

统计物理中的一些辩证法问题

郝柏林

(中国科学院物理研究所)

在这次自然辩证法讲习会上,介绍了基本粒子物理,那是时空范围很小的微观世界,其小无内,不可穷尽;也讨论了引力场理论,那是大范围的时空结构,其大无外,同样不可穷尽。统计物理研究由大量客体组成的系统,面向另一类不可穷尽的认识发展方向。

“一生二、二生三、三生万物”,量的变化导致物质运动由简单到复杂、由低级到高级的不同的形式和发展阶段。恩格斯早就指出过:“……物质的运动,不仅是粗糙的机械运动、单纯的位置移动,而且还是热和光、电压和磁压、化学的化合和分解、生命和意识”。

(《自然辩证法》)这个由简到繁的发展过程,同样是没有止境的,统计物理所研究的还是其中比较初始的阶段。统计物理既是物理学,又有方法论。作为物理学,它的主要对象是气体、液体、固体、等离子体等等“多体系统”,也涉及更复杂的化学和生物过程;作为方法论,它探讨如何从单个或少量粒子的运动规律出发,以概率统计的方法推断和说明由大量粒子组成的物体的性质。统计物理的研究范围,比较接近日常的生产和生活,比较容易有敏感性的认识和类比。这里也有不少哲学问题,希望能引起一部分自然辩证法工作者的注意。以下讲四个方面,它们是:一、宏观和微观,物质的结构层次和物理学的描述层次;二、平衡和非平衡,特别是平衡附近和远离平衡的质的差别;三、渐变和突变,着重讨论一下自然界的相变现象,以及对称、有序和结构的关系;四、有限和无限,这涉及统计物理本身的理论基础,它和量子场论的关系等等。

宏观和微观

科学研究的区分,就是根据科学对象所具有的特殊的矛盾性。一滴水里面有近百万亿个水分子,每个水分子有三个原子,十八个电子。一片最“纯”的半导体中杂质原子的数目仍有成千上万亿。通常所说的“稀薄”气体、“低密度”等离子体等等,其中每一个小体积中的粒子数目,往往还要以亿计量。“大量”也是一种特殊的矛盾性。

“大量”不仅是指宏观物体由极其众多的原子、分子组成,而且反映出它们的运动方式繁多。一个分子就可能有许多不同的运动方式:前后、上下、左右的平动,各种转动和振动,还可能有一些不那么直观的“内在”运动。每一种运动方式叫作一个“自由度”。

没有物质的运动和没有运动的物质同样是不可想象的。分子、原子、原子核、电子、乃至各种“基本”粒子，作为物质结构的单位是人们所熟悉的。它们又是物质运动的单位，而且在一定的相互作用条件下，组成与结构单位并不等同的运动单位。例如，金属中的电子通过与组成晶格骨架的原子核的相互作用，可以在条件适合时产生有效的相吸作用，成双配对地运动。又如，一个在晶格中运动的电子，可以使周围的晶格稍有畸变，它走到那里畸变随到那里，宛如一个更复杂的粒子。这样的运动单位有自己的动量、能量、相当长的寿命，甚至有独特的光谱等等，通常称之为“准粒子”或“元激发”。各类宏观物体中的“准粒子”名目繁多：声子、极化子、激子、等离子振荡子、超导金属中的电子对、液氮中的旋子…。它们与作为物质结构单位的粒子有一条根本区别，就是不能离开环境独立存在。然而它们作为物理对象的确定性，并不亚于任何“基本”粒子。

统计物理的研究对象，就是由大量粒子、准粒子组成，具有大量自由度的系统。由于它突出抓住“大量”这一特殊的矛盾性，“微观”和“宏观”的划分在这里也就更为相对，通常首先不是指物质结构的层次，而是用以区别物理描述的层次。

现代自然科学使人类对自然界的认识跨越了很大的时空尺度。空间范围从“基本”粒子“内部”的 10^{-15} 厘米，到现代天文观测手段所及的一百亿光年即 10^{28} 厘米，相去 10^{43} 倍。时间范围从强子寿命 10^{-23} 秒，到我们所知的这一部分宇宙的寿命一百亿年即 10^{17} 秒，也差 10^{41} 倍。物理思维中常把十倍左右的数量变化忽略掉，视为同一个“量级”。我们说，现代科学所知的物理世界在时间、空间两方面都跨越了四十个量级。人类的认识能力是无限的，它还要向“宏”和“微”两端延伸，增添新的量级，同时可以从一端往另一端，作出深远的科学和哲学概括。这是问题的一个方面。

另一方面，就具体的认识过程，就我们对物理世界的描述而言，必须把这几十个量级划分成许许多多的层次。这不仅是因为物质的结构和运动本来表现出阶段和层次，而且因为我们的每种观测手段，从高能加速器到射电望远镜，都局限于某些层次。

只有所短、寸有所长。每种物理仪器都有它所瞄准的主要层次，虽然有一定的调整变化余地（这叫作仪器的“动态范围”），也不可能跨越许多个量级。同时，每种仪器还有其观测精度或“分辨能力”，超乎这一限度的物质运动必须改用其它手段研究。这有如用放大镜看油画，作品的整体结构和主题自然是在视野之外，颜料和画布的分子结构也还无法察觉。

描述层次的划分可以举两个极端的例子。研究银河系的旋臂结构，把单个天体看成“微观”粒子，讨论这种粒子组成的连续的“气体”中物质的运动和分布。单个原子核或“基本”粒子，为了强调其内部的无限自由度，又作为“宏观”系统看待，和“液滴”类比等等。这两个例子都要引用统计物理的概念和方法加以处理。

描述单个或少量粒子的运动和相互作用的科学，可以统称之为“力学”。无论是描述天体运行的经典力学，反映电子运动的量子力学，表征电子与电磁场相互作用的量子电动力学包括相对论力学，从统计物理的观点看来，都是“微观”理论。即使我们透彻地掌握了它们，同时还知道了粒子间的相互作用力，也不可能直接运用这些规律来刻画宏观物体的性质；既使可以写出来全部方程，也无法准确知晓和利用全部初始条件来求解这些方程。仅仅使用“力学”来作正面进攻是无济于事的，人们必须另寻出路。

其实早在人类认识物质的微观结构之前，就形成了描述宏观物体的科学体系。液体、气体可以具有体积、密度、温度、压力。给不同物体提供相同的热量，温度升高多少不一，因为它们的“比热”不一样。各种固体同样升温一度，体积膨胀的比例有多有少，视其“热膨

胀系数”的大小而定。体积、温度、压力、比热、膨胀率、压缩率等等这样一批为数不多的参数，可以由实验直接测定，还可以从相当普遍的一般考虑出发，为它们建立一些定量关系。这种就事论事，不追究根源的描述体系就是热力学，它早在现代原子论、分子论被证实之前，就在研究蒸汽机和内燃机的过程中诞生了。这种既很实用，又颇成功的描述体系，至今仍是许多技术科学的基础。

宏观理论的成功本身又提出了问题：大量粒子组成的系统，微观运动错综复杂，瞬息万变，怎么又允许有热力学这样简单的描述呢？热力学描述中出现的物质参数，例如前面提到的比热、压缩率等等，又是由物质的微观结构和运动决定的？回答这些问题，就是统计物理的任务，它同时也说明了统计物理在理论和实践两方面的意义。理论上，它是从微观到宏观的结果，是热力学描述的理论基础。实践上：它提供从原子、分子组成出发，解释和预见物质宏观特性的途径，特别是在实验条件无法达到的情况，更是不可缺少的手段。

除了少数理想论的模型，可以从“力学”出发，使用概率统计方法求得准确结果，统计物理中的绝大部分处理方法是近似的。近似的实质，在于化多为少，从大量自由度中归并、约化出少量反映物理实质的自由度。一个好的物理描述通常涉及三个层次：抓住中心层次的主要自由度、实行决定论的、因果的、“力学”的描述；作为背景的层次，只有不完全的、概率的描述，化成了“平均场”、“随机力”等等；而更细微的内部层次，则忽略其结构和运动，剩下一些“常数”。描述层次的划分，反映了偶然与必然、统计规律与决定论规律的关系，这里的界限本来就是可变的。对于粒子数动辄以亿计的宏观系统，由统计规律所得结论的确定性和可靠性，实质上毫不亚于少量粒子的“力学”的决定论的描述。

有一种观点，认为统计规律所以必要，只是由于描述不够完备，原则上从完备的力学描述可以得出统计物理的全部结果，这是最初的一种“还原论”，要把统计物理还原为力学。只要系统足够复杂，就不可能有完备的描述，必然会有随机因素进来。既使是用大型电子计算机解三万个相互作用粒子的牛顿方程组，形式上完全是决定论的力学描述，也回避不了随机因素：只要计算机的字长有限，计算时间足够长之后，就不可能倒算回去，精确地达到原来的初态。这里已经有一点“宏观不可逆”的苗头，而“微观可逆性”反映得已不那么精确。

既然提到了“还原论”，顺便讲一点看法。“四人帮”曾经祭起“还原论”这根大棒，严重干扰了一些科学研究领域。只要引用数学方法和物理概念来讨论化学和生物过程，联系社会现象，就有人担心是否在搞“还原”。其实，高级运动形态并不排斥物理规律。只有认真细致的科学研究，才能说明高级运动形态为什么不能还原为低级运动形态，才能揭露其特有的规律性。为了从哲学上真正批判“还原论”，就应在自然科学中认真搞一点“还原”工作。把统计还原为力学的尝试，就曾带来一些有益的结果，我们在后面第四节中再回到这个问题。

平衡和非平衡

平衡是相对的、特殊的、局部的、暂时的。不平衡才是绝对的、普遍的、全局的、经常的。人类总是从特殊性着眼认识世界，所以历史上最早发展起来的是平衡态的热力学和统计物理。直到不久以前，热力学一词几乎当然是指平衡态，统计物理也主要研究平衡及其附近

的现象。非平衡统计问题的提出虽然与平衡问题同样悠久，但是直到近几十年才逐渐形成一些重要概念，开始勾划出理论体系。

单纯局限于平衡态之内，不可能全面认识平衡态本身。一个稳定的平衡态附近，主要的趋势是趋向平衡。如果对处于平衡态的系统施以短暂的小扰动，则取消扰动后，系统经一定时间后就重新回到平衡，所需的这一段时间称为弛豫时间，这类过程称为弛豫过程。如果强行维持使系统处于不平衡的外界条件（“力”），但又不使其离开平衡太远，则系统内会产生某种持续不断的“流”。例如，维持电位差，导致电流；保持温度差，出现热流；造成浓度差，形成粒子流……。这些“流”就是电荷、能量、质量等等的转移，而且要消耗能量。这类过程称为输运过程或耗散过程。如果离开平衡不远，“流”和“力”是成比例的，比例系数是物质的一种宏观参数，称为输运系数。电导率、热传导系数、粘性等等，都是输运系数。

宏观的平衡态，对应瞬息万变的微观运动方式，是微观运动的一种平均的表现。因此，各种宏观参数并不一成不变地等于平均值，而是在平均值上下起伏摆动。如果对宏观系统的一部分（所谓“微观大、宏观小”的部分）来作测量，则这种围绕平衡值的涨落尤为清楚。

弛豫过程、输运（耗散）过程、涨落过程是平衡态附近的主要非平衡过程，它们都是由趋向平衡这一总的倾向决定的，因此可以把平衡态的热力学和统计物理稍加延伸来加以处理。这一部分统计物理目前已经比较成熟。还有其它一些物理现象，例如共振吸收，吸收谱线的形状和峰宽，也主要是由这几类过程决定的，可在同一框架内讨论。

既然这几类过程都是由趋向平衡这一总的倾向决定的，它们之间必然有一些更深刻的内在联系。非平衡统计物理的重要成果，是证明了输运系数对称原理和涨落耗散定理。

输运过程可以错综复杂地进行。一种“力”能引起多种“流”，一种“流”可来自多种“力”。例如，温度差不仅直接引起热流，还可以引起扩散流（“热扩散”），电流（“温差电”）等等，而浓度差不仅直接造成扩散流，还能导致热流（“扩散热”）等等。如果恰当选择物理量，则甲种力引起乙种流，乙种力引起甲种流，这两类“相反”的交叉输运过程，它们的输运系数是相等的。这就是输运系数对称原理。早在1854年汤姆逊用热力学方法分析热电效应时，就建立了第一个这种对称关系，但是对称原理的一般证明则是本世纪三十年代的事。

涨落耗散定理告诉我们，输运系数与相应物理量涨落的平均值一致。例如，电导率由电流涨落的平均值决定。1928年证明电路中热噪声形成的随机电动势的平均值与元件的电阻（这也是“输运系数”）成正比，就是涨落耗散定理。1905年爱因斯坦研究布朗粒子运动时，把它与扩散系数联系起来，也是另一种意义上涨落耗散定理的先声。定理的一般证明，五十年代才臻于完备。

关于平衡与非平衡的描述，与物理世界时间层次的划分有密切关系。如果考察气体分子相互作用（即“碰撞”）过程本身，它持续约 $10^{-12} \sim 10^{-13}$ 秒，这里只能使用微观的力学描述。微观自由度数量巨大，但是从中分出少量相互作用的自由度来描述碰撞过程，其“力学”总是可逆的。相对于两次碰撞之间的“自由程”（其时间约为 $10^{-8} \sim 10^{-9}$ 秒）而言，碰撞过程可以忽略不计，整个描述使用较少的自由度，它已经可以反映出宏观系统中的不可逆过程。输运系数对称原理可以在这一描述水平上证明。这时可以看到，输运系数虽然出现在不可逆过程中，对称原理本身却恰恰是微观运动可逆性的表现。

如果进一步忽略碰撞间隔这样的时间层次，只关心宏观状态发生显著变化的时间尺度，

例如流体各部分温度由不平衡达到平衡的时间，我们就采用了与热力学描述类似的完全宏观描述。流体力学就是这样的体系，它只剩下五个量来代表每个“微观大、宏观小”的范围内的运动自由度。

以上两段话的意思，决不是说宏观不可逆性是随着描述层次变粗才出现的，而是强调要正确反映客观存在的不可逆性，我们必须采用较粗的描述方式。这个由细到粗、由小到大的过程，正是统计物理的研究对象。

只考虑平衡态本身和附近的现象，只抓住趋向平衡这一种倾向，统计物理就是极不完全的理论。我们必须离开平衡，往远离平衡的方向前进。

平衡态比较单纯，非平衡态丰富多采。离平衡态越远，物理现象千奇百怪，似乎很难有普遍描述和统一理论。事实则不然，远离平衡之后，许多系统会突然进入更有序的新状态。这些新状态本身虽然各有千秋，但却有一些共同之点。第一，通常有某个参数达到一定阈值，新状态才突然出现，这是一种临界现象。第二，新状态具有更丰富的时间和空间结构，例如周期变化或花纹图案。第三，只有不断从外界提供能量，这些结构才能存在下去。第四，新结构一旦出现，就具有和平衡态类似的稳定性，不易因外界条件的微小改变而消失。这类结构目前事称为“耗散结构”，是非平衡统计物理中正在迅速发展的新的一章。

考察一支半导体激光器。当电流较小时，它是一个普通的发光二极管，发出没有相干性的荧光。一旦电流达到阈值，荧光消失，出现频率结构单纯得多的相干光，这就是更为有序的、具有时空结构的新状态。质量欠佳的日光灯管，在一定条件下突然进入辉纹放电状态，出现黑白相间的条纹，有时这些条纹还沿着灯管运动，这也是一种“耗散结构”。由于生物体本身可能就是高级的“耗散结构”，这一概念目前引起了日益普遍的兴趣。

现在我们已经有了比较完整的图象：平衡附近是以趋向平衡为主的各种过程，远离平衡时经过突变形成耗散结构。这两个在一定意义上相反的过程都是宏观系统特有的，是系统的演化和发展。

有人问，如果把能源和物理系统看成一个封闭系统，或者说把宇宙作为封闭系统，最终是不是只剩下趋向平衡这一种过程。这是古老的一种杞人之忧——“热寂说”。其实恩格斯早在一百多年前就对自然科学提出了积极的重大课题：指明放射到太空中去的热以何种途径“转变为另一种运动形式，在这种运动形式中，它能够重新集结和活动起来”（《自然辩证法》）。这是要靠哲学和自然科学的长期努力来逐步解决的。

渐 变 和 突 变

耗散结构是经过突变出现的。这类突变过程目前还研究得很不够，人们往往满足于把它和宏观物质的“相变”作类比，指出它们之间有着深刻的相似性。我们着重讨论一下相变。

相变是自然界中量变转化为质变这一辩证规律的典型表现。恩格斯早就指出：“……每种气体都有其临界点，在这一点上相当的压力和冷却能使气体变成液体。一句话，物理学的所谓常数，大部分不外是这样一些关节点的名称，在这些关节点上，运动的量的增加或减少会引起该物体的状态的质的变化，所以在这些关节点上，量转化为质”。（《自然辩证法》）恩格斯这里指的是液气相变。现在知道相变是极其普遍的自然现象，各种不同的物理机制都会

在温度极其缓慢地变化过程中导致物质宏观状态的突变：高温下没有磁性的材料会在降温到一定温度时突然出现磁性，某些金属或合金会突然失去电阻进入“超导”状态，液体氦会突然失去粘性转为“超流”液体，晶体会突然改组晶格，成为另一种对称。这样的例子可以举出成千上万种，但大体上可以分成两类。

第一类相变有明显的体积变化，在相变时吸收或放出热量（“潜热”），可能该变不变，保持一段“过冷”或“过热”的亚稳态，可以有新旧两相共存现象（冰漂在水上）。

第二类相变没有体积变化和潜热，没有过冷、过热和两相共存，不变则已，一变全变。在第二类相变点附近，比热和其它一些宏观物质参数随温度变化的曲线上，出现趋向无穷大的尖峰。

这两类相变的物理图象极为不同。第一类相变的图象比较直观：子晶从溶液中逐渐长大。第二类相变的特点很发人深思。没有潜热，说明这种相变不需要能量，是某种无限小的变化引起的。比热尖峰，说明在相变点附近，物体内临时出现了大量运动自由度，它们增加了系统的热容量。

什么性质可以在无限小变化下突然消失或出现呢？设想一个正方晶格，围绕着某个轴转九十度，一百八十度，二百七十度，它都可以恢复原状。这样的“对称操作”一共有四十八种。如果加热时它均匀地向三个方向膨胀，就仍然是一个正方晶格，只有量变，没有质变。假定在某一温度下，有一个方向的膨胀率超过了其它两个方向，这时无限小的形变使晶格成为长方体，它的“对称操作”突然减为十六种。一定的对称性只能或者有、或者无，而对称变化的原因可能极其微小。这是第二类相变的本质。它同时说明，为什么新相不能从旧相中逐步生长出来，不能有两相共存现象。这时只能有一种跃跃欲变的趋势，在均匀物体中处处出现。这是一种关联，它从一点影响到邻近一些点，随着温度趋近相变点，关联的范围越来越大，终于互相连成一片，一起动作，取消或产生了若干新的对称性质。这是一种涨落或波动，它们就是造成比热尖峰的大量临时自由度。

第二类相变的实验和理论研究，最近十几年有很大进展。在光、电、机械和热测量中，热测量的精确度最低。测量和数据处理的自动化，大为提高了热测量的精度。低温下的大量研究，排除了其它干扰，给出了相变的纯粹形态。

一百多年来，曾经为各种具体的相变提出过带有各种名字的理论。后来知道这些理论本质上是同一的，都是“平均场”理论，它们与实验符合的程度曾经使物理学者满意了几十年。然而最近一些年的测量，不容置疑地说明平均场理论的结果是不对的。对许多统计物理模型的严格数学分析和数值计算结果，都支持实验而不利平均场理论。按照平均场理论原来精神求出的修正项更糟糕——它给出没有物理意义的发散积分，即无穷大。这一切矛盾的集中，在1972年导致了相变理论中的一次飞跃。有人引用量子场论中的“重整化群”技术，结合前面介绍的第二类相变图象，建立了新的相变理论。结论是有多么稀奇的：原来平均场理论在四维以上空间中是“唯一正确”的理论，在三维以下就不对了。

第二类相变的研究，使我们更多地思考对称、有序和结构的关系。其实，最对称的世界是没有任何秩序和结构的。那是在“盘古开天地”之前，天地混沌，无所谓上下、左右，没有任何特殊方向和特殊点，一切“对称操作”都允许。一旦可以看到“对称”，有一个立方或六角晶体摆在我们面前，已经是失去了不计其数的对称元素，只剩下寥寥数十个。首先明白这一点的，可能是老居里，他曾经有过“非对称创造了世界”的妙语。更复杂的物质结构形式，其实没有任何原来意义下的对称，但是这里又有大量局部的、近似的对称性质。对称

与突变的关系，值得继续思考。

概括起来说，从相变这个例子我们看到：当事物处于渐变过程中，它的个性表现得比较突出，但在质变点上表现出更多的共性，个性退居第二位。突变不是一个点，而是一个内容丰富的过程，在某一个描述层次上它才成为一个点。两类相变的划分，也许能有更广的意义。

在社会现象中我们也看到类似的情形。一个社会在其和平发展时期，民族的、历史的特点表现得比较清楚，然而到了革命变革时期，一切伟大的革命都有其惊人的相似之处。列宁在《共产主义运动中的左派“幼稚病”》一书中指出，俄国无产阶级革命的某些基本特点具有在国际范围内重演的历史必然性。这些类比使我们想到恩格斯1851年二月十三日致马克思信中的一段话：“革命是一种与其说受平时决定社会发展的法则支配，不如说在更大程度上受物理定律支配的纯自然现象。或者更确切地说这些法则在革命时期具有大得多的物理性质，必然性的物质力量表现得更为强烈”。相变现象的分析有助于我们理解恩格斯这段话。

有 限 和 无 限

统计物理研究具有大量运动自由度的宏观系统。在每个具体情形下，这个“大量”都是有确定上限的有限的数。然而它是如此之大，增加或减少几个粒子也没有影响。因此，认为粒子数无限多才更好地反映了客观世界，一切数量关系才得以简化，物理图象才更为突出。通常取所谓“热力学极限”：令粒子数和系统的体积趋向无穷，但单位体积内的粒子数（粒子数密度）仍是有限的。

事实上统计物理中的一些根本问题，只有在取了热力学极限之后才变得更明朗。

首先，统计物理的方法能否描述相变这类突变现象，人们曾经有过怀疑。因为统计平均使一切函数变得更为光滑，而相变是“连续性的中断”，是尖峰和跳跃。自从四十年代初求得一种相变模型的数学严格解之后，懂得了无穷、尖峰等等，都是取热力学极限的结果。对于有限个粒子组成的系统，比热即使冒尖，也是有限的。后来实验也证实了这些看法。

其次，统计“平均”是什么意思下的平均？对于微观运动而言，物理测量是一种时间平均，这里还取了另一个极限：测量时间比微观运动的特征时间大无穷多倍，因此微观运动的初始状态等等，都不应当影响测量结果。实际上统计物理中不会计算时间平均，把它换成了另一种平均：取同一个系统的无穷多个样本，它们的差别只在于初始条件不同，既然时间平均不依赖于初始条件，它就可以换成对同一时刻一切系统样本的平均（统计物理中叫作“系综平均”）。

这两种平均究竟相同否？这就是著名的遍历（又称“各态历经”）问题，因为如果一个力学系统从一个初始状态出发，确实要经历一切可能的状态，就很容易证明时间平均等于系统平均。企图把统计还原为力学的人们，在遍历问题上下了很大功夫，使它成为泛函分析的一个分枝，物理工作者主要关心其结论。最近几年遍历理论中得出了一些具体结果，例如证明了有限个非简谐振子是不遍历的而有限个弹性钢球组成的系统反而是遍历的。这两个结论都有点与物理直观相违，因为非简谐振子是经常用来代表各种“实际”的物理模型的系统，

它应能趋向平衡，用统计方法处理，而没有相互作用的简谐振子或弹性刚球组成的系统，根本不会趋近热平衡。出路何在呢？看来在于无穷多自由度。最近证明了无穷多个简谐振子组成的系统是遍历的。统计物理的基础，要从无穷多自由度出发来建立。

无穷多自由度带来了一套无穷维的数学：无穷维的函数空间，无穷维的矩阵对无穷多个函数变量的连续积分…，一句话，进入了泛函分析的领域。还有另一类处理无穷多自由度系统的物理理论，那就是量子场论。从数学结构上看，统计物理和量子场论是彼此相通的。近二十多年来，这两方面的发展经常互相促进，形成了一些强有力的方法，解决了一批难题。统计物理和量子场论也遇到了完全相似的困难例，如发散问题，但它在统计中表现得单纯得多。

总之，“无限”具有丰富的内容，是对客观世界的一种很好的近似。数学和哲学工作者考虑“无限”问题时，可以同时把统计物理作为很好的例证。