

非平衡熱力学におけるエネルギー散逸最小原理とヤコビ場

フリーランス 片桐 奏羽 (So Katagiri)

概要

熱力学の体系を非平衡系へ拡張する試みが非平衡熱力学であり、平衡系近傍ではオンサガーによる定式化が知られている [1, 2]。我々はオンサガーのエネルギー散逸最小原理を力学の変分原理として検討しヤコビ場を介して力学と非平衡熱力学が関係することを提案する。

1 序論

オンサガーの非平衡熱力学では、平衡状態に近い領域では熱力学変数 a^i の時間発展は輸送係数 L^{ij} と熱力学力 A_i によって

$$\dot{a}^i = L^{ij} A_j \quad (1)$$

のように記述される [1, 2]。この方程式はオンサガーのエネルギー散逸最小原理によって導出することができる。これは次のような変分

$$\delta_{\dot{a}}(A_i \dot{a}^i - \Phi) = 0 \quad (2)$$

によって記述される。ここで Φ は散逸関数

$$\Phi = \frac{1}{2} R_{ij} \dot{a}^i \dot{a}^j \quad (3)$$

で、 R_{ij} は L^{ij} の逆行列

$$R_{ij} L^{jk} = \delta_i^k \quad (4)$$

である。また、 $\delta_{\dot{a}}$ は $\dot{a}$ についてとるものとする。

この双対として

$$\delta_A(A_i \dot{a}^i - \Psi) = 0 \quad (5)$$

という変分も (1) を与える。ここで Ψ は

$$\Psi = \frac{1}{2} L^{ij} A_i A_j \quad (6)$$

で、 δ_A は A について変分をとるものとする。後の議論により、この方程式は経路積分の議論からオンサガー-マクラップ-橋爪作用 [3, 4, 5]

$$S_{OMH} = \beta \int (A_i \dot{a}^i - \Phi - \Psi) dt = \beta \int \frac{1}{2} R(\dot{x} - LA)^2 dt \quad (7)$$

の高温極限で $S_{OMH} = 0$ となることで導出されることがわかった。

これらの導出方法において、なぜ位置の変位 δa でなく速度の変位 $\delta \dot{a}$ を考えるのかは不明瞭である。

一方で、近年、非平衡熱力学と場の理論的観点から再考が行われた [6, 7]。これらの研究においては、親和力をゲージ場とみなし、これをゲージ固定することで系を記述する [6] という見方と、オンサガー-マクラップ-橋爪作用において輸送係数を重力場、親和力をプロカ場とみなして系を記述するという見方 [7] が採用されるが、これらの研究において前者はオンサガーのエネルギー散逸最小原理の立場をとり、後者はオンサガー-マクラップ-橋爪作用から議論をはじめており、両者の出発点が異なっていた。

これらの状況において、我々は問題点を整理するために、力学における変分原理を見直すことで、その意味が何であるかを調べてみる。

2 本論

2.1 力学における変分原理

力学において、運動方程式は作用についての変分が 0 であること、つまりハミルトンの原理

$$\delta S[x] = 0 \quad (8)$$

によって与えられる。今、 x についての変分 (仮想変位) δx を独立な自由度 (ヤコビ場) として扱い、 ϕ を用い、 $\delta x = \epsilon \phi$ と書くことにする。変分は

$$\delta S[x] = S[x + \epsilon \phi] - S[x] \quad (9)$$

のように書ける。ここで $S[x + \epsilon \phi]$ を ϵ について展開すると

$$S[x + \epsilon \phi] = S[x] + \epsilon \int \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\phi} + \frac{\partial L}{\partial x} \phi \right) dt \quad (10)$$

$$+ \frac{\epsilon^2}{2!} \int \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\phi}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \dot{\phi} \phi + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \phi^2 \right) dt + O(\epsilon^3) \quad (11)$$

となる。ここで λ を定数として

$$\delta S[x] = \epsilon \bar{S}[\phi, \lambda] \quad (12)$$

$$\bar{S}[\phi, \lambda] \equiv \int \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{\phi} + \frac{\partial L}{\partial x} \phi \right) dt + \frac{\lambda}{2} \int (\phi^2 - 1) dt \quad (13)$$

$$+\frac{\epsilon}{2!} \int \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{x}^2} \dot{\phi}^2 + 2 \frac{\partial^2 L}{\partial x \partial \dot{x}} \dot{\phi} \phi + \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \phi^2 \right) dt + O(\epsilon^2) \quad (14)$$

を定義する。よって、ハミルトンの原理は

$$\bar{S} = 0 + O(\epsilon) \quad (15)$$

となる。これらの変分は

$$\frac{\delta \bar{S}[\phi, \lambda]}{\delta \phi} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} + O(\epsilon) = \lambda \phi \quad (16)$$

$$\frac{\delta \bar{S}}{\delta \lambda} = \int (\phi^2 - 1) = 0 \quad (17)$$

である。第2式は ϕ の規格化条件を与える。第1式は $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}$ を導入し

$$\dot{p} = f + \lambda \phi + O(\epsilon) \quad (18)$$

となり、これは力以外に仮想変位による力が加わっていると理解できる。 ϕ について解けば

$$\phi = \frac{1}{\lambda} \left(\frac{dp}{dt} - f + O(\epsilon) \right) \quad (19)$$

なので、これを $\bar{S}$ に代入すれば

$$\bar{S} = \int \frac{1}{2\lambda} (\dot{p} - f)^2 - \frac{\lambda}{2} + O(\epsilon) = -\frac{\lambda(t_f - t_i)}{2} + \frac{1}{\lambda} \int \frac{1}{2} (\dot{p} - f)^2 + O(\epsilon) \quad (20)$$

よって、ハミルトンの原理 $\bar{S}[x, \lambda] = 0 + O(\epsilon)$ は

$$\int \frac{1}{2} (\dot{p} - f)^2 dt = \frac{\lambda^2}{2} (t_f - t_i)^2 - O(\epsilon) \quad (21)$$

であることがわかる。 λ は ϵ のオーダーであるので

$$\int \frac{1}{2} (\dot{p} - f)^2 dt = O(\epsilon) \quad (22)$$

よって、運動方程式

$$\dot{p} = f \quad (23)$$

が求まる。つまり、古典力学の運動方程式は

$$\bar{S} \equiv \int (p\dot{\phi} + f\phi) dt + \frac{\lambda}{2} \int (\phi^2 - 1) dt \quad (24)$$

としてヤコビ場を解いた

$$\bar{S} = \frac{1}{\lambda} \int \frac{1}{2} (\dot{p} - f)^2 dt \quad (25)$$

において $\bar{S} = 0$ を要請することで求めることができる。これがオンサガー-マクラップ-橋爪作用 [3, 4, 5] と対応する。

つまり、

$$S_{OMH} = \beta \int \frac{1}{2} R_{ij} (\dot{a}^i - L^{ik} A_k) (\dot{a}^j - L^{jl} A_l) dt \quad (26)$$

はヤコビ場 ϕ^i を導入して

$$\tilde{S} = \int \frac{1}{2} (R_{ij} a^i \dot{\phi}^j + A_i \phi^i) dt + \frac{1}{2\beta} \int (\phi^2 - 1) \quad (27)$$

のように書くことができる。ここで

$$S \equiv \int dt L(b, \dot{b}) \quad (28)$$

とにおいて、

$$A_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{b}^i} \quad (29)$$

$$R_{ij} a^j = \frac{\partial L}{\partial \dot{b}^i} \quad (30)$$

とおけば、

$$\delta S[b] = 0 \quad (31)$$

から

$$\dot{a}^i = L^{ij} A_j \quad (32)$$

を求められる。

2.2 オンサガーのエネルギー散逸最小原理

力学の変分原理とオンサガー-マクラップ-橋爪作用との関係は理解できた。しかし、元の

$$\delta_{\dot{a}}(A_i \dot{a}^i - \Phi) = 0 \quad (33)$$

$$\delta_A(A_i \dot{a}^i - \Psi) = 0 \quad (34)$$

という式はどのように理解できるだろうか。これらは次のように考えれば良い。
まず、ダランベールの原理と同様に、しかし変分として δA_i をとった

$$\delta_A(A_i \dot{a}^i - \Psi) = (\dot{a}^i - L^{ij} A_j) \delta A_i = 0 \quad (35)$$

を考える。この変分をヤコビ場に昇格して、規格化条件をつける。

$$\bar{L}_{OM}^{dual} \equiv (\dot{a}^i - L^{ij} A_j) \delta A_i + \frac{1}{2} \lambda (L^{ij} \delta A_i \delta A_j - 1) \quad (36)$$

次にこれを δA_i について解けば

$$\bar{L}_{OM}^{dual} = \frac{1}{2\lambda} (\dot{a}^i - L^{ij} A_j)^2 - \frac{\lambda}{2} \quad (37)$$

となり、定数項を除けばオンサーガー・マクラップ・橋爪の作用が得られる。
同様に

$$\delta_{\dot{a}}(A_i \dot{a}^i - \Phi) = (A_i - R_{ij} \dot{a}^j) \delta \dot{a}^i = 0 \quad (38)$$

においても

$$\bar{L}_{OM} \equiv (A_i - R_{ij} \dot{a}^j) \delta \dot{a}^i + \frac{1}{2} \lambda (R_{ij} \delta \dot{a}^i \delta \dot{a}^j - 1) \quad (39)$$

より、 $\delta \dot{a}^i$ を解けばオンサーガー・マクラップ・橋爪の作用が得られる。
つまり、

$$S[\dot{a}] = \int (A_i \dot{a}^i - \Phi) dt \quad (40)$$

$$S^{dual}[A] = \int (A_i \dot{a}^i - \Psi) dt \quad (41)$$

における変分原理

$$\delta S[\dot{a}] = 0 \quad (42)$$

$$\delta S^{dual}[A] = 0 \quad (43)$$

はヤコビ場を用いた作用から作られるオンサーガー・マクラップ・橋爪の作用を 0 とする条件と等しい。

3 結論

本研究ではオンサガーのエネルギー散逸最小原理を力学の変分原理と比較し、両者の対応関係を調べた。その結果、力学における変分原理はヤコビ場を用いることでオンサガー-マクラップ-橋爪作用と同様の定式化が可能であることがわかった。よって、力学における変分原理とヤコビ場を用いた作用に対応するものが非平衡熱力学における散逸エネルギー最小原理とオンサガー-マクラップ-橋爪作用に対応することが本研究で得られた結論である。

この立場から非平衡熱力学のゲージ固定の理論 [6] と非平衡熱力学の重力アナロジーの理論 [7] の間の関係がより具体的に理解できるようにすることで、平衡系から遠く離れた非平衡熱力学の定式化の理解を進めることを今後の課題としたい。

参考文献

- [1] Onsager, Lars: “Reciprocal relations in irreversible processes. I.”, Phys. Rev. 37 (1931) 405.
- [2] Onsager, Lars: “Reciprocal relations in irreversible processes. II.”, Phys. Rev. 38 (1931) 2265.
- [3] Onsager, Lars, and S. Machlup: “Fluctuations and irreversible processes”, Phys. Rev. 91 (1953) 1505.
- [4] Machlup, S., and Lars Onsager: “Fluctuations and irreversible process. II. Systems with kinetic energy”, Phys. Rev. 91 (1953) 1512.
- [5] Hashitsume, Natsuki. ”A statistical theory of linear dissipative systems.” Progress of Theoretical Physics 8.4 (1952): 461-478.
- [6] Katagiri, So. ”Non-equilibrium thermodynamics as gauge fixing.” Progress of Theoretical and Experimental Physics 2018.9 (2018): 093A02.
- [7] Aibara, Noriaki, et al. ”Gravity Analog Model of Non-equilibrium Thermodynamics.” arXiv preprint arXiv:1807.04132 (2018).

片桐 奏羽

1977 年 12 月 29 日生まれ。東京都立新宿高等学校卒業、筑波大学卒業、同大学院数理解物質科学研究科博士課程単位取得退学。iOS アプリのフリーランスエンジニアとしてアプ

り開発をする一方で放送大学大学院文化科学研究科に在籍し物理を研究中。専門は弦理論、量子論、非平衡熱力学。