

称号及び氏名 博士（工学） 上田 彰

学位授与の日付 平成 18 年 3 月 3 1 日

論文名 「一次元格子熱伝導系における非平衡定常分布の研究」

論文審査委員 主査 兼田 均
副査 萱沼 洋輔
副査 大同 寛明

論文要旨

近年、線形領域を超えた一般非平衡定常系に対し、熱力学や統計力学を拡張しようとする試みが、新たな展開を迎えつつある。まず、ゆらぎ定理 (fluctuation theorem) や Jarzynski 等式のような非平衡過程に対する新たな関係式が発見された。また、分子モーターのようなメソスコピック系で、エネルギー効率等の熱力学的性質が議論されるようになったことも重要な進展である。これに伴い、ラチェット系などの新たなモデルが研究対象となり、ゆらぎが重要となるスケールでのエネルギー論の構築が試みられている。ラチェット系とは、空間反転対称性が局所的に破れているポテンシャル（非対称周期ポテンシャル）下の粒子系である。さらに、1次元の格子上の粒子系が体積排除相互作用の下で非対称に拡散をする1次元非対称排他過程 (ASEP) などの非平衡定常状態が正確に求まる可解モデルの研究も進展している。

さて、両端に温度の異なる熱浴が取り付けられたバネと質点からなる一次元粒子系を、一次元格子熱伝導系という。格子熱伝導系は典型的な非平衡定常系である。ラチェット系や ASEP などと異なり、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和であるハミルトニアンで記述されるという点で、格子熱伝導系はより基本的である。格子熱伝導系では高温の熱浴から低温の熱浴への熱輸送が起これ、熱流 j は、温度勾配 ∇T に比例すると言う Fourier 則 $j = -\kappa \nabla T$ に従うと考えられてきた。格子熱伝導系は長い研究の歴史を有するにも拘わらず、計算機の高性能化に伴いようやく最近になって明らかになったことも多い。可積分系では、温度勾配は形成されず、熱流が両端の熱浴の温度差に比例するという事は 1960 年代から知られていた。例えば、調和格子の熱伝導問題が解かれたのは 1967 年のことである。しかし、Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 格子のような非線形バネで相互作用する1次元格子熱伝導系での熱伝導率 κ が系の大きさ N に $\kappa \propto N^\alpha$ ($\alpha = 0.37$) のように依存することが明らかになったのは、1997 年のことであった。それ以降の研究により、現在では、粒子間の相互作用だけを含み全運動量が保存されるような1次元系では、熱流の自己相関関数が時間の中間関数となる為に熱伝導率が発散すると考えられている。一方、粒子相互の力だけでなく格子を作る基盤からの作用（オンサイトポテンシャルからの

力)を含むような系では全運動量は保存されず、1次元系で熱伝導率は収束する。 ϕ^4 格子、ding-a-ling 格子、ding-dong 格子、Frenkel-Kontorova 格子はこのクラスに属する。ただし、この一般的なルールには例外も存在することが判明し、Fourier 則が成立する為に必要で十分な条件が何であるか未だに明らかになっていない。

いずれにせよ、これまでの格子熱伝導系の研究は Fourier 則と熱伝導率のみに焦点が絞られ、非平衡定常状態を記述する分布の性質を調べようとする研究は非常に乏しかった。しかし、非平衡系の統計力学を目指そうとすれば、当然分布が問題となるべきである。そこで、我々は、格子熱伝導系における非平衡定常状態を記述する分布の特性について研究を行うことにした。本来ならば平衡統計力学の Gibbs 分布に対応するような非平衡定常状態を記述する位相空間での分布を扱うべきである。しかしながら、それは大自由度なものであり、数値的に調べる訳にはいかない。そこで、各粒子の運動量分布に着目し、Maxwell 分布からどのようにずれるかについて調べた。熱伝導系では、局所平衡が実現し、その結果として局所的な温度や温度勾配について語るができるようになることと期待される。しかし、熱流を生み出すためには、必ず局所平衡からのずれがなければならない。局所平衡からのずれは、粒子間の相関といった効果も生み出すが、運動量分布の Maxwell 分布からのずれとして現れる部分もあるはずである。このずれを詳しく見ることによって、非平衡定常状態についての情報を得ようというのが本論文の目的である。

本論文は5章からなる。

第1章では、研究の背景と目的及び本論文の概要について述べた。また、一次格子熱伝導系及び Langevin 熱浴、Nose-Hoover 熱浴、熱壁の説明を行った。

第2章では、熱伝導の性質が異なる様々な格子モデルと様々な熱浴の組み合わせに対し、非平衡定常分布を求め、運動量分布の Maxwell 分布からのずれが系の大きさ、パラメータ、あるいは熱浴の違いにどのように依存するかを、相対エントロピーや3次モーメント、Maxwell 分布からのずれである尖度 (kurtosis) を求めることにより数値的に調べた。その結果、FPU 格子や ϕ^4 格子では各粒子の相対エントロピーと尖度が同じ傾向のプロファイルを描くのに対し、戸田格子では両者は異なる振舞いを見出された。これは戸田格子では Maxwell 分布からの非対称なずれが存在するため、戸田格子では尖度だけでずれを定量化できないからである。また、全ての格子では熱浴の種類に関らず、熱浴近傍で Maxwell 分布からのずれが最も大きくなることが明らかとなった。このことは、系の両端近傍での状態はバルクの状態と異なることを示していると思われる。更に、系全体の局所平衡分布からのずれの指標として全相対エントロピー (各粒子の相対エントロピーの和) を考え、格子系の両端にある熱浴の温度を固定して系の大きさ N を変えたとき、全相対エントロピーがどのように変化するか調べた。その結果、戸田格子では系の大きさに比例した全相対エントロピーが得られた。これは、粒子ごとのずれが系の大きさを変えても変わらないことを示しており、熱流が両端の熱浴の温度差だけで決まる可積分系の性質の反映である。同様の結果が、弾道的な輸送を示すセルオートマトンで見出されている。一方、FPU 格子と ϕ^4 格子では、システムサイズの増加に対して全相対エントロピーが減少に転じる振舞いが見られたが、両者の漸近形の違いまでは観測できなかった。両者では、熱伝導の振舞いの違いから全相対エントロピーの漸近挙動にも違いがあると予想される。

第3章では、系の対称性とその破れが分布関数に対して及ぼす影響について、詳しく調べた。平衡状態では、ポテンシャルの形状などに依らず運動量分布は Maxwell 分布であるが、非平衡定常状態ではそういった系の詳細が運動量分布に影響を与えるであろう。一次元格子熱伝導系における相互作用ポテンシャルとオンサイトポテンシャルが偶関数であり、かつ熱浴が Langevin 熱浴、もしくは Nose-Hoover 熱浴であれば、系の運動方程式は力学変数の符合反転操作に対して不変となり、Maxwell 分布からのずれも偶関数となる。しかし、対称性が破れると分布関数の対称性も破れ、粒子の運動量分布にもその効果が及ぶと考えられる。これは各粒子での非平衡定常分布から Maxwell 分布を差し引いたものや運動量の3次モーメントを求めることで数値的に検証できる。実際に、対称性の破れ方として (1) 相互作用ポテンシャルを非対称にする、(2) オンサイトポテンシャルを非対称にする、(3) 熱浴を熱壁のような対称性を満たさないものにす

る、の3通りを考え、それぞれの場合について数値的に非平衡定常分布から Maxwell 分布を差し引いたものと3次モーメントを求めた。その結果、(1) 相互作用ポテンシャルが対称性を破る場合には、バルク部分でずれは非対称になり、ポテンシャルの非対称性に比例した運動量の3次モーメントが現れる。(2) オンサイトポテンシャルが対称性を破る場合には、バルク部分で対称性の破れの影響は見られないが、境界近の粒子だけ非対称なずれが現れ、ポテンシャルの非対称性に比例した運動量の3次モーメントが出現する。これもまた、バルク部分と境界部分での状態の違いを示唆する結果である。(3) 熱壁は系の対称性を破るが、その影響はオンサイトポテンシャルのある系と無い系で異なる。 ϕ^4 格子では、熱壁による対称性の破れの効果は境界近傍に限定されるのに対し、FPU 格子では、系の中心部分までその効果が及ぶことを見出した。これはオンサイトポテンシャルの無い系ではバルク極限を持たないことを意味しており、過去に得られた熱伝導率の収束・発散性の結果と一致していることが明らかになった。

第4章では、線形応答領域を超えた強非平衡領域において、全運動量が保存される系とされない系における熱流の振舞いが系の大きさや熱浴の違いにどのように依存するのか詳しく調べた。その結果、前者である FPU 格子系では系の両端の温度差が大きくなると熱流は単調に増加するが、後者である ϕ^4 格子系では熱流の抑制が生じることを数値的に見出した。同様の現象が、2つの異なった Frenkel-Kontrova 格子を線形バネで結合させたヘテロな系で生じることと、およびその発生機構も知られている。しかし、一様な系での熱流抑制現象の報告はない。今後の課題として、一様な系で見られた熱流抑制の原因を明らかにすることが挙げられる。

第5章では、本論文で得られた結果の総括を行った。

審査結果の要旨

本論文は、一次元格子熱伝導系における非平衡定常分布と熱流を数値的に研究したもので、次のような成果を得ている。但し、一次元格子熱伝導系とは、一次元質点系の両端を相異なる温度の熱浴に接続したものである。

(1) Langevin 熱浴下の粒子数32の3種 (Fermi-Pasta-Ulam格子、 ϕ^4 格子、戸田格子) の熱伝導系では、非平衡定常状態における各粒子の運動量分布と粒子の温度に対応した Maxwell 分布が異なることが、分布の尖度 (kurtosis) 及び2分布間の相対エントロピーの値から分かる。また、全相対エントロピー (各粒子に対する相対エントロピーの総和) の粒子数依存性の違いとして3種の格子における熱伝導現象の違いがとらえられる。

(2) Langevin 熱浴下の粒子数32の上記と同じ3種の系に対して、中心部の粒子の運動量分布関数と粒子の温度に対応した Maxwell 分布関数の差を求めた。差は、Fermi-Pasta-Ulam格子、 ϕ^4 格子では偶関数であり、戸田格子ではそうではない。この事実は力学系の対称性から説明できる。さらに、一次元格子熱伝導系の対称性が破られたとき、対称性の破れの影響が系のどの位置にどの程度出現するかを粒子の運動量の3次モーメントを指標として検証できる。

(3) 熱浴温度があまり高くなければ、Fermi-Pasta-Ulam格子、 ϕ^4 格子の温度分布は熱浴の種類に依存しない直線で与えられる。一方の熱浴を非常に高温にすると、粒子の温度分布は、 ϕ^4 格子に限って著しく直線から乖離する。平均熱流は、Fermi-Pasta-Ulam格子では熱浴の温度差に比例するのに対し、 ϕ^4 格子では温度差が増大すれば定数に収束する。

これらの成果は、非平衡定常分布を研究する方法を示唆すると同時に、新たな研究課題を提起しており、熱伝導研究の発展に寄与するところ大である。また、申請者が自立して研究活動を行うのに必要な能力と学識を有する事を証したものである。

学位論文審査委員会は、本論文の審査ならびに学力確認試験の結果から、博士（工学）の学位を授与することを適当と認める。