論文の内容の要旨

論文題目　Hydrodynamic limit and equilibrium fluctuation for nongradient systems
（非勾配型の系に対する流体力学極限と平衡揺動）

氏名　　佐々田槙子

統計物理学は、原子や分子といったミクロな系の性質から、その系のマクロな性質を導出するための理論である。ここでミクロな系として考察の対象となる系は、一般に非常に多くの自由度、または構成要素を持ち、複雑な相互作用をしながら時間発展しており、大規模相互作用系と呼ばれる。統計物理学の数学的な基礎付けには、大数の法則をはじめとした確率解析に基づく大規模相互作用系の研究が大きな役割を果たしている。特に、ミクロな系の時間発展を表す確率過程を、時間と空間について適切なオーダーの比でスケール変換をし、スケーリングパラメータに極限操作を行い、大規模相互作用系の局所平衡による平均化を示すことで、マクロなパラメータが従う時間発展方程式を導出する手法は、流体力学極限と呼ばれている。平衡遥動は、このパラメータのゆらぎの時間発展を表す確率微分方程式を、スケール極限により導出する手法であり、流体力学極限が大数の法則の一種であるのに対し、その中心極限定理にあたるものである。

流体力学極限や平衡揺動が考察される確率モデルは、勾配条件と呼ばれる良い性質を満たす場合、勾配型と呼ばれる。勾配型の系に対する流体力学極限や平衡揺動の証明は、Guo らにより導入されたエントロピー法、および後に Yau により導入された相対エントロピー法により、可逆で良いエルゴード性を持つマルコフ系に対してはほぼ完成した。一方、勾配条件を満たさない非勾配型の系に対しても、Varadhan が導入した「勾配置き換え」のアイディアを用いることで研究が進んでいる。しかし、勾配型の場合に比べ、モデルに依存した議論が必要な部分が多く、いまだ発展途上である。

本博士論文では、物理的に興味深く重要だが、Varadhan の手法を適用するにはそれぞれ個別の技術的な難しさを持つ、いくつかの非勾配型の系に対する流体力学極限、平衡揺動を研究した。本博士論文で扱ったのは、非可逆な格子気体モデル、多種粒子系、ハミルトン系に確率的な摂動を加えた系である。本博士論文の構成は以下の通りである。第一章では、速度を持つ排他過程に対する流体力学極限、第二章では、古典的ハミルトン系に確率的な摂動を加えた非調和振動子鎖の系に対する平衡揺動、第三章では、多種粒子系排他過程に対する Spectral gap の評価を示した。

1　速度を持つ排他過程に対する流体力学極限

ハミルトン系で与えられるミクロな時間発展から熱拡散方程式を導出することは、非平衡統計力学における重要な未解決問題である。この問題へ数学的に厳密なアプローチをするための重要な手法が、ハミルトン系に確率的な摂動を加え流体力学極限を証明することである。しかし、このようにして定まる非可逆かつ非勾配型の系への、Varadhan の手法の適用は、技術的にまだ多くの難しさが残されている。本研究では、格子気体モデルにおいて、非可逆かつ非勾配型であり、状態空間が各粒子の位置と速度で与えられるなどハミルトン系にいくつかの点で類似した性質を持つモデルを導入し、そのモデルに対し流体力学極限を示した。

対称単純排他過程と完全非対称単純排他過程は、格子気体モデルの最も代表的で重要な例である。本研究で導入したモデルは、これらの中間物に相当しており、これら三つのモデルの極限方程式の比較も物理的に重要である。実際、本研究で扱った系の時間発展は、モデルのパラメータ γ が ∞ のとき対称単純排他過程、0 のとき完全非対称単純排他過程と同じであると考えられる。

境界条件についての問題を避けるため、トーラス上での粒子系を考える。$\mathbb{T}_N := (\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}) = \{0, 1..., N-1\}$ を 1 次元離散トーラスとする。各粒子は $+1$ または -1 の速度を持つとする。状態空間は、$\chi_N := \{1, 0, -1\}^{\mathbb{T}_N}$ で与えられる。状態空間の元を $\omega = (\omega_x)_{x \in \mathbb{T}_N} \in \chi_N$ で表す。速度を持つ排他過程 $\omega(t)$ を χ_N 上のマルコフ過程として以下の生成作用素 L_N

$$L_N f(\omega) = \sum_{x \in \mathbb{T}_N} \left[1_{\{\omega_x = 1\}} (f(\omega^{x,x+1}) - f(\omega)) + 1_{\{\omega_x = -1\}} (f(\omega^{x,x-1}) - f(\omega)) \right] + \gamma \sum_{x \in \mathbb{T}_N} (f(\omega^x) - f(\omega))$$

により定める。ただし、$\omega^{x,y}$ は状態 ω から ω_x と ω_y を入れ替えた状態、ω^x は、ω_x の符号を変えた状態とする。はじめの二つの項は、各粒子の速度方向への移動、および異なる速度の粒子間の衝突による速度の交換を表し、第三項は、外部要因による各粒子の速度の反転を表す。γ は外部要因の強さを表す正のパラメータである。この系の巨視的な粒子密度の経験分布 $\pi_t^N(du)$ は、**拡散型**の時空のスケール変換により

$$\pi_t^N(du) = \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathbb{T}_N} \eta_x(N^2 t) \delta_{\frac{x}{N}}(du) \in \mathcal{M}(\mathbb{T}), \quad \mathbb{T} := [0, 1)$$

で与えられる。ただし、$\eta_x := \omega_x^2$ は x における粒子数を表す。このとき、次が成り立つことを示した。

定理 1 (流体力学極限)**.** $\pi_0^N(du)$ はある可測関数 $\rho_0 : \mathbb{T} \to [0, 1]$ により定まる測度 $\rho_0(u)du$ に確率収束しているとする。このとき、任意の時刻 $t > 0$ に対し、$\pi_t^N(du)$ は次の非線形拡散方程式

$$\begin{cases} \partial_t \rho(t, u) = \partial_u \{ D^\gamma(\rho(t, u)) \partial_u \rho(t, u) \} \\ \rho(0, \cdot) = \rho_0(\cdot) \end{cases}$$

の一意的な弱解を密度にもつ測度 $\rho(t, u)du$ に確率収束する。ただし、拡散係数 $D^\gamma(\rho)$ はある変分公式により与えられる。特に、$D^\gamma(\rho)$ は

$$\frac{1}{2} + \frac{1-\rho}{2\gamma} \leq D^\gamma(\rho) \leq \frac{1}{2} + \frac{2-\rho}{4\gamma}$$

を満たす。すなわち、$\gamma \to \infty$ および $\gamma \to 0$ でのふるまいは、それぞれ対称単純排他過程、完全非対称単純排他過程の拡散型のスケール変換のもとでの巨視的な粒子の密度のふるまいと対応する。

2　非調和振動子鎖におけるマクロなエネルギーの拡散

第一章で述べたように、時空間に対する拡散型のスケール極限により、ハミルトン方程式で定まる微視的な系から巨視的なエネルギーの時間発展に対する熱拡散方程式を導出することは、非平衡統計力学における最も重要な問題の一つである。一次元の振動子鎖は、この問題の考察のためのシンプルなモデルとして用いられてきた。ハミルトン系で定まる振動子鎖においては、ポテンシャルの非線形性により、各振動モードの相互作用を引き起こすことが、エネルギーの拡散現象を導出するために不可欠である。しかし、一次元の振動子鎖では、ポテンシャルの非線形性だけでは、エルゴード性が十分でないことが知られている。本研究では、系に十分なエルゴード性を与えるため、ハミルトン系に確率的な摂動を加えることで、一次元の振動子鎖におけるエネルギーの拡散現象に対する数学的に厳密なアプローチを行い、平衡揺動定理を示した。本章の内容は、Stefano Olla 氏との共同研究である。

はじめに、ハミルトン系で定まる一次元非調和振動子鎖を導入する。周期的な境界条件をもつ、質量 1 の N 個の非調和振動子鎖を考える。各粒子を $j=1,...N$ で表し、$N+1$ と 1 を同一視する。$q_j, j=1,...,N$ を各粒子の位置、p_j を運動量（＝速度）とする。連続する二粒子の位置の差を表す変数 $r_j=q_j-q_{j-1}$ を導入し、系の状態を、$(p_j,r_j)_{j=1,\cdots,N}\in\mathbb{R}^{2N}$ で表す。各連続する二つの粒子の組 $(j-1,j)$ は、非調和なばねでつながれており、そのポテンシャルは $V(r_j)$ であるとする。ハミルトニアン $H=\sum_{j=1}^N \mathcal{E}_j$, $\mathcal{E}_j=\frac{1}{2}p_j^2+V(r_j)$, $j=1,\dots,N$ で与えられるハミルトン方程式:

$$r_j'(t)=p_j(t)-p_{j-1}(t),\quad p_j'(t)=V'(r_{j+1}(t))-V'(r_j(t)),\qquad j=1,\cdots,N$$

を考える。この系の巨視的なエネルギーの経験分布は、拡散型の時空間スケール変換により

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \mathcal{E}_i(N^2t)\delta_{i/N}(dy)$$

で与えられる。この $N\to\infty$ の極限として得られる長さ 1 のトーラス $\mathbb{T}$ 上の分布が考察の対象である。

本研究では、ハミルトン系にある確率的な摂動を加えた、エネルギーをただ一つの保存量とする非調和振動子鎖を考える。この系は、温度の逆数 β で特徴付けられる確率測度 ν_β^N を平衡測度として持つ。$\beta(e)$ を $\nu_{\beta(e)}^N$ のもとでの $\mathcal{E}_1$ の期待値が e となるものと定める。系が $\beta(e)$ で特徴付けられる平衡状態にあるとき、巨視的なエネルギー分布のゆらぎが、拡散型の時間発展をすることを示した。すなわち、時間に依存したゆらぎの分布

$$Y_t^N=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^N \delta_{i/N}\left\{\mathcal{E}_i(N^2t)-e\right\}$$

は、次の線形確率偏微分方程式

$$\partial_t Y=D(\beta(e))\partial_y^2 Y\,dt+\sqrt{2D(\beta(e))\chi(\beta(e))}\partial_y B(y,t)$$

の一意な解に収束することを示した。ここで B は時空のホワイトノイズ、$D(\beta)$ は変分公式で与えられる拡散係数、$\chi(\beta)$ は β で特徴付けられる平衡状態のもとでの $\mathcal{E}_1$ の分散である。

3　多種粒子系排他過程に対する Spectral gap

非勾配型の系に対する流体力学極限の証明では、緩和時間（Spcetral gap の逆数）の上からの評価が重要な役割を果たす。多種粒子系とは、異なる物理的性質、すなわち時間発展規則を持ついくつかの種

類の粒子により構成される系である。多種粒子系排他過程の Spectral gap は、空サイトの密度に依存しており、一種粒子系の場合とは質的に異なっている。本研究では、空間的に非一様な多種粒子系排他過程の Spectral gap の詳細な評価を与えた。本章の内容は、永幡幸生氏との共同研究である。

r を 2 以上の整数とし、r 種の粒子からなる格子気体モデルを考える。各自然数 $n \geq 1$ に対し、格子空間として d 次元立方体 $\Lambda_n := \{-n, -n+1, ..., n-1, n\}^d$ を考える。各粒子間には排他的な相互作用があるとする。このとき、系の状態空間は，$\Sigma_n := \{0, 1, 2, \ldots, r\}^{\Lambda_n}$ となる。$\{q_x\}_{x\in\mathbf{Z}^d}$ を、各サイト x における粒子の存在確率とし、これらはある $\epsilon \in (0, \frac{1}{2}]$ に対し、$\epsilon \leq q_x \leq 1-\epsilon$ を満たすとする。空間的に非一様な多種粒子系排他過程の時間発展を以下の生成作用素 L_n

$$L_n f(\eta) := \sum_{x,y\in\Lambda_n} p_{\eta_x}(x,y) g(\eta_x)(1-q_x) q_y 1_{\{\eta_y=0\}}(f(\eta^{x,y}) - f(\eta))$$

で与える。ここで、$g(i)$ は i 種の粒子の動きやすさを表す正の定数、$p_i(\cdot,\cdot)$ は、i 種の粒子の $\mathbf{Z}^d$ 上の遷移確率である。すべての i に対し、p_i は局所的かつ平行移動不変、$\mathbb{Z}^d$ 上で既約、対称であるとし、$g(0) = 0$、$p_0(x,y) \equiv 0$、$\eta^{x,y}$ は η の状態から η_x と η_y を入れ替えた状態とする。特に、q_x が x によらない時、空間的に一様な多種粒子系排他過程と呼ぶ。

この時間発展のもとで、各種の粒子数はそれぞれ保存される。そこで、$\sum_{i=0}^r k_i = |\Lambda_n|$ を満たす非負整数値のベクトル $k = (k_0, k_1, \ldots, k_r)$ に対し、$\Sigma_{n,k}$ を i 種の粒子が k_i 個と空サイトが k_0 サイトある状態全体とする: $\Sigma_{n,k} := \{\eta \in \Sigma_n; \sum_{x\in\Lambda_n} 1_{\{\eta_x=i\}} = k_i,\ 0 \leq i \leq r\}$。

多種粒子系の排他過程の解析の難しさは、$\{p_i\}_{i=1}^r$ の選び方により、 以下で定義する局所エルゴード性が成り立たない場合があることである。本博士論文では、そのような局所エルゴード性が成り立たない $\{p_i\}_{i=1}^r$ の例を 2 つ与えた。特に、例 2 では $p_1 = p_2 = \cdots = p_r$ の場合の例を与えている。また、本博士論文では、局所エルゴード性が成り立つための十分条件も与えた。

仮定 1 (局所エルゴード性)**.** ある n_0 があって、任意の $n \geq n_0$ と、非負整数値ベクトル $k = (k_0, k_1, \ldots, k_r)$ で $\sum_{i=0}^r k_i = |\Lambda_n|$ かつ $k_0 \geq 1$ を満たすものに対し、$\Sigma_{n,k}$ は L_n の既約成分である。

$L_{n,k}$ を L_n の $\Sigma_{n,k}$ 上への制限とする。$-L_{n,k}$ の Spectral gap $\lambda(n,k)$ を、$-L_{n,k}$ の 0 でない最小の固有値とする。仮定 1 の条件のもとで、空間的に一様な多種粒子系排他過程の Spectral gap は $O(\rho_0/n^2)$ であることを示した。ただし、$\rho_0 := \frac{k_0}{|\Lambda_n|}$ は空サイトの密度である。

空間的に非一様な場合、Spcetral gap のオーダーを評価するためには、空間の非一様性を定める $\{q_x\}_{x\in\mathbf{Z}^d}$ についてなんらかの仮定が必要である。そこで、次のような仮定をおく。

仮定 2. 次のどちらかが成り立っているとする*:*
(i) ある q^0 と $T \in \mathbf{N}$ が存在し、任意の $x \in \mathbf{Z}^d$ に対し、 $\{y \in 2Tx + \Lambda_T : q_y = q^0\} \neq \phi$ である。
(ii)$\{q_x : x \in \mathbf{Z}^d\}$ は有限集合である。

仮定 1 と 2 の条件のもとで、空間的に非一様な多種粒子系排他過程の Spectral gap は、ある正定数 C により、$\lambda(n,k) \geq C\rho_0/n^2$ となることを示した。