物性研究　96－3（2011－6）

講義ノート

無限系の非平衡統計力学[1]

早稲田大学 理工学部　田崎秀一

(2011年4月6日受理)

目 次

1　はじめに　291

2　C^* 代数の方法　291

2.1　C^* 代数の定義 291
2.2　$\mathfrak{A}$ における時間発展 301
2.3　C^* 代数上での状態 309
2.4　平衡状態　－ KMS（Kubo-Martin-Schwinger）状態－ 315
2.5　漸近アーベル性とエルゴード性 328

3　熱浴と相互作用する量子系　332

3.1　平衡近傍 332
3.2　熱浴と相互作用する有限量子系 333
3.3　非平衡定常状態 337
3.4　Spinless Fermion 系の非平衡定常状態 343

4　熱・統計力学とエルゴード理論　346

4.1　序: 熱力学と動力学 346

5　有限自由度系の平衡統計力学　347

5.1　状態と測度 347
5.2　孤立系における平衡状態の存在と混合性 350
5.3　混合性と動力学 352

[1]編集部註：本稿は、2005年7月27日～29日に京都大学大学院理学研究科において行われた講義をもとにして作られている。ノート起こしには当時の京都大学の大学院生であった西野貴博（現(株)グラフィック）が尽力している。しかし、2010年6月6日に田崎秀一氏が亡くなったために、本講義ノートは未完である。尚、原稿ファイルは多辺由佳氏（早稲田大教授）によって発掘されている。

5.3.1 準備 352
5.3.2 エルゴード性と混合性 353
5.3.3 特異測度 356
5.4 Pollicott-Ruelle の共鳴 357

6 開いた多重パイこねモデルの非平衡統計力学 357
6.1 エネルギー座標を持つ多重パイこねモデル 358
6.2 Poisson Suspension 358
6.3 定常状態の構成 361
6.4 粗視化エントロピー 362
6.5 相対エントロピー 364

1 はじめに

" What is the origin of irreversibility as stated by the 2nd law of thermodynamics? "[2] " How can one reconcile the 2nd law of thermodynamics with dynamical time reversibility? " etc…Those questions have been asked by many scientists over the years. And they are precisely the questions which were repeatedly asked to me by Ilya Prigogine, Novel Prize Winner in Chemistry of 1977, when I worked at the International Solvay Institute for Physics and Chemistry, Brussels, from 1989 to 1993 as one of his postdocs. By that time, Physics …his[3] School reached an intensive[4] conclusion that, if dynamical resonances occur in an infinitely extended system, irreversibility naturally comes out from the reversal system.

序論 1957 年の Kubo 論文などで、線形応答理論が確立すると、平衡から遠く離れた状態や非線形応答を扱える統計理論の構築が試みられ、1960 年代までには、Nakajima-Zwanzig, Mori らによう種々の射影演算子の方法、Keldysh の Green 関数法、Zubarev の非平衡アンサンブル法などで、よく知られた理論が提唱された。しかし、例えば、Zubarev アンサンブルの正当性、Keldysh 法の収束性の吟味などは行われておらず、非平衡状態は、平衡状態に比べ十分理解されていない。近年、特に 2000 年以降、数理物理の分野で従来、量子場や無限に拡がった系の平衡統計力学の研究に用いられてきた代数的方法が、無限に大きな複数の量子系と同時に相互作用する系に形成される非平衡状態の研究に適用され、非平衡定常状態の存在、そのエントロピー生成の正値性などが示されている。

2 C^* 代数の方法

通常の量子力学においては量子状態は Hilbert 空間のベクトルで表現され、物理量はそのベクトルに作用する Hermite 演算子として記述される。しかし、無限系においては Hamiltonian は ill-defined であり、従って、状態の発展演算子 e^{-iHt} も定義できない。そこで Hamiltonian を陽に用いずに、局所物理量のみが表に現れるような方法が有効である。本稿において用いる C^* 代数による記述はそのひとつの方法である。

2.1 C^* 代数の定義

Def. 1 (C^* 代数の定義)
積が定義された複素線形空間 $\mathfrak{A}$ が次の性質を満たすとき、$\mathfrak{A}$ を C^* 代数と呼ぶ。

[2]編集部註：本節は、2010 年 2 月に田崎秀一氏によって書かれた最後の文である。
[3]編集部註：(?) があった。
[4]編集部註：(?) があった。

1. 各元 $A \in \mathfrak{A}$ について次式を満たすノルム $\|A\|$ が定義され、それについて完備である。

$$\| A \| \geq 0 \quad (\text{等号成立は } A = 0 \text{ のときのみ}) \tag{2.1}$$
$$\| cA \| = |c| \, \| A \| \quad (c \in \boldsymbol{C}) \tag{2.2}$$
$$\| A_1 + A_2 \| \leq \| A_1 \| + \| A_2 \| \quad \textit{(triangle inequality)} \tag{2.3}$$
$$\| A_1 A_2 \| \leq \| A_1 \| \| A_2 \| \quad \textit{(product inequality)} \tag{2.4}$$

2. $\mathfrak{A}$ 上に次の性質を満たす全単射 $A \in \mathfrak{A} \to A^* \in \mathfrak{A}$ が定義される。

$$(c_1 A_1 + c_2 A_2)^* = c_1^* A_1^* + c_2^* A_2^* \tag{2.5}$$
$$A^{**} = A, \; (A_1 A_2)^* = A_2^* A_1^* \tag{2.6}$$

但し、$A_1, A_2 \in \mathfrak{A}$、$c_1, c_2 \in \boldsymbol{C}$。

3. ノルムは C^* 性を持つ。

$$\| A^* A \| = \| A \|^2 \quad (A \in \mathfrak{A}) \tag{2.7}$$

例として、spinless fermion、spinless boson を表す C^* 代数を紹介する。

例 1 (spinless fermion の CAR 代数)
a_k を、反交換関係 $[a_k, a_{k'}^*]_+ = \delta(k - k')\mathbf{1}$, $[a_k, a_{k'}]_+ = 0$ を満たす演算子とする。但し、$k \in \mathbf{R}^d$、$\delta(k)$ は d 次元デルタ関数および $[A, B]_+ = AB + BA$ である。このとき、d 次元空間上で定義された二乗可積分関数 $f(k) \in \mathfrak{h}$（$f \in \mathfrak{h} \Leftrightarrow \int dk |f(k)|^2 < +\infty$ となる関数）について、

$$a(f) \equiv \int dk f^*(k) a_k \tag{2.8}$$

とおく。単位元 $\mathbf{1}$ および $a(f_1)^* \cdots a(f_n)^* a(g_1) \cdots a(g_m)$ の型の有限項の和で任意に近似される元からなる集合 $\mathfrak{A}_{\mathrm{CAR}}$ は C^* 代数となる（これを、単位元 $\mathbf{1}$ と $a(f)$ から生成される C^* 代数とよぶ）。

$a(f)$ は次の性質を持つ。

CAR1 $c_j \in \boldsymbol{C}, f_j \in \mathfrak{h}$ について $a(c_1 f_1 + c_2 f_2) = c_1^* a(f_1) + c_2^* a(f_2)$（つまり、対応 $f \to a(f)$ は反線形である）。

CAR2 $[a(f_1), a(f_2)]_+ = 0$

CAR3 $[a(f_1), a(f_2)^*]_+ = (f_1, f_2)\mathbf{1}$。但し、$(f_1, f_2) = \int dk f_1(k)^* f_2(k)$。

さらに、$\|a(f)\| = \|f\|_2$（但し、$\|f\|_2 = \sqrt{(f, f)}$）。

説明：(CAR1)、(CAR2) は自明。(CAR3) は、

$$[a(f_1), a(f_2)^*]_+ = \int dk \int dk' f_1(k)^* f_2(k')[a_k, a_{k'}^*]_+$$
$$= \int dk \int dk' f_1(k)^* f_2(k')\delta(k-k')\mathbf{1} = (f_1, f_2)\mathbf{1} \tag{2.9}$$

と示せる。$a(f)$ のノルムは、(CAR2) から $0 = 2a(f)^2$ となることと、(CAR3) および C^* 性より、

$$\|a(f)\|^4 = \|a(f)^*a(f)\|^2 = \|(a(f)^*a(f))^*a(f)^*a(f)\| = \|a(f)^*a(f)a(f)^*a(f)\|$$
$$= \|a(f)^*\{(f,f)\mathbf{1} - a(f)^*a(f)\}a(f)\| = (f,f)\|a(f)^*a(f)\| = (f,f)\|a(f)\|^2$$

から、$\|a(f)\| = \sqrt{(f,f)}$ と求められる。 ♣

注：Hilbert 空間 $\mathfrak{h}$ について、条件（CAR1）-（CAR3）を満たす元 $a_1(f)$ と単位元から生成される C^* 代数を $\mathfrak{A}_1$ と $a_2(f)$ と単位元から生成される $\mathfrak{A}_2$ があるとする。すると、1対1かつ上への写像 $\alpha : \mathfrak{A}_1 \to \mathfrak{A}_2$ が唯一つ存在して、$(1)\alpha(c_1A_1 + c_2A_2) = c_1\alpha(A_1) + c_2\alpha(A_2)$、$(2)\alpha(A_1A_2) = \alpha(A_1)\alpha(A_2)$、$(3)\alpha(A^*) = \alpha(A)^*$ が成立し（このような写像 α を*-同型とよぶ）、全ての $f \in \mathfrak{h}$ について $\alpha(a_1(f)) = a_2(f)$ となる [Bratelli-Robinson:Theorem 5.2.5]。つまり、（CAR1）-（CAR3）により、C^* 代数は（*-同型を除き）一意に定まる。これを $\mathfrak{h}$ 上の CAR（Canonical Anticommutation Relation）代数と呼ぶ。

例 2 (spinless boson の CCR 代数)

a_k を、交換関係 $[a_k, a_{k'}^*] = \delta(k-k')\mathbf{1}$, $[a_k, a_{k'}] = 0$ を満たす演算子とする。但し、$k \in \mathbf{R}^d$、$\delta(k)$ は d 次元デルタ関数および $[A,B] = AB - BA$ である。このとき、d 次元空間上で定義された二乗可積分関数 $f(k) \in \mathfrak{h}$（$f \in \mathfrak{h} \Leftrightarrow \int dk|f(k)|^2 < +\infty$ となる関数）について、

$$W(f) \equiv \exp\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\left\{\int dk f^*(k)\, a_k + \int dk f(k)\, a_k^*\right\}\right) \tag{2.10}$$

とおく。$W(f_1)\cdots W(f_n)$ の型の有限項の和で任意に近似される元からなる集合 $\mathfrak{A}_{\mathrm{CCR}}$ は C^* 代数となる（つまり、単位元 $\mathbf{1}$ と $W(f)$ から生成される C^* 代数）。

$W(f)$ は次の性質を持つ。

CCR1 $f \in \mathfrak{h}$ について、$W(-f) = W(f)^*$。

CCR2 $f_j \in \mathfrak{h}$ について $W(f_1)W(f_2) = e^{-i\mathrm{Im}(f_1,f_2)/2}W(f_1+f_2)$。
但し、$(f_1, f_2) = \int dk f_1(k)^* f_2(k)$。

さらに、$W(0) = \mathbf{1}$、$W(f)^*W(f) = W(f)W(f)^* = \mathbf{1}$（つまり、$W(f)$ はユニタリー）で、ゼロでない $f \in \mathfrak{h}$ について $\|W(f) - \mathbf{1}\| = 2$。

説明: (CCR1) と $W(0)=\mathbf{1}$ は自明。$[A,B]$ が A および B と可換な場合、$e^Ae^B=e^{A+B}e^{[A,B]/2}$ となることと定義より、(CCR2) が示せる：

$$\begin{aligned}&W(f_1)W(f_2)\\&=W(f_1+f_2)\exp\left(-\left[\int dk\{f_1^*(k)\,a_k+f_1(k)\,a_k^*\},\int dk\{f_2^*(k)\,a_k+f_2(k)\,a_k^*\}\right]/4\right)\\&=W(f_1+f_2)\exp\left(-\{(f_1,f_2)-(f_2,f_1)\}/4\right)=W(f_1+f_2)\exp\left(-i\mathrm{Im}(f_1,f_2)/2\right)\end{aligned}$$

(CCR2) と $\mathrm{Im}(f,f)=0$ より $W(f)W(f)^*=W(f)W(-f)=W(f-f)=\mathbf{1}$。同様に $W(f)^*W(f)=\mathbf{1}$ なので、$W(f)$ はユニタリーである。$\|W(f)-\mathbf{1}\|=2$ については後述。
♣

注： Hilbert 空間 $\mathfrak{h}$ について、条件 (CCR1) - (CCR2) を満たす元 $W_1(f)$ から生成される C^* 代数を $\mathfrak{A}_1$ と $W_2(f)$ から生成される $\mathfrak{A}_2$ があるとする。すると、1対1かつ上への写像 $\alpha:\mathfrak{A}_1\to\mathfrak{A}_2$ が唯一つ存在して、$(1)\alpha(c_1A_1+c_2A_2)=c_1\alpha(A_1)+c_2\alpha(A_2)$、$(2)\alpha(A_1A_2)=\alpha(A_1)\alpha(A_2)$、$(3)\alpha(A^*)=\alpha(A)^*$ が成立し（このような写像 α を*-同型とよぶ）、全ての $f\in\mathfrak{h}$ について $\alpha(W_1(f))=W_2(f)$ となる [Bratelli-Robinson:Theorem 5.2.8]。つまり、(CCR1) - (CCR2) により、C^* 代数は（*-同型を除き）一意に定まる。これを $\mathfrak{h}$ 上の CCR (Canonical Commutation Relation) 代数と呼ぶ。

Def. 2 ($\mathfrak{A}$ の元のスペクトル)
$A\in\mathfrak{A}$ に対して $(\lambda\mathbf{1}-A)$ の逆元 $R_\lambda(A)\equiv(\lambda\mathbf{1}-A)^{-1}\in\mathfrak{A}$ が存在するような複素数 λ の集合をレゾルベント集合と呼び、$r(A)$ と書く。このとき、$R_\lambda(A)$ を λ における A のレゾルベントと呼ぶ。A のレゾルベント集合の補集合

$$\sigma(A)\equiv r(A)^c \tag{2.11}$$

を A のスペクトルと呼び、その拡がり

$$\rho(A)\equiv\sup\{|\lambda|:\lambda\in\sigma(A)\}$$

を、A のスペクトル半径と呼ぶ。大まかに言えば、A のスペクトルが A の固有値に、スペクトル半径が A の固有値の大きさの最大値にあたる。

Prop. 1
$A\in\mathfrak{A}$ のスペクトル半径は $\rho(A)=\lim_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}$ である。

(説明) レゾルベントを λ の逆べきに展開すると、

$$R_\lambda(A)=\frac{1}{\lambda}\left(\mathbf{1}-\frac{A}{\lambda}\right)^{-1}=\frac{1}{\lambda}\left\{\mathbf{1}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\lambda^n}A^n\right\} \tag{2.12}$$

という級数が得られる。複素級数の場合を思い出すと、この級数は

$$\frac{1}{|\lambda|}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{|\lambda|^n}\|A\|^n \tag{2.13}$$

が収束するとき、絶対収束する。よく知られているように後者の正項級数は、$|\lambda|>$(収束半径の逆数)$=\lim_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}$ のとき収束し、$|\lambda|<$(収束半径の逆数) のとき発散する。よって、レゾルベントが存在しない最大の $|\lambda|$、つまり、スペクトル半径が $\rho(A)=\lim_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}$ が理解できる。

詳しい証明は以下の通り。まず、product inequality から、$\|A^{n+m}\|\le\|A^m\|\|A^n\|$ が言えるので、自然数 $n(>)m$ について、$n=[n/m]m+q$ ($q=0,\cdots m-1$、$[x]$ は x を越えない整数) が成り立つことから

$$\|A^n\|^{1/n}\le\|A^m\|^{\left[\frac{n}{m}\right]/n}\|A^q\|^{1/n} \tag{2.14}$$

が成り立つ。n について上極限をとると、$\lim_{n\to\infty}\left[\frac{n}{m}\right]/n=1/m$ より

$$\limsup_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}\le\limsup_{n\to\infty}\|A^m\|^{\left[\frac{n}{m}\right]/n}\|A^q\|^{1/n}=\|A^m\|^{1/m} \tag{2.15}$$

続いて m について下極限を取ると

$$\limsup_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}\le\liminf_{m\to\infty}\|A^m\|^{1/m} \tag{2.16}$$

一般に上極限は下極限以上で、両者が一致するとき極限が存在するので、$a_A\equiv\lim_{n\to\infty}\|A^n\|^{1/n}$ は存在する。特に、$a_A\le\|A^m\|^{1/m}$ である。

さて、上の考察より、$\rho(A)\le a_A$ が言える。そこで、$\rho(A)<a_A$ と仮定すると、$a_A\le\|A^m\|^{1/m}$、つまり、$1\le\|A^m\|/a_A^m$ と矛盾することを示そう。まず、$\omega\equiv e^{2\pi i/n}$ を 1 の n 乗根とすると、$\log(z^n-1)=\sum_{k=1}^{n}\log(z-\omega^k)$ となり、これを z で微分すると

$$\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{z-\omega^k}=\frac{d}{dz}\sum_{k=1}^{n}\log(z-\omega^k)\frac{d}{dz}\log\{\prod_{k=1}^{n}(z-\omega^k)\}=\frac{d}{dz}\log(z^n-1)=\frac{nz^{n-1}}{z^n-1}$$

両辺を z/n 倍して、$1/z\to A/\lambda$ とおくと、

$$\left(\mathbf{1}-\frac{A^n}{\lambda^n}\right)^{-1}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\mathbf{1}-\omega^k\frac{A}{\lambda}\right)^{-1} \tag{2.17}$$

$\lambda\omega^{-k}\in r(A)$ のとき、右辺、従って、左辺は存在する。次に、仮定 $\rho(A)<a_A$ より、任意の $\theta\in\mathbf{R}$ について $a_Ae^{i\theta}\in r(A)$ となる。よって、$a_A\le|\lambda|\le a_A+1$ を満たす λ について

$$\begin{aligned}
&\left\|\left(\mathbf{1}-\frac{A^n}{\lambda^n}\right)^{-1}-\left(\mathbf{1}-\frac{A^n}{a_A^n}\right)^{-1}\right\|\le\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left\|\left(\mathbf{1}-\omega^k\frac{A}{\lambda}\right)^{-1}-\left(\mathbf{1}-\omega^k\frac{A}{a_A}\right)^{-1}\right\|\\
&=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left\|\left(\lambda\omega^{-k}\mathbf{1}-A\right)^{-1}\frac{A}{\omega^k}(a_A-\lambda)\left(a_A\omega^{-k}\mathbf{1}-A\right)^{-1}\right\|\\
&\le\|A\||a_A-\lambda|\sup_{a_A\le|\gamma|\le a_A+1}\left\|(\gamma\mathbf{1}-A)^{-1}\right\|^2
\end{aligned} \tag{2.18}$$

仮定より、有界閉集合 $a_A \leq |\gamma| \leq a_A + 1$ はレゾルベント集合の部分集合で、関数 $\gamma \to \left\|(\gamma \mathbf{1} - A)^{-1}\right\|$ はレゾルベント集合上、連続なので、(2.18) 式最右辺の上限は有限である。任意の ϵ について、(2.18) 式最右辺が ϵ 未満になるように $2\delta = \lambda - a_A$ を選ぶ。ところで、a_A の定義から、n が十分大きいと、$\|A^n\|^{1/n} < a_A + \delta$。よって、$\|(A/\lambda)^n\| < \{(a_A + \delta)/(a_A + 2\delta)\}^n \to 0 (n \to \infty)$ となる。以上から、結局、

$$\limsup_{n\to\infty} \left\| \mathbf{1} - \left(\mathbf{1} - \frac{A^n}{a_A^n}\right)^{-1} \right\| \leq \limsup_{n\to\infty} \left\| \mathbf{1} - \left(\mathbf{1} - \frac{A^n}{\lambda^n}\right)^{-1} \right\| + \limsup_{n\to\infty} \left\| \left(\mathbf{1} - \frac{A^n}{\lambda^n}\right)^{-1} - \left(\mathbf{1} - \frac{A^n}{a_A^n}\right)^{-1} \right\| \leq \epsilon \tag{2.19}$$

ϵ は任意なので、$\lim_{n\to\infty} \left\| \mathbf{1} - \left(\mathbf{1} - \frac{A^n}{a_A^n}\right)^{-1} \right\| = 0$、つまり、$\lim_{n\to\infty} \|A^n\|/a_A^n = 0$。これは、$1 \leq \|A^n\|/a_A^n$ に矛盾する。 ♣

Prop. 2

$A \in \mathfrak{A}$ に対して、

1. A がユニタリー $(AA^* = A^*A = \mathbf{1})$ なら

$$\rho(A) = 1,\ \sigma(A) \subset \{\lambda \in \boldsymbol{C} : |\lambda| = 1\} \tag{2.20}$$

2. A が自己随伴 $(A = A^*)$ なら

$$\rho(A) = \| A \|,\ \sigma(A) \subset [-\| A \|, \| A \|],\ \sigma\left(A^2\right) \subset \left[0, \|A\|^2\right] \tag{2.21}$$

(proof)

1. について。

まず、C^* 性と $A^*A = \mathbf{1}$ から、

$$\|A^n\|^2 = \| (A^n)^* A^n \| = \| \left(A^{n-1}\right)^* A^* A A^{n-1} \| = \| \left(A^{n-1}\right)^* A^{n-1} \| \cdots = \|\mathbf{1}\| = 1 \tag{2.22}$$

よって、前の Proposition から

$$\rho(A) = \lim_{n\to\infty} \|A^n\|^{1/n} = \lim_{n\to\infty} 1 = 1 \tag{2.23}$$

が分かる。同様に、$\rho(A^*) = 1$。

次に、$A^{-1} = A^*$ が存在することから、$0 \notin \sigma(A)$ かつ $\lambda \neq 0$ のとき、

$$\left(\lambda \mathbf{1} - A^{-1}\right) = -\lambda A^{-1} \left(\frac{1}{\lambda}\mathbf{1} - A\right) \tag{2.24}$$

となるので

$$(\lambda\mathbf{1}-A^{-1})^{-1}\text{が存在しない}\Leftrightarrow\left(\frac{1}{\lambda}\mathbf{1}-A\right)^{-1}\text{が存在しない}\tag{2.25}$$

が言える。よって、$\sigma(A^{-1})=\sigma(A^*)=\{\lambda|1/\lambda\in\sigma(A)\}$。従って、$\lambda\in\sigma(A)$ なら、$|\lambda|\leq\rho(A)=1$ かつ $1/|\lambda|\leq\rho(A^*)=1$、つまり、$\sigma(A)\subset\{\lambda:|\lambda|=1\}$。

2. について。

まず、C^* 性から

$$\|A^{2^n}\|=\|A^{*2^{n-1}}A^{2^{n-1}}\|=\|A^{2^{n-1}}\|^2=\cdots=\|A\|^{2^n}\tag{2.26}$$

よって、スペクトル半径の公式より

$$\rho(A)=\lim_{n\to\infty}\|A^{2^n}\|^{1/2^n}=\|A\|\tag{2.27}$$

となる。

次に、$\|A/(2\|A\|)\|=1/2<1$ より、$\pm i\mathbf{1}+A/(2\|A\|)$ の逆元が存在する。よって、

$$K=\left(-i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)\left(i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)^{-1}\tag{2.28}$$

とその逆元は定義できる。$A^*=A$ であるから

$$\begin{aligned}K^*&=\left(-i\mathbf{1}+\frac{A^*}{2\|A\|}\right)^{-1}\left(i\mathbf{1}+\frac{A^*}{2\|A\|}\right)=\left(-i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)^{-1}\left(i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)\\&=\left(i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)\left(-i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)^{-1}=K^{-1}\end{aligned}\tag{2.29}$$

つまり、K はユニタリーである。このとき、

$$\mathbf{1}-K=2i\left(i\mathbf{1}+\frac{A}{2\|A\|}\right)^{-1}\tag{2.30}$$

の逆元が存在し、

$$A=2i\|A\|(\mathbf{1}+K)(\mathbf{1}-K)^{-1}\tag{2.31}$$

これより、

$$\lambda\mathbf{1}-A=\{\lambda+2i\|A\|\}\left(\frac{\lambda-2i\|A\|}{\lambda+2i\|A\|}-K\right)(\mathbf{1}-K)^{-1}\tag{2.32}$$

となるので、$\lambda\in\sigma(A)$ は $\frac{\lambda-2i\|A\|}{\lambda+2i\|A\|}\in\sigma(K)$ と同値である。よって、1 より、

$$\left|\frac{\lambda-2i\|A\|}{\lambda+2i\|A\|}\right|=1\Leftrightarrow\lambda^*=\lambda\tag{2.33}$$

つまり、$\sigma(A)\subset\mathbf{R}$。これと $\rho(A)=\|A\|$ より、$\sigma(A)\subset[-\|A\|,\|A\|]$。

さらに、$(\lambda\mathbf{1}-A^2)=(\sqrt{\lambda}\mathbf{1}-A)(\sqrt{\lambda}\mathbf{1}+A)$ より、$\lambda\in\sigma(A^2)$ は、$\sqrt{\lambda}\in\sigma(A)$ または $-\sqrt{\lambda}\in\sigma(A)$ と同値である。よって、$\pm\sqrt{\lambda}\in[-\|A\|,\|A\|] \Leftrightarrow 0\le\lambda\le\|A\|^2$。つまり、$\sigma(A^2)\subset[0,\|A\|^2]$。 ♣

注:$W(f)$ をCCR代数を定義する演算子とするとき、$\|\mathbf{1}-W(f)\|=2$ を示す。まず、U をユニタリーとすると、$\|UAU^*\|\le\|U\|\|A\|\|U\|=\|A\|$。よって、$\|UAU^*\|\ge\|U^*UAU^*U\|=\|A\|$、つまり、$\|UAU^*\|=\|A\|$。さて、$\lambda\in\sigma(W(f))$ とすると、$W(f)$ はユニタリーなので $\lambda=e^{i\theta}$ と表せる。このとき、

$$W_1\equiv W\left(\frac{-i(\theta+\pi)}{\|f\|_2^2}f\right)$$

とおくと、$W(f)$ の性質から $W_1W(f)W_1^*=-e^{-i\theta}W(f)$ となるので、

$$2=1-\{-e^{-i\theta}\lambda\}\in\sigma\left(\mathbf{1}-W_1W(f)W_1^*\right)$$

がいえる。よって、$2\le\rho\left(\mathbf{1}-W_1W(f)W_1^*\right)=\|\mathbf{1}-W_1W(f)W_1^*\|=\|\mathbf{1}-W(f)\|$。他方、$\|\mathbf{1}-W(f)\|\le\|\mathbf{1}\|+\|W(f)\|=2$。 ♣

Def. 3

$A\in\mathfrak{A}$ が自己随伴でそのスペクトルが正の実数の部分集合であるとき、正値であるという。

Prop. 3

1. 自己随伴な A が正値である必要十分条件は $\|\mathbf{1}-A/\|A\|\|\le 1$。さらに、自己随伴な A が $\|\mathbf{1}-A\|\le 1$ を満たすなら A も正値である。

2. 正値元 A_1 A_2 と、正の実数 c_1 c_2 について、c_1A_1、$c_1A_1+c_2A_2$ は正値である。

3. 任意の自己随伴な元 A について、2つの正値元 $A_\pm$ が存在し、$A_+A_-=0$、$A=A_+-A_-$ が成り立つ。

4. A が正値 $\Leftrightarrow$ $A=B^*B$ となるような $B\in\mathfrak{A}$ が存在する。

(proof)

<u>1について</u>

A が正値なら $\sigma(A)\subset[0,\|A\|]$ なので、$\sigma(\mathbf{1}-A/\|A\|)=\{\lambda:\|A\|(1-\lambda)\in\sigma(A)\}\subset[0,1]$。よって、$\rho(\mathbf{1}-A/\|A\|)=\|\mathbf{1}-A/\|A\|\|\le 1$。

逆に、$\sigma(A)=\{\lambda:1-\lambda/\|A\|\in\sigma(\mathbf{1}-A/\|A\|)\subset[-1,1]\}\subset[0,2\|A\|]$、よって、$A$ は正値である。

さらに、$\|\mathbf{1}-A\|\le 1$ なら $\sigma(A)=\{\lambda:1-\lambda\in\sigma(\mathbf{1}-A)\subset[-1,1]\}\subset[0,2]$ となるので、A は正値である。

2について

$c_1>0$ なので、$\sigma(c_1A_1)=\{\lambda:\lambda/c_1\in\sigma(A_1)\}\subset\{\lambda:\lambda/c_1\in[0,\|A_1\|]\}=[0,c_1\|A_1\|]$。よって、$c_1A_1$ は正値である。他方、A_j は正値なので1より $\|\mathbf{1}-A_j/\|A_j\|\|\le 1$。そして、$p=c_1\|A_1\|/(c_1\|A_1\|+c_2\|A_2\|)$ とおくと、$0<p<1$ かつ

$$p\frac{A_1}{\|A_1\|}+(1-p)\frac{A_2}{\|A_2\|}=\frac{c_1A_1+c_2A_2}{c_1\|A_1\|+c_2\|A_2\|}$$

より、

$$\left\|\mathbf{1}-\left\{p\frac{A_1}{\|A_1\|}+(1-p)\frac{A_2}{\|A_2\|}\right\}\right\|\le p\left\|\mathbf{1}-\frac{A_1}{\|A_1\|}\right\|+(1-p)\left\|\mathbf{1}-\frac{A_2}{\|A_2\|}\right\|\le 1 \quad (2.34)$$

よって、$c_1A_1+c_2A_2/(c_1\|A_1\|+c_2\|A_2\|)$、従って、$c_1A_1+c_2A_2$ は正値である。

3について

$|x|<1$ のとき、一般2項定理より、$\sqrt{1-x}=1-\sum_{n=1}^{\infty}(2n-2)!x^n/(2^{2n-1}(n-1)!n!)$。ここで、$0\le x<1$ で $1-x\le e^{-x}$ と $\lim_{n\to\infty}\{\log n-\sum_{k=1}^{n-1}1/k\}$ が存在することから、

$$\frac{(2n-2)!}{2^{2n-1}(n-1)!n!}=\frac{1}{2n}\prod_{k=1}^{n-1}\left(1-\frac{1}{2k}\right)\le\frac{1}{2n^{3/2}}\exp\left(\frac{\log n}{2}-\sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{2k}\right)\le\frac{K}{2n^{3/2}}$$

を満たす正数 K が存在する。よって、$\sum_{n=1}^{\infty}(2n-2)!/(2^{2n-1}(n-1)!n!)$ は収束する。よって、$\|C\|\le 1$ のとき、

$$\left\|\sum_{n=N}^{M}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\right\|\le\sum_{n=N}^{M}\frac{(2n-2)!\|C\|^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\le\sum_{n=N}^{M}\frac{(2n-2)!}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\to 0\ (N,M\to\infty)$$

となるので、次の級数は $\mathfrak{A}$ でノルム収束する。

$$D(C)=\mathbf{1}-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!} \quad (2.35)$$

$\sqrt{1-x}$ の一般2項展開より、

$$1-x=1-x-2\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(2n-2)!x^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}+\left(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!x^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\right)^2$$

となるので、

$$\begin{aligned}D(C)^2&=\left(\mathbf{1}-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\right)^2\\&=\mathbf{1}-2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}+\left(\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}\right)^2\\&=\mathbf{1}-2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}+2\sum_{n=2}^{\infty}\frac{(2n-2)!C^n}{2^{2n-1}(n-1)!n!}=\mathbf{1}-C\end{aligned} \quad (2.36)$$

さて、Aが正値なら、1より $\|\mathbf{1}-A/\|A\|\| \leq 1$ となるので、

$$B = \|A\|^{1/2} D\Big(\mathbf{1} - \frac{A}{\|A\|}\Big) \tag{2.37}$$

が定義できる。また、Aが自己随伴なのでBも自己随伴となり

$$B^*B = B^2 = \|A\| D\Big(\mathbf{1} - \frac{A}{\|A\|}\Big)^2 = \|A\|\Big(\mathbf{1} - \mathbf{1} + \frac{A}{\|A\|}\Big) = A \tag{2.38}$$

がいえる。

さらに、

$$\Big\|\mathbf{1} - \frac{B}{\|A\|^{1/2}}\Big\| \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-2)!}{2^{2n-1}(n-1)!n!} = \sqrt{2} - 1 < 1 \tag{2.39}$$

なので、$B/\|A\|^{1/2}$、即ち、Bは正値である。そこで、BをAの平方根と呼び $B = \sqrt{A}$ と記す。特に、自己随伴なAについてA^2は正値なので正値元 $\sqrt{A^2}$ が定まる。これを $|A|$ と記す。

さて、自己随伴なAについて、$A_\pm = (|A| \pm A)/2$ とおくと、題意を満たすことを示そう。$A = A_+ - A_-$ は自明。$|A|$ は A と可能交換な $\mathbf{1} - A/\|A\|$ の級数なので、Aと交換する。よって、

$$4A_+A_- = (|A| + A)(|A| - A) = A^2 + A|A| - |A|A - A^2 = 0$$

次に、$A_\pm$が正値であることを示そう。どちらの場合も同様なので A_- の場合を考える。

$$A_n = nA_-^2(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}$$

とおくと、

$$|A|A_n = A_-A_n\,, \quad A_-A_n - A_- = -A_-(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}$$

なので、

$$\begin{aligned} &\||A|A_n - A_-\|^2 = \|A_-(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}\|^2 = \|(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}A_-^2(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}\| \\ &\leq \|(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}A_-^2\|\|(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}\| = \frac{1}{n}\|\mathbf{1} - (\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}\|\|(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}\| \end{aligned}$$

$\mathbf{1} + nA_-^2$ のスペクトルは $[1, \infty)$ に含まれるので、$(\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}$ および $\mathbf{1} - (\mathbf{1} + nA_-^2)^{-1}$ のスペクトルは $[0, 1]$ に含まれる。よって、上式右辺は $1/n$ 以下で、$\lim_{n\to\infty} \||A|A_n - A_-\| = 0$ となる。他方、

$$|A|A_n = \Big(|A|^{1/4}|A_-|^{1/2}\big(\mathbf{1}/n + A_-^2\big)^{-1/2}|A_-|^{1/2}|A|^{1/4}\Big)^2$$

は正値なので、

$$\left\|\mathbf{1}-\frac{A_-}{\|A_-\|}\right\| \le \left\|\mathbf{1}-\frac{|A|A_n}{\||A|A_n\|}\right\| + \left\|\frac{|A|A_n}{\||A|A_n\|}-\frac{|A|A_n}{\|A_-\|}\right\| + \left\|\frac{|A|A_n-A_-}{\|A_-\|}\right\|$$
$$\le 1+\left|\frac{1}{\||A|A_n\|}-\frac{1}{\|A_-\|}\right|\||A|A_n\| + \frac{\||A|A_n-A_-\|}{\|A_-\|} \to 1 \ (n\to\infty) \qquad (2.40)$$

よって、A_- は正値である。

4について

A が正値のとき、$A=B^*B$ となることは3の証明の過程で既に示した。逆に、B^*B は自己随伴なので、3より $B^*B=C-D$、$CD=0$ を満たす正値元 C,D が存在する。このとき、

$$-(BD)^*(BD) = -DB^*BD = -D(C-D)D = D^3$$

右辺は正値元 D の3乗なので、左辺も正値である。よって、$\sigma\big((BD)^*(BD)\big)\subset(-\infty,0]$ 逆に、自己随伴元 S,T を用い、$BD=S+iT$ と表すと (つまり、$S=\{(BD)+(BD)^*\}/2$、$T=\{(BD)-(BD)^*\}/(2i)$ とおくと)、

$$(BD)(BD)^* = (S+iT)(S-iT) = S^2+T^2+i(TS-ST) = -(BD)^*(BD)+2S^2+2T^2$$

右辺は正値元 $-(BD)^*(BD)$、$2S^2$、$2T^2$ の和なので、左辺は正値である。よって、任意の負数 $\lambda<0$ について、$(\lambda\mathbf{1}-(BD)(BD)^*)^{-1}$ が存在する。ところが、

$$\big(\lambda\mathbf{1}-(BD)^*(BD)\big)\big\{\mathbf{1}+(BD)^*(\lambda\mathbf{1}-(BD)(BD)^*)^{-1}(BD)\big\} = \lambda\mathbf{1}$$

より、$\big(\lambda\mathbf{1}-(BD)^*(BD)\big)^{-1}$ の存在が分かる。よって、$\sigma\big((BD)^*(BD)\big)\subset[0,\infty)$。以上から、$\sigma(D^3)=\sigma\big(-(BD)^*(BD)\big)=\{0\}$ となる。実数 λ について、$\omega=e^{2\pi i/3}$ と置く時、

$$\lambda^3\mathbf{1}-D^3 = (\lambda\mathbf{1}-D)(\lambda\omega\mathbf{1}-D)(\lambda\omega^2\mathbf{1}-D)$$

で、D は自己随伴なので後半の2因子は常に逆を持つ。よって、$\lambda^3\mathbf{1}-D^3$ が逆を持つことと $\lambda\mathbf{1}-D$ が逆を持つことは同値で、$\sigma(D)=\{\lambda\in\mathbf{R}:\lambda^3\in\sigma(D^3)\}=\{0\}$ となる。結局、スペクトル半径の公式より $\|D\|=0$ となる。ゆえに、$B^*B=C$ は正値である。 ♣

2.2 $\mathfrak{A}$ における時間発展

C^* 代数による方法では直接分布関数を扱わないため、Heisenberg 描像で時間発展を考える必要がある。そこで $\mathfrak{A}$ における時間発展演算子 τ_t を次のように定義する。

Def. 4 (時間発展の定義：強連続な*-同型群)
$A,B\in\mathfrak{A}$ に対して

1. $\tau_t:\mathfrak{A}\to\mathfrak{A}$ は線形写像で $\tau_t(AB)=\tau_t(A)\tau_t(B)$, $\tau_t(A^*)=\tau_t(A)^*$ を満たす。 (*-同型)

2. $\tau_{t+s}(A)=\tau_t\tau_s(A),\tau_0(A)=A$, (群の性質)

3. $\lim_{s\to t}\|\tau_s(A)-\tau_t(A)\|=0$, (強連続性)

Prop. 4

τ_t を $\mathfrak{A}$ 上の強連続な*-同型群とすると、$\tau_t(\mathbf{1})=\mathbf{1}$ かつ $\|\tau_t(A)\|=\|A\|$。

(proof) まず、$\tau_t(\tau_{-t}(A))=A$ より、

$$\tau_t(\mathbf{1})=\tau_t(\mathbf{1})\tau_t(\tau_{-t}(\mathbf{1}))=\tau_t(\mathbf{1}\tau_{-t}(\mathbf{1}))=\tau_t(\tau_{-t}(\mathbf{1}))=\mathbf{1}$$

さて、$A\in\mathfrak{A}$ を自己随伴とすると、$\lambda\in r(A)$ について、$(\lambda\mathbf{1}-A)^{-1}$ が存在する。よって、

$$(\lambda\mathbf{1}-\tau_t(A))\tau_t\big((\lambda\mathbf{1}-A)^{-1}\big)=\tau_t(\lambda\mathbf{1}-A)\tau_t\big((\lambda\mathbf{1}-A)^{-1}\big)=\tau_t\big((\lambda\mathbf{1}-A)(\lambda\mathbf{1}-A)^{-1}\big)=\tau_t(\mathbf{1})=\mathbf{1}$$

が存在する。よって、$\lambda\in r(\tau_t(A))$ である。逆に、$\lambda\in r(\tau_t(A))$ なら

$$\begin{aligned}&\tau_{-t}\big((\lambda\mathbf{1}-\tau_t(A))^{-1}\big)(\lambda\mathbf{1}-A)=\tau_{-t}\big((\lambda\mathbf{1}-\tau_t(A))^{-1}\big)\tau_{-t}\big(\tau_t(\lambda\mathbf{1}-A)\big)\\&=\tau_{-t}\Big(\big(\lambda\mathbf{1}-\tau_t(A)\big)^{-1}\big(\lambda\mathbf{1}-\tau_t(A)\big)\Big)=\tau_{-t}(\mathbf{1})=\mathbf{1}\end{aligned}$$

より、$\lambda\in r(A)$。よって,$r(A)=r(\tau_t(A))$、つまり、$\sigma(A)=\sigma(\tau_t(A))$ となり、$\|A\|=\rho(A)=\rho(\tau_t(A))=\|\tau_t(A)\|$ が言える。A が自己随伴でない場合は、$\|A\|^2=\|A^*A\|=\|\tau_(A^*A)\|=\|\tau_(A)^*\tau_t(A)\|=\|\tau_t(A)\|^2$ から、$\|A\|=\|\tau_t(A)\|$ が言える。 ♣

Prop. 5

強連続な*-同型群 τ_t について、$\mathfrak{A}$ の稠密な部分集合 $D(\delta)$ で定義された線形演算子 δ が存在し、$A\in D(\delta)$ について

$$\lim_{t\to0}\left\|\frac{\tau_t(A)-A}{t}-\delta(A)\right\|=0 \tag{2.41}$$

が成り立つ。ドメイン $D(\delta)$ で定義された δ のを τ_t の *generator* と呼ぶ。さらに、

i $\mathbf{1}\in D(\delta)$ かつ $\delta(\mathbf{1})=0$

ii A、$B\in D(\delta)$ ならば $AB\in D(\delta)$ で $\delta(AB)=A\delta(B)+\delta(A)B$ が成り立つ。

iii $A\in D(\delta)$ ならば $A^*\in D(\delta)$ で $\delta(A)^*=\delta(A^*)$ が成り立つ。

(proof) 集合 $D(\delta)$ を

$$D(\delta)=\left\{A_\alpha\equiv\frac{1}{\alpha}\int_0^\infty ds e^{-s/\alpha}\tau_s(A):\alpha>0、A\in\mathfrak{A}は任意\right\} \tag{2.42}$$

と置こう。まず、$D(\delta)$ が稠密であることを示そう。任意の $A\in\mathfrak{A}$ について強連続性から

$$\begin{aligned}\|A_\alpha-A\|&=\left\|\frac{1}{\alpha}\int_0^\infty ds e^{-s/\alpha}\tau_s(A)-\frac{1}{\alpha}\int_0^\infty ds e^{-s/\alpha}A\right\|=\left\|\int_0^\infty\frac{ds}{\alpha}e^{-s/\alpha}\{\tau_s(A)-A\}\right\|\\&=\left\|\int_0^\infty ds e^{-s}\{\tau_{\alpha s}(A)-A\}\right\|\le\int_0^\infty ds e^{-s}\|\tau_{\alpha s}(A)-A\|\to0\ (\alpha\to0)\end{aligned} \tag{2.43}$$

実際、任意の $\epsilon > 0$ について、M を $\int_M^\infty ds e^{-s} < \epsilon/(4\|A\|)$ となるように選ぶと、τ_t の強連続性より α を十分小さくとると $\sup_{0\le t\le \alpha M}\|\tau_t(A)-A\| < \epsilon/2$ とでき、

$$\|A_\alpha - A\| \le \int_0^\infty ds e^{-s}\|\tau_{\alpha s}(A)-A\|$$
$$\le \int_0^M ds e^{-s}\|\tau_{\alpha s}(A)-A\| + \int_M^\infty ds e^{-s} 2\|A\| < \int_0^M ds e^{-s}\frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} < \epsilon \qquad (2.44)$$

が言える。つまり、$D(\delta)$ は $\mathfrak{A}$ で稠密である。

さて、$A_\alpha \in D(\delta)$ について、

$$\tau_t(A_\alpha) = \int_0^\infty \frac{ds}{\alpha} e^{-s/\alpha}\tau_{s+t}(A) = \int_t^\infty \frac{ds}{\alpha} e^{\frac{t-s}{\alpha}}\tau_s(A) = e^{t/\alpha}A_\alpha - \frac{t}{\alpha}\int_0^1 ds e^{\frac{(1-s)t}{\alpha}}\tau_{ts}(A)$$

なので、

$$\left\|\frac{\tau_t(A_\alpha)-A_\alpha}{t} - \frac{A_\alpha - A}{\alpha}\right\| = \left\|\frac{e^{t/\alpha}-1-t/\alpha}{t}A_\alpha - \frac{1}{\alpha}\int_0^1 ds e^{\frac{(1-s)t}{\alpha}}\tau_{ts}(A) + \frac{A}{\alpha}\right\|$$
$$\le \left|\frac{e^{t/\alpha}-1-t/\alpha}{t}\right|\|A_\alpha\| + \frac{1}{\alpha}\int_0^1 ds e^{\frac{(1-s)t}{\alpha}}\|\tau_{ts}(A)-A\|$$
$$+\frac{1}{\alpha}\left|1-\int_0^1 ds e^{\frac{(1-s)t}{\alpha}}\right|\|A\| \to 0 \ (t\to 0) \qquad (2.45)$$

そこで、$A_\alpha \in D(\delta)$ について

$$\delta(A_\alpha) \equiv \frac{1}{\alpha}\{A_\alpha - A\} \qquad (2.46)$$

とおくと、明らかに δ は線形で、

$$\lim_{t\to 0}\left\|\frac{\tau_t(A_\alpha)-A_\alpha}{t} - \delta(A_\alpha)\right\| = 0 \qquad (2.47)$$

が成り立つ。

さて、$\tau_t(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$ から

$$\lim_{t\to 0}\left\|\frac{\tau_t(\mathbf{1})-\mathbf{1}}{t} - 0\right\| = 0 \qquad (2.48)$$

となるので、(i) が成立。また、$A, B \in D(\delta)$ のとき、

$$\left\|\frac{\tau_t(AB)-AB}{t} - \{\delta(A)B + A\delta(B)\}\right\|$$
$$= \left\|\frac{\tau_t(A)-A}{t}\tau_t(B) - \delta(A)\tau_t(B) + \delta(A)\tau_t(B) - \delta(A)B + A\frac{\tau_t(B)-B}{t} - A\delta(B)\right\|$$
$$\le \left\|\frac{\tau_t(A)-A}{t} - \delta(A)\right\|\|\tau_t(B)\| + \|\delta(A)\|\|\tau_t(B)-B\| + \|A\|\left\|\frac{\tau_t(B)-B}{t} - \delta(B)\right\|$$
$$\to 0 \quad (t\to 0) \qquad (2.49)$$

よって、(ii) が成立。$A \in D(\delta)$ なら、

$$\left\| \frac{\tau_t(A^*) - A^*}{t} - \delta(A)^* \right\| = \left\| \frac{\tau_t(A)^* - A^*}{t} - \delta(A)^* \right\|$$
$$= \left\| \frac{\tau_t(A) - A}{t} - \delta(A) \right\| \to 0 \quad (t \to 0) \tag{2.50}$$

よって、(iii) も成立。 ♣

例 3 (spinless fermion の自由時間発展)

$\mathfrak{A}_{\mathrm{CAR}}$ 上の写像 τ_t^0 を次式を満たす *-同型として定義する。

$$\tau_t^0 (a(f)) \equiv a\left(e^{ih_0 t} f\right) = \int dk \left(e^{i\omega_k t} f(k)\right)^* a_k \tag{2.51}$$

ただし $\left(e^{ih_0 t} f\right)(k) \equiv e^{i\omega_k t} f(k)$ とした。すると、*generator* は

$$\delta_0 (a(f)) = \int dk \left(i\omega_k f(k)\right)^* a_k \equiv a(ih_0 f) \tag{2.52}$$

となり、$a(f) \in D(\delta_0)$ であるには $\int dk |\omega_k f(k)|^2 < \infty$ でなければならない。これから、*generator* が $\mathfrak{A}$ 全体では定義できないことが分かる。因みに、上記 *Proposition* の証明中に出てきた $a(f)_\alpha$ は

$$a(f)_\alpha = \int dk \left\{ \frac{f(k)}{1 - i\alpha\omega_k} \right\}^* a_k$$

となる。

例 4 (spinless boson の自由時間発展)

$\mathfrak{A}_{\mathrm{CCR}}$ 上の写像 τ_t^0 を次式を満たす *-同型として定義する。

$$\begin{aligned} \tau_t^0 (W(f)) &\equiv \exp\left(\frac{i}{\sqrt{2}} \left\{ \int dk \left(e^{i\omega_k t} f(k) \right)^* a_k + \int dk \left(e^{i\omega_k t} f(k) \right) a_k^* \right\} \right) \\ &= W\left(e^{ih_0 t} f\right) \end{aligned} \tag{2.53}$$

ただし $\left(e^{ih_0 t} f\right)(k) \equiv e^{i\omega_k t} f(k)$ とした。

Prop. 6

τ_t を強連続な *-同型群とし、$V = V^* \in \mathfrak{A}$ を自己随伴な元とする。このとき、Γ_t を次の積分方程式の解とする。

$$\Gamma_t = \mathbf{1} + i \int_0^t ds \Gamma_s \tau_s(V) \tag{2.54}$$

すると、*(i)* Γ_t はユニタリーで、*(ii)* $\Gamma_{t+s} = \Gamma_t \tau_t(\Gamma_s)$ かつ *(iii)*

$$\tau_t^V(A) \equiv \Gamma_t \tau_t(A) \Gamma_t^* \quad (^\forall A \in \mathfrak{A}) \tag{2.55}$$

は強連続な*-同型群となり、τ_t^V の generator δ^V は $^\forall A \in D(\delta)$（δ は τ_t の generator）に対して定義され

$$\delta^V(A) = \delta(A) + i[V, A] \tag{2.56}$$

が成り立つ。

(proof) 与えられた積分方程式を逐次代入すると

$$\begin{aligned}\Gamma_t &= \mathbf{1} + i\int_0^t ds\tau_s(V) + i^2\int_0^t ds_2\int_0^{s_2} ds_1\tau_{s_1}(V)\tau_{s_2}(V) \\ &\quad + \cdots + i^n\int_0^t ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\tau_{s_1}(V)\tau_{s_2}(V)\cdots\tau_{s_n}(V) + \cdots\end{aligned} \tag{2.57}$$

が得られる。この無限級数が存在し、t の連続関数であれば、これは、積分方程式の解である。ところが、$\|\tau_{s_1}(V)\cdots\tau_{s_n}(V)\| \le \|\tau_{s_1}(V)\|\cdots\|\tau_{s_n}(V)\| = \|V\|^n$ より、$t > 0$ のとき対応する絶対級数は以下のように収束する：

$$\begin{aligned}&1 + \left\|\int_0^t ds\tau_s(V)\right\| + \cdots + \left\|\int_0^t ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdot\int_0^{s_2} ds_1\tau_{s_1}(V)\tau_{s_2}(V)\cdot\cdot\tau_{s_n}(V)\right\| + \cdots \\ &\le 1 + \int_0^t ds\|\tau_s(V)\| + \cdots + \int_0^t ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdot\cdot\int_0^{s_2} ds_1\|\tau_{s_1}(V)\tau_{s_2}(V)\cdot\cdot\tau_{s_n}(V)\| + \cdots \\ &\le 1 + \int_0^t ds\|V\| + \cdots + \int_0^t ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdot\cdot\int_0^{s_2} ds_1\|V\|^n + \cdots \\ &= 1 + t\,\|V\| + \cdots + \frac{t^n}{n!}\|V\|^n + \cdots = e^{\|V\|t} < +\infty\end{aligned} \tag{2.58}$$

$t < 0$ の場合も同様に収束するので、(2.57) はノルム収束し、積分方程式の解となる。

さて、(2.57) の右辺は t について微分可能であり、微分すると

$$\frac{d}{dt}\Gamma_t = i\Gamma_t\tau_t(V) \quad \text{及び} \quad \frac{d}{dt}\Gamma_t^* = -i\tau_t(V)\Gamma_t^*$$

を満たすことが分かる。よって、

$$\frac{d}{dt}(\Gamma_t\Gamma_t^*) = \frac{d\Gamma_t}{dt}\Gamma_t^* + \Gamma_t\frac{d\Gamma_t^*}{dt} = i\Gamma_t\tau_t(V)\Gamma_t^* - i\Gamma_t\tau_t(V)\Gamma_t^* = 0$$

より、$\Gamma_t\Gamma_t^* = \Gamma_0\Gamma_0^* = \mathbf{1}$。逆に、

$$\frac{d}{dt}(\Gamma_t^*\Gamma_t) = -i[\tau_t(V), \Gamma_t^*\Gamma_t]$$

より

$$\Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1} = -i\int_0^t dt[\tau_t(V), \Gamma_t^*\Gamma_t] = -i\int_0^t dt[\tau_t(V), \Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1}]$$

従って、$t > 0$ のときは $R_1(t) \equiv \int_0^t ds\|\Gamma_s^*\Gamma_s - \mathbf{1}\|$ とおくと、

$$\frac{dR_1(t)}{dt} = \|\Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1}\| \le \int_0^t dt\|[\tau_t(V), \Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1}]\| \le 2\|V\|\int_0^t dt\|\Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1}\| = 2\|V\|R_1(t)$$

が成り立ち

$$0 \leq \frac{e^{-2\|V\|t}}{2\|V\|}\|\Gamma_t^*\Gamma_t - \mathbf{1}\| = \frac{e^{-2\|V\|t}}{2\|V\|}\frac{dR_1(t)}{dt} \leq e^{-2\|V\|t}R_1(t)$$
$$= \int_0^t ds \frac{d}{ds}\{e^{-2\|V\|s}R_1(s)\} = \int_0^t ds e^{-2\|V\|s}\Big\{\frac{dR_1(s)}{ds} - 2\|V\|R_1(s)\Big\} \leq 0 \quad (2.59)$$

つまり、$\Gamma_t^*\Gamma_t = \mathbf{1}$が得られる。よって、$\Gamma_t$はユニタリーである。

次に、$\Gamma_s^*\Gamma_{t+s}\Big|_{t=0} = \mathbf{1}$と

$$\frac{d}{dt}\Gamma_s^*\Gamma_{t+s} = i\Gamma_s^*\Gamma_{t+s}\tau_{t+s}(V) \quad (2.60)$$

より、

$$\begin{aligned}
\Gamma_s^*\Gamma_{t+s} &= \mathbf{1} + i\int_0^t dt_1\tau_{s+t_1}(V) + i^2\int_0^t dt_2\int_0^{t_2} dt_1\tau_{s+t_1}(V)\tau_{s+t_2}(V) \\
&\quad + \cdots + i^n\int_0^t dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1\tau_{s+t_1}(V)\tau_{s+t_2}(V)\cdots\tau_{s+t_n}(V) + \cdots \\
&= \mathbf{1} + i\int_0^t dt_1\tau_s\big(\tau_{t_1}(V)\big) + i^2\int_0^t dt_2\int_0^{t_2} dt_1\tau_s\Big(\tau_{t_1}(V)\tau_{t_2}(V)\Big) \\
&\quad + \cdots + i^n\int_0^t dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1\tau_s\Big(\tau_{t_1}(V)\tau_{t_2}(V)\cdots\tau_{t_n}(V)\Big) + \cdots \\
&= \tau_s\Big(\mathbf{1} + i\int_0^t dt_1\tau_{t_1}(V) + i^2\int_0^t dt_2\int_0^{t_2} dt_1\tau_{t_1}(V)\tau_{t_2}(V) \\
&\quad + \cdots + i^n\int_0^t dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1\tau_{t_1}(V)\tau_{t_2}(V)\cdots\tau_{t_n}(V) + \cdots\Big) \\
&= \tau_s(\Gamma_t) \qquad (2.61)
\end{aligned}$$

つまり、$\Gamma_{s+t} = \Gamma_s\tau_s(\Gamma_t)$。

最後に$\tau_t^V(A) \equiv \Gamma_t\tau_t(A)\Gamma_t^*$が、強連続な*-同型群であることを示そう。$\tau_t^V$は明らかに線形である。そして、

$$\tau_t^V(AB) = \Gamma_t\tau_t(AB)\Gamma_t^* = \Gamma_t\tau_t(A)\tau_t(B)\Gamma_t^* = \Gamma_t\tau_t(A)\Gamma_t^*\Gamma_t\tau_t(B)\Gamma_t^* = \tau_t^V(A)\tau_t^V(B)$$
$$\tau_t^V(A^*) = \Gamma_t\tau_t(A^*)\Gamma_t^* = \Gamma_t\tau_t(A)^*\Gamma_t^* = \big(\Gamma_t\tau_t(A)\Gamma_t^*\big)^* = \tau_t^V(A)^*$$

つまり、τ_t^Vは*-同型である。そして、

$$\tau_t^V\big(\tau_s^V(A)\big) = \Gamma_t\tau_t\big(\Gamma_s\tau_s(A)\Gamma_s^*\big)\Gamma_t^* = \Gamma_t\tau_t(\Gamma_s)\tau_t\big(\tau_s(A)\big)\tau_t(\Gamma_s^*)\Gamma_t^*$$
$$= \Gamma_t\tau_t(\Gamma_s)\tau_{t+s}(A)\tau_t(\Gamma_s)^*\Gamma_t^* = \Gamma_{t+s}\tau_{t+s}(A)\Gamma_{t+s}^* = \tau_{t+s}^V(A) \quad (2.62)$$

より、τ_t^Vは群で、

$$\|\tau_t^V(A) - A\| = \|\Gamma_t\tau_t(A)\Gamma_t^* - A\| \leq \|\Gamma_t(\tau_t(A) - A)\Gamma_t^*\| + \|\Gamma_t A\Gamma_t^* - A\Gamma_t^*\| + \|A\Gamma_t^* - A\|$$
$$\leq \|\tau_t(A) - A\| + \|A\|\|\Gamma_t^* - \mathbf{1}\| + \|A\|\|\Gamma_t - \mathbf{1}\| \to 0 \quad (t \to 0) \quad (2.63)$$

より強連続でもある。さらに、$A\in D(\delta)$ のとき、ノルム収束の意味で

$$\frac{\tau_t^V(A)-A}{t}=\frac{\Gamma_t\tau_t(A)\Gamma_t^*-A}{t}=\Gamma_t\frac{\tau_t(A)-A}{t}\Gamma_t^*+\frac{\Gamma_t-\mathbf{1}}{t}A\Gamma_t^*+A\frac{\Gamma_t^*-\mathbf{1}}{t}$$
$$\to\delta(A)+iVA-iAV=\delta(A)+i[V,A]\quad(t\to 0)\tag{2.64}$$

が成り立つ。但し、$t\to 0$ で、$\|(\tau_t(A)-A)/t-\delta(A)\|\to 0$、$\|(\Gamma_t-\mathbf{1})/t-iV\|\to 0$ となることを用いた。よって、τ_t^V の generator δ^V は、$\delta^V(A)=\delta(A)+i[V,A]$ である。 ♣

系が自律的に変化するだけでなく、外からの操作によって変化する場合を考える必要がある。このとき、系の時間発展は時間に依存する摂動を受ける。この発展を記述する*-同型写像を考えよう。

Prop. 7

τ_t を強連続な*-同型群とし、$V(t)=V(t)^*\in\mathfrak{A}$ をノルム連続な自己随伴元とする。このとき、$\Gamma_{t,s}$ を次の積分方程式の解とする。

$$\Gamma_{t,s}=\mathbf{1}+i\int_0^t dt_1\Gamma_{t_1,s}\tau_{t_1-s}\big(V(t_1)\big)\tag{2.65}$$

すると、*(i)* $\Gamma_{t,s}$ はユニタリーで、*(ii)* $\Gamma_{t,s}=\Gamma_{t_1,s}\tau_{t_1-s}(\Gamma_{t,t_1})$ かつ *(iii)*

$$\tau_{t,s}^V(A)\equiv\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\Gamma_{t,s}^*\quad(^\forall A\in\mathfrak{A})\tag{2.66}$$

は*-同型で、$\tau_{t,s}^V(A)=\tau_{t_1,s}^V\big(\tau_{t,t_1}^V(A)\big)$ かつ $^\forall A\in D(\delta)$ に対し

$$\frac{d}{dt}\tau_{t,s}^V(A)=\tau_{t,s}^V\Big(\delta(A)+i[V(t),A]\Big)\tag{2.67}$$

が成り立つ。

(proof) 前同様、級数

$$\Gamma_{t,s}=\mathbf{1}+\sum_{n=1}^\infty i^n\int_s^t dt_n\int_s^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_s^{t_2}dt_1\tau_{t_1-s}\big(V(t_1)\big)\tau_{t_2-s}\big(V(t_2)\big)\cdots\tau_{t_n-s}\big(V(t_n)\big)\tag{2.68}$$

が存在し、t の連続関数であれば、これは、積分方程式の解である。ところが、

$$\|\tau_{t_1-s}(V(t_1))\cdots\tau_{t_n-s}(V(t_n))\|\le\|\tau_{t_1-s}(V(t_1))\|\cdots\|\tau_{t_n-s}(V(t_n))\|=K(t,s)^n$$

(但し、$K(t,s)\equiv\sup_{s\le\tau\le t}\|V(\tau)\|$) より、$t>s$ のとき対応する絶対級数は以下のように収束する：

$$1+\sum_{n=1}^\infty\left\|\int_s^t dt_n\int_s^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_s^{t_2}dt_1\tau_{t_1-s}\big(V(t_1)\big)\tau_{t_2-s}\big(V(t_2)\big)\cdots\tau_{t_n-s}\big(V(t_n)\big)\right\|$$
$$\le 1+\sum_{n=1}^\infty K(t,s)^n\int_s^t dt_n\int_s^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_s^{t_2}dt_1$$
$$=1+\sum_{n=1}^\infty\frac{K(t,s)^nt^n}{n!}=e^{K(t,s)t}<+\infty\tag{2.69}$$

$t<0$ の場合も同様に収束するので、(2.68) はノルム収束し、積分方程式の解となる。

さて、(2.68) の右辺は t について微分可能であり、微分すると

$$\frac{d}{dt}\Gamma_{t,s}=i\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(V(t)) \quad 及び \quad \frac{d}{dt}\Gamma^*_{t,s}=-i\tau_{t-s}(V(t))\Gamma^*_{t,s}$$

を満たすことが分かる。よって、

$$\frac{d}{dt}(\Gamma_{t,s}\Gamma^*_{t,s})=i\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(V(t))\Gamma^*_{t,s}-i\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(V(t))\Gamma^*_{t,s}=0$$

より、$\Gamma_{t,s}\Gamma^*_{t,s}=\Gamma_{s,s}\Gamma^*_{s,s}=\mathbf{1}$。逆に、

$$\frac{d}{dt}(\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s})=-i[\tau_{t-s}(V(t)),\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}]$$

より

$$\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}-\mathbf{1}=-i\int_s^t dt[\tau_{t-s}(V(t)),\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}]=-i\int_s^t dt[\tau_{t-s}(V(t)),\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}-1]$$

従って、$T\geq t>s$ のときは $R_1(t)\equiv\int_s^t dt'\|\Gamma^*_{t',s}\Gamma_{t',s}-\mathbf{1}\|$ とおくと、

$$\begin{aligned}\frac{dR_1(t)}{dt} &= \|\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}-\mathbf{1}\|\leq\int_s^t dt'\|[\tau_{t'-s}(V(t')),\Gamma^*_{t',s}\Gamma_{t',s}-\mathbf{1}]\| \\ &\leq 2K(T,s)\int_s^t dt'\|\Gamma^*_{t',s}\Gamma_{t',s}-\mathbf{1}\|=2K(T,s)R_1(t)\end{aligned}$$

が成り立ち

$$\begin{aligned}0&\leq\frac{e^{-2K(T,s)t}}{2K(T,s)}\|\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}-\mathbf{1}\|=\frac{e^{-2K(T,s)t}}{2K(T,s)}\frac{dR_1(t)}{dt}\leq e^{-2K(T,s)t}R_1(t) \\ &=\int_s^t dt'\frac{d}{dt'}\{e^{-2K(T,s)t'}R_1(t')\}=\int_s^t dt'e^{-2K(T,s)t'}\left\{\frac{dR_1(t')}{dt'}-2K(T,s)R_1(t')\right\}\leq 0\end{aligned}$$

つまり、$\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}=\mathbf{1}$ が得られ、$\Gamma_{t,s}$ がユニタリーであることが分かる。

次に、$\Gamma^*_{s_1,s}\Gamma_{t,s}\Big|_{t=s_1}=\mathbf{1}$ と

$$\frac{d}{dt}\Gamma^*_{s_1,s}\Gamma_{t,s}=i\Gamma^*_{s_1,s}\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(V(t)) \tag{2.70}$$

より、

$$\begin{aligned}\Gamma^*_{s_1,s}\Gamma_{t,s}&=\mathbf{1}+\sum_{n=1}^{\infty}i^n\int_{s_1}^t dt_n\int_{s_1}^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_{s_1}^{t_2}dt_1\tau_{t_1-s}(V(t_1))\tau_{t_2-s}(V(t_2))\cdots\tau_{t_n-s}(V(t_n)) \\ &=\mathbf{1}+\sum_{n=1}^{\infty}i^n\int_{s_1}^t dt_n\int_{s_1}^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_{s_1}^{t_2}dt_1\tau_{s_1-s}\Big(\tau_{t_1-s_1}(V(t_1))\tau_{t_2-s_1}(V(t_2))\cdots\tau_{t_n-s_1}(V(t_n))\Big) \\ &=\tau_{s_1-s}\Big(\mathbf{1}+\sum_{n=1}^{\infty}i^n\int_{s_1}^t dt_n\int_{s_1}^{t_n}dt_{n-1}\cdots\int_{s_1}^{t_2}dt_1\tau_{t_1-s_1}(V(t_1))\tau_{t_2-s_1}(V(t_2))\cdots\tau_{t_n-s_1}(V(t_n))\Big)\Big) \\ &=\tau_{s_1-s}(\Gamma_{ts_1})\end{aligned} \tag{2.71}$$

つまり、$\Gamma_{t,s}=\Gamma_{s_1,s}\tau_{s_1-s}(\Gamma_{t,s_1})$。

続いて、

$$\tau^V_{t,s}(A)\equiv\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\Gamma^*_{t,s}\quad(^\forall A\in\mathfrak{A}) \tag{2.72}$$

が*-同型であることを示そう。$\tau^V_{t,s}$ は明らかに線形である。そして、

$$\begin{aligned}\tau^V_{t,s}(AB)&=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(AB)\Gamma^*_{t,s}=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\tau_{t-s}(B)\Gamma^*_{t,s}\\&=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\Gamma^*_{t,s}\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(B)\Gamma^*_{t,s}=\tau^V_{t,s}(A)\tau^V_{t,s}(B)\\\tau^V_{t,s}(A^*)&=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A^*)\Gamma^*_{t,s}=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)^*\Gamma^*_{t,s}=\big(\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\Gamma^*_{t,s}\big)^*=\tau^V_{t,s}(A)^*\end{aligned}$$

なので、$\tau^V_{t,s}$ は*-同型である。さらに、

$$\begin{aligned}&\tau^V_{t_1,s}\big(\tau^V_{t,t_1}(A)\big)=\Gamma_{t_1,s}\tau_{t_1-s}\big(\Gamma_{t,t_1}\tau_{t-t_1}(A)\Gamma^*_{t,t_1}\big)\Gamma^*_{t_1,s}\\&=\Gamma_{t_1,s}\tau_{t_1-s}(\Gamma_{t,t_1})\tau_{t_1-s}\big(\tau_{t-t_1}(A)\big)\tau_{t_1-s}(\Gamma^*_{t,t_1})\Gamma^*_{t_1,s}=\Gamma_{t,s}\tau_{t-s}(A)\Gamma^*_{t,s}=\tau^V_{t,s}(A)\end{aligned} \tag{2.73}$$

が成り立つ。これと、$\Gamma_{t,t}=\mathbf{1}$ を利用すると、$^\forall A\in D(\delta)$ に対し

$$\begin{aligned}&\frac{\tau^V_{t+h,s}(A)-\tau^V_{t,s}(A)}{h}=\tau^V_{t,s}\left(\frac{\tau^V_{t+h,t}(A)-A}{h}\right)=\tau^V_{t,s}\left(\frac{\Gamma_{t+h,t}\tau_h(A)\Gamma^*_{t+h,t}-A}{h}\right)\\&=\tau^V_{t,s}\left(\Gamma_{t+h,t}\frac{\tau_h(A)-A}{h}\Gamma^*_{t+h,t}\right)+\tau^V_{t,s}\left(\Gamma_{t+h,t}A\frac{\Gamma^*_{t+h,t}-\mathbf{1}}{h}\right)+\tau^V_{t,s}\left(\frac{\Gamma_{t+h,t}-\mathbf{1}}{h}A\right)\\&\to\tau^V_{t,s}\big(\delta(A)\big)+\tau^V_{t,s}\big(-iAV(t)\big)+\tau^V_{t,s}\big(iV(t)A\big)\quad(h\to0)\end{aligned} \tag{2.74}$$

つまり、

$$\frac{d}{dt}\tau^V_{t,s}(A)=\tau^V_{t,s}\Big(\delta(A)+i[V(t),A]\Big) \tag{2.75}$$

が成り立つ。但し、$h\to0$ で、$\|(\tau_h(A)-A)/h-\delta(A)\|\to0$、$\|(\Gamma_{t+h,t}-\mathbf{1})/h-iV(t)\|\to0$ となることと写像 $A\to\tau^V_{t,s}(A)$ が連続であることを用いた。 ♣

2.3 C^* 代数上での状態

さて、これまでは可観測量からなる複素代数、C^* 代数の構造を見てきた。可観測量は観測毎に様々な値をとり、状態によって、その確率が異なる。よく知られているように、確率変数の生起確率を知ることとあらゆる次数のモーメント（可観測量のべきの平均値）をしることと同等である。従って、各可観測量の平均を知れば、状態がわかることになる。そこで、C^* 代数 $\mathfrak{A}$ 上の「状態」ω を次の性質を持つ $\mathfrak{A}$ から複素数 $\boldsymbol{C}$ への写像として定める。

Def. 5 (状態の定義)

$A,B\in\mathfrak{A},\ \alpha,\beta\in\boldsymbol{C}$ に対して

1. $\omega(\alpha A+\beta B)=\alpha\omega(A)+\beta\omega(B)$ *(線形性)*

2. $\omega(A^*A)\geq 0$ *(正値性)*

3. $\omega(\mathbf{1})=1$ *(規格化)*

を満たす写像を状態と呼ぶ。性質*1*は、和・スカラー倍の平均が平均の和・スカラー倍になることを意味し、性質*2*は正の値をとる可観測量の平均が非負であることを、性質*3*は、いつも*1*の値をとる可観測量の平均が*1*であることを表している。

Prop. 8 (状態の性質)

i $\omega(A)^*=\omega(A^*)$

ii $|\omega(A^*B)|\leq\sqrt{\omega(A^*A)\omega(B^*B)}$ （*Cauchy-Schwarz*の不等式）

iii $\omega(A^*B^*BA)\leq\|B\|^2\omega(A^*A)$

iv $|\omega(A)|\leq\|A\|$ （ωの連続性）

proof
(i)について：状態の正値性より、任意の複素数λについて

$$\omega\left((A+\lambda\mathbf{1})^*(A+\lambda\mathbf{1})\right)=\omega(A^*A)+\lambda^*\omega(A)+\lambda\omega(A^*)+|\lambda|^2$$

は実数。よって、$\mathrm{Im}\left(\lambda^*\omega(A)+\lambda\omega(A^*)\right)=0$となる。この式で、$\lambda=1$、$\lambda=i$とすると、それぞれ、$\mathrm{Im}\omega(A^*)=-\mathrm{Im}\omega(A)$、$\mathrm{Re}\omega(A^*)=\mathrm{Re}\omega(A)$が得られ、$\omega(A^*)=\omega(A)^*$となる。
(ii)について：再び状態の正値性より、任意の複素数λについて

$$0\leq\omega\left((A+\lambda B)^*(A+\lambda B)\right)=\omega(A^*A)+\lambda^*\omega(B^*A)+\lambda\omega(A^*B)+|\lambda|^2\omega(B^*B)$$

ここで、tを任意の実数とし、$\lambda=t\omega(A^*B)^*$ととると、(i)より$\omega(B^*A)=\omega(A^*B)^*$となるので

$$0\leq\omega(A^*A)+2t|\omega(A^*B)|^2+t^2|\omega(A^*B)|^2\omega(B^*B)$$

これから、右辺の判別式は非正でなければならない：

$$0\geq|\omega(A^*B)|^4-\omega(A^*A)|\omega(A^*B)|^2\omega(B^*B)$$

$\omega(A^*B)=0$のとき与式は明らかで、$\omega(A^*B)\neq 0$のとき$|\omega(A^*B)|^2\leq\omega(A^*A)\omega(B^*B)$を得る。
(iii)について：

$$\left\|\mathbf{1}-\left(\mathbf{1}-\frac{B^*B}{\|B\|^2}\right)\right\|\leq\frac{\|B^*B\|}{\|B\|^2}=1$$

なので、$\mathbf{1}-B^*B/\|B\|^2 \in \mathfrak{A}$は正値で、$\mathbf{1}-B^*B/\|B\|^2 = B'^*B'$を満たす$B'$が存在する。よって、正値性より

$$0 \leq \omega\Big((B'A)^*B'A\Big)\omega(A^*B'^*B'A) = \omega(A^*A) - \frac{\omega(A^*B^*BA)}{\|B\|^2} \tag{2.76}$$

よって、$\omega(A^*B^*BA) \leq \|B\|^2\omega(A^*A)$。
(iv)について：(i)を用い、(ii)で$B \to \mathbf{1}$とした不等式、(iii)で$A \to \mathbf{1}$、$B \to A$とした不等式を用いると

$$|\omega(A)| = |\omega(A^*)| \leq \sqrt{\omega(A^*A)} \leq \sqrt{\|A\|^2} = \|A\|$$

を得る。 ♣

例 5
$\mathfrak{A}$を$n \times n$行列からなるC^*代数とすると、上記のように定義した状態ωに対して、正値かつ$\mathrm{Tr}\,(\rho) = 1$を満たす行列ρが存在して$\omega\,(A) = \mathrm{Tr}\,(\rho A)$と表される。

(proof)
正規直交基底を$|e_j\rangle$,$(j = 1, 2, \cdots, n)$とすると、Aは次のように展開できる。

$$A = \sum_{ij} a_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|. \tag{2.77}$$

よって

$$\omega\,(A) = \sum_{ij} a_{ij}\omega\,(|e_i\rangle\langle e_j|) \tag{2.78}$$

となる。
そこで、ρを次のように定義する。

$$\rho \equiv \sum_{ij} \omega\,(|e_i\rangle\langle e_j|)\,|e_j\rangle\langle e_i|. \tag{2.79}$$

このように定義したとき

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,(\rho A) &= \mathrm{Tr}\left[\sum_{ij} \omega\,(|e_i\rangle\langle e_j|)\,|e_j\rangle\langle e_i|A\right] = \sum_{ij} \omega\,(|e_i\rangle\langle e_j|)\,\mathrm{Tr}\,(|e_j\rangle\langle e_i|A) \\ &= \sum_{ij} a_{ij}\omega\,(|e_i\rangle\langle e_j|) = \omega\left(\sum_{ij} a_{ij}|e_i\rangle\langle e_j|\right) = \omega\,(A)\,,\end{aligned} \tag{2.80}$$

が成立している。ここで$\mathrm{Tr}\,(|e_j\rangle\langle e_i|A) = \langle e_i|A|e_j\rangle = a_{ij}$を用いた。明らかに$A = \mathbf{1}$のとき、$\mathrm{Tr}\,(\rho) = \omega\,(\mathbf{1}) = 1$。以下、$\rho$が正値行列であること、つまり、エルミート行列で固有値が全て非負であること、を示そう。まず、$\rho^*_{ij} = \omega(|e_j\rangle\langle e_i|)^* = \omega(|e_i\rangle\langle e_j|) = \rho_{ji}$より、

ρはエルミートである。よって、対角化することができ、その固有値は全て実数である。μ_jを固有値、$|\varphi_j\rangle$を対応する規格化した固有ベクトルとする：$\rho|\varphi_j\rangle = \mu_j|\varphi_j\rangle$。すると、$|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \in \mathfrak{A}$は明らかに正値なので、$\omega$の正値性から、固有値が非負であることが分かる:

$$0 \leq \omega(|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|) = \mathrm{Tr}\left(\rho|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\right) = \mu_j \,\mathrm{Tr}\left(|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\right) = \mu_j \qquad \blacksquare$$

これまで繰り返し述べてきたように、C^*代数のアプローチでは、Hilbert空間を排除してきたが、状態を決める度にHilbert空間が導入され、Hilbert空間の性質と状態ωの性質が強く関係している。この出発点となるのが、次のGelfand-Naimark-Segalによる定理である。

Prop. 9 (GNS表現)
$\mathfrak{A}$をC^*代数、ωを状態とする。すると、*Hilbert*空間$\mathfrak{H}_\omega$と、その元Ω、$\mathfrak{A}$から$\mathfrak{H}_\omega$上の有界演算子の集合$\mathfrak{B}(\mathfrak{H}_\omega)$への*-同型写像$\pi_\omega$が存在し、

$$\omega(A) = (\Omega, \pi_\omega(A)\Omega) \quad (^\forall A \in \mathfrak{A}) \tag{2.81}$$

$$\mathfrak{H}_\omega = \overline{\{\pi_\omega(A)\Omega \ : \ A \in \mathfrak{A}\}} \ \ (\Omega \text{ は } \mathfrak{H}_\omega \text{の巡回ベクトル}) \tag{2.82}$$

が成立する。*(2.82)*右辺のバーは、*Hilbert*空間のノルムについて閉包をとることを意味する。

*Hilbert*空間、*-同型、ベクトルの組$(\mathfrak{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega)$は$C^*$代数$\mathfrak{A}$の（$\mathfrak{B}(\mathfrak{H}_\omega)$の元としての）表現を与える。これを*GNS*表現と呼ぶ。*GNS*表現は、ユニタリー変換を除き一意的に定まる。

(proof)
2つの元$A, B \in \mathfrak{A}$について、$\omega\big((A-B)^*(A-B)\big) = 0$のとき、$A \sim B$とすると、関係$\sim$は同値関係になる。そこで、$A \in \mathfrak{A}$を含む同値類を$x[A]$と示し、

$$\mathfrak{H}_0 = \{x[A] \ : \ A \in \mathfrak{A}\}$$

とおく。$\mathfrak{H}_0$に、和・スカラー倍を$c_1x[A] + c_2x[B] \equiv x[c_1A + c_2B]$（$c_1, c_2$は複素数）、内積を$(x[A], x[B]) \equiv \omega(A^*B)$で定める。

この定義は代表元の選び方によらず、$(\cdot,\cdot)$は内積である。まず、$N \in \mathfrak{A}$を$\omega(N^*N) = 0$を満たす元とすると、Cauchy-Schwarzの不等式から、$|\omega(N^*A)| \leq \sqrt{\omega(N^*N)\omega(A^*A)} = 0$となることに注意する。$A'$、$B'$をそれぞれ$x[A]$、$x[B]$の別の代表元とすると、$A - A'$、$B - B'$は、前記の$N$にあたる。よって、

$$\begin{aligned}
&\omega\big((c_1A + c_2B - c_1A' - c_2B')^*(c_1A + c_2B - c_1A' - c_2B')\big) \\
&= c_1^*\omega\big((A - A')^*(c_1A + c_2B - c_1A' - c_2B')\big) \\
&\qquad + c_2^*\omega\big((B - B')^*(c_1A + c_2B - c_1A' - c_2B')\big) = 0
\end{aligned} \tag{2.83}$$

より、c_1A+c_2B と $c_1A'+c_2B'$ は同じ同値類に属し、$c_1x[A]+c_2x[B]$ は代表元によらずに定まる。また、

$$\omega(A'^*B')=\omega(A^*B)+\omega\big((A'-A)^*B'\big)+\omega\big((B'-B)^*A\big)^*=\omega(A^*B)$$

より、$(x[A],x[B])$ も代表元によらない。さらに、

・$(x[A],x[A])=\omega(A^*A)\geq 0$

$(x[A],x[A])=\omega(A^*A)=0$ ならば $A\sim\mathbf{0}$ から $x[A]$ は $\mathfrak{H}_\omega$ の零元 $x[\mathbf{0}]$ に等しい。

・$(x[A],x[B])^*=\omega(A^*B)^*=\omega(B^*A)=(x[B],x[A])$

・$(x[C],c_1x[A]+c_2x[B])=\omega(C^*(c_1A+c_2B))=c_1\omega(C^*A)+c_2\omega(C^*B)$

$=c_1(x[C],x[A])+c_2(x[C],x[B])$

なので、$(\cdot,\cdot)$ は内積である。

$\mathfrak{H}_0$ をノルム $|x[A]|\equiv\sqrt{(x[A],x[A])}$ について完備化した Hilbert 空間を $\mathfrak{H}_\omega$ とする。$A\in\mathfrak{A}$ について、$\pi_\omega(A)x[B]\equiv x[AB]$ と定めると、$\pi_\omega(A)$ は $\mathfrak{H}_\omega$ 上の有界演算子に拡張できる。

実際、$\psi\in\mathfrak{H}_\omega$ とすると、点列 $\{B_n\}_{n=1}^\infty\subset\mathfrak{A}$ が存在し、$\lim_{n\to\infty}|x[B_n]-\psi|=0$ となる。この時、

$$|\pi_\omega(A)x[B_n]-\pi_\omega(A)x[B_m]|=|x[A(B_n-B_m)]|=\sqrt{\omega\big((B_n-B_m)^*A^*A(B_n-B_m)\big)}$$
$$\leq\|A\|\sqrt{\omega\big((B_n-B_m)^*(B_n-B_m)\big)}=\|A\||x[B_n]-x[B_m]|\to 0\quad(n,m\to\infty)$$

つまり、点列 $\{x[B_n]\}_{n=1}^\infty$ は $\mathfrak{H}_\omega$ の Cauchy 列となり、収束する。極限を $\pi_\omega(A)\psi$ と記そう。写像 $\psi\to\pi_\omega(A)\psi$ は明らかに線形である。そして、

$$|\pi_\omega(A)x[B_n]|=\sqrt{\omega(B_n^*A^*AB_n)}\leq\|A\|\sqrt{\omega(B_n^*B_n)}=\|A\||x[B_n]|$$

で $n\to\infty$ として、$|\pi_\omega(A)\psi|\leq\|A\||\psi|$ を得る。つまり、$\pi_\omega(A)\in\mathfrak{B}(\mathfrak{H}_\omega)$。

このとき、写像 $A\in\mathfrak{A}\to\pi_\omega(A)\in\mathfrak{B}(\mathfrak{H}_\omega)$ は*-同型（即ち、線形で、$\pi_\omega(A)^*=\pi_\omega(A^*)$ かつ $\pi_\omega(A)\pi_\omega(B)=\pi_\omega(AB)$）になる。

このことは、次の関係から分かる：

・$\pi_\omega(c_1A+c_2B)x[C]=x[c_1AC+c_2BC]=c_1x[AC]+c_2x[BC]=\{c_1\pi_\omega(A)+c_2\pi_\omega(B)\}x[C]$

・$(x[B],\pi_\omega(A)^*x[C])=(\pi_\omega(A)x[B],x[C])=(x[AB],x[C])=\omega(B^*A^*C)$

$=(x[B],x[A^*C])=(x[B],\pi_\omega(A^*)x[C])$

・$\pi_\omega(A_1)\pi_\omega(A_2)x[B]=x[A_1A_2B]=\pi_\omega(A_1A_2)x[B]$

ここで、$\Omega=x[\mathbf{1}]$ とおくと、$\{\pi_\omega(A)\Omega:\ A\in\mathfrak{A}\}=\{x[A]:\ A\in\mathfrak{A}\}=\mathfrak{H}_0$ より、Ω が巡回ベクトルであることが分かる。さらに、$(\Omega,\pi_\omega(A)\Omega)=(x[\mathbf{1}],x[A])=\omega(A)$ も成り立つ。

最後に、別の表現 $(\mathfrak{H}'_\omega,\pi'_\omega,\Omega')$ があるとする。これが $(\mathfrak{H}_\omega,\pi_\omega,\Omega)$ とユニタリー変換で結ばれることを示そう。写像 $U:\mathfrak{H}_\omega\to\mathfrak{H}'_\omega$ を

$$U\big(\pi_\omega(A)\Omega\big)=\pi'_\omega(A)\Omega'\quad(^\forall A\in\mathfrak{A})$$

と定義すると、$\{\pi_\omega(A)\Omega : A \in \mathfrak{A}\}$ は $\mathfrak{H}_\omega$ で稠密なので、U は $\mathfrak{H}_\omega$ 全体で定義できる。さらに、

$$\begin{aligned}&\Big(U^*\big(\pi'_\omega(A)\Omega'\big), \pi_\omega(B)\Omega\Big) = \Big(\pi'_\omega(A)\Omega', U\big(\pi_\omega(B)\Omega\big)\Big)\\ &= \Big(\pi'_\omega(A)\Omega', \pi'_\omega(B)\Omega'\Big) = \Big(\Omega', \pi'_\omega(A)^*\pi'_\omega(B)\Omega'\Big) = \Big(\Omega', \pi'_\omega(A^*B)\Omega'\Big)\\ &= \omega(A^*B) = \Big(\Omega, \pi_\omega(A^*B)\Omega\Big) = \Big(\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(B)\Omega\Big) \qquad (2.84)\end{aligned}$$

より、$U^*\big(\pi'_\omega(A)\Omega'\big) = \pi_\omega(A)\Omega$。よって、$U$ の定義と組合せ、$UU^*\big(\pi'_\omega(A)\Omega'\big) = U\big(\pi_\omega(A)\Omega\big) = \pi_\omega(A')\Omega'$ かつ $U^*U\big(\pi_\omega(A)\Omega\big) = U^*\big(\pi'_\omega(A)\Omega'\big) = \pi_\omega(A)\Omega$ を得る。つまり、U がユニタリーであることが分かる。さらに、

$$U^*\pi'_\omega(A)U\pi_\omega(B)\Omega = U^*\pi'_\omega(A)\pi'_\omega(B)\Omega' = U^*\pi'_\omega(AB)\Omega' = \pi_\omega(AB)\Omega = \pi_\omega(A)\pi_\omega(B)\Omega$$

から、$U^*\pi'_\omega(A)U = \pi_\omega(A)$ も言える。 ♣

GNS の定理により、C^* 代数を Hilbert 空間上の有界演算子として表すことができる。そして、その部分集合の性質により、状態を特徴付けることができる。このために必要な概念を 2 つ説明しよう。

Def. 6 (von Neumann 代数)
Hilbert 空間 $\mathfrak{H}$ 上の有界演算子の全体 $\mathfrak{B}(\mathfrak{H})$ の部分代数 $\mathfrak{M}$ について、

$$\mathfrak{M}' = \{a \in \mathfrak{B}(\mathfrak{H}) : \ [a, b] \equiv ab - ba = 0 \ \ {}^\forall b \in \mathfrak{M}\} \qquad (2.85)$$

を $\mathfrak{M}$ の *commutant*、$(\mathfrak{M}')' = \mathfrak{M}''$ を *bicommutant* と呼ぶ。$\mathfrak{M}'' = \mathfrak{M}$ を満たす代数を *von Neumann* 代数と呼ぶ。

Prop. 10
C^* 代数 $\mathfrak{A}$ の状態 ω に関する *GNS* 表現を $(\mathfrak{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega)$ とすると、

$$\mathfrak{M} \equiv \{\pi_\omega(A) : \ {}^\forall A \in \mathfrak{A}\}''(= \pi_\omega(\mathfrak{A})'' \text{と記す})$$

は *von Neumann* 代数となる。

(proof)
一般に、代数 $\mathfrak{M}$ の元は $\mathfrak{M}'$ の元と交換するので、$\mathfrak{M} \subset \mathfrak{M}''$。これから、$\mathfrak{M}''$ と交換する元が全て $\mathfrak{M}$ と交換することが分かるので、$\mathfrak{M}''' \subset \mathfrak{M}'$ が分かる。他方、最初に示した関係で $\mathfrak{M} \to \mathfrak{M}'$ とおくと、$\mathfrak{M}' \subset \mathfrak{M}'''$ が得られるので、$\mathfrak{M}' = \mathfrak{M}'''$ となる。ゆえに、$\mathfrak{M}'' = \mathfrak{M}''''$ これから直ちに $\Big(\pi_\omega(\mathfrak{A})''\Big)'' = \pi_\omega(\mathfrak{A})'''' = \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ が言える。 ♣

Def. 7 (factor)
C^* 代数 $\mathfrak{A}$ の状態 ω について *GNS* 表現を $(\mathfrak{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega)$ とし、$\mathfrak{M} = \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ を付随する *von Neumann* 代数とする。$\mathfrak{M}$ と $\mathfrak{M}'$ の双方と交換する元が単位元 $\mathbf{1}$ の複素数倍に限る、つまり、

$$\mathfrak{M} \cap \mathfrak{M}' = \{c\mathbf{1} : {}^\forall c \in \mathbf{C}\} (= \mathbf{C1} \text{と記す})$$

となるとき、状態 ω は *factor* であると言う。

2.4 平衡状態 －KMS（Kubo-Martin-Schwinger）状態－

C^* 代数が記述する無限量子系に、カノニカル分布やグランドカノニカル分布に相当する状態を導入することができる。まず、解析的な元から定義しよう。

Def. 8 (解析的な元)
σ_t を C^* 代数 $\mathfrak{A}$ で定義された強連続な *-同型群とする。複素面内の領域 $I_\lambda = \{z : |\mathrm{Im}z| < \lambda\}$ と I_λ 上で定義された関数 $f : I_\lambda \to \mathfrak{A}$ が存在し、
(i) t が実数のとき、$f(t) = \sigma_t(A)$。
(ii) $z \in I_\lambda$ について、次の極限がノルムの意味で存在する（強解析性）。

$$\lim_{h \to 0} \frac{f(z+h) - f(z)}{h}$$

の条件が成り立つとき、A は σ_t に対して解析的であると言い、$f(z) = \sigma_z(A)$ と記す。

Prop. 11 (解析元からなる稠密集合の存在)
任意の σ_t について、全複素平面で σ_t に対し解析的な元全体の集合 $\mathfrak{A}_\sigma$ は、σ_t の下で不変な *-部分代数でかつ $\mathfrak{A}$ で稠密である。

(proof) まず、$A, B \in \mathfrak{A}_\sigma$ とすると、$\mathbf{C}$ から $\mathfrak{A}$ への強解析的な関数 $f(z), h(z)$ が存在して、任意の実数 t について $f(t) = \sigma_t(A)$、$h(t) = \sigma_t(B)$ が成り立つ。このとき、複素数 c_1, c_2 について、$c_1 f(z) + c_2 h(z)$、$f(z)h(z)$、$f(z^*)^*$ は、強解析的で、

$$\begin{aligned} &c_1 f(z) + c_2 h(z)|_{z=t} = c_1 f(t) + c_2 h(t) = c_1 \sigma_t(A) + c_2 \sigma_t(B) = \sigma_t(c_1 A + c_2 B) \\ &f(z)h(z)|_{z=t} = f(t)h(t) = \sigma_t(A)\sigma_t(B) = \sigma_t(AB) \\ &f(z^*)^*|_{z=t} = f(t)^* = \sigma_t(A)^* = \sigma_t(A^*) \end{aligned} \tag{2.86}$$

つまり、$c_1 A + c_2 B, AB, A^* \in \mathfrak{A}_\sigma$ であり、$\mathfrak{A}_\sigma$ は *-部分代数である。加えて、

$$\lim_{h \to 0} \left\| \frac{f(z+h) - f(z)}{h} - g(z) \right\| = 0$$

とすると、

$$\lim_{h\to 0}\left\|\frac{\sigma_s(f(z+h))-\sigma_s(f(z))}{h}-\sigma_s(g(z))\right\|=\lim_{h\to 0}\left\|\sigma_s\left(\frac{f(z+h)-f(z)}{h}-g(z)\right)\right\|$$
$$=\lim_{h\to 0}\left\|\frac{f(z+h)-f(z)}{h}-g(z)\right\|=0$$

つまり、$\sigma_s(f(z))$ は強解析的で、$\sigma_s(f(t))=\sigma_s(\sigma_t(A))=\sigma_t(\sigma_s(A))$。ゆえに、$\sigma_s(A)\in\mathfrak{A}_\sigma$ となり $\mathfrak{A}_\sigma$ が σ 不変であることが分かる。

次に、稠密性を示そう。任意の $\epsilon>0$ と $A\in\mathfrak{A}$ について

$$A_\epsilon\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-s^2/\epsilon^2}\sigma_s(A)$$

とおき、この元が σ_t について解析的であることを示そう。$\mathbf{C}$ から $\mathfrak{A}$ への写像 $f(z)$ を

$$f(z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-(s-z)^2/\epsilon^2}\sigma_s(A)$$

とおく。すると、$|e^{-(s-z)^2/\epsilon^2}|=\exp[-(s^2-2s\mathrm{Re}z+\mathrm{Re}z^2)/\epsilon^2]$ より、右辺の積分は収束し、$\mathfrak{A}$ の元を定める。同じ理由で、

$$g(z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}\frac{2(s-z)}{\epsilon^2}e^{-(s-z)^2/\epsilon^2}\sigma_s(A)$$

も $\mathfrak{A}$ の元で、不等式 $|e^\alpha-1-\alpha|\le\sum_{n=0}^{\infty}|\alpha|^{n+2}/(n+2)!\le\sum_{n=0}^{\infty}|\alpha|^{n+2}/n!=|\alpha|^2e^{|\alpha|}$ を利用すると任意の複素数 z について $h\to 0$ で

$$\left\|\frac{f(z+h)-f(z)}{h}-g(z)\right\|=\left\|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}\left\{e^{\frac{2h(s-z)-h^2}{\epsilon^2}}-1-\frac{2h(s-z)}{\epsilon^2}\right\}\frac{e^{-\frac{(s-z)^2}{\epsilon^2}}}{h}\sigma_s(A)\right\|$$
$$\le\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}\left|e^{\frac{2h(s-z)-h^2}{\epsilon^2}}-1-\frac{2h(s-z)-h^2}{\epsilon^2}-\frac{h^2}{\epsilon^2}\right|\left|\frac{e^{-\frac{(s-z)^2}{\epsilon^2}}}{h}\right|\|\sigma_s(A)\|$$
$$\le|h|\|A\|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}\left\{\frac{|2(s-z)-h|^2}{\epsilon^4}\exp\left(\left|\frac{2h(s-z)-h^2}{\epsilon^2}\right|\right)+\frac{1}{\epsilon^2}\right\}\left|e^{-\frac{(s-z)^2}{\epsilon^2}}\right|\to 0$$

を得る。よって、$f(z)$ は強解析的である。そして、

$$f(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-(s-t)^2/\epsilon^2}\sigma_s(A)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-s^2/\epsilon^2}\sigma_{t+s}(A)=\sigma_t(A_\epsilon)$$

つまり、A_ϵ は σ_t の解析元で、$f(z)=\sigma_z(A_\epsilon)$ である。

次に、任意の $A\in\mathfrak{A}$ について、

$$B_n\equiv n\int_{-\infty}^{\infty}\frac{ds}{\sqrt{\pi}}e^{-n^2s^2}\sigma_s(A)$$

とおくと、$B_n \in \mathfrak{A}_\sigma$ かつ

$$\|B_n - A\| = \left\| n\int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 s^2} \{\sigma_s(A) - A\} \right\| = \left\| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{\sqrt{\pi}} e^{-s^2} \{\sigma_{s/n}(A) - A\} \right\|$$
$$\leq \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ds}{\sqrt{\pi}} e^{-s^2} \|\sigma_{s/n}(A) - A\| \to 0 \quad (n \to \infty)$$

よって、$\mathfrak{A}_\sigma$ は $\mathfrak{A}$ で稠密である。 ♣

Def. 9 (KMS 状態)

σ_t を強連続な *-同型群とし、$\mathfrak{A}_\sigma$ を σ_t について複素平面全体で解析的な元全体のなす *-部分代数とする。ノルムについて稠密かつ σ 不変な $\mathfrak{A}_\sigma$ の *-部分代数が存在し、その任意の元 A, B について、状態 ω が条件

$$\omega\left(A\sigma_{i\beta}\left(B\right)\right) = \omega\left(BA\right). \tag{2.87}$$

を満たすとき、ω は β における σ-*KMS* 状態と呼ばれる。

例 6 (有限次元の場合)

$\mathfrak{A}$ を $n \times n$ 行列からなる C^* 代数とし、$H = H^* \in \mathfrak{A}$ を用いて $\sigma_s(A) = e^{iHs} A e^{-iHs}$ と定めると、β における σ-*KMS* 状態、つまり、$\omega\left(A\sigma_{i\beta}\left(B\right)\right) = \omega\left(BA\right)$ を満たす状態は、密度行列 $\rho = e^{-\beta H}/Z$ （$Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$）で表されるカノニカル状態である。

(proof)

まず、前述したように、ω は密度行列 ρ を用いて $\omega(A) = \mathrm{Tr}(\rho A)$ と表される。$\sigma_{i\beta}\left(B\right) = e^{-\beta H} B e^{\beta H}$ であることと KMS 条件から、

$$\mathrm{Tr}\left(\rho A e^{-\beta H} B e^{\beta H}\right) = \mathrm{Tr}(\rho BA)$$

でなければならない。$H = H^*$ より、H は実固有値 h_j（$j = 1 \cdots n$）を持つ。対応する固有ベクトルを $|\psi_j\rangle$ とし、$A = |\psi_i\rangle\langle\psi_j|$、$B = |\psi_k\rangle\langle\psi_l|$ とおく。すると、

$$\langle\psi_l|\rho|\psi_i\rangle e^{-\beta(h_j - h_l)} \delta_{jk} = \mathrm{Tr}\left(\rho A e^{-\beta H} B e^{\beta H}\right) = \mathrm{Tr}(\rho BA) = \langle\psi_j|\rho|\psi_k\rangle \delta_{il}$$

となる。$j = k$、$i = l$ とおくと、$\langle\psi_l|\rho|\psi_l\rangle e^{\beta h_l} = \langle\psi_j|\rho|\psi_j\rangle e^{\beta h_j} =$ (定数) となるので、$\langle\psi_l|\rho|\psi_l\rangle e^{\beta h_l} = 1/Z$ とおける。さらに、$j = k$ とおくと

$$\langle\psi_l|\rho|\psi_i\rangle e^{-\beta(h_j - h_l)} = \langle\psi_j|\rho|\psi_j\rangle \delta_{il} = \delta_{il} \frac{e^{-\beta h_j}}{Z}$$

つまり、$\langle\psi_l|\rho|\psi_i\rangle = \delta_{il}\, e^{-\beta h_l}/Z$ が得られる。また、規格化条件 $\mathrm{Tr}\rho = \sum_j e^{-\beta h_j}/Z = 1$ より、$Z = \sum_j e^{-\beta h_j}$ となる。よって、

$$\rho = \sum_{li} |\psi_l\rangle\langle\psi_l|\rho|\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_{li} |\psi_l\rangle \delta_{il} \frac{e^{-\beta h_l}}{Z} \langle\psi_i| = \sum_{l} \frac{e^{-\beta H}}{Z} |\psi_l\rangle\langle\psi_l| = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad ♣$$

例 7 (Spinless Fermion の Grand Canonical 分布)
$a(f)=\int f(k)^* a_k dk$ から生成される CAR 代数 $\mathfrak{A}_{\mathrm{CAR}}$ 上で *-同型 Θ および *-同型の強連続群 σ_s を、それぞれ $\Theta\big(a(f)\big)=-a(f)$ および

$$\sigma_s\big(a(f)\big)=\int e^{-i\beta(\omega_k-\mu)s} f(k)^* a_k dk$$

で定める。但し、β、μ は温度の逆数と化学ポテンシャルである。Θ-不変な（つまり任意の A について $\omega(\Theta(A))=\omega(A)$ となる）-1 での σ-KMS 状態を ω とすると、

$$\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^* a(g_m)\cdots a(g_1)\big)=\begin{cases}\det\left\{\omega\big(a(f_i)^* a(g_j)\big)\right\}_{1\le i,j\le n} & (n=m)\\ 0 & (n\neq m)\end{cases} \tag{2.88}$$

ここで、

$$\omega\big(a(f_i)^* a(g_j)\big)=\int dk\,\frac{f_i(k)g_j(k)^*}{e^{\beta(\omega_k-\mu)}+1} \tag{2.89}$$

一般に (2.88) の関係を満たす状態は準自由状態と呼ばれる。

おおまかに言えば、この KMS 状態 ω は、密度行列 $\rho\propto e^{-\beta(H-\mu N)}$ (H、N は、それぞれエネルギー及び粒子数) で表される状態に相当する。

(proof) まず、十分大きな $|k|$ について $G(k)=0$ となる関数 $G(k)$ を選ぶと、全ての $s\in\mathbf{C}$ に対して $e^{-i\beta(\omega_k-\mu)s}G(k)^*$ は 2 乗可積分であり、$\sigma_s(a(G))$ が定義できる。つまり、このような $a(G)$ は σ_s の解析元で、特に次式が成り立つ：

$$\sigma_{-i}(a(G))=\int e^{-i\beta(\omega_k-\mu)\times(-i)}G(k)^* a_k dk=\int e^{-\beta(\omega_k-\mu)}G(k)^* a_k dk=a(\widetilde{G}) \tag{2.90}$$

但し、$\widetilde{G}(k)=e^{-\beta(\omega_k-\mu)}G(k)$ である。よって、十分大きな $|k|$ について 0 となる関数 f に対して、KMS 条件と正準反交換関係から

$$\omega\big(a(f)^* a(G)\big)=\omega\big(\sigma_{-i}(a(G))a(f)^*\big)=\omega\big(a(\widetilde{G})a(f)^*\big)=(\widetilde{G},f)-\omega\big(a(f)^* a(\widetilde{G})\big)$$

つまり、$\omega\big(a(f)^* a(G+\widetilde{G})\big)=(\widetilde{G},f)$ を得る。この関係は任意の $f,G\in\mathfrak{h}$ についても成立する（$\because$十分大きな $|k|$ について 0 となる関数 f の全体は $\mathfrak{h}$ で稠密）。

任意の $g\in\mathfrak{h}$ について $G(k)=g(k)/(1+e^{-\beta(\omega_k-\mu)})\in\mathfrak{h}$ かつ $G(k)+\widetilde{G}(k)=g(k)$ となるので

$$\omega\big(a(f)^* a(g)\big)=(\widetilde{G},f)=\int dk\,\frac{g(k)^* e^{-\beta(\omega_k-\mu)}}{1+e^{-\beta(\omega_k-\mu)}}f(k)=\int dk\,\frac{f(k)g(k)^*}{e^{\beta(\omega_k-\mu)}+1} \tag{2.91}$$

次に、$n=0$、$m=2l$（$l=1,2,\cdots$）としよう。上と同様にして

$$\omega\big(a(g_{2l})\cdots a(g_2)a(G)\big)=\omega\big(\sigma_{-i}(a(G))a(g_{2l})\cdots a(g_2)\big)$$
$$=\omega\big(a(\widetilde{G})a(g_{2l})\cdots a(g_2)\big)=-\omega\big(a(g_{2l})\cdots a(g_2)a(\widetilde{G})\big)$$

が得られるが、この式で $G(k)+\widetilde{G}(k)=g_1(k)$ とおくと $\omega\big(a(g_{2l})\cdots a(g_1)\big)=0$ が示せる。複素共役をとると $\omega\big(a(g_1)^*\cdots a(g_{2l})^*\big)=0$ も得られる。

続いて、$n+m=2l$ $(l=1,2,\cdots)$ とすると、$n+m-1$ は奇数なので、

$$
\begin{aligned}
&\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m\cdots a(g_2)a(G)\big)\\
&=\omega\big(\sigma_{-i}(a(G))a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&=\omega\big(a(\widetilde{G})a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&=(\widetilde{G},f_1)\ \omega\big(a(f_2)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&\qquad\qquad -\omega\big(a(f_1)^*a(\widetilde{G})\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&=\sum_{j=1}^{n}(-1)^{j-1}(\widetilde{G},f_j)\ \omega\big(\underbrace{a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*}_{a(f_j)^*\text{を除く}}a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&\qquad\qquad +(-1)^n\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(\widetilde{G})a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&=\sum_{j=1}^{n}(-1)^{j-1}(\widetilde{G},f_j)\ \omega\big(\underbrace{a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*}_{a(f_j)^*\text{を除く}}a(g_m)\cdots a(g_2)\big)\\
&\qquad\qquad -\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_2)a(\widetilde{G})\big)
\end{aligned}
$$

この式で、$G(k)+\widetilde{G}(k)=g_1(k)$ とおくと、$(\widetilde{G},f_j)=\omega(a(f_j)^*a(g_1))$ なので、

$$
\begin{aligned}
&\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)\\
&=\sum_{j=1}^{n}(-1)^{j-1}\omega(a(f_j)^*a(g_1))\ \omega\big(\underbrace{a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*}_{a(f_j)^*\text{を除く}}a(g_m)\cdots a(g_2)\big)
\end{aligned}
\tag{2.92}
$$

が得られる。$n<m$ の場合、(2.93) を繰り返し使うと、$\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)$ が $\omega\big(a(g_{k_1})\cdots a(g_{k_{m-n}})\big)=0$ の一次結合で表され、0になることが分かる。$n>m$ の場合も同様に0となる。$n=m=2$ の場合には

$$
\begin{aligned}
&\omega\big(a(f_1)^*a(f_2)^*a(g_2)a(g_1)\big)\\
&=\omega(a(f_1)^*a(g_1))\omega(a(f_2)^*a(g_2))-\omega(a(f_2)^*a(g_1))\omega(a(f_1)^*a(g_2))\\
&=\det\begin{pmatrix}\omega(a(f_1)^*a(g_1)) & \omega(a(f_1)^*a(g_2))\\ \omega(a(f_2)^*a(g_1)) & \omega(a(f_2)^*a(g_2))\end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となり、$n=m=k-1$ で与式が成り立つとすれば、

$$
\omega\big(\underbrace{a(f_1)^*\cdots a(f_k)^*}_{a(f_j)^*\text{を除く}}a(g_k)\cdots a(g_2)\big)
\tag{2.93}
$$

は行列式$\det\{\omega(a(f_i)^*a(g_j))\}_{1\le i,j\le k}$の$(j1)$余因子$\Delta_{j1}$の$(-1)^{j+1}$倍となるので、(2.93)から

$$\begin{aligned}
&\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_k)^*a(g_k)\cdots a(g_1)\big)\\
&=\sum_{j=1}^{k}(-1)^{j-1}\omega(a(f_j)^*a(g_1))\;\omega\big(\underbrace{a(f_1)^*\cdots a(f_k)^*}_{a(f_j)^*\text{を除く}}a(g_k)\cdots a(g_2)\big)\\
&=\sum_{j=1}^{k}\omega(a(f_j)^*a(g_1))\;\Delta_{j1}=\det\{\omega(a(f_i)^*a(g_j))\}_{1\le i,j\le k}
\end{aligned}\tag{2.94}$$

が得られる。よって、帰納法により$n=m$の場合の与式が証明される。

最後に、$n+m$が奇数の場合には、ωがΘ不変なので、

$$\begin{aligned}
&\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)=\omega\Big(\Theta\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)\Big)\\
&=\omega\Big(\Theta\big(a(f_1)^*\big)\cdots\Theta\big(a(f_n)^*\big)\Theta\big(a(g_m)\big)\cdots\Theta\big(a(g_1)\big)\Big)\\
&=(-1)^{n+m}\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)\\
&=-\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)=0
\end{aligned}\tag{2.95}$$

♣

例 8 (2つの部分系が異なる温度、化学ポテンシャルを持つ Spinless Fermion の状態) $\{a_{k\lambda},a^*_{k'\lambda'}\}=\delta_{\lambda\lambda'}\delta(k-k')$、$\{a_{k\lambda},a_{k'\lambda'}\}=0$を満たす消滅演算子$a_{k\lambda}$（$\lambda=1,2$）を用い、

$$a(f)=\sum_{\lambda}\int f_\lambda(k)^*a_{k\lambda}dk\qquad\left(\sum_{\lambda}\int|f_\lambda(k)|^2dk<+\infty\right)$$

とおくと、$a(f)$から生成されるC^*代数$\mathfrak{A}_{\mathrm{CAR}}$とする。*-同型$\Theta$および*-同型の強連続群$\sigma_s$を、それぞれ$\Theta\big(a(f)\big)=-a(f)$および

$$\sigma_s\big(a(f)\big)=\sum_{\lambda}\int e^{-i\beta_\lambda(\omega_{k\lambda}-\mu_\lambda)s}f_\lambda(k)^*a_{k\lambda}dk$$

で定める。但し、β_λ、μ_λは$a_{k\lambda}$で表される系の温度の逆数と化学ポテンシャルである。Θ-不変な-1でのσ-KMS状態をωとすると、

$$\omega\big(a(f_1)^*\cdots a(f_n)^*a(g_m)\cdots a(g_1)\big)=\begin{cases}\det\Big\{\omega\big(a(f_i)^*a(g_j)\big)\Big\}_{1\le i,j\le n} & (n=m)\\ 0 & (n\neq m)\end{cases}\tag{2.96}$$

ここで、

$$\omega\big(a(f_i)^*a(g_j)\big)=\sum_{\lambda}\int dk\,\frac{f_{i\lambda}(k)g_{j\lambda}(k)^*}{e^{\beta_\lambda(\omega_{k\lambda}-\mu_\lambda)}+1}\tag{2.97}$$

おおまかに言えば、このKMS状態ωは、密度行列$\rho\propto e^{-\sum_\lambda\beta_\lambda(H_\lambda-\mu_\lambda N_\lambda)}$（$H_\lambda$、$N_\lambda$は、それぞれ$a_{k\lambda}$で表される系のエネルギー及び粒子数）で表される状態に相当する。また、この命題の証明は前の例と同じなので省略する。

Prop. 12

σ_t を強連続な *-同型群とし、σ_t について複素平面全体で解析的な元からなる *-部分代数を $\mathfrak{A}_\sigma$ とする。

(a) β における σ-KMS状態 ω は σ-不変である。つまり、任意の $A \in \mathfrak{A}$ および $s \in \mathbf{R}$ について $\omega(\sigma_s(A)) = \omega(A)$。特に、$A \in \mathfrak{A}_\sigma$ かつ $z \in \mathbf{C}$ のとき、$\omega(\sigma_z(A)) = \omega(A)$。

(b) 状態 ω が β における σ-KMS状態である必要十分条件は、ノルムについて稠密かつ σ 不変な $\mathfrak{A}_\sigma$ の *-部分代数が存在し、その任意の元 A, B について、状態 ω が条件

$$\omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\right) = \omega(BA) \tag{2.98}$$

が成り立つことである。

(proof) (a) について $A \in \mathfrak{A}_\sigma$ とする。すると、z の解析関数 $\omega(\sigma_z(A))$ は、$0 \le \mathrm{Im}z \le \beta$ を満たす z について、有界となる：

$$|\omega(\sigma_z(A))| \le \|\sigma_z(A)\| \le \sup_{0\le s\le\beta} \|\sigma_{is}(A)\| \equiv M$$

ところで、ω が KMS 状態なので、$\omega(\sigma_{z+i\beta}(A)) = \omega\big(\mathbf{1}\sigma_{i\beta}(\sigma_z(A))\big) = \omega(\sigma_z(A))$ となり、z について周期 $i\beta$ の周期関数でもある。よって、任意の z について有界 $|\omega(\sigma_z(A))| \le M$ となり複素関数論の Liouville の定理から、$\omega(\sigma_z(A))$ は定数でなければならない：$\omega(\sigma_z(A)) = \omega(\sigma_0(A)) = \omega(A)$。これと $\mathfrak{A}_\sigma$ が $\mathfrak{A}$ で稠密で、$A \to \omega(\sigma_s(A))$、$A \to \omega(A)$ が連続であることから、ω の不変性が言える。

(b) について ω が KMS 状態であるとする。すると、(a) から $A, B \in \mathfrak{A}_\sigma$ について

$$\omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\right) = \omega\left(\sigma_{i\beta/2}\big(\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\big)\right) = \omega\left(A\sigma_{i\beta}(B)\right) = \omega(BA)$$

つまり、(2.98) が成り立つ。逆に (2.98) が成り立つと、$A \in \mathfrak{A}_\sigma$ について

$$\omega(\sigma_{z+i\beta/2}(A)) = \omega(\sigma_{-i\beta/2}(\mathbf{1})\sigma_{i\beta/2}(\sigma_z(A))) = \omega(\sigma_z(A))$$

より解析関数 $\omega(\sigma_z(A))$ は周期 $i\beta/2$ の周期関数で、

$$\sup_{z\in\mathbf{C}} |\omega(\sigma_z(A))| = \sup_{0\le \mathrm{Im}z\le\beta/2} |\omega(\sigma_z(A))| \le \sup_{0\le s\le\beta/2} \|\sigma_{is}(A)\|$$

となり、Liouville の定理から定数となる：$\omega(\sigma_z(A)) = \omega(A)$。よって、$A, B \in \mathfrak{A}_\sigma$ について

$$\omega\left(A\sigma_{i\beta}(B)\right) = \omega\left(\sigma_{-i\beta/2}\big(A\sigma_{i\beta}(B)\big)\right) = \omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\right) = \omega(BA)$$

つまり、ω は KMS 状態となる。 ♣

Prop. 13

σ_s を強連続な*-同型群とし、$V = V^* \in \mathfrak{A}_\sigma \subset \mathfrak{A}$ を自己随伴で σ について複素数全体で解析的な元とする。このとき、Γ_s、$\widetilde{\Gamma}_s$ を次の積分方程式の解とする。

$$\Gamma_s = \mathbf{1} + i\int_0^s ds'\Gamma_{s'}\sigma_{s'}(V)\ ,\quad \widetilde{\Gamma}_s = \mathbf{1} - i\int_0^s ds'\sigma_{s'}(V)\widetilde{\Gamma}_{s'} \tag{2.99}$$

すると、*(i)* Γ_s、$\widetilde{\Gamma}_s$ は任意の複素数 s で解析的かつ $\mathfrak{A}_\sigma$ の元で、*(ii)* $\Gamma_s^{-1} = \widetilde{\Gamma}_s$、*(iii)* β における σ-*KMS* 状態 ω について

$$\omega_V(A) \equiv \frac{\omega(\Gamma^*_{i\beta/2}A\Gamma_{i\beta/2})}{\omega(\Gamma^*_{i\beta/2}\Gamma_{i\beta/2})} \tag{2.100}$$

は強連続な*-同型群 $\sigma_s^V(A) \equiv \Gamma_s\sigma_s(A)\Gamma_s^*$ に関する β における *KMS* 状態になる。さらに、ω が β における唯一の σ-*KMS* 状態とすると、ω_V は β における唯一の σ^V-*KMS* 状態となる。

(proof) 与えられた積分方程式を逐次代入すると

$$\Gamma_s = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} i^n \int_0^s ds_n \int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\sigma_{s_1}(V)\sigma_{s_2}(V)\cdots\sigma_{s_n}(V) \tag{2.101}$$

が得られる。各項の被積分関数に含まれる $\sigma_{s_j}(V)$ はあらゆる複素数 s_j について解析的なので、級数の各項もあらゆる複素数 s について解析的である。そして、$s_j = st_j$ とおくと

$$\begin{aligned}
&\left\|\int_0^s ds_n \int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\sigma_{s_1}(V)\sigma_{s_2}(V)\cdots\sigma_{s_n}(V)\right\| \\
&= \left\|s^n\int_0^1 dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1\sigma_{st_1}(V)\sigma_{st_2}(V)\cdots\sigma_{st_n}(V)\right\| \\
&\le |s|^n\int_0^1 dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1\|\sigma_{st_1}(V)\sigma_{st_2}(V)\cdots\sigma_{st_n}(V)\| \\
&\le |s|^n\int_0^1 dt_n\int_0^{t_n} dt_{n-1}\cdots\int_0^{t_2} dt_1(\sup_{0\le t\le 1}\|\sigma_{st}(V)\|)^n = \frac{K(s)^n}{n!}
\end{aligned} \tag{2.102}$$

但し、$K(s) \equiv |s|\sup_{0\le t\le 1}\|\sigma_{st}(V)\|$。よって、

$$\begin{aligned}
&\sum_{n=1}^{\infty}\left\|\int_0^s ds_n \int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\sigma_{s_1}(V)\sigma_{s_2}(V)\cdots\sigma_{s_n}(V)\right\| \\
&\le \sum_{n=1}^{\infty}\frac{K(s)^n}{n!} < +\infty
\end{aligned} \tag{2.103}$$

となり、Γ_s を定義する級数は任意の有界集合 $\{s \in \mathbf{C} : |s| \le R\}$ （$R > 0$ は任意の実数）で一様に絶対収束するので、任意の複素数 s で解析的である。さらに、実数 s' で成立する関係式

$$\begin{aligned}
\sigma_{s'}(\Gamma_s) &= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} i^n\sigma_{s'}\left(\int_0^s ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\sigma_{s_1}(V)\sigma_{s_2}(V)\cdots\sigma_{s_n}(V)\right) \\
&= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} i^n\int_0^s ds_n\int_0^{s_n} ds_{n-1}\cdots\int_0^{s_2} ds_1\sigma_{s'+s_1}(V)\sigma_{s'+s_2}(V)\cdots\sigma_{s'+s_n}(V)
\end{aligned}$$

の右辺は任意の有界集合 $\{s' \in \mathbf{C} : |s'| \leq R\}$ （$R > 0$ は任意の実数）で一様に絶対収束し、各項は任意の複素数 s' について解析的である。よって、右辺は s' の解析関数で、実数の s' で $\sigma_{s'}(\Gamma_s)$ に一致する。つまり、Γ_s は σ の解析元である。

$\widetilde{\Gamma}_s$ についてもべき展開

$$\widetilde{\Gamma}_s = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_0^s ds_n \int_0^{s_n} ds_{n-1} \cdots \int_0^{s_2} ds_1 \sigma_{s_n}(V)\sigma_{s_{n-1}}(V)\cdots\sigma_{s_1}(V) \tag{2.104}$$

から、s についての解析性と σ に関する解析元であることが分かる。s が実数のときべき展開と Γ_s のユニタリー性から $\Gamma_s^{-1} = \Gamma_s^* = \widetilde{\Gamma}_s$ となるので、一般の複素数でもこれが成り立つ。

次に、$\sigma_{s^*}(V)^* = \sigma_s(V^*) = \sigma_s(V)$ と Γ_s のべき展開より、

$$\begin{aligned}
\Gamma_{s^*}^* &= \left(\mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (is^*)^n \int_0^1 dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \sigma_{s^* t_1}(V)\sigma_{s^* t_2}(V)\cdots\sigma_{s^* t_n}(V)\right)^* \\
&= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-is)^n \int_0^1 dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \sigma_{s^* t_n}(V)^*\sigma_{s^* t_{n-1}}(V)^*\cdots\sigma_{s^* t_1}(V)^* \\
&= \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-is)^n \int_0^1 dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \cdots \int_0^{t_2} dt_1 \sigma_{s t_n}(V)\sigma_{s t_{n-1}}(V)\cdots\sigma_{s t_1}(V) \\
&= \widetilde{\Gamma}_s = \Gamma_s^{-1}
\end{aligned} \tag{2.105}$$

となるので、σ の解析元 A と複素数 s について $\sigma_s^V(A) = \Gamma_s \sigma_s(A) \Gamma_s^{-1}$ であることが分かる。そして、

$$\begin{aligned}
&\omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^* \sigma_{-i\beta/2}^V(A)\, \sigma_{i\beta/2}^V(B)\, \Gamma_{i\beta/2}\right) \\
&= \omega\left(\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}\Gamma_{-i\beta/2}\sigma_{-i\beta/2}(A)\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}\Gamma_{i\beta/2}\sigma_{i\beta/2}(B)\Gamma_{i\beta/2}^{-1}\Gamma_{i\beta/2}\right) \\
&= \omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}\Gamma_{i\beta/2}\sigma_{i\beta/2}(B)\right)
\end{aligned}$$

が言える。さて、s, t が実数のとき $\Gamma_{t+s} = \Gamma_t \sigma_t(\Gamma_s)$ から $\Gamma_s = \sigma_s(\Gamma_{-s}^{-1})$ かつ $\Gamma_s^{-1} = \sigma_s(\Gamma_{-s})$ が言え、これを s について解析接続して、$\Gamma_{i\beta/2} = \sigma_{i\beta/2}(\Gamma_{-i\beta/2}^{-1})$、$\Gamma_{-i\beta/2}^{-1} = \sigma_{-i\beta/2}(\Gamma_{i\beta/2})$ を得る。よって、

$$\begin{aligned}
&\omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}\Gamma_{i\beta/2}\sigma_{i\beta/2}(B)\right) = \omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A)\sigma_{-i\beta/2}(\Gamma_{i\beta/2})\sigma_{i\beta/2}(\Gamma_{-i\beta/2}^{-1})\sigma_{i\beta/2}(B)\right) \\
&= \omega\left(\sigma_{-i\beta/2}(A\Gamma_{i\beta/2})\sigma_{i\beta/2}(\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}B)\right) = \omega\left(\Gamma_{-i\beta/2}^{-1}BA\Gamma_{i\beta/2}\right) = \omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^* BA\Gamma_{i\beta/2}\right)
\end{aligned}$$

以上まとめて、

$$\begin{aligned}
\omega_V\left(\sigma_{-i\beta/2}^V(A)\, \sigma_{i\beta/2}^V(B)\right) &= \frac{\omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^* \sigma_{-i\beta/2}^V(A)\, \sigma_{i\beta/2}^V(B)\, \Gamma_{i\beta/2}\right)}{\omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^*\Gamma_{i\beta/2}\right)} \\
&= \frac{\omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^* BA\Gamma_{i\beta/2}\right)}{\omega\left(\Gamma_{i\beta/2}^*\Gamma_{i\beta/2}\right)} = \omega_V(BA)
\end{aligned} \tag{2.106}$$

となるので、ω_V が σ^V-KMS 状態であることが分かる。

さて、最後に ω が唯一の KMS 状態のとき ω_V も唯一であることを示そう。ω'_V を任意の σ^V-KMS 状態とすると、$\Gamma_{-i\beta/2} = \sigma_{-i\beta/2}(\Gamma^{-1}_{i\beta/2})$、$\Gamma^{-1}_{i\beta/2} = \sigma_{i\beta/2}(\Gamma_{-i\beta/2})$ より

$$\Gamma_{-i\beta/2}\sigma_{-i\beta/2}(A) = \Gamma_{-i\beta/2}\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{-i\beta/2}\left(\Gamma^{-1}_{i\beta/2}\right)\Gamma^{-1}_{-i\beta/2} = \sigma^V_{-i\beta/2}\left(A\Gamma^{-1}_{i\beta/2}\right)$$

$$\sigma_{i\beta/2}(B)\,\Gamma^{-1}_{i\beta/2} = \Gamma_{i\beta/2}\sigma_{i\beta/2}(\Gamma_{-i\beta/2})\sigma_{i\beta/2}(B)\,\Gamma^{-1}_{i\beta/2} = \sigma^V_{i\beta/2}\left(\Gamma_{-i\beta/2}B\right)$$

が得られるので、$\Gamma^*_{-i\beta/2} = \Gamma^{-1}_{i\beta/2}$ に注意すると ω'_V が σ^V-KMS 状態なので

$$\omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\,\Gamma^*_{-i\beta/2}\right) = \omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}\sigma_{-i\beta/2}(A)\,\sigma_{i\beta/2}(B)\,\Gamma^{-1}_{i\beta/2}\right)$$
$$= \omega'_V\left(\sigma^V_{-i\beta/2}\left(A\Gamma^{-1}_{i\beta/2}\right)\sigma^V_{i\beta/2}\left(\Gamma_{-i\beta/2}B\right)\right) = \omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}BA\Gamma^*_{-i\beta/2}\right)$$

よって、次の状態は σ-KMS 状態になり、その一意性から ω に等しい：

$$\frac{\omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}A\Gamma^*_{-i\beta/2}\right)}{\omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}\Gamma^*_{-i\beta/2}\right)} = \omega(A)$$

これから、ω'_V が ω_V に等しいことがわかる：

$$\omega_V(A) = \frac{\omega\left(\Gamma^*_{i\beta/2}A\Gamma_{i\beta/2}\right)}{\omega\left(\Gamma^*_{i\beta/2}\Gamma_{i\beta/2}\right)} = \frac{\omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}\Gamma^*_{i\beta/2}A\Gamma_{i\beta/2}\Gamma^*_{-i\beta/2}\right)}{\omega'_V\left(\Gamma_{-i\beta/2}\Gamma^*_{i\beta/2}\Gamma_{i\beta/2}\Gamma^*_{-i\beta/2}\right)} = \omega'_V(A) \quad \clubsuit$$

(注) ω を C^* 代数 $\mathfrak{A}$ 上の強連続群 σ_t に関する KMS 状態とし、$(\mathfrak{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega)$ を ω の GNS 表現とする。すると、σ_t は von Neumann 代数 $\pi_\omega(\mathfrak{A})''$ 上の群 $\tilde{\sigma}_t$ に拡張され、Ω は $\tilde{\sigma}$-KMS 状態である：

$$(\Omega, A\tilde{\sigma}_{i\beta}(B)\Omega) = (\Omega, BA\Omega) \quad (A \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''\text{は任意の元}, B \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''\text{は解析元})$$

なお、Stone の定理によれば、$\mathfrak{H}_\omega$ で稠密に定義された（非有界な）自己随伴演算子 L が存在し、$\tilde{\sigma}_t(A) = e^{iLt}Ae^{-iLt}$ かつ $e^{iLt}\Omega = \Omega$ となる。

Def. 10 (端点 KMS 状態)
C^* 代数 $\mathfrak{A}$ 上で定義された強連続群 σ_t に関する *KMS* 状態が複数存在するとき、*KMS* 状態 ω が他の *KMS* 状態 ω_1、ω_2 と $0 < \lambda < 1$ によって $\omega = \lambda\omega_1 + (1-\lambda)\omega_2$ と表すことができない時、ω は端点状態であると言う。

Prop. 14 (端点状態と factor 状態の同値性)
C^* 代数 $\mathfrak{A}$ 上で定義された強連続群 σ_t に関する *KMS* 状態 ω について、ω が端点状態であることと *factor* 状態であることは同値である。

(proof)　factor 状態でなければ端点状態でないことを示そう。ω の GNS 表現を $(\mathfrak{H}_\omega, \pi_\omega, \Omega)$ とすると、ω が factor 状態でなければ、単位元の複素数倍でない $T' \in \pi_\omega(\mathfrak{A})' \cap \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ が存在し、状態

$$\varphi(A) \equiv \frac{(T'\Omega, AT'\Omega)}{(T'\Omega, T'\Omega)} \quad (A \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'')$$

が定義できる。$B \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ を $\tilde{\sigma}_t$ の解析元とすれば Ω は KMS 状態なので

$$\begin{aligned}(T'\Omega, A\tilde{\sigma}_{i\beta}(B)T'\Omega) &= (\Omega, T'^*AT'\tilde{\sigma}_{i\beta}(B)\Omega) = (\Omega, BT'^*AT'\Omega) \\ &= (\Omega, T'^*BAT'\Omega) = (\Omega, T'^*BAT'\Omega)\ . \end{aligned} \tag{2.107}$$

よって、$\varphi(A\tilde{\sigma}_{i\beta}(B)) = \varphi(BA)$ となり φ も KMS 状態である。さて、$\alpha = \|T'\Omega\|^2/(2\|T'\|^2)$ とおくと $0 < \alpha \leq 1/2$ かつ $\mathbf{1} - \frac{T'^*T'}{2\|T'\|^2}$ は正値元なので、

$$\varphi_\pm(A) \equiv \frac{\omega(A) \pm \alpha\varphi(\pi_\omega(A))}{1 \pm \alpha} = \frac{1}{1 \pm \alpha}\left(\left\{\mathbf{1} \pm \frac{T'^*T'}{2\|T'\|^2}\right\}^{1/2}\Omega, \pi_\omega(A)\left\{\mathbf{1} \pm \frac{T'^*T'}{2\|T'\|^2}\right\}^{1/2}\Omega\right)$$

は共に状態で、KMS 状態でもある。明らかに、

$$\omega(A) = \frac{1+\alpha}{2}\varphi_+(A) + \frac{1-\alpha}{2}\varphi_-(A)$$

なので、ω は端点状態ではない。

逆に、ω が端点状態でないとすると ω とは異なる KMS 状態 ω_1、ω_2 と正数 $0 < \lambda < 1$ を用い $\omega = \lambda\omega_1 + (1-\lambda)\omega_2$ と表される。$\mathfrak{H}_\omega$ の任意のベクトル $\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(B)\Omega$ $(A, B \in \mathfrak{A})$ をとり前者について共役線形で、後者について線形な写像

$$\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(B)\Omega \to \omega_1(A^*B)$$

を考える。$\omega(A^*A) \geq \lambda\omega_1(A^*A)$ と $\omega(A^*A) = (\Omega, \pi_\omega(A)^*\pi_\omega(A)\Omega) = \|\pi_\omega(A)\Omega\|^2$ より、

$$|\omega_1(A^*B)| \leq \sqrt{\omega_1(A^*A)\omega_1(B^*B)} \leq \frac{1}{\lambda}\sqrt{\omega(A^*A)\omega(B^*B)} = \frac{1}{\lambda}\|\pi_\omega(A)\Omega\|\|\pi_\omega(B)\Omega\|$$

となるので、上記の写像は有界である。$\pi_\omega(A)\Omega$ 型のベクトルが $\mathfrak{H}_\omega$ で稠密なので、Riesz の定理から $\mathfrak{B}(\mathfrak{H}_\omega)$ の元 S' があり $\omega_1(A^*B) = (\pi_\omega(A)\Omega, S'\pi_\omega(B)\Omega)$ と表される。特に、$(\pi_\omega(A)\Omega, S'\pi_\omega(A)\Omega) = \omega_1(A^*A) \geq 0$ なので S' は正値である。さらに、

$$\begin{aligned}&(\pi_\omega(A)\Omega, S'\pi_\omega(C)\pi_\omega(B)\Omega) = \omega_1(A^*CB) = \omega_1((C^*A)^*B)\\ &= (\pi_\omega(C)^*\pi_\omega(A)\Omega, S'\pi_\omega(B)\Omega) = (\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(C)S'\pi_\omega(B)\Omega)\end{aligned}$$

より、$S'\pi_\omega(C) = \pi_\omega(C)S'$ となるので $S' \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ が分かる。$\omega \neq \omega_1$ なので、S' は単位元の複素数倍ではない。

さて、ここでは解説しないが、富田・竹崎理論によれば、共役線形な写像 J が存在し、$J^2 = \mathbf{1}$、$(J\Psi, J\Phi) = (\Phi, \Psi)$、$J\Omega = \Omega$、$A' \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ について $Je^{\beta L/2}A'\Omega = A'^*\Omega$ および任意の $A' \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ について $JA'J \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ となることが分かっている。そこで、$S \equiv JS'J \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ について考えよう。$(\Psi, S\Phi) = (S'J\Phi, J\Psi) = (J\Phi, S'J\Psi) = (S\Psi, \Phi)$ より明らかに S は自己共役である。まず、状態 ω_1 は σ_t の KMS 状態なので、不変でもある。つまり、

$$\begin{aligned}&(\pi_\omega(A)\Omega, S'\pi_\omega(B)\Omega) = \omega_1(A^*B) = \omega_1(\sigma_t(A^*B)) = \omega_1(\sigma_t(A)^*\sigma_t(B))\\ &= (\widetilde{\sigma}_t(\pi_\omega(A))\Omega, S'\widetilde{\sigma}_t(\pi_\omega(B))\Omega) = (e^{iLt}\pi_\omega(A)\Omega, S'e^{iLt}\pi_\omega(B)\Omega)\\ &= (\pi_\omega(A)\Omega, e^{-iLt}S'e^{iLt}\pi_\omega(B)\Omega)\end{aligned}$$

よって、$e^{-iLt}S'e^{iLt} = S'$ が成り立つ。これから、$S'e^{\pm\beta L/2} = e^{\pm\beta L/2}S'$ も言える。次に、$L\Omega = 0$（これは L の定義から導かれる）から、$S\Omega = JS'J\Omega = JS'e^{\beta L/2}\Omega = Je^{\beta L/2}S'\Omega = S'^*\Omega = S'\Omega$ となるので、$\omega_1(A^*B) = (\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(B)S'\Omega) = (\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(B)S\Omega)$ も分かる。以下、$S \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ を示そう。すると、$\mathbf{1}$ の複素数倍でない $S \in \pi_\omega(\mathfrak{A})' \cap \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ が存在するため、ω は factor 状態ではない。さて、任意の $A, B, C \in \mathfrak{A}$ を σ の解析元とすると Ω、ω_1 が KMS なので

$$\begin{aligned}&(\pi_\omega(A)\Omega, \pi_\omega(C)S\pi_\omega(B)\Omega) = (\Omega, \pi_\omega(A^*C)S\pi_\omega(B)\Omega) = (\Omega, \pi_\omega(\sigma_{-i\beta}(B))\pi_\omega(A^*C)S\Omega)\\ &= \omega_1(\sigma_{-i\beta}(B)A^*C) = \omega_1(\sigma_{-i\beta}(C)\sigma_{-i\beta}(B)A^*) = \omega_1(\sigma_{-i\beta}(CB)A^*)\\ &= (\Omega, \pi_\omega(\sigma_{-i\beta}(CB))\pi_\omega(A^*)S\Omega) = (\Omega, \pi_\omega(A^*)S\pi_\omega(C)\pi_\omega(B)\Omega)\\ &= (\pi_\omega(A)\Omega, S\pi_\omega(C)\pi_\omega(B)\Omega)\end{aligned}$$

つまり、$\pi_\omega(C)S = S\pi_\omega(C)$ から $S \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ となる。 ♣

Prop. 15 (端点状態間の非同値性)
C^* 代数 $\mathfrak{A}$ 上で定義された強連続群 σ_t に関する異なる β-KMS 状態 ω_1、ω_2 の GNS 表現を $(\mathfrak{H}_1, \pi_1, \Omega_1)$、$(\mathfrak{H}_1, \pi_1, \Omega_1)$ とする。ω_1、ω_2 が端点状態ならば $U\pi_1(A)U^* = \pi_2(A)$ を満たすユニタリー変換 $U : \mathfrak{H}_1 \to \mathfrak{H}_2$ は存在しない。

(注) 証明では状態 $\omega = (\omega_1 + \omega_2)/2$ の GNS 表現を $(\mathfrak{H}, \pi, \Omega)$ とするとき、射影演算子 $P \in \pi(\mathfrak{A})' \cap \pi(\mathfrak{A})''$ が存在し、$\omega_1(A) = 2(\Omega, P\pi(A)\Omega)$、$\omega_1(A) = 2(\Omega, (\mathbf{1}-P)\pi(A)\Omega)$ と表されることを示す。このとき、状態 ω_1 と ω_2 は互いに素と言われる。つまり、同じ β に対応する異なる端点 σ-KMS 状態は互いに素である。

(proof) 仮定から状態 $\omega = (\omega_1 + \omega_2)/2$ は σ-KMS 状態で、$\omega_1(A^*A) \leq 2\omega(A^*A)$ である。よって、ω の GNS 表現を $(\mathfrak{H}, \pi, \Omega)$ とすると「端点状態と factor 状態の同値性」の証明と同様にして、$P \in \pi(\mathfrak{A})' \cap \pi(\mathfrak{A})''$ が存在し、$\omega_1(A) = 2(\Omega, P\pi(A)\Omega)$ となることが分かる。特に、P は正値である。さらに、$\omega_2(A) = 2\omega(A) - \omega_1(A) = 2(\Omega, (\mathbf{1}-P)\pi(A)\Omega)$ であるから、$\mathbf{1}-P$ も正値であることが分かる。よって、$P\{\mathbf{1} \pm (\mathbf{1}-P)/4\}$ は正値で、$0 \leq \alpha \equiv \|\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega\|^2/2 (\leq 1/2)$ とおくとき

$$\varphi_\pm(A) \equiv \frac{2}{1 \pm \alpha}(\Omega, P\{\mathbf{1} \pm (\mathbf{1}-P)/4\}\pi(A)\Omega) \tag{2.108}$$

も状態で、かつ $\omega_1 = \{(1+\alpha)\varphi_+ + (1-\alpha)\varphi_-\}/2$ となる。以下、$\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega = 0$ を示そう。もし、こうでないなら、

$$(1+\alpha)\varphi_+(A) - (1-\alpha)\varphi_-(A) = (\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega, \pi(A)\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega) \neq 0$$

なので、状態 $\varphi_\pm$ は ω_1 と異なる。さらに、σ_t の $\pi(\mathfrak{A})''$ への拡張を $\tilde{\sigma}_t$ とし、$\tilde{\sigma}_t$ の解析元を $A \in \pi(\mathfrak{A})''$ とすると $B \in \pi(\mathfrak{A})''$ について $P\{\mathbf{1} \pm (\mathbf{1}-P)/4\}B \in \pi(\mathfrak{A})''$ なので

$$(\Omega, P\{\mathbf{1}\pm(\mathbf{1}-P)/4\}B\tilde{\sigma}_{i\beta}(A)\Omega) = (\Omega, AP\{\mathbf{1}\pm(\mathbf{1}-P)/4\}B\Omega) = (\Omega, P\{\mathbf{1}\pm(\mathbf{1}-P)/4\}AB\Omega)$$

が成り立ち、$\varphi_\pm(B\sigma_{i\beta}(A)) = \varphi_\pm(AB)$、つまり $\varphi_\pm$ が KMS 状態であることが言える。これは、ω_1 が端点状態であることに反する。よって、$\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega = 0$ である。このとき、任意の $A \in \mathfrak{A}$ について

$$P(\mathbf{1}-P)\pi(A)\Omega = \{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\pi(A)\{P(\mathbf{1}-P)\}^{1/2}\Omega = 0$$

で、Ω は巡回ベクトルなので、$P(\mathbf{1}-P) = 0$、つまり P が射影演算子となる。

以下、$U\pi_1(A) = \pi_2(A)U$ を満たすユニタリー変換 U が存在しないことを示そう。まず、$P\mathfrak{H}$ から $\mathfrak{H}_1$ への写像 V_1 と、$\mathfrak{H}_2$ から $\mathfrak{H}$ への写像 V_2 を、$V_1P\pi(A)\sqrt{2}\Omega = \pi_1(A)\Omega_1$ および $V_2\pi_2(A)\Omega_2 = \pi(A)(\mathbf{1}-P)\sqrt{2}\Omega$ と定める。すると、

$$\|V_1P\pi(A)\sqrt{2}\Omega\|^2 = \|\pi_1(A)\Omega_1\|^2 = \omega_1(A^*A) = \|P\pi(A)\sqrt{2}\Omega\|^2$$

となるのでV_1は$P\mathfrak{H}$全体に拡張できる。さらに、$P\in\pi(\mathfrak{A})'$より、任意の$B\in\mathfrak{A}$について$\pi_1(B)V_1P\pi(A)\sqrt{2}\Omega=\pi_1(BA)\Omega_1=V_1\pi(B)P\pi(A)\sqrt{2}\Omega$が成り立ち、$\pi_1(B)V_1=V_1\pi(B)$が言える。同様に、$\|V_2\pi_2(A)\Omega_2\|=\|\pi_2(A)\Omega_2\|$となり$V_2$も$\mathfrak{H}_2$上に拡張でき、$(\mathbf{1}-P)V_2=V_2$および$\pi(B)V_2=V_2\pi_2(B)$（$B\in\mathfrak{A}$）が成立する。

さて、$U\pi_1(A)=\pi_2(A)U$を満たすユニタリー変換Uが存在すると仮定しよう。すると$\pi(B)V_2UV_1P=V_2\pi_2(B)UV_1P=V_2U\pi_1(B)V_1P=V_2UV_1P\pi(B)$が全ての$B\in\mathfrak{A}$について成り立つ。つまり、$V_2UV_1P\in\pi(\mathfrak{A})'$である。$\mathbf{1}-P\in\pi(\mathfrak{A})''$でもあるので、$V_2UV_1P=(\mathbf{1}-P)V_2UV_1P=V_2UV_1P(\mathbf{1}-P)=0$。よって、

$$\|U\pi_1(A)\Omega_1\|=\|V_2U\pi_1(A)\Omega_1\|=\|V_2UV_1P\pi(A)\sqrt{2}\Omega\|=0 \tag{2.109}$$

$\pi_1(A)\Omega_1$は$\mathfrak{H}_1$で稠密なので$U=0$となり、Uのユニタリー性に反する。つまりUは存在しない。 ♣

2.5 漸近アーベル性とエルゴード性

Def. 11 (漸近アーベル性)
C^*代数$\mathfrak{A}$上で定義された時間発展τ_tが

$$\lim_{|t\to\infty|}\|\,[A,\tau_t(B)]_\pm\,\|=0,\ \forall A,B\in\mathfrak{A} \tag{2.110}$$

を満たすとき、漸近アーベル性を持つという。ただし、A,B双方が奇数個の*Fermi*演算子を含むとき$+$を、それ以外のとき$-$をとる。

Prop. 16 (クラスター性)
強連続な$*$同型群σ_sに関する*KMS*状態ωが端点状態で、*Fermi*演算子の偶奇性を変えない時間発展τ_tが漸近アーベル的であるとすると、偶数個の*Fermi*演算子からなるBについては

$$\lim_{|t|\to\infty}\{\omega(A\tau_t(B)C)-\omega(AC)\omega(\tau_t(B))\}=0 \tag{2.111}$$

が、奇数個の*Fermi*演算子からなるBについては

$$\lim_{|t|\to\infty}\omega(A\tau_t(B)C)=0 \tag{2.112}$$

が成立する（クラスター性）。Bが*Fermi*演算子を奇数個含むとき$\lim_{|t|\to\infty}\omega(\tau_t(B))=0$となるので、このときにも前者の関係が成立する。

（proof）ωのGNS表現を$(\mathfrak{H}_\omega,\pi_\omega,\Omega)$とする。漸近アーベル性の役割を見るため、Hilbert空間$\mathfrak{H}_\omega$が可算個の正規直交基底$\{e_j\}_{j=1}^{\infty}$を持つ場合に限って証明しよう。このとき次の複素数の性質を用いる：

⟨RC⟩ 複素数列 $\{c_m\}_{m=1}^{\infty}$ について、$|c_m| \leq M$ $(m = 1, 2, \cdots)$ を満たす正数 M があるなら、収束する部分列 $\{c_{m_n}\}_{n=1}^{\infty}$ が存在する。

任意に点列 $\{t_m\}$ $(\lim_{m\to\infty} t_m = +\infty$ または $-\infty)$ をとり、B が偶数個の Fermi 演算子からなる場合には $\hat{B}_m \equiv \pi_\omega(\tau_{t_m}(B)) - \omega(\tau_{t_m}(B))\mathbf{1}$、奇数個の Fermi 演算子からなる場合には $\hat{B}_m \equiv \pi_\omega(\tau_{t_m}(B))$ と置こう。自然数の組 (i,j) に $(i_1,j_1) = (1,1)$、$(i_2,j_2) = (1,2)$、$(i_3,j_3) = (2,1)$、$(i_4,j_4) = (1,3)$、$(i_5,j_5) = (2,2)$、$(i_6,j_6) = (3,1)$ $\cdots$ と番号をつける。さて、複素数列 $(e_{i_1}, \hat{B}_m e_{j_1})$ について、$|(e_{i_1}, \hat{B}_m e_{j_1})| \leq \|\hat{B}_m\| \leq 2\|B\| < +\infty$ であるから、複素数の性質 ⟨RC⟩ より、収束部分列 $(e_{i_1}, \hat{B}_m^{(1)} e_{j_1})$ を持つ。その極限を b_1 としよう。次に、数列 $(e_{i_2}, \hat{B}_m^{(1)} e_{j_2})$ の収束部分列を $(e_{i_2}, \hat{B}_m^{(2)} e_{j_2})$、極限を b_2、数列 $(e_{i_3}, \hat{B}_m^{(2)} e_{j_3})$ の収束部分列を $(e_{i_3}, \hat{B}_m^{(3)} e_{j_3})$ その極限を b_3 ととり、以上を繰り返して極限が b_k である数列 $(e_{i_k}, \hat{B}_m^{(k)} e_{j_k})$ をとる。すると、部分列 $\{\hat{B}_m^{(m)}\}_{m=1}^{\infty}$ について、$\{\hat{B}_m^{(m)}\}_{m=k}^{\infty}$ は $\{\hat{B}_m^{(k)}\}_{m=1}^{\infty}$ の部分列であるから、全ての $k = 1, 2, \cdots$ について

$$\lim_{m\to\infty} (e_{i_k}, \hat{B}_m^{(m)} e_{j_k}) = b_k$$

が成立する（カントールの対角線論法）。さて、有限個の基底 $\{e_j\}$ の線形結合で表されるベクトル ψ, ϕ について、

$$(\psi, \hat{B}_m^{(m)} \phi) = \sum_{k=1}^{K} (\psi, e_{i_k})(e_{i_k}, \hat{B}_m^{(m)} e_{j_k})(e_{j_k}, \phi)$$

となり

$$\lim_{m\to\infty} (\psi, \hat{B}_m^{(m)} \phi) = \sum_{k=1}^{K} (\psi, e_{i_k}) b_k (e_{j_k}, \phi) \equiv \chi(\psi, \phi)$$

が成り立つ。$|(\psi, \hat{B}_m^{(m)} \phi)| \leq 2\|\psi\|\|B\|\|\phi\|$ なので、ψ について共役線形で ϕ について線形な写像 $\chi(\psi,\phi)$ は有界となる：$|\chi(\psi,\phi)| \leq 2\|\psi\|\|B\|\|\phi\|$。よって、Riesz の定理から、$\mathfrak{H}_\omega$ 上の線形演算子 X が存在し、$\chi(\psi,\phi) = (\psi, X\phi)$ かつ任意の $\psi, \phi \in \mathfrak{H}_\omega$ について $\lim_{m\to\infty}(\psi, \hat{B}_m^{(m)}\phi) = (\psi, X\phi)$ となる（$\{\hat{B}_m^{(m)}\}$ は X に弱収束する）。このとき $X \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ となる。実際、任意の $A' \in \pi_\omega(\mathfrak{A})$ について、$A'\hat{B}_m^{(m)} = \hat{B}_m^{(m)} A'$ であるから

$$\begin{aligned}
&|(\psi, (A'X - XA')\phi)| \\
&\leq |(\psi, A'(X - \hat{B}_m^{(m)})\phi)| + |(\psi, (A'\hat{B}_m^{(m)} - \hat{B}_m^{(m)}A'))\phi)| + |(\psi, (X - \hat{B}_m^{(m)})A'\phi)| \\
&= |(A'^*\psi, (X - \hat{B}_m^{(m)})\phi)| + |(\psi, (X - \hat{B}_m^{(m)})A'\phi)| \to 0 \ (m \to \infty) \qquad (2.113)
\end{aligned}$$

よって、$A'X = XA'$ が成立する。

まず、B が偶数個の Fermi 演算子からなる場合を考えよう。すると、$\{\hat{B}_m^{(m)}\}$ は $\{\hat{B}_m\}$ の部分列なので、$\hat{B}_m^{(m)} = \pi_\omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right) - \omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right)\mathbf{1}$ と表せ、τ_t の漸近アーベル性から、任意の $A \in \mathfrak{A}$ について

$$\begin{aligned}
&|(\psi, [\pi_\omega(A), \hat{B}_m^{(m)}]\phi)| = |(\psi, \pi_\omega([A, B_{t'_m}])\phi)| \\
&\leq \|\psi\|\|\pi_\omega([A, B_{t'_m}])\|\|\phi\| \leq \|\psi\|\|\phi\|\|[A, \tau_{t'_m}(B)]\| \to 0 \ \ (m \to \infty)
\end{aligned}$$

が成り立ち、

$$\begin{aligned}&|(\psi,(\pi_\omega(A)X-X\pi_\omega(A))\phi)|\\&\leq|(\pi_\omega(A)^*\psi,(X-\hat{B}_m^{(m)})\phi)|+|(\psi,[\pi_\omega(A),\hat{B}_m^{(m)}]\phi)|+|(\psi,(X-\hat{B}_m^{(m)})\pi_\omega(A)\phi)|\\&\to 0\quad(m\to\infty)\end{aligned}\tag{2.114}$$

となり、$X\in\pi_\omega(\mathfrak{A})'$が分かる。よって、$X\in\pi_\omega(\mathfrak{A})'\cap\pi_\omega(\mathfrak{A})''$となる。さて、KMS状態$\omega$は端点状態なので、factor状態となり、$X=x\mathbf{1}$（$x$：複素数）が結論される。つまり、

$$\lim_{m\to\infty}(\psi,\{\pi_\omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right)-\omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right)\mathbf{1}\}\phi)=\lim_{m\to\infty}(\psi,\hat{B}_m^{(m)}\phi)=x(\psi,\phi)$$

となる。特に、$\psi=\phi=\Omega$ととると右辺は0なので$x=0$、つまり$X=0$が分かる。

次にBが奇数個のFermi演算子からなるとしよう。偶数個のFermi演算子からなる$A\in\mathfrak{A}$については、Bが偶数個のFermi演算子からなる場合の推論と同様にして、$[\pi_\omega(A),X]=0$がいえる。$A\in\mathfrak{A}$が奇数個のFermi演算子からなるときは、漸近アーベル性から

$$\begin{aligned}&|(\psi,[\pi_\omega(A),\hat{B}_m^{(m)}]_+\phi)|=|(\psi,\pi_\omega([A,B_{t'_m}]_+)\phi)|\\&\leq\|\psi\|\|\pi_\omega([A,B_{t'_m}]_+)\|\|\phi\|\leq\|\psi\|\|\phi\|\|[A,\tau_{t'_m}(B)]_+\|\to 0\quad(m\to\infty)\end{aligned}$$

が言えるので、

$$\begin{aligned}&|(\psi,(\pi_\omega(A)X+X\pi_\omega(A))\phi)|\\&\leq|(\pi_\omega(A)^*\psi,(X-\hat{B}_m^{(m)})\phi)|+|(\psi,[\pi_\omega(A),\hat{B}_m^{(m)}]_+\phi)|+|(\psi,(X-\hat{B}_m^{(m)})\pi_\omega(A)\phi)|\\&\to 0\quad(m\to\infty)\end{aligned}\tag{2.115}$$

つまり、$\pi_\omega(A)X=-X\pi_\omega(A)$となることが分かる。特に、$\tau_{t'_m}(B)$も奇数個のFermi演算子からなるので、これより、

$$0=(\psi,(\hat{B}_m^{(m)}X+X\hat{B}_m^{(m)})\phi)\to 2(\psi,X^2\phi)\quad(m\to\infty)$$

つまり$X^2=0$が分かる。以下、$X^*X=0$を示そう。まず、偶数個のFermi演算子を含む$A\in\mathfrak{A}$については、$[\pi_\omega(A),X]=0$と$[\pi_\omega(A),X^*]=[X,\pi_\omega(A)^*]^*=0$より、

$$[\pi_\omega(A),X^*X]=X^*[\pi_\omega(A),X]+[\pi_\omega(A),X^*]X=0$$

となり、奇数個のFermi演算子を含む$A\in\mathfrak{A}$については、$[\pi_\omega(A),X]_+=0$と$[\pi_\omega(A),X^*]_+=[X,\pi_\omega(A)^*]_+^*=0$より、

$$[\pi_\omega(A),X^*X]=-X^*[\pi_\omega(A),X]_++[\pi_\omega(A),X^*]_+X=0$$

となる。つまり、$X^*X\in\pi_\omega(\mathfrak{A})'$である。上述したように$X^*X\in\pi_\omega(\mathfrak{A})''$でもあるから、状態$\omega$のfactor性により、$X^*X=y\mathbf{1}$（$y$は複素数）となる。$y=0$ならば$\|X\|^2=\|X^*X\|=0$より$X=0$が言え、$y\neq 0$ならば$X=y\mathbf{1}X/y=X^*X^2/y=0$となる。

以上をまとめると、任意の点列 $\{t_m\}$ について部分列 $\{t'_m\}$ が存在し、任意の $\psi, \phi \in \mathfrak{H}_\omega$ について

$$\lim_{m\to\infty}(\psi, \{\pi_\omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right) - \epsilon_B\omega\left(\tau_{t'_m}(B)\right)\mathbf{1}\}\phi) = \lim_{m\to\infty}(\psi, \hat{B}_m^{(m)}\phi) = 0$$

が成り立つ。ただし、B が偶数個の Fermi 演算子からなる場合は $\epsilon_B = 1$ で、奇数個の Fermi 演算子からなる場合は $\epsilon_B = 0$ である。

以下、任意の $\psi, \phi \in \mathfrak{H}_\omega$ について

$$\lim_{t\to\pm\infty}(\psi, \{\pi_\omega\left(\tau_t(B)\right) - \epsilon_B\omega\left(\tau_t(B)\right)\mathbf{1}\}\phi) = 0 \tag{2.116}$$

を背理法で示そう。$t \to \infty$ の場合に限り検討するが、$t \to -\infty$ の場合も同様である。結論が成り立たないとすると、ある $\psi_0, \phi_0 \in \mathfrak{H}_\omega$ が存在して、ある正数 ϵ_0 については、どんなに大きな T についても $t \geq T$ かつ

$$|(\psi_0, \{\pi_\omega\left(\tau_t(B)\right) - \epsilon_B\omega\left(\tau_t(B)\right)\mathbf{1}\}\phi_0)| > \epsilon_0$$

となる t が存在する。そこで、$T = 1$ とおいたとき、この不等式を満たす t を t_1、$T = t_1 + 1$ とおいたとき、この不等式を満たす t を t_2、$T = t_2 + 1$ とおいたとき、この不等式を満たす t を t_3 $\cdots$ のように t_m を定めると、点列 $\hat{B}_m \equiv \pi_\omega\left(\tau_{t_m}(B)\right) - \epsilon_B\omega\left(\tau_{t_m}(B)\right)\mathbf{1}$ は $|(\psi_0, \hat{B}_m\phi_0)| > \epsilon_0$ かつ前半の仮定を満たす。よって、前半の推論から部分列 $\{\hat{B}_m^{(m)}\}$ がとれ、$\lim_{m\to\infty}(\psi_0, \hat{B}_m^{(m)}\phi_0) = 0$ となる。これは $\hat{B}_m$ の作り方 $|(\psi_0, \hat{B}_m^{(m)}\phi_0)| > \epsilon_0$ に反する。ゆえに、(2.116) が成り立つ。特に (2.116) で $\psi = \pi_\omega(A)^*\Omega$、$\phi = \pi_\omega(C)\Omega$ とおくと

$$\begin{aligned} 0 &= \lim_{t\to\pm\infty}(\pi_\omega(A)^*\Omega, \{\pi_\omega\left(\tau_t(B)\right) - \epsilon_B\omega\left(\tau_t(B)\right)\mathbf{1}\}\pi_\omega(C)\Omega) \\ &= \lim_{t\to\pm\infty}\{\omega(A\tau_t(B)C) - \epsilon_B\omega\left(\tau_t(B)\right)\omega(AC)\} \end{aligned} \tag{2.117}$$

が得られる。 ♣

例 9 (spinless 自由 Fermion の漸近アーベル性とクラスター性)

自由 *Fermion* の場合、$a(f) = \int dk f(k)^* a_k$ の時間発展は $\tau_t(a(f)) \int dk f(k)^* e^{-i\omega_k t} a_k$ なので、*Riemann-Lebesgue* の定理から

$$\|[a(g)^*, \tau_t(a(f))]_+\| = \left|\int dk f(k)^* g(k) e^{-i\omega_k t}\right| \to 0 \quad (t \to \pm\infty)$$

より、漸近アーベル性が満たされることが分かる。

上記の *Proposition* から、*grand canonical* 状態はクラスター性を満たすことが結論されるが、これを $A \equiv a\left(f_1\right)^* a\left(f_2\right)$ 、$B \equiv a\left(g_1\right)^* a\left(g_2\right)$ について確かめておこう。

$$\omega\left(A\tau_t\left(B\right)\right) = \omega\left(A\right)\omega\left(\tau_t(B)\right) + \omega\left(a\left(f_1\right)^* \tau_t\left(a(g_2)\right)\right)\omega\left(a\left(f_2\right)\tau_t\left(a(g_1)^*\right)\right) \tag{2.118}$$

ここで、

$$\omega\left(\tau_t(B)\right) = \int dk \frac{g_1(k)g_2(k)^*}{e^{\beta(\omega_k-\mu)}+1} = \omega(B)$$
$$\omega\left(a\left(f_1\right)^* \tau_t\left(a(g_2)\right)\right) = \int dk \frac{f_1(k)g_2(k)^* e^{-i\omega_k t}}{e^{\beta(\omega_k-\mu)}+1} \to 0 \quad (|t| \to \infty)$$

であるから、次式を得る：

$$\lim_{|t|\to\infty} \omega\left(A\tau_t\left(B\right)\right) = \omega\left(A\right)\omega\left(B\right) \tag{2.119}$$

[5]

3 熱浴と相互作用する量子系

3.1 平衡近傍

ω が Grand canonical 状態であるとは、$\sigma_x = \tau_x \alpha_{-\mu x}$ に対して KMS 状態にあるときをいう。ただしここで $\alpha_s \sim e^{iNs} A e^{-iNs}$ を意味する。

Prop. 17
Grand canonical 状態 ω に対して相互作用 V が σ_x について解析的で $\alpha\left(V\right) = V$ *(*これをゲージ不変と呼ぶ*)* かつ摂動時間発展 τ_t^V が漸近アーベル的であるならば

$$\lim_{t\to\pm\infty} \omega\left(\tau_t^V\left(A\right)\right) = \omega_V\left(A\right) \tag{3.1}$$

である。ただし ω_V は σ_x^V の *KMS* 状態で τ_t^V, σ_x^V は次式で定義される。

$$\frac{d}{dt}\tau_t^V\left(A\right) = \tau_t^V\left\{\delta_0\left(A\right) i\left[V,A\right]\right\},\ \tau_{t=0}^V\left(A\right) = A \tag{3.2}$$
$$\frac{d}{dx}\tau_x^V\left(A\right) = \sigma_x^V\left\{\delta_0\left(A\right) - \mu\kappa\left(A\right) + i\left[V,A\right]\right\},\ \sigma_{t=0}^V\left(A\right) = A \tag{3.3}$$

ここで κ はゲージ変換の生成子である。

(証明のアウトライン)

$$\omega \sim \frac{1}{\Theta} e^{-\beta(H-\mu N)} \tag{3.4}$$
$$\omega_V \sim \frac{1}{\Theta_V} e^{-\beta(H+V-\mu N)} \tag{3.5}$$

[5]編集部註：ここで著者は、?????????????????????? をつけている。ここいらの議論が不完全だったと思ったのであろう。

に対して $\Gamma_\beta \equiv e^{-\beta(H-\mu N)}e^{-\beta(H+V-\mu N)}$ とすると、

$$\Theta = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta(H-\mu N)} = \mathrm{Tr}\, \Gamma_\beta e^{-\beta(H+V-\mu N)} \tag{3.6}$$

$$\omega \sim \frac{1}{\Theta} e^{-\beta(H-\mu N)} = \frac{\Gamma_\beta e^{-\beta(H+V-\mu N)}}{\mathrm{Tr}\, \Gamma_\beta e^{-\beta(H+V-\mu N)}} \tag{3.7}$$

$$= \frac{1}{\Theta} \frac{\Gamma_\beta}{\langle \Gamma_\beta \rangle_V} e^{-\beta(H+V-\mu N)} \tag{3.8}$$

となることから

$$\omega(A) = \frac{\omega_V(A\Gamma_\beta)}{\omega_V(\Gamma_\beta)} \tag{3.9}$$

が成立する。

さらに $\tau_t^V(C) = e^{i(H+V)t} C e^{-i(H+V)t}$ より

$$\omega\left(\tau_t^V(A)\right) = \frac{\omega_V\left(\tau_t^V(A)\Gamma_\beta\right)}{\omega_V(\Gamma_\beta)} \xrightarrow{t\to\infty} \frac{\omega_V\left(\tau_t^V(A)\right)\omega_V(\Gamma_\beta)}{\omega_V(\Gamma_\beta)} = \omega_V(A) \tag{3.10}$$

が示された。

3.2 熱浴と相互作用する有限量子系

ω を熱浴の grand canonical 状態とし、$\sigma_i = 1/\Theta_s exp\left[-\beta(H_s - \mu N_s)\right]$ (初期状態) とする。系との相互作用を $w(t)$ を変化させることで系の Hamiltonian を $H_s \to H_s + V(t)$ と変化させる。ただし $t = T$ 以降は $w(t) = w_0$ とする。つまり

$$V(t) + w(t) = \begin{cases} 0, & t \le 0 \\ V_0 + w_0, & t \ge T \end{cases} \tag{3.11}$$

とする。また $V_0 + w_0$ の相互作用の下で、系+外界は $t \to \infty$ で新しい平衡状態に漸近すると仮定する。このとき $\sigma_f \equiv 1/\Theta_{s'} exp\left[-\beta(H_s + V_0 - \mu N_s)\right]$ とすると、次の熱力学第一、第二法則を示すことができる。

$$\delta Q_t + \delta Z_t + \delta W_t = \mathrm{Tr}\left(\sigma_f\left[H_s + V_0\right]\right) - \mathrm{Tr}\left(\sigma_i H_s\right) + \delta\epsilon(t, \omega_0), \text{ (第一法則)} \tag{3.12}$$

$$\beta\delta Q_t = -\mathrm{Tr}\left(\sigma_f \log \sigma_f\right) + \mathrm{Tr}\left(\sigma_i \log \sigma_i\right) - S\left(\sigma_f | \sigma_T\right) + \delta S(t, \omega_0). \text{ (第二法則)} \tag{3.13}$$

ただし

$$\delta Z_t = \mu\left\{\tilde{\omega}_t(N_s) - \tilde{\omega}(N_s)\right\}, \text{ (物質移動)} \tag{3.14}$$

$$\delta W_t = \int_0^t \tilde{\omega}_u \left(\dot{V}(u) + \dot{\omega}(u)\right) du, \text{ (仕事)} \tag{3.15}$$

$$\delta Q_t = \left\{\tilde{\omega}_t\left(H_s + V(t) + \omega(t)\right) - \omega(H_s)\right\} - \delta Z_t - \delta W_t. \text{ (熱)} \tag{3.16}$$

また、

$$\delta\epsilon\left(t,\omega_0\right),\delta S\left(t,\omega_0\right)\to O\left(\omega_0\right)\ \left(t\to+\infty\right) \tag{3.17}$$

$$S\left(\sigma_f|\sigma_T\right)\equiv \mathrm{Tr}\left\{\sigma_T\left(\log\sigma_T-\log\sigma_f\right)\right\} \tag{3.18}$$

$$\sigma_T\equiv u_T^*\sigma_i u_T \tag{3.19}$$

$$u_T=T\exp\left\{i\int_0^T\left(H_s+V\left(T\right)\right)\right\}e^{-iH_sT} \tag{3.20}$$

さらに、Systemに流入する熱流を考える。そのためにまず、系のエネルギー変化と粒子数変化を考える。

$$\begin{aligned}J_E\left(t\right) &\equiv \frac{d}{dt}\widetilde{\omega}_t\left(H_s+V\left(t\right)+w\left(t\right)\right)\\ &= \widetilde{\omega}_t\left(i\left[H_s+H_B+V\left(t\right)+w\left(t\right),H_s+V\left(t\right)+w\left(t\right)\right]\right)+\widetilde{\omega}_t\left(\dot{V}\left(t\right)+\dot{w}\left(t\right)\right)\\ &= \widetilde{\omega}_t\left(i\left[H_B,V\left(t\right)+\omega\left(t\right)\right]\right)+\widetilde{\omega}_t\left(\dot{V}\left(t\right)+\dot{w}\left(t\right)\right)\end{aligned} \tag{3.21}$$

ここで第一項目を$\widetilde{\omega}_t\delta\left(V+w\right)$, 第二項目を仕事をあらわすものとして$P\left(t\right)$とおく。

次に粒子流$J_N\left(t\right)$を考える。

$$\begin{aligned}J_N\left(t\right) &= \frac{d}{dt}\widetilde{\omega}_t\left(N_S\right)=\widetilde{\omega}_t\left(i\left(\left[H_B+H_S+V\left(t\right)+w\left(t\right),N_S\right]\right)\right)\\ &= \widetilde{\omega}_t\left(i\left[V\left(t\right)+w\left(t\right),N_S\right]\right)\\ &= \widetilde{\omega}_t\left(\alpha\left(V\left(t\right)+w\left(t\right)\right)\right)\end{aligned} \tag{3.22}$$

ただしここで$N_S+N_B=$一定より

$$\left[N_S+N_B,H_s+H_B+V\left(t\right)+w\left(t\right),H_s+V\left(t\right)+w\left(t\right)\right]=0 \tag{3.23}$$

なので、

$$\left[V\left(t\right)+w\left(t\right),N_S\right]=\left[N_B,V\left(t\right)+w\left(t\right)\right]\equiv-i\alpha\left(V\left(t\right)+w\left(t\right)\right) \tag{3.24}$$

とした。

よって熱流$J_q\left(t\right)$は次のように定義される。

$$J_q\left(t\right)\equiv J_E\left(t\right)-P\left(t\right)-\mu J_N\left(t\right)=\widetilde{\omega}_t\left(\left(\delta-\mu\alpha\right)\left(V\left(t\right)+w\left(t\right)\right)\right). \tag{3.25}$$

ここで、熱力学第二法則を示す。

ωを熱浴のgrand canonical状態とし$\widetilde{\omega}\equiv\omega\otimes\sigma_i$とする。さらに物理量の時間発展を次のように定義する。

$$\tau_t\left(B\right) \equiv e^{i\left(H_B+H_S\right)t}Be^{-i\left(H_B+H_S\right)t}, \tag{3.26}$$

$$\frac{d}{dt}\Gamma_t = i\Gamma_t\tau_t\left(V\left(t\right)+w\left(t\right)\right),\ \Gamma_0=\mathbf{1} \tag{3.27}$$

$$\widetilde{\tau}_t\left(B\right) = \Gamma_t\tau_t\left(B\right)\Gamma_t^* \tag{3.28}$$

とすると、

$$\frac{d}{dt}\widetilde{\tau}_t = \widetilde{\tau}_t\left(i\left[H_B + H_S, B\right] + i\left[V\left(t\right) + w\left(t\right), B\right]\right) \tag{3.29}$$

また $\widetilde{\omega}_t\left(B\right) = \widetilde{\omega}\left(\Gamma_t \tau_t\left(B\right)\Gamma_t^*\right)$ となる。

$$\begin{aligned}
S\left(\widetilde{\omega}|\widetilde{\omega}_t\right) &\equiv \widetilde{\omega}_t\left(\ln\rho_t - \ln\rho_0\right) \\
&= \widetilde{\omega}_t\left(\widetilde{\tau}_{-t}\left(\Gamma_t^* \ln\rho_0\Gamma_t\right) - \ln\rho_0\right) \\
&= \widetilde{\omega}\left(\ln\rho_0 - \Gamma_t \ln\rho_0\Gamma_t^*\right) \\
&= -\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left[\ln\rho_0, \Gamma_t^*\right]\right) \\
&= \widetilde{\omega}\left(\beta\Gamma_t\left[H_B + H_s - \mu\left(N_B + N_s\right), \Gamma_t^*\right]\right) \\
&= i\beta\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left(\delta - \mu\alpha\right)\Gamma_t^*\right) + \beta\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left[H_s - \mu N_s, \Gamma_t^*\right]\right) \\
&= -\beta\delta Q_t + \beta\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left[H_s - \mu N_s, \Gamma_t^*\right]\right)
\end{aligned} \tag{3.30}$$

ただし

$$\rho_0 \sim e^{-\beta\left(H_B + H_S - \mu\left(N_B + N_S\right)\right)} \tag{3.31}$$

であり、またここで最後の等号は

$$\frac{d}{dt}\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left(\delta - \mu\alpha\right)\Gamma_t^*\right) = i\widetilde{\omega}_t\left(\left(\delta - \mu\alpha\right)\left(V\left(t\right) + w\left(t\right)\right)\right) = iJ_q\left(t\right) \tag{3.32}$$

より、

$$\widetilde{\omega}\left(\Gamma_t\left(\delta - \mu\alpha\right)\Gamma_t^*\right) = i\int_0^t dt J_q\left(t\right) = i\delta Q_t \tag{3.33}$$

となることから分かる。

ここで $t \geq T$ のとき、

$$\sigma_f \equiv \frac{1}{\Theta_f} e^{-\beta\left(H_S + V_0 - \mu N_S\right)} \tag{3.34}$$

$$\frac{d}{dt}\gamma_t = i\gamma_t e^{iH_S t} V\left(t\right) e^{-iH_S t},\ \gamma_0 = \mathbf{1} \tag{3.35}$$

とすると、

$$\begin{aligned}
S\left(\widetilde{\omega}|\widetilde{\omega}_t\right) &= i\beta\widetilde{\omega}\left(\delta\left(\Gamma_T\right)\Gamma_T^*\right) - \beta\left(\widetilde{\omega}\left(\Gamma_T H_S \Gamma_T^*\right) - \widetilde{\omega}\left(H_S\right)\right) \\
&\quad -\beta\left[\widetilde{\omega}\left(V_0 + w_0\right) - \omega_T\left(V_0 + w_0\right)\right]
\end{aligned} \tag{3.36}$$

となることから

$$\beta\delta Q_t = -\operatorname{Tr}\left(\sigma_f \ln\sigma_f\right) + \widetilde{\omega}\left(\ln\sigma_f\right) - \beta\left[\widetilde{\omega}\left(\gamma_T H_S \gamma_T^*\right) - \widetilde{\omega}\left(H_S\right)\right] + O\left(w_0\right) + O_t. \tag{3.37}$$

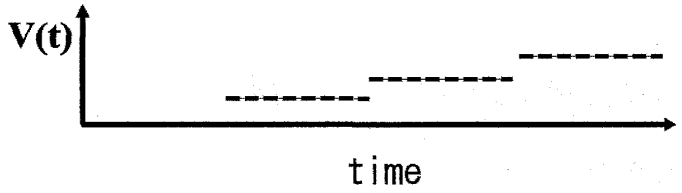

図 1: 相互作用ポテンシャルの時間変化

また右辺第二項、第三項は次のようにして簡単化できる。

$$\begin{aligned}\widetilde{\omega}\left(\ln\sigma_f\right)-\beta\left[\widetilde{\omega}\left(\gamma_T H_S\gamma_T^*\right)\right] &= \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\left[\ln\sigma_f-\beta\left(\gamma_T H_S\gamma_T^*-H_S\right)\right]\right)\\ &= \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\left(\gamma_T\ln\sigma_f\gamma_T^*\right)\right)-\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\ln\sigma_i\right)+\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\ln\sigma_i\right)\\ &= \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\ln\sigma_i\right)+\mathrm{Tr}\left(\sigma_T\left(\ln\sigma_T-\ln\sigma_f\right)\right)\\ &= \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\ln\sigma_i\right)-S\left(\sigma_f|\sigma_T\right) \qquad (3.38)\end{aligned}$$

よって

$$\beta\delta Q_t=-\mathrm{Tr}\left(\sigma_f\log\sigma_f\right)+\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\log\sigma_i\right)-S\left(\sigma_f|\sigma_T\right)+\delta S\left(t,\omega_0\right) \qquad (3.39)$$

つまり熱力学第二法則が示された。

ここで $w_0\to 0$ のとき (つまり熱力学的接触が行われたとき)

$$\beta\delta Q_t\le-\mathrm{Tr}\left(\sigma_f\log\sigma_f\right)+\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\log\sigma_i\right) \qquad (3.40)$$

つまり Clausius の不等式が導かれ、さらに図 4 にある各ステップの V の増加量をゼロになるようにしたとき (つまり準静的仮定) のとき

$$\beta\delta Q_t\simeq-\mathrm{Tr}\left(\sigma_f\log\sigma_f\right)+\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\log\sigma_i\right) \qquad (3.41)$$

が実現される。

また次のことから相対エントロピーは常に正であることがわかる。

$$\rho_1\equiv\sum|e_n\rangle p_n\langle e_n|,\ \rho_2\equiv\sum|f_n\rangle q_n\langle f_n| \qquad (3.42)$$

とすると

$$\begin{aligned}S\left(\rho_2|\rho_1\right) &= \sum_n p_n\left(\ln p_n-\sum_m|\langle e_n|f_m\rangle|^2\ln q_m\right)\\ &= -\sum_{n,m}p_n|\langle e_n|f_m\rangle|^2\ln\frac{q_n}{p_n}\\ &\ge -\ln\left(\sum_{n,m}p_n|\langle e_n|f_m\rangle|^2\frac{q_n}{p_n}\right)\\ &= 0 \qquad (3.43)\end{aligned}$$

となり常に正であることがわかる。

3.3 非平衡定常状態

ここではよく理解されている状態（局所平衡状態）から出発して、非平衡定常状態を構成したい。$t=0-$ で複数個の熱浴がそれぞれ平衡状態にあるとし、$t=0+$ で熱浴と有限系を接触させ、その緩和したあとつまり $t=+\infty$ での有限系の状態を調べるということをしたい。

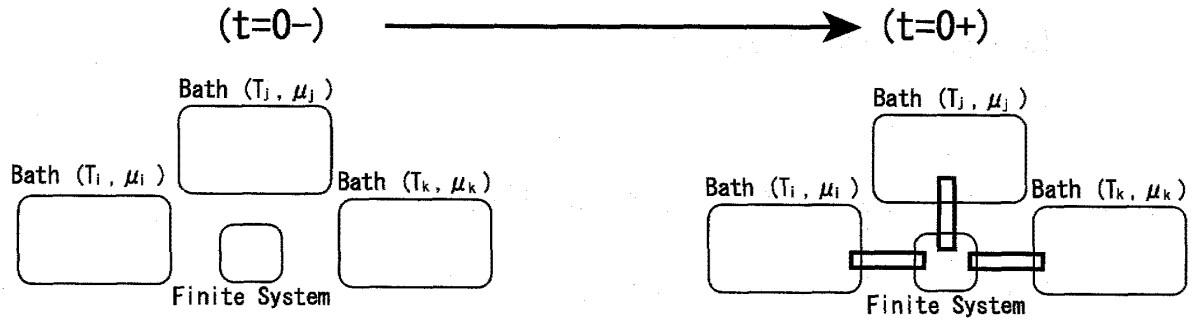

図 2: 有限系と熱浴を接続した概念図

まず Filed 代数 $\mathfrak{F}$ を定義する。この Filed 代数は C^* 代数を満たし、次の写像 (*-automorphism) をもつ。

1. 時間発展 τ_t

2. ゲージ変換 $\alpha_{\boldsymbol{\phi}}$ は $\alpha_{\boldsymbol{\phi_1}}\alpha_{\boldsymbol{\phi_2}}=\alpha_{\boldsymbol{\phi_1}+\boldsymbol{\phi_2}}$ を満たし、$\boldsymbol{\phi}\in\boldsymbol{R}^L$ とする。

3. $\Theta=\alpha_{\boldsymbol{\phi_0}}$ で表現される、involutive な変換 Θ。

4. 時間反転 ι

$$\iota\tau_t\iota=\tau_{-t},\ \iota^2=\mathbf{1} \tag{3.44}$$

ここで 1,2,3 の変換は互いに可換である。

直感的に書くと時間発展 τ_t は

$$\tau_t(A)\sim e^{iHt}Ae^{-iHt} \tag{3.45}$$

のようにあらわされるもので、またゲージ変換 $\alpha_{\boldsymbol{\phi}}$ は

$$\alpha_{\boldsymbol{\phi}}(A)=\exp\left[i\sum\phi_\lambda N_\lambda\right]A\exp\left[-i\sum\phi_\lambda N_\lambda\right] \tag{3.46}$$

のようにあらわすことができる。また Θ は Fermi 粒子の偶奇性をあらわすと考えれば分かりやすい。

またそれぞれの熱浴と系の分割を行う。

1. 物理量

$$\mathcal{F} = (\mathcal{F}_0)_{system} \otimes (\mathcal{F}_1 \otimes \cdots \otimes \mathcal{F}_N)_{reservoirs} \tag{3.47}$$

2. generator

$$\delta^V(A) = \delta(A) - i[V, A] \tag{3.48}$$

により構成される時間発展の分割。

$$\tau_t^V = \tilde{\tau}_t^{(1)} \otimes \cdots \otimes \tilde{\tau}_t^{(N)}. \tag{3.49}$$

各 $\tilde{\tau}_t^{(j)}$ は $\mathcal{F}_j$ に作用する。ここで各 $\tilde{\tau}_t^{(j)}$ は次を満たす。

$$\tilde{\tau}_t^{(j)}(A) = A, \ (\forall A \in \mathcal{F}_k, \ j \neq k) \tag{3.50}$$

$$\tilde{\tau}_t^{(j)} \tilde{\tau}_t^{(k)} = \tilde{\tau}_t^{(k)} \tilde{\tau}_t^{(j)} \ (t, s \in \boldsymbol{R}, \ j \neq k) \tag{3.51}$$

3. ゲージ変換の分割

$$\alpha_{\boldsymbol{\phi}} = \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}}^{(0)} \otimes \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}}^{(1)} \otimes \cdots \otimes \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}}^{(N)} \tag{3.52}$$

ゲージ変換も同様に次を満たす。

$$\tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}}^{(j)}(A) = A, \ (\forall A \in \mathcal{F}_k, \ j \neq k) \tag{3.53}$$

$$\tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}_1}^{(j)} \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}_2}^{(k)} = \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}_2}^{(k)} \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}_1}^{(j)} \ (\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2 \in \boldsymbol{R}, \ j \neq k) \tag{3.54}$$

また

$$\tilde{\tau}_t^{(j)} \tilde{\alpha}_{\boldsymbol{\phi}}^{(k)} = \tilde{\alpha}_{-\boldsymbol{\phi}}^{(j)} \tilde{\tau}_t^{(k)}, \ \left(\forall j, k = 1, \cdots, N, t \in \boldsymbol{R}, \boldsymbol{\phi} \in \boldsymbol{R}^L\right) \tag{3.55}$$

が成り立ち、かつ時間反転 ι に対して

$$\iota \tilde{\tau}_t^{(j)} \iota = \tilde{\tau}_{-t}^{(j)}, \ \ \iota \tilde{\alpha}_t^{(j)} \iota = \tilde{\alpha}_{-t}^{(j)} \tag{3.56}$$

が成立する。

さらに 1. のように τ_t^V が分割できることから $D\left(\delta^V\right) = D(\delta)$ となり次のことがわかる。

$$\delta(A) = \delta^V(A) + i[V, A], \ \forall A \in D(\delta) \tag{3.57}$$

$$\delta^V(A) = \sum_{j=1}^{N} \delta_j(A), \ \forall A \in D(\delta) \tag{3.58}$$

ただしここで δ_j とは、$\tilde{\tau}_t^{(j)}$ の generator である。

またFの重要な部分代数を定義する。

1. 可観測量部分代数 $\mathcal{A} \in \mathcal{F}$, ゲージ不変な物理量全体

2. 偶奇部分代数

$$\mathcal{F}_{\pm} = \{A \in \mathcal{F} | \Theta(A) = \pm A\} \tag{3.59}$$

Fermion 生成消滅演算子を偶数個/奇数個含む物理量

3. 次の二つの性質を満たすノルムが稠密な部分代数 $\mathcal{F}_L$.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \| [A, \tau_t(B)] \| < +\infty \ (A \in \mathcal{F}_L,\ B \in \mathcal{F}_L \cap \mathcal{F}_+), \tag{3.60}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \| [A, \tau_t(B)]_+ \| < +\infty \ (A, B \in \mathcal{F}_L \cap \mathcal{F}_-). \tag{3.61}$$

このような性質をもつ $\mathcal{F}_L$ が存在することを $L^1(\mathcal{F}_L)$ 漸近アーベル性と呼ぶ。また、熱浴との相互作用 V は $\mathcal{F}_L$ の要素である。

それぞれの熱浴は無限系で平衡状態にあり、かつそれぞれの熱浴ごとに温度や化学ポテンシャルが違う。このような状態を統一的に記述するため、KMS 条件により各熱浴を特徴づける。

まず、σ_x^{ω} を次のように定義する。

$$\sigma_x^{\omega}(B) \equiv \prod_{j=1}^{N} \tilde{\tau}_{-\beta_j x}^{(j)} \tilde{\alpha}_{-\beta_j \boldsymbol{\mu}_j x}^{(j)} \left(e^{iD_s x} B e^{-iD_s x} \right) \tag{3.62}$$

ここで β_j^{-1} は j 番目の熱浴の温度の逆数、$\boldsymbol{\mu}_j = \left(\mu_j^{(1)}, \cdots, \mu_j^{(L)} \right)$ は j 番目の熱浴の化学ポテンシャル、$\exp(D_s)$ は有限自由度系の初期状態を表している。また ω は温度 -1 のときの σ_x^{ω} に対する KMS 状態を表す。ここで、系が KMS 条件を満たしているとは

$$\omega\left(A \sigma_{-i}^{\omega}(B) \right) = \omega(AB) \tag{3.63}$$

であることを意味する。

ここで generator δ_{ω} は次のように与えられる。

$$\delta_{\omega}(A) = -\sum \beta_j \left(\beta_j \left(\delta_j(A) - \mu_{\lambda}^{(j)} g_{\lambda}^{(j)}(A) \right) \right) + i[D_S, A] \tag{3.64}$$

ここで $g_{\lambda}^{(j)}$ は $\alpha_{s\boldsymbol{e}_{\lambda}}^{(j)}$ に対する generator である。($\boldsymbol{e}_{\lambda}$ は $\boldsymbol{R}^L$ の λ 成分が 1 となる単位ベクトルで $s \in \boldsymbol{R}$ である。)

また、後の Prop. で書くが、系の分割方法によりどのような変化が生じるか調べるため locally modified state ω' を定義する。これは

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0' \otimes \mathcal{F}_1' \otimes \cdots \otimes \mathcal{F}_N' \tag{3.65}$$

というように、上のKMS条件による分割とは別にする。この分割に対する、温度-1のときの$\sigma_x^{\omega'}$に対するKMS状態ω'は

$$\sigma_x^{\omega'}(B)=\prod_{j=1}^{N}\tilde{\tau}_{-\beta_j x}^{\prime(j)}\tilde{\alpha}_{-\beta_j}^{\prime(j)}\boldsymbol{\mu}_j{}_x\left(e^{iD_s'x}Be^{-iD_s'x}\right) \tag{3.66}$$

で表現される。ここで$\beta_j,\boldsymbol{\mu}_j$は$\sigma_x^{\omega}$のときと同じである。

このω'がlocally modified stateであるとは$\delta_{\omega'}$とδ_{ω}が次の関係を満たすときである。

$$\delta_{\omega'}(A)-\delta_{\omega}(A)=i[W,A],\ (\forall A\in D(\delta_{\omega})) \tag{3.67}$$

ここで$W\in\mathfrak{A}$はselfadjointである。

Prop. 18 (定常状態の存在)
τ_tが$L^1(\mathcal{F}_L)$漸近アーベル性を満たすとき

$$\lim_{t\to\pm\infty}\omega\circ\tau_t(A)\equiv\omega_{\pm}(A),\ (\forall A\in\mathcal{F}_L) \tag{3.68}$$

がそれぞれの初期状態ωに対して存在し、$\omega_{\pm}$はτ_t不変である。[6]

Prop. 19
τ_tが$L^1(\mathcal{F}_L)$漸近アーベル性を満たし、σ_x^{ω}による*KMS*状態が一意的に決まるときωに局所的な摂動を加えたω'に対しても、

$$\lim_{t\to\pm\infty}\omega'\circ\tau_t(A)=\lim_{t\to\pm\infty}\omega\circ\tau_t(A)=\omega_{\pm}(A),\ (\forall A\in\mathcal{F}_L) \tag{3.69}$$

が成立する。

このことから定常状態$\omega_{\pm}$は熱浴の温度と化学ポテンシャルにより決定され、分割の仕方や有限自由度系の初期状態にはよらないことがわかる。

Prop. 20
τ_tが$L^1(\mathcal{F}_L)$漸近アーベル性を満たし、σ_x^{ω}による*KMS*状態が一意的に決まるとき、

$$\omega_{\pm}=\iota^*\omega_{\mp} \tag{3.70}$$

が成立する。ただしここでι^*は$\iota^*\omega(A)=\omega(\iota(A^*))$で定義される。

Prop. 21 (定常状態の安定性)
τ_tが$L^1(\mathcal{F}_L)$漸近アーベル性を満たし、σ_x^{ω}による*KMS*状態が一意的に決まり、*Møller*写像$\gamma_{\pm}\left(\equiv\lim_{t\to\pm\infty}\tau_t^{V^{-1}}\tau_t\right)$が*invertible*のとき定常状態$\omega_+$は局所的な摂動に対して次の意味で安定である。

$$\lim_{t\to\pm\infty}\frac{\omega_+(B^*\tau_t(A)B)}{\omega_+(B^*B)}=\omega_+(A),\ (\forall A,B\in\mathcal{F}). \tag{3.71}$$

またこれは、ω_-に対しても同様のことが言える。

[6]ここでRuelleの2000年の文献を引用していた。

Prop. 22

一般に C^* 代数において、密度行列 ρ_1, ρ_2 に対する相対エントロピー $S(\rho_1|\rho_2)$ は

$$S(\rho_1|\rho_2) = \mathrm{Tr}\{\rho_1(\log\rho_1 - \log\rho_2)\}, \tag{3.72}$$

で与えられている。これに対して、相対エントロピー生成の陽な表現が小嶋ら[7]や *Jakšić* と *Pillet*[8]により相対エントロピー $S(\omega|\omega_t)$ が次のように与えられる。

$$S(\omega|\omega_t) = \sum_j \beta_j \int_0^t dt' \omega_{t'}\left(J_j^q\right) - \omega_t(D_S) + \omega(D_S) \tag{3.73}$$

ここで $\omega_s \equiv \omega\circ\tau_s$ で、j 番目の熱浴との間に流れる熱流 J_j^q は

$$J_j^q \equiv -\delta_j(V) + \sum_{\lambda=1}^{L} \mu_\lambda^{(j)} g_\lambda^{(j)}(V) \tag{3.74}$$

で定義される。このとき、相対エントロピー生成量 $Ep(\omega_t) \equiv \frac{d}{dt}S(\omega|\omega_t)$ は τ_t が漸近アーベルであるとき $\lim_{t\to\pm\infty} Ep(\omega_t)$ は収束し、

$$\lim_{t\to\pm\infty} Ep(\omega_t) = Ep(\omega_\pm) \equiv \sum_j \beta_j \omega_\pm\left(J_j^q\right) \tag{3.75}$$

であらわされる。また $Ep(\omega_+) \geq 0, Ep(\omega_-) \leq 0$ が成立する。

(有限系に対する証明)

初期分布

$$\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\sum_j \beta_j(H_j - \mu_j N_j) - D_S} \sim \omega \tag{3.76}$$

と時間発展 τ_t に対して $\omega_t \equiv \omega\circ\tau_t$ なので相対エントロピーは次のようにして計算できる。

$$\begin{aligned}
S(\omega|\omega_t) &= \mathrm{Tr}(\rho_t(\ln\rho_t - \ln\rho_0)) \\
&= \mathrm{Tr}(\tau_{-t}(\rho_0)(\tau_{-t}(\ln\rho_0) - \ln\rho_0)) \\
&= \mathrm{Tr}(\rho_0(\ln\rho_0 - \tau_t(\ln\rho_0))) \\
&= \int_0^t dt' \frac{d}{dt'} \mathrm{Tr}\left(\rho_0\tau_{t'}\left[\sum_j \beta_j(H_j - \mu_j N_j)\right]\right) + \mathrm{Tr}(\rho_0(D_S - \tau_t(D_S))) \\
&= \sum_j \beta_j \int_0^t dt' \omega_{t'}\left(J_j^q\right) - \omega_t(D_S) + \omega(D_S)
\end{aligned} \tag{3.77}$$

ここで有限系では $\delta_j, g_\lambda^{(j)}$ は $\delta_j(A) = i[H_j, A]$、$g_\lambda^{(j)}(A) = i\left[H_\lambda^{(j)}, A\right]$ で与えられ、全ハミルトニアンは $H = \sum_{j=1}^N H_j + V$ であることから、$[V, H_j] = [H, H_j]$ と $\left[V, N_\lambda^{(j)}\right] = \left[H, N_\lambda^{(j)}\right]$

[7]編集部註：小嶋等の 1988 年や 89 年の論文を引用していた。
[8]編集部註：彼等の 2001 年、2002 年の論文を引用していた。

が成立する。よってsystemと熱浴jとの間を流れる熱流J_j^qは次のように変形できることを上の最後の等式で用いた。

$$\begin{aligned} J_j^q &\equiv -\delta_j(V) + \sum_{\lambda=1}^{L} \mu_\lambda^{(j)} g_\lambda^{(j)}(V) = -i[H_j, V] + \sum_{\lambda=1}^{L} \mu_\lambda^{(j)} i\left[N_\lambda^{(j)}, V\right] \\ &= \frac{d}{dt}\tau_t(H_j) - \sum_{\lambda=1}^{L} \mu_\lambda^{(j)} \frac{d}{dt}\tau_t\left(N_\lambda^{(j)}\right) \end{aligned} \tag{3.78}$$

さらに$S(\omega|\omega_t) \geq 0$より

$$\lim_{t\to\infty} Ep(\omega_t) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int_0^t ds \frac{d}{ds} S(\omega|\omega_s) \geq 0 \tag{3.79}$$

であることから次のことが分かる。

$$Ep(\omega_t) = \sum_j \beta_j \omega_t\left(J_j^q\right) - \dot{\omega}_t(D_S) \xrightarrow{t\to+\infty} \beta_j \omega_+\left(J_j^q\right) \geq 0 \tag{3.80}$$

同様に$t \to -\infty$のときは$S(\omega|\omega_t) \geq 0$より

$$\lim_{t\to-\infty} \frac{1}{t}\int_0^t ds \frac{d}{ds} S(\omega|\omega_s) \leq 0 \tag{3.81}$$

なので$Ep(\omega_-) \leq 0$が分かる。 ■

Prop. 23
温度が-1のときの状態ω_tは

$$\omega_x^{\omega_t} \equiv \gamma_t^{-1} \sigma_x^\omega \gamma_t, \quad \gamma_t \equiv \tau_t^{V^{-1}} \tau_t \tag{3.82}$$

に対する時間tの*KMS*状態で、その*generator*は次のように与えられる。

$$\delta_\omega^{(t)}(A) = \delta_\omega(A) + i\int_{-t}^{0} ds\left[\tau_s(\delta_\omega(V)), A\right], \quad \forall A \in D\left(\delta_\omega^{(t)}\right) = D(\delta_\omega) \tag{3.83}$$

Prop. 24
τ_tが$L^1(\mathcal{F}_L)$漸近アーベルでかつ*Møller*写像$\gamma_\pm$が*invertible*のとき温度-1における定常状態$\omega_\pm$は

$$\omega_x^{\omega_\pm} \equiv \gamma_\pm^{-1} \sigma_x^\omega \gamma_\pm \tag{3.84}$$

に対する*KMS*状態となる。$\delta_\omega(V) \in \mathcal{F}_L$のとき*generator* $\delta_\omega^\pm$は次のようにあらわされる。

$$\delta_\omega^\pm(A) = \delta_\omega(A) + i\int_{\pm\infty}^{0} ds\left[\tau_s(\delta_\omega(V)), A\right], \quad \forall A \in D(\delta_\omega) \cap \mathcal{F}_L \tag{3.85}$$

有限系においては、*-automorphism σ_x^ω に関する KMS 状態 ω は density matrix に対応する。

$$\rho_\omega = \frac{1}{Z}\exp\left[-\sum_{j=1}^{N}\beta_j\left(H_j - \sum_{\lambda=1}^{L}\mu_\lambda^{(j)}N_\lambda^{(j)}\right)\right] \tag{3.86}$$

Z は規格化定数で、$\beta_j, H_j, \mu_\lambda^{(j)}, N_\lambda^{(j)}$ はそれぞれ j 番目の熱浴の温度、エネルギー、化学ポテンシャル、粒子数オペレーターを意味する。

ここで式 (3.78) より

$$\tau_t\left(\delta_\omega\left(V\right)\right) = -\sum_{j=1}^{N}\beta_j\frac{d}{dt}\tau_t\left(H_j - \sum_{\lambda=1}^{L}mu_\lambda^{(j)}N_\lambda^{(j)}\right) = -\sum_{j=1}^{N}\beta_j\tau_t\left(J_j^q\right) \tag{3.87}$$

となるので、Prop. 24 より ω_t に相当する density matrix の時間発展 ρ_{ω_t} は次のようになる。

$$\rho_{\omega_t} = \frac{1}{Z}\exp\left[-\sum_{j=1}^{N}\beta_j\left(H_j - \sum_{\lambda=1}^{L}\mu_\lambda^{(j)}N_\lambda^{(j)} - \int_{-t}^{0}ds\tau_s\left(J_j^q\right)\right)\right] \tag{3.88}$$

ここで、$\rho_{\omega_t} = \tau_{-t}\left(\rho_\omega\right)$ となっていることから分かるようにこれは density matrix に対する Liouville-von Neumann 方程式そのものであることが分かる。

さらに $t \to \pm\infty$ とすると

$$\rho_{\omega_\pm} = \frac{1}{Z}\exp\left[-\sum_{j=1}^{N}\beta_j\left(H_j - \sum_{\lambda=1}^{L}\mu_\lambda^{(j)}N_\lambda^{(j)} - \int_{\mp\infty}^{0}ds\tau_s\left(J_j^q\right)\right)\right] \tag{3.89}$$

となる。これはまさに MacLennan-Zubarev による定常分布である。

3.4 Spinless Fermion 系の非平衡定常状態

ここでは具体的に Spinless Fermion 系において二つの系が相互作用する場合を考える。

$$a\left(f\right) \equiv \sum_\lambda\int dk f_\lambda^*\left(k\right)a_{k\lambda} \tag{3.90}$$

$$\tau_t^V\left(a\left(f\right)\right) = \sum_\lambda\int dk\left(e^{i\omega_{k\lambda}t}f_\lambda\left(k\right)\right)^*a_{k\lambda} \tag{3.91}$$

$$V \equiv a\left(u_1\right)^*a\left(u_2\right) + a\left(u_2\right)^*a\left(u_1\right) \tag{3.92}$$

ここで k は波数、λ は系の番号で、ここでは 1 または 2 である。また u_1, u_2 は次のことを満たす。

$$(u_1)_\lambda(k)=\begin{cases}u_1(k) & \lambda=1\\ 0 & \lambda=2\end{cases},\quad (u_2)_\lambda(k)=\begin{cases}0 & \lambda=1\\ u_2(k) & \lambda=2\end{cases} \tag{3.93}$$

このとき初期状態は

$$\omega\left(a^*(f)\,a(g)\right)=\sum_{\lambda=1,2}\int dk\frac{g_\lambda^*(k)\,f_\lambda(k)}{e^{\beta\lambda(\omega_{k\lambda}-\mu_\lambda)}+1} \tag{3.94}$$

とでき、時間発展は

$$\tau_t(A)=\tau_t^V(A)+\sum_{n=1}^{\infty}i^n\int_0^t dt_1\cdots\int_0^{t_{n-1}}dt_n\left[\tau_{t_n}^V(V),\left[\tau_{t_{n-1}}^V(V)\cdots\left[\tau_{t_1}(V),\tau_t(A)\right]\cdots\right]\right] \tag{3.95}$$

と表現できる。また、$\tau_t(a(f))=a(f_t)$ とする。

このとき $\delta(A)\equiv\frac{d}{dt}\tau_t\,V(A)\,|_{t\to\infty}$ に対して

$$\frac{d}{dt}\tau_t(a(f))=\tau_t(\delta(a(f))+i[V,a(f)]) \tag{3.96}$$

が成立することから、次のことが言える。

$$\dot{f}_\lambda(k;t) = i\omega_{k\lambda}f_\lambda(k;t)+iu_\lambda(k)\int dk''u_\lambda^*(k'')\,f_\lambda(k'';t) \tag{3.97}$$

$$f_\lambda(k;0) = f_\lambda(k) \tag{3.98}$$

ここでは、時間微分が残っているので、次のように変形する。

$$\begin{aligned}f_\lambda(k;t) &= e^{i\omega_{k\lambda}t}\phi_\lambda(k;f)+u_\lambda(k)\int dk'\frac{M_{\bar\lambda}^{(+)}(\omega_{k'\lambda})\,u_\lambda^*(k')\,\phi_\lambda(k';f)\,e^{i\omega_{k'\lambda}t}}{\Lambda^{(+)}(\omega_{k'\lambda})\,(\omega_{k'\lambda}-\omega_{k\lambda}+i0)}\\ &\quad+\int dk'\frac{u_{\bar\lambda}^*(k)\,\phi_{\bar\lambda}(k';f)\,e^{i\omega_{k'\bar\lambda}t}}{\Lambda^{(+)}(\omega_{k'\bar\lambda})\,(\omega_{k'\bar\lambda}-\omega_{k\lambda}+i0)}\end{aligned} \tag{3.99}$$

$$\begin{aligned}\phi_\lambda(k;f) &= f_\lambda(k)+\frac{u_\lambda^*(k)}{\Lambda^{(-)}(\omega_{k\lambda})}\times\\ &\quad\left[M_{\bar\lambda}^{-}(\omega_{k\lambda})\int dk'\frac{u_\lambda^*(k')\,f_\lambda(k')}{\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\lambda}-i0}+\int dk'\frac{u_{\bar\lambda}^*(k')\,f_{\bar\lambda}(k')}{\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\bar\lambda}-i0}\right]\end{aligned} \tag{3.100}$$

ここで

$$\bar\lambda = \begin{cases}2, & \lambda=1\\ 1, & \lambda=2\end{cases} \tag{3.101}$$

$$M_\lambda^{(\pm)}(\omega) = \int dk\frac{|u_\lambda(k)|^2}{\omega-\omega_{k\lambda}\pm i0} \tag{3.102}$$

$$\Lambda^{(\pm)}(\omega) = 1-M_1^{(\pm)}(\omega)\,M_2^{(\pm)}(\omega) \tag{3.103}$$

とした。

こうして、時間発展が分かったので、$t \to \infty$ での系の状態を調べる。

$$\omega_t\left(a\left(f^*\right)a\left(g\right)\right)=\omega\left(\tau_{-t}^{V}a\left(f_t\right)^*a\left(g_t\right)\right)=\omega\left(a\left(e^{-i\omega_k t}f_t\right)^*a\left(e^{-i\omega_k t}g_t\right)\right) \tag{3.104}$$

ここで、

$$\begin{aligned}e^{-i\omega_{k\lambda}t}f_\lambda\left(k;t\right)=&\phi_\lambda\left(k;f\right)\\&+\int dk'\frac{e^{i(\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\lambda})t}}{\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\lambda}+i0}\frac{M_\lambda^{(+)}\left(\omega_{k'\lambda}\right)u_\lambda\left(k\right)u_\lambda^*\left(k'\right)\phi_\lambda\left(k';f\right)}{\Lambda^{(+)}\left(\omega_{k'\lambda}\right)}\\&+\int dk'\frac{e^{i(\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\bar{\lambda}})t}}{\omega_{k\lambda}-\omega_{k'\bar{\lambda}}+i0}\frac{u_{\bar{\lambda}}^*\left(k\right)\phi_{\bar{\lambda}}\left(k';f\right)}{\Lambda^{(+)}\left(\omega_{k'\bar{\lambda}}\right)}\\\xrightarrow{t\to\infty}&\phi_\lambda\left(k;f\right)\end{aligned} \tag{3.105}$$

となることは、

$$\frac{e^{-ikt}}{k\pm i0}\xrightarrow{t\to\infty}0 \tag{3.106}$$

より分かる。

よって終状態は

$$\lim_{t\to\infty}\omega_t\left(a\left(f\right)^*a\left(g\right)\right)=\omega\left(a\left(\phi\left(f\right)\right)^*a\left(\phi\left(g\right)\right)\right)=\sum_\lambda\int dk\frac{\phi_\lambda\left(k;f\right)^*\phi_\lambda\left(k;g\right)^*}{e^{\beta_\lambda(\omega_{k\lambda}-\mu)}+1} \tag{3.107}$$

となることがわかる。

非平衡量子統計力学の代数的アプローチ講義概要 「微視的運動の動力学的性質から巨視的な不可逆現象がどのように導かれるか」という統計力学の基礎的問題が、近年、無限量子系の立場から再吟味されている。講義では、このアプローチについて最新のトピックスを交えて解説する。

量子力学の数学的定式化では、通常、状態を表すヒルベルト空間から出発し、その上で定義されたエルミート演算子を物理量と解釈する。このとき、測定により観測される量は、演算子の固有値であり、ヒルベルト空間のベクトルはそれぞれの固有値の観測確率の情報を担う（"状態"と呼ばれる）。

このようなアプローチは、無限に拡がった系には（例えば全系のエネルギーが無限大になるので）適用できない。代わりに、有限な観測可能量のつくる非可換代数から出発して「観測値」あるいは「平均の観測値」を与えるものとして状態を導入するという方針をとる。この定式化は、無限系の熱平衡状態をよく記述することが知られており、近年、非平衡状態の研究にも用いられている。講義では、この方法の基本から出発し、非平衡系へのアプローチを解説する。

シラバス

１．オリエンテーション　（量子力学の定式化）

2．C*代数1（有限可観測量のつくる代数：C*代数、ユニタリー性・エルミート性・正値性、スペクトル）
3．C*代数2　（状態、Gel'fand-Naimark-Segal構成）
4．C*代数3　（時間発展、時間発展の生成子、複素時間への解析接続）
5．散乱理論1　（散乱理論）
6．散乱理論2　（代数的アプローチにおける散乱問題）
7．平衡状態1　（Kubo-Martin-Schwinger条件と平衡状態）
8．平衡状態2　（平衡状態のエルゴード性、Clausiusの不等式）
9．平衡状態3　（自由Bose気体のBose-Einstein凝縮、自発的対称性の破れ）
10．非平衡定常状態1　（Ruelleの理論：定常状態の存在）
11．非平衡定常状態2　（定常状態のエルゴード性）
12．非平衡定常状態3　（量子開放系の定常状態：量子ドット）
13．非平衡定常状態4　（量子開放系の定常状態：一次元XYモデル）
14．非平衡定常状態5　（相対エントロピーと相対エントロピー生成）

4　熱・統計力学とエルゴード理論

熱平衡状態はアンサンブルによって記述でき、マクロな物理量はミクロな情報からアンサンブル平均として求められる。非平衡状態を表すアンサンブルをどのように表すかは問題であが、物理的状態が確率的であるとすれば記述可能である。以下では非平衡状態の性質を混合的力学系の性質として考えるためエルゴード理論を考察する。

4.1　序: 熱力学と動力学

平衡系の熱力学では「孤立した系を放置すると、それ以上変化しない落ち着いた平衡状態に達する」という熱平衡の存在を巨視的な系において成立する経験則として認めている。一方で、熱力学を微視的にみるとあらゆる系は力学の法則に従って時間発展しているので、熱力学と力学が両立するためには熱平衡に相当する力学過程が存在しなくてはならない。しかし、与えられた系の運動状態は時々刻々と変化するので熱平衡に対応する力学的状態は複数あり、力学系として、平衡状態の存在を保証する条件が問題となってくる。

ある系で熱平衡に対応する力学過程が存在するために、Boltzmanは一定のエネルギーをもった孤立系は十分長い時間の後には熱平衡状態に達し、その後はその周辺で小さなゆらぎがあるが、ほとんどその状態に留まり続けることを「長時間平均値＝アンサンブル平均値」という形のエルゴード性が成立するとして定式化させた。

ある力学量 f は十分時間が経った後に巨視的には熱平衡の値をとるので、初期状態 x_0 から出発した軌道の長時間平均 $\langle f \rangle_{x_0}$ は熱平衡での観測値 $\langle f \rangle_{eq}$ と同一視できる。さらに、

熱平衡の一意性から、長時間平均は初期状態によらず一定値 $\langle f \rangle$ をとると考えられる。一方で、エネルギー面上に一様に分布する統計集団（ミクロカノニカル分布）を考え、初期値をその分布にわたって平均したものを考えると、力学量 f の時間平均 $\langle f \rangle$ がミクロカノニカル分布にわたる平均 $[f]_{mc}$ と一致することを示すことができ

$$\langle f \rangle = [f]_{mc}, \tag{4.1}$$

のような関係となる。この性質をエルゴート性と呼び、アンサンブルと力学の性質だけから熱平衡にある系のさまざまな量を計算できる。つまり、孤立系の熱平衡状態をミクロカノニカルアンサンブルによって表される統計的状態として議論を進めていくことが可能となる。

5 有限自由度系の平衡統計力学

この節では、N 個の同種粒子からなる古典力学系において、平衡熱力学の諸性質を動力学の枠組みの中にどれだけ作り込めるかを見ていくことにしよう。簡単のため、系と外界との物質の移動は考えない。

5.1 状態と測度

統計力学では状態は統計集団で記述されるが、その根拠には長時間平均が相空間平均と一致するというエルゴード性を根拠にすることが多い。しかし、長時間平均で議論ができるなら、そもそも系の状態を記述するのに統計集団を持ち込む必要がない。ここでは、「（熱力学で扱われている）系の状態は物理量の測定結果によって決まる」という事実から出発すると、系の状態が一般に確率分布によって表されることを示そう。

N 個の同種粒子からなる古典力学では、系の運動状態は、$n = 3N$ 個（あるいは固定された物体を考える場合には $n = 3N - 6$ 個）の一般座標 q_j と一般運動量 p_j の値の組（相空間座標）により指定される。ただし、粒子の入換えにより移り変わる座標は同一視する。従って、この系の物理量は相空間上で定義された関数 $f = f(q_1, \cdots, q_n, p_1, \cdots, p_n) \equiv f(q, p)$ で表される。さて、この系について、物理量 f を測定したとしよう。一般には、測定値は測定の度に揺らぐだろうが、その平均値 $\omega(f)$ は確定した意味をもつ。そして、様々な物理量の測定値の平均を定めれば、状態を定めることができる。物理量 f に対して平均値 $\omega(f)$ を対応させる写像 $f \to \omega(f) \in \mathbf{C}$ は、明らかに次の性質を持つべきである。

(S1) 線形性： $\omega(\alpha f + g) = \alpha\omega(f) + \omega(g) \quad (\alpha \in \mathbf{C})$

(S2) 正値性： $f(q,p) \geqq 0 \implies \omega(f) \geqq 0$

(S3) 規格化： 常に $\mathbf{1}(q,p) \equiv 1$ となる物理量 $\implies \omega(\mathbf{1}) = 1$

つまり、$\omega(f)$ は規格化された正値汎関数である。

次に、最も一般な確率分布について考えてみよう。例えば、カノニカル集団は相空間上で定義された分布関数 $\rho(x) = \exp\Big(-H/(k_BT)\Big)/Z$（$Z$ は分配関数、T は温度、k_B はボルツマン定数）によって表される。分布関数が与えられると、相空空間のある部分集合 A で表される運動状態が実現する確率は

$$\int_A \frac{1}{Z} e^{-\frac{H}{k_BT}} \frac{dx}{N!} \tag{5.1}$$

で与えられる。これを一般化すると、相空空間の部分集合 $A \subset \Gamma$ で表される運動状態の実現確率 $\mu(A)$ を定めることが、最も一般の確率分布を考えることになる。[9]ここで、確率測度 μ とは相空間 Γ の“可測な”[10] 部分集合 A に実数 $\mu(A)$ を対応させる集合関数で, 次の条件を満たすものである。

(M1) $\mu(\emptyset) = 0$

(M2) 可測集合 A に対し $\mu(A) \geqq 0$

(M3) A_j（$j = 1, 2, \cdots$）が可測で $A_j \bigcap A_k = \phi$ $(j \neq k)$ ならば $\mu\left(\bigcup_{j=1}^{\infty} A_j\right) = \sum_{j=1}^{\infty} \mu(A_j)$

(M4) $\mu(\Gamma) = 1$

そして、Riesz の表現定理によれば汎関数 ω はある確率測度 μ に関する積分で表すことができる。ここでは、Riesz の定理のおおまかな内容を紹介するに留める（正確な内容については、例えば猪狩 [] 定理 6.18 参照)。

Prop. 25
平均値を与える写像 ω（正値汎関数）について、確率測度 μ が存在し

$$\omega(f) = \int_\Gamma f(x)\, \mu(dx) \tag{5.2}$$

と表せる。ここで $x = (q, p)$、 $dx = dq_1 \cdots dq_n dp_1 \cdots dp_n$ で Γ は相空間である。

(proof)

---

[9]編集部註：この箇所に、著者は、?????????? をつけている。

[10]集合 Γ の部分集合の集まり（集合族）$\mathcal{A}$ で

(A1) $\emptyset \in \mathcal{A}$

(A2) $A \in \mathcal{A}$ に対し $X \backslash A \in \mathcal{A}$

(A3) $A_j \in \Gamma$（$j = 1, 2, \cdots$）に対し $\cup_{j=1}^{\infty} A_j \in \mathcal{A}$

を満たすものを σ 集合体と呼び、$\mathcal{A}$ の要素を可測集合と呼ぶ。

相空間の部分集合 $A \subset M$ の特性関数を $\chi_A(x)$ とおく:

$$\chi_A(x) = \chi_A(q,p) = \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & x \notin A \end{cases} \tag{5.3}$$

汎関数 ω を用いて測度 μ を $\mu(A) \equiv \omega(\chi_A)$ とすると、これは相空間 M 上で定められた測度となることが以下のように示せる。

1. $\mu(\phi) = \omega(\chi_\phi) = 0$

2. $\mu(A) = \omega(\chi_A) \geqq 0$

3. $\mu(M) = \omega(\mathbf{1}) = 1$

4. $A_j \bigcap A_k = \phi \quad (j \neq k), \quad \chi_{\cup_j A_j} = \sum_j \chi_{A_j} \quad$ より $\mu\left(\bigcup_j A_j\right) = \sum_j \mu(A_j)$

Riesz の定理については、f が実数値関数のとき、$A_j = \{x | c_j \leqq f(x) < c_{j+1}\}$ とおくと $f(x) \doteqdot \sum_j c_j \chi_{A_j}(x)$ より

$$\omega(f) \doteqdot \sum c_j \omega(\chi_{A_j}) = \int f(x)\,\mu(dx) \tag{5.4}$$

■

5.2 孤立系における平衡状態の存在と混合性

まず、考えている系が、自律的時間発展によって平衡状態にアプローチする過程について考えよう。このとき、系の状態を表す相空間座標の時間変化は、正準方程式：

$$\dot{q}_j = \frac{\partial \mathcal{H}(q,p)}{\partial p_j} \qquad \dot{p}_j = -\frac{\partial \mathcal{H}(q,p)}{\partial q_j} \qquad (j=1,\ldots,n) \tag{5.5}$$

に支配される。初期点 $\left(q^{(0)},p^{(0)}\right) \equiv x_0$ から出発した運動方程式の解曲線が時刻 t に至る点を $(q(t),p(t)) \equiv x_t$ とすると、解曲線は初期点 x_0 を x_t に対応させる変換 $T_t : x_0 \to x_t$ で表すことができる。T_t は相空間から相空間への写像であり、

(i) $T_0 =$ (恒等写像)

(ii) $T_s \circ T_t = T_{s+t}$

(iii) $T_t x_0$ は t、x_0 について連続

という性質をもつ。この写像 T_t を「流れ」と呼ぶ。以下、重心運動と剛体回転の自由度を凍結し、ハミルトニアン H だけが運動の恒量であるとしよう。

流れ T_t を用いると、物理量 f の時刻 t での関数形は $f \circ T_t$ で与えられるので、その時刻 t での観測値／平均値は

$$\omega_t(f) \equiv \omega(f \circ T_t) = \int_\Gamma f \circ T_t(x)\,\mu(dx) \tag{5.6}$$

となる。また、これにより時刻 t での状態 ω_t が定まり、対応する測度を μ_t とすれば

$$\omega_t(f) = \int_\Gamma f(x)\,\mu_t(dx) \tag{5.7}$$

が成り立つ。関数 f として、相空間上の集合 $A \subset \Gamma$ の特性関数 χ_A を選ぶと測度の時間発展が次式で与えられることが判る：

$$\mu_t(A) = \omega_t(\chi_A) = \int_\Gamma \chi_A \circ T_t(x)\mu(dx) = \int_\Gamma \chi_{T_t^{-1}A}(x)\mu(dx) = \mu(T_t^{-1}A) \tag{5.8}$$

次に、状態の時間発展を考える。物理量は相空間上の関数なので、その時間発展は写像 T を用いて $f_t(q,p) = f(T_t(q,p))$ となる。また状態の時間発展は、$\omega_t(f) \equiv \omega(f \circ T_t)$ と与えられ、Riesz の定理から測度の時間発展則

$$\int_M f(x)\,\mu_t(dx) = \int_M f \circ T_t(x)\,\mu(dx) \tag{5.9}$$

となる。平衡状態であるためには、時間発展について測度は不変でなければならず、T_t の測度が、$\mu_t = \mu$ となる不変測度のときに、平衡状態が記述できる。しかし、一般の力学系は多くの不変測度を持っており、物理的に意味のある不変測度を選択する必要がある。

状態は時間が経てば、平衡状態に変化する：$\omega_t(f) \xrightarrow{t\to\infty} \omega_{eq}(f)$。初期密度$\rho(x)$のとき状態は$\omega(f) = \int_M f(x)\rho(x)\mu_{eq}(dx)$と表せ、時刻$t$での状態は

$$\omega_t(f) = \int_M f\circ T_t(x)\rho(x)\mu_{eq}(dx) \tag{5.10}$$

となる。$t\to\infty$とすれば、平衡状態

$$\omega_{eq}(f) = \int_M f(x)\mu_{eq}(dx) \tag{5.11}$$

に達することから、

$$\lim_{t\to+\infty}\int_M f\circ T_t(x)\rho(x)\mu_{eq}(dx) = \int_M f(x)\mu_{eq}(dx) \tag{5.12}$$

と表すことができる。$g(x)\geqq 0$, $\int_M g(x)\mu_{eq}(dx)\geqq 0$を満たす関数$g(x)$を用いると、確率密度は

$$\rho(x) = \frac{g(x)}{\int_M g(x)\mu_{eq}(dx)} \tag{5.13}$$

となり、平衡状態について以下のことが言える。

$$\frac{\int_M f\circ T_t(x)g(x)\mu_{eq}(dx)}{\int_M g(x)\mu_{eq}(dx)} \xrightarrow{t\to\infty} \int_M f(x)\mu_{eq}(dx) \tag{5.14}$$

$$\lim_{t\to\infty}\int_M f\circ T_t(x)g(x)\mu_{eq}(dx) = \int_M f(x)\mu_{eq}(dx)\int_M g(x)\mu_{eq}(dx) \tag{5.15}$$

つまり、任意の物理量f、gの相関関数がそれぞれの平衡測度によるアンサンブル平均の積に緩和している。この性質は混合性と呼ばれ、平衡状態の存在は混合性の問題に帰着されることが分かる。このように、Liouville方程式に従って時間発展する密度分布関数ρを使えば、熱平衡状態への不可逆過程を記述することができる

線形応答と混合性

次に、鈴木の表記[11]に従い線型応答理論を用いて混合性について考えよう。摂動$A(q,p)f(t)$の下でのハミルトニアンを$\mathcal{H}_0 + A(q,p)f(t)$とする。そのカノニカル分布での物理量Bの平均$\langle B\rangle$は、確率密度$\rho_0 = e^{-\beta\mathcal{H}_0}/Z_0$による平均を$\langle B\rangle_0$として、線形応答理論から

$$\langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \beta\int_{-\infty}^{0} ds\langle \dot{A}(s)B\rangle_0 f(t+s) \xrightarrow{f\to 1} \langle B\rangle = \langle B\rangle_0 + \beta\left\{-\langle AB\rangle_0 + \lim_{t\to+\infty}\langle AB(t)\rangle_0\right\} \tag{5.16}$$

[11]編集部註：ここで鈴木増雄の教科書ないし論文を引用していた。

となる。一方でハミルトニアン $\mathcal{H}_0 + A$ のカノニカル分布での物理量 B の平均は、

$$\langle B \rangle = \langle B \rangle_0 + \beta \{ -\langle AB \rangle_0 + \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0 \} \tag{5.17}$$

となるので、両者が一致するには

$$\lim_{t \to +\infty} \langle AB(t) \rangle_0 = \langle A \rangle_0 \langle B \rangle_0 \tag{5.18}$$

を満たさなければならない。これを満たすためには混合性が必要となることが分かる。

5.3 混合性と動力学

5.3.1 準備

測度とは、ある範囲の集合に非負の実数あるいは ∞ を対応させる集合関数で、次の性質をもつものである。

Def. 12 (σ 代数)
集合 X の部分集合の族 $\mathcal{A}$ が次の条件をみたすとき、X 上の σ-加法族とよぶ。

1. $A \in \mathcal{A} \Rightarrow X \backslash A \equiv A^c \in \mathcal{A}$

2. $A \in \mathcal{A}$ ならば $\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{A}$

3. $X \in \mathcal{A}$

Def. 13 (測度)
$\mathcal{A}$ を X 上の σ 代数とするとき、μ が $(X, \mathcal{A})$ 上の測度であるとは以下が成り立つことである。

1. $\mu(\phi) = 0$

2. $\forall A \in \mathcal{A}$ に対し、$0 \leq \mu(A) \leq \infty$

3. $A_k \in \mathcal{A}$, $A_k \bigcap A_l = \phi$ $(k \neq l)$ ならば、$\mu(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n)$

集合とその上の σ-加法族の組 $(X, \mathcal{A})$ を可測空間、それに測度を加えた $(X, \mathcal{A}, \mu)$ を測度空間という。X 上で定義された実数値関数 $f : X \to \mathbf{R}$ は、任意の実数 α についての集合 $\{x \in X : f(x) > \alpha\}$ が可測集合である時、可測関数と呼ばる。

保測変換
写像 T が測度 μ に関して保測変換であるとは、測度空間 $(X, \mathcal{A}, \mu)$ について、X 上で定義された写像 T が

$$\text{任意の } A \in \mathcal{A} \text{に対し、} T^{-1}A \in \mathcal{A} \text{でかつ、} \mu(T^{-1}A) = \mu(A)$$

を満たすとことである。

例 10

パイこね変換

軌道が互いに重ならず、かつ相空間の面積を保つ簡単な系として、パイこね変換が知られている。図1のように、面積1の正方形 $[0,1)\times[0,1)$ をそれ自身に移す全単射である変換 T_B を考える。

$$T_B(x,y) = \begin{cases} \left(2x, \frac{y}{2}\right) & x \in [0, \frac{1}{2}) \\ \left(2x-1, \frac{y+1}{2}\right) & x \in [\frac{1}{2}, 1) \end{cases} \tag{5.19}$$

また、$0<\alpha<1$ とし f_α は関数方程式の一意解

$$f_\alpha(x) = \begin{cases} \alpha f_\alpha(2x) & x \in [0, \frac{1}{2}) \\ (1-\alpha) f_\alpha(2x-1) + \alpha & x \in [\frac{1}{2}, 1) \end{cases} \tag{5.20}$$

で定義された関数とする。この関数方程式は連続で x について増加関数であるという性質をもち、

$$\mu_\alpha([0,x)\times[0,y)) = f_\alpha(x) f_\alpha(y) \tag{5.21}$$

によって正方形上に測度 μ_α を定めることができる。

$$T_B^{-1}[0,x)\times[0,y) = \begin{cases} [0, \frac{x}{2}) \times [0, 2y) & y \leqq \frac{1}{2} \\ [0, \frac{y}{2}) \times [0,1) \cup [\frac{1}{2}, \frac{1+x}{2}) \times [0, 2y-1) & y > \frac{1}{2} \end{cases} \tag{5.22}$$

であるから、$y \leqq \frac{1}{2}$ と $y > \frac{1}{2}$ のどちらの場合も

$$\mu_\alpha\left(T_B^{-1}[0,x)\times[0,y)\right) = f_\alpha(x) f_\alpha(y) = \mu_\alpha([0,x)\times[0,y)) \tag{5.23}$$

となり、変換によって測度が保たれるので、この測度についてパイこね変換 T_B は保測変換であることが分かる。

5.3.2 エルゴード性と混合性

エルゴード性

保測変換 T がエルゴード的であるとは、$T^{-1}A = A$ を満たす任意の可測集合 $A \in \mathcal{A}$ に対し、$\mu(A) = 0$ あるいは 1 が成立することである。ただし、$(X, \mathcal{A}, \mu)$ を測度空間、T を X 上で定義された保測変換とする。

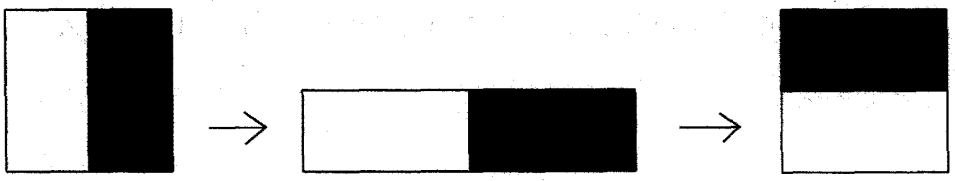

図 3: パイこね変換

Prop. 26
保測変換 T が混合的ならば T はエルゴード的である。

(proof)
$T^{-1}A = A$ を満たす $\forall A \in X$ に対し、関数 f、g を A の特性関数 χ_A とする：

$$f(x) = g(x) = \chi_A(x) \qquad \chi_A(x) = \begin{cases} 1 & x \in A \\ 0 & x \notin A \end{cases} \tag{5.24}$$

ここで、平衡状態と混合性の関係から

$$\int f \circ T_t(x)\, g(x)\, \mu_{eq}(dx) \xrightarrow{t\to\infty} \int f(x)\, \mu_{eq}(dx) \int g(x)\, \mu_{eq}(dx) \tag{5.25}$$

であり、左辺の被積分関数は

$$f \circ T_t(x) = \chi_A \circ T_t(x) = \chi_{T^{-1}A}(x) = \chi_A(x) \tag{5.26}$$

となるので、

$$\int \chi_A(x)\, \chi_A(x)\, \mu(dx) = \int \chi_A(x)\, \mu(dx) = \mu(A) \tag{5.27}$$

右辺も同様にして、$\mu(A)^2$ となる。よって $\mu(A) = \mu(A)^2$ となることから、$\mu(A) = 0$ または 1 が成立する。 ■

Birkhoff の個別エルゴード定理
$(X, \mathcal{A}, \mu)$ を測度空間、T を測度空間 X 上で定義された保測変換とする。このときほとんど全ての X の要素 x に対して、

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n} f\left(T^t x\right) \equiv f^*(x) \tag{5.28}$$

極限が存在する。ここで、$f : X \to C$ は可積分関数である。さらにほとんどすべての X の要素 x に対し、

$$f^*(Tx) = f^*(x) \tag{5.29}$$

が成立し（f^* の不変性）、全空間の測度が有限：$\mu(x) < \infty$ ならば

$$\int_X f(x)\, d\mu(dx) = \int_X f^*(x)\, d\mu(dx) \tag{5.30}$$

等式が満たされる。

つまり、任意の力学量について、その長時間平均の存在が Birkhoff の個別エルゴード定理から保証される。

Prop. 27

保測変換 T がエルゴート的であるとは、任意の可測関数 $f : X \to \mathbf{R}$ について

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n} f\left(T^t x\right) = \int_X f(x)\, \mu(dx) \tag{5.31}$$

がほとんどすべての $x \in X$ について成立することと同値である。

(proof)

エルゴード性から、可測関数 $f : X \to \mathbf{R}$ が、ほとんどすべての $x \in X$ に対し $f(Tx) = f(x)$ を満たすならば、関数 f はほとんどいたるところ定数であることがいえる[12]。これより、$f^*(Tx) = f^*(x) = f^*$ となるような定数 f^* が存在し、Birkhoff の個別エルゴード定理から

$$\int_X f(x)\, d\mu(x) = f^* \int_X d\mu(x) = f^* \tag{5.32}$$

となる。これより

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{t=0}^{n} f\left(T^t x\right) = f^* = \int_X f(x)\, \mu(dx) \tag{5.33}$$

となり、(5.31) が得られる。 ■

これは初期位相点を x、時刻 t の後の位相点を $T^t x$ として、Lebesgue 測度ゼロの集合を除く全ての初期位相点に関して、その刻々の時刻の位相点の関数 f の時間平均をとり、$n \to \infty$ にしたときに、ある一定の極限値があり、そのときの極限値が相空間平均と等しいことを示している。また、関数 f の長時間平均が平衡状態の値に近づかないような、X の初期位相点は実際上存在しないことも主張している。

混合性

$(X, \mathcal{A}, \mu)$ を規格化された測度 μ をもつ測度空間、T を X 上で定義された保測変換としたとき、任意の可測集合 $A, B \in \mathcal{A}$ に対し、

$$\lim_{t\to\infty} \mu\left(A \cap T^{-t} B\right) = \mu(A)\, \mu(B) \tag{5.34}$$

が成立するとき、変換 T は混合的である。混合性はエルゴード性より強い概念であり、保測変換 T が混合的なら、T はエルゴード的と言える。

[12]編集部註：ここで小路口の論文を引用していた。

5.3.3 特異測度

エルゴード的な系では長時間平均から不変測度が一意的に決まるように見えるが、一般的に多数のエルゴード測度を持つ力学系が存在し、測度によって見えてくる物理現象も異ってくる。特異測度とは μ_α と $\mu_{\alpha'}$ が互いに特異的な場合、$\mu_\alpha(A)=0$、$\mu_{\alpha'}(A)\neq 0$ となる A と $\mu_\alpha(B)=0$、$\mu_{\alpha'}(B)\neq 0$ となる B といった異なる測度が存在してしまうことである。特異測度の例として、Cantor 測度がある。

例 11
特異測度の例

Cantor 集合は $[0,1]$ を三等分してその中央の開区間を取り除き、次に残る閉区間を各三等分して中央の開区間を取り除き、以下同様のことを繰り返してできる集合である。f_c を次の方程式の解として定まる Cantor 関数とし

$$f_c(x)=\begin{cases}\frac{1}{2}f_c(3x) & x\in[0,\frac{1}{3})\\ \frac{1}{2} & x\in[\frac{1}{3},\frac{2}{3})\\ \frac{1}{2}f_c(3x-2)+\frac{1}{2} & x\in[\frac{2}{3},1)\end{cases} \tag{5.35}$$

測度を $\mu_c([0,x))=f_c(x)$ と定める。C を Cantor 集合とすると

$$C=[0,1]\setminus\left\{\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)\cup\left(\frac{1}{9},\frac{2}{9}\right)\cup\left(\frac{7}{9},\frac{8}{9}\right)\cup\ldots\right\} \tag{5.36}$$

となり、

$$\mu_c\left(\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)\right)=f_c\left(\frac{2}{3}\right)-f_c\left(\frac{1}{3}\right)=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}=0 \tag{5.37}$$

となるので、Cantor 集合に対する Cantor 測度は

$$\begin{aligned}&\mu_c\left(\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)\cup\left(\frac{1}{9},\frac{2}{9}\right)\cup\left(\frac{7}{9},\frac{8}{9}\right)\cup\ldots\right)\\ =\quad&\mu_c\left(\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)\right)+\mu_c\left(\left(\frac{1}{9},\frac{2}{9}\right)\right)+\cdots=0\end{aligned} \tag{5.38}$$

他方、Cantor 集合 に対する Lebesgue 測度は

$$\begin{aligned}&\mu_L\left(\left(\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right)\cup\left(\frac{1}{9},\frac{2}{9}\right)\cup\left(\frac{7}{9},\frac{8}{9}\right)\cup\ldots\right)=\frac{1}{3}+\frac{2}{3^2}+\cdots\\ =\quad&\frac{1}{3}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{2}{3}\right)^n=1\end{aligned} \tag{5.39}$$

また $\mu_c([0,1))=f_c(1)=1$、$\mu_L([0,1))=1$ なので

$$\mu_c=\mu_c([0,1))-\mu_c(C^c)=1 \tag{5.40}$$

$$\mu_L=\mu_L([0,1))-\mu_L(C^c)=0 \tag{5.41}$$

つまり、μ_c と μ_L は互いに特異的であり、特異測度が存在することが分かる。これは、混合的定常状態は一意的には決まらず、様々な安定した定常状態が存在することを示している。多くの力学系には複数の不変測度が存在し、測度によって見えてくる物理現象も異なる。つまり、望ましい性質を持った不変測度を決定することが重要となる。

5.4 Pollicott-Ruelleの共鳴

指数関数的不安定性を持つ拡大写像あるいは公理A写像（≅双曲系）Tについて、μを平衡測度とし、滑らかな関数f,gについて

$$\langle f \circ T^t g\rangle_\mu = \langle f\rangle_\mu \langle g\rangle_\mu + \sum_j \lambda_j^t \Psi_j(f)\,\Phi_j(g) + W_t \tag{5.42}$$

であり、$\langle f\rangle_\mu = \int_X f(x)\,\mu(dx)$ とする。ただし、

$$|\lambda_j| \leqq 1 \qquad W_t \lambda_j^{-t} \to 0 \quad (t \to +\infty) \tag{5.43}$$

とする。Ψ_j,Φ_j は超関数で、Koopman演算子Uの、固有値 λ_j に対する固有関数である。つまり、関数f,gに対し、次式が成り立つ。

$$\Psi_j(Uf) = \lambda_j \Psi_j(f) \tag{5.44}$$

$$\Phi_j\left(U^\dagger g\right) = \lambda_j \Phi_j(g) \tag{5.45}$$

Koopman演算子Uは $Uf(x) = f(Tx)$、$U^\dagger$ は $\langle Uf, g\rangle_\mu = \langle f, U^\dagger g\rangle_\mu$ で定義される。相関関数 $\langle U^t f, g\rangle_\mu$ の時間tについてのFourier変換を考えると $i\log\lambda_j$ という混合率に相当する周波数で極を持つ。このため、これをPollicott-Ruelleの共鳴と呼ぶ。

6 開いた多重パイこねモデルの非平衡統計力学

ここでは文献[13]に従い, 開いた多重パイこねモデルでの相対エントロピーによるエントロピー生成を求め、粗視化エントピー生成と比較する。粗視化エントロピーは粗視化されたセルによって決められた系の情報を測定し、その増加は粗視化された位相空間からより細かい位相空間への情報流によると考えられる。また相対エントロピーは時刻tでの状態と初期状態からの差で連続的に変移していることを示している。二つのエントロピー生成は物理的に異なる意味を持つが、以下では巨視的な極限では一致していることを示す。

[13]編集部註：ここで lecture という文献を引用していた。

6.1 エネルギー座標を持つ多重パイこねモデル

エネルギー座標を持つ多重パイこねモデルはLorentz気体の回帰写像を抽象化したものである。多重パイこねモデルの相空間は図2に示すような3次元セルの繋がりとして考えられ、

$$\Gamma\left\{(n,x,y,E)\,|E\in\mathcal{R}^{+},0<x\leqq a_E,0<y\leqq a_E\right\} \tag{6.1}$$

$\mathcal{Z}$は整数、$\mathcal{R}^{+}$は正の実数、$a_E=ae^E$でaは正の定数で定義される。Γ_nはn番目のセルとして考え、変数Eは周期的Lorentz気体にある粒子の運動エネルギーに対応し、a_E^2は各セルにおける運動エネルギーの面積を表していると考えればよい。

ここでは以下のような写像Bを考える。

$$B\,(n,x,y,E)=\begin{cases}\left(n-1,\frac{x}{l^{+}e^{F}},l^{+}e^{F}y,E+F\right) & \left(0<\frac{x}{a_E}\leqq l^{-}\right)\\ \left(n,\frac{x-l^{-}a_E}{s},sy+l^{+}a_E,E\right) & \left(l^{-}<\frac{x}{a_E}\leqq 1-l^{+}\right)\\ \left(n+1,\frac{x-\left(1-l^{+}\right)a_E}{l^{-}e^{-F}},\right.\\ \qquad\left\{l^{-}y+\left(1-l^{-}\right)a_E\right\}e^{-F},E-F\right) & \left(1-l^{+}<\frac{x}{a_E}\leqq 1\right)\end{cases} \tag{6.2}$$

ここで、Fは加えられた一定の外場とし、$l^{\pm}\equiv 2l/\left(1+e^{\pm 2F}\right)$は$n$番目のセルから$n\pm 1$番目のセルへの遷移率で、$s\equiv 1-2l\quad(0<l\leqq 1/2)$は同一のセルへ移動する自己遷移率である。

次に、図3のように開放系において、長さ$N+1$の多重パイこね変換を、自由運動が定義された無限に延びた格子上に埋め込むことを考える。写像Bは$n\in[1,N-1]$のときで、自由運動部分はずらし写像によってモデル化される。つまり、

$$B\,(n,x,y,E)=\begin{cases}(n-1,x,y,E) & \left(0<\frac{x}{a_E}\leqq l_f\right)\\ (n,x,y,E) & \left(l_f<\frac{x}{a_E}\leqq 1-l_f\right)\\ (n+1,x,y,E) & \left(1-l_f<\frac{x}{a_E}\leqq 1\right)\end{cases} \tag{6.3}$$

で与えられ、$n\leqq -2$の範囲で$l_f=l^{+}$、$n\geqq N+2$で$l_f=l^{-}$となる。$n=-1,0,N,N+1$の格子点は結合部にあたり異なる変換が必要になる[14]。この系は無限に拡がった自由運動する系に有限長の双曲系が埋め込まれているのでカオス散乱系となる。

6.2 Poisson Suspension

同種粒子が有限の密度を持つように分布している系の運動状態を記述しよう。Boltzmann流の見方で、一粒子相空間Γの粒子分布を考える。各粒子の空間Γ内での位置を$z_1,z_2\cdots\in\Gamma$とすると、点列

$$\zeta\equiv\{z_1,z_2\cdots\}\qquad z_j=(n_j,x_j,y_j,E_j)\in\Gamma\qquad(j=1,2,\cdots) \tag{6.4}$$

[14]編集部註：ここでta1という文献を引用していた。

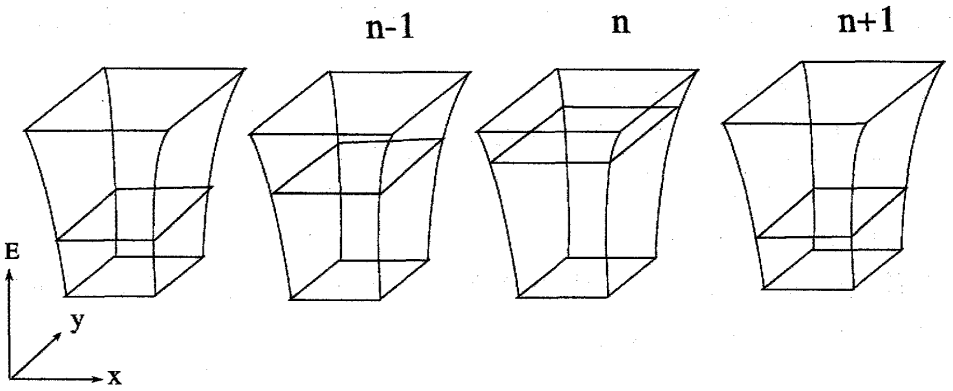

図 4: 相空間 Γ の概略図、断面は運動エネルギーをあらわす。

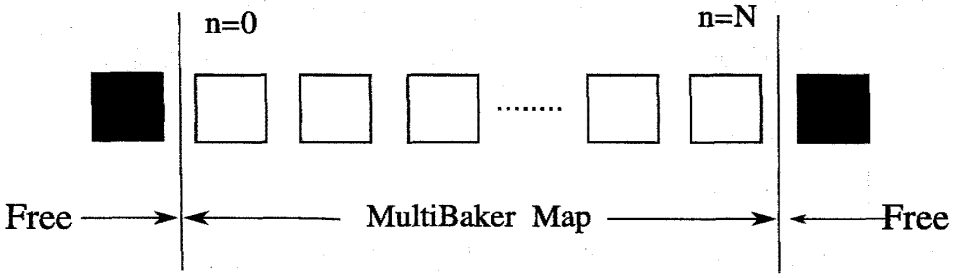

図 5: 定エネルギー面における開いた多重パイこね変換の全体図。

が系の状態を表す。同種粒子系を考えているので、順序が異なる点列 ζ は区別せず、いくつかの z_j が一致する場合も含める。また粒子数密度はどこでも有限であるとし、大きさが有限の集合 $K \subset \Gamma$ に対し、元の数が有限の所に無限個集積しないとする：$\#(K \cap \zeta) < +\infty$ (ただし $\#$ は集合の要素の個数を表す)。そしてこれらの条件を満たす点列 ζ が相空間 X を作る。

統計的状態を見るために、配位の集合 X 上で定義される確率測度を考える。有限集合 K 内に粒子が m 個ある配位からなる集合を

$$C_{K,m} = \{\zeta \in X | \#(\zeta \cap K) = m\} \tag{6.5}$$

とする。$C_{K,m}$ の集合を含む X 上の確率測度 P は

$$P(C_{K,m}) = \frac{\nu(K)^m}{m!} e^{-\nu(K)} \tag{6.6}$$

と表され、P を Poisson Suspension と呼ぶ。$\nu(K)$ は K 内に見出される平均粒子数を表している。例えば、体積 Ω の箱を考え、体積 Ω の中のある領域 K 内に含まれる平均粒子数を求めてみよう。この箱の中には粒子が一様に N 個含まれ、その粒子数 N と体積 Ω は非常に大きいとし、その比である密度 $\rho = N/\Omega$ は一定であるとする。密度 ρ を固定し、粒

子数 N と体積 Ω を ∞ の極限にしたとき K 内に m 個粒子を見いだす確率は

$$\begin{aligned} & K\text{内に}m\text{個粒子を見いだす確率} \\ = \quad & \frac{N!}{m!\,(N-m)!}\left(1-\frac{K}{\Omega}\right)^{N-m}\left(\frac{K}{\Omega}\right)^{m} \simeq \frac{(\rho K)^m}{m!}e^{-\rho K} \end{aligned} \tag{6.7}$$

となり、粒子数 m が Poisson 分布に従っている。Poisson Suspension はこの例のような対応関係として考えられる。また、有限集合 K 内に粒子が m 個、K' に m' 個ある配位は、$K\cap K'=\phi$ なら Poisson Suspension P は

$$P\left(C_{K,m}\cap C_{K',m'}\right)=P\left(C_{K,m}\right)P\left(C_{K',m'}\right) \tag{6.8}$$

を満たす。

一粒子の関数 $A(z)$ に対して、配位 $\zeta=\{z_1,z_2,\cdots\}$ の関数を $A(\zeta)=\sum_j A(z_j)$ とし、A の配位全体についての平均 $\int_X A(\zeta)\,dP(\zeta)$ を考えよう。一粒子の関数 $A(z)$ は特性関数

$$\chi_{K_\lambda}(z)=\begin{cases}1 & z\in K_\lambda \\ 0 & z\notin K_\lambda\end{cases} \tag{6.9}$$

を用いて、$A(z)=\sum_\lambda a_\lambda\chi_{K_\lambda}(z)$ となり、配位関数に対しては、

$$A(\zeta)=\sum_\lambda a_\lambda\sum_j \chi_{K_\lambda}(z_j) \tag{6.10}$$

である。ここで、$\sum_j\chi_{K_\lambda}(z_j)$ は K_λ 内に粒子が m 個あるとき値 m をとることを意味する。各 K について $X=\cup_m C_{K,m}$ とすれば

$$\begin{aligned} \int_X\sum_j\chi_{K_\lambda}(z_j)\,dP(\zeta) \quad &= \sum_m\int_{C_{K,m}}\chi_{K_\lambda}(z_j)\,dP(\zeta)=\sum_m m\int_{C_{K,m}}dP(\zeta) \\ &= \sum_m mP\left(C_{K,m}\right)=\sum_m m\frac{\nu(K)^m}{m!}e^{-\nu(K)} \\ &= \nu(K) \end{aligned} \tag{6.11}$$

よって、A の配位全体についての平均は

$$\int_X A(\zeta)\,dP(\zeta)=\sum_\lambda a_\lambda\nu(K)=\int_\Gamma A(z)\,d\nu(z) \tag{6.12}$$

という関係になる。Poisson Suspension $P(\zeta)$ の時間発展を考えると

$$\int_X A(\zeta)\,dP_t(\zeta)\equiv\int_X A_t(\zeta)\,dP(\zeta)=\int_\Gamma A\left(T^t z\right)d\nu(z)=\int_\Gamma A(z)\,d\nu_t(z) \tag{6.13}$$

ここで、$\nu_t(K)\equiv\nu\left(T^{-t}K\right)$ であり、(6.12) と (6.13) の比較をすると Poisson Suspension の時間発展は以下のように表せる。

$$P_t\left(C_{Km}\right)=\frac{\nu_t(K)^m}{m!}e^{-\nu_t(K)} \tag{6.14}$$

6.3 定常状態の構成

初期測度 ν_0 が粒子数密度 $\rho_0(n,x,y,E)$ で Lebesgue 測度について絶対連続の場合、全エネルギー E が一定での累積分布関数

$$G_t(n,x,y,E) \equiv \int_0^y dy' \rho_0\left(B^{-t}(n,x,y',E-nF)\right) \tag{6.15}$$

を用いるのが便利である。運動エネルギーは正であるので、$F>0$ であるなら、全エネルギーは $E \geqq (N+1)F$ を満さなければならない。

粒子数密度の時間発展 $\rho_{t+1} = \rho_t \circ B^{-1}$ は G_t の時間発展の式を与え、連続の式は

$$\Pi_{t+1}(n,E) - \Pi_t(n,E) = J^N_{n+1|n}(t,E) - J^N_{n-1|n}(t,E) \tag{6.16}$$

となる。$\Pi_t(n,E)$ は n 番目のセルに含まれるエネルギーあたりの粒子数

$$\Pi_t(n,E) \equiv \int_0^{a_n(E)} dx G_t(n,x,a_n(E),E) \tag{6.17}$$

で、$a_n(E) = a(E)e^{-nF}$、$J^N_{n-1|n}(t,E)$ は $n-1$ 番目のセルから n 番目のセルへのエネルギーあたりの粒子流である。

次に粒子が左右の自由運動部分で、Lebesgue 測度について均一となるような、初期状態を考える。$(-\infty,-1]$、$[N+1,+\infty)$ の格子点上での初期粒子数密度をそれぞれ、ρ_- 及び ρ_+ とすれば

$$\rho_0(n,x,y,E) = \rho_-(E) \equiv e^{-\beta_L(E-\mu_L)} \qquad (n \leqq -1) \tag{6.18}$$

$$\rho_0(n,x,y,E-(N+2)F) = \rho_+(E) \equiv e^{-\beta_R(E-\mu_R)} \qquad (n \geqq N+1) \tag{6.19}$$

β_L、β_R は左右での逆温度、μ_L、μ_R は化学ポテンシャルとする。そして、これらの初期状態からの漸近状態として、定常状態を求める。

初期分布密度 ρ_0 が x について区分的に連続微分可能なら、累積分布関数 G_t は $t \to \pm\infty$ の極限で、定常分布 G_∞ に収束する。$0 \leqq n \leqq N$ の範囲では、$G_t(n,x,y,E)$ は指数関数的に収束し、G_∞ の状態で、各セルのエネルギーあたりの平均粒子数は

$$\Pi_{+\infty}(n,E) = a_E^2(\rho_+(E)-\rho_-(E))\frac{e^{-2(N+1)F}\left(1-e^{-2(n+1)F}\right)}{1-e^{-2(N+2)F}} + a_E^2\rho_-(E)e^{-2nF} \tag{6.20}$$

で与えられ、$F \neq 0$ なら座標 n の指数関数になり、$F=0$ なら n の線型な関数となる。

エネルギー当りの粒子流は

$$\begin{aligned} J^N_{n|n+1}(+\infty,E) &= -l\{\Pi_{+\infty}(n+1,E) - \Pi_{+\infty}(n,E)\} \\ &\quad -l\tanh F\{\Pi_{+\infty}(n+1,E) + \Pi_{+\infty}(n,E)\} \\ &= -lKa(E)^2(\rho_+(E)-\rho_+(E)) \end{aligned} \tag{6.21}$$

Kは外場F、システムサイズNに依存する正の定数とし、第一項は散逸流、第二項はドリフト流にそれぞれ対応する。これより、上式は格子点nから$n+1$への粒子流のFickの法則を満たしている。

定常状態分布$G_{+\infty}$はxに依存せず、以下のようになる。

$$\int_0^y dy' \rho_{+\infty}(n,x,y',E-nF) = G_{+\infty}(n,y,E) = \Pi_{+\infty}(n,E)\frac{y}{a_{E,n}^2} - \frac{J_{n|n+1}^{+\infty}(E)}{la_{E,n}}\varphi_n\left(\frac{y}{a_{E,n}}\right) \tag{6.22}$$

ここで、$\varphi_n(\eta)$はフラクタル関数であり、定常状態分布$G_{+\infty}$も同様にフラクタルになる。

6.4 粗視化エントロピー

Gaspard [15]、Gilbert、Dorfman [16]らによって、巨視的なエントロピー生成は粗視化エントロピー生成によって与えらえることが主張された。これは定常状態へのアプローチがフラクタル構造の形成と同じであり、フラクタルへの情報流出をエントロピー生成としている。

$\{X_\lambda\}$を相空間のX分割とする（$X = \cup_\lambda X_\lambda$、$\lambda \neq \lambda'$のとき$X_\lambda \cap X_{\lambda'} = \emptyset$）。このとき粗視化エントロピーを

$$S_{cg} = \sum_\lambda P(X_\lambda) \ln \frac{M(X_\lambda)}{P(X_\lambda)} \tag{6.23}$$

とする。MはLebesgue測度に対し規格化されていないPoisson Suspensoinとする。エントロピーS_{cg}は分割$\{X_\lambda\}$についての位相の複雑性を意味している。

Poisson Suspensoin P_tによって描写される局所的な粗視化エントロピーを考える。$\{D_j\}$を一粒子相空間Γの分割とする。分割$\{D_j\}$は以下の三つの条件をみたす。

(a) $\Gamma_n = \cup_{D_j \subset \Gamma_n} D_j$

(b) $D_j \subset \Gamma_n$に対し$BD_j \subset \Gamma_n$または$\Gamma_{n\pm1}$

(c) $BD_j \subset \Gamma_n$に対し$D_j \subset \Gamma_n$または$\Gamma_{n\pm1}$

各セルΓ_nの配位の多様性を反映する相空間分割を$\{X_{\{m_j\}}\}$とすると、$\{X_{\{m_j\}}\} = \cap_{D_j \subset \Gamma_n} C_{D_j,m_j}$ $(m_j = 0,1,2,\cdots)$、$C_{K,m} \equiv \{\zeta \in X | \#(\zeta \cap K) = m\}$となる。分割$\{X_{\{m_j\}}\}$

[15]編集部註：ここで彼の文献を引用
[16]編集部註：ここで彼の文献を引用

に対する粗視化エントロピーは Γ_n での状態 P_t のエントロピーとみなすことができ、Γ での Lebesgue 測度を μ_0 とすると

$$P_t\left(\{X_{\{m_j\}}\}\right) = \prod_{D_j\subset\Gamma_n} \frac{\nu_t\left(D_j\right)^{m_j}}{m_j!} e^{-\nu_t(D_j)} \tag{6.24}$$

$$M\left(\{X_{\{m_j\}}\}\right) = \prod_{D_j\subset\Gamma_n} \frac{\mu_0\left(D_j\right)^{m_j}}{m_j!} \tag{6.25}$$

となる。ν_t は平均粒子数を表す測度であり、M は規格化されていないとする。

このとき、粗視化エントロピーは

$$S_{cg}\left(P_t,\Gamma_n,\{D_j\}\right) = \sum_{\{m_j\}} P\left(X_{\{m_j\}}\right) \ln \frac{M\left(X_{\{m_j\}}\right)}{P\left(X_{\{m_j\}}\right)} = \sum_{D_j\subset\Gamma_n} \nu_t\left(D_j\right) \ln \frac{\mu_0\left(D_j\right)}{\nu_t\left(D_j\right)} + \nu_t\left(\Gamma_n\right) \tag{6.26}$$

と表せ、Γ_n について示量的となる。(b) と (c) の条件から保存則

$$S_{cg}\left(P_{t+1},\Gamma_n,\{D_j\}\right) - S_{cg}\left(P_t,\Gamma_n,\{D_j\}\right) = J^S_{n-1|n}\left(t\right) - J^S_{n|n+1}\left(t\right) + \Delta_i S_{cg}\left(t,\Gamma_n,\{D_j\}\right) \tag{6.27}$$

となる。ここで、$J^S_{n-1|n}\left(t\right)$ はエントロピー流、また $\Delta_i S_{cg}\left(t,\Gamma_n,\{D_j\}\right)$ はエントロピー生成で、

$$\Delta_i S_{cg}\left(t,\Gamma_n,\{D_j\}\right) = \sum_{D_j\subset\Gamma_n} \nu_{t+1}\left(D_j\right) \ln \frac{\mu_0\left(D_j\right)}{\nu_{t+1}\left(D_j\right)} - \sum_{BD_j\subset\Gamma_n} \nu_{t+1}\left(BD_j\right) \ln \frac{\mu_0\left(BD_j\right)}{\nu_{t+1}\left(BD_j\right)} \tag{6.28}$$

と表せる。粗視化エントロピー生成 $\Delta_i S_{cg}\left(t,\Gamma_n,\{D_j\}\right)$ は非負で、粗視化されたセルの極限ではゼロとなる。また、多重パイこね変換のあたりでは、現象論的に

$$\Delta_i S_{cg}\left(+\infty,\Gamma_n,\{D_j\}\right) \simeq \int_{(N+1)F}^{\infty} dE \frac{J^N_{n|n+1}\left(+\infty,E\right)^2}{l\Pi_{+\infty}\left(n,E\right)} > 0 \tag{6.29}$$

となる[17]。

定常状態分布のフラクタル性は粗視化エントロピー生成が引き起こしていると考えられ、もし粗視化されたセルのサイズがフラクタル分配の最小サイズより小ければ、粗視化エントロピーは複雑性を見ることは出来なくなり一定な値となる。

次に巨視的極限について考える。サイト n、時刻 t をそれぞれ、$n = L_\xi X$、$t = L_\tau T$ とスケールし直し、極限 $L_\xi, L_\tau \to \infty$ で、拡散係数 $D = lL_\tau/L_\xi^2$ は一定であるとする。単位長さあたりの場の力を $\mathcal{F} = FL_\xi$、系の長さを $\mathcal{L} = NL_\xi$、エネルギーあたりの密度を

[17]編集部註：ここで Tasaki-Gaspard の論文を引用

$\pi_{+\infty}=\Pi_{+\infty}L_\xi$、単位時間、単位エネルギーの定常状態での流速$j=L_\tau J^N_{n|n+1}$は1であるとする。そのとき、定常状態でのエントロピー生成$\sigma^{st}_{cs}(X)$は

$$\begin{aligned}\sigma^{st}_{cs}(X) &= \lim_{L_{L_\xi,\tau}\to\infty D:\text{fixed}} L_\tau L_\xi \Delta_i S_{cs}(+\infty,\Gamma_n,\{D_j\}) \\ &= \int_{\mathcal{FL}}^{+\infty} dE \frac{j(E)^2}{D\pi_{+\infty}(X,E)} \end{aligned} \tag{6.30}$$

となり、流速$j(E)$はXに依存せず、以下のようになる。

$$j(E)=-D\left(2\mathcal{F}\pi_{+\infty}(X,E)+\frac{\partial\pi_{+\infty}(X,E)}{\partial X}\right) \tag{6.31}$$

6.5 相対エントロピー

相対エントロピーは初期状態からのずれの尺度として与えられ、また量子系の場合と密接に関係している。状態P_t、P_0の間の相対エントロピー$S(P_t,P_0)$は

$$S(P_t,P_0)=\int_X dP_t(\zeta)\log\left(\frac{dP_0}{dP_t}(\zeta)\right) \tag{6.32}$$

として与えられ、$\frac{dP_0}{dP_t}$は確率P_tに対する初期確率P_0の密度である。初期密度ρ_0がいたるところで、正の値をとるとするなら、

$$S(P_t,P_0)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\left\{\int_{\Gamma_n} dEdxdy\rho_t(n,x,y,E)\log\frac{\rho_0(n,x,y,E)}{\rho_t(n,x,y,E)}+\nu_t(\Gamma_n)-\nu_0(\Gamma_n)\right\} \tag{6.33}$$

となる。

定常状態における相対エントロピーの負の導関数は熱力学の定常状態のエントロピー生成$\Delta_i S$と一致し

$$\begin{aligned}\Delta_i S_R(+\infty) \equiv & -\lim_{t\to+\infty}\{S(P_{t+1},P_0)-S(P_t,P_0)\} \\ = & \beta_L J^L_q(+\infty)+\beta_R J^R_q(+\infty)\end{aligned} \tag{6.34}$$

$J^L_q(t)$と$J^R_q(t)$は両端の自由運動部分から有限の多重パイこね変換への粒子流である。

$$J^L_q(t)=\int_{(N+1)F}^{+\infty} dE(E-\mu_L)J^N_{-1|0}(t,E) \tag{6.35}$$

$$J^R_q(t)=-\int_{(N+1)F}^{+\infty} dE(E-\mu_R)J^N_{N|N+1}(t,E) \tag{6.36}$$

巨視的な極限では

$$\sigma^{st}_R=\lim_{L_\xi,L_\tau\to\infty D:\text{fixed}} L_\tau\Delta_i S_R(+\infty)=\int_{\mathcal{LF}}^{+\infty} dEj(E)\left\{2\mathcal{FL}+\log\frac{\pi_{+\infty}(\mathcal{L},E)}{\pi_{+\infty}(0,E)}\right\} \tag{6.37}$$

相対エントロピー生成 σ_R^{st} は粗視化エントロピー生成密度の空間積分として表される。

$$\int_0^{\mathcal{L}} dX \sigma_{cg}^{st}(X) = \sigma_R^{st} \tag{6.38}$$

つまり、粗視化エントロピー生成と相対エントロピー生成の物理的意味が異なるにも関らず、巨視的な極限では両者が一致することが分かる。[18]

[18]編集部註：著者はここで引用文献を紹介するつもりだったようであるが、そのファイルは発掘できていない。本講義ノートは実際の講義内容と比較しても半分程の内容であると感じられる。