

1次元非線形揺らぎあり流体力学と確率過程モデル

東京工業大学 理学院 笹本 智弘

Tomohiro Sasamoto

Department of Physics, Tokyo Institute of Technology

概要

数年前, H. van Beijeren と H. Spohn は, Fermi-Pasta-Ulam(FPU) 鎖を代表例とする 1 次元非調和鎖の長時間の振る舞いの一部が, 揺らぎあり非線形流体力学を經由して考察することにより, Kardar-Parisi-Zhang(KPZ) 普遍クラスの性質を用いて記述出来るという予想を立てた. 同様な予想は多成分確率過程モデルにも立てることができ, ある 2 成分排他過程に対しては厳密に確認することができる.

1 Introduction

乱流は, 古くから知られる物理現象で応用上も極めて重要であるにも関わらず, その理論的理解は十分とは言えず, 今でも重要な未解決問題が多くある. その本質的な困難は, 系の非線形性に起因するカオスのため, 長時間における振舞いを調べるのが難しいことに由来する. 例えば, Kolmogorov が乱流のエネルギースペクトルに関する統計則を導く際に用いた仮説が, 乱流の基礎方程式であり決定論的非線形方程式である Navier-Stokes 方程式からどのように導かれるか, 現在でも完全に理解されてはいない.

乱流や Navier-Stokes 方程式は, 通常 3 次元 (または 2 次元) において研究されるが, 決定論的な時間発展から普遍的な揺らぎがどのように現れるかという問題は, 1 次元においても考えることができる. ハミルトニアン

$$H = \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2} + V(x_{j+1} - x_j) \right) \quad (1.1)$$

で与えられる 1 次元古典系を考えよう. $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ の場合は調和バネでつながれた連成振動の問題となり, 運動方程式が線型であるため Fourier 解析を用いて解くことが出来, 一般解は基準振動の重ね合わせの形に書ける.

1955 年, Fermi, Pasta, Ulam は, 相互作用ポテンシャルが

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \frac{\alpha}{3}x^3 + \frac{\beta}{4}x^4 \quad (1.2)$$

のように非線形性を含む場合を考察した (Fermi-Pasta-Ulam(FPU) 鎖) [1]. FPU の 3 人は, 世界で最初のコンピュータの一つである MANIAC を用い, 非線形性が熱平衡化を

もたらす様子を調べようとしたのだが、結果はむしろ再期現象に近い振舞いが見られるというものであった。このように明確な結論が得られた訳ではなかったが、FPU 鎖および論文はその後カオスやソリトンといった概念と関係し、非線形系に関する研究が進むきっかけの一つとなった。

FPU 鎖に対する研究は、その後も沢山の蓄積があるが、可解ではないため特に長時間の振舞いを調べるのは難しいままである [2]。しかし近年、その揺らぎや相関に関する性質の一部は、KPZ 普遍性クラス概念を用いて理解できることが分かって来た。

1986 年、Kardar, Parisi, Zhang は、界面成長を記述するあるモデル方程式として次のような方程式を提案した (KPZ 方程式) [3]:

$$\frac{\partial}{\partial t} h(x, t) = \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2} h(x, t) + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} h(x, t) \right)^2 + \eta(x, t). \quad (1.3)$$

ここで $h(x, t)$ は時刻 t , 位置 x における界面の高さであり、また $\eta(x, t)$ は

$$\langle \eta(x, t) \eta(x', t') \rangle = 2D \delta(x - x') \delta(t - t') \quad (1.4)$$

を満たすガウシアンホワイトノイズである。Kardar らは、動的繰り込み群を適用する事により界面の性質について調べ、揺らぎの指数などを計算した。KPZ 方程式が記述する界面の性質は、多くの界面成長系で普遍的に見られ、現在 KPZ 普遍性と呼ばれる [4]。特に近年は、KPZ 普遍性クラスに対して揺らぎの指数のみでなく、普遍的な分布関数や相関関数が厳密に計算されている [5-8]。また対応する精緻な実験結果も得られている [9, 10]。

KPZ 方程式は、界面の傾き $u = \frac{\partial}{\partial x} h$ に対するもの書き直すと

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + \frac{\lambda}{2} \frac{\partial}{\partial x} (u(x, t))^2 + \frac{\partial}{\partial x} \eta(x, t) \quad (1.5)$$

となる。これは Burgers 方程式と呼ばれる 1 次元非線形輸送方程式にノイズが加わった形をしており、Noisy-Burgers 方程式 と呼ばれ、1 成分系に対する非線形な揺らぎあり流体力学方程式と言える。

KPZ 普遍性クラスは、これまで 1 成分系の界面成長や輸送現象の普遍性を記述するものと考えられていたが、上記のように、近年 1 次元非線形鎖の性質の記述にも現れることが分かって来た [11, 12]。本稿では 1 次元非線形揺らぎあり流体力学と KPZ 普遍性の関連を概観したのち、そこから導かれる予想を 2 成分非対称排他過程の場合に理論的に検証した最近の我々の結果について紹介する。

2 1 次元非線形揺らぎあり流体力学

2.1 一般論

ハミルトニアン (1.1) で記述される 1 次元多体古典系を考える。ポテンシャルは (1.2) の形には限らない一般の場合を考える。この系には次の 3 つの保存量が存在する:

$$r_j = x_{j+1} - x_j, \quad p_j, \quad e_j = \frac{p_j^2}{2} + V(r_j). \quad (2.1)$$

これらに対する運動方程式は次のように書ける:

$$\dot{r}_j = p_{j+1} - p_j, \quad (2.2)$$

$$\dot{p}_j = V'(r_j) - V'(r_{j-1}), \quad (2.3)$$

$$\dot{e}_j = p_{j+1}V'(r_j) - p_jV'(r_{j-1}). \quad (2.4)$$

これは,

$$\vec{G} = (r_j, p_j, e_j) \quad \vec{J} = (-p_j, -V'(r_{j-1}), -p_jV'(r_{j-1})) \quad (2.5)$$

と書くことにすると, 次のような連続の方程式の形にまとめることができる:

$$\frac{d}{dt}\vec{G}(j, t) + \vec{J}(j+1, t) - \vec{J}(j, t) = 0. \quad (2.6)$$

この系の流体力学的な振舞いを考えることができる. Euler 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{g} + \frac{\partial}{\partial x}\vec{j} = 0 \quad (2.7)$$

の形に書かれると期待される. ただしこれでは揺らぎの効果が無い. ノイズ η と, それに伴って拡散項も加えると, 次のような方程式を得る:

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{g} + \frac{\partial}{\partial x}(\vec{j} + \partial_x D\vec{g} + B\vec{\eta}) = 0. \quad (2.8)$$

ただし D は拡散行列, B はノイズの相関を表す行列である. この方程式を平衡状態の周りに 2 次まで展開すると,

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{u} + \frac{\partial}{\partial x}(A\vec{u} + \frac{1}{2}\langle\vec{u}, H\vec{u}\rangle + \partial_x D\vec{u} + B\vec{\eta}) = 0 \quad (2.9)$$

という形の方程式が得られる. これが揺らぎあり非線形流体力学の方程式である.

ここに現れる行列 A を $RAR^{-1} = \text{diag}(c_1, c_0, c_{-1})$ のように対角化すると, "基準モード" $\vec{\phi} = R\vec{u}$ に対する方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi_\alpha + \frac{\partial}{\partial x}(c_\alpha\phi_\alpha + \frac{1}{2}\langle\vec{\phi}, G^\alpha\vec{\phi}\rangle + \partial_x(D\vec{\phi})_\alpha + (B\vec{\eta})_\alpha) = 0 \quad (2.10)$$

のように書かれる. 非線形項には, 行列 G^α で表されるモード間の相互作用が入っているが, 長時間の振舞いにおいては, 対角部分からのものが主要な寄与を与えると仮定すると, 各モードに対する方程式は, Noisy-Burgers 方程式 (1.5) に他ならない. これから, 各基準モードの相関や分布に関する性質が, KPZ 方程式で記述されると期待されることになる.

これが 1 次元ハミルトニアン系に対する非線形揺らぎあり流体力学による取り扱いと, KPZ 普遍性との関連である. ここでは非線形性が一番一般的な状況を想定し, 全てのモードが KPZ 的な性質を示すことが期待されるように書いたが, 実際にはいくつかの非線形項が現れないというようなことが起こり, その場合にはまた別の検討が必要である. 特に 1 次元非調和鎖の場合には熱モードと呼ばれるモードには自己相互作用による非線形性は現れず, Lévy 分布と関係する揺らぎを示すことが予想される [12].

2.2 シミュレーション

前節の議論は、基準モード間の相互作用を無視してしまう荒っぽいものであり、実際に正しいか検証する必要がある。理論的な検証は容易ではないが、予想自体は明確なものであるため、数値計算による確認は比較的容易に行うことができ、実際に行ってみると、良い一致を見ることができることが報告されている [13, 14]。

2.3 確率過程モデル

2.1 節における揺らぐ流体力学の定式化は、3つの保存量を持つ1次元ハミルトン系に対して行われたが、同様の定式化は多成分の確率過程モデルに対しても行うことが可能である [15]。この場合も generic な場合は各基準モードは長時間において KPZ 系のような振舞いを示すということが期待され、実際にモンテカルロシミュレーションにおいて確認される [15]。ハミルトン系の場合と比較して有限時間効果が小さい様子が見られる。

確率過程モデルに対しては、ハミルトン系におけるカオスのような根本的な問題は存在しないため、理論的な取り扱いが比較的容易であると期待される。最近我々はある2成分非対称排他過程に対して予想を解析的に確認することが出来たので [16]、次の節ではその結果を紹介したい。

3 2成分非対称排他過程

3.1 モデル

1998年, Arndt, Heinzl, Rittenberg は、ある2成分の非対称排他過程を導入した (AHR モデル) [17]。このモデルには、+ 粒子と - 粒子という2種類の粒子があり、+ 粒子は右方向へのみ rate β で hop する TASEP であり、- 粒子は左方向へのみ rate α で hop する TASEP である。ただし + 粒子と - 粒子が +- のように隣り合っている場合は、rate 1 で位置を交換し -+ という配置となる。このモデルは、元々、周期境界条件において定常状態が行列積の形に厳密に表されるものの例として導入され、興味深い凝縮現象を示すことなども知られているが [18]、近年揺らぐ流体力学を検証する際のモデルとしても用いられるようになっていく。 $\alpha + \beta = 1$ の時は定常状態が各サイト独立となることが知られており、本稿ではその場合を考えることにする。

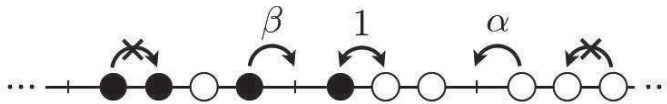


図 1: AHR モデル

初期条件としては、1次元格子の原点より左側には + 粒子が密度 ρ で存在し、原点より右側には - 粒子が詰まっているようなものを採用する。この場合が手法の都合上一番簡単であり、かつ揺らぐ流体力学の予想を検証する上で十分意味があるからである。

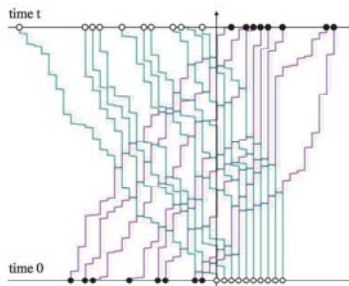


図2: 初期条件と時間発展の様子.

3.2 一般化された予想

AHR モデルに対する流体力学方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{u}(t, x)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{u}(t, x))}{\partial x} = 0 \quad (3.1)$$

の形に与えられる. ただし $\mathbf{j}(\mathbf{u}) = (j_+(\mathbf{u}), j_-(\mathbf{u}))$ の $j_{\pm}(\mathbf{u})$ は \pm 粒子のカレントを表し

$$\begin{aligned} j_+(\mathbf{u}) &= \rho_+(1 - \rho_+ - \rho_-) + 2\rho_+\rho_-, \\ j_-(\mathbf{u}) &= -(1 - \rho_+ - \rho_-)\rho_- - 2\rho_+\rho_-. \end{aligned}$$

この方程式は, 基準モードに移ることで解くことが可能である. 特に現在我々が考えている初期条件に対しては, 原点における \pm 粒子の平均カレントは $j_+ = \frac{\rho(3-\rho)^2}{16}$, $j_- = \frac{(1+\rho)^2(2-\rho)}{16}$ と与えられる.

揺らぐ流体力学の予想は,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{\infty, \infty}[s_-(n, m, \rho, t) \leq s_-] = F_2(s_-) \quad (3.2)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{\infty, \infty}[s_+(n, m, \rho, t) \leq s_+] = F_G(s_+) \quad (3.3)$$

と表すことができる. ただしここで n, m は時刻 t までに原点を超えた \pm 粒子の個数であり, スケールされた変数 $s_{\pm}(n, m, \rho, t)$ は

$$s_-(n, m, \rho, t) = \frac{(1 + \rho) \cdot n - (3 - \rho) \cdot m + (1 - \rho)(1 - \frac{(1-\rho)^2}{4})t}{(3/16)^{1/3}(1 - \rho)(3 - \rho)^{2/3}(1 + \rho)^{2/3}t^{1/3}}, \quad (3.4)$$

$$s_+(n, m, \rho, t) = \frac{-2(2 - \rho) \cdot n + 2\rho \cdot m + 2(2 - \rho)(1 - \rho)\rho t}{3(1 - \rho)^{3/2}\sqrt{\rho(2 - \rho)}t^{1/2}} \quad (3.5)$$

で与えられる. また F_2, F_G はそれぞれ GUE 型 Tracy-Widom 分布 [20] とガウス分布の分布関数である.

2つのモードが独立であると考えと, (3.2),(3.3) は

$$P_{\infty, \infty}[N_+(t) = n, N_-(t) = m] \simeq F'_G(s_+)F'_2(s_-) \quad (3.6)$$

のようにまとめられる。これは無限系に対する予想であり、非調和鎖の場合と同様、モンテカルロシミュレーションで確認することが出来る。しかし、以下で行う解析計算においては、+粒子と-粒子の粒子数をそれぞれ N, M と有限にした場合しか扱えない。我々は、このような状況における揺らぐ流体力学の考察を一般化し、一般化された予想

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{N,M}[N_+(t) = N, N_-(t) = M] = F_G(s_+)F_2(s_-) \quad (3.7)$$

を立てた。これは上記の (3.6) と似ているように見えるが、実際はかなり非自明な拡張となっている。シミュレーションでみると下図のようになっており、数値的には予想は正しいと期待されるが、我々は次節においてこの事実を解析的な計算によって検証する。

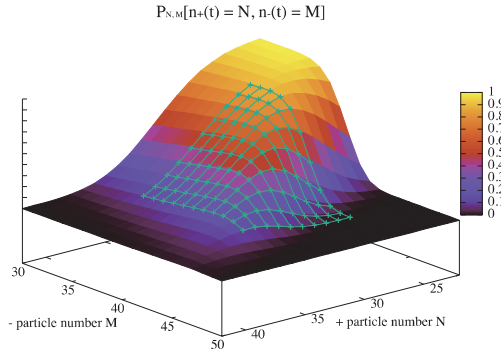


図3: 予想 (3.7) のシミュレーションによる確認

3.3 厳密解による確認

AHR モデルは、可解なモデルとなっている [19]。Bethe 仮説を用いた計算により、グリーン関数（時刻 0 で $x_i^{(0)}, y_j^{(0)}$ にいた粒子が時刻 t に x_i, y_j にいる確率）は多重積分の形に書ける。特に、最初 + 粒子は全て原点より左側にいて - 粒子は全て原点より右側でいたところから出発し、時刻 t では、+ 粒子は全て原点より右側にいて - 粒子は全て原点より左側にいるような場合については、次のように書ける。

$$\begin{aligned} & G(\{x_j - x_j^{(0)}\}, \{y_k - y_k^{(0)}\}, t) \quad (3.8) \\ &= \oint \prod_{j=1}^N \frac{dz_j}{2\pi i} \prod_{k=1}^M \frac{dw_k}{2\pi i} e^{\Lambda t} \prod_{k=1}^M \prod_{j=1}^N \frac{1}{\beta z_j + \alpha w_k} \\ &\times \sum_{\pi \in S_N} \text{sign}(\pi) \prod_{j=1}^N \left(\frac{z_j - 1}{z_{\pi_j} - 1} \right)^{j-1} z_{\pi_j}^{x_j} z_j^{-x_j^{(0)}-1} \\ &\times \sum_{\rho \in S_M} \text{sign}(\rho) \prod_{k=1}^M \left(\frac{w_k - 1}{w_{\rho_k} - 1} \right)^{M-k} w_{\rho_k}^{-y_k} w_k^{y_k^{(0)}-1} \quad (3.9) \end{aligned}$$

ただし $\Lambda = \sum_{j=1}^N \beta(1/z_j - 1) + \sum_{k=1}^M \alpha(1/w_k - 1)$ で積分経路はすべて原点を回るものである。

次に、時刻 t において、 N 個の $+$ 粒子が全て原点を通過し右側におり、 M 個の $-$ 粒子が全て原点を通過し左側にいる確率を考える。これはグリーン関数の初期条件と終条件に関する適当な和を取ることで計算され、次のような多重積分表示が得られる：

$$P_{N,M}(N_+(t) = N, N_-(t) = M) = \frac{1}{N!M!} \oint \prod_{j=1}^N \frac{dz_j}{2\pi i} \prod_{k=1}^M \frac{dw_k}{2\pi i} e^{\Lambda t} \quad (3.10)$$

$$\times \frac{\rho^N \prod_{1 \leq i < j \leq N} (z_i - z_j)^2 \prod_{1 \leq k < l \leq M} (w_l - w_k)^2}{\prod_{j=1}^N (z_j - 1)^N (1 - (1 - \rho)z_j) \prod_{k=1}^M (w_k - 1)^M \prod_{j=1}^N \prod_{k=1}^M (\beta z_j + \alpha w_k)} \quad (3.11)$$

z_j 積分, w_k 積分のみに着目すると、1 成分の TASEP の場合に現れるランダム行列的な表式となっており、今回はそれに加えて相互作用に由来する積 $\prod_{j=1}^N \prod_{k=1}^M (\beta z_j + \alpha w_k)$ が現れているという形をしている。この多重積分の漸近解析は非自明であるが³, $z_j = 1/(1 - \rho)$ における極からの寄与を分離したのち、一成分系の場合の解析と同様な手法を用いることが出来、結果として (3.7) を確認することが可能となる。より詳しくは原論文を見て頂きたい。

4 おわりに

本稿では、保存量が複数個存在する系の長時間における振舞いに KPZ 系の性質が現れるという予想について説明し、AHR モデルと呼ばれる 2 成分非対称排他過程においては実際に検証が出来たことについて説明した。この結果を元に、基準モードの独立性などに関する考察が深まり、Fermi-Pasta-Ulam 鎖を含むハミルトン系における長時間の振舞いの理解が進展することを期待したい。

参考文献

- [1] E. Fermi, J. Pasta and S. Ulam, *Studies of Nonlinear Problems*. Los Alamos Report LA-1940, 1995.
- [2] G. Gallavotti, *The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report*. Lecture Notes in Physics 728, Springer, Berlin, 2008.
- [3] M. Kardar, G. Parisi and Y. C. Zhang, *Dynamic scaling of growing interfaces*. Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 889–892.
- [4] A.L. Barabási and H.E. Stanley, *Fractal concepts in surface growth*, Cambridge University Press, 1995.
- [5] T. Sasamoto and H. Spohn, *One-dimensional Kardar-Parisi-Zhang equation: an exact solution and its universality*, Phys. Rev. Lett. **104**(2010), 230602.

- [6] 笹本智弘, 1次元非対称単純排除過程の厳密解, 物性研究, 79:881–925, 2003.
- [7] T. Sasamoto, *Fluctuations of the one-dimensional asymmetric exclusion process using random matrix techniques*, J. Stat. Mech. (2007) P07007.
- [8] T. Sasamoto, *The 1D Kardar-Parisi-Zhang equation: Height distribution and universality*, Prog. Theor. Exp. Phys. 022A01 (2016).
- [9] K.A. Takeuchi, M. Sano, *Growing Interfaces of Liquid Crystal Turbulence: Universal Scaling and Fluctuations*, Phys. Rev. Lett. **104**(2010), 230601.
- [10] K.A. Takeuchi, M. Sano, *Evidence for geometry-dependent universal fluctuations of the Kardar-Parisi-Zhang interfaces in liquid-crystal turbulence*, J. Stat. Phys. **147**(2012), 853-890.
- [11] H. van. Beijeren, *Exact results for anomalous transport in one-dimensional Hamiltonian systems*, Phys. Rev. Lett. **108**(2012), 180601.
- [12] H. Spohn, *Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics for Anharmonic Chains*, J. Stat. Phys. **154**(2014), 1191-1227.
- [13] S. G. Das, A. Dhar, K. Saito, C. B. Mendl, H. Spohn, *Numerical test of hydrodynamic fluctuation theory in the Fermi-Pasta-Ulam chain*, Phys. Rev. E. **90**(2014), 012124.
- [14] C. B. Mendl, H. Spohn, *Dynamic Correlators of Fermi-Pasta-Ulam Chains and Nonlinear Fluctuating Hydrodynamics*, Phys. Rev. Lett. **111**(2013), 230601; *Shocks, Rarefaction Waves, and Current Fluctuations for Anharmonic Chains*, J. Stat. Phys. **166**(2017), 841-875.
- [15] P. Ferrari, T. Sasamoto and H. Spohn, *Coupled Kardar-Parisi-Zhang Equations in One Dimension*, J. Stat. Phys. **153**(2013), 377-399;
- [16] Zeying Chen, Jan de Gier, Iori Hiki, Tomohiro Sasamoto, *Exact confirmation of 1D nonlinear fluctuating hydrodynamics for a two-species exclusion process*, Phys. Rev. Lett. **120**(2018), 240601.
- [17] P. F. Arndt, T. Heinzl and V. Rittenberg, *Spontaneous breaking of translational invariance in one-dimensional stationary states on a ring*, J. Phys. A: Math. Gen. **31** (1998), no. 2, L45; *Spontaneous breaking of translational invariance and spatial condensation in stationary states on a ring: 1. the neutral system*, J. Stat. Phys. **97** (1999), no. 2, 1–66; *Spontaneous breaking of translational invariance and spatial condensation in stationary states on a ring: 2. the charged system and the two-component burgers equations*, J. Stat. Phys. **107** (2002), no. 2, 989–1013.

- [18] T. Sasamoto N. Rajewsky and E. R. Speer, *Spatial particle condensation for an exclusion process on a ring*, Physica. A **279** (2000).
- [19] L. Cantini, *Algebraic bethe ansatz for the two species asep with different hopping rates*, J. Phys. A: Math. Theor. **41** (2008), 095001.
- [20] C. A. Tracy, H. Widom *Level-spacing distributions and the airy kernel*, Comm. Math. Phys. **159** (1994), 151–174.