数理解析研究所講究録
第 405 巻 1980 年 159-171

Boltzmann方程式におけるfluctuationと無限次元O-U過程

広島大理　田中　洋

§1. はじめに

Boltzmann方程式におけるfluctuationの問題についてはFox-Uhlenbeck [1]の研究があるが，数学の問題として取り上げる際にはKac [3]のようにマスター方程式から出発するのがわかり易い．マスター方程式そのものがすでにランダムな時間発展であり，さらに空間的一様な場合に限られているという点では，Kacの方法は，本来のLiouville方程式から出発するのに比べて"中間的"なものと考えざるを得ないが，いくつかの本質的で興味ある側面をそなえている．ここでは，マスター方程式から出発し，

i. hard sphereの場合に，大数の法則としてBoltzmann方程式が導かれることを示し (§2),

ii. Kacモデルの場合のfluctuationの問題として中心極限定理を取り扱う (§3).

§2. Hard sphere gas の Boltzmann 方程式と大数法則

Hard sphere gas の Boltzmann 方程式（空間的一様）は

$$(2.1)\quad \frac{\partial u(t,x)}{\partial t}=\int_{R^3\times S^2}\{u(t,x')u(t,y')-u(t,x)u(t,y)\}|(x-y,\ell)|dy\,d\ell$$

の形をしている．ただし $\ell\in S^2$（2次元単位球面）で，

$$x'=x+(y-x,\ell)\ell,\quad y'=y-(y-x,\ell)\ell.$$

(2.1) に対応する n 粒子のマスター方程式は n 個の粒子の速度のランダムな時間発展（R^{3n} 上の飛躍型マルコフ過程）を記述している．このマルコフ過程は大まかにいえば次のようなものである．平均 $2(n-1)^{-1}$ の指数型滞在時間 T ののちに第 i 粒子と第 j 粒子の間に"衝突"が起る．ただし，組 (i,j), $1\leq i<j\leq n$, は確率 $\binom{n}{2}^{-1}$ でえらばれる．x_i, x_j $(\in R^3)$ でそれぞれ第 i 粒子と第 j 粒子の衝突前の速度を表わすとき，衝突後の速度は

$$x_i'=x_i+(x_j-x_i,\ell)\ell,\quad x_j'=x_j-(x_j-x_i,\ell)\ell$$

である．ここに，ℓ は S^2 上に一様分布している．

このようにして定まるマルコフ過程は基礎となる適当な確率空間 $(\Omega,\mathcal{F},P)$ の上のマルコフ過程

$$X^{(n)}(t)=(X_1^{(n)}(t),\cdots,X_n^{(n)}(t))$$

として実現される．$X_k^{(n)}(t)$ は第 k 粒子の時刻 t における速度である．$\{X^{(n)}(t)\}$ の生成作用素 K_n は

$$(K_n\varphi)(x_1,\cdots,x_n)$$
$$=\frac{1}{n}\sum_{1\le i<j\le n}\int_{S^2}\{\varphi(x_1,\cdots,x_i',\cdots,x_j',\cdots,x_n)-\varphi\}|(x_i-x_j,l)|dl$$

で与えられる．$\{X^{(n)}(t)\}$ を(2.1)に対応する(n 粒子の)マスター過程，K_n をマスター作用素という．

注意．もし第 i 粒子と第 j 粒子とが平均1の指数型滞在時間 T_{ij} ののちに衝突するのであれば，前記の滞在時間 T に相当するのは $\min_{1\le i<j\le n} T_{ij}$ で，これは平均 $\binom{n}{2}^{-1}$ の指数分布に従う．これでは，粒子数 n が大きくなったとき単位時間内に衝突が頻繁に起りすぎるので，n に依存した時間の scaling を行って前記の滞在時間 T の平均が $2(n-1)^{-1}$ になるようにした．

$\sigma>0$ を定数(以下固定)とし，
$$S(\sqrt{n}\sigma)=\{(x_1,\cdots,x_n)\in\mathbb{R}^{3n}:\sum_{k=1}^{n}|x_k|^2=n\sigma^2\}$$
とおく．衝突時におけるエネルギー保存($|x'|^2+|y'|^2=|x|^2+|y|^2$)により，もしマルコフ過程 $\{X^{(n)}(\cdot)\}$ が $t=0$ において $S(\sqrt{n}\sigma)$ の上にあれば，任意の時刻 $t>0$ においてもそうである．以下，$u^{(n)}(dx_1\cdots dx_n)$，$n>1$，を $S(\sqrt{n}\sigma)$ 上の確率分布(これは $\mathbb{R}^{3n}$ 上の確率分布でその support $\subset S(\sqrt{n}\sigma)$ といってもよい)で $dx_1,\cdots,dx_n$ につき対称であると仮定する．このとき，列 $\{u^{(n)}\}$ がカオス的(Kac [2] では Boltzmann property

と呼ばれている）であるとは，任意の m と $\varphi_k \in C_0(\mathbb{R}^3)$, $1 \leq k \leq m$，に対し

$$\langle u^{(n)}, \varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_m \rangle \longrightarrow \prod_{k=1}^{m} \langle u_0, \varphi_k \rangle, \quad n \to \infty$$

が成りたつことをいう．ただし，u_0 は $\mathbb{R}^3$ 上のある確率分布，$\varphi_1 \otimes \cdots \otimes \varphi_m$ は関数 $\varphi_1(x_1) \cdots \varphi_m(x_m)$ のことであるが上ではこれをとくに $S(\sqrt{n}\sigma)$ 上の関数とみなしている．さらに，一般に記号 $\langle \mu, \varphi \rangle$ は関数 φ の測度 μ による積分を表わし，$C_0(\mathbb{R}^3)$ は台がコンパクトな $\mathbb{R}^3$ 上の連続関数の空間のことである．上の定義において u_0 を強調したいときは，便宜上，$\{u^{(n)}\}$ を u_0－カオス的といい，また u_0 を列 $\{u^{(n)}\}$ に対応する一粒子分布ということにする．

一般に，点 x における δ－分布を δ_x と書くことにし，

$$\overline{X}^{(n)}(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \delta_{X_k^{(n)}(t)} \qquad \text{（粒子数測度）}$$

とおくと，ω を固定したときこれは $\mathbb{R}^3$ 上の確率測度である．

次の定理は，$\{\overline{X}^{(n)}(t)\}$ の時間発展が $n \to \infty$ の極限においては Boltzmann 方程式 (2.1) で与えられることを示すものである．

定理 2.1（大数の法則）．密度関数 $u_0(x)$ をもつ $\mathbb{R}^3$ 上の確率分布 u_0 で

$$(2.2) \qquad \int_{\mathbb{R}^3} |x|^2 u_0(dx) = \sigma^2 \quad , \qquad \int_{\mathbb{R}^3} |x|^4 u_0(dx) < \infty$$

をみたすようなものが与えられたとし，

$$(2.3) \qquad \sup_n \int_{S(\sqrt{n}\sigma)} |x_1|^4 u^{(n)}(dx_1 \cdots dx_n) < \infty$$

をみたすような任意の u_0-カオス的な列 $\{u^{(n)}\}$ をとり，$u^{(n)}$ を初期分布とするマスター過程を $\{X^{(n)}(t)\}$ とする。このとき

$$\overline{X}^{(n)}(t) \xrightarrow[\text{(確率測度としての収束)}]{} u(t),\ n \to \infty \ \text{(確率収束)}$$

が成りたつ．ここに $u(t) = u(t,x)\,dx$ で $u(t,x)$ は $u_0(x)$ を初期値とする (2.1) の解（一意）である．

証明には，$\{\overline{X}^{(n)}(t)\}$ を確率測度の値をもつマルコフ過程と見て，マルチンゲール問題に帰着し，極限移行のもとでの安定性および Povzner [6] による (2.1) の解の存在・一意性の結果を用いる．詳しいことは省略する．

系（カオスの伝播）．$\{X^{(n)}(\cdot)\}$ の初期分布を $\{u^{(n)}\}$，時刻 t での分布を $\{u^{(n)}(t)\}$ とする．u_0 が定理 2.1 のように与えられ，$\{u^{(n)}\}$ が u_0-カオス的で (2.3) をみたすならば，任意の $t \geq 0$ に対し $\{u^{(n)}(t)\}$ は $u_0(t)$-カオス的である。$u_0(t)$ は定理 2.1 のと同じである．

注意（定理 2.1 の elaboration）．W を $[0,\infty)$ から R^3 への関数で右連続かつ左極限をもつようなものの全体とすると，確率過程 $\{X_k^{(n)}(t)\}$ は W に値をもつ確率変数 $X_k^{(n)}$ と見なすこ

とが出来る．そこで

$$\overline{X}^{(n)} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \delta_{X_k^{(n)}}$$

とおくと，これはW上の確率測度を値にもつ確率変数である．$\{X^{(n)}(\cdot)\}$の初期分布の列$\{u^{(n)}\}$に関し定理2.1と同じ仮定をおくとき，

$$\overline{X}^{(n)} \xrightarrow[\text{(W上の確率測度としての収束)}]{} U, \quad n\to\infty \ (\text{確率収束})$$

が成りたつ．ただし，Uは(2.1)に対応するマルコフ過程（初期分布はu_0）—— このような型のマルコフ過程については McKean [4] または Tanaka [7] を参照 —— によって導かれるW上の確率測度である．

§3. Kacモデルにおけるfluctuation（中心極限定理）

実直線R上を運動しているn個の粒子から成る系を考える．空間的一様な場合のみを考えるので，粒子の位置は無視しその速度だけに注目し，第i粒子の速度を$X_i^{(n)}(t)$で表わす．Kacモデルにおける（n粒子の）マスター過程

$$X^{(n)}(t) = (X_1^{(n)}(t), \cdots, X_n^{(n)}(t))$$

とは，その生成作用素K_nが次頁の式で与えられるようなR^n上のマルコフ過程のことである（Kac [2] 参照）．

$$(K_n\varphi)(x_1,\cdots,x_n)$$
$$=\frac{1}{n}\sum_{1\le i<j\le n}\int_{-\pi}^{\pi}\{\varphi(x_1,\cdots,x_i',\cdots,x_j',\cdots,x_n)-\varphi\}\,\text{đ}\theta,$$

ただし

$$\begin{pmatrix}x_i'\\x_j'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_i\\x_j\end{pmatrix},\quad \text{đ}\theta=\frac{d\theta}{2\pi}.$$

対応するBoltzmann方程式は

$$(3.1)\quad \frac{\partial u(t,x)}{\partial t}=\int_{\mathbb{R}\times(-\pi,\pi)}\{u(t,x')u(t,y')-u(t,x)u(t,y)\}\,dy\,\text{đ}\theta,$$

ただし,

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}.$$

前と同じように(ただし簡単のため$\sigma=1$とする)

$$S(\sqrt{n})=\{(x_1,\cdots,x_n)\in\mathbb{R}^n:\sum_{k=1}^n x_k^2=n\}$$

とおく. Kacモデルにおいては, "衝突"に際し, 運動量は保存されないが, エネルギーは保存される$(|x'|^2+|y'|^2=|x|^2+|y|^2)$. したがって, $\{X^{(n)}(\cdot)\}$の初期値が$S(\sqrt{n})$の上にあるならば, それ以後の任意の時刻で$X^{(n)}(t)\in S(\sqrt{n})$である. 以下, $u^{(n)}=u^{(n)}(dx_1\cdots dx_n)$は$S(\sqrt{n})$上の確率分布で$dx_1,\cdots,dx_n$につき対称であると仮定する. このとき, 列$\{u^{(n)}\}$がカオス的($u_0$-カオス的)であるという定義はhard sphereの場合と

同様である．そして Kac モデルにおいては，$\{X^{(n)}(\cdot)\}$ の初期分布の列 $\{\mu^{(n)}\}$ が u_0-カオス的であるという条件だけで（(12.3) のような付帯条件なしに），大数の法則，カオスの伝播が成りたつ（これらの叙述は，hard sphere の場合と同様であるので，省略する）．

粒子数測度 $\overline{X}^{(n)}(t)=n^{-1}\sum_{k=1}^{n}\delta_{X_k^{(n)}(t)}$ は $n\to\infty$ の極限においてのみ $u(t)$（$u(t)=u(t,x)dx$ で $u(t,x)$ は $u_0(x)$ を初期値とする Boltzmann 方程式 (3.1) の解）に等しいのであって，$\overline{X}^{(n)}(t)$ そのものは $u(t)$ のまわりにゆらいでいる．そのゆらぎについて調べるには

(3.2) $$\overline{X}^{(n)}(t)=u(t)+\frac{1}{\sqrt{n}}Y^{(n)}(t)$$

とおいて，$Y^{(n)}(t)$ について考察すればよい．まずは，$n\to\infty$ における $\{Y^{(n)}(t)\}$ の極限過程は何かという問題が考えられるが，この種の問題は確率論では中心極限定理として取り扱われている．$Y^{(n)}(t)$ のとる値は全測度が 0 の符号付測度であるが，$n\to\infty$ での極限においてはもはやそうではない．それは超関数の値をとる，すなわち無限次元の，Ornstein-Uhlenbeck 過程である．このようなことは，少くとも大まかには，Kac [3], McKean [5] の仕事からわかるが，$\{Y^{(n)}(t)\}$ の極限定理を無限次元確率過程の収束の問題として厳密にとらえようとする際は，まだ問題点もあるように思う．

本節の目的は，このような極限定理を最近K. Itô [9][11]により研究されている無限次元過程の枠組の中で厳密に取り扱うことである．[9]に従い，次のような記号を導入しておく．

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2} \qquad (\text{Hermite 多項式})$$

$$e_0(x) = \sqrt{g(x)}\ , \quad g(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{-x^2/2}$$

$$e_n(x) = e_0(x) H_n(x)/\sqrt{n!} \qquad (\text{Hermite 関数})$$

$$\mathcal{P} = \{ \varphi = \sum a_k e_k\ (\text{有限和}),\ a_k = \text{real} \}$$

$$\|\varphi\|_n^2 = \sum a_k^2 \left(k + \tfrac{1}{2}\right)^{2n}, \quad n = 0, \pm 1, \cdots$$

$\mathcal{S}_n = \mathcal{P}$ を $\|\cdot\|_n$ により完備化して得られるヒルベルト空間

$\mathcal{S}_n' = \mathcal{S}_n$ の共役空間 $(\cong \mathcal{S}_{-n})$

$$\mathcal{S} = \bigcap \mathcal{S}\ , \quad \mathcal{S}' = \bigcup \mathcal{S}_n'\ .$$

ここでは $\{X^{(n)}(t)\}$ の初期分布が $S(\sqrt{n})$ 上の一様分布 μ_n であるような特別な場合に話を限る．この場合でも詳しい証明はかなり長くなるので，大体の結果だけをのべることにする。まず $\{\mu_n\}$ は g-カオス的であることを注意しておく．ただし $g = g(x)dx$．さらに μ_n はマルコフ過程 $\{X^{(n)}(t)\}$ の不変測度，すなわち，$u^{(n)}(t) \equiv \mu_n$ が成りたつ．したがって $\{X^{(n)}(t)\}$ は定常過程でもある．ところで，以下の計算のためには $\{Y^{(n)}(t)\}$ を(3.2)で定義するよりは，少し修正して

(3.3) $$Y^{(n)}(t) = \sqrt{n}\left(\overline{X}^{(n)}(t) - g\right)/e_0$$

と定義しておく方が便利である．(3.3)の意味はテスト関数

$\varphi \in \mathcal{S}$ に対して

$$\langle Y^{(n)}(t), \varphi \rangle = \sqrt{n}\left\{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\frac{\varphi(X_k^{(n)}(t))}{e_0(X_k^{(n)}(t))} - \langle g, \varphi/e_0 \rangle\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}\left\{\frac{\varphi(X_k^{(n)}(t))}{e_0(X_k^{(n)}(t))} - (e_0, \varphi)_0\right\}$$

となることである．ここに $(\ ,\ )_0$ は $\mathcal{S}_0$ における内積．
(3.3) で与えられる $\{Y^{(n)}(t)\}$ —— これもやはりマルコフ過程になっている —— の生成作用素は

$$(L_n F)(p) = \frac{n}{2}\int_{-\pi}^{\pi}\left\langle \left(g + \frac{e_0 p}{\sqrt{n}}\right)\otimes\left(g + \frac{e_0 p}{\sqrt{n}}\right), F\left(p + \frac{\varepsilon_{x,y}}{\sqrt{n}\, e_0}\right) - F(p)\right\rangle d\theta$$

$$- \frac{1}{2}\int_{-\pi}^{\pi}\left\langle g + \frac{e_0 p}{\sqrt{n}}, F\left(p + \frac{\varepsilon_{x,x}}{\sqrt{n}\, e_0}\right) - F(p)\right\rangle d\theta$$

と表わすことが出来る．ただし $\varepsilon_{x,y} = \delta_{x'} + \delta_{y'} - \delta_x - \delta_y$.
この L_n を $\mathcal{S}'$ ($\mathcal{S}_1'$ でも同じ) 上の関数に作用するものと考えると，それはマルコフ過程の生成作用素になり得ないであろう．しかし，L_n をもっとせまい空間，例えば

$$\mathcal{M}_n = \left\{p = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}\left\{e_0(x_k)^{-1}\delta_{x_k} - e_0\right\}\right\}$$

上の関数に作用するものと考えると，L_n はたしかに ($\mathcal{M}_n$ を状態空間とする) マルコフ過程 $\{Y^{(n)}(t)\}$ の生成作用素になっている．次に幾分乱暴であるが，$n \to \infty$ のときの $(L_n F)(p)$ の極限を求めて見よう．実際，次のことが証明出来る．すな

わち，$\Phi\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{m+1})$ を用いて $F(p)=\Phi(\langle p,e_0\rangle,\cdots,\langle p,e_m\rangle)$
と表わされているときは

$$\lim_{n\to\infty}(L_nF)(p)=(LF)(p),$$

ただし

$$(3.4)\quad (LF)(p)=\sum_{k=1}^{m}\lambda_k\partial_{kk}^2\Phi(\langle p,e_0\rangle,\cdots,\langle p,e_m\rangle) -\sum_{k=1}^{m}\lambda_k\langle p,e_k\rangle\partial_k\Phi(\langle p,e_0\rangle,\cdots,\langle p,e_m\rangle),$$

$$(3.5)\quad \lambda_n=\int_{-\pi}^{\pi}(1+\delta_{n0}-\cos^n\theta-\sin^n\theta)d\theta .$$

1°. 極限過程の存在について．(3.4)で定義される L を生成作用素とするマルコフ過程が $\mathcal{S}'$-過程として存在したとして，それを $\{Y(t)\}$ と書き

$$Y_k(t)=\langle Y(t),e_k\rangle\ ,\quad k=0,1,\cdots$$

とおくと，

$$\begin{cases} Y_0(0)=Y_2(0)=0,\quad Y_k(0)\text{の分布}=g\ (k\neq 0,2)\\ \{Y_k(0)\}_{k=0,1,\cdots}\text{は独立}. \end{cases}$$

したがって，L の具体的な形(3.4)を用いて

$$\begin{cases} Y_0(t)=Y_2(t)=0,\\ \{Y_k(t)\}_{k=0,1,\cdots}\text{は独立},\\ \text{おのおのの}\{Y_k(t)\}\ (k\neq 0,2)\text{は生成作用素が}\\ \lambda_k\left(\frac{d^2}{dx^2}-x\frac{d}{dx}\right)\text{の1次元Ornstein-Uhlenbeck過程}, \end{cases}$$

がわかる．このことよりLを生成作用素とするマルコフ過程$\{Y(t)\}$はたしかに存在して，いわば無限次元（$\mathcal{S}_1'$上の）Ornstein-Uhlenbeck過程ともいうべきものになっている．

2°. 線型化衝突作用素との関係. 線型化衝突作用素$\mathcal{L}$を

$$\mathcal{L}u = e_0 * u + u * e_0 - u - e_0 \int u(y) e_0(y) dy$$

により定義する．ただし

$$u_1 * u_2 = \int_{\mathbb{R}\times(-\pi,\pi)} u_1(x') u_2(y') e_0(y) dy d\theta .$$

このとき，e_nは$\mathcal{L}$の固有関数になっている：

(3.6) $\quad \mathcal{L} e_n = -\lambda_n e_n$ ，（λ_nは(3.5)で与えたもの）.

そこで

$$E\{e^{i\langle B(t), \varphi\rangle}\} = e^{t(\mathcal{L}\varphi, \varphi)_0}, \quad \varphi \in \mathcal{S}$$

によって定まる$\mathcal{S}'$上（実は$\mathcal{S}_1'$上）のBrown運動を$\{B(t)\}$とすると，極限過程$\{Y(t)\}$は確率微分方程式

$$dY(t) = dB(t) + \mathcal{L} Y(t) dt$$

の定常過程としての解になっている．

3°. 収束の問題. 次のことが証明出来る．

定理3.1. $m \geq 1$, $0 \leq t_1 < \cdots < t_m$, $k_1, \cdots, k_m \geq 1$を任意に与えたとき，$\langle Y^{(n)}(t_1), e_{k_1}\rangle, \cdots, \langle Y^{(n)}(t_m), e_{k_m}\rangle$の結合分布は$\langle Y(t_1), e_{k_1}\rangle, \cdots, \langle Y(t_m), e_{k_m}\rangle$の結合分布に収束する．

参考文献

[1] R. F. Fox and G. E. Uhlenbeck, Contributions to non-equilibrium thermodynamics. I, II, Phys. Fluids 13 (1970).

[2] M. Kac, Foundations of Kinetic Theory, Proc. Third Berkeley Symp. on Math. Stat. and Prob., Vol.III (1956), 171-197.

[3] M. Kac, Some probabilistic aspects of the Boltzmann-equation, Acta Physica Austriaca, Suppl. X, (1973), 379-400.

[4] H. P. McKean, A class of Markov processes associated with nonlinear parabolic equations, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 56 (1966), 1907-1911.

[5] H. P. McKean, Fluctuations in the kinetic theory of gases, Comm. Pure Appl. Math., 28 (1975), 435-455.

[6] A. Y. Povzner, On Boltzmann's equation in the kinetic theory of gases, Mat. Sb. 58 (1962), 63-86.

[7] H. Tanaka, Probabilistic treatment of the Boltzmann equation of Maxwellian molecules, Z. Wahrscheinlichkeitstheorie 46 (1978), 67-105.

[8] O. E. Lanford III, Time evolution of large classical system, Lecture Notes in Physics, 38 (1975), 1-111.

[9] K. Itô, Stochastic analysis in infinite dimensions, In Stochastic Analysis edited by Friedman and Pinsky, Academic Press (1978).

[10] P. Billingsley, Convergence of Probability Measures, Wiley, New York, 1968.

[11] 伊藤 清, 無限個の粒子の運動 (確率過程論と開放系の統計力学, 数理研講究録 367, 1979).