ながれ40（2021）38－45

〔解説〕

微分形式による粘性流体の定式化

DeepFlow 株式会社　深　川　宏　樹*

Formulation of Viscous Fluids with Differential Form

*Hiroki FUKAGAWA, DeepFlow, Inc.

*E-mail: hiroki.fukagawa@deepflow.co.jp

(Received 9 February 2020; revised 6 November 2020; accepted 7 December 2020; published 25 February 2021)

Hamilton's principle states that the trajectory of a physical system in the product space of its state space and time gives the stationary value of a functional. We describe the necessary condition by differential form and generalize it to dissipative systems where entropy satisfies a non-holonomic constraint. In this formulation, the pair of the functional and the constraint characterizes a physical system. It is consistent with symmetries and well-posedness. Moreover, the constraint on entropy satisfies the second law of thermodynamics and Onsager reciprocal relations. These requirements define the proper class of equations of motion. We use this method for viscous fluids such as a Newtonian fluid and a vapor-liquid system.

(**KEY WORDS**): Hamilton's principle, Differential form, Viscous fluid, Non-holonomic constraint

1　はじめに

各時刻での系の状態を状態空間上の点として記録すれば，運動は状態空間と時間との積空間上の曲線で表される．運動法則は曲線が満たすべき条件となり，変分原理は，これを「運動が描く曲線は汎関数に停留値を与える」という形で述べたものになる [1]．

最初に，ハミルトンの変分原理の必要条件を微分形式で書き表す．微分形式では，様々な演算が座標変換で不変であり，幾何学的な量の計算に便利である [2,3]．

次に，拘束のある系を微分形式で書き表す．拘束条件が物理量の値だけの関数で与えられない系を非ホロノミック系と呼ぶ．散逸系は非ホロノミック系になっており，熱力学的状態量であるエントロピーは他の物理量の関数にはならないが変位との間には関係がつく．本稿では，微分形式を使って散逸系を定式化し [4]，これを粘性流体に適用し，運動方程式を導出する．

物理系には，幾何学的な条件として時間並進，空間並進・回転の対称性を，熱力学的な条件として熱力学第二法則とオンサーガーの相反定理 [5,6] を満たすことが求められる．また，微分形式を使った定式化で導出される運動方程式と境界条件の組は良設定 [7] である必要がある．これらの要請を考慮するための理論を示し，粘性流体への適用例としてニュートン流体 [8–10] と同一物質による気液二相流体 [11,12] の運動方程式を導出する．

2　微分形式の導入

変数 $\boldsymbol{q} = (q^1, \cdots, q^n)$ の関数 $U(\boldsymbol{q})$ の全微分は $\mathrm{d}U(\boldsymbol{q}) = \frac{\partial U}{\partial q^i}\mathrm{d}q^i$ となる．これ以降，同じ項で添字が上下で重なる場合は，その添字の和を取る．ベクトル $\boldsymbol{X} = X^i\frac{\partial}{\partial q^i}$ との内部積 ι を $\iota_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{d}U) = \boldsymbol{X}(U) = X^i\frac{\partial U}{\partial q^i}$ で与える．関数を微分 0 形式と呼び，$f = f_i\mathrm{d}q^i$ の形になるものを 1 形式と呼ぶ．内部積 ι は $\iota_{\boldsymbol{X}}(f) = X^i f_i$ と計算する．

ウェッジ積 $\wedge$ を $\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}q^j = -\mathrm{d}q^j \wedge \mathrm{d}q^i$ を満たす演算と定める．明らかに $\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}q^i = 0$ となる．2 形式 $\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}q^j$ に対し，内部積 ι を

$$\begin{aligned} & \iota_{\boldsymbol{Y}}\iota_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}q^j) \\ = \; & \iota_{\boldsymbol{Y}}\left[(\iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}q^i)\mathrm{d}q^j - \mathrm{d}q^i(\iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}q^j)\right] \\ = \; & (\iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}q^i)(\iota_{\boldsymbol{Y}}\mathrm{d}q^j) - (\iota_{\boldsymbol{Y}}\mathrm{d}q^i)(\iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}q^j) \end{aligned} \tag{1}$$

と計算する．これは $\boldsymbol{X}$ と $\boldsymbol{Y}$ を辺とする平行四辺形の向きを考慮した面積になる．

1 形式の外微分 d を

$$\mathrm{d}f = \mathrm{d}(f_j\mathrm{d}q^j) = \mathrm{d}f_j \wedge \mathrm{d}q^j = \frac{\partial f_j}{\partial q_i}\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}q^j \tag{2}$$

で定める．$f = \mathrm{d}U$ ならば，明らかに $\mathrm{dd}U = 0$ となる．一般に外微分 d は冪零 $(\mathrm{dd} = 0)$ である．

1 形式の積分は線積分であり，2 形式の積分は面積分になる．どちらも向きがある．ストークスの定理より，

向き付きの面領域 S と境界 ∂S に対し，

$$\oint_{\partial S} f = \int_S \mathrm{d}f \tag{3}$$

となる．1 形式 f のベクトル $\boldsymbol{X}$ に沿ったリー微分 $\mathscr{L}_{\boldsymbol{X}}$ を差分の極限として

$$\begin{aligned} & \mathscr{L}_{\boldsymbol{X}}(f_i \mathrm{d}q^i) \\ := & \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha}\left(f_i(q^j+\alpha X^j)\mathrm{d}(q^i+\alpha X^i) - f_i(q^j)\mathrm{d}q^i\right) \\ = & \boldsymbol{X}(f_i)\mathrm{d}q^i + f_i \mathrm{d}X^i \end{aligned} \tag{4}$$

で定める．一方で，

$$\begin{aligned} & (\mathrm{d}\iota_{\boldsymbol{X}} + \iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d})(f_i \mathrm{d}q^i) \\ = & \mathrm{d}(\iota_{\boldsymbol{X}}(f_i\mathrm{d}q^i)) + \iota_{\boldsymbol{X}}(\mathrm{d}f_i \wedge \mathrm{d}q^i) \\ = & \mathrm{d}(X^i f_i) + \boldsymbol{X}(f_i)\mathrm{d}q^i - X^i \mathrm{d}f_i \\ = & \boldsymbol{X}(f_i)\mathrm{d}q^i + f_i\mathrm{d}X^i \end{aligned} \tag{5}$$

なり，微分 1 形式に対して $\mathscr{L}_{\boldsymbol{X}} = \mathrm{d}\iota_{\boldsymbol{X}} + \iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}$ となる．これは Cartan の公式と呼ばれ，任意の微分 n 形式についても同様に成り立つ [2,3]．

3 変分原理

力学での変分原理の一つであるハミルトンの原理 [1] の必要条件を微分形式で表し，最適制御理論の観点から更に一般化する．次に，対称性と保存則の関係を示す．最後に，拘束系および散逸系への拡張を行う．

3.1 ハミルトンの原理

時刻 t の質点の状態は位置 q と速度 u で与えられる．位置 q の時間発展は，$\mathrm{d}q/\mathrm{d}t = u$ より速度 u で定まり，(q,u,t) 空間で運動曲線 C_0 は

$$\int_{C_0} (\mathrm{d}q - u\mathrm{d}t) = 0 \tag{6}$$

を満たす．ハミルトンの原理によると，曲線 C_0 はラグランジアン $L(q,u)$ の時間積分に停留値を与える．α を媒介変数とする曲線 C_α について，$\lim_{\alpha\to 0} C_\alpha = C_0$ となり，$C_0 - C_\alpha$ が閉曲線をなせば，ハミルトンの原理は

$$\lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\oint_{C_0 - C_\alpha} L(q,u)\mathrm{d}t = 0 \tag{7}$$

と周回積分で表せる．ただし，式 (6) より q と u は独立ではなく，任意の未定乗数 p について，常に

$$\lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\oint_{C_0 - C_\alpha} p(\mathrm{d}q - u\mathrm{d}t) = 0 \tag{8}$$

を満たす．未定乗数法を用いて運動方程式を導出する．式 (7) と (8) の和から，$\tilde{\Xi} := L\mathrm{d}t + p(\mathrm{d}q - u\mathrm{d}t)$ として，ストークスの定理を用いれば，ハミルトンの原理は

$$0 = \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\oint_{\partial S_\alpha}\tilde{\Xi} = \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\int_{S_\alpha}\mathrm{d}\tilde{\Xi} \tag{9}$$

と表せる．ここで，C_α は (p,q,u,t) 空間上の曲線とし，$\partial S_\alpha = C_0 - C_\alpha$ とした．プレハミルトニアンを

$$\tilde{H}(p,q,u) := pu - L(q,u) \tag{10}$$

とすれば，$\tilde{\Xi} = p\mathrm{d}q - \tilde{H}\mathrm{d}t$ となり，

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\tilde{\Xi} &= \mathrm{d}p\wedge\mathrm{d}q - \mathrm{d}\tilde{H}\wedge\mathrm{d}t \\ &= \left(\mathrm{d}p + \frac{\partial\tilde{H}}{\partial q}\mathrm{d}t\right)\wedge\left(\mathrm{d}q - \frac{\partial\tilde{H}}{\partial p}\mathrm{d}t\right) \\ &\quad -\frac{\partial\tilde{H}}{\partial u}\mathrm{d}u\wedge\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{11}$$

を得る．運動曲線 C_0 の接ベクトルを

$$\boldsymbol{X}_{C_0} := \frac{\mathrm{d}C_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial q} + \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial t} \tag{12}$$

とし，変分を与えるベクトルを

$$\boldsymbol{Y}_{\boldsymbol{\alpha}} := \delta p_\alpha\frac{\partial}{\partial p} + \delta q_\alpha\frac{\partial}{\partial q} + \delta u_\alpha\frac{\partial}{\partial u} + \delta t_\alpha\frac{\partial}{\partial t} \tag{13}$$

とする．なお，δ は微小量を表す記号である．外積 $\times$ を用いて，向きを考慮した面積を $S_\alpha = \boldsymbol{X}_{C_0}\times\boldsymbol{Y}_\alpha$ とすれば，式 (9) より $\iota_{\boldsymbol{Y}_\alpha}[\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}\tilde{\Xi})] = 0$ を得る．ここで $\boldsymbol{Y}_\alpha$ は任意なので，

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}\tilde{\Xi}) = 0 \tag{14}$$

となり，式 (11) より，

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\tilde{H}}{\partial p},\ \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial\tilde{H}}{\partial q},\ \frac{\partial\tilde{H}}{\partial u} = 0 \tag{15}$$

を得る．$\partial\tilde{H}/\partial u = 0$ の解 $u^*(p,q)$ を式 (10) に代入し，ハミルトニアンを $H(p,q) := \tilde{H}(p,q,u^*(p,q))$ とすれば，運動方程式である正準方程式

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p},\ \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{16}$$

が得られる．

3.2 最適制御理論

最適制御理論の観点から，ハミルトンの原理を一般化する．質点の速度 u が位置 q の時間発展を決めることから，速度 u は状態量 q の制御とみなせる．一般的には，制御は $F(q,u)$ と関数で与えることができ，式 (6) は

$$\int_C (\mathrm{d}q - F(q,u)\mathrm{d}t) = 0 \tag{17}$$

とできる [13]．このとき，式 (10) のプレハミルトニアンは $\tilde{H}(p,q,u) := pF(q,u) - L(q,u)$ で再定義され，式 (11) 以降の議論と同様にして，最適制御 $u^*(p,q)$ 下での時間発展方程式 (16) が得られる [8,9]．

3.3 対称性と保存則

ネーターの定理は，系の連続的な対称性に応じた保存則が存在することを主張する．微分形式を使えば，これを簡単に示せる．移動 $\phi(\alpha) : (p_0, q_0, t_0) \mapsto (p_\alpha, q_\alpha, t_\alpha)$ で $\mathrm{d}\Xi := \mathrm{d}(p\mathrm{d}q - H\mathrm{d}t)$ が不変なとき，系は $\phi(\alpha)$ に関して対称性を持つと言う．移動が 1 径数変換群であり，

$$\boldsymbol{X}_\phi := \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\alpha} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial}{\partial q} + \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\alpha}\frac{\partial}{\partial t} \tag{18}$$

に対し，

$$0 = \mathscr{L}_{\boldsymbol{X}_\phi}(\mathrm{d}\Xi) = \mathrm{d}(\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}(\mathrm{d}\Xi)) \tag{19}$$

となれば，系は連続な対称性を持つと言う．ここで $\mathscr{L}_{\boldsymbol{X}_\phi}\mathrm{d} = (\mathrm{d}\iota_{\boldsymbol{X}_\phi} + \iota_{\boldsymbol{X}_\phi}\mathrm{d})\mathrm{d} = \mathrm{d}\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}\mathrm{d}$ を用いた．

もし，ある関数 $G(p,q)$ があって，

$$\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}(\mathrm{d}\Xi) = -\mathrm{d}G \tag{20}$$

となれば，式 (19) は満たされる．さらに $\boldsymbol{X}_\phi$ が，

$$\boldsymbol{X}_G := -\frac{\partial G}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial G}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q} \tag{21}$$

を用いて，$\boldsymbol{X}_\phi = \boldsymbol{X}_G$ で与えられれば，式 (16) から，

$$\begin{aligned}\iota_{\boldsymbol{X}_G}(\mathrm{d}\Xi) &= \iota_{\boldsymbol{X}_G}(\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q) - \boldsymbol{X}_G(H)\mathrm{d}t \\ &= -\mathrm{d}G - \left(\frac{\partial G}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q} - \frac{\partial G}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p}\right)\mathrm{d}t \\ &= -\mathrm{d}G + \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t \end{aligned}\tag{22}$$

となり，式 (20)–(22) から保存則 $\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t} = 0$ を得る．

例えば，式 (21) の G をハミルトニアン H に変えて，$\boldsymbol{X}_\phi = \boldsymbol{X}_H + \frac{\partial}{\partial t}$ とすれば，これは式 (16) より時間並進のベクトルとなる．式 (20) で $G = 0$ とすれば，

$$\begin{aligned}0 &= \iota_{(\boldsymbol{X}_H + \frac{\partial}{\partial t})}(\mathrm{d}\Xi) \\ &= \iota_{\boldsymbol{X}_H}(\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q) - \boldsymbol{X}_H(H)\mathrm{d}t + dH \\ &= \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}t \end{aligned}\tag{23}$$

となり，保存則 $\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0$ を得る．式 (16) の下で式 (20) から導かれる G の保存則と $\boldsymbol{X}_\phi$ との関係は，ネーターの定理と呼ばれる [1)]．

3.4 拘束系の運動法則

状態量間に拘束条件が課せられた系の運動方程式を導出する．ラグランジアン L を (q, u, s) の関数とする．状態量 s が他の状態量の関数 $W(q,t)$ となるとき，

$$0 = U(s,q,t) := s - W(q,t) \tag{24}$$

となり，この形で与えられる拘束条件をホロノミック拘束条件と呼ぶ [1)]．未定乗数 T に対し，

$$0 = \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\int_{\partial S_\alpha} TU\mathrm{d}t = \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\int_{S_\alpha}\mathrm{d}(TU\mathrm{d}t) \tag{25}$$

となる．式 (24) を考慮すれば，$\mathrm{d}(TU\mathrm{d}t) = T\mathrm{d}U \wedge \mathrm{d}t$ となる．ここで微分 1 形式

$$\beta := T\mathrm{d}s + f\mathrm{d}q + Q\mathrm{d}t \tag{26}$$

を導入する．このとき，

$$\beta = T\mathrm{d}U \tag{27}$$

であれば，$f = T\frac{\partial U}{\partial q}$ と $Q = T\frac{\partial U}{\partial t}$ となり，式 (25) から $S_\alpha = \boldsymbol{X}_{C_0} \times \boldsymbol{Y}_\alpha$ として $\iota_{\boldsymbol{Y}_\alpha}[\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\beta)] = 0$ が導かれる．ここで $\boldsymbol{Y}_\alpha$ が任意なので，(p,q,u,s,t,T) 上の曲線 C_0 の接ベクトル $\boldsymbol{X}_{C_0}$ について，次が示せる．

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}\beta = 0 \tag{28}$$

未定乗数法を用いれば，式 (14) と同様にして $\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}(\tilde{\Xi} + TU\mathrm{d}t)) = 0$ を得る．この式は

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t) = 0 \tag{29}$$

と式 (28) との組に分解できる．本稿において，式 (29) は拘束系の運動を表現する重要な式であり，以降の議論の起点となる．なお，$\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t$ は，

$$\begin{aligned}&\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q - (\mathrm{d}\tilde{H} - \beta) \wedge \mathrm{d}t \\ =\ &\left[\mathrm{d}p + \left(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q} - f\right)\mathrm{d}t\right] \wedge \left(\mathrm{d}q - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}\mathrm{d}t\right) \\ &- \left(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial s} - T\right)\mathrm{d}s \wedge \mathrm{d}t - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u}du \wedge \mathrm{d}t \end{aligned}\tag{30}$$

と計算でき，式 (29) より，

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p},\quad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q} + f, \tag{31}$$

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial s} - T = 0,\quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} = 0 \tag{32}$$

を得る．以上から，運動は式 (28)，(31)，(32) を満たす．

式 (30) の計算では式 (24) を使ってない．拘束系の定式化を式 (28) と (29) で行えば，運動方程式 (31) と (32) を得る．一般に式 (24) で表せない拘束条件を非ホロノミック拘束条件と呼ぶ [1,4)]．非ホロノミック系でも，拘束条件が式 (28) で与えられれば，式 (29) から運動方程式が導ける．

3.5 拘束系の対称性と保存則

式 (20) の議論を踏まえて，式 (30) が $\boldsymbol{X}_\phi$ に関して，

$$\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}(\mathrm{d}\Xi + \beta \wedge \mathrm{d}t) = \mathrm{d}G \tag{33}$$

となる G があるときの保存則を調べよう．連続的な対称性とは式 (19) を指す言葉であるが，式 (33) を満たすときも使うとしよう．もし，ある適当な関数 δs を使って，$\boldsymbol{X}_\phi = \boldsymbol{X}_G + \delta s\frac{\partial}{\partial s}$ で式 (20) が満たされれば，

$$\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}\beta = 0 \tag{34}$$

となり，保存則は $\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}=0$ となる．時間並進対称性は $\boldsymbol{X}_\phi=\boldsymbol{X}_H+\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial s}+\frac{\partial}{\partial t}$ で与えられ，式 (23) と同様に $G=0$ のとき，

$$\left(\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}+Q\right)\mathrm{d}t=0 \tag{35}$$

となる．ここで s をエントロピーとすれば，式 (35) はエネルギー保存則を表し，H の値は系の総エネルギーを表し，Q の値は単位時間あたりに系外へ流出する熱量を表す．

4 場の理論

前節までの内容を場の理論として拡張する．

4.1 場の微分形式

数学的には場は底空間からの切断である．底空間座標を $\boldsymbol{x}=(x^1,x^2,x^3)$ とし，場の共変微分 $\nabla_{\partial/\partial x^j}$ を ∇_j と書く．スカラー場には ∇_j は偏微分 ∂_j になる．本稿ではレビ・チビタ接続で共変微分を与える．計量テンソル $g_{ij}\mathrm{d}x^i\otimes\mathrm{d}x^j$ は $\nabla_k g_{ij}=0$ を満たす．つまり計量を保存する．計量 g_{ij} を $\boldsymbol{x}$ の関数として，$\sqrt{g}:=\sqrt{|\mathrm{det}g_{ij}|}$ とすれば，体積要素は $*1=\sqrt{g}\mathrm{d}x^1\wedge\mathrm{d}x^2\wedge\mathrm{d}x^3$ と書ける．

場を r^i とし，関数 $f(r^i,\nabla_j r^i)$ の外微分 $\mathrm{d}f$ を

$$\begin{aligned}&\frac{\partial f}{\partial r^i}\mathrm{d}r^i+\frac{\partial f}{\partial\nabla_j r^i}\nabla_j(\mathrm{d}r^i)\\ =&\left(\frac{\partial f}{\partial r^i}-\nabla_j\frac{\partial f}{\partial\nabla_j r^i}\right)\mathrm{d}r^i+\nabla_j\left(\frac{\partial f}{\partial\nabla_j r^i}\mathrm{d}r^i\right)\end{aligned} \tag{36}$$

と定め，ベクトル場 $\boldsymbol{X}=X^i\frac{\partial}{\partial r^i}$ との内部積を

$$\iota_{\boldsymbol{X}}\mathrm{d}f=X^i\left(\frac{\partial f}{\partial r^i}-\nabla_j\frac{\partial f}{\partial\nabla_j r^i}\right)+\nabla_j\left(X^i\frac{\partial f}{\partial\nabla_j r^i}\right) \tag{37}$$

と定める．

4.2 場の運動法則

場の運動法則を式 (28) と (29) に対応する形で与える．場 (p_i,q^i,s,u^i) の運動方程式を求めよう．プレハミルトニアン密度を $\tilde{\mathcal{H}}(p_i,q^i,\partial_j q^i,s,u^i)$ とする．ここで q^i をスカラー場とした．微分形式 $\tilde{\Xi}$ を

$$\tilde{\Xi}:=*1\wedge\left(p_i\mathrm{d}q^i-\tilde{\mathcal{H}}\mathrm{d}t\right) \tag{38}$$

で定め，式 (26) に対応して，未定乗数場 λ を用いて，

$$\beta:=*1\wedge\left(\lambda\mathrm{d}s+\zeta_i\mathrm{d}q^i+\eta_i^j\partial_j(\mathrm{d}q^i)+Q\mathrm{d}t\right) \tag{39}$$

を定める．ζ_i,η_i^j,Q は場とその共変微分の関数である．式 (38) と (39) より $\mathrm{d}\tilde{\Xi}+\beta\wedge\mathrm{d}t$ は

$$\begin{aligned}*1\wedge\Biggl\{&\left[\mathrm{d}p_i+\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial q^i}-\nabla_j\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\partial_j q^i)}-\left(\zeta_i-\nabla_j\eta_i^j\right)\right)\mathrm{d}t\right]\\ &\wedge\left(\mathrm{d}q^i-\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial p_i}\mathrm{d}t\right)-\left[\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial u^i}\mathrm{d}u^i+\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial s}-\lambda\right)\mathrm{d}s\right]\wedge\mathrm{d}t\\ &-\nabla_j\left[\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\partial_j q^i)}-\eta_i^j\right)\mathrm{d}q^i\wedge\mathrm{d}t\right]\Biggr\}\end{aligned} \tag{40}$$

となる．時間と場との積空間上にある運動曲線 C_0 の接ベクトルを $\boldsymbol{X}_{C_0}=\frac{\partial p_i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial p_i}+\frac{\partial q^i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial q^i}+\frac{\partial u^i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial u^i}+\frac{\partial s}{\partial t}\frac{\partial}{\partial s}+\frac{\partial}{\partial t}$ とし，変分を与えるベクトルを $\boldsymbol{Y}_{\boldsymbol{\alpha}}=\delta p_{\alpha i}\frac{\partial}{\partial p_i}+\delta q_\alpha^i\frac{\partial}{\partial q^i}+\delta u_\alpha^i\frac{\partial}{\partial u^i}+\delta s_\alpha\frac{\partial}{\partial s}+\delta t_\alpha\frac{\partial}{\partial t}$ とすれば，運動法則は式 (28) と

$$\int_V\left[\iota_{\boldsymbol{Y}_\alpha}\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}\left(\mathrm{d}\tilde{\Xi}+\beta\wedge\mathrm{d}t\right)\right]=0 \tag{41}$$

で与えられる．V は底空間の積分領域である．式 (40) と (41) より，境界条件

$$\int_V\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\sqrt{g}\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\partial_j q^i)}-\eta_i^j\right)\left(\frac{\mathrm{d}q_\alpha^i}{\mathrm{d}t}\delta t-\delta q_\alpha^i\right)\right]=0 \tag{42}$$

を得る．ここでベクトル場 v^i に対し一般的に

$$(\nabla_i v^i)*1=\partial_i(\sqrt{g}v^i)\mathrm{d}x^1\wedge\mathrm{d}x^2\wedge\mathrm{d}x^3 \tag{43}$$

となることを用いた．ディリクレ境界条件

$$\delta q_\alpha^i(\boldsymbol{x})=\delta t=0,\ \boldsymbol{x}\in\partial V \tag{44}$$

は式 (42) を満たし，境界 ∂V 上での (q^i,t) の値を指定する．以降の境界条件を式 (44) で与える．

4.3 場の対称性と保存則

対称性と保存則の関係を調べる．3.5 節の議論を踏襲する．ハミルトニアン密度 $\mathcal{H}$ が求まったとする．ベクトル $\boldsymbol{X}_\phi$ が

$$\int_V\iota_{\boldsymbol{Y}}\mathrm{d}\left(\iota_{\boldsymbol{X}_\phi}(\mathrm{d}\Xi+\beta\wedge\mathrm{d}t)\right)=0 \tag{45}$$

を満たす例を探そう．ある関数 $G(p_i,q^i,\partial_j q^i)$ があり，

$$\boldsymbol{X}_G=-\left(\frac{\partial G}{\partial q_i}-\nabla_j\frac{\partial G}{\partial(\partial_j q^i)}\right)\frac{\partial}{\partial p_i}+\frac{\partial G}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q^i} \tag{46}$$

としたとき，$\iota_{\boldsymbol{X}_G}(\mathrm{d}\Xi+\beta\wedge\mathrm{d}t)$ は

$$\begin{aligned}*1\wedge\Biggl\{&-\mathrm{d}G+\nabla_j\left(\frac{\partial G}{\partial(\partial_j q^i)}\mathrm{d}q^i\right)\\ &+\left[\frac{\partial G}{\partial t}+\nabla_j\left(-\frac{\partial G}{\partial(\partial_j q^i)}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial p_i}\right.\right.\\ &+\left.\left.\left(\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial(\partial_j q^i)}-\eta_i^j\right)\frac{\partial G}{\partial p_i}\right)\right]\mathrm{d}t\Biggr\}\end{aligned} \tag{47}$$

となる．式 (45) で $\boldsymbol{X}_\phi=\boldsymbol{X}_G+\delta s\frac{\partial}{\partial s}$ とすれば，式 (47) の第 1 項と第 2 項は，それぞれ冪零 $\mathrm{dd}=0$ と境界条件 (44) により消える．第 3 項の $\mathrm{d}t$ の係数がゼロになる条件は G に関する保存則を表す．

底空間での移動 ϕ に空間並進・回転がある．場を r とし，$\boldsymbol{\alpha}=(\alpha^1,\alpha^2,\alpha^3)$ が十分に小さいとする．空間並進は $r(\boldsymbol{x})\mapsto r(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\alpha})\approx r(\boldsymbol{x})+\alpha^i\nabla_i r(\boldsymbol{x})$ で与えられて，式 (46) において，$G_j=p_i\partial_j q^i$ となる．一方，空間回転は $r(\boldsymbol{x})\mapsto r(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{x})\approx r(\boldsymbol{x})+\alpha^l\epsilon_{lm}^k x^m\nabla_k r(\boldsymbol{x})$ となり，

$G_j = \varepsilon^l_{jk} x^k p_i \partial_l q^i$ となる．ここで，ε_{jkl} をエディントンのイプシロン，g^{lm} を g_{kl} の逆行列とし，$\epsilon^k_{lm} := g^{kn}\epsilon_{nlm}$ とした．これより，添字の上げ下げが計量 g_{ij} を介在して行われるとする．

空間並進と空間回転について β が式 (34) を満たすとしよう．空間並進では，式 (34) で $\boldsymbol{X}_\phi = (\nabla_k r^i)\frac{\partial}{\partial r^i}$ となり，式 (39) の d を ∇_k に置き換える．

$$\gamma_k := \lambda\partial_k s + \zeta_i \partial_k q^i + \eta^j_i \nabla_k(\partial_j q^i) = 0 \tag{48}$$

空間回転では，式 (34) で $\boldsymbol{X}_\phi = \epsilon^k_{lm} x^m \nabla_k r^i \frac{\partial}{\partial r^i}$ となり，

$$\epsilon^k_{lm}\left[x^m\gamma_k + \eta^m_i\left(\partial_k q^i\right)\right] = 0 \tag{49}$$

を得る．式 (49) の $x^m\gamma_k$ は式 (48) よりゼロとなるので，$\sigma^{nm} := g^{nk}\eta^m_i\left(\partial_k q^i\right)$ は $\epsilon_{nlm}\sigma^{nm} = 0$ より対称テンソルとなる．式 (48) と (49) より，

$$\zeta_i = -\lambda(\partial_k s)\frac{\partial x^k}{\partial q^i} - \left(\sigma^m_h \frac{\partial x^h}{\partial q^l}\frac{\partial x^k}{\partial q^i}\right)\left(\nabla_m \partial_k q^l\right) \tag{50}$$

を得る．ここで $\frac{\partial x^j}{\partial q^k}$ は $\partial_k q^j$ の逆行列である．式 (50) を式 (39) に代入すれば，

$$\beta = *1\wedge\left\{\lambda\left[\mathrm{d}s + (\partial_j s)\mathrm{d}'X^j\right] - \sigma^i_j\nabla_i(\mathrm{d}'X^j) + Q\mathrm{d}t\right\} \tag{51}$$

となる．ここで

$$\mathrm{d}'X^j := -\frac{\partial x^j}{\partial q^k}\mathrm{d}q^k \tag{52}$$

とした．なお，d' は外微分を意味せず，式 (52) のみに使う記号とする．式 (51) の導出には，δ^k_j をクロネッカーのデルタとし，$0 = \partial_m\delta^k_j = \partial_m\left(\frac{\partial x^k}{\partial q^l}\frac{\partial q^l}{\partial x^j}\right) = \partial_m\left(\frac{\partial x^k}{\partial q^l}\right)\frac{\partial q^l}{\partial x^j} + \frac{\partial x^k}{\partial q^l}\partial_m\left(\frac{\partial q^l}{\partial x^j}\right)$ を使った．

5 粘性流体

粘性流体の運動方程式を導出する．

5.1 ラグランジュ座標

オイラー描像での流体粒子の位置変化を知るためには，底空間に固定された座標点 $\boldsymbol{x} = (x^1, x^2, x^3)$ 上の流体粒子の初期位置，つまり，ラグランジュ座標 $\boldsymbol{q} = (q^1, q^2, q^3)$ の時間変化を知ればよい．なお，ラグランジュ座標 $\boldsymbol{q}$ は固定された座標点 $\boldsymbol{x}$ 上を通り過ぎていく流体粒子を区別するためのラベルとして用いただけであり，$\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{x}$ とが一対一対応さえしていれば良い [14)]．つまり，$\frac{\partial(q^1,q^2,q^3)}{\partial(x^1,x^2,x^3)} \neq 0$ を満たせば，$\boldsymbol{q}$ はラグランジュ座標に限らず何でも良い．底空間の座標変換をしても q^i の値を変える必要は無く，$\boldsymbol{q}$ はスカラー場の組になる．

速度場 $\boldsymbol{u} = u^i\partial_i$ に沿った物理量の時間変化は，リー微分 $\frac{\partial}{\partial t} + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}$ で与えられる．流体粒子のラベルを表すスカラー場 $q^i(t, \boldsymbol{x})$ は

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}\right) q^i = D_t q^i \tag{53}$$

を満たす．ここで $D_t := \frac{\partial}{\partial t} + u^j\partial_j$ とし，

$$\mathscr{L}_{\boldsymbol{u}} q^i = \lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\alpha}\left(q^i(x^j + \alpha u^j) - q^i(x^j)\right) = u^j\partial_j q^i \tag{54}$$

を用いた．なお，$\mathscr{L}_{\boldsymbol{u}} = \mathrm{d}\iota_{\boldsymbol{u}} + \iota_{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}$ とし，スカラー場 q^i と $\boldsymbol{u}$ との内部積を $\iota_{\boldsymbol{u}} q^i = 0$ で定義して計算することもできる．式 (53) と $*1$ とのウェッジ積 $\wedge$ に，未定乗数 p_i をかければ，

$$*1\wedge p_i\left[\mathrm{d}q^i + (u^j\partial_j q^i)\mathrm{d}t\right] = 0 \tag{55}$$

を得る．

5.2 質量保存則

質量密度を $\rho(t, \boldsymbol{x})$ とすれば，質量保存則は

$$\begin{aligned} 0 &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}\right)(\rho * 1\wedge \mathrm{d}t) \\ &= \left[\frac{\partial(\sqrt{g}\rho)}{\partial t} + \partial_i(\sqrt{g}\rho u^i)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\wedge\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{56}$$

となる．ここで $\mathrm{d}(\rho(t,\boldsymbol{x}) * 1\wedge\mathrm{d}t) = 0$ を使った．式 (56) より，式 (43) と (52)，$\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{g} = 0$ を用いて，

$$B := *1\wedge\kappa\left[\mathrm{d}\rho + \nabla_i(\rho\mathrm{d}'X^i)\right] \tag{57}$$

を定める．ここで κ は未定乗数である．

5.3 運動方程式の導出

流体は局所的熱平衡にあり，単位質量密度あたりのエントロピー，つまり比エントロピー密度 s が定まる．式 (51) で s の拘束条件を与える．比エネルギー密度を $\epsilon(\rho, s)$ で与え，圧力 P と温度 T は $\mathrm{d}\epsilon = -P\mathrm{d}\rho^{-1} + T\mathrm{d}s$ の関係を満たすものと定めれば，

$$P = -\frac{\partial\epsilon}{\partial\rho^{-1}} = \rho^2\frac{\partial\epsilon}{\partial\rho},\ T = \frac{\partial\epsilon}{\partial s} \tag{58}$$

となる．

ラグランジアン密度 $\mathcal{L}$ は運動エネルギーと内部エネルギーの密度差で与えられ，

$$\mathcal{L}(\rho, s, \boldsymbol{u}) = \rho\left(\frac{u^2}{2} - \epsilon(\rho, s)\right) \tag{59}$$

となる．ここで $u^2 := g_{ij}u^i u^j$ とした．微分形式 $\tilde{\Xi}$ を

$$\begin{aligned} \tilde{\Xi} &= *1\wedge\left[\mathcal{L}\mathrm{d}t + p_i\left(\mathrm{d}q^i + (u^j\partial_j q^i)\mathrm{d}t\right)\right] \\ &= *1\wedge\left(p_i\mathrm{d}q^i - \tilde{\mathcal{H}}\mathrm{d}t\right) \end{aligned} \tag{60}$$

で与える．プレハミルトニアン密度を

$$\tilde{\mathcal{H}} = -p_i u^j\partial_j q^i - \rho\left(\frac{u^2}{2} - \epsilon(\rho, s)\right) \tag{61}$$

とする．

このとき，$\mathrm{d}\tilde{\Xi}+(\beta+B)\wedge\mathrm{d}t$ は

$$\begin{aligned}&*1\wedge\Biggl\{\Biggl[\mathrm{d}p_k-\Biggl(\nabla_i\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\partial_i q^k)}\\&-\left(\rho\partial_j\kappa-\nabla_i\sigma^i_j-\lambda\partial_j s\right)\frac{\partial x^j}{\partial q^k}\Biggr)\mathrm{d}t\Biggr]\\&\wedge\left(\mathrm{d}q^k-\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial p_k}\mathrm{d}t\right)\\&-\left[\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial u^i}\mathrm{d}u^i+\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial s}-\lambda\right)\mathrm{d}s+\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\rho}-\kappa\right)\mathrm{d}\rho\right]\wedge\mathrm{d}t\\&-\nabla_i\left[\left(\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\partial_i q^k)}+\left(\rho\kappa\delta^i_j-\sigma^i_j\right)\frac{\partial x^j}{\partial q^k}\right)\mathrm{d}q^k\wedge\mathrm{d}t\right]\Biggr\}\end{aligned}\tag{62}$$

となる．第 1 項より，式 (56) を用いて，

$$D_t\left(\frac{p_k}{\rho}\right)\frac{\partial q^k}{\partial x^j}=-\partial_j\left(\frac{u^2}{2}\right)+\frac{1}{\rho}(\partial_j P-\nabla_i\sigma^i_j)\tag{63}$$

を得る．第 2 項より $\rho u_k+p_j\partial_k q^j=0$ となり，

$$\boldsymbol{u}^\flat+\frac{p_j}{\rho}\mathrm{d}q^j=0\tag{64}$$

を得る．ここで $\boldsymbol{u}^\flat:=(g_{ij}u^i)\mathrm{d}x^j$ とした．第 3 項より，$\lambda=\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial s}=\rho\frac{\partial\epsilon}{\partial s}=\rho T$ となる．第 4 項より，$\kappa=\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\rho}=-\frac{1}{2}u^2+h$ を得る．ここで $h:=\epsilon+\frac{P}{\rho}$ はエンタルピーである．これの全微分は $\mathrm{d}h=\frac{\mathrm{d}P}{\rho}+T\mathrm{d}s$ となる．速度場の時間発展方程式を求めよう．式 (64) に $\frac{\partial}{\partial t}+\mathscr{L}_{\boldsymbol{u}}$ を作用させ，式 (53) と (63) を用いれば，速度場の時間発展方程式

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}^\flat}{\partial t}+\mathrm{d}\left(\frac{u^2}{2}\right)+\iota_{\boldsymbol{u}}\mathrm{d}\boldsymbol{u}^\flat+\frac{1}{\rho}\left(\mathrm{d}P-\nabla\cdot\sigma\right)=0\tag{65}$$

が得られる．ここで $\nabla\cdot\sigma:=(\nabla_i\sigma^i_j)\mathrm{d}x^j$ とする．通常のベクトル解析での記法を使えば，

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial t}+\mathrm{grad}\frac{u^2}{2}-\boldsymbol{u}\times\mathrm{rot}\boldsymbol{u}+\frac{1}{\rho}\left(\mathrm{grad}P-\nabla\cdot\sigma\right)=0\tag{66}$$

となる [14)]．式 (65) の導出に，式 (53) より $(\partial_t+\mathscr{L}_{\boldsymbol{u}})\mathrm{d}q^k=dD_tq^k=0$ となり，

$$(\partial_t+\mathscr{L}_{\boldsymbol{u}})\left(\frac{p_k}{\rho}\mathrm{d}q^k\right)=D_t\left(\frac{p_k}{\rho}\right)\mathrm{d}q^k\tag{67}$$

となることを使った．式 (62) の最終項から境界条件 (44) は境界での流れ場となる．また，速度場 $\boldsymbol{u}$ が式 (65) を満たすとき，式 (47) より，運動量保存，角運動量保存，エネルギー保存の式が得られる．

5.4 熱力学第二法則とオンサーガーの相反定理

熱力学第二法則とオンサーガーの相反定理から式 (51) の σ^i_j と Q を求めよう．式 (28) に対応して，$\lambda=\rho T$ に注意すれば，

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}\beta=*1\wedge\left(TD_ts-\sigma^i_j\nabla_iu^j+Q\right)=0\tag{68}$$

を得る．一方で，エントロピーの時間発展方程式は散逸関数 Θ とエントロピー流束 J^i を用いて，

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho s)-\Theta+\nabla_iJ^i=0\tag{69}$$

と書ける [14)]．式 (68) と比べて，$Q=\nabla_iJ^i_Q$ として，

$$\Theta=\frac{\sigma^i_j}{T}\nabla_iu^j+J^i_Q\partial_i\left(\frac{1}{T}\right),\tag{70}$$

$$J^i=\rho su^i+\frac{J^i_Q}{T}\tag{71}$$

となる．熱力学第二法則は $J^i=0$ となる孤立系ではエントロピーは増大することを主張する．つまり，$\Theta\geqq 0$ となるように σ^i_j と J^i_Q が定まる．

散逸関数 Θ は不可逆的流れと熱力学的力の積となる．線形熱力学では，熱力学的力を χ_i とし，輸送係数を L^{ij} とすれば，不可逆流れは $L^{ij}\chi_i$ となる．オンサーガーの相反定理から，輸送係数は対称 ($L^{ij}=L^{ji}$) となる [5,6)]．

この L^{ij} を用いて，散逸関数は二次形式 $\Theta=L^{ij}\chi_i\chi_j$ で与えられる．なお，L^{ij} が対称であることは熱力学的力の基底の選び方によらない．式 (70) において，粘性テンソル σ^{ij} は対称テンソルなので，歪速度テンソル $e_{ij}:=\left(\nabla_ju_i+\nabla_iu_j\right)/2$ を用いて，$\sigma^{ij}\nabla_iu_j=\sigma^{ij}e_{ij}$ となる．熱力学的力を $\boldsymbol{\chi}=(e_{ij},\partial_j(1/T))$ とすれば，

$$\frac{\sigma^{ij}}{T}=L^{\sigma^{ij}\sigma^{kl}}e_{kl}+L^{\sigma^{ij}\epsilon^k}\partial_k\left(\frac{1}{T}\right),\tag{72}$$

$$J_Q{}^i=L^{\epsilon^i\sigma^{kl}}e_{kl}+L^{\epsilon^i\epsilon^j}\partial_i\left(\frac{1}{T}\right)\tag{73}$$

となる．例えば，ニュートン流体では，ずり粘性 ζ_s，体積粘性 ζ_b，熱伝導率 ξ を用いて，輸送係数は，

$$L^{\sigma^{ij}\sigma^{kl}}=T\left[2\zeta_sg^{ik}g^{jl}+\left(\zeta_b-\frac{2}{3}\zeta_s\right)g^{ij}g^{kl}\right],\tag{74}$$

$$L^{\epsilon^i\epsilon^j}=\xi g^{ij},\tag{75}$$

$$L^{\sigma^{ij}\epsilon^k}=L^{\epsilon^i\sigma^{kl}}=0\tag{76}$$

で与えられ，オンサーガーの相反定理は満たされる [15)]．式 (72) より，式 (65) はナビエ・ストークス方程式となる．

5.5 良設定問題

微分方程式が境界条件と合わせて，次の意味で適切に設定されるとき，良設定または適切な問題と言う [7)]．

1. 解が存在する．
2. 解がただ一つである．
3. 解が境界条件に対して連続的に変化する．

条件 1 と 2 は，境界条件が過不足ないことを意味する．一般に，境界条件が多すぎると解は存在せず，少なすぎると解は定まらない．条件 3 は，初期条件や境界条件を少しずらしても解は少ししかずれないことを意味する．

流体の運動が方程式の解として決定されるためには，初期条件と境界条件が適切に指定される必要がある．注1) 初期条件としては初期時刻での $(\boldsymbol{q}, s, \boldsymbol{u})$ の値が必要であり，境界条件としては流体領域の境界面 V でのエントロピー流束 J^i とラグランジュ座標 q^i の値が必要である．エントロピーの式 (69) より境界面でのエントロピー流束 J^i が要求される．一方，式 (62) では流体の運動方程式の導出の際にディリクレ境界条件 (44) を用い，境界 ∂V で時刻 t での q^i は指定した．例えば，固定された壁面での滑りなし条件は $\frac{\partial}{\partial t} q^i(t, \boldsymbol{x}) = 0, \boldsymbol{x} \in \partial V$ で与えられる．

6 気液二相流体

同一物質による気液二相流体の運動方程式を求める．気液界面エネルギーと潜熱流束の関係を良設定問題の観点から明らかにし，速度場の式を修正する．

6.1 界面エネルギーと潜熱流束

界面エネルギーと潜熱流束の関係を求めよう．水蒸気と水のように，同一物質の気液界面では急激に密度 ρ が変化し，密度勾配の二乗 $|\nabla\rho|^2$ は大きくなる．界面エネルギーを密度勾配の関数としてモデル化し [17]，比内部エネルギーを $\epsilon(\rho, \partial_i \rho, s)$ で与えれば，

$$\mathrm{d}(\rho\epsilon) = h\mathrm{d}\rho + \rho T \mathrm{d}s + \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \mathrm{d}\partial_i \rho \tag{77}$$

となる．$\mathrm{d}\tilde{\Xi} + (\beta + B) \wedge \mathrm{d}t$ を計算すると，

$$\begin{aligned} &式 (62) + *1 \wedge \left[\nabla_i \left(\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \right) \mathrm{d}\rho \wedge \mathrm{d}t \right. \\ &\left. -\nabla_i \left(\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \mathrm{d}\rho \wedge \mathrm{d}t \right) \right] \end{aligned} \tag{78}$$

となる．

式 (78) の最終項からは境界 ∂V 注2) での ρ の値が固定される．しかし，これは余分な境界条件である．質量保存則 (56) より，$\boldsymbol{u}$ もしくは $\boldsymbol{q}$ が与えられると，ρ の値が定まる．つまり，境界 ∂V で ρ と $\boldsymbol{q}$ を独立に指定できない．5.5 節で述べたように，解が存在するためには，余分な ρ の境界条件はないほうが良い．

1 形式 R を新たに導入し，$\beta + R$ より比エントロピー密度 s の拘束条件が決まるとする．$R \wedge \mathrm{d}t$ の項が式 (78) の最終項を打ち消せば，余計な ρ の境界条件は消える．また，R が底空間の並進と回転に対して，$\iota_{\boldsymbol{X}_\phi} R = 0$ を満たすとしよう．式 (69) では，エントロピーの時間発展は散逸関数 Θ とエントロピー流束 J^i の項に分かれた．このとき，先の条件を満たす R のエントロピー流束の項は，

$$*1 \wedge T \nabla_i \left[\frac{\rho}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \left(\mathrm{d}\rho + (\partial_j \rho) \mathrm{d}' X^j \right) \right] \tag{79}$$

となる．R 全体に $\mathrm{d}q^j$ について，より高次の微分の項が加われば，式 (44) の微分が境界条件として加わる．そして，その境界条件もまた式 (44) とは独立には決められないので余分である．したがって，R は式 (79) のみとなる．エントロピーの式 (69) は $\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\beta + R)$ から求まる．式 (79) の d を $\partial/\partial t$ に置き換えれば，式 (71) は

$$J_L^i = \rho \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} D_t \rho \tag{80}$$

として，$J^i = \rho s u^i + \left(J_Q^i + J_L^i \right) / T$ となる．式 (80) は界面エネルギーに由来した潜熱流束を表す．

6.2 気液二相流体の運動方程式

5.3 節と同様に計算すれば，$\mathrm{d}\tilde{\Xi} + (\beta + R + B) \wedge \mathrm{d}t$ は

$$\begin{aligned} &式 (62) + *1 \wedge \left[T \nabla_i \left(\frac{\rho}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \right) \mathrm{d}\rho \wedge \mathrm{d}t \right. \\ &- \frac{\rho}{T} (\partial_i T) \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} (\partial_j \rho) \mathrm{d}' X^j \wedge \mathrm{d}t \\ &\left. + \nabla \left(\rho \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} (\partial_j \rho) \mathrm{d}' X^j \wedge \mathrm{d}t \right) \right] \end{aligned} \tag{81}$$

となり，速度場の方程式は式 (65) の左辺に

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\rho} \left\{ \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \mathrm{d}\partial_i \rho - \mathrm{d} \left[T \nabla_i \left(\frac{\rho}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} \right) \right] \right. \\ &\left. -(\partial_i T) \frac{1}{T} \frac{\partial \epsilon}{\partial(\partial_i \rho)} (\partial_j \rho) \mathrm{d}x^j \right\} \end{aligned} \tag{82}$$

を加えたものとなる．例えば，比内部エネルギーを $\epsilon = \epsilon_B(\rho, s) + \epsilon_F(\partial_i \rho)$ とし，

$$\epsilon_F = \frac{1}{2} M g^{ij} (\partial_j \rho)(\partial_i \rho) \tag{83}$$

とすれば，式 (82) は

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\rho} \left\{ \mathrm{d} \left[\frac{1}{2} M (\nabla^i \rho)(\partial_i \rho) - M \rho (\nabla_i \nabla^i \rho) \right. \right. \\ &\left. -T \rho (\nabla^i \rho) \partial_i \left(\frac{M}{T} \right) \right] \\ &\left. - \frac{M}{T} (\partial_i T)(\nabla^i \rho)(\partial_j \rho) \mathrm{d}x^j \right\} \end{aligned} \tag{84}$$

となる．ここで $\nabla^i \rho := g^{ij} \partial \rho$ とした．

6.3 動的ファンデルワールス理論との比較

気液二相流体の先行研究に，動的ファンデルワールス理論がある [11,12]．結論を先に述べると，式 (84) で導いた運動方程式は，動的ファンデルワールス理論から導かれるものを修正したものになる．

注1) ナビエ・ストークス方程式は，ある有限時刻までは適切性が証明されている．全ての時刻に渡っても適切だと考える研究者は多いが，これについては未解決である [16]．

注2) 境界 ∂V は気液界面を意味せず，積分領域 V は気液界面を内包する大きな領域を想定していることに注意する．

式 (70) の散逸関数 Θ での粘性応力テンソル σ^i_j を $\sigma^i_j - M(\nabla^i\rho)(\partial_j\rho)$ とすることもできる．このとき，散逸関数 Θ に $M(\nabla^i\rho)(\partial_j\rho)e^j_i/T$ の項が加わり，式 (84) の最終項は $T\nabla_i\left(M(\nabla^i\rho)(\partial_j\rho)/T\right)\mathrm{d}x^j$ となる．

動的ファンデルワールス理論[11,12]では，式 (84) の最終項は $\nabla_i\left(M(\nabla^i\rho)(\partial_j\rho)\right)\mathrm{d}x^j$ で与えられているが，これは式 (79) の第二項を無視した結果に等しい．

7 まとめ

ハミルトンの変分原理では，質点の運動を表す曲線 C_0 は，ある 1 形式 $\tilde{\Xi}$ の線積分に停留値を与える．このときの必要条件は式 (14) となるが，我々の定式化では，この必要条件こそを運動法則の基礎とする．状態量間の拘束条件が 1 形式 β から定まる場合には，運動は式 (29) を満たすとした．したがって，系の運動は (Ξ, β) の組から求まる．連続的な移動 ϕ に対し，式 (33) を満たすことを対称性を持つと定めた．物理系には，時間並進，空間並進・回転の対称性が課せられる．エントロピーの式は β から定まり，散逸関数は熱力学第二法則とオンサーガーの相反定理を満たし，エントロピー流束は導出される運動方程式と境界条件を良設定にする．重要なのは，物理系が満たすべき幾何的な条件である対称性，熱力学的な条件である第二法則とオンサーガーの相反定理，そして，数学的な条件である良設定の全てを満たすことを (Ξ, β) に課すことで，運動方程式の形が定まっていくことである．本稿では，その例としてニュートン流体と同一物質による気液二相流体の運動方程式を導出した．

謝辞

適切な助言をして頂いたことに対して，二人の匿名査読者および統計数理研究所の後藤振一郎特任准教授と慶應義塾大学の藤谷洋平教授に感謝します．

引用文献

1) 山内恭彦: 一般力学　増訂第 3 版, (岩波書店, 1959).
2) 森田茂之: 微分形式の幾何学, (岩波書店, 2005).
3) 谷村省吾: 幾何学から物理学へ, (サイエンス社, 2019).
4) M. A. Biot: A virtual dissipation principle and Lagrangian equations in non-linear irreversible thermodynamics, Acad. Roy. Belg. Bull. Cl. Sci., **61** (1975) 6–30.
5) L. Onsager: Phys. Rev., Reciprocal Relations in Irreversible Processes. I, **37** (1931) 405; Reciprocal Relations in Irreversible Processes. II, **38** (1931) 2265.
6) 土井正男:ソフトマター物理学入門, (岩波書店, 2010), 8 章.
7) クーラント, ヒルベルト: 数理物理学の方法 上・下, (丸善出版, 2013; 2019).
8) H.Fukagawa and Y.Fujitani: Clebsch potentials in the variational principle for a perfect fluid, Prog. Theor. Phys., **124** (2010) 517-531; A variational principle for dissipative fluid dynamics, **127** (2012) 921-935.
9) 深川宏樹: 散逸系の変分原理, 日本物理学会誌 **72**(1) (2017) 34-38.
10) F. Gay-Balmaz and H. Yoshimura: A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part I: discrete systems, J. Geom. Phys., **111** (2017) 169; A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part II: continuum systems, **111** (2017) 194.
11) A. Onuki: Thermoacoustic effects in supercritical fluids near the critical point: Resonance, piston effect, and acoustic emission and reflection, Phys. Rev. E, **76** (2007) 061126.
12) 小貫明: 非平衡相転移現象: 熱流による非線形効果, 日本物理学会誌 **63**(10) (2008) 779-785.
13) ポントリャーギン: 最適制御理論における最大値原理 (森北出版, 2000), 1 章.
14) 今井功: 流体力学 (前編) (裳華房, 1973).
15) 北原和夫, 吉川研一: 非平衡系の科学 1 (反応・拡散・対流の現象論), (講談社サイエンティフィク, 1994), 2 章.
16) 岡本久: Navier-Stokes 方程式の解の構造について, ながれ **19** (2000) 172-179.
17) J.D. van der Waals: Thermodynamische theorie der capillariteit in de onderstelling van continue dichtheidsverandering, Verhandel. Konink. Acad. Weten. Amsterdam, Sect.1, Vol. 1, No. 8 (1893). 英語訳: J.S. Rowlinson: The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density, J. Stat. Phys., **20** (1979) 200–244.