

格子気体モデルの流体力学極限 における拡散係数

東北大学大学院 理学研究科 数学専攻
佐々木 拓郎

概要

ランダムに運動する微視的粒子系のモデルの一つである格子気体に対して、そのスケールリングした極限で決定論的な拡散方程式が導かれることが知られている。本修士論文では極限で現れる拡散方程式を特徴付ける量である拡散係数をモデルに勾配条件とよばれる強い条件を課すことで具体的に決定した。その結果、勾配条件を満たす格子気体からは導かれない拡散係数が存在することがわかった。

はじめに

インクなどを水中に垂らすと徐々に広がっていき、最後には全体が均一な状態になる。このような現象を拡散現象と呼ぶ。我々の日常の感覚では、全体のインクの濃度が一定な状態へ徐々に近づいていくように見える。このような捉え方は、拡散方程式と呼ばれる濃度についての偏微分方程式によってうまく説明できることがわかっており、同一の条件の下では結果は常に同じである。一方で物質はすべて原子・分子からできているので、水やインクの分子の複雑な運動の集まりとして拡散現象を説明する観点が考えられる。目に見える現象として観測されるほどの系を構成する粒子の数は莫大であり、さらに巨視的には同じ条件であっても微視的粒子系のとりうる状態（全ての粒子の位置・運動量）は無数にある。したがって巨視的には同じように見える現象でも微視的には全て違った運動である。このような系を決定論的に扱うには重大な困難があるため、ここでは微視的粒子系に確率論を導入して考える。微視的には違う系であっても巨視的な振る舞いは同じに見えるということ、スケール変換を用いたある種の極限定理を示すことにより説明しようとするのである。微視的粒子系から巨視的な系へのスケール変換により決定論的な方程式を導く極限操作を流体力学極限とよぶ。このような極限の例としては独立なランダムウォーク（微視的粒子系）のスケールリングした極限として独立な Brown 運動が得られ、その分布が熱方程式（決定論的な方程式）に従うというものがある。この例では各粒子は独立、すなわち粒子間に相互作用はないものとしているが、現実の粒子には衝突などによる相互作用が働くので、粒子間に相互作用のあるモデルを考えたい。本修士論文で扱う格子気体とは粒子間に相互作用を入れた微視的粒子系の一つのモデルである。格子気体モデルについては [2] などにより流体力学極限の成立することが示されており、密度に依存する拡散係数をもつ非線形拡散方程式が得られる。また流体力学極限で現れる拡散方程式を特徴付ける拡散係数の表示も得られているが、その表示は変分公式によるものであり具体的な計算は困難である。本修士論文では拡散係数を具体的に計算できるための条件として知られている勾配条件を満たす格子気体について考察し、どのような拡散係数を導くことが可能かを調べた。勾配条件は連続なモデルの場合のポテンシャルの存在に相当するものであるが、格子気体の場合には非常に特殊な条件である。主結果においては勾配条件を満たす格子気体の族を構成し、それらから導かれる拡散係数の範囲を決定する。その範囲は巨視的方程式として可能な拡散係数の範囲に真に含まれることがわかる。また、ここで構成したもので勾配条件を満たすものをすべて尽くしているということは証明できなかったが、構成法からこれで全てだと予想される。この予想が正しいとすれば、巨視的には起こりうる拡散でも勾配条件を満たす格子気体からは起こり得ないものがあるということになる。

以下に本修士論文の構成を述べる。第 1 章では本修士論文を読む上で必要となる確率論の諸概念を定義する。第 2 章では第 1 章の概念を用いて格子気体モデルの定義を行い、流体力学極限の成立することを述べる。第 3 章で勾配条件を満たす格子気体に対しては拡散係数が具体的に計算できることを述べ、主結果を紹介する。第 4 章で主結果の証明を行う。

謝辞

本修士論文を書くにあたって指導教官の服部 哲弥先生には多大な御指導を頂いた上，他大学の先生の招聘や出張の援助などで全面的なサポートをして頂きました．また大阪大学の永幡 幸生先生からはテーマを頂戴したほか，研究についてのアドバイスを多々頂きました．厚くお礼申し上げます．そして確率論セミナーを通して竹田 雅好先生，針谷 祐先生，先輩である塩沢 裕一さん、土田 兼治さん、田原 喜宏さんからも有益な御指摘を頂きました．この場をお借りして深く感謝いたします．同期の沼澤 洋平君には頼りっぱなしでした．どうもありがとうございました．

目次

第 1 章 準備	5
1.1 確率過程	5
1.2 マルチンゲール	5
1.3 Markov 過程	6
1.3.1 有限状態空間上の離散時刻 Markov 連鎖	6
1.3.2 指数分布	7
1.3.3 有限状態空間上の連続時間 Markov 過程	7
1.3.4 平衡測度, 可逆測度	9
1.3.5 Markov 過程に付随するマルチンゲール	9
1.4 確率過程の法則の緊密性	10
1.4.1	10
1.4.2	11
1.4.3	11
1.4.4	12
1.5 拡散方程式	12
1.5.1 拡散方程式の導出	12
1.5.2 性質	13
第 2 章 格子気体モデル	15
2.1 格子気体モデルの定義	15
2.2 定理 2.2 の証明の概略	19
2.2.1 準備	19
2.2.2 緊密性	20
2.2.3 定理 2.2 の証明	21
第 3 章 主結果	25
第 4 章 主定理の証明	32
4.1 主定理 1 の証明	32
4.2 主定理 2 の証明	34
4.3 予想	35

第1章 準備

この章では後の章を読むために必要となる確率論の基礎的事項について述べる．この章を通じて， $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ を確率空間とする．

1.1 確率過程

可測空間 (S, \mathcal{M}) に値をとる $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ 上の可測関数 X を S -値確率変数という．特に， $S = \mathbf{R}$ であるとき， X の \mathbf{P} による積分を $\mathbf{E}[X] = \int_{\Omega} X d\mathbf{P}$ とかき， X の \mathbf{P} による平均という．また $A \in \mathcal{F}$ に対して $\mathbf{E}[X; A] = \int_A X d\mathbf{P}$ とする．

S -値確率変数 X に対して，

$$\mathcal{L}_X(A) = \mathbf{P}[X \in A] \quad A \in \mathcal{M}$$

とすると， \mathcal{L}_X は (S, \mathcal{M}) 上の確率測度になることがわかる． \mathcal{L}_X は X の分布または法則とよばれる． \mathbf{R} の部分集合 Γ でパラメーター付けられた $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ 上の確率変数の族 $(X_t)_{t \in \Gamma}$ を確率過程とよぶ．

$\Gamma = \mathbf{N}$ または \mathbf{N} の部分集合である場合には確率連鎖ということもある．確率過程 $(X_t)_{t \in \Gamma}$ に対して， $\omega \in \Omega$ を止めるごとに得られる t の関数

$$\Gamma \ni t \mapsto X_t(\omega) \in S$$

を $(X_t)_{t \in \Gamma}$ の道という．道の空間 S^Γ の座標関数

$$p_t : S^\Gamma \ni x. \mapsto x_t \in S \quad (t \in \Gamma)$$

を可測にする最小の σ -加法族を $\sigma\{p_t : t \in \Gamma\}$ とすると確率過程 $(X_t)_{t \in \Gamma}$ は $(S^\Gamma, \sigma\{p_t : t \in \Gamma\})$ -値確率変数 $X.$ とみなせる： $X.(\omega) : t \mapsto X_t(\omega)$ ．

道が確率 1 で右連続のとき， $(X_t)_{t \geq 0}$ は右連続であるなどという．確率過程の重要なクラスとして以下に述べるマルチンゲールと Markov 過程がある．

1.2 マルチンゲール

定義 1.1. 確率変数 X は平均をもつ ($\mathbf{E}(|X|) < \infty$) とする． $\mathcal{G} \subset \mathcal{F}$: 部分 σ -加法族に対して， X の条件付き平均 $\mathbf{E}[X|\mathcal{G}]$ とは以下を満たす確率変数 Y のことである．

- (i) Y は \mathcal{G} -可測，
- (ii) $\mathbf{E}(|Y|) < \infty$ ，
- (iii) $\mathbf{E}[Y : G] = \mathbf{E}[X : G] \quad (\forall G \in \mathcal{G})$ ．

このような Y は \mathbf{P} -a.s. でしか決まらない。すなわち、 Y, Y' が共に条件を満たすならば $\mathbf{P}[Y = Y'] = 1$ である。条件付平均の存在は Radon-Nikodym の定理による。

定義 1.2. (i) \mathcal{F} の増大する部分 σ -加法族の族 $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ をフィルトレーションという：

$$\mathcal{F}_s \subset \mathcal{F}_t \subset \mathcal{F} \quad (s \leq t).$$

(ii) 確率過程 $(X_t)_{t \geq 0}$ は任意の t に対して X_t が \mathcal{F}_t -可測であるとき、 (\mathcal{F}_t) -適合であるという。

定義 1.3. $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t), \mathbf{P})$ 上の確率過程 $(M_t)_{t \geq 0}$ がマルチンゲールであるとは、次の条件を満たすことである。

- (i) $M_0 = 0$,
- (ii) $(M_t)_{t \geq 0}$ は (\mathcal{F}_t) -適合,
- (iii) $\mathbf{E}[|M_t|] < \infty \quad (\forall t)$,
- (iv) $\mathbf{E}[M_t | \mathcal{F}_s] = M_s \quad (0 \leq s \leq t)$.

定理 1.4. (Doob の不等式) 右連続マルチンゲール $(M_t)_{t \geq 0}$ に対して、

$$\mathbf{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} |M_t|^p \right] \leq \left(\frac{p}{p-1} \right)^p \mathbf{E}[|M_T|^p] \quad (p > 1).$$

定義 1.5. (M_t) が連続かつ二乗可積分なマルチンゲールであるとき、非減少過程 (A_t) で、

$$\begin{cases} A_0 = 0, \\ M_t^2 - A_t \text{ はマルチンゲール,} \end{cases}$$

を満たすものが一意的存在する。この (A_t) を (M_t) の二次変分とよび、 $\langle M \rangle_t$ とかく。

定義より、 $\mathbf{E}[M_t^2] = \mathbf{E}[\langle M \rangle_t]$ である。

1.3 Markov 過程

1.3.1 有限状態空間上の離散時刻 Markov 連鎖

以後、本章を通じて S を空でない有限集合とし、 S に値をとる確率過程を考える。 S を状態空間、 S の元を状態と呼ぶ。

定義 1.6. S 上の行列 $P = (p_{x,y})_{x,y \in S} = (p(x,y), x,y \in S)$ は

- (i) $p(x, y) \geq 0 \ (\forall x, y \in S),$
- (ii) $\sum_{y \in S} p(x, y) = 1 \ (\forall x \in S),$

を満たすとき確率行列であるという。

定義 1.7. 確率行列 $P = (p(x, y))$ と S 上の確率分布 $\mu_0 = (\mu_0(x))_{x \in S}$ が与えられているとする。確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ 上で定義された確率連鎖 $(X_n)_{n \geq 0}$ は

- (i) $\mathbf{P}[X_0 = x_0] = \mu_0(x_0),$
- (ii) $\mathbf{P}[X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_{m+1} = x_{m+1}] = \mu_0(x_0)p(x_0, x_1)p(x_1, x_2) \cdots p(x_m, x_{m+1}),$

をみたすとき推移確率 P , 初期分布 μ_0 の Markov 連鎖であるという。

$p(x, y)$ は状態 x から次の時刻に状態 y に遷移する確率である。

1.3.2 指数分布

定義 1.8. 確率変数 $T : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ はその分布が

$$\mathbf{P}(T > t) = e^{-\lambda t} \ (\forall t \geq 0) \tag{1.1}$$

を満たすときパラメーター $\lambda \geq 0$ の指数分布に従うという。

T がパラメーター $\lambda > 0$ の指数分布に従うとき $\mathbf{E}[T] = \lambda^{-1}$ であり, $\frac{T}{\alpha}$ はパラメーター $\alpha\lambda$ の指数分布に従う。

補題 1.9. ([5], Theorem 2.3.3.)

$q_x (x \in S)$ が $q := \sum_{x \in S} q_x \in (0, \infty)$ を満たし, $T_x (x \in S)$ は独立な確率変数でパラメーター q_x の指数分布に従うものとする。 $T = \inf_x T_x$ とおくと, T はパラメーター q の指数分布に従う。さらに $T_K = T$ となる T と独立な確率変数 K が a.s. で一意的に存在し, $\mathbf{P}(K = x) = \frac{q_x}{q}$ を満たす。

1.3.3 有限状態空間上の連続時間 Markov 過程

この節では右連続な道をもつ連続時間 Markov 過程を構成する。まず生成作用素とその性質について述べる。連続時間 Markov 過程は生成作用素から構成できる。

定義 1.10. $Q = (q_{xy})_{x, y \in S} = (q(x, y), x, y \in S)$ は

- (i) $0 \leq -q(x, x) < \infty \ (\forall x \in S),$
- (ii) $q(x, y) \geq 0 \ (\forall x \neq y),$
- (iii) $\sum_{y \in S} q(x, y) = 0 \ (\forall x \in S),$

を満たすとき，生成作用素であるという． $q(x) = -q(x, x)$ とする．

有限次元ベクトルと S 上の関数を同一視すれば，生成作用素を決めることは $C(S) = S$ 上の（連続）関数全体上の作用素を定めることと同じである．

定理 1.11. 一般の行列 Q に対して $P(t) = e^{tQ}$ （行列の指数関数）とすると，次が成り立つ．

(i) $P(s+t) = P(s)P(t)$.

(ii) $P(t)$ は

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}P(t) &= P(t)Q, \\ P(0) &= I, \end{cases}$$

の一意解である

(iii) $P(t)$ は

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}P(t) &= QP(t), \\ P(0) &= I, \end{cases}$$

の一意解である

(iv) $(\frac{d}{dt})^k P(t)|_{t=0} = Q^k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) .

特に Q が生成作用素である場合には次が成り立つ．

定理 1.12. ([5], Theorem 2.1.2.)

$P(t) = e^{tQ}$ とするとき， Q が生成作用素であることと $P(t)$ が任意の t に対して確率行列であることは同値である．

右連続な道をもつ S -値過程 (X_t) は以下の jump times (J_n) と holding times (S_n) で決まる：

$$\begin{aligned} J_0 &= 0, \\ J_{n+1} &= \inf\{t \geq J_n \mid X_t \neq X_{J_n}\} \text{ (for } n > 0), \\ &\text{(ただし, } \inf \emptyset = \infty \text{ とする)} \\ S_n &= J_n - J_{n-1}. \end{aligned}$$

$Y_n = X_{J_n}$ を jump chain とよぶ．

定義 1.13. ([5], 2.6) Q を生成作用素， μ_0 を S 上の分布とする．確率過程 $(X_t)_{t \geq 0}$ は

- (i) jump chain (Y_n) が初期分布 μ_0 ，推移確率 Π の離散時間 Markov 過程，
- (ii) holding times (S_n) について，各 S_n は独立でパラメーター $q(Y_{n-1})$ の指数分布に従う，

を満たすとき, Q によって生成される初期分布 μ_0 の Markov 過程であるという. ここで Π は以下のようにして Q から定まる確率行列である:

$$\pi(x, y) = \begin{cases} \frac{q(x, y)}{q(x)} & (\text{if } y \neq x \text{ and } q(x) \neq 0) \\ 0 & (\text{if } y \neq x \text{ and } q(x) = 0), \end{cases}$$

$$\pi(x, x) = \begin{cases} 0 & (\text{if } q(x) \neq 0) \\ 1 & (\text{if } q(x) = 0). \end{cases}$$

生成作用素 Q と S 上の分布 μ_0 が与えられたとき, Markov 過程 $(X_t)_{t \geq 0}$ は次のようにして構成できる. Y_0 を初期分布 μ_0 に従うものとする. $(T_n^y : n \geq 1, y \in S)$ をパラメーター 1 の指数分布に従う独立な確率変数とする. $Y_n = x$ として $(n = 0, 1, 2, \dots)$,

$$S_{n+1}^y = \frac{T_{n+1}^y}{q(x, y)} \text{ for } j \neq i,$$

$$S_{n+1} = \inf_{y \neq x} S_{n+1}^y,$$

$$Y_{n+1} = \begin{cases} y & \text{if } S_{n+1}^y = S_{n+1} < \infty \\ x & \text{if } S_{n+1} = \infty, \end{cases}$$

で Y_n と S_n を定めれば求めるものになっている. 状態 x から状態 y への待ち時間 S_{n+1}^y はパラメーター $q(x, y)$ の指数分布に従う. すなわち, 状態 x から状態 y へは単位時間あたり平均 $q(x, y)$ 回遷移する.

1.3.4 平衡測度, 可逆測度

定義 1.14. (i) S 上の確率測度 μ は, 任意の $t > 0$ に対して $\mu P(t) = \mu$ を満たすとき $P(t)$ を推移確率とする平衡測度であるという.

(ii) μ は次の詳細釣り合い条件

$$\mu(x)q(x, y) = \mu(y)q(y, x) \text{ for } x, y \in S$$

を満たすとき可逆化測度であるという.

命題 1.15. ([5], Lemma 3.7.2.)

可逆化測度は平衡測度である.

1.3.5 Markov 過程に付随するマルチンゲール

定理 1.16. ([3], 定理 A.19)

(X_t) を Q の生成する有限状態 Markov 過程とする. $[0, \infty) \times S$ 上の関数 $f(t, x)$ は $\frac{\partial}{\partial t} f(t, x)$ が存在

して連続であるとする．このとき，

$$\begin{aligned}\Theta_f(t, x) &= \sum_{y \in S} Q_{x,y} [f(t, y) - f(t, x)]^2, \\ M_t &= f(t, X_t) - f(0, X_0) - \int_0^t (\partial_s + Q)f(s, X_s) ds, \\ N_t &= M_t^2 - \int_0^t \Theta_f(s, X_s) ds,\end{aligned}$$

とすると、 M_t, N_t は共にマルチンゲールである．すなわち，

$$\langle M \rangle_t = \int_0^t \Theta_f(s, X_s) ds.$$

1.4 確率過程の法則の緊密性

この節では次の章で測度値確率変数列の収束を論じる際に必要となる事項を用意する．

1.4.1

(X, d_X) を距離空間とし， $\mathcal{B}(X)$ を X の Borel σ -加法族とする． $(X, \mathcal{B}(X))$ 上の有限測度全体を $\mathcal{M}(X)$ ， $(X, \mathcal{B}(X))$ 上の全測度が 1 以下の測度全体を $\mathcal{M}_1(X)$ ， $(X, \mathcal{B}(X))$ 上の確率測度全体を $\mathcal{P}(X)$ とする． $\mathcal{P}(X) \subset \mathcal{M}_1(X) \subset \mathcal{M}(X)$ である． X 上の有界連続関数全体を $C_b(X)$ で表し， $\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$ をノルムとする Banach 空間とみなす． $\mathcal{M}(X)$ に $C_b(X)$ の共役空間としての汎弱位相を入れる．すなわち，

$$\xi_n \rightarrow \xi \in \mathcal{M}(X) \Leftrightarrow \langle \xi_n, J \rangle \rightarrow \langle \xi, J \rangle \text{ for all } J \in C_b(X)$$

で $\mathcal{M}(X)$ における収束を定める．ここに，

$$\langle \xi, J \rangle = \int_X J d\xi \text{ for } J \in C_b(X), \xi \in \mathcal{M}(X)$$

である．

定義 1.17. $M \subset \mathcal{P}(X)$ は任意の $\varepsilon > 0$ に対してコンパクト集合 $K \subset X$ がとれて $\inf_{\xi \in M} \xi(K) > 1 - \varepsilon$ とできるとき緊密であるという．

次が成立する．

命題 1.18. M が緊密 $\Rightarrow M$ は相対コンパクト

1.4.2

(X, d_X) を距離空間とし, $[0, T]$ 上の X -値連続関数全体を $C = C([0, T], X)$ で表す. $\mathcal{B}_C = \sigma\{p_t : 0 \leq t \leq T\}$ により (C, \mathcal{B}_C) を可測空間とみる. C 上の距離 d_C を

$$d_C(a, b) = \sup_{0 \leq t \leq T} d_X(a_t, b_t)$$

で定める. この距離に関して C が可分ならば \mathcal{B}_C は C の Borel 集合族と一致する. このとき,

定理 1.19. ([3], 定理 A.22)

C 上の Borel 確率測度の列 $\{Q^N\}_{N=1}^\infty$ が緊密であることは, 次の二つの条件が成立することと同値である.

(i) 任意の $\varepsilon > 0$ に対してコンパクト集合 $A_\varepsilon \subset X$ が存在して

$$\inf_N Q^N(\{a \in C \mid a([0, T]) \subset A_\varepsilon\}) > 1 - \varepsilon,$$

(ii) 任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\limsup_{\delta \downarrow 0} \limsup_N Q^N \left(\left\{ a \in C \mid \sup_{|t-s| \leq \delta} d_X(a_t, a_s) > \varepsilon \right\} \right) = 0.$$

$(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ 上に X -値連続確率過程 $(Y_t)_{0 \leq t \leq T}$, すなわち $a.a. - \omega \in \Omega$ に対して $Y : t \mapsto Y_t(\omega)$ が連続であるもの, が与えられているとする. Y を C -値確率変数とみなすと, その分布 Q は (C, \mathcal{B}_C) 上の確率である.

1.4.3

以下では X をコンパクト距離空間とする. このときは $\mathcal{M}(X)$ の位相を距離

$$d_{\mathcal{M}}(\xi, \xi') = \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-k} \frac{|\langle \xi, J_k \rangle - \langle \xi', J_k \rangle|}{1 + |\langle \xi, J_k \rangle - \langle \xi', J_k \rangle|}$$

により与えることができる. ここで $\{J_k\}$ は, その線形結合全体が $C_b(X) = C(X)$ で稠密で $\|J_k\|_\infty \leq 1$ であるものである. $\mathcal{M}_1(X)$ 上では $d_{\mathcal{M}}$ と

$$d_{\mathcal{M}_1}(\xi, \xi') = \sum_{k=0}^{\infty} 2^{-k} |\langle \xi, J_k \rangle - \langle \xi', J_k \rangle|$$

は同値な距離である. また, Riesz の表現定理により $\mathcal{M}_1(X)$ もコンパクトであることがわかる. 前節の X を $\mathcal{M}_1(X)$ に置き換えて考える. $C = C([0, T], \mathcal{M}_1(X))$ には距離

$$d_C(\xi, \xi') = \sup_{0 \leq t \leq T} d_{\mathcal{M}_1}(\xi_t, \xi'_t)$$

を入れる.

定理 1.20. ([3], 定理 A.23)

$\mathcal{M}_1(X)$ -値確率過程の列 $(\xi_t^N)_{0 \leq t \leq T}$ が与えられているとし, その法則を Q^N とする. このとき $\{Q^N\}$ が緊密であるための必要十分条件は, 任意の $J \in C(X)$ と任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\lim_{\delta \downarrow 0} \limsup_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left[\sup_{|t-s| \leq \delta} |\langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_s^N, J \rangle| > \varepsilon \right] = 0$$

が成り立つことである.

1.4.4

$D = D([0, T], \mathcal{M}_1(X))$ を $\mathcal{M}_1(X)$ -値関数で右連続, 左極限が存在するものとする. $\mathcal{B}_D = \sigma\{p_t : 0 \leq t \leq T\}$ により D を可測空間とみなす. $\mathcal{M}_1(X)$ -値確率過程の列 $(\xi_t^N)_{0 \leq t \leq T}$ の道は確率 1 で D に属するとする. このときの ξ_t^N の分布を Q^N とする. C を D 上の有界関数で, \mathcal{B}_D -可測かつ (C, d_C) 上で連続なものの全体とする.

定理 1.21. ([3], 定理 A.24)

任意の $J \in C(X)$ と任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\lim_{\delta \downarrow 0} \limsup_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left[\sup_{|t-s| \leq \delta} |\langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_s^N, J \rangle| > \varepsilon \right] = 0$$

が成り立つならば $\{Q^N\}$ は次の意味で相対コンパクトである: $\{Q^N\}$ の部分列 $\{Q^{N'}\}$ と, C 上の確率測度 Q が存在して, 任意の $F \in C$ に対して

$$\int_D F dQ^{N'} \rightarrow \int_C F dQ.$$

1.5 拡散方程式

1.5.1 拡散方程式の導出

簡単のため 1 次元で考える. 一様な空間に物質が散らばっているとする. 時刻 t , 位置 θ での密度を $\rho(t, \theta)$ とする. Fick の法則「物質は密度の高い方から低い方へ密度勾配に比例して移動する」より, 単位時間あたりに流れる物質の量 (フラックス) J は,

$$J = -D(\rho(t, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(t, \theta)$$

と表される ($D(\rho) > 0$). 微小区間 $[\theta, \theta + \Delta\theta]$ における密度は一定であるとみなせるとすると, 物質の量の時間的増加率は $\frac{\partial}{\partial t} [\rho(t, \theta) \Delta\theta]$ である. これが単位時間あたりに微小区間 $[\theta, \theta + \Delta\theta]$ に流れ込む物質の量に等しいとくと,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho(t, \theta) \Delta\theta] &= J|_{\theta=\theta} - J|_{\theta=\theta+\Delta\theta} \\ &= D(\rho(t, \theta + \Delta\theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(t, \theta + \Delta\theta) - D(\rho(t, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(t, \theta) \end{aligned}$$

が成り立つ．両辺を $\Delta\theta$ で割って

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \theta) = \frac{D(\rho(t, \theta + \Delta\theta))\frac{\partial}{\partial\theta}\rho(t, \theta + \Delta\theta) - D(\rho(t, \theta))\frac{\partial}{\partial\theta}\rho(t, \theta)}{\Delta\theta}$$

を得る．この式で $\Delta\theta \downarrow 0$ として，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \theta) = \frac{\partial}{\partial\theta}(D(\rho(t, \theta))\frac{\partial}{\partial\theta}\rho(t, \theta))$$

を得る．

1.5.2 性質

定理 1.22. (保存則)

初期値問題

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \theta) = \frac{\partial}{\partial\theta}(D(\rho(t, \theta))\frac{\partial}{\partial\theta}\rho(t, \theta)), \\ \rho(0, \theta) = \rho_0(\theta), \\ \rho(t, 0) = \rho(t, 1), \end{cases} \quad t \in [0, T], \theta \in [0, 1]$$

の解 $\rho(t, \theta)$ に対して，保存則

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^1 \rho(t, \theta) d\theta = 0$$

が成り立つ．

定理 1.23. (解の一意性) ([3], 4.3.3)

初期値問題

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \theta) = \frac{\partial}{\partial\theta}(D(\rho(t, \theta))\frac{\partial}{\partial\theta}\rho(t, \theta)), \\ \rho(0, \theta) = \rho_0(\theta), \\ \rho(t, 0) = \rho(t, 1), \end{cases} \quad t \in [0, T], \theta \in [0, 1]$$

の弱解は一意的である．

証明. $P(\rho) = \int_0^\rho D(u) du$ とすると，方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t, \theta) = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} P(\rho(t, \theta))$$

と表される． ρ_1, ρ_2 を同じ初期値問題の二つの古典解とする．

$$w_i(t, \theta) = \int_0^\theta \rho_i(t, \theta') d\theta' - \int_0^1 d\theta' \int_0^{\theta'} \rho_i(t, \theta'') d\theta'' \quad (i = 1, 2)$$

とおき， $w_1 = w_2$ を示せばよい．境界条件から

$$\frac{\partial}{\partial t} w_i(t, \theta) = \frac{\partial}{\partial\theta} P(\rho_i(t, \theta))$$

がわかる．また保存則から

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \|w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)\|_{L^2}^2 &= 2 \int_0^1 (w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)) \frac{\partial}{\partial t} (w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)) d\theta \\ &= 2 \int_0^1 (w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} (P(\rho_1(t, \theta)) - P(\rho_2(t, \theta))) d\theta \\ &= -2 \int_0^1 (\rho_1(t, \theta) - \rho_2(t, \theta)) (P(\rho_1(t, \theta)) - P(\rho_2(t, \theta))) d\theta\end{aligned}$$

がわかる．よって，

$$\|w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)\|_{L^2}^2 = -2 \int_0^t (\rho_1(s, \theta) - \rho_2(s, \theta), P(\rho_1(s, \theta)) - P(\rho_2(s, \theta)))_{L^2} ds$$

となるが， $D(\rho) > 0$ より P は単調増加なので $\|w_1(t, \theta) - w_2(t, \theta)\|_{L^2}^2 \leq 0$ ，すなわち $w_1 = w_2$ である． ρ_1, ρ_2 が弱解の場合も軟化子を用いれば同様に示せる． ■

第2章 格子気体モデル

この章では、考える格子気体モデルを定義し流体力学極限の成立を示す。[2] では平衡測度が混合条件を満たす Gibbs 測度である場合まで流体力学極限が成立することが示されているが、本修士論文では Bernoulli 測度が平衡測度である格子気体モデルのみ考える。本章の内容は [3] による。

2.1 格子気体モデルの定義

N を自然数、 $\mathbf{T}_N = \mathbf{Z}/N\mathbf{Z} \cong \{1, 2, \dots, N\}$ とする。 \mathbf{T}_N 上を運動する粒子系を考える。各点にある粒子は高々1つまでと仮定する（排他条件）と、粒子系のある時刻における状態は配置空間

$$\chi_N := \{0, 1\}^{\mathbf{T}_N}$$

の一点 $\eta \in \chi_N$ として表される。 $x \in \mathbf{T}_N$ における η の値 $\eta(x)$ を η_x と書く。 $\eta_x = 1$ または 0 は点 $x \in \mathbf{T}_N$ に粒子があるか無いかを表す。考える格子気体を χ_N -値 Markov 過程として以下のように定義する。

まず η と $x, y \in \mathbf{T}_N$ に対して η の x と y での値を交換した配置を $\eta^{x,y}$ とする。すなわち、

$$(\eta^{x,y})_z = \begin{cases} \eta_y & z = x \text{ のとき} \\ \eta_x & z = y \text{ のとき} \\ \eta_z & \text{その他} \end{cases}$$

である。次に、

$$C(\chi_N) = \{\chi_N \text{ 上の関数全体}\}$$

とし、 $C(\chi_N)$ 上の作用素 $\pi_{x,y}(x, y \in \mathbf{T}_N, x \neq y)$ を

$$\pi_{x,y}F(\eta) = F(\eta^{x,y}) - F(\eta) \quad (F \in C(\chi_N))$$

で定義する。また、シフト作用素 $\tau_x, x \in \mathbf{T}_N$ を

$$(\tau_x \eta)_y = \eta_{x+y} \quad (\eta \in \chi_N),$$

$$\tau_x f(\eta) = f(\tau_x \eta) \quad (f \in C(\chi_N))$$

で定義する。

$$L_N F(\eta) = \sum_{x=1}^N c_{x,x+1}(\eta) \pi_{x,x+1} F(\eta) \quad (2.1)$$

で定義される L_N を生成作用素とする χ_N -値 Markov 過程 $(\tilde{\eta}^N(\tau))_\tau$ として格子気体を定義する．ここで $c_{x,x+1} \in C(\chi_N)$ は配置 η から配置 $\eta^{x,x+1}$ への遷移が起こる率（飛躍率）であり N によらないものとする． N に依存しないことから飛躍率は \mathbf{Z} 上の関数とみるのが適切である．

$$\begin{aligned}\chi &:= \{0, 1\}^{\mathbf{Z}}, \\ C(\chi) &:= \{\chi \text{ 上の関数全体}\},\end{aligned}$$

とおく．また $f \in C(\chi)$ が局所関数であるとは，非負整数 r が存在して f が $(\eta_x)_{|x| \leq r}$ にのみ依存することとし， $f \in \mathcal{F}_c$ とかく．すなわち局所関数は有限個の $\eta_x (x \in \mathbf{Z})$ の多項式であるが， $\eta_x = 0, 1$ より $\eta_x^2 = \eta_x$ であることから各 η_x について一次であり，

$$\begin{aligned}\Psi_A(\eta) &= \prod_{x \in A} 1_{\{\eta_x=1\}}(\eta) \\ &= \prod_{x \in A} \eta_x\end{aligned}$$

なる $\Psi_A \in \mathcal{F}_c (A \subset \mathbf{Z}: \text{有限集合})$ の線形結合で表される．以下では飛躍率について次の仮定をおく．まず，

$$c_{x,x+1} = \tau_x c_{01}$$

となっているものとする（空間的一様性）． $0, 1 \in \mathbf{T}_N$ の粒子が交換する率 $c_{0,1} = c_{01}$ については

1. 非退化性： $\eta_0 \neq \eta_1$ ならば $c_{01}(\eta) > 0$,
2. 相互作用の局所性： $c_{01} \in \mathcal{F}_c$,
3. 対称性： $\pi_{0,1} c_{01} = 0$,

を仮定する．

注意 2.1. $\eta_0 = \eta_1$ のときには飛躍率がどのような値をとるとしても L_N は変わらない． $\eta_0 = \eta_1$ のとき $c_{01} = 0$ となるとした場合には既に粒子のある場所への移動は起こらないとしたことになり， $\eta_0 = \eta_1$ のとき $c_{01} > 0$ となるとした場合には 2 点 $0, 1$ にある粒子が交換するとしたことになる．本修士論文で問題とするのは粒子全体の分布だけなので，どちらに決めても結果には影響しない．また $c_{01}(\eta) > 0 (\eta \in \chi)$ である飛躍率 c_{01} が与えられたとき，粒子の交換は起きないとする飛躍率 c'_{01} を

$$c'_{01}(\eta) = c_{01}(\eta) \{ \eta_0(1 - \eta_1) + (1 - \eta_0)\eta_1 \}$$

で作ることができる．詳しくは後の章で述べる．

次に $(\tilde{\eta}^N(\tau))_\tau$ の性質を述べる． $\{0, 1\}$ 上の測度 $\mu^\rho (\rho \in [0, 1])$ の直積として表される測度を **Bernoulli 測度** という． $\mu^\rho(\{1\}) = \rho \in [0, 1]$ を Bernoulli 測度の密度と呼ぶ． χ_N 上の密度 ρ の Bernoulli 測度を ν_ρ^N と書くことにする． ν_ρ^N は

$$\nu_\rho^N(\eta) = \prod_{x=1}^N \rho^{\eta_x} (1 - \rho)^{1 - \eta_x},$$

$$\mathbf{E}^{\nu_\rho}[\eta_x] = \rho \quad (x \in \mathbf{T}_N),$$

を満たす． $f \in \mathcal{F}_c$ に対して $E^{\nu_\rho}[f]$ は ρ の多項式である． $\chi_N = \{0, 1\}^Z$ 上の Bernoulli 測度を ν_ρ で表す．飛躍率の対称性と $\nu_\rho(\eta) = \nu_\rho(\eta^{x, x+1})$ であることから詳細釣り合い条件

$$\nu_\rho(\eta)c_{x, x+1}(\eta) = \nu_\rho(\eta^{x, x+1})c_{x, x+1}(\eta^{x, x+1})$$

が成り立ち， ν_ρ は L_N の可逆化測度になる．また粒子数が保存量である．本修士論文では以上で定義された粒子系を格子気体と呼ぶ．

次に時間と空間のスケーリングを行い，巨視的なスケールでの粒子の分布に対応付ける．微視的空間としては $\mathbf{T}_N = \{0, 1, \dots, N\}$ を取った．巨視的空間として $\mathbf{T} = [0, 1)$ をとる． \mathbf{T}_N を $\frac{1}{N}$ に縮小して \mathbf{T} に埋め込む．このスケーリングで $x \in \mathbf{T}_N$ は $\frac{x}{N} \in \mathbf{T}$ に対応する．また微視的時間は巨視的時間の T^2 倍にとる．巨視的時間 $[0, T]$ の間で考えるものとする．時空のスケーリングは

$$[0, N^2T] \times \mathbf{T}_N \ni (\tau, x) \mapsto (t, \theta) \in [0, T] \times \mathbf{T}$$

となる．このスケーリングで χ_N -値 Markov 過程 $(\tilde{\eta}^N(\tau))_{\tau \in [0, N^2T]}$ を \mathbf{T} 上の粒子数分布に対応させる．まず，時間についてスケーリングを施した χ_N -値 Markov 過程を $(\eta^N(t))_{t \in [0, T]}$ とする．これは N^2L_N を生成作用素とする Markov 過程である． $(\eta^N(t))_x = \eta_x^N(t) (x \in \mathbf{T}_N)$ とする．また以下では $(\eta^N(t))_{t \in [0, T]}$ は N によらない同一の確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ で定義されているとする．次に空間に関するスケーリングをとり， $\eta^N(t)$ を

$$\xi_t^N(d\theta) = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^N \eta_x^N(t) \delta_{\frac{x}{N}}(d\theta) \quad (2.2)$$

と同一視する．

流体力学極限とは以上のスケーリングによって，ランダムな微視的粒子系の極限として決定論的な巨視的方程式が導かれることを示すことである．次に $N \rightarrow \infty$ としたとき，どのような意味で収束するのかを述べる為に必要な事項をまとめる．

まず \mathbf{T} 上の Borel 測度で全測度が 1 以下のもの全体を $\mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ とする：

$$\mathcal{M}_1(\mathbf{T}) := \{\mu \mid \mu \text{ は } \mathbf{T} \text{ 上の Borel 測度 } \mu(\mathbf{T}) \leq 1\}. \quad (2.3)$$

各 t, N に対して ξ_t^N は $\mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ -値確率変数 $\xi_t^N : \Omega \rightarrow \mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ である． $\alpha \in \mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ によるテスト関数 $J \in C^\infty(\mathbf{T})$ の積分を $\langle \alpha, J \rangle$ とかくことにする． \mathbf{T} 上の可測関数の積分も同じ記号で表す．任意の $J \in C^\infty(\mathbf{T})$ に対して

$$\langle \alpha_n, J \rangle \rightarrow \langle \alpha, J \rangle \quad (n \rightarrow \infty)$$

が成り立つとき， α_n は α に弱収束するといいい $\alpha_n \rightarrow \alpha$ とかく． \mathcal{M}_1 上に弱収束の位相を与える距離を以下で定義する． $\{J_k\} \subset C^\infty(\mathbf{T})$ でその線形和の全体が $C^\infty(\mathbf{T})$ で稠密であり， $\sup_k \|J_k\|_\infty \leq 1$ であるものをとる．例えば，

$$J_0 = 1, \quad J_{2k+1} = \sin 2\pi k\theta, \quad J_{2k} = \cos 2\pi k\theta (k \geq 1)$$

ととればよい．

$$d_{\mathcal{M}_1}(\mu, \nu) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2^k} |\langle \mu, J_k \rangle - \langle \nu, J_k \rangle|$$

は $\mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ 上の距離を定め ,

$$\begin{aligned} d_{\mathcal{M}_1}(\mu_n, \mu) \rightarrow 0 &\Leftrightarrow \mu_n \rightarrow \mu \\ &\Leftrightarrow \langle \mu_n, J \rangle \rightarrow \langle \mu, J \rangle \quad (\forall J \in C^\infty(\mathbf{T})) \end{aligned}$$

となる . この距離を用いて $\mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ -値確率変数列 (ランダムな測度の列) $\alpha^N : \Omega \rightarrow \mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ ($N = 1, 2, \dots$) が $\mu \in \mathcal{M}_1(\mathbf{T})$ に確率収束するとは ,

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P}[d_{\mathcal{M}_1(\mathbf{T})}(\alpha^N, \mu) > \varepsilon] = 0$$

が成り立つことと定義する .

$$\alpha^N \rightarrow \mu \text{ (確率収束)} \Leftrightarrow \langle \alpha^N, J_k \rangle \rightarrow \langle \mu, J_k \rangle \text{ for all } k \text{ (確率収束)}$$

である . とくに極限が $\mu_t(\theta) = \rho(t, \theta)d\theta$ と表されるときは , 任意の区間 $[a, b] \subset \mathbf{T}$ に対して

$$\alpha^N([a, b]) \rightarrow \int_{[a, b]} \rho(t, \theta)d\theta \text{ (確率収束)}$$

が成り立つ .

定理 2.2. ([3], 主定理)

可測関数 $\rho_0 : \mathbf{T} \rightarrow [0, 1]$ が与えられていて , $\rho(t, \theta)$ は拡散方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \rho(t, \theta) = \frac{\partial}{\partial \theta} (D(\rho(t, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(t, \theta)) \\ \rho(0, \theta) = \rho_0(\theta) \\ \rho(t, 0) = \rho(t, 1) \end{cases} \quad (2.4)$$

の解であるとする . ここで拡散係数 D は

$$D(\rho) = \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \inf_{f \in \mathcal{F}_c} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right\}^2 c_{01} \right] \quad (2.5)$$

で定義されるものとする . このとき , 初期分布について $\xi_0^N \rightarrow \rho_0(\theta)d\theta$ (確率収束) ならば任意の $\varepsilon > 0$ に対して ,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} d_{\mathcal{M}_1}(\xi_t^N, \mu_t) > \varepsilon \right] = 0 \quad (2.6)$$

が成り立つ . ただし , $\mu_t(d\theta) := \rho(t, \theta)d\theta$ (ランダムでない測度) である .

注意 2.3. (2.5) 中の $\sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f)$ は f が局所関数であることから有限和である .

以上のようにランダムな微視的粒子系から決定論的な巨視的方程式が得られる . 仮定は微視的粒子系に対してのみ置かれ , 得られる拡散方程式に対する初期値問題の解の一意性など巨視的な系の性質は全て微視的粒子系から導かれる .

2.2 定理 2.2 の証明の概略

2.2.1 準備

定理 2.4. ([3], 補題 2.1, 定理 6.13)

(2.5) の $D(\rho)$ は次の性質を満たす .

- (i) $D(\rho)$ は $[0, 1]$ 上で正値である .
- (ii) $D(\rho)$ は $(0, 1)$ 上連続で端点 $0, 1$ まで連続に拡張できる .

これより , (2.5) で定義した $D(\rho)$ を拡散係数にもつ拡散方程式の弱解は一意である .

$J \in C^\infty(\mathbf{T})$ に対して , $F_{N,J} \in C(\chi_N)$ を $F_{N,J}(\eta) = \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathbf{T}_N} \eta_x J\left(\frac{x}{N}\right)$ で定義すると ,

$$\begin{aligned} \langle \xi_t^N, J \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathbf{T}_N} \eta_x^N(t) J\left(\frac{x}{N}\right) \\ &= F_{N,J}(\eta^N(t)). \end{aligned}$$

定理 1.16 より

$$M_t^N = \langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_0^N, J \rangle - \int_0^t N^2 L_N F_{N,J}(\eta^N(s)) ds$$

はマルチンゲールである . Doob の不等式により次がわかる .

定理 2.5.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{E} \left[\sup_{0 \leq t \leq T} |M_t^N|^2 \right] = 0.$$

以下 ,

$$\langle \xi_t^N, J \rangle = \langle \xi_0^N, J \rangle + \int_0^t N^2 L_N F_{N,J}(\eta^N(s)) ds + r^N(t)$$

(ただし , $r^N(t)$ は $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{E} [\sup_{0 \leq t \leq T} |r^N(t)|] = 0$ であるもの) の $N \rightarrow \infty$ とした極限で非線形拡散方程式 (2.4) の弱形

$$\langle \rho(t, \theta), J \rangle = \langle \rho_0(\theta), J \rangle + \int_0^t \int_{\mathbf{T}} D(\rho(s, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(s, \theta) J'(\theta) d\theta ds$$

が得られることを示す .

記号を次のように定める . 数列 a_x の算術平均を $\mathbf{A}_{\mathbf{v}_x a_x}$ で表す . $\eta \in \chi_N$ に対して , 区間 $\Lambda_{x,K}$ における経験密度 $\bar{\eta}_{x,K}$ を

$$\bar{\eta}_{x,K} = \mathbf{A}_{\mathbf{v}_{|y-x| \leq K}} \eta_y = \frac{1}{2K+1} \sum_{|x-y| \leq K} \eta_y \quad \text{for } \eta \in \chi_N$$

で定める . $\eta = \eta^N(t)$ としたものを $\bar{\eta}_{x,K}^N(t)$ で表す :

$$\bar{\eta}_{x,K}^N(t) = \frac{1}{2K+1} \sum_{|x-y| \leq K} \eta_y^N(t).$$

一階差分作用素 ∇_N を $\nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) = N[J\left(\frac{x+1}{N}\right) - J\left(\frac{x}{N}\right)]$ で定める．Taylor 展開により

$$\nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) = J'\left(\frac{x}{N}\right) + \frac{1}{2N}J''\left(\frac{x}{N}\right) + \mathbf{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

である．また，

$$w_{x,x+1}(\eta) = c_{x,x+1}(\eta)(\eta_x - \eta_{x+1})$$

とおく． $w_{x,x+1}$ は単位時間あたりに点 x から点 $x+1$ へ移動する粒子の個数を表す量であり，粒子フラックスあるいはカレントとよばれる．定義から $L_N\{\eta_x\} = w_{x-1,x}(\eta) - w_{x,x+1}(\eta)$ である．

$$\begin{aligned} N^2 L_N F_{N,J}(\eta) &= N \sum_{x \in \mathbf{T}_N} L_N\{\eta_x\} J\left(\frac{x}{N}\right) \\ &= N \sum_{x \in \mathbf{T}_N} (c_{x-1,x}(\eta)(\eta_{x-1} - \eta_x) - c_{x,x+1}(\eta)(\eta_x - \eta_{x+1})) J\left(\frac{x}{N}\right) \\ &= N \sum_{x \in \mathbf{T}_N} (w_{x-1,x}(\eta) - w_{x,x+1}(\eta)) J\left(\frac{x}{N}\right) \\ &= \sum_{x \in \mathbf{T}_N} w_{x,x+1}(\eta) \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) \end{aligned}$$

より

$$\langle \xi_t^N, J \rangle = \langle \xi_0^N, J \rangle + \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} w_{x,x+1}(\eta^N(s)) \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) ds + r^N(t)$$

である．

2.2.2 緊密性

$$X_t^N = \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} w_{x,x+1}(\eta^N(s)) \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) ds$$

とすると X_t^N は $C([0, T], \mathbf{R})$ -値の確率変数とみなせる．任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\lim_{\delta \downarrow 0} \limsup_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left[\sup_{|t-s| < \delta} |X_t^N - X_s^N| > \varepsilon \right] = 0$$

が成り立つことから X^N の法則のなす列は緊密である．また， ξ^N の $D([0, T], \mathcal{M}_1(T))$ 上の法則を Q^N とすると，上の式と

$$\langle \xi_t^N, J \rangle = \langle \xi_0^N, J \rangle + X_t^N + r^N(t)$$

より，

$$\lim_{\delta \downarrow 0} \limsup_{N \rightarrow \infty} \mathbf{P} \left[\sup_{|t-s| < \delta} |\langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_s^N, J \rangle| > \varepsilon \right] = 0$$

がわかるので， Q^N は定理 1.21 の意味で相対コンパクトである．その極限で次が成り立つ．

定理 2.6. ([3], 定理 6.4) Q^N の任意の極限を Q とすると $Q - a.a.$ $\xi \in C$ に対して可測関数 $\rho(t, \theta)$ が存在して, $\xi(d\theta) = \rho(t, \theta)d\theta$. さらに, $\rho(t, \theta)$ の θ に関する超関数微分は $Q - a.s.$ に $L^2([0, T] \times \mathbf{T})$ に入る:

$$\int_0^t \int_{\mathbf{T}} \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(s, \theta) J(s, \theta) d\theta ds = - \int_0^t \int_{\mathbf{T}} \rho(s, \theta) \frac{\partial}{\partial \theta} J(s, \theta) d\theta ds,$$

$$\mathbf{E}^Q \left[\int_0^T \int_{\mathbf{T}} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \rho(t, \theta) \right)^2 d\theta dt \right] < \infty.$$

2.2.3 定理 2.2 の証明

Fick の法則

補題 2.7. (i) $\chi_{\varepsilon, \theta}(\theta') = \frac{1}{2\varepsilon} 1_{[\theta - \varepsilon, \theta + \varepsilon]}(\theta')$ とすると, $|x - \theta N| \leq 1$ のとき,

$$\bar{\eta}_{x, \varepsilon N}^N(s) = \langle \xi_s^N, \chi_{\varepsilon, \theta} \rangle + \mathbf{O}\left(\frac{1}{\varepsilon N}\right).$$

(ii) $\xi_s(d\theta) = \rho(s, \theta)d\theta$ であるとき,

$$\langle \xi_s, \chi_{\varepsilon, \theta} \rangle \rightarrow \rho(s, \theta) \text{ as } \varepsilon \downarrow 0.$$

$K \in \mathbf{N}$ に対して $K^\dagger = K - \lfloor \sqrt{K} \rfloor$ とする. $\Lambda_{x, K^\dagger} = \{x - K^\dagger, \dots, x + K^\dagger\} \subset \mathbf{T}_N$ 上の粒子フラックスの算術平均 $\mathbf{A}\mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta)$ は, 巨視的空間 \mathbf{T} における微小区間 $\frac{1}{N} \Lambda_{x, K^\dagger}$ へ流れ込む粒子の量を表す.

定理 2.8. (Fick の法則) ([3], 定理 6.7)

(2.5) の D に対して次が成り立つ.

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \limsup_{\varepsilon \downarrow 0} \limsup_{N \rightarrow \infty} \mathbf{E} \left[\left| \int_0^T \sum_{x \in \mathbf{T}_N} J\left(\frac{x}{N}\right) \left\{ \mathbf{A}\mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta^N(s)) - D(\bar{\eta}_{x, \varepsilon N}^N) \frac{\eta_{x - \varepsilon N}^N(s) - \eta_{x + \varepsilon N}^N(s)}{2\varepsilon N} \right\} ds \right| \right] = 0. \quad (2.7)$$

以上をもとに定理 2.2 の証明を行う.

証明.

$$\langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_0^N, J \rangle = \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) w_{x, x+1}(\eta^N(s)) ds + r^N(t).$$

ここで, $r^N(t)$ は $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{E} [\sup_{0 \leq t \leq T} |r^N(t)|] = 0$ であるものであった. Taylor 展開により,

$$\sum_{x \in \mathbf{T}_N} \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) w_{x, x+1}(\eta) = \sum_{x \in \mathbf{T}_N} \nabla_N J\left(\frac{x}{N}\right) \left\{ \mathbf{A}\mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta) + \mathbf{O}\left(\frac{K^2}{N^2}\right) \right\}$$

がわかる．これより（必要ならば r^N を途中で取り直して），

$$\begin{aligned}
\langle \xi_t^N, J \rangle - \langle \xi_0^N, J \rangle &= \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} \nabla_N J \left(\frac{x}{N} \right) \mathbf{A} \mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta^N(s)) ds + r^N(t) \\
&= \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} J' \left(\frac{x}{N} \right) \mathbf{A} \mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta^N(s)) ds + r^N(t) \\
&= \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} J' \left(\frac{x}{N} \right) \left[D(\bar{\eta}_{x, \varepsilon N}^N(s)) \frac{\eta_{x-\varepsilon N}^N(s) - \eta_{x+\varepsilon N}^N(s)}{2\varepsilon N} \right] ds + r^N(t) \\
&= \int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} J' \left(\frac{x}{N} \right) \left[D \left(\langle \xi_s^N, \chi_{\varepsilon, \theta} \rangle + \mathbf{O} \left(\frac{1}{\varepsilon N} \right) \right) \frac{\eta_{x-\varepsilon N}^N(s) - \eta_{x+\varepsilon N}^N(s)}{2\varepsilon N} \right] ds + r^N(t).
\end{aligned}$$

$N \rightarrow \infty$ としたときの ξ_t^N の極限過程の一つを $\xi_t(d\theta) = \rho(t, \theta) d\theta$ とすると，

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{T}} \rho(t, \theta) J(\theta) d\theta - \int_{\mathbf{T}} \rho_0(\theta) J(\theta) d\theta \\
&= \int_0^t \int_{\mathbf{T}} D(\langle \xi_s, \chi_{\varepsilon, \theta} \rangle) \frac{\rho(s, \theta - \varepsilon) - \rho(s, \theta + \varepsilon)}{2\varepsilon} J'(\theta) d\theta ds.
\end{aligned}$$

$\varepsilon \downarrow 0$ として，非線形拡散方程式 (2.4) の弱形

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{T}} \rho(t, \theta) J(\theta) d\theta - \int_{\mathbf{T}} \rho_0(\theta) J(\theta) d\theta \\
&= \int_0^t \int_{\mathbf{T}} D(\rho(s, \theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} \rho(s, \theta) J'(\theta) d\theta ds
\end{aligned}$$

を得る．初期値問題の解の一意性より N について部分列をとることなしに， ξ^N は同一の極限 $\rho(t, \theta) d\theta$ に収束する．すなわち，(2.6) が証明された． ■

拡散係数の決定

次に Fick の法則 (2.7) を示す．

定理 2.9. ([3], 補題 6.6) 任意の $K \in \mathbf{N}$, $f \in \mathcal{F}_c$ に対して

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{E} \left[\left[\int_0^t \sum_{x \in \mathbf{T}_N} J \left(\frac{x}{N} \right) \tau_x \left[\mathbf{A} \mathbf{v}_{-K \leq y < K} L_N(\tau_y f) \right] (\eta^N(s)) ds \right] \right] = 0$$

より $\mathbf{A} \mathbf{v}_{y, y+1 \in \Lambda_{x, K^\dagger}} w_{y, y+1}(\eta^N(s)) - D(\bar{\eta}_{x, \varepsilon N}^N) \frac{\eta_{x-\varepsilon N}^N(s) - \eta_{x+\varepsilon N}^N(s)}{2\varepsilon N}$ に $\mathbf{A} \mathbf{v}_{-K \leq y < K} L_N(\tau_y f)$ を加えた

$$G_K^f(\eta) = \mathbf{A} \mathbf{v}_{-K^\dagger \leq y < K^\dagger} (w_{y, y+1}(\eta) + L_N(\tau_y f) - D(\bar{\eta}_{0, K})(\eta_x - \eta_{x+1})) \quad (2.8)$$

に対して (2.7) の三重極限を示す．証明はエントロピー不等式から従う

命題 2.10. $\eta(t)$ の関数 X に対して

$$\mathbf{E}[|X|] \leq \frac{1}{\beta N} \log \mathbf{E}_{eq}^N [e^{\beta X} + e^{-\beta X}] + \frac{C_0}{\beta}, (\beta > 0) \quad (2.9)$$

に基づく．これを用いて Fick の法則を示すには

定理 2.11.

$$\inf_{f \in \mathcal{F}_c} \limsup_K \limsup_N \frac{1}{N} \log \mathbf{E}_{eq}^N [\exp\{N \int_0^t \sum_x J(\frac{x}{N}) \tau_x G_K^f(\eta^N(s)) ds\}] \leq 0 \quad (2.10)$$

を用いる．これを示すには Feynman-Kac の公式より

$$\log \mathbf{E}_{eq}^N [\exp\{N \int_0^t \sum_x J(\frac{x}{N}) \tau_x G_K^f(\eta^N(s)) ds\}] \leq t \Omega_0 \{N \sum_x J(\frac{x}{N}) \tau_x G_K^f + N^2 L_N\} \quad (2.11)$$

(Ω_0 は最大固有値) と最大固有値の評価

定理 2.12. K に対して $\langle G \rangle_{K,m} = 0$ ならば

$$\limsup_N \Omega_0 \{ \sum_x J(\frac{x}{N}) \tau_x G_K^f + N L_N \} \leq \|J\|_2 \sup_{m,\omega} [(2K) \Delta_{K,m,\omega}(G)] \quad (2.12)$$

を使う．これにより $\Lambda(K) = \{-K, \dots, K\}$ 上の格子気体に帰着．上の記号は、 $\langle \cdot \rangle$ が一様測度に関する積分、 ω は外部配置、

$$\Delta_{K,m,\omega}\{G\} = \frac{1}{2} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \mathbf{E}[(\int_0^T G(\tilde{\eta}(s)) ds)^2]. \quad (2.13)$$

$\langle G \rangle_{K,m} = 0$ のとき

$$\Delta_{K,m,\omega}\{G\} = \langle G(-L_{\Lambda(K),m,\omega})^{-1} G \rangle. \quad (2.14)$$

$\sup_{m,\omega} [2K \Delta_{K,m,\omega}\{G\}]$ を調べる．

$$\mathcal{G} = \{h \in \mathcal{F}_c | \exists K \forall m, \langle h \rangle_{K,m} = 0\} \quad (2.15)$$

とおく． $\eta_{x+1} - \eta_x, w_{x,x+1}, L_N f$ は \mathcal{G} の元．いまは

$$V_{K,m,\omega}(h, g) = 2K \Delta(\mathbf{A} \mathbf{v} \tau_y h, \mathbf{A} \mathbf{v} \tau_y g) \quad (2.16)$$

の形のものについてしか適用しない．

定理 2.13. ([3], 定理 B) $\frac{m}{2K} \rightarrow \rho \in [0, 1]$ となるように極限をとるとき、

$$V^\rho(h, g) = \lim V_{K,m,\omega}(h, g) \quad (2.17)$$

が存在 (ω によらない)．内積空間 (\mathcal{G}, V^ρ) において

$$\mathcal{G}_0 = \{\alpha w_{0,1} + Lf\} \quad (2.18)$$

は稠密．

計算により

$$\begin{aligned} V^\rho\{w_{0,1} + LF\} &= \frac{1}{2} \mathbf{E}^{\nu_1}[\eta_0 - \eta_1 + \sum \pi_{0,1}(\tau_x f)^2 c_{01}] = \chi(\rho) D(\rho : f) \\ V^\rho(w_{0,1}, \eta_0 - \eta_1) &= \rho(1 - \rho) = \chi(\rho) \\ V^\rho(Lf, \eta_0 - \eta_1) &= 0 \end{aligned} \quad (2.19)$$

2番目の式より $\{\alpha(\eta_0 - \eta_1) + Lf\}$ も稠密．従って、 $D(\rho)$ をうまくとると

$$\inf_f V^\rho \{w_{0,1} - D(\rho)(\eta_0 - \eta_1) - Lf\} = 0 \quad (2.20)$$

これらより拡散係数 D の変分表示を得る．また

$$\begin{aligned} \lim_{\frac{m}{2K} \rightarrow \infty} \Delta \{G_K^f\} &= V^\rho \{w_{0,1} - Lf - D(\rho)(\eta_0 - \eta_1)\} \\ &= \chi(\rho) \{D(\rho : f) - D(\rho)\} \end{aligned} \quad (2.21)$$

より示したかった

定理 2.14.

$$\inf_{f \in \mathcal{F}_c} \limsup_K \limsup_N \frac{1}{N} \log \mathbf{E}_{eq}^N [\exp\{N \int_0^t \sum_x J(\frac{x}{N}) \tau_x G_K^f(\eta^N(s)) ds\}] \leq 0 \quad (2.22)$$

がわかる．

第3章 主結果

この章では、勾配条件をみたす場合に拡散係数を具体的に決定する。

前章で述べたように一般の場合には拡散係数は変分公式により表され、その具体的な形を知ることとは容易ではない。下限を達成する局所関数が具体的にわかる為の条件として次が知られている。

定義 3.1. 飛躍率が $c_{x,x+1}$ の格子気体が勾配系であるとは、勾配条件

$$h \in \mathcal{F}_c \text{ が存在して } w_{0,1}(\eta) = c_{01}(\eta)(\eta_0 - \eta_1) = (h - \tau_1 h)(\eta) \quad (\forall \eta) \quad (3.1)$$

を満たすことをいう。

連続なモデルの場合には上に述べた勾配条件は粒子フラックスがポテンシャルをもつという自然な条件に対応するが、格子気体の場合には特殊な条件であり勾配条件を満たす飛躍率の形は限られたものになる。

例 1 $c_{0,1} = \frac{1}{2}$ は勾配条件を満たす。実際、

$$\begin{aligned} w_{0,1} &= \frac{1}{2}\eta_0 - \frac{1}{2}\eta_1 \\ &= \frac{1}{2}\eta_0 - \frac{1}{2}\tau_1(\eta_0) \end{aligned}$$

であるから、 $h = \frac{1}{2}\eta_0$ で勾配条件を満たしている。

勾配条件が成り立つ場合には (2.5) において、下限を達成する局所関数が $f = 0$ であることが次のようにしてわかる。

$$\begin{aligned} & \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right\}^2 c_{01} \right] \\ &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ (\eta_0 - \eta_1)^2 - 2(\eta_0 - \eta_1) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) + \left(\sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right)^2 \right\} c_{01} \right]. \end{aligned}$$

右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned}
& \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[(c_{01}(\eta_0 - \eta_1)) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[(h - \tau_1 h) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] - \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[\tau_1 h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu\rho} [h(\tau_1 \eta) \pi_{01} f(\tau_y \eta)] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu\rho} [h(\eta) \pi_{01}(\tau_{y-1} f)] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] - \sum_{z=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu\rho} [h(\eta) \pi_{01}(\tau_z f)] \\
&= \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right] - \mathbf{E}^{\nu\rho} \left[h \sum_{z=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_z f) \right] \\
&= 0
\end{aligned}$$

であり，第 3 項は

$$\mathbf{E}^{\nu\rho} \left[\left(\sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y f) \right)^2 c_{01} \right] \geq 0$$

であるから，第 3 項が 0 となるとき下限が達成される．すなわち， $f = 0$ のときに最小となる．よって勾配条件が満たされている場合に拡散係数は

$$D(\rho) = \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \mathbf{E}^{\nu\rho} [(\eta_0 - \eta_1)^2 c_{01}] \quad (3.2)$$

となる．以上の議論は不変測度が Bernoulli 測度でなくても，平行移動不変性 $\nu(\tau_1 \eta) = \nu(\eta)$ をもつものであれば成立する．さらに (3.2) は勾配条件で存在が仮定されている $h \in \mathcal{F}_c$ を用いて次のようにもかける．

命題 3.2. ([3], 4.2.2)

$c_{0,1}$ を飛躍率とする格子気体が勾配条件 $c_{0,1}(\eta)(\eta_0 - \eta_1) = h(\eta) - \tau_1 h(\eta)$ を満たすとき，拡散係数は

$$D(\rho) = \frac{\partial}{\partial \rho} \mathbf{E}^{\nu\rho} [h] \quad (3.3)$$

である．

以上から勾配系に対しては拡散係数が具体的に計算可能である．

例 $c_{01}(\eta) = \frac{1}{2}$ のとき，

$$\begin{aligned}
c_{01}(\eta_0 - \eta_1) &= \frac{1}{2} \eta_0 - \frac{1}{2} \eta_1 \\
&= \frac{1}{2} \eta_0 - \frac{1}{2} \tau_1 \eta_0
\end{aligned}$$

であるから， $h = \frac{1}{2}\eta_0$ で勾配条件を満たしている．よって拡散係数は

$$\begin{aligned} D(\rho) &= \frac{\partial}{\partial \rho} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\frac{1}{2}\eta_0 \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

となる．これは独立なランダムウォークの場合と同じ分布である．

第2章，注意2.1(16ページ)において， $\eta_0 = \eta_1$ であるときの飛躍率をどのように決めても結果に影響しないことを述べたが，特に0とした場合には飛躍率の形は次のようになる．

命題 3.3. 飛躍率 $c_{0,1}$ が， $\eta_0 = \eta_1$ のとき $c_{0,1}(\eta) = 0$ ，を満たすならば，

$$c_{0,1}(\eta) = \{\eta_0(1 - \eta_1) + (1 - \eta_0)\eta_1\} \tilde{c}_{0,1}(\eta)$$

の形である．ここで $\tilde{c}_{0,1}$ は η_0, η_1 によらない飛躍率である．

証明．一般に局所関数 f は

$$f = \eta_0\eta_1 f_1 + \eta_0 f_2 + \eta_1 f_3 + f_4 \quad (f_1, f_2, f_3, f_4 \text{ は } \eta_0, \eta_1 \text{ に依らない})$$

と分解できる． $c_{0,1} = \eta_0\eta_1 f_1 + \eta_0 f_2 + \eta_1 f_3 + f_4$ (f_1, f_2, f_3, f_4 は η_0, η_1 に依らない) とする． $\eta_0 = \eta_1 = 0$ のとき， $c_{0,1}(\eta) = f_4(\eta) = 0$ より $f_4 = 0$ がわかる．飛躍率についての仮定 $\pi_{0,1} c_{0,1} = 0$ ，すなわち $c_{0,1}(\eta^{0,1}) = c_{0,1}(\eta)$ から任意の η に対して

$$\eta_0\eta_1 f_1(\eta) + \eta_1 f_2(\eta) + \eta_0 f_3(\eta) = \eta_0\eta_1 f_1(\eta) + \eta_0 f_2(\eta) + \eta_1 f_3(\eta)$$

が成り立つ (f_i は η_0, η_1 に依らないので， $f_i(\eta^{0,1}) = f_i(\eta)$ ($i = 1, 2, 3$) である)．特に $\eta_0 = 1, \eta_1 = 0$ なる任意の η に対して

$$f_3(\eta) = f_2(\eta)$$

であるが， f_2, f_3 は η_0, η_1 に依らないので $f_2 = f_3$ である．同様に $\eta_0 = \eta_1 = 1$ なる η に対して

$$c_{0,1}(\eta) = f_1(\eta) + 2f_2(\eta) = 0$$

であることより $f_1 = -2f_2$ とわかる．したがって，

$$\begin{aligned} c_{0,1}(\eta) &= -2\eta_0\eta_1 f_2(\eta) + \eta_0 f_2(\eta) + \eta_1 f_2(\eta) \\ &= (\eta_0 - 2\eta_0\eta_1 + \eta_1) f_2(\eta) \\ &= \{\eta_0(1 - \eta_1) + (1 - \eta_0)\eta_1\} f_2(\eta) \end{aligned}$$

となる． $c_{0,1}$ が飛躍率であることより， f_2 も飛躍率の条件を満たすことは容易にわかる． ■

上の命題で $c_{0,1}$ が勾配条件 $(\eta_0 - \eta_1)c_{0,1}(\eta) = h(\eta) - \tau_1 h(\eta)$ を満たしているときには， $\tilde{c}_{0,1}$ も同じ h で勾配条件を満たす．実際，

$$(\eta_0 - \eta_1)\{\eta_0(1 - \eta_1) + (1 - \eta_0)\eta_1\} = (\eta_0 - \eta_1)$$

であることから粒子フラックスが一致する．以下では飛躍率として η_0, η_1 に依らないものを考えることにする．この場合，任意の η に対して正の飛躍率をとる．

$h \in \mathcal{F}_c$ は $\eta_x(x \in \mathbf{T}_N)$ の多項式なので，命題 3.2 より勾配条件を満たしているときの拡散係数は ρ の多項式となることがわかる．では逆にどのような多項式を勾配系の拡散係数として導くことができるのだろうか．本修士論文では次の結果を得た．

定理 3.4. (主定理 1)

$$\begin{aligned} c_{0,1}(\eta) &= \alpha_0 \\ &+ \frac{1}{2}\alpha_1(\eta_{-1} + \eta_2) \\ &+ \frac{1}{3}\alpha_2(\eta_{-2}\eta_{-1} + \eta_{-1}\eta_2 + \eta_2\eta_3) \\ &\dots \\ &+ \frac{1}{n+1}\alpha_n \sum_{k=0}^n \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \prod_{j=1}^{n-k} \eta_{j+1} \right) \\ &= \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m \end{aligned}$$

(ここに，

$$d_{01}^m(\eta) = \frac{1}{m+1} \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} \right)$$

とする.) は勾配条件を満たす飛躍率である．ただし係数 $\alpha_0, \dots, \alpha_n$ は $c_{0,1}(\eta) > 0$ が成り立つようにとるものとする．その拡散係数は

$$D(\rho) = \sum_{m=0}^n \alpha_m \rho^m$$

である．また上の形の飛躍率から導かれる拡散係数の範囲

$$\mathcal{D}'_n = \left\{ D(\rho) = \sum_{m=0}^n \alpha_m \rho^m \mid c_{01}(\eta) = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m(\eta) > 0 \text{ for all } \eta \right\}$$

は $n \geq 2$ のとき，

$$\mathcal{D}_n = \left\{ D(\rho) = \sum_{m=0}^n \alpha_m \rho^m \mid D(\rho) > 0 \text{ for all } \rho \in [0, 1] \right\}$$

の真部分集合である．

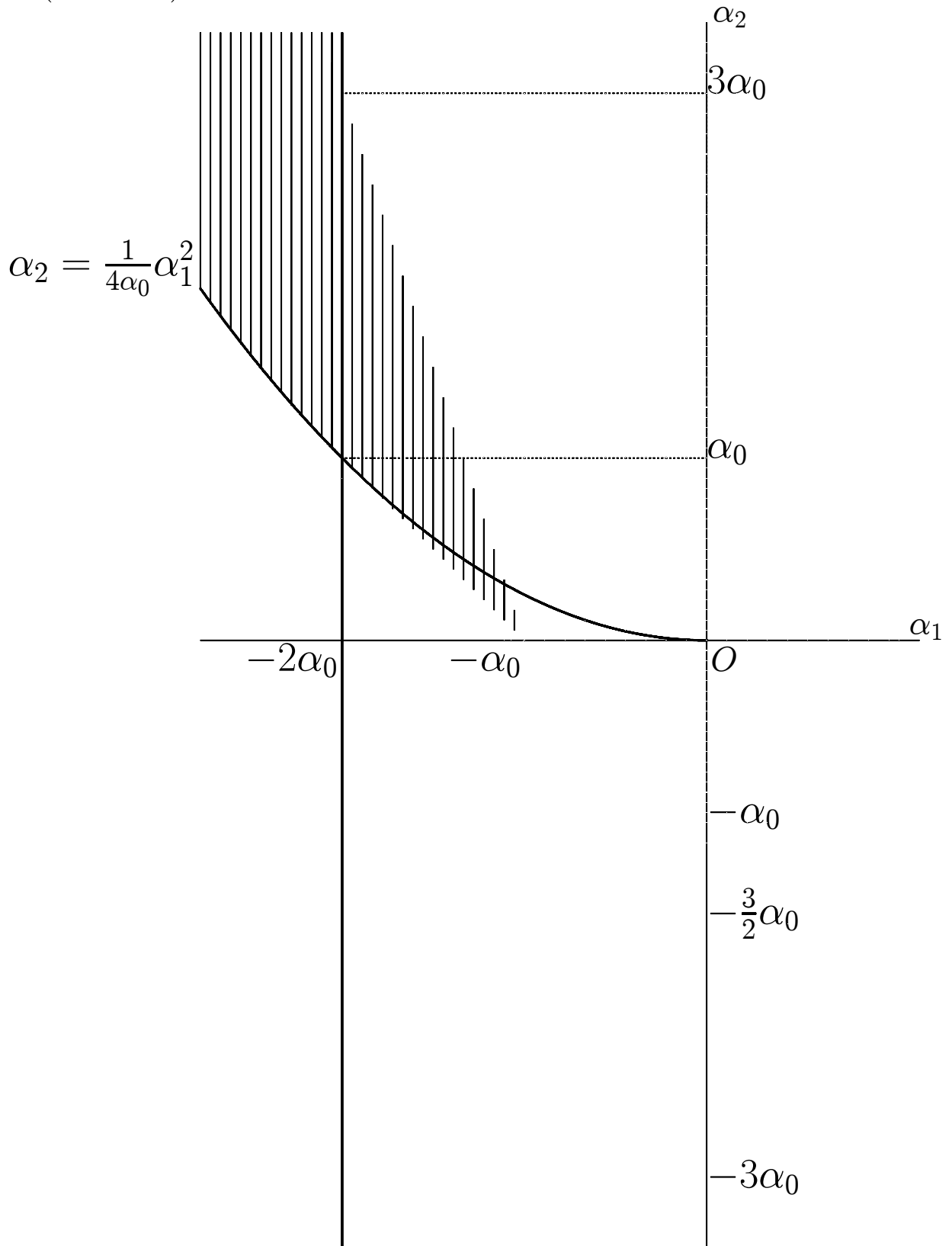
注意 3.5. $n = 2$ のとき \mathcal{D}'_n と \mathcal{D}_n は具体的には

$$\mathcal{D}_2 = \{(\alpha_2, \alpha_1, \alpha_0) \mid D(\rho) = \alpha_2 \rho^2 + \alpha_1 \rho + \alpha_0 > 0\}, \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}'_2 &= \left\{ (\alpha_2, \alpha_1, \alpha_0) \mid \frac{1}{3}\alpha_2(\eta_{-2}\eta_{-1} + \eta_{-1}\eta_2 + \eta_2\eta_3) + \frac{1}{2}\alpha_1((\eta_{-1} + \eta_2) + \alpha_0) > 0 \text{ (for all } \eta) \right\} \\ &= \left\{ (\alpha_2, \alpha_1, \alpha_0) \mid \alpha_0 > 0 \quad \frac{1}{2}\alpha_1 + \alpha_0 > 0 \quad \frac{1}{3}\alpha_2 + \frac{1}{2}\alpha_1 + \alpha_0 > 0 \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{3}\alpha_2 + \alpha_1 + \alpha_0 > 0 \quad \frac{2}{3}\alpha_2 + \alpha_1 + \alpha_0 > 0 \quad \alpha_2 + \alpha_1 + \alpha_0 > 0 \right\}, \quad (3.5) \end{aligned}$$

であり，図示すると以下のようなになる．斜線部が (3.5) の領域，それに縦線部を合わせたものが (3.4) の領域である．

$(\alpha_0 > 0)$



注意 3.6. この結果には次のような意義がある．粒子系が従う巨視的な方程式が求められ，拡散係数を決定できたとする．このとき拡散係数が上で述べたような形のものでなければ，微視的粒子系は $c_{01} = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m$ の形の飛躍率で決まるものではない．すなわち巨視的な観察だけで微視的粒子系についてもいくらかの情報が得られる．

勾配条件を満たしているかいないかのチェックは組み合わせ論的な計算による．そのため， $c_{0,1} = 1 + \eta_{-1} + \eta_2$ は勾配条件を満たすが，摂動を加えた $c_{0,1}^\varepsilon = 1 + (1 + \varepsilon)\eta_{-1} + \eta_2$ はもはや勾配条件を満たさず，拡散係数の決定には変分公式を用いなければならない．しかし，次の定理により拡散係数には摂動の効果は 2 次以上にしか現れない．

定理 3.7. (主定理 2)

$c_{0,1}^0$ を勾配条件を満たす飛躍率とする． $c_{0,1}^\varepsilon = c_{0,1}^0 + \varepsilon c'_{0,1} (\varepsilon > 0)$ が飛躍率の条件を満たすように $c'_{0,1}$ が与えられたとする． $\{g_{\varepsilon,n}\} (g_{\varepsilon,n} = g_0 + \varepsilon g_1 + \varepsilon^2 g_2 + \cdots + \varepsilon^n g_n, g_0 = 0, g_l \in \mathcal{F}_c (l \geq 1))$ を

$$D(\rho) = \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \inf_{g \in \mathcal{F}_c} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{x=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_x g) \right\}^2 c_{0,1}^\varepsilon \right]$$

の Minimizing Sequence とするとき，

$$D(\rho) = \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \mathbf{E}^{\nu_\rho} [(\eta_0 - \eta_1)^2 c_{0,1}^\varepsilon] + \mathbf{O}(\varepsilon^2) \quad (3.6)$$

である．

すなわち， ε の 2 次以上のオーダーの量を無視すれば， c^ε を飛躍率にもつ格子気体の拡散係数も勾配系の場合と同様に計算できる．

第4章 主定理の証明

本章では前章で述べた定理を証明し，成り立つと予想される結果を述べる．

4.1 主定理 1 の証明

証明. d_{01}^m は飛躍率についての仮定のうち正值性以外は全て満たしている．従って， $c_{01} = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m$

もそうである． d_{01}^m が勾配条件を満たしていることを示す．

$$\begin{aligned}
& (\eta_0 - \eta_1)d_{01}^m(\eta) \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\eta_0 \sum_{k=0}^m \prod_{i=1}^{m-1} \eta_{-i} \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} - \eta_1 \sum_{k=0}^m \prod_{i=1}^{m-1} \eta_{-i} \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\eta_0 \left\{ \sum_{k=0}^{m-1} \prod_{i=1}^{m-1} \eta_{-i} \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} + \eta_{-m} \cdots \eta_{-1} \right\} - \eta_1 \left\{ \sum_{k=1}^m \prod_{i=1}^k \eta_{-i} \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} + \eta_2 \cdots \eta_{m+1} \right\} \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\left\{ \sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \eta_0 \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} \right) - \sum_{k=1}^m \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} \right) \right\} \right. \\
&\quad \left. + \left\{ \eta_{-m} \eta_{-m+1} \cdots \eta_{-1} \eta_0 - \eta_1 \eta_2 \cdots \eta_{m+1} \right\} \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\left\{ \sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \eta_0 \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} \right) - \sum_{l=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^{l+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-l-1} \eta_{j+1} \right) \right\} + \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i - \prod_{i=k-m}^k \eta_{i+1} \right) \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^k \eta_{-i} \eta_0 \prod_{j=1}^{m-k} \eta_{j+1} - \prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) + \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i - \tau_1 \prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=0}^k \eta_{-i} \eta_2 \prod_{j=2}^{m-k} \eta_{j+1} - \prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) + \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i - \tau_1 \prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i'=1}^{k+1} \eta_{-i'+1} \eta_2 \prod_{j'=1}^{m-k-1} \eta_{j'+2} - \prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) + \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i - \tau_1 \prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\sum_{k=0}^{m-1} \left\{ \tau_1 \left(\prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) - \prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right\} + \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i - \tau_1 \prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) \right] \\
&= \frac{1}{m+1} \left[\left\{ \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) - \sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) \right\} \right. \\
&\quad \left. - \tau_1 \left\{ \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) - \sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) \right\} \right]
\end{aligned}$$

より

$$h_m = \frac{1}{m+1} \left\{ \sum_{k=0}^m \left(\prod_{i=k-m}^k \eta_i \right) - \sum_{k=0}^{m-1} \left(\prod_{i=1}^{k+1} \eta_{-i} \eta_1 \prod_{j=1}^{m-k-1} \eta_{j+1} \right) \right\}$$

とおくと $h_m \in \mathcal{F}_c$ であり， $(\eta_0 - \eta_1)d_{01}^m(\eta) = h_m(\eta) - \tau_1 h_m(\eta)$ である．よって， d_{01}^m は勾配条件を満たしている．したがって d_{01}^m の線形結合 $c_{01} = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m$ で正值であるものも勾配条件を満たし，3.2 より拡散係数は $D(\rho) = \sum_{m=0}^n \alpha_m \rho^m$ となる．

次に $\mathcal{D}'_n \subsetneq \mathcal{D}_n$ を示す． $c_{01} = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m$ が $c_{01}(\eta) > 0$ (for all η) を満たすとする． c_{01} は勾配条件を満たすので拡散係数はある $h \in \mathcal{F}_c$ により $D(\rho) = \frac{\partial}{\partial \rho} \mathbf{E}^{\nu_\rho}[h]$ と表される多項式であり，また c_{01} の正值性から $D(\rho) = \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \mathbf{E}^{\nu_\rho}[(\eta_0 - \eta_1)^2 c_{01}]$ は任意の $\rho \in [0, 1]$ に対して正である．よって $\mathcal{D}'_n \subset \mathcal{D}_n$ である． $n \geq 2$ のとき逆の包含が成り立たないことは，可能な係数の範囲が \mathcal{D}'_n では連立

一次不等式によって， D_n では二次以上の多項式に関する不等式によって決定されることからわかる．

■

4.2 主定理 2 の証明

証明． 仮定より，

$$\begin{aligned} D(\rho) &= \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \inf_{g \in \mathcal{F}_c} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g) \right\}^2 c_{0,1}^\varepsilon \right] \\ &= \frac{1}{2\rho(1-\rho)} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y(\varepsilon g_1 + \mathbf{O}(\varepsilon^2))) \right\}^2 c_{0,1}^\varepsilon \right] \end{aligned}$$

である．

$$\mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y(\varepsilon g_1 + \mathbf{O}(\varepsilon^2))) \right\}^2 (c_{0,1}^\varepsilon) \right] = \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[(\eta_0 - \eta_1)^2 c_{0,1}^\varepsilon \right] + \mathbf{O}(\varepsilon^2)$$

であることを示す．左辺を展開して，

$$\begin{aligned} &\mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ \eta_0 - \eta_1 - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y(\varepsilon g_1 + \mathbf{O}(\varepsilon^2))) \right\}^2 (c_{0,1}^\varepsilon) \right] \\ &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ (\eta_0 - \eta_1)^2 - 2(\eta_0 - \eta_1) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1} \{ \tau_y(\varepsilon g_1 + \mathbf{O}(\varepsilon^2)) \} + \left(\sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_\varepsilon) \right)^2 \right\} (c_{0,1}^0 + \varepsilon c'_{0,1}(\eta)) \right] \\ &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\left\{ (\eta_0 - \eta_1)^2 - 2\varepsilon(\eta_0 - \eta_1) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) + \mathbf{O}(\varepsilon^2) \right\} (c_{0,1}^0(\eta) + \varepsilon c'_{0,1}(\eta)) \right] \\ &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[(\eta_0 - \eta_1)^2 c_{0,1}^0(\eta) \right] + \varepsilon \left\{ \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[-2(\eta_0 - \eta_1) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) c_{0,1}^0(\eta) \right] + \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[(\eta_0 - \eta_1)^2 c'_{0,1}(\eta) \right] \right\} + \mathbf{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

となる．第二項が 0 であることを示せばよい． $c_{0,1}^0$ が勾配条件を満たすという仮定から $h \in \mathcal{F}_c$ を用いて， $(\eta_0 - \eta_1) c_{0,1}^0(\eta) = h(\eta) - \tau_1 h(\eta)$ とかけるので，

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[(\eta_0 - \eta_1) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) c_{0,1}^0(\eta) \right] &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\{h(\eta) - \tau_1 h(\eta)\} \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) \right] \\ &= \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[h(\eta) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) \right] - \mathbf{E}^{\nu_\rho} \left[\tau_1 h(\eta) \sum_{y=-\infty}^{\infty} \pi_{0,1}(\tau_y g_1) \right] \\ &= \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu_\rho} [h(\eta) \pi_{0,1}(\tau_y g_1)] - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu_\rho} [h(\tau_1 \eta) \pi_{0,1}(\tau_y g_1)] \\ &= \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu_\rho} [h(\eta) \pi_{0,1}(\tau_y g_1)] - \sum_{y=-\infty}^{\infty} \mathbf{E}^{\nu_\rho} [h(\zeta) \pi_{0,1}(\tau_{y-1} g_1)] \\ &= 0 \end{aligned}$$

したがって，主張が従う． ■

4.3 予想

主定理 1 において $c_{01} = \sum_{m=0}^n \alpha_m d_{01}^m$ の形の飛躍率が勾配条件を満たすことはわかった。では、勾配条件を満たす飛躍率はこれで尽きているのだろうか？ 実は $m = 1$ の場合の d_{01}^1 の代わりに $\tilde{d}_{01}^1 = \eta_{-2} + \eta_3$ としたのも勾配条件を満たしている。更に $\eta_{-3} + \eta_4, \eta_{-4} + \eta_5, \dots$ などとしても、またはこれらの線形結合を d_{01}^1 に代えたものも勾配条件を満たす。このように代えた場合には可能な拡散係数は主定理 1 で述べた範囲よりもさらに小さい。 $m \geq 2$ の場合には d_{01}^m の代わりになるものがあるか無いかは不明であるが、そのようなものは存在しない、すなわち、勾配系から導かれる拡散係数は主定理 1 の範囲で尽きているだろうということを予想として掲げておく。また、勾配条件を満たすものが他にもあるとしても可能な拡散係数の係数の範囲が連立一次不等式によって決まるので、巨視的に可能なもので勾配系からは導かれないものがあることは変わらない。

参考文献

- [1] T.Funaki, K.Handa and K,Uchiyama: Hydrodynamic limit of one-dimensional exclusion processes with speed change, Ann. Probab., **19**, pp.245-265, 1991
- [2] S.R.S. Varadhan and Horng-Tzer Yau: Diffusive Limit of Lattice Gas with mixing conditions, ASIAN J. MATH. vol. 1, No. 4, pp.623-678, 1997
- [3] 内山 耕平, 舟木 直久: ミクロからマクロへ 2 格子気体の流体力学極限, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2002
- [4] H.Spohn: Large Scale Dynamics of Interacting Particles, Springer, 1991
- [5] J.R.Norris: Markov Chains, Cambridge series in Statistical and Probabilistic Mathematics, 1997
- [6] D.Williams: Probability with Martingales, Cambridge University Press, 1991