統計力学におけるスケール極限

内山 耕平 (東京工大・理)

I Brown 運動と Random Walk

1. 確率論の表現形式，基本事項
am

1-1. $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ を確率空間とする：
Ω は集合、$\mathcal{F} \subset 2^\Omega$ は σ-代数、P は $\mathcal{F}$ 上の測度で $P(\Omega) = 1$.
「If $A_j \in \mathcal{F}$ and $A_j \cap A_k = \emptyset$, then $P(\cup_{n=1}^\infty A_n) = \sum_{n=1}^\infty P(A_n)$.」

1-2. Ω 上の $\mathbf{R}$-値可測関数を確率変数という.
X が P-可積な確率変数のとき $E[X] = \int X dP$ と表す.
$E[X]$ を X の平均または期待値という.

1-3. 事象 $A \in \mathcal{F}$ が確率変数を用いて表わされるとき，例えば
確率変数 X と $\mathbf{R}$ の Borel 集合 Γ とによって $A = \{\omega \in \Omega : X(\omega) \in \Gamma\}$ と表されるとき $P(A)$ を $P[X \in \Gamma]$ のように書く：

$$P[X \in \Gamma] = P(\{\omega \in \Omega : X(\omega) \in \Gamma\}) = P(X^{-1}(\Gamma)) = P \circ X^{-1}(\Gamma).$$

$P \circ X^{-1}$ を X の $((\mathbf{R}, \mathcal{B}(\mathbf{R}))$ 上に誘導する）分布という.

例（コイン投げの実験）$X_1, X_2, X_3, \ldots$

$$X_k = 1\ (表),\quad = 0\ (裏).$$

この実験を表現する確率空間：$\Omega = \{0,1\}^{\mathbf{N}}$, $\omega = (\omega_1, \omega_2, \ldots) \in \Omega$,
μ を $\{0,1\}$ 上の確率測度で $\mu(\{0\}) = \mu(\{1\}) = 1/2$ とし、
$P = \mu \times \mu \times \mu \cdots$,（無限直積測度）
このとき $X_n(\omega) = \omega_n$ とればよい.

あるいは：$\Omega = [0,1)$, $\mathcal{F}$ は $[0,1)$ の Borel 集合全体、
P は $[0,1)$ の Lebegue 測度とする. $\omega \in [0,1)$ の２進展開を
$0.\omega_1\omega_2\cdots$ とし、$X_n(\omega) = \omega_n$ とればよい.

2. 大数の法則
$X_1, X_2, \ldots,$ を上の例の確率変数列とし、

$$S_n = X_1 + X_2 + \cdots + X_n$$

とおく.

弱法則（確率収束）：任意の $\varepsilon > 0$ に対し、

$$\lim_{n\to\infty} P\left[\left|\frac{1}{n}S_n - \frac{1}{2}\right| < \varepsilon\right] = 1. \quad \text{(Bernoulli, 1713)}$$

強法則　（概収束）

$$P\left[\lim_{n\to\infty}\left|\frac{1}{n}S_n - \frac{1}{2}\right| = 0\right] = 1. \quad \text{(Borel, 1909)}$$

（$\omega \in \Omega$ を与えるごとに無限列 $X_{(}\omega), X_2(\omega), \ldots$ が定まることに注意する.）

3. 中心極限定理と Donsker の普遍原理

確率変数列

$$\frac{2}{\sqrt{n}}(S_n - n/2)$$

の（$(\mathbf{R}, \mathcal{B}(\mathbf{R}))$ 上の）分布は $N(0,1)$（標準正規分布）に収束：

$$P\left[\frac{2}{\sqrt{n}}(S_n - n/2) \in [a,b]\right] \to \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_a^b e^{-x^2/2}dx. \quad (a < b)$$

Y を標準正規分布に従う確率変数とするとき、上の事実を
$\frac{2}{\sqrt{n}}(S_n - n/2)$ は Y に法則収束するという.

$0 < t < 1$ を固定するごとに、

$$Y_t^n := \frac{2}{\sqrt{n}}(S_{[tn]} - [tn]/2)$$

の分布は $N(0,t)$ に収束：

$$P\left[Y_t^n \le a\right] \to \frac{1}{\sqrt{2\pi t}}\int_{-\infty}^a e^{-x^2/2t}dx.$$

２次元確率ベクトル (Y_t, Y_1) の結合分布の収束：
Y_t^n と $Y_1^n - Y_t^n$ は独立で、$Y_1^n - Y_t^n$ の分布は $N(0, 1-t)$ に収束するから、

$$P\left[Y_t^n \le a, Y_1^n < b\right] \to \int_{-\infty}^a p(t,x)dx\int_{-\infty}^b p(1-t, y-x)dy.$$

ここに

$$p(t,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}}e^{-x^2/2t}.$$

一般に、$0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_m \le 1$ に対し、増分 $Y_{t_k}^n - Y_{t_{k-1}}^n$ は互いに独立、その分布は $N(0, t_k - t_{k-1})$ に収束するので結合分布関数 $P\left[Y_{t_1}^n \le a_1, \ldots, Y_{t_m}^n < a_m\right]$ は

$$(*) \qquad \int_{-\infty}^{a_1} p(t_1, x_1)dx_1 \cdots \int_{-\infty}^{a_m} p(t_m - t_{m-1}, x_m - x_{m-1})dx_m$$

に収束する.

♠ 確率過程 $Y_t^n(\omega)$ はその有限次元分布が上式 $(*)$ で与えられる確率過程 （Brown 運動）に法則収束することが予想される.

Y_t^n の代わりに, 連続に補間したもの W_t^n を考える：
　$tn \in \mathbf{N}$ のときは $W_t^n = Y_t^n = \frac{2}{\sqrt{tn}}(S_{tn} - tn/2)$
　その他の t では線分でつなぐ.
（標準的酔歩 $2S_n - n$ を折れ線でつないで スケール変換したもの.）

$C_0[0,1]$： $w(0) = 0$ である $[0,1]$ 上の連続関数全体

とすると、$\omega \in \Omega$ を止めるごとに $W_t^n = W_t^n(\omega)$ は $C_0[0,1]$ の元である. $C_0[0,1]$ を一様収束ノルムによる位相空間とみなし、その *Borel*-加法族を $\mathcal{B}(C_0)$ とすると、写像

$$W^n : \omega \in \Omega \mapsto (W_t^n(w))_{0 \le t \le 1} \in C_0[0,1]$$

は $(\Omega, \mathcal{F})$ から $(C_0[0,1], \mathcal{B}(C_0))$ への可測写像である. 従って

$$\mu_n(A) = P[W^n \in A] = P((W^n)^{-1}(A)) \quad (A \in \mathcal{B}(C_0))$$

により $(\Omega, \mathcal{F})$ 上の確率測度 μ_n （W^n の分布）が定義される.

定理(Donsker's invariance principle)　W^n は $[0,1]$ 上の Brown 運動に法則収束する、すなわち、μ_n は $C_0[0,1]$ 上の Wiener 測度 μ に弱収束する：すべての $\Phi \in C(C_0[0,1])$ に対し、

$$\lim_{n\to\infty} E[\Phi(W^n)] = \int_{C_0[0,1]} \Phi(w)\mu(dw).$$

系　$A \subset C_0[0,1]$ が $\mathcal{B}(C_0)$-可測で、その境界 ∂A が Wiener 測度 μ のゼロ集合であれば、$\lim_{n\to\infty} P[W^n \in A] = \mu(A)$.

例： $A = \{w \in C_0[0,1] : \max_{0\le t\le 1} |w(t)| < a\}$.

4. Brown 運動

R. Brown 1828　花粉粉末のジグザグ運動の観測
L. Bachelier 1900 株価の変動の問題に関連して、数量的解析
A. Einstein 1905　物理的量による拡散係数の表示
J. Perrin 1910　Avogadro 数の算定
N. Wiener 1923　Brown 運動を表現する確率測度の構成

定義　確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ 上に定義された (実数値) 確率過程 W_t は次の条件を満たすとき Brown 運動という：

(1) 任意の $t, h > 0$ に対し、$W_{t+h} - W_t$ は $\sigma\{W_s : 0 \le s \le t\}$ と（確率論的に）独立である. (Markov 性 + 空間的一様性)

(2) $W_{t+h} - W_t$ の分布は h のみにより定まり、t には依存しない. (時間的一様性)

(3) $P[\, W_t$ は t の連続関数$\,] = 1$. （道の連続性）

以下簡単のため $E[W_1] = 0$, $E|W_1|^2 = 1$ （標準 BM）とする.

定理　連続な道をもつ確率過程 W_t が標準 Brown 運動であることは次の条件 1), 2) , 3) の各々と同値である．　($W_0 = 0$ とする．)

1) W_t は Gauss 過程で $E[W_t W_s] = \min\{s,t\}$ $(s,t>0)$.

2) W_t は時間的一様な Markov 過程でその推移法則は $p(t,x)$ を用いて次式により与えられる； $0<s<t$ に対し,

$$P[W_t \le a \,|\, \sigma\{W_r : 0 \le r \le t\}] = \int_{-\infty}^{a} p(t-s, x-W_s)dx.$$

3) W_t は時空に関し一様な Markov 過程で．　$E[W_1]=0$, $E|W_1|^2 = 1$.

Brown 運動は方物的スケール変換の下で不変である： W_t が標準 Brown 運動であれば、任意の $\lambda > 0$ に対し

$$\left(\frac{1}{\lambda} W_{\lambda^2 t} : t \ge 0\right)$$

も標準 Brown 運動である.

II 離散集合上の Markov 過程

1. 推移確率

S：可算集合

$L = (L_{a,b})$ は $S \times S$ 行列で次の条件を満たすとする.

$$L_{a,b} \ge 0 \quad (a \ne b); \qquad 0 > L_{a,a} = -\sum_{b:b\ne a} L_{a,b} > -\infty.$$

簡単のため、$L_{a,a}$ は有界とする．このとき

$$P(t) := e^{tL} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(tL)^k \qquad (t \ge 0)$$

によって定義される行列の族は任意に t をとめるごとに確率行列になっていて、半群の性質：

$$P(t+s) = P(t)P(s), \quad P(0) = I$$

をもつ．$P(t)$ を Markov 生成作用素 L により生成される推移確率行列という.

$\lambda(a) = -L_{a,a}$ とし、

$$q(a,b) = \frac{1}{\lambda(a)} L_{a,b} \ (b \ne a), \quad q(a,a) = 0 \tag{1}$$

と置くと，$Q = (q(a,b))$ は S 上の確率行列である．S 上の関数 f に L を作用させれば

$$Lf(a) = \sum_b \lambda(a) q(a,b)(f(b) - f(a))$$

となる.

2. Markov 性

一般に適当な確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ 上に定義された S-値確率過程 X_t はその有限次元分布が

$$
\begin{aligned}
&P(X_0 = a_0, X_{t_1} = a_1, \ldots, X_{t_n} = a_n) \\
&= \mu_0(X_0 = a_0) P_{a_0,a_1}(t_1 - t_0) \cdots P_{a_{n-1},a_n}(t_n - t_{n-1})
\end{aligned} \tag{2}
$$

で与えられるとき L を生成作用素とする Markov 連鎖 (または Markov 過程) であるという． ここに μ_0 は初期分布である．

条件 (2) は Markov 性の条件：すべての $0 \leq s \leq t$, $b \in S$ に対し

$$
P[X_t = b \,|\, X_r, 0 \leq r \leq s] = P_{X(s),b}(t - s) \tag{3}
$$

(ここに $X(s) = X_s$) と同等である．

$u_t(a) = P(t)f(a) = E[f(X_t)|X_0 = a]$ は Kolmogorov の後退方程式

$$
\frac{d}{dt} u_t = L u_t
$$

を満たす．

条件 $X_0 = a$ の下で $X_t \neq a$ となる t の最小値を τ_a で表せば，Markov 性 (3) から

$$
P[\tau_a > t \,|\, X_0 = a] = e^{-t\lambda(a)}
$$

$$
P[X_{\tau(a)} = b \,|\, X_0 = a] = q(a, b) \qquad (b \neq a)
$$

が導かれる．ここで任意の時刻 s に対し条件 $X_0 = a$ を $X_s = a$ で置き換えても同じ議論ができる．さらに時刻 s として他の状態から a に遷移した時刻をとっても同じ結論を得ることができる．

上の事実に基づいて，L によって生成される Markov 連鎖の時間発展は λ と q を用いて次のように直感的に記述されることが理解できよう：過程が他の状態から状態 a に移ったのちランダムな時間 τ_a が経過すると状態 b に確率 $q(a,b)$ で移動する；このとき待機時間 τ_a の分布は期待値 $1/\lambda(a)$ の指数分布に従う，即ち $P(\tau_a > t) = e^{-\lambda(a)t}$.

3. エルゴード分解

以下 S は有限集合とする．

定義　G を S の部分集合とする．$a \in G$, $c \notin G$ に対し常に $q(a, c) = 0$ であるとき G は閉じているという．閉じた部分集合として極小であるとき，即ち G 自身は閉じているが G の真部分集合はすべて閉じていないとき，G は エルゴード類（あるいは既約類）であるといい，L は G 上で エルゴード的であるという．

二つの閉じた部分集合の共通部分は閉じている．したがって二つの異なるエルゴード類は共通部分をもたない．いかなるエルゴード類にも含まれない S の元全体を T で表せば，S は

$$
S = T + S_1 + \cdots + S_m \quad (\text{互いに素な集合の和}) \tag{4}
$$

と分解される，但し $S_1, ..., S_m$ は相異なるエルゴード類を表す．

G が閉じていれば $P(t)$ $(t>0)$ の $G \times G$ への制限 $P(t)|_G = (P_{a,b}(t))_{a,b \in G}$ は確率行列である．$t>0$ に対し $P_{a,b}(t)>0$ となるとき b は a から到達可能であるという．状態 a を含む最小の閉じた集合は a から到達可能な状態の全体である．これより S 自身エルゴード類であることは L が 既約行列であること，即ち任意の2状態 a,b が互いに到達可能であること，と同値である．特に，G がエルゴード類であることは $P(t)|_G$ $(t,0)$ が既約な確率行列であることと同値である．a が T の元であることはある $c \in S$ が在って a から c には到達可能であるがそこから戻ってこれないことと同値である．一つのエルゴード類に含まれる状態は相互に到達でき，また相異なる二つのエルゴード類 S_i, S_j は互いに行き来できない．T に含まれる状態は通過的 transient であるという．

定義　$\mu = (\mu(a))_{a \in S}$ は S 上の測度とする．任意の $t>0$ に対し $\mu P(t) = \mu$ であるとき μ は $P(t)$ の 不変測度であるという．

4. 対称性

状態空間 S 上に確率測度 μ が与えられているとする．S 上の有限な台を持つ実数値関数全体を $C_0(S)$ で表し，μ を重みとする $C_0(S)$ の内積を $\langle fg \rangle_\mu$ と書く，即ち

$$\langle fg \rangle_\mu := \sum_a f(a)g(a)\mu(a), \qquad f,g \in C(S).$$

内積 $\langle fg \rangle_\mu$ に関し作用素 L（及び $P(t)$）が対称となる、すなわち

$$\langle fLg \rangle_\mu = \langle gLf \rangle_\mu$$

となるための条件は μ が

$$\mu(a)L_{a,b} = \mu(b)L_{b,a} \qquad a,b \in S$$

を満たすとことである。このとき，μ は必然的に不変測度である．
上の条件を 詳細釣り合い条件 という．

III ランダム粒子系の流体力学極限

ミクロな系　$\longrightarrow$　偏微分方程式（マクロな描像）

時空のスケール変換（空間の粗視化、長時間平均）

（ランダム）粒子系、拡散現象のモデル（bulk diffusion）

（保存量があり、局所平衡が成立する系）

代表的なモデル

拡散型のスケール極限をとるもの:

1　相互作用する Brown 粒子系（[11]）

2　バイアスのない格子気体（排他過程，zero-range 過程等）

3　Ginzburg-Landau model

双曲型（Euler type）のスケール極限をとるもの:

4　古典的 Hamilton（即ち Newton 力学の）粒子系

5　バイアスのある格子気体（[4],[5]）

（これらの粒子系の統計力学的扱いについては [6] に全般的な解説がにある）

格子気体の流体力学極限（拡散型スケールの場合）.

格子気体とはここでは時間発展する粒子系を指す．そのもっとも単純な例として排他過程をとりあげ，非勾配系についての S.R.S. Varadhan[10] による結果を紹介する．（[9],[2] に詳しい解説がある.）

モデル

$\mathbf{Z} = \{0, \pm 1, \pm 2 \ldots\}$

$\mathbf{Z}$ 上を N 個の粒子がランダムに運動

排他条件を満たす（一つの格子点には高々一つの粒子しか存在し得ない）

粒子の配置をあらわす変数 η：

η_x: $x \in \mathbf{Z}$ に対し，値 1 または 0 をとる変数

$\eta_x = 1$：　x に粒子が「在る」

$\eta_x = 0$：　x に粒子が「無い」

$$\eta = (\eta_x)_{x \in \mathbf{Z}} \in \{0, 1\}^{\mathbf{Z}}$$

個々の粒子はすぐ後に述べる確率法則に従って運動し，それに応じて配置 η が変化する．時刻 t での配置を

$$\eta(t) = (\eta_x(t))_{x \in \mathbf{Z}}$$

で表す．拡散型スケールの下での粒子の経験分布 α_t を

$$\alpha_t(d\theta) = \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathbf{Z}} \eta_x(N^2 t) \delta_{x/N}(d\theta) \qquad (\theta \in \mathbf{R}),$$

により定義する．但し，$\int J(\theta)\delta_{x/N}(d\theta) = J(x/N)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} J(\theta)\alpha_t(d\theta) = \frac{1}{N} \sum_{x \in \mathbf{Z}} \eta_x(N^2 t) J(x/N) \qquad (J \in C_0^{\infty}(\mathbf{R})).$$

ここでの目標はこの系に対し流体力学極限の成立すること，即ち

$$\alpha_t(d\theta) \longrightarrow \rho(t, \theta) d\theta \quad (N \to \infty)$$

及び $\rho(t, \theta)$ が次の型の非線形拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial \theta}\left(D(\rho)\frac{\partial}{\partial \theta}\rho\right) \tag{5}$$

を満たすことを示すことである．粒子系の運動法則は，Markov 過程として，次により決定される：$\eta(t)$ は $\{0,1\}^{\mathbf{Z}}$ 上の Markov 過程で，その生成作用素 $L=L_N$ は

$$Lf(\eta)=\sum_x c_{x,x+1}(\eta)\Big[f(\eta^{x,x+1})-f(\eta)\Big]$$

で与えられる．ここに $\eta^{x,x+1}$ は η において η_x と η_{x+1} を入れ替えて得られる配置を表し，$c_{x,x+1}$ は $\{0,1\}^{\mathbf{Z}}$ 上の非負関数でその値

$$c_{x,x+1}(\eta)\sim \text{平均待ち時間の逆数}.$$

$c_{x,x+1}\equiv 1$ であればこの確率過程は排他条件の下でランダムウオークする N 個の粒子のなす Markov 過程に他ならない．

$c_{x,x+1}$ は次の条件を満たすとする：

1. 非退化性　$c_{01}(\eta)>0$.
2. 相互作用の局所性　$c_{01}(\eta)$ は局所関数.
   (つまり c_{01} は η の有限個の座標にしか依存しない)
3. 空間的一様性　$c_{x,x+1}(\eta)=c_{01}(\tau_x\eta)$.
4. 対称性　$c_{01}(\eta^{01})=c_{01}(\eta)$.

但し $\tau_x\eta$ は η を x だけ平行移動した配置 $(\eta_{y+x})_{y\in\mathbf{Z}}$ を表す．

定理　$c_{x,x+1}$ が上の条件を満たし，初期値 α_0 が一つの確率分布に収束すれば $\eta(t)$ に対し流体力学極限が成り立つ．(5) に現れる拡散係数 $D(\rho)$ は以下に述べる Green-Kubo 公式で与えられる：

ν_ρ：$\{0,1\}^{\mathbf{Z}}$ 上の密度 $\rho\in[0,1]$ の Bernoulli 分布：$\nu_\rho(\eta_x=1)=\rho$.
$\langle\cdot\rangle_\rho$：ν_ρ による積分.
e^{tL}：$L^2(\nu_\rho)$ において L の生成する作用素の半群.
このとき

$$D(\rho)=\frac{1}{2\chi}\langle(\eta_0-\eta_1)^2c_{01}\rangle_\rho-\frac{1}{\chi}\int_0^\infty\sum_{x\in\mathbf{Z}}\langle(w_{01}\circ\tau_x)e^{tL}w_{01}\rangle_\rho dt$$

である．但し $\chi=\frac{1}{2}\langle(\eta_0-\eta_1)^2\rangle_\rho=\rho(1-\rho)$,

$$w_{01}(\eta)=c_{01}(\eta)(\eta_0-\eta_1).$$

注意 1．$w_{01}(\eta)$ は current と呼ばれる関数である．$w_{01}(\eta)$ が或る局所関数 $h(\eta)$ の勾配、即ち

$$w_{01}=h-h\circ\tau_1$$

となっているとき，格子気体は勾配系であるという．勾配系であれば、Green-Kubo 公式の最後の項は消えてしまう．

注意 2．定理の証明では D の変分公式による次の表現が重要な役割を果す．$\pi_{01}f(\eta)=f(\eta^{01})-f(\eta)$ と書き，

$$D(\rho;f)=\frac{1}{2(\rho-\rho^2)}E^{\nu(\rho)}\left[\left\{\eta_0-\eta_1-\sum_{y=-\infty}^{\infty}\pi_{01}(\tau_yf)\right\}^2c_{01}\right]$$

$(\tau_x f = f \circ \tau_x)$ と置くとき,

$$D(\rho) = \inf_{f \in \mathcal{F}_c} D(\rho; f).$$

中心極限定理の分散として定まる或る２次形式 V^ρ を用いて, $D(\rho)$ は

$$(*) \qquad \inf_{f \in \mathcal{F}_c} V^\rho\{D[\eta_0 - \eta_1] - w_{01} - Lf\} = 0$$

を満たす定数 $D = D(\rho)$ として特徴付けられる.

上の定理は S.R.S. Varadhan (1993) が 非勾配系の Ginzburd-Landau モデルについて証明したものを格子気体について述べ直したものである.

次のモデル i), ii) についても上と類似の流体力学極限が示される.

i) 非対称単純排他過程

確率 p: $p(x) \geq 0, \sum p(x) = 1, \sum p(x)x = 0$ とする. 生成作用素：

$$Lf(\eta) = \sum_x \sum_y p_{y-x}\eta_x[f(\eta^{x,y}) - f(\eta)].$$

により定まる格子気体は p が対称 $(p(x) = p(-x))$ ならば実質的に勾配系になり $D(\rho)$ は定数である. p が対称でなければ非勾配系になり、 $D(\rho) > \frac{1}{2}\sigma^2$ $(0 < \rho < 1)$ である. その場合原点でのカレントを $W = \frac{1}{2}\sum y w_{0y}$ で与え、 $D(\rho)$ を w_{01} の代わりに W を用いて (*) により定義すれば定理1と同様な結果が得られる.

ii) ランダムな な媒質上の排他過程

α_x $(x \in \mathbf{Z})$ を独立同分布で一様有界な確率変数列とする. $0 < c_1 \leq g < c_2$ なる関数 g により

$$c_{01}^\alpha(\eta) = g(\alpha_0, \eta_0, \alpha_1, \eta_1).$$

但し,

$$g(\alpha, s, \alpha', s') = g(\alpha', s', \alpha, s),$$

$$g(\alpha, s, \alpha', s') = g(\alpha, s', \alpha', s)e^{-(s'-s)(\alpha'-\alpha)}.$$

特に対称な２変数関数 $g(\alpha, \alpha') = g(\alpha', \alpha)$ をもって

$$c_{01}^\alpha(\eta) = g(\alpha_0, \alpha_1).$$

α_x は媒質のランダムな性質を表すものと理解される.

局所平衡の定式化

f を局所関数とし自然数 K に対し

$$\bar{f}_{x,K} := \frac{1}{2K+1}\sum_{y:|x-y|\leq K} \tau_y f$$

と置く. これは格子点 x を中心とし, 一辺の長さが $2K+1$ のブロックにおける $\tau_y f$ の標本平均値 (sample average) である. この式で $f(\eta) = \eta_0$ ととった特別な場合, その標本平均値を $\bar{\eta}_{x,K}$ で表す：

$$\bar{\eta}_{x,K} := \frac{1}{2K+1}\sum_{y:|x-y|\leq K} \eta_y.$$

また，$\eta = \eta^N(t)$ としたものを $\bar{\eta}^N_{x,K}(t)$ と書く：

$$\bar{\eta}^N_{x,K}(t) := \frac{1}{2K+1} \sum_{y:|x-y|\le K} \eta^N_y(t).$$

($\eta(t) = \{\eta_x(t); x \in \mathbf{Z}\}$ は作用素 L_N によって生成される Markov 過程を表す.)

局所関数 f の ν_ρ に関する期待値を $\hat{f}(\rho)$ と書く．即ち

$$\hat{f}(\rho) = E^{\nu_\rho}[f].$$

補題（時空平均測度に対する局所エルゴード定理）任意の $J \in C_0(\mathbf{R})$ に対し

$$\lim_{K\to\infty} \limsup_{\epsilon\to 0} \limsup_{N\to\infty} E\left[\int_0^t \sum_{x\in Z} J(x/N) \left|\bar{f}_{x,K}(\eta(N^2 s)) - \hat{f}\left(\bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s)\right)\right| ds\right] = 0$$

この定理は局所平衡の一つの数学的表現で，密度パラメータ ρ を保存量の標本平均値 $\bar{\eta}_{x,\epsilon N}$ にとれば，ランダムな量 $\tau_y f(\eta(N^2 s))$ の局所的な算術平均 $\bar{f}_{x,K}(\eta(N^2 s))$ が平衡状態 ν_ρ による期待値 $\hat{f}(\rho)$ $(\rho = \bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s))$ で置き換えてよいことを意味している．

ここで、密度パラメータとして現われる $\bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s)$ は，巨視的には幅が 2ϵ と狭い区間だが，微視的には幅 $2\epsilon N$ の広い区間での標本平均値であることに注意する．従ってこれは巨視的量である．一般に $\hat{f}(\rho)$ は ρ の非線形な関数で，ρ として微視的量 $\bar{\eta}^N_{x,K}(s)$ でなく巨視的量 $\bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s)$ がとれることは $N \to \infty$ の極限操作を行う上で本質的である．

なお、上の式で $\bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s)$ を $\bar{\eta}^N_{x,K}(s)$ で置き換えた関係

$$(\sharp) \qquad \lim_{K\to\infty} \limsup_{N\to\infty} E\left[\int_0^t \sum_{x\in Z} J(x/N) \left|\bar{f}_{x,K}(\eta(N^2 s)) - \hat{f}\left(\bar{\eta}^N_{x,K}(s)\right)\right| ds\right] = 0$$

も成立し、証明ははるかに簡単になる．区間 $[-K, K]$ 上の粒子数 m $(0 \le m \le 2K+1)$ の配置空間を $\mathcal{X}_{K,m}$ で表す，即ち $\mathcal{X}_{K,m} := \{\eta \in \{0,1\}^{[-K,K} : \sum_x \eta_x = m\}$．またその上の一様確率分布を $\nu_{K,m}$ とする．このとき $(\sharp)$ は，部分系 $\{\eta_{x+y}(t) : |y| \le K\}$ の分布の時空平均が，大きい N に対しては，$\nu_{K,m}$ の重ね合わせで近似されること（(弱い意味の）局所平衡の成立）と同義である．なぜなら $m/(2K+1) \to \rho$ となるように $K, m \to \infty$ $(0 < \rho < 1)$ とするとき、$\nu_{K,m}$ は ρ に関し一様に ν_ρ に収束し，従って次の大数の法則が成立するからである：任意の $\varepsilon > 0$ に対し，

$$\lim_{K\to\infty} \sup_{m\le 2K+1} \nu_{K,m}(\{\eta \in \mathcal{X}_{K,m} : |\bar{f}_{0,K}(\eta) - \hat{f}(\bar{\eta}_{0,K})| > \varepsilon\}) = 0.$$

上にのべた局所平衡の成り立つことは、保存量 $\bar{\eta}^N_{x,K}(s)$ が他の物理量に比べゆっくり変化するからであると理解でき，証明も比較的容易である．

定理の証明について

非線形拡散方程式 (5)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = \frac{\partial}{\partial \theta}\left(D(\rho)\frac{\partial}{\partial \theta}\rho\right) = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}P(\rho), \quad P(\rho) := \int_0^\rho D(r)dr$$

の弱型

$$\text{(b)} \qquad \langle \rho_t J\rangle = \langle \rho_0 J\rangle + \int_0^t \langle P(\rho_s) J''\rangle ds \qquad (J \in C_0^\infty(\mathbf{R}))$$

(ただし、$\rho_t = \rho(t,\cdot)$, $\langle f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$) を考える.

α_t^N の定義より

$$\alpha_t^N(J) = \int J(\theta)\alpha_t^N(d\theta) = \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} \eta_x(N^2t)J(x/N).$$

ここで

$$F(\eta) = \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} \eta_x J(x/N)$$

とおけば $\qquad \alpha_t^N(J) = F(\eta(N^2t)).$

Markov 過程の一般論より

$$\alpha_t^N(J) = \alpha_0^N(J) + \int_0^t N^2 LF(\eta(N^2s))ds + M_t.$$

M_t は martingale で $N\to\infty$ のとき零に収束する： $E[\sup_{0\le t\le 1}|M_t|] \to 0.$

$w_{x,x+1} = w_{0,1}\circ\tau_x$ と置くと、$L\{\eta_x\} = w_{x-1,x} - w_{x,x+1}$ となり、部分和をとれば,

$$\begin{aligned} N^2 LF(\eta) &= N\sum_{x\in\mathbf{Z}}(w_{x-1,x} - w_{x,x+1})J(x/N) \\ &= \sum_{x\in\mathbf{Z}} w_{x,x+1}\nabla^N J(x/N), \end{aligned}$$

但し

$$\nabla^N J(x/N) = N[J((x+1)/N) - J(x/N)] \sim J'(x/N).$$

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

勾配系であるとする. 局所関数 $h = h(\eta)$ が在って、$w_{x,x+1} = h_x - h_{x+1}$ ($h_x = \tau_x h$) と書けるから, 再び部分和がとれて

$$N^2 LF(\eta) \sim \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} h_x J''(x/N).$$

ゆえに

$$\alpha_t^N(J) = \alpha_0^N(J) + \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} h_x(\eta(N^2s))J''(x/N)ds + o(1).$$

先の補題（局所平衡）より,

$$\int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} h_x(\eta(N^2s))J''(x/N)ds \sim \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} \hat{h}\left(\bar{\eta}_{x,\epsilon N}^N(s)\right)J''(x/N)ds.$$

ここで、もし、

$$\alpha_t^N(d\theta) \to \rho(t,\theta)d\theta \tag{6}$$

であれば、右辺の $\hat{h}\left(\bar{\eta}^N_{x,\epsilon N}(s)\right)$ は

$$\hat{h}(\rho(t,x/N)) =: P(\rho(t,x/N))$$

で置き換えてよく、

$$\alpha^N_t(J) = \alpha^N_0(J) + \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x\in\mathbf{Z}} P(\rho(t,x/N))J''(x/N)ds + o(1).$$

ここで $N\to\infty$ とすれば $\langle\rho_t J\rangle = \langle\rho_0 J\rangle + \int_0^t\langle P(\rho_s)J''\rangle ds$ が得られる.

上の議論では (6) を仮定したが，もちろんこのようなことは仮定できない．実際の証明では，$(\alpha^N_t)_{0\le t\le 1}$ が確率測度値関数の空間に誘導する確率分布の相対コンパクト性を証明し，それに基づくある種の routine な議論を行う.

非勾配系の場合ははるかに深い内容のある議論を準備する必要がある.

IV　古典的粒子系のスケール極限.

古典的 Hamilton 系.

微視的スケールの下での運動方程式

$$\frac{d^2}{d\tau^2}q_i(\tau) = -\sum_{j\neq i}\nabla U(q_i(\tau)-q_j(\tau)),\quad i=1,2,\ldots \tag{7}$$

U は２体間の相互作用力を与える potential 関数（近接作用 (finite range) とする）.

Boltzmann 方程式

希薄気体中の１粒子の時刻 t での位置 q と速度 v の分布密度関数を $f(t,q,v)$ で表す．直感的考察により，L. Boltzmann は彼の名で呼ばれる次の方程式を導いた.

$$\frac{\partial}{\partial t}f + v\cdot\nabla f = Q(f),$$

ここに Q は衝突作用素と呼ばれる 速度変数のみに関する非線形作用素で， v の関数 $g=g(v)$ への作用は, 次のような形である.

$$Q(g)(v) = \int\int[g(v_1^\theta)g(v^\theta) - g(v_1)g(v)]K(v,v_1,\theta)dv_1d\theta.$$

粒子が剛体球のとき， O.E. Lanford はごく短い時間に限れば n-粒子の Hamilton 系から Boltzmann-Grad 極限をとることにより Boltzmann 方程式が導かれることを示した（[1],[8] 参照）．ここで Boltzmann-Grad 極限とは剛体球半径を ϵ， 単位体積内の粒子数を n とするとき条件

$$n\epsilon^2 \cong 1 \qquad (\text{粒子密度} \sim \epsilon)$$

の下で、 $n\to\infty, \varepsilon\downarrow 0$ とする極限操作のことである．この極限では時間についてのスケールは変えずに,

$$\text{典型的な 1 個の粒子の単位時間の衝突回数} \sim 1$$

となる．これに対し次に述べる流体力学極限では

$$n\epsilon^3 \cong 1 \qquad (\text{粒子密度} \sim 1)$$

であり典型的な粒子は数個の粒子と常時相互作用していることになる．

流体力学極限 では

保存量（粒子数，運動量，エネルギー）を巨視的スケールで見るときの経験分布を問題にする．

$\epsilon :=$ 粒子の巨視的スケールでの大きさ粒子数，粒子速度，エネルギーの経験分布は各々 $x_i(t) := \epsilon q_i(t/\epsilon)$， 巨視的スケールで見た粒子の位置

$$\alpha_\epsilon = \epsilon^3 \sum_i \delta_{x_i(t)}, \quad \beta_\epsilon = \epsilon^3 \sum_i \dot{q}_i(t/\epsilon)\delta_{x_i(t)}, \quad \gamma_\epsilon = \epsilon^3 \sum_i e_i(t/\epsilon)\delta_{x_i(t)}$$

但し $e_i(\tau) := \frac{1}{2}|\dot{q}(\tau)|^2 + \frac{1}{2}\sum_{j\neq i} U(q_i(\tau) - q_j(\tau))$ (第 i 粒子のエネルギー)．

局所平衡の成立を仮定 $\Rightarrow$ Euler 方程式：

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot(\rho p) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho p) + [\nabla\cdot(\rho p_k p)]_{k=1}^3 + \nabla P = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e) + \nabla\cdot(\rho e p + P p) = 0.$$

ここに ρ, p, e は各々，$\alpha_\epsilon, \beta_\epsilon$，$\gamma_\epsilon$ の極限の密度関数である．また $P = P(\rho, p, e)$ は U により定まる圧力関数である．

U が遠隔作用の potential のときは Vlasov 方程式と呼ばれる微積分方程式が現れる．この方程式は典型的な平均場近似の方程式で流体力学極限に特徴的な概念である局所平衡とは無関係に理解される．このような事情は，あるいは抵抗のある 1 次元古典的粒子系に対しては数学的結果として定式化できる [7]．

Hamilton 系から直接 Euler 方程式を導く方法以外に，Boltzmann 方程式から流体の方程式を導く方法がありこれも流体力学極限と呼ばれることがある．先の Boltzmann 方程式で衝突項 Q を $\ell^{-1}Q$ で置き換えたときの解を $f^\ell(t,x,\xi)$ で表す：

$$\frac{\partial}{\partial t}f^\ell + \xi\cdot\nabla f^\ell = \frac{1}{\ell}Q(f^\ell),$$

パラメータ ℓ は平均自由行程と呼ばれる量に相当し，ある意味で気体の希薄性を表現している．速度変数について積分することにより密度場，速度場，エネルギーの場を各々

$$\begin{aligned} \rho^\ell(t,x) &= \int f^\ell(t,x,\xi)d\xi \\ v^\ell(t,x) &= \int \xi f^\ell(t,x,\xi)d\xi \\ e^\ell(t,x) &= \int \frac{1}{2}|\xi|^2 f^\ell(t,x,\xi)d\xi \end{aligned}$$

によって定義すれば．初期値 $f^\ell(0,x,\xi)$ についての適当な条件の下で $\ell \to 0$ としたとき，これらが前と同じ形の Euler 方程式の解に近づき，$f^\ell(t,x,\xi)$ はその解 $(\rho(t,x), p(t,x), e(t,x))$ をパラメーターとする局所 Maxwell 分布に近づくことが示される．但し、ここに現れる圧力関数 P は

$$P = \rho T = \frac{2}{3}\left(e - \frac{1}{2}p^2\right)\rho$$

で与えられ，理想気体のそれと同じである．([1] 参照)

参考文献

[1] C. Cercignani, R. Illner and M. Pulvirenti: The Mathematical Theory of Dilute Gases, Springer, NY., 1994.

[2] C. Kipnis and C. Landim : Scaling limits of particle systems, Springer, 1999

[3] S. Olla, S.R.S. Varadhan and H.T. Yau: Hydrodynamical limit for a Hamiltonian system with weak noise, Commun. Math. Phys., **155** (1993) 523-560.

[4] F. Rezakhanlou: Hydrodynamic limit for attractive particle systems on $\mathbf{Z}^d$, Commun. Math. Phys., **140** (1991) 417-448.

[5] T. Seppäläinen, Coupling the totally asymmetric simple exclusion process with a moving interface. I Brazilian School in Probability (Rio de Janeiro, 1997). Markov Process. Related Fields **4** (1998), no. 4, 593-628.

[6] H. Spohn: Interface motion in models with stochastic dynamics, J. Statis. Phys., **71** (1993) 1081-1132.

[7] K. Uchiyama: Scaling limit for a mechanical system of interacting particles, Commun. Math. Phys., **177** (1996) 103-128; K. Uchiyama: Scaling limit for a mechanical system of interacting particles II, Commun. Math. Phys., **196** (1998) 681-701.

[8] K. Uchiyama: Derivation of the Boltzmann equation from particle dynamics, Hiroshima Math. J. **18** (1988) 245-297.

[9] 内山・舟木，ミクロからマクロへ 2（格子気体の流体力学極限，シュプリンガー東京, 2002.

[10] S.R.S. Varadhan: Nonlinear diffusion limit for a system with nearest neighbor interactions - II, In: Asymptotic problems in probability theory: stochastic models and diffusions on fractals (eds. Elworthy and Ikeda), Longman, 1993, pp. 75-128.

[11] S.R.S. Varadhan: Scaling limits for interacting diffusions, Commun. Math. Phys., **135** (1991) 313-353.

* 文献 [9] の正誤表が 東工大数学教室のホームページにあります：
http://www.math.titech.ac.jp/ uchiyama/index-j.html
(ただし，日本語 (Shift JIS) にエンコーディングする必要あり.)