Неравновесная статистическая механика стохастически возмущенной системы осцилляторов

Андрей Дымов (МИАН & ВШЭ)

МИЭМ, 30 мая 2018 года

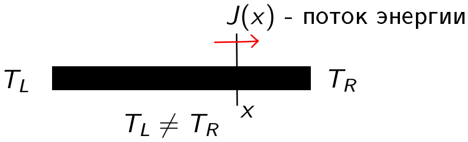
T_L  T_R

$$T_L \neq T_R$$

Наблюдаем при $t \to \infty$:

1. Сходимость к равновесному состоянию
2. Уравнение теплопроводности

Физическая мотивация



Наблюдаем при $t \to \infty$:

1. Сходимость к равновесному состоянию

2. Уравнение теплопроводности $\Leftarrow$ закон Фурье

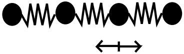
$$J(x) = -\kappa \nabla T(x),$$

где κ — коэффициент теплопроводности, а $T(x)$ — температура на сечении с координатой x.

Классическая модель

N осцилляторов,

$N \sim 10^{23}$



q_j

Пусть $q_j, p_j \in \mathbb{R}$ - координата и импульс j-ого осциллятора и

$$q = (q_1, \dots, q_N), \quad p = (p_1, \dots, p_N).$$

Динамика изолированной цепочки осцилляторов задана гамильтонианом

$$H(p,q) = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{q_j^2}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}),$$

$V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$, четна, имеет не более, чем полиномиальный рост на ∞.

Уравнения движения:

$$\begin{aligned} \dot{q}_j &= \partial_{p_j} H = p_j, \\ \dot{p}_j &= -\partial_{q_j} H = -q_j - V'(q_j - q_{j+1}) - V'(q_j - q_{j-1}). \end{aligned}$$

Классическая модель

Пусть $q_j, p_j \in \mathbb{R}$ - координата и импульс j-ого осциллятора и

$$q = (q_1, \ldots, q_N), \quad p = (p_1, \ldots, p_N).$$

Динамика изолированной цепочки осцилляторов задана гамильтонианом

$$H(p,q) = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{p_j^2}{2} + \frac{q_j^2}{2} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}),$$

$V \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$, четна, имеет не более, чем полиномиальный рост на ∞.

Уравнения движения:

$$2 \le j \le N-1: \qquad \dot{q}_j = p_j, \quad \dot{p}_j = -\partial_{q_j} H,$$

$$j = 1 \text{ or } j = N: \qquad \dot{q}_j = p_j, \quad \dot{p}_j = -\partial_{q_j} H \overbrace{-p_j + \sqrt{2T_j}\dot{\beta}_j}^{\text{термостат Ланжевена}}$$

Стохастические дифференциальные уравнения

$$1 \le j \le N: \qquad \dot q_j = p_j, \quad \dot p_j = -\partial_{q_j} H,$$

$$j = 1 \text{ or } j = N: \qquad \dot q_j = p_j, \quad \dot p_j = -\partial_{q_j} H \quad \underbrace{-p_j + \sqrt{2T_j}\dot\beta_j}_{\text{термостат Ланжевена}} \quad ,$$

где β_j - независимые броуновские движения.

Определение. Случайный процесс $\beta(t)$ называется броуновским движением, если выполнены следующие свойства:
1. $\beta(0) = 0$ почти наверное,
2. $\beta(t) - \beta(s)$ не зависит от $\beta(s)$, $\quad \forall\, t \ge s \ge 0$,
3. $\beta(t) - \beta(s) \sim \mathcal{N}(0, t-s)$, $\quad \forall\, t \ge s \ge 0$.

Решение стохастического дифференциального уравнения:

$$p_j(t) - p_j(0) = \int_0^t \big(-\partial_{q_j} H - p_j \big)\, ds + \sqrt{2T_j}\beta_j(t).$$

1. Существование и единственность стационарной меры μ? Сходимость к ней при $t \to \infty$ (перемешивание)?

- Вероятностная мера μ на $\mathbb{R}^{2N}$ стационарна, если

$$\mathcal{D}(p,q)(0) = \mu \quad \Rightarrow \quad \mathcal{D}(p,q)(t) \equiv \mu,$$

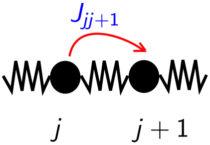
  где $\mathcal{D}(\xi)$ — распределение случайной величины ξ.
- Сходимость к стационарной мере (перемешивание):

$$\forall (p,q)(0) \quad \text{имеем} \quad \mathcal{D}(p,q)(t) \to \mu \quad \text{при} \quad t \to \infty.$$

Описанные выше свойства имеют место:

Eckmann, Pillet, Rey-Bellet, *Commun. Math. Phys.* '99

2. Уравнение теплопроводности? Закон Фурье?



Поток энергии из j-ого осциллятора в $j+1$-ый

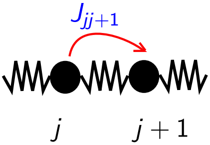
$$J_{jj+1}(p,q) = \frac{p_j + p_{j+1}}{2} V'(q_j - q_{j+1}).$$

Закон Фурье:

$$\mathbb{E}_\mu J_{jj+1} \quad \underset{T_1, T_N \to \hat{T}}{\overset{N\to\infty}{\approx}} \quad \kappa(\hat{T}) \frac{T_1 - T_N}{N},$$

где $\hat{T} = (T_1 + T_N)/2$, $\quad \kappa$ — коэффициент теплопроводности.

2. Уравнение теплопроводности? Закон Фурье?



Поток энергии из j-ого осциллятора в $j+1$-ый

$$J_{jj+1}(p,q) = \frac{p_j + p_{j+1}}{2} V'(q_j - q_{j+1}).$$

Закон Фурье:

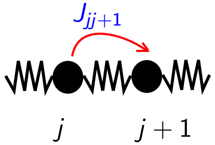
$$\mathbb{E}_\mu J_{jj+1} \quad \underset{T_1, T_N \to \hat{T}}{\overset{N\to\infty}{\approx}} \quad \kappa(\hat{T}) \frac{T_1 - T_N}{N},$$

где $\hat{T} = (T_1 + T_N)/2$, $\quad \kappa$ — коэффициент теплопроводности.

Peierls, *On the kinetic theory of thermal conduction in crystals* '29.

Закон Фурье

2. Уравнение теплопроводности? Закон Фурье?



Поток энергии из j-ого осциллятора в $j+1$-ый

$$J_{jj+1}(p,q) = \frac{p_j + p_{j+1}}{2} V'(q_j - q_{j+1}).$$

Закон Фурье:

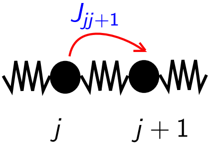
$$\mathbb{E}_\mu J_{jj+1} \underset{T_1, T_N \to \hat{T}}{\overset{N\to\infty}{\approx}} \kappa(\hat{T}) \frac{T_1 - T_N}{N},$$

где $\hat{T} = (T_1 + T_N)/2$, κ — коэффициент теплопроводности.

Peierls, *On the kinetic theory of thermal conduction in crystals* '29.

Bonetto, Lebowitz, Rey-Bellet, *Fourier's law: a challenge to theorists* '00.

2. Уравнение теплопроводности? Закон Фурье?



Поток энергии из j-ого осциллятора в $j+1$-ый

$$J_{jj+1}(p,q) = \frac{p_j + p_{j+1}}{2} V'(q_j - q_{j+1}).$$

Закон Фурье:

$$\mathbb{E}_\mu J_{jj+1} \quad \underset{T_1, T_N \to \hat{T}}{\overset{N\to\infty}{\approx}} \quad \kappa(\hat{T}) \frac{T_1 - T_N}{N},$$

где $\hat{T} = (T_1 + T_N)/2$, $\quad \kappa$ — коэффициент теплопроводности.

Peierls, *On the kinetic theory of thermal conduction in crystals* '29.

Bonetto, Lebowitz, Rey-Bellet, *Fourier's law: a challenge to theorists* '00.

Статус задачи на сегодняшний день:

Линейный случай, $V(x) = x^2$: Rieder, Lebowitz, Lieb '67 ($\kappa = \infty$)

Нелинейный случай: строгие результаты отстутвуют

Модели, обладающие дополнительными эргодическими свойствами

$\Leftarrow$

каждый осциллятор подвергнут случайному возмущению

Basile, Bernardin, Bonetto, Lebowitz, Liverani, Lukkarinen, Olla, ...

Для нелинейного случая результатов практически нет

Модели, обладающие дополнительными эргодическими свойствами

$\Leftarrow$

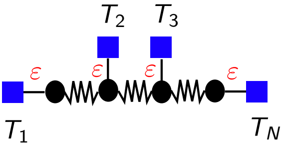
каждый осциллятор подвергнут случайному возмущению

Basile, Bernardin, Bonetto, Lebowitz, Liverani, Lukkarinen, Olla, . . .

Для нелинейного случая результатов практически нет

Постулаты:

1. Случайное возмущение $\to 0$ 2. Нелинейное взаимодействие
3. Естественный шум



$$\varepsilon \to 0, \ N \to \infty, \ T_j \to \hat{T}?$$

Модели, обладающие дополнительными эргодическими свойствами

$\Leftarrow$

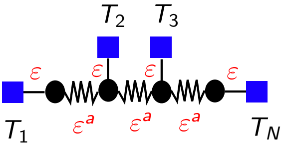
каждый осциллятор подвергнут случайному возмущению

Basile, Bernardin, Bonetto, Lebowitz, Liverani, Lukkarinen, Olla, ...

Для нелинейного случая результатов практически нет

Постулаты:

1. Случайное возмущение $\to 0$ 2. Нелинейное взаимодействие
3. Естественный шум



$$\varepsilon \to 0,\ N \to \infty,\ T_j \to \hat{T}?$$

Модели, обладающие дополнительными эргодическими свойствами

$$\Leftarrow$$

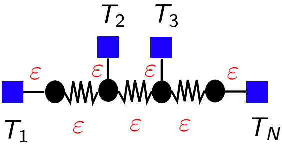
каждый осциллятор подвергнут случайному возмущению

Basile, Bernardin, Bonetto, Lebowitz, Liverani, Lukkarinen, Olla, ...

Для нелинейного случая результатов практически нет

Постулаты:

1. Случайное возмущение $\to 0$ 2. Нелинейное взаимодействие
3. Естественный шум



$$\varepsilon \to 0,\ N \to \infty,\ T_j \to \hat{T}?$$

Гамильтониан:

$$H^\varepsilon(p,q) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2}+\frac{q_j^2}{2}\right)+\varepsilon\sum_{j=1}^{N-1}V(q_j-q_{j+1}).$$

Уравнения движения (для всех $1 \le j \le N$):

$$\dot q_j = p_j, \qquad \dot p_j = -\partial_{q_j}H^\varepsilon \quad \underbrace{-\varepsilon p_j + \sqrt{2\varepsilon T_j}\dot\beta_j}_{\text{термостат Ланжевена}}$$

Гамильтониан:

$$H^\varepsilon(p,q) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2}+\frac{q_j^2}{2}\right) + \varepsilon\sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}).$$

Уравнения движения (для всех $1 \le j \le N$):

$$\dot q_j = p_j, \qquad \dot p_j = -\partial_{q_j} H^\varepsilon \underbrace{-\varepsilon p_j + \sqrt{2\varepsilon T_j}\dot\beta_j}_{\text{термостат Ланжевена}}$$

Существует единственная стационарная мера μ, перемешивание

Гамильтониан:

$$H^{\varepsilon}(p,q) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2}+\frac{q_j^2}{2}\right) + \varepsilon\sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}).$$

Уравнения движения (для всех $1 \le j \le N$):

$$\dot q_j = p_j, \qquad \dot p_j = -\partial_{q_j} H^{\varepsilon} \underbrace{-\varepsilon p_j + \sqrt{2\varepsilon T_j}\dot\beta_j}_{\text{термостат Ланжевена}}$$

Существует единственная стационарная мера μ, перемешивание

$$\mathbb{E}_{\mu} J_{jj+1} \to ? \text{ при } \varepsilon \to 0,\ N \to \infty,\ T_j \to \hat{T} = const$$

Гамильтониан:

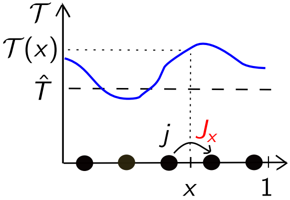
$$H^\varepsilon(p,q) = \sum_{j=1}^{N}\left(\frac{p_j^2}{2}+\frac{q_j^2}{2}\right) + \varepsilon\sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}).$$

Уравнения движения (для всех $1 \le j \le N$):

$$\dot q_j = p_j, \qquad \dot p_j = -\partial_{q_j} H^\varepsilon \underbrace{-\varepsilon p_j + \sqrt{2\varepsilon T_j}\dot\beta_j}_{\text{термостат Ланжевена}}$$

Существует единственная стационарная мера μ, перемешивание

$$\mathbb{E}_\mu J_x \to ? \text{ при } \varepsilon \to 0,\ N \to \infty,\ T_j \to \hat T = const$$



Поместим j-ый осциллятор в точку j/N. Предположим, что $T_j = \mathcal{T}(j/N)$, где $\mathcal{T} : (0,1) \mapsto \mathbb{R}_+$ гладкая функция. Пусть $J_x := J_{jj+1}$, где $j = [xN]$.

Теорема. Допустим, что $|V''(x)| \leq 1/4$ для всех $x \in \mathbb{R}$. Тогда существует функция $\kappa : \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbb{R}_+$, такая что

$$\mathbb{E}_\mu J_x \underset{\mathcal{T}\to\hat{T}}{\overset{\varepsilon\to 0,\, N\to\infty}{\approx}} \kappa(\hat{T})\frac{1}{N}\frac{d\mathcal{T}(x)}{dx}$$

Теорема. Допустим, что $|V''(x)| \leq 1/4$ для всех $x \in \mathbb{R}$. Тогда существует функция $\kappa : \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbb{R}_+$, такая что

$$\mathbb{E}_\mu J_x \overset{\varepsilon\to 0,\, N\to\infty}{\underset{\mathcal{T}\to\hat{T}}{\approx}} \kappa(\hat{T}) \frac{1}{N} \frac{d\mathcal{T}(x)}{dx}$$

Здесь сходимость $\mathcal{T} \to \hat{T}$ означает, что $\mathcal{T}(x) - \hat{T} = \lambda\widetilde{\mathcal{T}}(x)$, где $\lambda \to 0$, а $\widetilde{\mathcal{T}}$ — фиксирована.

Теорема. Допустим, что $|V''(x)| \leq 1/4$ для всех $x \in \mathbb{R}$. Тогда существует функция $\kappa : \mathbb{R}_+ \mapsto \mathbb{R}_+$, такая что

$$\mathbb{E}_\mu J_x \quad \underset{\mathcal{T}\to\hat{T}}{\overset{\varepsilon\to 0,\, N\to\infty}{\approx}} \quad \kappa(\hat{T})\frac{1}{N}\frac{d\mathcal{T}(x)}{dx}$$

Здесь сходимость $\mathcal{T} \to \hat{T}$ означает, что $\mathcal{T}(x) - \hat{T} = \lambda\widetilde{\mathcal{T}}(x)$, где $\lambda \to 0$, а $\widetilde{\mathcal{T}}$ — фиксирована.

Результат напоминает локальную версию классического закона Фурье, который имеет вид

$$\mathbb{E}_\mu J_x \quad \underset{T_1, T_N\to\hat{T}}{\overset{N\to\infty}{\approx}} \quad \kappa(\hat{T})\,\frac{T_1 - T_N}{N}.$$

Доказательство теоремы

1. $\varepsilon \to 0$. Теория стохастического усреднения Хасьминского-Вентцеля-Фрейдлина $\Rightarrow$ сходимость $\mathbb{E}_\mu J_x \to \mathbb{E}_\nu J_x$ при $\varepsilon \to 0$, где ν — единственная стационарная мера эффективного уравнения.

2. $\mathcal{T} \to \hat{T}$. Разложение $\nu = \nu^0 + \lambda\nu^1 + o(\lambda)$.
$\mathbb{E}_{\nu^0} J_x = 0$, так что остается изучить $\mathbb{E}_{\nu^1} J_x$ в пределе $N \to \infty$.

3. $N \to \infty$. Равномерные по N оценки на решение, равномерность по N перемешивания.

Эффективное уравнение

$$\dot{q}_j = \partial_{p_j} H^{res} - \frac{q_j}{2} + \sqrt{T_j}\dot{\beta}_j^1, \quad \dot{p}_j = -\partial_{q_j} H^{res} - \frac{p_j}{2} + \sqrt{T_j}\dot{\beta}_j^2,$$

где $\beta_j^{1,2}$ — независимые броуновские движения и

$$H^{res} = \Big\langle \sum_{j=1}^{N-1} V(q_j - q_{j+1}) \Big\rangle_R,$$

$\langle\cdot\rangle_R$ — резонансное усреднение.