

学位論文題名

# Nonequilibrium Statistical Mechanics of Finite-Time Carnot Cycle

(有限時間カルノーサイクルの非平衡統計力学)

## 学位論文内容の要旨

近年、地球温暖化問題が注目を集めている。よりクリーンで能率的な熱機関の開発はこの重要な問題の解決のためには必須である。一方、基礎物理学の世界に目を向けてみれば熱機関の解析は熱力学の発展に重要な寄与をなした。カルノーは、無限にゆっくりと準静的に動作する等温過程と断熱過程を交互に繰り返す理想的な可逆熱機関のモデル(カルノーサイクル)を考案し、その効率(カルノー効率)が作業物質の種類や量、系の詳細によらずに熱源の温度だけで決定され、どんな熱機関の効率もこの値を超えることができないことを示した(熱力学第二法則)。カルノーサイクルは熱機関が原理的に達成できる最も高い効率の値を与える理想的なモデルであるが、しかしながら、その最大効率は無限にゆっくりと動く準静的極限でのみ達成されるため、取り出せる仕事率(単位時間あたりに生み出す仕事)は事実上ゼロとなってしまう。現実の熱機関は有限の仕事率で動作しなければ役に立たず、その意味では準静的に動くカルノーサイクルは現実の熱機関の動作を記述するモデルとしては十分ではない。

このような問題意識の下、Curzon と Ahlborn [1]は有限の時間で動作する現象論的な熱機関の数理モデルを考案し、それが最大仕事率で動作している際の効率(Curzon-Ahlborn (CA) 効率と呼ばれる)が、作業物質の種類や量、系の詳細によらず熱源の温度のみで決定されるという注目すべき結果を導いた。さらに彼らはCA効率が現実のパワープラントの効率のデータをカルノー効率よりも良く再現できると主張した。しかし、彼らの導出にはいくつかの理論的な仮定が用いられており、CA効率がどの程度広く一般の熱機関に適用できるのかは明らかではない。またそれを実験によって確かめる研究も存在していなかった。

一方、Van den Broeck [2]は温度差が小さい極限における非平衡系を普遍的に記述する線形不可逆熱力学のOnsager関係式を用いて、その関係式で記述可能なクラスの熱機関の最大仕事率時の効率の上限値がCA効率となることを一般的に導いた。この上限値は、Onsager関係式に含まれるOnsager係数がタイトカップリング条件と呼ばれる特殊な条件を満たす際に達成される。しかしながら、有限時間で動作するカルノーサイクルのように作業物質が同時にではなく交互に高温熱源と低温熱源に接触するような、周期的に変化する非平衡系にVan den Broeckの理論が適用できるのかは定かではなかった。

そこで本研究では、CA効率の検証を目的として、数値実験(コンピュータシミュレーション)と分子運動論による解析が同時に可能な2次元理想気体を模した低密度剛体球系の有限時間

で動作するカルノーサイクルを構成し[3,4]、実際に分子動力学法を用いたシミュレーションによってその最大仕事率時の効率が一般には CA 効率に一致せず、温度差が小さくなる極限でのみ CA 効率と一致することを初めて確認した。また分子運動論を用いた理論によってこの振る舞いを解析的に説明することにも成功し[3]、さらにこの振る舞いの背後にある物理的な理由を明らかにするために、エントロピー生成率を導入して有限の時間で動作するカルノーサイクルの Onsager 係数の計算を初めて行った[5]。それらの係数は実際にタイトカップリング条件を満たしていることも示し、有限時間で動作するカルノーサイクルが CA 効率を達成する理由を線形不可逆熱力学の観点から明らかにすることに成功した。また有限の時間で動作するカルノーサイクルの Onsager 係数の性質をより一般的に考察するために、Schmiedl と Seifert [6]によって提唱されていたブラウン運動する粒子を作業物質とする有限時間で動作するカルノーサイクルの Onsager 係数を計算した[7]。Onsager 係数にはサイクルの動かし方の情報が含まれ、任意の動かし方で常にタイトカップリング条件が成立することが明らかになった。これは、物理的には、仕事率をサイクルに要する時間の関数として最大化すれば動かし方に関係なく常に温度差が小さい極限で CA 効率が成立することを意味している。

最後に、Onsager 関係式に散逸を表す非線形項を含めた拡張された Onsager 関係式を提案し、その最大仕事率時の効率を計算した。この理論は温度差が小さい極限では Van den Broeck [2]の理論を含み、また任意の温度差ではその最大仕事率時の効率の上限値と下限値が最近 Esposito, et al. [8]によって提案された低散逸カルノーサイクルの結果を再現するなど、より一般的で広範囲の熱機関の振る舞いを説明できることを明らかにした。

- [1] F. Curzon and B. Ahlborn, *Am. J. Phys.* **43**, 22 (1975).
- [2] C. Van den Broeck, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 190602 (2005).
- [3] Y. Izumida and K. Okuda, *EPL*. **83**, 60003 (2008).
- [4] Y. Izumida and K. Okuda, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **173**, 163-168 (2009).
- [5] Y. Izumida and K. Okuda, *Phys. Rev. E* **80**, 021121 (2009).
- [6] T. Schmiedl and U. Seifert, *EPL*. **81**, 20003 (2008).
- [7] Y. Izumida and K. Okuda, *Eur. Phys. J. B*, **77**, 499 (2010).
- [8] M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg and C. Van den Broeck, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 150603 (2010).

# 学位論文審査の要旨

|     |     |         |
|-----|-----|---------|
| 主 査 | 准教授 | 根 本 幸 児 |
| 副 査 | 教 授 | 大 川 房 義 |
| 副 査 | 教 授 | 伊 土 政 幸 |
| 副 査 | 准教授 | 北 孝 文   |

学 位 論 文 題 名

## Nonequilibrium Statistical Mechanics of Finite-Time Carnot Cycle

(有限時間カルノーサイクルの非平衡統計力学)

Carnot は、無限にゆっくりと準静的に動作する可逆熱機関である Carnot サイクル (CC) を考案し、その効率 (Carnot 効率) が熱源の温度だけで決定され、その効率は熱機関の上限値であることを示した (Carnot 原理)。しかし、その最大効率は無限にゆっくりと動く準静的極限でのみ達成されるため、取り出せる仕事率は事実上ゼロとなってしまう。Curzon-Ahlborn は有限の時間で動作する現象論的な熱機関の数理モデルを考案し、それが最大仕事率で動作している際の効率  $\eta_{\max}$  もまた熱源の温度のみで決定されるという結果を導いた (CA 効率)。一方、Van den Broeck は Onsager 関係式で記述可能なクラスの熱機関の  $\eta_{\max}$  の上限値が CA 効率となることを一般的に導いた。この上限値は、Onsager 関係式に含まれる Onsager 係数がタイトカップリング (TC) 条件を満たす際に達成される。

本論文は、2 次元理想気体系を模した低密度剛体球系の有限時間で動作する CC (FTCC) を構成し、実際に分子動力学法を用いた数値実験によってその  $\eta_{\max}$  は温度差が小さくなる極限でのみ CA 効率と一致することを初めて確認し、分子運動論を用いた理論によってこの振る舞いを解析的に説明することにも成功した。また、Onsager 係数の直接計算によりこのモデルが TC 条件を満たしていることを示し、FTCC が CA 効率を達成する理由を明らかにすることに成功した。さらに、散逸を表す非線形項を含めた拡張 Onsager 関係式を提案した。この理論は温度差が小さい極限では Van den Broeck の理論を含み、また任意の温度差ではその最大仕事率時の効率の上限値と下限値が低散逸 CC の結果を再現するなど、より一般的で広範囲の熱機関の振る舞いを説明できることを明らかにした。

このように、本論文は非線形非平衡熱力学の発展に大きく寄与するのみならず、近年の地球温暖化問題の解決のための、よりクリーンで能率的な熱機関の開発研究に重要な知見を与えるものということができる。

よって著者は、北海道大学博士 (理学) の学位を授与される資格あるものと認める。