

非平衡状態間の遷移における第2法則の一般化とその応用¹

茨城大学大学院 理工学研究科 高良 和麻², 石川 順一, 長谷川 博³
エンブリー・リドル航空大学 D.J. Driebe

概要

最近, 我々が導出した非平衡状態間における第2法則の一般化 (最大仕事公式) とその公式を用いた応用について報告する [1-2]. 最大仕事公式は, 熱的に孤立した系に対して導出され, 等エントロピー条件で決まる有効温度を持った終期と初期の相対エントロピーの差として厳密に導出される. 部分系が巨大な熱浴となるとき, 有効温度は熱浴の温度になり, 等温過程において最大仕事公式を得ることができる. 我々は, この最大仕事公式を基として, 非平衡状態間を廻る一般化されたカルノーサイクルおよび Curzon-Ahlborn(CA) エンジン [3-5] についても議論する.

設定 全系は熱的に孤立した有限な自由度のハミルトニアン系とする. 全系は二つの系 A, B から成り, 全系のハミルトニアンは系 A, B のハミルトニアンとそれらの相互作用ハミルトニアンの和で表される.

$$H(X, \theta(t)) = H^{(A)}(x, a(t)) + H^{(B)}(y, b(t)) + H^{(I)}(x, y) \quad (1)$$

ここで, $X = (x, y)$ は全系の位相空間上の座標で, $x(y)$ は系 A(B) の座標であり, 時間依存パラメータ $\theta(t) = (a(t), b(t))$ の $a(t)(b(t))$ は系 A(B) の外部操作に関連して与えられる. また系 A(B) の関数は (A)((B)) を上付添え字で表す. 我々は, $t=0$ で系 A, B が互いに独立な非平衡初期分布 $\rho(X, 0) = \rho^{(A)}(x, 0)\rho^{(B)}(y, 0)$ を用意し, 中間時点 ($0 < t < T$) で相互作用させた後, 時刻 $t=T$ で系 A, B を分離させる. 即ち, 相互作用ハミルトニアンは時刻 $t=0$ と $t=T$ の両方で無視できると仮定する. 今後, 便宜上 $H_t(X) = H(X, \theta(t))$, $\rho_t(X) = \rho(X, t)$ と表す.

導出 全系は断熱であるから, 外部から行う仕事は

$$W \equiv \langle H_T | \rho_T \rangle - \langle H_0 | \rho_0 \rangle \quad (2)$$

で与えられる. ここで, シャノンのエントロピーの保存, 相対エントロピーの非負性, 相互情報量の非負性と系から取り出せる仕事 ($-W$) 最大の条件 (等エントロピー条件) を用いることで, 断熱過程における最大仕事公式が以下のように導出される.

$$W \geq \Delta F(\tilde{\beta}) + \tilde{\beta}^{-1} D[\rho_T^{(A)} || \rho_{\text{can}, T}^{(A)}(\tilde{\beta})] - \tilde{\beta}^{-1} D[\rho_0 || \rho_{\text{can}, 0}(\tilde{\beta})] \quad (3)$$

ΔF は時刻 T と 0 の自由エネルギー差, $\tilde{\beta}^{-1}$ は等エントロピー条件で決まる我々が定義する有効温度, $\rho_{\text{can}, t}(\tilde{\beta})$ は時刻 t で有効温度のカノニカル分布, $D[\rho || \phi]$ は ρ と ϕ の相

¹この原稿は, 論文 [2] の結果とその後の発展に基づく内容である.

²E-mail: takarakazuma@gmail.com

³E-mail: hhh@mx.ibaraki.ac.jp

対エントロピーである。系 B の初期分布をカノニカル分布に選び、更に自由度無限の極限を取ることで、有効温度は熱浴の温度になり、等温過程における最大仕事公式を導出できる。導出の詳細は、論文 [2] を参照のこと。

応用 非平衡状態間を廻る一般化されたカルノーサイクル (図 1) と CA エンジンについて報告する。熱機関を、系、低温熱浴と高温熱浴の 3 つの部分に分けて、サイクルを、
 (1) 系を低温熱浴とだけ接触させる過程 ($0 \leq t < T_1$)
 (2) 系を高温熱浴とだけ接触させる過程 ($T_1 \leq t < T_2$)
 の 2 つの過程に分けて考えている。

図に書かれている黒丸は系の状態を表している。 $t = 0, T_1, T_2$ では、非平衡状態を実現させるために、系のハミルトニアンを瞬間的に変化させる操作を行っており、 $t = t_1, t_2$ では、図の状態にあるような系が存在すると仮定している。カルノーサイクルについての詳細は論文 [2] に譲り、続いて CA エンジンについて説明する。CA エンジンとは、仕事率最大の熱機関であり、1 サイクルの周期が有限な、より現実的な熱機関である。このとき有限時間で関与できる各熱浴の自由度が有限となることから、有効温度が非常に重要な役割を演じる。最近発表された論文 [5] では、吸熱量を振動数 (周期の逆数) の 1 次近似で見積もっているが、我々の枠組みでは、高次まで厳密に扱うことが可能であることを強調したい。詳細については、現在投稿準備中の論文を参照していただきたい。

結論 我々が導出した最大仕事公式は、力学と確率論の基本的な性質のみから導出される普遍的な法則である。巨大な熱浴と結合する等温系のみでなく、有限自由度の断熱系でも有効温度を導入することで適用が可能になった。その意味で、第 1 法則と同様に普遍であり、少数自由度の量子系においてさえ成り立つ。ここで論じた熱機関への応用において、系を低温熱浴または高温熱浴の片方とのみとしか結合させなかったが、今後、系を両方と同時に結合させることで実現する非平衡定常状態について議論していきたい。

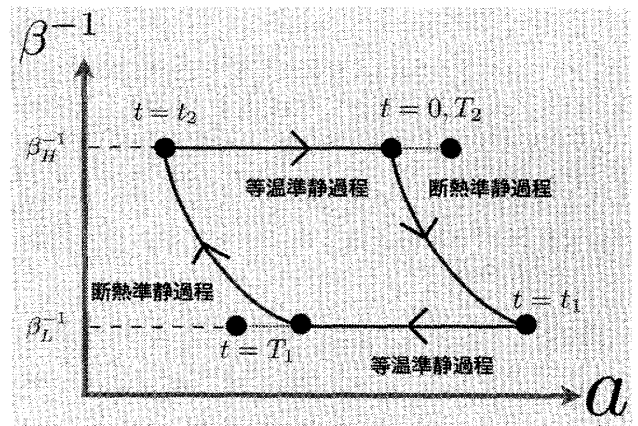


図 1: 一般化されたカルノーサイクル

参考文献

- [1] H.-H. Hasegawa, J. Ishikawa, K. Takara, D.J. Driebe, Phys. Lett. A 374 (2010) 1001.
- [2] K. Takara, H.-H. Hasegawa, D.J. Driebe, Phys. Lett. A 375 (2010) 88.
- [3] F.L. Curzon and B. Ahlborn, Am. J. Phys. 43 (1975) 22.
- [4] C. Van den Broeck, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 190602.
- [5] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg and C. Van den Broeck, PRL 105, (2010)150603.