非平衡統計演算子の一般論
—Kirkwood の時間平均操作の有効性—

阪大・工　一 柳 正 和

§1. 統計力学の基本的問題

統計力学は，微視的階層での完全な知識からある粗いまとめ方で整理することを一つの本質としているが，微視的力学の他に統計性の介入を重要な基礎概念としている。どのようなまとめ方をするかは，物理的視点の定め方によるので，いくつかの粗さの段階が存在する。この点は，すでに常識となっているので今更何か論ずべきことも残されていないように思えるかも知れない。だが，paradox of irreversibility が残っている。[注] 筆者は，複数の階層の存在に前提された一つの試論をここで展開してみたい。

Boltzmann のH定理については，Zermelo と Loschmidt がH函数の単調減少性は力学法則と矛盾するとの異論を唱えたことは有名なことである。Loschmidt の反論は，時間反転に対する力学法則の対称性に依拠したものであった。ある運動の途中で粒子の速度の大きさを変えないで方向だけを反転させれば，粒子はもと来た軌道を逆にたどることになるので，もし粒子の分布函数が速度の偶函数であるとすると速度の反転した運動に対するH函数の変動はもとの運動に対するものとは逆にならざるを得ず，H函数の単調性は成り立たないというのである。この批判に対する Boltzmann の回答が molecular chaos の仮定の導入ということであった。この仮定は，Burbury（1894年，Nature）によって示されたように，時間反転についての不変性をもっていない。この事こそが，統計性の介入ということであり，統計集団を特徴づける不可欠の要素なのである。

H定理証明に用いられた Boltzmann 方程式は，1粒子分布函数による多粒子系の記述であって，力学的運動方程式（例：Liouville-von Neumann 方程式）の階層から粗視化の手続き

[注]　この paradox については，先回の研究会での小嶋氏の報告に新しい論点が示されている。[1] そこには，「…不可逆性の起源も，一方的に系の外に求めるべきではなく，実は，対象系も環境も含めた自然そのものの内に元々内在していたものということになりそうである。もしそうならば，“時間の矢”は最初から自然自身の中で決定されていたはず…」とある。更に進めて，「…“時間の矢の謎”に答えることではなく，“時間の矢”を前提しそれに沿うての Beings の生成を辿ること，即ち≪どういう運動の中から，どんな構造がどのように形成されるか≫という移行のメカニズムの解明を通じて，“可逆的 Beings の生成の秘密にこそ迫るものだ」とある。

を経て得られたものである。このような粗視化の概念の重要さが指摘されてすでに久しい。「古典力学であれ，量子力学であれ，ミクロの段階の力学法則を根底として，どういう視角からの粗視化が可能か，その視角の中での次々の粗視的段階での物理法則がどういう形をとるか。[2)]」このことを明らかにすることは，統計力学の基本的な課題なのである。この課題は，次のような基本的問題を含んでいる：

(1) Gibbs統計集団の物理的意味は何か。また，これを非平衡統計力学にまで一般化することはできるか（非平衡統計演算子の一般論）。

(2) 粗視化の各階層での物理法則の不可逆性をミクロの力学の可逆性といかに関連づけるか。

従って，ここでの問題は，力学の法則に従うとされる系の性質が，なぜ統計集団の性質によって表現できるのだろうかということでもあり，統計力学の建設過程で多くの人々によって考えられてきた種類のものである。[注]

§2. Kirkwood の時間平均操作法の問題点

先ず，Kirkwood の方法[5)]とはどのようなものか，その大筋のみ述べる。

彼（1946年）は，観測の理論の見地からすれば，巨視的物理量というものは，τ 時間（微視的には“長い”が巨視的には“短い”時間）に亘っての平均値であるとし，次のように定義した：

$$\langle Q[t;\tau]\rangle=\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau}ds\int d\Gamma\, Q(\Gamma)\, f(\Gamma,t+s) \tag{1}$$

但し，Γは位相点であり，$f(\Gamma,t)$はN体分布函数であって微視的力学方程式（Liouville方程式）に従う。

$$\frac{\partial}{\partial t}f(\Gamma,t)+i\mathscr{L}f(\Gamma,t)=0. \tag{2}$$

$\mathscr{L}$は Liouville 演算子である。定義(1)から，粗視化された分布函数$\overline{f}(\Gamma,t)$は

［注］ Gibbsのアンサンブル理論は，aged system の統計集団に拡張された（Onsager. 1931年）。非平衡系のアンサンブル理論として種々のものが提案されてきたが，ここでは，Cox[3)]の構想に注目する。彼は，系の量子状態（$i=1,2,\cdots$）に対して確率分布 f_i を導入できるとし，f_i は確率論的方程式に従うとした。従って彼の理論では，不可逆性は，その出発点において導入ずみなのである。ここが，今日からすれば不満な点ではあるが，線型応答理論が構築される段階（1956年頃）で，Cox のアイデアが役立った。特に，中嶋[4)] の分析は，非平衡系のアンサンブル理論を展開する上での多くのヒントを提供している。

$$\bar{f}(\Gamma, t)=\frac{1}{\tau}\int_0^{\tau}ds\, f(\Gamma, t+s) \tag{3}$$

のように，floating time-average として導入される。

この方法は，しかしながら重大な問題に直面した。それは，次の２つに凝縮している。第１は，$\bar{f}(\Gamma, t)$ が再び Liouville 方程式に従うことであり，(2) 式が可逆な方程式である限り，粗視化された $\bar{f}(\Gamma, t)$ もその可逆性を保存せざるを得ない。第２に，粗視化した $\bar{f}(\Gamma, t)$ の知識からもとの分布函数の全ての情報を復元することができる。このことは，次の方程式が成り立つことから簡単に示せる：

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\bar{f}(\Gamma, t)=(\bar{f}(\Gamma, t+\tau)-\bar{f}(\Gamma, t))/\tau. \tag{4}$$

Kirkwood の方法によっては，どこで情報の消失があったか不明なのである。(3) 式にもどって，これを一般化して

$$\bar{f}(\Gamma ; t)=\frac{1}{\tau}\int_{-\infty}^{0}ds\, e^{s/\tau}f(\Gamma, t+s) \tag{5}$$

と定義しても事情は一向に変化しない。この定義は，直ちに

$$f_{\varepsilon}(\Gamma, t)=\lim_{\varepsilon\to 0}\ \varepsilon\int_{-\infty}^{0}ds\, e^{\varepsilon s}f(\Gamma, t+s) \tag{6}$$

を想起さすが，Kirkwood の方法では，$\tau\to\infty$ ととることは許されない点に注意しておく。

従来，ここに指摘した「情報の復元可能性」が，Kirkwood の方法の一つの欠陥とされてきたのだが，次節に示すように，復元自体も額面通りではなく，非平衡統計力学の手法として Kirkwood の方法を生かすことができる。

§3. 非平衡統計演算子

非平衡系の統計力学とは LN (Liouville-von Neumann) 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t)+i\,[\mathbf{H}, \rho(t)]=0 \tag{7}$$

の一般解を求めることであると一先ず定式化しておこう。$\rho(t)$は規格化された統計演算子 ($\mathrm{Tr}\,\rho(t)=1$)である。定常解については，系がエルゴート的である限り，カノニカル分布が一意的な解である。

粗視化した統計演算子 $D(t)$を次のように定義する：

$$\ln \mathrm{D}(t)=\frac{1}{\tau}\int_{-\tau}^{0}ds\ \ln\ \rho(t+s), \tag{8}$$

但し，τ は適当に問題に応じて定めることとしておく。重要な点は，この D(t)も LN 方程式に従うということである。すなわち，

$$\frac{\partial}{\partial t}\ln \mathrm{D}(t)+i\,[\mathbf{H},\ \ln \mathrm{D}(t)]=0 \tag{7'}$$

である。粗視化する時間を［0, τ］とするか［$-\tau$, 0］とするかは，因果律に係わる問題でもある。(8) 式によれば，ＬＮ方程式の一つの解が得られると次々に新しい解を作ることができるのである。粗視化する前の解も粗視化した解も共に LN 方程式の解であるというのは一見不思議である。どちらも可逆な方程式の解であるので，(8) 式で導入した粗視化によっては，不可逆性の発現する余地はなさそうに思える。だが，粗視化に伴って，次の事が見えてくる。先ず，定義によって

$$\frac{\partial}{\partial t}\ln \mathrm{D}(t)=\{\ln \rho(t)-\ln \rho(t-\tau)\}/\tau \tag{9}$$

であるので，Klein の不等式から

$$\beta \mathrm{P}[t\,;\tau]\equiv \mathrm{Tr}\,\rho(t)\cdot\frac{\partial}{\partial t}\ln \mathrm{D}(t)=\mathrm{Tr}\,\rho(t)\{\ln\rho(t)-\ln\rho(t-\tau)\}/\tau\geq 0, \tag{10}$$

が得られる。βは，ここでは便宜上の parameter である。P［t ; τ］は微視的なエントロピー生成であることを以下で示す。

ところで系の演算子の集合 $\{\mathbf{A}_j : j=0,1,\cdots\}$ を 系の物理量の全ての線型結合を含む lineax closure であるとすれば，$\rho(t)$もこれらの演算子を用いて表現することができる。[6] このことを利用して，最も詳細な情報の下での統計演算子 $\rho(t)$を

$$\ln\rho(t)=-\beta\mathbf{H}-\sum_{j=0}^{(\infty)}\mathbf{A}_j\cdot\mathbf{x}_j(t),\ (\mathbf{A}_0\equiv\mathbf{I}\ とする\ ) \tag{11}$$

と書いて，これが (7) 式の解となる条件を求めてみよう。$\mathbf{x}_j(t)$ は c 数であり，$\mathbf{A}_j$ ($j=0,1,\cdots$) は，$\ln\rho(t)$ を表現するに必要な演算子であるがその数は有限とは限らない。一般に $\mathbf{A}_j$ の数は無限個であるだけでなく，(11) 式の表現も一意的とは限らない。物理的考察に応じて，種々の組 $\{\mathbf{A}_j\}$ が必要になる。演算子の組 $\{\mathbf{A}_j\}$ に関しては，次の様な Lie代数として扱い得る：

$$[\,i\mathbf{H},\ \mathbf{A}_j\,]=\sum\mathbf{A}_k\,g_{kj}, \tag{12}$$

g_{kj} は Lie 代数の構造定数と呼ばれる定数である。更に，次のような量が常に存在するとする。U (t, t_0) を時間発展演算子として

$$U(t,\ t_0)\mathbf{A}_j U^*(t,\ t_0)=\sum \mathbf{A}_k G_{kj}(t,\ t_0) \tag{13}$$

g_{kj} は $\partial G_{kj}(t,\ t_0)/\partial t$ の $t=t_0$ での値である。

ここでの代数的構造は明らかに LN 方程式に対する初期条件とは無関係に定まるものであり，一度決めれば，同一の組 $\{\mathbf{A}_j\}$ を用いている限り，任意の初期条件のもとでの一般解を決める。換言すれば，時間平均操作によっては，代数的構造は変化しないのである。

(12)，(13) を用いると，LN 方程式は

$$\dot{\mathbf{x}}_j(t)=\sum \mathbf{x}_k(t)\, g_{kj} \tag{14}$$

と同等となり，この方程式の解は

$$\mathbf{x}_j(t)=\sum G_{jk}(t,\ t_0)\,\mathbf{x}_k(t_0) \tag{15}$$

と書ける。「最も詳細な」という意味は，演算子 $\mathbf{A}_j$ の数に等しいだけの初期条件 $\mathbf{x}_k(t_0)$ が与えられているという意味である。

$\mathbf{x}_j(t)$がどんな物理量であるかは，形式的なエントロピー

$$S[\rho(t)]=-\mathrm{Tr}\,\rho(t)\ln\rho(t) \tag{16}$$

に (11) 式を代入して

$$\mathbf{x}_j(t)=\delta S[\rho(t)]/\delta(\mathrm{Tr}\,\rho(t)\mathbf{A}_j) \tag{17}$$

となることに注意すれば，「熱力学的力」(単に形式としての) に該当する量であることが知れる。

次に，LN 方程式の解 (11) を (10) 式に代入して

$$\begin{aligned}\beta P[t\,;\tau]&=-\sum \mathrm{Tr}\,\rho(t)\,\mathbf{A}_j\{\mathbf{x}_j(t)-\mathbf{x}_j(t-\tau)\}/\tau\\&=\sum(\Delta\alpha_j(t)/\Delta t)\cdot\mathbf{x}_j(t)\geq 0\end{aligned} \tag{18}$$

が得られる。但し，

$$\Delta\alpha_j(t)/\Delta t\equiv \mathrm{Tr}\,\rho(t)\{U(t-\tau,\ t)\,\mathbf{A}_j U^*(t-\tau,\ t)-\mathbf{A}_j\}/\tau \tag{19}$$

は，粗視的な流束である。(19) 式において，$\tau\to+0$ とする事は許されない。この点こそは，Casimir[7] が Onsager の統計熱学に対して指摘した事情と軌を一にするものである。(18) 式は，エントロピー生成と解したい不等式であるが，理論が熱力学であることをまだ示していない。

次に，前節に述べた情報の復元について再論する。(9) 式より

$$\ln\rho(t)=\sum_{n=0}^{\infty}\tau\frac{\partial}{\partial t}\ln D(t+n\tau) \tag{20}$$

が得られる。これは形式的な意味では，$D(t)$ の情報を用いて $\rho(t)$ の情報を復元したことになるが，(20) 式は情報復元には無限先の未来の情報を必要としている。すなわち，実現可能な復元を意味せず，(20) 式を有限和で置き換えれば，その時点で情報の消失が伴うことにならざるを得ない。また (8) 式で，Kirkwood の定義にもどって粗視化領域を $[0,\ \tau]$ に変更すれば，(20) 式の代りに，$D(t)$ の無限の過去の情報まで含めて $\rho(t)$ の情報が復元されるという結論を得ることができる。こうした議論から得られる自然な結論は，(20) 式をもって「情報の復元」と見做すのでなく，微視的階層の情報 ($\rho(t)$) が，未来まで伝達される (記憶効果の別の表現) と解することであろう。因果律からすれば，粗視化の領域は $[0,\ \tau]$ でなく $[-\tau,\ 0]$ でなければならない。

§4. 初期条件と粗視化

LN 方程式から Boltzmann 方程式を導くことは，時空間的な粗視化に相当するいくつかの仮定 (BBGKY 理論) を置けば可能である。Bogoliubov は n (>1) 体の分布函数 $f_n(t)$は，1粒子分布函数 $f_1(t)$ 汎函数であって，時間変化は $f_1(t)$ の変化を通して起ると仮定した。この仮定は，十分遠い過去において，粒子間の相関を消去するという条件と同じであって，時間反転について非対称 (因果的) である。粒子間の相関のない初期状態は，その後の殆んどの理論で採用されることとなった。しかしながら，任意の初期条件をとることにすれば，系のエントロピーは増大もするが減少することもあっても差支えないのではないだろうか。弱い相関のある初期条件から出発すると，初期相関が減衰し去った後においてのみ，H定理が成り立つとする議論もある。すなわち，nontrival な初期相関が，力学的発展に伴って発生する系統的な相関によって駆逐されてしまった段階で，H定理が成り立つとするのである。この事をKirkwood の方法を用いて再論する。筆者の主張は，Kirkwood の方法は，初期時刻においてだけ採用するという点である。

因果律から，粗視化は (8) 式で定義すべきであった。特に初期値は

$$\ln \mathrm{D}(t_0)=\frac{1}{\tau}\int_{-\tau}^{0}\mathrm{d}s\ \ln\rho(t_0+s) \tag{8'}$$

で与えられるとしなければならない。任意時刻 t での値は

$$\ln \mathrm{D}(t)=\ln\{\mathrm{U}(t,\ t_0)\,\mathrm{D}(t_0)\,\mathrm{U}^*(t,\ t_0)\} \tag{21}$$

で求められる。(11) 式を用いて

$$\ln \mathrm{D}(t_0)=-\beta\mathbf{H}-\sum_{j=0}^{f}\mathbf{A}_j\cdot\mathbf{X}_j(t_0)\,. \tag{22}$$

$$\mathbf{X}_j(t_0)=\frac{1}{\tau}\int_{-\tau}^{0}\mathrm{d}s\ \mathbf{x}_j(t_0+s)。 \tag{23}$$

ここで，粗視化の効果は，$\mathbf{x}_k(t)$ の殆んどのものは，$[-\tau,\ 0]$ の間で時間平均操作することによって消去されるという具合に現れた。すなわち

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{X}_j(t_0)&\neq 0, \quad j=0,1,\cdots f(=f(\tau))\\ &=0, \quad j>f\end{aligned}\right\} \tag{24}$$

とすることができる。最も重要な点は，この操作によっても，演算子の組 $\{\mathbf{A}_j\}$ の代数的構造は全く変化せず系の運動の様態のみが変るという点である。今の例では，(24) 式が巨視的変数 (及び，それに対応する演算子) を決める条件式であり，LN 方程式の巨視的初期条件を定めている。この視点からすると，どれだけの変数を用いて初期状態を設定するかということが，Kirkwood の時間平均操作の一側面であることがわかる。初期状態を熱平衡状態とする応答理論の立場は，エルゴート的な系では $\tau\to\infty$ とすることと同等なのである。

(22) を (23) に代入すれば，

$$\ln \mathrm{D}(t)=-\beta\mathbf{H}-\sum_{j=0}^{f}\mathbf{A}_j\cdot\mathbf{X}_j(t)+\Phi(t) \tag{25}$$

を得る。但し，$\Phi(t)$ は $\mathbf{A}_j$ ($i>f$) による微視的励起の効果である。LN 方程式に代入して，

$$\Phi(t)=\sum_{j=0}^{f}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}s\ \mathrm{U}(t,s)\{[i\mathbf{H},\mathbf{A}_j]\cdot\mathbf{X}_j(s)+\mathbf{A}_j\cdot\dot{\mathbf{X}}_j(s)\}\,\mathrm{U}^*(t,s) \tag{26}$$

と書けることが示せる。$\Phi(t)$ が現れた理由は，$\{\mathbf{X}_j(t)\,;\,j=0,1,\cdots,f\}$ のみでは，運動方程式が閉じないからである。$\Phi(t)=0$ と近似すれば，局所平衡の仮定に該当する。

特性時間 τ の存在に前提された初期条件が (22) 式で与えられることは，(24) 式を満たす

巨視変数のみで統計演算子が書かれるという点で，ここでの理論はGibbs 集団の一般化になっている。このような理論は，すでにRichardson[8] が行っている（但し，古典系で）。そこでは，prior distribution function という概念が展開されている。

相対エントロピーの性質

$$S[D(t)\,|\,D(t_0)]=\mathrm{Tr}\,D(t)\{\ln D(t)-\ln D(t_0)\}\geq 0 \tag{27}$$

を利用すれば，直ちに

$$\sum_{k=0}^{f}\int_{t_0}^{t}ds\,\{\mathbf{J}_k(s)\cdot\mathbf{X}_k(s)+\alpha_k(s)\cdot\dot{\mathbf{X}}_k(s)\}\geq\sum_{k=0}^{f}\alpha_k(t)[\mathbf{X}_k(t)-\mathbf{X}_k(t_0)] \tag{28}$$

が得られる。但し

$$\alpha_k(t)=\mathrm{Tr}\,D(t)\mathbf{A}_k,\quad \mathbf{J}_k(t)=\dot{\alpha}_k(t) \tag{29}$$

である。一方，熱力学的な意味で，Gibbs-Duhem の関係式

$$\sum_{k=0}^{f}\alpha_k(t)\cdot\delta\mathbf{X}_k(t)=0 \tag{30}$$

が成り立っておれば，(28)式において $t=t_0+\Delta t$（$\Delta t\rightarrow+0$）とおけば

$$\beta P[t_0;\,\tau]=\sum_{k=0}^{f}\mathbf{J}_k(t_0)\cdot\mathbf{X}_k(t_0)\geq 0 \tag{31}$$

であることが証明できる。この結果は，(18)式と同じ構造のものであるが，熱力学的力が(31)式では，粗視化されている点と熱力学的流束が粗視化された平均値 $\alpha_k(t)$ の時間微分になっている点が(18)式との違いである。微視的段階での任意の初期条件，$\{\mathbf{x}_j(t_0)\,;\,j=0,1,\cdots\}$，から出発しても，粗視化した統計演算子 $D(t)$ でみれば，系のエントロピーは少なくとも初期段階では増大する。任意の時刻 t でのエントロピー生成が正であることの証明には別の条件を附加する必要があるようである[9]。

§5. 多層的階層構造

初期条件を与えたとき，巨視系での不可逆過程の進行は，次の三つの段階に分けて扱われた（Bogoliubov の発想）。すなわち，第1段階は，初期混沌の過程であり，急激で極めて複雑な変動（殆んどの場合，外部パラメターを変化さす方法では制御不能）が見られる段階である。微視的な初期条件のかなり多くの部分はこの段階で消失するとされる。第2段階は，運動学的過程で，比較的ゆるやかな変動モードに同期した過程が進行する。第3段階が流体力学的過程

であり，不可逆過程の熱力学の対象となるものである。これら三つの代表的段階は Chronological に出現するとされる。

このように，巨視系での不可逆過程は，各段階を特徴づける時間によって分類することができる。前節までは，一個の特性時間 τ の存在を措定してきたが，粗視化の操作は，次のように位階的に導入できる：

$$\ln \mathrm{D}_n(t)=\frac{1}{\tau_n}\int_{-\tau_n}^{0}\mathrm{d}s\ \ln \mathrm{D}_{n-1}(t+s),\quad (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots) \tag{32}$$

但し，$\tau_{n+1}>\tau_n>\tau_0\ (\to+0)$ とし，$\mathrm{D}_0(t)=\rho(t)$ であるとする。今までと同様にして，

$$\ln \mathrm{D}_n(t)=-\beta\mathbf{H}-\sum_{j=0}^{f^{(n)}}\mathbf{A}_j\cdot\mathbf{X}_j^{(n)}(t)+\Phi_n(t), \tag{33}$$

$$\Phi_n(t)=\sum_{j=0}^{f^{(n)}}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}s\ \mathrm{U}(t,s)\{[i\,\mathbf{H},\mathbf{A}_j]\cdot\mathbf{X}_j^{(n)}(s)+\mathbf{A}_j\cdot\dot{\mathbf{X}}_j^{(n)}(s)\}\,\mathrm{U}^*(t,s) \tag{34}$$

が導ける。但し，

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{X}_j^{(n)}(t_0)&=\frac{1}{\tau_n}\int_{-\tau_n}^{0}\mathrm{d}s\ \mathbf{X}_j^{(n-1)}(t_0+s)\neq 0, && j=0,\ 1,\cdots,\ f^{(n)}\\ &=0 && j>f^{(n)}\end{aligned}\right\} \tag{35}$$

と置いた。$f^{(n)}\leq f^{(n-1)}$ であることは自明である。

通常のようにエントロピーを $\mathrm{D}_n(t)$ で定義すれば

$$\mathrm{S}(\mathrm{D}_n(t))=-\ \mathrm{Tr}\ \mathrm{D}_n(t)\ \ln \mathrm{D}_n(t)\geq \mathrm{S}(\mathrm{D}_{n-1}(t)) \tag{36}$$

が成り立つ。すなわち，粗視化することで，エントロピーは増えており，位階的に情報の消失を行っていることになる。また，エントロピー生成は

$$\beta\mathrm{P}_n[t;\tau_n]\equiv \mathrm{Tr}\ \mathrm{D}_n(t)\frac{\partial}{\partial t}\ln \mathrm{D}_{n+1}(t)\geq 0,\quad (n\neq 0), \tag{37}$$

となる。すなわち，流束を Casimir[7] の意味での時間微分によって定義すれば，エントロピー生成は常に正である。

統計演算子を (33) 式の形で求めたことは，次のような重要な内容を先どりしたものであることに注意しておく必要がある。(33) 式を用いて流束

$$\mathbf{J}_k^{(n)}(t)\equiv \mathrm{Tr}\ \mathrm{D}_n(t)[i\,\mathbf{H},\mathbf{A}_k],\quad (k=0,\ 1,\cdots,\ f^{(n)}), \tag{38}$$

を求めると，

$$\mathbf{J}_k^{(n)}(t)=\sum_{j=0}^{f^{(n)}}\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}_n(t)\,[\,i\mathbf{A}_j,\mathbf{A}_k\,]/\beta$$

$$+\sum_{j=0}^{f^{(n)}}\int_{t_0}^{t}ds\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}_n(t)[\mathrm{U}(t,s)\{[\,i\mathbf{H}\cdot\mathbf{A}_j\,]\cdot\mathbf{X}_j^{(n)}(s)+\mathbf{A}_j\cdot\dot{\mathbf{X}}_j^{(n)}(s)\}\mathrm{U}^*(t,s),\mathbf{A}_k]/\beta$$

と書ける。ここでは恒等式 $\mathrm{Tr}\,e^{A+B}[A, C]=\mathrm{Tr}\,e^{A+B}[C, B]$ のみを用いた。[10]

今仮に，着目している階層(n) が丁度熱力学的であったとすると，演算子は互に平均的に可換であるとすればその巨視性の表現となる：

$$\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}_n(t)\,[\mathbf{A}_j,\mathbf{A}_k]=0 \tag{39}$$

更に，Gibbs-Duhem の関係式

$$\sum_{j=0}^{f^{(n)}}\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}_n(t)\,\mathbf{A}_j\cdot\dot{\mathbf{X}}_j^{(n)}(t)=0 \tag{40}$$

も成り立っていると考えてよい。この二つの条件が満たされると，結局,

$$\mathbf{J}_k^{(n)}(t)=\sum_{j=0}^{f'^{(n)}}\int_{t_0}^{t}ds\,\mathrm{Tr}\,\mathrm{D}_n(s)[[i\mathbf{H},\mathbf{A}_j],\,\mathrm{U}^*(t,s)\,\mathbf{A}_j\mathrm{U}(t,s)]\cdot\mathbf{X}_j^{(n)}(s) \tag{41}$$

が得られる。（41）式の右辺は非平衡状態での応答函数に他ならない。この結果は，Kubo, Yokota and Nakajima[11]の表式の一般化である。

このように各階層において，エントロピーやエントロピー生成の値は異なる。このことは大変重要な点である。すなわち，ある階層からすれば，エントロピー的であるエネルギーも，一つ深い階層では，その一部は自由エネルギーになっている。だから，このような機構が働けば，例えば，熱運動に埋れていた熱的ゆらぎのエネルギーの一部をもより深い階層では有効な仕事に変換でき得るはずなのである。このように，多層的階層構造を考えることは，対象としている階層のエントロピー自体が今まで以上に多様性を示したり，より豊富な内容を獲得するのではないだろうか。

［文 献］

1) 小嶋　泉：「進化の力学への場の理論的アプローチ」研究会報告〔物性研究 47（’87）No. 5, 素粒子論研究 74（’87）No. 6, 物性研究 51（’88）No. 11, 素粒子論研究 78（’88）No. 2〕

2) 久保亮五：統計力学のあゆみ［量子物理学の展望(上) 江沢・恒藤編 岩波書店 1977］

3) R. T. Cox: Rev. Mod. Phys. **22** (1950) 238.
4) 中嶋貞雄：物性論研究 102（1956） 24.
5) J. G. Kirkwood: J. Chem. Phys. **14** (1946) 180; ibid **15** (1947) 72.
6) Y. Alhassid and L. Levine: Phys. Rev. **A18** (1978) 89.
7) H. B. G. Casimir: Rev. Mod. Phys. **17** (1945) 343.
8) J. M. Richardson: J. Stat. Phys. **11** (1974) 323.
9) I. Ojima, H. Hasegawa and M. Ichiyanagi: J. Stat. Phys. **50** (1988) 633.
10) M. Ichiyanagi: J. Phys. Soc. Japan **55** (1986) 2093.
11) R. Kubo, M. Yokota and S. Nakajima: J. Phys. Soc. Japan **12** (1957) 1203.

Exact Dynamical Behavior near the Critical Point in the Transverse Ising Model

名大・理　李　　　　燦

C. Lee and S. I. Kobayashi, Phys. Rev. Lett. **27**, (1989) 1061 を御覧下さい。