

リウビル演算子の複素固有値問題と 濃密度気体系の非平衡輸送現象^{1,2}

Center for Complex Quantum Systems, Department of Physics,
The University of Texas, Austin, TX 78712, USA
Tomio Y. Petrosky³

(2007年8月10日受理)

無限自由度を持つ巨視的な物理系における、リウビル演算子の複素スペクトル解析の理論を紹介する。この理論によると、系の不可逆的振る舞いは物理学の基本法則から導かれる力学の厳密な性質であることが示される。応用として、任意の d 次元空間内で衝突し合っている剛体球よりなる、比較的濃密度気体系の振る舞いを論じる。このスペクトル分解を通して、媒質による集団モードの効果を取り入れて再規格化された分布関数が従う運動論的方程式を導く。この再規格化の効果は、平衡状態では消えてしまう非平衡効果である。通常の分布関数が記憶効果に由来した非マルコフ方程式に従っているのとは対照的に、再規格化された分布関数は全ての次元 d で良く定義されたマルコフ方程式に厳密に従っている。したがって、 $d=2$ を含んだ全ての次元でこの集団モードに付随した輸送係数が定義できるようになった。それ故、我々の定式化は巨視的輸送理論についての微視的意味付けを提供したことになる。このことはさらに、2次元系に輸送方程式がはたして存在するののかという長年の問題に、肯定的な回答を与えたことにもなっている。任意の n モード結合から来る長時間テールのような、再規格化されていない通常の分布関数に現れる非マルコフ効果は、我々の再規格化された分布関数のマルコフ的發展の重ね合わせで書けている。そこで、この複素スペクトル分解を使って、線形応答理論におけるグリーン=久保公式の長時間テールに起因した赤外発散の問題を分析した。通常論じられているように流体力学的モードのみを中間状態の多体モードの効果に取り入れた場合には、赤外発散の現れる最大の次元、すなわち臨界次元は、今までと同じ $d=2$ となった。しかし、中間状態にもっと複雑な非流体力学的モードを取り入れた場合、流体力学的モードのような赤外発散を相殺する項が現れず、その結果、臨界次元として新たに $d=4$ が得られた。時

¹本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

²このレビューは、かつて筆者が英語で書いた論文 [1]-[4] に、いくつかの改良を加えて書き上げたものである。ここでは、不可逆性が熱力学的極限で現れてくる力学および数学的根拠を論じるが、その際に、非平衡統計力学に慣れていない読者にとって特に取り付きにくい分布関数の特異性に付いて、以前の論文よりもかなり噛み砕いた説明をしてある。

³E-mail: petrosky@physics.utexas.edu

間の対称性の破れに関して良く出て来る一連の質問に対する回答なり意見を巻末に列挙した。

1 はじめに

不可逆過程は我々を取り巻いている自然界のあらゆる分野で本質的な役割を演じている。不可逆過程に伴った散逸は伝統的には、熱損失やエンジンの効率に対する制限などのように否定的な概念としてとらえられて来た。しかし今日では、散逸は物質の自己組織化へと導く生産的役割を演じることが判っている。したがって、力学に基づいて不可逆性の微視的起源を理解することは、物理や数学の多くの分野にまたがった重要な問題である。実際、古典力学でも量子力学でも、その基本方程式は全て時間の反転に関して対称であるが、散逸を記述する方程式は時間の対称性を破っている。上で述べた散逸の生産的役割を理解した今となつては、多大な自由度を持った系を厳密に取り扱うことが出来ないという我々の処理能力の限界や、それを根拠とした系の粗視化による近似の帰結として不可逆性が現れてくるという、しばしば聞かれるような説明を受け入れるのは困難である。自然自身は近似をしない。また、我々の存在を可能にしているのは不可逆性であつて、我々の存在が不可逆性を産み出しているのではない。この基本方程式と不可逆過程の見かけの矛盾を解消するために、筆者は、古典力学および量子力学の基本方程式であるリウビル＝フォン・ノイマン方程式に対する複素固有値解析の理論を Prigogine 教授との共同研究で開発して来た。この理論によると、基本方程式はその形を変えずに、複素固有値の虚数部分を通して散逸的特徴を獲得する。したがって不可逆性は、我々の処理能力とは無関係な、力学に付随した現象であると結論することができる。

ハミルトニアン系を考えた場合、リウビル＝フォン・ノイマン演算子（単にリウビリアンとも言う）は古典系ではハミルトニアンとのポアソン・ブラケットとして、また、量子系ではハミルトニアンとの交換関係として定義される。この演算子是对称演算子であり、ヒルベルト空間内の分布関数や密度行列に作用する限り、その固有値は実数である。そして、それが実数であることから、力学では時間の対称性が破れないという主張が出て来る。したがって、もしリウビリアンが複素固有値を持つことができたなら、時間の対称性が破れることが有り得るわけである。その場合、もちろん系の運動は非ヒルベルト空間の要素によって記述されることになる。

このレビューは2つに大別できる部分から構成されている。1つは熱力学的極限での古典リウビリアンの複素固有値問題の一般的定式化と、もう1つはその応用である。

本論でこの一般的定式化を論じる準備として、ここで良く知られた量子力学でのハミルトニアンの複素固有値問題に触れておく。この場合、複素固有値を持ったハミルトニアンの固有状態は共鳴状態とよばれている。共鳴状態の例として、例えば粒子の励起状態が光を自発的に放出することによって、その基底状態に遷移するボーアの原子模型の現象をハ

ミルトニアンによる力学過程として理解するために考案された Friedrichs モデルを考える [5, 6]。励起原子は我々の未来に向かって基底状態に自発崩壊をするので、原子は時間の向きを知っているようである。Friedrichs モデルのハミルトニアンは $H = H_0 + \lambda V$ のように、相互作用をしていない 2 レベル原子の状態と 1 光子状態の和からなる無摂動ハミルトニアン H_0 と、光子を 1 つだけ出して励起原子が基底状態に移るか、その反対に光子を 1 つだけ吸収して基底状態から励起状態に遷移する過程だけが許されている相互作用 λV からなっている。ここで λ はその相互作用の大きさを表すパラメーターである。このように簡単な過程に限ることによって、このモデルのハミルトニアンは厳密に対角化できるようになっている [5, 6]。このモデルから得られた結果は、本論で詳しく論じる不可逆性の力学的根拠を理解する論理的な枠組みについて基本的な雛形を与えてくれているので、少々長い復習になるが、その結果をここでまとめておこう：

自発遷移が起こるこの系では、光の状態が連続スペクトルを持っていることが本質的である。その結果、系のハミルトニアン H のリゾルベント演算子 $1/(z - H)$ は z の実軸上でカットを持った、 z に関する多価関数となっている。そして、相互作用の形を適当に選ぶと、 z をその複素平面の上半面から実軸上のカットを通して下半面に解析接続したリーマン面上に 1 位の極を持つことを示すことが出来る。この極の位置の虚数部分が、励起状態の減衰比を与える。

一方、もしリゾルベント演算子の極が実軸上にあるような場合には、そのリゾルベント演算子を任意の状態に作用したのものについてその極での留数を取ると、それが、極の位置の値を固有値として持ったハミルトニアンの固有状態になっていることを簡単な計算で示すことが出来る (例えば [7] 参照)。

そこで実固有値に関して良く知られたこの定理を複素平面上の極に対しても拡張して適用しその留数を取ると、その状態がちょうどその極を固有値に持った固有状態になっている。これが上に述べた共鳴状態である。この場合、ハミルトニアンの固有値が複素数となっているために、同じ固有値に属する左固有関数は、右固有値のエルミート共役にはなっていない。物理系のハミルトニアンは対称演算子であるために、ヒルベルト空間では複素固有値を持つことが出来ないのも、この右固有関数と左固有関数で双対をなす共鳴状態はもちろんヒルベルト空間の要素ではない。しかし、共鳴状態を要素に含むように拡張した関数空間で双直交、双完備な固有関数の組を作り出すことができる。そして、この拡張された関数空間の中で時間の対称性が破れているのである [6, 8]。

上では z の解析接続をその上半面からはじめたが、これと同じ議論が、 z の下半面から上半面に解析接続した場合にも成り立つ。ただし、その場合、ハミルトニアンがヒルベルト空間では対称演算子であったことの帰結として、上半面の複素固有値は必ず下半面の複素固有値の複素共役になっている。自発遷移は我々の未来に向かって起こるので、この過程を記述するには、 z の上半面から解析接続されて得られる双直交、双完備な組を使って論じなくてはならない。以上が、Friedrichs モデルを使って得られた厳密な結果である

[6, 8].

ここで重要なことは、自発遷移の散逸過程を特徴づける減衰比が、近似の結果出て来たものではなくて、ハミルトニアン系の持っている厳密な性質であるということである。この場合、この現象を記述するのに、シュレーディンガー方程式を書き換える必要はない。ただし、減衰比をハミルトニアンのスペクトルの性質の一部として取り入れるためには、ハミルトニアンの作用する関数空間を拡張する必要があるためである。

上の議論は、量子力学系のハミルトニアンに関するものであったが、これと同様な議論が古典系の分布関数の時間発展の生成演算子としてのリウビル演算子や、量子系の密度行列の時間発展の生成演算子としてのフォン・ノイマン演算子に付いても拡張できることを示すのが、このレビューで論じる中心テーマの一つである。

しかし、量子力学ではすでにハミルトニアンに関する複素スペクトル表示が知られているのに、何を今更フォン・ノイマン演算子についても論じなくてはならないのかという疑問が出てくるかもしれない。実はこれから説明するように、連続スペクトルを持った系では、この拡張は自明なものではなく、ハミルトニアンの複素固有値問題とリウビリヤンの複素固有値問題の間には本質的な違いがある。

例えば、上の例のように量子系のハミルトニアンが $H = H_0 + \lambda V$ で与えられている場合を考えよう。 $H_0|\alpha\rangle = \omega_\alpha|\alpha\rangle$ として H_0 の任意の固有状態で作られるダイアド $|\alpha\rangle\langle\alpha|$ は全て無摂動系のリウビリヤンのゼロ固有値に属し、無摂動系の運動の恒量となっている。したがって、 H_0 が連続固有値を持っているときは、無摂動系のリウビリヤンは無限に縮退している。これは無摂動系のハミルトニアンに縮退がない場合でも起こっており、リウビリヤンに本質的で固有な性質である。この無限の縮退は、無摂動リウビリヤンのゼロでない任意の固有値に対しても存在している。同様なことは、量子系ばかりでなく古典系でも起こり、その場合自由粒子系では任意の形をした運動量分布関数が運動の恒量になっている。したがって、リウビリヤンのゼロ固有値に属した固有関数は、やはり無限に縮退している。

その結果、この無摂動系に相互作用の摂動を入れたときに、その縮退を解く過程で、ハミルトニアンには起こりえなかった新しい性質が出て来る場合がある。例えばハミルトニアンの共鳴状態を計算するためには、そのリゾルベント演算子の複素平面上での極の位置を計算しなくてはならないが、良く知られているように、その過程でハミルトニアンの自己エネルギー部分を計算する必要がある。ハミルトニアンに縮退がない場合、この自己エネルギー部分は単なる c 数になっている。ところが、本論でも見るように、リウビリヤンではこの無限縮退のために、「自己エネルギー」に対応した部分が演算子になっている。筆者にとってさらに驚きだったのは、この演算子が非平衡統計力学で良く知られている一般化されたマスター方程式の衝突演算子（もっと正確には、そのラプラス変換）そのものであることであった。したがってハミルトニアンとは違って、リウビリヤンの複素固有値を計算するためには、その衝突演算子の固有値問題を解かなくてはならない。気体分

子運動論で良く知られているように、衝突演算子の固有値は一般に複素数であり、その虚数部分が拡散係数などの輸送係数を与えている。そして、例えば、古典拡散現象やそれに対応した量子拡散現象での拡散係数などの概念は、一つの軌跡や波動関数に帰着できない概念であり、したがって古典のハミルトン運動方程式や量子論のハミルトニアン複素固有値問題には帰着できない概念である。

このようにリウビリアンの固有値問題はハミルトニアンの固有値問題に比べて桁違いに複雑であり、それを計算しなくてはならない我々にとっては大変厄介な問題である。しかし逆にこの複雑性が、多自由度を持った非可積分な物理系の振る舞いのあり方を大変豊かなものにしており、我々の埋め込まれたこの宇宙の多様性を保証してくれているのである。

このレビューでは第2節から4節にかけて、通常の輸送係数が存在すると期待される系に対して古典リウビリアンの複素固有値問題の一般論を紹介する。非常に一般的に、そのような系は(2.3)で定義される「熱力学的極限」で示量変数や示強変数が存在している系である。その場合、本論で詳しく示すように位相空間内で見いだされる系の確率分布関数は、位置変数に共役な波数ベクトルに関して「デルタ関数特異性」をもっている。この特異性のために、分布関数はヒルベルト空間の要素になることができず、したがって、リウビル方程式をヒルベルト空間よりもっと拡張された関数空間で解かなくてはならないことになる。上でも触れたように、このように拡張された空間では、リウビル方程式を何ら書き換えることなく、時間の対称性を破ることができるようになる。

この一般論の応用例として、我々は第5節以降で、一般的な d 次元空間の内部で衝突し合っている剛体球からなる古典的気体系の熱平衡状態への緩和現象を分析する。応用例を提示するときには、先ず簡単な例から始めて、順次複雑な問題に進む方法もあるが、ここではいきなり高度な応用例を提示することにする。その理由は、一つには誌面の制限にもあるが、もっと大事な理由としては、不可逆性を力学の本質的な性質の一つとしてとらえた我々の立場によって、今まで解けなかった問題がどのように解決できるようになったかを示したかったからである。

実際、比較的濃密度な系に対する気体分子運動論では、過去の努力によって多くの興味ある結果が得られてはいるものの [9]–[25]、今なお多大な困難に直面している。その主な困難は、たとえば拡散方程式のような巨視的な輸送方程式がマルコフ方程式であり、その時間変化が系の瞬間的な状態で決まってしまうところにある。このことは力学の第一原理から導かれた微視的な方程式とは著しい対照をなしている。事実 Prigogine と Résibois [26] によってリウビル方程式から近似なしで導かれた良く知られた一般化されたマスター方程式は次のような形をしている：

$$i \frac{\partial}{\partial t} P^{(0)} \rho(t) = \int_0^t dt' \tilde{\psi}^{(0)}(t-t') P^{(0)} \rho(t') + \tilde{D}^{(0)}(t) \rho(0) \quad (1.1)$$

ここで、 $P^{(0)}$ は分布関数 $\rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$ に作用して速度にのみ依存する関数を

抜き出す射影演算子である。この式は弱く結合した系や低密度に対してのみ正しく成り立つボルツマン方程式の近似の適応範囲を越えた領域では記憶効果が重要になり、非マルコフ的振る舞いが問題になることを示している。そして、そのような物理的状況で平衡状態に近づく際には、ゆっくりしたベキ型の減衰過程が存在することは良く知られており、その減衰項がいろいろな困難をもたらすのである。輸送係数を導出するために、この方程式をマルコフ化する多くの試みがなされて来たが、困難は取り除けずにいる（例えば [19, 20] 参照）。第7節で示すように、マルコフ近似された方程式は2次元系の気体では発散してしまうのである。しかしながら、輸送理論が2次元系で成り立たないと信じるのは困難である。

リウビル演算子の複素スペクトル表示に基づいて Prigogine と筆者によって導入された方法によると、これらの困難を回避できる。かいつまんで言うと、我々は熱力学的極限を表す状態として、ヒルベルト空間に属さない関数 ρ のクラス（それには一般化された関数空間、あるいは超関数が含まれる）を考える。そして、その拡張された関数空間に対してリウビル演算子 $L = L_0 + \lambda L'$ （ここで、 L_0 は自由粒子に対応し、 $\lambda L'$ は粒子間相互作用に対応する）に対して固有値問題を解く。その解を使うと、その拡張された関数空間で直交完備性を持つ $P^{(\nu)}$ と $\Pi^{(\nu)}$ という2つの異なった射影演算子：

$$\sum_{\nu} P^{(\nu)} = 1, \quad \sum_{\nu} \Pi^{(\nu)} = 1 \quad (1.2)$$

を導入することができる。ここで、 $P^{(\nu)}$ は L_0 と交換し、 $\Pi^{(\nu)}$ は L と交換する演算子である。また、 ν は「相関の度数」(the degree of correlations) と呼ばれる数であり、大雑把に言うと分布関数 ρ の座標に関する各フーリエ成分の中のゼロでない独立な波数ベクトルの数である。もっと詳しくは第3節で定義される。我々の理論の最も重要な点は各 $P^{(\nu)} \Pi^{(\nu)} \rho$ 成分がそれ自身で閉じたマルコフ方程式にしたがうことを示したことにある [(4.21) 参照]。

このマルコフ方程式による記述では $P^{(\nu)}$ と $\Pi^{(\nu)}$ の両成分が同時に現れている。そしてそれは「衣を着た」あるいは「再規格化された」分布関数に対する記述である。例えば、通常の1粒子分布関数は

$$\phi(\mathbf{v}_1, t) = \int d\mathbf{v}_2 \cdots \int d\mathbf{v}_N P^{(0)} \rho(t) = \int d\mathbf{v}_2 \cdots \int d\mathbf{v}_N \phi_N(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N, t) \quad (1.3)$$

で与えられている。それに対して、 $P^{(0)} \Pi^{(0)} \rho$ では相互作用の効果が取り入れられ、衣を着た速度分布関数は

$$\phi^{(0)}(\mathbf{v}_1, t) = \int d\mathbf{v}_2 \cdots \int d\mathbf{v}_N P^{(0)} \Pi^{(0)} \rho(t) \quad (1.4)$$

で定義される。これは媒質のなかの他の粒子との相互作用に依存した汎関数であり、別の言葉で言うとこれは「集団モード」を表している。この衣を着た効果は非平衡効果であり、熱平衡状態では衣を着た効果は消えてしまう：すなわち、規格化されたマックスウェル分布関数 $\varphi_{eq}(v_1)$ を使って $\varphi_{eq}^{(0)}(\mathbf{v}_1) = \varphi_{eq}(v_1)$ となっている。

元の速度分布関数が非マルコフ方程式 (1.1) に従うことを考えると、衣を着た分布関数に対するこの結果は興味がある。弱い結合系でのいわゆる $\lambda^2 t$ 近似で得られる例のように、通常の分布関数に対する良く知られたマルコフ方程式は、平均自由行程時間程度の有限の時間間隔の間だけで良い近似になっている [27]。それに比べて短時間と長時間では、マルコフ近似で無視された記憶効果が重要になって来る。したがって通常の分布関数はマルコフ的な輸送方程式を満たさない。それとは対照的に、 $\varphi^{(0)}(\mathbf{v}_1, t)$ のような衣を着た分布関数は全ての時間でマルコフ方程式に従う。それゆえ我々の衣を着た分布関数を使えば輸送係数が定義できることになる。この方向に沿った考えはすでに Theodosopulu と Grecos [28] によって試みられている。彼らは3次元流体の分子運動論を使って線形化された流体力学方程式を導き出した。そして、線形流体力学がこの非平衡集団モードに対してのみ存在することを示した。

この論文では、同一の剛体粒子の集団からなる古典気体が d 次元空間内 ($d \geq 2$) を運動している比較的濃密度な気体系について考察する。その系の数密度は n で与えられているものとする。そして、線形化された運動論的な方程式が正しいものと予想されるような、平衡状態に近い系に対してリウビリアンに対する我々の複素スペクトル表示を適用する。

ところで、比較的濃密度な気体の輸送現象を記述するに際して密度展開の高次の寄与を考慮に入れた場合に、2次元系では通常理論でマルコフ化された分子運動論的方程式の衝突項が発散することが知られている [20]。これは、流体力学的極限での赤外発散に起因している。流体力学方程式等の現象論的不可逆方程式に現れる摩擦係数や拡散係数や粘性係数等々の輸送係数の概念は、このマルコフ化された方程式に付随した概念である。しかしながら上でも述べたように、これら輸送係数が2次元系で存在していないとは考えられない。この論文で示される重要な結論の一つは、複素固有値解析を通して得られる非平衡繰り込みの概念を使って得られた衣を着た分布関数に対して、マルコフ方程式が全ての次元で存在することを示したことである。したがって、通常の分布関数を使ってはそれが不可能な $d=2$ の場合でも、輸送係数を定義することができる (第7節を見よ)。それゆえ、ボルツマン近似から比較的濃密度流体への移行に対して、根本的な変革が要求されたわけである。すなわち、輸送係数は通常の分布関数に付随した概念ではなくて、非平衡集団モードに付随した概念と成っているのである。

しかしながら、我々が自然界を観測する場合、通常の分布関数に渡っての物理量の平均値を通してそれを観測しているのも事実である。したがって、通常の分布関数の時間発展を追うことも重要である。その場合、我々の複素スペクトル表示によると、(1.1) における分布関数の非マルコフ的發展は次式で表現されているように、集団モードに対するマルコフ的發展の重ね合わせで記述できる：

$$\phi(\mathbf{v}_1, t) = \sum_{\nu} \int d\mathbf{v}_2 \cdots \int d\mathbf{v}_N P^{(0)} \Pi^{(\nu)} \rho(t) \quad (1.5)$$

このことは、いわゆるグリーン=久保の定式化とよばれる、線形応答理論での自己相関

関数を計算する際にも同様である。([19]と[20]はこの問題の優れた、そして今なお斬新な解説である。また[22]-[25]も参照。)ここで論じる2つ目の応用例として、線形応答理論で良く知られている、2次元系の比較的濃密度系での拡散係数に対するグリーン=久保公式の赤外発散の問題についても論じる。この発散は速度自己相関関数の長時間テールの効果から出て来る。そこで、この論文では、次式で定義される無次元に規格化された速度自己相関関数の時間発展を考える：

$$\Gamma(t) = \frac{\langle v_{1,x}(0)v_{1,x}(t) \rangle^{\text{eq}}}{\langle v_{1,x}(0)^2 \rangle^{\text{eq}}} = \int d\mathbf{v}_1 v_{1,x} \delta\varphi(\mathbf{v}_1; t) \quad (1.6)$$

ここで、 $\langle A \rangle^{\text{eq}} = \int d\mathbf{v}^N d\mathbf{r}^N A \rho_N^{\text{eq}}$ であり、 ρ_N^{eq} は N 粒子正準平衡分布関数であり、 $\delta\varphi(\mathbf{v}_1; t)$ は次式で定義される1粒子既約関数である：

$$\delta\varphi(\mathbf{v}_1; t) \equiv \beta m \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \int d\mathbf{r}^N e^{-iLt} v_{1,x} \rho_N^{\text{eq}} \quad (1.7)$$

また、 $\beta = 1/k_B T$ であり、 m は粒子の質量である。

通常の理論では、この発散の存在を示すために、2つのアプローチがある。その一つは、現象論的な流体力学方程式から出発する半微視的なアプローチである[19]。もう一つは、運動論的方程式から出発する微視的なアプローチである[20]。共に、この発散が、2体空間相関の長時間テールのベキ減衰が遅すぎることからくることを示している点で一致している。

この微視的理論では、ボルツマン方程式の衝突演算子 ありき として、その固有値問題の解の知識を使って分析している（このことは以下の本論でも詳しく論じるが、文献[20]も参照のこと）。この分析によると、2体散乱の効果のみを取り入れたボルツマン近似では自己相関関数は指数則にしたがって緩和時間程度で減衰することが示せる。さらに、多体散乱の効果を取り入れた場合、流体力学的モード間の2モード結合の中でのリング過程とよばれる衝突過程を通して、自己相関関数に対して $t^{-d/2}$ の形のベキ則減衰（いわゆる長時間テール）が導きだされることが良く知られている[20]。 $d=3$ の場合、このベキ則減衰の結果は次式で定義されるグリーン=久保の「拡散係数」

$$D_{GK} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{m\beta} \int_0^t d\tau \Gamma(\tau) \quad (1.8)$$

に対して有限な寄与を与える。ところが $d=2$ の場合、この積分は $\ln t \rightarrow \infty$ に比例して発散してしまう。

しかしながら、上で述べたように通常取り扱いでは、ボルツマン方程式に対する密度展開の補正項を取り入れた場合、2次元系のマルコフ化された運動論的方程式は存在していないことになっている。したがって、ありもしない 衝突演算子に対する近似衝突演算子の固有値問題を使ってグリーン=久保公式の発散を示すことになってしまい、この取扱いは自己矛盾に陥っている。

ここで論じるように、複素固有値解析に基づいた我々の取り扱いでもやはり、グリーン=久保公式は発散している。しかし、我々が示す取り扱いでは、上に述べたように衣を着た分布関数に対しては密度展開に対する補正項を取り入れても、その運動論的方程式が存在しているので、この発散に起因した線形応答理論の限界を矛盾なく論じることが出来るようになっていく。

長い間 $d \geq 2$ に対する $\Gamma(t)$ の寄与では 2 体相関から来る 2 体モード結合が一番遅い減衰過程を導き出すという主張が受け入れられて来た。また「臨界次元」は $d = 2$ であるとの主張が受け入れられて来た [13]–[15], [20]。ここで臨界次元とは、その次元より小さい次元では高次のモードからの寄与が低次のものよりゆっくり減衰し、その次元より大きな次元では早く減衰する境目の次元である。流体力学に基づく現象論的な議論もこの結果を援護して来た [19]。我々は、微視的理論における運動論的方程式を使った取り扱いでも、もし衝突の中間状態の現象を流体力学的モードに限って計算するならば、この主張が正しいものであることを示すであろう。

しかしこの論文ではそれに加えて非流体力学的モードまで考慮に入れると、高次の相関のなかに 2 体相関からの寄与よりも遅く減衰する寄与があることも示す。実際、比較的濃密度な気体系では長時間テールに対する大きさの程度が

$$\bar{\Gamma}(t) \sim \sum_{\nu=2}^{\infty} \bar{\Gamma}^{(\nu)}(t) \quad (1.9)$$

で与えられることを示す。ここで $\bar{\Gamma}^{(\nu)}(t)$ は各 $\Gamma^{(\nu)}(t)$ の中の寄与で一番遅く減衰する寄与を表しており、

$$\bar{\Gamma}^{(\nu)}(t) \sim g^{3\nu-4} \tau^{2(\nu-2)} \tau^{-d(\nu-1)/2} \quad (1.10)$$

で与えられる [46]。ただし、 $\tau \equiv t/t_r$ は緩和時間 $t_r \equiv \gamma^{-1} = [k_0 \langle v \rangle]^{-1}$ を単位にした無次元時間であり、

$$g \equiv n_0^{d-1} = k_0^d/n, \quad n_0 \equiv a_0^d n \quad (1.11)$$

である。また $k_0 = l_m^{-1} = a_0^{d-1} n$ は平均自由行程の逆数であり、 a_0 は剛体球の直径であり、さらに $\langle v \rangle = (m\beta)^{-1/2}$ は熱速度である。

この結果によると、実際の臨界次元は $d = 4$ である。そして、グリーン=久保の拡散係数 D_{GK} が $d = 3$ でも発散してしまうことを示している。このことは、衣を着た分布関数に対するマルコフ的運動論的方程式から定義される拡散係数が発散しないという事実と著しい対照をなしている。またこの結論は、臨界次元が $d = 2$ であるという伝統的な見解と抵触するので、長時間テールについて第 9 節以降で詳しく論じることにする。

「おわりに」の節で、ここで論じられた問題と結果をまとめるが、それに加えて、筆者が長年携わって来た時間の対称性の破れの問題に関してしばしば出されて来た質問に対する、筆者の意見ないし回答を列挙する。読者等の思索の糧になることが出来れば幸いである。

2 分布関数の体積依存性とデルタ関数特異性

この章では熱力学的極限で分布関数をもつ重要な性質について論じる。文献 [1] も参照されたい。位置と速度の位相空間での N 粒子分布関数 $\rho(x^N, t)$ に対するリウビル方程式は

$$i \frac{\partial \rho}{\partial t} = L \rho \quad (2.1)$$

で与えられる。ここで、 $x^N = (\mathbf{v}^N, \mathbf{r}^N)$ 、 $\mathbf{r}^N = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ であり、 $\mathbf{r} = (r_x, r_y, \dots)$ は d 次元内の位置ベクトルである。分布関数は

$$\int dx^N \rho(x^N) = 1 \quad (2.2)$$

のように規格化されているものとする。

我々の理論では「熱力学的極限」、すなわち、系を閉じ込めている一辺の長さが L_B の立方体の箱の体積を $V = L_B^d$ として、

$$N \rightarrow \infty, \quad V \rightarrow \infty \quad \text{with } n = \frac{N}{V} \text{ finite} \quad (2.3)$$

という極限で示量変数や示強変数が存在するような系を取り扱う。そのような系を記述する確率集団（アンサンブル）の分布関数は熱力学的極限ではヒルベルト・ノルムを持たず、したがってヒルベルト空間に属さない。このことは例えば、以下で見るように、理想気体の正準分布関数に対して、そのノルムが熱力学的極限でゼロとなっていることから判る。

それを見るために、 $\mathbf{p}_a = m\mathbf{v}_a$ に対して、 $d\mu_a \equiv d\mathbf{p}_a d\mathbf{x}_a / \hbar^3$ のように無次元化された位相空間体積要素を使って

$$\int d\mu_1 \cdots d\mu_N \hat{\rho}_{eq} = 1 \quad (2.4)$$

と規格された 3 次元系の理想気体の正準分布関数 $\hat{\rho}_{eq} \equiv \exp[-\beta \sum_{a=1}^N p_a^2 / 2m] / Z_0$ を考えよう。その分配関数の具体的な値 [29]、

$$Z_0 \equiv \int d\mu_1 \cdots d\mu_N e^{-\beta \sum_a p_a^2 / 2m} = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{2\pi m}{\hbar^2 \beta} \right)^{3N/2} \quad (2.5)$$

を使い、それに $V = N/n$ を代入すると、熱力学的極限でこの分布関数の無次元化されたヒルベルト・ノルムの 2 乗が、

$$\|\hat{\rho}_{eq}\|_0^2 \equiv \int d\mu_1 \cdots d\mu_N |\hat{\rho}_{eq}|^2 \sim \left(\frac{c_0}{e} \right)^N \quad (2.6)$$

となることが簡単な計算で判る。ただし、ここで分布関数に「ハット」記号を添えたのは、(2.2) とは違った無次元体積要素で規格化された理想気体の分布関数であることを強調

するためであり、さらに、ヒルベルト・ノルムの添字0もそれが以下の議論で使われるのとは違った、無次元ノルムであることを強調するために付けておいた。ここで、

$$c_0 \equiv \left(\frac{\hbar}{2\sqrt{\pi}m\langle v \rangle} \right)^3 n \quad (2.7)$$

は N に依らない無次元量である。常温の空気の場合の値、 $\langle v \rangle \sim 500\text{m/s}$ 、 $n \sim 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 等を使うと、 $c_0 \sim 10^{-10}$ と評価され、この量は1に比べて大変小さい値である。したがって、(2.6)で計算されるヒルベルト・ノルムは熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ でゼロになっている。

さらにまた、これから説明するように、輸送係数等が存在する非平衡統計力学で取り扱うような分布関数は、熱力学的極限で波数ベクトルに関して「デルタ関数特異性」を持つという、著しい特徴を持った関数のクラスに限られる。したがって、その理由によっても、これらの系の運動をヒルベルト空間内で記述することができなくなっている。

しかし、そのために、ヒルベルト空間内では対称演算子であったリウビル演算子が、この拡張した関数のクラスに対して数学的に矛盾することなく複素固有値を持つことが可能となり、その虚数部分が時間の対称性を破ることが出来るようになる。慣れていない読者には以下の議論は込み入ったものになっているが、このデルタ関数特異性は不可逆性の力学的根拠を理解する上での重要な点の一つになっているので、少々面倒でも読みこなさなければならない部分である。

さて、このデルタ関数特異性を理解するために、まず始めに以下のハミルトニアンで記述される2体の短距離力で相互作用している N 粒子系を考えよう：

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \lambda V \\ &= \sum_{a=1}^N \frac{mv_a^2}{2} + \lambda \sum_{b(>a)}^N \sum_{a=1}^N V(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|) \end{aligned} \quad (2.8)$$

ここで、 λ は相互作用のオーダーを表すために導入された無次元量である。相互作用は $r = |\mathbf{r}|$ として、

$$V(r) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.9)$$

のようにフーリエ展開可能であると仮定する。 $\Omega \equiv V/(2\pi)^d$ は体積要素を表し、また、体積無限大で $V_{\mathbf{k}}$ は体積に依存しないものとする。相互作用のこの体積依存性は、体積無限大の極限で短距離力に対する相互作用が存在するとの仮定から出てくる。また、ここでは通常の周期的境界条件を仮定する。そこで波数ベクトル \mathbf{k} は d 次元整数ベクトル \mathbf{n} を使って $\mathbf{k} = \mathbf{n}\Delta\mathbf{k}$ と表される。ここで $\Delta\mathbf{k} \equiv 2\pi/L_B$ は波数ベクトルの不連続性の大きさである。また便宜上、整数ベクトルに関する和を表す代わりに、それを波数ベクトルに関する和で表した。また、ハミルトン形式では、速度変数ではなくて運動量変数を使うのが本筋であるが、以下で見るように剛体球を扱う場合には、速度変数で表示した方が簡単な表

現が得られる場合もある。そこで、この論文では速度変数を使って統一することにする。その場合、この論文でのように分布関数が速度変数で規格化されているのか、あるいは、他の文献でのように運動量変数で規格化されているのかについて混乱しないように注意が必要である。

当然のことながら、このハミルトニアン H の運動エネルギーを表す項は粒子の位置に依存しない。言い換えると、この部分は粒子の位置 r を無限大にしてもゼロとはならない「非局所的」な関数である。そこで、この部分を強引に波数ベクトルに関するフーリエ展開のなかに括り込んで表現してみると、

$$H = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a=1}^N \left[\frac{mv_a^2}{2} \delta_{\Omega}(\mathbf{k}) + \lambda \sum_{b(>a)}^N V_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_b} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a} \quad (2.10)$$

が得られる。ここで、 $\delta^{kr}(\mathbf{k}) \equiv \delta_{\mathbf{k},0}$ を d 次元のクロネッカー・デルタとして、 $\delta_{\Omega}(\mathbf{k}) \equiv \Omega \delta^{kr}(\mathbf{k})$ であり、整数ベクトルに関するクロネッカー・デルタを表す代わりに、それを波数ベクトルに関するクロネッカー・デルタで表した。良く知られているように、体積無限大の極限 $\Omega \rightarrow \infty$ で

$$\Omega^{-1} \sum_{\mathbf{k}_a} \rightarrow \int d\mathbf{k}_a, \quad \delta_{\Omega}(\mathbf{k}_a) \rightarrow \delta(\mathbf{k}_a) \quad (2.11)$$

となる。したがって、このハミルトニアン H の非局所的な部分は体積無限大の極限で波数ベクトル $\mathbf{k} = 0$ の部分でデルタ関数特異性を持っている。

もう一つ重要なことは、短距離力を仮定したので、(2.8)の相互作用が N^2 に比例した数の項から構成されているにもかかわらず、もし、粒子の空間的分布が均一分布から余り極端にずれていない限り、その相互作用部分からくる全位置エネルギーが N に比例して大きくなれることである。したがって、熱力学的極限では系の全エネルギーは示量変数となり、また、その量を系の自由度の数で割った、一自由度あたりの示強変数 ϵ がその極限で存在している。このような示強変数は、例えば、銀河系のように長距離力で相互作用している場合には存在しない。また、数がいくら多くても、衝突前と衝突後がはっきり定義できるような多体散乱系では N/V が $V \rightarrow \infty$ でゼロになってしまうので、やはり示強変数は存在しない。我々がこれから論じようとしている、熱力学的な意味で不可逆な系では、このような例は除外されている。ただし、同じ長距離力でも、プラズマのように反対の電荷で電気力が遮蔽されて、効果的には短距離力として取り扱うことが出来る場合は、以下に与える定式を使うことが出来る。

熱力学的に興味のある系では、熱平衡状態を表す正準分布関数 $\rho_{\text{eq}} = \exp[-\beta H]/Z$ が重要になる、ここで Z は分配関数である。式(2.10)に現れるハミルトニアン H の中のデルタ関数特異性はこの正準分布関数の波数ベクトルによるフーリエ展開に対して、大変複雑なデルタ関数特異性を持ち来たらす。これをあからさまに見るために、 $\exp[-\beta H]$ のしたが

う良く知られた積分方程式、

$$e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} - \lambda \int_0^\beta d\beta' e^{-(\beta-\beta')H_0} V e^{-\beta' H} \quad (2.12)$$

をそれ自身の右辺に逐次代入して得られる λ による展開式に、上の相互作用に対するフーリエ展開式を代入してみる。その結果、以下のような展開式が得られる [27] :

$$\begin{aligned} \rho(x^N) = & \frac{1}{V^N} \left[\rho_0(\mathbf{v}^N) + \frac{1}{\Omega} \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a}' e^{i\mathbf{k}_a \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \rho_{\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a}(\mathbf{v}^N) \right. \\ & + \frac{1}{\Omega^2} \sum_{c>b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b - i(\mathbf{k}_a + \mathbf{k}_b) \cdot \mathbf{r}_c} \rho_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b, -\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b}(\mathbf{v}^N) + \dots \\ & \left. + \frac{1}{\Omega} \sum_a^N \sum_{\mathbf{k}_a}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a} \rho_{\mathbf{k}_a}(\mathbf{v}^N) + \frac{1}{\Omega^2} \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b} \rho_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}(\mathbf{v}^N) + \dots \right] \quad (2.13) \end{aligned}$$

ここで第1項は全ての粒子に付随した波数ベクトルがゼロであり、したがって粒子の位置によらない速度分布関数であり、第2項は粒子 a がゼロでない波数ベクトル \mathbf{k}_a を持ち、粒子 b が波数ベクトル $\mathbf{k}_b = -\mathbf{k}_a$ を持つ以外、全ての残りの粒子の波数ベクトルがゼロであり、第3項は、粒子 a がゼロでない波数ベクトル \mathbf{k}_a を持ち、粒子 b がゼロでない波数ベクトル \mathbf{k}_b を持ち、粒子 c が波数ベクトル $\mathbf{k}_c = -\mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b$ を持つ以外、全ての残りの粒子の波数ベクトルがゼロであり、等々。これら、波数ベクトルの和記号に1重ダッシュを付けた成分では、各粒子の波数ベクトルを足しあげたものがゼロになっており、したがって、全ての粒子の位置に対して並進対称性が成り立っている（すなわち、位置に関して均質な）部分からの寄与である。例えば、熱平衡状態ではこのような成分のみからなっている。また、上の正準分布関数の場合には、第4項以下の波数ベクトルの和記号に2重ダッシュを付けた成分は熱平衡系では存在しないが、後の便宜のためにそれらの項も書いて置いた。また、波数ベクトルの和記号の上に付けた1重ダッシュと2重ダッシュは2度足ししないように波数ベクトルがゼロの部分を除いて和を取ることを意味している。さらにまた2重ダッシュは、各粒子の波数ベクトルを足しあげたものがゼロになる部分を除いて和を取ることをも意味している。

この展開式は一見複雑に見えるが、デルタ関数特異性に関する一番重要な構造に関しては至って簡単である。それは分布関数の各フーリエ成分の中の独立な波数ベクトルの数を ν としたとき、そのフーリエ成分の大きさが共通な因子 $1/V^N$ を除いて、 $1/\Omega^\nu$ に比例していることである。したがって、ゼロでない独立な波数ベクトルの数が1つ少ない項からの寄与が、それより1つ多い項からの寄与と比べて、ちょうど Ω 倍大きくなっており、(2.11) で見るように、熱力学的極限を取ったとき各成分が波数ベクトルに関してデルタ関数特異性を持っていることを表している。

文献 [27] に詳しく示されているように、系が全粒子の位置に関する並進対称性をもっている均質な場合には、波数ベクトルの和記号に1重ダッシュのついた均質成分のフーリエ

成分で ν 個の独立な波数ベクトルを持った成分は、 ν 体位置相関関数のフーリエ成分そのものである。したがって、熱力学的極限で上のようなデルタ関数特異性を持つということは、その極限での系の運動を論じるのに、速度分布関数（相関の真空）、2 体位置相関関数、3 体位置相関関数、等々と、逐一相関の程度を挙げて行く記述法に意味がある系を取り扱うということである。言い換えると、熱力学的極限で示強変数が存在している系である。そして、上の展開式 (2.13) は相関の程度に基づいた展開をしたことになっている。この場合、位置と速度のデルタ関数で表される位相空間内の軌跡に対する分布関数の全てのフーリエ成分が同じ体積依存性を持っていることと比べると、著しく異なっている。

上の例では熱平衡系について論じたが、もっと一般に非平衡系を論じる場合には、分布関数の中に並進対称性の無い、非均質な分布関数まで含める必要がある。上の展開 (2.13) で 2 重ダッシュのついた成分を含めたのは、そのような非平衡系をも論じることが出来るようにするためである。この場合、2 重ダッシュのついた最初の項は 1 粒子分布関数の位置に関する非均質性を表す成分である。このように、これから論じる分布関数のクラスの中には、上で触れた熱平衡系ばかりでなく、もっと一般の非平衡分布関数も含める。その場合には、分布関数のフーリエ展開が上の展開 (2.13) で表されたのと同じ体積依存性を持った関数のクラスで、かつ、速度に依存する部分が、各粒子の運動エネルギーのみではなく、もっと一般の速度依存性を持った関数も許すことにする。この関数のクラスは、上のようにデルタ関数特異性を持ち、かつ、各フーリエ成分が共通の因子 $1/V^N$ を除いて 2 乗可積分な関数よりなっているという意味で、曖昧さなしに定義されている。この展開のもう一つの重要な性質は、(2.9) や後で定義される相互作用 (3.21) に対して、(2.13) の体積依存性がリウビル方程式にしたがう時間発展に対して不変に保たれていることである。

上で述べたように、波数ベクトルに関するデルタ関数特異性は、その分布関数が位置に関して非局所的な関数であることを表している。それ故、このクラスに属する分布関数で表される状況では「永続的」(persistent) な相互作用を取り扱う [1]。したがって、非平衡統計力学で対象となる系は、上で触れた散乱問題のように衝突前と衝突後が定義できる系ではない。この理論で対象としているのは、いつまでたっても相互作用をし続けている状態での系の振る舞いであり、言わば散乱途中の系の長時間的振る舞いである。その結果、長時間極限や体積無限大の極限の取り方が、散乱問題とは本質的に異なっており、その極限操作の違いが、時間の対称性の破れと言う散乱問題では存在しなかった数学的側面をもたらすのである [30]。

3 相関の射影演算子

リウビル方程式の形式解は

$$\rho(t) = e^{-iLt} \rho(0) \quad (3.1)$$

で与えられる。ここで考える系では、リウビリアン L は自由リウビリアン L_0 と相互作用部分 $\lambda L'$ すなわち

$$L = L_0 + \lambda L' = \sum_{a=1}^N L_0^{(a)} + \lambda \sum_{b>a=1}^N L'_{ab} \quad (3.2)$$

より構成されているものとする。ここで、 $L_0^{(a)} = -i\mathbf{v}_a \cdot (\partial/\partial \mathbf{r}_a)$ である。系の運動が上の例のように通常のハミルトニアンで記述される場合、リウビリアンはそのハミルトニアンのポアソン括弧式を使って、 $L\rho = i\{H, \rho\}$ で定義されるが、後で例示するような剛体球間の特異な相互作用を取り扱う場合には、相互作用部分は2体衝突演算子を使った「擬リウビリアン」形式 (Pseudo-Liouillian) で表される [式 (3.21) を見よ]。

ここで論じる古典力学系の場合にも、量子力学の場合と同様な Dirac の「ブラ・ケット」表示を使うと、 L_0 の固有状態は

$$L_0|\mathbf{k}^N, \mathbf{v}^N\rangle = (\mathbf{k}^N \cdot \mathbf{v}^N)|\mathbf{k}^N, \mathbf{v}^N\rangle \quad (3.3)$$

を満たす。ここで、 $(\mathbf{k}^N \cdot \mathbf{v}^N) \equiv \sum_{a=1}^N \mathbf{k}_a \cdot \mathbf{v}_a$ であり、また、 $|\mathbf{k}^N, \mathbf{v}^N\rangle \equiv |\mathbf{k}^N\rangle \otimes |\mathbf{v}^N\rangle$ 、かつ、 $|\mathbf{k}^N\rangle \equiv |\mathbf{k}_1\rangle \otimes |\mathbf{k}_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\mathbf{k}_N\rangle$ 等々である。それらは平面波であり、系を閉じ込めている箱の体積を有限として、

$$\langle \mathbf{r}^N, \mathbf{v}^N | \mathbf{k}^N, \mathbf{v}^N \rangle = V^{-N/2} \exp[i(\mathbf{k}^N \cdot \mathbf{r}^N)] \delta(\mathbf{v}^N - \mathbf{v}^N) \quad (3.4)$$

で表される。ここで、 d 次元のデルタ関数 $\delta(\mathbf{v})$ を使って、 $\delta(\mathbf{v}^N) \equiv \delta(\mathbf{v}_1) \cdots \delta(\mathbf{v}_N)$ である。

この表示では、任意の位相関数 f は $f(x^N) = \langle x^N | f \rangle$ で表され、二つの位相関数 f と g の間の内積は

$$\langle f | g \rangle = \int dx^N f^*(x^N) g(x^N) \quad (3.5)$$

で与えられる [47]。ここで「*」は複素共役を表す。この内積によって、いつものように演算子のエルミート共役やユニタリー性を定義することが出来る。この内積で定義されるヒルベルト・ノルムが有限な位相関数で張られる関数空間では、リウビリアンは対称演算子であることが示せる。またその関数空間で $L_0^{(a)}$ の固有関数は完全直交系を成す：

$$\sum_{\mathbf{k}_a} |\mathbf{k}_a\rangle \langle \mathbf{k}_a| = 1, \quad \int d\mathbf{v}_a |\mathbf{v}_a\rangle \langle \mathbf{v}_a| = 1, \quad (3.6a)$$

$$\langle \mathbf{k}_a | \mathbf{k}'_b \rangle = \delta_{a,b} \delta^{kr}(\mathbf{k}_a - \mathbf{k}'_b), \quad \langle \mathbf{v}_a | \mathbf{v}'_b \rangle = \delta_{a,b} \delta^{kr}(\mathbf{v}_a - \mathbf{v}'_b) \quad (3.6b)$$

ここで、 $\delta_{a,b}$ は通常のクロネッカー・デルタである。

以上の記法を使うと、粒子間の位置相関の程度による展開式 (2.13) を以下で定義する射影演算子を使ってすっきりした表現：

$$\begin{aligned} |\rho\rangle &= P^{(0)}|\rho\rangle + \sum_a \sum_{\mathbf{k}_a}'' P^{(\mathbf{k}_a)}(a)|\rho\rangle + \sum_{b>a} \sum_{\mathbf{k}_a} P^{(\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a)}(ab)|\rho\rangle \\ &+ \sum_{b>a} \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}'' P^{(\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b)}(ab)|\rho\rangle + \cdots \end{aligned} \quad (3.7)$$

で表される。ここで、

$$\begin{aligned}\langle x^N | P^{(0)} | \rho \rangle &= V^{-N} \rho_0(\mathbf{v}^N) \\ \langle x^N | P^{(\mathbf{k}_a)}(a) | \rho \rangle &= V^{-N} \Omega^{-1} e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a} \rho_{\mathbf{k}_a}(\mathbf{v}^N) \\ \langle x^N | P^{(\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a)}(ab) | \rho \rangle &= V^{-N} \Omega^{-1} e^{i\mathbf{k}_a \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \rho_{\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a}(\mathbf{v}^N), \quad \dots\end{aligned}\quad (3.8)$$

であり、また、射影演算子は

$$\begin{aligned}P^{(0)} &= \int d\mathbf{v}^N |0, \mathbf{v}^N\rangle \langle 0, \mathbf{v}^N| \\ P^{(\mathbf{k})}(a) &= \int d\mathbf{v}^N |a_{\mathbf{k}}, \mathbf{v}^N\rangle \langle a_{\mathbf{k}}, \mathbf{v}^N| \\ P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} (ab) &= \int d\mathbf{v}^N |a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}, \mathbf{v}^N\rangle \langle a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}, \mathbf{v}^N|, \quad \dots\end{aligned}\quad (3.9)$$

であり、さらに

$$\begin{aligned}|0, \mathbf{v}^N\rangle &\equiv |\mathbf{k}^N = 0\rangle \otimes |\mathbf{v}^N\rangle \\ |a_{\mathbf{k}}, \mathbf{v}^N\rangle &\equiv |\mathbf{k}_a = \mathbf{k}, \mathbf{k}^{N-1} = 0\rangle \otimes |\mathbf{v}^N\rangle \\ |a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}, \mathbf{v}^N\rangle &\equiv |\mathbf{k}_a = \mathbf{k}, \mathbf{k}_b = \mathbf{k}', \mathbf{k}^{N-2} = 0\rangle \otimes |\mathbf{v}^N\rangle, \quad \dots\end{aligned}\quad (3.10)$$

である。

射影演算子 $P^{(\nu)}(\{a\})$ はゼロでない波数ベクトルをもった粒子の組 $\{a\}$ を特定する演算子である。これらの特定の粒子に関わった演算子を、特定演算子と呼ぶことにする。しかし、我々は一般には粒子の名前を特定せずに、単に s 個の任意の粒子が見いだされる確率密度に興味を持っている。そこで、 $P^{(\nu)}(\{a\})$ で波数ベクトルがゼロでない全ての粒子の可能な組み合わせに対して和を取った一般演算子、例えば、

$$P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} = \sum_{b>}^N \sum_{a=1}^N P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} (ab) \quad (3.11)$$

を導入しておくことと便利である。この定義により、 $P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} (ab) = P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')} (ab)$ が成り立っていることに注意。

もし、波数ベクトルをあからさまに書き下す必要がない場合には、我々は以下で、 $P^{(\mathbf{k})}$ に対して $P^{(1)}$ 、 $P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}$ に対して $P^{(2)}$ 、 $P^{(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{k}'')}$ に対して $P^{(3)}$ 等々と略記する。したがって、整数 ν に対して $P^{(\nu)} \rho$ は ν 度の相関を表す成分を表している。この射影演算子は次の関係式を満たす：

$$L_0 P^{(\nu)} = P^{(\nu)} L_0, \quad P^{(\nu)} P^{(\mu)} = P^{(\nu)} \delta_{\nu, \mu}, \quad \sum_{\nu} P^{(\nu)} = 1 \quad (3.12)$$

また、 $P^{(\nu)}$ に直交する相補的な射影演算子

$$Q^{(\nu)} = 1 - P^{(\nu)} \quad (3.13)$$

も導入しておく。

さて自由運動（あるいは可積分系の運動）を追っている限り、ヒルベルト空間はその記述に関して整合した枠組みを与えてくれる。しかし、熱力学的極限では、非可積分系の相互作用は一般に自由運動に対するのと同じヒルベルト空間には属さない新しいケット・ベクトルの組を持ち来たらす。このことは、新しいケット・ベクトルと元のケット・ベクトルの内積が熱力的極限で発散してしまうことから分かる。これは、文献 [31] で Dirac が相互作用をしている量子場について詳しく論じた場合ときわめて類似した状況である。Dirac はモデル・ハミルトニアンを用いて相互作用演算子が無摂動系の真空に作用した場合、それがヒルベルト空間の構造を壊してしまうことを示している⁴。もし、全ての時間に渡ってケット・ベクトルの完全性を論じることを望むならば、適当なクラスのテスト関数を想定した一般化された関数（あるいは超関数）を含んだ、ヒルベルト空間よりも広い関数空間を導入しなくてはならない⁵。

このような熱力学的極限での発散は、有限な粒子数 $s < N$ に依存する任意の物理量 $M_s(x^s)$ をテスト関数として、我々の興味をその期待値、

$$\langle M_s \rangle_t = \langle M_s | e^{-iLt} | \rho(t) \rangle = \int dx^N M_s(x_1, \dots, x_s) \rho(x^N, t) \quad (3.14)$$

に限ることによって避けることが出来る。事実、この量の計算では相互作用に現れる粒子は「着目粒子」、 $1 \dots s$ に つながった ものだけに限られるので、この期待値は熱力学的極限で有限な値となる。この操作は、次式で定義されるブラ・ベクトル、

$$\langle \hat{\delta}_{y_1 \dots y_s} | \equiv \int dx^N \left[\sum_{j_1 \neq 1} \sum_{j_2 \neq 1, 2} \dots \sum_{j_s \neq 1, 2, \dots, s-1} \delta(y_1 - x_{j_1}) \delta(y_2 - x_{j_2}) \dots \delta(y_s - x_{j_s}) \right] \langle x^N | \quad (3.15)$$

と分布関数の内積を取ることによって実現化され、その結果、次の既約 s 粒子分布関数 $f_{1 \dots s}(x_1, \dots, x_s)$ 、

$$f_{1 \dots s}(x_1, \dots, x_s) = \langle \hat{\delta}_{x_1 \dots x_s} | \rho \rangle = \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_{(1 \dots s)}^{N-s} \rho(x^N) \quad (3.16)$$

が導かれる。ここで $\int dx_{(1 \dots s)}^{N-s}$ は N 粒子の中で着目粒子 $1 \dots s$ を除いた粒子の変数で積分することを意味している。また、因子 $N!/(N-s)!$ は N 個の中から任意の s 個の粒子の列を選び出す方法の数を表している。この因子は、配位空間の中でどの s 個の粒子が来るかに関わりなく定義される一般既約分布関数に興味があることから付いたものである。

⁴例えば (3.21) で定義した剛体球の場合の相互作用に対しては、

$$\langle 0, \mathbf{v}^N | L' \int d\mathbf{v}^N | 0, \mathbf{v}^N \rangle f(\mathbf{v}^N) = \frac{i}{V} \sum_{b>}^N \sum_{a=1}^N T_0^{(ab)} f(\mathbf{v}^N)$$

となる。これは $N(N-1)/2$ 項からなっており、この内積は熱力学的極限で $N^2/V \sim nN \rightarrow \infty$ のように発散する。

⁵この問題に関する詳しい議論は文献 [32] でなされている。

この他に、以下に定義されるような速度分布関数 $\phi_{1\dots r}$ や $s \neq r$ に対する混合既約分布関数 $f_{1\dots s, 1\dots r}$ も使う：

$$\phi_{1\dots r}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r) = \int d\mathbf{r}^N d\mathbf{v}_{(1\dots r)}^{N-r} \rho(x^N) \quad (3.17a)$$

$$f_{1\dots s, 1\dots r}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r) = \frac{N!}{(N-s)!} \int d\mathbf{r}_{(1\dots s)}^{N-s} d\mathbf{v}_{(1\dots r)}^{N-r} \rho(x^N) \quad (3.17b)$$

$r > s$ に対して通常の因数分解：

$$\phi_{1\dots r}(\mathbf{v}^r) = \prod_{a=1}^r \phi(\mathbf{v}_a); \quad f_{1\dots s, 1\dots r}(\mathbf{r}^s, \mathbf{v}^r) = f_{1\dots s}(x^s) \prod_{a=s+1}^r \phi(\mathbf{v}_a) \quad (3.18)$$

が成り立っていることを仮定する⁶。ここで $\phi(\mathbf{v}_a)$ は規格化条件

$$\int d\mathbf{v}_a \phi(\mathbf{v}_a) = 1 \quad (3.19)$$

を満たす 1 粒子速度分布関数であり、また 1 粒子速度分布関数の場合、記号の煩雑さを避けるために ϕ_a の下の粒子の指標 a を省略することにする。

熱力学的極限では、例えば 1 粒子既約分布関数に対して、

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1, t) &= n\phi(\mathbf{v}_1, t) + \frac{n}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} f_{\mathbf{q}}(\mathbf{v}_1, t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} \\ &\rightarrow n\phi(\mathbf{v}_1, t) + n \int d\mathbf{q} f_{\mathbf{q}}(\mathbf{v}_1, t) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} \end{aligned} \quad (3.20)$$

が得られる。この式の因子 Ω^{-1} は (3.7) の中のデルタ関数特異性から出て来たものである。

今までは相互作用がハミルトン形式で書けるような系について触れて来たが、上で述べた全てのことは、剛体球のようにハミルトン形式で書き表すと相互作用に特異性が現れる場合にも成り立っている。剛体球の場合には 2 体衝突の過程を表す衝突演算子が著しく簡単になって、それに対応するボルツマン方程式を書き下す場合の計算の労力の多大な部分が省けるという利点がある。そこで、第 6 節以降の応用例では、剛体球の場合を考慮することにする。この場合、相互作用の部分は、Ernst et. al. 等 [11] によって導入された「擬リウビリアン」形式の取り扱いを使って表される (文献 [20] の第 X 章も参照)。この形式では相互作用の行列要素は

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'^N, \mathbf{v}'^N | L'_{ab} | \mathbf{k}^N, \mathbf{v}^N \rangle &= \frac{i}{V} T_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^{(ab)} \delta^{kr} (\mathbf{k}'_a + \mathbf{k}'_b - \mathbf{k}_a - \mathbf{k}_b) \\ &\quad \times \delta_{ab}^{kr} (\mathbf{k}'^{N-2} - \mathbf{k}^{N-2}) \delta(\mathbf{v}'^N - \mathbf{v}^N) \end{aligned} \quad (3.21)$$

で与えられる。ここで直径 a_0 の剛体球の場合の「2 体衝突演算子」は

$$T_{\mathbf{q}}^{(ab)} = a_0^{d-1} \int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{v}_{ab} > 0} d\hat{\mathbf{s}} (\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{v}_{ab}) (e^{-i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{s}}a_0} \hat{b}_{\mathbf{v}}^{(ab)} - e^{+i\mathbf{q}\cdot\hat{\mathbf{s}}a_0}) \quad (3.22)$$

⁶この性質は $t=0$ でだけ仮定すれば、 $t>0$ で成り立っていることを証明することができる。例えば、文献 [27, 33] を参照せよ。

で定義される。また、 \hat{s} は単位ベクトルである。演算子 $\hat{b}_v^{(ab)}$ は \mathbf{v}_a と \mathbf{v}_b を、その衝突前の値 $\hat{b}_v^{(ab)} f(\mathbf{v}_a, \mathbf{v}_b) = f(\bar{\mathbf{v}}_a, \bar{\mathbf{v}}_b)$ に置き換える演算子であり、ここで $\mathbf{v}_{ab} \equiv \mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b$ として、 $\bar{\mathbf{v}}_a = \mathbf{v}_a - \hat{s}(\hat{s} \cdot \mathbf{v}_{ab})$ 、かつ、 $\bar{\mathbf{v}}_b = \mathbf{v}_b + \hat{s}(\hat{s} \cdot \mathbf{v}_{ab})$ である。さらに、 $\delta_{ab}^{kr}(\mathbf{k}^{N-2})$ は粒子 a と b を除いた粒子に対する $N-2$ 個のクロネッカー・デルタの積を表す。

4 複素スペクトル表示

この節では、デルタ関数特異性を持った関数よりなる拡張された関数空間での、リウビリアン固有値問題を定式化する。この特異性の結果、リウビリアンはそれが対称演算子であるにもかかわらず、この拡張された関数空間では数学に矛盾すること無く、複素固有値 $Z_j^{(\nu)}$ を持つことが出来るようになる。この固有値の虚数部分が時間の対称性を破るわけである。そして、系の時間発展が二つの半群に分離することになり、 $\text{Im} Z_j^{(\nu)} \leq 0$ の成分に対して、系は我々の未来 $t \rightarrow \infty$ に向かって熱平衡に近づき、 $\text{Im} Z_j^{(\nu)} \geq 0$ に対して我々の過去に向かって熱平衡に向かうことになる。この二つの半群の領域は熱平衡状態を除いて重ならない [1, 2]。自己矛盾に陥らないように、我々の未来に向かう $\text{Im} Z_j^{(\nu)} \leq 0$ に対応した半群の解を選ばなければならない。

固有値が複素数であることから、一般に左固有状態は右固有値のエルミート共役にはなっていない。そこで複素固有値 $Z_j^{(\nu)}$ に属する右および左固有状態をそれぞれ $|F_j^{(\nu)}\rangle$ と $\langle \tilde{F}_j^{(\nu)}|$ で表すと

$$L|F_j^{(\nu)}\rangle = Z_j^{(\nu)}|F_j^{(\nu)}\rangle, \quad \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}|L = Z_j^{(\nu)}\langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| \quad (4.1)$$

となる。ここで、 ν と共に指標 j は固有状態を特徴付けるパラメータである。この固有状態に対しても (2.13) に対応した相関の度合いによる分解、すなわち、

$$\begin{aligned} \langle x^N | F_j^{(\nu)} \rangle &= \langle x^N | P^{(0)} | F_j^{(\nu)} \rangle + \sum_a^N \sum_{\mathbf{k}_a}'' \langle x^N | P^{(\mathbf{k}_a)} | F_j^{(\nu)} \rangle \\ &+ \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a} \langle x^N | P^{(\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a)} | F_j^{(\nu)} \rangle + \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}'' \langle x^N | P^{(\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b)} | F_j^{(\nu)} \rangle + \dots \\ &= \frac{1}{V^{N/2}} \left[F_{j;0}^{(\nu)}(\mathbf{v}^N) + \frac{1}{\Omega} \sum_a^N \sum_{\mathbf{k}_a}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a} F_{j;\mathbf{k}_a}^{(\nu)}(\mathbf{v}^N) + \frac{1}{\Omega} \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a} e^{i\mathbf{k}_a \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} F_{j;\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a}^{(\nu)}(\mathbf{v}^N) \right. \\ &\left. + \frac{1}{\Omega^2} \sum_{b>a}^N \sum_{\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a + i\mathbf{k}_b \cdot \mathbf{r}_b} F_{j;\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b}^{(\nu)}(\mathbf{v}^N) + \dots \right] \quad (4.2) \end{aligned}$$

および $\langle \tilde{F}_j^{(\nu)}|$ に対する同様な分解が可能であり、したがってデルタ関数特異性が存在していることを仮定する。さらに、相互作用が消えた場合に対して条件、

$$|F_j^{(\nu)}\rangle = P^{(\nu)}|F_j^{(\nu)}\rangle, \quad \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| = \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}|P^{(\nu)} \quad (\text{for } L' = 0) \quad (4.3)$$

を付す。(4.2)の前に付いた $1/V^{N/2}$ が (2.13) の対応する因子と異なっていることに注意。この違いは固有状態に対して次のような双直交、双完備性を付したことから来る：

$$\langle \tilde{F}_j^{(\nu)} | F_{j'}^{(\mu)} \rangle = \delta_{\nu,\mu} \delta_{j,j'} \quad \sum_{\nu} \sum_j |F_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| = 1 \quad (4.4)$$

また、ここではジョルダン・ブロックが現れるような最も一般的な可能性は考えないことにする。もちろんこの仮定が正しいかどうかは、与えられた系に対して確認されなければならないが、この論文で示すように無限個の粒子よりなる系で多体散乱の効果まで取り入れた固有状態は大変複雑であり、これらの仮定を厳密に証明することは現時点においてほとんど絶望的である。したがって我々は一先ずこの性質を仮定して、どこまで生産的な結論が得られるかを探るという立場を取ることにする。

この固有関数の組を使って我々は系の発展に対して次のような複素スペクトル表示を得る：

$$e^{-iLt} |\rho(0)\rangle = \sum_{\nu} \sum_j |F_j^{(\nu)}\rangle e^{-iZ_j^{(\nu)}t} \langle \tilde{F}_j^{(\nu)} | \rho(0)\rangle \quad (4.5)$$

さて、(4.1)の両辺に $P^{(\nu)}$ とそれに直交する射影演算子 $Q^{(\nu)}$ を作用させると、固有関数の $P^{(\nu)}$ 成分と $Q^{(\nu)}$ 成分に対する連立方程式が得られる。その連立方程式を解くことによって、 L に対するいわゆるブリリュアン=ウイグナー型の固有状態：

$$|F_j^{(\nu)}\rangle = [P^{(\nu)} + Q^{(\nu)}C^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)})] |F_j^{(\nu)}\rangle, \quad \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| = \langle F_j^{(\nu)}| [P^{(\nu)} + D^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)})Q^{(\nu)}] \quad (4.6)$$

が得られる。ここでそれぞれ「相関の生成演算子」 $C^{(\nu)}(z)$ と「相関の消滅演算子」 $D^{(\nu)}(z)$ とよばれる演算子は

$$C^{(\nu)}(z) \equiv G_Q^{\nu}(z)LP^{(\nu)}, \quad D^{(\nu)}(z) \equiv P^{(\nu)}LG_Q^{\nu}(z) \quad (4.7)$$

で定義され、それに現れる発展子 (propagator) は

$$G_Q^{\nu}(z) \equiv Q^{(\nu)}[z - Q^{(\nu)}LQ^{(\nu)}]^{-1} \quad (4.8)$$

で定義される。

(4.6) を (4.1) に代入して固有状態の $P^{(\nu)}$ 成分を見ると、それが

$$\psi^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)})|u_j^{(\nu)}\rangle = Z_j^{(\nu)}|u_j^{(\nu)}\rangle, \quad \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| \psi^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) = \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| Z_j^{(\nu)} \quad (4.9)$$

となって、その成分が「衝突演算子」 $\psi^{(\nu)}(z)$ とよばれる非平衡統計力学で重要な演算子の固有状態となっていることが分かる。ただしここで、 $P^{(\nu)}|F_j^{(\nu)}\rangle = \sqrt{N_j^{(\nu)}}|u_j^{(\nu)}\rangle$ 、 $\langle \tilde{F}_j^{(\nu)}|P^{(\nu)} = \sqrt{N_j^{(\nu)}}\langle \tilde{v}_j^{(\nu)}|$ であり、 $N_j^{(\nu)}$ は規格化定数である。そして、衝突演算子は

$$\psi^{(\nu)}(z) = P^{(\nu)}L_0P^{(\nu)} + P^{(\nu)}\lambda L'P^{(\nu)} + P^{(\nu)}\lambda L'C^{(\nu)}(z)P^{(\nu)} \quad (4.10)$$

で与えられる。したがって、もし衝突演算子の固有値問題が解けたら、リウビル演算子の固有値問題も解けたことになる。「はじめに」でも触れたように、この衝突演算子がハミルトニアン「自己エネルギー」に対応する部分である。さらに、 $\nu=0$ の場合、 $\psi^{(0)}(z)$ は(1.1)の衝突演算子 $\tilde{\psi}^{(0)}(t)$ をラプラス変換した物である。

この演算子は三つの成分からなっている：それは、1) 自由な流れ項 L_0 、2) 2体相互作用項、そして、3) $\lambda L'$ が $\mathcal{C}^{(\nu)}(z)$ の中の発展子に繰り込まれた、相互作用に関して非線形な項である。また、衝突演算子の固有値問題は(4.9)で見られるように、演算子の中に固有値 $Z_j^{(\nu)}$ が現れるために、 $Z_j^{(\nu)}$ に関して非線形になっていることに注目してほしい。この事実は後で詳しく論じるように、通常の分布関数に対するマルコフ化された運動論的方程式の衝突演算子が2次元系では発散してしまうのに、衣を着た分布関数に対する運動論的方程式の衝突演算子がなぜ発散しないのかを理解する上で重要になる。

また、上の結果は、リウビル演算子の固有値が衝突演算子の固有値と同じであることを示している。後で見るように、低密度系では衝突演算子の相互作用に関する非線形項3)を無視することが出来る。この場合、上の相互作用項2)はボルツマン方程式の2体衝突項を与える。したがって、低密度系での衝突演算子の固有値が複素数になることは明らかである。そのことから、この場合にはリウビル演算子も複素固有値を持つことになる。

ここで注意すべきことは、射影演算子 $P^{(\nu)}$ と $Q^{(\nu)}$ を使って行った分解が意味をなすためには、上で述べた熱力学的極限で現れるデルタ関数特異性の存在が決定的な役割を演じていることである。実際、この射影演算子は上で見たように、ゼロでない独立な波数ベクトルの数によって分類されている。したがって、ある射影演算子を使って残りの部分から分離することは、各粒子に付随した幾つもの波数ベクトルに関する積分の中で、それがたまたまゼロになる1点の寄与を残りの積分から分離することに対応している。そのような分離が意味を持つことが出来たのは、このデルタ関数特異性のおかげである。もしこの特異性がなかったら、積分の中の1点からの寄与は無視できるはずだからである。そしてまた、その特異性のおかげで、ここで求めた固有状態はヒルベルト空間の要素になっておらず、したがって、リウビル演算子が対称演算子であったにもかかわらず複素固有値を持つことが出来たのである。

さて、部分空間 $P^{(\nu)}$ 内での双完備性を仮定することによって、我々は常に $\{|u_j^{(\nu)}\rangle\}$ の組に双直交な状態の組 $\{|\tilde{u}_j^{(\nu)}\rangle\}$ 、すなわち

$$\langle \tilde{u}_j^{(\nu)} | u_\beta^{(\mu)} \rangle = \delta_{\nu,\mu} \delta_{\alpha,\beta}, \quad \sum_j |u_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{u}_j^{(\nu)}| = P^{(\nu)} \quad (4.11)$$

を作ることができる。そのことは、 $\{|\tilde{v}_j^{(\nu)}\rangle\}$ の組に対する双直交な組 $\{|v_j^{(\nu)}\rangle\}$ に対しても同様である。ただし、一般に $\langle \tilde{v}_j^{(\nu)} | \neq \langle \tilde{u}_j^{(\nu)} |$ である [1, 2]。

この双直交系の組を使うと、次式で定義される「包括的衝突演算子」、

$$\theta^{(\nu)} \equiv \sum_j \psi^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) |u_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{u}_j^{(\nu)}| = \sum_j |u_j^{(\nu)}\rangle Z_j^{(\nu)} \langle \tilde{u}_j^{(\nu)}| \quad (4.12)$$

を導入することができる。それに対応して「包括的生成および消滅演算子」、

$$\mathbf{C}^{(\nu)} \equiv \sum_j \mathbf{C}^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) |u_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{u}_j^{(\nu)}|, \quad \mathbf{D}^{(\nu)} \equiv \sum_j |v_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| \mathbf{D}^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) \quad (4.13)$$

を導入することができる。その結果、包括的衝突演算子は [34]

$$\theta^{(\nu)} = P^{(\nu)} L_0 P^{(\nu)} + P^{(\nu)} \lambda L' P^{(\nu)} + P^{(\nu)} \lambda L' \mathbf{C}^{(\nu)} P^{(\nu)} \quad (4.14)$$

と表され、さらに、リウビリ안의固有関数は

$$|F_j^{(\nu)}\rangle = \sqrt{N_j^{(\nu)}} (P^{(\nu)} + \mathbf{C}^{(\nu)}) |u_j^{(\nu)}\rangle, \quad (4.15a)$$

$$\langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| = \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| (P^{(\nu)} + \mathbf{D}^{(\nu)}) \sqrt{N_j^{(\nu)}} \quad (4.15b)$$

と表させる。

この式を規格化双直交関係 (4.4) に代入すると規格化定数が

$$N_j^{(\nu)} = \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| A^{(\nu)} |u_j^{(\nu)}\rangle \quad (4.16)$$

という形でもとめられる。ここで、

$$A^{(\nu)} \equiv P^{(\nu)} (1 + \mathbf{D}^{(\nu)} \mathbf{C}^{(\nu)})^{-1} = \sum_j |u_j^{(\nu)}\rangle N_j^{(\nu)} \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| \quad (4.17)$$

は $P^{(\nu)}$ 部分空間の「規格化演算子」とよばれるものである。さらに (4.6) を使うと、

$$N_j^{(\nu)} = \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| P^{(\nu)} |u_j^{(\nu)}\rangle + \langle \tilde{v}_j^{(\nu)}| \mathbf{D}^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) \mathbf{C}^{(\nu)}(Z_j^{(\nu)}) |u_j^{(\nu)}\rangle \quad (4.18)$$

という表現も得られる。

以前の仕事で我々は「サブダイナミクス」という概念をしばしば使って来た [34]–[36]。

この概念とここで導入した複素スペクトル表示は、次式で定義される「射影演算子」、

$$\Pi^{(\nu)} \equiv \sum_j |F_j^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{F}_j^{(\nu)}| = (P^{(\nu)} + \mathbf{C}^{(\nu)}) A^{(\nu)} (P^{(\nu)} + \mathbf{D}^{(\nu)}) \quad (4.19)$$

を通して関係付けることができる。それは次の直交完備関係

$$L \Pi^{(\nu)} = \Pi^{(\nu)} L, \quad \Pi^{(\nu)} \Pi^{(\mu)} = \Pi^{(\nu)} \delta_{\nu, \mu}, \quad \sum_{\nu} \Pi^{(\nu)} = 1 \quad (4.20)$$

を満たしている。 $\Pi^{(\nu)}$ は $P^{(\nu)}$ の全リウビリアン L への拡張である [(3.12) 参照]。 $(\Pi^{(\nu)})^\dagger \neq \Pi^{(\nu)}$ であることに注意。すなわち、この演算子は $P^{(\nu)}$ とは違って自己共役演算子ではない。この非対称性は時間の対称性の破れからの帰結である。この演算子はリウビリアンと交換するので、それによって射影される各成分 $\Pi^{(\nu)}|\rho\rangle$ は互いに独立にリウビル方程式を満た

す。それゆえ、この射影演算子によってサブダイナミクスが形成される。そして、(4.5) から、各サブダイナミクス $\rho^{(\nu)}(t) \equiv \Pi^{(\nu)}\rho(t)$ の「主成分」とよばれる成分 $P^{(\nu)}\rho^{(\nu)}(t)$ に関するマルコフ方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}P^{(\nu)}|\rho^{(\nu)}(t)\rangle = \theta^{(\nu)}P^{(\nu)}|\rho^{(\nu)}(t)\rangle \quad (4.21)$$

を導きだすことができる。これとは対照的に $\rho(t) = \sum_{\nu} \rho^{(\nu)}(t)$ の $P^{(\nu)}$ 成分は記憶効果を持った非マルコフ方程式にしたがうので[例えば、(1.1) 参照]、この結果は重要である。リウビリヤンの複素固有値問題に基づいたここでの定式化では、記憶効果はマルコフ過程の重ね合わせとして、

$$\rho(t) = \sum_{\nu} e^{-iLt}\rho(0) = \sum_{\nu} [P^{(\nu)} + \mathbf{C}^{(\nu)}]e^{-i\theta^{(\nu)}t}A^{(\nu)}[P^{(\nu)} + \mathbf{D}^{(\nu)}]\rho(0) \quad (4.22)$$

と記述される。

以上紹介したリウビル演算子の複素スペクトル表示を、ハミルトニアン (2.8) のポアンソンのブラケットや交換関係から得られるリウビリヤンに応用し、弱結合 ($\lambda \ll 1$) でかつ斥力を仮定して、相互作用からくる効果の最低次 (すなわち λ^2 項) の寄与のみを残すと、 $\nu = 0$ に対する速度分布関数や運動量分布関数に対する所謂 $\lambda^2 t$ 近似に対応した古典系のフォッカー・プランク方程式や量子系のパルリ・マスター方程式が得られる。この計算は比較的簡単であるが、誌面の都合上ここで載せることが出来ないため、それらに関しては文献 [1, 2] を見てほしい。この場合、それらの方程式に現れる衝突演算子は、リウビリヤンとは対照的に反対称演算子になっており、従って、衝突演算子の固有値はゼロか純虚数になっている。上で述べたように衝突演算子の固有値はリウビリヤンの固有値と等しいので、 $\nu = 0$ の部分空間ではリウビリヤンが純虚数の固有値を持つことになり、元のリウビル・ダイナミクスのなかで時間の対称性が破れているわけである。

この対称性の破れた部分の寄与は、衝突演算子の計算の際に、振動数ないしエネルギー積分に関する被積分関数がポアンカレの共鳴特異性を表す分母の零点で発散してしまう部分を、デルタ関数として評価して得られた寄与である。強調すべき点は、このデルタ関数は振動数やエネルギーに関するものであり、第2節で述べた分布関数の空間的非局所性から来る波数ベクトルに関するデルタ関数特異性とは独立な、「ポアンカレの非可積分性」を根拠にして得られた特異性である。したがって、時間の対称性が破れる力学的根拠には、上で詳しく述べた分布関数の非局所性の他に、もう一つ力学系の非可積分性という重要な要素があったのである。このことについての詳しい説明は文献 [37] に載せてあるので、それも是非参照してもらいたい。

5 比較的濃密度気体系への応用

この節からは上で紹介した一般論の応用である。序論でも述べたように、ここで紹介する応用は我々の理論の入門編ではなく、かなり高度な応用編である。上でも触れたが、

もっと簡単な応用例については文献 [1, 2] を参照されたい。

前章で総括した我々の定式化を、同じ質量をもった N 個の剛体球 ($d=3$)、あるいは剛体円盤 ($d=2$) よりなる比較的濃密度な気体系に応用する。 $d=3$ の場合で、かつ、空気分子の直径を 10^{-10} m 程度とした場合、(1.11) で定義された無次元密度 n_0 は 1 気圧室温状態では 10^{-5} 程度の大変小さい値を持つ。ここで言う比較的濃密度系とは、 n_0 は 1 より十分小さいが、 10^{-5} よりはかなり大きい場合のことである。

剛体球の場合には、相互作用が特異であり結合常数が小さくないので、以下の取り扱いでは $\lambda=1$ とおいて、その大きさを L' の中に含めた表現を使うことにする。

我々は、運動論的方程式に対して線形近似が有効な、熱平衡状態に近い状況について考察する。ここでの議論では、以下の標準的仮定、すなわち、(1) いわゆる「リング過程」による現象の分析が有効であり、そして、(2) 輸送係数の評価について「流体力学的モード」と「非流体力学的モード」の分離が明確になされているものと仮定する。

さて、一つの波数ベクトル \mathbf{q} を持ったサブダイナミクス $\Pi^{(\mathbf{q})}$ に対応した 1 粒子既約分布関数を考えよう。それは波数ベクトル \mathbf{q} をもった N 粒子分布関数のフーリエ成分で粒子 1 を除いた粒子の速度を積分したものとして定義され、それは

$$f_1^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, t) = \sum_j f_{j;1}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, t) \quad (5.1)$$

で与えられる。ここで、

$$f_{j;1}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, t) \equiv V^{N/2} \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | P^{(\mathbf{q})} | F_j^{(\mathbf{q})} \rangle \langle \tilde{F}_j^{(\mathbf{q})} | \rho(t) \rangle \quad (5.2)$$

であり、体積因子は分布関数および固有関数の規格化からでたものである [(2.13) と (4.2) 参照]。衝突演算子の固有関数 $u_j^{(\mathbf{q})}$ を使えば、この式は、

$$f_{j;1}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, t) = V^{N/2} \sqrt{N_j^{(\mathbf{q})}} \left[\int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | P^{(\mathbf{q})} | u_j^{(\mathbf{q})} \rangle \right] \langle \tilde{F}_j^{(\mathbf{q})} | \rho(t) \rangle \quad (5.3)$$

となる。内積 (3.5) の定義から、 $\langle \tilde{F}_j^{(\mathbf{q})} | \rho(t) \rangle$ が粒子の速度によらないことに注意。それ故、速度に関する積分演算子はこの式のカギカッコの中だけに作用する。

この式の従う方程式を導くために、(5.3) の両辺を時間で微分する。そして、 $\langle \tilde{F}_j^{(\mathbf{q})} |$ が L の固有状態であることを使うと、

$$i \frac{\partial}{\partial t} f_{j;1}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, t) = V^{N/2} \sqrt{N_j^{(\mathbf{q})}} \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | \psi^{(\mathbf{q})}(Z_j^{(\mathbf{q})}) | u_j^{(\mathbf{q})} \rangle \langle \tilde{F}_j^{(\mathbf{q})} | \rho(t) \rangle \quad (5.4)$$

が得られ、ここで、

$$\int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | \psi^{(\mathbf{q})}(Z_j^{(\mathbf{q})}) | u_j^{(\mathbf{q})} \rangle = Z_j^{(\mathbf{q})} \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | u_j^{(\mathbf{q})} \rangle \quad (5.5)$$

である。

この固有値方程式を既約固有関数を使って表すために、任意の ν に対して次の式で定義される s 粒子既約関数を導入しよう。

$$r_{j:1\dots s}^{(\nu)}(x^s) = \langle x^s | r_{j:1\dots s}^{(\nu)} \rangle \equiv [N_j^{(\nu)}]^{-1/2} \int dx_{(1\dots s)}^{N-s} F_j^{(\nu)}(x^N) \quad (5.6)$$

(4.2)をこの式に代入すると、

$$\begin{aligned} r_{j:1\dots s}^{(\nu)}(x^s) = & \frac{V^{-s}V^{N/2}}{\sqrt{N_j^{(\nu)}}} \left[F_{s,j;0}^{(\nu)}(\mathbf{v}^s) + \frac{1}{\Omega} \sum_a \sum_{\mathbf{k}_a}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot \mathbf{r}_a} F_{s,j;\mathbf{k}_a}^{(\nu)}(\mathbf{v}^s) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\Omega} \sum_{b>a}^s \sum_{\mathbf{k}_a}'' e^{i\mathbf{k}_a \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} F_{s,j;\mathbf{k}_a, -\mathbf{k}_a}^{(\nu)}(\mathbf{v}^s) + \dots \right] \quad (5.7) \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $F_{s,j;\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b, \dots}^{(\nu)}(\mathbf{v}^s)$ は $F_{j;\mathbf{k}_a, \mathbf{k}_b, \dots}^{(\nu)}(\mathbf{v}^N)$ を積分変数 \mathbf{v}^{N-s} に渡って積分して得られる s 粒子関数である。この式は、固有関数を部分的に積分して得られる s 粒子関数が、やはりデルタ関数特異性を持っており、したがってヒルベルト空間に属さない関数であることを示している。

これらの既約関数に対して、(3.9)や(3.11)と同じように、特定射影演算子 $P_s^{(k)}(1)$ 、 $P_s^{(k,k')}(ab), \dots$ や一般射影演算子 $P_s^{(\mu)}$ を導入することができる。ここで、指標 s は、これらが s 粒子状態に作用する演算子であることを示している。これを使うと(3.7)と同じように、

$$|r_{j:1\dots s}^{(\nu)}\rangle = \sum_{\mu=0}^s P_s^{(\mu)} |r_{j:1\dots s}^{(\nu)}\rangle \quad (5.8)$$

という分解が得られる。ここで考えている系では相互作用によって全波数ベクトルの和が保存するので、 $\mathbf{q} \neq 0$ を持った非均質成分の部分空間では $|r_{j:1}^{(\mathbf{q})}\rangle = P_1^{(\mathbf{q})} |r_{j:1}^{(\mathbf{q})}\rangle$ が成り立っていることに注意。

さて、(4.10)で示したように、(5.5)に現れる衝突演算子 $\psi^{(\mathbf{q})}$ は3つの項から成っている。はじめの2つの項は最後の項よりも簡単な構造をしている。そこで、この二つの項のみからくる寄与を $\overline{r_{j:1}^{(\mathbf{q})}}$ と表すことにすると、(5.5)から

$$Z_j^{(\mathbf{q})} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}_1 | \overline{r_{j:1}^{(\mathbf{q})}} \rangle = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1 \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}_1 | r_{j:1}^{(\mathbf{q})} \rangle + \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_a | P_2^{(\mathbf{q})} V L'_{1a} P_2^{(\mathbf{q})} | r_{j:1a}^{(\mathbf{q})} \rangle \quad (5.9)$$

が得られる。ここで、第2項の体積因子 V は、(5.7)で $s=1$ と $s=2$ の場合では体積依存性が異なることから出て来た。

煩雑な記号を避けるために、今後は自明なブラ・ベクトルの部分を省略することにする。その約束の下に上の式を特定射影演算子を使って書き直すと、

$$Z_j^{(\mathbf{q})} \overline{|r_{j:1}^{(\mathbf{q})}\rangle} = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1 |r_{j:1}^{(\mathbf{q})}\rangle + \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a P_2^{(\mathbf{q})}(1) V L'_{1a} (P_2^{(\mathbf{q})}(1) + P_2^{(\mathbf{q})}(a)) |r_{j:1a}^{(\mathbf{q})}\rangle \quad (5.10)$$

が得られる。さらに、

$$\hat{P}_{ab}f(\mathbf{v}_a, \mathbf{v}_b) = f(\mathbf{v}_b, \mathbf{v}_a) \quad (5.11)$$

で定義される互換演算子を導入すると、この式は

$$Z_j^{(\mathbf{q})}|\overline{r_{j;1}^{(\mathbf{q})}}\rangle = \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1|r_{j;1}^{(\mathbf{q})}\rangle + \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a P_2^{(\mathbf{q})}(1) V L'_{1a} (1 + \hat{P}_{1a}) P_2^{(\mathbf{q})}(1) |r_{j;1a}^{(\mathbf{q})}\rangle \quad (5.12)$$

と書ける。

同様に、(4.10)の最後の項も考慮した $|r_{j;1}^{(\mathbf{q})}\rangle$ の全成分に対して、

$$\begin{aligned} Z_j^{(\mathbf{q})}|r_{j;1}^{(\mathbf{q})}\rangle &= \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1|r_{j;1}^{(\mathbf{q})}\rangle + \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a P_2^{(\mathbf{q})}(1) V L'_{1a} (1 + \hat{P}_{1a}) P_2^{(\mathbf{q})}(1) |r_{j;1a}^{(\mathbf{q})}\rangle \\ &+ \sum_{s=2}^N \sum_{a_2, \dots, a_s}^N \int d\mathbf{v}_{a_2} \cdots \int d\mathbf{v}_{a_s} \delta\psi_{1a_2 \dots a_s}^{(\mathbf{q})} (Z_j^{(\mathbf{q})}) P_s^{(\mathbf{q})}(1) |r_{j;1a_2 \dots a_s}^{(\mathbf{q})}\rangle \end{aligned} \quad (5.13)$$

が得られる。ここで、 s 粒子既約衝突演算子は

$$\delta\psi_{1a_2 \dots a_s}^{(\mathbf{q})}(z) = P_s^{(\mathbf{q})}(1) L'_{1a_2} Q_s^{(\mathbf{q})} C_{1a_2 \dots a_s}(z) P_s^{(\mathbf{q})}(1) \quad (5.14)$$

で与えられ、 $C_{1a_2 \dots a_s}(z)$ は s 粒子既約生成演算子である。この衝突演算子の具体的な形は後で与える。

式(5.13)は1粒子既約関数で閉じた方程式に成っていない。ここでは、これを閉じさせるために我々の考察を平衡状態の近傍に限ることにする。流れ項 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1$ があるために粒子1の分布関数は非平衡状態にある。他のダミー粒子 a_2, \dots, a_s も、一般には平衡分布とそれからのズレの関数で表されている。平衡近傍ではそれらのズレは無視できるくらい小さい。そこで、平衡近傍での線形な運動論的方程式を導く通常議論と同様にして[20]、 $s \geq 2$ に対して

$$P_s^{(\mathbf{q})}(1) r_{j;1a_2 \dots a_s}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{a_2}, \dots, \mathbf{v}_{a_s}) = r_j^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1) \varphi_{eq}(v_{a_2}) \cdots \varphi_{eq}(v_{a_s}) \quad (5.15)$$

で与えられる既約固有関数のクラスについて考えれば良い。ここで、

$$\varphi^{eq}(v_a) = (\beta m / 2\pi)^{d/2} \exp(-\beta m v_a^2 / 2) \quad (5.16)$$

は規格化されたマクスウェル分布である。また、今後は煩雑な記号を避けるために、省略記号 $r_j^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1) \equiv r_{j;1}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1)$ を使うことにする。この式を(5.13)に代入すると、最終的に、 $r_j^{(\mathbf{q})}$ について閉じた「線形化された」方程式、

$$\Psi_1^{\mathbf{q}}(Z_j^{(\mathbf{q})}) |r_j^{(\mathbf{q})}(1)\rangle\rangle = Z_j^{(\mathbf{q})} |r_j^{(\mathbf{q})}(1)\rangle\rangle \quad (5.17)$$

が得られる。ここで、 $r_j^{(q)}(1)$ の因子 1 はこの状態が粒子 1 に付随した状態であることを強調するために付けておいた。ただし、ここで「線形化された」と括弧付きで述べたのは、この方程式では衝突演算子が固有値 $Z_j^{(q)}$ に依存しているので、(4.9) と同じ意味でまた、「非線形な」方程式であるからである。また、1 粒子既約状態 $|r_j^{(q)}(1)\rangle$ と N 粒子状態 $|u_j^{(q)}\rangle$ を区別するために、ここでは 1 粒子状態に対して 2 重ケットの記号を導入した。さらに、この 1 粒子衝突演算子は

$$\Psi_1^{(q)}(z) \equiv \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_a + iK_1^{(q)} + \delta\Psi_1^{(q)}(z) \quad (5.18)$$

で与えられ、

$$iK_1^{(q)} \equiv \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a P_2^{(q)}(1) V L'_{1a} (1 + \hat{P}_{1a}) P_2^{(q)}(a) \varphi_{eq}(v_{a2}) \quad (5.19)$$

かつ

$$\delta\Psi_1^{(q)}(z) \equiv \sum_{s=2}^N \sum_{a_2, \dots, a_s} \int d\mathbf{v}_{a_2} \cdots \int d\mathbf{v}_{a_s} \delta\psi_{1a_2 \dots a_s}^{(q)}(z) P_s^{(q)}(1) \varphi_{eq}(v_{a_2}) \cdots \varphi_{eq}(v_{a_s}) \quad (5.20)$$

である。1 粒子関数に対して $\langle\langle \mathbf{v}_1 | f \rangle\rangle = f(\mathbf{v}_1)$ である。(5.3) を (5.4)–(5.5) と組み合わせると、各固有モードに対しての運動論的方程式、

$$i \frac{\partial}{\partial t} f_{j;1}^{(q)}(\mathbf{v}_1, t) = \Psi_1^{(q)}(Z_j^{(q)}) f_{j;1}^{(q)}(\mathbf{v}_1, t) \quad (5.21)$$

が得られる。

さらに進んで (5.1) に与えられている 1 粒分布関数 $f_1^{(q)}(\mathbf{v}_1, t)$ 自身の従うマルコフ型の運動論的方程式を導きだすことが出来る。ただし、それを導くためには以下で示すように少々準備がいる。

先ず、上で導入した「線形衝突演算子」 $K_1^{(q)}$ を考える。(5.18) に相互作用の具体的な形 (3.21) を代入する。同一粒子から成る系では、(5.18) の中のダミー粒子 a を代表粒子 2 で置き換え、さらに粒子の和を $N-1$ で置き換えることが出来る。そして、熱力学的極限を取ると $(N-1)/V \rightarrow n$ となり、

$$K_1^{(q)} \phi(\mathbf{v}_1) = n \int d\mathbf{v}_2 (T_0^{(12)} + T_q^{(12)} \hat{P}_{12}) \varphi_{eq}(v_2) \phi(\mathbf{v}_1) \quad (5.22)$$

が得られる。 $\mathbf{q} = 0$ の場合には、(5.22) は良く知られた線形ボルツマン衝突演算子 K_1^B :

$$K_1^B \phi(\mathbf{v}_1) = n \int d\mathbf{v}_2 T_0^{(12)} (1 + \hat{P}_{12}) \varphi_{eq}(v_2) \phi(\mathbf{v}_1) \quad (5.23)$$

となる。

この演算子の固有値問題、

$$K_1^B |\phi_j^0(1)\rangle\rangle = \lambda_j^0 |\phi_j^0(1)\rangle\rangle \quad (5.24)$$

は多くの文献で研究されている (例えば [20] を参照)。次式で定義されるスカラー積、

$$\langle\langle g|f\rangle\rangle \equiv \int d\mathbf{v} [\varphi_{eq}(v)]^{-1} g^*(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}) \quad (5.25)$$

を導入すると、 K_1^B はエルミート演算子、すなわち、 $\langle\langle g|K_1^B|f\rangle\rangle^* = \langle\langle f|K_1^B|g\rangle\rangle$ となっている。このスカラー積を使って定義されるヒルベルト空間ではスペクトル λ_j^0 が不連続であり、また固有状態 $\phi_j^0(\mathbf{v}_1)$ が完備直交系、

$$\sum_j |\phi_j^0(1)\rangle\rangle \langle\langle \phi_j^0(1)| = 1, \quad \langle\langle \phi_j^0(1)|\phi_{j'}^0(1)\rangle\rangle = \delta_{j,j'} \quad (5.26)$$

を成すことが知られている [20]。ただし、(5.26) の左の式は

$$\sum_j \phi_j^0(\mathbf{v}_1) \phi_j^0(\mathbf{v}'_1) = \delta(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}'_1) \varphi_{eq}(v_1) \quad (5.27)$$

という関係の形式的な表現である。

この論文では、上で述べた線形ボルツマン衝突演算子の固有値問題についての知識の他に、

$$K_a^{BL} \phi(\mathbf{v}_a) \equiv n \int d\mathbf{v}_b T_0^{(ab)} \varphi_{eq}(v_b) \phi(\mathbf{v}_a) \quad (5.28)$$

で定義される「ボルツマン=ローレンツ衝突演算子」や、非均質系の線形ボルツマン衝突演算子 $K_1^B - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1$ の固有値問題についての知識も使う。

これらの衝突演算子や上で導入した線形ボルツマン衝突演算子の固有値問題の解についての有益な公式を付録 A に列記しておく。付録 A で見るように非均質系の場合には、線形ボルツマン衝突演算子の左固有値状態は右固有状態のエルミート共役に成ってはいない。そして、その左右固有状態が双直交、双完備系を成してゐる。

それよりもっと複雑な、(5.17) で考えている固有状態 $|r_j^{(a)}(1)\rangle\rangle$ については、それが、1 粒子関数の空間の中で双完備性、

$$\sum_j |r_j^{(a)}(1)\rangle\rangle \langle\langle \tilde{r}_j^{(a)}(1)| = 1 \quad (5.29)$$

が成り立っていることを仮定すると、我々は常に $\{|r_j^{(a)}(1)\rangle\rangle\}$ の組に対して次式を満たす双直交な組 $\{|\tilde{r}_j^{(a)}(1)\rangle\rangle\}$ を作る事が出来る [(4.11) 参照] :

$$\langle\langle \tilde{r}_j^{(a)}(1)|r_{j'}^{(a)}(1)\rangle\rangle = \delta_{j,j'} \quad (5.30)$$

また、 $r_j^{(q)}$ と $\tilde{r}_j^{(q)}$ は非平衡モードなので、

$$\langle\langle \tilde{r}_j^{(q)}(1) | \varphi_{eq}(1) \rangle\rangle = \langle\langle \varphi_{eq}(1) | r_j^{(q)}(1) \rangle\rangle = 0 \quad (5.31)$$

を仮定する。

この双直交、双完備性を (5.21) に使うことによって我々の目標であった、1 粒子分布関数 (4.21) に対するマルコフ型の運動論的方程式、

$$i \frac{\partial}{\partial t} f_1^{(q)}(\mathbf{v}_1, t) = \Theta_1^{(q)} f_1^{(q)}(\mathbf{v}_1, t) \quad (5.32)$$

が得られる⁷。ここで、

$$\Theta_a^{(q)} \equiv \sum_j \Psi_a^{(q)}(Z_j^{(q)} | r_j^{(q)}(a) \rangle\rangle \langle\langle \tilde{r}_j^{(q)}(a) | = \sum_j Z_j^{(q)} | r_j^{(q)}(a) \rangle\rangle \langle\langle \tilde{r}_j^{(q)}(a) | \quad (5.33)$$

である。

式 (5.3) 中の規格化定数 $N_j^{(q)}$ を決めるには、衝突演算子 $\Psi_a^{(q)}(z)$ の左固有値問題を定式化しなくてはならない。その定式化はここで触れた右固有値問題の定式化とほとんど同じようにできるので、その定式化は付録 B にまとめておく。

以下で定義される演算子 $t^{(ab)}$ を使って、

$$\langle a_{\mathbf{k}}, b_1 | t^{(ab)} | a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{q}} \rangle \equiv T_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}^{(ab)} \delta^{kr} (\mathbf{k} + \mathbf{l} - \mathbf{p} - \mathbf{q}) \quad (5.34)$$

次の演算子、

$$\hat{K}_a \equiv n \int d\mathbf{v}_b t^{(ab)} (1 + \hat{P}_{ab}) \varphi_{eq}(v_b) \quad (5.35)$$

を導入しておくると便利である。これを使うと熱力学的極限では、

$$K_1^{(q)} \Phi(\mathbf{v}_1) = \sum_{\mathbf{k}} \langle 1_{\mathbf{q}}, b_0 | \hat{K}_1 | 1_{\mathbf{k}}, b_0 \rangle \Phi(\mathbf{v}_1) \quad (5.36)$$

と表される。また、(5.36) で $\mathbf{q} = 0$ のとき、それは線形ボルツマン衝突演算子 K_1^B に帰着する。

6 ダイアグラムによる表現

無次元化された系の密度が十分小さい、すなわち $n_0 \ll 1$ の場合には、(5.18) の衝突演算子はその右辺のはじめの 2 項で近似できる。しかし、これから例示するような、系の密度が比較的が大きくなって、 n_0 は小さいが、その高次の寄与が無視できなくなった場合

⁷ここで得られた結果は、(5.4) 中の N 粒子衝突演算子の固有値問題を既約して計算する代わりに、いきなり (4.1) のリウビリアンの固有値問題を既約した計算を使っても得られる。

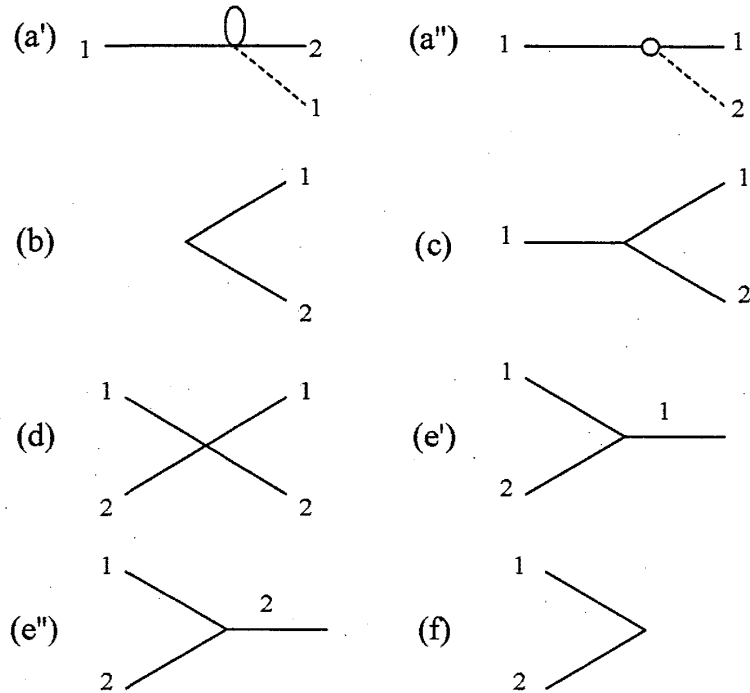


図 1: 基本的なバーテックス : Prigogine-Balescu の規則に従って、波数ベクトルがゼロでない粒子には実線を描き、波数ベクトルがゼロの粒子は破線で描くか、何も描かない。必要に応じて粒子線に粒子番号と図 6 のように波数ベクトルを付けて描くこともある。剛体球の場合には、Prigogine-Balescu のダイアグラムにはなかった新しいバーテックス (a'') がある。

には、この右辺の最後の項からの寄与を考慮しなくては成らなくなる。式 (5.20) および、(5.14) を見て想像が付くように、この部分の構造は大変複雑であり、その部分からの寄与を計算するには大変な労力が要求される。そこで、この複雑な計算を見落としなく系統的に成し遂げるために、ダイアグラムを使ってバーテックス L'_{ab} や発展子 $1/(z - L_0)$ を書き下すのが便利である。以下に導入するダイアグラムは Prigogine-Balescu によって導入されたダイアグラムの方法に対して、ここで考えている剛体球の場合にも取り扱えるように少しの改良を加えたものである [27, 33]。

このダイアグラムでは $\langle \mathbf{k}^N | L'_{ab} | \mathbf{k}'^N \rangle$ は、図 1 に列挙してあるいくつかのバーテックスの組み合わせで描かれる。ダイアグラムではゼロでない波数をもった粒子の発展子を実線であらわし波数ゼロの粒子は破線で表すか、あるいは何も書かない。必要に応じて、実線の上に粒子番号、あるいはその波数を付して描く。

Prigogine-Balescu のバーテックスに加えて、図 2 で示した (a) と (e) も使うことにする。図 2 のバーテックス (a) が $i\hat{K}_1$ に対応していることに注意。

さて、ダイアグラムの使い方の例として、 $\delta\Psi_1^{(q)}(z)$ の中で 2 モード過程のみで構成される部分を考えよう。この部分に対応する表現式を見つけるために、次式によって定義さ

$$\begin{aligned}
 \text{(a)} \quad & \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \bullet \text{---} \\ 1 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \circ \text{---} \\ 1 \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \bigcirc \text{---} \\ 2 \end{array} \\
 & = \begin{array}{c} 1 \\ \text{---} \circ \text{---} \\ 1 \end{array} \times (1 + \hat{P}_{12}) \\
 \\
 \text{(e)} \quad & \begin{array}{c} 1 \\ \diagdown \\ \bullet \\ \diagup \\ 2 \end{array} \text{---} 1 = \begin{array}{c} 1 \\ \diagdown \\ \text{---} \\ \diagup \\ 2 \end{array} \text{---} 1 + \begin{array}{c} 1 \\ \diagdown \\ \text{---} \\ \diagup \\ 2 \end{array} \text{---} 2 \\
 & = \begin{array}{c} 1 \\ \diagdown \\ \text{---} \\ \diagup \\ 2 \end{array} \text{---} 1 \times (1 + \hat{P}_{12})
 \end{aligned}$$

図 2: この図は、図 1 のバーテックスの足し算で定義され、(a)=(a')+(a'') と (e)=(e')+(e'') である。

れる m モード過程に対する「再規格化された発展子」を考えよう：

$$\begin{aligned}
 G_m(z) &= P_N^{(m)} \frac{1}{z - P_N^{(m)}(L_0 + L')P_N^{(m)}} \\
 &= P_N^{(m)} \frac{1}{z - L_0} \sum_{n=0}^{\infty} \left[P_N^{(m)} L' P_N^{(m)} \frac{1}{z - L_0} \right]^n \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

ここでは、射影演算子が N 粒子状態に作用するものであることを示すために、前には書かなかった指標 N をあからさまに書いておいた。これを使うと 2 モード過程のみからくる N 粒子衝突演算子に対する寄与 $\delta\psi^{(q)}(z; 2)$ は

$$\delta\psi^{(q)}(z; 2) = P_N^{(q)} L' G_2(z) \lambda L' P^{(q)} \quad (6.2)$$

で与えられる。ここで、 $\delta\psi^{(q)}(z; m)$ のなかの m はこの衝突演算子が m 個の波数ベクトルを持った m モード過程に対して定義されていることを示している。 N 粒子に関するこの $\delta\psi^{(q)}(z; 2)$ を着目粒子 1 以外の粒子の変数で積分すると、1 粒子既約衝突演算子 $\delta\Psi^{(q)}(z; 2)$ が得られる。図 3 には (6.1) の右辺の幾何級数を使ってこの衝突演算子をダイアグラムで表現したものが示されている。

図 3 に現れる再規格化された発展子はダイアグラムを使って、図 4 で示されている図の和として太線で定義されている。図 3 の各ダイアグラムの一番左に現れる図 1 の中の (c) 型のバーテックスは、(4.10) の最後の項の $P_N^{(q)} L' Q_N^{(q)}$ に対応しており、その各ダイアグラムの残りの部分は $C^{(q)}(z)$ に対応している。

$$\delta\Psi_1^{(a)}(z;2) = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} + \dots$$

図 3: 幾何級数を使って得られた突演算子 $\delta\Psi^{(a)}(z;2)$ の図による表現。太線は図 4 で定義されている。

$$\text{---} \text{---} \text{---} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \bullet \bullet \text{---} + \dots$$

図 4: バーテックス (a) を繰り返り込んで再規格化された発展子の図による表現。

一般に $\delta\psi^{(a)}(z)$ は、任意の m をもった m モード過程を含んだもっと複雑な過程から成っている。図 5 に、3 モード過程に対応するダイアグラムの一つを例示してある。

図 3 に対応する幾何級数を足し上げることによって得られるところの相互作用の部分発展子の中に繰り返り込んだ表現を使うと、1 粒子既約衝突演算子 $\delta\Psi^{(a)}(z;2)$ の表現として、

$$\delta\Psi_1^{(a)}(z;2) = \frac{n}{(2\pi)^d} \sum_{\mathbf{k}} \int d\mathbf{v}_2 \langle 1_{\mathbf{q}}, 2_0 | it^{(12)} g_2^{(12)}(z) it^{(ab)} (1 + \hat{P}_{12}) \varphi_{eq}(v_2) | 1_{\mathbf{k}}, 2_0 \rangle \quad (6.3)$$

が得られる。ここで、2 粒子既約発展子 $g_2^{(ab)}(z)$ は

$$\begin{aligned} g_2^{(ab)}(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} g_{2R}^{(ab)}(z) [i(2\pi)^{-d_t(ab)} g_{2R}^{(ab)}(z)]^n \\ &= \frac{1}{z - L_0^{(ab)} - i\hat{K}_a - i\hat{K}_b - i(2\pi)^{-d_t(ab)}} \end{aligned} \quad (6.4)$$

で定義される。さらに「リング発展子」は

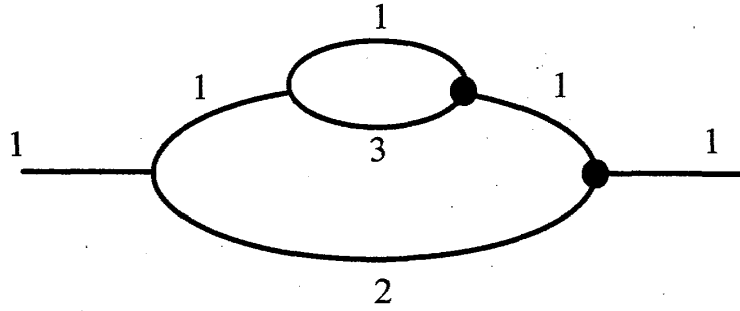
$$g_{2R}^{(ab)}(z) = \frac{1}{z - L_0^{(ab)} - i\hat{K}_a - i\hat{K}_b} \quad (6.5)$$

で定義され、 $L_0^{(ab\dots c)} \equiv L_0^{(a)} + L_0^{(b)} + \dots + L_0^{(c)}$ である。時間 $t > 0$ に対して、これら発展子としては複素数 z の上半面から下半面に解析接続したものを使わなくてはならない。

図 3 に描かれているダイアグラムと (6.3) の表現の間には密接な関係がある。各ダイアグラムの一番左側、図 1 での (c) 型のバーテックスは $nit^{(12)}$ に対応し、一番右側の (e) 型のバーテックスは $it^{(ab)}(1 + \hat{P}_{12})\varphi_{eq}(v_2)$ に対応し、中間の (d) 型のバーテックスは (6.4) の $i(2\pi)^{-d_t(12)}$ に対応している。さらに、中間の再規格化された水平線は (6.5) のリング発展子に対応している。表 1 に図 1 と 2 のなかのバーテックスと既約衝突演算子の中に現れる表現式の完全な対応を挙げておく。

さて、(6.3) の中の寄与に対して、(6.4) の和の第一項を他から分離することによって、この衝突項を

$$\delta\Psi_1^{(a)}(z;2) = \delta\Psi_1^{(a)}(z;2R) + \delta\Psi_1^{(a)}(z;2R') \quad (6.6)$$


 図 5: $\delta\psi^{(q)}(z)$ に寄与する 3 モード過程の例。

(a) $i\hat{K}_1$	(b) $nit^{(12)}$	(c) $nit^{(12)}$
(d) $i(2\pi)^{-d}t^{(12)}$	(e) $i(2\pi)^{-d}t^{(12)}(1 + \hat{P}_{12})\varphi_{\text{eq}}(v_2)$	(f) $i(2\pi)^{-d}t^{(12)}(1 + \hat{P}_{12})\varphi_{\text{eq}}(v_2)$

表 1: 熱平衡状態近傍を取り扱う場合、図 1 と 2 で定義されたバーテックスに対応した表現式

と分離しよう。ここで、 $\delta\Psi_1^{(q)}(z; 2R)$ は (6.3) の中で $g_2^{(ab)}$ を $g_{2R}^{(ab)}$ と置き換えたものとして定義され、また、 $\delta\Psi_1^{(q)}(z; 2R')$ は (6.4) の和の残りの部分からの寄与に対応したものである。演算子 $\delta\Psi_1^{(q)}(z; 2R)$ は良く知られており ([20] の第 X 章参照)、 $z = \epsilon \rightarrow +i0$ に対して「リング演算子」とよばれているものである。この演算子は、2 モード結合の寄与に対して媒質中の粒子との任意の数の衝突からの寄与を表している。

7 相関の真空部分空間でのリング演算子

この章では相関の真空部分空間 $\nu = 0$ に属した、衣を着た 1 粒子速度分布関数 $\varphi_{j;1}^{(0)}(\mathbf{v}_1, t)$ に対する運動論的方程式を考える。 $\mathbf{q} = 0$ の均一な場合には、この分布関数に関して (5.2) に対応した、

$$\varphi_{j;1}^{(0)}(\mathbf{v}_1, t) \equiv V^{N/2} \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N | P^{(0)} | F_j^{(0)} \rangle \langle \tilde{F}_j^{(0)} | \rho(t) \rangle \quad (7.1)$$

に対する運動論的方程式

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{j;1}^{(0)}(\mathbf{v}_1, t) = \Psi_1^{(0)}(Z_j^{(0)}) \varphi_{j;1}^{(0)}(\mathbf{v}_1, t) \quad (7.2)$$

が得られる。ここで、

$$\Psi_1^{(0)}(z) \equiv iK_1^B + \delta\Psi_1^{(0)}(z) \quad (7.3)$$

である。

この方程式を通常の方法分布関数に対する伝統的な運動論的方程式と比べて見るのは興味深い。通常の方法分布関数の場合、一般化されたマスター方程式 (1.1) に「マルコフ近似」を施したものを積分して得られる形式的な漸近的運動論的方程式の中での、リング演算子を取り扱っている。(1.1) に現れる演算子の上の記号 \sim は (4.10) で定義されている演算子の $\nu = 0$ の場合の逆ラプラス変換を表している。マルコフ近似では $\rho(t-t')$ を $\rho(t)$ で近似し、また、初期条件の記憶効果を表す $\tilde{D}^{(0)}(t)$ を無視する。さらに、(1.1) の積分の上限について $t \rightarrow +\infty$ の極限でも積分値が存在するとの楽観的な仮説を使うと、形式的に

$$i \frac{\partial}{\partial t} P^{(0)} \rho(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \psi^{(0)}(+i\epsilon) P^{(0)} \rho(t) \quad (7.4)$$

という形のマルコフ方程式が得られる。今後は ϵ を正の無限小 $\epsilon \rightarrow 0+$ を表すものとして、 \lim の記号を一々書かないことにする。さらにこのマルコフ方程式の両辺を粒子 1 を除いた残りの粒子の速度で積分し、熱平衡状態近傍で線形化近似を行うと、(1.3) で定義された裸の方法分布関数形式的 $\phi(\mathbf{v}_1, t)$ にたいする近似的運動論的方程式として、

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{v}_1, t) = [iK_1^B + \delta\Psi_1^{(0)}(+i\epsilon)] \phi(\mathbf{v}_1, t) \quad (7.5)$$

が得られる ([20] の Eq.(X.73) 参照)。

これとは対照的に、衣を着た方法分布関数に対する我々の方程式 (7.2) では衝突演算子の因子の値は $z = +i\epsilon$ ではなくて、有限な値 $z = Z_j^{(0)} \equiv -i\xi_j^{(0)}$ が現れている。このように因子の値がゼロからずれているのは、我々の衝突演算子の固有値問題が (4.9) で見るように非線形であることに起因している。付録 A で示してあるように、 $\xi_j^{(0)} \neq 0$ に対する緩和モードに対して、その大きさは $\xi_j^{(0)} \sim \gamma$ の程度である。そして我々の演算子 $\delta\Psi_1^{(0)}(Z_j^{(0)})$ の物理的意味は、その衝突過程が「吸収媒質」の中で起こっているということである。

演算子 $\delta\Psi_1^{(0)}(z)$ に対して 2 体モード過程の中の寄与 $\delta\Psi_1^{(0)}(z; 2R)$ だけを残すと、比較的濃密度系での「リング近似」が得られる。衣を着た方法分布関数に対する我々の演算子 $\delta\Psi_1^{(0)}(Z_j^{(0)}; 2R)$ と、通常の方法分布関数に対する (7.4) の中の伝統的なリング演算子の違いは、本質的である。何故なら、 $d = 2$ の場合に我々の演算子は有限の値を持つが、通常の方法演算子は発散するからである。そのことを見るために、リング演算子を $\delta\Psi_1^{(0)}(z; 2R) = \delta\bar{\Psi}_1^{(0)}(z; 2R) + R_{nh}$ のように 2 つの部分に分解してみよう。ここで、上付きバーを持った演算子はそれが (6.3) の中の積分でその領域を $|\mathbf{k}| < k_0$ に限った、流体力学的モードからくる寄与を表しており、 R_{nh} は残りの非流体力学的モードからくる寄与を表している。さらに、(5.22) の中の $T_q^{(12)}$ を $T_0^{(12)}$ で近似する。その結果、リング発展子 (6.5) の中の $a = 1$ と 2 に対する \hat{K}_a は K_a^B で近似される⁸。

付録 A の式 (A.1) の中の $\alpha = 3$ と 4 にそれぞれ対応したズレ・モードと熱モードに関連した拡散モードが、 $d = 2$ に対して伝統的なリング演算子を発散させることは良く知られ

⁸この論文では固い球の大きさから来る体積粘性率に対する効果については論じないことにする。それについては、[20] の第 VI 章と [23] を参照。

ている [20]。それ故、ここでは我々の衝突演算子に対するそれらのモードから来る寄与に付いて焦点を絞って議論しよう。熱力学的極限で (6.3) のなかでの拡散モードに渡つての積分は、

$$\delta\bar{\Psi}_1^{(0)}(Z_j^{(0)}; 2R) \sim in \left(\frac{\gamma}{n}\right)^2 \int_0^{k_0} dk \frac{k^{d-1}}{k^2 D_\alpha^B + \xi_j^{(0)}} \quad (7.6)$$

によって評価される大きさの程度の寄与をもたらす。ただし、ここでは z に $Z_j^{(0)} = -i\xi_j^{(0)}$ を代入し、 $t^{(12)} \sim T_0^{(12)} \sim \gamma/n$ と近似し、さらに、(6.5) の分母の $-ik \cdot v_{12} + K_1^B + K_2^B$ を $k^2 D_\alpha^B$ で置き換えた。この式で角度積分については、それが積分の大きさの程度を評価するについて重要でないので、それを省略した (もっと詳しくは、[20] の第 XI 章を参照)。この積分は $\xi_j^{(0)} \sim \gamma$ に対して全ての次元で有限である。3次元についてはそのことは良く知られているが、(7.6) は 2次元でも有限値をもっている。実際、(7.6) にボルツマンの拡散係数の大きさ $D_\alpha^B \sim D \equiv \langle v \rangle / k_0$ を代入すると、 $d = 2$ 対して

$$\delta\bar{\Psi}_1^{(0)}(Z_j^{(0)}; 2R) \sim i\gamma n_0 \ln 2 \quad (7.7)$$

が得られる。さらにリング演算子の非流体力学的部分が線形化されたボルツマン衝突演算子に対する有限な補正項を与えることは良く知られている [10, 20, 21]。したがって、衣を着た分布関数に対する我々の運動論的マルコフ方程式は全ての次元で存在していることになる。

このことは、(7.6) の積分が $\xi_j^{(0)}$ を無限小量 ϵ で置き換えたものが $d = 2$ に対して $\ln \epsilon$ と対数的に発散してしまい、したがって、通常の分布関数に対する (7.5) の右辺が発散してしまうことと比べて著しい違いを示している。このことは、2次元の気体系と云えども、系は熱平衡状態に近づくことができるが、それにあたって非マルコフ効果が、3次元系よりも重要になるであろうという、我々の直感と一致している。

ここで得られた結果は、分子運動論的方程式が示している不可逆性を、物理学の基本方程式から得られる力学過程の厳密な性質として捉えるリウビル演算子の複素スペクトル解析が、不可逆性を、我々の処理能力の限界に根拠をおいた近似の結果得られる性質として捉える伝統的立場と比べて、如何に生産的であるかを具体的に示している。

8 流体力学的モード

次に、もっと複雑な $\mathbf{q} \neq 0$ の場合の非均質成分 $\Psi_1^{(\mathbf{q})}$ について考える。この場合、2体モードまで考慮に入れると、右固有状態に対する固有値問題は

$$\Psi_1^{(\mathbf{q})}(Z_j^{(\mathbf{q})}; 2) |r_j^{(\mathbf{q})}(1)\rangle\rangle = Z_j^{(\mathbf{q})} |r_j^{(\mathbf{q})}(1)\rangle\rangle \quad (8.1)$$

で与えられる。ただしここで $\Psi_1^{(\mathbf{q})}(Z_j^{(\mathbf{q})}; 2)$ は、(5.18) の最後の項を (6.3) で近似したものである。 $d = 3$ で $|\mathbf{q}| < k_0$ についての流体力学的場合に対して、この方程式は古典流体に

おける非解析的な分散公式の議論の際に Ernst と Dorfman によって導入された固有値方程式と同じものである [12]。その場合に、彼らは固有値に $q^{5/2}$ で表される、 $q=0$ のところで非解析的にな項が含まれていることを示した。ここでは、 $d=2$ に対して、彼らと同様な計算をしよう ([18] も参照)。

そのために次式で定義される、付録 A に示してある流体力学的モード $\{\alpha\} = \{1, 2, 3, 4\}$ からの寄与を抜き出す射影演算子 P_{h0} と、それに直交する射影演算子 $Q_{h0} \equiv 1 - P_{h0}$ を導入する [(5.26) 参照]:

$$P_{h0} = \sum_{j \in \{\alpha\}} |\phi_j^0(1)\rangle\rangle \langle\langle \phi_j^0(1)| \quad (8.2)$$

これから論じる $\Psi_1^{(q)}(Z_j^{(q)}; 2)$ の固有状態は、 $P^{(\nu)}$ と $Q^{(\nu)}$ を使ったリウビリアン固有状態の表現 (4.6) と形の上で同じである。ただし、ここでは L の役割を $\Psi_1^{(q)}(z; 2)$ が演じている。実際、(8.1) に P_{h0} と Q_{h0} を作用させると、 $P_{h0}|r_j^{(q)}(1)\rangle\rangle$ と $Q_{h0}|r_j^{(q)}(1)\rangle\rangle$ についての連立方程式が得られる。その連立方程式から Q_{h0} 成分を消去すると、 P_{h0} 成分に対して、

$$[Z_j^{(q)} - \Phi_h^{(q)}(Z_j^{(q)}; 2)]P_{h0}|r_j^{(q)}(1)\rangle\rangle = 0 \quad (8.3)$$

が得られる。ただし、

$$\Phi_h^{(q)}(z; 2) \equiv P_{h0}\Psi_1^{(q)}(z; 2)P_{h0} + P_{h0}\Psi_1^{(q)}(z; 2)C_h^{(q)}(z; 2)P_{h0} \quad (8.4)$$

であり、また、

$$C_h^{(q)}(z; 2) \equiv \frac{1}{z - Q_{h0}\Psi_1^{(q)}(z; 2)Q_{h0}} Q_{h0}\Psi_1^{(q)}(z; 2)P_{h0} \quad (8.5)$$

である。そして、(8.1) の固有値問題の解は

$$|r_j^{(q)}(1)\rangle\rangle = (P_{h0} + Q_{h0}C_h^{(q)}(Z_j^{(q)}; 2)P_{h0})|r_j^{(q)}(1)\rangle\rangle \quad (8.6)$$

で与えられる。

(8.1) の固有値は (8.3) の左辺の演算子に付随した行列式のゼロ点を探すことによって得られる。そのようにして、分散公式、

$$\text{Det}|z\delta_{ij} - iq\sigma_{ij}(\mathbf{q}, z) - q^2W_{ij}(\mathbf{q}, z)| = 0 \quad (8.7)$$

が得られる。ここで、

$$-iq\sigma_{ij}(\mathbf{q}, z) = \langle\langle \phi_i^0(1)|\Psi_1^{(q)}(z; 2)|\phi_j^0(1)\rangle\rangle \quad (8.8a)$$

$$-q^2W_{ij}(\mathbf{q}, z) = \langle\langle \phi_i^0(1)|\Psi_1^{(q)}(z; 2)C_h^{(q)}(Z_j^{(q)}; 2)|\phi_j^0(1)\rangle\rangle \quad (8.8b)$$

$$(8.8c)$$

である。

$z = -i\xi$ と置くと、分散公式 (8.7) は $d = 3$ に対して Ernst と Dorfman によって導かれたものと完全に同じになる [12]。彼らはボルツマンの拡散係数、

$$\xi_{0,\alpha}^{(q)} = -iqc\sigma_\alpha - q^2 D_\alpha^B \quad (8.9)$$

を第ゼロ近似として上の分散公式を逐一解くことに依って、輸送係数に対して上で述べた $d = 3$ に対する $q^{5/2}$ の非解析的を見つけた。その後、この計算は $d = 2$ の場合にも拡張された [18]。その場合の計算がすでにその文献に詳しく提示されているので、ここでは同じ計算を繰り返さず、その主な結果だけを示すことにする。詳細に興味ある読者は原論文を参照してほしい。 $d = 2$ の場合、対 $|\mathbf{q}| \ll k_0$ に対して固有値の q 依存性は

$$\xi_\alpha^{(q)} = -iqc'\sigma_\alpha - q^2 D'_\alpha + q^2 \Delta_\alpha \ln\left(\frac{q}{k_0}\right) \quad (8.10)$$

で与えられる。ここで、 c' 、 D'_α と Δ_α は q に依らない正の定数である。それらの具体的な形はここでの議論では重要ではない。音速 c' と拡散係数 D'_α は線形化されたボルツマン方程式から計算されるものにリング過程からの補正を施したものである。その補正項は n_0 が小さい程小さくなる。

(8.10) の最後の項もまたリング過程からの補正である。この補正項は $q = 0$ のところで非解析的である。小さな n_0 に対して $\Delta_\alpha/D'_\alpha \sim n_0$ であることが知られている。比較的濃密度な系に対して、広い範囲の q に関して拡散項が優勢である。そして $q/k_0 < \exp(-1/n_0)$ を満たす極端に小さな q の値に対して、非解析的な項が重要になる。

この節で得られた結果は、衣を着た分布関数についての運動論的マルコフ方程式を通して任意の次元に対して輸送係数を定義できることを示している点で興味がある。ここに現れた輸送係数 c' 、 D'_α と Δ_α が、通常分布関数の汎関数である、集団モードについての衣を着た分布関数 $P^{(q)} \Pi^{(q)} \rho$ から得られたものに対してのみ定義されていることを強調するのは重要である。このことは、通常分布関数に対する運動論的方程式 (1.1) をマルコフ化して論じられる輸送係数が $d = 2$ の場合に発散してしまう事実と著しい対照をなしている。

この節を終わるにあたって、相関の真空成分についての運動論的方程式 (7.2) と非均質成分 (5.21) の間の関係について補足的な解説をしよう。(5.21) で単純に $\mathbf{q} = 0$ と置くと (7.2) と同じものが得られる。しかし、この関係については注意が必要である。第2節で述べたように、ハミルトン系であるにもかかわらず不可逆な運動論的方程式が得られた最も重要な理由は、熱力学的極限で分布関数のフーリエ成分がデルタ関数特異性をもっており、その結果、その分布関数がヒルベルト空間に属していなかったからである。この特異性の結果、 $\mathbf{q} = 0$ に対する非均一成分 $f_{j,1}^{(q)}(\mathbf{v}_1, t)$ は真空成分 $\phi_j^{(0)}(\mathbf{v}_1, t)$ とは等しくない (例えば、(3.20) の $f_q(\mathbf{v}_1, t)$ で $\mathbf{q} = 0$ と置いた部分は、第一項の $\phi(\mathbf{v}_1, t)$ ではなく、その項より $1/\Omega$ だけ小さな量である)。したがって、 $d = 2$ に対して相関の真空成分に対する

衝突演算子 $\Psi_1^{(0)}$ が発散せずに良く定義できたのに、非均質成分に対する衝突演算子 $\Psi_1^{(q)}$ が $q=0$ のところで $\ln q$ に比例する対数特異性を持っていることに驚くべきではない。また、この対数特異性は大変弱い特異性なので、非均一成分に対する運動論的方程式を座標表示したものは良く定義された方程式であることにも、注意する必要がある。

9 速度自己相関関数

前の章では $P^{(0)} \Pi^{(0)}$ と $P^{(q)} \Pi^{(q)}$ に関連した衣を着た分布関数の発展についてだけ考察した。しかしながら、ここで紹介した方法は通常の分布関数 (1.3) や自己相関関数等のもっと一般的な問題にも使うことが出来る。この場合、全てのサブダイナミクス $\Pi^{(\nu)}$ からの寄与を計算することになる。これから示すように、自己相関関数 (1.6) に対して全てのサブダイナミクス $\Pi^{(\nu)}$ を考慮すると、ちょうど繰り込み群の場合と同じように、臨界次元は $d=4$ となる。すなわち、 $d > 4$ の場合には通常のグリーン=久保公式が成り立ち、 $d < 4$ の場合には記憶効果の減衰が遅くなりすぎて、その公式は成り立たなくなる。この結論は、臨界次元が $d=2$ であるという伝統的な見解と抵触するので、長時間テールについての詳細な議論をする必要がある。

さて、(4.19) の部分空間 $\Pi^{(2)}$ のなかにある 2 体相関の部分空間 $|F_j^{(2)}\rangle \langle \tilde{F}_j^{(2)}|$ に対する最も簡単な「リング過程」からの寄与の計算を先ず考えよう。この部分空間では時間発展は $P^{(k,-k)}$ 空間のなかで起こるが、一方、初期条件 $\delta\varphi(\mathbf{v}_1; 0)$ と物理量 $v_{1,x}$ は共に相関の真空の部分空間にある。したがって、

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(t) = & \int d\mathbf{v}^N v_{1,x}(0, \mathbf{v}^N | P^{(0)} C^{(2)}(Z_j^{(2)}) P^{(2)} \\ & \times \exp[-i\psi^{(2)}(Z_j^{(2)})t] A^{(2)} P^{(2)} D^{(2)}(Z_j^{(2)}) P^{(0)} | \rho_N^{eq} \rangle v_{1,x} \end{aligned} \quad (9.1)$$

となる。この寄与は次の 3 つの部分からなっている：それは、(イ) 遷移 $P^{(0)} C^{(2)}(z) P^{(2)}$ 、(ロ) 部分空間 $P^{(2)} \Pi^{(2)} P^{(2)}$ の中の時間発展 $\exp[-i\psi^{(2)}(z)t] A^{(2)}$ 、(ハ) 遷移 $P^{(2)} D^{(2)}(z) P^{(0)}$ である。

我々は先ず、図 6 に描かれているリング・ダイアグラムによって記述される過程について考えることにする。その過程は、図 4 と図 7 で定義されている再規格化された発展子と、図 1 の中の (b) と (f) 型のバーテックスから構成されている。左端の (b) 型のバーテックスは上の遷移 (イ) に対応し、中間の 2 本の線は (ロ) の過程に対応し、そして右端の (f) 型のバーテックスは遷移 (ハ) に対応している。

図 7 中の全ての (a'') 型のバーテックスを足し上げることによって得られる再規格化された発展子の分母にはボルツマン=ローレンツ演算子 iK_1^{BL} が繰り込まれている。そこで、媒質中の着目粒子 1 以外のダミー粒子の変数に渡って積分を実行すると、 $C^{(2)}$ に対応した

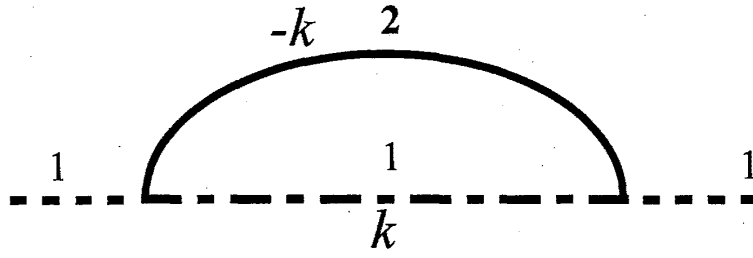


図 6: (9.1) に対応した 2 体相関の部分空間からなるリング・ダイアグラム。再規格化された発展子に対応する太実線や太破線などは図 7 で定義されている。

表現、

$$P^{(0)}C^{(2)}(Z_j^{(2)})P^{(2)} := \frac{n}{-i\xi_j^{(k,-k)} - iK_1^{BL}} \langle 1_0, 2_0 | it^{(12)} | 1_k, 2_{-k} \rangle \quad (9.2)$$

が得られる。ここで、 $\xi_j^{(k,-k)} \equiv iZ_j^{(k,-k)}$ であり、記号 $:=$ は N 粒子演算子とその既約された表現の間の対応を表している。同様に $\mathcal{D}^{(2)}$ に対して次の対応がある：

$$P^{(2)}\mathcal{D}^{(2)}(Z_j^{(2)})P^{(0)}v_{1,x}\rho_N^{eq} := \frac{1}{(2\pi)^d} \langle 1_k, 2_{-k} | it^{(12)} | 1_0, 2_0 \rangle \\ \times P^{(2)} \frac{1}{-i\xi_j^{(k,-k)} - iK_1^{BL}} v_{1,x}\varphi^{eq}(v_2) \quad (9.3)$$

部分空間 $\Pi^{(2)}$ における、(ロ) に対応した中間部分の発展の既約生成演算子は、 $\mathbf{v}_{12} \equiv \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ として、

$$\Psi^{(k,-k)}(Z_j^{(k,-k)}) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + iK_1^{BL} + iK_2^B + \delta\Psi^{(k,-k)}(Z_j^{(k,-k)}) \quad (9.4)$$

で与えられる。図 6 に対応した部分ではこの衝突演算子の最後の項 $\delta\Psi^{(k,-k)}(z)$ が無視されている。この近似は比較的濃密気体の場合には正当であり、この近似は「リング近似」と呼ばれている [20]。さらに、我々は中間部分 (ロ) の再規格化演算子 $A^{(2)}$ を $P^{(2)}$ によって近似する。この置き換えから来る誤差は n_0 の高次の補正項であり、したがって比較的濃密気体の場合にはその補正項を無視できるからである。それらの近似の結果、(ロ) の時間発展部分に対して、

$$e^{-i\psi^{(2)}(Z_j^{(2)})t}A^{(2)} := P^{(2)} \exp[(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + K_1^{BL} + K_2^B)t]P^{(2)} \\ = \sum_{j,j'} |\phi_{BL,j}^{(-k)}(1)\phi_{j'}^{(k)}(2)\rangle \exp[(\lambda_{BL,j}^k + \lambda_{j'}^{-k})t] \langle \langle \phi_{BL,j}^{(-k)}(1)\phi_{j'}^{(k)}(2) | \quad (9.5)$$

という対応が得られる。ここで、付録 A で論じられている $|\phi_j^{(k)}(2)\rangle$ は固有値 λ_j^k をもった線形化されたボルツマン演算子 $-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 + K_2^B$ の固有状態であり、 $|\phi_{BL,j}^{(-k)}(1)\rangle$ は固有値 $\lambda_{BL,j}^k$ をもったボルツマン=ローレンツ演算子の固有状態である [(A.7) 参照]。

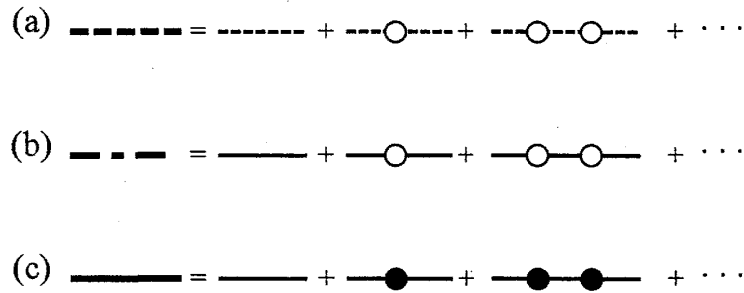


図 7: それぞれのバーテックスが繰り込まれた発展子。(a) と (b) には K_a^{BL} が繰り込まれ、(c) には K_b^B が繰り込まれている。

自己相関関数における長時間テール効果が、小さな波数ベクトル $k < k_0$ をもった流体力学的モードの中の拡散モードの寄与からくることは良く知られている (例えば [19] 参照)。それらのモードに対して、 $D \equiv \langle v \rangle / k_0$ として $\xi_\alpha^{(k, -k)} \sim k^2 D$ の大きさの程度をもつ。その一方で、 K_1^{BL} のゼロでない固有値は $\gamma = k_0 \langle v \rangle$ の大きさの程度である。したがって、(9.2) と (9.3) の分母のなかで K_1^{BL} の固有値に比べて $\xi_\alpha^{(k, -k)}$ を無視することができる。さらに、小さな波数ベクトルに対して $T_k^{(12)} \approx T_0^{(12)}$ と近似して良い。上の式 (9.2)、(9.3)、(9.5) に、これらの近似を施すと、熱力学的極限でこの部分空間内で最も遅い減衰をする最も重要な寄与として、

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}^{(2)}(t) &\approx \frac{nm\beta}{(2\pi)^d} \sum_{j \in \{\alpha\}} \int_{k < k_0} dk \int dv_1 dv_2 v_{1,x} \frac{1}{K_1^{BL}} T_0^{(12)} \phi_{BL,1}^{(-k)}(\mathbf{v}_1) \phi_j^{(k)}(\mathbf{v}_2) \\ &\times e^{(\lambda_{BL,1}^k + \lambda_j^{-k})t} \int dv'_1 dv'_2 \varphi_{eq}(v'_1)^{-1} \varphi_{eq}(v'_2)^{-1} \phi_{BL,1}^{(k)}(\mathbf{v}'_1) \phi_j^{(-k)}(\mathbf{v}'_2) \\ &\times T_0^{(12)} \frac{1}{K_1^{BL}} v'_{1,x} \varphi_{eq}(v'_1) \varphi_{eq}(v'_2) \quad (\text{for } t \gg t_r) \end{aligned} \quad (9.6)$$

が得られる。ここで $\hat{\Gamma}^{(2)}(t)$ は、全ての中間状態が流体力学的モード $\{\alpha\} = \{1, 2, \dots, d+2\}$ に制限された過程からくる寄与を表している。この論文では自己相関関数の長時間的振る舞いに興味があるという同意の下に、我々は以後 $t \gg t_r$ の条件を一々書かないことにする。

式 (3.22) で定義されている 2 体衝突演算子に対して $\hat{b}_v^{(12)} f(v_1^2 + v_2^2) = f(v_1^2 + v_2^2) \hat{b}_v^{(12)}$ が成り立つことから、(9.6) の一番右の因子 $\varphi_{eq}(v'_1) \varphi_{eq}(v'_2)$ を右側の $T_0^{(12)} / K_1^{BL}$ の演算子と交換させて、その左側に移動できる。その結果、Résibois と De Leener によって得られた、速度自己相関関数の長時間テールに対する表現と、完全に同じものが最終的に得られる ([20] の XII 章を参照) :

$$\hat{\Gamma}^{(2)}(t) \approx \frac{nm\beta}{(2\pi)^d} \sum_{j \in \{\alpha\}} \int_{k < k_0} dk |\mu_k^j|^2 e^{(\lambda_{BL,1}^k + \lambda_j^{-k})t} \quad (9.7)$$

ここで、

$$\mu_{\mathbf{k}}^j = \int d\mathbf{v}_1 d\mathbf{v}_2 v_{1,x} \frac{1}{K_1^{BL}} T_0^{(12)} \phi_{BL,1}^{(-\mathbf{k})}(\mathbf{v}_1) \phi_j^{(\mathbf{k})}(\mathbf{v}_2) \quad (9.8)$$

である。この式を使うと、長時間テール効果 ($\sim t^{d/2}$) について、例えば、 $d = 3$ に対して良く知られた結果 [20]、

$$\hat{\Gamma}^{(2)}(t) \approx \frac{2}{3n} \frac{1}{\left[4\pi(D^B + \frac{\eta^B}{\rho_m})t\right]^{3/2}} \quad (9.9)$$

が導かれる。ここで、 D^B はボルツマンの拡散係数、 η^B はその剪断粘性係数、そして $\rho_m = mn$ は質量密度である。

10 高次の相関からの寄与の大きさの評価

前節では、リウビル演算子の複素固有値問題に基づいたサブダイナミックスの手法を使って長時間テールを計算した場合、2体相関の部分空間の寄与だけを取り入れた結果が、良く知られた2モード結合の寄与だけを取り入れて計算された結果と一致することを納得してもらうために、いくぶん詳しい計算に基づいて説明した。この節では、もっと高次の相関からくる寄与について、その大きさを評価する。しかしながら読者も予想されるごとく、相関の程度を上げていくと、その計算の複雑さが著しく増大する。そこで、この論文では、それらの寄与の大きさだけの評価することにする。

これから示す粗い計算が、大きさの評価に関する限り正当なものであることを納得してもらうために、先ず始めにこの評価の方法が上の2体相関に対する結果(9.7)と同じ結果を導きだすことを示そう。以下に見るように、この簡略化された計算法は、相関関数の評価に対する流体力学的モードや非流体力学的モードの役割の本質を理解するについて、簡単で強力な視点を与えてくれる。

先ず、 $v_{1,x}$ がボルツマン=ローレンツの衝突演算子 $K_{BL,1}$ の衝突不変量ではないことに注意する。そのことは、射影演算子 Q_{0h}^{BL} を使って、

$$v_{1,x} = v_{1,x} Q_{0h}^{BL} \quad (10.1)$$

が成り立っていることを意味する。ここで $Q_{0h}^{BL} \equiv 1 - P_{0h}^{BL}$ であり、(8.2) に対応した射影演算子 P_{0h}^{BL} は、付録Aで論じられている $K_{BL,1}$ の固有状態を使って

$$P_{0h}^{BL} \equiv |\phi_{BL,1}^{(0)}(1)\rangle \langle\langle \phi_{BL,1}^{(0)}(1) | \quad (10.2)$$

で定義される。同様に、 $\mathbf{q} \neq 0$ に対する射影演算子 $Q_h^{BL}(\mathbf{a}) \equiv 1 - P_h^{BL}(\mathbf{a})$ と $Q_h^B(\mathbf{a}) \equiv 1 - P_h^B(\mathbf{a})$ 、及び、

$$P_h^{BL}(\mathbf{a}) \equiv |\phi_{BL,1}^{(\mathbf{a})}\rangle \langle\langle \phi_{BL,1}^{(-\mathbf{a})}(\mathbf{a}) |, \quad P_h^B(\mathbf{a}) \equiv \sum_{j \in \{\alpha\}} |\phi_j^{(\mathbf{a})}(\mathbf{a})\rangle \langle\langle \phi_j^{(-\mathbf{a})}(\mathbf{a}) | \quad (10.3)$$

を定義して置く。ここで、 $P_h^{BL}(a)$ と $P_h^B(a)$ は流体力学的モードに対する射影演算子である。

この射影演算子を使うと、(9.6) の本質的は部分は、

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}^{(2)}(t) \sim \frac{n}{\langle v \rangle^2} \sum_{\{\alpha\}} \int dk \int dv_1 dv_2 v_{1,x} \frac{1}{\gamma} Q_{0h}^{BL} T_0^{(12)} P_h^{BL}(1) P_h^B(2) \phi_{BL,1}^{(-k)}(v_1) \phi_\alpha^{(k)}(v_2) e^{-k^2 Dt} \\ \times \int dv'_1 dv'_2 \phi_{BL,1}^{(k)}(v'_1) \phi_\alpha^{(-k)}(v'_2) P_h^{BL}(1) P_h^B(2) T_0^{(12)} \frac{1}{\gamma} Q_{0h}^{BL} v'_{1,x} \end{aligned} \quad (10.4)$$

と表現できる。ここで、記号 \sim は大きさの程度を表し、またこの表現では、 K_1^{BL} を γ で置き換え $\lambda_{BL,1}^k + \lambda_j^{-k}$ を $-k^2 D$ で置き換えた。さらに、 $K_1^{BL} \sim nT_0^{(12)}$ であるから、流体力学的モードと非流体力学的モードの間の遷移に対する $T_0^{(12)}$ の大きさは

$$Q_{0h}^{BL} T_0^{(12)} P_h^{BL}(1) P_h^B(2) \sim P_h^{BL}(1) P_h^B(2) T_0^{(12)} Q_{0h}^{BL} \sim \frac{\gamma}{n} \quad (10.5)$$

の程度であると評価できる。

自明な記号を用いることによって、この評価式を

$$Q_h T_0^{(12)} P_h \sim P_h T_0^{(12)} Q_h \sim \frac{\gamma}{n} \quad (10.6)$$

と省略して書くこともある。同様な議論から、

$$Q_h T_0^{(12)} Q_h \sim Q_h T_0^{(12)} Q_h \sim \frac{\gamma}{n} \quad (10.7)$$

の評価式も得られる。一方、 $P_h T_0^{(12)} P_h$ の遷移の評価に対しては慎重を要するので、それについては以下に3体相関からの寄与の大きさを評価するとき、詳しく論じる。

この評価(10.6)を(10.4)に代入し、 $\phi_{BL,1}^{(q)}(v_1)$ と $\phi_\alpha^{(q)}(v_2)$ を、それぞれ q のべきによる展開の最低次の寄与 $\phi_{BL,1}^0(v_1) = \varphi_{eq}(v_1)$ と $\phi_\alpha^0(v_2)$ で近似する。さらに、平均自由行程の逆数を単位とした、無次元の波数ベクトル $\mathbf{y} = l_m \mathbf{k} = \mathbf{k}/k_0$ を導入する。そして、どの衝突不変量を使って(10.4)の中の速度積分を実行しても、それらが $\langle v \rangle^2$ に大きさ1の程度を掛けた物を与えるという事実を使い、さらに、積分変数に変換 $\mathbf{x} = \mathbf{y}\sqrt{\tau}$ を施すと、 $\hat{\Gamma}^{(2)}(t)$ に対する大きさの程度の評価として、最終的に

$$\hat{\Gamma}^{(2)}(t) \sim \frac{1}{n} \int dk e^{-k^2 Dt} \sim \frac{k_0^d}{n} \int dy e^{-y^2 \tau} \sim \frac{g}{\tau^{d/2}} \quad (10.8)$$

が得られる。この結果は、(9.7) あるいは $d=3$ の場合の(9.9)と同程度の、整合した大きさを与えている。

次に、3体相関の部分空間 $|F_\alpha^{(3)}\rangle \langle \tilde{F}_\alpha^{(3)}|$ で図8に対応した、全ての中間状態が流体力学的モードからなる寄与の大きさを評価しよう。これ以降の図では図7の(a)で示した両側の太破線の発展子を描かないことにする。

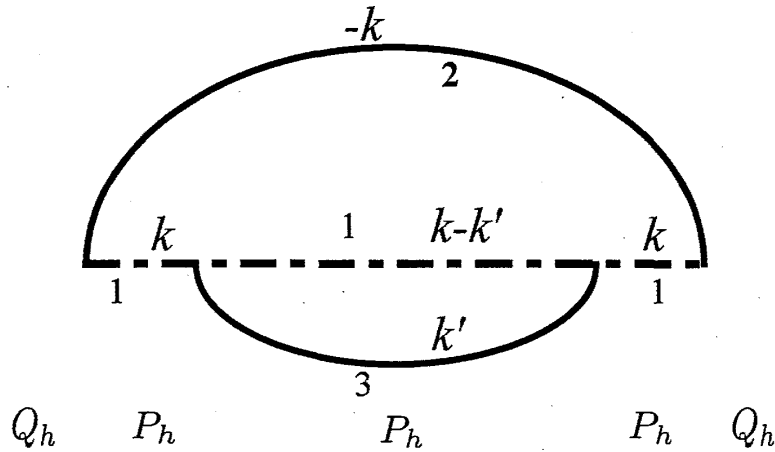


図 8: (10.9) に対応した 3 体相関の部分空間のリング・ダイアグラム。ここでは中間状態は全て流体力学的モードに限られている場合を考える。

式 (9.2) と (9.3) と同じように分母を線形化されたボルツマン演算子を使って再規格化すると、この流体力学的モードから来る寄与は

$$\begin{aligned}
 \hat{I}^{(3)}(t) &\sim n^2 \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} + K_1^{BL}} Q_h \langle 1_0, 2_0 | t^{(12)} | 1_{\mathbf{k}}, 2_{-\mathbf{k}} \rangle P_h \\
 &\times \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + K_1^{BL} + K_2^B} P_h \langle 1_{\mathbf{k}}, 3_0 | t^{(13)} | 1_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, 3_{\mathbf{k}'} \rangle P_h \\
 &\times \exp[(-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{v}_1 + K_1^{BL} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 + K_2^B - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{v}_3 + K_3^B)t] \\
 &\times P_h \langle 1_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, 3_{\mathbf{k}'} | t^{(13)} | 1_{\mathbf{k}}, 3_0 \rangle P_h \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + K_1^{BL} + K_2^B} \\
 &\times P_h \langle 1_{\mathbf{k}}, 2_{-\mathbf{k}} | t^{(12)} | 1_0, 2_0 \rangle Q_h \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} + K_1^{BL}} \quad (10.9)
 \end{aligned}$$

となる。今後の表現では、大きさの程度を評価するに当たって本質的でない速度積分の部分を書かずに省略することにする [この積分は (10.4) で説明したのと同じ理由で、 $\langle v \rangle^2$ に比例しており、一番前にある因子 $1/\langle v \rangle^2$ を相殺する]。拡散モードに対して、 $D_i \sim D$ とし、それらは

$$\xi_\alpha^{(3)} \sim |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 + k^2 D_1 + k'^2 D_2 \sim (k^2 + k'^2) D \quad (10.10)$$

と評価できる。したがって、最初と最後の分母の中の $\xi_\alpha^{(3)}$ は (9.1) の場合と同様に無視できて、

$$\frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} + K_1^{BL}} \approx \frac{1}{K_1^{BL}} \sim \frac{n}{\gamma} \quad (10.11)$$

と評価できる。それとは対照的に、中間の流体力学的モードからくる分母の中の $\xi_\alpha^{(3)}$ は、線形化されたボルツマン演算子 $-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 + K_1^{BL}$ と $-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_\alpha + K_\alpha^B$ の寄与の大きさが $\xi_\alpha^{(3)}$ と

同じ大きさの程度 $\sim k^2 D$ なので、無視することはできない。その結果、中間状態の分母は $k = k' = 0$ のところで発散する特異性をもっている。

式 (10.9) の中には (10.4) には現れなかった、次のような新しい型の遷移とそれを左右反転した遷移、すなわち、 $m \in \{\alpha\}$ に対する流体力学的モード間の遷移 $P_h T_{k'}^{(13)} P_h$ が現れている：

$$P_h \langle 1_{\mathbf{k}}, 3_0 | t^{(13)} | 1_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, 3_{\mathbf{k}'} \rangle P_h \sim \langle \langle \phi_{BL,1}^{(\mathbf{k})}(1) \varphi_{eq}(3) | T_{k'}^{(13)} | \phi_{BL,1}^{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} (1) \phi_m^{(\mathbf{k}')} (3) \rangle \rangle \quad (10.12)$$

一方、付録 C で詳しく証明してあるように、 $i, j, m, n \in \{\alpha\}$ に対して、

$$\langle \langle \phi_i^0(1) \phi_j^0(3) | T_0^{(13)} | \phi_m^0(1) \varphi_{eq}(3) \rangle \rangle = \langle \langle \phi_i^0(1) \varphi_{eq}(3) | T_0^{(13)} | \phi_m^0(1) \phi_n^0(3) \rangle \rangle = 0 \quad (10.13)$$

が成り立っている [(C.2) 参照]。それ故、(10.12) は $k \rightarrow 0$ かつ $k' \rightarrow 0$ の極限でゼロとなる。したがって、たとえば $k \sim k' < k_0$ の場合の (10.12) の型の遷移の大きさの程度は、

$$P_h T_{k'}^{(13)} P_h \sim \frac{k'}{k_0} \frac{\gamma}{n} \quad (10.14)$$

で与えられることになる。この k' 依存性は重要であり、この依存性のおかげで、波数ベクトルの積分を評価するときに $k' = 0$ の部分で起こる赤外特異性が相殺がされる。この式と (10.6) 及び (10.7) を比べてみると分かるように、 P_h と Q_h の間の遷移や、 Q_h と Q_h の間の遷移ではこのような相殺は起こらない。

$\xi_\alpha^{(3)}$ に対するここで述べた大きさの評価と (10.5) と (10.14) を (10.9) に代入し、再び、時間に依存した部分を線形化されたボルツマン衝突演算子の固有値の大きさの程度で置き換えると、最終的に次式で表される評価が得られる：

$$\begin{aligned} \hat{I}^{(3)}(t) &\sim n^2 \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \left(\frac{1}{\gamma}\right)^2 \left(\frac{\gamma}{n}\right)^2 \left(\frac{k'}{k_0} \frac{\gamma}{n}\right)^2 \left(\frac{1}{(k^2 + k'^2)D}\right)^2 e^{-(k^2 + k'^2)Dt} \\ &= \frac{1}{n^2} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \left(\frac{k'}{k_0}\right)^2 \left[\frac{k_0^2}{k^2 + k'^2}\right]^2 e^{-(k^2 + k'^2)Dt} \\ &\sim g^2 \tau (\tau^{-d/2})^2 \end{aligned} \quad (10.15)$$

ここでも (10.8) の時と同じような積分変数の変換を行った。

この (10.15) 式では全ての中間状態が流体力学的モード P_h の場合を評価したが、図 8 に対応する過程の中で長時間テールを与える遷移としては、この他に真ん中の状態だけが P_h で、残りの全てが Q_h の場合がある。この場合には、(10.9) に対応した式の全ての遷移が γ/n に比例し、また全ての発展子の分母が γ に比例することになるので、その大きさの評価は (10.8) をちょうど 2 乗した物と等しくなり、したがって、その大きさは $g^2 \tau^{-d}$ に比例する。それ故、その大きさは、全ての中間状態が流体力学的モードであった過程の大きさ (10.15) と比べて $1/\tau$ 倍小さくなり、長時間極限 $\tau \gg 1$ では、この過程からの寄与を無視することができる。

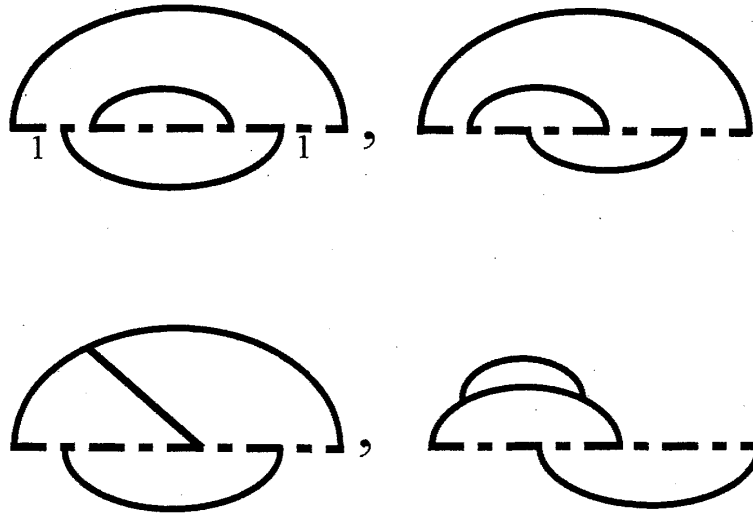


図 9: 中間状態を流体力学的モードだけに限った場合、4 体相関の部分空間の中でもっともゆっくりしたベキ減衰をするリング・ダイアグラムの例。

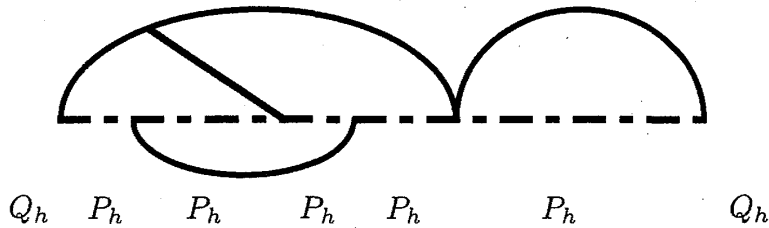


図 10: 中間状態を流体力学的モードだけに限った場合、4 体相関の部分空間の中で図 9 のダイアグラムよりも早くベキ減衰をするリング・ダイアグラムの例

上の結果で、(10.15) を (10.8) で割ると $g\tau^{(2-d)/2}$ が得られる。したがってこの比の臨界次元は $d = 2$ である。すなわち、 $d > 2$ では (10.15) は (10.8) よりも早く減衰する。

この結果は、(10.8) を (10.15) の 2 番目の積分と比べても導きだすことができる。実際、(10.15) は (10.8) と比べて $\nu = 3$ に対して余分な因子

$$\frac{\hat{\Gamma}^{(\nu)}(t)}{\hat{\Gamma}^{(\nu-1)}(t)} \sim \frac{1}{n} \int dk' \left(\frac{k'}{k_0}\right)^2 \left(\frac{k_0^2}{k^2 + k'^2}\right)^2 e^{-k'^2 Dt} \sim g\tau^{(2-d)/2} \quad (10.16)$$

をもっている。ただし、ここでも一番右の評価を得るのに、 $\mathbf{k} = k_0 \mathbf{y}$ と $\mathbf{k}' = k_0 \mathbf{y}'$ の変数変換を行った。

全ての中間状態が流体力学的モードに限られている場合には、式 (10.16) で示された評価は、任意の高次の相関 ν に対する $|F_\alpha^{(\nu)}\rangle \langle \tilde{F}_\alpha^{(\nu)}|$ 部分空間からの寄与に対する評価に拡張できる。図 9 と 10 に $\nu = 4$ の場合の代表的な過程を表すダイアグラムを示しておいた。これらの全ての図で両端の状態は Q_h の中にあり、全ての中間状態は P_h の中にあるもの

とする。上の例と同じように評価すると、図9の各ダイアグラムの大きさは全て同程度であり、全ての中間状態が P_h の場合にはそれらの寄与が $\nu = 4$ 部分空間の中では最も遅くベキ減衰し、そして、その大きさと $\nu = 3$ に対する図8の寄与の大きさの比は、やはり (10.16) で与えられる。それに対して図10の過程はもっと早く減衰する。

この大きさの評価は、任意の相関 ν に対して容易に拡張することができ、その結果を以下のようにまとめることができる：先ず、ある中間状態にある線の数 m を数える。そして、一番右側の外側の値 $m = 0$ から出発して、バーテックスによる遷移を経るごとにその数が1つずつ増し、最大の数 $m = \nu$ に到達した後、バーテックスによる遷移を経るごとにその数を1つずつ減らして、最終的に一番左側の $m = 0$ の状態に戻る過程が、中間状態を全て流体力学的モードに限った場合に対する最も遅くベキ減衰する寄与を与える。図9は $\nu = 4$ の場合の、そのよう過程の例であり、図10は、そうでない過程の例である。このように、ダイアグラムのトポロジーと長時間テールの寄与の間には密接な関係がある。

しかしながら驚いたことに、この型の過程が最も遅い減衰過程ではないのである。実際、もし中間状態の中に非流体力学的モードからの寄与を繰り込むと、もっと遅い減衰過程が得られることを次の節で示す。

11 非流体力学的モードの繰り込み

この節では、高次の相関の寄与の中で中間状態に非流体力学的モードが現れる過程からの寄与の大きさを評価する。先ず、図11に示されている $|F_\alpha^{(3)}\rangle\langle\tilde{F}_\alpha^{(3)}|$ 部分空間から来る寄与を考えよう。この図ではダイアグラムの中で矢印で示された部分は非流体力学的モードに制限され、残りの中間状態は流体力学的モードに制限されている。これを図8と比べると、図8の中間状態の各バーテックスにもう一つのバーテックスを加えて、 P_h から P_h の遷移の間に Q_h への遷移を繰り込んだものになっている。

式 (10.9) に対応して、この過程からくる寄与の大きさは、

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}^{(3)}(t) &\sim n^2 \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} + K_1^{BL}} Q_h \langle 1_0, 2_0 | t^{(12)} | 1_{\mathbf{k}}, 2_{-\mathbf{k}} \rangle P_h \\ &\times \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + K_1^{BL} + K_2^B} P_h T_1^{(13)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P_h \\ &\times \exp[(-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{v}_1 + K_1^{BL} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 + K_2^B - i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{v}_3 + K_3^B)t] \\ &\times P_h T_2^{(13)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_h \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{12} + K_1^{BL} + K_2^B} \\ &\times P_h \langle 1_{\mathbf{k}}, 2_{-\mathbf{k}} | t^{(12)} | 1_0, 2_0 \rangle Q_h \frac{1}{\xi_\alpha^{(3)} + K_1^{BL}} \end{aligned} \quad (11.1)$$

で与えられる。ここで、 $\bar{\Gamma}^{(3)}(t)$ は、今考えている過程から来る寄与であることを表して

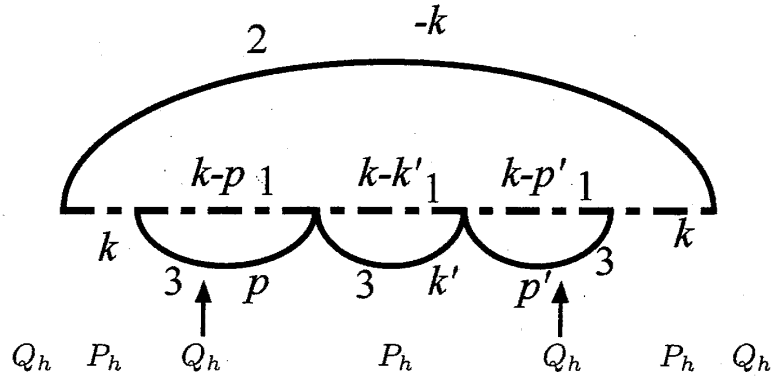


図 11: 3 体相関の部分空間の (11.1) に対応するリング・ダイアグラム。矢印は中間状態で非流体力学的モード、すなわち、緩和モードが現れる部分を示している。

おり、またこれから見るように $\Gamma^{(3)}$ の中でもっとも遅くベキ減衰する寄与を表している。また、 $P_h T_1^{(13)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P_h$ で表される遷移は、図 11 の左側の矢印で示された部分に対応し、それは

$$\begin{aligned}
 P_h T_1^{(13)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P_h &\equiv \int d\mathbf{p} P_h \langle 1_{\mathbf{k}}, 3_0 | t^{(13)} | 1_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}, 3_{\mathbf{p}} \rangle Q_h \\
 &\times \frac{1}{-i(\mathbf{k}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{p}_1 + K_1^{BL} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_2 + K_2^B - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}_3 + K_3^B} \\
 &\times Q_h \langle 1_{\mathbf{k}-\mathbf{p}}, 3_{\mathbf{p}} | t^{(13)} | 1_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, 3_{\mathbf{k}'} \rangle P_h
 \end{aligned} \quad (11.2)$$

で定義された、中間状態に非流体力学的モードの状態を繰り込んだ遷移である。同様に、(11.1) 中の $P_h T_2^{(13)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) P_h$ で表される遷移は、図 11 の右側の矢印で示された部分を繰り込んだ遷移である。

前節で計算した過程では、中間状態に遷移 $P_h T_{\mathbf{k}'}^{(13)} P_h$ が現れ、それが k' に比例することによって $k' = 0$ の部分で起こる赤外特異性を相殺したことを見たが、ここで考えている過程では、そのように赤外特異性を相殺する遷移はどこにも含まれていない。これから見るように、そのことが、この過程が前節で評価された過程よりもゆっくりと減衰する原因である。

さらに、(11.2) 中の分母に現れる線形化された衝突演算子の固有値の大きさは Q_h 空間の緩和モードに対して、 γ の程度の正の値の大きさによって下から押さえられているので、この分母は $k = 0$ のところで特異性を持たない。この事と、上で述べた $t^{(13)}$ の行列要素の性質を考慮に入れると、次元解析の助けを借りて (11.2) の遷移の大きさの程度は、次のように評価できる：

$$\lim_{k, k' \rightarrow 0} P_h T_1^{(13)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P_h \sim \int d\mathbf{p} P_h T_{\mathbf{p}}^{(13)} Q_h \frac{1}{\gamma} Q_h T_{-\mathbf{p}}^{(13)} P_h \sim k_0^d \frac{\gamma}{n} \frac{1}{\gamma n} \quad (11.3)$$

ここで因子 k_0^d は、前と同様に、波数ベクトルの単位を系の固有の量 k_0 で測ったとき、すなわち、 $\mathbf{p} = k_0 \mathbf{y}$ とした場合の \mathbf{p} 積分から得られた物である。

$i = 1, 2$ に対する (11.1) の二つの $P_h T_i^{(13)} P_h$ の部分を $P_h t^{(13)} P_h$ で置き換えると、前節の (10.9) が得られる事に注意。したがって、(10.9) の大きさの評価式 (10.15) の $P_h t^{(13)} P_h$ に対応する部分 $(k'/k_0)(\gamma/n)$ を (11.3) 式の $k_0^d \gamma/n^2$ で置き換えると、(11.1) の大きさの評価が得られる。そして、それは最終的に

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma}^{(3)}(t) &\sim n^2 \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \left(\frac{1}{\gamma}\right)^2 \left(\frac{\gamma}{n}\right)^2 \left(\frac{k_0^d \gamma}{n^2}\right)^2 \left(\frac{1}{(k^2 + k'^2)D}\right)^2 e^{-(k^2 + k'^2)Dt} \\ &\sim g^4 \tau^2 (\tau^{-d/2})^2 \end{aligned} \quad (11.4)$$

と評価される。

この減衰は (10.9) で評価された過程よりもゆっくりと減衰している。したがって、長時間では、中間状態に非流体力学的モードを繰り込んだ過程の方が、全ての中間状態が流体力学的モードからくる過程よりも重要になっているという、注目すべき結果が得られたことになる。この結果は、現象論的な流体力学的方程式を使って導かれた結果とは異なっている [19]。流体力学方程式では、我々がここで考察した非流体力学的モードからの寄与がはじめから考慮されていないので、この違いが得られたことに驚くべきではない。

ここでも (10.16) の場合と同様に、 ν 空間の寄与と $\nu - 1$ 空間の寄与の比を取ると

$$\frac{\bar{\Gamma}^{(\nu)}(t)}{\bar{\Gamma}^{(\nu-1)}(t)} \sim \frac{g^2}{n} \int d\mathbf{k}' \left(\frac{k_0^2}{k^2 + k'^2}\right)^2 e^{-k'^2 Dt} \sim g^3 \tau^{(4-d)/2} \quad (11.5)$$

が得られることが示せる。ここで $\bar{\Gamma}^{(\nu)}(t)$ は、前節で論じられた過程に対応するダイアグラムで中間状態の $P_h t^{(13)} P_h$ 表すバーテックスを (11.2) に対応した Q_h の状態を中間状態に繰り込んだ $P_h T_i^{(13)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') P_h$ の遷移に置き換えて得られるダイアグラムからくる寄与を表す。実際、前節でやったように (11.4) を (10.8) で形式的に割って見ると、 $\nu = 3$ に対して (11.5) の表現が得られていることは容易に確認できる。したがって、この遅い減衰過程の臨界次元は $d = 4$ であり、高次の相関の効果は $d > 4$ の場合にのみ低次の相関の効果より早く減衰する。

初期値 $\nu = 2$ の大きさの程度 (10.8) から出発して、逐一 (11.5) を適用すると、序論で与えた最終的な評価式 (1.9) が得られる。

空間次元 $d < 4$ に対して、かつ、大きな時間では、高次の相関からの寄与は (1.9) を発散させてしまう。したがってこの場合、(1.9) が使える時間に対して、上限の時間 $\tau = \tau_0$ がある。 τ_0 より十分短い時間でのみ、ここで論じたリング過程に基づいた大きさの評価は有効であると考えられる。この時刻 τ_0 は比 (11.5) を 1 と置くことによって得られ、それは

$$\tau_0 = g^{6/(d-4)} \quad (11.6)$$

で与えられる。これはかなり密度の濃い $n_0 = 10^{-1}$ に対して、

$$\tau_0 \approx \begin{cases} 10^3 & \text{for } d = 2 \\ 10^{12} & \text{for } d = 3 \end{cases} \quad (11.7)$$

を与え、また、 $n_0 = 0.5$ の非現実的に密度の濃い場合には、

$$\tau_0 \approx \begin{cases} 8 & \text{for } d = 2 \\ 4.1 \times 10^3 & \text{for } d = 3 \end{cases} \quad (11.8)$$

を与える。

12 まとめ

このレビューでは筆者が Prigogine との共同研究で築き上げて来た、リウビル演算子の複素固有値問題の観点から、熱力学的極限での非平衡物理系の持つ不可逆性を論じ、統計力学における分子運動論的方程式によって記述される輸送現象を微視的な力学に基づいて取り扱う方法を紹介した。そして、この場合不可逆過程が力学と両立する数学的根拠が、物理系の状態を記述する分布関数が粒子の位置のフーリエ共役な波数ベクトルの値がゼロのところで、デルタ関数特異性を持つことにあることを指摘した。物理的には、この性質は、熱力学や非平衡統計力学が対象とする系の粒子の空間的分布が非局所的であることから出て来る帰結である。したがってこのクラスの分布関数で表される状況では、永続的な相互作用を取り扱わなくてはならないことになる。そして、多大な粒子数よりなる系であるにもかかわらず、1粒子速度分布関数、1粒子位置分布関数、2体位置相関関数、3体位置相関関数、等々の分類を使ってその系の性質を論じることに意味があり、したがって、示強変数や示量変数等の概念でその性質を論じることに意味があるような系である。特別な例としては、熱平衡正準分布関数がこの特異性を持っている。このような特異性を持った系は、粒子の数の多少にかかわらず一過性の相互作用を取り扱う散乱理論で対象とする系とは際立って異なった物理系である。

本論で述べたようにこの特異性を持った関数のクラスは、各フーリエ成分が共通な因子 $1/V^N$ を除いて2乗可積分な関数よりなっているという意味で、数学的に曖昧さなしに定義されている。このデルタ関数特異性の結果、非平衡統計力学で取り扱う系の性質を表す分布関数はヒルベルト空間の成分になっておらず、したがって、リウビリアンが対称演算子であるにもかかわらず、複素固有値を持つことができ、その虚数部分が時間の対称性を破ったわけである。さらに、その虚数部分が、拡散係数や粘性係数等の不可逆性を特徴づける輸送係数を与えていることを示した。

この複素固有値問題の応用として、2次元空間における比較的濃密度な古典気体系での運動論的方程式の存在に関する問題と、線形応答理論での自己相関関数の計算の際に、長時間テールとよばれる記憶効果の大変遅い減衰項が原因で現れる赤外発散の問題を論

じた。そして、前者の問題として、通常の分布関数では、一般化されたマスター方程式をマルコフ近似して得られる方程式の衝突項が2次元系では発散してしまうが、我々の複素固有値問題から得られる、非平衡集団モードの衣を着た分布関数のマルコフ方程式は発散していないことを示した。したがって、低次元系でも輸送係数は存在するはずだとの我々の直感が、リウビル演算子の複素スペクトル解析によって正当化されたものと考えられる。

また後者の問題としては、高次の相関モードから来る自己相関関数への寄与が、複素スペクトル解析によって如何に系統的に計算できるようになるかを示した。その結果、今までのように中間状態の全てで流体力学的モードの寄与のみを評価するばかりではなく、非流体力学的モードの寄与まで取り入れて計算すると、長時間では、非流体力学的モードを中間状態に繰り込んだ過程の方が重要になっているという注目すべき結果を得た。その理由は、(10.13)で示した性質から、中間の流体力学的モード間の遷移では(10.14)で見たように $P_h T_k^{(13)} P_h$ の型の遷移の大きさの程度が波数ベクトル k' に比例することになり、流体力学的モード間の遷移のみを考えた(10.15)では波数ベクトルの積分を評価する際にその分母に現れる $k' = 0$ の部分で起こる赤外特異性が相殺されるが、それに対して、中間状態に非流体力学的モードへの遷移を許すと、(10.6)や(10.7)の性質から、このような相殺が起こらないからである。その結果、グリーン=久保の拡散係数の発散に関する臨界次元が、 $d = 4$ 次元であるという結論が得られた。この結論は、臨界次元が $d = 2$ であるという伝統的な見解と抵触しているので、この長時間テールの計算を詳しく論じた。

このレビューでは第4節の最後の部分でわずかに触れた部分を除いて、詳しくは論じなかったが、不可逆性の問題を理解する要となるもう一つの重要な概念に、「ポアンカレの非可積分性」がある。 n 個の独立な運動の恒量をもった少数 n 自由度古典ハミルトニアン系で、そのリウビリヤンのスペクトルが不連続な値を持っている場合、その自由度間の相互作用を入れた新しいハミルトニアン系を考えてみる。その場合、ほとんど全ての相互作用の形に対して、新しいハミルトニアン系の運動の恒量がポアンカレの共鳴特異性によって壊れてしまい、独立な運動の恒量の数が n より少なくなってしまう。これは「ポアンカレの定理」とよばれる、カオス等を論じる近代非線形力学系の中心的役割を演じる重要な定理である [27], [37]–[39]。この定理によると、摂動展開の中にエネルギーや振動数に関する発展子分母がゼロとなる点が現れた場合、もしリウビリヤンのスペクトルが不連続だったら、その分母が数学的に無意味な表現になってしまうことが原因で、運動の恒量が壊れてしまうのである。しかし、我々は、系のリウビリヤンが熱力学的極限の場合のように連続スペクトルを持っている場合には、発展子分母の中に現れる連続なリウビリヤンの固有値を複素平面に解析接続することによって、その分母のゼロ点が連続変数の積分下で超関数として数学的に正当な意味をもつ寄与をあたえ、被積分関数の中の発散部分が衝突演算子として時間の対称性を破っていることを示した [1, 2, 37, 40]。それ故、我々は自由度無限大な系でポアンカレの意味での非可積分系を扱うという意味で、このような系を「大きなポアンカレ系」とよんでいる。第4節の最後の部分でも述べたように、この非可

積分性は不可逆性の力学的根拠を理解するための、もう一つの要点ではあるが、誌面に限りがあるので、この問題についてはすぐ上に挙げた文献、その中でも特に [37] に詳しく論じてあるので、それらを参照して頂きたい。

このレビューで扱った問題は、全て古典力学系の問題であった。上で述べたように、不可逆性の力学的根拠はポアンカレの共鳴特異性にある。このことは、量子力学系でも同じあり、フォン・ノイマン演算子が連続スペクトルを持った場合の、ポアンカレ共鳴特異性の結果として不可逆性が現れて来るのである [2]。したがって、不可逆性は量子効果ではなく、古典系にも量子系にも共通な、共鳴特異性に基づいた非可積分性の帰結として現れて来たのである [37]。

最後に、筆者が時間の対称性の破れの問題を議論して来た際に、しばしば出された幾つかの質問に対する筆者の意見を以下に列挙する：

(甲) 筆者がしばしば聞かれる質問に「熱力学的極限を取ったら N は無限大となってしまうが、我々の宇宙の粒子の数は有限ではないのか」というのがある。これはもっともな質問ではあるが、それに答えるには「物理学の理想化とは何か」という問題も絡めて考える必要がある。例えば、散乱理論ではハミルトニアンが連続スペクトルを持っていることが前提とされているが、連続スペクトルを持つためには厳密にはこの宇宙の大きさが無限大でなければならない。また、半導体ではハミルトニアンが連続なエネルギーバンド構造を持っていることが本質であるが、それを厳密に持つためには結晶の大きさが無限大でなくてはならない。しかしながら、実験で取り扱う実際の系が厳密には連続スペクトルを持っていないのだから、その仮定で計算された散乱問題や半導体の問題の結果が現実の現象を記述していると考えるのは意味がないという方は、物理学者の間にはいないと思う。筆者は証明をまだ試みてはいないが、我々が埋め込まれているこの宇宙の性質をこれら連続スペクトルの極限を使って記述できるのには、数学的な裏付けがあるのだと思う。多数の粒子からなる系を取り扱う場合、系の記述の仕方に先ず理想化された 1 体問題を理解し、次に理想化された 2 体問題を理解し、順に N 体問題の N を大きくして理解して行く方法もあるが、 N が大きい場合に、いきなり N を無限大にした理想化を考え、 N は大きい有限の場合には、 $1/N$ のある正の数のべきを単位とした漸近展開をして、その補正項を順に計算して行く方法もあり得る。良く知られているように、近似をあげて行っても、パラメーターが大きい場合の漸近展開は、パラメーターが小さい場合の級数展開とは同じ値や関数形に収束するとは限らない。熱力学的極限を論じたり、散乱理論や半導体のバンド構造を論じているのは、この漸近展開の一番はじめの寄与だけを考えた場合に対応しているのだという方向で数学的な正当化ができるのではないか。

(乙) 「ポアンカレの再帰定理との関係はどうなっているのか」という質問も良く聞かれる。ご存知のように、ポアンカレの再帰定理は軌跡に関する定理であって、分布関数に関する定理ではない。さらに再帰定理は位相空間内で軌跡が有限な体積の領域に限られている場合についてのみ適用可能である。したがって熱力学的極限では軌跡と云えども適

用可能ではない。さらに、この定理が適用可能な場合でも、位相空間の2点が同時に初期条件の近傍に戻ってくる時間は、各々の再帰時間の最小公倍数である。非線形力学のカオスの理論によって明らかにされたことは、系がポアンカレの意味で非可積分な場合には、ある軌跡の任意近傍にある別々の軌跡が互いに全然違った再帰時間を持ち得るということである。連続関数である分布関数を論じる場合には、2点どころか軌跡の無限個の集合を論じている。したがってカオスが予想されるような非可積分系では、少数自由度系といえども分布関数に対して再帰定理は成り立たない。

(丙)「H 定理に対するロシュミットの批判との関係に付いて」も良く聞かれる質問である。ヒルベルト空間内の状態に関しては、確かにロシュミットの言うように H 定理を満たすような量はハミルトン系には存在しない。しかしながら、複素固有値をもつ共鳴状態をその要素として含むように拡張された関数空間では、力学に従っている限り、速度反転しても相変わらず単調に減衰し続ける H 関数を作ることが出来ることを文献 [6] で示した。またこの H 関数を使って、光子の吸収や散乱による励起原子の生成消滅過程に対して、エントロピー生成のみならずエントロピー流の役割に付いても、文献 [41] で論じた。

(丁)「Van Hove の $\lambda^2 t$ 近似とよばれる、 $t \rightarrow \infty$ の極限で時間のベキ関数として発散する永年項を集めた近似計算や、摂動展開の近似計算で出て来るエネルギーや振動数のデルタ関数で表されるポアンカレ共鳴を根拠に、不可逆性というデリケートな問題を論じても良いのか」もしばしば出て来る質問である。例えば、励起原子が光を出して基底状態に遷移する現象を記述するために考案された Friedrichs モデルは、そのハミルトニアンが簡単な構造をしているために、ハミルトニアンの複素固有値をもった共鳴状態を厳密に計算することができる [6]。さらに、この系では発展演算子 $\exp[-iHt]$ がユニタリ演算子であるにもかかわらず、指数関数的に減少する成分が近似なしの厳密な発展の中に存在していることも、この共鳴状態を使って示すことが出来る。この発展演算子の従うダイソン方程式を $\lambda^2 t$ 展開に基づいて計算すると、それがこの厳密に存在する振る舞いをこの永年項を通し逐一近似的に評価したものになっていることを示すことが出来る。また、不可逆性を表す減衰比等の輸送係数に対応する複素固有値の虚数部を摂動展開で計算すると、その最低次の寄与がちょうどエネルギーや振動数のデルタ関数で表されるポアンカレ共鳴の部分からの寄与になっている。そして、その近似の精度を上げて行くと、デルタ関数はローレンチアンに近い型の幅を持った関数になっていることも示すことができる。しかしこの場合にも、近似の精度を上げて最終的に摂動展開の全次数を集めて厳密に計算したからといって、輸送係数が消えてなくなるわけではない。ポアンカレの定理によれば、摂動展開の最低次でポアンカレ共鳴があれば、系は全次数で非可積分系になるということである。無限自由度を持った系に摂動展開の低次でポアンカレ共鳴があるということは、その非可積分性が原因で時間の対称性が破れていることの指標を与えているわけである。

(戊)「量子力学で自由粒子の波束が広がる運動は時間に対して向きを持っているように見えるが、それと不可逆性との関係は何か」。これは無限に広い空間の中で起こる現象

なので (乙) に関連した質問とも考えられる。また同じような例として「2種類の分子で出来た理想気体で、もし一方の分子の分布が局在していた場合には、衝突なしにあたかも拡散現象のように他の分子と混じって行くように見えるが、それと不可逆性との関係は何か」という質問も考えられる。これらの現象は、非平衡統計力学が対象とする散逸現象ではない。散逸現象の特徴は、系の不可逆性を特徴づける、初期条件によらない時間スケール (例えば熱平衡状態への緩和時間等) が存在することである。この時間スケールは、第4節の最後の部分で触れたように、ポアンカレ共鳴に基づいた非可積分性を根拠に得られた衝突演算子の複素固有値の虚数部分から計算される物である。実際、余程特異な初期条件を選ばない限り、初期条件の記憶は衝突によって多体相関の中に散って行き、その衝突過程だけに依存して初期条件には依らない系固有な時間スケール (例えば拡散時間等) が現れて来ることは直感的に受け入れられるであろう。それに対して、ここの質問の現象は、相互作用に依らないために系の固有な時間スケールは存在せず、初期条件に強く依存した現象である。このような現象は、時間的に向きのある現象ではあっても、位相混合現象とよんで散逸現象とは質的に違ったものとして区別している。

この他にも、ここで紹介したリウビル=フォン・ノイマン演算子の複素固有値問題の応用例として、指数関数的に厳密に減衰する量子系の不安定粒子を密度行列のレベルで同定する問題 [42]–[44] や、Yang が Bethe の ansatz に基づいて熱力学的極限で分配関数を厳密に計算した量子系に対して、熱平衡状態への時間発展を考察したものがある [45]。後者の問題では、我々は、その系のリウビリヤンの複素固有値がハミルトニアン固有値の差で表されていないことから、ハイゼンベルグによる交換関係の発見の指針を与えていた、原子から放出される光の振動数に関する Rize–Rydberg の二項原理がこの Yang の系では成り立たないことを示した。そのことは、不可逆な系では物理系を記述する最も基本的な量が確率振幅ではなくて、確率密度行列であることを示している点で興味のある問題である。興味のある方はその原論文も読んで頂きたい。

A 線形ボルツマン衝突演算子のスペクトルの性質

この付録では $d = 2$ の場合の線形ボルツマン衝突演算子のスペクトルの性質を簡単に列挙する ($d = 3$ の場合については [20]) を参照)。

流体力学との関連でこの固有値問題では、ゼロ固有値 $\lambda_{\alpha}^0 = 0$ に属する固有関数 ϕ_{α}^0 が特に重要になり、それは「衝突不変量」とよばれている。2次元系では、衝突不変量は4重に縮退している。すなわち、 $\{\alpha\} \equiv \{1, \dots, 4\}$ である。我々は今後、この衝突不変量に属した固有状態の指標として、記号 $\{\alpha\}$ を使うことにする。この不変量はマクスウェル分布 $\varphi_{eq}(v_a)$ に、それぞれ、1、速度の成分 v_{ax} と v_{ay} 、または、速度の大きさの2乗 v_a^2 を掛けたものである。空間内の方向を記述するために、与えられた波数ベクトル \mathbf{q} に平行な

単位ベクトル $\hat{\mathbf{q}}$ を x 方向に選ぶことにする。したがって、 $v_{ax} = \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{v}_a$ である。そうすると、互いに直交する規格化された衝突不変量は

$$\phi_\alpha^0(\mathbf{v}_a) = \chi_\alpha^0(\mathbf{v}_a) \varphi_{eq}(v_a) \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。ここで $i = 1, 2$ として、

$$\chi_i^0(\mathbf{v}_a) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{3}{\sqrt{17}} - (-1)^i \sqrt{m\beta} \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{v}_a + \frac{2m\beta v_a^2}{\sqrt{17}} \right) \quad (\text{A.2a})$$

$$\chi_3^0(\mathbf{v}_a) = \sqrt{m\beta} \hat{\mathbf{q}}_\perp \cdot \mathbf{v}_a \quad (\text{A.2b})$$

$$\chi_4^0(\mathbf{v}_a) = \frac{1}{\sqrt{17}} \left(5 - \frac{m\beta v_a^2}{2} \right) \quad (\text{A.2c})$$

であり $\hat{\mathbf{q}}_\perp$ は $\hat{\mathbf{q}}$ に直交する単位ベクトルである。

$j \notin \{\alpha\}$ をもった残りのスペクトルに対しては、 $\lambda_j^0 \geq \lambda^0 > 0$ であり、ここで λ^0 は、ゼロでない固有値の最小なものを表す。その大きさは (5.23) と (3.22) で与えられた K_a^B の次元解析から評価できて [(1.11) も参照]

$$\lambda^0 \sim n a_0^{d-1} \langle v \rangle = \gamma \quad (\text{A.3})$$

である。

非均質系では線形化されたボルツマン衝突演算子の右固有値問題は

$$(K_a^B - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_a) |\phi_j^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle = \lambda_j^{\mathbf{q}} |\phi_j^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle \quad (\text{A.4})$$

で与えられる。同じ固有値に属する左固有状態は $\langle\langle \phi_j^{(-\mathbf{q})}(a) |$ である。この固有状態は右固有状態と一緒に以下の双完備、双直交系をなす [20] :

$$\sum_j |\phi_j^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle \langle\langle \phi_j^{(-\mathbf{q})}(a) | = 1, \quad \langle\langle \phi_i^{(-\mathbf{q})}(a) | \phi_j^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle = \delta_{i,j} \quad (\text{A.5})$$

小さい波数ベクトル $|\mathbf{q}| \ll k_0$ の場合には、固有値問題 (A.4) の解は q の級数展開、

$$\begin{aligned} |\phi_j^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle &= |\phi_j^0(a)\rangle\rangle - iq |\phi_{1,j}^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle + \dots \\ \lambda_j^{\mathbf{q}} &= \lambda_{0,j}^{\mathbf{q}} - iq \lambda_{1,j}^{\mathbf{q}} + q^2 \lambda_{2,j}^{\mathbf{q}} \dots \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

を使って求めることが出来る。

流体力学的モード $\phi_\alpha^{(\mathbf{q})}$ は $q \rightarrow 0$ のとき (A.1) の衝突不変量に帰着する状態、すなわち、 $\lambda_{0,\alpha}^{\mathbf{q}} = 0$ として定義される。実際のところ、(A.2) は衝突不変量が、

$$(K_a^B - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_a) |\phi_\alpha^{(\mathbf{q})}(a)\rangle\rangle = -iq \sigma_\alpha |\phi_\alpha^{(0)}(a)\rangle\rangle + O(q^2) \quad (\text{A.7})$$

を満たすように χ の形を選んであったのである。ただしここで、 $\sigma_1 = -\sigma_2 = c = \sqrt{17/m\beta}$ は音速であり、 $\sigma_3 = \sigma_4 = 0$ である。そして、 $i = 1, 2$ に対する (A.2) の ϕ_i^0 は音モードに対応し、 ϕ_3^0 はズレ・モード、 ϕ_4^0 は熱モードにそれぞれ対応する。

流体力学的モードに対する (A.6) のスペクトルの q に関して 2 次の補正項は次式で計算されるボルツマンの拡散係数 D_α^B を与える [20] :

$$\lambda_{2,\alpha}^q = \langle\langle \phi_\alpha^0(a) | \hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{v}_\alpha \frac{1}{K_\alpha^B - \epsilon} (\hat{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{v}_\alpha - \sigma_\alpha) | \phi_\alpha^0(a) \rangle\rangle \quad (\text{A.8})$$

ただし、 $\epsilon \rightarrow 0+$ は正の無限小である。

$j \notin \{\alpha\}$ を持った非流体力学的モードは「緩和モード」ともよばれる。このモードの固有値の実部の大きさの程度は

$$\text{Re } \lambda_j^q \sim \gamma \quad (\text{A.9})$$

か、それより大きい値を持つ。

我々の計算では、(5.28) で定義されるボルツマン=ローレンツ演算子、および、その非均質演算子 $K_\alpha^{BL} - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_\alpha$ も使う。 $K_\alpha^{BL} - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_\alpha$ の固有状態 $|\phi_{BL,j}^{(q)}(a)\rangle$ の中で衝突不変量は一つだけであり、それは $\mathbf{q} = 0$ に対するマクスウェル分布 $\phi_{BL,1}^0(\mathbf{v}_\alpha) = \varphi_{eq}(v_\alpha)$ 、すなわち、

$$K_\alpha^{BL} \varphi_{eq}(v_\alpha) = 0 \quad (\text{A.10})$$

である。

非均質系の右固有値方程式は

$$(K_\alpha^{BL} - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_\alpha) |\phi_{BL,j}^{(q)}(a)\rangle = \lambda_{BL,j}^q |\phi_{BL,j}^{(q)}(a)\rangle \quad (\text{A.11})$$

であり、同じ固有値に属する左固有状態は前と同様に、 $\langle\langle \phi_{BL,j}^{(-q)}(a) |$ である。この固有状態は右固有状態と一緒に双完備、双直交系をなす。ボルツマン=ローレンツ演算子の衝突不変量が縮退していないことから、これには音モードが存在しないことを除いて、上で線形ボルツマン演算子について述べた、(A.3) のすぐ上の文章から (A.9) までの性質と公式は、それらに対応する固有値や固有関数に置き換えるだけで、このボルツマン=ローレンツ演算子に対しても同様に成り立つ。

B 左固有値問題

この付録では、(5.18) で与えられている既約衝突演算子 $\Psi_1^{(q)}(z)$ の左固有値状態を与える。以下の議論は第5節で与えられたものと平行に論じられる。

先ず (5.5) に対応した式

$$\int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle \tilde{v}_j^{(q)} | \psi^{(q)}(Z_j^{(q)}) | 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N \rangle = Z_j^{(q)} \int d\mathbf{v}_{(1)}^{N-1} \langle \tilde{v}_j^{(q)} | 1_{\mathbf{q}}, \mathbf{v}^N \rangle \quad (\text{B.1})$$

から始めよう。\$p\$ 粒子既約左固有関数は次式で定義される [(5.6) 参照] :

$$\tilde{s}_{j:1\dots p}^{(\nu)}(x^p) = \langle \tilde{s}_{j:1\dots p}^{(\nu)} | x^p \rangle \equiv [N_j^{(\nu)}]^{-1/2} \int dx_{(1\dots p)}^{N-p} \tilde{F}_j^{(\nu)}(x^N) \quad (\text{B.2})$$

そして (5.13) に対応した

$$\begin{aligned} Z_j^{(\mathbf{q})} \langle \tilde{s}_{j:1}^{(\mathbf{q})} | &= \langle \tilde{s}_{j:1}^{(\mathbf{q})} | \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_1 + \sum_{a=2}^N \int d\mathbf{v}_a \langle \tilde{s}_{j:1a}^{(\mathbf{q})} | P_2^{(\mathbf{q})}(1) V L'_{1a} (1 + \hat{P}_{1a}) P_2^{(\mathbf{q})}(1) \\ &+ \sum_{p=2}^N \sum_{a_2, \dots, a_p}^N \int d\mathbf{v}_{a_2} \cdots \int d\mathbf{v}_{a_p} \langle r_{j:1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})} | P_p^{(\mathbf{q})}(1) \delta \psi_{1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})} (Z_j^{(\mathbf{q})}) \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

が得られる。ここで [(5.14) 参照]

$$\delta \psi_{1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})}(z) = P_p^{(\mathbf{q})}(1) D_{1a_2\dots a_p}(z) Q_p^{(\mathbf{q})} L'_{1a_2} P_p^{(\mathbf{q})}(1) \quad (\text{B.4})$$

である。

平衡状態近傍だけに制限して、(5.15) に対応した次ぎのクラスの既約固有関数を考える :

$$P_p^{(\mathbf{q})}(1) \tilde{s}_{j:1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{a_2}, \dots, \mathbf{v}_{a_p}) = \tilde{s}_j^{(\mathbf{q})}(\mathbf{v}_1) \varphi_{eq}(v_{a_2}) \cdots \varphi_{eq}(v_{a_p}) \quad (\text{B.5})$$

これを (B.3) に代入すると 1 粒子左固有関数 \$\langle \langle \tilde{s}_j^{(\mathbf{q})}(1) |\$ に関して閉じた方程式 [(5.17) 参照]、

$$\langle \langle \tilde{s}_j^{(\mathbf{q})}(1) | \Psi_1^{\mathbf{q}}(Z_j^{(\mathbf{q})}) = Z_j^{(\mathbf{q})} \langle \langle \tilde{s}_j^{(\mathbf{q})}(1) | \quad (\text{B.6})$$

が導かれる。

最後に、規格化定数 \$N_j^{(\mathbf{q})}\$ は (4.18) を使って、

$$(N_j^{(\mathbf{q})})^{-1} = \langle \tilde{s}_{j:1}^{(\mathbf{q})} | P_1^{(\mathbf{q})} | r_{j:1}^{(\mathbf{q})} \rangle + \sum_{p=2}^N \sum_{a_2, \dots, a_p}^N \langle \tilde{s}_{j:1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})} | D_{1a_2\dots a_p}(z) C_{1a_2\dots a_p}(z) | r_{j:1a_2\dots a_p}^{(\mathbf{q})} \rangle \quad (\text{B.7})$$

で与えられる。

C \$T_0^{(12)}\$ の行列要素の性質

ここでは付録 A に列挙された線形化されたボルツマン衝突演算子の固有状態を使って表示される演算子 \$T_0^{(12)}\$ の行列要素に対して、重要な公式 (C.2) を証明する。

自己相関関数の中での多モード過程からの寄与を評価するとき、しばしば

$$\begin{aligned} &\langle \langle \phi_i^{(\mathbf{k})}(1) \phi_j^{(1)}(2) | T_{\mathbf{p}}^{(12)} | \phi_m^{(\mathbf{k}-\mathbf{p})}(1) \phi_n^{(1+\mathbf{p})}(2) \rangle \rangle \\ &= \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \varphi_{eq}^{-1}(v_1) \varphi_{eq}^{-1}(v_2) \phi_i^{(\mathbf{k})}(\mathbf{v}_1) \phi_j^{(1)}(\mathbf{v}_2) T_{\mathbf{p}}^{(12)} \phi_m^{(\mathbf{k}-\mathbf{p})}(\mathbf{v}_1) \phi_n^{(1+\mathbf{p})}(\mathbf{v}_2) \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

という形の行列要素にお目に掛かる。

特に興味があるのは「流体力学的状況」とよばれる状況であり、それは (C.1) の行列要素が (A.6) のように波数ベクトルの $\mathbf{k} = \mathbf{l} = \mathbf{p} = 0$ の周りで級数展開の低次の寄与を使って近似できる状況である。ここではこれから、衝突不変量 $i, j, m, n \in \{\alpha\}$ に対するこの展開のゼロ次の項に対して、

$$\langle\langle \phi_i^0(1)\phi_j^0(2)|T_0^{(12)}|\phi_m^0(1)\phi_n^0(2)\rangle\rangle = \langle\langle \phi_i^0(1)\phi_n^0(2)|T_0^{(12)}|\phi_m^0(1)\phi_j^0(2)\rangle\rangle = 0 \quad (\text{C.2})$$

が成り立つことを証明する。

これを証明するには、先ず (A.1) で導入された $\chi_m^0(a)$ に対して

$$\begin{aligned} (1 + \hat{P}_{12})\chi_m^0(1)\chi_n^0(2) \\ = [\chi_m^0(1) + \chi_m^0(2)][\chi_n^0(1) + \chi_n^0(2)] - (1 + \hat{P}_{12})\chi_m^0(1)\chi_n^0(1) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

が成り立っていることに注意する。 $\mathbf{q} = 0$ の場合の $T_{\mathbf{q}}^{(12)}$ の定義 (3.22) と、そこで定義された $\hat{b}_{\mathbf{v}}^{(12)}$ の性質を使うと、衝突不変量に対して

$$T_0^{(12)}[\chi_m^0(1) + \chi_m^0(2)][\chi_n^0(1) + \chi_n^0(2)] = 0 \quad (\text{C.4})$$

が成り立つことが判る。さらに、

$$\hat{b}_{\mathbf{v}}^{(12)} f(v_1^2 + v_2^2)g(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = f(v_1^2 + v_2^2)g(\bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_2) = f(v_1^2 + v_2^2)\hat{b}_{\mathbf{v}}^{(12)}g(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \quad (\text{C.5})$$

より、

$$T_0^{(12)}\varphi_{eq}(1)\varphi_{eq}(2) = \varphi_{eq}(1)\varphi_{eq}(2)T_0^{(12)} \quad (\text{C.6})$$

が成り立っている。

以上の関係を (C.2) と (A.1) とに組み合わせると、

$$\begin{aligned} \langle\langle \phi_i^0(1)\phi_j^0(2)|T_0^{(12)}|\phi_m^0(1)\phi_n^0(2)\rangle\rangle \\ = \frac{1}{2}\langle\langle \phi_i^0(1)\phi_j^0(2)|T_0^{(12)}(1 + \hat{P}_{12})|\phi_m^0(1)\phi_n^0(2)\rangle\rangle \\ = \frac{1}{2}\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \varphi_{eq}(1)\varphi_{eq}(2)\chi_i^0(1)\chi_j^0(2)T_0^{(12)}(1 + \hat{P}_{12})\chi_m^0(1)\chi_n^0(2) \\ = -\frac{1}{2}\int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \varphi_{eq}(1)\varphi_{eq}(2)\chi_i^0(1)\chi_j^0(2)T_0^{(12)}(1 + \hat{P}_{12})\chi_m^0(1)\chi_n^0(1) \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

が得られる。

この関係式を $\chi_n^0 = 1$ を持った衝突不変量 $\phi_n^0 = \varphi_{eq}$ に付いて適用すると、

$$\langle\langle \phi_i^0(1)\phi_j^0(2)|T_0^{(12)}|\phi_m^0(1)\varphi_{eq}(2)\rangle\rangle = -\langle\langle \phi_i^0(1)\phi_j^0(2)|T_0^{(12)}|\phi_m^0(1)\varphi_{eq}(2)\rangle\rangle \quad (\text{C.8})$$

が成り立っていることが判り、したがって (C.2) の右側の等式が証明できたことになる。

この式の左側の等式を証明するには、次の関係があることに着目する：

$$\begin{aligned}
& \langle\langle \phi_i^0(1) \varphi_{eq}(2) | T_0^{(12)} | \phi_m^0(1) \phi_n^0(2) \rangle\rangle \\
&= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{v}_2 \varphi_{eq}(1) \varphi_{eq}(2) \chi_i^0(1) T_0^{(12)} (1 + \hat{P}_{12}) \chi_m^0(1) \chi_n^0(1) \\
&= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{v}_1 \varphi_{eq}^{-1}(1) \phi_i^0(1) \left[\int d\mathbf{v}_2 T_0^{(12)} (1 + \hat{P}_{12}) \varphi_{eq}(2) \chi_m^0(1) \chi_n^0(1) \right] \\
&= \langle\langle \phi_i^0(1) | K_1^B | \phi_m^0(1) \chi_n^0(1) \rangle\rangle \tag{C.9}
\end{aligned}$$

一方 K_1^B はエルミート演算子なので、(C.2) の右側の等式に対して

$$0 = \langle\langle \phi_i^0(1) \varphi_{eq}(2) | T_0^{(12)} | \phi_m^0(1) \phi_n^0(2) \rangle\rangle = -\frac{1}{2} \langle\langle \phi_m^0(1) \chi_n^0(1) | K_1^B | \phi_i^0(1) \rangle\rangle^* \tag{C.10}$$

が成り立ち、これと (C.9) を一緒にすると (C.2) の左側の等式が証明できたことになる。

以上で線形化されたボルツマン方程式の固有状態に対して (C.2) が証明できたが、一般の l に対して $\phi_l^0(1)$ を $\phi_{BL,1}^0$ で置き換えた場合にも、それに対して (C.2) に対応した関係が成り立っていることを証明するのは容易である。

(C.2) から得られる重要な帰結は、流体力学的モードの間の遷移からの寄与が波数ベクトルに関して少なくともその大きさの 1 次に比例するということである。そこで、次元解析から、 $i, j, m, n \in \{\alpha\}$ に対する流体力学的モードの間の遷移について、

$$\begin{aligned}
& \langle\langle \phi_i^{(\mathbf{k})}(1) \varphi_{eq}(2) | T_{\mathbf{k}'}^{(12)} | \phi_m^{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}(1) \phi_n^{(\mathbf{k}')} (2) \rangle\rangle \\
& \sim \langle\langle \phi_m^{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}(1) \phi_n^{(\mathbf{k}')} (2) | T_{-\mathbf{k}'}^{(12)} | \phi_i^{(\mathbf{k})}(1) \varphi_{eq}(2) \rangle\rangle \sim \frac{k}{k_0} \frac{\gamma}{n} + \frac{k'}{k_0} \frac{\gamma}{n} \tag{C.11}
\end{aligned}$$

という大きさの評価が得られる。この評価と同じような大きさの評価が (10.12) で与えられているボルツマン=ローレンツ衝突演算子の固有状態を含んだ行列要素に対しても成り立っている。

(C.2) が成り立っているのは、 $i, j, m, n \in \{\alpha\}$ に場合の衝突不変量に対してだけであることは強調されるべきである。実際、もし (C.1) の中の波数ベクトルのどれかが非流体力学的な緩和モードで (例えば、 $p \gg k_0$) かつ、残りが流体力学的モードだったとしたら ($k, l < k_0$)、表 1 のバーテックス (c) と (e) に対する行列要素は $k \rightarrow 0$ と $l \rightarrow 0$ の極限でゼロにはならない。したがって、流体力学的モード間の遷移に対応したバーテックスの行列要素の $\mathbf{k} = \mathbf{l} = \dots = 0$ の近傍での解析的性質は、流体力学的モードと非流体力学的モードの間のバーテックスの行列要素のその近傍での解析的性質とは全然違ったものになっている。第 10 節と 12 節で示したように、この解析的性質の違いは、自己相関関数の中に非流体力学的モードを中間状態に繰り込んだ項から来るゆっくりした減衰が存在することに付いて決定的な役割を演じているのである。

謝辞

筆者は、このレビューを詳しく読んで貴重な意見を下さった田中智氏に感謝の意を表す。また、我々の仕事の内容をレビュー形式でまとめることを勧めて下さった早川尚男氏にも心から感謝の意を表す。

参考文献

- [1] T. Petrosky and I. Prigogine, *Chaos, Solitons and Fractals*, **7** (1996), 441.
- [2] T. Petrosky and I. Prigogine, *Advances in Chemical Physics*, **99** (1997), 1.
- [3] T. Petrosky, *Foundation of Physics*, **29**, 1417 (1999); **29** (1999), 1581
- [4] T. Petrosky, *Advances in Chemical Physics*, **122** (2002), 129.
- [5] K. O. Friedrichs, *Commun. Pure Appl. Math.*, **1** (1948), 361.
- [6] T. Petrosky, I. Prigogine and S. Tasaki *Physica*, **A 173** (1991), 175.
- [7] N. M. Hugenholtz, *Physica*, **23** (1957), 481.
- [8] I.E. Antoniou and I. Prigogine, *Physica*, **A 192** (1993), 443.
- [9] B. Alder and T. Wainwright, *Phys. Rev.*, **A1** (1970), 18.
- [10] J. Van Leeuwen and A. Weyland, *Physica*, **36**, (1967), 457.
- [11] M. H. Ernst, J. R. Dorfman, W.R. Hoegy and J. Van Leeuwen, *Physica*, **45** (1969), 127.
- [12] M. H. Ernst and J. R. Dorfman, *Physica*, **61** (1972), 157.
- [13] P. Résibois, *Physica*, **70** (1973), 431.
- [14] P. Résibois and Y. Pomeau, *Physica*, **72** (1974), 493.
- [15] M. Theodosopulu and P. Résibois, *Physica*, **82A** (1976), 47.
- [16] M. H. Ernst and J. R. Dorfman, *J. Stat. Phys.*, **12** (1975), 311.
- [17] J. R. Dorfman and E. G. D. Cohen, *Phys. Rev.*, **A6** (1972), 776; **A12** (1975), 292.
- [18] I. M. De Schepper and M. H. Ernst, *Physica*, **87A** (1975), 35.

- [19] Y. Pomeau and P. Résibois, *Phys. Report*, **19C** (1975), 63.
- [20] P. Résibois and M. de Leener, *Classical Kinetic Theory of Fluids* (John Wiley & Sons, New York, 1977).
- [21] Y. Kan and J. R. Dorfman, *Phys. Rev.*, **A16** (1977), 2447.
- [22] J. R. Dorfman and H. van Beijeren, *Statistical Mechanics, Part B*, edited by B. J. Berne (Plenum Press, New York, 1977).
- [23] J. Piasecki, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics, Vol. IV* (Plenum Elsevier Science, Amsterdam, 1977).
- [24] J. R. Dorfman and T. Kirkpatrick, in *Lecture Notes in Physics : System Far from equilibrium—Proceedings, Sitges*, 263 (Springer-Verlag, Berlin, 1980).
- [25] M. A. van der Hoef, Thesis “Simulation Study of Diffusion in Lattice-Gas Fluids and Colloids,” 263, de Rijksuniversiteit te Utrecht (1992).
- [26] I. Prigogine and P. Résibois, *Physica*, **27** (1961), 629.
- [27] I. Prigogine, *Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Wiley Interscience, New York, 1962).
- [28] M. Thedopulu and A. P. Grecos, *Physica*, **95A** (1979), 35
- [29] R. Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Krieger Publishing Company, Malabar, Florida, 1991).
- [30] T. Petrosky, G. Ordonez and T. Miyasaka, *Phys. Rev.*, **A 53** (1996), 4075.
- [31] P. A. Dirac, *Lectures on Quantum Field Theory* (Belfer Graduate School, Yshiva University, New York, 1966).
- [32] in *Gravity, Particle and Space-Time*, P. Pronin and G. Sardanashvily, eds. (World Scientific, Singapore, 1996), p51.
- [33] R. Balescu, *Statistical Mechanics of Charged Particles* (Wiley Interscience, New York, 1963).
- [34] C. George, *Bull. Classe Sci. Acad. Roy. Bel.*, **53** (1967), 623.
- [35] I. Prigogine, C. George and F. Henin, *Physica*, **45** (1969), 418.

- [36] T. Petrosky and H. Hasegawa, *Physica*, **160A** (1989), 351
- [37] Tomio Yamakoshi Petrosky, 「複雑系と時間の矢」(『複雑系叢書』第7巻、早稲田大学複雑系高等学術研究所編、共立出版、2006)
- [38] H. Poincaré, *Les methodes nouvelles de la mecanique celeste* (Dover, New York, 1957), 英訳: NASA Technical Translation F-450, 451, 452 (1957).
- [39] E. Whittaker, *A Treatise on Analytic Dynamics of Particles and Rigid Bodies* (Cambridge Univ. Press, London, 1964).
- [40] T. Petrosky and I. Prigogine, *Physica*, **147A** (1988), 439.
- [41] G. Ordonez, T. Petrosky and I. Prigogine, *Advances in Chemical Physics*, Proceedings of the XXII Solvay Conference of Physics “The physics of communication” (World Scientific, Singapore 2003) p270.
- [42] G. Ordonez, T. Petrosky and I. Prigogine, *Phys. Rev.*, A **63** (2001), 052106.
- [43] T. Petrosky, G. Ordonez and I. Prigogine, *Phys. Rev.*, A **64** (2001), 062101.
- [44] T. Petrosky, G. Ordonez and I. Prigogine, *Phys. Rev.*, A **68** (2003), 022107.
- [45] T. Petrosky and G. Ordonez, *Phys. Rev.*, A **56**, (1997), 3507.
- [46] 文献 [3] では、この大きさの程度の評価をするときに、中間状態に現れる全ての非流体力学的モードを形式的に繰り込んであるが、ここで行うような大きさの評価だけの粗い計算では、全てのオーダーの繰り込みは余り意味がない。この論文では、最低次の繰り込みだけを考慮して、意味のある結果を示してあるので、(1.11) の g 依存性が文献 [3] で示した結果と異なっている。この違いは、 g が小さい場合は無視できる。
- [47] ヒルベルト空間に属さない関数に関しては、このスカラー積を厳密には “indefinite two form” とよぶべきであるが、それを承知で、ここではなお伝統的な「内積」という言葉を使うことにする。