

ガラス系の統計理論に対する流体屋のアプローチ

鳥取大・工 大信田丈志 (OOSHIDA Takeshi)
Tottori Univ.

青山学院大・理工 大槻道夫 (Michio OTSUKI)
Aoyama Gakuin Univ.

岡山大・自然* 後藤晋 (Susumu GOTO)
Okayama Univ.

日大・理工 中原明生 (Akio NAKAHARA)
Nihon Univ.

京大・理 松本剛 (Takeshi MATSUMOTO)
Kyôto Univ.

1 研究背景：ガラス系と乱流

流体乱流を通して宇宙を見るという副題のついた研究会で今回のような話をするということについては多少の釈明^{いわけ}が必要かと思われる。宇宙と言っても、ここでは太陽フレアの話をするわけではなく、惑星形成の話をするわけでもない。ブラックホールも降着円盤も登場しない。しかし、もし宇宙^{ユニバース}という語を森羅万象の意味に解するなら、*παντα ρει*と言い習わされる万物流転の現象を扱うのも、やはり宇宙の謎を解明する物理科学的取り組みの一環である。万物流転とはギリシャの哲人の言葉であるが、周知のように、20世紀前半に *rheology* という造語を生み、米国のレオロジー学会 (Society of Rheology) の標語となった。

我々の話も、要するにこのレオロジーと関係がある。もう少し説明すると、我々が解明を目指している問題は、濃密コロイド系のレオロジーについての構成関係式をマイクロ側の統計理論から導出することである。ところがこれが難しい問題なのである。どれくらい難しいかというと、乱流と同じくらい難しい。それだけでなく、難しさの中身についても、どうやら乱流と似たところがあるらしい。それならば、流体屋なりのアプローチの仕方が可能なのではないか、と講演者は考えた次第で、これもまた「流体乱流を通して宇宙を見る」ということの一つの形であるに違いない。

さて話の順番としては、講演タイトルにある「ガラス系」とは何であるかを説明すべきであるが、その前に、ペーストの乾燥破壊実験 [1-6] について紹介しておきたい。我々が濃密コロイド系のレオロジーに取り組むようになったのは、この実験が契機である。この実験結果を究極的に理解

* 2012年4月より大阪大・基礎工

するには、濃密コロイド系における緩和時間の発散について知る必要があり、それは、より一般的に、ガラス系 [7-9] の一環として位置づけられるべき問題なのである。歴史的な経緯を書くと、我々（本講演の著者）の一員である中原は、乾燥破壊による亀裂パターンの形成 [10-14] への興味から、今から 15 年くらい前*1、粉を水で溶いて得られる泥状の物質（ペースト）を用いた研究を開始した [1]。乾燥破壊の亀裂パターンを決める要因は何か？というのが問題だが、一連の実験により、意外な要因が判明した。それは、亀裂パターンは亀裂発生時の条件だけで決まるとは限らず、それよりも前の実験開始時点で加えた処理による影響を受けるといふ、記憶効果の存在である。水を多めにし、粉と水の混合液が完全に液体的になっている状態で浅い皿に注いでから静置乾燥させると、亀裂パターンは図 1(a) のようなランダムなセル状になる。亀裂の間隔は最終的な層厚さ程度という特徴的な値を示す一方、亀裂の方向は等方的である。他方、水がもっと少ない状態からスタートすると、なぜか非常に異方的な、縞状の亀裂パターンが生じる。最初に得られた縞パターンが放射状であったことから、当初、中原らは容器の側壁形状の影響を疑ったが、まもなく、じつは実験開始時点で容器を水平に揺すったのが縞状亀裂パターンの原因であることが分かった。実験開始時にペーストを数十秒のあいだ意図的に揺すり、そのあと静置乾燥させると、数十時間後には、図 1(b) に示すように、明らかに揺すった方向と相関のある方向—炭酸カルシウムペーストの場合は揺すった方向と垂直—に亀裂が走るのである。ただし、すぐあとで説明するように、揺すった方向と亀裂の進行方向に相関をもたせるためには、ペーストの固さ（水分含有量）と揺する強さを適当に調整する必要がある。

そもそも、ここで扱っているような粉と水の混合系は、水分が多いと液体的だが、水分を減らすとともに流動性が失われ、やわらかい固体となる。このやわらかい固体に外力を加えると、外力の大きさがある閾値を超えたところで再び流動性が回復し*2、塑性流動 [15-17] が起きる。どの程度の水分量でどの程度の外力を加えるとどれだけの塑性流動が起きるのかは、連続体力学の立場から言えば複雑流体の構成関係式を求める問題で、ミクロな物理に基づいた答えを出すのは至難の業である。他方、中原らの乾燥破壊実験において、粉と水の割合および加振の加速度を系統的に変えて亀裂パターンへの影響を調べた結果 [3]、加振の記憶としての異方性の発現には塑性流動が必須であることが明らかになった。水が少なすぎたり加振が弱すぎたりすると塑性流動が生じず、記憶現象は生じない。他方、水が多すぎ、あるいは加振が強すぎると、記憶を壊すような流れが発生する。記憶効果が生じる条件は、レオロジー測定で得られた降伏応力の値を加振強度がわずかに上回るような、いわば固体と液体の境目の領域にあることが分かった。塑性とは、変形に参与する緩和時間が有限と無限のあいだで切り替わる現象だから、記憶が比較的短時間のうちに書き込まれて長時間にわたって残る現象には、何らかの形で緩和時間の発散が関与しているはずである。しかしこの記憶効果の具体的な機構が、たとえば Bingham モデル [16] や Herschel-Bulkley モデル [18] のような何らかの構成関係式と連続体力学で説明できるものなのか [19, 20]、それとも、よりミクロ

*1 いま確認できる最も古い研究会報告 [1] には、実験のビデオ画像から取ったスナップショットが載っていて、そこには 1997 年 3 月 1 日および 2 日の日付が入っている。

*2 厳密なことを言えば、待ち時間が無限に長ければほぼ必ず流動性が観測されるので（“παντα ρει”）、閾値の値は測定手段に依存する [15]。

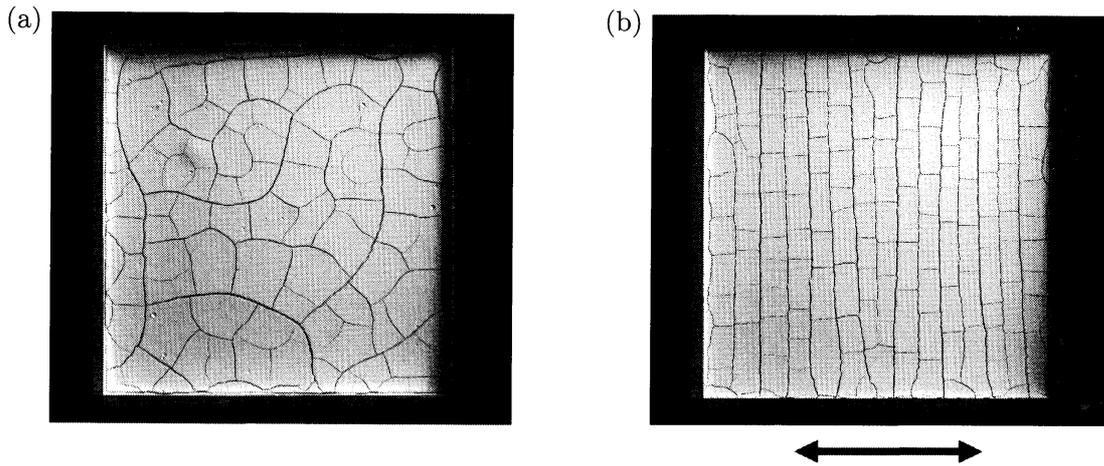


図1 ペーストの乾燥破壊実験における記憶効果。炭酸カルシウム粉末 360 g と所定の量の水を混ぜたものを、一辺が 20cm の正方形容器に入れて静置乾燥させた。(a) 水が多い場合 (体積比 25% つまり粉と水の体積が 1 : 3)。亀裂パターンは等方的なセル状になる。(b) 水を少なめ (体積比 42%) にしたうえで最初に水平方向の振動を加え、そのあと静置乾燥させた場合。振動の振幅は 15 mm, 振動数は 1 Hz で、図の矢印の方向に 1 分間振動させた。乾燥後にできる主要な亀裂が最初の振動方向に垂直に走るといふ、顕著な異方性が見られる。

な構造に基づいた未知の物性によるものなのか、まだ誰にも明確に分かっていない*³。たとえ前者であったとしても、構成関係式の微視的な導出は未解決問題として残る。

ペーストの塑性流動とは、濃密コロイド系における緩和時間が応力と濃度によって無限から有限に切り替わる現象である。この現象は、より広い目で見れば、ガラス系およびジャミングの問題とつながっている [7-9, 23]。ガラス系とは、熔融ガラスなどの液体を冷やすことで結晶化せずに固まるようなもの、およびそれに類似する挙動を示す系のことであり、必ずしも狭い意味のガラスに限らない (まぎらわしい用語ではあるが「金属」と「金」の関係を想起されたい)。絵の具や化粧品の塗り方から地震発生の機構解明まで、またパスタの乾燥からアモルファス金属材料の開発に至るまで、非結晶固体が関与する問題は多岐に渡るが、なにしろ「完全 (理想) 結晶に対応する完全 (理想) 非晶質」という概念は確定していない [24] という状況*⁴を変えるためには、基礎研究としてのガラス系の理解は大きな意味を持つはずである。

ガラス系の微視的モデルの一つとして、斥力相互作用する Brown 粒子系を考えよう。この系を

*³ 最近行われた記憶上書き実験 [21, 22] の結果は、前者の描像 (連続体モデル) と整合するようと思われるが、後者の可能性を完全に否定できているわけではなく、より詳細な検討が必要である。

*⁴ 平衡系での熱力学的な相転移としての「理想ガラス転移」が存在するの否か、存在するとしたらどんな転移かという問題 [25] は、古くからの難問であって、未だに解決されていない。最近の研究としては、理想ガラス転移を示すモデルを具体的に構成する試み [26] が行われている。

支配する Langevin 方程式は、

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i = -\mu\dot{\mathbf{r}}_i - \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \sum_{j < k} V(r_{jk}) + \mu \mathbf{f}_i(t) \quad (1a)$$

$$\langle \mathbf{f}_i(t) \otimes \mathbf{f}_j(t') \rangle = \frac{2k_B T}{\mu} \delta_{ij} \delta(t-t') \mathbf{1} \quad (1b)$$

のように書ける。抵抗係数 μ は、本来は粒子配置に依存するはずだが（流体力学的相互作用）、単化のため、 μ は定数とする。粒子間相互作用 $V(r)$ が無視できる場合は、適当に粗視化した密度場は単なる拡散方程式に従い、その拡散係数は $D = k_B T / \mu$ で与えられる。他方、粒子間相互作用 $V(r)$ として、一定の粒子直径 σ が定まるような短距離斥力部分をもつポテンシャルを仮定し（実際には結晶化を防ぐために粒子直径にばらつきをもたせることが多い）、式 (1a) に対する Monte Carlo 計算をおこなうと、密度の上昇や温度の低下とともに、緩和が劇的に遅くなる挙動が見られる。緩和時間の増大は粘性係数の増大を意味するので、流動性が失われることが分かる。

ガラス系の理論におけるひとつの大きな目標は、どの程度の温度や密度でどの程度まで緩和時間が増大するのかを、直接数値計算によらずに^{*5}求められるようにすることである。これに対する微視的理論としては、モード結合理論 (Mode-Coupling Theory = MCT) [27–30] が現状では最も成功していると言われている。さらに、MCT に剪断流を導入し、コロイド系のレオロジーを扱う試みも既に始まっている [31–34]。もっとも、剪断を入れる以前の平衡系の MCT 自体に既にさまざまな問題点が指摘されており、多くの人々がその改良に取り組んでいる。

モード結合理論の名の示すとおり、MCT は、密度場の Fourier モードのあいだの非線形相互作用を取り込んだ近似完結理論である。その基盤となる基礎方程式は、たとえば、斥力相互作用する粒子系の Langevin 方程式 (1) であるが、これを、粒子間隔程度の解像度で見た密度場

$$\rho = \rho(\mathbf{r}, t) = \sum_j \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \rho_0 + \sum_{\mathbf{k}} \hat{\rho}(\mathbf{k}, t) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

の Fourier モードに対する方程式として、

$$(\partial_t + D_c k^2) \hat{\rho}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q}=0} V_{\mathbf{k}}^{\mathbf{p}\mathbf{q}} \hat{\rho}(-\mathbf{p}) \hat{\rho}(-\mathbf{q}) + \hat{f}_{\rho} \quad (3)$$

のような形に書き直すことができる [35, 36]。1次元の場合の具体的な式を、あとで式 (17) として示す。MCT とは、式 (3) から、密度の 2 時刻相関 $\langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, t) \hat{\rho}(-\mathbf{k}, 0) \rangle$ に対する方程式を導出し、そこから緩和時間などの^{よさず}方^{より}の情報を読み取る理論であると言える。

式 (3) は、少なくとも形の上で、我々がよく知っている乱流のモデル、すなわち外力つき Navier–Stokes 方程式の Fourier 表示

$$(\partial_t + \nu k^2) \hat{\mathbf{u}}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q}=0} M_{\mathbf{k}}^{\mathbf{p}\mathbf{q}} : (\hat{\mathbf{u}}(-\mathbf{p}) \otimes \hat{\mathbf{u}}(-\mathbf{q})) + \hat{\mathbf{F}}_{\text{ex}} \quad (4)$$

^{*5} 分野によっては、何でもコンピュータの力で直接数値計算によって求められると思っている人もいるようである。そういう人の思考からは、現象の生じる時間尺度の階層の問題が完全に抜け落ちている可能性がある。そういう人には、ぜひ、アミノ酸の見える解像度で、ゆで卵が固まる過程のリアルな数値計算を実行して見せていただきたい。

によく似ている。主な違いは

- 式 (4) の非線形項はエネルギーを保存するように作られているのに対し、式 (3) の非線形項はエネルギーをひたすら散逸するようになっていること
- 式 (4) の外力項は非平衡定常状態を維持するためのもので、普通は低波数側のみに決定論的に入っているのに対し、式 (3) の \hat{f}_ρ は、系を温度 T の平衡状態に保つためのランダム力であって、その特性は式 (1b) を波数表示したもので与えられること

という 2 点である。こうして見るとガラス系というのは、乱流のちょうど裏返しに見える。そして “Extremes meet” と諺^{ことわざ}に言うように、両者には相通じるものがあるように思える。たとえば既に挙げた MCT は、 $\hat{\rho}$ の 2 時刻相関に対する近似完結理論であって、乱流理論における DIA と非常によく似ているし、実際のところ、途中まで全く同じ定式化ができる。

他方、波数表示の式 (4) を見ているだけではなかなか見えてこないような秩序構造が乱流のなかには存在していることも、乱流理論に親しんでいる者はみな良く知っているとおりでである。乱流中の秩序構造は、実空間で渦度場の構造を見ることで初めて明瞭に浮かび上がってくる。渦度の重要な特徴のひとつは、粘性が小さい極限で、いわゆる凍結場 (frozen field) [37] となることである。
バロトロピック
順圧的な非粘性流体の渦度方程式は

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \frac{\boldsymbol{\omega}}{\rho} = \frac{\boldsymbol{\omega}}{\rho} \cdot \nabla \mathbf{u} \quad (5)$$

のように書いて [38]、 $\boldsymbol{\omega}/\rho$ の時間変化は移流およびそれに伴う引き伸ばしのみとなる。あるいは、数学的に言えば、Lie 微分がゼロとなる。これに伴い、各流体要素ごとに Lagrange 的な保存則が成り立ち、それはたとえば Kelvin の循環定理 [39, p.74] として定式化される。渦構造の力学を少しでもまともに取り扱おうとするなら、このような Lagrange 的な保存則を大前提とせざるを得ないだろう。他方、ガラス系においても、粒子の移動の空間相関という形で、ある種の秩序構造が観察されており、動的不均一 [40] と呼ばれている。このようなガラス系の動的構造を追う問題には、乱流中の渦構造の扱いと共通するものがありそうな気がする。

さらに、式 (5) のような凍結場—その時間変化が移流と引き伸ばしのみで帰着できるような場—がガラス系にも存在する。あまりにも当然すぎて普段意識しないことなのだが、一般に、単一成分子系の密度場は凍結場の一種である。密度の時間変化を支配する連続の式は

$$(\partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla) \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

という形に書いて、 $\rho = \rho(\mathbf{r}, t)$ の時間変化は移流と引き伸ばしのみで帰着される。Lagrange 的には ρdV が流体要素ごとに保存される。

さて、以上のような次第であるならば、乱流理論での “凍結場” たる渦度を扱う方法を借りてきて、ガラス系の理論に役立てることはできないだろうか。凍結場を扱うための一つの有効な処方箋は、Lagrange 記述を導入し、同時に速度勾配および凍結場自身のテンソル性を適切に扱うことである。これらの処方箋は流体力学という粗視化された階層で用いられてきたが、これらを、より粗

視化の程度の少ない、中間尺度の階層で用いることはできないだろうか。特に、凍結場の数学的表現は、Lie 微分（流体要素にフォーカスした時間微分の種類）がゼロということであるから、ガラス系における遅いダイナミクスの記述に対して有効である可能性が期待できるのではないか。

こういうわけで、我々の将来的な目標は、本物のガラス系を扱う新理論を開発することであるが、そのための第一歩として、ここでは、式 (1) の 1 次元版を扱うことにする。1 次元なのだから簡単だろうと思うかもしれないが、じつは 1 次元だからこそ MCT の弱点が露呈してしまうという面があって、決してつまらない問題ではない。我々のアイディアの要点は、流体力学でいう Lagrange 記述を統計力学に持ち込む点にある。MCT が扱っているのは、式 (2) で定義されるような Euler 表示された密度場に対する 2 時刻相関であるが、これだと 1 次元系の遅い拡散をうまく捉えることができない。そこで本講演では、密度場の Lagrange 相関を計算する枠組みを構築し、これにより 1 次元系の遅い拡散を正しく再現できることを示す。

また、今後に残る重要な課題は今回の手法を 3 次元することだが、これに関して我々が講演時に提案した式 (65)(68) は、一見して Clebsch 変数 [41, 42] を思わせる形をしている。これに関する議論も、何かの参考になるかもしれないので、裏話なども交えて記しておくことにする。

2 問題設定と先行研究

2.1 一列縦隊拡散

ここで扱うのは、式 (1) の 1 次元版で与えられるような系の挙動である。運動方程式は

$$m\ddot{X}_i = -\mu\dot{X}_i - \frac{\partial}{\partial X_i} \sum_{j < k} V(X_k - X_j) + \mu f_i(t) \quad (7)$$

のように書ける。系の大きさを L とし*6、平均密度が $\rho_0 = N/L$ となるように、 $X_{i+N} = X_i$ という周期境界条件を課す。粒子間相互作用としては、粒子直径 σ で排除体積効果を示す“剛体球”ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} V_{\max} \rightarrow +\infty & (|r| < \sigma) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (8)$$

を仮定する（数値計算ではこれを適当に平滑化したものを用いる）。この系の挙動は、一列縦隊拡散（Single-File Diffusion = SFD）として古くから研究されている一方 [43–45]、最近でもさまざまに拡張した研究が続いており [46–51]、レーザートラップを用いた実験 [52] も行われている。また、棒状高分子系の理想化と見ることもできる [53, 54]。

SFD では、相互作用によって追い越しが禁止される結果、粒子の拡散が非常に遅くなることが知られている。拡散を定量化するため、 i 番目の粒子の変位を $R_i \stackrel{\text{def}}{=} X_i(t) - X_i(0)$ と書くことにして、平均二乗変位 $\langle R^2 \rangle = \langle R_i^2 \rangle$ を考えよう（系は一様だとすれば $\langle R_i^2 \rangle$ は i に依存しないは

*6 有限寸法効果が出ないように、系の大きさはかなり大きく取る。本稿では、このあと“長時間”という言い方が何度も出てくるが、これは $\rho_0^{-2} \ll Dt \ll L^2 \rightarrow \infty$ という意味に解釈する。

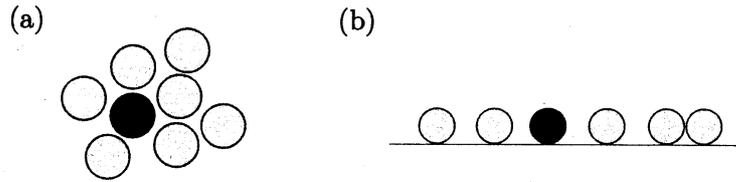


図 2 (a) ケージ (cage = “鳥籠”) の概念図。着目している粒子は、他の粒子に取り囲まれて自由に動けない状態にある。(b) ケージ効果を考察するために単純化した 1 次元モデル。

ず)。相互作用がなく粒子が自由に互いを追い越せる場合、長時間の漸近挙動は $\langle R^2 \rangle = 2Dt$ となる (いわゆる “通常拡散”)。これに対し、SFD では

$$\langle R^2 \rangle = \frac{2S}{\rho_0} \sqrt{\frac{D_c t}{\pi}} \propto t^{1/2} \quad (9)$$

となることが知られている [46]。ただしここで D_c は集団拡散計算、 $S = S(0)$ は静的構造因子の長波長極限值である。時間に関するべきが $1/2$ であって 1 より小さいので、通常拡散に比べてずっと遅いことが分かる。

SFD で拡散が遅くなるのは、動きのタイミングが隣の粒子と合うまで待たないといけないから、というように直感的に理解できる。問題は、これを MCT またはそれに類する理論で定量的に扱えるかどうか、である。

2.2 なぜ今さら一列縦隊拡散？

もともと我々が研究を始めた動機の一つに、乱流理論における Lagrange 描像の役割に対応するものがガラス系にもあるのではないかと、という直感があった。この考えを試してみるには、何か Lagrange 表示での理論を具体的に作ってみれば良く、そのための最初の例題として、我々は SFD といういささか古い問題を選んだことになる。これは全くの行き当たりばったりというわけではなく、もちろん直接には宮崎 [30] に触発されたためであるが、そのほかにも多少の考えがあつたことである。

そもそも、濃密コロイド粒子系や過冷却液体で流動性が失われる機構は、直感的には、図 2(a) にあるように粒子が別の粒子たちに囲まれてしまい、自由に動けなくなるためである。これをケージ効果という。SFD は、図 2(b) に示すように、ケージ効果を単純化し誇張したモデル系と考えることができる。なお、図には少数の粒子しか描いていないが、もちろん着目している粒子のすぐ隣の粒子だけ考えればよいわけではなく、それらの動きを抑えているのはさらに外側にある粒子たちであるし、さらにその外側にも粒子がいて…というように、ケージには多数の粒子が関与していることに注意しておく。

さて MCT では、ケージ効果を、式 (3) のような密度の Fourier モード間の相互作用としてとらえる。単純に式 (3) の統計平均をとるともちろん無限階層の問題が現れるが、適当な完結近似を導

入し、相関関数 $C = C(k, t) \propto \langle \hat{\rho}(\mathbf{k}, t) \hat{\rho}(-\mathbf{k}, 0) \rangle$ と記憶関数 $M = M(k, \tilde{t})$ に対する

$$(\partial_t + D_c k^2) C(k, t) = - \int_0^t dt' M(k, t - t') \partial_{t'} C(k, t') \quad (10)$$

$$M(k, s) \propto \sum V^2 C(p, s) C(q, s) \quad (11)$$

のような形の完結方程式を導出する。これがいわゆる MCT 方程式であって、ケージ効果 (“モード結合”) はすべて V^2 を通じて M のなかに現れる。

MCT 方程式 (10) の導出には、大きく分けて、ふたつの方法が挙げられる [29, 30]。過冷却液体や濃密コロイド系に対して最も普通に用いられるのは Mori-Zwanzig の射影演算子の方法で、系のダイナミクスを C に射影することで式 (10) の形の厳密な方程式をまず導出し、そこに現れる 4 体相関 $M \propto \langle \hat{\rho} \hat{\rho} \hat{\rho} \hat{\rho} \rangle$ を $\langle \hat{\rho} \hat{\rho} \rangle \langle \hat{\rho} \hat{\rho} \rangle$ すなわち 2 体相関の積で近似する。もうひとつは、Martin-Siggia-Rose (MSR) の方法 [55] による、いわゆる場の理論の方法であり、1 ループ近似の範囲で相関 C とプロパゲータ G に対する方程式をまず導出したあと、これを C だけの方程式に直す (伝搬関数とは、もともと場の量子論に現れるある種の Green 関数のことであるが [56]、ここでは熱的揺動力に対する応答関数を意味する)。ただし過冷却液体や濃密コロイド系でこの方法を用いようとすると、どうしても、導出過程のどこかでつじつまの合わないことをせざるを得ない。たとえば、せつかく導出した G の方程式を捨てて、別途導出した揺動応答関係式で置き換える (!) ということが必要になる。

どちらにしても、MCT は、2 体相関による近似完結理論として作られていることが分かる。ところが、図 2(b) のような系で追い越し禁止ルールを表現するには、 (x, t) 平面上で粒子の世界線が交わらないことを表現するために 4 点の情報が必要であり、Euler 表示の密度場で 4 点相関を扱おうとすると $\langle \rho(x_1, t) \rho(x_1, 0) \rho(x_2, t) \rho(x_2, 0) \rangle$ のような 4 体の相関関数になってしまうので、これを MCT で正しく扱うのは無理がある。実際、宮崎 [30] により、

- 定石どおりの MCT からは式 (9) は得られず、 $\langle R^2 \rangle \propto t$ という通常拡散になる
- 4 点相関の考察をもとに、 M のなかの V が MCT と微妙に異なる式を作ると $t^{1/2}$ が出る

ということが示されている。要するに MCT の M には 4 点相関が正しく入っていないために、ケージ効果を長時間に渡って正しく扱うことができないのだと考えられる。

それならば、ケージ効果を M で記述するのではなく、ケージに追従して動く座標系を導入して、これによってケージ効果を記述してはどうだろうか。いま、1 次元系についての宮崎 [30] の指摘を紹介したが、3 次元の MCT も、ある面では多大な成功を収めている一方、たとえば液体側からスタートして固体側に向かってパラメータを動かしていくと、本物のガラス転移に到達する前に偽の転移を示してダイナミクスが凍結してしまうという問題など、いくつかの困難をかかえている。ラベル変数による記述は、固体側 (弾性論) と相性の良い記述だから、うまくいけば、3 次元での上記の困難に対しても何らかの改善をもたらさそうな気がする。

しかしやはり、いきなり 3 次元に挑戦するのは無謀だ。地味ではあっても、まずは 1 次元の場合の解答を仕上げた方法論を確立することが重要である。あの有名な演説 [57, 58] で Hilbert も言っ

ているではないか：

Eine noch wichtigere Rolle als das Verallgemeinern spielt—wie ich glaube—bei der Beschäftigung mit mathematischen Problemen das Specialisiren. Vielleicht in den meisten Fällen, wo wir die Antwort auf eine Frage vergeblich suchen, liegt die Ursache des Mißlingens darin, daß wir einfachere und leichtere Probleme als das vorgelegte noch nicht oder noch unvollkommen erledigt haben. Es kommt dann Alles darauf an, diese leichteren Probleme aufzufinden und ihre Lösung mit möglichst vollkommenen Hilfsmitteln und durch verallgemeinerungsfähige Begriffe zu bewerkstelligen. Diese Vorschrift ist einer der wichtigsten Hebel zur Überwindung mathematischer Schwierigkeiten und es scheint mir, daß man sich dieses Hebels meistens—wenn auch unbewußt—bedient.

さて一般化よりも、数学の問題に取り組むにあたってなお重要な役を演じるのは、我輩思うに、特殊化です。蓋し、問題の解答を探すも空しく終わるほとんどの場合において、失敗の原因は、目の前の問題よりもモット単純でモット容易な問題をまだ解いておらないから、あるいはまだ解き方が不完全だからでありましょう。されば全ては、そういう問題を見つけ出し、能う限り完璧な手段でもって、一般化可能な概念を通じて解決を成し遂げるということに懸かっております。この規則は数学的困難を克服するための最も大事な梃子であって、キット皆、この梃子の力を常日頃（知らず識らずのうちにでも）借りているものと思われます。

(和訳は本稿筆者による)

そういうわけで我々は、^{しよほい}地味かもしれないが、1次元の拡散を密度相関経路で正しく扱う方法論の確立を当面の目標とする。大事なことは、ただ1次元の問題が解ければよいというのではなしに、「一般化可能な概念」による解法を確立することである。

2.3 密度場の Langevin 方程式

通常の Euler 的な MCT および我々の Lagrange 的な理論の出発点として、粒子の Langevin 方程式 (7) を、1次元の密度場およびその流束

$$\rho = \rho(x, t) = \sum_j \rho_j, \quad \rho_j = \rho_j(x, t) = \bar{\delta}(x - X_j(t)), \quad (12)$$

$$Q = Q(x, t) = \sum_j \rho_j(x, t) \dot{X}_j(t) \quad (13)$$

で書き直す。なお ρ_j は j 番目の粒子の 1 体密度であり、 $\bar{\delta}$ はわずかに鈍らせた delta 関数をあらわす（以下では特に必要がない限りバーを省略する）。定義により当然、 ρ は連続の式

$$\partial_t \rho + \partial_x Q = 0 \quad (14a)$$

を満たし、 Q は、短時間での慣性の効果を無視する近似のもとで

$$Q = -D \left(\partial_x \rho + \frac{\rho}{k_B T} \partial_x U \right) + \sum_j \rho_j(x, t) f_j(t) \quad (14b)$$

$$U = U[\rho](x) = \int dx' V(x - x') \rho(x') \quad (14c)$$

という式に従うことが示せる。以下では、式 (7) の代わりに、方程式系 (14) を基礎方程式として扱う。

2.4 Euler 表示の 1 次元 MCT による結果

まずは式 (14) に対する MCT 方程式を具体的に書き下そう。Fourier モードを

$$\hat{\rho}(k, t) = \frac{1}{L} \int dx e^{ikx} [\rho(x, t) - \rho_0], \quad \rho(x, t) = \rho_0 + \sum_k \hat{\rho}(k, t) e^{-ikx} \quad (15)$$

$$\hat{\rho}_j(k, t) = \frac{1}{L} \int dx e^{ikx} \rho_j(x, t) = L^{-1} \exp [ikX_j(t)] \quad (16)$$

により定義し、密度場の Langevin 方程式 (14) を

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\rho}(k, t) = & -Dk^2 \left(1 + \frac{2\rho_0 \sin k\sigma}{k} \right) \hat{\rho}(k, t) \\ & + D \sum_{k+p+q=0} k (\sin p\sigma + \sin q\sigma) \hat{\rho}(-p, t) \hat{\rho}(-q, t) + \hat{f}_\rho(k, t) \end{aligned} \quad (17)$$

のように書き直す。なお、非線形項は粒子間ポテンシャル $V(r)$ に由来するが、必ずしも式 (8) および式 (14c) そのものを正直に反映しておらず、密度の 1 時刻相関である静的構造因子

$$S(k) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_j \langle \exp [ik(X_j - X_i)] \rangle = \frac{L^2}{N} \langle \hat{\rho}(k, 0) \hat{\rho}(-k, 0) \rangle \quad \left(\frac{k}{2\pi/L} \in \mathbf{Z}^+ \right) \quad (18)$$

と整合するように $V(r)$ を実効ポテンシャルで置き換えたうえで V_k^{pq} を決める形になっている。ここで考えている直径 σ の 1 次元剛体球粒子の場合、実効ポテンシャルは、式 (8) で $V_{\max} = k_B T$ としたものと一致する。

MCT で計算される量は

$$C(k, t) = \frac{1}{N} \langle \hat{\rho}(k, t) \hat{\rho}(-k, 0) \rangle, \quad C_s(k, t) = \langle \hat{\rho}_j(k, t) \hat{\rho}_j(-k, 0) \rangle \quad (19)$$

で定義される密度相関である。もし粒子どうしの相互作用が全くなければ、式 (14) の U の項が消えて $C(k, t) = C_s(k, t) = L^{-2} e^{-Dk^2 t}$ となり、これと

$$C_s = L^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \langle R^n \rangle \quad (20)$$

から $\langle R^2 \rangle = 2Dt$ というよく知られた結果が得られる。では相互作用を含めた場合、 C_s はどのように修正されるのだろうか。密度の相関関数 C に対する 1 次元 MCT 方程式は、式 (10) で

$$M(k, s) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dq (\sin p\sigma + \sin q\sigma)^2 C(p, s) C(q, s) \quad (21)$$

としたもので与えられ (ただしここで $k+p+q=0$)、さらにこれと連立させて、 C_s に対する式

$$(\partial_t + Dk^2) C_s(k, t) = - \int_0^t dt' M_s(k, t-t') \partial_{t'} C_s(k, t') \quad (22)$$

$$M_s(k, s) \propto \int_{-\infty}^{+\infty} dq \sin^2 p\sigma C(p, s) C_s(q, s) \quad (23)$$

を解く。期待されることは、非線形項の存在が M および M_s に反映されることで C_s が修正を受け、これによって $\langle R^2 \rangle \propto t^{1/2}$ という異常拡散が導出されることなのだが、残念ながら MCT はこの期待に答えてくれない。

以下、宮崎 [30] に従って、1次元 MCT 方程式の長時間での漸近挙動を見ることにする。MCT 方程式 (10)(22) から $\langle R^2 \rangle \propto \sqrt{t}$ を得るためには、式 (20) から分かるように、 C_s の展開のなかに $k^2 \sqrt{t}$ という項がなければならない。もし、そのような項があるなら、 C_s の Laplace 変換

$$\hat{C}_s(k, z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^\infty dt e^{-zt} C_s(k, t) = \frac{C_s(t=0)}{z + \hat{D}(z)k^2 + O(k^4)}$$

を通じて定義される $\hat{D}(z)$ は、 $z \rightarrow +0$ で $\hat{D} \sim \sqrt{z}$ のように振る舞うはずである。これと、 C_s に対する MCT 方程式 (22) の Laplace 表示

$$\hat{C}_s(k, z) = \frac{C_s(t=0)}{z + \frac{Dk^2}{1 + \hat{M}_s(k, z)}} \quad (24)$$

を比較することにより、問題は $\hat{M}_s(0, z) \sim z^{-1/2}$ か否かという点に帰着する。

ところが、式 (23) より

$$\hat{M}_s(0, z) \propto \int_0^\infty dt e^{-zt} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \sin^2 q\sigma C(q, t) C_s(q, t) \propto \int_0^\infty dq \sin^2 q\sigma \hat{C}_s(q, z + Dq^2)$$

であり、これと式 (22) を解いて得られる $\hat{M}_s(0, z)$ は、 $z \rightarrow +0$ で発散しないことが示される。つまり、式 (20) の展開のなかに \sqrt{t} は現れないことになり、定石どおりの MCT では異常拡散は再現できないことが結論される [30]。

振り返ってみれば、Langevin 方程式 (14) を波数表示に書き換える際に粒子間相互作用ポテンシャル $V(r)$ を有効ポテンシャルで置き換えていることに問題の根源がある。しかし、そこに直接踏み込むのは無理である。単純に V_{\max} を大きくしても、 $\langle R^2 \rangle$ の長時間の漸近挙動が t から $t^{1/2}$ に変わるわけではないからだ。他方、宮崎 [30] は、4点相関を取り込むことで結果が改善できる可能性を示唆している。すぐあとで示す我々の方法はラベル変数を用いて Lagrange 相関を計算するというもので、これにより V_{\max} の問題を回避し、実質的に4点相関に相当するものを取り込んでいることになるのだと思われる。

3 ラベル変数の方法

3.1 ラベル変数の具体的構成

MCT は、粒子間相互作用を密度場の Fourier モードの相互作用として扱い、記憶関数 M を通じてケージ効果をとらえようとするが、SFD での宮崎の結果 [30] は、長時間にわたるケージ効果の記述がじゅうぶんに正確でないことを意味する。同じ問題が棒状高分子系 [53] でも現れる。これに対する我々のアイデア [50] は、ケージ効果を記憶関数に任せず、ケージに貼りついて移動し伸縮する移流座標系を用いることである。これは要するに、Lagrange 記述を粒子スケールにまで持ち込むことを意味する。

Lagrange 記述にもいろいろな方法があるが、ここでは、粒子番号 j を連続化した ξ というラベル変数を陽に定義し、 x に代えて ξ に座標の役割をさせる。ラベル変数の定義は、初期位置を参照するのではなく、凍結場たる密度 $\rho = \rho(x, t)$ になるべく密着して定義するのが良さそうである。このあたりの発想は、渦度に密着したラベル変数としての Clebsch 変数と、ある意味で共通しているとも言える。

ラベル変数として大事なことは、各時刻において x と ξ のあいだに 1 対 1 の対応があること、また移流方程式を満たすことである。通常の流体力学は、粒子スケールの力学から見ると粗視化の産物なので速度 u が各点で連続的に定義されており、したがって、ラベル変数 ξ あるいは“ラベル場” $\xi = \xi(x, t)$ の満たすべき移流方程式は、 $(\partial_t + u\partial_x)\xi(x, t) = 0$ と書ける。他方、粒子が見え始める解像度で見ると、必ずしも速度が各点で定義できるわけではないので、そのままでは少々困ったことになる。そこで、移流方程式としては、通常の形に ρ を掛けた

$$(\rho\partial_t + Q\partial_x)\xi(x, t) = 0 \quad (25)$$

という条件を要請することにする。

さて、連続の式 (14a) を満たすという条件のもとで任意に与えられた (ρ, Q) に対し、式 (25) を満たす ξ が必ず存在することが分かる。なぜかという、連続の式 (14a) は 1+1 次元の発散がゼロという形をしているので、Poincaré の補題 [59, 60] により

$$\rho = \partial_x \xi(x, t), \quad Q = -\partial_t \xi(x, t) \quad (26)$$

を満たすポテンシャルが存在し、この ξ を移流方程式 (25) の左辺に代入すると

$$\rho\partial_t \xi + Q\partial_x \xi = (\partial_x \xi)(\partial_t \xi) - (\partial_t \xi)(\partial_x \xi) = 0 \quad (27)$$

となるからである。さらに式 (26) の解は陽に書き下すことが可能で、

$$\xi = \xi(x, t) = \int_{X_0(t)}^x \rho(x', t) dx' = \sum_i \bar{\theta}(x - X_i(t)) \quad (28)$$

のように書ける。ここで $\bar{\theta}$ はわずかに鈍らせた階段関数である（一価性と可逆性を持たせるため）。

3.2 ラベル変数による Langevin 方程式の書き換え

上記のようにして、勝手な粒子配置に対して $\xi = \xi(x, t)$ が存在すると分かったので、その逆写像 $\xi \mapsto x = x(\xi, t)$ を考え、 ξ を空間座標として扱う。これにより、 (ξ, t) を独立変数として、Langevin 方程式 (14) を書き換えよう。

まず、連鎖則を用いて、微分演算子を

$$\partial_x = \frac{\partial \xi}{\partial x} \partial_\xi = \rho \partial_\xi, \quad (\partial_t \cdot)_x = (\partial_t \cdot)_\xi - Q \partial_\xi \quad (29)$$

のように書き換える。Lagrange 微分は D/Dt あるいは D_t とは書かず、 $(\partial_t \cdot)_\xi$ と書いている。間違ふおそれのない場合には、これを単に ∂_t と書くことにする。

粒子位置 x はもはや独立変数ではなく、 $x = x(\xi, t)$ である。恒等式 $\partial_t \partial_\xi x = \partial_\xi \partial_t x$ により、

$$\partial_t \left[\frac{1}{\rho(\xi, t)} \right] = \partial_\xi \left(\frac{Q}{\rho} \right) \quad (30)$$

という運動学的な関係式が得られる。式 (30) はまた、式 (6) を ρ^{-2} 倍して導くこともできるが、その際、上に書いたとおり、式 (30) の ∂_t は Lagrange 微分であることに注意が必要である。

これらの式を用いて Langevin 方程式 (14) を書き換え、

$$\begin{aligned} \partial_t \left[\frac{1}{\rho(\xi, t)} \right] &= -D \partial_\xi \left(\partial_\xi \rho + \frac{\rho}{k_B T} \partial_\xi U \right) + \partial_\xi \sum_j \delta(\xi - \Xi_j) f_j(t) \\ &= -D \partial_\xi [\partial_\xi \rho + 2 \sinh(\rho \sigma \partial_\xi) \rho] + f_L(\xi, t) \end{aligned} \quad (31)$$

を得る。なお、 $V_{\max} = +\infty$ をまともにも扱うわけにもいかないので、 U のなかの粒子間相互作用は有効ポテンシャルで置き換えた。

3.3 平均二乗変位および 2 粒子変位相関を求める公式の導出

式 (31) を見ると、どうやら、密度ゆらぎを $\rho(x, t) - \rho_0$ の形で扱うよりも、

$$\psi(\xi, t) = \frac{\rho_0}{\rho(\xi, t)} - 1 \quad (32)$$

を従属変数に選ぶほうが良さそうである。図 3 に示すように、 ψ には粒子間隔の変動という意味づけができる。この意味で、ある種の自由体積理論のようなものを扱うことになる。

Euler 的な MCT では、 $\langle R^2 \rangle$ は C_s から式 (20) を通じて求めたが、これに代わる、 $\langle R^2 \rangle$ を求める公式が必要である。もし ψ の揺らぎが $\langle \psi(\xi, t) \psi(\xi', 0) \rangle$ の形で求められたとするならば、これを用いて $\langle R^2 \rangle$ をあらわす公式は

$$\langle R^2 \rangle = \frac{1}{\rho_0^2} \int_{\Xi_i}^{\Xi_j} d\xi \int_{\Xi_i}^{\Xi_j} d\xi' \left[\langle \psi(\xi, 0) \psi(\xi', 0) \rangle - \langle \psi(\xi, t) \psi(\xi', 0) \rangle \right] \quad (33)$$

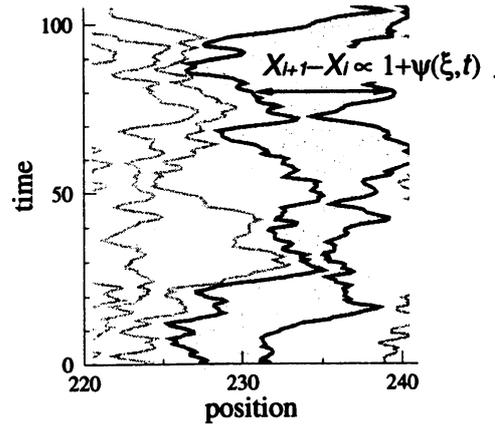


図3 変数 ψ の概念図。粒子間隔の平均値は $1/\rho_0$ であるが、式 (32) で定義される ψ は、そのときの粒子間隔 $1/\rho(\xi, t)$ が平均値の $1 + \psi$ 倍になっていることを示す。

と書ける。ただしここで $\Xi_j = \xi(X_j, t)$ であり、 i と j は十分離れている ($1 \ll |j - i| \ll N/2$) とする。式 (33) を導出するには、 $\xi(x, t)$ の定義と ψ の定義から

$$X_j(t) - X_i(t) = \rho_0^{-1} \int_{\Xi_i}^{\Xi_j} [1 + \psi(\xi, t)] d\xi \quad (34)$$

となることに着目し、式 (34) から $X_j(0) - X_i(0) = \dots$ を引いて二乗すればよい。

MCT 的な理論を作ることを考えると、波数空間での表示も必要である。そこで ξ に対応する Fourier モードを考えて haček (逆向きの帽子) で表すことにし、

$$\check{\psi}(k, t) = \frac{1}{N} \int d\xi e^{ik\xi} \psi(\xi, t), \quad \psi(\xi, t) = \sum_{k/\Delta k \in \mathbf{Z}} \check{\psi}(k, t) e^{-ik\xi} \quad \left(\Delta k = \frac{2\pi}{N} \right) \quad (35)$$

のように定義する。これを用いて、式 (31) を $\check{\psi}$ で書き直すと

$$\partial_t \check{\psi}(k, t) = -\frac{D_*}{S} k^2 \check{\psi}(k, t) + \sum_{k+p+q=0} \mathcal{V}_k^{pq} \check{\psi}(-p, t) \check{\psi}(-q, t) + \rho_0 \check{f}_L(k, t) \quad (36)$$

のようになり、ここで $D_* = \rho_0^2 D$, $S = 1/(1 + 2k^{-1} \sin \rho_0 \sigma k)$ である。また \mathcal{V} の詳細な形は論文 [50] を見ていただくことにして、ここでは、 $\mathcal{V}_k^{pq} = D_* k^2 W_{kpq}$ と書けることと、 W は添字の任意の入れ換えに対して対称であることのみを記しておく。

さて、運動学的な式 (30) の導出を思い出すと、変位 $R(\xi, t) = x(\xi, t) - x(\xi, 0)$ が

$$R(\xi, t) = \int_0^t \frac{Q(\xi, t')}{\rho(\xi, t')} dt' = \partial_\xi^{-1} \left(\frac{1 + \psi}{\rho_0} \right) \Big|_0^t = \frac{1}{\rho_0} \sum_k \frac{e^{-ik\xi}}{-ik} [\check{\psi}(k, t) - \check{\psi}(k, 0)] \quad (37)$$

と書けることが分かる。ここで、式 (35) で定められる $\check{\psi}$ の相関を

$$\check{C}(k, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{L^2} \langle \check{\psi}(k, t) \check{\psi}(-k, 0) \rangle \quad (38)$$

と書くことにすれば、これと式 (37) から、

$$\langle R(\xi, t)R(\xi', t) \rangle = \frac{L^4}{\pi N^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik(\xi-\xi')} \frac{\check{C}(k, 0) - \check{C}(k, t)}{k^2} \quad (39)$$

という公式が導出できる。式 (39) の左辺にある 2 粒子変位相関は、時空上の 4 点を含む統計量であることに注意しておく。また、式 (39) で $\xi = \xi'$ としたものは、式 (33) の波数表示に相当する。

歴史的には、式 (39) で $\xi = \xi'$ としたものとほぼ同等な式が、Alexander & Pincus [45] によって近似式として導出されており、その後も、何人かの研究者が類似の式を用いている。過去の文献の式が近似にとどまる理由は、Euler 表示と Lagrange 表示の厳密な区別をおこなわず、両者を近似的に入れ換え可能なものと見なす線形弾性論的な扱いを行っていることが主な理由である。ここでの式 (39) は、ラベル変数を陽に構成して用いることで Alexander & Pincus [45] の式を厳密化し拡張したものと解釈できる。この意味で、式 (39) を拡張 Alexander–Pincus 公式と呼ぶことにしよう。

3.4 線形解析による異常拡散の再導出

式 (38) の Lagrange 的相関 \check{C} と拡張 Alexander–Pincus 公式 (39) から平均二乗変位 $\langle R^2 \rangle$ を求める計算の概略を見るために、まずは式 (31) の線形解析をおこない、これから \check{C} を経由して $\langle R^2 \rangle$ を計算してみよう。線形化は ψ が小さい場合に妥当となるので、長時間経過後の漸近的挙動に対しては正しい結果を与えることが期待できる。実際に計算してみると、この方法で、異常拡散の式 (9) が正しく再導出されることが分かる [50]。長時間の漸近挙動に関する限り、非線形項をまともに扱う必要はなく、線形解析と拡張 Alexander–Pincus 公式 (39) だけで異常拡散が示せるのである。

まずは式 (31) を線形化すると $\partial_t \check{\psi}(k, t) = -(D_*/S)k^2 \check{\psi} + \rho_0 \check{f}_L$ となり、これから

$$\check{C} = \frac{S}{L^2} \exp(-\rho_0^2 D_c k^2 t) \quad (40)$$

を得る。ただし $D_*/S = \rho_0^2 D/S = \rho_0^2 D_c$ とした。式 (40) は、波数表示でなく ξ 表示に直して

$$\langle \psi(\xi, t)\psi(\xi', 0) \rangle = \frac{S}{\sqrt{4\pi\rho_0^2 D_c t}} \exp\left[-\frac{(\xi - \xi')^2}{4\rho_0^2 D_c t}\right] \quad (41)$$

のように書くこともできる。

こうして式 (41) で得られた $\langle \psi\psi \rangle$ を式 (33) に代入すると

$$\langle R^2 \rangle = \frac{S}{\rho_0^2} \int_{\Xi_i}^{\Xi_j} d\xi \int_{\Xi_i}^{\Xi_j} d\xi' \left\{ \delta(\xi - \xi') - \frac{\exp\left[-\frac{(\xi - \xi')^2}{4\rho_0^2 D_c t}\right]}{\sqrt{4\pi\rho_0^2 D_c t}} \right\} = \frac{2S}{\rho_0} \sqrt{\frac{D_c t}{\pi}} \quad (42)$$

となり、Kollmann [46] の式 (9) が、係数まで含めて完全に再現できる [50]。また、同じ内容の計算を波数表示でおこなうことももちろん可能で、式 (40) を修正 Alexander–Pincus 公式 (39) に代入し、さらに $\xi = \xi'$ とすることで、全く同じ結果が再現される。

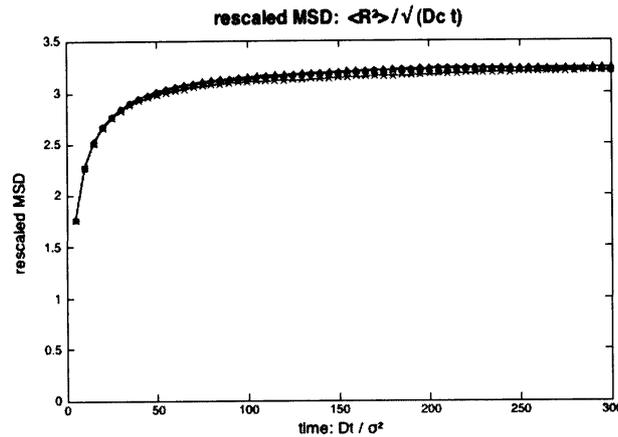


図4 $\langle R^2 \rangle / \sqrt{D_c t}$ を数値的に求め、 Dt/σ^2 に対してプロットした図。密度および粒子数は $\rho_0 = N/L = 0.2\sigma^{-1}$, $N = 3000$ とした。系が比較的大きいので、アンサンブル平均を省いて粒子平均に置き換え、その代わりに、3つの独立な時系列に対する結果を重ねて示している。

3.5 非線形解析：Lagrange 的 MCT

前の章での線形解析は、長時間の極限で漸近的に成り立つ線形近似に基づいており、式(9)あるいは式(42)は漸近的な式としては正しいが、過渡的にはそこからずれた挙動が見られる。たとえば、もし式(9)が正確に成り立つなら、 $\langle R^2 \rangle / \sqrt{D_c t}$ は t によらず一定値となるはずであるが、実際に $\langle R^2 \rangle$ を式(7)の数値積分から求め、横軸に時間、縦軸に $\langle R^2 \rangle / \sqrt{D_c t}$ をプロットすると、図4に示すように、かなり時間が経過しないと一定値にならない。

このような過渡的挙動は、もちろん $t = 0$ の近傍での通常拡散的な挙動と $t \rightarrow +\infty$ での式(9)とを適当に補間すれば出てくるのではあるが、それでは Hilbert の言う「一般化可能な概念を通じて解決を成し遂げる」ことにはならない。そこで、ここではあえて、 \check{C} に対する Lagrange 的 MCT の導出を試みる。MCT 方程式さえ導出できれば、これを解くことで \check{C} の過渡的挙動が計算できるので、あとは拡張 Alexander-Pincus 公式(39)を通じて $\langle R^2 \rangle$ の挙動が分かることになる。

3.5.1 SFD に対する DIA

式(36)から出発して \check{C} に対する MCT 方程式を得るために、以下では、いったん、相関関数 \check{C} とプロパゲータ(応答関数) G に対する連立方程式を導出する。乱流の分野では、このような相関関数と応答関数の連立方程式を導出する理論は、直接相互作用近似(Direct-Interaction Approximation = DIA)として知られている[61–64]。

DIA 方程式の導出にはさまざまな考え方があるが、妥当な結果を得るために最も重要なことは、良い変数を選ぶことである[64]。ここでの我々の出発点は、Lagrange 表示した粒子間隔 $\psi = \psi(\xi, t)$ の方程式(36)であり、これから、式(38)で定義される相関 \check{C} と、あとで式(49)で定

義される応答関数 G に対する完結近似方程式を導出する。なお、ランダム力 \check{f}_L の満たすべき関係式は、式 (1b) の 1 次元版を波数表示することにより

$$\rho_0^2 \langle \check{f}_L(k, t) \check{f}_L(-k', t') \rangle = \frac{2D_*}{N} k^2 \delta_{kk'} \delta(t - t') \quad (43)$$

となる。Euler 的な場合には、揺動力の分散には未知数 ρ への依存性が現れるが [35]、式 (43) の右辺にはそれに当たるものがなく、既知関数のみですべて書けていることに注意しておく。

さて、まずは定石どおり式 (36) に $\check{\psi}(-k, 0)$ を掛けて統計平均をとると

$$\partial_t \check{C}(k, t) = -\frac{D_*}{S} k^2 \check{C}(k, t) + \frac{N}{L^2} \sum \mathcal{V}_k^{pq} \langle \check{\psi}(-p, t) \check{\psi}(-q, t) \check{\psi}(-k, 0) \rangle \quad (44)$$

という式が得られる。式 (44) に $\langle \check{\psi} \check{f}_L \rangle$ が現れないのは、式 (43) の右辺に未知関数 ψ に対する依存性がないおかげである。したがって、式 (44) で評価すべき対象は $\langle \check{\psi} \check{\psi} \check{\psi} \rangle$ のみとなる。ここで最も重要なことは良い変数を選ぶことなので、 \check{C} を Lagrange 的に定義し、 \check{C} と G で完結近似をおこなうと決めた時点で答えは既に出ているとも言えるが、我々の気持ちとしては導出の過程も大事にしたい。とある教科書の Bessel 関数の章 [65, p.55] には、母関数とは魔法である旨の記述があり、我々としても、たとえば MSR の方法 [55] などにはこの形容があてはまるように思える。以下では、比較的「魔法」の度合いが少ない、後藤・木田 [66] の考え方に従う。

後藤・木田 [66] の導出法では、もともと Kraichnan [61] が考えたように、まずは DIA 分解を導入する。式 (36) の非線形項を、各 \mathcal{V}_k^{pq} に対して $\{k, p, q\}$ を頂点とする三角形（“直接相互作用”）を描く方法で図示すると、だいたい $O(N^2)$ 個に及ぶ多数の三角形がある一方、辺を共有する三角形は皆無であることがわかる。そこで、直接相互作用 $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ をひとつ選び、この三角形をキャンセルするような人為的な外力項 I_k を仮想的に導入して、 I_k に対する摂動論を組む。数式の上では、直接相互作用 $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ に関する DIA 分解を

$$\check{\psi}(k, t) = \check{\psi}_0(k, t; \{\alpha, \beta, \gamma\}, t_0) + \check{\psi}_1(k, t; \{\alpha, \beta, \gamma\}, t_0) \quad (45)$$

と書き、これを、誤解が生じない範囲内で $\check{\psi}_k = (\check{\psi}_0)_k + (\check{\psi}_1)_k$ と略記することにしよう。DIA 分解 (45) における $\check{\psi}_0$ の定義は、

$$\partial_t (\check{\psi}_0)_k = -\frac{D_*}{S} k^2 (\check{\psi}_0)_k + \sum \mathcal{V}_k^{pq} (\check{\psi}_0)_{-p} (\check{\psi}_0)_{-q} + (\rho_0 \check{f}_L)_k + I_k \quad (46)$$

$$\check{\psi}_0|_{t=t_0} = \check{\psi}|_{t=t_0} \quad (47)$$

で与えられ、ここで I_k は“直接相互作用殺し”

$$I_k = I[\check{\psi}_0](k, t; \{\alpha, \beta, \gamma\}) = -\sum_{\{\alpha, \beta, \gamma\}} \delta_k^\alpha \mathcal{V}_\alpha^{\beta\gamma} (\check{\psi}_0)_{-\beta} (\check{\psi}_0)_{-\gamma}$$

である。式 (36) と式 (46) の差をとり、 $O(\check{\psi}_1^2)$ の項を無視すると

$$\partial_t (\check{\psi}_1)_k = \mathcal{L}_{\text{DIA}} (\check{\psi}_1)_k - I_k \quad (48)$$

の形の線形非同次方程式が得られる。解は、

$$\partial_t G_k^{k'} = \mathcal{L}_{\text{DIA}} G_k^{k'}, \quad G_k^{k'}(t, t') \Big|_{t=t'} = \delta_k^{k'} \quad (49)$$

により定義される G を用いると、少なくとも形式的に

$$(\check{\psi}_1)_k = - \int_{t_0}^t dt' \sum G_k^{k'}(t, t') I_{k'}(t') \quad (50)$$

と書ける。

目標は \check{C} に対する方程式を求めることであり、式 (44) の 3 体相関が評価できればよい。そこで、右辺の \sum のなかの一項をとり、 $\{\alpha, \beta, \gamma\} = \{-k, -p, -q\}$, $t_0 < 0$ とした DIA 分解を適用する。本来には $\{-k, -p, -q\}$ のあいだには直接相互作用による相関があるはずだが、直接相互作用を殺したうえで $t_0 \rightarrow -\infty$ とすると、 \check{f}_L の効果で相関が失われるため、 $\check{\psi}_0$ とうしは無相関になると考えられる。さらに、 $\check{\psi}_1$ の 1 次の項は、 G を用いた形式解 (50) を代入して計算すると 2 体相関の積に分解できて*7、

$$\begin{aligned} \langle \check{\psi}(-p, t) \check{\psi}(-q, t) \check{\psi}(-k, 0) \rangle &= \frac{4L^4}{N^2} \text{sym}_{pq} \nu_q^{pk} \int_{t_0}^t dt' \bar{G}(-q, t-t') \check{C}(p, t-t') \check{C}(k, |t'|) \\ &\quad + \frac{2L^4}{N^2} \nu_k^{pq} \int_{t_0}^0 dt' \bar{G}(-k, -t') \check{C}(p, t'-t_0) \check{C}(q, t'-t_0) \end{aligned}$$

という結果が得られる。ただしここで \bar{G} は

$$\bar{G}(-k, t-t') = \langle G_{-k}^{-k'}(t, t') \rangle$$

のような略記であり、また $\check{C}(-k, t) = \check{C}(k, t)$ であることを用いた。なお、ここでは決して 4 体相関を 2 体相関に分解する近似を手で入れているわけではないし、また揺らぎがガウスのであるとかいう類の仮定も特に用いていないことを強調しておく。

あとは \bar{G} に対する方程式が得られればよい。方程式 (49) の統計平均には $\langle \check{\psi}_0 G \rangle$ が現れるので、これを同様に DIA 分解によって計算する。具体的には

$$J_k^{k'}(t, t') = -2 \sum_{\{\alpha, \beta, \gamma\}} \delta_k^\alpha \nu_\alpha^{\beta\gamma} (\check{\psi}_0)_{-\beta} G_{-\gamma}^{k'}(t, t') \quad (51)$$

として、 G を

$$G = G_0 + G_1, \quad \partial_t G_0 = \mathcal{L}_{\text{DIA}} G_0 + J, \quad \partial_t G_1 = \mathcal{L}_{\text{DIA}} G_1 - J$$

のように DIA 分解する。解は

$$(G_1)_k^{k'}(t, t') = - \int_{t'}^t dt'' \sum G_k^{k''}(t, t'') J_{k''}^{k'}(t'', t') \quad (52)$$

*7 ただしここで $\{p, q, k\}$ のなかに重複はないものと暗に仮定している。非圧縮 Navier–Stokes の場合は重複がある項の寄与はゼロだが、いまの場合はそのようなことは期待できない。おそらく、あとで出てくる G の紫外発散あるいは $M_C(k, 0)$ の問題は、ここに関係しているものと思われる。

のように書けるので、これを用いて $\langle \psi_0 G \rangle$ を計算し、 \bar{G} に対する方程式を得る。

以上の結果は、次の連立方程式にまとめられる：

$$\left(\partial_t + \frac{D^*}{S} k^2 \right) \check{C}(k, t) = \int_{t_0}^t dt' M_G(k, t-t') \check{C}(k, |t'|) + \int_{t_0}^0 dt' M_C(k, t-t') \bar{G}(-k, -t') \quad (53)$$

$$\left(\partial_t + \frac{D^*}{S} k^2 \right) \bar{G}(k, t) = \int_0^t dt' M_G(k, t-t') \bar{G}(k, t') \quad (54)$$

ただしここで

$$M_G(k, s) = \frac{4L^2}{N} \sum \nu_k^{pq} \nu_q^{pk} \check{C}(p, s) \bar{G}(-q, s), \quad M_C(k, s) = \frac{2L^2}{N} \sum (\nu_k^{pq})^2 \check{C}(p, s) \check{C}(q, s)$$

であり、また $t_0 \rightarrow -\infty$ とする。なお、乱流の場合には $t_0 \rightarrow 0$ に取ることも可能であって、それは（結果論かもしれないが）直接相互作用を殺したあとに相関が消える速さが乱流の場合には相当に速いためだとも解釈できる。また、じつは結果が t_0 の選択によらないことも、モデルの性質を利用して陽に示すことができる。乱流の場合には、非線形相互作用はエネルギー保存的であり、着目しているモードに対して他の多数の自由度がランダム外力として働くために相関が消えるのだが、ガラス系では、非線形相互作用が純散逸的であるため、他のモードからの作用によるランダム化は期待できないような気がする。長い時間をかけて熱的揺動力によるランダム化が起きると考え、 $t_0 \rightarrow -\infty$ と選ぶことにする。本来、この点について、たとえばスピングラスなどの簡単な離散モデル^{*8}を用いた検証が必要だと思われるが、そのような検証は将来の検討課題ということにして、話を先に進める。

3.5.2 Lagrange 的 MCT 方程式と揺動散逸定理との整合性

原理的には、式 (53)(54) および初期条件

$$\check{C}(k, 0) = \frac{S(k)}{L^2}, \quad \bar{G}(k, 0) = 1 \quad (55)$$

のみで \check{C} および \bar{G} が定まるはずである。しかし、これを正直に計算しようとする、次の2つの困難に直面する。

- 前の章の最後に書いたような理由で $t_0 \rightarrow -\infty$ とするので、非因果的な式になる。
- 式 (54) の右辺にある M_G と G の畳み込みは紫外発散するように思われる^{*9}。

これらの困難を（表向き）回避するために、別の手を考える。

まず、方程式 (53) を t で微分する。方程式 (54) を $\lambda_0 k^2$ 倍したものをこれに加え（ここで λ_0 は適当な定数）、 $\partial_t \check{C} + \lambda_0 k^2 G$ に対する方程式を求める：

^{*8} 後藤・木田 [66] が DIA の考え方の検証のために用いている簡略モデルは、乱流モデル (4) の性質を受け継ぐべく、非線形項が純粋に保存的になるように作られている。これと同じような検証を、何らかの純散逸的なモデル、たとえば文献 [9] の式 (40)(41) にある p -spin model の疎結合版で行う必要がある。

^{*9} なお乱流の DIA とは違って、紫外発散は問題にならない。発散の困難の現れ方が違うのは、ひとつには非線形項の波数依存性が異なるためであり、もうひとつには式 (36) で自己相互作用が紛れ込んでくるためである。

$$\begin{aligned}
& \left(\partial_t + \frac{D_* k^2}{S} \right) [\partial_t \check{C}(k, t) + \lambda_0 k^2 G(k, t)] \\
&= \int_0^t dt' M_G(k, t-t') [\partial_t \check{C}(k, t') + \lambda_0 k^2 G(k, t')] \\
& \quad + \int_{t_0}^0 dt' \{ M_G(k, t-t') \partial_{t'} \check{C}(k, -t') - [\partial_{t'} M_C(k, t-t')] \bar{G}(-k, -t') \} \tag{56}
\end{aligned}$$

右辺第 2 項には \mathcal{V} が含まれているので、 $\mathcal{V}_k^{pq} = D_* k^2 W_{kpq}$ と書けることと W の対称性を利用して、これを具体的に書き下すと、多少の式変形のあと、次の式が得られる：

$$\begin{aligned}
& \text{[式 (56) の右辺第 2 項の被積分関数]} \\
&= \frac{4L^2}{N} D_*^2 k^2 \sum W_{kpq}^2 [q^2 \bar{G}(-q, t-t') \partial_{t'} \check{C}(k, -t') - k^2 \bar{G}(k, -t') \partial_{t'} \check{C}(q, t-t')] \\
&= \frac{4L^2}{N} D_*^2 k^2 \sum W_{kpq}^2 \{ q^2 \bar{G}(-q, t-t') [\partial_{t'} \check{C}(k, -t') - \lambda_0 k^2 \bar{G}(k, -t')] \\
& \quad - k^2 \bar{G}(k, -t') [\partial_{t'} \check{C}(-q, t-t') - \lambda_0 k^2 \bar{G}(-q, t-t')] \}.
\end{aligned}$$

したがって、もしすべての k に対して

$$\partial_t \check{C}(k) + \lambda_0 k^2 \bar{G}(k, t) = 0 \tag{57}$$

が成り立てば、式 (56) の両辺がゼロになり、等号が成立する。定数 λ_0 の値は、初期条件から $\lambda_0 = D_*/L^2$ と求められる。式 (57) は、揺動散逸定理 (Fluctuation-Dissipation Theorem) あるいは揺動応答関係式と呼ばれるもので、平衡系の一般的性質であり、分布関数から直接示すことができる [67]。上記に示した計算は、Lagrange 的 DIA の結果である式 (53)(54) が FDT と矛盾しないことを示している。この点は、通常の MSR の方法で MCT 方程式を導出しようとした際に、 G の方程式を捨てて FDT にすり替える必要があるのに比べて、たしかに改善されている点である。

ともかくこうして式 (53)(54) から式 (57) が得られたので、式 (54) を式 (57) で置き換え、これと式 (53) の連立方程式系を考えることにする。まず

$$\bar{G}(k, t) = -\frac{1}{\lambda_0 k^2} \partial_t \check{C}(k, t) \quad \text{したがって} \quad M_G(k, s) = -\frac{1}{\lambda_0 k^2} \partial_s M_C(k, s)$$

となることが容易に示される。これを (53) に代入すると

$$\left(\partial_t + \frac{D_* k^2}{S} \right) \check{C} = \frac{1}{\lambda_0 k^2} \left[M_C(k, 0) \check{C} - \int_0^t dt' M_C(k, t-t') \partial_{t'} \check{C}(k, t') \right]$$

となり、ここで $M_C(k, 0)$ は何かの間違い (?) と思って見なかったことにすれば、最終的に、Lagrange 相関 \check{C} に対する MCT 方程式が

$$\left(\partial_t + \frac{D_* k^2}{S} \right) \check{C}(k, t) = - \int_0^t dt' M(k, t-t') \partial_{t'} \check{C}(k, t') \tag{58}$$

のように導出される。ここで

$$M(k, s) = \frac{M_C(k, s)}{\lambda_0 k^2} = \frac{2L^4}{N} D_* k^2 \sum_{p+q=k} W_{pqk}^2 \check{C}(p, s) \check{C}(q, s) \tag{59}$$

である。

以上のようにして、式 (53)(54) から \bar{G} を消去して MCT 方程式 (58) を得ることができるが、この過程で式 (57) との矛盾が生じないのはラベル変数の方法の御利益であることを強調しておく。Lagrange 的な式 (31) の代わりに、通常の Euler 的な式 (14) から出発して同じような計算をした場合、式 (56) に相当する式がゼロにならず、計算はそこで行き詰まる [36]。これは、式 (14) のランダム力のなかに

$$\langle f_\rho(x, t) f_\rho(x', t') \rangle = 2D \partial_x \partial_{x'} \rho(x, t) \delta(x - x') \delta(t - t') \quad (60)$$

のような形で ρ 依存性が隠れているためである。ラベル変数の方法は、この隠れた ρ 依存性をランダム力から追い出す。そのおかげで式 (60) に相当する式は式 (43) のように変わる一方、非線形項の係数が対称性をもつようになり、これにより FDT との整合性が回復する。

得られた MCT 方程式 (58) をきちんと解くには数値計算が必要であるが、特に希薄極限 ($\rho_0 \sigma \rightarrow +0$) の場合には W および S が 1 になり、級数展開のような方法で解析的に解くことが可能になる。現時点で得られている結果は、少なくとも定性的には図 2 の挙動を再現する（今回は図示していない）。定量的な一致のためには、級数展開（長時間極限からの長波展開）に頼らず、なおかつ有限密度の効果を取り込んだ数値計算を行う必要があると思われる。

4 ラベル変数についての考察

4.1 高次元への拡張

最初に書いたような本来の動機から言えば、ここでのラベル変数の方法を 2 次元あるいは 3 次元にどうやって拡張するかが問題となる。2+1 次元あるいは 3+1 次元でラベル変数を定義する問題を具体的に書くと、 $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{Q} = 0$ を満たす (ρ, \mathbf{Q}) に対し、 $\rho(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) \xi = 0$ を満たすような ξ をさがせ、ということになる。

今回、我々がラベル変数を構成するために用いたアイデアの要点は、連続の式 (14a) のポテンシャル表示 (26) を利用する点にあった。連続の式は 1+1 次元の発散がゼロという式だから、そのポテンシャルが存在する。このあたりの数学的な事情は、2 次元の定常流で $\text{div } \mathbf{u} = 0$ のポテンシャルとしての流線関数が存在するのと全く同じことである。

この発想を素朴に 3+1 次元に拡張すると、連続の式が成り立つように、

$$\rho = \text{div } \tilde{\xi}, \quad \mathbf{Q} = -\partial_t \tilde{\xi} \quad (61)$$

を満たすような $\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}, \tilde{\eta}, \tilde{\zeta})$ を求めれば良いような気がする。実際、このような $\tilde{\xi}$ を求めることは可能である。Maxwell 方程式の半分（ふつうは \mathbf{Q} を \mathbf{j} と書くと思うが）

$$\rho = \text{div } \mathbf{D} \quad (62a)$$

$$\mathbf{Q} = -\partial_t \mathbf{D} + \text{rot } \mathbf{H} \quad (62b)$$

を式 (61) と見比べると、

$$\tilde{\xi} = \mathbf{D} - \partial_t^{-1} \text{rot } \mathbf{H} \quad (63)$$

とすればよいことが分かる。

ところが、こうして定めた $\tilde{\xi}$ がラベル変数になるかという、そうは問屋が卸してくれない。1+1 次元の場合の式 (27) に相当する式が成り立つかどうか、2+1 次元で確かめてみよう。つまり、式 (61) で $\tilde{\zeta} = 0$ とした式

$$\rho = \partial_x \tilde{\xi} + \partial_y \tilde{\eta}, \quad \mathbf{Q} = - [\partial_t \tilde{\xi} \quad \partial_t \tilde{\eta}]$$

を前提として、 $\rho \partial_t \tilde{\xi} + \mathbf{Q} \cdot \nabla \tilde{\xi}$ がゼロになるかどうかを見ればよい。具体的に計算してみると

$$\begin{aligned} (\rho \partial_t + \mathbf{Q} \cdot \nabla) [\tilde{\xi} \quad \tilde{\eta}] &= (\partial_x \tilde{\xi} + \partial_y \tilde{\eta}) \partial_t [\tilde{\xi} \quad \tilde{\eta}] - [\partial_t \tilde{\xi} \quad \partial_t \tilde{\eta}] \begin{bmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{bmatrix} [\tilde{\xi} \quad \tilde{\eta}] \\ &= [\partial_t \tilde{\xi} \quad \partial_t \tilde{\eta}] \left\{ (\partial_x \tilde{\xi} + \partial_y \tilde{\eta}) \mathbf{1} - \begin{bmatrix} \partial_x \tilde{\xi} & \partial_x \tilde{\eta} \\ \partial_y \tilde{\xi} & \partial_y \tilde{\eta} \end{bmatrix} \right\} \\ &= [\partial_t \tilde{\xi} \quad \partial_t \tilde{\eta}] \begin{bmatrix} \partial_y \tilde{\eta} & -\partial_x \tilde{\eta} \\ -\partial_y \tilde{\xi} & \partial_x \tilde{\xi} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (64)$$

となり、これが厳密にゼロになるためには、 $\partial_t \tilde{\xi} = 0$ となるか、または右辺に現れる 2×2 行列がゼロ固有値をもつ必要がある。前者は $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ を意味する自明な場合で、そんなものを求めても仕方がない。他方、後者の行列式がゼロという条件は

$$\frac{\partial(\tilde{\xi}, \tilde{\eta})}{\partial(x, y)} = 0$$

を意味するので、2次元の曲線座標として機能しないことになる。

初期条件をラベルとして採用した場合の質量保存の式は、多くの流体力学の教科書に書いてあって、3+1次元では3次のJacobianで密度をあらわす式になる。したがって、密度はラベル変数の3次（正確には3重線形）の式で表されるべきなのに、式(61)は $\tilde{\xi}$ の1次であるという点にそもそも無理がある。つまり、もし式(61)の $\tilde{\xi}$ が仮にラベル変数と関係があるとしても、それは厳密な式ではなく線形近似の産物であると考えられる。確かに、ラベル空間での3次元微小要素 $d^3\xi = d\xi \wedge d\eta \wedge d\zeta$ を物理空間に写像して得られる dV について質量保存を要請し、さらに尺度を適当に調整することが可能だと仮定すれば

$$\rho = \det(\nabla\xi, \nabla\eta, \nabla\zeta) = \frac{\partial(\xi, \eta, \zeta)}{\partial(x, y, z)} \quad (65)$$

と考えるのが自然で、この式を適当に線形化すると $\text{div } \tilde{\xi}$ が現れる。では \mathbf{Q} のほうはどう考えたらよいだろうか。

そこで、 $\tilde{\xi}$ のことはしばらく忘れ、式(65)を仮定したうえで移流方程式に着目する。ラベル変数たるべき ξ の各成分（上つき添字を用いて $\xi^i \in \{\xi, \eta, \zeta\}$ のように書くことにする）が移流方程式を満たすことを要請すると、

$$\rho \partial_t \xi^i + \mathbf{Q} \cdot \nabla \xi^i = 0 \quad \text{すなわち} \quad \mathbf{Q} \cdot \nabla \xi^i = -\rho \partial_t \xi^i \quad (66)$$

でなければならない。もちろん $\xi^i = \xi^i(\mathbf{r}, t)$ であり、式 (66) の ∂_t は Euler 微分である。ここで、 $\{\nabla\xi, \nabla\eta, \nabla\zeta\}$ と $\{\partial_{\xi}\mathbf{r}, \partial_{\eta}\mathbf{r}, \partial_{\zeta}\mathbf{r}\}$ が $(\partial_i\mathbf{r}) \cdot \nabla\xi^j = \delta_i^j$ という双対基底の関係にあることを思い出すと、式 (66) は、 \mathbf{Q} を $\partial_i\mathbf{r}$ で展開したときの係数（反変成分）を与えることが分かる。したがって、式 (66) が成り立つならば

$$\mathbf{Q} = -\rho(\partial_t\xi^i)\partial_i\mathbf{r} \quad (67)$$

である。さらに、たとえば $\partial_{\xi}\mathbf{r}$ は $\nabla\eta$ と $\nabla\zeta$ の両方に直交するのだから $\nabla\eta \times \nabla\zeta$ のスカラー一倍になっているはずで、そのスカラーを $(\partial_{\xi}\mathbf{r}) \cdot \nabla\xi = 1$ および式 (65) に合うように定めると

$$\partial_{\xi}\mathbf{r} = \rho^{-1}\nabla\eta \times \nabla\zeta$$

という式が得られる。同様に $\partial_{\eta}\mathbf{r} = \rho^{-1}\nabla\zeta \times \nabla\xi$, $\partial_{\zeta}\mathbf{r} = \rho^{-1}\nabla\xi \times \nabla\eta$ であり、これらを式 (67) に代入して、

$$\mathbf{Q} = -(\partial_t\xi)\nabla\eta \times \nabla\zeta - (\partial_t\eta)\nabla\zeta \times \nabla\xi - (\partial_t\zeta)\nabla\xi \times \nabla\eta \quad (68)$$

を得る。

以上の議論は、もちろん結果からさかのぼっているもので、そのような ξ の存在を保証するものではない。しかし、少なくとも初期条件において ρ から ξ を定めることは可能であるはずだし、続いて、勝手に与えられた (ρ, \mathbf{Q}) に対し、 $\xi = \xi(\mathbf{r}, t)$ に妙な特異性を生じることなく移流方程式に従って ξ を時間発展させることも、一般に（あるいは制約があったとしても、きわめて緩い制約のもとで）可能なのではないかと思われる。この期待を、次のような予想の形で定式化しておく：

Conjecture: 連続の式をみたす範囲で勝手に与えられた (ρ, \mathbf{Q}) に対し、式 (65) および (68) を通じて (ρ, \mathbf{Q}) を与えるような“ポテンシャル” $\xi = (\xi, \eta, \zeta)$ が存在する。

もしかしら、この予想はどこかの文献に載っているのかもしれないが、今のところそのような情報は確認できていない。

4.2 Clebsch 変数

式 (68) は、一見して Clebsch 変数 [41, 68–70] を思わせる形をしているので、その存在条件（積分可能条件）が気になる。以下、教科書 [42, p.248] および他の文献に従って、Clebsch 変数についての基礎事項を確認し、式 (65)(68) と比較してみよう。

速度場の表示としての Clebsch 変数とは、

$$\mathbf{u} = \nabla\phi + \lambda\nabla\mu \quad (69)$$

における λ および μ のことである。最初の ϕ は普通の意味の速度ポテンシャルで、非圧縮流体の場合、 $\text{div } \mathbf{u} = 0$ を満たすように決まる。まず式 (68) が Clebsch 変数表示そのものではないことを確認しておく。式 (65)(68) はラベル変数の 3 次（3 重線形）なのに対し、 $\lambda\nabla\mu$ は 2 次（双線形）だからである。

Clebsch 変数の特徴は、渦度に密着した変数であるという点にある。まずは時間 t を固定し、流れのスナップショットを考えよう。スナップショットにおける Clebsch 変数 $\lambda = \lambda(\mathbf{r})$, $\mu = \mu(\mathbf{r})$ は、渦度場 $\boldsymbol{\omega}$ と

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla\lambda \times \nabla\mu \quad (70)$$

という関係にあるふたつのスカラー場として特徴づけられる。式 (70) から速度 \mathbf{u} を逆算して式 (69) を得る。

渦度場 $\boldsymbol{\omega}$ が式 (70) の形に書けることが期待できるのは、渦線の束が、ふたつの曲面群、たとえば $\alpha = \alpha(x, y, z)$ と $\beta = \beta(x, y, z)$ の等値面の交わりとして書ける場合である [42, p.248]。渦線とは、与えられた $\boldsymbol{\omega}$ に対する $d\mathbf{r}/ds = \boldsymbol{\omega}$ のような ODE の解曲線のことだから、この解が $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\alpha, \beta; s)$ の形で陽に得られれば上記の形に原理的に書き直せるはずだが、もちろん一般にそれが可能であるか否かは保証の限りではない。しかしともかく、渦線が等値面の交わりで書ける場合について考えると、 $\boldsymbol{\omega}$ は $\nabla\alpha$ にも $\nabla\beta$ にも垂直だから、各点で $\nabla\alpha \times \nabla\beta$ のスカラー倍になっているはずで、適当なスカラー場 γ を用いて

$$\boldsymbol{\omega} = \gamma \nabla\alpha \times \nabla\beta \quad (71)$$

のように書けることになる。そこで $(\alpha, \beta) \mapsto (\lambda, \mu)$ のような変数変換をおこなうと

$$\boldsymbol{\omega} = \gamma \left(\frac{\partial\alpha}{\partial\lambda} \nabla\lambda + \frac{\partial\alpha}{\partial\mu} \nabla\mu \right) \times \left(\frac{\partial\beta}{\partial\lambda} \nabla\lambda + \frac{\partial\beta}{\partial\mu} \nabla\mu \right) = \gamma \frac{\partial(\alpha, \beta)}{\partial(\lambda, \mu)} \nabla\lambda \times \nabla\mu$$

となるので、係数 $\gamma \partial(\alpha, \beta) / \partial(\lambda, \mu)$ が 1 になるように λ, μ をうまく調整すればよい。もし γ が (α, β) だけでは決まらない自由度を持っていたら、そのような調整は不可能になるが、式 (71) を $\text{div} \boldsymbol{\omega} = 0$ に代入すると

$$\det(\nabla\alpha, \nabla\beta, \nabla\gamma) = 0 \quad \text{つまり} \quad \frac{\partial(\alpha, \beta, \gamma)}{\partial(x, y, z)} = 0$$

という式が得られ、 $\gamma = \gamma(\alpha, \beta)$ であることが分かるので、その心配は不要である。

以上の議論はスナップショットに対するものであるが、流れ場の時間依存性を考えると、渦線は流体要素と共に動くことが知られているので、 $\lambda = \lambda(\mathbf{r}, t)$ および $\mu = \mu(\mathbf{r}, t)$ がラベル変数になるように時間依存性を定義することが可能である。もちろん、あえてラベル変数にならないように定義することも可能であって、その意味では Clebsch 変数は移流方程式と直接結びついたものではなく、渦度を通じた間接的結びつきにとどまっているとも言える。

さて、Clebsch 変数には、そもそもスナップショットの時点で問題がある。与えられた渦度場に対し、式 (70) を満たす Clebsch 変数が常に存在すると期待してよいのだろうか？ 実際のところ、それは一般には無理であることが知られている。

閉じた渦線 C があって、 C 上で $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}$ が定符号（たとえば常に正）だったとする。このとき、もし大域的に Clebsch 変数をうまく定義できるとすると矛盾が生じることを、初等的に示そう。まず、渦線なのだから C 上で $\lambda = \text{const.}$ であり、したがって C は λ の等値面上にある (Clebsch

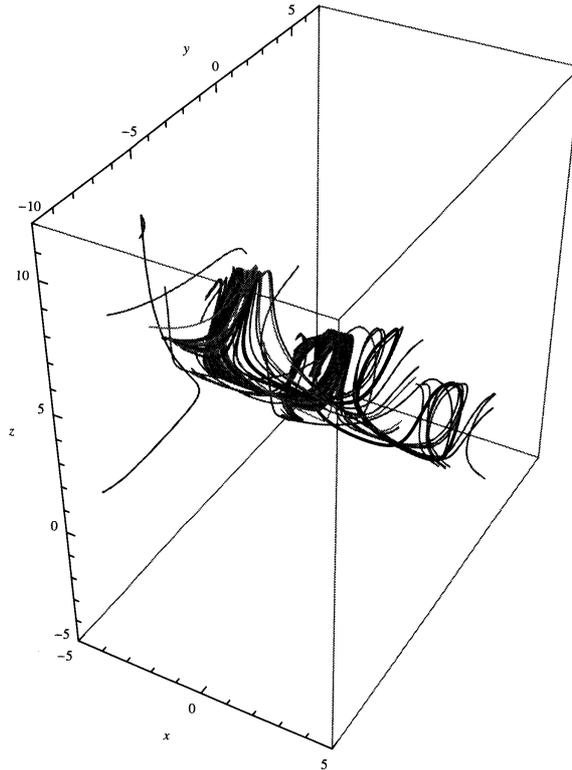


図5 Arnold–Beltrami–Childress 流れにおける渦線の例。式 (72) で $A : B : C = 1 : 1 : 0.5$ とした場合について、いくつかの渦線を Mathematica で求めて図示した。太い線は、数値的に得られた“閉じた渦線”である。

変数が“うまく定義できる”と仮定しているので、この等値面には穴や折れ曲がりがあるてはいけない)。この面のうえで C に囲まれた部分を S_λ とすると、 S_λ の法線ベクトルは $\nabla\lambda$ に平行、すなわち ω に垂直であり、したがって C 上の循環 Γ は

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{r} = \int_{S_\lambda} \boldsymbol{\omega} \cdot d\mathbf{S} = 0$$

によりゼロとなる。他方、 C はもともと渦線なので、パラメータ表示は $d\mathbf{r} = \boldsymbol{\omega} ds$ のように取ることができる。条件 $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} > 0$ により、

$$\Gamma = \oint_C \mathbf{u} \cdot d\mathbf{r} = \oint_C \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega} ds > 0$$

となり、矛盾を生じる。

速度と渦度の内積 $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}$ を空間積分した量は helicity と呼ばれており、適当な条件のもとで、helicity がゼロにならないことは渦線のからみあいを意味する [38, 70]。特に、 $\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}$ がほとんどいたるところ正になるような Euler 方程式の定常解を具体的に構成することができて (Beltrami 流れ)、そういう流れには、非常に複雑にからみあった渦線が存在し得る [71–73]。図5に、Beltrami

流れの代表例である Arnold–Beltrami–Childress 流れ

$$\mathbf{u} = (A \cos y + B \sin z, B \cos z + C \sin x, C \cos x + A \sin y) \quad (72)$$

で $A : B : C = 1 : 1 : 0.5$ とした場合の渦線を示す。このようなものを式 (70) の形で書けるとはとても思えない。また、数値的な探索により、ほとんど閉じた渦線を見つけることができる。実際に閉じた渦線があれば、先ほどの議論により、Clebsch 変数は構成できないことになる。

このように、渦線がからみあう流れでは Clebsch 変数を定義しようとする矛盾が生じるが、それだけではなく、流れのなかに渦度が消える点があると Clebsch 変数に特異性が生じることも示される [74]。このように、Clebsch 変数をうまく定義できない状況というものが存在する。

それでは、式 (65)(68) を満たすようなラベル変数 (ξ, η, ζ) の存在条件についてはどうだろうか。Clebsch 変数の場合の渦線に相当するものは、今の場合、時空における粒子の世界線である。すべての粒子が過去から無限の未来に向かうので、閉じた世界線は現れず、したがって問題は生じないような気がする。もちろん、粒子と反粒子の対消滅などがあれば話は違ってくるので、そのようなものを排除して考える必要がある。また、密度がゼロになる点があると特異性が生じるので、そこには注意が必要かもしれない。

4.3 個人的回想

本稿の最後に、本稿の筆者（大信田）の、ラベル変数にまつわる個人的回想を記しておきたい。話は大学院時代、1+1 次元の非線形波動の枠組で、混相流のモデル [75, 76] や交通流モデル [77] をいじっていた頃にさかのぼる（ちなみに同じ頃、中原は別のグループで管内粉体流の実験をしていた [78]）。このような系では体積力と摩擦が重要なので運動量が保存されないうえに、その体積力の式（交通流で言えば「最適速度」）を現象論的に仮定せざるを得ないので、確実に頼れるものは連続の式だけである。ある日、大学の地下食堂で取り留めのない計算をしていたとき、ふと連続の式 (14a) には式 (26) を満たすようなポテンシャル ξ が存在することに気づき、このポテンシャルの意味は何だろうかと考えた。答はすぐ分かった。ふたつの式の比をとると

$$\frac{Q}{\rho} = -\frac{\partial_t \xi}{\partial_x \xi} = \left(\frac{\partial x}{\partial t} \right)_\xi \quad (73)$$

となるから、 ξ はラベル変数である。しかしその後しばらく、この方法をまともに自分の研究に用いた記憶はない。また京大の研究室内の議論では、Lagrange 表示と言えは初期位置をラベルとする表示のことだというのが当然の見解になっていたような気がする。

鳥取大学に着任して 1 次元の圧縮性気体を扱うようになり、衝撃波管における接触領域（接触層）についての共著論文 [79] を書いた。もともとは衝撃波管の数値計算結果に基づく論文であるが、本質的には、圧縮性流体の方程式系を圧力一定という条件によって単純化した

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \quad (\partial_t + u \partial_x) T = \partial_x(\kappa \partial_x T), \quad \rho T = \text{const}. \quad (74)$$

という方程式を適当な境界条件のもとで解けば結果は出る。そこで筆者は、まずラベル変数による Lagrange 表示に移ったあとで長時間経過後の漸近解を計算するというノートを作成し、その内容を論文原稿の Appendix に追加した。この原稿^{*10}には、既に式 (29) に相当する連鎖則が登場している。しかし、いくつかの理由により、このノートそのものが日の目を見ることはなかった。論文の補遺は、ラベル変数を用いない形に書き直され、接触領域の外縁の流速（これは定数）を u_e として、 $D/Dt = (\partial_t \cdot)_\xi$ の代わりに $\partial_t + u_e \partial_x$ つまり速度 u_e で動く座標枠から見た時間微分が用いられることになった。言うまでもなく $\partial_t + u \partial_x$ を $\partial_t + u_e \partial_x$ にしてしまったのでは大幅な後退で、これだと熱伝導方程式の移流項が消えない。移流項を消すためには、座標枠が流れの一点を追いかけて動くだけでは不十分で、すべての流体要素に貼りついて伸縮する移流座標系が必要なのである。ただ、そのことを明快的確に言い表す力量は、当時の筆者にはまだなかった。また、カットした補遺について、あとから続報を別の論文として出すという手もあったのだが、結局その続報論文は書かないまま今に至ってしまった。

他方、式 (61) を通じた高次元への拡張の試みを過去のノートで探してみると、2003 年頃のノートに既に式 (63) が登場していて、その次のページに、式 (64) のようになるのでうまいかない、という話が出てくる（2003 年 9 月頃のことらしい）。本稿の最初に書いた中原による乾燥破壊実験について、佐々真一氏から筆者（大信田）に紹介していただいたのが 2003 年 1 月のことだから、その半年ほど後である。この頃はラベル変数の話とペーストの話がつながるとは思っていなかった。ラベル変数を高次元化しようとした動機は、斜面流 [80, 81] への応用の可能性を考えていたような気がする。ともかくこの時点で、連続の式を通じたラベル変数の高次元化は一度あきらめた。

その後、関本謙氏との共著論文 [82] や、物性研究の特集記事 [17] を経て、筆者（大信田）は塑性流体に関して中原や大槻との研究上の交流を深めていった。その過程で書いた、ペーストの記憶効果を説明する理論の論文 [19] は、ラベル変数による移流座標系をフル活用した微分幾何学的な定式化で弾塑性体の連続体力学を扱ったものである。ところが、この原稿を読んだ佐々真一氏は、Lagrange 記述は分かりにくいので好きではない…という意味のことを言われた。これほど賢い方がこうおっしゃるのは意外だったが、ふと思いついた。統計物理に詳しい人でも Lagrange 記述に詳しいとは限らず、したがってガラス系の分野では、Lagrange 記述の威力は誰にも知られないまま未開拓となっているのではないだろうか。ならば今から流体屋の参入する余地があるに違いない。

こういう次第で、本稿の著者 5 名による共同研究プロジェクトがスタートした。本講演は、プロジェクト開始から 3 年間で得られた主な成果の総括に当たる。一度はあきらめた式 (26) の高次元化についても、今回は明確な動機があるので再び挑戦してみた。その結果が式 (65)(68) であつて^{*11}、今後、これをもとに 2 次元あるいは 3 次元の Lagrangian MCT を作っていくことを考えている。

^{*10} ファイル名が `draft991108.dvi` となっているのと、コンパイル日が 1999 年 11 月 25 日になっていることから、どうやらこの時期に作成したものと思われる。

^{*11} この式に到達したメモには 2010 年 12 月 11 日という日付が入っている。

5 まとめと今後の展望

ペーストのレオロジーに対する微視的理論の樹立という遠い目標に向けて、Lagrange 記述という流体屋の得意とする手法をガラス系の統計理論と融合させるというアイデアを提示し、その有効性を 1 次元のモデル系で試してみた。普通の MCT で見ているのは密度の Euler 相関であり、粒子の拡散は一体密度の相関 C_s から直接読み取る。他方、我々の方法では、独立変数を ξ として、密度揺らぎ（正確には粒子間隔の揺らぎ）の Lagrange 相関 \check{C} をまず求め、続いて \check{C} から拡張 Alexander-Pincus 公式 (39) などを経て $\langle R^2 \rangle$ を計算するという、2 段構えの構成になっている。おそらく、この 2 段構えの構成により、まず \check{C} についての適切な時間尺度を拾い、続いて式 (39) で 4 点相関の情報を入れるという仕組みになっているのだと思われる。4 点相関の数値的検証や本物のガラス系でのケージ効果との関連については、現在、投稿論文を準備中である [83]。

高次元化については、もし式 (65)(68) で任意の (ρ, Q) を表示できることを前提にしてよければ、連鎖則を書き下して Langevin 方程式を書き直すところまでは素直に実行できる。その後、Alexander-Pincus 公式 (39) を 3 次元に拡張する必要があるが、そのためには、単なる密度揺らぎの相関ではなくて変形勾配テンソルの相関が必要になるものと我々は考えている。また、相互作用ポテンシャル $V(r)$ による項は、式 (31) では $\sinh(\rho\sigma\partial_\xi)$ という演算子になっており、じつはこの評価が技術的難点だったので、高次元でもそれなりに面倒なことになるかもしれない。

さらにレオロジーを考えるには、剪断を入れて非平衡定常系を扱う必要があるが、この場合に揺動応答関係はどうなるのかという問題がある。この点についての考察の助けとするため、現在、強制乱流のモデル系で揺動応答関係の修正を問う研究が進行中である。またペーストのレオロジー測定や、記憶効果に関する新しい実験も行われており、いつの日か、これらの実験結果と本稿のような微視的理論を統合することで非結晶固体の理解に新たな一步を踏み出せることを期待している。

なお、本稿の内容については、著者の浅学非才ゆえ、思わぬ勘違いや間違いが紛れ込んでいるかもしれない。疑義のある点に気づかれた際にはぜひご教示いただくとともに、今後の理論的發展のために共に議論していただければ幸いである。

謝辞

この研究は、日本学術振興会による科学研究費補助金（基盤（C）21540388 「塑性流動の新理論に向けての統計力学と流体力学のコラボレーション」）の支援によるものです。また、講演後に加筆した内容の一部は、学術研究助成基金助成金（基盤（C）24540404 「統計力学と流体力学のコラボレーションによる塑性流動と乱流の新理論の展開」）の支援を受けています。

これらの科研費の支援のもとに、セミナーを定期的で開催し、そのうち何度かは外部の方々を講師として招き、ガラス系とその周辺に関してさまざまなことを教えていただきました。今までにセミナー講師としてご出席いただいた、鄭誠虎・中村真・狐崎創・宮崎州正・有木健人・荒木圭典・佐々真一・川崎猛史の各氏に感謝の念を表したいと思います。また、日大塑性研究会および鳥取非

線形研究会の参加者の方々にもお礼を申し上げます。最後になりましたが、藤定義氏をはじめ今回の研究会で質問あるいはコメントをくださった方々、特に Clebsch 変数との関連について質問された大木谷耕司氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] 中原明生, 松尾洋介. 炭酸カルシウムを使った乾燥破壊の実験. 物性研究, Vol. 74, No. 6, pp. 650–653, 2000.
- [2] 中原明生, 松尾洋介. 乾燥破壊における粉体の記憶の実験. 物性研究, Vol. 81, No. 2, pp. 184–185, 2003.
- [3] A. Nakahara & Y. Matsuo. Imprinting memory into paste and its visualization as crack patterns in drying process. *J. Phys. Soc. Japan*, Vol. 74, pp. 1362–1365, 2005.
- [4] 中原 明生, 松尾 洋介. パーストへの記憶の刷り込みと乾燥破壊時の亀裂の制御. 複雑流体の数理とその応用, 数理解析研究所 (RIMS) 講究録, No. 1472, pp. 38–45, 2006.
- [5] A. Nakahara & Y. Matsuo. Imprinting memory into paste to control crack formation in drying process. *J. Stat. Mech.*, 2006. P07016.
- [6] A. Nakahara & Y. Matsuo. Transition in the pattern of cracks resulting from memory effects in paste. *Phys. Rev. E*, Vol. 74, p. 045102(R), 2006.
- [7] A. J. Liu & S. R. Nagel. *Jamming and Rheology: Constrained Dynamics on Microscopic and Macroscopic Scales*. Taylor & Francis, London, 2001.
- [8] 山本量一, 小貫明. ガラスの非平衡ダイナミクス. 日本物理学会誌, Vol. 60, No. 8, pp. 602–608, 2005.
- [9] L. Berthier & G. Biroli. Theoretical perspective on the glass transition and amorphous materials. *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 83, pp. 587–645, 2011.
- [10] A. Groisman & E. Kaplan. An experimental study of cracking induced by desiccation. *Europhys. Lett.*, Vol. 25, p. 415, 1994.
- [11] C. Allain & L. Limat. Regular patterns of cracks formed by directional drying of a colloidal suspension. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 74, p. 2981, 1995.
- [12] T. S. Komatsu & S. Sasa. Pattern selection of cracks in directionally drying fracture. *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 36, p. 391, 1997.
- [13] S. Kitsunozaki. Fracture patterns induced by desiccation in a thin layer. *Phys. Rev. E*, Vol. 60, pp. 6449–6464, 1999.
- [14] Desiccation cracks. *Physics Today*, Vol. 60, No. 9, 2007.
- [15] H. A. Barnes. The yield stress—a review or ‘*παντα ρει*’—everything flows? *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 81, pp. 133–178, 1999.
- [16] E. C. Bingham. *Fluidity and plasticity*. McGraw-Hill, New York, 1922.
- [17] 大信田 丈志ほか. 塑性という名の動的機構. 物性研究, Vol. 88, No. 3, p. 315, 2007.
- [18] W. H. Herschel & R. Bulkley. Konsistenzmessungen von Gummi-Benzollösungen. *Kolloid-Zeitschrift*, Vol. 39, pp. 291–300, 1926. in German.
- [19] Ooshida Takeshi. Continuum theory of memory effect in crack patterns of drying pastes. *Phys. Rev. E*, Vol. 77, p. 061501, 2008.
- [20] M. Otsuki. Memory effect on the formation of drying cracks. *Phys. Rev. E*, Vol. 72, p. 046115, 2005.
- [21] 林緑也, 平岡智輝. パーストのメモリー効果における記憶の強さに関する研究. 卒業論文, 日本大学 理工学部, 2012.
- [22] 中原明生, 林緑也, 平岡智輝, 中山寛士, 松尾洋介, 大信田丈志, 大槻道夫, 狐崎創. パーストの揺れの記憶の上書き実験: 記憶するタイミングと記憶の復活について. 日本物理学会講演概要集 (2012 年秋季大会) 第 2 分冊, p. 311, 2012. 21aAF-5 (in Japanese).
- [23] A. J. Liu & S. R. Nagel. Jamming is not just cool any more. *Nature*, Vol. 396, pp. 21–22, 1998.
- [24] 井野博満. 研究解説: アモルファス合金の可能性. 生産研究, Vol. 32, pp. 453–459, 1980.
- [25] W. Kauzmann. The nature of the glassy state and the behavior of liquids at low temperatures. *Chem. Rev.*, Vol. 43, pp. 219–256, 1948.
- [26] S. ichi Sasa. Pure glass in finite dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 109, p. 165702, 2012.
- [27] W. Götze & L. Sjögren. Relaxation processes in supercooled liquids. *Rep. Prog. Phys.*, Vol. 55, p. 241, 1992.
- [28] 川崎恭治. 非平衡と相転移: メソスケールの統計物理学. 朝倉書店, 2000.
- [29] D. R. Reichman & P. Charbonneau. Mode-coupling theory. *J. Stat. Mech.*, p. P05013, 2005.
- [30] 宮崎州正. ガラス転移とモード結合理論. 物性研究, Vol. 88, No. 5, pp. 621–720, 2007.
- [31] K. Miyazaki & D. R. Reichman. Molecular hydrodynamic theory of supercooled liquids and colloidal suspensions under shear. *Phys. Rev.*

- E*, Vol. 66, No. 5, p. 050501(R), 2002.
- [32] M. Fuchs & M. E. Cates. Theory of nonlinear rheology and yielding of dense colloidal suspensions. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 89, No. 24, p. 248304, 2002.
- [33] 宮崎州正. ガラスの非線形レオロジーの微視的理論: モード結合理論によるアプローチ. 物性研究, Vol. 88, No. 3, pp. 360–367, 2007.
- [34] J. M. Brader, M. E. Cates & M. Fuchs. First-principles constitutive equation for suspension rheology. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 101, p. 138301, 2008.
- [35] D. S. Dean. Langevin equation for the density of a system of interacting langevin processes. *J. Phys. A: Math. Gen.*, Vol. 29, p. L613, 1996.
- [36] Ooshida Takeshi, S. Goto, T. Matsumoto, A. Nakahara & M. Otsuki. An approach to glassy systems with direct-interaction approximation. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, Vol. 195, pp. 157–166, 2012.
- [37] A. V. Tur & V. V. Yanovsky. Invariants in dissipationless hydrodynamic media. *J. Fluid Mech.*, Vol. 248, pp. 67–106, 1993.
- [38] P. G. Saffman. *Vortex Dynamics*. Cambridge University Press, ??, 1992.
- [39] 巽友正. 流体力学. 新物理学シリーズ, No. 21. 培風館, 1982.
- [40] L. Berthier, G. Biroli, J.-P. Bouchaud, L. Cipelletti & W. van Saarloos. *Dynamical Heterogeneities in Glasses, Colloids, and Granular Media*. Oxford University Press, 2011.
- [41] A. Clebsch. Über die Integration der hydrodynamischen Gleichungen. *J. Reine Angew. Math.*, Vol. 56, pp. 1–10, 1859. in German.
- [42] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Cambridge University Press, 6th edition, 1932.
- [43] T. E. Harris. Diffusion with “collisions” between particles. *J. Appl. Probab.*, Vol. 2, pp. 323–338, 1965.
- [44] D. W. Jepsen. *J. Math. Phys.*, Vol. 6, p. 405, 1965.
- [45] S. Alexander & P. Pincus. Diffusion of labeled particles on one-dimensional chains. *Phys. Rev. B*, Vol. 18, p. 2011, 1978.
- [46] M. Kollmann. Single-file diffusion of atomic and colloidal systems: Asymptotic laws. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 90, p. 180602, 2003.
- [47] A. Taloni & F. Marchesoni. Single-file diffusion on a periodic substrate. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 96, p. 020601, 2006.
- [48] E. Barkai & E. Silbey. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 102, p. 050602, 2009.
- [49] E. Barkai & E. Silbey. Diffusion of tagged particle in an exclusion process. *Phys. Rev. E*, Vol. 81, p. 041129, 2010.
- [50] Ooshida Takeshi, S. Goto, T. Matsumoto, A. Nakahara & M. Otsuki. Continuum theory of single-file diffusion in terms of label variable. *J. Phys. Soc. Japan*, Vol. 80, p. 074007, 2011.
- [51] J.-B. Delfau, C. Coste & M. S. Jean. Single-file diffusion of particles in a box: Transient behaviors. *Phys. Rev. E*, Vol. 85, p. 061111, 2012.
- [52] C. Lutz, M. Kollmann & C. Bechinger. Single-file diffusion of colloids in one-dimensional channels. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 93, p. 026001, 2004.
- [53] K. Miyazaki & A. Yethiraj. Entanglement effects in mode coupling theories of polymers. *J. Chem. Phys.*, Vol. 117, p. 10448, 2002.
- [54] J. M. Rallison. Brownian diffusion in concentrated suspensions of interacting particles. *J. Fluid Mech.*, Vol. 186, pp. 471–500, 1988.
- [55] P. C. Martin, E. D. Siggia & H. A. Rose. Statistical dynamics of classical systems. *Phys. Rev. A*, Vol. 8, pp. 423–437, 1973.
- [56] 杉田 勝実, 岡本 良夫, 関根 松夫. 経路積分と量子電磁力学. 森北出版, 1998.
- [57] D. Hilbert. Mathematische probleme. *Göttinger Nachrichten*, pp. 253–297, 1900. in German.
- [58] 杉浦光夫 (編). ヒルベルト 23 の問題. 日本評論社, 1997.
- [59] M. Spivak. *Calculus on Manifolds: A Modern Approach to Classical Theorems of Advanced Calculus*. W.A. Benjamin Inc., New York, 1965.
- [60] 有馬 哲, 浅枝 陽. ベクトル場と電磁場: 電磁気学と相対論のためのベクトル解析. 東京図書, 1987.
- [61] R. H. Kraichnan. The structure of isotropic turbulence at very high Reynolds numbers. *J. Fluid Mech.*, Vol. 5, pp. 497–543, 1959.
- [62] Y. Kaneda. Renormalized expansions in the theory of turbulence with the use of the Lagrangian position function. *J. Fluid Mech.*, Vol. 107, pp. 131–145, 1981.
- [63] S. Kida & S. Goto. A Lagrangian direct-interaction approximation for homogeneous isotropic turbulence. *J. Fluid Mech.*, Vol. 345, pp. 307–345, 1997.
- [64] Y. Kaneda. Lagrangian renormalized approximation of turbulence. *Fluid Dynamics Research*, Vol. 39, pp. 526–551, 2007.
- [65] G. B. Arfken & H. J. Weber. 特殊関数. 講談社, 第4版, 2001. 権平 健一郎, 神原 武志, 小山 直人 訳.
- [66] S. Goto & S. Kida. Direct-interaction approximation and reynolds-number reversed expansion for a dynamical system. *Physica D*, Vol. 117, pp. 191–214, 1998.
- [67] U. M. B. Marconi, A. Puglisi, L. Rondoni &

- A. Vulpiani. Fluctuation-dissipation: Response theory in statistical physics. *Physics Reports*, Vol. 461, pp. 111–195, 2008.
- [68] D. Lynden-Bell & J. Katz. Isocircular flows and their Lagrangian and energy principles. *Proc. R. Soc. London*, Vol. A 378, pp. 179–205, 1981.
- [69] P. J. Morrison. Hamiltonian description of the ideal fluid. *Reviews of Modern Physics*, Vol. 70, pp. 467–521, 1998.
- [70] 棚橋 隆彦. うず運動の力学とその応用. 連続体の力学, No. 8. 理工図書, 1991.
- [71] T. Dombre, U. Frisch, J. Greene, M. Hénon, A. Mehr & A. Soward. Chaotic streamlines in the abc flows. *J. Fluid Mech.*, Vol. 167, pp. 353–391, 1986.
- [72] 岡本久. ナヴィエ-ストークス方程式の数理. 東京大学出版会, 2009.
- [73] T. Kambe. *Geometrical Theory of Dynamical Systems and Fluid Flows*. World Scientific, 2010.
- [74] C. R. Graham & F. S. Henyey. Clebsch representation near points where the vorticity vanishes. *Physics of Fluids*, Vol. 12, pp. 744–746, 2000.
- [75] T. S. Komatsu & H. Hayakawa. Nonlinear waves in fluidized beds. *Phys. Lett. A*, Vol. 183, p. 56, 1993.
- [76] Ooshida T. & T. Kawahara. Generic weakly-nonlinear model equation for density waves in two-phase fluids. *Phys. Rev. E*, Vol. 56, p. 511, 1997.
- [77] H. Hayakawa & K. Nakanishi. Theory of traffic jam in a one-lane model. *Phys. Rev. E*, Vol. 57, pp. 3839–3845, 1998.
- [78] Shin Horikawa, Akio Nakahara, Tomoo Nakayama & Mitsugu Matsushita. Self-organized critical density waves of granular material flowing through a pipe. *J. Phys. Soc. Japan*, Vol. 64, pp. 1870–1873, 1995.
- [79] Y. Onishi, Ooshida Takeshi & N. Umemura. On a small structure in velocity field within a contact region. *Physics of Fluids*, Vol. 12, No. 12, pp. 3235–3244, 2000.
- [80] Ooshida Takeshi. Surface equation of falling film flows with moderate Reynolds number and large but finite Weber number. *Physics of Fluids*, Vol. 11, pp. 3247–3269, 1999.
- [81] T. Ooshida, S. Watanabe & H. Kawazoe. Viscous solitons on film flows falling down a vertical wall. In *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Vol. 55, pp. 221–230, 2006.
- [82] Ooshida Takeshi & K. Sekimoto. Internal stress in a model elastoplastic fluid. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, No. 10, p. 108301, 2005.
- [83] Ooshida Takeshi, S. Goto, T. Matsumoto, A. Nakahara & M. Otsuki. Analytical calculation of four-point correlations for a simple model of cages involving numerous particles. in preparation (to be submitted to PRE).