ミクロとマクロの時間発展をつなぐ数学 -流体力学極限-

東京大学大学院数理科学研究科　佐々田槙子 *

2016 年 7 月 30 日

概 要

原子や分子の運動を記述するミクロな世界の時間発展法則と，流体や気体，熱などの拡散や輸送といったマクロな世界の時間発展を記述する偏微分方程式の間にはどのようなつながりがあるのでしょうか？この関係を，確率論の手法を用いて厳密に明らかにするのが，流体力学極限と呼ばれる時空間変数に対するスケール極限の手法です．

流体力学極限は，ミクロな系を与えるランダムな大規模相互作用粒子系から，決定論的な発展方程式を導出する，大数の法則の一種です．これに付随する中心極限定理や大偏差原理も自然に考察することができ，これらは統計物理における散逸揺動定理や大偏差関数の厳密な基礎付けを与えます.

流体力学極限の理論は，２０年ほど前に，系のエントロピーの時間発展を調べるという普遍的な手法が生み出されたことで大きく発展してきました．その後，これまで多くの興味深いモデルに関して「ミクロな系の相互作用が，マクロな系の時間発展をどのように規定するのか」という非常に基本的な問いに，答え続けています.

本講演では，流体力学極限の基本的な考え方や，重要なモデルに対する結果を紹介します．また，最近の話題として，古典力学系への流体力学極限の応用や，異常拡散のミクロな相互作用粒子系からの導出などについても述べる予定です．これらのテーマは，今後大きな発展が期待されますので，学生の皆さんにぜひ興味を持って取り組んでもらいたいと思います.

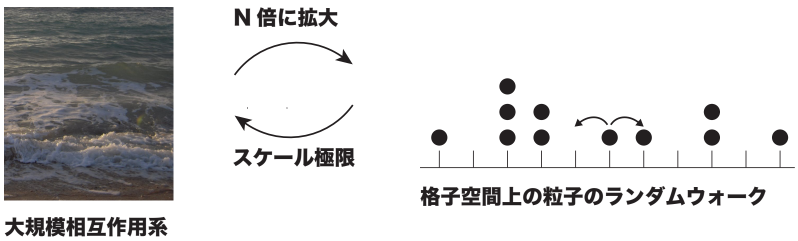
1　流体力学極限の Key となる考え方

流体力学極限は，統計物理学を数学的に厳密に基礎付ける重要な手法の一つである．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

*sasada@ms.u-tokyo.ac.jp

極限と呼ばれている．この手法の本質的なアイディアは，大規模相互作用系は，その性質ゆえに，マクロな（少数の）パラメータで特徴づけられる平衡状態を持ち，さらにその平衡状態を特徴づけるパラメータは時空間の各点で異なり（局所平衡状態），それが滑らかに連なって全体として平均化していく，という描像にある．この局所平衡による平均化の構造は，元々，非平衡統計力学において，流体の方程式 (Euler 方程式，Navier-Stokes 方程式等）を Boltzmann 方程式から導出する際に用いられたものであり，流体力学極限の名前もそこに由来するものである．流体方程式とのつながりについては [1] に詳しく紹介されている．

	ミクロ	マクロ
物理量	各分子の位置・運動量 etc	密度，圧力，温度，流体の速度 etc
系の自由度	膨大	少数
時間発展	各要素間の複雑な相互作用	偏微分方程式



格子気体モデルの流体力学極限のイメージ

1.1 大数の法則

膨大な自由度を持つ系から，その「平均的な」情報として少数のパラメータを得るという描像は，確率論の最も基本的な定理である「大数の法則」と非常に相性が良い．「大数の法則」は，サイコロを繰り返し投げ続けると出た目の平均値は，回数をどんどん増やせば，サイコロの目の「期待値」に収束するという定理である．ここで，各回に出た目の全ての情報をミクロな情報，その平均値をマクロな情報と考えれば，ミクロな情報は非常に膨大であるが，そのどれか一つを失ったところでマクロな情報には（ほとんど）影響がない．しかし，マクロな情報は確かにミクロな情報から定まっており，ミクロな情報の自由度が大きくなればなるほど（すなわちサイコロを投げる回数を増やすほど），マクロな情報の揺らぎは小さくなる．こうして，ミクロな世界の自由度の膨大さこそがマクロな世界の秩序を生み出すという描像が正当化されるのである．

より一般には，大数の法則は以下のような主張である．独立同分布な確率変数列 $X_1, X_2, \ldots$ が $E[X_1] = m, E[(X_1 - m)^2] = v$ を満たすとき，$S_n = \sum_{k=1}^n X_k$ に対して，

$$\frac{S_n}{n} \to m \qquad (n \to \infty).$$

ただし，$E[\cdot]$ は期待値を表すものとする．厳密にはこの収束の意味は２通りあり，

$$P(\lim_{n\to\infty} \frac{S_n}{n} = m) = 1$$

を大数の強法則,

$$\forall \epsilon > 0, \lim_{n\to\infty} P(|\frac{S_n}{n} - m| > \epsilon) = 0$$

を大数の弱法則と呼ぶ.

大数の法則は, 中心極限定理，大偏差原理と合わせて極限定理と呼ばれ，これらは確率論の最も基本的で重要な定理である．中心極限定理，大偏差原理の主張，及びこれらの極限定理と流体力学極限との関わりについては [4] に詳しく述べたので，参照いただきたい.

より一般に, 可測空間 $(S, \mathcal{S})$ に値をとる確率変数列 $Y_1, Y_2, \ldots$ がある $y \in S$ に関して

$$Y_n \to y \qquad (n \to \infty)$$

という定理は確率論の様々な場面で現れる．収束の意味は状況に応じて異なるが，こうした定理は「極限がランダムでない」という広い意味で大数の法則の一種と考えられる．流体力学極限も,「ランダムに時間発展する膨大な数の粒子の動き」から「偏微分方程式」というランダムさを持たない対象をある種の極限として導出する「大数の法則」なのである.

1.2 時空間のスケール極限

「ミクロな系の時間発展をマクロな世界から見る」とは，時空間変数にスケールを変換し，そのスケーリングパラメータを十分大きく（または小さく）することに他ならない．時間変数と空間変数について適切なスケール比をとることで，マクロな世界から見た時間発展を導出することができるのである．このことを，１次元のランダムウォークの例で確認しよう.

1 次元の格子 $\mathbb{Z}$ 上の単純ランダムウォークは時刻 0 で原点を出発し，時刻 n で位置 x にいたとすると，時刻 $n+1$ では $x+1$ または $x-1$ にそれぞれ確率 $\frac{1}{2}$ で移動する，という系である．ただし，各時刻で左右どちらに移動するかは独立である.

単純ランダムウォークの時刻 n での位置を S_n で表す．$X_n = S_n - S_{n-1}$ とすれば，確率変数列 $X_1, X_2, \ldots$ は独立で，$P(X_n = 1) = P(X_n = -1) = \frac{1}{2}$ を満たし．$S_0 = 0$, $S_n = S_{n-1} + X_n = \sum_{i=1}^n X_i$ となることは明らかである.

単純ランダムウォーク S_n をミクロな世界の粒子（原子または分子）の動きのモデルと考えて，この動きをマクロな世界から見てみることを考えよう.

マクロな世界とミクロな世界の空間変数時間変数との比をどちらも $\frac{1}{N}$ としよう．このとき，<u>マクロな時刻</u> t での粒子の <u>マクロな位置</u> は $\frac{S_{[Nt]}}{N}$ となる．ここで，スケールの比 N を無限大にした極限を考えると，S_n が独立で同分布を持つ確率変数の和で与えられていることから，大数の強法則により, 確率 1 で $\lim_{N\to\infty} \frac{S_{[Nt]}}{N} = 0$ となることがわかる．つまり，すべての <u>マクロな時刻</u> t で粒子の <u>マクロな位置</u> は 0 となり，この場合もマクロな世界でみると，粒子は動いていないことがわかる.

今度は，マクロな世界とミクロな世界の空間変数の比を $\frac{1}{N}$, 時間変数の比を $\frac{1}{N^2}$ とする．このとき，<u>マクロな時刻</u> t での粒子の <u>マクロな位置</u> は $\frac{S_{[N^2t]}}{N}$ となる．実は，S_n に対する中心極限定理から，$\lim_{N\to\infty} \frac{S_{[N^2t]}}{N}$ は分布の意味で収束し，収束先の分布は平均 0，分散 t の正規分布となることがわかる．さらに，$\tilde{S}^N(t) := \frac{S_{[N^2t]}}{N}$ として，$\tilde{S}^N$ を $[0, \infty)$ から $\mathbb{R}$ へのランダムな関数と見ると，これは $N \to \infty$ の極限でブラウン運動に収束することが知られ

物性研究・電子版 Vol. 6, No. 4, 064209 (2017年11月号)

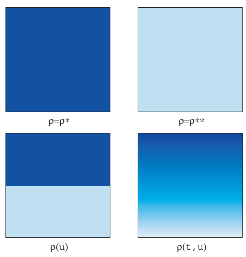
ている．つまり，単純ランダムウォークは，空間変数を $\frac{1}{N}$，時間変数を $\frac{1}{N^2}$ とスケール変換したマクロな世界では $(N \to \infty$ の極限で）ブラウン運動に見えることがわかった．１次元のランダムウォークの時空間スケール変換については [3] に詳しく述べたので，参照いただきたい．

この例からわかるように，時空間変数を正しい比でスケール変換しなければマクロな粒子の「面白い」運動は見えてこない．さらに，後述する多粒子ランダムウォークの場合，粒子全体の平均的な動きをみたいのか，もしくは平均的な動きからの揺らぎをみたいのか，あるいは特定の１粒子の動きをみたいのか，など着目している現象によって，適切な時空間変数のスケール比は変わってくる．

1.3　大規模相互作用系の局所平衡

ある確率過程にスケール変換をほどこし，そのスケーリングパラメータに対する極限操作によって別の時間発展を導出する，という手法は，流体力学極限に限らない．流体力学極限を特徴付けるのは「局所平衡」の成立を経由することである．より正確には,（十分よい性質を持つ）大規模相互作用系に対して成立が期待される次のような性質を，数学的に厳密に定義し証明することが流体力学極限の鍵である．

- 平衡状態は，少数のマクロなパラメータで特徴付けられる
- 非平衡状態でも，マクロな時空間の各点の状態は，各点ごとに異なるパラメータで特徴付けられる平衡状態に ”十分近い ”(局所平衡状態)
- 局所平衡状態を表すマクロなパラメータは時間変数 t と空間変数 u に対し，滑らかに時間発展する



局所平衡の考え方について理解を深めるには，[2] が参考になる．

2　流体力学極限の厳密な主張と証明

本節では，流体力学極限が数学的にはどのように定式化され，また証明されるのかを抽象的に理解し，さらに具体的なモデルを通してみていこう．具体的には，対称単純排他過程（Symmetric Simple Exclusion Process, SSEP）と呼ばれる相互作用のある多粒子ランダムウォークのモデルを考える．

物性研究・電子版 Vol. 6, No. 4, 064209（2017年11月号）

2.1 流体力学極限の典型的な要素と証明の流れ

流体力学極限の主要な登場人物は以下のものである：

- スケーリングパラメータ N
- ミクロな系の時間発展を定める確率過程 η^N（パラメータ N ごとに定まる）
- マクロパラメーター＝ミクロな系の平衡状態を特徴付けるパラメーター＝ミクロな系の保存量（１つとは限らない）
- マクロパラメータのミクロな系から定まる経験分布の マクロスケールでの 時間発展 $\pi^N = \pi^N(t)$

流体力学極限を特徴付ける要素である局所平衡の成立を示すには，まずマクロパラメータが何であるかを明らかにする，すなわち，平衡状態を特徴付けることが必要である．ミクロな系の保存量が明らかな場合にはこれは難しくないが，一般的な古典力学系などではけして容易なことではない．

マクロな系の時間発展を導出するには，前節でみたように，$\pi^N(t)$ を定めるための時空間のスケーリングの取り方が重要である．流体力学極限の主張は，初期時刻でのマクロパラメータの経験分布 $\pi^N(0)$ が $N \to \infty$ で $\rho(0,u)du$ に収束するならば，任意の時刻 t で $\pi^N(t)$ は $N \to \infty$ で $\rho(t,u)du$ に収束し，関数 $\rho = \rho(t,u)$ の時間発展はある偏微分方程式で与えられる，というものである．すなわち，初期時刻において，ミクロな系の状態がマクロパラメータ $\rho(0,u)$ で近似されているならば，時間発展した後のミクロな系の状態も，マクロパラメータ $\rho(t,u)$ によって近似することができる，ということである．これはまさに局所平衡が任意の時刻で成立することを表してる．

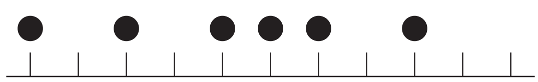
$$
\begin{array}{lcccl}
 & \text{ミクロな系} & & \text{マクロな系} & \\
 & \pi^N(0) & \xrightarrow[N\to\infty]{\text{定理の仮定}} & \rho(0,u) & \\
\text{時間発展（確率過程）} & \downarrow & & \downarrow & \text{時間発展（PDE）} \\
 & \pi^N(t) & \xrightarrow[N\to\infty]{\text{定理の結論}} & \rho(t,u) &
\end{array}
$$

次に，これらの定理が具体的なモデルでどのように定式化されるのかをみてみよう．

2.2 対称単純排他過程（Symmetric Simple Exclusion Process）

2.2.1 モデル

d 次元格子空間 $\mathbb{Z}^d$ 上を互いに排他的な相互作用をしながら移動する粒子の系を考える．特に $\mathbb{Z}^d$ の各点 x には，粒子は高々一つしか存在できないものとする．この時，系の状態空間は $\chi^d := \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$ となる．このように排他的な相互作用をする粒子の配置により与えられる相互作用粒子系は，総称して排他過程とよばれる．状態空間の元を，$\eta = (\eta_x)_{x\in\mathbb{Z}^d} \in \chi^d$: で表す．すなわち，$\eta_x$ は，状態 η のときの場所 x の粒子の数を表す．

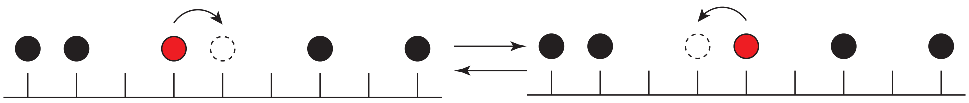


$d = 1$ の粒子の配置（状態空間の元）の例

物性研究・電子版 Vol. 6, No. 4, 064209（2017年11月号）

対称単純排他過程の時間発展規則は，次のように説明される．

- 各粒子は期待値１の指数分布に従う，独立な時計（待ち時間）を持つ
- いずれかの粒子の時計が鳴ると，その粒子は隣接点の中から確率 $\frac{1}{2d}$ で行き先を一つ選ぶ
- 排他規則にしたがい，選んだ行き先に粒子がいなかった場合のみ粒子はそこに移動する
- 時計は全てリセットされ，次の（いずれかの粒子の）時計が鳴るのを待つ



時間発展の様子：可逆である

より厳密には，対称単純排他過程 $\eta(t)$ は χ^d 上のマルコフ過程で以下の生成作用素 L により定まるものとして定義される．

$$(Lf)(\eta) = \frac{1}{2d} \sum_{x,y \in \mathbb{Z}^d, |x-y|=1} 1_{\{(\eta_x,\eta_y)=(1,0)\}} (f(\eta^{x,y}) - f(\eta))$$

ここで，$f : \chi^d \to \mathbb{R}$，$|x-y| := \sum_{i=1}^d |x_i - y_i|$，

$$\eta_z^{x,y} = \begin{cases} \eta_z & \text{if } z \neq x, y, \\ \eta_y & \text{if } z = x, \\ \eta_x & \text{if } z = y, \end{cases}$$

とする．

2.2.2　不変測度の特徴づけ

流体力学極限の証明において，最初の重要なステップが不変測度の特徴づけである．単純対称排他過程は，粒子数（粒子の密度）を唯一つの保存量として持ち，これが平衡状態を特徴づけるマクロなパラメータとなる．実際，平行移動不変な系の不変測度は，粒子の密度 ρ で特徴付けられたベルヌーイ測度の直積測度の重ね合わせとなる．

そこで，粒子の密度分布に関するマクロな時間発展方程式を導出するため，経験測度 π_t^N をミクロな系に**拡散型スケーリング**でスケール変換を施した $\mathbb{R}^d$ 上の粒子の密度分布として次のように定義する:

$$\pi_t^N(du) = \frac{1}{N^d} \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \eta_x(N^2 t) \delta_{\frac{x}{N}}(du) \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$$

ここで，$\mathcal{M}(\mathbb{R}^d)$ は $\mathbb{R}^d$ 上の測度の集合とする．すなわち，$\mathbb{R}^d$ 上の粒子の密度分布を $\mathbb{R}^d$ 上の測度と考えている．

2.2.3 対称単純排他過程に対する流体力学極限

定理 2.1. (cf.[7])
ある可測関数 $\rho_0 : \mathbb{R}^d \to [0,1]$ が存在し，

$$\pi_0^N(du) \to \pi_0(du) = \rho_0(u)du \quad N \to \infty \quad \text{in prob}$$

であると仮定する．このとき，任意の時刻 $t > 0$ で，

$$\pi_t^N(du) \to \pi_t(du) = \rho(t,u)du \quad N \to \infty \quad \text{in prob}$$

が成り立つ．ただし，$\rho(t,u)$ は以下の熱方程式の一意解とする:

$$\begin{cases} \partial_t \rho(t,u) = \dfrac{1}{2d}\Delta\rho(t,u) \\ \rho(0,\cdot) = \rho_0(\cdot) \end{cases}$$

ここで，in prob は確率収束の意味である．すなわち，この定理は，初期時刻の経験測度の分布が，ある deterministic な関数を密度とする測度に収束していると仮定すると，時間発展したあとの経験測度も，ある deterministic な関数を密度とする測度に収束し，さらに，その関数は熱方程式の解となっている，ということを主張している．この定理の持つ重要な意義の一つは，ランダムなミクロな系から決定論的なマクロな時間発展を導出している点である．また，可逆なミクロな系から非可逆なマクロな時間発展を導出しているという点でも重要な結果である．

2.3 流体力学極限の証明

流体力学極限の証明には，Guo らにより導入されたエントロピー法（[6]）と Yau により導入された相対エントロピー法（[10]）という 2 つの方法が知られている．ここでは，エントロピー法のアイディアを簡単に紹介する．講演では時間があれば，相対エントロピー法のアイディアについても紹介したい．

エントロピー法による証明は次の 3 つを示すステップからなる：
Step 1.$\{\pi^N\}_{N\in\mathbb{N}}$ から誘導されるパス空間上の確率測度の列 $\{Q^N\}_{N\in\mathbb{N}}$ の緊密性（tightness）
Step 2. $\{Q^N\}_{N\in\mathbb{N}}$ の部分列の極限 Q^* の，時間発展方程式（SSEP では熱方程式）による特徴づけ.
Step 3. Step2 で得られた時間発展方程式の弱解の一意性.

Step 1 の証明は，広いクラスに適応できるいくつかの手法が知られている（[7] Section 5.1，Section 7.6 等）．また，Step 3 に関しては，得られた時間発展方程式の性質により様々な手法があり，偏微分方程式の研究の観点からも多くの結果がある（[7] Appendix 2.4 等). ただし，特に多次元の問題を扱う際には，証明が困難な場合もあり，一意性を仮定とする場合もある．通常最も本質的かつ困難な部分は Step 2 の証明である．Step2 のアイディアについては，講演の中で詳しく紹介する予定である．特に，勾配型モデルと呼ばれる比較的証明が容易なモデルと，非勾配型モデルと呼ばれる一般的なモデルに対する証明の難易度は大きく異なる．非勾配型モデルに対する流体力学極限については，より深い理解が求められている．

3 様々な魅力的なモデルと今後の課題

格子気体モデル以外にも，連続あるいは離散的な界面の時間発展を記述する界面モデル，連続的なエネルギーの時間発展モデル，ハミルトン系に確率的な摂動を加えたモデル，ヤング図形の時間発展モデルなど，非常に多様なモデルに対する流体力学極限が研究されている．しかし，厳密な証明が得られているモデルはそれほど多くはない．特に，保存量が複数のモデルや連続値の変数を持つモデル，退化したモデル，古典力学系に由来するモデルなどは，今後の発展がおおいに期待される．そうした発展途上にあるモデルに関する結果をいくつか紹介する．

3.1 退化放物型方程式の流体力学極限による導出

粒子数により特徴づけられた状態空間が, 系の時間発展を表すマルコフ過程について既約でない格子気体モデルは, 退化した飛躍率を持つ格子気体モデルと呼ばれる．こうしたモデルは，高密度な粒子の運動やガラス転移のモデルとして，物理学の立場からは 1980 年代に導入されていたが，エルゴード性が失われるこのようなモデルの流体力学極限を示すことは非常に困難であった．2008 年に Gonçalves ら ([5]) は，相対エントロピー法を用い，退化した飛躍率を持つある排他過程について流体力学極限を示し，極限方程式として多孔媒質方程式を導いた．

佐々田 ([9]) では，Gonçalves らの手法を応用し，排他条件を課さないモデルに対して結果を拡張し，極限方程式として様々な退化した放物型方程式を得た．

しかし，どちらの場合もマクロパラメータの初期条件に関する仮定が強く，熱方程式と本質的に異なる有限伝播性が現れるような初期条件のもとでは未解決である．

3.2 （非）調和振動子鎖におけるエネルギーに関する極限定理

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．

Olla-佐々田（[8]）では，系に十分なエルゴード性を与える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．平衡揺動定理は，流体力学極限が大数の法則であるのに対し，この中心極限定理にあたるものである．本結果は非調和振動子鎖に対し唯一知られている厳密なスケール極限の結果である．

一方，調和振動子鎖に運動量を保存するような摂動を加えたモデルに対しては，通常の熱方程式ではなく Fractional heat equation を極限に持つことが最近になってわかってきた．この極限方程式の指数には普遍性があると考えられており，これを非調和振動子の場合に示すことは今後非常に重要な課題である．

参考文献

[1] 舟木直久, 「数理科学」, **340**, 1991 年 10 月号.

[2] 舟木直久, 「数理科学」, **347**, 1992 年 5 月号.

[3] 佐々田槙子, 「数理科学」, **636**, 2016 年 6 月号.

[4] 斎藤毅・河東泰之・小林俊行編, 数学の現在 e, 第 3 講, 37–52.

[5] P. Gonçalves, C. Landim and C. Toninelli, *Hydrodynamic limit for a particle system with degenerate rates*, Ann. Inst. H. Poincaré, Probab. Statis., **45** (2009), 887–909.

[6] M.Z. Guo, G.C. Papanicolaou and S.R.S. Varadhan, *Nonlinear diffusion limit for a system with nearest neighbor interactions.*, Comm. Math. Phys., **118** (1988), 31–59.

[7] C. Kipnis and C. Landim, *Scaling Limits of Interacting Particle Systems*, 1999, Springer.

[8] S. Olla and M. Sasada, *Macroscopic energy diffusion for a chain of anharmonic oscillators*, *Probab. Theory and Relat. Fields*, **157** (2013), 721–775.

[9] M. Sasada, *Hydrodynamic limit for particle systems with degenerate rates without exclusive constraints*, ALEA Latin American Journal on Probability and Math. Stat., **7** (2010), 277–292.

[10] H.T. Yau, *Relative entropy and hydrodynamics of Ginzburg-Landau models*, Letters. Math. Phys., **22** (1991), 63–80.