

氏 名	浦 長 瀬 正 幸
学位(専攻分野)	博 士 (情 報 学)
学 位 記 番 号	情 博 第 301 号
学位授与の日付	平 成 20 年 3 月 24 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	情 報 学 研 究 科 数 理 工 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	Statistical and Dynamical Properties of Systems with Two Hard Particles (二体剛体球系の統計的および動力学的性質)
論文調査委員	(主 査) 教 授 宗 像 豊 哲 教 授 岩 井 敏 洋 教 授 船 越 満 明

論 文 内 容 の 要 旨

本論文では少数自由度系の研究が、ナノ系等粒子が閉じ込められた系の物性理解とエルゴード性など統計力学基礎の理解の両面から重要であることに着目し、二個の剛体粒子が容器の中に閉じ込められている体系について統計力学と計算機実験を用いて考察している。

第一章では研究の動機付けと、閉じ込め系に関する先行研究について述べた後、本研究で用いられた体系ならびに理論的枠組みについて簡潔に説明している。具体的には位相空間体積を定義し、それとエントロピーや温度、圧力といった熱力学的な量との関係を説明している。

第二章では二個の剛体球が直方体の箱の中に入っている体系をD次元空間 ($D = 1, 2, \dots$) で考え、位相空間体積の厳密な計算手法を展開している。すなわち配置分配関数(位相空間体積の位置座標に関する積分による寄与の部分)に対する再帰的な関係式を導出し、それを用いることにより2次元、3次元の配置分配関数を解析的に計算している。特に3次元での厳密な位相空間体積から圧力を数値的に求め、箱のサイズが小さいときに圧縮率が負になる領域が存在することを見いだし、かつこの現象に着目し相図を描くと、負の圧縮率の発生パターンが二次元のときと比較して相当複雑になることを示している。さらに、壁面に対する圧力を理論と分子動力学シミュレーションで求めて比較することにより、この体系がエルゴード的に振舞うことを示唆する結果を得ている。この点についてはさらに、理論とシミュレーションの比較をより高次元の場合や異なる物理量(密度や運動量分布)に対しても行い体系のエルゴード性をより広い観点から明示している。

第三章では二個の剛体円盤が円形容器に入っている体系(体系A)と剛体球が円筒容器に入っている体系(体系B)を考えている。これらの体系の特徴はエネルギーのほかに一方向の角運動量が保存量として存在していることである。特に熱力学的な量の角運動量依存性に着目し、温度、圧力が共に体系の角運動量に依存し、かつ体系Bの場合には負の圧縮率の発生にも影響を与えている事を見出している。さらに第二章と同様に分子動力学シミュレーションと理論結果を比較することにより体系のエルゴード性を数値的に確認している。ただし、体系Aにおいては角運動量の絶対値と容器のサイズがともに小さいとき、圧力の揺らぎが大きくなることを見いだし、その原因が円盤のダイナミクスが時々寿命の長い非エルゴード的な状態にトラップされることによることを突き止めている。

第四章では非平衡統計力学の問題の一つである「断熱ピストン」が少数自由度熱浴(合計4個の剛体円盤)の場合について調べられている。理論的な解析では射影演算子法が用いられ、体系のマクロな変数についての時間発展方程式が導出され、この方程式の解と計算機実験の結果を比較することにより、少数自由度断熱ピストンの性質について多くの知見を与えている。特にピストンの質量が大きくまたシリンダーのサイズが小さくなると、時間発展方程式の解がシミュレーション結果をうまく再現することが見出されている。

第五章では研究全体を総括し、今後の課題と発展の方向についての議論が与えられている。

論文審査の結果の要旨

本論文は二個の剛体粒子により構成される体系の統計力学的な振る舞いを、閉じ込め系の物性とエルゴード性の両面から調べたものである。この研究では位相空間体積に基づいて熱力学的な量を計算しているが、体系の自由度が小さいことにより位相空間体積を少なくとも数値的には厳密に計算することが可能であることを示した。そして分子動力学シミュレーションと比較することにより体系のエルゴード性の数値的な検証を行うと同時に圧縮率が負となる不安定領域が存在することを示している。エルゴード性は統計力学の土台となっている性質であり、これを検証することには深い意義がある。また少数自由度系にもファンデアワールス的な不安定性が存在することを一般的に示したことは、ナノ系等の物性理解に繋がる貴重な成果である。

第二章では二個の剛体球が箱の中に入っている体系を考え、位相空間体積を計算するための再帰的關係式を導出し、その関係を用いて3次元の場合について位相空間体積を解析的に計算したことは高く評価できる。またこの体系における“負の圧縮率”という現象に着目し、相図を描くことにより単純な体系が持つ複雑な性質を明らかにしたことも評価すべき点である。

第三章では二個の剛体円盤が円形容器に入っている体系について研究している。この体系の位相空間体積を計算するためには数値積分を必要とするものの、角運動量の保存が体系の熱力学的な性質に及ぼす影響について入念に調べており、種々の非自明な結果が得られている。さらにシミュレーションにより時折円盤の運動がある種の局在モードにトラップされることを発見しているが、同様の現象が異なる力学系でも観察されている。この事実はこの体系を力学系としての観点から研究することの必要性を示しており、本研究の重要性を高めている。

上のような平衡特性のみならず、第四章では非平衡統計力学の分野での問題の一つである“断熱ピストン”を少数自由度熱浴の場合について考察している。理論的に導出される方程式には静的な量が含まれており、静的な量からダイナミクスを予言するというのはこの研究において注目すべき点である。なお、この体系の示すダイナミクスは多自由度系の場合とあまり変わらないものであるが、このことは決して自明ではなく、理論とシミュレーションによりこれを見出したことには高い価値がある。

以上のように本論文のいずれの研究においても統計力学における重要な問題に取り組み、高い成果が得られているといえる。

よって、本論文は博士（情報学）の学位論文として価値あるものと認める。

また、平成20年2月18日実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。