

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 28 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2016

課題番号：26610115

研究課題名(和文)乱流結晶の構成と分類

研究課題名(英文)Turbulent crystal:Construction and classification

研究代表者

佐々 真一 (Sasa, Shin-ichi)

京都大学・理学研究科・教授

研究者番号：30235238

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：ゆらぎのスペクトルにピークがない「乱れ」と並進対称性の破れである「結晶」は数学的には別の概念であり、両者が共存する状態は「乱流結晶」と呼ばれている。本研究課題では、時間並進対称性と空間並進対称性について、乱流結晶を示すモデルをできるだけ多く構築し、分類することを目指した。その結果、ゆらぎのスペクトルが連続のまま時間並進対称性を破るモデルを2例構成し、それぞれ論文で公表した。それらは時系列アンサンブルにおけるレプリカ対称性の破れを示している。空間並進対称性に関しては、有力な候補を見出したが最後まで詰め切ることができなかった。

研究成果の概要(英文)：“Disorder states” are characterized by no peak in the spectrum of fluctuation, while “crystal states” are defined by the translational symmetry breaking. Both the concept is not exclusive and, in principle, there may be states respecting the two properties. Such states are called “turbulent crystals”. In this research project, we aim at proposing mathematical models that exhibits a turbulent crystal state. We also attempt to classify them. Here, the translational symmetries are considered in space and time directions, respectively; We refer them “turbulent crystal (space)” and “turbulent (time)”. As the result of this project, we report two examples of “turbulent crystals (time)”, which are related to the concept of “replica symmetry breaking of trajectories”. The examples are published in Phys. Rev. Lett and J. Phys. A. With regard to “turbulent crystals (space)”, we find a strong candidate but we could not establish the evidence for the validity of this model.

研究分野：統計物理

キーワード：統計物理 ガラス 不規則

1. 研究開始当初の背景

ゆらぎのスペクトルにピークがない「乱れ」と並進対称性の破れである「結晶」は数学的には別の概念であり、両者が共存することは可能である。このような状態はルエルによって「乱流結晶」と呼ばれた。しかしながら、我々が知っている全ての例では、液体のように統計状態に並進対称性が存在する場合にはゆらぎのスペクトルにピークがないし、結晶固体のようにスペクトルにピークを持つ場合には、並進対称性が破れている。

平衡統計力学だけではない。時系列のアンサンブルに対しても、時間並進対称性があるゆらぐ時系列では周波数スペクトルは連続であり、連続スペクトルを保ったまま時間並進対称性を破る、というのは考えにくい。

ところで、理想的なガラスを追及する研究において、3次元格子上の128状態モデルで、レプリカ対称性の破れを示す例を見出した。その例では、大ざっぱに言って、不規則な状態に固まる、ということが生じており、これは乱流結晶の例になっている。私を知る限り、乱流結晶は、数理模型を含めてもこの例しかない。実験ではただの一つも報告されておらず、数理的に証明された模型もない。

2. 研究の目的

本研究課題の目的は、乱流結晶の例をできるだけ多く構成し、それらを分類することである。その結果として、将来、乱流結晶を実験室で構成したり、数学的に証明したりすることに繋げたい。逆に言えば、実験室での構成や数学的な証明は直接の目的ではない。むしろ、できるだけ幅広い視点から、乱流結晶の候補を数多く提案したい。萌芽期にある研究のひとつのスタイルとして、多くの可能性を列挙することを目指した。

また、乱流結晶として、波数スペクトルにピークを持たないまま空間並進対称性を破れる場合と周波数スペクトルにピークを持たないまま時間並進対称性が破れる場合をそれぞれ乱流結晶(空間版)と乱流結晶(時間版)として、双方について可能性を列挙し、その関係も考えたい。

3. 研究の方法

それまでの研究成果を踏まえて、二つのアプローチを考えたい。第一のアプローチでは、乱れたパターンを生成する規則を使う。カオスやセルオートマトンの研究で、簡単な規則によって複雑な時系列やパターンが生成されることはよく知られている。つまり、ゆらぎのスペクトルでは連続になるが、簡単な規則をもつという意味で何かしらの秩序があると考えられる。そこで、その秩序を対称性の破れに利用する、というアイデアが考えられる。例えば、基底状態については、このような方

法で乱れと対称性の破れを共存させることは可能であるが、ノイズに対してロバストでなく、有限温度の場合には対称性が破れない例しかなかった。ただし、それまでは2次元系の研究だったので、3次元系について同様な方法を試みる。

第2のアプローチでは、ランダムネスを使う。系は並進対称性を保持しているが、結合の仕方など内部自由度にランダムネスを持ち込む。これは、唯一の成功例で使われたアプローチである。この場合、対称性の破れは通常の高エネルギー状態の選択という形で生じる一方、内部自由度の乱れによって複雑なエネルギーランドスケープが生成されることを期待する。理論的には平均場模型なら解析できるが、有限次元の解析は難しい。ただ、模型の候補を考えるのは容易ではある。

以上は、乱流結晶(空間版)を念頭においているが、乱流結晶(時間版)についても同様である。ただし、その場合、対称性の破れる方向がひとつだけであり、時間方向に簡単な規則を埋め込んで秩序化させるのは簡単ではなく、具体的には第2のアプローチしか考えられない。

4. 研究成果

本研究課題において「目に見える」最大の成果は、乱流結晶(時間版)の構成である。これは、時間並進に関して対称な確率過程において、ゆらぎの周波数スペクトルは連続のまま、時間並進対称性を破る例を複数構築した。具体的には、「時系列に対するレプリカ対称性の破れ」を定式化することによって実行した。出版論文において公表された例が2つある。

第一の例は、KPZ方程式によって駆動されるブラウン粒子である。この場合、ブラウン粒子の軌道の確率を書き下すと、ランダムポテンシャル中の向きのあるポリマーの統計力学の問題と関係づけられることが分かる。この関係を鍵にして、レプリカ対称性が弱く破れることを明示的に示した。時系列の統計分布がレプリカ対称性の破れを示す例が提示されたのは史上初めてであり、全く新しい方向への研究を切り拓くことになった。本研究課題においては、乱流結晶(時間版)の例示という位置づけであるが、レプリカ対称性の破れの観点では別の重要な点もある。レプリカ理論は、スピングラスの解析で生まれ、情報科学への応用で大きく発展したが、本研究課題の結果は、レプリカ理論の時系列解析への展開をもたらすかもしれない。この結果は、Phys. Rev. Lett. に掲載された。

第2の例は、ランダムトラップポテンシャル中のランダムウォークである。モデルの基本的な枠組みは第一の例と似ているが、理論的解析がある程度までできるのが特徴である。また、このモデルは極限の取り方を変えると平衡統計力学のランダムエネルギー模

型のひとつになりレプリカ対称性の破れが生じることが知られており、概念的な整理をするにも有用である。実際、ランダムウォークの集団としては、低温で熱力学が破綻するという病的な現象を示すが、平衡統計力学としてレプリカ対称性の破れを示しているわけではない。他方、軌道の統計力学については、レプリカ対称性の破れを示すのである。このレプリカ対称性の破れは、異なる極限で得られる平衡状態のランダムエネルギー模型のレプリカ対称性の破れとは直接の関係がない。いずれにしても、乱流結晶(時間版)として二つめの例が見つかった意義は大きい。この結果は、J. Phys. A に掲載された。

乱流結晶(空間版)については、第一のアプローチにしたがって、有望な模型を見出した。具体的には、3次元 XY 模型を出発点にとり、位相が揃う状態を基底状態にするのではなく、低エネルギー状態を空間方向へのカオス写像で生成する。また、基底状態を非自明にするために、空間3方向へのカオス写像が整合的にならないようにパラメータを選んでおく。このような模型のデザインはこれまでになく新しいものである。まず、交換モンテカルロ法を使った有限温度の数値実験により、相転移があることを抑えた。熱力学測定では、熱容量が不連続になっていた。これは、前回の模型と様相が異なり、レプリカ理論の意味で理想ガラスとして期待されている描像に沿っている。また、重なり分布が特異になっているという意味でレプリカ対称性が破れているのは間違いないが、問題はブラッグピークの有無である。模型の構成の仕方から、熱力学極限で結晶が残る可能性を排除できない。そこで、 $4 \times 4 \times 4$, $8 \times 8 \times 8$, $16 \times 16 \times 16$ とサイズを変えていくとき、基底状態のエネルギー密度値が減少することを示すことを考えた。もし、これが理論的に示せると、結晶が残る可能性がなくなり、ほぼ間違いなく乱流結晶になる。

しかしながら、ここでうまくいかなかった。数値実験は $8 \times 8 \times 8$ が限界であり、 $16 \times 16 \times 16$ の計算を実行するには、並列化計算をマスターしなければならなかった。残念ながらその時間を確保できなかった。また、理論的に示すには難しい命題で、証明することができなかった。つまり、もっともらしい模型の候補まで絞ったが、詰めることができなかった。そのため、論文として公表するに至っていない。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 14 件)

"Gaussian white noise as a resource for work extraction"

Andreas Dechant, Adrian Baule, and

Shin-ichi Sasa

Phys. Rev. E 95, 032132/1-032132/12

2017 年 査読有り

DOI:10.1103/PhysRevE.95.032132

"Replica symmetry breaking in trajectory space for the trap model"

Masahiko Ueda, Shin-ichi Sasa

J. Phys. A: Math. Theor. 50 125001/1-14

2017 年 査読有り

DOI: 10.1088/1751-8121/a a5d5e

"Universal Form of Stochastic Evolution for Slow Variables in Equilibrium Systems"

Masato Itami, Shin-ichi Sasa

J. Stat. Phys. 167 46-63

2017 年 2 月 査読有り

DOI: 10.1007/s10955-017-1738-6

"Entropy Production of Nanosystems with Time Scale Separation"

Shou-Wen Wang, Kyogo Kawaguchi,

Shin-ichi Sasa, and Lei-Han Tang

Phys. Rev. Lett. 117 070601/1-070601-5

2016 年 査読有り

DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.070601

"Focus on stochastic thermodynamics"

C Van den Broeck, S.-I. Sasa, U Seifert

New Journal of

Physics 18 020401-020403

2016 年 査読有り

DOI: 10.1088/1367-2630/18/2/020401

"Thermodynamic entropy as a Noether invariant"

S.-I. Sasa, Yuki Yokokura

Phys. Rev. Lett 116 140601/1-140601/6

2016 年 査読有り

DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.140601

"Exact equalities and thermodynamic relations for nonequilibrium steady states"
Teruhisa S. Komatsu, Naoko Nakagawa,
Shin-ichi Sasa, Hal Tasaki
J. Stat. Phys 159 1237-1285
2015 年 査読有り
DOI: 10.1007/s10955-015-1221-1

"Nonequilibrium Statistical Mechanics for Adiabatic Piston Problem"
Masato Itami, S.-I. Sasa
J. Stat. Phys 158 37-56
2015 年 査読有り
DOI: 10.1007/s10955-014-1115-7

"Replica symmetry breaking in trajectories of a driven Brownian particle"
Masahiko Ueda, S.-I. Sasa
Phys. Rev. Lett 115 080605/1-080605/5
2015 年 査読有り
DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.080605

"Derivation of Stokes' s Law from Kirkwood' s formula and the Green-Kubo formula via large deviation theory"
Masato Itami, S.-I. Sasa
J. Stat. Phys 161 532-552
2015 年 査読有り
DOI: 10.1007/s10955-015-1349-z

"Collective dynamics from stochastic thermodynamics"
S.-I. Sasa
New J. Phys 17 045024/1-045024/14
2015 年 査読有り
DOI: 10.1088/issn.1367-2630

"Macroscopically measurable force induced by temperature discontinuities at solid-gas interfaces"

Masato Itami, S.-I. Sasa
Phys. Rev. E 89 .052106 /1-052106/6
2014 年 査読有り
DOI: 10.1103/PhysRevE.89.052106

"Nonequilibrium Dissipation-free Transport in F1-ATPase and the Thermodynamic Role of Asymmetric Allostereism"
Kyoto Kawaguchi, S.-I. Sasa, Takahiro Sagawa
Biophysical Journal 1065649/1-5649/8
2014 年 査読有り
DOI: 10.1016/j.bpj.2014.04.034

14 "Finite-size effects in a mean-field kinetically constrained model: dynamical glassiness and quantum criticality"
Takahiro Nemoto, Vivien Lecomte, S.-I. Sasa, Friédéric van Wijland
J. Stat. Mech P10001/1- P10001/38
2014 年 査読有り
DOI: 10.1088/1742-5468/2014/10/P10001

[学会発表](計 12 件)

「Thermodynamic entropy as a Noether Invariant」
The Berkeley Stat. Mech. Meeting
S.-I.Sasa
発表年月日(2017 年 1 月 15 日)
アメリカ(カリフォルニア大学バークレー校)
国際会議(招待講演)

「Thermodynamic entropy as a Noether Invariant」
9th Dynamics Days Asia Pacific
S.-I.Sasa
発表年月日(2016 年 12 月 15 日)
中国(香港浸会大学・香港科技大学)
国際会議(基調講演)

「Thermodynamic entropy as a Noether invariant」

STATPHYS26

S.-I.Sasa

発表日(2016年7月22日)

リヨン、フランス

国際会議

「Thermodynamic entropy as a Noether invariant」

The 7th KIAS Conference on Statistical Physics

S.-I.Sasa

発表日(2016年7月4日)

ソウル、韓国

国際会議(招待講演)

「Replica symmetry breaking in trajectories of a driven Brownian particle」

第3回統計物理に関する東アジアジョイントセミナー

S.-I. Sasa,

発表日(2015年10月16日)

ソウル、韓国

国際会議(招待講演)

「Large deviation functions and fluctuation relations in non-equilibrium systems」

統計物理に関する学校 IV

S.-I. Sasa

発表日(2015年7月6日~11日:全日)

バンガロール、インド

国際会議(招待講演)

「Non-equilibrium statistical mechanics from large deviation theor」

統計力学と大偏差レート関数の計算に関する国際会議

S.-I. Sasa

発表日(2015年6月17日)

リヨン、フランス

国際会議(招待講演)

「A fresh look at hydrodynamics」

第113回統計力学に関する国際会議

S.-I. Sasa

発表日(2015年5月11日)

ラトガース、アメリカ

国際会議(招待講演)

「Computation of Large Deviation Statistics via Iterative Measurement-and-Feedback Procedure」

Workshop:Glassy Systems and Constrained Stochastic Dynamics(招待講演)

Takahiro Nemoto, Shin-ichi Sasa

発表日(2014年6月10日)

Warwick University, England

「Computation of Large Deviation Statistics via Iterative Measurement-and-Feedback Procedure」

Workshop in YITP:Thermodynamics(招待講演)

Takahiro Nemoto, Shin-ichi Sasa

発表日(2014年9月17日)

Kyoto University

「Computation of Large Deviation Statistics via Iterative Measurement-and-Feedback Procedure」

NITheP Workshop(招待講演)

Takahiro Nemoto, Shin-ichi Sasa

発表日(2014年11月4日)

Stellenbosch University, South Africa

「Collective dynamics from non-equilibrium identities」

Kyoto Winter School(招待講演)

Shin-ichi Sasa

発表日(2015年2月10日~12日)

Kyoto University

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

取得状況(計0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

京都大学大学院理学研究科 物理学第一教室
佐々グループ

http://www.ton.scphys.kyoto-u.ac.jp/nonlinear/sasa/publication_j.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者

佐々 真一 (SASA, Shin-ichi)
京都大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号：30235238

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者

(4) 研究協力者

()