

バランス方程式

by T. Koyama

1 . 場の定義

ここで扱う場は古典力学場である。量子場は扱わない。場を解析する場合、Lagrange の立場（着目点に伴い座標系が移動）と Euler の立場（座標系を固定）があるが、本研究では Euler の立場にて議論を展開する。

さて、扱う古典力学場は熱力学場（力学場を含む）である。さらに局所平衡を仮定する。この局所平衡を仮定するということは、空間の任意の点において、熱力学的変数がすべて定義でき、その位置において、熱力学的関係式(Gibbs-Duhem の関係式等)が成立することを意味するものである。

場の分類には、スカラ - 場とベクトル場が存在する。空間の各点に、一個ずつ勝手な数値を書き込み、その数値全体の分布を表す場がスカラ - 場である。その値が時間によって、大きくなったり小さくなったりしていれば、これは、時間に依存したスカラ - 場であり、その大きさの変動を記述する式が場の運動方程式である。一方、空間の各点に一個ずつ矢印を書き込み、この矢の分布がベクトル場である。矢の長さがその位置における場の大きさであり、矢の方向がその位置における場の方向である。これらの矢が、あちこちで、によきによき長くなったり短くなったり、さらに方向を変えたりしていれば、時間に依存するベクトル場である。そのによきによきを決めるのが場の方程式である。

また、本研究で考慮する場は、Fourier 級数にて表現できると仮定する。すなわち、無限大や無限小をとるような場の状態を表す変数は存在せず、かつ、空間のいたるところで、個々の変数は階微分可能と仮定する。

2 . バランス方程式と連続の方程式の導出、および各種の方程式との関係

空間の位置 $\mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)$ に、ある時間 t 、ある物理量 $f(\mathbf{r}, t)$ が分布しているとしよう。ここで $f(\mathbf{r}, t)$ は、スカラ - 場ではスカラ - 量そのもの、ベクトル場では、ベクトル成分とする。さて、空間内のある領域の体積を V 、その表面積を S とする。 S の単位面積を通り単位時間に流れる量を $g(\mathbf{r}, t)$ とし、面要素 dS の法線ベクトルを \mathbf{n} とする。さらに単位時間あたりの V 内の湧き出し量を $q(\mathbf{r}, t)$ とする。以上より式(1)が成立する。

$$\frac{d}{dt} \int_V f(\mathbf{r}, t) dV = - \int_S g(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS + \int_V q(\mathbf{r}, t) dV \quad (1)$$

Gauss の発散定理から、

$$\int_S g(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{div}\{g(\mathbf{r}, t)\} dV = \int_V \nabla \cdot g(\mathbf{r}, t) dV \quad (2)$$

であるので、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V f(\mathbf{r}, t) dV + \int_V \nabla \cdot g(\mathbf{r}, t) dV &= \int_V q(\mathbf{r}, t) dV \\ \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot g(\mathbf{r}, t) &= q(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3)$$

が成立する。これをバランス方程式という。特に $q(\mathbf{r}, t) = 0$ の特別な場合、式(3)は式(4)になる。

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot g(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (4)$$

これを連続の方定式という。

式(3)において、 $f(\mathbf{r}, t)$ を密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ とすると、 $g(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ となり、

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)\} = 0 \quad (5)$$

が得られる。右辺の0は物体が生成消滅しないことを意味し、この式が連続の方程式の由来である。また式(4)において、 $f(\mathbf{r}, t)$ を濃度場 $c(\mathbf{r}, t)$ とすると、濃度場 $c(\mathbf{r}, t)$ の流れ $g(\mathbf{r}, t) = j(\mathbf{r}, t)$ となり、式(4)は式(6)のように拡散方程式となる。

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot j(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

さらに式(3)において、 $f(\mathbf{r}, t)$ を運動量密度 $\rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)$ とすると、 $g(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)v_j(\mathbf{r}, t)$ となり、またこの式は力の収支になるので、式(3)右辺は

$\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) + A_i(\mathbf{r}, t)$ となる。すなわち、

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)v_j(\mathbf{r}, t) = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) + A_i(\mathbf{r}, t) \quad (7)$$

が得られる。 $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$ は体積要素に働く応力成分で、 $A_i(\mathbf{r}, t)$ は単位体積に働く外力の*i*成分である。(なお、 $A_i(\mathbf{r}, t)$ は電磁気力等の長範囲力を意味し、外部応力項は $\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$ 内に含まれるとする。)さてここで、応力の伝播は非常に高速であり、応力が変化している間、密度はほとんど不変に保たれると仮定しよう。すなわち $\partial \rho(\mathbf{r}, t) / \partial t = 0$ と置く。これより式(5)は次のように近似できる。

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \{\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)\} \cong \rho(\mathbf{r}, t) \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} v_j(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (8)$$

この時、式(7)の左辺は、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)v_j(\mathbf{r}, t) \\ & \cong \rho(\mathbf{r}, t) \frac{\partial v_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t) \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} v_j(\mathbf{r}, t) \\ & = \rho(\mathbf{r}, t) \frac{\partial v_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ & = \rho(\mathbf{r}, t) \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \end{aligned} \quad (9)$$

となる。 $u_i(\mathbf{r}, t)$ は変位成分である。したがって、式(7)は式(10)にて与えられる。

$$\rho(\mathbf{r}, t) \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) + A_i(\mathbf{r}, t) \quad (10)$$

つまり、応力の伝播に対して、密度変化が非常に遅い場合、式(10)が成立し、この式が弾性体の運動方程式である。さらに式(10)の左辺が0となる、いわゆる定常状態では、式(10)は応力の釣り合いの方程式となる。

応力の伝播と密度変化が同程度の速さを有する場合には、式(7)を簡略化することは出来ない。しかしこのような条件は、固体ではほとんど生じることではなく、主として液体において問題となる。特に、応力の伝播と密度変化が同程度であるということは、実際に、微小歪理論が使用できないことを意味する。密度変化は物質の輸送に関係するので、元来遅い過程であり、この遅い過程と同程度の速度の応力伝播とは、流体の粘性力に相当する応力である。したがって、微小歪理論のように応力が変形勾配に比例するのではなく、速度勾配に比例するという仮定を使用しなくてはならない。この仮定は、形式的には Hooke の法則に等しい。通常、等方弾性体の応力は次式にてあたえられる。

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) = -p(\mathbf{r}, t)\delta_{ij} + \lambda\delta_{ij} \sum_k e_{kk}(\mathbf{r}, t) + 2\mu e_{ij}(\mathbf{r}, t) \quad (11)$$

$p(\mathbf{r}, t)$ は外部応力で、 δ_{ij} は Kronecker の δ である。 λ, μ は Lamé の定数で、 $e_{ij}(\mathbf{r}, t)$ は弾性歪である。面白いことに、この $e_{ij}(\mathbf{r}, t)$ を変形勾配から定義すれば、式(11)は、弾性固体の応力を表し、 $e_{ij}(\mathbf{r}, t)$ を速度勾配に基づき定義すれば、流体の粘性応力を表す式となる。このそれぞれに対応する定義は、式(12)(13)にて与えられる。

$$e_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (12)$$

$$e_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \quad (13)$$

それでは、流体におけるバランス方程式を導いてみよう。式(11)(13)を式(7)に代入する。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \rho(\mathbf{r}, t)v_i(\mathbf{r}, t)v_j(\mathbf{r}, t) \\ &= \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-p(\mathbf{r}, t)\delta_{ij} + \lambda\delta_{ij} \sum_k e_{kk}(\mathbf{r}, t) + 2\mu e_{ij}(\mathbf{r}, t) \right] + A_i(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j} + \lambda \sum_k \frac{\partial^2 v_k(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j \partial x_k} + \mu \sum_j \frac{\partial^2 v_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_i \partial x_j} + \mu \frac{\partial^2 v_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j^2} + A_i(\mathbf{r}, t) \\ &= -\frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j} + (\lambda + \mu) \sum_k \frac{\partial^2 v_k(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j \partial x_k} + \mu \frac{\partial^2 v_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x_j^2} + A_i(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (14)$$

この式が、Navier-Stokes の方程式である。

3 . 力の分類

さて、連続体物質の場では体積要素が定義でき、この体積要素に作用する力を以下のように3つに分類する。

- 1) 着目している体積要素近傍の体積要素から働く単範囲力（原子間力など）
- 2) 連続体の他の部分から働く長範囲力（Coulomb 力、応力など）
- 3) 連続体外部からの力（重力などの体積力）

通常これら3種類の力を考慮することによって、場の安定性や時間発展を解析することが可能である。

4 . 相互作用の分類

連続体物質場における体積要素に働く相互作用は、以下の3つに分類される。

- 1) 同じ空間的位置における、時間方向の相互作用。（例えば、直前の情報のみが現在の状態を規定すると仮定する場合は、Markov 過程である。）
- 2) 同じ時間における、空間方向の相互作用。（長範囲、短範囲相互作用等）
- 3) 異なるスケール間の相互作用。（例えば、原子からマクロへの相互作用）

なお、これらの3つは互いに独立ではなく、同時に作用することもあることを忘れてはならない。

これらの相互作用を省略することなく、全て考慮することが理想であるが、現実問題として全てを考慮することは不可能である。物理の歴史的は、これらの相互作用の内、どこまで省略できるか、どこまで単純化できるかの歴史といっても過言ではないであろう。

例えば、1)について、直前の情報のみが現在の状態を規定すると仮定する場合は、Markov 過程である。2)について、着目する体積要素の周辺からの相互作用をならしてしまう方法が平均場近似である。3)については、空間スケールの小さな現象は、マクロ的な現象の変化速度に対して非常に高速に進行し、マクロ現象を扱う場合に、常にミクロな状態がその場における定常状態にあると仮定する場合は、電子論では断熱近似と呼ばれ、より普遍的には、Haken によって隷従原理と一般化されている。

これらは、あくまでも仮定であって、このような仮定が使用できるかどうかは、自然界にご教授願わなくてはならない。実験と理論との対応から、この点を見極めることが非常に大切である。

5 . 自然界の記述法

従来、自然界の挙動を記述する方法として、微分方程式、積分方程式が利用されている。解析力学を基礎に、Hamiltonian が規定されれば、微分量から種々の物理量を定義できるので、このようなアプローチの仕方は非常に強力である。さらに高次の微分は、その差分表記から容易に理解できるように、高次になるほど、時間および空間において広範囲の情報を必要とし、必然的に短範囲力から長範囲力までの広範囲の効果を記述することができる。さらに場における相互作用を積分表記し、それを微分方程式内に取り込めば、より正確に自然現象を記述することが出来る。

さて、ここで問題なのは、それで果たして、本当に十分であろうかということである。確かに微分方程式は強力なツールである。しかし、最近の生物学における自己組織化現象、人工生命、セルラ - オ - トマタ、カオス理論および複雑系の物理が示唆する内容などから

類すると、従来の微分方程式による記述が自然界を記述する言葉として、はたして必要十分であるかどうかには、若干疑問が残る。

S.Wolfram は次のように主張している。「Newton 時代からの科学は、数学、特に微分方程式の虜になっている。単純な論理的規則の集まり、例えばセルラ - オ - トマトンの元になるようなものが、実世界を記述するずっと強力な言語を提供するかもしれない。」これは非常に面白い考え方である。さらに、この考えは従来の微分方程式による解析と相矛盾する考え方ではない。つまり、Wolfram の言うところの単純な論理的規則の集まりとは、微分方程式における差分マトリックスであると置き直すことによって、両者は統合される。具体的例を挙げれば、例えばライフゲ - ムの有名な規則が、差分マトリックスとなるような微分方程式を考えれば、ライフゲ - ムは、その微分方程式の差分シミュレ - ションとみなすことが出来る。ここで、単純な論理的規則の集まりをマトリックスとして表記したものを「論理マトリックス」と呼ぼう。最も注目すべき点は、この論理マトリックスをすべての基礎に置く考え方が、自然界の記述法として、最も汎用性に富む手法を提供するということである。つまり、微分で記述できないような条件もこの論理マトリックスならば、記述することができる。なぜなら、まさにこれは、論理的手続きをマトリックス表記しただけであるので、論理学における完全性定理から、あらゆる現象を矛盾なく記述することが出来るからである。この論理マトリックスが、ある場合には、差分マトリックスになり、それを極限近似した方程式が微分方程式であると考えれば、微分方程式は、論理マトリックスの特別な場合に過ぎないことになる。また1つの差分方程式から、それを微分方程式に持っていくときの境界条件によって、種々の微分方程式が導かれることが知られており、これは微分方程式よりも差分方程式、ひいては論理マトリックスの方が普遍性を有している1つの証拠である。この論理マトリックスに基づき、セルラ - オ - トマトや、人工生命、生物の自己組織化現象をシミュレ - ションできることは言うまでもない。さらに、遺伝的アルゴリズムもこの範疇に属する。なぜなら、論理マトリックスには閾値という概念が容易に導入できるからである。また、従来のモンテカルロシミュレ - ションは、論理マトリックスの規則に熱活性化仮定を利用した場合である。

以上より、本研究の基本原理は、この論理マトリックスに置く。しかし、従来の微分方程式に基づく研究との整合性を考慮して、当面は、差分マトリックスを使用した解法のみを扱うことにする。しかし、論理マトリックスを利用する解法は、近年急速に発展している、各種の自然界の動的変化を記述する数値計算法を、アルゴリズムの面から統一するものであることを強調しておく。

6 . 発展方程式から導かれる散逸構造の時空間サイズについて

微分方程式から導かれる散逸構造の時空間サイズが、何によって決定されるかを考察する。まず微分方程式を一般的に次式のように記す。

$$\frac{dX}{dt} + m \frac{d^2 X}{dt^2} + \dots = AX + BX^2 + CX^3 + \dots + E \frac{dX}{dr} + D \frac{d^2 X}{dr^2} + F \frac{d^3 X}{dr^3} + \dots \quad (15)$$

時間対称性がある現象では、変数 X の時間に関する奇数階微分項は消える。同様に、空間対称性がある現象では、空間に関する奇数階微分項および奇数乗項は消える。なお、時間対称性が存在する場合が、非散逸系 (エネルギー - 保存) の現象であり、対称性が破れている場合が散逸系 (エネルギー - 散逸) の反応である。このどちらであっても自己組織化現象は生じ得る。式(15)の特殊な場合をここで、いくつか議論する。

$$\frac{dX}{dt} = AX \quad (16)$$

式(16)の場合、時間尺度は、 $\sim A^{-1}$ となる。

$$m \frac{d^2 X}{dt^2} = AX \quad (17)$$

式(17)の場合、時間尺度は、 $\sim (m / A)^{1/2}$ となる。

$$\frac{dX}{dt} = AX + D \frac{d^2 X}{dr^2} \quad (18)$$

式(18)の場合、特に定常状態を考えれば、

$$\frac{d^2 X}{dr^2} = -\frac{A}{D} X \quad (19)$$

となるので、空間尺度は、 $\sim (D / A)^{1/2}$ となる。

微分方程式に基づき、ある構造・組織の形成を解析しようとする場合、微分方程式の係数である A , D , および m などの値は、あらかじめ既知であるか、ある程度のお-ダ-がわかっている場合が多い。このような時には、式(17)~(19)に見るように、形成される構造・組織の尺度を、事前に推定することができる。例えば、合金の拡散係数の大きさが既知であれば、合金の拡散によって、実験できる時間範囲内で形成される組織のサイズをあらかじめ知るが出来る。特に、これらの係数がかならずある範囲内に存在するような分野では、微分方程式自身が現象のスケ-ルを規定することになる。この点は、隷従原理適用の妥当性の判断基準にも利用することが出来、重要な点である。