

# 非平衡态研究的最新进展

方锦清 (中国原子能科学研究院)

自组织的微观机理是什么? 不可逆性的微观意义何在? 什么类型的动力学系统允许存在自组织? 普利高津学派在非平衡态研究方面的最新进展令人振奋。

去年10月, 非平衡态研究方面的国际科学精英聚会号称欧洲之都的布鲁塞尔市。10月2日的《每日电信报》以“时间本身的新视野”为题显著报道了普利高津学派在非平衡态研究方面的最新进展, 同时刊登了普利高津教授考察三体模型的照片及一组非平衡结构的彩照, 如宇宙中银河系大旋臂奇观和由旋风、飓风和低气压构成的气象云图案。真是令人惊叹叫绝, 欧洲之都也为之倾倒: 时间就像凯旋的礼车绚丽多彩, 普利高津用计算机模拟再次考察了时间的箭头与含义。半个多月之后, 赞歌从欧洲飘到亚洲东方, 日本《读卖新闻》于1989年10月28日, 又突出报道了正在召开的关于当代尖端科学最新发展及其前景的学术顾问会议。会议特邀5位诺贝尔奖获得者参加(1972年物理学奖获得者、1975年和平奖获得者、1977年化学奖获得者、1982年生理学奖获得者及1985年文学奖获得者)。其中的普利高津教授又获殊荣应邀光临了由日本主办的第二届诺贝尔奖获得者盛会。非平衡态研究的最新进展再度轰动东京。近年来, 在世界各地非平衡态领域的各类交叉科学学术会议开得十分频繁和活跃, 展示了该领域研究的一派生机勃勃的喜人局面。

非平衡态的研究, 特别是远离平衡及非线性系统的研究, 确已遍及众多的学科和广泛的领域, 是现代科学中最富有挑战性的交叉学科之一<sup>[1~8]</sup>。从70年代以来, 人们对此新兴科学的兴趣与日俱增。例如, 非平衡物理、化学和生物等学科, 仍处在迅速发展的状态, 大量的远离平衡系统的自组织现象的观测材料已清楚

地阐明了时间在当中所起的建设性作用。我们知道, 普利高津学派发现的自组织概念原先是从唯象的热力学层次上引进的。自组织的微观机理是什么, 不可逆性的微观意义何在, 一直是令人关注的基本问题。正是在这些问题的研究上, 普利高津学派近年来取得了鼓舞人心的进展, 他们将非平衡态的研究从宏观唯象层次推进到了微观层次, 从经典物理推进到了量子物理。

因篇幅所限, 本文只能主要评述普利高津学派在非平衡态的微观机理上研究的最新进展。第一部分叙述建立在分子动力学基础上的计算机数值模拟, 结果表明自组织来自基本的微观层次, 无需任何宏观假设, 可以直接从动力学层次上产生。第二部分进一步讨论自组织的动力学基础, 评述建立在子动力学理论上的关联动力学的研究成果及其应用, 阐明什么类型的动力学系统允许自组织以及时间之矢的不可逆性的微观意义。第三部分着重阐明理论的应用范例及其意义。最后, 我们简评基于非平衡态最新成果总结成书的《时间与永恒之间》的含义, 特别是对规律与事件的双重性的辩证认识。

## 一、从分子动力学研究自组织的微观机理

近年来, 通过建立在分子动力学基础上的超级计算机的数值模拟, 已成功地研究了自组织的微观机理。普利高津学派已经利用分子动力学和蒙特卡洛方法发展了研究远离平衡系统的数值模拟技术<sup>[4]</sup>, 并在流体的贝纳德不稳

定性、自催化反应和燃烧中波前的形成等课题的研究中取得了令人满意的成果。

例如，他们应用非平衡分子动力学模拟了流体中的贝纳德不稳定性<sup>[4,5]</sup>。对象是一个矩形系统，内有5400硬盘集合，垂直侧面为反射边界，水平侧面为热库，有一个外力(类似于重力)向下作用在流体粒子上，底部热库的温度高于顶部的温度。用此模型在计算机上对粒子运动方程进行时间数值积分，模拟了流体粒子速度场的形成过程。如图1所示，由热和重力相互作用产生了典型的速度场，图中每个箭头都是对粒子的速度在一个单元胞内取平均，典型的是每单元胞5个粒子，在粒子的碰撞次数高于10兆次(相应于1000微微秒)时求平均。如此小的流体系统居然十分明显地展现了宏观的贝纳德对流旋转的图案。值得注意的是，在平衡态时仍然存在时间箭头。

非平衡化学反应一直是研究非平衡态自组

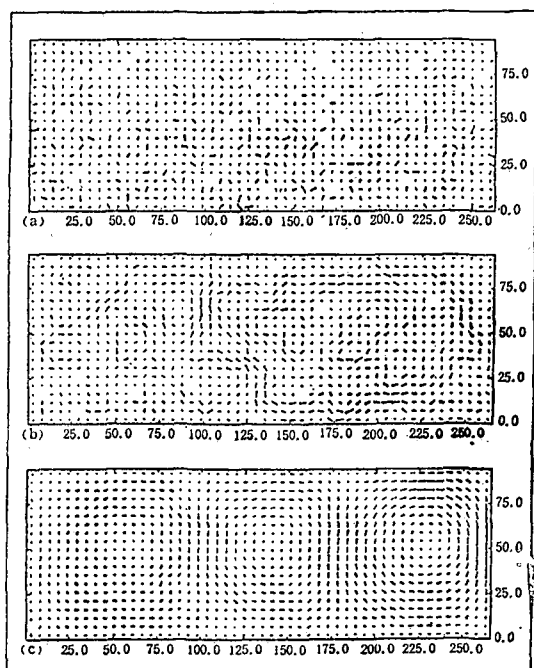


图1 在热梯度及外力(重力)作用下由5400硬盘组成的有限流体系统

(a)初始的随机速度密度分布；(b)在不同的外部约束条件下相应系统产生的速度场；(c)在(a)条件下经过几千次分子碰撞之后产生的速度场，已经形成了贝纳德对流旋转图样。

织的一个极有价值的领域<sup>[6]</sup>。毫无例外，人们同样成功地应用分子动力学研究了化学钟形成的微观机理。因为化学振荡周期取决于反应率和化学成分的浓度，宏观的时间标度意味着每个周期内存在大量的碰撞，这样势必需要大量的计算机机时，耗费太大。贝德首先作了这样的化学分子动力学研究<sup>[7]</sup>。他发展了比传统的分子动力学方法快百千倍的方法，但只适用于玻耳兹曼稀薄气体，且限于二体碰撞(如二级化学反应系统)。

迄今，已提出了许多能产生周期振荡的简单化学模型，诸如布鲁塞尔器和施洛格模型等<sup>[6]</sup>。它们均属于三分子碰撞。人们已证明，可以用具有不同时间标度的一对双分子来近似三分子步骤(可通过绝热消除快变量)。不过该方案不宜用分子动力学来研究，因慢变量的种类比快变量的种类在每单位时间内反应碰撞的次数要少得多，这将会浪费大量的计算机时间。从现代计算机角度，欲应用分子动力学研究非平衡化学反应只有两种做法：一是建立一个模拟三体碰撞的微观模型；二是寻求合适的二级反应方案，使各变量之间的时间标度相差尽可能地小。这两种方案已分别由普利高津领导的两个研究中心的学者提出来了。前者对布鲁塞尔器作了研究；后者提出了如下新的化学反应模型： $U+W \rightarrow W+V+feed$ ， $V+V \rightleftharpoons W$ ； $V \rightarrow$ 引出。该模型的特点：一是只有二体碰撞；二是没有不同的时间标度，如在一定参量下 $U$ 、 $W$ 、 $V$ 具有相同的振荡周期(如500秒)；三是只有3种种类参与反应。据作者所知，该模型是迄今产生化学钟的最简单的模型，适于分子动力学模拟。他们已经对此模型分别从确定论方程求解、分子动力学模拟、主方程求解以及考虑有色噪声的朗之万方程的随机模拟，并都取得了满意的结果(在周期、关联函数及功率谱等方面)。这再次表明，非平衡化学反应的宏观结构可从分子动力学中产生，即从微观层次上形成，而它无需任何宏观假设。

总之，通过分子动力学的计算机数值实验

研究, 我们可清楚看到, 大量的微观分子通过碰撞产生了关联效应. 而平衡态意味着要衰减掉关联效应, 正是这种衰减保证了“分子混沌”持久性的时间箭头的出现. 由此得出一个相当令人意外的结论: 从微观层次上甚至在平衡态时也确实存在着时间箭头, 换言之, 时间箭头是相应于甚至在平衡态时也存在着的一种普遍现象. 系统的非平衡条件只不过将这个时间箭头“放大”, 从而将系统从微观层次进一步推进到宏观水平. 于是形成了自组织——非平衡态宏观结构. 上述所描述的过程也为信息从二体系统(碰撞的粒子)传递到介质提供了一种很好的解释. 显然, 将上述经典力学中的研究推广到量子力学中去, 是十分令人感兴趣的事情.

## 二、非平衡统计力学的动力学基础<sup>[1, 8~13]</sup>

从上述自然引出一个问题: 什么类型的动力学系统允许存在自组织? 让我们转到普利高津学派在量子力学中非平衡态研究的最新进展<sup>[8~10]</sup>. 他们最近发展了子动力学理论, 提出关联动力学新理论, 同时应用计算机数值模拟, 从理论和数值两方面十分一致地研究了超过范霍夫(Van Hove)极限情形和庞加莱(Poincaré)大系统<sup>[9, 11]</sup>, 取得了卓有成效的成果. 范霍夫教授对非平衡态物理作出过重要贡献<sup>[12]</sup>, 特别是用动力学变量严格导出了泡利方程. 沿着他开拓的道路, 非平衡物理得到了蓬勃发展. 下面我们先简要总结一下他的主要思想和成果.

考虑由相互作用(经典的或量子的)粒子或与辐射相互作用的原子所组成的系统, 其哈密顿算符为

$$H = H_0 + \lambda V, \quad (1)$$

$H_0$ 为自由哈密顿算符,  $V$ 为相互作用量,  $\lambda$ 为耦合常数. 其相应的分布函数的刘维尔算符为

$$L_H = L_0 + \lambda L_V. \quad (2)$$

由于耗散效应导致特征值问题的求解方法与刘维尔方程的发散有关, 因此必须寻求特殊的处理方法才能导出关于分布函数的时间演化的信

息. 范霍夫的思想是: 对刘维尔方程迭代解的 $\lambda^{2t}$ 的所有幂次项求和, 从而得到按指数趋向平衡的结果. 要保持 $\lambda^{2t}$ 量级的贡献就得考虑耦合 $\lambda \rightarrow 0$ 和长时间 $t \rightarrow \infty$ , 使得 $\lambda^{2t}$ 项具有一个有限值, 这样便得到主方程, 且对“关联真空” $\rho_0$ 为封闭方程. 更精确地说, 在量子的情形下得到泡利方程, 而在经典的情形下得到福克-普朗克方程. 易将此法推广到稀薄气体, 并导出与玻耳兹曼方程相对应的主方程.

重要的问题是: 倘若超出 $\lambda^{2t}$ 近似, 那将出现什么情况呢? 普利高津学派正是从这里突破的. 他们不仅要保留 $\lambda^{2t}$ 的贡献, 而且要把具有任意 $n$ 的 $\lambda^n (\lambda^{2t})^n$ 的贡献也计及. 这时情形大不一样, 因为要考虑 $\lambda$ 为有限值, 且不限于 $t \rightarrow \infty$ 和 $\lambda \rightarrow 0$ 的渐近极限情形. 早先的工作证明: 这就得大大修改主方程, 得到所谓“形式的”非马尔科夫主方程. 该方程在奥尔德(Alder)和温赖特(Wainright)用于研究布朗粒子后引起了人们的重视<sup>[13]</sup>. 他们得到对于松弛时间长得多的情形速度关联并非按指数衰减, 而是按 $1/t^d$ 形式的“长尾”衰减( $d$ 为系统的几何维数). 他们和以后的文章认为: 除了玻耳兹曼机制外, 还有另一个“流体力学的”机制决定速度关联的衰减. 由于布朗粒子在介质中产生扰动, 它犹如波一样地传播、反射及返回作用在粒子上, 因此, 速度关联函数是两种不同过程的叠加结果: 玻耳兹曼机制(涉及布朗粒子及其邻近粒子的碰撞)和流体力学机制(相应于受激的波传播和反作用于粒子). 这两种机制显然都是非马尔科夫的, 因为在波反作用于粒子之前经过了有限的时间.

我们现在来评述普利高津学派的一些最新发展. 先讨论非平衡统计力学的动力学基础, 然后指出包含耦合常数 $\lambda$ 和非马尔科夫过程的一种微扰方法(此法是对范霍夫方法的自然推广), 最后介绍应用例子. 鉴于数学上的复杂性, 这里多限于定性讨论.

### 1. 动力学的基本事件: 共振

如何来表征非平衡动力学系统的类型, 这

是我们经常提出的一个问题。这里最感兴趣的是庞加莱的开拓性工作。他早已确认,从三体出发的大多数动力学系统都是不可积的,而且这种不可积是由共振引起的,因为共振意味着系统的自由度之间存在强的耦合,使得动力学系统不能分解为相应于非相互作用的自由度的独立运动。共振表明频率都是可通约的,不存在不等于零的  $k_n$  整数集使得  $\sum k_i \omega_i = 0$ 。可以预期在相空间内的共振是“稀少的”,因为它们相应于实数域中的有理数分布。若它们到处是“稠密的”,则属于著名的 KAM 理论研究的情形。

普利高津学派将研究推进到了庞加莱大系统情形,即在该系统内存在共振的连续谱。已发现,对于庞加莱大系统共振不再限于有理数点,而是出现在相空间内的“几乎所有的”点。这样问题就回到现代动力学理论所描述的情形,该理论所引入的碰撞算符对应于整个共振的积分,且精确地表示了共振连续谱的存在。在几乎所有的现代物理学领域都遇到了庞加莱大系统,例如涉及“碰撞”的各种系统、粒子与场相互作用的系统、两个场相互作用的系统和量子跃迁等等。因此,研究庞加莱大系统具有典型的意义。普利高津学派的最新结果将表明:只有不稳定的庞加莱大系统(经典的和量子的系统)才允许存在自组织。

## 2. 子动力学理论的发展: 关联动力学

普利高津学派最近发展了建立在子动力学基础上的关联动力学,并在研究庞加莱大系统中取得了重大进展。他们所研究的哈密顿和刘维尔方程仍由(1)、(2)式所描述。对于量子情形  $L_H$  为  $H$  的对易子,对于经典情形  $L_H$  为相应的李导数。这里  $L_H$  是作用在  $\rho_0$  上的“超算符”。假设无扰动时刘维尔算符  $L_0$  的谱分解由一套特征值  $L_\nu$  及特征投影超算符  $P^{(\nu)}$  给出,即有

$$L_0 = \sum_\nu L_\nu P^{(\nu)} \quad (3)$$

投影算符  $P^{(\nu)}$  满足下列关系:

$$P L_0 = L_0 P \quad (\text{对易性}), \quad (3a)$$

$$\sum_\nu P^{(\nu)} = 1 \quad (\text{完备性}), \quad (3b)$$

$$P^{(\nu)} P^{(\nu')} = P \delta_{\nu\nu'} \quad (\text{正交性}), \quad (3c)$$

$$P^{\dagger} = P \quad (\text{厄米性}). \quad (3d)$$

现在关心的是对于完全刘维尔算符  $L_H$  是否存在类似的厄米投影算符  $P^{(\nu)}$  集。已证明,倘若要求式(3a~d)成立且  $\lambda$  有解析条件,则庞加莱定理告诉我们不能构造这样的谱投影。这样在构造对角线的哈密顿的酉变换时同样遇到了发散问题,因此在子动力学中首要问题是如何将无扰动系统下求解特征值问题的方法加以广义化。为此,他们将分布函数或密度矩阵  $\rho$  用一个完全集表示:

$$\rho = \sum_\nu \Pi \rho^{(\nu)}, \quad (4)$$

每一个  $\Pi \rho^{(\nu)}$  都随时间独立地演化。再将此式与

$$\rho = \sum_\nu P \rho^{(\nu)} \quad (5)$$

比较,此处  $P^{(\nu)}$  是无扰动时刘维尔的谱投影。(5)式为我们提供了描述动力学演化的“语言”,它相应于出现在无扰动的哈密顿  $H_0$  的变量。谱投影  $P^{(\nu)}$  与  $L_H$  不对易,  $P^{(\nu)} \rho$  并不满足分离的运动方程,  $P^{(\nu)} \rho$  称为“关联态”。随着时间推移,它演化到另一个关联态  $P^{(\nu')} \rho$ 。广义的谱投影算符  $\Pi^{(\nu)}$  在该演化中发挥着本质的作用,因为通过计算  $P^{(\nu')} \Pi^{(\nu)} P^{(\nu)}$  能为我们提供描述“信息”从  $(\nu')$  到  $(\nu)$  的传送。在这种方式下,可以精确阐明“非线性因果关系”的含义:由“原因”  $P^{(\nu)} \rho(0)$  激发起其他自由度  $(\nu)$ ,即产生了“效应”,该效应又反作用在“原因”上。这极类似于在宏观系统中导致的催化过程:  $X$  成分产生  $Y$ ,  $Y$  又与  $X$  的产生相关。关联动力学处理的新颖性就是每个分量  $\Pi \rho^{(\nu)}$  并非几率,只有它们的和才表示几率,因此也只有它们的和才满足酉演化和测度守恒。  $\Pi^{(\nu)}$  满足的方程组除了厄米性条件外,极类似于  $P^{(\nu)}$  满足的方程组,即有

$$\overset{(\nu)}{\Pi} L_H = L_H \overset{(\nu)}{\Pi} \quad (\text{对易性}), \quad (5a)$$

$$\sum \overset{(\nu)}{\Pi} = 1 \quad (\text{完备性}), \quad (5b)$$

$$\overset{(\nu)}{\Pi} \overset{(\nu')}{\Pi} = \overset{(\nu)}{\Pi} \delta_{\nu\nu'} \quad (\text{正交性}). \quad (5c)$$

那末, 如何构造 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ 呢? 因为所处理的是一个连续谱, 所以需要一种解析开拓的方法. 在厄米投影算符的构造中利用标准方法, 由解析开拓类型决定时间方向: 若解析开拓到下半平面 $(-i\epsilon)$ , 则对应 $t > 0$ ; 反之到上半平面 $(+i\epsilon)$ , 则对应于 $t < 0$ . 最简单的例子是散射理论, 平面波通过散射被变换到球面波. 为将时间反演( $t \rightarrow -t$ ), 就得将解析开拓从 $-i\epsilon$ 变到 $+i\epsilon$ , 而物理过程仍然保持不变, 但以反序作了描述.

在通常的量子理论和经典理论的框架内, 时间只是一个参数, 时间的符号不影响物理描述, 但它对可能的状态的准备有主要的限制. 在未来我们只观测到从平面波到球面波的散射, 而没有反散射.

在散射过程中既存在入射粒子动量是随机性的碰撞, 也产生出射粒子与散射中心之间的关联. 时序是: 碰撞 $\rightarrow$ 关联. 在反散射下就会因散射导致关联破坏及反向随机性. 重复散射导致在未来出现平衡, 而重复反散射就会导致在过去出现平衡. 于是我们就有一个“自然的”时序, 从而很自然地得出解析开拓的新规则: 关联度增加(称为“关联产生”)将与我们的未来有关, 且对应于下半平面 $(-i\epsilon)$ 的解析开拓; 反之, 关联度减少(称为“关联破坏”)则是过去的过程, 且对应于上半平面 $(+i\epsilon)$ 的解析开拓. 这种解析开拓导致了 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ 和 $\overset{(\nu)}{P}$ 有本质的不同. 不管 $\overset{(\nu)}{P}$ 的厄米条件, 我们得到星-酉条件:

$$\overset{(\nu)}{\Pi} = \overset{(\nu)}{\Pi}^* \equiv (\overset{(\nu)}{\Pi}')^{\dagger}. \quad (6)$$

这里 $\overset{(\nu)}{\Pi}'$ 中带撇号定义为在关联产生与关联破坏之间的解析开拓运算符 $\pm i\epsilon$ 交换.

利用上述解析开拓的新规则, 普利高津等人得到了子动力学的显式表达. 由于 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ 与 $L_H$ 的对易性和正交性,  $L_H$ 所产生的动力学演化被分

解为许多独立的“子动力学”. 注意投影算符 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ 满足所谓“星-厄米性”更一般的对称条件.

### 3. 时间演化

应用上述子动力学理论可以研究系统的时间演化. 当只有 $\lambda^2 t$ 项时, 子动力学描述退化为范霍夫的极限情形, 且得到刘维尔-冯诺曼方程的初值问题的形式解, 它表明了非马尔科夫的记忆效应. 现在通过子动力学, 这样的非马尔科夫效应就能显式地算出. 这些非马尔科夫过程, 如上所述, 对应于“非线性因果关系”类型. 初始条件中包含的信息被传送到系统的各自由度上去, 且反作用于初始条件所激发起来的自由度.

首先我们可以导出在每个子空间 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ 中的分量—— $\overset{(\nu)}{P}$ 的一个封闭的演化方程:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \overset{(\nu)}{P} \rho(t) = \overset{(\nu)}{P} L_H (\overset{(\nu)}{P} + \overset{(\nu)}{Q}) \rho(t) = \overset{(\nu)}{\theta} \overset{(\nu)}{P} \rho(t), \quad (7)$$

这里  $\overset{(\nu)}{\rho}(t) \equiv \overset{(\nu)}{\Pi} \rho(t)$ ,  $(8)$

$$\overset{(\nu)}{\theta} \equiv L_H \overset{(\nu)}{P} + \lambda \overset{(\nu)}{P} L_H \overset{(\nu)}{C} \overset{(\nu)}{P}, \quad (9)$$

$\overset{(\nu)}{\theta}$ 在 $\lambda$ 下的最低级近似正好就是碰撞算符. 因此, 在关联真空 $\overset{(0)}{\rho}$ 所产生的 $\overset{(\nu)}{\Pi}$ -子空间内演化方程退化为著名的泡利方程. 对于给定的初始条件, 可以求得时间演化解. 它包含两部分贡献: 第一部分是平凡的贡献, 来自初始条件的信息通过子动力学 $\overset{(0)}{\Pi}$ 传播; 第二部分对应于各种自由度之间进行的信息交换(既有传播又有返回).

现在可看到, 普利高津学派新发展的子动力学理论为我们提供了广义的动力学理论. 子动力学 $\overset{(\nu)}{\Pi} (\nu \neq 0)$ 的其他自由度的“反流”效应恰好导致了以往所述的非马尔科夫效应. 这表明, 子动力学理论具有比传统的动力学理论更广泛的意义, 能够战胜以往克服不了的困难, 成功地解释了许多非线性因果关系产生的复杂性现象(效应).

各种子动力学告诉我们它们各自的历史,对于给定的初值条件集,系统将通过它们的历史进行演化.一般地说,初值条件将激起所有的子动力学.不过,对于给定的有限精度,我们只能观察到一些类型的子动力学.子动力学最重要的优点是,它能从实验和理论两方面以自治(一致)的方式给出极限.这些优点将在各种应用中进一步显示出来.

### 三、理论的应用范例及其意义

现在我们以范例阐明理论的应用及其意义.

#### 1. 辐射衰减

受激振子与经典场相互作用,这时系统的哈密顿算符可写成

$$H = \omega J + \sum_k \omega_k J_k + \text{相互作用项}.$$

经典物理预言,该谐振子的作用将按指数衰减,即  $J = J_0 e^{-\gamma_{\text{th}} t}$ , 其中  $\gamma_{\text{th}}$  为理论上的衰减率.我们特别感兴趣的是能量如何从振子传送给场的解激过程.从初值条件

$$\rho(0) = \delta(J - J_0) \prod_k \delta(J_k)$$

出发,将上述问题应用计算机数值模拟,可看到该系统的行为是非常复杂的.与范霍夫的极限一样,也得到了谐振子的指数衰减.但是,在谐振子激发场时考虑进  $\lambda^2(\lambda^2 t)^n$  等等高价项后,则出现一个补充机制,场又反作用在粒子上.普利高津学派从子动力学理论分析和数值模拟两方面都十分一致地揭示了存在3个阶段的衰减过程:首先是周期等于频率倒数的短时间阶段(对于玻尔原子量级为  $10^{-14}$  秒),在此期间衰减率  $\gamma$  从零趋向理论值  $\gamma_{\text{th}}$ ; 第二阶段是一个长周期,基本上按指数衰减;最后阶段是一个“长尾”演化,按  $1/t^d$  衰减.我们所关心的是根据子动力学解释头、尾两个阶段的意义.尽管从不同的初始条件出发,怎么做也无法阻止衰减率(常数)达到它的理论值,这个不可能性正是典型的不可逆过程.第一阶段相应于系统的“预备”阶段,是为了“允许”粒子将

能量传递给场的自由度而作准备.由于这个复杂的自组织过程,在振子周围产生一片云,一部分云被辐射掉,其余的云仍然在衰减过程中被定域在那里,粒子仍受到该云“信号”的扰动.从某种意义上可将振子与布朗粒子相比拟,所不同的是它在介质中运动,它能被自身“产生”.最后阶段的“长尾”是由于粒子与场相互作用,自身被感应,就好像粒子被“复活”一样,这才使粒子保持其能量,且比其指数衰减所预言的寿命要长.相关联地,耗散过程也不过是一个严格被定域的过程,它涉及到与环境的相互作用.

子动力学也被应用于研究由受激振子衰减产生的波.推广了范霍夫的方法得到了  $e^{-\lambda^2(t-\gamma)}$  的最终表达式,于是发现,因果关系是由于发生在不同子动力学中的时间演化叠加的结果.

我们想指出,普利高津学派上述关于受激振子衰减的结果非常类似于量子力学中对不稳定衰减的预言,那里也存在经典情形的3个阶段.但是彼此的解释大不相同,在薛定谔方程的框架下不能说什么“自组织”,而是由波包来识别不稳定粒子,按它们的衰减率来区别“年轻的”和“年老的”粒子.普利高津的解释是,各种衰减阶段相应于粒子与介质的相互作用.总的系统(粒子加介质)表现出不同的演化阶段.这就回答了前面的问题,不稳定的动力学系统可以产生自组织现象.

作者认为,子动力学理论应用于不稳定的动力学系统,诸如庞加莱大系统,包括量子力学,是十分有意义的和令人感兴趣的.因为对这样的系统,量子理论的双重性(薛定谔方程加测度理论)可以被避免.不稳定动力学系统的量子理论可以克服传统形式中遇到的某些主要困难.看来,普利高津学派的研究路线正在为量子力学开辟一条新途径.

#### 2. 关联流

关联流是子动力学理论中一个重要概念.因为粒子之间的碰撞不仅有两个粒子引起的

“二体关联”，也有3个粒子的“三体关联”，以此类推，如图2所示。为此，定义动力学函数

$$\mathcal{H} = \int \rho^2 d\Gamma.$$

这里为了简化，以 $\rho^2$ 取代通常的 $\rho \log \rho$ 。我们可将 $\mathcal{H}$ 分解为来自速度分布的贡献 $\mathcal{H}_0$ 、二体关联的贡献 $\mathcal{H}_2$ 、三体关联的贡献 $\mathcal{H}_3$ ，等等。图3示出动力学 $\mathcal{H}$ 函数的演化特性。图

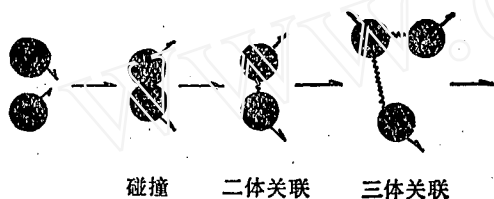


图2 关联流示意图

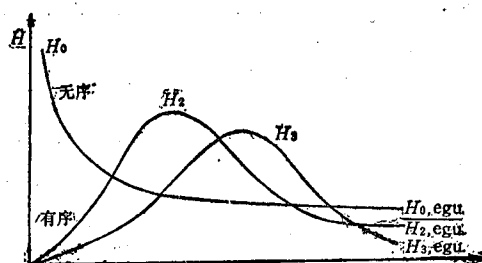


图3 动力学 $\mathcal{H}$ 函数的演化特性

3在计算机模拟中只能观察到 $\mathcal{H}_0$ 和 $\mathcal{H}_2$ ，其余为示意图。由于共振缘故，任何高阶关联 $\mathcal{H}_n$ 具有量级为1的矩，这些高阶关联通过其最大值后趋向平衡值，平衡值大小正比于耦合常数 $\lambda$ 的幂次。在多体系统中高阶关联极难计算，因为并不存在与高阶关联相对应的可观测量。图3中 $\mathcal{H}$ 对应于麦克斯韦速度分布，这正是著名的玻耳兹曼H定理，该过程导致无序。但过程并不停留在此。从动力学观点， $\mathcal{H}$ 应为一个常数，因此趋向无序大多由 $\mathcal{H}_2$ 、 $\mathcal{H}_3$ 等来补偿。 $\mathcal{H}_2$ 的增加相应于有序过程，经一定时间后 $\mathcal{H}_2$ 减少，相应于二体关联的平衡值的残余。最大值的存在相应于如下事实：非平衡关联比平衡关联的过程更长。非平衡关联对 $\mathcal{H}$ 的贡献为1量级，而平衡关联的贡献只有 $\lambda^2$ 量级。类似地可得 $\mathcal{H}_3$ 、 $\mathcal{H}_4$ ……，阶数越高，对平衡态的贡献越来越小。 $\mathcal{H}$ 的演化显然是有序与无

序之间复杂过程竞争的结果。可证有不等式： $\mathcal{H} - \mathcal{H}_{eq} \geq 0$ ，这里 $\mathcal{H}_{eq}$ 为平衡态的 $\mathcal{H}$ 函数（定义为动力学 $\mathcal{H}$ 函数的渐近时间极限）。 $\mathcal{H}$ 函数的演化恰似飓风浪，当它飞越海岸线时留下一些残余，继续飞过越来越多的岛屿，风浪的残余越来越小，最后对动力学结构不再有什么贡献。反过来，从热力学层次上看，它似乎对应于平衡态，其实不然，飓风浪仍在行进，只不过变得越来越不可观测罢了。在动力学世界里无序和有序过程之间会存在一种精确的平衡，由 $\mathcal{H}_0$ 描述的初始无序过程会感应起逐级有序化的一系列波过程，但是由于信息损失掉，熵增加了，从而无序占优势，这是真正热力学第二定律。与巴克变换的差别在于被损失的信息的类型，巴克变换来自只看到的有限窗口，而这里则来自缺乏对高阶关联的控制。此外，熵的含义就是存在信息从可观测到不可观测的渗透。从某种意义上说，可观测的关联趋向平衡态是靠将信息传递到高阶关联，那就是为何它们变得不可观测。这里存在已知的和未知的，以及可控的和不可控的之间的关系，这将导致信息破坏，因而，熵增加。

### 3. 波函数的破裂

保尔·戴维斯(Paul Davies)在最近《新的物理学》一书的导言中指出<sup>[14]</sup>：“量子力学中的测度问题是现代物理学中最令人感兴趣的问题，因为它处于交界面上，从某种意义上是处于物质与精神之间的交界面上。”这里我们将讨论如何认识规律与事件的双重性关系。应用于动力学研究波函数的破裂为我们提供了这方面的新认识。在老的玻尔量子理论中存在由量子化规则给出的量子层次，而在正规的量子理论中则有对应于规律的薛定谔方程。于是问题是：什么是这种情形下发生事件的原因呢？后者的正规的解释为事件来自测量。这样，事件变成人们与自然相干的结果。正因为如此，许多人一直对量子理论表示不满意，尽管它取得了很大的成功。在阿拉斯戴俄所写的《量子物理学：幻觉还是现实？》一书中对此作了漂亮的解释<sup>[15]</sup>。

问题是：究竟谁测量？普利高津学派已证明，这个问题在庞加莱大系统的量子力学下被消除了。我们举一个弗里德利希模型的例子，它对应于只有两个过程的两层原子。考虑其两种情形：一种是通常模型，一个处于激发态的原子被嵌在连续场的频率中；另一种是考虑一种束缚态，它具有负能量，在连续谱下面它不会再发生共振。现在来考察当给粒子初值条件后，熵或信息的行为如何。 $\mathcal{H}$  函数为

$$\mathcal{H} = \text{tr}(\rho^2) = \rho_{11} + \sum_k (|\rho_{1k}|^2 + |\rho_{k1}|^2) + \sum_k |\rho_{kk}|^2,$$

其中  $\mathcal{H}_0$  包含关于粒子  $\rho_{11}$  的信息， $\mathcal{H}_1$  对应于粒子与场  $\rho_{1k}$  及  $\rho_{k1}$  的关联， $\mathcal{H}_2$  是关于场  $\rho_{kk}$  的信息。我们先看束缚态，计算机最新模拟给出 3 个贡献：一是束缚态的贡献，二是粒子与场的贡献，三是场产生的贡献。3 个贡献中每一个都在涨落，但是每一个涨落从本质上是不变的，因此没有信息传递。

然而，一旦考虑不稳定粒子就出现了引人入胜的变化(图 4)。从本质上场收集了被原子衰减破坏掉的所有信息。倘若作多层次相互作用的研究，则有很好的图像。以此方式从二体关联到越来越高阶的关联，一个传递一个，其总和仍然恒定，不过这是一种理想化的情形。若我们考虑有无数态的福克空间，则在这点上关联既不能观测又不能计算。这样我们能干什么呢？要是将系统截断，则会抑制掉这些自由度及信息，从而不再被传播。现在能做的就是应用子动力学理论来计算这种情况，因为子动力学能考虑到我们只观测到一些关联。当将此考虑进熵时，我们看到  $\mathcal{H}$  量减少了。当继续引进时，相应于一个完全动力学系统的波函数消亡了，即系统中正在发生的力学过程导致了波函数的破裂。以这种方式，量子理论中的事件被复活了。波函数的破裂是由于高阶关联的结果，只有远程和大时间才出现这种高阶关联。

由此可见，普利高津学派巧妙地引进了高度不稳定的庞加莱大系统，从而给出了量子力

学的统一描述的形式，并赋以事件内在的意义。而庞加莱大系统就包含在每次测量中。波函数的破裂从某种意义上说是热力学第二定律的结果。

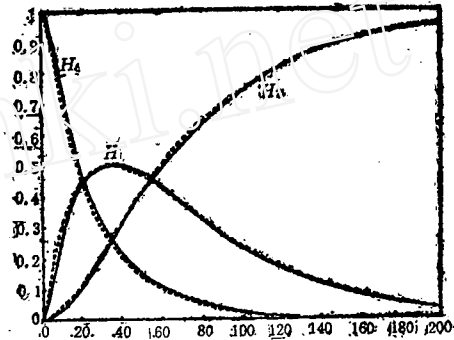


图 4 对于不可积的弗里德利希模型  $\mathcal{H}$  函数的演化 实线为数值模拟的结果，虚线为子动力学理论结果。现在共振使得信息从低阶关联传递到高阶关联。

#### 四、时间与永恒之间

普利高津的一本最新的英文版著作《时间与永恒之间》(Between Time and Eternity)不久将出版。该书是他的《非平衡系统的自组织》、《从存在到演化》、《从混沌到有序》、《探索复杂性》等一系列专著之后的又一部杰作。书名新颖，扣人心弦，提出了迄今科学家和哲学家共同感兴趣的一个重大课题。书中系统地总结了近年来普利高津学派在非平衡态领域的新发现、新思想和新概念，并以丰富的科学成果阐明了 3 个问题：不稳定性、规律与事件之间的双重性以及有序与无序之间的辩证关系。

这个过去、现在和将来之间有着根本不同层次和含义的“时间”，现在仍然是物理学、生物学以及化学等领域的中心研究课题。普利高津学派近年来从分子动力学、子动力学及超级计算机数值模拟等方面，从经典力学到量子力学，对非平衡态自组织的微观机制进行了卓有成效的研究，进一步阐明了时间之矢的不可逆性意义和建设性的作用，开拓了我们的眼界，提高了我们的科学观和自然观。正如普利高津多次指出的，“我们的自然观正在向着多重的、暂时的和复杂的方向发生根本性的变化。”这个论



述今天变得更加有说服力。

非平衡态研究的最新成果,涉及到自然界中许多本质的东西.如何加以吸收提升,形成崭新的概念,从而能更好地理解包括我们人类自身在内的自然界,是一个并行的重要课题,普利高津学派对此也作出了重大贡献.

现在我们评述一下对规律与事件的双重性的新认识.规律和事件是为描述自然界而引述的两个概念,它们之间的矛盾冲突一直贯穿着近代科学发展史.事件意味着随机性、不连续性,且用不可逆演化的概率来描述.规律则是确定性的因果关系,是经典力学的理性概念.过去的科学史曾交替强调其中一种概念而忽视另一种概念.结果各有成功,又各有困难.今天看来这两个概念,相辅相成,不能偏废,应当统一地辩证地认识它们的双重性及其意义.有人试图将规律与事件叠加起来,这种做法现已证明是一种不能令人满意的折衷方案.那末应如何正确认识它们呢?本文上面论述的非平衡态的最新进展,以及(限于篇幅没有论及的)近年来混沌动力学的新发展(表明在确定论的方程下产生了内在随机性),使我们对规律与事件的双重性的认识,更上了一层楼.普利高津学派另辟蹊径,为我们提供了一种自然的合理的解释和统一的认识.如上所述,共振导致碰撞的一种动力学解释,是事件最简单的例子.每当动力学的规律都是庞加莱大系统的规律时,事件总要发生.庞加莱大系统将规律与事件两者有机地结合了起来,克服了规律与事件之间的对立状态.因为一旦将事件(如碰撞)引入,则将产生涉及粒子流增长的关联流,关联流限制了动力学规律的正确性,所以必须转向采用统计物理及吉布斯系综理论描述事件,即用概率分布函数来描述.既然碰撞产生关联,很自然就要研究关联动力学.这样就解开了规律与事件之谜,解决了动力学与热力学之间的矛盾.随时间的发展,关联动力学使得在初值条件时的信息在越来越高阶的关联中间发生相干效应.庞加莱大系统的描述确立了信息的传播

与集中之间的定量关系.普利高津学派的子动力学理论的重要性在于,动力学演化可分解为各自独立的各种子动力学的过程,从而能对各种过程进行分类(如分为对可观测测量有贡献的和无贡献的).越来越多的事实再次告诉我们,自然界确实是一个“多演员”的世界,我们既是“观众”,又是“演员”.迄今我们研究的动力学演化也只是有限的窗口,我们的知识离所要穷尽的世界还差得很远,我们现在所认识的只是一种“有限的理性科学”.非平衡态研究的发展加深了我们的认识,同时也必将推动我们向新的科学高峰迈进.

“机不可失,时不再来”,时间意味着创造,意味着新事物、新发现,包含多层次的科学意义,从这个意义上时间具有永恒的魅力.实践,认识,再实践,再认识,循环往复,以至无穷,这是我们的一条唯物认识论的路线.普利高津学派也为我们提供了一条殊途同归的科学路线.

作者衷心感谢在普利高津中心访问期间I.普利高津教授及L. E.雷克教授所给予的支持和十分有益的学术讨论,并为撰写本文提供了有关专著手稿及许多论文的预印本.同时也对富雄·佩特罗斯基博士和长谷川博士提供的研究论文表示谢意.

- [1] Prigogine I., *Naturwissenschaften*, **76**(1989)1
- [2] 尼科里斯,普利高津,《探索复杂性》,四川教育出版社(1986)
- [3] 方锦清,高良俊,《自然杂志》, **10**(1987)907
- [4] Kestemont E., Mareschal M., *J. Stat. Phys.*, **48**(1987)1187; *Phys. Rev.*, **A30**(1984)1158
- [5] Mareschal M et al., *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987)875; Garcia A. et al., *Phys. Rev.*, **A36**(1987)4348
- [6] Nicolis G., Prigogine I., *Self-Organization in Non-Equilibrium Systems*, John Wiley(1977); Nicolis G. ed., *Aspect of Chemical Evolution*, John Wiley(1984)
- [7] Bird G. A., *Molecular Gas Dynamics*, Oxford University Press (1976)
- [8] Prigogine I., *Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley(1962); Balescu R., *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, John Wiley (1975)
- [9] Petrosky T., Prigogine I., *Physica*, **147A**(1988)439; Prigogine I., Petrosky T., *Physica*, **147A**(1988)461
- [10] Prigogine I., *The Microscopic Meaning of Irreversible Processes*, Leipzig Publication (1989)
- [11] Poincaré H., *Methods Nouvelles de la Mécanique*, Vol. 1, Dover (1957)
- [12] Van Hove, *Physica*, **21**(1955)517; **23**(1957)441
- [13] Alder B., Wainright T., *Phys. Rev.*, **A1**(1970)18; Alder B. et al., *J. Chem. Phys.*, **53**(1970)3813
- [14] Davies P. C. W. ed., *The New Physics*, Cambridge University (1989)
- [15] Alastair Rae, *Quantum Physics: Illusion or Reality?* Cambridge University (1986)