

散逸演算子と積分原理

京大理 物理 長谷川 洋

§ 1. 概略

「擾動散逸定理」のように物理において "dissipation" は「散逸」という用語が使われ、それが自然のように思われる。これは統計物理特に開放系を扱う場合一つの基本概念になっているわけであるが、その数学的性質の抽出については縮小型半群の generator の満たす特徴をなわち dissipative operator として早くから知られて来た。[1] - [3]

Hille-Yosida の定理 (Hilbert 空間の場合) Hilbert 空間 X において dense な定義域をもつ閉作用素 A が X 上の縮小半群の generator であるための必要十分条件は A が maximal dissipative [3]

$$(1) \operatorname{Re} (Au, u) \leq 0 \quad u \in D(A) \text{ dense in } X \text{ (Lumer-Phillips [2])}$$

$$(2) \operatorname{Re} \lambda > 0 \quad \lambda \in \mathbb{C} \text{ に対し } (\lambda - A)^{-1} \text{ が } X \text{ 上有界}$$

なることである。

(量子) 統計力学では、密度行列の時間発展はその表わす力学

系の物理量の時間発展に移して扱われる (Schrödinger 描像 \rightarrow Heisenberg 描像, ス保教授の稿) が, その場合物理量の表わす空間では代数的な演算が自由に行われる必要があり, 上述の古典的縮小半群では不十分 (古典的可換量に限定しても) とする。

この要請について最近「動力学半群」 dynamical semigroup の研究が進展しつつある。これは 1960年代 スピン共鳴の理論や量子光学 (レーザー理論) の発展によって散逸を伴う量子系のダイナミクスを厳密化する必要から生じたもので, Sudarshan ら [4] と Kossakowski [5] とが独立に始め, Davies [6, 7] Ingarden ら [8], Lindblad [9], Gorini ら [10], Spohn [11] Frigerio [12] などの仕事が見られた。非可換量の上の dynamical map の特徴は 正の量を正の量に変えるというマルコフ性に加えそれよりも強い「完全正值性」が要請されそれが開放系のダイナミクスに適合する。現在のところ殆ど generator が有界の場合に限られていて未完成的なものである (§2, §3 に略述)。

動力学半群の発展方程式を可換の場合 (古典力学系) に限定すると, 物理でよく使われる マスター方程式, Fokker-Planck 方程式の場合となる。これらに対する位相解析的な取扱いはいふしう現在あまり流行っていないように見える。しかし非平衡開放系の統計力学の一つの目標からこの場合の研究を深めることに意味があるように思われる。その目標とは, 非平衡

熱力学への橋渡しとすること、「エントロピー生成最小の原理」を定式化した。 §5以下にこのことに関する筆者の試みを説明する。その出発点は、上述の動力学半群の立場でもう一度 Hille-Yosida 理論を見直すことによりその散逸性の表現に新しい視点が得られることである。同様の試みは最近 Spohn と Lebowitz が成る特殊の場合に行ったものであり [18]、両者の関係を説明する。開放系統計力学としてそのよい実例は、レーザーの定常発振状態である。 [20]

§2. 動力学半群 (dynamical semigroup)

Ingarden-Kossakowski [8] に従って述べる。量子力学体系を可分 Hilbert 空間 H 上の有界線型作用素の作る C^* -代数 $B(H)$ で表わすとして、その部分空間

$$P(H) = \{ p \in B(H) \mid p = p^* (\text{self-adjoint}) \geq 0, \text{Tr} p = 1 \}$$

(密度行列の全体)

$$L^1(H) = \{ p \in B(H) \mid \|p\|_1 = \text{Tr}|p| = \sum_n |(x_n, p x_n)| < \infty \}$$

(トレス・クラス)

$$L^\infty(H) = \{ A \in B(H) \mid \text{Tr}(p|A|) < \infty \quad \forall p \in P(H) \}$$

(トレス・ノルムに関する Banach 部分空間上連続汎関数の全体)

を用いる。

$L^\infty(H)$ は $L^1(H)$ の dual Banach space であり、実際は $L^\infty(H) = B(H)$

である。又、 $L^1_+(H)$, $L^\infty_+(H)$ はそれぞれ $L^1(H)$, $L^\infty(H)$ の正の部分集合

の subset を表わすこととする。密度行列 $\rho \in P(H)$ は力学系 $B(H)$ のもっとも一般な '状態' からみれば極めて normal のもので、物理量 A の状態 ρ における期待値は $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A)$ と書かれる。

定義 Banach alg $\mathcal{B}(L^1(H))$ ($L^1(H)$ 上の有界線型作用素の作代数) の一径族 $\{\Lambda_t; t \geq 0\}$ が次の条件を満すとき、これを力学系 $B(H)$ の動力学半群と呼ぶ (Schrödinger 描像)。

$$(i) \quad \Lambda_t L^1_+(H) \subset L^1_+(H) \quad (\text{正值トレースをそれぞれ自身にうつす})$$

$$(ii) \quad \|\Lambda_t \rho\|_1 = \|\rho\|_1 \quad \rho \in L^1_+(H) \quad (\text{密度保存性})$$

$$(iii) \quad \Lambda_t \Lambda_s = \Lambda_{t+s} \quad t, s \geq 0$$

$$(iv) \quad w\text{-}\lim_{t \downarrow 0} \Lambda_t \rho = \rho \quad \rho \in L^1(H) \quad \left(\lim_{t \downarrow 0} \text{Tr}(\Lambda_t \rho A) = \text{Tr}(\rho A) \right) \\ \forall \rho \in L^1(H)$$

remark 1. 連続性 (iv) は実は強連続 $\lim_{t \downarrow 0} \|\Lambda_t \rho - \rho\| = 0$ と同値であることが証明される [3]。(わざわざ弱連続で表わすのは dual space の定義 — Heisenberg 描像 — と合わせるため)

remark 2. (i) および (ii) の条件は $L^1_+(H)$ ではなく正の要素に対する条件として書かれたが、これを $L^1(H)$ に対する条件として同値に表わすことも出来、次のようになる。

$$(i') \quad \text{Tr}(\Lambda_t \rho) = \text{Tr} \rho \quad \rho \in L^1(H)$$

$$(ii') \quad \|\Lambda_t \rho\|_1 \leq \|\rho\|_1 \quad \rho \in L^1(H)$$

このことは、正值性 (i) と密度保存 (ii) とが必然的にマルコフの縮小性 (ii') をもたらし、逆に後者および trace 保存の要請から必

形式的に正値性 (i) が従ふことを意味するものである。以下略証。

$$(i), (ii) \implies (i'), (ii')$$

$P = P^+ \in L^1(H)$ と $P = P_+ - P_-$ ($P_{\pm} \in L^1_+(H)$) のように二つの正寄りに分解すると (i), (ii) の仮定のもとに $\|\Lambda_t P_{\pm}\|_1 =$

$$\begin{aligned} \|P_{\pm}\|_1 &= \text{Tr } P_{\pm}, & \text{Tr}(\Lambda_t P) &= \text{Tr}(\Lambda_t P_+) - \text{Tr}(\Lambda_t P_-) \\ & & &= \text{Tr } P_+ - \text{Tr } P_- = \text{Tr } P \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|\Lambda_t P\|_1 &= \|\Lambda_t P_+ - \Lambda_t P_-\| \\ &\leq \|\Lambda_t P_+\|_1 + \|\Lambda_t P_-\|_1 = \|P_+\|_1 + \|P_-\|_1 = \|P\|_1 \end{aligned}$$

$$(i'), (ii') \implies (i), (ii)$$

正値性, $[P \in L^1_+(H) \text{ ならば } \Lambda_t P \in L^1_+(H)]$ が (i') (ii') のもとに成立するならば (ii) の成立は明らかであるから, 以下正値性を示す。

$$(ii') \text{ より } \|\Lambda_t P\|_1 \leq \|P\|_1 \quad \text{であるが } P \geq 0 \text{ ならば } \text{Tr } P = \text{Tr}(\Lambda_t P), \text{ 故に}$$

$$(i') \text{ より } \quad = \text{Tr}(\Lambda_t P) \leq \text{Tr} |\Lambda_t P|$$

$$\text{すなわち } \|\Lambda_t P\|_1 = \text{Tr} |\Lambda_t P| \leq \text{Tr}(\Lambda_t P) \leq \text{Tr} |\Lambda_t P| \quad \text{より}$$

不等号は等号となる: $\text{Tr}(\Lambda_t P) = \text{Tr} |\Lambda_t P| \quad \therefore \Lambda_t P \geq 0$. 以上.

定理 以上の定義は dual space $L^\infty(H)$ 上の次の定義と同値になる。

$$(i)^* \quad \Lambda_t^* L^1_+(H) \subset L^1_+(H), \quad \Lambda_t^* 1 = 1 \quad 0 \leq t$$

$$(ii)^* \quad \|\Lambda_t^* A\|_\infty \leq \|A\|_\infty \quad (= \sup_{\|P\|_1=1} \|AP\|_1)$$

$$(iii)^* \quad \Lambda_t^* \Lambda_s^* = \Lambda_{t+s}^* \quad t, s \geq 0$$

$$(iv)^* \quad \omega^* \text{-}\lim_{t \downarrow 0} \Lambda_t^* A = A \quad A \in L^\infty(H) \quad \left(\lim_{t \downarrow 0} \text{Tr}(P \Lambda_t^* A) = \text{Tr}(PA) \right) \quad \forall P \in P(H)$$

統計力学では更に (v)^* $(\Lambda_t^* A)^* = \Lambda_t^* A^*$ と仮定する必要がある。

§3. 完全正值性 (complete positivity) および完全散逸性 (complete dissipativity)

Ingarden-Kossakowski はさうに $\{\Lambda_t\}$ の generator L , $\Lambda_t = e^{tL}$, の満たすべき特徴および L による Λ_t の生成条件を論じたがそれは満足したものではなかった。これを閉双系の物理として有意義な形式にとらえなおすのは Lindblad である。

Λ_t (および Λ_t^*) は前述のように正值性を持つが、非可換量の量子的散逸系では単なる正值性では不十分で「完全正值性」を持つべきであり、又これらについてその generator も完全散逸性と稱する不等式に従う。

定義 C^* -代数 \mathcal{A}_1 から C^* -代数 \mathcal{A}_2 への正值写像 φ ; $X \in \mathcal{A}_1$, $\varphi(X) \in \mathcal{A}_2$, $X \geq 0 \Rightarrow \varphi(X) \geq 0$, が完全正值とは M_n ($n=1, 2, \dots$) を $n \times n$ 行列代数として $X_n \in \mathcal{A}_1 \otimes M_n$, $\varphi_n(X_n) \in \mathcal{A}_2 \otimes M_n$, $X_n \geq 0$ ならば $\varphi_n(X_n) \geq 0$, すなわち φ_n がすべての n に対し正值写像になることである。

上の概念は C^* -代数において早くから知られていたが、これに
 関する有用な不等式が Lieb-Ruskai^[13] によって以下のように
 知られる。

定理 (Lieb-Ruskai) C^* -代数 \mathcal{A}_1 から W^* -代数 \mathcal{A}_2 への完全正值写像 φ , $A, B \in \mathcal{A}_1$ に対し

$$\varphi(A^*B) [\varphi(B^*B)]^{-1} \varphi(B^*A) \leq \varphi(A^*A)$$

この不等式の証明は \mathcal{O}_2 が可換の場合、次のような elementary なものである。

$$0 \leq \varphi((A + \lambda B)^*(A + \lambda B)) = \varphi(A^*A) + \lambda^* \varphi(B^*A) + \lambda \varphi(A^*B) + \lambda^* \lambda \varphi(B^*B)$$

$$\varphi(A^*B)^* = \varphi(B^*A) = |\varphi(B^*A)| e^{i\theta} \quad (\text{極分解})$$

$$\lambda = |\lambda| e^{-i\theta} \text{ とし } 0 \leq \varphi(A^*A) + 2|\lambda| |\varphi(B^*A)| + |\lambda|^2 \varphi(B^*B)$$

$$\text{これより } |\varphi(B^*A)|^2 \leq \varphi(A^*A) \varphi(B^*B)$$

$$\text{すなわち } \varphi(A^*B) \varphi(B^*A) \leq \varphi(A^*A) \varphi(B^*B)$$

すなわち、Schwarz の不等式であって、 φ が \mathbb{C} -数の場合の範囲に従うが、若し φ が互いに非可換の場合には λ の 1 次の部分を上の極分解と phase の部分に分けて扱うことが本来的なので、簡単な不等式を導くことが本来的なのであるが、「完全正值」という条件があれば Lieb-Ruskai の形に不等式が成立するのである。従って

系 可換 C^* -代数に対しては完全正值性と導いた正值性と同一であり、Lieb-Ruskai 不等式は

$$\varphi(A^*B) \varphi(B^*A) \leq \varphi(A^*A) \varphi(B^*B)$$

で表わされる。

「完全正值」という概念が南沢統計力学において本質的であることは次のような事実から知られる (Lieb-Ruskai)。

量子力学の二つの体系を Hilbert 空間 H_1 と H_2 の上の有界作用素の C^* -代数 $B(H_1)$, $B(H_2)$ で与えたとし $B(H_2)$ の自由

度の項を次のような "partial trace" によって行うとする。

(簡単のため H_2 は有限次元とする)

$$(\varphi, T_2(X)\psi) = \sum_{n=1}^N (\varphi \otimes e_n, X\psi \otimes e_n)$$

$$X \in \mathcal{B}(H_1 \otimes H_2) \quad T_2(X): \mathcal{B}(H_1 \otimes H_2) \rightarrow \mathcal{B}(H_1)$$

$\{e_n\}$: H_2 の正規直交系

このとき, partial trace T_2 は $\mathcal{B}(H_1 \otimes H_2)$ から $\mathcal{B}(H_1)$ への完全正値写像となる。

定理 (Lindblad) [9] dynamical semigroup の dual space における

表現 $\{\Lambda_t^*\}$ が条件 (i)* - (v)* および完全正値性に従うとする。その

generator L^* ; $\Lambda_t^* = e^{tL^*}$, は

a) $L^*1 = 0$

b) $L^*(A^*A) \geq A^*(L^*A) + L^*(A^*)A$

を満足する。特に L^* が有界であれば, 逆にこの二条件を満足

する L^* は (完全正値な) dynamical semigroup を生成する。その一般

型は

$$L^*A = \sum_i (V_i^* [A, V_i] + [V_i^*, A] V_i) + i[H, A]$$

$$\left(V_i, \sum V_i^* V_i \in \mathcal{B}(H); H(=H^*) \in \mathcal{B}(H) \right)$$

で与えられる。

example 1. Bloch の方程式; $\frac{d}{dt}A = i[H, A] + \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \gamma_{\downarrow} S_+ [A, S_-] + h.c. \\ + \gamma_{\uparrow} S_- [A, S_+] + h.c. \\ + \eta S_+ S_- [A, S_+ S_-] + h.c. \end{array} \right)$

= h.s.) damping part だけ

$$\frac{dS_+}{dt} = -\gamma_{\downarrow} S_+, \quad \frac{dS_z}{dt} = -\gamma_{\parallel} (S_z - S_0) \quad \gamma_{\parallel} = \gamma_{\downarrow} + \gamma_{\uparrow}, \quad \gamma_{\downarrow} = \frac{1}{2}(\gamma_{\downarrow} + \gamma_{\uparrow} + \eta).$$

example 2. 有限 (N -単位) 系における完全正值動力半群

N 次元ベクトル空間 \mathcal{L} Hilbert空間 H とすると $M_N = \mathcal{L}^+(H) = \mathcal{L}^\infty(H) = \mathcal{B}(H)$ である。この場合の complete dissipative operator の構造は次の定理によって決定されている。

定理 (Gorini, Kossakowski, Sudarshan) [16]

(i) M_N における 1次元 projector $\{P_i; i=1, \dots, N; P_i P_j = \delta_{ij} P_i\}$ すべてからなる family を \mathcal{P}_N とする。 $L: M_N \rightarrow M_N$ の dynamical semigroup の generator であるための必要十分条件は

$$\text{tr} P_i (L P_j) \geq 0 \quad i, j=1, \dots, N; \quad \text{tr} (L P_j) = 0 \quad j=1, \dots, N.$$

かつすべての $\{P_i; i=1, \dots, N\} \in \mathcal{P}_N$ に対し成立することである。

(ii) L の complete dynamical semigroup の generator であるのは

$$L P = \frac{1}{2} \sum_{r,s=1}^{N-1} c_{rs} \{ [F_r, P F_s^*] + [F_r P, F_s^*] \} - i [H, P]$$

$$\left(\text{tr} (F_r) = 0, \quad \text{tr} (F_r^* F_s) = \delta_{rs} \quad r, s=1, \dots, N-1; \quad F_r, F_r^*, H (= H^*) \in M_N \right.$$

$$\left. \text{tr} H = 0 \right) \text{ と一義的に表わされる。 } \{c_{rs}\} \text{ は } N^2-1 \text{ 次元正値}$$

エルミート行列 c である。この主軸変換により Lindblad の表現に達する。

example 3. quantum damped harmonic oscillator

調和振動子の operator $(a, a^\dagger); [a, a^\dagger] = 1$ に対し

$$L P = ([a, P a^\dagger] + [a P, a^\dagger]) - 2\bar{n} [a^\dagger [a, P]]$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{通常の表現に於て} \\ \gamma_\downarrow ([a, P a^\dagger] + [a P, a^\dagger]) + \gamma_\uparrow ([a^\dagger, P a] + [a^\dagger P, a]) \end{array} \right)$$

これは解を具体的に表すことの出来る非有界 generator の典型である。

§4. H-定理

古典的マルコフ過程に關し エントロピー増大を意味する H 定理があることはよく知られている [1] (p. 392) これに相当して非可換代数上の完全正值 dynamical semigroup に対して

$$P_t = \Lambda_t P \quad \Lambda_t P_0 = P_0 \quad (\text{定常分布})$$

の遷移行列に關し 相対エントロピーの増大

$$S(P_t | P_0) = \text{Tr} P_t (\log P_t - \log P_0)$$

$$-\frac{d}{dt} S(P_t | P_0) \geq 0$$

($S(A|B) = \text{Tr} A (\log A - \log B)$ は物理の“相対エントロピー”のマイナスとして定義されるのが例)

が成立することが期待される。これについては Lindblad の基本的な結果 [14]

$$S(\Phi A | \Phi B) \leq S(A | B)$$

($A, B \in T_+(H)$ 重: $T(H)$ から $T(H)$ への完全正值写像)

が保証しているが、その証明は難かしい。最近 Spohn は “エントロピー生成” $\sigma(P_t | P_0) = -\frac{d}{dt} S(P_t | P_0)$ と一般的に与え、その凸性および正值性を、Lieb によるいわゆる Wigner-Yanase-Dyson conjecture の証明 [15] に帰着させて、

比較的簡単に示した。その概略は以下の通り。前半の2次元有限次元 (N -単位) として扱う。

$$\sigma(P_i | P_0) = -\text{Tr}_n(L P_i)(\log P_i - \log P_0)$$

$$L P = -i[H, P] + \frac{1}{2} \sum_i ([V_i, P V_i^*] + [V_i P, V_i^*])$$

$$L P_0 = 0$$

$\sigma(P | P_0)$ の P に関する凸性 $\text{Tr}_n(L P) \log P_0$ は P に関する

線型であるから、1項 $-\text{Tr}_n(L P) \log P$ の凸性を見ればよい。ところが

$$\begin{aligned} -\text{Tr}_n(L P) \log P &= \sum_i \text{Tr}_n(V_i^* V_i P \log P - V_i P V_i^* \log P) \\ &= \frac{d}{dq} \left[\sum_i \left(-\text{Tr}_n(P^q V_i P^{1-q} V_i^*) \right) \right]_{q=0} \end{aligned}$$

この \sum_i の各項 $-\text{Tr}_n(P^q V_i P^{1-q} V_i^*)$ ^($0 \leq q \leq 1$) は Lieb に よる その正しいことが証明された Wigner-Yanase-Dyson の conjecture により 凸関数である。特に $q=0$ の P の保型正数である。このことから $\frac{d}{dq} ()_{q=0}$ に対しても凸性が保証される。

$\sigma(P | P_0) \geq 0$ 上に示された $-\text{Tr}_n(L P) \log P$ の凸性と explicit に書くならば

$$-T_2(L(\lambda P + (1-\lambda)P_0) \log(\lambda P + (1-\lambda)P_0))$$

$$\leq -\lambda T_2(LP \log P) - (1-\lambda) T_2(LP_0 \log P_0)$$

$$0 \leq \lambda \leq 1$$

とあるが、ここで P_0 が定常状態 $LP_0 = 0$ とあるとすると

$$-\lambda T_2(LP \log(\lambda P + (1-\lambda)P_0)) \leq -\lambda T_2(LP \log P)$$

λ を限り $\lambda \rightarrow 0$ として

$$T_2(LP \log P_0) \geq T_2(LP \log P), \therefore \sigma(P|P_0) \geq 0.$$

古典マルコフ過程の H-定理は、(特別な凸函数 $P \log P$ に限らず) 一般の凸函数について成立つ形式である。このことは非可換代数の上の動力子半群に対しても成立するものであることは Jensen の不等式として早くから知られていた。

すなわち dual space 上の map Λ_t^* に対し

$$\Lambda_t^* H(A) \geq H(\Lambda_t^* A) \quad (A \geq 0)$$

$H(x)$ は $0 \leq x < \infty$ の区間 I で定義された凸函数。

特に古典系(可換代数)の場合には $H(x)$ が滑らかな凸函数として上の不等式を generator に対する条件として表わすことが出来る。

$$\text{すなわち} \quad L^* H(A) - H(A)(L^* A) \geq 0$$

上の $\sigma(P|P_0) \geq 0$ は $H(A) = -\log A$, $A = P/P_0$ として P の平均を取ることによって得られるものである。

§ 5. 拡散過程に対する考察

動力半群とその generator によって特徴付ける問題は、与えられた operator がどれだけの性質を備えていれば、その半群の generator になり得るか、に答えなければならぬ。又それによって数学としての解答が完成することは冒険であらう。Hille-Yosida 定理をみてもわかることである。その意味では有限次元の場合の Gorini et al, 有界の場合の Lindblad の定理がそれぞれ答えを出していることになる。しかし、物理の立場から見ると、generator の物理的特性である「散逸性」の本質に十分迫っていないように思われる。何故なら H-定理の右辺に現れる正の量「エントロピー生成」^注の役割を明らかにしていないからである。以下の議論は拡散過程に対しエントロピー生成を用いてその generator を特徴付ける試みである。

注。相対エントロピー $-S(P|P_0) = \text{Tr} P(-\log P + \log P_0)$ の時間微分が閉系系の散逸性を特徴付けることは、少なくとも定常分布 P_0 が熱平衡 — その扱っているカウ系が接触した熱浴に因して — の場合だけ次のように明白なものである。 $P_0 = P_\beta = e^{-\beta(E-F)}$ として

$$\frac{d}{dt} S(P|P_0) = \frac{d}{dt} \text{Tr} P(-\log P) - \beta \frac{d}{dt} \langle E \rangle \quad (\beta^{-1} = \text{熱浴の温度})$$

第一項はカウ系の情報エントロピーの時間変化、第二項は熱浴へ供給されるエネルギー（熱）にもとづくエントロピー変化に相当する。

周知のように拡散過程のマルコフ半群の generator は適当な関数空間上の二階偏微分作用素で表わされる。ユークリッド空間 \mathbb{R}^d 上

$$Au = b_\mu \frac{\partial u}{\partial x_\mu} + a_{\mu\nu} \frac{\partial^2 u}{\partial x_\mu \partial x_\nu} \quad u \in C^2(\mathbb{R}^d)$$

のように書かれる。拡散方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = Au$ の積分付位相解析の一つの結果として吉田先生の教科書 [1] に述べられている

が、現在の統計物理におけるようにひんぱんに使われるためには更に調べるべきことが未だ残っているように思われる。例えば、ユークリッド空間 \mathbb{R}^d の場合 $b_\mu, a_{\mu\nu} \in C(\mathbb{R}^d)$ かつ $\sup |b_\mu|, \sup |a_{\mu\nu}| < \infty$

の条件を課しては、もっとも典型的なガウス過程 $b(x) = -\gamma x$ ($a_{\mu\nu} = \text{const}$) の拡散を含めることも出来るわけである。

さて、上の diffusion operator に対する dissipativity に関する以下のことがわかる。

$$1) \quad Au^2 - 2u(Au) = 2a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\mu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} \geq 0$$

すなわち Lindblad の散逸条件は拡散係数 $a_{\mu\nu}$ が正値であることにより満たされ、これは一階微分の係数 (drift) b_μ によらない。これに対し

$$2) \quad (Au, u) = - \int_{\mathbb{R}^d} a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\mu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} dx - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \left(\frac{\partial b_\mu}{\partial x_\mu} \right) u^2 dx$$

(ただし $u \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$: support compact の $C^2(\mathbb{R}^d)$)

すなわち A が Lumer-Phillips の散逸条件 [2, 3] を満たすこと

の必要十分条件は、drift b_μ に依存する。 $\text{div } b = \frac{\partial b_\mu}{\partial x_\mu} \geq 0$ である。

あるいは無条件に $(Au, u) \leq 0$ が成立する。直観的に
 言えば $\text{div } b$ は '流' の source であり、それが常に供給されている
 は常に dissipative ということになる。もっとも簡単な $\dot{x} = -\gamma x$
 に対応する 1 次元過程 $\frac{\partial u}{\partial t} = -\gamma x \frac{\partial u}{\partial x} + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ $D = \text{const}$
 について見れば、 $b(x) = -\gamma x$ は $\frac{\partial b}{\partial x} = -\gamma < 0$ である
 から、これは無条件に dissipative であるということになる。逆に、
 不安定な運動 $\dot{x} = \gamma x$ ($\gamma > 0$) に対応する "拡散" $Au =$
 $\gamma x \frac{\partial u}{\partial x} + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ は常に $(Au, u) \leq 0$ ($u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^1)$)
 と dissipativity が保証されることになる。(以上は、むしろ
 直観を矛盾するように見えるが実はそうではない。"不安定
 なブラウン運動こそより dissipative である"といういわゆる anomalous
 fluctuation の物理に適合する事実なのである。)

いずれにせよ、以上のことからわかることは、Lumer-Phillips
 の散逸条件 2) にはもっとも単純なブラウン運動すらも適切に
 カバー出来る、ということであって、より左の条件としての
 Lindblad の dissipativity の基礎を求める理由はここに存する。

以下、拡散方程式の積分に関するわれわれの結果を述べた
 め、この場合の H-定理を示しておく。

$$AH(u) - H'(u)(Au) = H'(u) \text{div} \frac{\partial u}{\partial x_\mu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} \geq 0$$

$$u \in C^2(\mathbb{R}^d) \quad H(u) := \int \text{階連続可積分}$$

$$\text{密度 } H''(u) \geq 0$$

特に $H(u) = -\log u$ に対し

$$AH(u) - H'(u)(Au) = -A \log u + \frac{1}{u}(Au) = a_{\mu\nu} \frac{\partial \log u}{\partial x_\mu} \frac{\partial \log u}{\partial x_\nu}$$

$$\begin{aligned} \langle P, AH(u) - H'(u)(Au) \rangle &= \langle P, A \log \frac{1}{u} \rangle + \langle P_0, Au \rangle \\ &= \langle P, A \log \frac{1}{u} \rangle = 0 \quad (\because A_* P_0 = 0) \end{aligned}$$

$$= \int a_{\mu\nu} \frac{\partial \log u}{\partial x_\mu} \frac{\partial \log u}{\partial x_\nu} P \, dx \geq 0 \quad \left(\begin{array}{l} A_* \text{ is} \\ (A_*)^* = A \\ A \text{ の predual} \\ \text{operator} \end{array} \right)$$

$u = P/P_0$ とおくことにより

$$\begin{aligned} \sigma(P|P_0) &= -\langle P, A(\log P - \log P_0) \rangle \\ &= \int a_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \log \frac{P}{P_0} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{P}{P_0} \right) P \, dx \end{aligned}$$

$\sigma(P|P_0)$ の P に関する凸性の検証

$$\delta^{(1)} \sigma(P|P_0) = \int \left[-2 \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(a_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{P}{P_0} \right) P \right) + a_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \log \frac{P}{P_0} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{P}{P_0} \right) P \right] \frac{\delta P}{P} \, dx$$

$$\delta^{(2)} \sigma(P|P_0) = \int a_{\mu\nu} \frac{\partial \delta P}{\partial x_\mu} \frac{\partial \delta P}{\partial x_\nu} \frac{dx}{P} \geq 0$$

remark $\delta^{(2)} \sigma$ (P の変分に対する σ の 2 次変分) の表式は,

$\delta^{(2)} \log P = -\frac{1}{2} \left(\frac{\delta P}{P} \right)^2$ からの寄与と $\delta^{(1)} \log P \times \delta P$ からの寄与との相殺の結果である。

最小問題, $\int P \, dx = 1$, $\sigma(P|P_0) = \min(P)$ の解

$\int \delta P \, dx = 0$, $\delta^{(1)} \sigma = 0$ より λ を Lagrange 未定乗数として

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \left(a_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{P}{P_0} \right) P \right) - \frac{1}{2} a_{\mu\nu} \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} \log \frac{P}{P_0} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} \log \frac{P}{P_0} \right) P = \lambda P. \quad \text{これに}$$

$P = P_0$ 以外にこれを満たす解が存在しなれば $A_* P = 0$ とは无缘。

§ 6. Lebowitz の開放系に対する平衡問題とその解

J. L. Lebowitz は すでに 1960 年前後, 上述の エントロピー生成の最小原理によって 定常分布 P_0 を特徴付ける, という開放系統計力学の一般理論を提出している [16]。これを最近の動力系半群の理論に促って量子系に押し再構成しようとしたのが Spohn [17] (Spohn-Lebowitz [18]) である。その概略を拡張過程に適用する分だけ以下のようにする。

Lebowitz の開放系とは, 密度 ρ に従う系が一般に温度の異なる二つ以上 (有限個) の熱浴に接しており何々との熱接触によって drive される ρ の generator A_{*i} は その定常分布として温度 β_i^{-1} の canonical 分布であり, 全体として generator $\sum_i A_{i*}$ により運動する, というモデルである。このとき全体としての定常分布は

$$\left(\sum_i A_{i*} \right) P_{st} = 0$$

となるべきであるが, それだけ果して “エントロピー生成の最小” の原理から導かれるのだろうか? Spohn は Lebowitz の 20 年前の考えに従って σ を何々の熱浴との間の エントロピー生成 σ_i の和として表わしその最小と与える ρ を調べた。その結果, 熱浴の温度差 $\beta_i - \beta_j$ が小さい場合その 1 次の範囲では確かに $\sigma_{tot} = \sum_i \sigma_i$ を最小にする ρ が P_{st} に一致するが, exact にどう行かないことを確かめた。拡張過程について見れば

$$\sigma(P) = \sum_i \sigma_i(P | \beta_i) = \sum_i \int a_{\mu\nu}^{(i)} \left(\frac{\partial \log P}{\partial x_\mu} \right) \left(\frac{\partial \log P}{\partial x_\nu} \right) P dx$$

として $\int P dx = 1$ のもとに $\sigma(P) = \min(P)$ が

$$\left(\sum_i A_{ix} \right) P = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a_{\mu\nu}^{(i)} \left(\frac{\partial \log P}{\partial x_\nu} \right) P \right) = 0$$

の解と一致するか? という問題になるが, §5 の最後に示したことから一般に一致しないのは一目瞭然である。

ところがここに, Prigogine の “局所ポテンシャル” (local potential) ^[19] という考えがあつて変分函数を変更することにより最小条件が定常条件と厳密に一致するようになることが出来る。それは, $\sigma(P)$ の積分の中が $\text{grad} \log P / \beta$ に関する二次形式 $\times P$ となつていて, この multiplier としての P を同時に変分の対象とすることから余分な非保型項が現れるので, 二次形式とそれを平均する分布としての P とを区別し

$$\sigma(P, S) = \sum_i \int a_{\mu\nu}^{(i)} \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu} (S + \log P_{\beta_i}) \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\nu} (S + \log P_{\beta_i}) \right) P dx = \min(S)$$

とする。最小条件 $\delta^{(1)} \sigma(P, S) = 0$ が $S = -\log P$ において成立する, という条件がすなわち $(\sum_i A_{ix}) P = 0$ である。

又, その時の最小値 $\sigma_{\min}(P, S = -\log P)$ が熱力学的

エントロピー生成 $\sigma_{\min}(P, S = -\log P) = \sum_i \beta_i \langle P, A_i E \rangle$ と一致

する。以下, この事実を Hilbert 空間上の正則散逸作用素 ^(注) [3]

を用いて散逸形式に述べる。(注文献[3]を若干拡張に用いている)

Hilbert 空間 X 上そのノルム $\|\cdot\|$ で dense な subspace V が $\|\cdot\|$ より強いノルム $\|\cdot\|_1$ によって閉であるとする。 X の sesqui linear form $a(u, v)$ が条件 (i) $|a(u, v)| \leq M \|u\|_1 \|v\|_1 \quad \forall u, v \in V$
(ii) $-\operatorname{Re} a(u, u) \geq \delta \|u\|_1^2 \quad \delta > 0 \quad \forall u \in N^\perp V$ ($N = \{u \mid a(u, u) = 0\}$)
を満足せば X の或る dense subspace D を定義域とする閉散逸作用素 A が $(Au, v) = -a(u, v) \quad (\forall v \in X)$ によって定義され、 A は X 上の縮小半群 (マウラ型) の generator とする。更に非縮性 (iii) $a(u, v) = \overline{a(v, u)}$ ($a(u, u) = \text{real}$) があれば A は自己共役、任意の $f \in N^\perp$ に対し $Au = f$ が解を持つ (何故なら (ii) より A は閉値域 $R(A) = \overline{R(A)}$ ばかり), 次の変分原理

$$(V) \quad J(u) \equiv \frac{1}{2} a(u, u) + (f, u) = \min(u)$$

の解と一致する。ユークリッド空間の領域 R 上 $V = C_0^1(R)$, $X = L^2(R)$ とし $a(u, v) = \int_R a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\mu} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x_\nu} p \, dx$ ($a_{\mu\nu} \xi_\mu \bar{\xi}_\nu \geq \delta_1 |\xi|^2$)
 $p \in L^1(R)$ により sesqui linear form ε を定義すると (i), (iii) は成立、更に p に対する適当な条件より (ii) が満たされるのを仮定すると、

$$Au = \frac{\partial}{\partial x_\mu} (a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} p), \quad f = -\frac{\partial}{\partial x_\mu} (b_{\mu} p) \quad (b_{\mu} \in L^2(R) \text{ とす})$$

p が Fokker-Planck 方程式 $\frac{\partial}{\partial x_\mu} (a_{\mu\nu} \frac{\partial p}{\partial x_\nu}) - \frac{\partial}{\partial x_\mu} (b_{\mu} p) = 0$ の解であるための必要十分条件は変分原理 (V) の解が $u = -\log p$ と一致することである。

附記. その後有限次元 C^* 代数上で Lebowitz の変分問題は完全な解が得られた (to appear in Commun. Math. Phys.)

文 献

- [1] K. Yosida; Functional Analysis 4th edition, Springer Verlag (1974)
- [2] E. Hille, R. Phillips; Functional Analysis and Semi-groups (1957).
- [3] 田辺広城「発展方程式」岩波書店数学選書。(1975).
- [4] J. Mehra and E. C. G. Sudarshan; Nuovo Cimento 11 B, 215 (1972).
- [5] A. Kossakowski, Rep. Math. Phys. 3, 247 (1972).
- [6] E. B. Davies, Comm. Math. Phys. 15, 277 (1969) 39 91 (1974).
- [7] E. B. Davies, Quantum Theory of Open Systems London Academic Press (1976).
- [8] R. S. Ingarden and A. Kossakowski, Ann. Phys. 89, 451 (1975).
- [9] G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 48, 119 (1976). (1976).
- [10] V. Gorini, A. Kossakowski and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. 17, 821
- [11] H. Spohn, Rep. Math. Phys. 10, 189 (1976). (1978).
- [12] A. Frigerio, Lett. Math. Phys. 2, 33 (1977); Comm. Math. Phys. 63, 289
- [13] E. H. Lieb and M. B. Ruskai, Adv. Math. 12, 269 (1974).
- [14] G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 40, 147 (1975).
- [15] E. H. Lieb, Adv. Math. 11, 267 (1973).
- [16] P. G. Bergmann and J. L. Lebowitz, Phys. Rev. 99, 578 (1955).
- [17] H. Spohn, J. Math. 19, 1277 (1978). (Wiley-Interscience 1971)
- [18] H. Spohn and J. L. Lebowitz, Adv. Phys. Chem. XXXVIII 109 (1978).
- [19] P. Glansdorff and I. Prigogine, Thermodynamic Theory of Structure
- [20] H. Hasegawa and T. Nakagomi, J. Stat. Phys. 20, 191 (1979).