

熱力学における変分原理とフィンスラー構造

お茶の水女子大学 宇宙物理 大塚隆巧* (Takayoshi Ootsuka)

Physics Department, Ochanomizu University

1 フィンスラー多様体

我々は、以下で熱力学に内在すると思われるフィンスラー構造を考察し、それから統計的理論を構成する方法を検討しますが、その前に動力学の幾何学であるフィンスラー幾何および接触幾何を見ておきましょう。

運動学の幾何学は、一般的に良く知られるようになりました。ハミルトン系は、シンプレクティック幾何を用いて定式化されるのが当たり前になり、また、ラグランジュ系も、ジェット束を用いた定式化がなされています [1, 2]。ただしこれらは、時間変数を別にして取り扱っているので、相対論的な問題を扱う場合などには適せず、動力学の幾何学的定式化にはなっておりません。また、相対論とは関係の無い、カオス系や多体系、熱力学や統計力学、化学反応系や生物系などの一般力学系においても、系の発展を記述するパラメータを必ずしも“我々の時間”に取らなくてもよい筈です。時間変数を適切なものに取り替えただけで、劇的に簡単になる系があるかもしれませんし、違った振る舞いを見せる系も実は同じ性質のものと理解できるかもしれません。しかし、そのような時間変数の変更が自由に行えるという前提には、動力学までもが幾何学的に定式化されていなくてはなりません。

ラグランジュ系において、この時間変数を自由に選べる(共変性)という動力学の幾何学が、フィンスラー幾何学です。ハミルトン系においては接触幾何学がこれに当たります。

定義 1. (M, F) がフィンスラー多様体とは、

$$F(x, dx) : v \in T_x M \mapsto F(x, dx(v)) \in \mathbb{R}, \quad F(x, \lambda dx) = \lambda F(x, dx), \lambda > 0$$

なる、接ベクトルに長さを与える関数 $F(x, dx)$ が定義された多様体 M のことである。

数学ではもう少し、定義域や正值性に気を使った定義をします [3, 4]。物理に応用する際には、全ての $v \in T_x M$ に対して長さが定義されるとは限りませんし、正值性も気にしません。定義の後半の式は、ホモジニティー条件と呼ばれています。 M 上の有向曲線 C を F を使って測った長さ(フィンスラー距離) $\int_C F(x, dx)$ が、パラメータの取り方に依存しないで、幾何学的な長さを与えることを保証する条件です。

*E-mail: ootsuka@cosmos.phys.ocha.ac.jp

フィンスラー多様体の例を幾つか挙げましょう。先ず、リーマン多様体 (M, g) は、フィンスラー関数を $F(x, dx) = \sqrt{g_{ij}(x)dx^i dx^j}$ と定義すれば、フィンスラー多様体になることが直ちに分かります。次は、我々にとって非常に身近なフィンスラー多様体の例です。よく地図などにある“駅から徒歩何分”などというのがそれです。また、途中で坂などがあれば、往きと返りではその時間(フィンスラー距離)が違います。フィンスラー距離は、このように向きや方向によって異なる、リーマン距離の自然な一般化になっています。最後に、非常に重要なフィンスラー幾何学の例がラグランジュ系です。一般的に、配位空間 Q には幾何構造が存在しませんが、拡大配位空間である $M = \mathbb{R} \times Q$ には、ラグランジアンから自然に誘導されるフィンスラー構造が存在します。ラグランジアン $L(x, \dot{x}, t)$ が与えられた場合、拡大配位空間 M には、

$$F(t, x, dt, dx) = L\left(x, \frac{dx}{dt}, t\right)|dt|$$

なるフィンスラー構造を定義することができます。これを用いると、ラグランジュ系の作用量 $\mathcal{A}[\gamma]$ も、

$$\mathcal{A}[\gamma] = \int_{\gamma} F(x, dx) = \int_{s_0}^{s_1} F\left(x^{\mu}(s), \frac{dx^{\mu}(s)}{ds}\right) ds$$

として、 M 上の有向曲線 γ に対する幾何学的なフィンスラー長として定義することができます。有向曲線 γ は、系の発展を表していますから、変分原理 $\delta\mathcal{A}[\gamma_c] = 0$ によって決まる古典軌道 γ_c は、配位座標 (x^i) だけでなく、時間座標 $(x^0 = t)$ にも依らない幾何学的な曲線(測地線)として定義されることになります。

このようなラグランジュ系の幾何学的定式化は、比較的古くから知られていました[5, 6]が、最近では新しい教科書にも取り挙げられています[7, 8, 9]。そこでは、 F を基本1-形式と呼んだり、ポアンカレ・カルタン形式と呼んでいますが、数学ではフィンスラー関数に相当する[6]ということはいまだあまり明示されておられません。

2 共変ハミルトン形式

次は、フィンスラー・ラグランジュ形式から誘導される、共変的なハミルトン形式を見て行きましょう。フィンスラー関数 $F(x, dx)$ から正準運動量 p_{μ} を $p_{\mu} = \frac{\partial F}{\partial dx^{\mu}}$ として定義します。 F のホモジニティー条件から、 $F(x, dx) = p_{\mu}(x, dx)dx^{\mu}$ が成り立つことが分かります(オイラーの公式)から、 p_{μ} は0次のホモジニティー条件: $p_{\mu}(x, \lambda dx) = p_{\mu}(x, dx)$, $\lambda > 0$ を満たすことが分かります。従って、 $\frac{\partial p_{\mu}}{\partial dx^{\nu}} dx^{\nu} = 0$, ゆえに、 $\det\left(\frac{\partial p_{\mu}}{\partial dx^{\nu}}\right) = 0$ が導かれ、少なくともひとつの拘束条件 $G(x, p) = 0$ が存在していることが分かります。この関数 G は、共変的な形式ではハミルトニアンに相当します。また後の熱力学においては、状態方程式に相当することが分かります。共変ハミルトン形式における作用量 $\mathcal{A}[\tilde{\gamma}]$ は、ラグランジュの未定乗数 λ を用いて、

$$\mathcal{A}[\tilde{\gamma}] = \int_{\tilde{\gamma}} \left(p_{\mu} \frac{dx^{\mu}}{ds} - \lambda G \right) ds,$$

で与えられます。また、共変ハミルトン方程式は、

$$\begin{cases} \frac{dx^\mu}{ds} = \lambda \frac{\partial G}{\partial p_\mu}, \\ \frac{dp_\mu}{ds} = -\lambda \frac{\partial G}{\partial x^\mu}, \\ G = 0. \end{cases}$$

となります。 T^*M の部分多様体として定義される、

$$\Sigma = \{(x^\mu, p_\mu) \in T^*M; G(x, p) = 0\} \subset T^*M$$

には、接触 1-形式 $\Theta = p_\mu dx^\mu|_\Sigma$ が定義できて、 (Σ, Θ) は接触多様体になります。ここで接触形式 Θ とは、奇数次元の多様体 Σ 上で定義された 1-形式であって、

$$\Theta \wedge d\Theta \wedge \cdots \wedge d\Theta \neq 0$$

となるものです。上式の左辺は最大次の形式(トップ形式)です。この接触多様体 (Σ, Θ) こそが共変ハミルトン形式の幾何学的定式化であり、 Σ は拡大相空間に相当します。

運動方程式の解である古典軌道 $\gamma_c(\tilde{\gamma}_c)$ を用いて定義されるハミルトン主関数 W は、フィンスラー幾何学においては測地距離、

$$W(x_1, x_0) = \mathcal{A}[\gamma_c] = \int_{\gamma_c} p_\mu dx^\mu$$

に対応します。ここで、 x_0 および x_1 は、 γ_c の始点と終点を表します。始点、終点を変化させると、 $\delta W(x_1, x_0) = p_1 \delta x_1 - p_0 \delta x_0$ となって、 $p_\mu = \frac{\partial W}{\partial x^\mu}$ が導かれます。拘束条件 $G(x, p) = 0$ の中の p をこれで置き換えた式、 $G(x^\mu, \frac{\partial W}{\partial x^\mu}) = 0$ がハミルトン・ヤコビ方程式の共変形です。

3 熱力学における変分原理

熱力学の第 2 法則は、エントロピー関数 S を用いて、

$$dS \geq \frac{\delta Q}{T_{\text{ex}}} \quad (1)$$

と表現することができました。可逆過程の場合に等号が成立しますが、その時は熱力学第 1 法則も、

$$dS = \frac{1}{T} dE + \frac{p}{T} dV$$

と表すことができました。この熱力学を先程のフィンスラー・ラグランジュ形式と比較して見ますと、現実の軌道 $\Leftrightarrow$ 可逆過程、非現実軌道 $\Leftrightarrow$ 不可逆過程、ハミルトン主関数

$W \Leftrightarrow$ エントロピー関数 S に対応していることが分かります。ここで、熱配位空間 M を $M = \{(E, V)\}$ として、(1) 式の右辺を、

$$\frac{\delta Q}{T_{\text{ex}}} = F(E, V, dE, dV).$$

なるフィンスラー関数であると仮定すれば、熱力学における可逆過程 γ_c は、作用量 $\mathcal{A}[\gamma]$,

$$\mathcal{A}[\gamma] = \int_{\gamma} F(E, V, dE, dV)$$

を最大にする軌道 γ_c として変分原理の形に書き表すことができます。共変ハミルトン形式に移ってみましょう。すると、 $p_E = \frac{1}{T}$, $p_V = \frac{p}{T}$ ですから、正準変数 (E, V, p_E, p_V) の間に成り立つ拘束条件 G は、状態方程式であると考えねばなりません。

簡単な例題によって以上を整理しましょう。状態方程式 $G = pV - \frac{2}{3}E = p_V V - \frac{2}{3}p_E E = 0$ で与えられる単原子理想気体を取り上げましょう。このとき、 $\Sigma = \{(E, V, p_E, p_V); G = 0\}$, $\Theta = p_E dE + p_V dV|_{\Sigma}$ で定義された (Σ, Θ) は、接触多様体になるべきものであるはずなのですが、実は、状態方程式の特殊な関数形によって、このとき Θ はつぶれて $d\Theta \wedge \Theta = 0$ いて、接触形式にはなりません。したがって、別にゲージ拘束条件 $G_2(E, V, p_E, p_V) = 0$ を加え、共変ハミルトン形式での作用量は、

$$\mathcal{A}[\tilde{\gamma}] = \int_{\tilde{\gamma}} p_E dE + p_V dV + \lambda_1 (p_V V - \frac{2}{3}p_E E) ds + \lambda_2 G_2(E, V, p_E, p_V) ds.$$

と与えることになります。これより導かれる熱力学の共変ハミルトン方程式は、

$$\begin{cases} \frac{dE}{ds} = \frac{2}{3}\lambda_1 E - \lambda_2 \frac{\partial G_2}{\partial p_E}, & \frac{dV}{ds} = -\lambda_1 V - \lambda_2 \frac{\partial G_2}{\partial p_V}, \\ \frac{dp_E}{ds} = -\frac{2}{3}\lambda_1 p_E + \lambda_2 \frac{\partial G_2}{\partial E}, & \frac{dp_V}{ds} = \lambda_1 p_V + \lambda_2 \frac{\partial G_2}{\partial V}. \end{cases}$$

となります。この方程式から、 $p_E = \frac{3r}{2E}$, $p_V = \frac{r}{V}$, ($r = \text{定数}$) が得られます。前者の $E = \frac{3r}{2}T$ は、通常、理想気体を定義する際の定義式として仮定されますが、ここでは運動方程式の解として導かれています。

4 熱力学から統計力学へ

ファインマンの経路積分が、ラグランジュ系における変分原理の逆操作であり、古典力学において非現実である軌道の寄与も加え合わせることによって、古典力学よりもより基礎的な理論である量子力学を導けたように、我々の熱力学における変分原理を基にして、逆変分操作を行うことにより、不可逆過程の寄与も含んだ統計的な理論を構成する試みを紹介いたします。

我々は以前に、変分の逆操作である経路積分を、フィンスラー幾何学の観点から再考察し、測度を含め座標に依らない幾何学的な定式化を与えました [10]。この手法は、こ

の熱力学の場合にも適用することができます。これを標語で表しますと、

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}[\gamma_c] = 0 & \xrightarrow{\text{量子化}} \Psi = \int \delta \gamma \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{A}[\gamma] \right) \\ \delta \mathcal{A}[\gamma_c] = 0 & \xrightarrow{\text{統計化}} \mathcal{P} = \int \delta \gamma \exp \left(\frac{1}{k} \mathcal{A}[\gamma] \right) \end{aligned}$$

ということになります。このとき、後者の積分を古典解 $E = \frac{3}{2}T$ によって WKB 近似すれば、アインシュタイン・ボルツマン分布、

$$\mathcal{P}(X \rightarrow X') \propto \exp \left(\frac{1}{k} \Delta S \right)$$

が得られることが分かります。ですから、この手法により、一般的に不可逆過程を取り入れた、(非平衡系の)統計力学を熱力学(あるいは不可逆過程の熱力学)から構成することができるものと考えています。

我々の試みは、全く新しいものではありません。熱力学の解析力学は、[11, 12] などがあり、熱力学の幾何学化および統計化は [13] にも議論されております。ただ、我々の新しいところは、熱力学配位空間 M および熱力学相空間 Σ に、それぞれ状態方程式から誘導されるフィンスラー構造、ならびに接触構造が定義されること、さらにそれらの構造だけから我々の開発した幾何学的な逆変分操作(フィンスラー経路積分)を施すことによって、熱力学から不可逆過程を取り入れた統計理論を構成しようとするところです。また、我々は極値条件 (on shell) から離れたときにも存在するフィンスラー構造・接触構造に注目しているのに対し、[12, 13] などにおいては、主に on shell のハミルトン・ヤコビ理論を基に考察している点も異なっています。

参考文献

- [1] P. Olver, *Applications of Lie Groups to Differential Equations (2nd ed.)*, Springer 1993.
- [2] O. Krupkova, *The Geometry of Ordinary Variational Equations*, Springer 1997.
- [3] 松本誠, 計量微分幾何学, 裳華房, 1975.
- [4] S.S. チャーン, W.H. チェン, K.S. ラム, (島田英夫, V.S. サバウ 共訳), 微分幾何学講義, 培風館 2005.
- [5] C. Lanczos, *The Variational Principles of Mechanics (4th ed.)*, Dover 1986.
- [6] Y. Suzuki, “Finsler Geometry in Classical Physics”, Journal of the College of Arts and Sciences, Chiba university, Vol.2, No.1, (1956) 12-16.
- [7] 木村利栄, 菅野礼司, 微分形式による解析力学 (改訂増補版), 吉岡書店 1996.
- [8] 山本義隆, 中村孔一, 解析力学 I, II, 朝倉書店 1998.

- [9] H. Goldstein, C.P. Poole, J.F. Safko, *Classical Mechanics (3rd ed.)*, Pearson Education 2001.
- [10] T. Ootsuka, E. Tanaka, “Finsler Geometrical Path Integral”, *Physics Letters A* 374 (2010) 1917-1921.
- [11] R. Hermann, *Geometry, Physics, and Systems*, Marcel Dekker 1973
- [12] R. Mrugała, J.D. Nulton, J.C. Schön, P. Salamon, “Contact Structure in Thermodynamic Theory”, *Rep. Math. Phys.* **29** (1991) 109-121.
- [13] G. Ruppeiner, “Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory”, *Rev. Modern Phys.* 67 (1995) 605-659.