物理と数学の絡み合いによる発展

理研　鈴木増雄

1. 佐藤・三輪・神保と統計力学
2. 加藤敏夫と東大物理（山内恭彦、今井功、久保亮五…）
3. 数理的素粒子理論と統計物理学
   臨界現象のくり込み群理論（K.G.W. 1971年）
   ◎CAM → 近似理論の包絡線的統合（M.S. 1986年）
4. 量子現象の数理 ― 非可換代数（量子解析）
5. 直観と解析 ― 自然法則の変分原理

◎ 不可逆過程の変分原理と経路積分量子化

― 途中を考慮した変分原理 ―

--- ルジャンドル変換に導かれて ---

輸送現象の不可逆過程

◎ オンサーガの相反定理(1968年ノーベル化学賞)
複数の外力(電圧Vや温度差$\nabla(\frac{1}{T})$など)$\{X_i\}$に対する
流れ$\{J_i\}$は、線形の範囲では、1次式(フーリエ則)

$$J_i = \sum_j L_{ij} X_j = L_{i1} X_1 + L_{i2} X_2 + \cdots$$

で表される。このとき、輸送係数$\{L_{ij}\}$は対称的である:

クロス効果が対称的(*)

$$L_{ij} = L_{ji} \geq 0 \text{ (正値対称)}.$$

この対称性をオンサーガの相反定理という。この定理は、
輸送係数が、線形の範囲では、平衡系の時間的なゆらぎで表されることから示される。(揺動散逸定理とも呼ばれる関係。)
この相反定理は、単位時間、単位体積当りのエントロピー生成

$$\sigma = \sum_i J_i X_i \geq 0 \ : \ \frac{dS}{dt} = \int_V \sigma \, dv \geq 0$$

が正であることを保証する。$\sigma = \sum_{i,j} L_{ij} X_i X_j \geq 0$.

◎ 輸送係数$\{L_{ij}\}$を量子統計力学的に導いた式を久保公式という。

不可逆非線形輸送現象の変分原理(プリゴジンの問題*)

寺田寅彦(!?)

―積分型のエントロピー生成最小の個別原理の発見―

◎ グランスドルフ－プリゴジンの発展規準:
流れ$\{J_i\}$と力の変分$\{dX_i\}$の積の和 $d_X W \equiv \int_V d\mathbf{r} \sum_i J_i dX_i \leq 0$
が負となるという条件のもとに定常流が安定となる。
これは、エントロピー生成最小の原理を不可逆非線形現象に拡張する試みの第一歩である(プリゴジン)。

◎ 新しい変分原理:積分型エントロピー生成最小の原理(M.S.)
(旧方式のように瞬間のジュール熱発生ではなく)平衡値0から定常値$X(\mathbf{r})$になるまでのエネルギー散逸(ジュール発生)の速さを足し合わせたものが最小となる。

$$Q_i \equiv \int_V d\mathbf{r} \int_0^{X_i(\mathbf{r})} J_i\left(X_1(\mathbf{r}), \cdots, X_{i-1}(\mathbf{r}), X_i'(\mathbf{r}), X_{i+1}(\mathbf{r}), \cdots\right) dX_i'(\mathbf{r}) = \text{最小}。$$

それぞれの外力X_iごとの変分原理→個別変分原理に進化。

○ 発展規準も個別発展規準 $d_X W_i \leq 0$ に進化。相反法則を必要としない。

◎ 変分原理の個別化と相反法則の不成立とが対応している。

新変分原理による定常解の求め方および独立変数のとり方

○ 個別に変分した変分解をまとめた連立方程式の解が定常解となる：$X_i^*(\mathbf{r}) = X_i^*(\{X_j^*\}; j \neq i) \quad i=1,2,\cdots$

○ 変分するとき境界条件がつく：例えば和が一定；$\underbrace{\int X_i(\mathbf{r})d\mathbf{r}}_{=一定}$

○ 独立変数としては力$\{X_i\}$ではなく，流れ$\{J_i\}$を取ることも多い。
そのときの変分原理は

$$\tilde{Q}_i \equiv \int_V d\mathbf{r} \int_0^{J(\mathbf{r})} X_i(J_1(\mathbf{r}),\cdots,J_{i-1}(\mathbf{r}), J_i'(\mathbf{r}), J_{i+1}(\mathbf{r}),\cdots)\,dJ_i'(\mathbf{r}) = 最小；i=1,2,\cdots$$

◎ 積分形のエネルギー散逸率の量子統計力学的表式 (M.S.)

外力

流れのゆらぎ

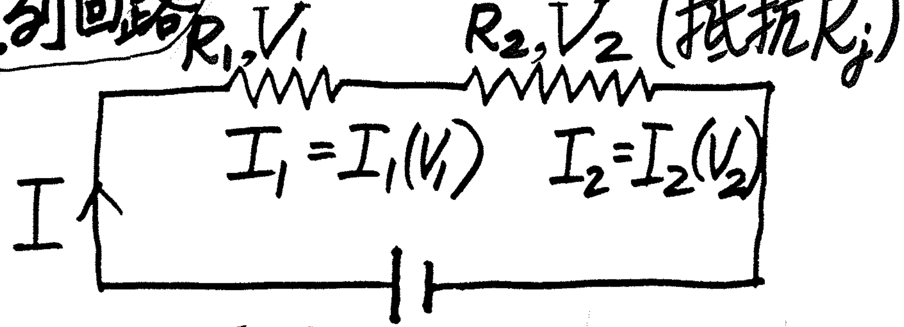
$$Q_i = \int_0^{F_i} J_i(F_i')dF_i' = \int_0^{F_i} \sigma_i(F_i')F_i'dF_i' = \int_0^{F_i} dF_i' \int_0^{\infty} dt\, e^{-\varepsilon t} \int_0^{\beta} d\lambda \sum_{j=1}^{n} \langle j_i(-i\hbar\lambda)\, j_j(t; F_k') \rangle_{eq}^{F_i'}$$

東西両巨人（久保とプリゴジン）の肩に乗って研究ができ幸運です。

◎新変分原理の物理的意味：ファインマンにならって簡単な例で本質を！

例示 ～異なる非線形伝導度を持つ2つの伝導体の比較～

直列回路



電圧 $V = V_1 + V_2$

$$I_j = V_j / R_j = V_j / R_j(V_j) \equiv I_j(V_j)$$

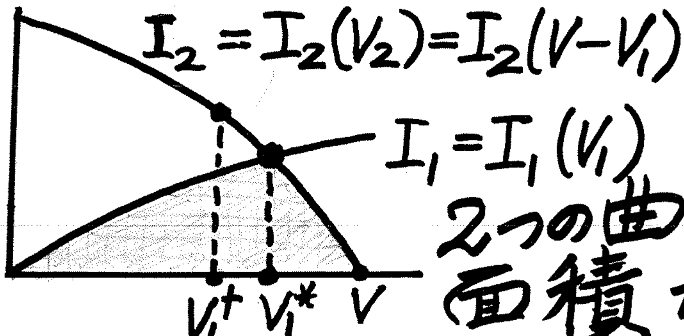
I_j は V_j の非線形関数

○抵抗が一定の線形の場合はファインマンが変分原理で扱った：

瞬間のジュール熱発生率 $W = V_1^2/R_1 + (V-V_1)^2/R_2$

が最小となるとして、$I_1 = V_1/R_1 = V_2/R_2 = I_2$ を導いた。

◎新変分原理：積分形のジュール熱発生率の和が最小



2つの曲線の下の面積が最小。

$$Q \equiv \int_0^{V_1} I_1(V_1')\,dV_1' + \int_0^{V-V_1} I_2(V_2')\,dV_2' = \text{最小。}$$

$$\frac{dQ}{dV_1} = I_1(V_1^*) - I_2(V-V_1^*) = 0$$

解 V_1^* をつける

$\therefore I_1 = I_2$ （定常解）

旧方式の"瞬間のジュール熱発生最小"の変分原理との比較

旧方式でジュール熱発生率を最小にすると非線形効果のために、正しい定常電流 $I_1=I_2$ が得られない。（線形の場合のみ正しい結果を与える。）

この旧方式で求めた解 W_1^{+}, W_2^{+} と新方式で求めた解 W_1^{*}, W_2^{*} とを比較すると、同じ定常値 V になるまでのエントロピー生成（ジュール熱発生率）が少ない方が、新原理では、旧方式より、大きなエントロピー生成が許される。逆に、旧方式で大きい方は、新原理では小さくなる。

これは、大変示唆的である。以上の結果は、一般の電気回路に拡張できる。同様に、他の非線形輸送現象にも一般的に新変分原理が成り立ち、上の例で示した興味深い教訓的な結論が導ける。◎ 新変分原理と旧方式との対応関係は量子力学とニュートン力学との関係に類似。

$$W \equiv W_1 + W_2$$

$$W_1 \equiv I_1(V_1)V_1$$

$$W_2 = I_2(V_2)V_2 ; V_2 = V - V_1$$

$$\frac{dW}{dV_1} = \left(I_1(V_1) - I_2(V_2)\right) + \left(I_1'(V_1)V_1 - I_2'(V_2)V_2\right) = 0$$

この解を $V_1^{+}, V_2^{+} = V - V^{+}$ とし、

$$W_1^{+} = I_1(V_1^{+})V_1^{+},$$

$$W_2^{+} = I_2(V_2^{+})V_2^{+}$$

とおき、正しい解

$$W_1^{*} = I_1(V_1^{*})V_1^{*}, \quad W_2^{*} = I_2(V_2^{*})V_2^{*}$$

と比較すると、$W_1^{+} < W_2^{+}$ のとき

$$W_1^{*} > W_1^{+}, \quad W_2^{*} < W_2^{+}$$