カレントのキュムラント母関数と熱力学関数

根本　孝裕
東京大学大学院総合文化研究科　広域科学専攻　相関基礎科学系

背景

熱力学関数は、平衡状態にある系の巨視的な状態を特徴付ける関数である。この関数は、マクロな測定量のみから構成され、その普遍的な性質は物理学の至る所で現れる。この熱力学関数を、ミクロを記述する法則から計算する枠組みが、平衡統計力学である。平衡統計力学は、ミクロを記述する力学のハミルトニアンから、実際に力学を解くことなしに、熱力学関数を計算する方法を与えてくれる。重要な点は、その方法が、平衡状態の物理学に対する強力な直感を与えてくれるという点にある。

非平衡系においては、まだ平衡近傍でしかそのような法則は得られていない。現在、非平衡系において最も信頼される理論の一つである線形応答理論は、平衡状態におけるゆらぎが、平衡に近い非平衡系を記述するという非常に分かりやすい直感を与えてくれる。しかし一方で、平衡から遠く離れたときにその理論が破綻することも、その直感から分かってしまう。線形応答理論を超えて、平衡から遠く離れた非平衡系を含む広い範囲で成立する、有用で物理的直感を伴う法則を発見することは、挑戦的な課題である。そのためにも、線形応答理論の基礎である『平衡からの摂動』とは全く別の切り口から、非平衡系を記述する法則を探ることが必要である。

『平衡からの摂動』とは全く別の切り口から非平衡系を記述する法則を探る上で、熱力学関数の数学的構造に着目することが出来る。熱力学関数は、平衡統計力学の枠組みにおいて、物理量の空間平均の大偏差関数、及びそのルジャンドル変換であるキュムラント母関数に対応する。この構造に着目し、物理量の時間平均についての熱力学関数を定義することが出来る。この枠組みは統計熱力学形式と呼ばれる。近年、ゆらぎ定理や相加性原理 (Additivity principle[2]) など、この物理量の時間平均の大偏差関数の性質に注目が集まっている。平衡統計力学のような強力な直感と実用性を兼ね備えた理論の発見のためにも、現在、さらなる研究が必要とされている。

着眼点

我々は、この時間に関する熱力学関数に対して、『熱力学関数の測定』という点に着目する。熱力学関数、すなわち大偏差関数はまれに起こるゆらぎを記述する関数なので、ゆらぎを直接観測することによってその関数を測定することは不可能である。ところが平衡統計力学（熱力学）は、熱力学関数の測定を可能にする。その基礎となるのが熱力学関係式である。実際、ギブス自由エネルギーを熱力学変数に共役な外場で微分すると、その熱

力学変数の期待値が得られる。この関係式をキュムラント母関数（大偏差関数のルジャンドル変換）を用いて表現すると、次のようになる。

$$\frac{\partial G(h,H)}{\partial h} = M^{H+h}. \tag{1}$$

ここで、$G(h,H)$ がキュムラント母関数、h がキュムラント母関数の引数、H が熱力学変数に共役な外場、そして M^{H+h} が外場 $H+h$ のときの熱力学変数の期待値である（簡単のため、H と h が同じ単位を持つとした）。この等式は、まれに起こるゆらぎ（左辺。h の大きい所でのキュムラント母関数の微分の値）を、測定可能な期待値（右辺。余分な外場を加えた別の平衡状態での熱力学変数の期待値）と結びつける関係式である。現在までのところ、以下のように、同様の関係式がランジュバン系で成立することが分かっている。

具体的なモデルと結果

リング上の n 個の粒子を考える。各粒子の位置を $\boldsymbol{x} = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$ と表記し、これらが次のランジュバン方程式に従うとする

$$\dot{x}_i = \frac{1}{\gamma_i} F_i(\boldsymbol{x}) + \sqrt{\frac{2T}{\gamma_i}}\xi_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n). \tag{2}$$

ここで γ_i は抵抗係数、T は温度、そして $\xi_i(t)$ は $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$、$\langle \xi_i(t)\xi_j(s) \rangle = \delta_{i,j}\delta(t-s)$ を満たすガウシアンホワイトノイズである。また $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = \{F_1(\boldsymbol{x}), F_2(\boldsymbol{x}), ..., F_n(\boldsymbol{x})\}$ は相互作用も含めた、粒子に働く力である。各粒子は、力 $F_i(\boldsymbol{x})$ を通して相関を持つことに注意せよ。各粒子の時間平均速度 $V_i(\tau)$ は $V_i(\tau) \equiv (1/\tau)\int_0^\tau dt \dot{x}_i$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ で与えられ、これら V_i をまとめて $\boldsymbol{V} = \{V_1, V_2, \cdots, V_n\}$ と表記する。ここで τ は平均時間である。また、$\boldsymbol{h} = \{h_1, h_2, \cdots, h_n\}$、及び $\boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{V} = \sum_i h_i V_i$ と置き、時間平均速度のキュムラント母関数 $G(\boldsymbol{h})$ を $G(\boldsymbol{h}) = \lim_{\tau\to\infty}(1/\tau)\log\langle e^{\tau \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{V}(\tau)}\rangle$ で定義する。このとき、次式が成り立つことを示すことが出来る。

$$\frac{\partial G(\boldsymbol{h})}{\partial h_i} = V_i^{\boldsymbol{F}+\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}}}. \tag{3}$$

ここで $V_i^{\boldsymbol{F}+\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}}}$ は、(2) 式の力 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$ を、$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}}(\boldsymbol{x})$ に置き換えたときの i 番目の粒子速度の期待値である。ただしこの余分な力 $\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}}(\boldsymbol{x})$ は、系の発熱率に関連したある量を最大にする力として特徴付けられる。

講演内容

講演では上記の内容について話をしたい。具体的に実験で用いる方法 [1] や、$\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{h}}(\boldsymbol{x})$ を特徴付ける変分原理と相加性原理 (Additivity principle[2]) との関連などにも触れたい。

参考文献

[1] T. Nemoto and S. Sasa, arXiv:1009.3379.

[2] T. Bodineau and B. Derrida, Phys. Rev. Lett. **92**, 180601 (2004).