Derivation of fractional diffusion equations from stochastic harmonic chains

東京科学大学・理学院　須田 颯
Hayate Suda
School of Science,
Institute of Science Tokyo

概要

本稿では,「確率調和振動子鎖」と呼ばれる数理モデルから「分数階拡散方程式」を導出する問題に関する講演者の結果を紹介する. モデルの定義や結果に先立ち, この問題の背景にある現象や関連する先行結果を説明する.

1 一次元非線形系における異常拡散と確率調和振動子鎖

均質な媒質中の熱拡散現象は拡散方程式に従うことが期待されるが, 一次元非線形系においては通常より速い熱の異常拡散が見られることがあり, 対応する巨視的挙動は分数階拡散方程式

$$\partial_t \bar{e}(y,t) = -D(-\Delta)^a \bar{e}(y,t) \quad 0 < a < 1 \tag{1.1}$$

であると予想されている. しかし, 決定論的な時間発展をする非線形系の数学的解析は困難であり, 通常熱拡散を意味するフーリエの法則の厳密導出すらもまだ解決されておらず, また計算可能な線形系である調和振動子鎖においてはそもそも拡散現象が見られない. そこで, 非線形効果の近似として, 隣り合う振動子の運動量を交換する確率的ノイズが加えられた調和振動子鎖 (確率調和振動子鎖) が, 上記した異常拡散を数学的に扱うための数理モデルとして提案され, 実験や理論予測と整合した結果が得られることから, 望ましい非線形系的な性質を備えていることが知られている [5]. そのダイナミクスは, 次の確率微分方程式系

$$\begin{cases} dq_x(t) = p_x(t)dt \\ dp_x(t) = -(\alpha \star q)_x(t)dt + \displaystyle\sum_{|z|=\pm 1} (p_{x+z}(t) - p_x(t))\, dN_{x,x+z}(t), \end{cases}$$

によって記述される. ここで, $p_x(t)$, $q_x(t)$ は x 番目の振動子の時刻 t における運動量, 相対的位置であり, $\alpha : \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$ は振動子間の相互作用ポテンシャルであって, 次の仮定を満たすものである.

$(a.1)$ $\alpha_x \le 0 \ \forall x \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$, $\exists x \in \mathbb{Z}$ s.t. $\alpha_x \ne 0$.

$(a.2)$ $\alpha_x = \alpha_{-x} \ \forall x \in \mathbb{Z}$.

$(a.3)$ $\exists C > 0$ s.t. $|\alpha_x| \le Ce^{-\frac{|x|}{C}}$, $\forall x \in \mathbb{Z}$.

$(a.4)$ $\hat{\alpha}(k) > 0 \ \forall k \ne 0$, $\hat{\alpha}(0) = 0, \hat{\alpha}''(0) > 0$, ここで, $\hat{\alpha}$ は α の離散フーリエ変換である:

$$\hat{\alpha}(k) \coloneqq \sum_{x\in\mathbb{Z}} \alpha_x e^{-2\pi\sqrt{-1}xk}, \quad k \in \mathbb{T} \coloneqq \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right).$$

また, $\star$ は $\mathbb{Z}$ 上の合成積であり, $(N_{x,x+z}(t) = N_{x+z,x}(t))_{x\in\mathbb{Z}, z=\pm 1}$ は 平均 $\gamma > 0$ の 独立同分布ポアソン過程である. 興味があるのは, x 番目の振動子のエネルギー $e_x(t)$ 及びその経験分布 $\mathcal{E}_\varepsilon(t)$ の時空ス

ケール極限であり, それぞれ以下で与えられる量である.

$$e_x(t) := \frac{1}{2}|p_x(t)|^2 - \frac{1}{4}\sum_{x'\in\mathbb{Z},x'\neq x}\alpha_{x-x'}|q_x(t)-q_{x'}(t)|^2, \quad \mathcal{E}_\varepsilon(t) := \varepsilon\sum_{x\in\mathbb{Z}}e_x(t)\delta_{\varepsilon x}.$$

我々は 次の 主張 A を証明したい:

主張 A "適当な意味"で, 任意の $t\geq 0$ に対して次の収束

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\mathbb{E}\left[\mathcal{E}_\varepsilon\left(\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)\right] = \bar{e}(y,t)\,dy$$

が成立し, $\bar{e}(y,t)$ は (1.1) を満たす. ここで, $\mathbb{E}$ は 初期条件 $p(0), q(0)$ 及び確率的ノイズに対する期待値であり, $f(\varepsilon)$ は $\varepsilon\to 0$ で 0 に収束する時間スケーリングである.

上記した確率調和振動子鎖について, 以下の結果が知られている.

Theorem 1.1 ([1] + [3], [4])**.** 初期条件に関する適当な仮定のもとで 主張 *A* が成立する. この場合の時間スケーリングは $f(\varepsilon) = \varepsilon^{3/2}$ であり, 分数階ラプラシアンの指数は $a = 3/4$ となる.

Remark 1.1. 一次元非線形ハミルトン系のポテンシャル関数が適当な仮定を満たす場合, 巨視的な熱の異常拡散が期待され, 対応する分数階ラプラシアンの指数 a は, ポテンシャル関数の対称性に応じて $3/4, 5/6$ のどちらかであることが *[7]* によって予想されている. *Theorem 1.1* ではこの予想と整合する指数が得られている.

2 強い長距離相関を持つ確率調和振動子鎖における異常拡散 [8]

先行結果において数学的に興味深い点の一つは, 確率調和振動子鎖が局所的な相互作用しか持たない場合, すなわち, ある $L>0$ が存在して相互作用ポテンシャル α が $\alpha_x = 0, |x|>L$ を満たす場合でも, 巨視的に大域的な作用素である分数階ラプラシアンが現れることである. よって, α に対して (a.3) よりも強い長距離相関の仮定を置いた場合, 分数階ラプラシアンの指数に影響を与えることが期待されるが, その影響の仕方は, 対称排他過程などの拡散的な挙動を示す微視的系とは全く異なることが予想される. そこで [8] では, 次のような多項式減衰する相互作用ポテンシャルを持つ確率調和振動子鎖を考察した.

$$\alpha_x := -|x|^{-\theta} \quad x\neq 0, \quad \alpha_0 := 2\sum_{x\neq 0}|x|^{-\theta} \qquad \theta > 2.$$

Theorem 2.1. 初期条件に関する適当な仮定のもとで 主張 *A* が成立し, 時間スケーリング $f(\varepsilon) = f_\theta(\varepsilon)$ 及び 分数階ラプラシアンの指数 $a = a_\theta$ は θ に応じて以下のように変化する.

$$f_\theta(\varepsilon) = \begin{cases} \varepsilon^{\frac{6}{7-\theta}} & 2<\theta<3, \\ |h(\varepsilon)|^3 & \theta = 3, \\ \varepsilon^{\frac{3}{2}} & \theta > 3, \end{cases} \qquad a_\theta = \begin{cases} \dfrac{3}{7-\theta} & 2<\theta<3, \\ \dfrac{3}{4} & \theta\geq 3, \end{cases}$$

ただし, h は $y\mapsto y^2\left(\sqrt{-\log y}\right)^{-1}$ の $[0,1)$ 上における逆関数である.

Remark 2.1. 例えば, 一次元対称排他過程であって, $x, y\in\mathbb{Z}$ 間の転移確率が $|x-y|^{-\theta}$, $\theta>1$ であるものの巨視的な拡散は, 指数 $\min\{(\theta-1)/2, 1\}$ の分数階拡散方程式に従うことが知られている *[2]*. この模型における θ と指数の関係は典型的なものであり, *Theorem 2.1* によって得られた a_θ は, これとは全く異なる θ 依存をしていることに注意されたい. また, *[8]* のイントロダクションでは, 系の特徴量の漸近的振る舞いにより, 指数 a がどのように定まるのかを議論している.

3　磁場中の確率調和振動子鎖における異常拡散 [6]

一般に, 微視的系の持つ対称性とその巨視的振る舞いは密接に関わっていることが期待される. [6] では, 磁場のある二次元空間中の一次元確率調和振動子鎖における巨視的な熱拡散の振る舞いが考察された. 各振動子は磁場によりローレンツ力を受け, この場合のダイナミクスは以下で与えられる.

$$
\begin{cases}
dq_x^{(i)}(t) = p_x^{(i)}(t)dt \quad i = 1,2, \\
dp_x^{(i)}(t) = \left(-\left(q_{x+1}^{(i)} + q_{x-1}^{(i)} - 2q_x^{(i)}\right)(t) + B\delta_{i,1}p_x^{(2)}(t) - B\delta_{i,2}p_x^{(1)}(t)\right)dt \\
\qquad + \sum_{|z|=\pm1} \left(p_{x+z}^{(i)}(t) - p_x^{(i)}(t)\right) dN_{x,x+z}(t) \quad i = 1,2,
\end{cases}
$$

ここで, $(p_x^{(1)}, p_x^{(2)})$, $(q_x^{(1)}, q_x^{(2)})$ は二次元空間中における x 番目の振動子の運動量, 位置であり, $B > 0$ は磁場の強さを表す. また, x 番目の振動子が持つエネルギー $e_x(t)$ は,

$$
e_x(t) \coloneqq \sum_{i=1,2} \left(\frac{1}{2}\left|p_x^{(i)}(t)\right|^2 + \frac{1}{4}\sum_{z=\pm1}\left|q_x^{(i)}(t) - q_{x+z}^{(i)}(t)\right|^2\right)
$$

によって定義される. 磁場の効果により系の回転対称性が壊された結果, 巨視的な振る舞いは以下のようになる.

Theorem 3.1. *初期条件に関する適当な仮定のもとで 主張 A が成立する. この場合の時間スケーリングは $f(\varepsilon) = \varepsilon^{5/3}$ であり, 分数階ラプラシアンの指数は $a = 5/6$ となる.*

Remark 3.1. *磁場モデルから得られる指数 5/6 は Remark 1.1 で紹介した予想と整合するものであり, 局所的な相互作用をする確率調和振動子鎖であって指数 5/6 が得られるのは, 現状では磁場モデルのみである. ところが, 磁場モデル は [7] の仮定 (弾道的スケールで時間発展する保存量の存在) を満たさないため, 異なる理由でたまたま同じ指数が現れているのではないかとも考えられている. 異常拡散に現れる指数の数学的理解は未だに十分でなく, 今後の進展を期待したい.*

4　証明のスケッチ：二段階極限

Theorems 2.1, 3.1 の証明では, [1, 3] により導入された, “ミクロ”から “メゾ”, “メゾ”から “マクロ” の二段階極限をとるアイデアが重要となる. ここでは, 簡単のため, Section 1, 2 で考察した設定であって, $\theta > 2$ のもとでの証明方針を紹介する. Theorem 2.1 に関しては, [4] による直接極限のアイデアを用いることも可能である, 詳細は [8] を参照されたい.

4.1　ミクロからメゾ：振動子鎖からボルツマン方程式

一段階目のスケール極限では, 微視的なエネルギー経験分布のメゾスコピックな振る舞いとして, あるボルツマン方程式を導出する. 鍵となるのは, エネルギー経験分布を直接解析するのではなく, より扱いやすい代替量を導入することであり, そのために, まずいくつかの記号を用意する.

- $J : \mathbb{R} \times \mathbb{T} \to \mathbb{R} \times \mathbb{T}$ に対し, 第一変数に対するフーリエ変換を $\tilde{J}$ とかく, すなわち,

$$
\tilde{J}(p,k) \coloneqq \int_{\mathbb{R}} J(y,k)e^{-2\pi i py}dy.
$$

- $\mathbb{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{T})$ を, $\mathbb{R}\times\mathbb{T}$ 上の急減少関数全体からなり, 以下のノルム

  $$\|J\| := \int_{\mathbb{R}} \sup_{k\in\mathbb{T}} \left|\tilde{J}(p,k)\right| dp$$

  が与えられたノルム空間とする.

調和振動子鎖の波動関数 $\psi_x(t)$ を, 以下で定義される $\mathbb{T}$ 上の関数 $\hat{\psi}(k,t)$ の逆フーリエ変換として定義する.

$$\hat{\psi}(k,t) := \omega(k)\,\hat{q}(k,t) + \mathrm{i}\hat{p}(k,t),$$

ただし, $\omega(k) := \sqrt{\hat{\alpha}(k)}$ である. この $\psi_x(t)$ を用いて, エネルギーの 局所スペクトル密度 $W_\varepsilon(t) \in \mathbb{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{T})'$ を, 次式で定義する.

$$\begin{aligned}\langle W_\varepsilon(t), J\rangle &:= \frac{\varepsilon}{2}\sum_{x,x'\in\mathbb{Z}} \mathbb{E}\left[\psi_{x'}\left(\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)^{*}\psi_x\left(\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)\right]\int_{\mathbb{T}} e^{2\pi\mathrm{i}(x'-x)k} J\left(\frac{\varepsilon(x+x')}{2},k\right)^{*} dk\\ &= \frac{\varepsilon}{2}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} \mathbb{E}\left[\hat{\psi}\left(k-\frac{\varepsilon p}{2},\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)^{*}\hat{\psi}\left(k+\frac{\varepsilon p}{2},\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)\right]\tilde{J}(p,k)^{*}.\end{aligned}$$

ここで, $J(y,k) = J(y)$ の場合は

$$\langle W_\varepsilon(t), J\rangle = \left\langle \mathcal{E}_\varepsilon\left(\frac{t}{f(\varepsilon)}\right), J\right\rangle,$$

また $J(y,k) = J(k)$ の場合は

$$\langle W_\varepsilon(t), J\rangle = \frac{\varepsilon}{2}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} \mathbb{E}\left[\left|\hat{\psi}\left(k,\frac{t}{f(\varepsilon)}\right)\right|^{2}\right]\tilde{J}(k)^{*},$$

が成立することに注意されたい.

Theorem 4.1. ある $\mathbb{R}\times\mathbb{T}$ 上の有限測度 μ_0 が存在して, 任意の $J\in\mathbb{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{T})$ に対し,

$$\langle W_\varepsilon(t), J\rangle = \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} J(y,k)d\mu_0$$

が成立すると仮定する. また, ある $\gamma_0 > 0$ が存在して, $\gamma = \varepsilon\gamma_0$ であると仮定する. この時, 以下が成立する.

- 任意の $t\geq 0$ に対し, ある $W(t)\in\mathbb{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{T})'$ が存在して,

  $$\lim_{\varepsilon\to 0}|\langle W(t), J\rangle - \langle W_\varepsilon(t), J\rangle| = 0,$$

  が成立する.
- $W(t)$ は $\mathbb{R}\times\mathbb{T}$ 上の有限測度 $\mu(t)$ に拡張できる.
- $\mu(t)$ は以下の 測度値ボルツマン方程式の解である : 任意の $J\in\mathbb{S}(\mathbb{R}\times(\mathbb{T}\setminus\{0\}))$ に対し,

  $$\begin{cases}\partial_t \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} d\mu(t)J(y,k) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} d\mu(t)\omega'(k)\partial_y J(y,k) + \gamma_0\int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} d\mu(t)\left(\mathcal{L}J(y,\cdot)\right)(k),\\ \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} d\mu(0)J(y,k) = \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{T}} d\mu_0 J(y,k), \qquad \mu(t)(dy,\{0\}) = 0,\end{cases}$$

  ただし, $\mathbb{T}$ 上の作用素 $\mathcal{L}$ は次式で定義される.

  $$\begin{aligned}\mathcal{L}J(k) &:= \int_{\mathbb{T}} dk'\ R(k,k')(J(k') - J(k)), \quad J\in\mathbb{L}^1(\mathbb{T}),\\ R(k,k') &:= 16\sin^2(2\pi k)\sin^2(2\pi k').\end{aligned}$$

特に, $\mu(0) = u_0(y,k)dydk$ である場合, 任意の $t > 0$ に対して, $\mu(t) = u(y,k,t)dydk$ であり, $u(y,k,t)$ は次のボルツマン方程式の弱解である.

$$\begin{cases} \partial_t u(y,k,t) + \dfrac{\omega'(k)}{2\pi}\partial_y u(y,k,t) = \gamma_0 \mathcal{L} u(y,k,t), \\ u(y,k,0) = u_0(y,k). \end{cases} \tag{4.1}$$

4.2　メゾからマクロ：ボルツマン方程式から分数階拡散方程式

二段階目の極限では, (4.1) の解が適当なスケール変換のもとで, (1.1) の解に収束することを示す. [3] による方法では, 以下に紹介する (4.1) の解の確率的表示と, マルコフ連鎖の汎函数極限定理が鍵となる.

$\{K_n\ ;\ n \geq 0\}$ を $\mathbb{T}$ 上のマルコフ連鎖であって, その転移確率が

$$P(k, dk') \coloneqq \frac{R(k,k')}{R(k)} dk', \quad R(k) \coloneqq \int_{\mathbb{T}} dk' R(k,k')$$

で与えられるものとする. さらに, $\{\tau_n\ ;\ n \geq 0\}$ は独立同分布な非負値確率変数族であって, $\mathbb{P}(\tau_1 \leq c) = 1 - e^{-c}$, $c > 0$ なるものとし, $\{K_n\ ;\ n \geq 0\}$ と $\{\tau_n\ ;\ n \geq 0\}$ は独立とする. これらを用いて, 連続時間マルコフ連鎖 $\{K(t)\ ;\ t \geq 0\}$ を以下のように定める：

$$K(t) \coloneqq K_n, \quad t \in \left[\sum_{m=1}^{n} \frac{\tau_m}{2\gamma_0 R(K_{m-1})}, \sum_{m=1}^{n+1} \frac{\tau_m}{2\gamma_0 R(K_{m-1})}\right),$$

ただし, $\sum_{m=1}^{0} = 0$. $\mathbb{E}_k$ を初期条件 $K(0) = k$ のもとでの期待値とする. 以上の記法のもとで, $u_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{T})$ に対して, $u(y,k,t)$ を

$$u(y,k,t) \coloneqq \mathbb{E}_k\left[u_0(y + Z(t), K(t))\right], \quad Z(t) \coloneqq \int_0^t \omega'(K(s))\, ds,$$

によって定義すると, (4.1) の古典解になる. さらに, 次のようなスケール変換を行う. $N \in \mathbb{N}$ に対し, $u_N(y,k,t)$ を

$$u_N(y,k,t) \coloneqq \mathbb{E}_k\left[u_0\left(f_\theta\left(N^{-1}\right)(y + Z(Nt)), K(Nt)\right)\right],$$

によって定義する. 確率論的表示に現れる $f_\theta\left(N^{-1}\right) Z(Nt)$ に対して, [3, Theorem 2.8] を用いることで, 次の結果が得られる.

Theorem 4.2. 任意の $(y,t) \in \mathbb{R} \times [0,\infty)$ に対して,

$$\lim_{N\to\infty} \int_{\mathbb{T}} \left| u_N\left(f_\theta\left(N^{-1}\right)^{-1} y, k, t\right) - \bar{e}(y,t)\right|^2 dk = 0,$$

が成立する. ここで, $\bar{e}(y,t)$ は初期条件が $\bar{e}(y,0) = u_0(y,0)$ で与えられる (1.1) の解である.

参考文献

[1] G. Basile, S. Olla, H. Spohn : Energy transport in stochastically perturbed lattice dynamics. Arch. Ration. Mech. **195** (2009) 171–203

[2] M. Jara : Hydrodynamic limit of particle systems with long jumps. arXiv:0805.1326v2

[3] M. Jara, T. Komorowski, S. Olla : Limit theorems for additive functionals of Markov chains. Ann. Appl. Probab. **19** (2009) 2270–2300

[4] M. Jara, T. Komorowski, S. Olla : Superdiffusion of Energy in a Chain of Harmonic Oscillators with Noise. Commun. Math. Phys. **339** (2015) 407–453

[5] Thermal Transport in Low Dimensions : From Statistical Physics to Nanoscale Heat Transfer. edited by S. Lepri, Springer, New York (2016)

[6] K. Saito, M. Sasada, H. Suda : 5/6-superdiffusion of energy for coupled charged harmonic oscillators in a magnetic field. Comm. Math. Phys. **372** 151-182 (2019)

[7] H. Spohn : Nonlinear fluctuating hydrodynamics for anharmonic chains. J. Stat. Phys. **154**(5) (2014) 1191-1227

[8] H. Suda : A family of fractional diffusion equations derived from stochastic harmonic chains with long-range interactions. Ann. Inst. H. Poincare Probab. Statist. 57(4): 2268-2314 (2021)