に示すことができる。

SST では、可能な操作を（系がもつ非等方性を考慮して）制限した範囲での最小仕事の原理が提唱されている。これは弱カノニカル性と本質的に関わっている。自由エネルギーを $\Phi[u(\cdot)] = -\beta^{-1} \log \int dX \, \exp[-\beta \sum_{i=1}^{N} u(\mathbf{r}_i)]$ と定義すると（これは SST 自由エネルギーの Legendre 変換である）、次の定理がなりたつ。

定理：弱カノニカル性をもつ系を考える。はじめ、系のポテンシャルは $u_{\mathrm{i}}(\cdot)$ で、状態は対応する定常測度とする。ポテンシャルを、$u_{\mathrm{i}}(\cdot)$ から $u_{\mathrm{f}}(\cdot)$ まで、$\mathcal{U}$ の範囲で、任意のやり方で時間変化させる。この際、操作者がおこなう仕事の合計を W とすると、最小仕事の原理 $W \geq \Phi[u_{\mathrm{f}}(\cdot)] - \Phi[u_{\mathrm{i}}(\cdot)]$ が成立する。