応用数学・確率論合同セミナー
20051027(木)16:00-17:30 @総合棟 801
舟木直久氏（東大・数理）　　粒子系に対する流体力学極限

予備知識を最小限に，有限粒子系の Markov chain で説明．できれば仕事のヒントになるように technical なことも．
（服部注：若い諸君にも分かるように，という依頼に応えて下さいました.）

1 目次

§1. 流体力学極限とは
§2. 熱方程式に対する entropy 法.
Varadhan の entropy method まで行きたいが，いきなり粒子系は難しいので，まずマクロ系で entropy 法の説明.（ミクロのランダム系からマクロの偏微分方程式を導くのが流体力学極限だが，そのときの Lyapnov function が entropy 法．それをマクロなほうで紹介.）
§3. 連続時間 Markov chain
マクロ系はミクロなランダム系のスケール極限として得られるが，ミクロ系の定式化のために Markov chain の要約：generator，ランダム系の構成，不変測度（時間無限での dynamics の収束先），対応する Dirichlet form
§4. 格子気体に対する entropy 法
ミクロ系での entropy 法（マクロの entropy 法とよく対応している）.
§5. その他の結果

2 流体力学極限とは

流体力学極限（用語は，物理で流体の方程式を出すときと構造が似ている，という意味だけで流体力学の方程式に限らない）

例：煙．マクロな（人間に見える）視点では，密度の時空依存性が拡散方程式に従う.

ミクロな視点では多数の煙の粒子の運動（ある法則で相互作用しながら時間発展している）．このとき，（ある種の平衡状態を key point として＝ある種のエルゴード性の下で）マクロな視点での拡散方程式を導きたい.

ミクロ系とマクロ系での時間および空間のスケールの大きな違い．時空のスケールの極限でミクロ系からマクロ系を導く．鍵は，マクロ系の 1 単位の時間はミクロ系にとって非常に長い時間なので，ミクロ系にとっては平衡状態に近いこと（局所平衡状態）．平衡状態とは，ランダム系だが，多い少ないの分布が分かること．いくつかの平均量を決めると確率的に状態が一つ決まる.

エルゴード定理（確率に関する平均と時間平均が等しいこと）によってミクロの情報が消されてマクロの決定論的方程式を得る，というのが流体力学極限のイメージ．ただし実際の証明はたいへんで，証明のために，各時刻での状態の平衡状態からの距離をリャプノフ関数（エントロピー）として導入する.

3 熱方程式に対する entropy 法.

拡散方程式：
$\dot{u} = u'', x \in [0,1]$
$u[0,x] = u_0(x) > 0$
$\left.\dfrac{\partial u}{\partial t}\right|_{x=0,1} = 0$ (Neumann, or periodic boundary condition)

Note: 保存則 $\int_0^1 u(t,x)dx = \text{constant in } t$

エントロピー：$H(u) = \int_0^1 u(x) \log u(x) dx$

Note. $\int_0^1 u(x)dx = 1$, $u(x) > 0$ ならば $x \log x$ は下に凸なのでイェンセンの不等式から $H(u) \geqq 0$

$$\frac{d}{dt} H(u(t)) = \int_0^1 \dot{u}(\log u + 1) dx$$

保存則と熱方程式と部分積分と境界条件から

$$\frac{d}{dt} H(u(t)) = -4 \int_0^1 \left(\frac{\partial \sqrt{u}}{\partial x} \right)^2 dx \leqq 0$$

各時刻のこの値を entropy production と呼ぶ．被積分関数は $\sqrt{u}$ の Dirichlet form.

この時間に関する単調性から $H(u(t))$ は $t \to \infty$ である値に収束．そのとき $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$，よって u は定数関数（平衡状態）.

これを粒子系に移し替えたいというのが Varadhan のアイデア.（元をたどるとボルツマンの目標としたこと.）

4 連続時間 Markov chain

参考書．たとえば Norris, *Markov chain*.

・状態空間 $\mathcal{X} \ni x, y$；ここでは要素数 $N = \sharp\mathcal{X}$ の有限集合とする．

・generator

「jump の確率」$\{q_{x,y} \geqq 0 \mid x \neq y \in \mathcal{X}\}$

$q_{xx} = -\sum_{y \neq x} q_{xy} \leqq 0$

$N \times N$ 行列 $Q = (q_{xy})_{x,y \in \mathcal{X}}$ が時間発展を決める．

書き換え：$\psi:\ \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ に対して $(Q\psi)(x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} q_{xy}\psi_y = \sum_y q_{xy}(\psi(x) - \psi(y))$

一般に，これを満たす operator（$\mathcal{X}$ 上の関数を $\mathcal{X}$ 上の関数に移す）Q を Markov chain の generator という．

・transition porbability

$P(t) = e^{tQ} = (p_{xy}(t))$, $t \geqq 0$ 確率行列（$p_{xy}(t) \geqq 0$ および $\sum_y p_{xy}(t) = 1$）

Kolmogorov の拡張定理から $\{X(t), t \geqq 0\}$ は $\mathcal{X}$-valued なパラメータ t を持つ確率変数で Prob$[\ X(t) = y \mid X(0) = x\ ] = p_{xy}$ を満たすものが存在する．これが Q に対応する Markov chain.

Markov chain の別の構成のしかた（pathwise な確率論的構成）：T がパラメータ q の指数分布 $E(q)$ に従うとは $P(T > t) = e^{-qt}$, $t > 0$, の意味.（このとき E$[\ T\ ] = q$.）

T_y の分布が $E(q_{xy})$ とする．$\min\{T(y)\} = T(y_0)$ のとき，

$X(t) = x$, $t < T(y_0)$, $X(t) = y_0$, $t \geqq T(y_0)$,

と定義しても同じ Markov chain が作れる．

さらに別の言い方：$\forall\psi:\ X \to \mathbb{R}$ に対して $\psi(X(t)) - \psi(X(0)) - \int_0^t Q\psi(X(s))ds$ が martingale になるもの，としても同じ．

・invariant measure (stationary equilibirum), reversible measure

$\nu = (\nu_x)_{x \in \mathcal{X}} \in P(\mathcal{X})$（つまり，$\nu$ が確率測度ということ）が invariant measure とは $\nu Q = 0$ （ν を横ベクトルと思ったとき）なること．

これは Q が irreducible のとき $\nu P(t) = \nu$（すなわち，$\sum_{x \in \mathcal{X}} \nu_x P_{xy}(t) = \nu_y$）, $\forall t \geqq 0$, とも同値.（実際，後者が成り立てば，t で微分して $t = 0$ とおくと前者を得る.）

ν が reversible とは detailed balance condition がなりたつこと，すなわち，$\nu_x q_{xy} = \nu_y q_{yx}$, $\forall x, y$, が成り立つこと．これは $\nu_x p_{xy}(t) = \nu_y p_{yx}(t)$, $\forall t, x, y$, と同値.

（reversible ならば x について和を取ることで invariant が分かる.）

reversible は，さらに，Dirichlet form が symmetric，すなわち，$-(f, Qg)_\nu = -(Qf, g)_\nu$, $\forall f, g : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, と同値．ここで $(f, g)_\nu = \sum_{x \in \mathcal{X}} f(x) g(x) \nu(x)$.

5　格子気体に対する entropy 法

格子気体（川崎ダイナミクス＝保存量がある場合）の簡単な場合.

格子上のランダムウォークの集まりで，exclution rule（各格子点には高々1 粒子のみ）を課した系.

1 次元格子 $\Gamma_N = 1, 2, \cdots, N$, periodic boundary condition $(0 = N)$．そのいくつかの点に粒子があって，それぞれランダムウォークするが，2 粒子が重なることは（もちろんすれ違うことも）ない.

状態空間 $\mathcal{X}_N = \{\eta = (\eta_i)_{i \in \Gamma_N} \mid \eta_i = 0 \text{ or } 1\}$

ここで $\eta_i = 1$ は site i に粒子があり，$\eta_i = 0$ 粒子がないことを表す.

（粒子数が保存されるので $\displaystyle\sum_{i=1}^{N} \eta_i = m$ を満たす空間に状態空間 $\mathcal{X}_N$ を制限しても良いがここではそうしない.）

generator:

$$L_N \psi(\eta) = \sum_{i=1}^{N} C_{i,i+1}(\eta)(\psi(\eta^{i,i+1}) - \psi(\eta))$$

ここで $C_{i,i+1}(\eta) > 0$ （さっきの言葉では $q_{\eta, \eta^{i,i+1}}$）は given，また，$\eta^{i,i+1}$ は η の site i と site $i+1$ の粒子の有り無しを交換して得られる configuration．この generator に対応する Markov chain が micro な粒子の運動．これの時間空間のスケールを変えながら $N \to \infty$ をとることが興味.

・reversible な状況で考える

・$N^2 L_N$ に対応する jump rate を $\eta^N(t) = \{\eta_i^N(t)\}_{i \in \Gamma_N}$ とすると，対応する $\mathcal{X}_N$ 上の Markov chain を Kawasaki dynamics と言う.

（今年ノーベル賞を取った Glauber の Glauber dynamics は保存則が無くて粒子数が変化する場合）

・scaling

空間 N，時間 N^2 のとき diffusive scaling

macroscopic density field: $u^N(t, x) = \dfrac{1}{N} \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \eta_i^N(t) \delta_{i/N}(dx)$, $x \in [0, 1) = T^1$ なる random measure．ここで δ は単位分布.（u^N は空間を全長 1 に規格化して，粒子のある位置に weight $1/N$ をおいたということ.）

問題 $u^N(t, x)$ は $N \to \infty$ でどうなるか？

$\forall f \in C^\infty(T^1)$: test function

$$\langle u^N(t), f \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \eta_i^N(t) f(i/N)$$

ここで，上で注意した Markov 過程とマルチンゲールの関係を使うと

$$\langle u^N(t), f \rangle = \langle u^N(0), f \rangle + \int_0^t b^N(\eta_s^N) ds + M_t^N;$$

ここで $b^N(\eta) = N^2 L_N(\langle u, f \rangle)(\eta)$ とおいた．また，M_t^N は martingale.

$\pi_{i,i+1}\psi(\eta) = \psi(\eta^{i,i+1}) - \psi(\eta)$ とおくと，c_{ij} が有界などの条件があれば

$$\langle M^N \rangle_t = N^2 \sum_i c_{i,i+1} (\pi_{i,i+1} \langle u, f \rangle)^2 \to 0, \quad N \to \infty$$

となる.（真ん中の形をカレドシャンと呼ぶ.）$1/N$ のべきを数えることで 0 への収束が分かる（下記計算参照）.

b^N について．$c_{i,i+1}$ が i によるとやっかいなので i によらず 1 とすると，f を滑らかとしてテーラー展開を使えば

$$\begin{aligned} & b^N(\eta) = N^2 \sum_i \pi_{i,i+1} \langle u, f \rangle \\ & \approx \sum_i f'(i/N)(\eta_i - \eta_{i+1}) = \sum_i (f'(i/N) - f'((i-1)/N))\eta_i \\ & \approx \frac{1}{N} \sum_i f''(i/N)\eta_i = \langle u, f'' \rangle \end{aligned}$$

となって $O(N^0)$ の量であることが分かる．

これから

$$\left\langle u^N(t), f \right\rangle = \left\langle u^N(0), f \right\rangle + \int_0^t \left\langle u^N(s), f'' \right\rangle ds$$

を得る．話をはしょると，もし，$u^N(t,dx) \to u(t,x)dx$ ならばこれは拡散方程式の弱解になっている！

（実際は tightness を言って，uniqeness などを言う.）

$c = 1$ でないときは，gradient replacement ということをやらないといけない (Varadhan, Varadhan–Yau Asian Math J. vol 1)．ここのようにうまくいくのは gradient condition がある場合だが，川崎ダイナミクスでは gradient condition は普通は成り立たない．

gradient replacement をやるときは log Sobolev ineq などで spectral gap を使わないといけない．

一般には averaging をやらないといけない（その結果，variational formula から拡散係数に u 依存性が出て非線形方程式が出る）．そのときに entropy 法を用いて $N \to \infty$ で平衡状態に近づくことを言って，エルゴード性を使う．

（時間切れ！）

最近，拡散係数と Green-Kubo formula の関係，さらに滑らかさ，なども分かってきた．

非対称の場合はスケーリングが変わって，Burger's eq. を得る．(Hamilton-Jacobi 方程式など)

参考文献．舟木直久，ミクロからマクロへ，Springer 東京．