ゆらぐオーダーパラメータダイナミクス

佐々　真一　（京大　理）

（共同研究者は最後に紹介します）

非平衡系の物理学　-- 階層性と普遍性 --
@ 京都　　2018/12/27

ゆらぐオーダーパラメータ
ダイナミクス

あるいは

ゆらぐ”流体力学”
(広い意味の)

~~若手~~ 最先端を追う研究者

「何それ？」

~~年配~~　経験豊かな研究者

「あぁ、昔昔・・」

動的くりこみ群による解析の基本模型群

Hohenberg and Halperin, Rev. Mod. Phys. 1977

ランダウ＝リフシッツ「流体力学」　１７章

講演のメッセージ

今、なぜ、ゆらぐオーダーパラメータダイナミクス？

研究としての現代的意義を整理

最先端的結果の紹介

PART II

背景

背景　その１
基本的動機

ダイナミクスの階層性を理解したい

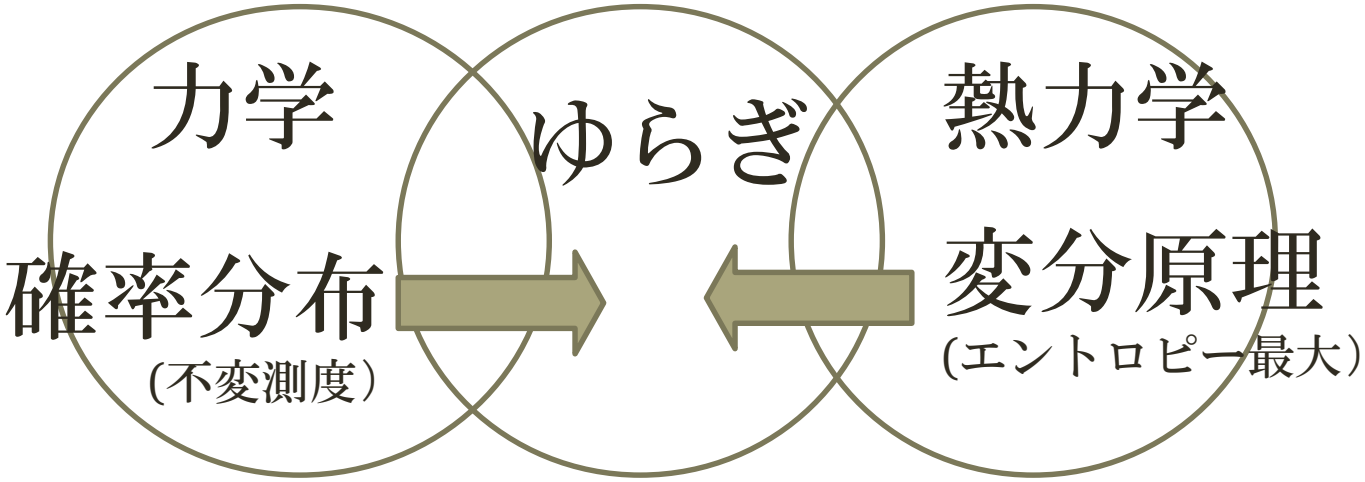
原子核	原子	人	地球	銀河	宇宙
10^{-35}m	10^{-15}m	10^{-10}m	10^{0}m	10^{7}m	10^{21}m	10^{27}m

多様な自然現象

スケールに応じて「法則」が変っていく

平衡統計力学

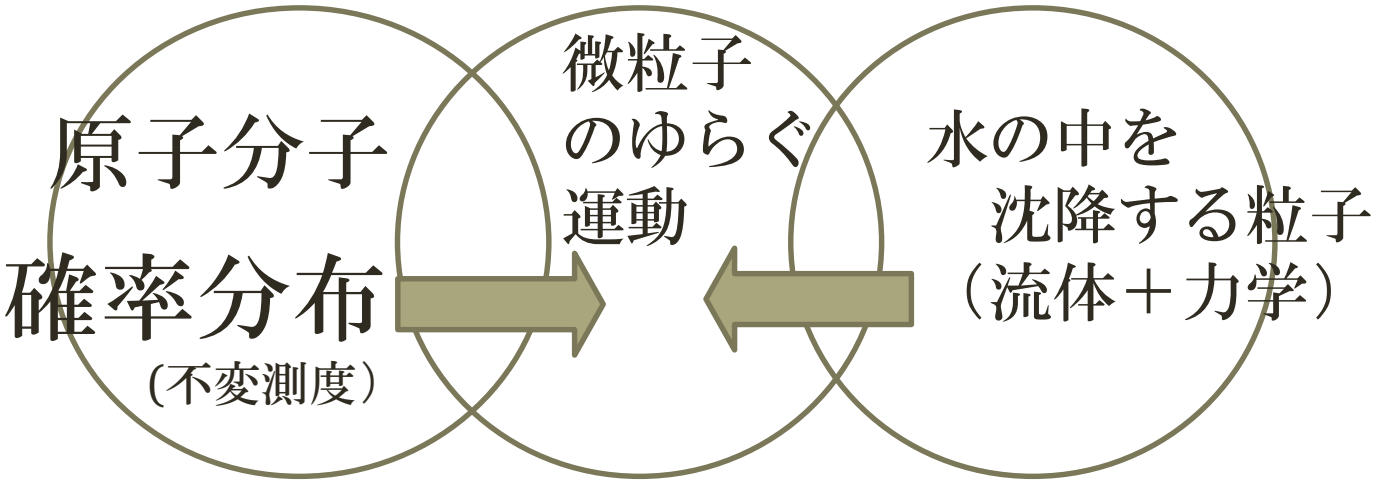
アインシュタインの定式化



変分関数がゆらぎをきめる
等重率の原理はそのミニマムな要請

熱力学のゆらぎ化

ダイナミクスのゆらぎ化の例



粒子の運動法則＋熱力学の適用

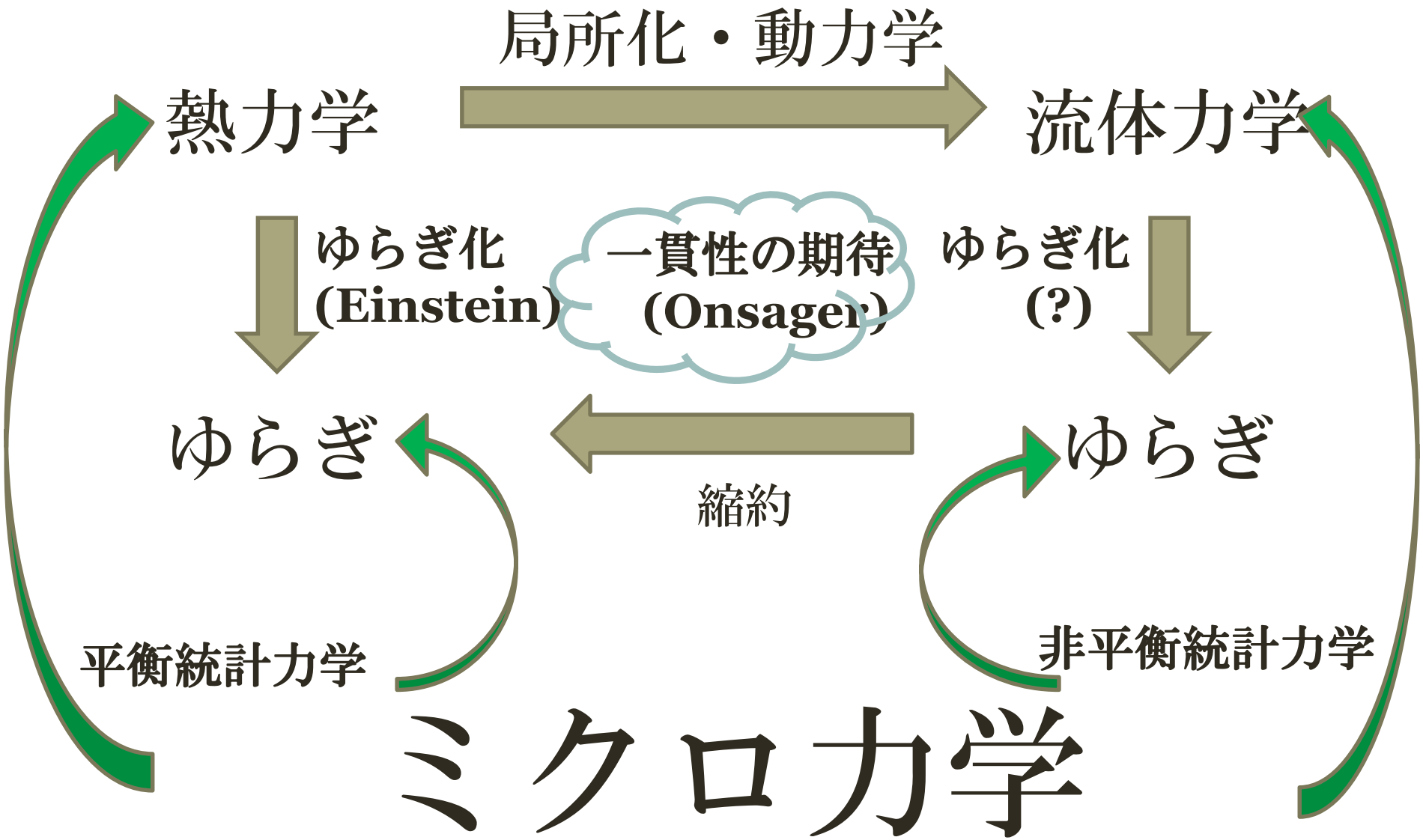
微粒子の運動法則の現象論的決定
アボガドロ数を決める公式

アインシュタインの理論　１９０５

論点

「マクロダイナミクスのゆらぎ化」は
どこまで理解されているのか？

「マクロダイナミクスのゆらぎ」と
ミクロダイナミクスをつなぐ体系は？


局所化・動力学
熱力学
流体力学
ゆらぎ化
(Einstein)
一貫性の期待
(Onsager)
ゆらぎ化
(?)
ゆらぎ
ゆらぎ
縮約
平衡統計力学
非平衡統計力学
ミクロ力学

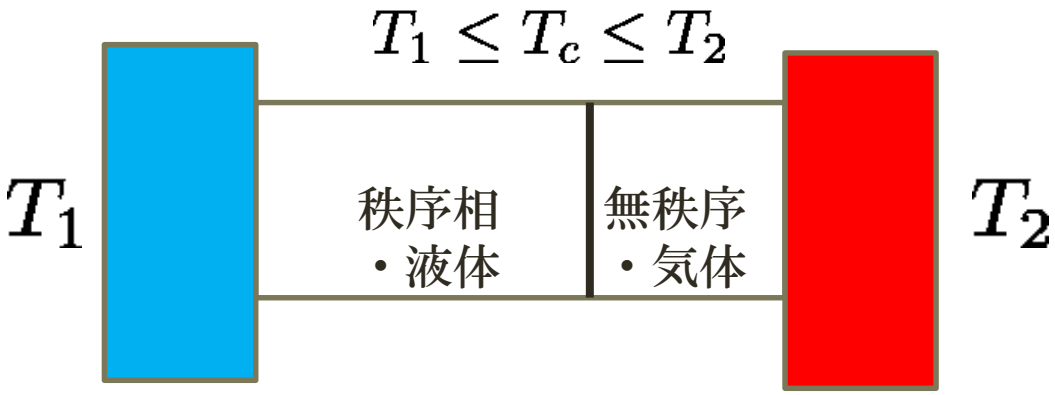
背景　その２

ゆらぐオーダーパラメータが“本質的”な役割を果たす現象をみたい

動的臨界現象　＝　「臨界ゆらぎ」のダイナミクス
臨界減速が本質

熱伝導下相共存：　（非平衡条件下１次転移）

マクロダイナミクス



ネマティック相＝等方相転移　とか　気液転移

流体力学＋界面熱力学　(Beadeaux et al 2003, Onuki 2007)

Ginzburg-Landau＋エネルギー輸送　(Penrose 他1990)

詳細は後述

大事なこと：この記述では

界面位置が移動する時定数 $\tau_{\rm int}$ は、熱力学量の緩和の時定数 $\tau_{\rm therm}$ よりずっと長い

$$\tau_{\rm int} = \frac{1}{\eta}\tau_{\rm therm} \qquad \eta = \frac{\Lambda_0}{L}$$

界面の厚み

系の長さ

$L \to \infty$ を先にとって、長時間極限 $\tau_{\rm obs} \to \infty$ を後からとると、平衡条件下であっても準安定相が観測される。
（ノイズを無視した平均場になる。）

長時間極限 $\tau_{\rm obs} \to \infty$ を先にとって、$L \to \infty$ を後からとると、決定論的マクロ力学の「定常解」が観測される。

マクロ極限は、$\tau_{\rm obs} \simeq \tau_{\rm int} \to \infty$ となる時空間極限であり、ノイズによって振る舞いが大きく影響されるだろう

論点

熱伝導下相共存を記述する
「ゆらぐオーダーパラメータダイナミクス」
は何か？

「ゆらぐオーダーパラメータダイナミクス」
において、 $\tau_{\mathrm{obs}} \simeq \tau_{\mathrm{int}} \to \infty$
という極限を議論せよ

PART III

運動の記述

例：流体記述の階層

孤立系　// 初期条件　非平衡　（e.g. 局所平衡分布からサンプル）

ハミルトン方程式

パラメータ：
ハミルトニアン

ゆらぐ流体方程式

パラメータ：
メソ局所熱力学
「裸」の散逸定数

流体方程式

パラメータ：
局所熱力学
散逸定数

Zwanzig, 1961

FNS, 1977

低次元系異常性

恒等式＋”時間尺度の分離”

ゆらぎのくりこみ

射影演算子・モード結合

Mori, 1958
の現代版 Sasa, PRL,2014

恒等式＋時空間スケールの分離

現象論（Onsager理論）

「完全な変数の組」 $\alpha = (\alpha^\ell)_{\ell=1,2,\cdots,M}$ の指定

$$\tau_{\mathrm{micro}} \ll \Delta t \ll \tau_{\mathrm{macro}}$$

（メソスケール）局所熱力学の仮定

エントロピー生成を担う変数を指定

（局所）詳細つりあいを満たすノイズを仮定

非平衡性は、境界条件で与えるか、局所熱力学に組み込むか、・・

平衡条件下ならおそらく正しいが、一般には、不明なことも多い。

Onsager　標準形

$$\frac{d\alpha^\ell}{dt} = F^\ell_{\rm rev}(\alpha) + \sum_m L^{\ell m}(\alpha)\frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha_m} + \sum_m \frac{\partial L^{\ell m}(\alpha)}{\partial \alpha^m} + \sum_m g^{\ell m}(\alpha)\cdot \xi^m$$

Ito

$$\sum_\ell \frac{\partial}{\partial \alpha^\ell}\left[F^\ell_{\rm rev}(\alpha)P_{\rm eq}(\alpha)\right] = 0 \qquad L^{\ell m} = \frac{1}{2}\sum_n g^{\ell n} g^{mn}$$

$$\frac{\partial L^{\ell m}}{\partial \alpha^n} = 0$$

線形ゆらぎ　（業界用語：誤解をまねく）

⇒

非マルティプリカティブゆらぎ　（提案）

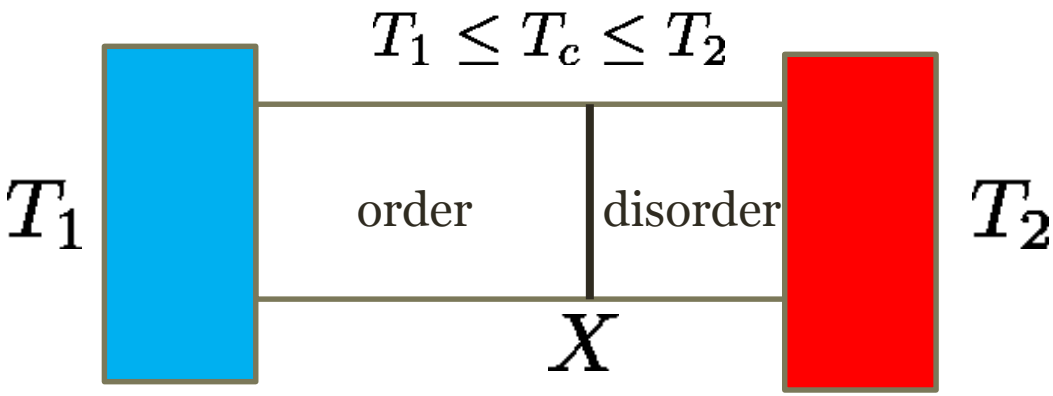
歴史：

Green, 1952 ;　Zwanzig, 1961 ;　Kawasaki, 1973 ・・・・

近年、忘れ去られて、混乱

Onsager の精神にもとづいた整理：⇒　Itami-Sasa, JSP, 2017

ターゲット



(e.g. nematic phase – isotropic phase in liquid crystals)

Simple question

What is the temperature of the interface?

完全な熱力学変数の組

$m(\boldsymbol{r})$ order parameter density field

$v(\boldsymbol{r})$ momentum density field

$h(\boldsymbol{r})$ energy density field

$$h(\boldsymbol{r}) = u(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}v(\boldsymbol{r})^2 + \frac{d_e}{2}(\boldsymbol{\nabla} m)^2$$

internal energy density field

オーダーパラメータ
の運動エネルギー

界面熱力学
gradient term

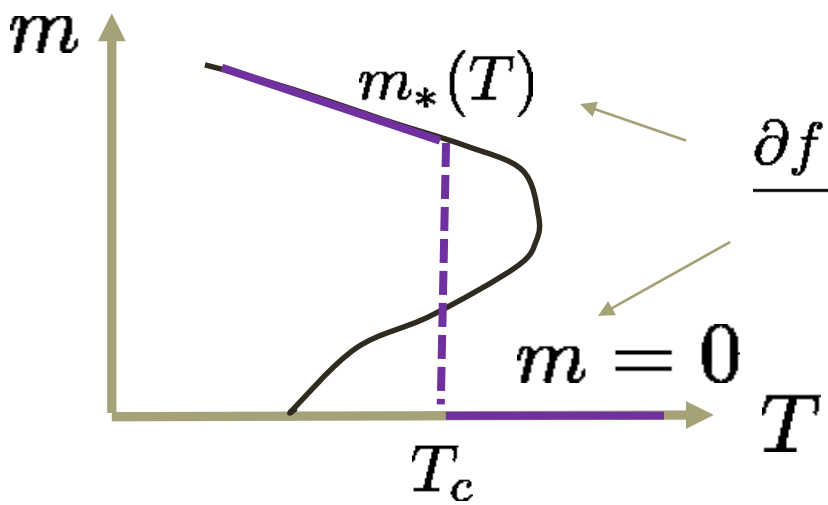
Entropy functional

$$\mathcal{S}(h, m, v) = \int d^d\boldsymbol{r} \left[s(u(\boldsymbol{r}), m(\boldsymbol{r})) - \frac{d_s}{2}(\boldsymbol{\nabla} m)^2 \right]$$

局所熱力学
entropy density

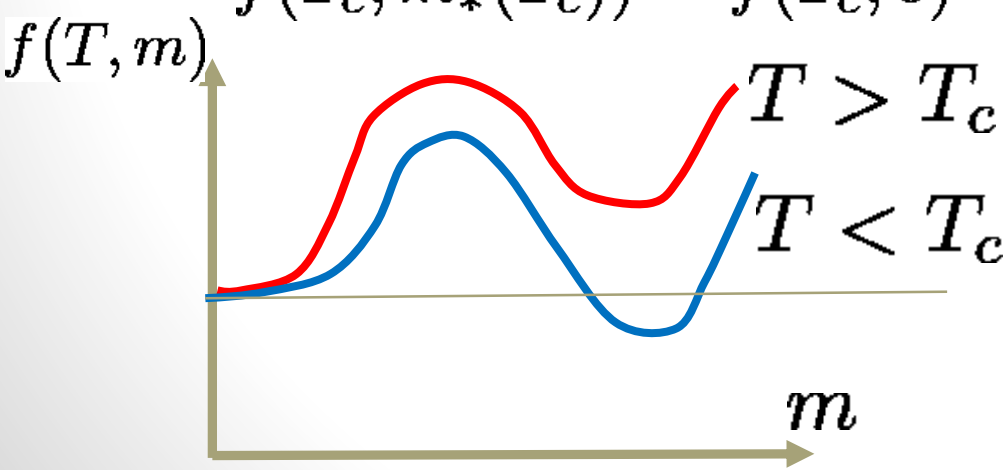
界面熱力学
gradient term

1 次転移のLandau 理論



$$\frac{\partial f(T,m)}{\partial m} = 0$$

$$f(T_c, m_*(T_c)) = f(T_c, 0)$$



$$m_{\mathrm{eq}}(T) = 0 \quad \text{for } T > T_c$$

$$m_{\mathrm{eq}}(T) = m_*(T) \quad \text{for } T < T_c$$

エントロピー密度

$$f(T,m) = \frac{a_1}{2}(T - T_0)m^2 - \frac{a_2}{4}m^4 + \frac{a_3}{6}m^6 + \varphi(T)$$

$$c_m = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_m$$ 定数

$$s(u,m) = -\frac{a_1}{2}m^2 + c_m \log\left[u + \frac{a_1}{2}T_0 m^2 + \frac{a_2}{4}m^4 - \frac{a_3}{6}m^6\right]$$

Onsager 標準形

$$\partial_t m = v = -T\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta v(\boldsymbol{r})}$$

可逆項

$$\partial_t v = \gamma T\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta v(\boldsymbol{r})} + T\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta m(\boldsymbol{r})} + \sqrt{2\gamma T}\cdot\xi^v$$

$$\partial_t h = -\boldsymbol{\nabla}\left(\kappa\boldsymbol{\nabla}\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta h(\boldsymbol{r})} + \sqrt{2\kappa}\cdot\boldsymbol{\xi}^h\right)$$

$$\beta = \left(\frac{\partial s}{\partial u}\right)_m$$

Onsager 標準形（具体形）

$$\partial_t m = v$$

$$\partial_t v = -\gamma v + T\left(\frac{\partial s}{\partial m}\right)_u + T d_e (\boldsymbol{\nabla}\beta)(\boldsymbol{\nabla} m) + d_f \Delta m + \sqrt{2\gamma T}\cdot \xi^v$$

$$\partial_t h = -\boldsymbol{\nabla}\left(\kappa \boldsymbol{\nabla}\beta + \sqrt{2\kappa}\cdot \boldsymbol{\xi}^h\right)$$

$$\beta = \left(\frac{\partial s}{\partial u}\right)_m$$

$$d_f = d_e + T d_s$$

$$h(\boldsymbol{r}) = u(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2} v(\boldsymbol{r})^2 + \frac{d_e}{2}(\boldsymbol{\nabla} m)^2$$

超絶微妙な話

$$\langle \xi(\boldsymbol{r},t)\xi(\boldsymbol{r}',t')\rangle = \delta_\Lambda(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t-t')$$

$$\delta_\Lambda(\boldsymbol{r}) = \int_{|\boldsymbol{k}|\Lambda<1} \frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$$

$$\ell \ll \Lambda \ll \Lambda_0 \ll L$$

ミクロ長さ　　界面厚み　　系の大きさ

熱伝導率はオーダーパラメータに依存するが、
非マルティプリカティブと同じように扱かってよい

このカットオフが本質的な役割を果たす他の例：
表面近くのスリップ現象　Nakano-Sasa, preprint, 2018

関連する先行研究のモデル

Penrose and Fife, Physica D, 1990;
over-damped version, without noise, and $d_e = 0$

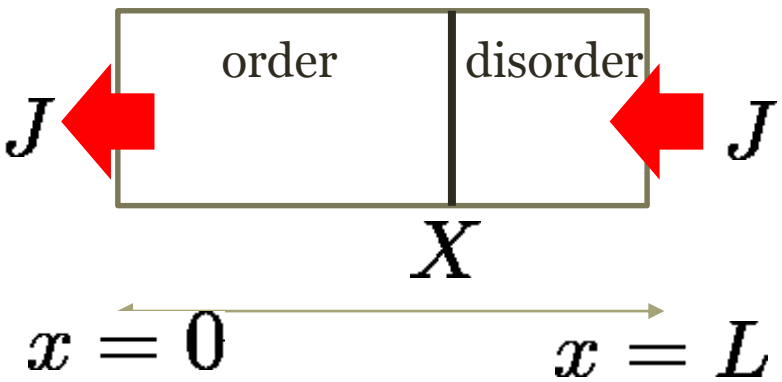
Halperin, Hohenberg, and Ma, Phys. Rev. B, 1974;
over-damped version, near the critical, and $d_e = 0$

Bedeaux, Johannessen, and R{¥o}sjorde, Physica A, 2003:
hydrodynamics with gradient terms, without noise

Onuki, Phys. Rev. E, 2007;
hydrodynamics with gradient terms, without noise

Fujitani, J. Phys. Soc. Jpn., 2010;
Analysis of hydrodynamics with gradient terms, without noise

熱伝導境界条件　（特別）



断熱非平衡条件

フラックス制御条件

J is controlled externally as a parameter

The total energy E is conserved

Equilibrium($J = 0$): the first-order transition at $T = T_c$
symmetry breaking for $T < T_c$

"The phase diagram is determined by
the micro-canonical ensemble, not by the canonical ensemble."

Onsager 形:　熱伝導

$$\partial_t m = v$$

$$\partial_t v = -\gamma v + T\left(\frac{\partial s}{\partial m}\right)_u + T d_e (\boldsymbol{\nabla}\beta)(\boldsymbol{\nabla} m) + d_f \Delta m + \sqrt{2\gamma T}\cdot \xi^v$$

$$\partial_t h = -\boldsymbol{\nabla}\left(\kappa \boldsymbol{\nabla}\beta + \sqrt{2\kappa}\cdot \boldsymbol{\xi}^h\right)$$

$$\beta = \left(\frac{\partial s}{\partial u}\right)_m \qquad d_f = d_e + T d_s$$

$$h(\boldsymbol{r}) = u(\boldsymbol{r}) + \frac{1}{2}v(\boldsymbol{r})^2 + \frac{d_e}{2}(\boldsymbol{\nabla} m)^2$$

境界条件

$$\kappa \partial_x \beta|_{x=0} = \kappa \partial_x \beta|_{x=L} = J$$

$$\boldsymbol{\xi}^h(x=0,y,z,t) = \boldsymbol{\xi}^h(x=L,y,z,t) = 0$$

PART IV

解析

平衡系　（断熱環境）

$$J = 0$$

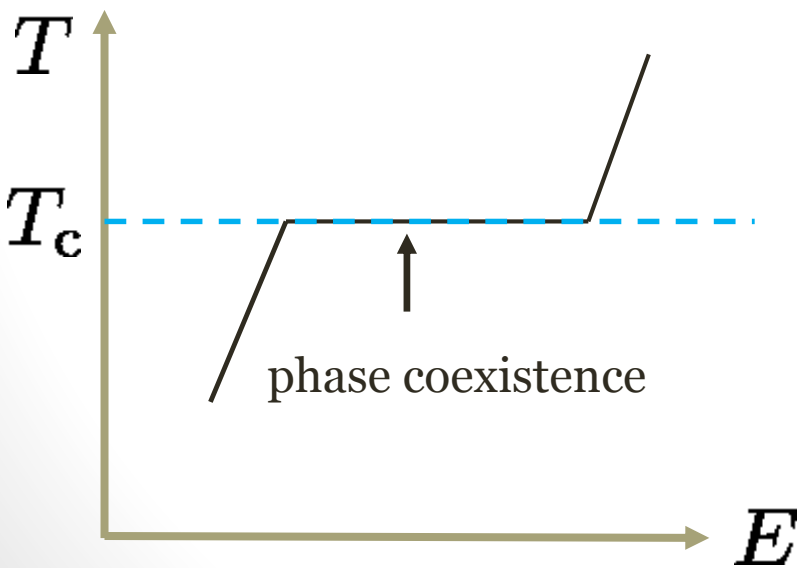
$$\mathcal{P}(h, m, v) = \mathcal{N} e^{\mathcal{S}(h,m,v)} \delta\left(E - \int d^d \boldsymbol{r} h(\boldsymbol{r})\right)$$

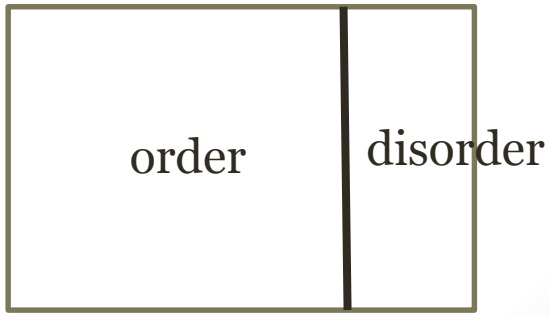
Most probable profile:
$(h_*(\boldsymbol{r}), m_*(\boldsymbol{r}), v_*(\boldsymbol{r}) = 0)$

maximize $\mathcal{S}(h, m, v)$

with

$$\int d^d \boldsymbol{r} h(\boldsymbol{r}) = E$$





非平衡定常状態・線形応答

$$\alpha = (m, v, h) \qquad \Gamma_0 = \frac{\ell}{L} \qquad \eta = \frac{\Lambda_0}{L} \simeq \sqrt{\Gamma_0}$$

$$\mathcal{P}_{\rm ss}(\alpha; E, J) = e^{\frac{1}{\Gamma_0^3}[\tilde{\mathcal{S}}(\alpha;E,J)+O(J^2)+\rm const]}\delta\left(\int d^3\boldsymbol{r}h(\boldsymbol{r}) - E\right)$$

$$\tilde{\mathcal{S}}(\alpha; E, J) = \int d^3\boldsymbol{r}s(u(\boldsymbol{r}), m(\boldsymbol{r})) + JI(\alpha)$$

時刻０でミクロカノニカル分布を用意する。
時刻 t_f でフラックスが J となるように「ゆっくり」印加する。

定常状態： $t_f = \dfrac{K}{\eta}\tau_{\rm therm}$

$$\lim_{K\to\infty}\lim_{\eta\to 0}\Gamma_0^3 \log \mathcal{P}(\alpha, t_f)$$

TO DO

補正項 $I(\alpha)$ の計算：（色々な極限が混じるので要注意）

$$\tilde{\mathcal{S}}(\alpha; E, J) = \int d^3\boldsymbol{r} s(u(\boldsymbol{r}), m(\boldsymbol{r})) + JI(\alpha)$$

⇩

熱伝導下における界面位置に対するポテンシャルの計算

（コントラクション）

⇩

界面位置の変分原理による決定

ズバーレフ＝マクレナン表現

$$\mathcal{P}_{\rm ss}(\alpha;E,J)=e^{\frac{1}{\Gamma_0^3}[\tilde{\mathcal{S}}(\alpha;E,J)+O(J^2)+{\rm const}]}\delta\left(\int d^3\boldsymbol{r}h(\boldsymbol{r})-E\right)$$

$$\tilde{\mathcal{S}}(\alpha;E,J)=\int d^3\boldsymbol{r}s(u(\boldsymbol{r}),m(\boldsymbol{r}))+JI(\alpha)$$

$$I(\alpha)=\int d^2\boldsymbol{r}_\perp\int_0^{t_f}dt\,\langle(\beta(L,\boldsymbol{r}_\perp,t)-\beta(0,\boldsymbol{r}_\perp,t))\rangle^{\rm eq}_{\alpha^*\to{\rm eq}}$$

境界フラックス制御系での表現　(NEW)

時間積分が残っているので一般には使いにくいが・・・

補正項 $I(\alpha)$ の評価アイデア

$$I(\alpha) = \int d^2\boldsymbol{r}_\perp \int_0^{t_f} dt \, \langle (\beta(L, \boldsymbol{r}_\perp, t) - \beta(0, \boldsymbol{r}_\perp, t)) \rangle_{\alpha^* \to \mathrm{eq}}^{\mathrm{eq}}$$

$\alpha(\boldsymbol{r}) \to \alpha(x)$ 垂直面で均一 A 断面積

$$\psi(x,t) \equiv \int_0^x dy \left(h(y,t) - \frac{E}{LA} \right) \qquad \partial_t \psi = \kappa \partial_x \beta$$

$$\beta(L,t) - \beta(0,t) = \int_0^L dx \partial_t \beta(x,t)$$

$$= \int_0^L dx \frac{\partial_t \psi}{\kappa}$$

熱伝導率が定数なら、ズバーレフ＝マクレナン表現は時間積分を含まず、ミクロカノニカルの拡張として明示的に書くことができる。相共存の場合でも、補正項を評価できる

が、

この公式は、 $J = O(\eta)$ で有効であり、
$\eta \to 0$ という極限をとれない

とりあえず、気にせず・・

補正項 $I(\alpha)$ の計算をする。

正しいなら

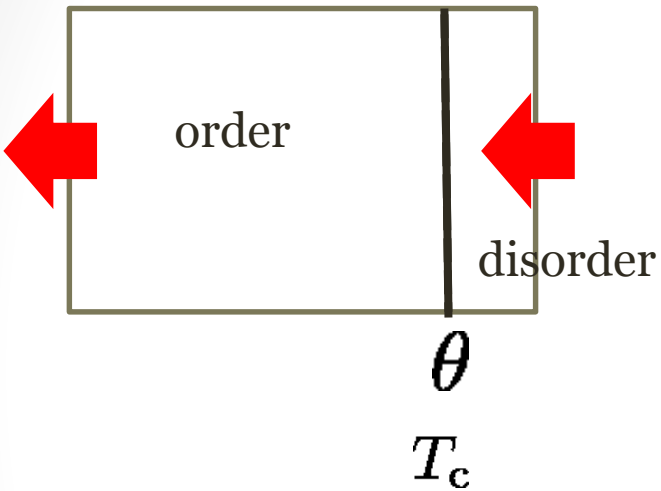
⇩

界面位置の変分原理による決定

変分関数
＝界面位置指定での定常状態に対する全エントロピー
＋「温度差 x 潜熱x 界面位置の関数」

「修正されたエントロピー」最大

熱力学量の計算結果I



界面温度は平衡の転移温度である。

マクロダイナミクスの計算と本質的に同じ

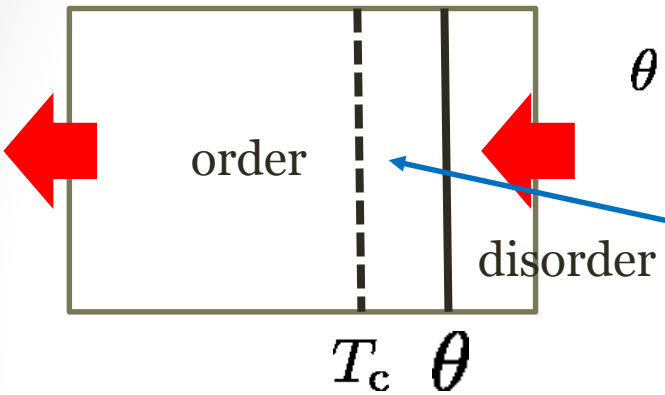
ゆらぎの効果は本質的ではない・・・

理論的課題

フラックスを（線形応答領域という意味で）
小さく固定したまま、長時間極限と熱力学極限
をとれ・・・　未完　・・・

演説

熱力学量の計算結果II



$$\theta - T_c = -T_c^2 J_0 \left(\frac{1}{2\kappa^o} - \frac{1}{2\kappa^d} \right) \frac{X(L-X)}{L}$$

super-heated ordered state

$$\theta - T_c > 0$$

κ^o 秩序相の熱伝導率

κ^d 無秩序相の熱伝導率

準安定状態の熱伝導による安定化という現象が生じる！

ダイナミクスのゆらぎ化がもたらす本質的現象

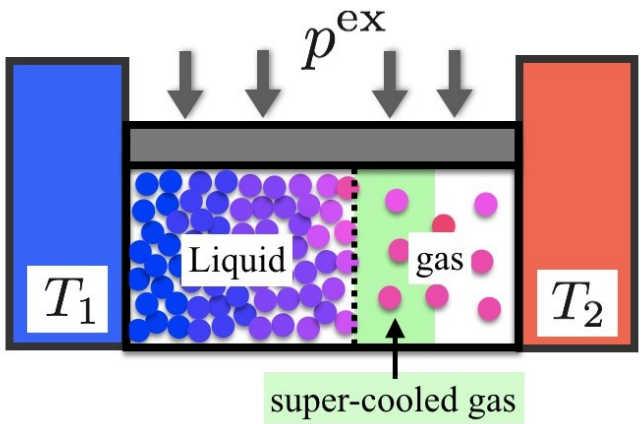
大域熱力学

「大域温度」によって、非一様系を「一様系」にマップし、熱伝導系に対して、大域熱力学を構築

(Nakagawa-Sasa, 準備中)

大域熱力学に付随する変分原理を提案し、熱伝導状態において、過冷却気体が安定化する現象を予言

(Nakagawa-Sasa, PRL, 2017)



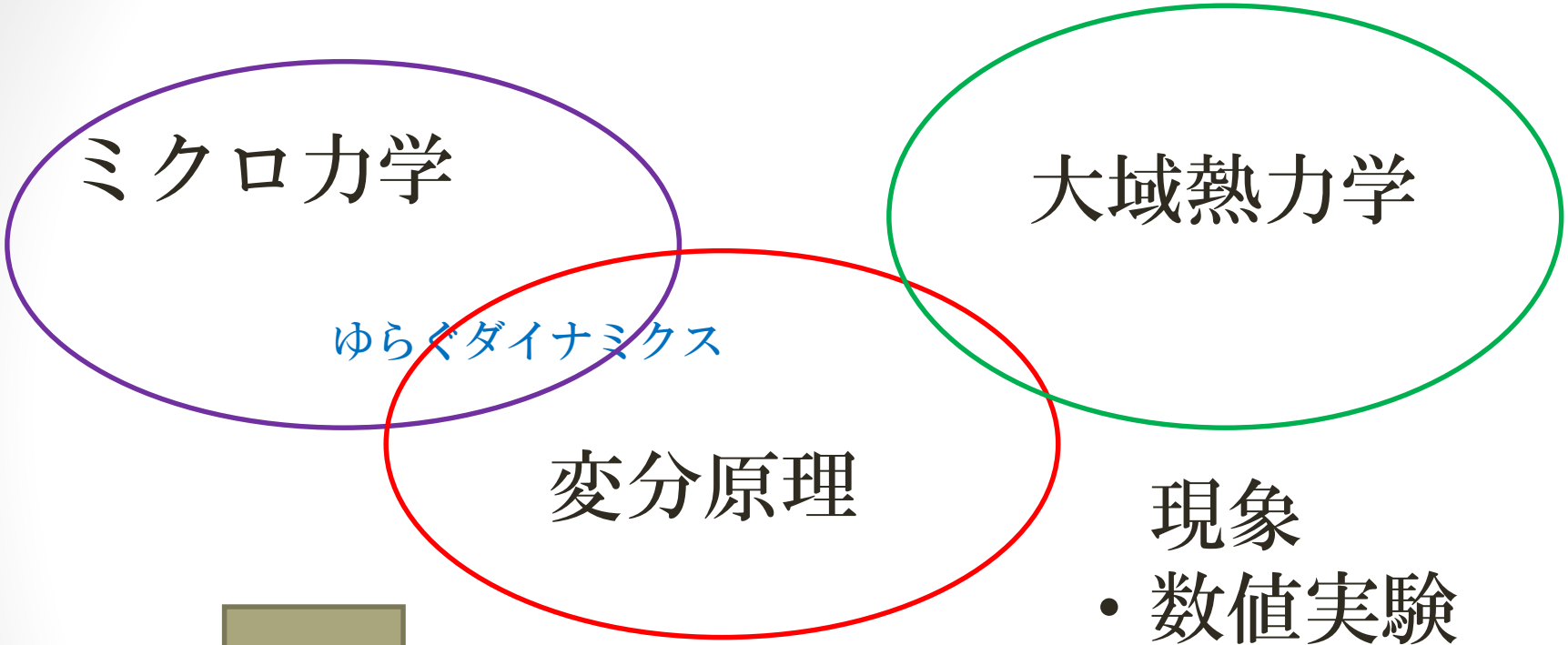
驚くべきことに・・

計算結果IIと大域熱力学の
変分原理は等価であり、
大域熱力学の公式をつかっても
同じ計算結果を得る！

PART V

展望

これからの問題



現象
- 数値実験
- 実験

量子ダイナミクス、凝縮系、ハドロン・・

今日の講演の共同研究者

大域熱力学、熱伝導下相共存全般、ゆらぎの解析:
中川尚子（茨城大）

オンサーガーの標準形、
ノイズの特異性、ゆらぎの解析:
伊丹将人（京大）

メソ記述のモデル、ゆらぎの解析:
中山洋平（中央大）

力学記述とゆらぐ流体の関係:
本郷優（理研）、齋藤（慶応大）

熱伝導下相共存の大規模数値実験：
小林未知数（京大）

ゆらぐ流体によるすべり現象：中野（京大）