数理解析研究所講究録
第 367 巻 1979 年 268-287

散逸演算子と変分原理

京大理　物理　長谷川　洋

§1. 概略

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

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

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

(2)　$\mathrm{Re}\,\lambda > 0$　$\lambda \in C$ に対し $(\lambda - A)^{-1}$ が X 上有界

なることである。

(量子)統計力学では，密度行列の時間発展はその表わす力学

系の物理量の時間発展に移して扱われる(Schrödinger描像→Heisenberg描像,久保数授の話)が,その場合物理量の表わす空間では代数的な演算が自由に行われる必要があり,上述の古典的縮小半群では不十分(古典的可換量に限定しても)となる。この要請に応じて最近「動力学半群」dynamical semigroup の研究が進展しつつある。これは1960年代スピン共鳴の理論や量子光学(レーザー理論)の発展によって散逸を伴う量子系のダイナミックスを厳密化する必要から生じたもので,Sudarshanら[4]とKossakowski[5]とが独立に始め,Davies[6,7] Ingardenら[8],Lindblad[9],Goriniら[10],Spohn[11] Frigerio[12]などの仕事が現れた。非可換量の上のdynamical mapの特徴は正の量を正の量に写すというマルコフ性に加えそれよりも強い「完全正値性」が要請されそれが開放系のダイナミックスに適合する。現在のところ殆どgeneratorが有界な場合に限られていて未完成なものである(§2,§3に略述).

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

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

§2. 動力学半群 (dynamical semigroup)

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

$$P(H) = \{ \rho \in B(H) \quad \rho = \rho^+ (\text{self-adjoint}) \geq 0,\ \mathrm{Tr}\,\rho = 1 \}$$

(密度行列の全体)

$$\mathbb{L}^1(H) = \{ \rho \in B(H) \quad \|\rho\|_1 = \mathrm{Tr}|\rho| = \textstyle\sum_n |(x_n, \rho x_n)| < \infty \}$$

(トレース・クラス)

$$\mathbb{L}^\infty(H) = \{ A \in B(H) \quad \mathrm{Tr}(\rho|A|) < \infty \quad \forall \rho \in P(H) \}$$

(トレース・ノルムに関する Banach 部分空間上連続汎関数の全体)

を用いる。

$\mathbb{L}^\infty(H)$ は $\mathbb{L}^1(H)$ の dual Banach space で，実際は $\mathbb{L}^\infty(H) = B(H)$ となる。又，$\mathbb{L}^1_+(H)$，$\mathbb{L}^\infty_+(H)$ でそれぞれ $\mathbb{L}^1(H)$, $\mathbb{L}^\infty(H)$ の正の要素全体

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

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

(i)　$\Lambda_t \mathbb{L}^1_+(H) \subset \mathbb{L}^1_+(H)$　（正値トレース・クラスをそれ自身にうつす）

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

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

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

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

<u>remark 2.</u>　(i) および (ii) の条件は $\mathbb{L}^1_+(H)$ すなわち正の要素に対する条件として書かれたが，これを $\mathbb{L}^1(H)$ に対する条件として同値に表わすことも出来，次のようになる。

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

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

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

然的に正値性 (i) が従うことを意味するものである。以下略証

(i), (ii) $\Longrightarrow$ (i′), (ii′)

$\rho=\rho^{+}\in L^1(H)$ を $\rho=\rho_+-\rho_-$ ($\rho_\pm\in L^1_+(H)$) のように二つの正要素に分解すると (i), (ii) の仮定のもとに $\|\Lambda_t\rho_\pm\|_1 =$ $\|\rho_\pm\|_1 = \mathrm{Tr}\,\rho_\pm$,

$$\mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho) = \mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho_+)-\mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho_-) = \mathrm{Tr}\,\rho_+ - \mathrm{Tr}\,\rho_- = \mathrm{Tr}\,\rho$$

$$\|\Lambda_t\rho\|_1 = \|\Lambda_t\rho_+-\Lambda_t\rho_-\| \le \|\Lambda_t\rho_+\|_1 + \|\Lambda_t\rho_-\|_1 = \|\rho_+\|_1+\|\rho_-\|_1 = \|\rho\|_1$$

(i′), (ii′) $\Longrightarrow$ (i), (ii)

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

(ii′) より $\|\Lambda_t\rho\|_1 \le \|\rho\|_1$ であるが $\rho\ge 0$ ならば これは $=\mathrm{Tr}\,\rho$, そして

(i′) より $= \mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho) \le \mathrm{Tr}|\Lambda_t\rho|$

すなわち $\|\Lambda_t\rho\|_1 = \mathrm{Tr}|\Lambda_t\rho| \le \mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho) \le \mathrm{Tr}|\Lambda_t\rho|$ より

不等号は等号となる: $\mathrm{Tr}(\Lambda_t\rho)=\mathrm{Tr}|\Lambda_t\rho|$ $\therefore$ $\Lambda_t\rho\ge 0$. 以上

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

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

(ii)* $\|\Lambda_t^* A\|_\infty \le \|A\|_\infty \left(=\sup_{\|\rho\|_1=1}\|A\rho\|_1\right)$

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

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

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

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

Ingarden-Kossakowski はさらに $\{\Lambda_t\}$ の generator L, $\Lambda_t = e^{tL}$, の満すべき特徴 および L による Λ_t の生成條件を論じたがそれは満足なものではなかつた。これを開放系の物理として有意義な形式にとらえたのは Lindblad である。Λ_t (および Λ_t^*) は前述のように正値性を持つが, 非可換量の量子的散逸系では単なる正値性では不十分で「完全正値性」を持つべきであり, 又それに応じてその generator も完全散逸性と稱する不等式に従う。

<u>定義</u> C^*-代数 $\mathfrak{A}_1$ から C^*-代数 $\mathfrak{A}_2$ への正値写像 φ; $X \in \mathfrak{A}_1$ $\varphi(X) \in \mathfrak{A}_2$, $X \geq 0 \Rightarrow \varphi(X) \geq 0$, が完全正値とは M_n $(n=1,2,\cdots)$ を $n\times n$ 行列代数として $X_n \in \mathfrak{A}_1 \otimes M_n$, $\varphi_n(X_n) \in \mathfrak{A}_2 \otimes M_n$, $X_n \geq 0$ ならば $\varphi_n(X_n) \geq 0$, すなわち φ_n がすべての n に関し正値写像になることである。

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

<u>定理</u> (Lieb-Ruskai) C^*-代数 $\mathfrak{A}_1$ から W^*-代数 $\mathfrak{A}_2$ への完全正値写像 φ, $A, B \in \mathfrak{A}_1$ に対し

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

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

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

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

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

これより $\qquad |\varphi(B^*A)|^2\leq \varphi(A^*A)\varphi(B^*B)$

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

すなわち，Schwarz の不等式であって，φ が C-数の場合の類推に従うが，若し φ が互いに非可換の場合には λ の1次の部分を上の様に絶対値と phase の部分にわけて扱うことが出来ないので，簡単に不等式を導くことが出来ないのであるが，「完全正値」という条件があれば Lieb-Ruskai の形に不等式が成立するのである。従って

系　可換 C^*-代数に対しては完全正値性と単なる正値性とは同じであり，Lieb-Ruskai 不等式は

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

で表わされる。

「完全正値」という概念が開放系統計力学において本質的なものであることは次のような事実から知られる(Lieb-Ruskai)。

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

度の消去を次のような "partial trace" によって行うとする。

(簡単のため H_2 は有限次元とする)

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

$$X \in \mathcal{B}(H_1 \otimes H_2) \qquad T_2(X): \mathcal{B}(H_1 \otimes H_2) \to \mathcal{B}(H_1)$$

$\{e_n\}$: H_2 の正規直交系

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

<u>定理</u> (Lindblad)[9] dynamical semigroup の dual space における表現 $\{\Lambda_t^*\}$ が條件 $(i)^*$—$(v)^*$ および完全正値性に従うとする。その generator L^*; $\Lambda_t^* = e^{tL^*}$, は

a) $\quad L^* 1 = 0$

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

を満足する。特に L^* が有界であれば, 逆にこの二條件を満足する L^* は(完全正値な) dynamical semigroup を生成する。その一般型は

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

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

で与えられる。

<u>example 1.</u> スピンの Bloch 方程式; $\displaystyle \frac{d}{dt}A = i[H, A] + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \gamma_\downarrow S_+[A, S_-] + h.c. \\ +\gamma_\uparrow S_-[A, S_+] + h.c. \\ +\eta S_+S_-[A, S_+S_-] + h.c. \end{pmatrix}$

これより damping part に対し

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

<u>example 2</u>　有限（N-準位）系における完全正値動力学半群

N次元ベクトル空間をHilbert空間 H とすると $M_N = \mathbb{L}^1(H) = \mathbb{L}^\infty(H) = \mathcal{B}(H)$ である。この場合の complete dissipative operator の構造は次の定理によって決定されている。

<u>定理</u>（Gorini, Kossakowski, Sudarshan）[10]

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

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

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

(ii) $\mathbb{L}$ が complete dynamical semigroup の generator であれば

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

$\left(\ \mathrm{tr}(F_r)=0,\ \mathrm{tr}(F_r^*F_s)=\delta_{rs}\quad r,s=1,\cdots N^2-1\ ;\ F_r, F_r^*, H(=H^*) \in M_N\right.$
$\left.\mathrm{tr}\, H=0\ \right)$ と一義的に表わされる。$\{c_{rs}\}$ は N^2-1 次元正値エルミート行列でこれの主軸変換により Lindblad の表現に達する。

<u>example 3</u>　quantum damped harmonic oscillator

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

$$\mathbb{L}\rho = \left([a,\rho a^\dagger]+[a\rho,a^\dagger]\right) - 2\bar{n}[a^\dagger[a,\rho]]$$

$$\left(\overset{\text{適当な定数により}}{=} \gamma_\downarrow\left([a,\rho a^\dagger]+[a\rho,a^\dagger]\right)+\gamma_\uparrow\left([a^\dagger,\rho a]+[a^\dagger\rho,a]\right)\right)$$

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

§4. H－定理

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

$$\rho_t = \Lambda_t \rho \qquad \Lambda_t \rho_0 = \rho_0 \quad (\text{定常分布})$$

なる密度行列に関し相対エントロピーの増大

$$S(\rho_t \mid \rho_0) = \mathrm{Tr}\,\rho_t(\log\rho_t - \log\rho_0)$$

$$-\frac{d}{dt}S(\rho_t \mid \rho_0) \geq 0$$

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

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

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

($A, B \in T_+(H)$ $\quad\Phi$: $T(H)$ から $T(H)$ への完全正値写像)

が保証しているが，その証明は難かしい。最近 Spohn は"エントロピー生成" $\sigma(\rho_t \mid \rho_0) = -\frac{d}{dt}S(\rho_t \mid \rho_0)$ を一般的に与え，その凸性および正値性を，Lieb によるいわゆる Wigner-Yanase-Dyson conjecture の証明[15] に帰着させて，

比較的簡単に示した。その概略は以下の通り。簡単のため有限次元（N-準位）として扱う。

$$\sigma(\rho_t \mid \rho_0) = -\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho_t)(\log\rho_t - \log\rho_0)$$

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

$$\mathbb{L}\rho_0 = 0$$

<u>$\sigma(\rho \mid \rho_0)$ の ρ に関する凸性</u>　$\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho)\log\rho_0$ は ρ に関し線型であるから、第1項 $-\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho_t)\log\rho_t$ の凸性を見ればよい。ところが

$$-\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho)\log\rho = \sum_i \mathrm{Tr}\left(V_i^*V_i\,\rho\log\rho - V_i\rho V_i^*\log\rho\right)$$

$$= \frac{d}{dq}\left[\sum_i\left(-\mathrm{Tr}\left(\rho^q V_i \rho^{1-q} V_i^*\right)\right)\right]_{q=0}$$

この $\sum_i$ の各項 $-\mathrm{Tr}(\rho^q V_i \rho^{1-q} V_i^*)$ $(0 \le q \le 1)$ は Lieb によってその正しいことが証明された Wigner-Yanase-Dyson の conjecture すなわち密度行列 ρ の凸函数であり特に $q=0$ で ρ の線型函数となっている。このことから その $\frac{d}{dq}(\ \ )_{q=0}$ に対しても凸性が保証される。

<u>$\sigma(\rho \mid \rho_0) \ge 0$</u>　上に示された $-\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho)\log\rho$ の凸性を explicit に書くならば

$$-\mathrm{Tr}\Big(\mathbb{L}(\lambda\rho+(1-\lambda)\rho_0)\log(\lambda\rho+(1-\lambda)\rho_0)\Big)$$
$$\leq -\lambda\,\mathrm{Tr}((\mathbb{L}\rho)\log\rho)-(1-\lambda)\,\mathrm{Tr}((\mathbb{L}\rho_0)\log\rho_0)$$
$$0\leq\lambda\leq 1$$

となるが，ここで ρ_0 が定常状態 $\mathbb{L}\rho_0=0$ であるとすると

$$-\lambda\,\mathrm{Tr}((\mathbb{L}\rho)\log(\lambda\rho+(1-\lambda)\rho_0))\leq-\lambda\,\mathrm{Tr}((\mathbb{L}\rho)\log\rho)$$

λで割り $\lambda\to 0$ として

$$\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho)\log\rho_0\geq\mathrm{Tr}(\mathbb{L}\rho)\log\rho,\quad\therefore\quad\sigma(\rho|\rho_0)\geq 0.$$

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

すなわち dual space 上の map Λ_t^* に対し

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

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

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

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

上の $\sigma(\rho|\rho_0)\geq 0$ は $H(A)=-\log A$, $A=\rho/\rho_0$ として ρ で平均を取ることによって得られるものである。

§5. 拡散過程に対する考察

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

注。相対エントロピー $-S(\rho|\rho_0)=\mathrm{Tr}\,\rho(-\log\rho+\log\rho_0)$ の時間微分が開放系の散逸性を特徴付けることは，すくなくとも定常分布 ρ_0 が熱平衡 — その扱っている力学系が接触する熱浴に関して — の場合には次のように明白なものである。 $\rho_0=\rho_\beta=e^{-\beta(E-F)}$ として

$$\frac{d}{dt}S(\rho|\rho_0)=\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\,\rho(-\log\rho)-\beta\frac{d}{dt}\langle E\rangle \quad (\beta^{-1}:\text{熱浴の温度})$$

第一項は力学系の情報エントロピーの時間変化，第二項は熱浴へ供給されるエネルギー(熱)にもとずくエントロピー変化に相当する。

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

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

のように書かれる。拡散方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = Au$ の積分は位相解析の一つの結論として吉田先生の教科書[1]に述べられているが、現在の統計物理におけるようにひんぱんに使われるためには更に調べるべきことが出て来ているように思われる。例えば、ユークリッド空間での場合 $b_\mu, a_{\mu\nu} \in C(R^d)$ すなわち $\sup|b_\mu|, \sup|a_{\mu\nu}| < \infty$ の条件を課していては、もっとも典型的なガウス過程 $b(x) = -\gamma x$ $(a_{\mu\nu} = \mathrm{const})$ の拡散を含めることも出来ないわけである。

さて、上のdiffusion operatorに対するdissipativityに関し次のようなことがわかる。

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

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

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

(ただし $u \in C_0^2(R^d)$: support compact な $C^2(R^d)$)

すなわち A が Lumer-Phillips の散逸条件[2, 3]を満すかどうかは、drift b_μ に依存する。$\mathrm{div}\, b = \frac{\partial b_\mu}{\partial x_\mu} \geq 0$ で

あれば無條件に $(Au, u) \leq 0$ が成立する。直観的に言えば $\mathrm{div}\, b$ は'流れ'の source であり それが常に供給されていれば常に dissipative ということになる。もっとも簡単な $\dot{x} = -\gamma x$ に対応するガウス過程 $\frac{\partial u}{\partial t} = -\gamma x \frac{\partial u}{\partial x} + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ $D = \mathrm{const}$ についてみれば, $b(x) = -\gamma x$ は $\frac{\partial b}{\partial x} = -\gamma < 0$ であるから, これは無條件に dissipative ではないことになる。逆に, 不安定な運動 $\dot{x} = \gamma x$ $(\gamma > 0)$ に対応する"拡散" $Au = \gamma x \frac{\partial u}{\partial x} + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ は常に $(Au, u) \leq 0$ $(u \in C_0^2(R^1))$ と dissipativity が保証されることになる。(以上は, ちょっと直観に矛盾するように見えるが実はそうではない。"不安定なブラウン運動こそより dissipative である" といういわゆる anomalous fluctuation の物理に適合する事実なのである。)

いずれにせよ, 以上のことからわかることは, Lumer-Phillips の散逸條件 2) ではもっとも単純なブラウン運動すらも適切にカバー出来ない, ということであって, より広い條件としての Lindblad の dissipativity に基礎を求める理由はここに存する。

以下, 拡散方程式の積分に関するわれわれの結果を述べるため, この場合の H-定理を示しておこう。

$$A\,H(u) - H'(u)(Au) = H'(u)\, a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\mu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} \geq 0$$

$u \in C^2(R^d)$　　$H(u)$: 二階連続可微分凸関数 $H''(u) \geq 0$

特に $H(u)=-\log u$ に対し

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

$$\langle p,\ AH(u)-H'(u)(Au)\rangle=\langle p,\ A\log\tfrac{1}{u}\rangle+\underbrace{\langle p_0,\ Au\rangle}_{=0\ (\because\ A_* p_0=0)}$$

$$=\langle p,\ A\log\tfrac{1}{u}\rangle$$

$$=\int a_{\mu\nu}\frac{\partial \log u}{\partial x_\mu}\frac{\partial \log u}{\partial x_\nu}p\,dx\ \geq 0$$

$\left(\begin{array}{c}A_* \text{ は}\\ (A_*)^* = A\\ A\text{の predual}\\ \text{operator}\end{array}\right)$

$u=p/p_0$ とおくことにより

$$\sigma(p\,|\,p_0)=-\langle p.\ A(\log p-\log p_0)\rangle$$

$$=\int a_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log\frac{p}{p_0}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{p}{p_0}\right)p\,dx$$

<u>$\sigma(p\,|\,p_0)$ の p に関する凸性の検証</u>

$$\delta^{(1)}\sigma(p\,|\,p_0)=\int\left[-2\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(a_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{p}{p_0}\right)p\right)+a_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log\frac{p}{p_0}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{p}{p_0}\right)p\right]\frac{\delta p}{p}dx$$

$$\delta^{(2)}\sigma(p\,|\,p_0)=\int a_{\mu\nu}\frac{\partial\,\delta p}{\partial x_\mu}\frac{\partial\,\delta p}{\partial x_\nu}\frac{dx}{p}\ \geq 0$$

<u>remark</u> $\delta^{(2)}\sigma$ (pの変分に対するσの2次変分) の表式は、$\delta^{(2)}\log p=-\frac{1}{2}\left(\frac{\delta p}{p}\right)^2$ からの寄与と $\delta^{(1)}\log p\times\delta p$ からの寄与との相殺の結果である。

<u>最小問題，$\int p\,dx=1$，$\sigma(p|p_0)=\min(p)$ の解</u>

$\int\delta p\,dx=0$，$\delta^{(1)}\sigma=0$ より λ を Lagrange 未定定数として

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(a_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{p}{p_0}\right)p\right)-\frac{1}{2}a_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\log\frac{p}{p_0}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{p}{p_0}\right)p=\lambda p.$$

これは $p=p_0$ 以外にこれを満す解が存在したとしても $A_* p=0$ とは無縁。

§6. Lebowitz の開放系に対する変分問題とその解

J. L. Lebowitz はすでに 1960 年前後，上述のエントロピー生成の最小原理によって定常分布 ρ_0 を特徴付ける，という開放系統計力学の一般理論を提出している [16]。 これを最近の動力学半群の理論に従って量子系に対し再構成しようとしたのが Spohn [17] (Spohn-Lebowitz [18]) である。その概略を拡散過程に適用するならば以下のようになる。

Lebowitz の開放系とは，密度 ρ に従う系が一般に温度の異る二つ以上（有限個）の熱浴に接しており各々との熱接触によって drive される ρ の generator A_{*i} はその定常分布として温度 β_i^{-1} (§5の脚注参照) のカノニカル分布であり，全体として generator $\sum_i A_{i*}$ により運動する，というモデルである。このとき全体としての定常分布は

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

となるべきであるが，それは果して"エントロピー生成 σ 最小"の原理から導かれるであろうか？ Spohn は Lebowitz の20年前の考えに従って σ を各々の熱浴との間のエントロピー生成 σ_i の和として表わしその最小を与える ρ を調べた。その結果，熱浴の温度差 $\beta_i-\beta_j$ が小さい場合その1次の範囲では確かに $\sigma_{tot}=\sum_i\sigma_i$ を最小にする ρ が ρ_{st} に一致するが，exact にそうはならないことを確かめた。 拡散過程について見れば

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

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

$$\left(\sum_i A_{i*}\right)P = \sum_i \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(a^{(i)}_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial x_\nu}\log\frac{P}{P_{\beta_i}}\right)P\right) = 0$$

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

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

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

とする。最小條件 $\delta^{(1)}\sigma(P,S)=0$ が $S=-\log P$ において成立する、という條件がすなわち $\left(\sum_i A_{i*}\right)P=0$ である。

又、その時の最小値 $\sigma_{min}(P,S=-\log P)$ が熱力学的エントロピー生成 $\sigma_{min}(P,S=-\log P)=\sum_i \beta_i \langle P, A_i E\rangle$ と一致する。以下、この事実を Hilbert 空間上の正則散逸作用素(注)[3] を用いて厳密な形に述べる。(注 文献[3] を若干拡張して用いている)

Hilbert 空间 X 上そのノルム $\| \|$ で dense な subspace V が $\| \|$ より強いノルム $|||\ |||$ によって閉であるとする。X の sesqui linear form $a(u,v)$ が条件 (i) $|a(u,v)| \leq M |||u||| \, |||v||| \quad \forall u, v \in V$

(ii) $-\mathrm{Re}\, a(u\ u) \geq \delta\, |||u|||^2 \quad \delta > 0 \quad \forall u \in N^{\perp} V \ (N = \{u \mid a(u\ u) = 0\})$

を満たせば X の或る dense subspace D を定義域とする閉放送作用素 A が $(Au, v) = -a(u, v)\ (\forall v \in X)$ によって定義され、A は X 上の縮小半群(マルコフ型)の generator となる。更に対称性 (iii) $a(u\ v) = \overline{a(v, u)}$ ($a(u\ u) = \text{real}$) があれば A は自己共役、任意の $f \in N^{\perp}$ に対し $Au = f$ が解を持ち(何故なら (ii) より A は閉値域 $R(A) = \overline{R(A)}$ だから)、次の変分原理

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

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

$$Au = \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(a_{\mu\nu} \frac{\partial u}{\partial x_\nu} \rho\right), \qquad f = -\frac{\partial}{\partial x_\mu}(b_\mu \rho) \ (\in L^2(R) \text{ とする})$$

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

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

文献

[1] K. Yosida; Functional Analysis 4th edition, Springer Verlag (1974)

[2] E. Hille, R. Phillips; Functional Analysis and Semi-groups (1954).

[3] 田辺広城「発展方程式」岩波書店 数学選書 (1975).

[4] J. Mehra and E.C.G. Sudarshan; Nuovo Cimento 11 B, 215 (1972).

[5] A. Kossakowski, Rep. Math Phys. 3, 247 (1972).

[6] E.B. Davies, Comm. Math. Phys. 15, 277 (1969) 39 91 (1974).

[7] E.B. Davies, Quantum Theory of Open Systems London Academic Press (1976).

[8] R.S. Ingarden and A. Kossakowski, Ann. Phys. 89, 451 (1975).

[9] G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 48, 119 (1976).

[10] V. Gorini, A. Kossakowski and E.C.G. Sudarshan, J. Math. Phys. 17, 821 (1976).

[11] H. Spohn, Rep. Math. Phys. 10, 189 (1976).

[12] A. Frigerio, Lett. Math Phys. 2, 33 (1977); Comm. Math. Phys. 63, 269 (1978).

[13] E.H. Lieb and M.B. Ruskai, Adv. Math 12, 269 (1974).

[14] G. Lindblad, Comm. Math. Phys. 40, 147 (1975).

[15] E.H. Lieb, Adv. Math. 11, 267 (1973).

[16] P.G. Bergmann and J.L. Lebowitz, Phys. Rev. 99, 578 (1955).

[17] H. Spohn, J. Math. 19, 1277 (1978).

[18] H. Spohn and J.L. Lebowitz, Adv. Phys. Chem. XXXVIII 109 (1978).

[19] P. Glandsdorff and I. Prigogine, Thermodynamic Theory of Structure-- (Wiley-Interscience 1971)

[20] H. Hasegawa and T. Nakagomi, J. Stat Phys. 20, 191 (1979).