流体力学極限の幾何学的考察

佐々田槙子 (東京大学数理科学研究科)

2021 年 9 月 24 日
岡潔女性数学者セミナー

Plan

- 流体力学極限とは？
  多粒子の確率過程, スケール極限, 時間発展方程式
- 「幾何学的考察」による新しい視点は？
  コホモロジー, 群作用, 射影極限
- 「幾何学的考察」により得られた結果は？
  保存量の定式化, 幾何的データと確率的データの分離, 群作用の役割の抽出, 相互作用の局所性が果たす役割の抽出, 極限方程式の計算に必要なコホモロジーの一般的な導出
- 今後の展開（妄想）
  無限直積空間におけるホッジ理論？ 指数定理？ 流体力学極限を「計量付き幾何的空間の収束」として定式化？

流体力学極限とは

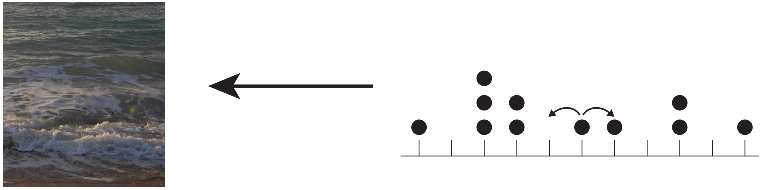
- 流体力学極限の目的：統計力学の数学的な基礎付け
- 統計力学の目的：マクロ（巨視的）な現象をミクロ（微視的）な系の法則から説明する $\leftarrow$ 厳密な数学にしたい
  マクロな現象の例：熱の伝導, 物質の拡散, 流体の運動 etc

もう少し具体的には...

- ミクロな系：たくさんの「粒子」が相互作用しながら時間発展する確率過程（大規模相互作用系）
  ex. 相互作用ランダムウォーク, ノイズつき（非）調和振動子鎖...
- マクロな系：少数のマロパラメータ（「保存量」）に関する偏微分方程式
  ex. 拡散方程式、Navier-Stokes 方程式、Euler 方程式...

流体力学極限の鍵となる要素

- ミクロな系は膨大な自由度を持つ「離散的」な系（「粒子」の描像）
- マクロな系は少数パラメータに関する「連続的」な系
- 時空間変数と粒子数を、全て同時にスケールする極限
- ミクロとマクロを繋ぐもの：大数の法則



本研究の背景と目的

これまでの流体力学極限の証明は，全て，具体的なミクロモデルごとの解析に基づく．

ミクロモデルによらない証明の strategy はあるものの，適用限界がはっきりせず，抽象的で一般的な枠組みがない！

特に，重要ないくつものミクロモデルについて，流体力学極限は未解決！

本研究の (やや壮大な) 目的は，流体力学極限の抽象理論を創ること!

本研究の背景と目的（続）

元々，本研究を始めた動機は，流体力学極限による拡散方程式の導出において本質的な

「無限直積空間上の閉形式の分解定理」（Varadhan's decomposition）

をモデルによらない抽象的な設定で理解したい，また群作用や対象の幾何構造から理解したい，というものであった．

「Varadhan's decomposition」の大雑把な設定と内容：

- ミクロモデルに応じて「閉形式」と「完全形式」を，無限直積空間上で定義： $\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}, \{0,1,\dots,\kappa\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}, \mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}, \mathbb{R}_+^{\mathbb{Z}^d} \dots$
- { 閉形式 }/{ 完全形式 } $\cong \mathbb{R}^c$ であることを示し，具体的な "調和形式" の表示を得る． c は極限の拡散方程式の行列サイズとなる．

既存の証明の難点：

- コホモロジーの次元 c が，何で決まるのかよくわからない．モデルごとの具体的な計算の結果として c を得ている．（次元があがると現実的でない）
- 証明に必須の「spectral gap estimate」は，無限直積空間上の確率測度に強く依存するが，コホモロジーの次元や "調和形式" の表示は「topological」な性質に見える．理由がわからない！

本研究の背景と目的（続）

元々の目的：

- このような分解定理が成立するための，ミクロモデルの詳細によらない条件を見つける
- この分解定理が成立する背景となる抽象的な構造を理解する
- より直感的で，シンプルな証明を得る
- まだ分解定理の証明が得られていないミクロモデルについて，新しいアプローチによって証明を与える

我々の鍵となるアイディア

分解定理を考える，抽象的な設定を与える．
幾何学的（空間的）データと確率論的（時間的）データ を分離して扱う．
<u>巨視的</u>な性質 ＝ <u>極限</u>の対象が持つ性質 ＝ モデルの<u>不変量</u>.

主結果（Bannai-Kametani-S, arXiv:2009.04699)

設定：

- S：一般の集合　　$ex.\ \{0,1\}$
- $X=(X,E)$：局所有限単純対称有向連結グラフ「locale」
  $ex.\ (\mathbb{Z}^d,(\mathbb{Z}^d)^*)$
- $\phi: S\times S\to S\times S$：「相互作用」　　$ex.\ \phi(s,s')=(s',s)$

結果１（保存量と配置空間の導入)：

- 与えられた (S,ϕ) から「保存量」のなす線型空間
  $\mathrm{Consv}^{\phi}(S)\subset\{f:S\to\mathbb{R}\}$ が定まる　　$ex. f(s)=s$（保存量）
- 与えられた (S,X,ϕ) から, (S^X,Φ) という新たなグラフ（配置空間, と呼ぶ）が定まる（X が無限グラフの時, 配置空間 (S^X,Φ) は, 連結成分が無限個あり, 局所有限でもない）

主結果（Bannai-Kametani-S, arXiv:2009.04699）（続）

結果２（新しいコホモロジーの導入）：

- (S^X, Φ) に通常のグラフコホモロジーではなく，一様局所コホモロジー $H^m_{\mathrm{unif}}(S^X, \mathbb{R})$，というものを導入する
- locale が無限グラフで，かつある良い条件を満たすとき，$H^0_{\mathrm{unif}}(S^X, \mathbb{R}) \cong \mathrm{Consv}^\phi(S)$，$H^m_{\mathrm{unif}}(S^X, \mathbb{R}) \cong \{0\}$ $(m \geq 1)$
- locale が $(\mathbb{Z}, \mathbb{Z}^*)$ のときは，「良い条件」を満たさない．$H^1_{\mathrm{unif}} \cong \{0\}$ の反例がある．

結果３（一様局所コホモロジーに対する分解定理）：

- locale (X, E) に群 G が free に作用しているとする
- この時，群 G のアーベル化 G^{ab} の次元が $d < \infty$ ならば $\{G$ 不変な１閉形式 $\}/\{G$ 不変な１完全形式 $\} \cong (\mathrm{Consv}^\phi(S))^d$．

主結果についての Remark

Remark

- 上記の定理には, 確率論的（時間的）データはない（多様体における, ドラームコホモロジーに対応）
- 上記の L^2 コホモロジー版が *Varadhan* の定理である（リーマン多様体における, *Hodge* 分解に対応. リーマン計量が確率論的（時間的）データに対応）
- 局所形式は, L^2 形式の *core*（リーマン多様体における *smooth* 形式と, L^2 形式の関係に対応）
- 結果 3 は結果 2 の *Corollary* であり, 本質は結果 2
- 「保存量」の概念を初めて抽象的に定義. 一様局所コホモロジーの導入により, 「総粒子数」と「総粒子数の 2 乗」を区別できることがわかった. 前者は $H^0_{\mathrm{unif}}(S^X, \mathbb{R})$ の元だが, 後者はそうでない.
- (X, E) の無限性が本質的！
- ‘調和写像”の表示は, X/G の基本領域, G^{ab} の基底, $\mathrm{Consv}^{\phi}(S)$ の基底のとり方を定めるごとに一意に定まる

L^2 版に対する主結果（Bannai-S, 論文準備中）

設定：

- データ (S, X, ϕ) に加えて, interaction rate $r : \Phi \to (0, \infty)$ が与えられているものとする.
- r に対して, S^X 上の確率測度 μ で「reversible」なものが存在するとする.

追加の仮定：

- S：有限集合
- locale $X = (X, E)$ には群 $G \cong \mathbb{Z}^d$ が free に作用し, X/G は有限グラフで, $X = (X, E)$ は X/G の最大アーベル被覆になっている
- r, μ も G 不変
- μ は直積確率測度である

結果４（L^2 コホモロジーに対する分解定理, Varadhan の分解定理に対応）：

- Spectral gap estimate が成り立つならば, $\{G$ 不変な L^2- 1 閉形式 $\}/\{G$ 不変な L^2- 1 完全形式 $\} \cong (\mathrm{Consv}^\phi(S))^d$.

具体的なモデル：Exclusion processes on $\mathbb{Z}^d$

$\chi := \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$: Configuration space

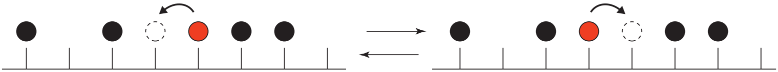
$\mathbf{s} = (s_x)_{x\in\mathbb{Z}^d} \in \chi$: Configuration of particles

- $s_x = 1$: There is a particle at x
- $s_x = 0$: There is no particle at x

Exclusive interaction：There is at most one particle at each x

Symmetric Simple Exclusion Process (SSEP) の時間発展

- Each particle has its own "bell" which rings at a random time with exponential distribution with expectation 1 independently (simple)
- When one of bells rings, the particle choose a target site from nearest neighbor sites with probability $\frac{1}{2d}$ (symmetric)
- If the target site is empty, the particle jumps to the site
- Reset all bells (or equivalently the bell of the chosen particle) and repeat the same procedure



Evolution（reversible dynamics）

一般の Exclusion process on $\mathbb{Z}^d$

Exclusion Process on $\mathbb{Z}^d$: Continuous time Markov process $\{\mathbf{s}(t)\}_{t\geq 0}$ on $\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$ with the jump rate $r_{x,y} : \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$: "frequency of the jump from x to y"

Example : SSEP (nearest neighbor)

$$r_{x,y}(\mathbf{s}) = \frac{1}{2d}\mathbf{1}_{\{|x-y|=1\}}, \quad x, y \in \mathbb{Z}^d$$

- Translation invariant : $r_{x,y}(\mathbf{s}) = r_{0,y-x}(\tau_{-x}\mathbf{s})$
- Local interaction : $r_{x,y}$ are local functions, namely it depends only on $(s_z)_{z\in\Lambda}$ for some finite set $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ ($x, y \notin \Lambda$ a priori)
- Finite range : $\exists R > 0$ s.t. $r_{x,y} \equiv 0$ for all $|x-y| = \sum_{i=1}^d |x_i - y_i| > R$
- Non degenerate : For any $x, y \in \mathbb{Z}^d$ there is a path $(x = x_0, x_1, \ldots, x_n = y)$ from x to y such that $r_{x_i,x_{i+1}}(\mathbf{s}) > 0$ for all $\mathbf{s}$. (Typically $r_{0,e_i}(\mathbf{s}) > 0$, $r_{e_i,0}(\mathbf{s}) > 0$ for all $\mathbf{s}$.)

Simple : $r_{x,y}(\mathbf{s}) = c_{x,y}$, Symmetric : $r_{x,y}(\mathbf{s}) = r_{y,x}(\mathbf{s})$

Macroscopic parameter and empirical measure

Total number of particles is the "unique" conserved quantity
$\{\nu_\rho\}_{\rho\in[0,1]}$: Bernoulli product measures on $\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$: invariant measures
Macroscopic parameter = the density of particles

Conserved quantity $\leftrightarrow$ Invariant measures $\leftrightarrow$ Macroscopic parameter(s)

$\Rightarrow$ Derive the evolution equation for <u>the density of particles</u> as $N \to \infty$

Introduce space-time scaled random measures π_t^N : empirical measure associated to the macroscopic parameter

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

Main theorem of hydrodynamic limit for SSEP

Take $\theta = 2$: diffusive scaling.

Theorem (Hydrodynamic limit (classical result))

Suppose π_0^N converges to a deterministic measure $\rho_0(u)du$ in probability. Then, for any time $t > 0$,

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

where $\rho(t,u)$ is the unique solution of the following heat equation:

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

Observation

Stochastic dynamics $\to$ Deterministic PDE : space-time scaling limit.
Reversible dynamics$\to$ Irreversible evolution : Arrow of time!

Relation between properties of the microscopic system and the macroscopic PDE

- Asymmetric (nearest neighbor) simple exclusion process on $\mathbb{Z}$; $r_{x,x+1}(\mathbf{s}) = p$, $r_{x+1,x}(\mathbf{s}) = q$, $p \neq q$, Euler scaling $\theta = 1$

$$\partial_t \rho = -(p-q)\partial_u \left(\rho(1-\rho)\right)$$

- Symmetric (not necessarily nearest neighbor) simple exclusion process on $\mathbb{Z}^d$; $r_{x,y}(\mathbf{s}) = r_{y,x}(\mathbf{s}) = c_{x,y}$, Diffusive scaling $\theta = 2$

$$\partial_t \rho = \nabla \cdot D \nabla u = \sum_{i,j=1}^{d} \partial_{u_i} \left(D_{ij} \partial_{u_j} \rho \right) = \sum_{i,j=1}^{d} D_{ij} \partial_{u_i u_j} \rho \quad \text{linear equation}$$

$D_{ij} = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} c_{0,x} x_i x_j$: diffusion matrix

- Symmetric exclusion process on $\mathbb{Z}^d$; $r_{x,y}(\mathbf{s}) = r_{y,x}(\mathbf{s})$, $\theta = 2$

$$\partial_t \rho = \nabla \cdot D(\rho) \nabla u = \sum_{i,j=1}^{d} \partial_{u_i} \left(D_{ij}(\rho) \partial_{u_j} \rho \right) \quad \text{nonlinear equation}$$

the diffusion matrix $D_{ij}(\rho)$ is given by a variational formula

Varadhan の分解定理の具体例

- $\chi = \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$
- $\eta = (\eta_x)_{x\in\mathbb{Z}^d} \in \chi, \quad \eta_x \in \{0,1\}$
- μ_ρ : Bernoulli product measure with $\mu_\rho(\eta_x = 1) = \rho$
- $\partial : L^2(\mu_\rho) \to (L^2(\mu_\rho))^d$ where $(\partial f)_i(\eta) = f(\eta^{0,e_i}) - f(\eta)$ for $i = 1, \dots, d$
- $\eta^{x,y}$ is the configuration obtained from η by exchanging the occupation variables at x, y

Theorem (Exclusion process に対する Varadhan の分解定理 (Funaki-Uchiyama-Yau))

If $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_d) \in (L^2(\mu_\rho))^d$ is a germ of closed form

$$\Rightarrow \xi = \lim_{n\to\infty} \partial\Big(\sum_{\sigma\in\mathbb{Z}^d} \tau_\sigma f_n\Big) + \sum_{i=1}^{d} a_i \partial\Big(\sum_{\sigma\in\mathbb{Z}^d} \sigma_i \eta_\sigma\Big) \quad in \quad L^2(\mu)^d \text{ for some}$$

sequence of local functions f_n on χ and $a_1, \dots, a_d \in \mathbb{R}$.

Exclusion process の場合の配置空間 (S^X, Φ)

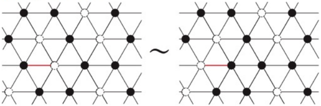
設定

- $S = \{0, 1\}$
- $X = (X, E)$: locale （局所有限単純連結対称有向グラフ）
- $\phi(s, s') = (s', s)$
- $\chi := \{0, 1\}^X$ ： 配置空間
- $\Phi := \{(\eta, \eta') \in \chi \times \chi \ ; \ \exists e \in E \ s.t. \ \eta \overset{e}{\sim} \eta'\}$

$\eta \overset{e}{\sim} \eta' \overset{def}{\Leftrightarrow} \eta_v = \eta'_v$ for $v \neq oe, te$, $(\eta'_{oe}, \eta'_{te}) = \phi(\eta_{oe}, \eta_{te})$, $\eta \neq \eta'$

$$\mathcal{A} = (S^X, \Phi) \text{ ： グラフ！！}$$

Triangular lattice



その他の様々なミクロモデル

- Lattice gas : interacting random walks on a lattice space: e.g. exclusion process, multi-species exclusion process, generalized exclusion process, zero-range process, $\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$, $\{0,1,2,\dots,\kappa\}^{\mathbb{Z}^d}$, $\mathbb{N}^{\mathbb{Z}^d}$
- Ginzburg-Landau dynamics : Brownian Interface model on a lattice with local interaction $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$
- System of oscillators (Hamiltonian dynamics) + stochastic noise : Oscillators on a lattice with local interaction potential + stochastic noise $(\mathbb{R}^{2d})^{\mathbb{Z}^d}$
- Energy evolution model $\mathbb{R}_+^{\mathbb{Z}^d}$: Mesoscopic model obtained from deterministic model

今回の L^2 版の主結果は, multi-species exclusion process に用いることができる. （New!)

結晶格子上のミクロモデル

Crystal lattice

- infinite locally finite connected graph $X = (V, E)$
- a free abelian group $\Gamma \cong \mathbb{Z}^d$ acts freely
- its quotient graph $X_0 = (V_0, E_0) = X/\Gamma$ is a finite graph

Examples

- $\mathbb{Z}^d$: $X_0 = (\{0\}, \{e_1, e_2, \ldots, e_d\})$, $|V_0| = 1, |E_0| = d$
- triangular lattice : $d = 2$, $|V_0| = 1, |E_0| = 3$
- hexagonal lattice : $d = 2$, $|V_0| = 2, |E_0| = 3$
- Kagome lattice : $d = 2$, $|V_0| = 3, |E_0| = 6$

Crystal lattices

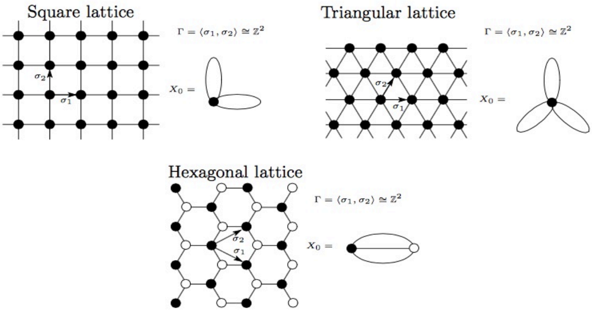


Figure 1: Crystal lattices

Picture from the paper by Ishiwata, Kawabi and Kotani (2015).

今回の L^2 版の主結果は, generalized/ multi-species/ exclusion process on crystal lattices に使うことができる. (New!)

拡散行列に対する新しい解釈

確率的なデータを用いて, $(C^1_{\mathrm{unif}}(S^X,\mathbb{R}))^G$ 上に内積が定まる. (リーマン計量のアナロジー)

- $\mathcal{C}_{L^2} := \overline{(C^1_{\mathrm{unif}}(S^X,\mathbb{R}))^G} \cap Z(S^X,\mathbb{R})$: "L^2" G 不変な閉形式
- $\mathcal{E}_{L^2} := \overline{\partial\big(C^0_{\mathrm{unif}}(S^X)^G\big)}$: $\partial\big(C^0_{\mathrm{unif}}(S^X)^G\big)$ の完備化

$$\mathcal{C}_{L^2} \cong \mathcal{E}_{L^2} \oplus \bigoplus_{k=1}^{d} \mathrm{Consv}^{\phi}(S) :$$ topological (Varadhan's) decomposition

$$\mathcal{C}_{L^2} \cong \mathcal{E}_{L^2} \oplus \bigoplus_{k=1}^{d} \mathrm{Consv}^{\phi}(S) :$$ orthogonal decomposition

マクロな拡散行列

マクロ方程式の拡散行列 = 二つの異なる分解の変換行列

ホッジ理論の周期行列の類似? Future Work!

今後の課題

- 具体的な課題
  - S：無限離散集合の場合（コンパクトでない）
  - S：連続の場合（関数の regularity の議論）
  - ϕ が離散的（差分）でなく，「微分」や「積分」の場合
  - Spectral gap estimate はいつ成り立つのか？ 必要条件か？
- 長期的な課題
  - 異なるミクロモデルの間をつなぐ理論（モデルの分類）
  - 流体力学極限の「計量つき幾何的空間の収束」としての定式化
  - 周期行列との類似？