論文の内容の要旨

論文題目　相分離の確率平衡系モデルにおけるエントロピー的反発と大偏差原理

氏　名　坂川 博宣

物理的な系を十分低温で観測すれば相転移が起き、それに伴って異なる相を分離する界面が現れる。そのような界面を表す微視的な数学モデルの一つとして $\nabla\varphi$ 界面モデルと呼ばれるモデルが考えられ、最近数多くの研究がなされている (cf. [2])。本論文ではこの $\nabla\varphi$ 界面モデルに関連して平衡系における以下の二つの問題

1. Entropic repulsion for Gaussian field with finite range interaction
2. Large deviations for $\nabla\varphi$ interface model with weak pinning and their applications

を取り上げ研究を行った。

Part 1.　Entropic repulsion for Gaussian field with finite range interaction

$\mathbb{Z}^d$ 上の共分散行列が離散 Laplacian の多項式の逆行列で与えられるような Gauss 場を考え、エントロピー的反発の問題について論じた。

$q(r) = \sum_{j=1}^{K} q_j r^j$, $\{q_j\}_{1\le j\le K} \in \mathbb{R}^K$ を K 次の多項式とし、$\mathbb{Z}^d$ 上の離散 Laplacian$-\Delta = \{(-\Delta)(x,y)\}_{x,y\in\mathbb{Z}^d}$

$$(-\Delta)(x,y) = \begin{cases} -\frac{1}{2d} & \text{if } |x-y| = 1 \\ 1 & \text{if } |x-y| = 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

に対し $J_\varepsilon(x,y) = q(\varepsilon I - \Delta)(x,y)$, $\varepsilon \ge 0$, $x, y \in \mathbb{Z}^d$ と定義する。ただし $j \ge 2$ に対しては

$$(-\Delta)^j(x,y) = \sum_{z_i\in\mathbb{Z}^d\,;\,i=1,2,\cdots,j-1} (-\Delta)(x,z_1)(-\Delta)(z_1,z_2)\cdots(-\Delta)(z_{j-1},y)$$

とする。$J_0(x,y)$ を $J(x,y)$ と書く。

まず次の条件を仮定する。

(i) $d \geq 2l+1$ ただし $l = \min\{j; q_j \neq 0\}$

(ii) 任意の $0 < r \leq 2$ に対し $\sum_{j=l}^{K} q_j r^j > 0$

この仮定の下で十分小さな任意の $\varepsilon \geq 0$ に対し J_ε^{-1} が存在し、正定値となる。従って共分散行列 $G \equiv J^{-1}$ を持つような $\mathbb{Z}^d$ 上の Gauss 場が存在する。その $\Omega \equiv \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ 上の分布を P と書くことにすると P は次の DLR 方程式で無限領域 Gibbs 測度として特徴づけられる。

$$P(\,\cdot\,|\mathcal{F}_{\{x\}^c}) = \mathcal{N}(-J(0,0)^{-1}\sum_{y\neq x} J(x,y)\phi_y,\ J(0,0)^{-1}) \quad P\text{-a.s. } \phi$$

ここで $\mathcal{F}_{\{x\}^c} = \sigma(\phi_y; y \neq x)$ は $\{\phi_y; y \neq x\}$ によって生成される σ-field であり、$\mathcal{N}(m,\sigma^2)$ は平均 m, 分散 σ^2 の一次元正規分布を表す。

Remark 1.1. 形式的には P は

$$P(d\phi) = \frac{1}{Z}\exp\{-\sum_{j=l}^{K}\left(\frac{1}{2d}\right)^{a_j} q_j \sum_{x\in\mathbb{Z}^d} V\left((-\Delta)^{\frac{j}{2}}\phi_x\right)\}\prod_{x\in\mathbb{Z}^d} d\phi_x,\ V(r) = r^2$$

と表せる。ただし a_j は j が奇数のとき 1, 偶数のとき 0 とする。これより $\phi = \{\phi_x\}_{x\in\mathbb{Z}^d} \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ を $d+1$ 次元空間内の異なる 2 相を分離する $\mathbb{Z}^d$ 上の界面の高さを表す変数と考えると、P はエネルギーが $H(\phi) = \sum_{j=l}^{K}\left(\frac{1}{2d}\right)^{a_j} q_j \sum_{x\in\mathbb{Z}^d} V\left((-\Delta)^{\frac{j}{2}}\phi_x\right)$, $V(r) = r^2$ から定まる Gibbs 測度とみなせる。特に $K = l = 1$ の場合は $\nabla\phi$ からエネルギーが決まるので $\nabla\phi$ 界面モデルと呼ばれる。

続いて P の下での FKG 不等式を保証するような次の条件

(iii) $\varepsilon_k \downarrow 0$ なる実数列 $\{\varepsilon_k\}_{k\geq 1}$ が存在し、任意の $x, y \in \mathbb{Z}^d$ および $k \geq 1$ に対し $J_{\varepsilon_k}^{-1}(x,y) \geq 0$ を満たす

を仮定する。条件 (i) – (iii) を満たすような $q(r)$ の例としては次のようなものがある。

Example. $q(r) = \alpha_0 r^l \prod_{j=1}^{K-l}(\alpha_j r + \beta_j)$, ただし $1 \leq l \leq K$ かつ任意の $0 \leq j \leq K-l$ に対して $\alpha_j, \beta_j > 0$.

エントロピー的反発とは高さ 0 のレベルに壁 (hard-wall) を置くとき、Gibbs 測度の持つランダムさによって自然に生ずる揺動力により界面が壁からどのくらい上方に押し上げられるかその高さを調べる問題であり、

$$\Omega_N^+ = \{\phi \in \Omega; \phi_x \geq 0 \text{ for all } x \in V_N\},\ V_N = [-N,N]\cap\mathbb{Z}^d$$

に対し $P(\Omega_N^+)$, $P(\,\cdot\,|\Omega_N^+)$ の $N \to \infty$ での漸近挙動を調べることになる。この問題はエネルギーが $H(\phi)$ から定まる Gibbs 測度に対してはポテンシャル V が一般の場合も含め $\nabla\phi$ 界面モデル、すなわち $K = l = 1$ の場合はいろいろと研究されている (cf. [2])。ここでは $\mathbb{Z}^d$ 上の共分散行列が離散 Laplacian の多項式の逆行列で与えられるような Gauss 場を考えることによって一般の相互作用を持つ界面モデルについてエントロピー的反発の問題を考えることが目的である。特に $K = 2$ の場合はこのモデルは細胞膜のモデルに対応することが知られている (cf. [3])。

まず事象 Ω_N^+ の確率の漸近挙動として次が成り立つ。

Theorem 1.1. ある $C_1, C_2 > 0$ が存在して

$$\begin{aligned}-C_1 \ &\leq\ \liminf_{N\to\infty}\frac{1}{N^{d-2l}\log N}\log P(\Omega_N^+)\\ &\leq\ \limsup_{N\to\infty}\frac{1}{N^{d-2l}\log N}\log P(\Omega_N^+)\ \leq\ -C_2\end{aligned}$$

が成り立つ。C_1, C_2 は

$$C_1 = 2lq_l\mathcal{C}_l G(0,0), \quad C_2 = \frac{2(2\pi)^d l q_l J(0,0)}{(K+1)^{2d}(\bar{J})^2 I_1 I_2}$$

で与えられる。ここで $\mathcal{C}_l = Cap_l(V) = \inf\{\left(\frac{1}{2d}\right)^l(\psi,(-\Delta_c)^l\psi)_{L^2(\mathbb{R}^d)}; \psi \in H_0^l(\mathbb{R}^d), \psi \geq 1_V\}$, Δ_c は $\mathbb{R}^d$ 上の Laplacian, $(\,\cdot\,,\,\cdot\,)_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ は $L^2(\mathbb{R}^d)$ 内積を表し、$H_0^l(\mathbb{R}^d)$ はノルム $(\psi,(-\Delta_c)^l\psi)^{\frac{1}{2}}_{L^2(\mathbb{R}^d)}$ から定まる Sobolev 空間とする。また $\bar{J} = \sup_{x\neq 0}|J(0,x)|$ とし、I_1, I_2 は

$$I_1 = \int_{V\times V}\frac{1}{|x-y|^{d-2l}}dxdy, \quad I_2 = \int_0^\infty\int_{\mathbb{R}^d}\exp\{i\zeta\cdot\omega - \left(\frac{1}{2d}\right)^l|\omega|^{2l}t\}d\omega dt$$

で定義される。ただし $\zeta \in \mathbb{S}^{d-1}$ であり I_2 は $\zeta \in \mathbb{S}^{d-1}$ の取り方によらない。

これよりこのモデルでは $P(\Omega_N^+)$ の漸近挙動に影響するのは、多項式 $q(r)$ の最低次数 l であり、多項式 $q(r)$ の最高次数 K, すなわちエネルギー $H(\phi)$ における相互作用の最大距離ではないことがわかる。

Therorem 1.1 を用いることにより条件付き確率測度 $P(\,\cdot\,|\Omega_N^+)$ の下での高さ変数の局所的な標本平均に対する漸近挙動が得られる。

Theorem 1.2. $1-\frac{2l}{d} < \gamma \leq 1$ を固定する。このとき任意の $a < 2G(0,0)\{(-1+\gamma)d+2l\}$ に対し

$$\lim_{N\to\infty}\sup_{\substack{z\in V_N, r>0\\ V_{rN^\gamma}(z)\subset V_N}} P(\bar{\phi}_{z,rN^\gamma} \leq \sqrt{a\log N}\mid \Omega_N^+) = 0$$

が成り立つ。またある $b>0$ が存在して

$$\lim_{N\to\infty}\sup_{\substack{z\in V_N, r>0\\ V_{rN}(z)\subset V_N}} P(\bar{\phi}_{z,rN} \geq \sqrt{b\log N}\mid \Omega_N^+) = 0$$

が成立する。ここで $V_R(z) = z + V_R$ は中心 z, 幅 $2R$ を持つ $\mathbb{Z}^d$ の立方体とし、$\bar{\phi}_{z,R} = \frac{1}{|V_R(z)|}\sum_{x\in V_R(z)}\phi_x$ は高さ変数 ϕ の $V_R(z)$ 上の局所的な標本平均を表す。

この結果より界面が hard-wall 条件により $\sqrt{\log N}$ のオーダーで持ち上げられることがわかる。

Part 2. Large deviations for $\nabla\varphi$ interface model with weak pinning and their applications
(舟木直久教授との共同研究)

$\nabla\varphi$ 界面モデルに対し、ピンニング効果と一般の Dirichlet 境界条件を加えた下での大偏差原理について考察した。特にその結果として大数の法則の極限がある種の自由境界を持つ変分問題によって特徴づけられることがわかる。

$\mathbb{R}^d$ の有界領域 D で境界 ∂D が Lipschitz 連続であるようなものに対し $D_N = ND\cap\mathbb{Z}^d$, $\partial^+D_N = \{x \notin D_N; |x-y| = 1 \text{ for some } y \in D_N\}$, $\overline{D_N} = D_N \cup \partial^+D_N$ $(N\in\mathbb{Z}^+)$ と定義し D_N 上の微視的なレベルでの界面を $\phi = \{\phi(x)\}_{x\in D_N} \in \mathbb{R}^{D_N}$ で表す。いま相互作用ポテンシャル $V:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$, 一体ポテンシャル $U: D\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ に対し境界条件 $\psi = \{\psi(x)\}_{x\in\partial^+D_N} \in \mathbb{R}^{\partial^+D_N}$ を持つ D_N 上の界面 ϕ のエネルギーを

$$H_N^{\psi,U}(\phi) = \frac{1}{2}\sum_{b\in\overline{D_N}^*} V(\nabla(\phi\vee\psi)(b)) + \sum_{x\in D_N} U\left(\frac{x}{N},\phi(x)\right)$$

で定義する。ただし $\phi\vee\psi$ は D_N 上で ϕ, ∂^+D_N 上で ψ に一致する $\overline{D_N}$ 上の界面の配置を表す。$\overline{D_N}^*$ は $\overline{D_N}$ 内の向き付けられたボンド全体の集合とし、ボンド $b = \langle x,y\rangle$ に対し $\nabla\phi(b) = \phi(x) - \phi(y)$ と定める。ここで

相互作用ポテンシャル V は C^2, 偶かつある $c_-, c_+ > 0$ が存在して任意の $\eta \in \mathbb{R}$ に対し $c_- \le V''(\eta) \le c_+$ を満たすと仮定する。また $U(\theta, r) = Q(\theta)W(r)$, $Q: D \to \mathbb{R}$, $W: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は、例えば界面を負の側に引き付ける力を表し、条件

(Q1) Q は非負、有界かつ区分的に連続

(W1) W は有界かつ可測

(W2) ある $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ が存在して $\lim_{r \to +\infty} W(r) = \alpha$ かつ $\lim_{r \to -\infty} W(r) = \beta$

を満たすものとする。相互作用の形からこのモデルは（ピンニングを持つ）$\nabla\varphi$ 界面モデルと呼ばれる。

対応する D_N 上の Gibbs 測度は

$$\mu_N^{\psi,U}(d\phi) = \frac{1}{Z_N^{\psi,U}} \exp\{-H_N^{\psi,U}(\phi)\} \prod_{x \in D_N} d\phi(x) \prod_{x \notin D_N} \delta_{\psi(x)}(d\phi(x))$$

で定義される。$Z_N^{\psi,U}$ は正規化定数である。このとき、巨視的なランダムな高さ変数 $\{h^N(\theta)\}_{\theta \in D}$ を x- 方向と ϕ-方向ともに $1/N$ 倍にスケール変換して得られる

$$h^N(\frac{x}{N}) = \frac{1}{N}\phi(x), \; x \in D_N$$

の多重線形補間（polilinear interpolation, 一種の折れ線近似）として定義する。また $g \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$ に対し $g\big|_{\partial D}$ を巨視的な境界条件とし、$H_g^1(D) = \{h \in H^1(D); h - g\big|_D \in H_0^1(D)\}$ と定義する。微視的レベルでの境界条件 $\psi \in \mathbb{R}^{\partial^+ D_N}$ に対しては次の条件を仮定する。

(ψ1) $\max_{x \in \partial^+ D_N} |\psi(x)| = O(N)$

(ψ2) ある $p > 2$ が存在して $\sum_{x \in \partial^+ D_N} |\psi(x) - Ng(\frac{x}{N})|^p = O(N^d)$ を満たす。

以上の設定のもとで次が成り立つ。

Theorem 2.1. 巨視的な高さ変数 $\{h^N(\theta)\}_{\theta \in D}$ に対し $\mu_N^{\psi,U}$ の下で $\mathbb{L}^2(D)$ 上で速さ N^d, 速度関数 $I^U(h)$ を持つ大偏差原理が成立する。$I^U(h)$ は $h \in H_g^1(D)$ ならば $I^U(h) = \Sigma^U(h) - \inf_{h \in H_g^1(D)} \Sigma^U(h)$, ただし

$$\Sigma^U(h) = \begin{cases} \int_D \sigma(\nabla h(\theta))d\theta - (\alpha - \beta)\int_D Q(\theta)1(h(\theta) \le 0)d\theta & \alpha - \beta \ge 0 \text{ のとき} \\ \int_D \sigma(\nabla h(\theta))d\theta - (\beta - \alpha)\int_D Q(\theta)1(h(\theta) \ge 0)d\theta & \alpha - \beta \le 0 \text{ のとき} \end{cases}$$

$h \notin H_g^1(D)$ ならば $I^U(h) = +\infty$ で定義される。$\sigma(v)$ は表面張力と呼ばれる巨視的な量である。

Remark 2.1. $U(\theta, r) = QW(r)$, $Q \ge 0$ は定数のとき、ピンニングポテンシャル U がある場合とない場合の自由エネルギーの差は $-|\alpha - \beta|Q$ で与えられ、従って上の汎関数 $\Sigma^U(h)$ は巨視的レベルでの界面 h の総エネルギーを表している。$\Sigma^U(h)$ を $H_g^1(D)$ で最小化する変分問題は、$\alpha > \beta$ で $Q > 0$ かつ境界条件 g が正の場合は一般に領域 D の内部に自由境界を生成し、特に $\sigma(u) = |u|^2$ の場合は詳しく調べられている (cf. [1])。

Theorem 2.1 より次のことがわかる。

Corollary 2.1. Σ^U が H_g^1 で ただ一つの minimizer $\bar{h}$ をもつとすると任意の $\delta > 0$ に対し

$$\lim_{N \to \infty} \mu_N^{\psi,U}(\|h^N - \bar{h}\|_{\mathbb{L}^2(D)} > \delta) = 0$$

が成り立つ。

Remark 2.2. ピンニングポテンシャル U の一つとしていわゆる角井戸型ピンニング $U(\theta, r) = W(r) = -bI(|r| \leq a)$ $a, b > 0$ が $\nabla\phi$ 界面モデルに関連する幾つかの問題で調べられているが (cf. [2]), Theorem 2.1 より $\{h^N(\theta)\}_{\theta \in D}$ に対し $\mu_N^{\psi,W}$ の下では $\mathbb{L}^2(D)$ 上で速度関数 $I(h)$ を持つ大偏差原理が成り立つ。ここで $I(h)$ は $h \in H_g^1(D)$ ならば $I(h) = \Sigma(h) - \inf_{h \in H_g^1(D)} \Sigma(h)$, ただし

$$\Sigma(h) = \int_D \sigma(\nabla h(\theta)) d\theta$$

$h \notin H_g^1(D)$ ならば $I(h) = +\infty$ で定義される。これより角井戸型ピンニングは我々のスケール変換では大偏差原理に影響を与えないことがわかる。

更に別の種類のピンニングとして δ-ピンニングと呼ばれるものがある。これは

$$\mu_N^{\psi,J}(d\phi) = \frac{1}{Z_N^{\psi,J}} \exp\{-H_N^{\psi}(\phi)\} \prod_{x \in D_N} (e^J \delta_0(d\phi(x)) + d\phi(x)) \prod_{x \notin D_N} \delta_{\psi(x)}(d\phi(x)), \ J \in \mathbb{R}$$

で定義されるもので、角井戸型ピンニングを加えた Gibbs 測度 $\mu_N^{\psi,W}$ で $2a(e^b - 1) = e^J$ を保ちながら $a \to 0, b \to \infty$ と極限を取った時の弱収束極限として得られるものである。δ-ピンニング $\mu_N^{\psi,J}$ に対する大偏差原理を $d = 1$ の場合について考える。いま $D = (0,1)$, $D_N = [1, N-1] \cap \mathbb{Z}$ とし、境界条件を $\psi(0) = aN$, $\psi(N) = bN, a, b \in \mathbb{R}$ と取る。また

$$W_{a,b}(D) = \{h \in C([0,1]; \mathbb{R}); h(0) = a, h(1) = b\}$$
$$H_{a,b}^1(D) = \{h \in W_{a,b}(D); h \text{ は絶対連続かつ } h' \in \mathbb{L}^2([0,1])\}$$

と定義する。このとき次が成り立つ。

Proposition 2.1. $d = 1$ とし $V(\eta) = \frac{1}{2}\eta^2$ を仮定する。このとき巨視的な高さ変数 $\{h^N(\theta)\}_{\theta \in D}$ に対し $\mu_N^{\psi,J}$ の下で $W_{a,b}(D)$ 上で速さ N, 速度関数 $I^J(h)$ を持つ大偏差原理が成立する。ここで $I^J(h)$ は $h \in H_{a,b}^1(D)$ ならば $I^J(h) = \Sigma^J(h) - \inf_{h \in H_{a,b}^1(D)} \Sigma^J(h)$, ただし

$$\Sigma^J(h) = \frac{1}{2} \int_0^1 (h')^2(\theta) d\theta + \tau(J) |\{\theta \in D; h(\theta) = 0\}|$$

$h \notin H_{a,b}^1(D)$ ならば $I^J(h) = +\infty$ で定義される。$\tau(J) \leq 0$ は

$$\tau(J) = -\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \log \frac{Z_N^{0,J}}{Z_N^0}$$

で定義される壁面自由エネルギーと呼ばれる巨視的な量である。

特に J が十分大きいときは $\tau(J) < 0$ が成り立ち、この結果より角井戸型ピンニングのときと異なり δ-ピンニングではピンニングの影響が大偏差原理に現れることがわかる。

参考文献

[1] H.W. ALT AND L.A. CAFFARELLI, *Existence and regularity for a minimum problem with free boundary*, J. Reine Angew. Math., **325** (1981), pp. 105-144.

[2] G. GIACOMIN, *Anharmonic Lattices, random walks and random interfaces*, Preprint (2000).

[3] R. LIPOWSKY, *From bunches of membranes to bundle of strings*, Z. Phys. B **97** (1995) 193-203.