

Microscopic and Macroscopic Physics of Non-equilibrium Steady States Near and Far from Equilibrium

慶応義塾大学 日吉物理学教室 青木 健一郎¹
Yale 大学 物理学科 Dimitri Kusnezov²

古典格子系では非平衡定常状態の物理量の振る舞いを第一原理より求めることができる。その手法を紹介し、温度勾配のある ϕ^4 理論と FPU 模型の平衡近傍と平衡状態より離れた状況での物理量の振る舞いを解説する。特に、位相空間のアトラクターへの収縮と輸送現象との関係を導き、定量的に検証する。量子非平衡系への第一原理よりのアプローチについてその問題点を含めて解説をする。

1 初めに

初期宇宙、重イオン衝突、固体／流体における輸送現象など物理の至る分野にとって有限温度の非平衡物理系の振る舞いの理解は重要である。実際の物理的状況を考えると、非平衡系の振る舞いに関して以下の疑問が自然に生ずる。

- 系は熱平衡化 (thermalize) しているのだろうか？ 局所平衡とは物理量のいかなる振る舞いを意味し、どのようにしてそれからの「ずれ」を測定できるのであるだろうか？
- 線形応答理論はどのような領域で有効なのであるだろうか？ それに対する補正は定量的にどのように振る舞うのか？
- 相互作用が強い場合にはどのように非平衡系は振る舞うのか？
- ミクロの物理とマクロの物理の関係は具体的にどのようなものであるだろうか？ グローバルな平衡と局所平衡の関係はどのようなものであるだろうか？

このような疑問に答えたいので、我々は理論に対して次のような要請をする。

- 系を**第一原理**より扱い、系のダイナミックスに関して仮定をおかない。仮定をおくと得られた結果が仮定に由来するものなのか判断するのが困難であるからである。
- 近似をしないで非摂動的に系のダイナミックスを求める。近似を用いると結果がその影響を受け、また、相互作用が強い場合には近似は一般に使えないからである。
- 線形応答だけではなく、平衡状態から離れた場合も扱う。

¹E-mail: ken@phys-h.keio.ac.jp

²E-mail: dimitri@mirage.physics.yale.edu

- 。系内部の非平衡の状況 (流れ, 温度勾配, 等々) は系の境界条件と系内部のダイナミックスにより生じ, これに関し何ら仮定をおかない。

これらの要求はあまりにも理想的であり, 無理に感じるかも知れないが, 古典格子系では実は満たすことができる。近年, 我々は 1 ~ 3 次元の ϕ^4 理論, FPU 模型などにおいて温度勾配がある場合に, 様々な物理量の振る舞いを分析している [1, 2, 3, 4, 5]。なぜ古典系を調べるのかという疑問があるかも知れない。我々は最終的には量子的場の理論にまで理解を広げたいと考えているが, まず古典系で理解ができなければ量子系での理解をしようというのは無理な話であると考えている。また, 古典非平衡系自体が興味深い系であり, 数々の未解決の問題が残されているので面白い。以下ではそのうち特にマイクロとマクロの物理の関係と量子系への拡張に焦点を絞って手短かに解説する。

2 ϕ^4 理論と FPU 模型の非平衡系

我々は以下では中に温度勾配の生じる非平衡系の定常状態での物理量の振る舞いを調べる。系の両端にサーモスタットをつけ温度を (T_0^1, T_0^2) にする (図 1 (左))。系内部の領域 (V_{in}) のダイナミックスにサーモスタットの自由度は一切直接関与しない。系の温度は例えば図 1 (右) のように振る舞う。古典系では, 必要であれば数値的手段も活用して運動方程式を解けば, 第一原理より系のダイナミックスを求められる。

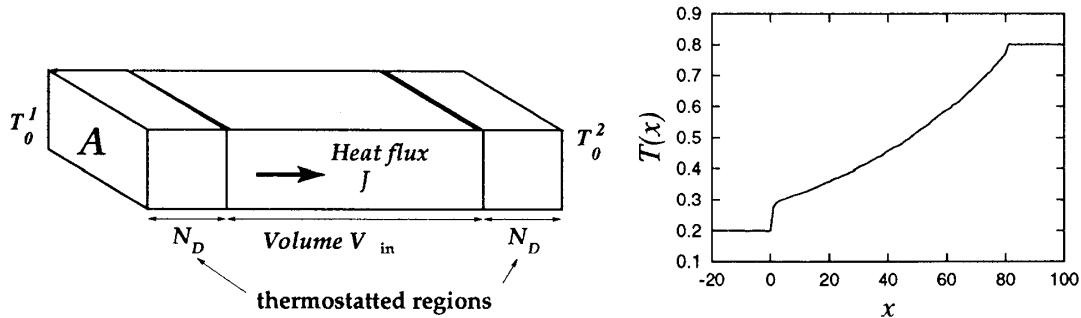


図 1: (左) 温度差のある系, (右) ϕ^4 理論の温度の空間依存性の例, $(T_0^1, T_0^2) = (0.2, 0.8)$, $N_D = 20$.

以下で扱う系のハミルトニアンは次式の通りである。

$$H = \sum_{\mathbf{x}} \left[\frac{\pi_{\mathbf{x}}^2}{2} + \frac{(\nabla \phi)_{\mathbf{x}}^2}{2} + V \right], \quad V = \frac{\phi_{\mathbf{x}}^4}{4} \quad (\phi^4 \text{ 理論}), \quad \frac{(\nabla \phi_{\mathbf{x}})^4}{4} \quad (\text{FPU 模型}) \quad (1)$$

格子系なので $\nabla \phi_{\mathbf{x}}$ は差分である。系の内部での運動方程式は上記のハミルトニアンから得られるものであり, 系の両端 (図 1 (左) で N_D の領域) ではサーモスタットに対応する自由度が $\pi_{\mathbf{x}}$ と相互作用する。ページ数のためサーモスタットの詳細は割愛せざるをえないが, 使うサーモスタットは Nosé-Hoover と呼ばれているタイプを拡張したものであり, 決定論的なものである [6, 1]。運動方程式を数値的手段を用いて解き, 物理量は時間平均によって求められる。温度は時間平均 $\langle \pi_{\mathbf{x}}^2 \rangle$ で局所的に定義する。両端の温度をサーモスタットでコントロールすると, 系内の ϕ^4 理論, FPU 模型のダイナミックスにより温度勾配が動的に定まる。

このような手法を強力であり, 第一原理より非平衡系定常状態での任意の物理量を時間平均をとることにより計算できる。平衡近傍で温度勾配が違う系を扱うことにより, Fourier

の法則 $J = -\kappa \nabla T$ (J は熱流, κ は熱伝導度を表す) が成り立っていることを検証し, κ をその温度依存性を含めて求めることができる [1, 2]. 求められた熱伝導度 κ は平衡状態での Green-Kubo 公式を用いた結果とも一致する. また, ϕ^4 理論にはバルク極限が存在し, κ は十分大きな系では示強性を持つことが示せるが, FPU 模型にはバルク極限が存在しない. 局所平衡の破れは Maxwell 分布からのずれとしてキュムラント $\langle \pi_x^4 \rangle$ を用いて定量的に測定でき, 線形応答からの破れとともに, ϕ^4 理論, FPU 模型の両方の系で $\sim (\nabla T)^2$ のように振る舞う [3].

3 ミクロとマクロの非平衡物理

ミクロな視点からは, 位相空間内で系の軌跡はフラクタル次元 D_{neq} を持つストレンジアトラクターに落ちこむと通常考えられている. D_{neq} はナイーブな次元 (D), つまり自由度の数, より非平衡状況では $\Delta D (\equiv D - D_{\text{neq}})$ だけ小さい. 平衡状態では $\Delta D = 0$ である. 次元が小さくなれば自由度間の相関が必然的に生まれる. 非平衡の度合いが大きくなれば, ΔD が大きくなり, 熱流などの相関関数が大きくなる, というのは自然かつミクロとマクロの観点を結び付ける魅力的な概念である. ΔD の具体的な振る舞いはどのようなものであろうか? 特に ϕ^4 理論のように示量性のある理論では ΔD も示量的に振る舞うと思われるがこれはどのようなことを意味するのであろうか? ここではミクロレベルの ΔD と巨視的な輸送現象を定量的に結び付け, この考え方を具体的なものにする [7, 4].

上記のアトラクターによる描像を考慮すると, 下式のような振る舞いが考えられる.

$$\frac{\Delta D}{D} = C' \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^2 + \mathcal{O} \left(\frac{\nabla T}{T} \right)^4 \quad ? \quad (2)$$

しかし, 具体的に適用しようとする以下のような問題がすぐに浮かび上がる (図 1 参照).

1. D とはどの自由度の数をさすのか? 系の内部の自由度であらうか? それともサーモスタットも含んだ系全体の自由度であるのか?
2. ∇T は一般に系内で一定ではない. ∇T とは何をさすのであろうか? どの点の勾配であらうか? あるいは平均であらうか?
3. 一般には温度には境界ではずれがある³. このずれは内部の ∇T では取り除かれているが, ずれは ΔD には関与しないのであろうか?
4. サーモスタットの種類を代えたらどのような影響が ΔD に現れるのだろうか? あるいは現れないのだろうか?

以下で ΔD と輸送, 示量性との関係を具体的に求めてこれらの疑問に答える.

ΔD は Kaplan-Yorke の次式により求められ, この次元は振る舞いが物理的に「まとも」な通常の非平衡系では他の方法により求められる次元と一致することが知られている [8].

$$\Delta D = D - K + \frac{\sum_{j=1}^K \lambda_j}{\lambda_{K+1}}, \quad \sum_{j=1}^{K-1} \lambda_j \geq 0 > \sum_{j=1}^K \lambda_j \quad (3)$$

³ このずれの物理も理解できる [5].

ここで $\{\lambda_j | \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \lambda_D\}$ は系の Lyapunov 指数である。おおざっぱには Lyapunov 指数とは運動方程式の相空間での固有値の時間平均である。平衡の近傍では次の近似が有効である。

$$\Delta D = -\frac{\sum_{j=1}^D \lambda_j}{\lambda_{\max}^{\text{eq}}} + \mathcal{O}((\nabla T)^2) \quad (4)$$

Lyapunov 指数の和は位相空間全体の収縮率であり、これはエントロピーの生成率に他ならない。ここで V_{in} は系内部の体積、 A は断面積をさす (図 1 (左) 参照)。

$$\sum_{j=1}^D \lambda_j = -\dot{S} = AJ \left(\frac{1}{T_1^0} - \frac{1}{T_2^0} \right) = V_{\text{in}} \frac{J^2}{\kappa T^2} \left(1 + \frac{2\alpha}{V_{\text{in}}} \right) + \mathcal{O}(J^4) \quad (5)$$

α は境界での温度のずれの影響である。上式を用いると ΔD の平衡近傍での振る舞いが得られる。

$$\frac{\Delta D}{V_{\text{in}}} = \frac{J^2}{\kappa \lambda_{\max}^{\text{eq}} T^2} \quad (6)$$

$\lambda_{\max}^{\text{eq}}$ は平衡状態での最大 Lyapunov 指数である。この導出された式は (2) で指摘した問題を解決している。まずミクロの ΔD とマクロの輸送現象を定量的かつ具体的に結び付けている。 $\kappa, \lambda_{\max}^{\text{eq}}$ が示強性を示せば ΔD が示量性も持つのも明らかである。省略したが、(6) 式で境界での温度のずれを考慮することも可能である。また、(3) 式を使うと ΔD を求めるのに $\mathcal{O}(D^2)$ 個の運動方程式を解かねばならないのに対し、(4) 式では $\mathcal{O}(D)$ 個で十分であり、大きい系は平衡近傍になりがちなので ΔD を求めるのに (4) 式は非常に有用な方法である。逆に小さい系であれば Lyapunov 指数を全て求める事も可能である。

ϕ^4 理論を例にとり、上で理論的に導出された式がどのように成り立っているか調べる。まず (5) 式のエントロピー生成と $\sum_j \lambda_j$ の関係は図 2 (左) に示すように平衡近傍のみならず $\sim J^2$ のように振る舞わないような領域でも完璧に成り立っている。 ΔD の示量性を示す (6) 式も検証できる (図 2 (右) 参照)。また、(6) 式は理論的には平衡近傍で導かれたが、実際の系では平衡から遠い領域まで成り立つことを指摘しておく。さらに一点指摘すべきは ΔD がサーモスタットの種類に依存するという点である。この依存性はサーモスタットの自由度が多くなるとよりカオス性が強くなり、 $\lambda_{\max}^{\text{eq}}$ が大きくなるためである、とおおざっぱに理解できる。 $\lambda_{\max}^{\text{eq}}$ はユニバーサルな物理量ではないのである。

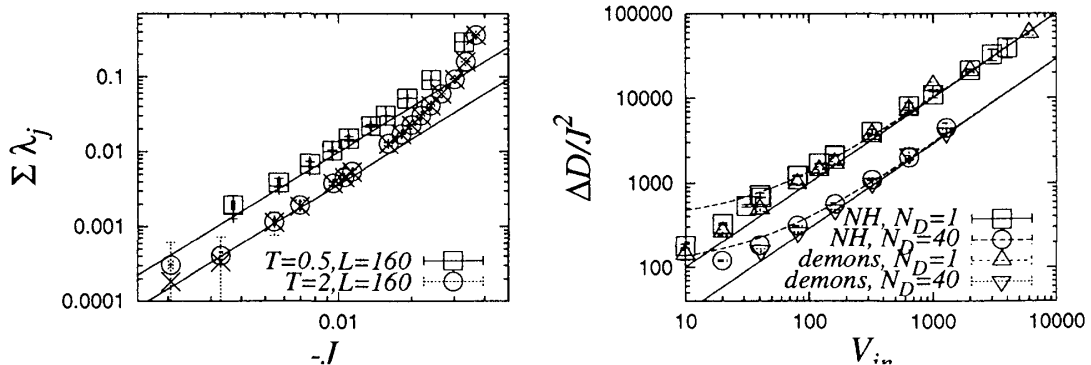


図 2: (左) $\sum \lambda_j$ ($\square, \circ$) と $AJ(1/T_1^0 - 1/T_2^0)$ ($+, \times$) の $-J$ に対する振る舞いを 2 つの異なる温度の場合について示した。実線は (5) 式の $\sim J^2$ 型の振る舞い。(右) いくつかのサーモスタットの種類に関しての ΔD の示量性。実線は (6) 式の右辺であり、点線は境界での温度のずれを考慮した場合の理論値。

4 第一原理より扱う量子非平衡系

以上で見てきたように古典格子系では数値解析も利用することにより、有限温度非平衡系のあらゆる物理量を第一原理より求めることができる。この状況を量子系に拡張できないであろうか、というのは自然な発想である。しかし、次のようなあからさな困難が伴う。

- I 古典力学の運動方程式に量子力学では Schrödinger 方程式が対応する。1 自由度 (q, p) の振る舞いは古典的には 2 個の運動方程式を解けば得られるが、量子力学で Hilbert 空間で解くと無限個の微分方程式に対応する。興味のある (例えば低エネルギーの) レベル M 個に限定したとしても、 N 自由度に対応しては M^N 個の方程式を解かねばならない。一番簡単な 1/2 スピン N 個でも、量子力学的には 2^N 個の方程式を解く必要がある。扱う自由度が古典力学に比べてとてつもなく多いのである。
- II 古典力学とは異なり有効なサーモスタットが知られていない。古典力学で用いた Nosé-Hoover 型サーモスタットを量子力学系でどのように適用して良いのか明らかではない。さらに、適用しても有効であるかは定かではない。

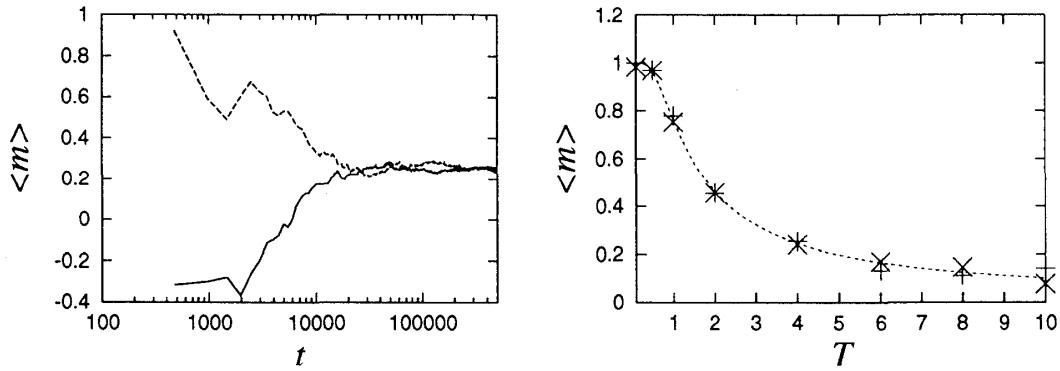


図 3: 同じ温度の磁場中 1/2-スピン 2 個の系。(左) 2 つのスピンの期待値の時間依存性 ($T = 4$ の場合)。スピンの期待値が収束するのが見える。(右) 2 個のスピンの期待値 (+, ×) とその温度依存性。理論的期待値 $\tanh(1/T)$ (点線) との一致が良いことがわかる。

量子非平衡系では調和振動子の場合が解析的に解かれている以外、第一原理より物理量を求めた例はまだあまり存在しない [9]。量子非平衡系のダイナミックスを、まず仮定や近似をしないで我々は理解したいので、量子力学の本質である問題 I は回避できないと思われる。よってスピン系のように自由度の少ない系を扱うことにする。そのような系でも II のサーモスタットの問題が残る。これに関してはスピン 1 つの場合には Nosé-Hoover 型サーモスタットを一般化したものが有効であることが示されているので [10]、これを拡張する。ここでは詳細は省くが、量子状態を $\psi(t) \equiv \sum_k (q_k + ip_k)/\sqrt{2}|k\rangle$ と書き直すと、Schrödinger 方程式は下式のように古典力学に類似した形式に書き換えられる。

$$\dot{q}_k = \sum_l H_{kl} p_l, \quad \dot{p}_k = -\sum_l H_{kl} q_l \quad H_{kl} \equiv \langle k | H | l \rangle \quad (7)$$

(q_k, p_k) が $\mathbb{CP}^{N-1}$ に属することは注意する必要があるが、上式より古典力学的なサーモスタットが自然に拡張できることが期待される。物理量は古典力学同様に Schrödinger 方

程式を解き期待値の時間平均により得られる。しかし、設定した温度で局所平衡が得られるか、そしてそれをどのようにして確認するのか、という点は実際に試してみなければわからない。1/2-スピン 2 つを同じ温度のサーモスタットと相互作用させた結果を図 3 に示す。このようにシンプルな系ではサーモスタットは有効であることが検証される。

5 最後に

非平衡系の振る舞いは統計力学の創始者達が悩んだ古くからある分野である。解析的に解ける系は興味深いが、非常にシンプルな系に限られており、現実的な系とは程遠い。近年の計算機の飛躍的な進歩により、古典非平衡系の振る舞いを第一原理より調べるのが小規模な計算機でも現在は可能である。これを用い、より現実的な系の具体的な振る舞いを定量的に調べ、物理的理解を得る事ができる。非平衡物理には、量子系は言うまでもなく、古典系でも基礎的な側面でさえわかっていない困難な問題が多い。チャレンジングで楽しい分野であると思う。

参考文献

- [1] K. Aoki, D. Kusnezov, *Phys. Lett.* **B477** (2000) 348; *Ann. Phys.* **295** (2002) 50
- [2] K. Aoki, D. Kusnezov, *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001) 4029—4032
- [3] K. Aoki, D. Kusnezov, [nlin.CD/0105063](#).
- [4] K. Aoki, D. Kusnezov, [nlin.CD/0204015](#).
- [5] K. Aoki, D. Kusnezov, *Phys. Lett.* **A265** (2000) 250.
- [6] S. Nosé, *J. Chem. Phys.* **81**, 511 (1984); *Mol. Phys.* **52** (1984) 255 ; W. G. Hoover, *Phys. Rev. A* **31** (1985) 1695; W.G.Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, Amsterdam, 1991).
- [7] H.A. Posch, W.G. Hoover, *Phys. Rev.* **A38** (1988) 473; B. Moran, W.G. Hoover, S. Bestiale, *J. Stat. Phys.* **48** (1987) 709; D.J. Evans, E.G.D. Cohen, D.J. Searles, F. Bonetto, *J. Stat. Phys.* **101** (2000) 17
- [8] W.G. Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, Amsterdam, 1991); D.J. Evans, G.P. Morriss, *Statistical Mechanics of Non-Equilibrium Liquids* (Academic, London, 1990); P. Gaspard, *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*, (Cambridge, New York, 1998).
- [9] U. Zürcher, P. Talkner, *Phys. Rev.* **A42** (1990) 3267, 3278; K. Saito, S. Takesue, S. Miyashita, *Phys. Rev.* **E54** (1996) 2404
- [10] D. Kusnezov, *Phys. Lett.* **A184** (1983) 50