

古典気体における1体分布関数のゆらぎ

お茶の水女子大 橋 爪 夏 樹
 湘 北 大 落 合 萌

§ 1. はじめに

van Kampen¹⁾, 久保氏ら²⁾, 富田氏ら³⁾により立てられたマルコフ過程に従う巨視系での非平衡状態の統計論によれば, 巨視的変数のゆらぎを決定する手法が与えられる。この方法をもう一段微視的な変数, たとえば1体分布関数などに拡張することは興味がある。その際, 良く知られているように, マルコフ過程という制限を取除くことが, ボルツマン方程式などの drift term を導入するのに必要である。Siegert⁴⁾により希薄気体に対する, 2体衝突まで考慮した master equation が与えられているが, これから久保氏の手法により1体分布のゆらぎの分散の満すべき運動方程式も書きおろされる。これらの二式に drift term がどのような形で入ってくるのであろうか。また, 久保氏らの方法では系の寸法無限大という巨視的極限をとる操作が重要な役割をもつのであるが, 1体分布のような一段微視的な変数まで考えるとき, この極限操作はどうなるのか。このような二つの疑問がこの小論の出発点であった。

§ 2. 1体分布のゆらぎ

簡単のために, N 個の質点よりなる古典気体を考え, j 番目の粒子の空間座標を $\mathbf{q}_j$, それに正準共役な運動量を $\mathbf{p}_j$ とする。 μ -空間の座標は $\mathbf{x}_j \equiv (\mathbf{q}_j, \mathbf{p}_j)$ と書く。粒子間には2体中心力 $\varphi(|\mathbf{q}_j - \mathbf{q}_k|)$ が働け, また十分ゆるやかな外場 $\varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q}_j)$ が作用するものとしよう。 μ -空間内の点 $\mathbf{x} \equiv (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ における1体分布は

$$f(\mathbf{x}) \equiv \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \equiv \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_j) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j) \quad (2.1)$$

で与えられる。その平均値は1体分布関数になるのであるが, Bogoliubov⁵⁾の規格化によるものを $F_1(\mathbf{x}, t)$ とすると,

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \frac{N}{V} F_1(\mathbf{x}, t) \quad (2.2)$$

となる。V は気体を収める容器の体積であり、平均は Γ -空間内の気体の分布関数 $D(t; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ によるものである：

$$\langle \dots \rangle = \int \dots \int \dots D(t; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N \quad (2.3)$$

同一時刻での 2 次以上のモーメントは次のようになる：

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}') \rangle &= \frac{N(N-1)}{V^2} F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) + \frac{N}{V} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, t), \\ \langle f(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}') f(\mathbf{x}'') \rangle &= \frac{N(N-1)(N-2)}{V^3} F_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) \\ &+ \frac{N(N-1)}{V^2} \{ \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') F_2(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'') F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \\ &+ \delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'') F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', t) \} + \frac{N}{V} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'') F_1(\mathbf{x}, t), \dots \dots \end{aligned} \quad (2.4)$$

$F_2, F_3, \dots$ は Bogoliubov の 2, 3, $\dots$ 体分布関数である。ゆらぎを論ずるにはモーメントよりキュムラントの方が都合がよい。規格化因子を $F_1, F_2, \dots$ に合わせたものを $\lambda_1, \lambda_2, \dots$ とすると、

$$\begin{aligned} \lambda_1(\mathbf{x}, t) &= F_1(\mathbf{x}, t), \\ \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) &= \left(1 - \frac{1}{N}\right) F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) - F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}', t) + \frac{V}{N} \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, t), \\ \lambda_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 - \frac{2}{N}\right) F_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) - F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}', t) F_1(\mathbf{x}'', t) \\ &+ \frac{V}{N} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \{ \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') F_2(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'') F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \\ &+ \delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'') F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', t) \} + \left(\frac{V}{N}\right)^2 \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'') F_1(\mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & - F_1(\mathbf{x}, t) \left\{ \left(1 - \frac{1}{N}\right) F_2(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{V}{N} \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') F_1(\mathbf{x}', t) - F_1(\mathbf{x}', t) F_1(\mathbf{x}'', t) \right\} \\
 & - F_1(\mathbf{x}', t) \left\{ \left(1 - \frac{1}{N}\right) F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', t) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{V}{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'') F_1(\mathbf{x}'', t) - F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}'', t) \right\} \\
 & - F_1(\mathbf{x}'', t) \left\{ \left(1 - \frac{1}{N}\right) F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \right. \\
 & \quad \left. + \frac{V}{N} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') F_1(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}', t) \right\}, \quad (2.5)
 \end{aligned}$$

となる。これらの式は熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ (ただし $v \equiv V/N$ は固定) をとるとき都合のよい形にしてある。

さて Bogoliubov の理論⁵⁾ は分布関数を $1/v$ または v で展開する形で立てられている。この種の展開, 特に $1/v$ 展開に対しては近年, 展開項の発散という困難が生じているのであるが, 現在これに代る他の一般論もないことであるから, 展開の初項のみを考えることにして, Bogoliubov 理論を借用することにする。粒子間力が短かい有効距離をもち, 気体が稀薄であるときは, $1/v$ 展開が使用され, すなわち形式的に $1/v \rightarrow 0$ で,

$$F_1(\mathbf{x}, t) = O(v^0),$$

$$F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = F_1(\mathbf{X}^{(2)}, t) F_1(\mathbf{X}'^{(2)}, t) + O\left(\frac{1}{v}\right) \quad (2.6)$$

となる。⁶⁾ ここに $\mathbf{X}^{(2)}, \mathbf{X}'^{(2)}$ は $\mathbf{x}, \mathbf{x}'$ から, 相互作用 $\varphi(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|)$ のみがあるとして運動を十分の過去までさかのぼり, 軌道が直線になったところで, 同じ時間だけその直線を現在まで延長して得られる値である。(2.5) によれば 1 体分布のゆらぎは,

$$\lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = v \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, t) + O(v^0), \quad (2.7)$$

すなわち, 主項のみを残すならば, 同時刻の 1 体分布関数の非平衡形 $F_1(\mathbf{x}, t)$ のみで定められる。この $F_1(\mathbf{x}, t)$ は (2.6) によりボルツマン方程式を解いて定めればよいことになる (§4 参照)。これは理想気体での平衡状態の結果の拡張に外ならない。Nicolis⁷⁾ の分布関数のゆらぎの話とも合致している。

粒子間力がクーロン力のように長い有効距離をもち、その中に多数の他粒子が入るときは、 v 展開が使用される。この場合には形式的に $v \rightarrow 0$ で、

$$\begin{aligned}
 F_1(\mathbf{x}, t) &= O(v^0), \\
 F_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) &= F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}', t) + v F_2'(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) + O(v^2) \\
 F_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= F_1(\mathbf{x}, t) F_1(\mathbf{x}', t) F_1(\mathbf{x}'', t) \\
 &\quad + v \{F_1(\mathbf{x}, t) F_2'(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) + F_1(\mathbf{x}', t) F_2'(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', t) \\
 &\quad + F_1(\mathbf{x}'', t) F_2'(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)\} + O(v^2), \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

となる。⁸⁾ 従って (2.5) により、

$$\begin{aligned}
 \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) &= v \{F_2'(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) + \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') F_1(\mathbf{x}, t)\} + O(v^2), \\
 \lambda_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) &= O(v^2), \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned}$$

を得る。この場合には F_2 の v -展開の v について 1 次の項 F_2^1 をも求めねばならない (§4 参照)。このような場合について、ゆらぎを求めた計算があるか否かは知らないが、プラズマの雑音などの研究には役立つかもしれない。

§ 3. Siegert 理論へのキュムラントの導入

Siegert⁴⁾ によれば、マルコフ過程に従う稀薄気体に対する master equation が立てられ、これにモーメントの母関数を用いることにより drift term のないボルツマン方程式が導かれる。

計算の手段を変え、この Siegert の理論にキュムラントの母関数を導入し、その満す運動方程式を出すことにより、ボルツマン方程式、分散の従う式を一層容易に与えることができる。

運動量空間を k 個に細胞分割し、時刻 t において j 番目の細胞を占める粒子の数を n_j 、 $t=0$ におけるそれを m_j とする。 $n_1, n_2, \dots, n_k$ および $m_1, m_2, \dots, m_k$ をまとめてそれぞれ n, m と書く。時刻 t における確率分布を $P(m/n, t)$ とすれば Siegert のモーメントの母関数は、

$$G_m(x, t) \equiv \langle \prod_j x_j^{n_j} \rangle = \sum_{\{n\}} P(m/n, t) \prod_j x_j^{n_j} \quad (3.1)$$

で与えられている。ただし、 $x_1, x_2, \dots, x_k$ のかわりに x と書き、 $\sum_{\{n\}}$ は n のあらゆる組についての和を取ることを意味する。以下同様な省略記号を用いる。(3.1)において $x_j \equiv e^{i\xi_j}$ とおくと、

$$G_m(e^{i\xi}, t) = \langle \exp \left[i \sum_j \xi_j n_j \right] \rangle \quad (3.2)$$

は特性関数であるから、

$$C_m(i\xi, t) \equiv \ln G_m(e^{i\xi}, t) \quad (3.3)$$

はキュムラントの母関数で、

$$C_m(i\xi, t) = \sum_{\{\ell\}} \prod_j \frac{(i\xi_j)^{\ell_j}}{\ell_j!} \lambda_{\{\ell\}}^{(t)}, \quad \lambda_{\{\ell\}}^{(t)} = \prod_j \left\{ \frac{\partial}{\partial (i\xi_j)} \right\}^{\ell_j} C_m(i\xi, t) \Big|_{\xi=0} \quad (3.4)$$

$\partial/\partial x_j = e^{-i\xi_j} \partial/\partial (i\xi_j)$ により Siegert の式

$$\frac{\partial G_m(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{k\ell ij} x_k x_\ell \alpha_{k\ell ij} \frac{\partial^2 G_m(x, t)}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.5)$$

は、

$$\frac{\partial G_m(e^{i\xi}, t)}{\partial (i\xi_p)} = G_m(e^{i\xi}, t) \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial (i\xi_p)}$$

$$\frac{\partial^2 G_m(e^{i\xi}, t)}{\partial(i\xi_p) \partial(i\xi_q)} = G_m(e^{i\xi}, t) \left\{ \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_p)} \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_q)} + \frac{\partial^2 C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_p) \partial(i\xi_q)} \right\},$$

(p \neq q) (3.6)

に注意すると (3.3) により次の形に書ける：

$$\frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{k\ell ij} \alpha_{k\ell ij} e^{i(\xi_k + \xi_\ell - \xi_i - \xi_j)} \left\{ \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_i)} \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_j)} + \frac{\partial^2 C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_i) \partial(i\xi_j)} \right\}$$

(3.7)

これがキュムラントの母関数の従う運動方程式である。 $\alpha_{k\ell ij}$ は i 番目の細胞中の粒子と j 番目の細胞中の粒子とが衝突してそれぞれ k 番目および ℓ 番目の細胞へ移るような 2 体衝突における散乱断面積に相当するものである。たとえば単位時間当りの遷移確率は $n_i n_j$ と $\alpha_{k\ell ij}$ との積で書ける。

$\lambda_{\{\ell\}}^{(t)}$ において $\ell_p = 1$ 以外の ℓ が 0 であるような 1 次のキュムラントを $\lambda_{1_p}^{(t)}$, $\ell_p = 1, \ell_q = 1$ 以外の ℓ が 0 であるような 2 次のキュムラントを $\lambda_{1_p 1_q}^{(t)}$ と書き、以下同様な表記法に従うなら、キュムラントは母関数で、

$$\lambda_{1_p}^{(t)} = \left. \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_p)} \right|_{\xi=0},$$

$$\lambda_{1_p 1_q}^{(t)} = \left. \frac{\partial^2 C_m(i\xi, t)}{\partial(i\xi_p) \partial(i\xi_q)} \right|_{\xi=0},$$

.....

(3.8)

と表わされる。これより、1 次のキュムラントおよび 2 次のキュムラントの満す運動方程式は、

$$\frac{\partial \lambda_{1_p}^{(t)}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial(i\xi_p)} \left. \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial t} \right|_{\xi=0},$$

(3.9)

$$\frac{\partial \lambda_{1p^1q}^{(t)}}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial (i\xi_p) \partial (i\xi_q)} \frac{\partial C_m(i\xi, t)}{\partial t} \Big|_{\xi=0} \quad (3.10)$$

より, $\alpha_{k\ell ij} = \alpha_{k\ell ji} = \alpha_{\ell kij}$ および $\sum_{k\ell} \alpha_{k\ell ij} = 0$ に注意してそれぞれ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_{1p}^{(t)}}{\partial t} = & \sum_{\substack{\ell ij \\ (p\ell \neq ij)}} \alpha_{p\ell ij} \{ \lambda_{1i}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + \lambda_{1i^1j}^{(t)} \} \\ & - \sum_{\substack{k\ell j \\ (k\ell \neq pj)}} \alpha_{k\ell pj} \{ \lambda_{1p}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + \lambda_{1p^1j}^{(t)} \}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

および,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_{1p^1q}^{(t)}}{\partial t} = & \frac{1}{2} \left[\sum_{\substack{ij \\ (ij \neq pq)}} (\alpha_{pqij} + \alpha_{qpji}) \{ \lambda_{1i}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + \lambda_{1i^1j}^{(t)} \} \right. \\ & + \sum_{\substack{k\ell \\ (k\ell \neq pq)}} (\alpha_{k\ell pq} + \alpha_{k\ell qp}) \{ \lambda_{1p}^{(t)} \lambda_{1q}^{(t)} + \lambda_{1p^1q}^{(t)} \} \\ & - 4 \sum_{\substack{kj \\ (kp \neq qj)}} \alpha_{kpqj} \{ \lambda_{1q}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + \lambda_{1q^1j}^{(t)} \} \\ & - 4 \sum_{\substack{ki \\ (kq \neq pj)}} \alpha_{kqpj} \{ \lambda_{1p}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + \lambda_{1p^1j}^{(t)} \} \\ & + \sum_{\substack{\ell ij \\ (p\ell \neq ij)}} \alpha_{p\ell ij} \{ 4 \lambda_{1q^1i}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + 2 \lambda_{1q^1i^1j}^{(t)} \} \\ & + \sum_{\substack{\ell ij \\ (q\ell \neq ij)}} \alpha_{q\ell ij} \{ 4 \lambda_{1p^1i}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + 2 \lambda_{1p^1i^1j}^{(t)} \} \\ & - \sum_{\substack{k\ell j \\ (k\ell \neq pj)}} \alpha_{k\ell pj} \{ 2 \lambda_{1q^1p}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + 2 \lambda_{1q^1j}^{(t)} \lambda_{1p}^{(t)} + 2 \lambda_{1q^1p^1j}^{(t)} \} \\ & - \sum_{\substack{k\ell j \\ (k\ell \neq qj)}} \alpha_{k\ell qj} \{ 2 \lambda_{1p^1q}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + 2 \lambda_{1p^1j}^{(t)} \lambda_{1q}^{(t)} + 2 \lambda_{1q^1p^1j}^{(t)} \} \\ & \left. + \sum_{k\ell ij} \alpha_{k\ell ij} \{ 2 \lambda_{1p^1q^1i}^{(t)} \lambda_{1j}^{(t)} + 2 \lambda_{1p^1i}^{(t)} \lambda_{1q^1j}^{(t)} + \lambda_{1p^1q^1i^1j}^{(t)} \} \right] \quad (3.12) \end{aligned}$$

となる。system size expansion

$$\begin{aligned}
\alpha_{k\ell ij} &= \frac{1}{V} A_{k\ell ij}, \\
\lambda_{1p}(t) &= V f_p(t) + u_p(t) + O(V^{-1}), \\
\lambda_{1p^1q}(t) &= V \sigma_{pq}(t) + O(V^0), \\
&\dots\dots\dots
\end{aligned} \tag{3.13}$$

により, (3.11) から数密度の平均 $f_p(t)$ およびそのはずれ $u_p(t)$ に関する運動方程式が, (3.12) からはゆらぎの分散の従う運動方程式が求められる。すなわち, ボルツマン方程式に相当して,

$$\frac{\partial f_p(t)}{\partial t} = \sum_{\substack{\ell ij \\ (p\ell \neq ij)}} \{ A_{p\ell ij} f_i(t) f_j(t) - A_{ijp\ell} f_p(t) f_\ell(t) \} \tag{3.14}$$

およびその補正

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u_p(t)}{\partial t} &= \sum_{\substack{\ell ij \\ (p\ell \neq ij)}} [A_{p\ell ij} \{ f_i(t) u_j(t) + f_j(t) u_i(t) + \sigma_{ij}(t) \} \\
&\quad - A_{ijp\ell} \{ f_p(t) u_\ell(t) + f_\ell(t) u_p(t) + \sigma_{p\ell}(t) \}] \tag{3.15}
\end{aligned}$$

が得られ, ゆらぎの分散の満たす運動方程式として,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \sigma_{pq}(t)}{\partial t} &= \sum_{\substack{ij \\ (ij \neq pq)}} A_{pqij} f_i(t) f_j(t) + \sum_{\substack{k\ell \\ (k\ell \neq pq)}} A_{k\ell pq} f_p(t) f_q(t) \\
&\quad - 2 \sum_{\substack{kj \\ (kp \neq qj)}} A_{k\ell qj} f_q(t) f_j(t) - 2 \sum_{\substack{kj \\ (kq \neq pj)}} A_{kqpj} f_p(t) f_j(t) \\
&\quad + 2 \sum_{\substack{\ell ij \\ (p\ell \neq ij)}} A_{p\ell ij} \sigma_{qi}(t) f_j(t) + 2 \sum_{\substack{\ell ij \\ (q\ell \neq ij)}} A_{q\ell ij} \sigma_{pi}(t) f_j(t) \\
&\quad - \sum_{\substack{k\ell j \\ (k\ell \neq pj)}} A_{k\ell pj} \sigma_{qp}(t) f_j(t) - \sum_{\substack{k\ell j \\ (k\ell \neq pj)}} A_{k\ell pj} \sigma_{qj}(t) f_p(t)
\end{aligned}$$

$$- \sum_{\substack{k \ell j \\ (k \ell \neq qj)}} A_{k \ell qj} \sigma_{pq}(t) f_j(t) - \sum_{\substack{k \ell j \\ (k \ell \neq qj)}} A_{k \ell qj} \sigma_{pj}(t) f_q(t)$$

が得られる。

このようにキュムラントの母関数を導入することで、(3.14), (3.15), (3.16) はモーメントを取り扱う手法によるよりはるかに簡単に導びかれる。遷移確率の分っている場合は上の方法は大変に有効である。

§4 キュムラントの運動方程式

Siegert は master equation からモーメントの母関数の満す方程式を求めた。Bogoliubov⁹⁾ も BBGKY 方程式を与えるモーメントの母関数

$$\begin{aligned} L[t, u(\mathbf{x})] &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \prod_{j=1}^N \left\{ 1 + \frac{V}{N} u(\mathbf{x}_j) \right\} \right\rangle \\ &= 1 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \cdots \int F_s(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s, t) \\ &\quad u(\mathbf{x}_1) \cdots u(\mathbf{x}_s) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_s \end{aligned} \quad (4.1)$$

を用いている。§3 で見たようにここにキュムラントの母関数を導入し、キュムラントの満す運動方程式を導く手法は直截的で有益である。キュムラントの母関数を求めるには、Bogoliubov の母関数で、 $1 + v u(\mathbf{x})$ の代りに $\exp \{ i v \xi(\mathbf{x}) \}$ をとる方が、特性関数の形になって便利である：

$$\begin{aligned} L'[t, e^{i \xi(\mathbf{x})}] &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \exp \left\{ \frac{V}{N} \int i \xi(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \right\} \right\rangle \\ &\equiv \exp \{ K[t, \xi(\mathbf{x})] \} \end{aligned} \quad (4.2)$$

キュムラントと母関数 K との関係は

$$\begin{aligned} K[t, \xi(\mathbf{x})] &= 1 + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{s!} \int \cdots \int \lambda_s(\mathbf{x}_s(\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_s, t) \\ &\quad i \xi(\mathbf{x}_1) \cdots i \xi(\mathbf{x}_s) d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_s \end{aligned} \quad (4.3)$$

で与えられる。¹⁰⁾ キュムラントは K を $i\xi(\mathbf{x})$ で汎関数微分し, $\xi \rightarrow 0$ とおいて得られる。Liouville 方程式から母関数 K に対する方程式は容易に導びかれて次の形となる:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial K[t, \xi(\mathbf{x})]}{\partial t} + \int \left\{ -\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial i\xi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{q}} + \frac{\partial \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial i\xi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{p}} \right\} \frac{\delta K[t, \xi(\mathbf{x})]}{\delta i\xi(\mathbf{x})} d\mathbf{x} \\ &= -\frac{1}{v} \iint \frac{\partial \varphi(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial i\xi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{p}} \left\{ \frac{\delta K[t, \xi(\mathbf{x})]}{\delta i\xi(\mathbf{x})} \frac{\delta K[t, \xi(\mathbf{x}')] }{\delta i\xi(\mathbf{x}')} \right. \\ & \quad \left. + \frac{\delta^2 K[t, \xi(\mathbf{x})]}{\delta i\xi(\mathbf{x}) \delta i\xi(\mathbf{x}')} \right\} d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \quad (4.4) \end{aligned}$$

これから BBGKY に等価なキュムラントの満す方程式系を導くことはやさしく,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \lambda_1(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \left\{ \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right\} \lambda_1(\mathbf{x}, t) \\ &= \frac{1}{v} \int \frac{\partial \varphi(|\mathbf{q}-\mathbf{q}'|)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \{ \lambda_1(\mathbf{x}, t) \lambda_1(\mathbf{x}', t) + \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \} d\mathbf{x}' \quad (4.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} + \left\{ \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}'}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}'} \right. \\ & \quad \left. - \frac{\partial \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q}')}{\partial \mathbf{q}'} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right\} \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) \\ &= \frac{1}{v} \int \frac{\partial \varphi(|\mathbf{q}-\mathbf{q}''|)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \{ \lambda_1(\mathbf{x}, t) \lambda_2(\mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) \\ & \quad + \lambda_1(\mathbf{x}'', t) \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) + \lambda_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) \} d\mathbf{x}'' \\ &+ \frac{1}{v} \int \frac{\partial \varphi(|\mathbf{q}'-\mathbf{q}''|)}{\partial \mathbf{q}'} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \{ \lambda_1(\mathbf{x}', t) \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}'', t) \\ & \quad + \lambda_1(\mathbf{x}'', t) \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) + \lambda_3(\mathbf{x}, \mathbf{x}', \mathbf{x}'', t) \} d\mathbf{x}'' \quad (4.6) \end{aligned}$$

.....

を得る。

これらの式には drift term が現われている。興味があるのは (4.2) が ξ について2次の項までで切れるガウス分布の近似が良い場合であって、そのとき1体分布の分散 λ_2 を定める式は (4.6) から、久保氏ら²⁾ が与えた分散 σ の満す式と本質的には同じ型であって、それに drift term を加えた形になっている。drift term が与えられれば、温度勾配その他のゆらぎに及ぼす効果を論ずることが可能になるう。

Bogoliubov の $1/v$ 展開法が使えるとした場合には § 2 に述べたように1体分布の分散 λ_2 は $F_1(\mathbf{x}, t)$ で定まってしまう、 λ_2 の方程式 (4.6) を解く必要がない。このとき (4.5) の方は (2.5) の第一式および (2.6) によりボルツマン方程式に一致するから、¹¹⁾これを解き非平衡の $F_1(\mathbf{x}, t)$ を求めればよい。

Bogoliubov の v 展開法が使えるとする場合には、(2.9) により $\lambda_2 = O(v)$, $\lambda_3 = O(v^2)$ となるから、(4.5) は self-consistent field equation¹²⁾

$$\frac{\partial \lambda_1(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \left\{ \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right\} \lambda_1(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (4.7)$$

となり、(4.6) はそれに似た方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t)}{\partial t} + \left\{ \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\mathbf{p}'}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}'} - \frac{\partial \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{p}'} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right\} \\ \lambda_2(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

で近似される。後者は Bogoliubov の関数 F_2^1 を定める方程式と同値である。¹³⁾ 上式で有効場 φ_{eff} は次のように与えられる¹⁴⁾：

$$\begin{aligned} \varphi_{\text{eff}}(\mathbf{q}, t) &\equiv \varphi_{\text{ext}}(\mathbf{q}) + \frac{1}{v} \int \varphi(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) \{ \rho(\mathbf{q}', t) - 1 \} d\mathbf{q}', \\ \rho(\mathbf{q}', t) &\equiv \int \lambda_1(\mathbf{x}, t) d\mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.9)$$

気体が一様な場合には $\rho = 1$ となる。 φ_{eff} の第2項はプラズマで一様な back ground を仮定したときの形である。

§5. あとがき

以上に見たように気体分子運動論では、BBGKY 方程式系がそもそも熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ で有用であったことから分るように、系が巨視的だということだけでは話が簡単にならず、 $1/v \rightarrow 0$ 又は $v \rightarrow 0$ という操作で、久保氏らの理論における system size expansion と同様な方程式系の分離（平均の運動を定め、これを使って分散の運動が求められるという、階級制度の下克上または decoupling）が行われた。Siegert 理論への久保の方法を適用したときは正に system size expansion で、先づボルツマン方程式が分離され、次に分散の方程式が得られたのと比べて、これは少々意外な結果であった。一様でない系の場合には森氏¹⁵⁾も指摘しているように、巨視的極限ということは詳しく論ずる必要があるのであろう。

drift term を求めることは首尾よく目的を達したのであるが、同時刻のゆらぎしか求めていない。異なる時刻の量についての相関を求めるように理論全体を公式化しなおす必要がある。そうしないと雑音のパワー・スペクトルを求めるような問題には末だ不便である。いわば理論体系が末だマルコフ過程論の尻尾をつけているといえよう。マルコフ過程からはっきり抜け出す公式化は次期の問題で、母関数を経路に対するものに拡張するような一般化も必要としよう。

参 考 文 献

- 1) G.N. Van Kampen, Can. J. Phys. 39 (1961) 551; Physica, 67 (1973) 1.
- 2) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Stat. Phys. 9 (1973) 51
- 3) K. Tomita and H. Tomita, Progr. Theor. Phys. 51 (1974) 1731
K. Tomita, 科学 45 (1975) 1-9
- 4) A. Siegert, Phys. Rev. 76 (1949) 1708
- 5) N.N. Bogoliubov: Problemy Dinamicheskoi Teorii v Statisticheskoi Fizike (Problems of a Dynamical Theory in Statistical Physics) (Moscow, 1946) [in Russian]; see also English translation by E.K. Gora, Studies in Statistical Mechanics ed. J. De Boer and G. E. Uhlenbeck (North-Holland, Amsterdam, 1962) Vol. 1, Part

A; or the authorized English translation from Russian, The
Dynamical Theory in Statistical Physics (Hindustan, Delhi, 1965)

- 6) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eqs. (9.3), (9.10)
- 7) G. Nicolis, J. Stat. Phys. 6 (1972) 195
- 8) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eqs. (11.6), (11.11)
- 9) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eqs. (7.1), (7.10)
- 10) R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan 17 (1962) 1100
- 11) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eq. (9.12)
- 12) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eq. (11.13)
- 13) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eqs. (11.15), (11.16), (11.17)
- 14) N.N. Bogoliubov, loc. cit., Eq. (11.4)
- 15) H. Mori, Prog. Theor. Phys. 53 (1975) 1617