

Frenkel欠陥を持つ結晶中の Brown運動の生存確率

福島 竜輝

(京都大学理学研究科数学教室)

部分的に上木直昌氏(京都大学
人間環境学研究科)との共同研究

確率論と統計物理
2008年3月10日

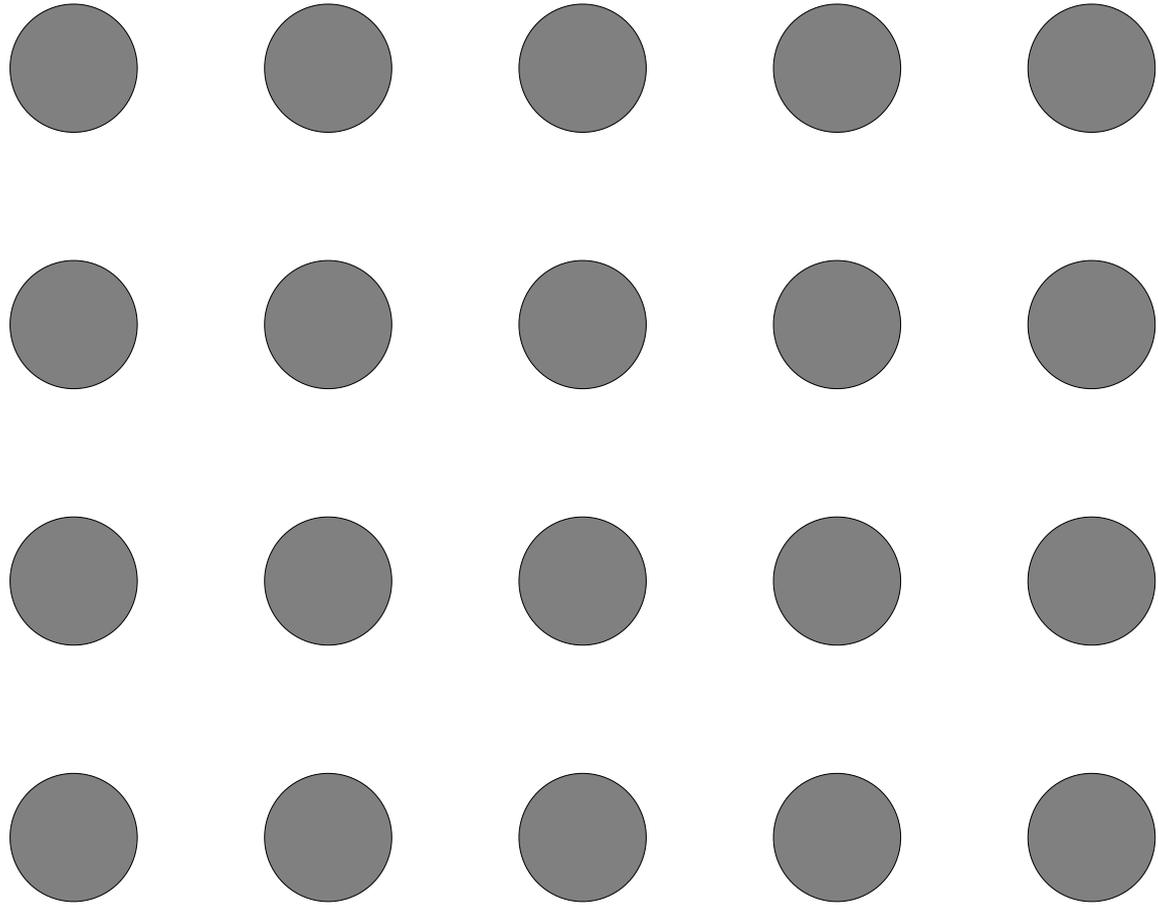
1. Model

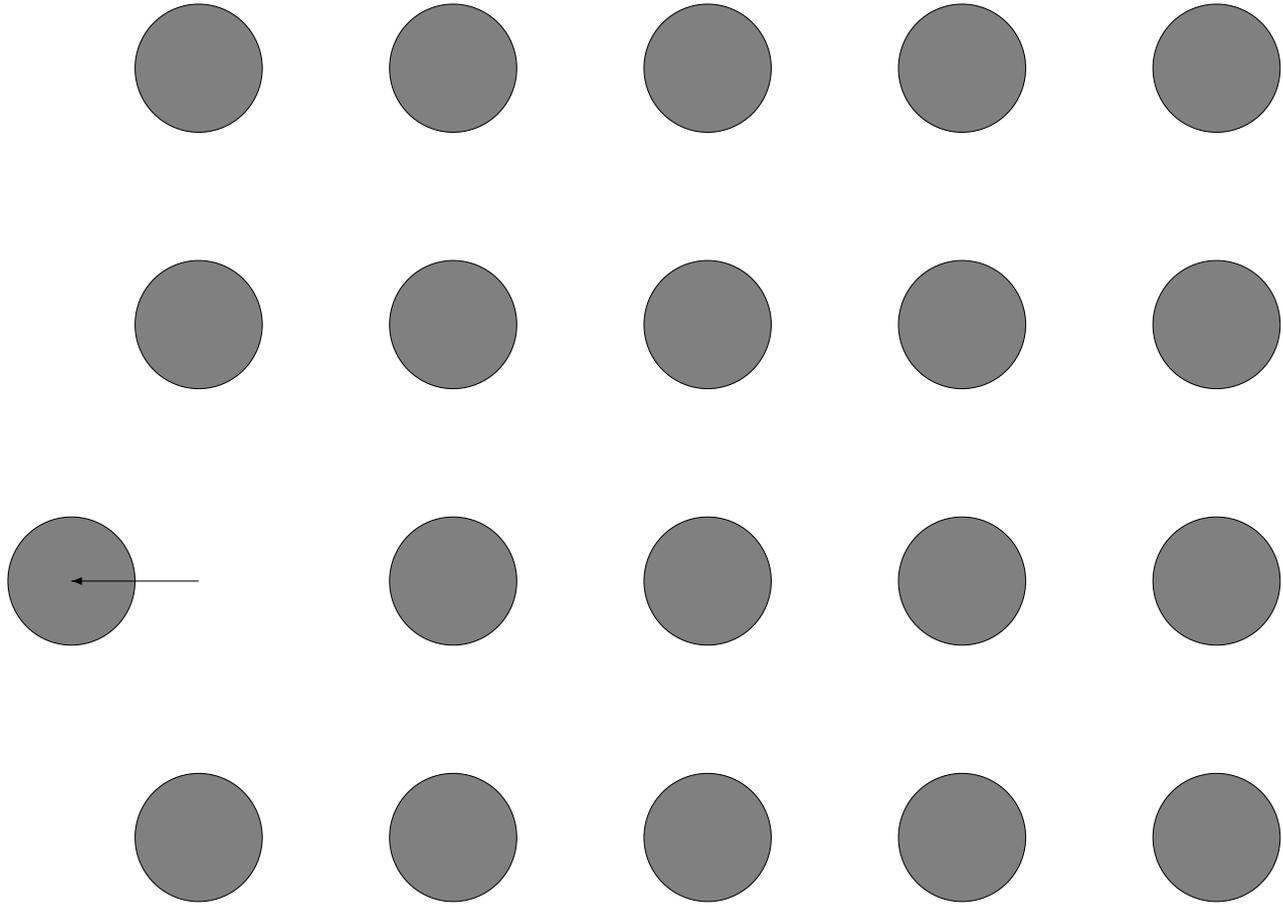
- $(\{B_t\}_{t \geq 0}, P_x)$: d -次元 Brown 運動.
- $(\{\xi_q\}_{q \in \mathbb{Z}^d}, \mathbb{P}_\theta)$: \mathbb{R}^d -値 i.i.d. r.v.'s,
$$\mathbb{P}_\theta(\xi_q \in dx) \asymp \exp\{-|x|^\theta\} dx.$$

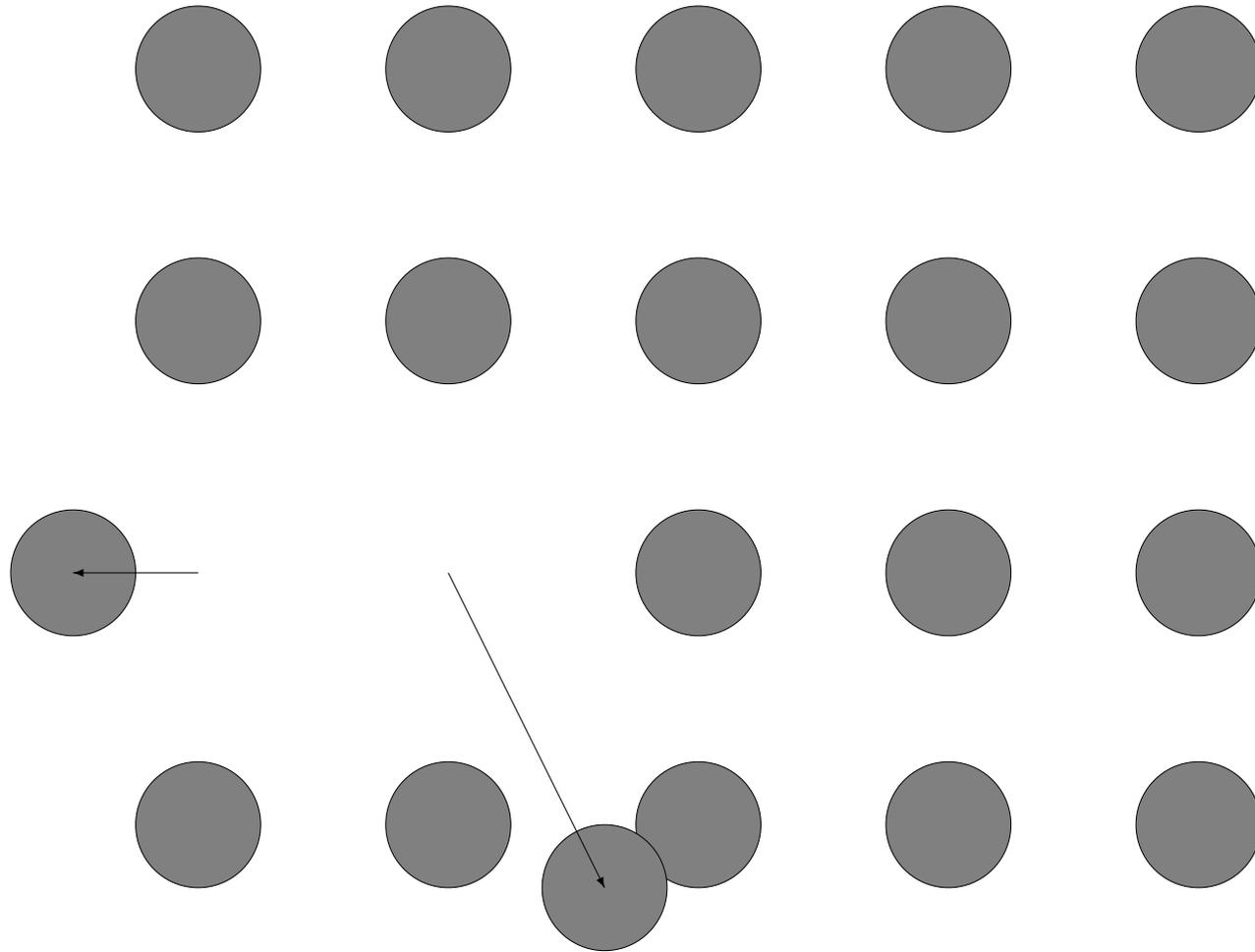
$\xi := \sum \delta_{q+\xi_q}$ を perturbed lattice と呼ぶ .

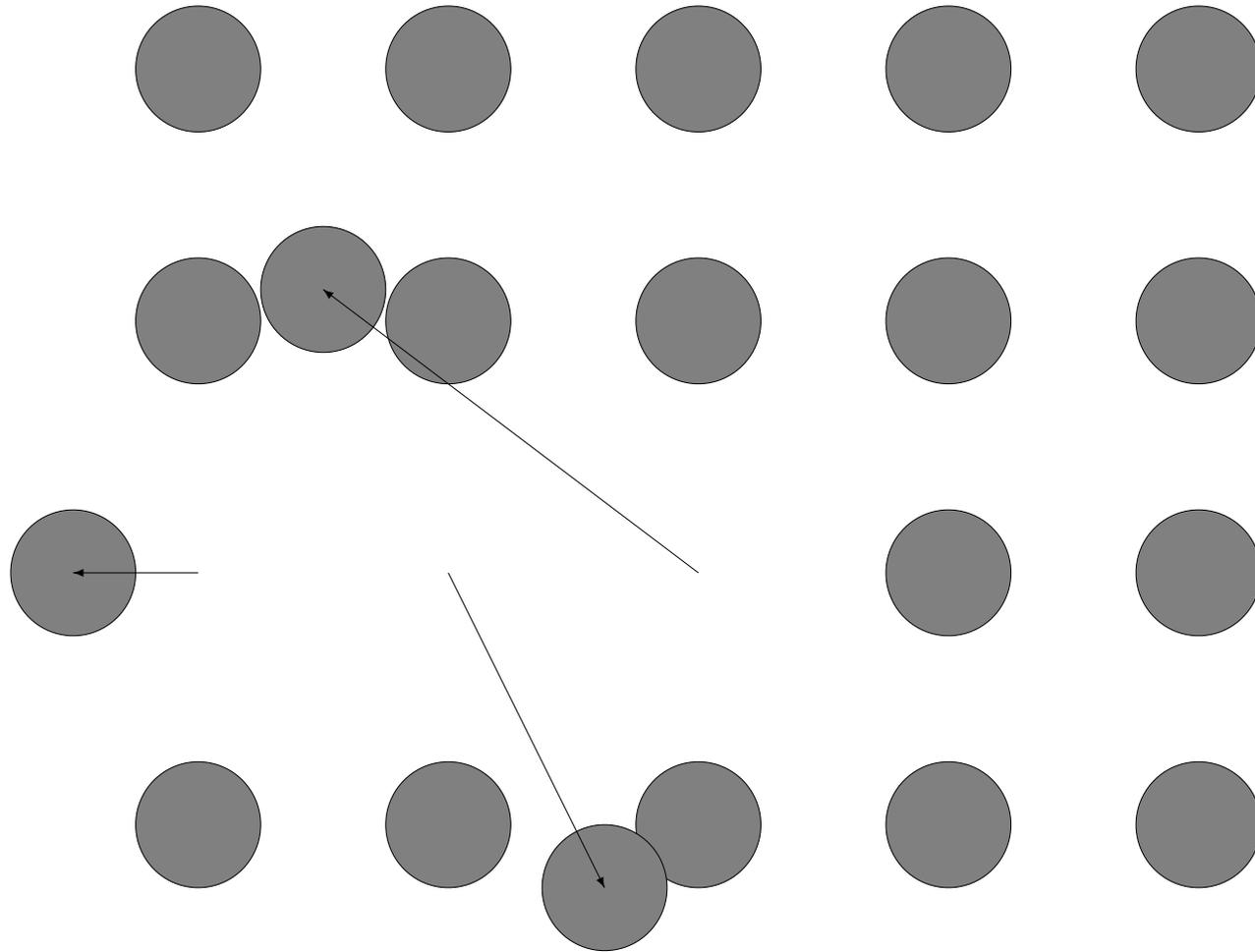
Killing traps: 非負の可積分関数 W に対して

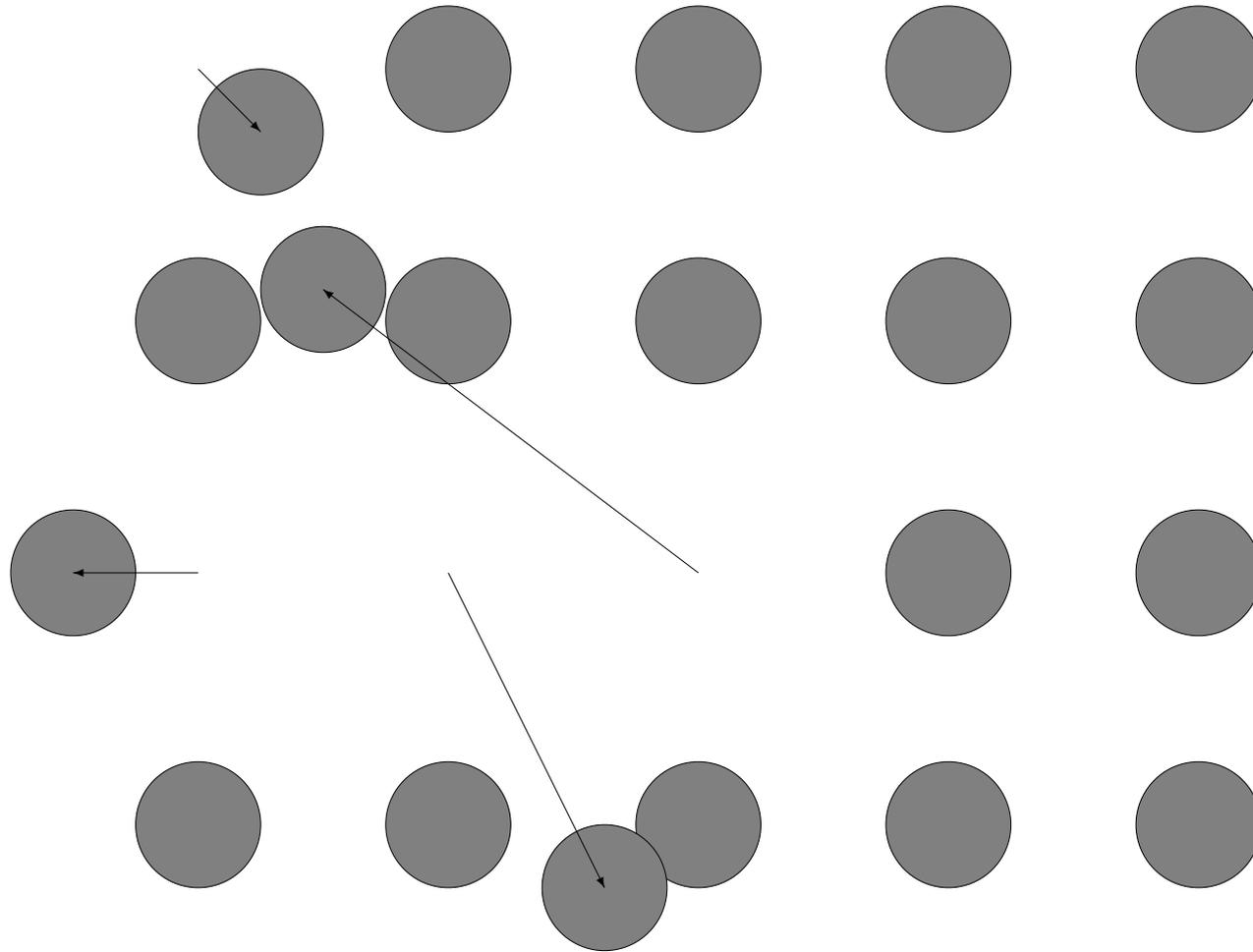
$$V(x, \xi) := \sum_{q \in \mathbb{Z}^d} W(x - q - \xi_q).$$

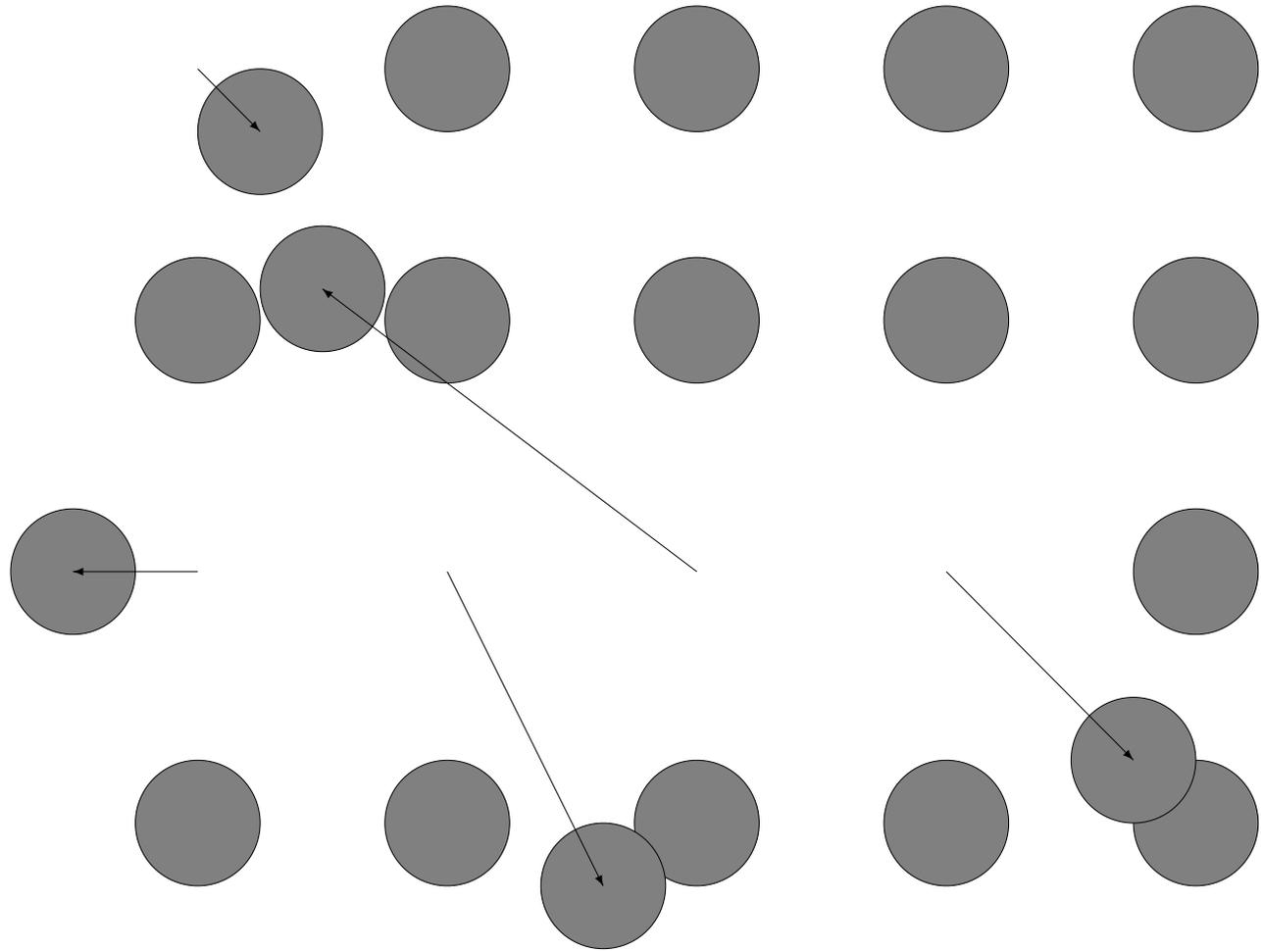


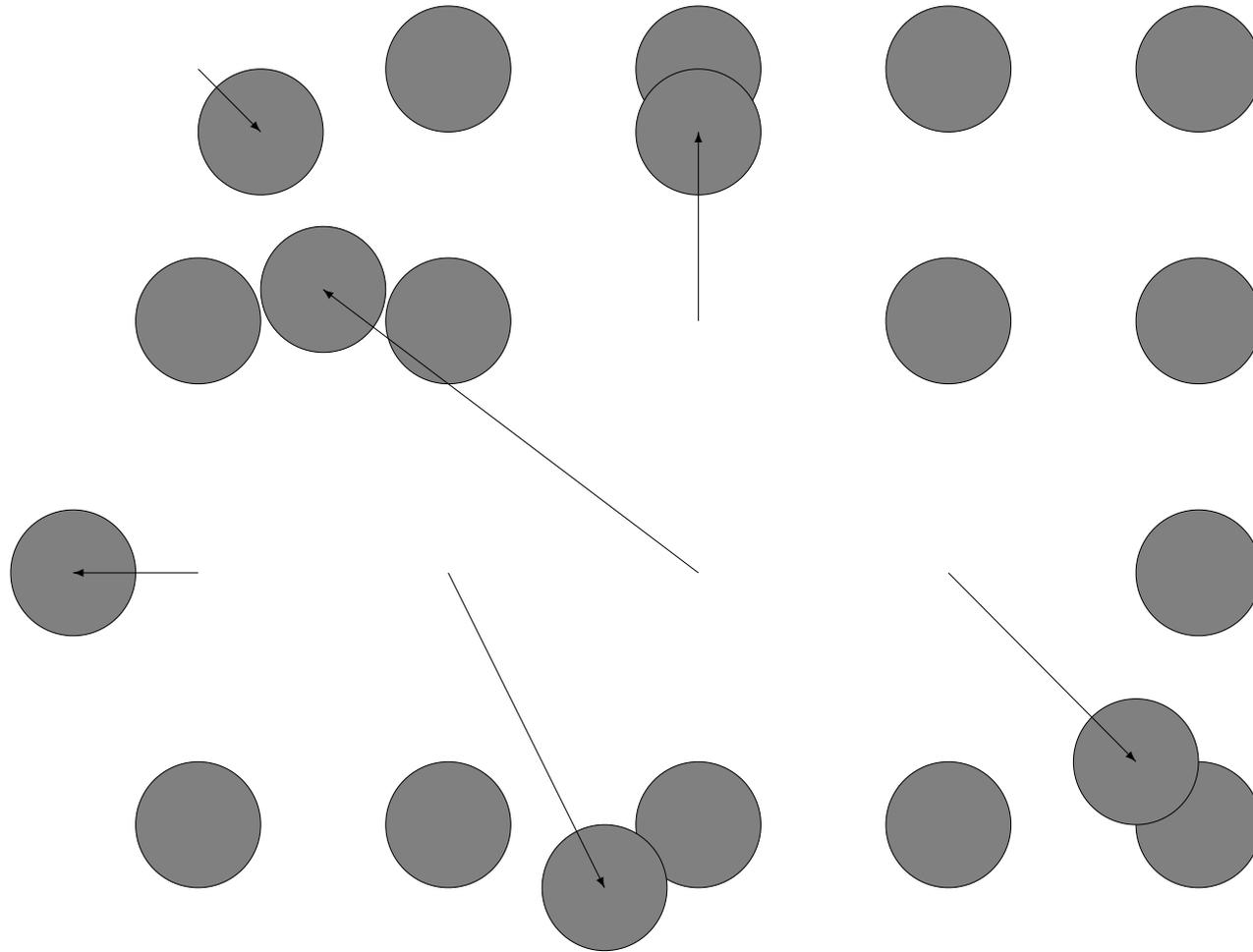


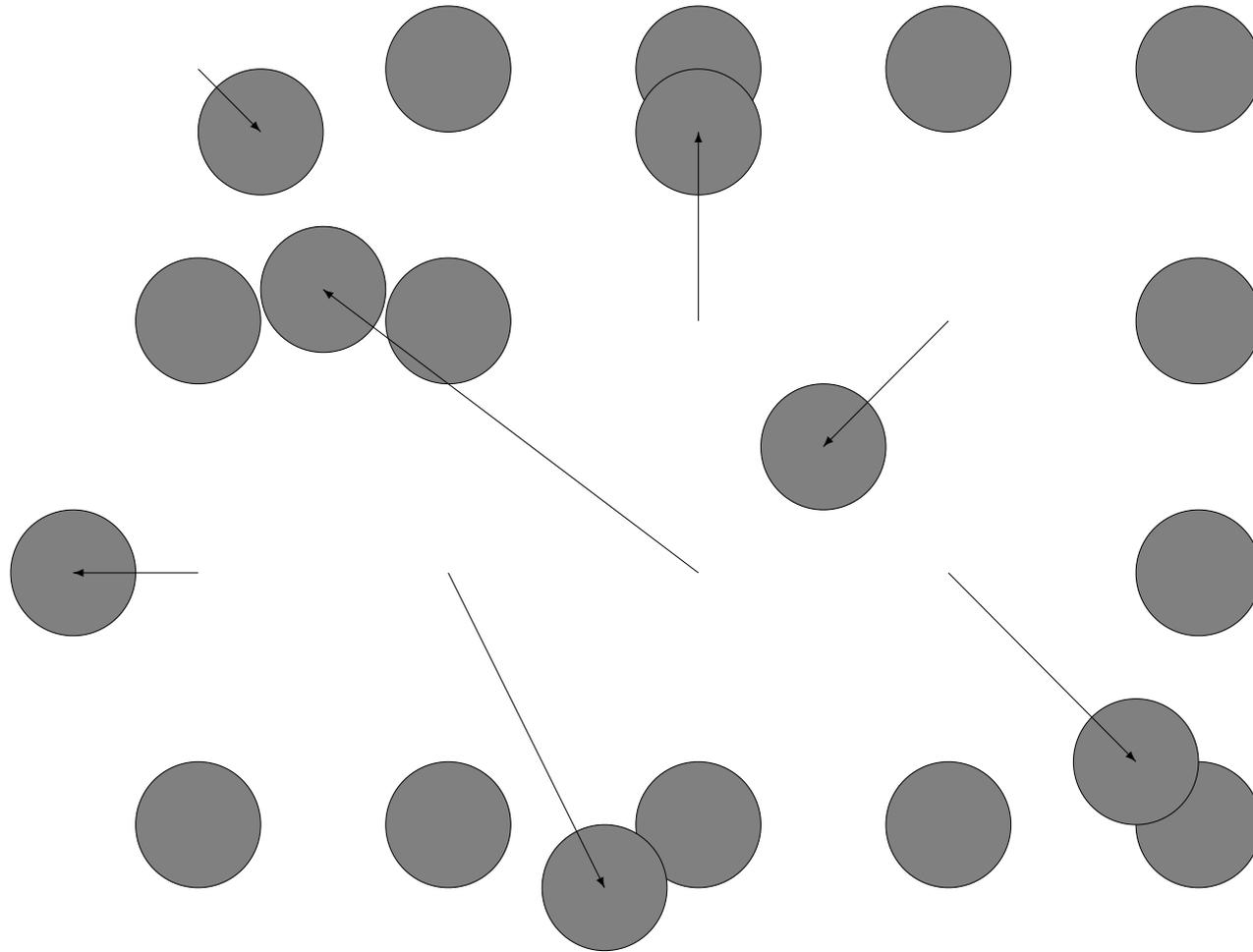


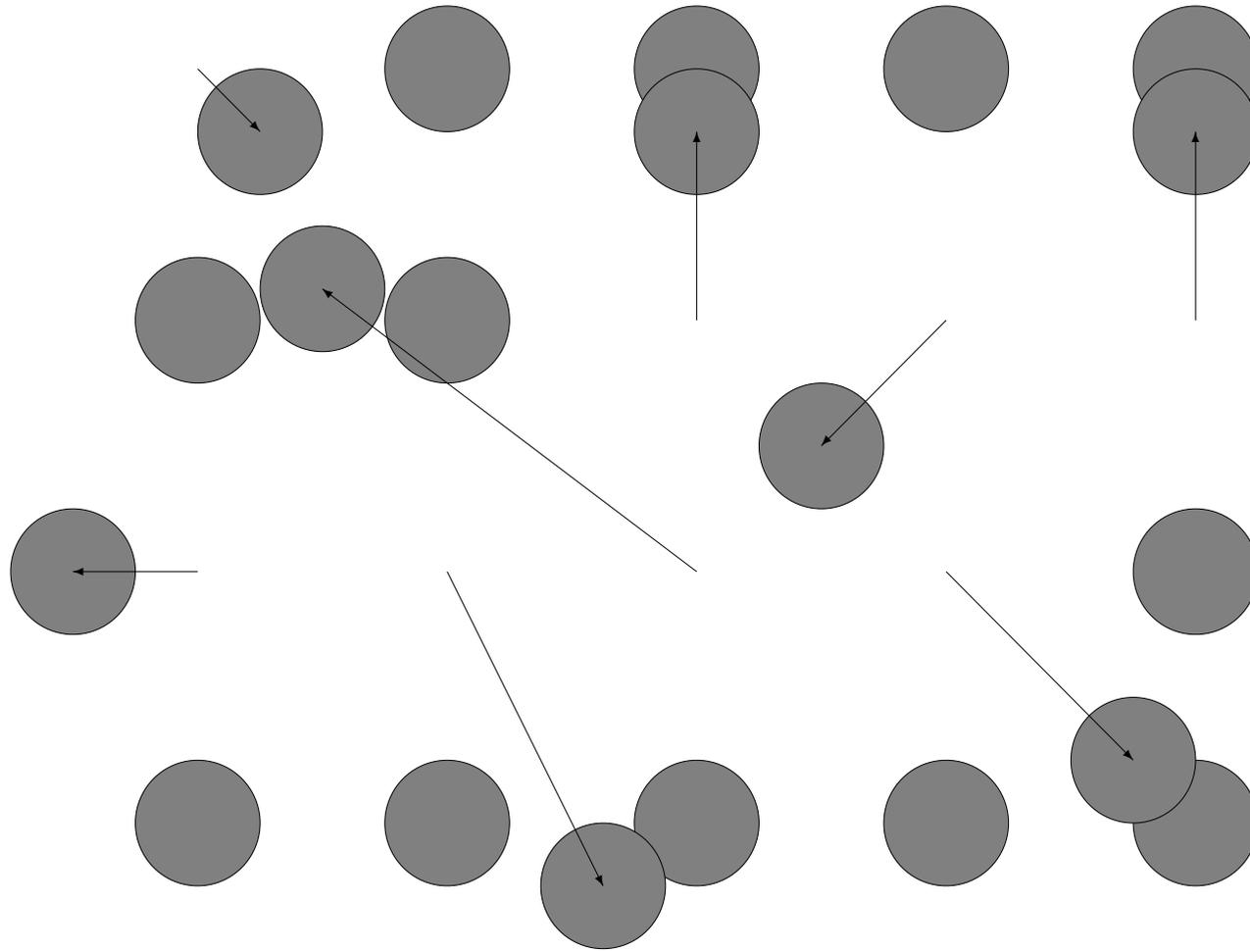


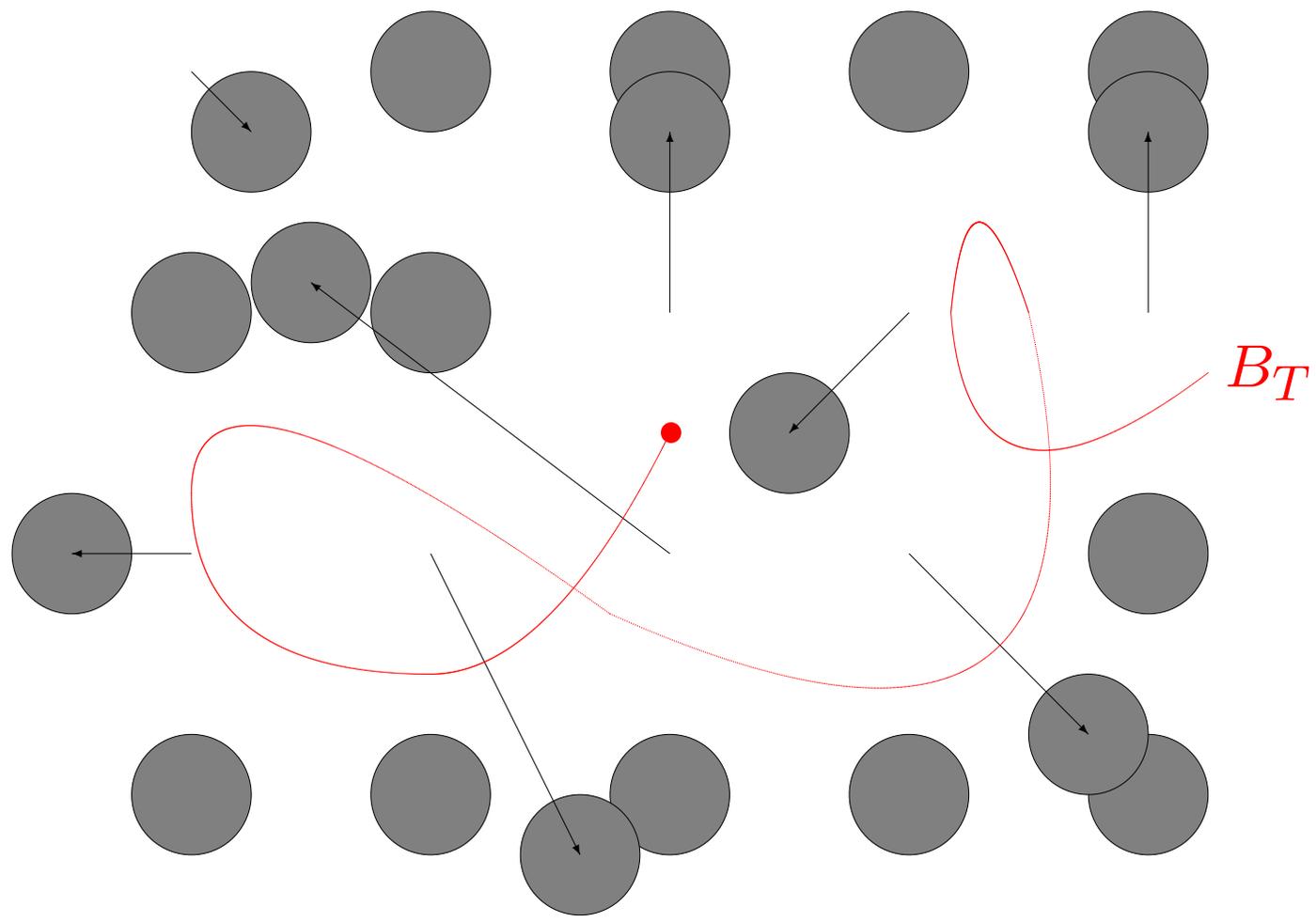












Survival probability

$V(\cdot, \xi)$ を killing potential とする Brown 運動が時刻 T まで生存する確率は,

$$S_T := \mathbb{E}_\theta \otimes E_0 \left[\exp \left\{ - \int_0^T V(B_s, \xi) ds \right\} \right].$$

Motivations

1. S_T は $\mathbb{P}_\theta \otimes P_0(\cdot | \text{survive})$ の正規化定数 = 分配関数という意味を持つ .
2. S_T は killed BM の生成作用素 $-1/2\Delta + V(\cdot, \xi)$ の “状態密度” の Laplace 変換である .

S_T の解釈

1. Kacの公式によると ξ 毎の生存確率

$$S_{T,\xi}(x) = E_x \left[\exp \left\{ - \int_0^T V(B_s, \xi) ds \right\} \right]$$

は次の初期値問題：

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) = \frac{1}{2} \Delta u(t, x) - V(x, \xi) u(t, x)$$

の初期値 $u(0, \cdot) \equiv 1$ に対する解の (T, x) での値である。

2. 媒質のエルゴード性により, \mathbb{P}_θ での平均は $S_{T,\xi}(x)$ の空間平均

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|B(0, N)|} \int_{B(0, N)} S_{T,\xi}(x) dx$$

と思ってもよい。

Example 1. ξ が \mathbb{Z}^d の格子点の場合,

$$\log S_T \asymp -T \quad (T \rightarrow \infty).$$

Example 2. (Donsker-Varadhan '75) ξ が Poisson 点過程で $W(x) = o(|x|^{-d-2})$ の場合,

$$\log S_T \asymp -T^{\frac{d}{d+2}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

Example 3. (Pastur '77) ξ が Poisson 点過程で $W(x) \sim |x|^{-\alpha}$ ($\alpha < d + 2$) の場合,

$$\log S_T \asymp -T^{\frac{d}{\alpha}} \quad (T \rightarrow \infty).$$

2. Main results

Theorem 1.

W が台コンパクトのとき任意の $\theta > 0$ に対し $T \rightarrow \infty$ で

$$\log S_T \asymp \begin{cases} -T^{\frac{2+\theta}{4+\theta}} (\log T)^{-\frac{\theta}{4+\theta}} & (d = 2), \\ -T^{\frac{d^2+2\theta}{d^2+2d+2\theta}} & (d \geq 3). \end{cases}$$

Remarks.

(1) Weak disorder limit: $\frac{d^2 + 2\theta}{d^2 + 2d + 2\theta} \xrightarrow{\theta \rightarrow \infty} 1$.

(2) Strong disorder limit: $\frac{d^2 + 2\theta}{d^2 + 2d + 2\theta} \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \frac{d}{d + 2}$.

Theorem 2.

$W(x) \sim |x|^{-\alpha}$ ($\alpha > d$) のとき任意の $\theta > 0$ に対し $T \rightarrow \infty$ で

$$\log S_T \asymp \begin{cases} -T^{\frac{d+\theta}{\alpha+\theta}} & (\alpha < d+2), \\ -T^{\frac{d^2+2\theta\mu}{d^2+2d+2\theta\mu}} & (\alpha \geq d+2). \end{cases}$$

ここで $\mu = \frac{\alpha-2}{\alpha-d}$.

Remarks.

$$(1) \quad 1 \xleftarrow{\theta \rightarrow \infty} \frac{d+\theta}{\alpha+\theta} \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \frac{d}{\alpha}.$$

$$(2) \quad 1 \xleftarrow{\theta \rightarrow \infty} \frac{d^2+2\theta\mu}{d^2+2d+2\theta\mu} \xrightarrow{\theta \rightarrow 0} \frac{d}{d+2}.$$

3. Lifshitz and Pastur tails ($d \geq 3$)

$-1/2\Delta + V(\cdot, \xi)$ の状態密度を

$$\ell(d\lambda) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|B(0, N)|} \sum_{i=1}^{\infty} \delta_{\lambda_i^D(B(0, N))}(d\lambda),$$

で定める． $\log S_T$ の漸近挙動と指数的 Tauber 型定理により， $\lambda \rightarrow 0$ において次が分かる：

$$\log \ell([0, \lambda]) \asymp \begin{cases} -\lambda^{-\frac{d}{2} - \frac{\theta}{d}} & (W \text{ が台コンパクト}), \\ -\lambda^{-\frac{d}{2} - \frac{\theta}{d}\mu} & (W(x) \sim |x|^{-\alpha}, \alpha \geq d + 2), \\ -\lambda^{-\frac{d+\theta}{\alpha-d}} & (W(x) \sim |x|^{-\alpha}, \alpha < d + 2). \end{cases}$$

4. Compact support case

簡単のため以下 potential の高さを ∞ とし ,

$$S(\xi) := \bigcup_{q \in \mathbb{Z}^d} (q + \xi_q + \text{supp } W)$$

とする . 大偏差原理における Varadhan's lemma の類似で

$$\begin{aligned} S_T &= \mathbb{P}_\theta \otimes P_0 \left(H_{S(\xi)} > T \right) \\ &\approx \sup_U \left[P_0 \left(T_U > T \right) \mathbb{P}_\theta (\xi(U) = 0) \right] \end{aligned}$$

が分かる . (但し証明は大偏差原理ではなく “粗視化” で行う.)

4.1 Hole probability

前の変分問題のうち Brown 運動に関する部分は

$$\log P_0(T_U > T) \sim -\lambda_1(-1/2\Delta \text{ in } U)T$$

と最小固有値を使って評価できる．一方、大きな穴を見つける確率については次が成り立つ：

Lemma. $U \subset \mathbb{R}^d$ に対する緩い regularity condition の下で、

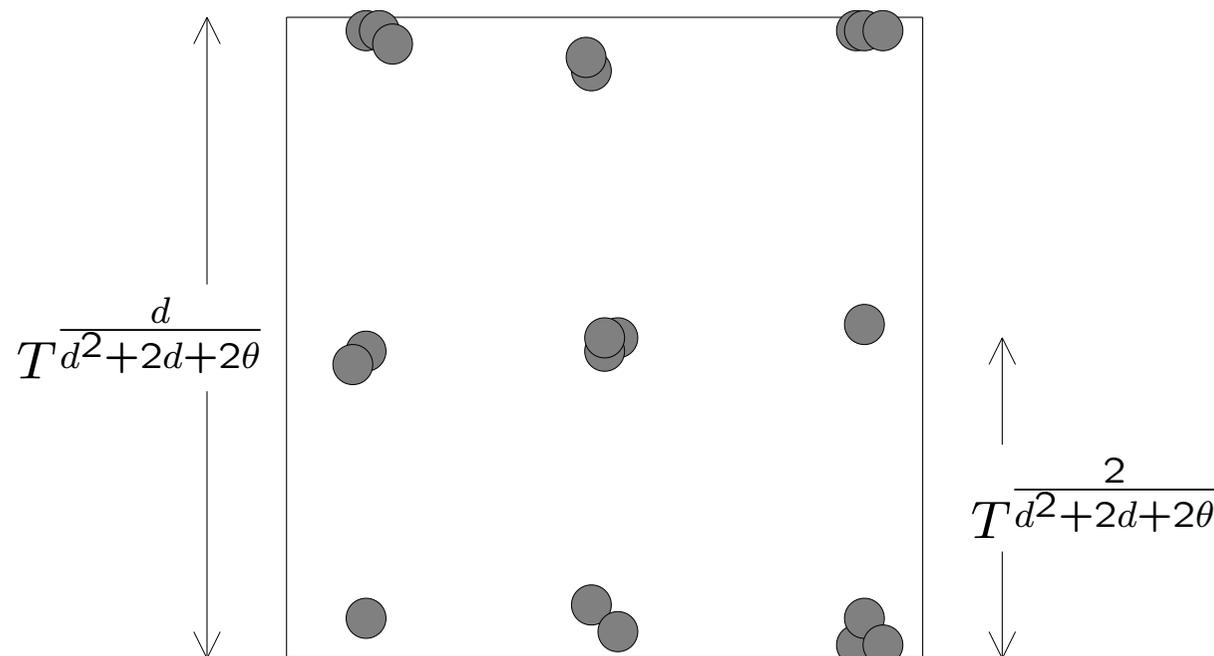
$$\log \mathbb{P}_\theta(\xi(U) = 0) \sim - \int_U \text{dist}(x, \partial U)^\theta dx.$$

- これらによって変分問題は次のように書き換えられる．

$$\log S_T \approx - \inf_U \left\{ \lambda_1(U)T + \int_U \text{dist}(x, \partial U)^\theta dx \right\}.$$

4.2 Constant capacity regime

前の変分問題の最小は $d \geq 3$ のとき以下のような状況で達成される。



Proposition.

$$\inf_U \left\{ \lambda_1(U)T + \int_U \text{dist}(x, \partial U)^\theta dx \right\} \asymp T \frac{d^2 + 2\theta}{d^2 + 2d + 2\theta}.$$

5. Light tail case

$W(x) \sim |x|^{-\alpha}$ ($\alpha \geq d + 2$) の場合を考える．このとき“粗視化”はうまく行かず，代わりに次を用いる．

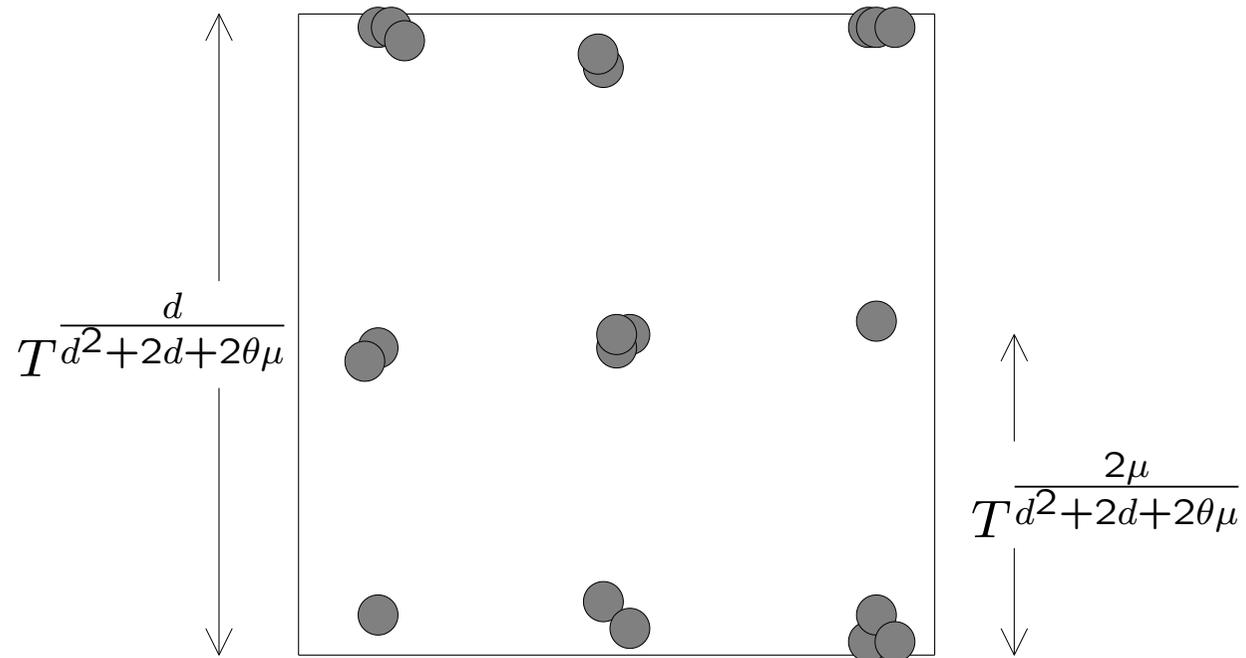
$$\begin{aligned} S_T &= \mathbb{E}_\theta \left[e^{-T(-1/2\Delta + V(\cdot, \xi))} \right] \\ &\approx \mathbb{E}_\theta \left[\exp \{ -T\lambda_1(-1/2\Delta + V(\cdot, \xi)) \} \right] \\ &\leq e^{-T\lambda} \mathbb{P}_\theta(\lambda_1(\xi) > \lambda) + \mathbb{P}_\theta(\lambda_1(\xi) \leq \lambda). \end{aligned}$$

ここで λ を $e^{-T\lambda}$ と第二項が同じ減衰オーダーになるようにとる．

Proposition.

$$\mathbb{P}_\theta \left(\lambda_1(\xi) \leq c_1 T^{-\frac{2d}{d^2+2d+2\theta\mu}} \right) \leq \exp \left\{ -c_2 T^{\frac{d+2\theta\mu}{d^2+2d+2\theta\mu}} \right\}$$

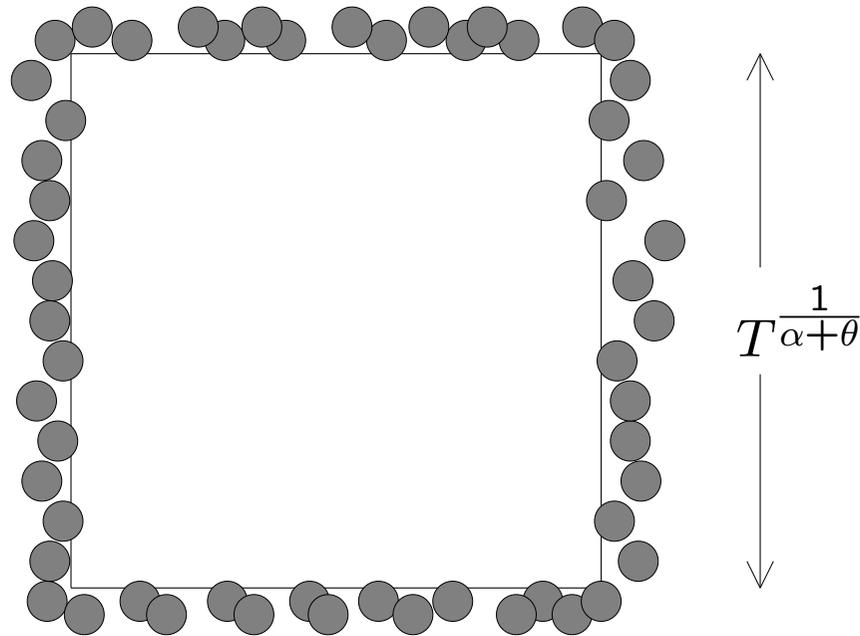
この命題の証明は compact support の場合と同様に以下のような描像がほとんど最適であることを信じて評価を行うのであるが，解析的に書けていないので別種の困難がある．



Remark. $\alpha = d + 2$ のとき $\mu = \frac{\alpha - 2}{\alpha - d} = \frac{d}{2}$.

6. Heavy tail case

$W(x) \sim |x|^{-\alpha}$ ($\alpha < d + 2$) の場合を考える．前の Remark で見たようにこのとき次のような配置が最適となることが分かる．



観察： $\lambda_1(-1/2\Delta \text{ in } \square) \asymp T^{-\frac{2}{\alpha+\theta}} \ll T^{\frac{d-\alpha}{\alpha+\theta}} \asymp \inf_{x \in \square} V(x, \xi)$

7. Convergence of point process

結果を述べる際にも注意したが, $\log S_T$ の漸近挙動の指数は $\theta \rightarrow 0$ において Poisson 点過程の時の指数に収束する. そこで

$$Q : (\xi, \mathbb{P}_\theta) \xrightarrow{\text{weakly}} \text{Poisson point process?}$$

まず次は比較的容易に分かる.

Lemma. 任意の有界 Borel 集合 $B \subset \mathbb{R}^d$ に対し,

(i) $\mathbb{P}_\theta(\xi(B) = 0) \rightarrow e^{-|B|}$ as $\theta \rightarrow 0$,

(ii) $\mathbb{E}_\theta[\xi(B)] \rightarrow |B|$ as $\theta \rightarrow 0$.

Theorem.(Kallenberg) 任意の有界 Borel 集合 $B \subset \mathbb{R}^d$ に対し ,

$$(i) \lim_{\theta \rightarrow 0} \mathbb{P}_\theta(\xi(B) = 0) = \mathbb{P}_0(\xi(B) = 0),$$

$$(ii) \limsup_{\theta \rightarrow 0} \mathbb{E}_\theta[\xi(B)] \leq \mathbb{E}_0[\xi(B)],$$

であるならば , $\mathbb{P}_\theta \xrightarrow{\text{weakly}} \mathbb{P}_0$.

(cf. O. Kallenberg. *Random measures*. Akademie-Verlag, Berlin, fourth edition, 1986.)

- 従って , $(\xi, \mathbb{P}_\theta) \xrightarrow{\text{weakly}} \text{Poisson point process}$.