数理解析研究所講究録
第1855巻 2013年 236-244

カオスの伝播とカットオフ現象：エーレンフェスト模型の場合

高橋陽一郎
東京大学生産技術研究所
Yoichiro Takahashi
Institute forIndustrial Sciences (IIS), University of Tokyo

故 田中洋先生に捧ぐ

確か1969年の学内が静かになり始めた頃に上野正氏が帰国されてIthacaでの思い出話とともに、やや興奮気味にH.P.McKeanの最新の研究について伝えられた。それがBoltzmann方程式、とくにカオスの伝播の問題に田中洋さん[1]が興味を持たれた契機であったと推察している。

田中さんは「統計力学を基礎から勉強しよう」と言われ、東大本郷で「統計力学セミナー」と称する小人数のセミナーが毎週開かれた。M.KacやH.P.McKeanの論文などと並行して、篠原昌彦さんがどこかから入手されてきた久保亮五氏の物理学科での講義録（和文タイプ版）なども読んだ。D.Ruelleの"Statistical Mechanics: Rigorous results"などはまだ図書室になかった。

1971年に田中洋さんは広島大学に移られた。その最初の２年間、確率論講座のメンバーは、神田護さん、村田博さんに高橋を加えた４人であった。月に１～２回はセミナーで話された。カオスの伝播の証明を目指して、最初は相対エントロピーを使おうと試みられたが捗々しくなく、いわゆる“田中の汎関数”を発案された。その経緯はほぼすべてお聞きできた。私自身は統計力学をさらに勉強しつつ、別の方向の研究に取り組んだが、田中さんはその後、SinaiやKestenの研究していたランダム媒質中の酔歩などに関心を移されるまで、カオスの伝播に関する成果を次々と発表される。慶応大学に移られてからの共著者だけでもかなりの数に上るはずである。

あれから約４０年を経て、たまたまDiaconisたちのカットオフ現象を学び直し、整理している過程で、カオスの伝播によって代表的なカットオフ現象が明快に理解できる／できそうなことに気付いた。自明なカオスの伝播は決して自明ではない。この門前の小僧による簡単な事実の発見は久々にご報告するに値すると思った矢先、2012年7月17日に訃報に接することになった。

ここにその概要を記すとともに、田中洋先生のご冥福をお祈り申し上げます。

---

[1] 大学院進学した途端に田中洋指導教官から「先生と呼ぶな。さん付けで呼べ」という厳命があった。研究者の一員としての自覚を持てというのが趣意であったと思う。以下それに従う。

1 カオスの伝播

1.1 定義

ここでは、Boltzmann 方程式に関することはすべて割愛して、カオスの伝播の定義を述べよう。ここでの“カオス”とは、Wiener chaos とは通じるところのあるものの、力学系のカオスとはほとんど無縁の概念である。

以下、空間 S は Polish space とし、S 上の有界連続関数全体を $C_b(S)$、Borel 確率測度全体を $\mathcal{M}_1^+(S)$ と記す。簡単のため、Borel 集合族 $\mathcal{B}(S)$ その他は、とくに必要な場合を除いて、明記しない。

Definition 1 (μ-chaoticity). 各 N ごとに直積空間 S^N 上の対称な確率測度 $\mu^{(N)}$ が与えられたとき、$\{\mu^{(N)}\}$ がカオス的とは、S 上の確率測度 μ が存在して、$N \to \infty$ のとき、各 $k \geq 1$ に対して、μ_N の S^k への射影 $\mu_k^{(N)}$ が直積測度 $\mu^{\otimes k}$ に弱収束すること、すなわち、任意の $\phi_i \in C_b(S)$, $i = 1, 2, \ldots, k$ に対して

$$\lim_{N\to\infty} \langle \mu_N, \phi_1 \otimes \phi_2 \otimes \cdots \otimes \phi_k \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 \rangle = \prod_{i=1}^{k} \langle \mu, \phi_i \rangle \tag{1}$$

が成り立つことをいう。μ を特定するときは、$\{\mu_N\}$ は μ カオス的という。

Example 2 (Poincaré). $S = \mathbb{R}$、$\mu^{(N)}$ を $\mathbb{R}^N$ 内の球 $x_1^2 + \cdots + x_N^2 = N\sigma^2$ の上の一様分布とすると、$\mu^{(N)}$ は μ カオス的である。ただし、$\mu \sim N(0, \sigma^2)$.

Definition 3 (propagation of chaos). . 各 $N \geq 1$ ごとに S^N 上のマルコフ過程 $X^{(N)}(t)$, $t \geq 0$ が与えられたとき、$\{X^{(N)}\}$, $N \geq 1$ がカオスを伝播するとは、初期分布が $\mu^{(N)}(0) = \mu(0)^{\otimes N}$, $N \geq 1$ ならば、各時刻 $t \geq 0$ に対して、$\mu(t) \in \mathcal{M}_1^+$ が存在して, $X^{(N)}(t)$ の分布 $\mu^{(N)}(t)$, $N \geq 1$ が $\mu(t)$ カオス的であることをいう。

次は、挙げるのをためらうほどに、自明な例である。

Example 4 (直積マルコフ過程). S 上のマルコフ過程 $X(t)$, $t \geq 0$ の直積 $X^{(N)}(t) = (X_1^{(N)}(t), \ldots, X_N^{(N)}(t))$ はカオスを伝播する。このとき、$\mu(t)$ は、初期分布 $\mu(0)$ のもとでの時刻 t における 1 粒子系 $X(t)$ の確率分布である。

1.2 カオスの伝播と大数の弱法則

Theorem 5 (Tanaka, Uchiyama, Sznitman). 確率測度列 $\mu^{(N)}$ が μ カオス的なことと、次は同値：

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \delta_{X_i} \to \mu \quad in\ \mathcal{M}_1^+(S). \tag{2}$$

ここで X_i は S^N の第 i 座標とする. さらに、$\mu^{(N)}$ がカオス的なことは X_1 の分布が *tight* なことと同値である。また、上記の定義 1 は、$k=2$ の場合のみで必要十分である。

1.3 平均場相互作用をもつ跳躍過程

カオスの伝播の研究は、歴史的には、相互作用をもつ確率微分方程式の場合が先行し、$\mu(t)$ が Burgers 方程式の解となる場合なども示されて話題となったが、扱いやすさを除けば、拡散項の存在が本質ではない。

Example 6 (T.Shiga and H.Tanaka 1985). 空間 S 上の非負有界測度の族 $Q(x,x';\cdot)$, $x,x'\in S$ は条件

$$Q(x,x';A) \text{ は } (x,x') \text{ について可測},$$
$$Q(x,x';\{x\})=0, \quad Q(x,x';S) \text{ は } (x,x') \text{ について有界}$$

と仮定して、 各 $\nu\in\mathcal{M}_1^+(S)$ に対して

$$Q_\nu\phi(x)=\int_S\left(\int_S Q(x,x';dy)\nu(dx')\right)(\phi(y)-\phi(x)), \quad \phi\in\mathcal{C}_b(S)$$

とおく。S^N 上の相互作用をもつマルコフ過程 $X^{(N)}(t)=(X_1^{(N)}(t),\dots,X_N^{(N)}(t))$ を生成作用素

$$Q^{(N)}\phi(x_1,\dots,x_N)=\sum_{i=1}^N Q_{\nu_N}^{(i)}\phi(x_1,\dots,x_N), \quad \nu_N=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N\delta_{x_i}$$

により定める。ここで、$Q_{\nu_N}^{(i)}$ は、第 i 座標に作用する Q_{ν_N} とする。このとき、$X^{(N)}(t)$ はカオスを伝播し、$\mu(t)$ は次の非線型方程式の弱解である。

$$\frac{d}{dt}\langle u(t),\phi\rangle=\langle u(t),Q_{u(t)}\phi\rangle, \quad \phi\in\mathcal{C}_b(S),$$
$$u(0)=\mu(0).$$

1.4 中心極限定理

例えば、前小節のカオスの伝播を大数の弱法則とみれば、当然、中心極限定理を考えたくなる。実際、それは然るべく定式化され、証明されているが、ここでは割愛する。

2 カットオフ現象

マルコフ過程の定常分布への収束のはやさは指数的減少が代表的であり、多項式的など劣指数的な場合もあるというのが確率論の常識である。しかし、驚くべきことに、Diaconis や Aldous たちは、Ehrenfests の壺などにおいて遥かに早い急減少が観察し得ることを示し、カットオフ現象と名付けた。例えば、５２枚のカードのリフル・シャッフリングにおいて７回切ればほぼ混合状態に達することは New York Times にも紹介されて広く知られることになった。([入門 II]) 参照。

その驚くべき急減少は全変動距離に基づくときに観察される。また、その証明の多くは固有関数展開の計算に基づき、巧みに全変動距離を上下から評価するものである。そこには組合せ表現論的な面白さがあり、国内では洞明人氏は距離正則グラフ上の酔歩に関して良い結果を得ている。また近年の研究の流れは混合時間の問題などに移っているようである。しかし、混合性のはやさという視点からのカットオフ現象の確率論な意味は明快とは言い難い。以下、それがわかる例を述べる。

2.1 全変動距離

Definition 7 (total variation norm). $\mu, \nu \in \mathcal{M}_1^+(S)$ に対して、

$$\|\mu - \nu\| = \sup\{|\mu(A) - \nu(A)| : A \in \mathcal{B}(S)\} = \frac{1}{2}\int_S |\mu(dx) - \nu(dx)| \tag{3}$$

とおき、これを μ と ν の全変動距離という.

２つの確率変数 X, Y の結合 (coupling) の概念を用いると、

$$\|\mu - \nu\| = \inf\{P(X \neq Y) : \ E\delta_X = \mu, \ E\delta_Y = \nu\}. \tag{4}$$

S が Polish 空間なので上限、下限は実現され、minimax 定理が成り立つ。

2.2 エーレンフェスト模型におけるカットオフ現象

次で、$r = 0$ の場合が古典的なエーレンフェストの壺である。

Definition 8 (Ehrenfests' model of diffusion). 状態空間 $\{0, 1, \ldots, N\}$ 上で次の推移確率をもつマルコフ連鎖をエーレンフェスト模型という：

$$P(i,j) = \begin{cases} \frac{i}{N+r}, & j = i-1 \geq 0, \\ \frac{r}{N+r}, & j = i, \\ \frac{N-i}{N+r}, & j = i+1 \leq N, \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases} \tag{5}$$

この模型において、玉に１から N までの番号を付けて、玉が一方の壺にあるかないかを 0, 1 で表せば、有限可換群 $\{0,1\}^N$ 上の酔歩が得られる。これは（超）立方体 $\{0,1\}^N$ 上の酔歩とよばれることも多い。

Theorem 9 (cut-off phenomenon in Ehrenfests' model [DS]). $x=0$ から出発した $\{0,1\}^N$ 上の酔歩を考え、時刻 n での分布を $\mu^{(N)}(n)$ とすると、$n=\frac{1}{4}N\log N+cN$、 $N\to\infty$ のとき、

$$\|\mu^{(N)}(n)-\pi^{\otimes N}\|\to 2[\Phi(\frac{1}{4}e^{-2c})-\Phi(0)],\quad -\infty<c<\infty \tag{6}$$

が成り立つ。ここで、$\Phi(x)=\int_{-\infty}^{x}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-u^2/2}du$、$\pi$ は $\{0,1\}$ 上の一様分布.

2.3 直積型マルコフ過程におけるカットオフ現象とその精密化

前頁の定理6のカットオフは [H1-2] でレベル 2 と呼ばれている強い形である。元の証明は L^2 での固有関数展開を用いた上下から評価に基づくもので、確率論的な本質が何処にあるのかわかりにくい。また、N,n をともに ∞ にした極限も優指数的な緩和現象という視点からは隔靴掻痒の感があった。実は、レベル2のカットオフ現象の自明な例は、カオスの伝播も自明であった直積型マルコフ過程の場合であり、その精密化（任意の誤差範囲で、十分大きな N を固定して $n\to\infty$ として成り立つこと）もできる。

Theorem 10 (Y.T.). 状態空間 S 上のマルコフ過程 $X(t)$ は混合的で、定常分布 π に関して推移確率密度 $p(t,x,y)$ をもち、初期分布 $\mu(0)=\mu$ から出発したときの時刻における分布密度 $p_\mu(t,x)$ は以下の条件を満たすと仮定する：

$$\rho_\mu(t):=\left(\int_S|p_\mu(t,x)-1|^2\pi(dx)\right)^{\frac{1}{2}}\ \to\ 0,\quad t\to\infty, \tag{7}$$

$$\int_S|p_\mu(t,x)-1|^3\pi(dx)=O(\rho_\mu(t)^3),\quad t\to\infty, \tag{8}$$

$$\inf\{p_\mu(t,x)>0:\ x\in S,\ t\geq t_0\},\quad \exists t_0>0. \tag{9}$$

このとき、各時刻 t における $X(t)$ の分布 $\mu(t)$ に対して、$N\to\infty$ のとき、

$$\|\mu(t)^{\otimes N}-\pi^{\otimes N}\|=\Phi(\frac{1}{2}\sqrt{N}\rho_\mu^{+}(t))-\Phi(-\frac{1}{2}\sqrt{N}\rho_\mu^{-}(t))+O(\frac{1}{\sqrt{N}}) \tag{10}$$

が成り立つ。ここで、 $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ は $t>t_0$ について一様であり、$\rho_\mu^{\pm}(t)$ は t の連続関数で、漸近的に $\rho_\mu(t)$ に等しい：

$$\rho_\mu^{\pm}(t)=\rho_\mu(t)+O(\rho_\mu(t)^2),\quad t\to\infty.$$

この系として、次の (Diaconis たちの意味での) カットオフも得られる。

Corollary 11. $N\to\infty$、$t\to\infty$、$\sqrt{N}\rho_\mu(t)\to a\in[0,\infty]$ のとき、

$$\lim_{N\to\infty}\|\mu(t)^{\otimes N}-\pi^{\otimes N}\|=\begin{cases}0, & a=0,\\ 2\int_0^{\frac{1}{2}a}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{t^2}{\sqrt{2\pi}}}dt, & 0<a<\infty,\\ 1, & a=\infty.\end{cases} \tag{11}$$

Example 12. $\rho_\mu(t) = ce^{-\lambda t}$, $c > 0$, $\lambda > 0$ のとき、$t = \frac{1}{2\lambda}\log N + s$, $-\infty < s < \infty$ とすれば、

$$\lim_{N\to\infty} \|\mu(t)^{\otimes N} - \pi^{\otimes N}\| = 2(\Phi(e^{\lambda s}/c) - \Phi(0)). \tag{12}$$

証明は [YT] を参照していただきたいが、ガウス分布関数 $\Phi(x)$ の現れるからくりは、全変動距離の評価が対数尤度 $\log p_\mu(t,x)$（の独立和）に対する中心極限定理に帰着されることにあり、一様評価は Berry-Esseen 評価の帰結である。

3 自明なカオスの伝播

3.1 連続時間エーレンフェスト模型

N 次元立方体 $\{0,1\}^N$ 上の単純酔歩（$r=0$ の場合）の推移確率は、

$$P(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{N}, & |y-x| = 1, \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{13}$$

である。そのままの時間尺度で考えれば、連続時間酔歩の生成作用素は

$$L\phi(x) = \frac{1}{N} \sum_{y:|y-x|=1} (\phi(y) - \phi(x)) \tag{14}$$

となる。ここで、$|x| = |\{i :\ 1 \le i \le N,\ x_i = 1\}$ である。

よって、時間尺度を変更すれば、**Example 6** と同様に形に書けて、

$$Q\phi(x) := NL\phi(x) = \sum_{i=1}^{N} Q^{(i)}\phi(x) \tag{15}$$

は直積型の酔歩の生成作用素となる。したがって、連続時間酔歩におけるカットオフ現象は **Theorem 10** の特別な場合となる。なお、連続時間酔歩の場合に簡単な直接計算によりカットオフ現象が証明できることは [DGM] でも指摘されている。

3.2 エーレンフェスト模型におけるカオスの伝播とカットオフ

立方体 $\{0,1\}^N$ 上の酔歩の時刻 n における分布 $\mu_n^{(N)}$ とする。

Lemma 13. $\{0,1\}^k$ への射影 $\mu_n^{(k|N)}(x)$ は、

$$\mu_n^{(k|N)}(x) = 2^{-k} \sum_{\xi\in\{0,1\}^k} (-1)^{x\cdot\xi} \left(1 - \frac{2|\xi|}{\tilde{N}}\right)^n \mu(\chi_1)^{|\xi|}, \quad x \in \{0,1\}^k \tag{16}$$

で与えられる。ただし、χ_1 は可換群 $\{0,1\}$ 上の自明でない（唯一の）指標とする。

$r>0$ の場合も同様に計算できて、これより、カオスの伝播が従う。

Theorem 14. パラメタ r は N ともに変化してよいが、

$$\lim_{N\to\infty}\frac{r}{N}=\alpha\in[0,\infty).$$

をみたすとする。このとき、任意の μ に対して、初期分布 $\mu^{\otimes N}$ から出発した $\{0,1\}^N$ 上の酔歩は時間変更 $n=[Nt]$ のもとでカオスを伝播し、$\mu(t)$ は次をみたす：

$$\langle\mu(t),\chi_1\rangle=\langle\mu,\chi_1\rangle e^{-2t/(1+\alpha)}. \tag{17}$$

この定理（を少し精密化したもの）の系として、Diaconis-Shashani の定理（**Theorem 9**）が従う。

3.3 注意

• Aldous はカットオフ現象の要件として、システムのサイズ N に対して、混合時間は $\log N$ であることも要請している。これまで知られているカットオフのほとんどはこの要件を満たしているが、エーレンフェスト模型のみが例外で $n=\frac{1}{4}N\log N+cN$ であった。

しかし、上述のように、時間変更 $n=[Nt]$ のもとで、カオスが伝播し、本質的に直積型マルコフ過程のカットオフ現象が起こることを考えると、$n=(\frac{1}{4}\log N+c)N$ であって、この要件が満たされることになる。

• Diaconis たちは、出発点が $x=0$ でない場合に、カットオフ現象が生じるかという問題を提起している。上記の定理によれば、初期分布が直積測度の場合にレベル 2 のカットオフが生じる。ところで、直積でない一般の対称な測度の場合は直積測度の線型結合であり、レベル 2 のカットオフ現象は、重ねあわせの原理は不成立である。したがって、出発点が $x=0$ でない場合、初期分布が直積でない限り、カットオフ現象は生じない。

4 未解決の諸問題

• リフル・シャフリングは、対称群の上の酔歩である。例えば、Haar 測度のもとで、$\phi(1)$ は $\{1,2,\ldots,N\}$ 上で一様分布し、$(\phi(1),\phi(2))$ は $\{1,2,\ldots,N\}^2\setminus$ *diagonal* 上で一様分布する。したがって、対称群 S_N については、

$$S_N\subset S_{N+1}\subset\cdot\subset S_\infty=\{\phi:\mathbb{N}\to\mathbb{N},\ \textit{bijection},\quad |\{i:\ \phi(i)\neq i\}|<\infty\}$$

を利用して、カオスの伝播が定式化できそうに思われる。しかし、まだ成功していない。

• [A] 以来、いろいろな有限群上の酔歩について急減少が示されている。残念ながら、可換群の直積以外の場合に、カオスの伝播の概念をどのように拡張して定式化できるかは手付かずの問題である。

• さらに、距離正則グラフ上の酔歩の場合は、association scheme を用いてカットオフ現象が証明はされている。しかし、距離正則グラフについては未知の事柄が多く、群上の酔歩に持ち上げることができるかどうかも知られていない。

参考文献

[A] D.Aldous, *Random walk on finite groups and rapidly mixing Markov chains.* Springer LNM 986(1983), 243-297.

[AD] D.Aldous and P.Diaconis, *Shuffling cards and stopping times.* AMS Monthly 93(1986), 333-348.

[D2] P.Diaconis, *The cut-off phenomenon in finite Markov chains.* Proc. NAS 93(1996), 51-72.

[D1] P.Diaconis, *Applications of non-commutative Fourier analysis to probability problems.* Springer LNM 1326(1988), 51-100.

[DS] P.Diaconis nd M.Shahshahani, *Generating a random permutation with random transpositions.* ZW 57(1981), 157-179.

[DGM] P.Diaconis, R.L.Graham and J.A.Morrison, *Asymptotic analysis of a random walk on a hypercube with many dimension.* Random Struct. Algor. 1(1990), 51-72.

[H1] A.Hora, *Cut-off phenomenon in random walks.* RIMS Kôkyûroku 1017(1997), 70-91(in Japanese).

[H2] A.Hora, *An axiomatic approach to the cut-off phenomenon for random walk on large distance-regular graphs.* Hiroshima Math. J. 30(2000), 271-299.

[K1] M.Kac, *Foundation of kinetic theory.* Proc. Third Berkeley Symp. on Math. Stat. and Prob., 3(1956), 171-197.

[K2] M.Kac, *Some probabilistic aspects of Boltzmann equation.* Acta Physica Austraiaca, Sippl., 10 (1973).

[M1] H.McKean, Jr., *Speed of approach to equlibrium for Kac's caricature of Maxwellian gas.* Arch. Rational Mech. Anal., 21 (1966), 343-367.

[M1] H.McKean, Jr., *Propagation of chaos for a class of nonlinear hyperbolic equations,* Lecture series in differential equations 7, 41-57, Catholic University, Washington D.C. (1967)

[M3] H.McKean, Jr., *Fluctuation in kinetic theory of gases.* Comm. Pure Appl Math., 28 (1975), 435-455.

[MT] H.Murata and H.Tanaka, *An equality for certain functionals of multidimensional probability distributions* , Hiroshima J.Math., 4 (1974), 75-81.

[Sz] A.S. Sznitman, *Topics in Propagation of Chaos.* Springer LNM 1464(1991), 165-251.

[ST] T.Shiga and H.Tanaka, *Central Limit Theorem for a System of Markovian Particles with Mean Field Interaction.* ZW 69(1985), 439-459.

[Sz] A.S. Sznitman, *Topics in Propagation of Chaos.* Springer LNM 1464(1991), 165-251.

[T] H.Tanaka, *Limit theorems for certain diffusion processes with interaction.* Proc. Intern. Taniguchi Symp. on Stochastic Analysis (ed. K. Itô), pp.469-488, Kinokuniya/North Holland.

[U] K.Uchiyama, *Fluctuations of Markovian systems in Kac's caricature of a Maxwellian gas.* J. Math. Soc. Japan, 35 (1983), 477-499.

[YT] Y.Takahashi, *Propagation of Chaos and Cut-off in Ehrenfests' model. In memory of Hiroshi Tanaka,* in preparation

[入門 II] 池田信行、小倉幸雄、眞鍋昭治郎、髙橋陽一郎、確率論入門 II、培風館（近く脱稿の予定）