ランダムピニング模型における相転移・臨界現象について

千野　由喜

1　ランダムピニング模型の紹介

ランダムピニング模型は元来，特定の媒質中にある高分子化合物の形状のモデル化として考え出された [5]. このモデルは高分子鎖をランダムウォークの軌跡，媒質をポテンシャルとして書き直すことで数理モデル化される．ランダムピニング模型は大きく homogeneous な場合と disordered な場合の二つに分けられる．

1.1　Homogeneous – 均質な場合

まずは，媒質が homogeneous な場合のランダムピニング模型を紹介しよう．ここではランダムウォーク S を再帰時間の分布によって特徴付ける．その分布は

$$K(n) := \mathbf{P}(\tau_i - \tau_{i-1} = n) = \frac{c_K}{n^{1+\alpha}}\ ,\ \alpha > 0\ , \tag{1}$$

で与え，τ_i を i 番目の再帰時刻，c_K を規格化定数とする．簡単のため $K(\infty) = 0$ と，今回はしておく. 再帰時刻の列 $\{\tau_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ は再生過程と呼ばれ，このモデルの解析において重要な役割を果たす（[2] が詳しい）．媒質については原点に対し時間一様にポテンシャルを置く．ウォークが原点に再帰する度にポテンシャルの効果でウォークは重みを増す（もしくは減らす）といったように考える．この効果の下でのウォークの振舞いを観察するための準備として，次の分配関数というものを定義する．

$$Z_{n,h} := \mathbf{E}\left[\exp\left\{h\sum_{k=1}^{n}\mathbf{1}_{\{S_k=0\}}\right\}\mathbf{1}_{\{S_n=0\}}\right]\ . \tag{2}$$

統計力学では状態和と呼ばれるもので，全てのウォークのサンプルを含んでいる．簡略化のため以下の記号を使っていく．

$$\delta_n := \mathbf{1}_{\{S_n=0\}}\ ,\ L_n := \sum_{k=1}^{n}\delta_k\ . \tag{3}$$

平衡状態を記述する（有限）Gibbs 測度は次のように書ける．

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{P}_{n,h}}{\mathrm{d}\mathbf{P}} = \frac{\exp\left\{h\sum_{k=1}^{n}\mathbf{1}_{\{S_k=0\}}\right\}\mathbf{1}_{\{S_n=0\}}}{Z_{n,h}}\ . \tag{4}$$

（平衡）統計力学では，臨界現象を何らかの極限関数が解析性を失うことで特徴付ける．ここで言う極限とは無限体積極限のことであり，今回は $n \to \infty$ のことである．この極限関数として自由エネルギー $\mathbf{F}(h)$ を考える．自由エネルギーは以下の等式の解として定められる．

$$\sum_{n=0}^{\infty} K(n)\exp\{h - n\mathbf{F}(h)\} = 1\ . \tag{5}$$

再生定理を用いることにより，

$$\mathbf{F}(h)=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log Z_{n,h}\ . \tag{6}$$

であることが言える（証明については [6] もしくは [7] 参照）．分配関数に対するラプラス変換もしくは母関数を考えることで (5) 式による定義と (6) 式による定義の同値性を言うこともできる．自由エネルギーを観察することによって臨界点 h_c が定まる．母関数を用い考えた場合，この臨界点は母関数の収束半径にあたる．

$$h_c:=\inf\{h\in\mathbb{R};\mathbf{F}(h)>0\}\ . \tag{7}$$

もし $h=0$ ならば，自明にランダムウォークのままで何も変化しない．しかし $h>0$ ならば，原点に再帰する度に重みを増すので原点付近に局在するウォークが実現されやすくなる．もちろん $h<0$ ならば，ウォークは原点から離れるように振舞いやすくなる．このように局在相と非局在相の相転移の閾値として臨界点 $h_c=0$ は特徴付けられる．これは直感にも合っていてとてもわかりやすい．

1.2 Disordered – 不均質な場合

この disordered な場合では媒質に対してランダムさ ω を加えて考える．つまり再帰する度にもらえた重みが毎回ランダムに変化する状況を考えている．ここで ω には本質的ではないが計算しやすくなるように，次の仮定をしておく．

$$\omega=\{\omega_i\}_{i\in\mathbb{N}}\ \text{は独立同分布}\ ,\ \mathbb{E}[\omega_1]=0\ ,\ \mathbb{E}[\omega_1^2]=1\ ,\ \mathbb{E}[e^{\beta\omega_1}]:=M(\beta)<\infty\ ,\ \beta\in\mathbb{R}\ . \tag{8}$$

$\mathbf{E}$ はウォークに関する期待値を表し，$\mathbb{E}$ は ω に関する期待値を表すとする．Disordered な場合では分配関数を次のように二通りに定めることができる．

$$Z_{n,h,\beta}:=\mathbf{E}\left[\exp\left\{\sum_{k=1}^{n}(h+\beta\omega_k)\delta_k\right\}\delta_n\right]\ , \tag{9}$$

$$Z^a_{n,h,\beta}:=\mathbb{E}\left[Z_{n,h,\beta}\right]\ . \tag{10}$$

一つ目を quenched，二つ目を annealed と呼ぶ．Quenched な場合では媒質のランダムさがそのまま分配関数に反映されており，分配関数自体が確率変数になっている．それに対して annealed な場合では，媒質に対して平均を取ってしまっているので平均場のような量になっている．さらに annealed な場合は独立性のおかげで計算が容易にでき，homogeneous な場合を少し平行移動したものになっていることがわかる．

$$\begin{aligned}Z^a_{n,h,\beta}&=\mathbb{E}\mathbf{E}\left[\exp\left\{\sum_{k=1}^{n}(h+\beta\omega_k)\delta_k\right\}\delta_n\right]=\mathbf{E}\left[\exp\left\{h\sum_{k=1}^{n}\delta_k\right\}\mathbb{E}\left[\exp\left\{\beta\sum_{k=1}^{n}\omega_k\delta_k\right\}\right]\delta_n\right]\\&=\mathbf{E}\left[\exp\left\{h\sum_{k=1}^{n}\delta_k\right\}\prod_{k=1}^{n}\mathbb{E}\left[\exp\left\{\beta\omega_k\right\}\right]^{\delta_k}\delta_n\right]=\mathbf{E}\left[\exp\left\{h\sum_{k=1}^{n}\delta_k\right\}M(\beta)^{\sum_{k=1}^{n}\delta_k}\delta_n\right]=Z_{n,h+\log M(\beta)}\end{aligned}$$

この計算により annealed な場合の臨界現象は homogeneous な場合と同様に解析することができる．Quenched な場合に関しては，$\mathbb{E}[\log Z_{n,h,\beta}]$ の持つ優加法性と Kingman のエルゴード定理を用いることで次に定める自由エネルギーの存在性が言える．

$$\mathbf{F}(h,\beta):=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log Z_{n,h,\beta}\ , \tag{11}$$

$$\mathbf{F}^a(h,\beta):=\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log Z^a_{n,h,\beta}=\mathbf{F}(h+\log M(\beta))\ . \tag{12}$$

これにより，臨界点も

$$h_c(\beta) := \inf\{h \in \mathbb{R}; \mathbf{F}(h,\beta) > 0\} \ , \tag{13}$$
$$h_c^a(\beta) := \inf\{h \in \mathbb{R}; \mathbf{F}^a(h,\beta) > 0\} = -\log M(\beta) \ . \tag{14}$$

と定めることができる．対数の凸性から次の大小関係もわかる．

$$\mathbf{F}(h) \le \mathbf{F}(h,\beta) \le \mathbf{F}^a(h,\beta) \ , \tag{15}$$
$$h_c^a(\beta) \le h_c(\beta) \le h_c = 0 \ . \tag{16}$$

2　主要な結果

今現在得られている主な結果を紹介する．

定理 2.1 ([9], [3], [1])**.** $\beta > 0$ に対して，

$$h_c(\beta) \begin{cases} = h_c^a(\beta) \underset{\beta\downarrow 0}{\sim} -\frac{1}{2}\beta^2 & ,\alpha \in (0,1/2) \\ \underset{\beta\downarrow 0}{\sim} \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2\mu}\frac{\alpha}{1+\alpha}\right)\beta^2 & ,\alpha > 1 \end{cases} \tag{17}$$

が成り立つ．ただし，$\mu = \mathbb{E}[\tau_1]$ とする．また，$h > h_c(\beta)$ に対して

$$\lim_{h \searrow h_c(\beta)} \frac{\mathbf{F}(h,\beta)}{\log(h - h_c(\beta))} \begin{cases} = 1/\alpha > 2 & ,\alpha \in (0,1/2) \\ \le 2 & ,\alpha \ge 1/2 \end{cases} \tag{18}$$

が言える．

(18) 式の 2 つ目の不等式は Smoothing 不等式と呼ばれ，[8] では ω がガウス型，[4] ではさらに一般の場合で示されている．

定理 2.2 ([7])**.** $\beta > 0$ に対して，ある定数 c がとれて

$$h_c(\beta) - h_c^a(\beta) \ge \begin{cases} c\beta^2 & \alpha > 1 \\ c\beta^2/(\log(1+\frac{1}{\beta}))^2 & \alpha = 1 \\ c\beta^{\frac{2\alpha}{2\alpha-1}} & \alpha \in (\frac{1}{2},1) \\ \exp\left\{\frac{-1}{c\beta^4}\right\} & \alpha = \frac{1}{2} \end{cases} \tag{19}$$

が成り立つ．

この定理 2.2 は Fractional Moment Method(FMM:分数次積率法) と呼ばれる解析手法を用いて示される．

- **[Fractional moment estimate]**
  分数次数 $\gamma \in (0,1)$ を適切に選び，分配関数を 適切な距離(相関距離) で分割する．評価には $(1+x)^\gamma \le 1 + x^\gamma$, $x \ge 0$ を用いる
- **[Tilting(change of measure estimate)]**
  Hölder の不等式を応用して，ω についての確率測度を 適切 に取り直し，coarse graining によって分割された，相関距離の大きさのブロックでの分配関数を評価する
- **[Coarse graining estimate]**
  相関距離で分割したブロック毎の分配関数の評価から全ての系の分配関数の評価に広げる

相関距離を k，分数次数を γ として分配関数を coarse graining する

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\log Z_{n,h,\beta}] &= \frac{1}{\gamma}\mathbb{E}[\log(Z_{n,h,\beta})^{\gamma}] \\ &\geq \frac{1}{\gamma}\mathbb{E}[\log(Z_{k,h,\beta}Z_{n-k,h,\beta})^{\gamma}] \\ &= \frac{1}{\gamma}\mathbb{E}[\log(Z_{k,h,\beta})^{\gamma}] + \frac{1}{\gamma}\mathbb{E}[\log(Z_{n-k,h,\beta})^{\gamma}] \end{aligned} \tag{20}$$

この後，Jensen の不等式を用いて分配関数の分数次の積率を評価していくことになる．この手法の難しい点は，分数次数 γ および相関距離 k を恣意的に与えなければ評価がうまくいかないところにある．

3 Discussion

定理 2.1 では $\alpha \in (0, 1/2)$ および $\alpha > 1$ における臨界点の振舞いが観察できる．しかしながら，$\alpha \in (1/2, 1)$ における臨界点の振舞いは現在に至るまでわかっていない．また，Smoothing 不等式では自由エネルギーの臨界点近くでの曲率の上限がわかっているだけにとどまり，その漸近挙動をつかむには至っていない．これらの定理で得られる結果は FMM を考えてもわかるように，ほとんどが annealed な場合の臨界点からのアプローチである．**下に凸で単調増加，無限回微分可能な曲線 (自由エネルギー) の** 0 **との交点 (臨界点) を求めたい**という目的に対して，臨界点の下側である annealed な場合の臨界点からのアプローチはやや**不自然**に感じる．自由エネルギーの属性から，臨界点の上側である homogeneous な場合からのアプローチを考えるほうが直感的と言える．講演では，どのようにしてこういったアプローチをするかを，その際に現れる問題点と共に議論していきたい．

参考文献

[1] Kenneth S Alexander and Nikos Zygouras. Quenched and annealed critical points in polymer pinning models. *Communications in Mathematical Physics*, 291(3):659–689, 2009.

[2] Søren Asmussen. *Applied probability and queues*, volume 51. Springer, 2003.

[3] Quentin Berger, Francesco Caravenna, Julien Poisat, Rongfeng Sun, and Nikos Zygouras. The critical curves of the random pinning and copolymer models at weak coupling. *Communications in Mathematical Physics*, pages 1–24, 2013.

[4] Francesco Caravenna and Frank den Hollander. A general smoothing inequality for disordered polymers. *Electronic communications in probability*, 18:1–15, 2013.

[5] Michael E Fisher. Walks, walls, wetting, and melting. *Journal of Statistical Physics*, 34(5-6):667–729, 1984.

[6] Giambattista Giacomin. *Random polymer models*, volume 200. World Scientific, 2007.

[7] Giambattista Giacomin. *Disorder and Critical Phenomena Through Basic Probability Models: École D'Été de Probabilités de Saint-Flour XL–2010*, volume 40. Springer, 2011.

[8] Giambattista Giacomin and Fabio Lucio Toninelli. Smoothing effect of quenched disorder on polymer depinning transitions. *Communications in mathematical physics*, 266(1):1–16, 2006.

[9] Fabio Lucio Toninelli et al. Disordered pinning models and copolymers: beyond annealed bounds. *The Annals of Applied Probability*, 18(4):1569–1587, 2008.