

Title	統計物理から(モレキュール型「宇宙現象での進化と時間の矢の問題」,研究会報告)
Author(s)	富田, 博之
Citation	物性研究 (1979), 32(1): A6-A10
Issue Date	1979-04-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/89760
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

富田博之

7. 富松彰 本報告集
8. 杉本大一郎 本報告集
9. Y. Néeman, Int. J. Theor. Phys. 3 (1970), 1.
10. 佐藤文隆 本報告集
11. 高木正博 本報告集
12. L. Brillouin 科学と情報理論, みすず書房
13. 松田卓也, 二間瀬敏史, 武田英徳 (1978), Unpublished.

「統計物理から」

京大教養 富田博之

統計力学の立場では時間の矢の方向は決定できず, いわば矢羽をつければ矢は飛んでいる方向を向く, ということしか言えていないようである。この矢羽をつけるという操作が物理的にどういう意味を持っているのかが問題となろう。

§ 1. 熱力学におけるエントロピーと第二法則

いうまでもなく熱力学におけるエントロピーは, 少数の状態変数で特徴づけられる熱平衡状態の存在を前提として, 巨視的状态量, 例えば $S(U, V)$ として定義される。内容的には, 歴史的には熱機関において巨視的な仕事としてとり出し得るエネルギーという概念と関係づけられる。例えば混合エントロピーというものも, 統計力学あるいは情報量と関係づければ大変スマートに理解されるが, 元々熱力学的には, 半透膜を張ったピストンで仕事をとり出す, という操作を前提にして初めて意味を持っていると言えよう。また第二法則をエントロピー増大則という時にも大きな制限があり, 孤立系において始状態Aと終状態Bがともに熱平衡状態であり, そのエントロピー S_A, S_B が定義される時にのみ $S_A \leq S_B$ と言っているにすぎず, その途中の任意の非平衡状態については何ら言及していない。まして特異的な始状態の行末については熱力学の範囲を超えてい

る。また巨視的変化であつても熱力学的変数が何ら変化しないようなものである時には第二法則からは何の結論も引出せない。複雑な生体系における「一見第二法則に反するような…」と言われる現象には開放系であると同時に後者のような意味で熱力学の範囲を超えているものが多いように思われる。

エントロピーおよび第二法則をこのように省てみると、統計力学によって力学法則から非可逆性を導く時に、巨視状態、巨視法則を抽出するという操作が必要不可欠であることは明らかであろう。例えば N 粒子系の拡散現象を考えてみても、 $6N$ 次元の Γ 空間の点の運動としてみる限り、何ら不思議なことは起っていないのである。

§ 2. Boltzmann の H 定理における時間

Boltzmann は μ 空間での粒子分布 $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ によって H 函数

$$H(t) = \int f \ln f d\mathbf{x} d\mathbf{v}$$

を定義し、 $dH/dt \leq 0$ となることを示し、エントロピーが確率的に増大するとした。逆行性批判、再帰性批判と呼ばれる力学法則の対称性と H 定理における時間の方向づけの間の矛盾に関して激しい論争が交されたのは有名な話である。しかしそれではどこで時間の方向づけが行われたのかについては、統計力学の教科書にはあまり明解に書かれていないようである。普通この H 定理を導くのに用いられた仮定として、①分子無秩序あるいは衝突数の仮定、②微視的可逆性の仮定、があげられている。②が力学法則の対称性で基礎づけられることは明らかであり、①が巨視化の操作として重要な役割を果していることは疑いない。①の仮定に基づいて確率過程化が行われるのである。しかしこれだけでは時間の方向づけを説明することにはならない。実は確率過程化する際に「時間の方向の選択」が行われているのである。導出の途中で用いられる $f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ に対する運動方程式

$$\frac{d}{dt}f(\mathbf{v}_1) = \int c [f(\mathbf{v}'_1)f(\mathbf{v}'_2) - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)] d\mathbf{v}_2 d\Omega$$

は、前進的確率方程式と言われるものであり、詳しくは、「ある時刻 t_0 ($t_0 = -\infty$ でもよい) である状態にあった時のその後の時刻 $t > t_0$ での条件つき確率」の従う方程式である。これに対し $t < t_0$ の時には別の方程式(単純には符号を変えたもの)となり後退方程式と呼ばれる。後者も2つの物理量の時間を隔てた相関関数によって観測され

富田博之

得るし、2つの時刻 t_1, t_2 で条件づけられた時の $t_1 < t < t_2$ における確率分布の従う方程式では時間の対称性は回復する。 H 定理において前進方程式を採用することがごく自然と思えるところに H 定理の意義があると言えよう。渡辺氏によれば H 定理は「認識の方向」に従っているにすぎないことになる。(渡辺慧「時間の歴史」)

§ 3. アンサンブル理論における H 定理

アンサンブル理論ではエントロピーは Γ 空間での位相点の分布密度 ρ を用いて

$$S = - \int \rho \ln \rho d\Gamma$$

で定義され情報量と関係づけられる。(ここでは古典力学に限定する。) しかしこの S は、 ρ が Liouville 方程式に従う限り時間的に不変である。すなわち出発点で与えられた Γ 空間のある体積は時間とともにその形を変えながら Γ 空間を巡り歩くが、その体積は不変であるということである。(保測性) 従って S 増大ということを示すには粗視化という操作が必要となる。 Γ 空間を体積 $\Delta\Gamma$ の細胞に分割し、各細胞内では一様に均らされた「粗視化された密度」 $\tilde{\rho}$ をとり、粗視化されたエントロピー

$$\tilde{S} \equiv - \int \tilde{\rho} \ln \tilde{\rho} d\Gamma = - \int \rho \ln \tilde{\rho} d\Gamma$$

を導入する。この細胞化という操作は、 $6N$ 変数の函数として表わされる、いくつかの巨視変数の空間への射影で記述することに対応すると考えればよい。この時、 $t=0$ では $\tilde{\rho}(0) = \rho(0)$ (例えば初期集団としてひとつの細胞を採用すればよい。) とすれば $\tilde{S}(t) \geq \tilde{S}(0)$ が示される。しかしながらこの粗視化という操作だけではエントロピー増大にはつながらない。もし初期細胞が時間とともに巡り歩く際にその形が大して変わらず、常にせいぜい数個以内の細胞にしかまたがっていないような仕方では、いかに全 Γ 空間をくまなく巡り歩く(エルゴード性)としても $\tilde{S}(t)$ は増大しない。変形されていく初期細胞が全体積を保ちながらも、またがる細胞の数がどんどん増えていく、例えば細く細くひき延ばされていくような仕方でないとならぬと増大しない。この時には粗視化された密度では、どんどんうすめられていくのである。(これが $t \rightarrow \infty$ で一様になる時、混合的と言われる。) 従ってアンサンブル理論での H 定理では、粗視化という操作とともに、個々の力学系の性質である混合性が重要な役割を果していることになる。よく例に出されるパイコね変換がこの例であり、現実の系では剛体球衝突の singularity (不連続性) が混合

性を保障することが知られている。解析的な場合には、線型振動子系では混合的でなく（もちろん非エルゴード的）相互作用が必要であるが、相互作用の非線型性がある程度強ければ混合的になることが数値実験で示されている。端的に言えば、 Γ 空間での任意の近傍点が時間とともに平均的には指数函数的に離れていく性質があれば、初期集団としていくら小さくても測度ゼロでない体積から出発する限りエントロピーは増大する。注意しなければならないのは、混合的な系は負の時間の方向にも混合的であることである。パイコね変換の逆変換をたどれば明らかであろう。つまりここでも「時間のすすむ方向にエントロピーが増大する」ことしか言っていないのである。

アンサンブル理論で残る疑問は非平衡状態における統計集団の意味である。平衡状態においては、エルゴード性すなわち時間平均＝集団平均が成立つとし、熱力学的エントロピーは与えられた束縛条件のもとでの S の最大値、すなわち対応するカノニカル集団のもつ情報量と関係づけられ、統計集団とエントロピーの意味は明解である。非平衡状態においてはこれほど明解ではない。各時刻での物理量の観測値と集団平均を関係づけるには、十分大きな系がほとんど独立な巨視的部分系に分けられる、という観点からの理解が最も妥当と思われる。

その他に非可逆過程の統計力学で確立されてきた方法として、巨視的変数を取り出す射影演算子の方法、線型応答理論などがあるが、いずれも「前進解の選択」という操作が入ってくることを追記するにとどめる。またマスター方程式については江沢氏の報告に譲る。

§ 4. 非線型非平衡状態の統計力学

従来の非可逆過程の統計理論は、少くとも確立されたと言えるものは、熱平衡状態に近い線型領域に限られてきた。近年、ようやく熱平衡状態から遠い、非線型非平衡状態というものが脚光を浴びるようになってきた。しかしながらこのような状態を扱う統計力学的処方確立されたとは言い難い。むしろ、熱平衡状態に近い系では予期されなかった新たな現象が、様々の分野での個々の現象の中にどうやら統一性を持って現われているらしいという点に大きな関心が注がれているのが現状と言える。ここでは散逸構造と言われているものの例をあげるにとどめよう。

開放系において熱平衡から遠い束縛条件を維持すると、全体としての散逸が十分大き

富松 彰

いために部分的には「一見第二法則に反するような」現象 — 例えば反拡散現象 — が現われることがある。もちろん第二法則に何ら抵触するものではなく、局所平衡の安定性から帰結される「線型領域では個々の非可逆過程のエントロピー生成が正である」という特殊性が破れるだけである。例えば化学反応系を考えよう。系が一様だと仮定して安定な定常状態が予想されるとしよう。この時、系内での各物質の拡散を考慮すると、大きな波数モードに対して線型安定性が破れ、空間構造を持った解が現われることがある。拡散は元来、系を一様化する傾向を持ったものであるにも拘らず、むしろ拡散を考慮することにより構造が得られるのである。もちろん平衡状態に近い所では拡散は常に系をより安定化する役割しか持たないことが示される。反応系ではこのような例はモデルとしてはいくらでも作れるし、現実の系（自己触媒反応を持つような非線型反応系）で見出されている。

また一様な定常解が不安定化した後に、リミットサイクル的な安定な周期解が現われることもあり、更にその次には周期解でも多重周期解でもない乱れた解さえ現われることが知られている。このような振舞いが化学反応系に限らず、流体力学系、生態系、電気回路型、非線型光学系、等いろんな分野で見出されており、従来の統計力学とは異なる、新たな統一的観点が追究され始めている。

この分野での現状については、7月の国際セミナーの報告集として近々プロGRESSのサプリメントが刊行されるのでそちらを参照していただきたい。

ブラックホールの熱力学

広島大理論研 富松 彰

星が重力崩壊を引き起して、その外側に特異点を残さずにブラックホール (B. H.) を形成したとしよう。一般相対論によれば、この B. H. の外側の重力場を記述するパラメーターはその質量 M 、角運動量 J 、荷電 Q だけになってしまう。B. H. の内部は観測不能であり、重力崩壊してしまった星の物理状態を識別することはできないためである。