－不可逆な時間と物質系の時間発展〈量子確率過程力学〉－

「原子分子のミクロ系の運動〈素粒子原子核，化学反応〉は19世紀末から今世紀始めにかけて欧州の物理学者多数の尽力により開発された **量子力学** にて厳密に記述される」．現実に量子力学は原子分子のミクロ世界の挙動解明に不可欠で，今日化学,電子磁気材料,医薬の開発に不可欠な道具になっており膨大な実験事実も量子力学の正確さを支持してる．だがそれでも間だ基礎的な未決問題が開発当初以来，長く存在してきた！．その代表例を挙げて見る．

量子力学では観測対象は **状態** と呼ばれる時空変数xの関数$\psi(x)$〈ﾌﾟｻｲ,ｴｯｸｽ〉で表現され，他方 **物理量観測装置** は演算子 A に対応する．演算子 A は元の関数$\psi(x)$を別な関数$\phi(x)$〈ﾌｧｲｴｯｸｽ〉に変換させる作用がある．即ちミクロ系では観測を行なえば状態変化が一般に起こる．この事はマクロな古典ニュートン力学とは決定的に異なる差異であり，注意せねばならない．

注：関数，演算子に着いてはページ　　参照．

$\phi(x) = A \cdot \psi(x)$．　〈「関数$\psi$に A を作用すると$\phi$に変換する」と読む〉．

観測可能である「長さ,重さ,温度」等の物理量は全て現実の数と言う意味での **実数** で表現される．だが量子論では$i^2=-1$と言う非現実的な虚数も最終的な結論には出現しないと言う制約の下に，理論中途段階では一応，使用許可される事には注意する．

(1)物理量が実数になる演算子を **自己共役演算子** と呼び，だから量子力学での演算子は全てこれらに限られると言う基礎前提が開発当初以来，絶対的支配原理として君臨していた．

(2)特に力学系の基本物理量であるエネルギーを計る演算子 H を **ハミルトニアン** と呼び，これも当然ながら自己共役であるとされる． H はだから力学系のエンジンに相当する．

(3)車がエンジンとハンドルにて時間走行する如く，量子力学系の時間(走行)発展は次の

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x) = H\,\psi(x). \qquad \cdots\cdots\cdots\text{①}$$

シュレデンガー方程式で記述されるとする．$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$はハンドルに相当して状態$\psi$の時間変化**の向き表現するとされる．**だが実は最も基礎土台であるここに問題が発生する．

(4)エンジンである H を自己共役に限定すると，実はψには時間発展がない事が厳密に証明できる．即ち，化学反応と言う明白なミクロマクロ系の時間発展はないと言う馬鹿げた結論が避けられない．これは既に化学者プリゴジン博士等により指摘されてた〈みすず書房,存在から発展〉．筆者も彼等とは独立にこの事実に気が着いた(1987年)．だが彼等は足踏み状態だった．

(5)以上の経過が基本動機となり，筆者は新たなミクロ系の動統計力学〈 **量子確率過程力学** 〉の開発に踏み込む事になり， **(後戻りしない時間)不可逆時間の物質発展系** の解明に至る．

(6)その基本的成果は以下に要約される．

❶真の時間発展には非自己共役なハミルトニアン≡ H_s が必要になる．

❷非自己共役なハミルトニアン≡ H_s の下ではエネルギー値は不明になる〈 **特異化** 〉．

❸だがその様な異常事態はΔt(ﾃﾞﾙﾀｰﾃｰ)＝0の区間時間でしか実現しない．

☞:量子力学系での状態変化は瞬間に起こる事が現実に観測されて，事実はこれを支持！．

❹現実のエンジン＝ハミルトニアンは{自己共役H_0と非自己共役$H_s(t)$の交互交替列}になる．その交替のあり様は確率過程的になる．

☞:元素崩壊系での状態変化は確率過程であり，観測事実はこれを正に支持する！．

❺時間軸上で点存在として発生し，状態変化を引き起こす$H_s(t)$の発生確率密度は統計集団として決まる状態のエネルギー偏差値〈揺らぎ〉≡$\Delta E(t)$に比例する．

☞:非エルゴード的ウィナーキンチン定理を開発した結果，これが一般証明された．ウィナーキンチン定理と言うのは雑音信号$N(t)$の様な統計集団系のエネルギー周波数分布$E(f)$と$N(t)$の相関関数の関係を結ぶ有名な基礎定理で，この分野はフーリエ解析と呼ばれる．

❻確率系の自明な恒等式たるマスター方程式に以上の結果を総合すると「幾らの確率$\omega_j(t)$〈ｵﾒｶﾞｼﾞｪｲﾃｰ〉でどの状態jが実現するか」と言うミクロ系の確率時間変化を記述する基礎式が判明．この方程式から **熱力学第２法則** に対応する **一般緩和過程解** を得た(1988)．

$$\underbrace{\frac{d}{dt}}_{\text{状態分布変化率}}\omega(t) = \underbrace{[\Delta E(t)/\hbar]}_{\text{エネ揺らぎ}}\underbrace{[\,T-1\,]}_{\text{状態遷移反応行列}}\underbrace{\omega(t)}_{\text{時刻tに実現される状態の確率(分布関数)}}. \qquad \text{〈孤立閉鎖系の式〉}. \qquad \cdots\cdots\cdots\text{②}$$

—補足解説—

統計力学：風船を想定してみる．内部は空気の分子多数がランダムに走行しているだろう．風船のマクロ〈巨視的〉力学状態は体積Ｖと圧力Ｐ，内部ガス温度Ｔで記述できるだろう．マクロに{V，P，T}の熱力学的変数を指定しても同一のマクロ状態を与えるミクロな分子の運動状態を一つに決める事は不可能で，似た様なミクロ状態多数が可能になる．従って{V，P，T}で指定される同一の力学系多数を **統計集団** として定義できる．このミクロ集団のミクロ物理量の集計的な統計的平均値が実は[P，V，T}を与える事が一般に証明できる．この手法を統計力学と呼ぶ．なほ要素的なミクロ物理量は量子力学から計算する．

❶❷❸：自己共役では時間発展がないとすれば，対偶命題として，時間発展系でのハミルトニアンは非自己共役となる．だが非自己共役の下ではエネルギー値が実数として確定しない．この事はエネルギーの揺らぎ〈同一ハミルトニンの力学系多数を想定した **統計集団** を仮定すれば，そのエネルギーの統計偏差値ΔＥ(デルターイー)が無限大になると言う事に相当する．すると幸いにもかような状態が持続する時間Δtは０になる．その理由はエネルギーの揺らぎとその持続時間は同時に確定できないとするハイゼンベルグの **不確定性原理** による．

$\Delta t\cdot\Delta E=\hbar\,(1.054\times10^{-34}\mathrm{Js}$:プランク定数)．⇔　$\Delta t=\hbar/\Delta E$．〈不確定性原理〉．

特異点：前述の非自己共役ハミルトニアンではエネルギー値が有限確定しないとした．これは代言すれば **無限大** になると言う事でもある．数学量が無限大〈又は０〉になる事を特異性と呼び，そのような時空地点を特異点と呼ぶ．因果的一意決定性を基本使命とする数理科学に取り，因果律破綻点である特異点の発生は厄介であるが，実は自然一般が持つ正真正銘の顔であり，ゲーデル不完全性定理に対応する事象であり，無矛盾な理論ならば必ず存在する現象であり，確率論と一体関係になる．本書ではこの議論は繰り返されるので留意されたし

❹：確率混成ハミルトニアンの理論参照，ページ　．

❺：エネルギー揺らぎが大なれば，反応速度は早く，揺らぎが小なれば，反応速度は遅い．この事は爆発過程や，温度の低い系をみれば現実に対応している事実が判るだろう．この普遍的な事実を **エネルギー揺動進展原理** と命名した．

❻熱力学第２法則：ページ　を参照．

一般緩和過程：例えば危ない例だが，密閉圧力容器にナトリュウムを置き，そこに水を注いで瞬時に蓋をすると内部では爆発的反応が進行する．だが充分に時間が立てば反応は必ずおとなしくなって静止状態に到達する．これを緩和過程と呼ぶ．これは熱力学第２法則に準じる事も判るだろう．故に生命の如き非静止系≡活動系では必ず，内部外部をつなぐ **物質一熱流** が必ず存在する．流れがある系を **開放系** と呼ぶ．卵は表向き閉じた系だが，外壁には熱流が流れ孵化する．

---

❼ エントロピー増大法則と不可逆時間〈ボルツマンの呪いと現代文明の癌病巣〉．

基礎方程式②からは熱力学第２法則の別表現たる閉じた系のエントロピー増大法則も結論できる．②では時間変数を逆向きにするともやは不成立な事から時間の不可逆性も証明可能．

☞：従来のパウリのＨ定理にもとずく量子力学での不可逆性定理は誤りである．パウリの裁可で有名な彼も自己共役ハミルトニアンを使用しており，明白な誤りを犯した．不可逆性の議論は統計力学の元祖：ボルツマン以来の因縁深いもので，彼もＨ定理から不可逆性を主張したが，ツエルメロ(1876)，ポアンカレ(1896)の古典力学の可逆性，再帰定理による批判にあい「時間を逆にできる物ならしてみろ，そんなに長く待てるものならば待ってみろ！」と激怒したとの伝聞があり，だが問題を深刻に捕らえた彼は後に自殺する伝説は有名だ．古典力学ではある運動の時間反転運動も可能である事を可逆性と言う．又閉じた容器内での分子運動を想定する時，ある初期状態Ｉから出発した運動は充分時間経過すれば必ずＩの近傍近辺も通過するというのがポアンカレの再帰定理である．彼の不可逆性の仕事は50年早過ぎたのである〈量子力学前の仕事！〉．だが筆者の仕事は50年遅すぎた感がある．その意味は **地球規模の熱的，化学的不可逆性問題** こそは実に現代文明最大の癌病巣になりつある現実から判るだろう．この量子確率過程力学の仕事は1988年以来既に10年を経過するが，その基礎論文は今だに公開されないのである！．おそらく不可逆性問題こそは物理学史最大のミステリー〈ミス定理?〉であり，恥部でもあろう．

☞：不可逆性の本質は力学運動の確率化にある．力学系はハミルトニアンで一つに指定されるが運動は時間順方向でも既に一つに決定できない．故に時間反転したハミルトニアンでも運動を一つに指名できない．と言う事はある運動の逆運動を確率１で実現する事は不可能．

☞: **ミクロ分子系の不可逆性がマクロにも伝搬する理由：**
ミクロ分子系挙動が量子論性の確率的であり，ゆえに不可逆性が起こる理由は直に理解可能だろう．ではなぜ巨視系でも不可逆なのか？，電車，舟の運動は逆行可能である，だが目に見える現象としてのグラスが割れる，衣類が燃える，人の老齢化は不可逆である．その理由はマクロ現象だが化学分子反応的だからである．人は化学系の固まりその物であり，毒物では容易に死ぬ，水質系は大抵の化学成分に対して溶解的だから，拡散現象が起こり，汚濁を元に戻す事は容易でなくなる．ゴミ一般は化学物質なのだから不可逆的存在となる．

☞: **地球が開放系たるは熱赤外線放出が可能な事による，この唯一経路を閉じると破綻する．**
熱力学第２法則の言う事は閉じた系では反応進行があれば一方的に無秩序化の進行と言う事になり，故に秩序保持には必ず外部と通じる流出入経路が必要になる．この意味で地球が開放系でいられる条件は熱赤外線による熱放出のみである．もしCO^2増加が起こるとCO^2が熱を内部に抱えて熱放出経路を断つ事になり，いわば閉鎖系になる危険を引き起こす．

❽ シュレンデンガー方程式の再解釈：
量子力学の基礎方程式は確かにシュレンデンガー方程式である事はここに至っても正しい．但し時間発展する系ではエンジン＝ハミルトニンが{自己共役$\mathfrak{H}_0$と非自己な$\mathfrak{H}_S(t)$}の確率的混成になる結果，確率微分方程式と呼ばれ，その一般的解法は困難である〈その代理解が筆者のマスター方程式法であり，これは結局シュレデンガー方程式と数学的同値である〉．
従来の基礎的問題では原子状態の如く時間変化のない$\mathfrak{H}_0$のみの **定常系問題** と，その逆の$\mathfrak{H}_S(t)$**のみの素粒子原子核反応に**対応する **散乱問題** と呼ばれる設定での時間は過去は**負無限大での**|初期状態〉から未来は正無限大とする|終期状態〉への遷移確率のみを決定する**内容であり，時事刻々と時間変化する**状態の記述ではないので欠陥が発覚しなかったのだ．
だが化学反応の時間経過を問題とする場合はやはり矛盾が露呈する．だからこの問題を告発**したのが化学者であるプリゴジン**等であった事は的を得ている理由と言えるのである．
残念ながら，彼等は時間発展の動的統計力学開発では筆者の仕事に抜かれたのである．

この結果から判る如く「量子確率過程力学の業務範囲」はミクロ時間発展系問題であり，
①化学反応速度の一般理論，一般緩和過程．
②一般開放系での反応速度論．
③形態形成，秩序形成物質系の時間追跡．
但し反応行列 T を決定する初歩段階からして結構問題は膨大であり，手間がかかかる．
しかも方程式②はΔEを通じて状態確率密度ωの非線形方程式で解析的な解を求める事は一般に極めて困難となる．だから計算機疑似実験向きと言えるだろう．

❾ 観測問題等の量子力学未解決問題の全解決：
①シュレデンガーの猫の問題．

猫が居る暗黒箱内部に置かれた放射性元素が放射線を発射すると測定機が捕らえ，毒ガスが出て猫が即死する仕掛けになっている．測定前は猫は死んでいる状態ψ_Dか，又は生きている状態ψ_Aのいずれかである．量子力学の従来公理によれば，結果は測定時に決まる．測定時点で猫は生から死へ瞬時状態遷移するのが理論．これは常識からしておかしい？！．

この議論は多少なりとも量子力学の予備知識がないと正確な説明は難しい．だが結論は常識がやはり正しい．誤解の元は測定には基本的に異なる２種があると言う事である．
(1)自己共役ハミルトニアン$\mathfrak{H}_0$の下では状態変化がない事を既に述べた．すると$\mathfrak{H}_0$の関数となる観測の演算子 A $\equiv A(\mathfrak{H}_0)$の測定では状態変化はない事が証明できる．かような演算子 A は$\mathfrak{H}_0$と可換とも言う．これらを$\mathfrak{H}_0$の **最大観測量** と呼ぶ．結局猫の生死の観測演算子は最大観測量で，測定で状態変化は起きず，測定前に状態は一つに確定済みなのである．
☞:個々の観測は統計集団での観測標本を対象にする物で，元々，$\mathfrak{H}_0$の下では有名な確率的混合状態としての固有状態の線形和と言う仮定が誤りである事が一般証明できる．
(2)観測演算子 A が$\mathfrak{H}_0$と非可換な場合，これは時間変化する演算子であり，例えば電子の位置観測演算子が典型例だが，この演算子を作用させると状態は瞬時変化する．かような測定演算子を **非最大観測量** と呼ぶ．現実に位置観測では光子電子衝突が必要になる．

⑩ 一般開放系と生命系の抽象概念： 〈以下は初心者には難しいので飛ばして良い〉.
閉じた系は死滅的である一方，流れがある開放系では活動的，秩序的系が出現可能になる事が基礎方程式の視点からも理解される．②式は閉鎖系の発展方程式だが開放系にも発展系としてのマスター方程式が設定できる．その基本方針は対象系の状態遷移は内部反応＝ T による場合，外部流 L (t)に起因する２通りが想定され，その結果のみを引用すれば次の通り．

$$\frac{d}{dt}\,\omega(t)=\underline{\Theta(t)[\;T-1\;]}\;\underline{\omega}\;\underline{(t)}+\underline{\xi(t)[\;L\;(t)-1\;]}\;\underline{\omega}\;\underline{(t)}. \qquad \cdots\cdots ③$$

状態時間変化　　内部反応状態遷移　　流れによる状態遷移

$\Theta(t)$は ω (t)から決定するエネルギー揺動による反応 T の発生確率密度を与える．
$\xi(t)$は ω (t)， L (t)から決定するエネルギー揺動による流れ L による状態遷移発生確率密度を与える．いずれもエネルギー揺動進展原理に基ずく量とされる．特に流れ行列 L (t)，その反応速度$\xi(t)$は一般原理から推論された結果であり，まだ具体的事例に適用されるまでに現状の研究段階は至っていない未開拓分野である事も冒頭指摘せねばならない．
(1)Θ，ξは本来非線形量だが$\{\Theta(t),\xi(t);\ T, L\ (t)\}$を外部与件と見成せば③の形式解は，
$\omega\ (t)=\omega\ (0)\exp\{\int dt[\Theta(t)[\ T-1\ ]+\xi(t)[\ L\ (t)-1\ ]\}$.
この結果{内部反応 T ，流れ L (t)}が適当な条件を満たせば，望む状態 ω (t)を実現！．
<u>流れはかように開放系の形態を制御できる事が判明</u>〈 **<u>流れによる自立的形態形成の原理</u>** 〉.
(2)一般的結論として流れ行列 L が定数的だと，開放系は最終的に静的状態化する．但しこの静止状態が形態形成的である，ないの議論までには議論は到達していない．
(3)特殊例として静止化最終状態での興味深い自立的秩序形成としての解が一つ得られる．

－鼓動解－
方程式③はまともな解析解を直に得る事などは到底及ばないので次の粗い仮定を設ける．
＊流れを時間不変と仮定：$\xi(t)[\ L\ (t)-1\ ]\ \omega\ (t)\equiv j_0$.
＊充分時間経過の後に状態変化停止とする，即ち$\frac{d}{dt}\,\omega\ (t=\infty)=0$．　すると次関係を得る．

$0=[\Delta E(\infty)/\hbar][\ T-1\ ]\ \omega\ (\infty)+\ j_0$　　〈基礎方程式〉.
$\Delta E(\infty)/\hbar\equiv 1/\Delta t(\infty)$.　　〈不確定性関係〉.
$\omega\ (\infty)=[\ 1-T\ ]^{-1}(\ j_0\ )\Delta t(\infty)$.

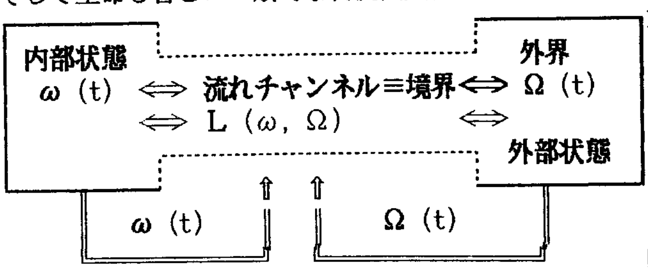
「内部反応 T と流れ j_0 から形成される状態 ω (∞)」．

$\omega\ (\infty)=\ T\cdot\omega\ (\infty)-(\ -j_0\ )\Delta t(\infty)$.

時間不変状態　反応による状態分布変化　流れによる状態分布変化．　一定周期鼓動．

具体例)ポンポン蒸気(?)と言うブリキ玩具舟がある．ミニボイラーを備え蝋燭で加熱すると２本のボイラーへの流入管の一方は吸い込み，他方は熱水流出になり，舟を駆動する．この時，ミニボイラーはポンポンとリズムを刻む．これは過熱流による時間的，及びボイラ管中の流れの空間非対象性の **自立的秩序形成** の発生である．これらは熱機関一般にも成立する内部反応による変化は流れで生じる変化を相殺して，状態密度は静止状態化をなす．

(2) 一般オートマトンとしての生命系：
オートマトンは入出力装置と内部記憶を備えた数学的機械概念をさし，典型は計算機であり，そして生命も含む．一般的な物流出入経路を持つ開放系がオートマトンになる事を示す．



左図の関心対象は左端の系であり，その状態分布は ω (t)で示す．その外部環境が Ω (t)であり，両者は時間tの関数で刻々変化する系．さてその間にある流れ系は両者の状態から決まる関数になるのが一般的である．すると内部状態ωは自分自身ω，及びΩの関数として決定される存在になる．これは一種のオートマトンの形成に他ならない．