J. Plasma Fusion Res. Vol.95, No.8 (2019) 387‐390

研究最前線

波動場のエントロピー

Entropy of Waves

河 森 栄 一 郎
KAWAMORI Eiichirou
台湾國立成功大學

（原稿受付：2019年６月13日）

古典波動場のエントロピーについての新提案を紹介する．提案されているエントロピーは，ギブスエントロピーやシャノンエントロピーの自然な拡張になっており，対象とする波動場（乱流場からスーパーコンティニュウムまで）の位相乱雑度を“定量的に”測ることが可能である．量子系のコヒーレンスの指標として用いられているフォンノイマンエントロピーの古典力学版ともいえる．このエントロピーを用いて波動場の非平衡自由エネルギーが定義できるようになるため，情報熱力学との融合など様々な応用が期待できる．一例として，波動場の自発的対称性の破れの同定にこのエントロピーを利用することを紹介する．

Keywords:
entropy, classical wave, coherence, turbulence, non-equilibrium free energy

１．はじめにー概観ー

エントロピーという物理量は，やや人工的で，様々な意味に用いられるため，一見難解な物理量である．熱力学的な系の発展の方向を示したり，量子系のデコヒーレンスを定量化したり，情報の損失もしくは複雑性を定量化したり，と様々な物理現象の本質に関連づけられる物理量である．歴史的には，クラウジウスによって断熱下における熱力学的可逆，不可逆過程の判別のために導入された示量性の状態量である．熱力学的エントロピー S の定義は，準静的な過程で定義される次の式で与えられる．

$$S \equiv \int \frac{d'Q}{T}. \tag{1}$$

d' は不完全微分で，経路に依存する変化量を表す．積分は，基準となる状態から目的の状態まで行う．熱力学の第二法則，$\mathrm{d}S \geq 0$（断熱系）は，断熱系においてこのエントロピーという物理量が増大する方向に熱力学発展は起こる，ということを示している．熱力学で導入されたエントロピーの微視的描像による基礎づけ（あるいは，その逆ともいえる．）はボルツマンにより行われ，次式で定義されるエントロピーS_Bが熱力学による定義を包含し，また整合することを主張する．

$$S_\mathrm{B} \equiv k_\mathrm{B} \ln W. \tag{2}$$

ここで，k_B およびW は，各々ボルツマン定数，微視的状態の数である．微視的状態が各々重み p_i の確率で実現される場合，（２）式はそれらの平均値で表されて，

$$S_\mathrm{Gibbs} \equiv k_\mathrm{B} \sum\nolimits_\mathrm{i} p_\mathrm{i} \ln\left(\frac{1}{p_\mathrm{i}}\right) = -k_\mathrm{B} \sum\nolimits_\mathrm{i} p_\mathrm{i} \ln p_\mathrm{i}. \tag{3}$$

のようになる．これは　ギブスエントロピーと呼ばれ，情報理論におけるシャノンエントロピーと等価である．ここに，エントロピーの情報としての意味が付加されることになる．ちなみにプラズマ物理学でおなじみの（非平衡）エントロピーの表式 $S_\mathrm{f} \equiv -\int f(v) \ln[f(v)] \mathrm{d}v$ はギブスエントロピーである．

量子的な系の場合，f としてブラケット表示の波動関数 $|\Psi\rangle$ から定義した密度行列（演算子）$\rho \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi|$ を用いることで S_Neumann を定義できる．これはフォンノイマンエントロピーとよばれ，量子系のデコヒーレンスを表す物理量である．$|\Psi\rangle$ は波動関数であるから，S_Neumann はある意味（量子論的）波動場のエントロピーであるといえる．

古典的な波動場のエントロピーとしては，Hasselmann 等により与えられた，次の定義がある[1-3]．

$$S_\mathrm{Hasselmann} \equiv k_\mathrm{B} \int \ln[n(k)] \mathrm{d}k. \tag{4}$$

ここで，$n(k) = N(k(\omega)) d\omega/\mathrm{d}k$ は波のアクション密度で通常W/ω で定義される．W は波の全エネルギーで，プラズマ波動の場合，電場のエネルギーに加え誘電媒質としてのプラズマの音波（コヒーレント）エネルギー成分も含んでいる[4]．

$S_\mathrm{Hasselmann}$ は，非線形相互作用を含む波動方程式の無限階層方程式のクロージャーのために乱雑位相近似（Rondom phase approximation，RPA）を用いて導入され

Institute of Space and Plasma Sciences, National Cheng Kung University, Tainan 70101, Taiwan
author's e-mail: kawamori@pssc.ncku.edu.tw

る[1,2,5]．結果，波のアクション密度 $n(k)$ の時間発展方程式(wave kinetic equation)が導出される．また，$S_{\mathrm{Hasselmann}}$ は H 定理に従うことも示される．RPA においては，非線形相互作用の最低次では $a(k)$(:波の振幅)の位相は独立でランダムであることが仮定され，$\langle a(k)a^*(k')\rangle = n(k)\delta(k-k')$，$\langle a_1^* a_2^* a_3 a_4\rangle = n(k_1)n(k_2)[\delta(k_1-k_3)+\delta(k_2-k_4)]$ などの関係によって階層の無限連鎖が閉じられる[6,7]．よって，位相情報を完全に無視しているため位相コヒーレントな波動場には $S_{\mathrm{Hasselmann}}$ は適用できない．さらにその物理的な意味も不明瞭である．

プラズマ物理における波動を含め，位相の情報を保持する波動は情報そのものである．波動場のエントロピーを，位相から考えるのは自然である．本稿では，古典波動のエントロピーを位相から考え，新たな波動場のエントロピーを提案した研究[8]の紹介を中心にした考察を展開する．

2．波動場のエントロピーの従来定義と新提案

本稿（及び参考論文８）で考える系は，定常状態かつ，ある種の平衡状態で，系のサイズは無限大もしくは周期境界条件を適用できるものとする．波動場 $\Psi(t)$ を時間に関してフーリエ級数で展開する．

$$\Psi(t) = \textstyle\sum_{i=0}^{N_{\mathrm{mode}}} c_i \exp(-i\omega_i t). \tag{5}$$

ここで，c_i，ω_i，及び N_{mode} は各々，モード i のフーリエ振幅，角周波数及びモード数を表す．次式で定義される波の振幅の密度行列 ρ を導入する．その成分 ρ_{ij} は次式で定義される．

$$\rho_{ij} \equiv \langle c_j c_i^* \rangle = \langle |c_i||c_j| e^{i(\theta_j - \theta_i)} \rangle. \tag{6}$$

$\langle\ \rangle$ は期待値あるいはアンサンブル平均を表す．また，θ_i はモード i の位相である．ρ はエルミート行列であるので，常に固有値分解可能であり，すなわち対角化が可能である．対角成分は実数で，選択した基底におけるスペクトル密度を表し，ポピュレーションと呼ばれる．非対角成分は異なるモード間の位相の非乱雑度を表し，コヒーレンスとよばれる．有意な非対角成分がある状態を純粋状態，非対角成分がアンサンブル平均により零となる状態を混合状態と呼ぶ．

提案する波動場のエントロピーは ρ を用いて次式で定義される．

$$S_{\mathrm{waves}} \equiv -\mathrm{Tr}(\rho \ln \rho). \tag{7}$$

Tr は対角和を表す．式(７)は，ρ を波動関数の密度行列で置き換えれば，量子系のデコヒーレンスの測度であるフォン・ノイマンエントロピーである．固有値分解と規格化 $\rho = \sum_i \lambda_i |i\rangle\langle i|$，$\lambda_i \geq 0$，$\sum_i \lambda_i = 1$ を用いると式(７)は，以下のシンプルな形で計算することができる．ここで $\langle i|$ 及び $|i\rangle$ は，対角化後の基底ベクトルのブラケット表示．

$$S_{\mathrm{waves}} = -\textstyle\sum_i \lambda_i \ln \lambda_i. \tag{8}$$

λ_i を確率分布とみれば式(８)はギブスエントロピー，シャノンエントロピーと等価であるということがわかる．

S_{waves} はエントロピーに求められる以下の性質を具備している．

1．純粋状態でゼロ，混合状態で正値をとる．
2．完全な混合状態（$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_{\mathrm{Nmode}} = 1/N_{\mathrm{mode}}$）において最大値 $S_{\mathrm{waves}}^{\mathrm{Max}} = \ln(N_{\mathrm{mode}})$ をとる．
3．次式で表される加法性（additivity）をみたす．独立成分の直積量が変数の場合には系のエントロピーは各々の変数についてのエントロピーの和になる．

$$S_{\mathrm{waves}}(\rho_1 \otimes \rho_2) = S_{\mathrm{waves}}(\rho_1) + S_{\mathrm{waves}}(\rho_2). \tag{9}$$

これらの性質は一般的にエントロピーという物質量に求められるものである．

計測データから実際に S_{waves} を計算する手順は以下のようになる：

(i) 波の振幅の時系列データを時間に関してフーリエ変換する．
(ii) 式(６)を用いて密度行列 ρ を計算する．
(iii) $\rho/\mathrm{Tr}\rho \to \rho$ のように規格化する．
(iv) ρ を固有値分解し対角化する．λ_i も同時に求まる．
(v) 式(８)を用いて S_{waves} を計算する．

ここで注意したいことは，性質２からわかるように，S_{waves} の絶対値はフーリエ展開の解像度 N_{mode} に依存するということである（連続基底を用いればこの問題は解決する）．

3．検証

この章では提案する波動場のエントロピー S_{waves} を実際のデータに適用して，その妥当性を検証する．白色雑音と３波結合信号をテスト信号として用いた検証，実際の数値シミュレーションデータに適用した検証，については文献[8]を参照のこと．

本稿では次の２つのデータを人工的に生成し，検証用のデータとした．(I)乱雑位相乱流（Random phase turbulence），(II)コヒーレントスーパーコンティニュウム(Coherent Supercontinuum)．

図１に(I)と(II)に対するパワースペクトルを示す[(a), (b)]．どちらの場合も，周波数 $f=1$（規格化されている．）を中心にブロードなスペクトルがみられる．(I)では，このブロードな成分に位相を乱雑にするイベントをある頻度で与えている．そのため，４波結合を計測する tricoherence $|t|^2$ は f_1，f_2 の全領域に渡って小さい値である（**図１**(c)）．ここで，$|t|^2(f_1,f_2,f_3) = |T(f_1,f_2,-f_3)|^2$ は次式を用いて定義される．

$$|T(f_1,f_2,-f_3)| = \frac{E[X(f_1)X(f_2)X(-f_3)X^*(f_1+f_2-f_3)]}{\sqrt{P_{1,2,3}(f_1,f_2,-f_3)P(f_1+f_2-f_3)}},$$

E，X，及び P はアンサンブル平均，フーリエ振幅及び，$P_{1,2,3}(\omega_1,\omega_2,-\omega_3) = E[X(\omega_1)X(\omega_2)X(-\omega_3)X^*(\omega_1)X^*(\omega_2)X^*(-\omega_3)]$ で定義されるパワーを表す．この図では，４波結合の周波数整合条件 $f_1+f_2=f_3+f_4$ に対して $f_3=1.0$ とした $|t|^2$ を示している．図中，高い $|t|^2$ 値を示す十字状の線状の領域，$f_1=f_3\,(f_2=f_3)$ は，これらの値を上記の $|t|^2$ の定義式に代入してみればわかるように，相関の有無にかかわらず一

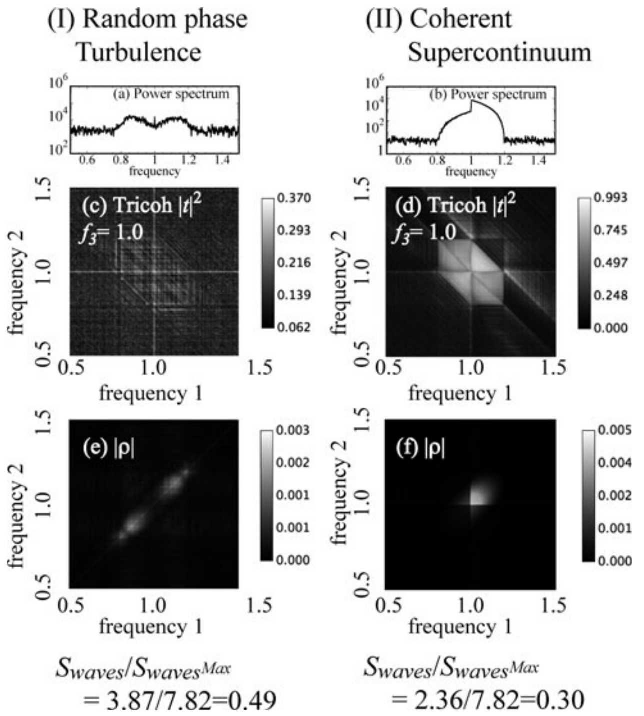

図１．（左列）乱雑位相な乱流状態及び，（右列）コヒーレントスーパーコンティニュウムにおける（a, b）パワースペクトル，（c, d）tricoherence $|t|^2$ 及び，（e, f）波の振幅の密度行列の絶対値 $|\rho|$.

定値１をとる周波数で，物理的な意味はない．

一方(Ⅱ)では，４波結合の周波数整合条件 $2f_1=f_3+f_4$ 及び，位相整合条件をみたすように非線形結合により $f=1$ を中心としたサイドバンド成分を生成している．そのため，$|t|^2$ には，$f_1=f_2=1$ を中心としてサイドバンド帯域と $f=1$ 成分間の有意な相関がみられる［**図１**（ｄ）］．

図１(e)と(f)は，(Ⅰ)と(Ⅱ)に対する波の振幅の密度行列 ρ の絶対値である（ρ は複素数）．(Ⅰ)では対角成分が支配的であり，各モードの位相がランダムになっていることが反映されている．(Ⅱ)ではサイドバンド帯域の非対角成分が大きな値を示し，位相情報が保持されていることがきちんと反映されている．

これらの ρ を式(７)に適用して得られた波のエントロピー $S_{\rm waves}/S_{\rm waves}^{\rm Max}$ はそれぞれ，(Ⅰ)0.49と(Ⅱ)0.30となり期待通りの結果が得られる．

４．波動場のエントロピーの物理的意味，従来定義との類似性と相違，自発的対称性の破れの測度としての物理量

ここではまず，波の振幅（プラズマの場合は波動電場）の密度行列 ρ の意味と，それから計算される $S_{\rm waves}$ が何故乱雑さを抽出することができるのかを考える．２節でも簡単に触れたが，ρ の対角成分は選択した基底でのパワースペクトル分布を表し，非対角成分はモード間のコヒーレンス，非線形性がある場合には結合をあらわしている．ρ はその定義からエルミート行列なので，任意のユニタリ変換に対して，固有値，トレースが不変であり，かつ必ず固有値分解できる．そのため，常に対角化が可能である．つまり対角化後の対角成分（固有値）が表しているのは，独立な成分のみからなる基底におけるスペクトル（確率分布）である．(７)式から求められる $S_{\rm waves}$ は，この真に独立な成分からなる波の振幅（プラズマの場合は波動電場）で計算されたギブスエントロピーなのである．ギブスエントロピーは，確率分布がどの程度不確かか（情報が含まれていないか）を表す．最も簡単な例では，デルタ関数で最小値，一様分布で最大値をとる．

これに対して従来のスペクトルエントロピーや，Hasselmann の波のエントロピーの定義 $S_{\rm Hasselmann}$ は，位相情報を用いない（もしくは RPA を仮定する），見かけのギブスエントロピー（のようなもの）である．

次に広くエントロピーとよばれる物理量に対して成り立つ H 定理について述べる．$S_{\rm Hasselmann}$ に対しては，H 定理が成立することがわかっているが，$S_{\rm waves}$ の時間発展に関して H 定理が成立するかどうかは自明ではない．ただし，ρ の時間発展がユニタリーである場合には $S_{\rm waves}$ の時間変化は零となる．１つの例として，非線形シュレディンガー方程式に従う系について文献８に示されている．H 定理に関する興味深いトピックとして，最近，インコヒーレントな波動場に Fermi-Pasta-Ulam 回帰現象が起こり，$S_{\rm Hasselmann}$ に対しての H 定理が破れる場合があるという報告がある[9]．このような系では，我々の提案する $S_{\rm waves}$ を用いることで，従来のエントロピー $S_{\rm Hasselmann}$ のパラドックスを説明することができるかもしれない．

これまで空間１次元の波動場についてのみ考えてきたが，多次元の場合についてはどうなるのであろうか．そのために式(９)の意味するところを考えてみる．この式は，波動場全エントロピー $S_{\rm waves}$ は，波動場ベクトルの各々の成分に対するエントロピー $S_{\rm waves}$ の和になるということを表している．したがって，例えば３次元の波動電場を用いて $S_{\rm waves}$ を計算する場合，電場の x, y, z 成分を用いて各々に対する ρ 及び $S_{\rm waves}$ を計算し，足し合わせればよいことになる．

最後に，波動場の自発的対称性の破れの指標として $S_{\rm waves}$ が応用できることを紹介して本節を締めくくる．波動場が乱雑な位相を持つ状態だということは，その系は特別な方向を持たないということなので，対称性がある状態である．すなわち乱流状態は対称性が高い．それに対して，何らかの構造を持つ状態は，通常位相が揃っているので対称性は低いといえる．従来の乱流場での構造形成問題の研究では，RPA を基にして位相についての考察はなされてこなかった．本論文で提案した波のエントロピー $S_{\rm waves}$ を用いれば，位相乱雑な乱流状態からスペクトルは乱流のようにブロードだがコヒーレントな状態への遷移を定量的に評価することが可能である．文献10では，$S_{\rm waves}$ をラングミュア波の場に適用することで，ラングミュア乱流とスーパーコンティニュウム間での遷移現象を同定している[10]．

５．結　言

古典波動場の密度行列とエントロピーが提案されていることを紹介した．提案されているエントロピーは，ギブス

エントロピーやシャノンエントロピーの概念の自然な拡張になっており，対象とする波動場の位相乱雑度を“定量的に”測ることが可能である．このエントロピーは，位相が乱雑な乱流場からコヒーレントなスーパーコンティニュウムまでのあらゆる波動場に適用することができる．提案されているエントロピーは，量子系のコヒーレンスの指標として用いられているフォンノイマンエントロピーの古典力学版ともいえる．このエントロピーは，波動場の自発的対称性の破れの観点から，乱流場での構造形成問題に適用できる．更に重要な展開は，このエントロピーを用いて古典波動場の非平衡自由エネルギーを定義できるようになることである．プラズマ波動物理を，近年提唱されている熱力学と情報の融合にまで展開できる可能性がある[11]．

謝　辞

この研究は，台湾 Ministry of Science and Technology，Grants-in-Aid MOST 107-2112-M-006-012-MY3 によりサポートを受けました．

参 考 文 献

[1] K. Hasselmann, J. Fluid Mech. **12**, 481 (1962).
[2] K. Hasselmann, J. Fluid Mech. **15**, 273 (1963).
[3] J.A. Picozzi *et al.*, Phys. Rep. **542**, 1 (2014).
[4] T.H. Stix, *Waves in Plasmas* (New York: American Institute of Physics) (1992) Chapter 4.
[5] V. Zakharov *et al.*, Phys. Rep. **398**, 1 (2004).
[6] Y.V. Lvov *et al.*, Phys. Rev. E **69**, 066608 (2004).
[7] P.A.E.M. Janssen. J. Physical Oceanog. **33**, 863 (2003).
[8] E. Kawamori, Phys. Plasmas **24**, 090701 (2017).
[9] M. Guasoni *et al.*, Phys. Rev. X **7**, 011025 (2017).
[10] E. Kawamori, *arXiv*:1709.09113 [physics.plasm-ph] (2017).
[11] Juan M.R. Parrondo *et al.*, Nature Phys. **11**, 131 (2015).