

# 統計的パラメーター

戸田格子の破碎現象への適用

大阪教育大 鯖田 秀 樹

清恵会医療専門学院 岩 田 和 朗

## § 1. はじめに

最近、統計力学の基礎的分野で、stochastic parameter (統計的パラメーター) と呼ばれる量について研究がなされている。

この量はエントロピーよりも広い意味を含んでいるとも考えられる。広く、自然現象の解明に用いることが可能な量と思われる。

歴史的に考えると、熱力学のエントロピーが統計力学的に解釈され、それがヒントとなり Shannon が情報理論において「あいまいさの尺度としてのエントロピー」を樹立した。その後 Kolmogorov が  $\epsilon$ -エントロピーと呼ばれる量を創始し測度空間のエントロピーが研究されている。一方、力学系の非可逆性を問題とする数値実験の研究者達は、グラフ (ポアンカレ・マッピング) 的に非可逆性を示そうと努めている。

しかし、多自由度系ではもはやグラフには表現できない。そこで、非可逆性を端的に示す量はないかという問から L. Galgani をリーダーとするイタリアを中心とするグループが entropy-like quantity (エントロピー的量)<sup>1)</sup> を考案した。これは Liapunov の特性数、

Kolmogorov の  $\epsilon$ -エントロピーと関連していることが、シベリアの Kolmogorov の弟子達によって調べられている。

数学的精密さは条件をせばめる。エントロピー的量はそれ自体は有限時間内の現象を調べるのによい量と考えられる。

エントロピー的量は stochastic parameter とも呼ばれている。この小稿では数学的議論はさけて、統計的パラメーターを新たに定義してそれが自然現象の理解にどの程度役立つかをみてみよう。自然現象の推移を統計的パラメーターの時間的変化に写してみる試みである。各自然現象に固有の stochastic parameter が考えられ、定義は一意的でない。

エントロピーを特別な場合とするように定義することにこだわると、対象とする自然

現象をうまくとらえられない。

エントロピーの概念の拡張となるのか、その底辺を拡めることになるのか未知である。ここでは対象として、戸田格子の破砕現象をえらび、前論文<sup>2)</sup>で借用した薩摩氏等<sup>3)</sup>のデータについてくわしく調べ、さらに、初期状態を変えた筆者等のデータについてもしらべ比較しよう。

破壊現象のように日常の尺度で短時間の間に終わってしまう現象、つまり無限時間と見なすのが不都合な現象に統計的パラメーターが定義しやすいように思われる。

生物界の現象、社会現象についても考えられる可能性があることを付記したい。現象の始めと終りで統計的パラメーターがどんな変化を示すか。グラフに表わしたらどうなるか。

## § 2. 統計的パラメーターの定義

エントロピーの定義を考えてみよう。考える空間を細分して部分空間に分ける。そして各部分空間の確率が与えられているとして、その確率の対数を取り、その平均値を計算する。つまり空間平均あるいは位相平均をとる操作によってエントロピーが定義されるとみなされる。このとき、対数の真数は測度になっているが、その部分空間の集合関数であれば何でもよいと改めるとふつうの意味でのエントロピーでなくなる。それを空間平均での統計的パラメーターと呼びたい。

エルゴード理論は時間平均と空間平均(位相平均)の同一性を問題としている。現実の自然現象でわれわれが測定し得る量、観測する量は時間平均であり、マイクロな時間に比して長時間であるが故に無限時間平均である。その無限時間平均は殆んど物理系では計算できないので、それと等価と考えられる空間平均を計算する。この考えを上のエントロピーにあてはめてみる。ある量の対数の時間平均を考える。無限時間平均であれば空間平均とある条件のもとでは等しくなる。つまりエントロピーといってよい。しかし有限時間であり条件が弱い時はどう呼ぶか。エントロピー的量又は統計的パラメーターと呼んでおくのが妥当といえよう。時間を無限大と考えるのは現実に観測しているマクロの現象の奥にマイクロな過程があつて、マイクロ時間に比してマクロな時間は無限大と考える。単にマクロな現象だけしか考えない時には有限の短い時間しか現われないはずである。以下ではそのような短い有限時間でのある物理量の平均を考える。時間軸の確率

は古来等確率と考える人類の考えにしたがって、特殊な確率測度は考えないでおこう。

ある時間的に変化する量  $f(t)$  があるとする。その対数  $\ln f(t)$  の有限時間平均

$$k(t) = \frac{1}{T} \int_0^T \ln f(t) dt \quad (1)$$

を考える。

時間を離散的とすると、

$$k_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln f_i \quad (2)$$

となる。

この量を統計的パラメーターと呼ぶ。 $f(t)$  としてどんな関数をえらぶかは対象とする自然現象による。例えば、位相空間の相隣る 2 点をとれば、L. Galgani 等のイタリアのグループの創始したエントロピー的になる。

対数は真数が 1 より小さいときに負になるのをさけるためには  $\ln f(t)$  の代りに  $\ln[1 + |f(t)|]$  に変えておくと都合がよい。

対象とする現象によりどんな  $f(t)$  をとるべきか。その指導原理はエントロピーとの類推、その現象とうまく合致した量等であろう。

戸田格子の chopping の場合は、数値計算の結果から現象の始めは規則的で途中が random で、終りはいろいろなサンプルについて共通の様子を示すことがみられる。それで初期ではゼロとなり random の期間では正となり増加を続け、終りは max. になる。そのような  $k(t)$  が得られて、計算が容易な量  $f(t)$  をえらぶことが最良と思える。

時間を変換された離散時間、つまり切れ目の入る毎に時間が単位ずつ増えるようにとる。

何回目の切れ目かで時間を表わす。n 回目の切れ目は時刻 n で起るとする。

相隣る i 回目と i - 1 回目の切れ目の入る格子点間の距離  $d_i$  をとる。この量は正負の値をとり得るので  $f(t)$  として  $|d_i|$  をとる。

$$f(t) = |d_i|$$

そうすると、(2)式は

$$k_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln |d_i| \quad (3)$$

となる。

上の定義はどの格子点に切れ目が入るかに着目して、1つずつ端から順番に切れ目が入るのと比較してどの程度ばらつきが時間的に起っているかを示す量とも考えられる。

各時点で、どんな長さの切片ができるかを示す  $k'_n$  として、 $d'_i$  として  $i$  番目の切れ目とその時刻での最近接な既存の切れ目との距離をとった量を考えることができる。

$$k'_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln |d'_i| \quad (4)$$

つぎに前論文で議論した切れ目と切れ目との間の待ち時間を問題とする。

$$\tau_i = \tau_i - \tau_{i-1} \quad (5)$$

が待ち時間であるが、その差

$$d_i = \tau_i - \tau_{i-1} \quad (6)$$

を考える。

$$k_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln |d_i| \quad (7)$$

(7)式は(3)式と同じ形である。

数値計算のデータから  $k_n$  を計算しグラフで表すのはつぎの§3で行うが、このように定義すると興味ぶかいことが分かる。

初期で切れ目が規則的に端からはいるときは  $k_n$  はゼロである。その規則からはずれて、かけはなれたところが切れはじめると  $k_n$  は正で増加しはじめる。この期間は random に切れることを表わしているように見える。

最終状態に近づくと  $k_n$  の値の増加の速度がにぶり、ついには  $\delta k_n = 0$  となる。つまり  $k_n = \max.$  が chopping 現象の終りを示す。

逆に考えると、ある現象を取扱う時、このような結果となるように  $f(t)$  をえらび、 $k_n$  を計算するのがよいといえる。

それではグラフをお目につけよう。  $f(t)$  として別のえらび方をするともっとよく現

象を写し得るかも知れない。あるいはこれで出来過ぎかも知れない。

### § 3. choppingの統計的パラメーター

初期状態が異なった2個のデータを使い、§ 2で定義した統計的パラメーターを具体的に図示しよう。第1のデータは格子の各粒子に一樣な張力を加える場合（薩摩氏等の数値実験）であり、第2は格子の各粒子に不均一な張力を加える場合である。後者は具体的には次のような張力を加えるのである。

$$V(J) = A \cos B \left( J - \frac{N}{2} \right) \quad (8)$$

$V(J)$  は  $J$  番目のバネに加える張力。  $N$  は格子の全粒子数（したがって  $1 \leq J \leq N$ ）。  $A$ ,  $B$  は上の2種類の数値実験で、格子の全エネルギーが等しくなるように定めた定数。以上の2個のデータについて 1. 切れる位置, 2. 切れる時間とに分けて図示しよう。

#### 1. 切れる位置について

図1, 2は§ 2の(3)で定義した  $k_n$  を図示したものである。図1は初期状態として各粒子に一樣な張力を加えた場合。図2は各粒子に(8)で定義した張力を加えた場合。

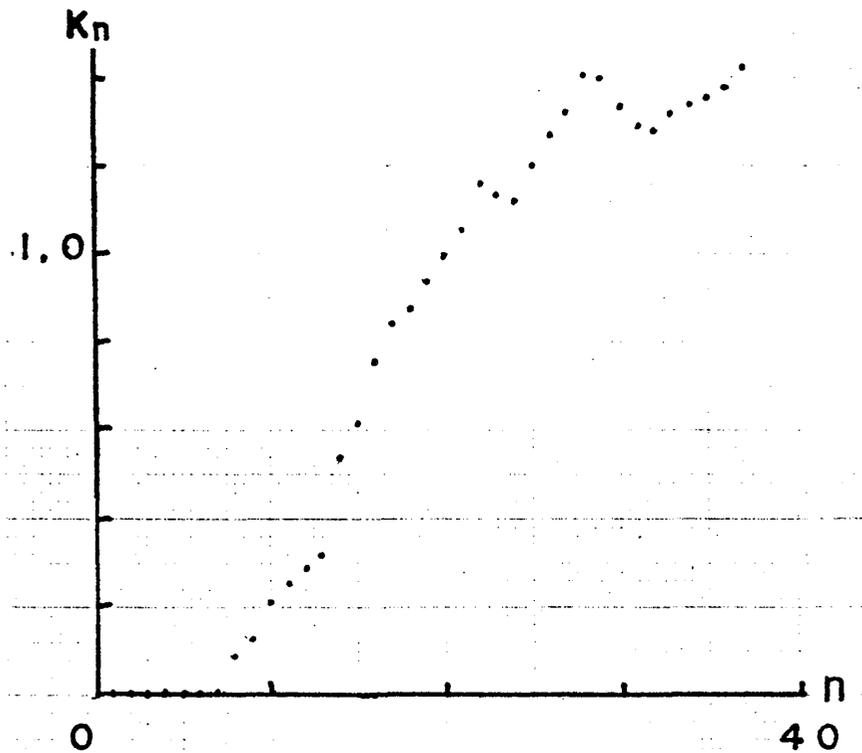


図1-(1)  $N = 100$

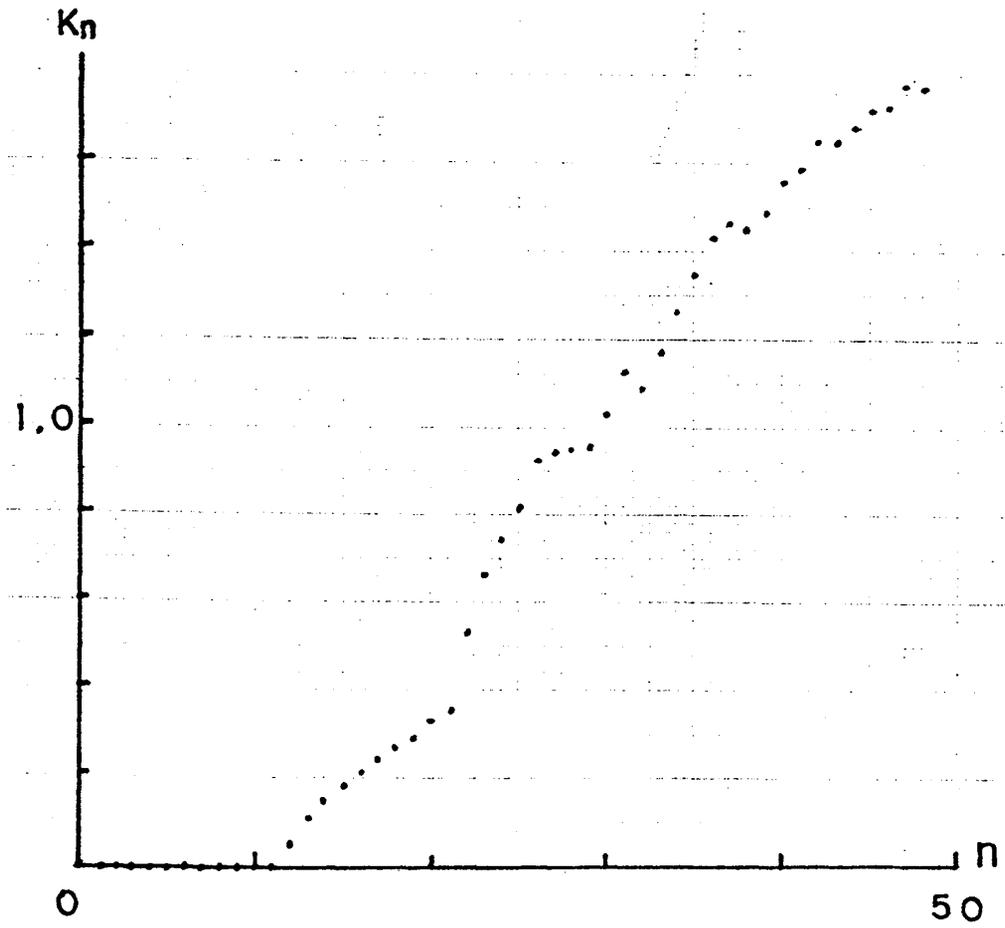


図 1 - (2)  $N = 150$

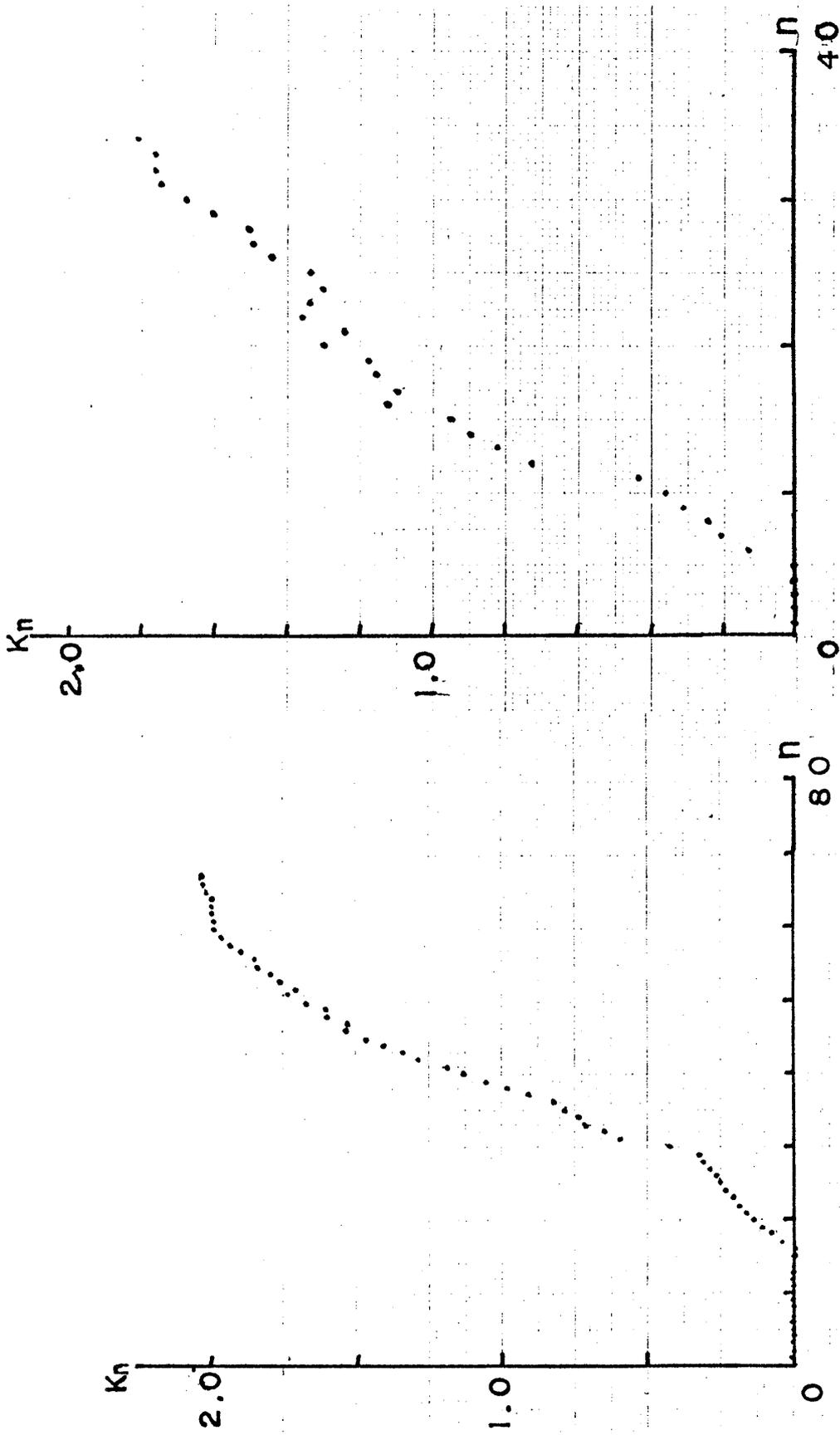


図 2-(1)  $N = 100$

図 1-(3)  $N = 200$

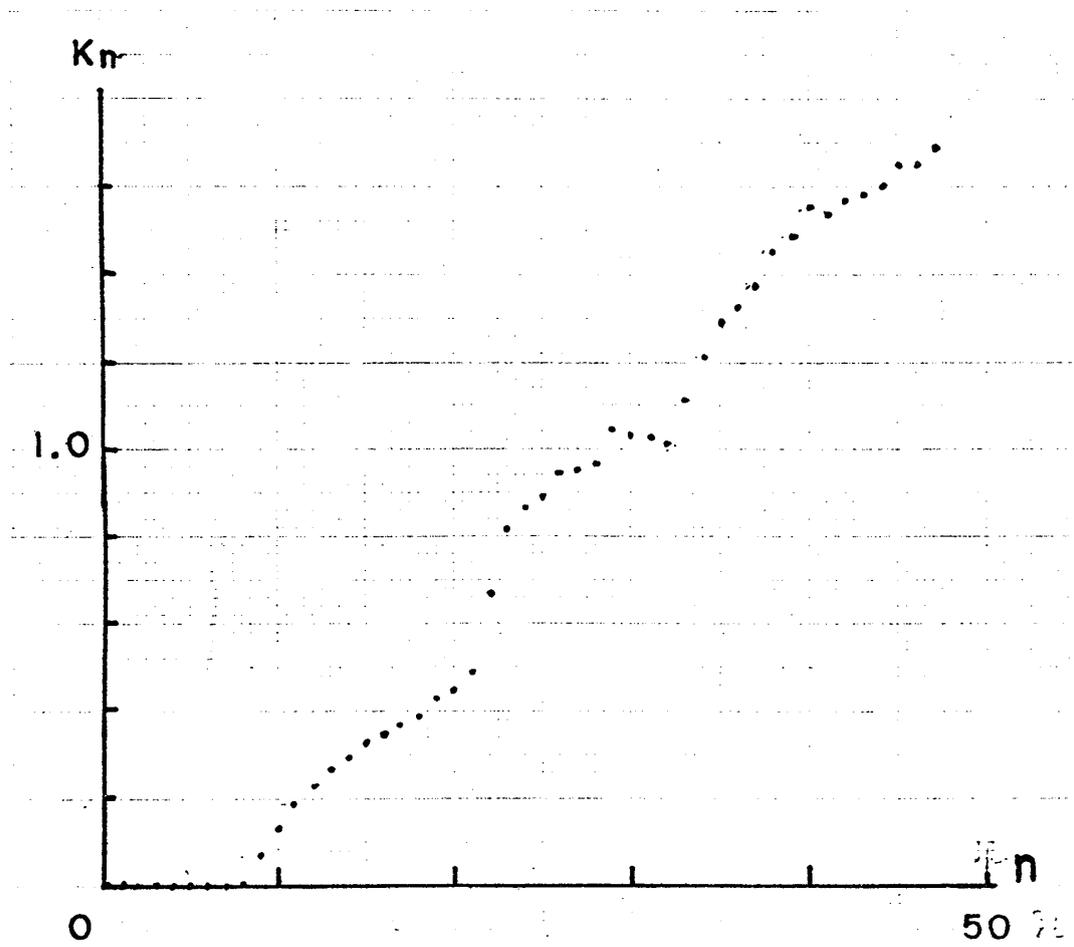


図 2 - (2)  $N = 150$

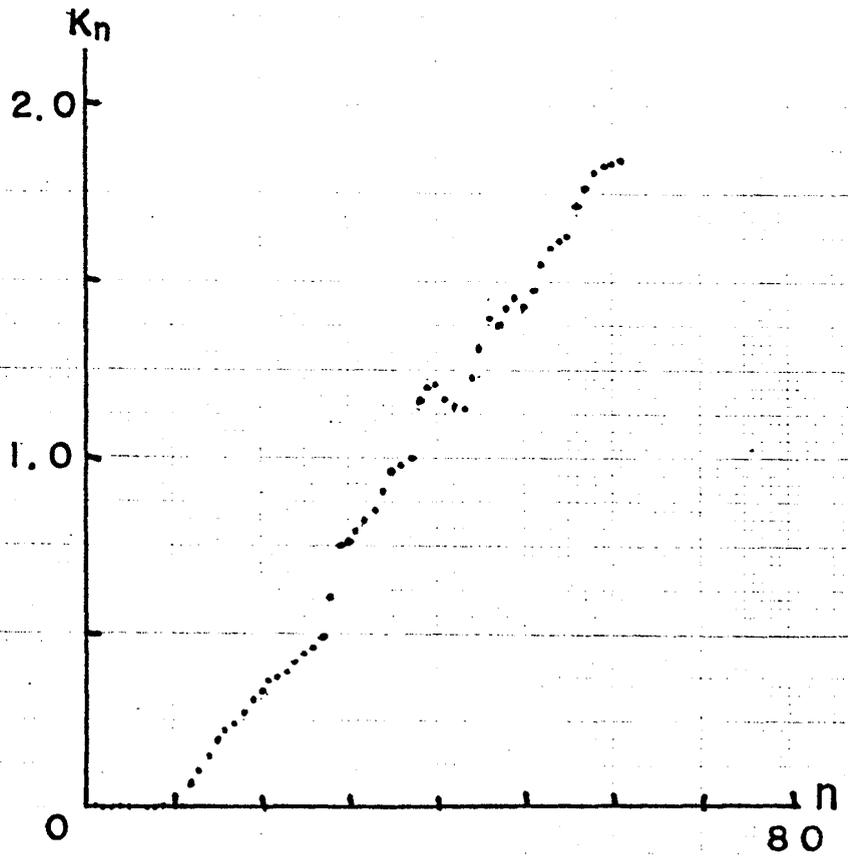


図 2 - (3)  $N = 200$

次に § 2 の(4)式で定義した  $k'_n$  の場合も図示しよう ( 図 3, 図 4 )。 図 3 は張力が一様なとき, 図 4 は張力が不均一のときである。

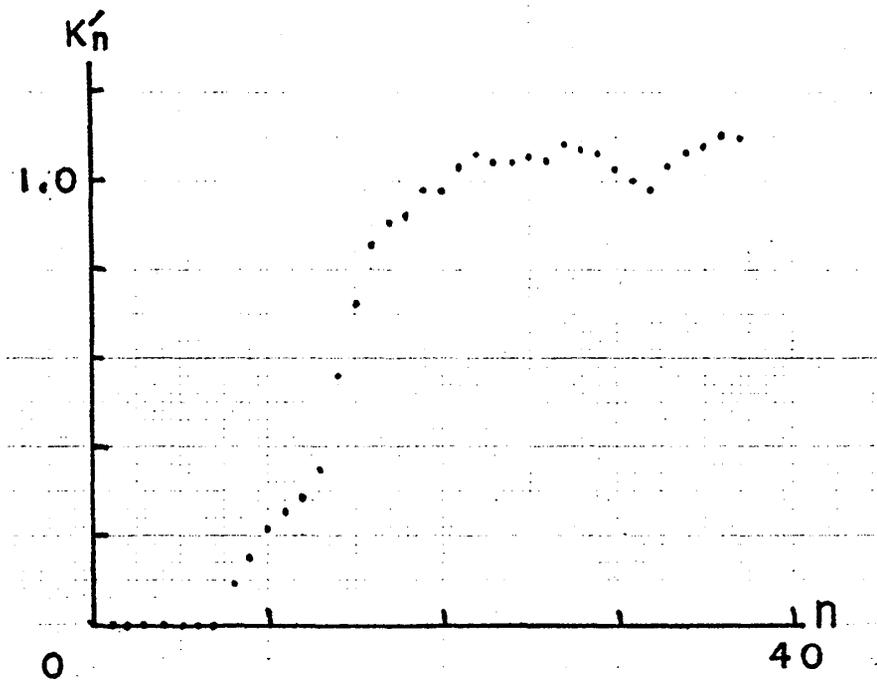


図 3-(1)  $N=100$

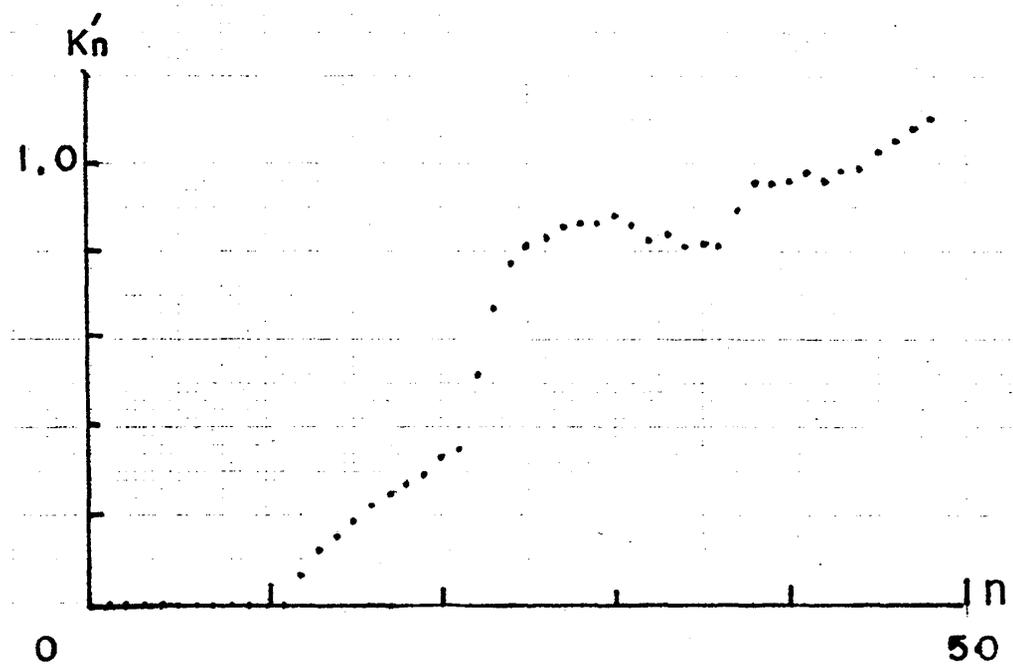


図 3-(2)  $N=150$

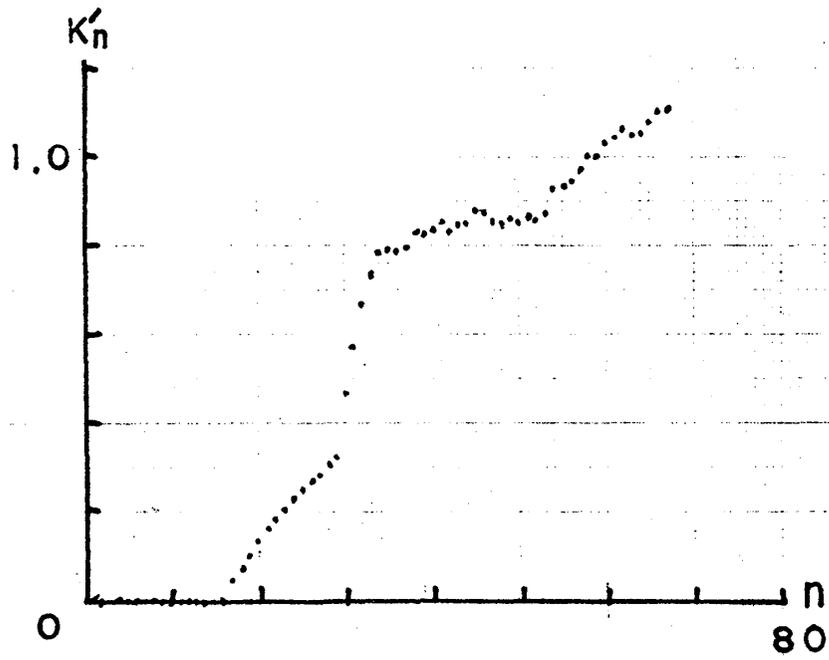


図 3 - (3)  $N = 200$

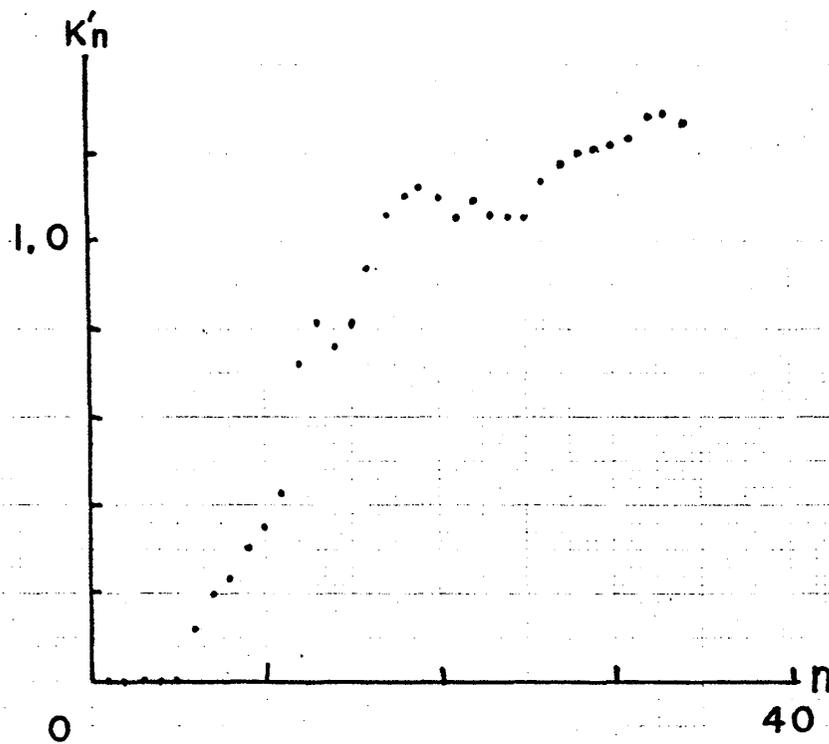


図 4 - (1)  $N = 100$

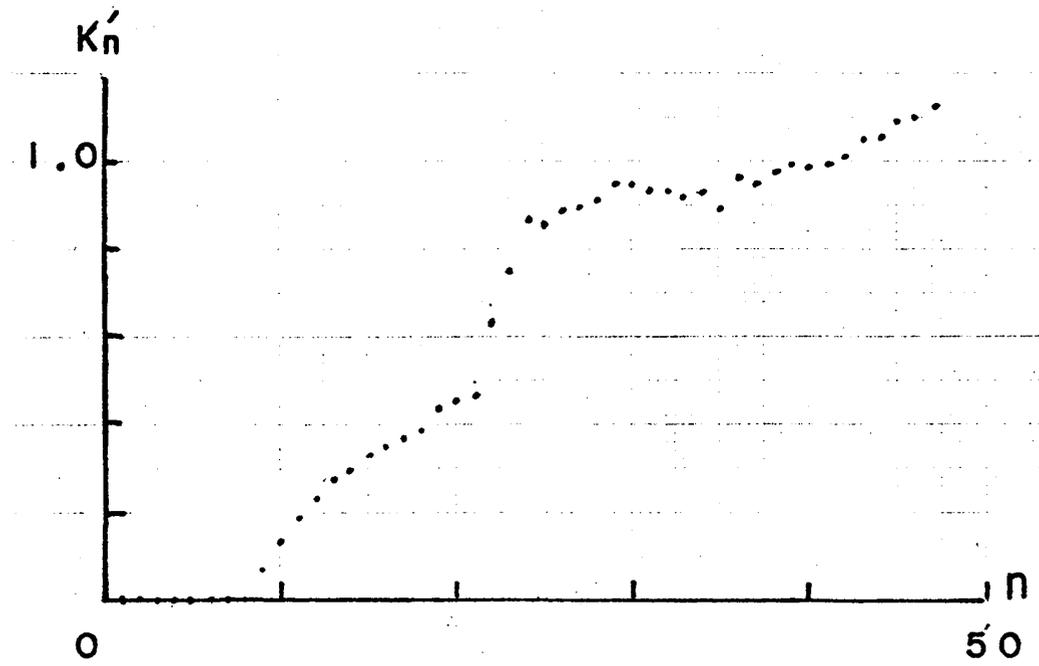


図 4-(2)  $N=150$

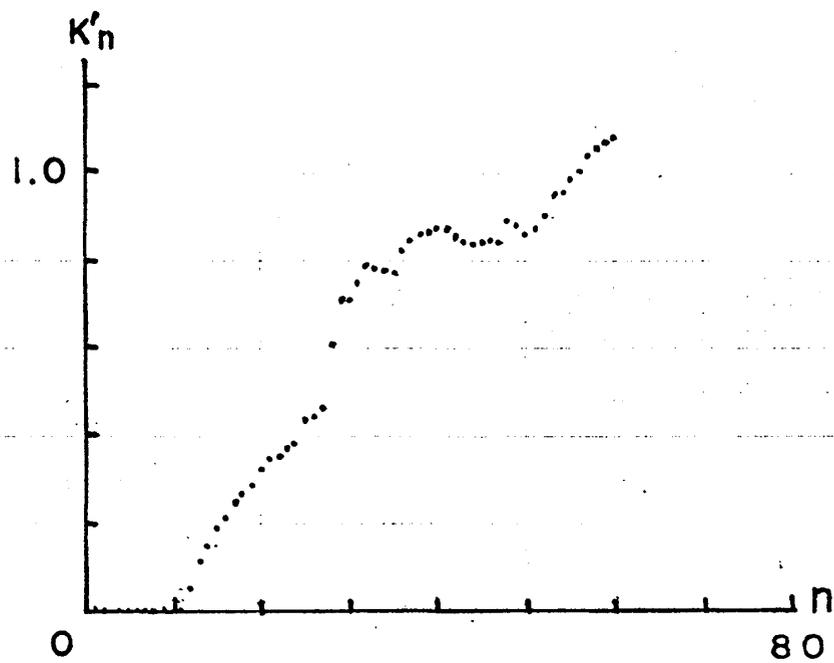


図 4-(3)  $N=200$

以上の図の番号で(1), (2), (3)とあるのは, それぞれ格子の全粒子数が 100, 150, 200 の場合を表わす。

2. 切れる時間について

§ 2の(7)式で定義した統計的パラメーターを粒子数が 150 個の場合について図示しよう(図5, 図6)。

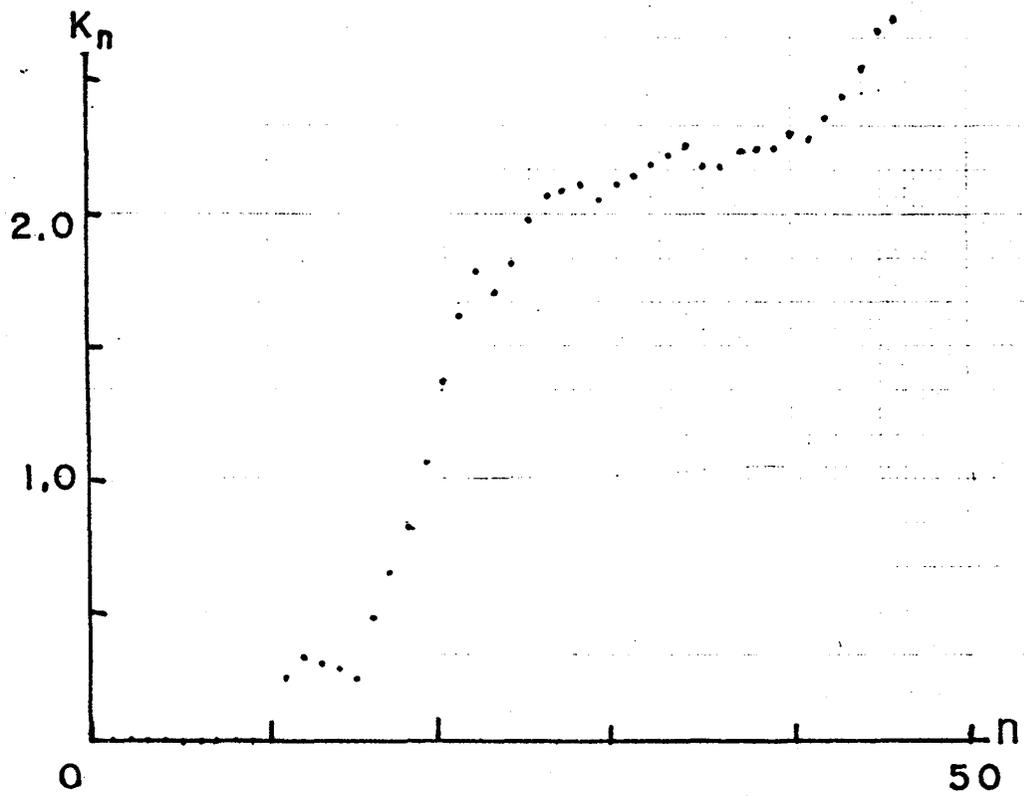


図5

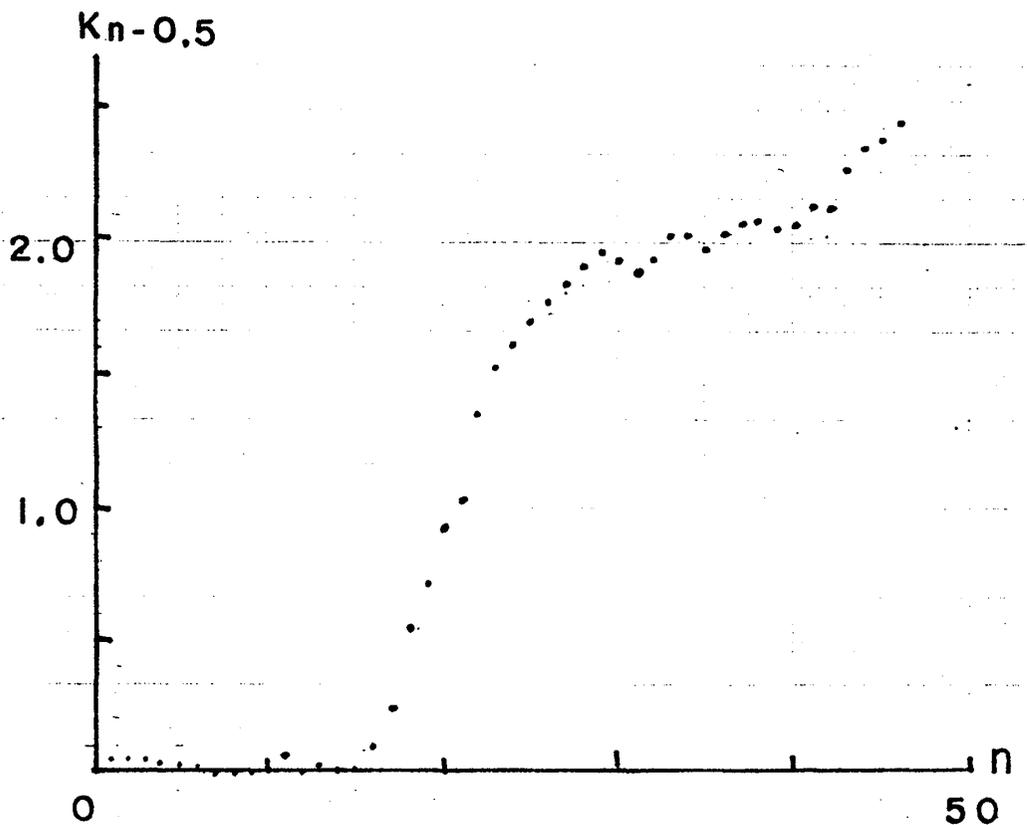


図 6

図 5 は張力が一様なとき（薩摩氏等の場合）であり，図 6 は張力が不均一のとき（筆者等の場合）である。ただし図 6 は縦軸を  $k_n - 0.5$  とした。

#### § 4. 議論

一様な張力を加えた場合の図（図 1, 3, 5）と不均一な張力を加える場合の図（図 2, 4, 6）を比べてみると大きな差異はないといえる。このことは，初期状態によって  $k_n$  の値や  $n$  による変化の様子が変らないことを意味している。力学的プロセスを考えると，どんな初期条件から出発してもいくつかのソリトンが形成されて，それが自由端で反射されると伸張波になり切れるパターンが共通であることによるといえる。つまりソリトンが形成されるまでにはいろいろ異なるプロセスをとるにしろ，一旦ソリトンができると以後の経過は同じである。

$k_n$  の最終値は何を意味するのか。  $k_n'$  についてはここで扱った 6 個の場合についてす

べて共通の値になっている。

この系はエネルギー保存系ではない。鎖が切れるときに、そのバネのポテンシャル・エネルギーは最大ではあるが、その粒子も運動エネルギーを持ち、切れた切片は並進運動のエネルギーを持つ。最終状態での全切片の内部エネルギーの総和は初期エネルギーの約 80% であることが数値計算の結果わかる。

切れる位置については真数  $|d_i|$  が 1 より大きいから  $k_n$ ,  $k_n'$  の定義はこのままでよいが、待ち時間については  $|d_i|$  がゼロになることがある。その場合には真数に 1 を加えることが必要である。統計的パラメーターの定義に任意性をもたせているが、もっと深い議論が要求される。エントロピーの定義のときの凸関数に対応して、なんらかの条件を課すること。対象が線形現象か非線形現象かで区別できるようにする。平衡状態に接近する間の期間をしらべるのに適した量であること。特別な場合としてエントロピーになるのか、エントロピーとは本質的に区別されるべき量なのか。等々。

非線形格子の破壊現象にかぎっての問題点を挙げよう。薩摩氏と四方氏<sup>4)</sup>は戸田ポテンシャル以外のポテンシャルについて計算して興味ある結果を出している。彼等は不純物格子の場合には、不純物の位置からも切れ始めることを示している。このような場合には  $d_i$  の定義に少し修正を要するが  $k_n$  の時間的変化にはさほど影響はないものと思われる。

現実の物質ではバネの弱いところがある。非線形現象であるから必ずしも弱い位置から切れるとはかぎらない。どんな切れ方をするのか。また、 $k_n$  の形に変化が生ずるのか。しらべてみる必要がある<sup>5)</sup>。

バネの弱いところ、不純物が不規則に分布しているときには  $k_n$  が最初から正で増加しはじめることが想像される。規則的に chopping がおこる初期のプロセスがなくなるものと予想される。

物理以外の現象への応用として、生物現象がとりあつかえそうに考えられる。枝分れしながら成長がおこる現象。正常細胞が異常細胞に変化する過程。健康状態から発病に至る過程。生物体の成長のプロセスも幼児期、成長期が  $k_n = 0$  に対応し、壮年期が  $k_n$  が正で増加するランダムな時期で末期的老年期が  $k_n$  が max. に近づく期間で  $\delta k_n = 0$  となり  $k_n$  が max. になることは死を意味する。他の現象への応用をいろいろ試みることは興味ぶかく、統計的パラメーターの意味をさぐる上にも重要であろう。

§ 5. おわりに

筆者の1人(鯖田)は統計的パラメーターについての着想を伊のミラノ大滞在中に思いついたこと、友人L. Galgani教授の位置空間での統計的パラメーターがヒントになっていることを付記します。

筆者の1人(岩田)は計算機についての指導を川崎広吉代に負っていることを付記します。

理学部生物物理寺本研の皆さんおよび京大工学部の薩摩氏の助力に、心から感謝の意を表します。

参 考 文 献

- 1) M. Casartelli, E. Diana, L. Galgani, A. Scotti, Numerical Computations On a Stochastic Parameter Related To Kolmogorov Entropy, Phys. Rev. A, Vol 13, 1976  
G. Benettin, L. Galgani, J.-M. Strelcyn, Kolmogorov Entropy and Numerical Experiments, Phy. Rev. A, Vol 14, 1976, P. 2338-2345.
- 2) 岩田和朗, 鯖田秀樹, 物性研究 Vol. 27 No. 1, 22 (1976)
- 3) M. Toda, R. Hirota and J. Satuma: "Chopping Phenomena of a Nonlinear System", Prog. Theor. Phys. Supplement No. 58 (1976)
- 4) 四方博実, 修士論文
- 5) 広田良吾, 私信