

ISSN 0452-2982
UDC 551.51
532
512.9

航空宇宙技術研究所資料

TECHNICAL MEMORANDUM OF NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

TM-720

微量物質の中間圏，成層圏における混合，
拡散の数値計算

その1 微量物質の混合および分子拡散の基礎方程式系

西村 英明

1997年12月

航空宇宙技術研究所
NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

目 次

1. 緒 言	2
2. 混合、拡散を記述する方程式	3
2.1) 運動方程式 Navier–Stokes 方程式	3
2.2) 連続の式	4
2.3) エネルギー 方程式	4
2.4) 拡散方程式	5
2.5) 混合流体の方程式	5
2.5.1) 流体の熱力学的量と化学ポテンシャルの関係	5
2.5.2) 拡散流束密度 \mathbf{i} と熱流束 \mathbf{q}	6
2.5.3) 圧力勾配は実際上無視でき、流体の温度および濃度はほとんど変化なく、 流体の運動も非常に遅い場合	6
2.5.4) 2.5.3)の場合に加えて、実際上無視できるほど、流体の濃度が薄い場合	7
3. 基礎方程式の一般曲線座標表示	7
3.1) 運動方程式	7
3.2) 連続の式	8
3.3) エネルギー式	8
3.4) 濃度分布式	8
3.5) 二種混合流体の場合	9
3.5.1) エネルギー式	9
3.5.2) 濃度分布	9
3.6) 圧力勾配は実際上無視でき、流体の温度および濃度はほとんど変化なく、 流体の運動も非常に遅い場合 [付録 2.5.3)章の場合]	9
3.6.1) エネルギー式	9
3.6.2) 濃度分布	9
3.6.3) さらに濃度の薄い場合	9
4. 回転座標系における方程式	9
5. (r, θ, φ) 曲線座標系における方程式	11
6. 結 言	15
7. 参考文献	16
付録 1) 一般曲線座標系における各種偏微分関係式の表示法	17
付録 2) 一般曲線座標系表示による公式	23
付録 3) 異種分子を含む場合の熱力学方程式	27
付録 4) 球面座標系	36

微量物質の中間圏，成層圏における混合，拡散の数値計算

その1 微量物質の混合および分子拡散の基礎方程式系

西村 英明

Numerical analysis of mixing and diffusion of particles in the mesosphere and in the stratosphere

1. Basic system of equations on mixing of particles
and diffusion of molecules

Numerische Untersuchungen über Mischung und Diffusion der kleinen Körper in der Mesosphäre und in der Stratosphäre

1. Grundlegende Gleichungssysteme über Mischung der Teilchen
und Diffusion of Moleküle

Hideaki NISHIMURA

ABSTRACT

Basic system of equations of mixing and diffusion of particles, i.e., equations of motion, energy equation, continuity equation and equations of mixing of particles are derived in the rotational coordinate system, in order to analyze mixing of the molecules in the stratosphere, particularly in the mesosphere. Taking into consideration the character of the tensor of equations, the equations are given in the form of the curvilinear coordinate system, and then transformed into the spherical coordinate system.

Keywords: equations of mixing of particles, rotational coordinate system, atmospheric mixing, stratospheric atmosphere

Überblick

Es handelt sich bei dieser Abhandlung um die Grundgleichungssysteme über Mischung und Diffusion der kleinen Körper, d. h. Bewegungsgleichungen, Energiegleichung, Kontinuitätsgleichung und Gleichungen über Mischung der kleinen Körper, um die Phänomene der Mischung in der Stratosphäre besonders in der Mesosphäre untersuchen zu können. Zuerst wurden die Gleichungen in Form des Krummlinigen Koordinatensystems erhalten, dann in das sphärische Koordinatensystem transformiert, während die Eigenschaften von Tensoren des Gleichungssystems in Betracht gezogen wurden.

Schlüsselwort: Gleichungssystem von Mischung der kleinen Körper, rotierendes Koordinatensystem, atomosphärische Mischung, stratosphärische Atmosphäre

* 平成9年3月12日受付 (received 12 March 1997)
* * 原動機部

概 要

大気中における物質の混合，分子拡散の数値解析を行うためにその基礎となる方程式系，すなわち運動方程式，エネルギー式，連続式，拡散方程式等を導き，それらの方程式の回転座標系表示をした。そのさい，各運動方程式がテンソル量であることを利用して一般曲線座標表示式を導き曲面座標表示式を導いた。

本文中に用いられる各変数の意味を以下に示す。

- p : 圧 力
- s : エントロピ
- T : 温 度
- c : 濃 度
- n_i : 物質成分 i の粒子数
- m_i : 物質成分 i の分子量
- ρ : 流体の密度
- $\mathbf{v}(v^i)$: 流体の速度(速度成分)
- κ : 熱伝導度
- $\mathbf{v}\sigma$: 内部摩擦によるエネルギー 流束
- σ : 内部摩擦によるエネルギー
- q : 熱流束 ($-\kappa \text{grad}T$)
- μ : 化学ポテンシアル
- ε : 単位質量あたりの内部エネルギー ($d\varepsilon = C_v dt$)
- w : 単位質量あたりのエンタルピー

$$\left(w = \frac{p}{\rho}, dw = C_p dT \right)$$

\mathbf{i} : 拡散流束密度(拡散により単位時間に単位面積を通過する成分の量)

$$(\mu_i)_{mix} = \frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} : \text{二種以上の物質成分の場合の化学ポテンシアル}$$

$$\sigma_{\alpha\gamma} = \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) + \zeta \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta}$$

: 運動流束でテンソル量

一般曲線座標表示において，デカルト座標(直交直線座標)系では，変数 y と指標 $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon)$ を使い一般曲線座標系では変数 x と指標 (i, j, k, l, m, n) 系または (a, b, c, d, e) 系を使うものとする。

$$v^i{}_{,j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} : \text{テンソル量ではない。}$$

$$v^i|_j = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} v^k \equiv v^i{}_{,j} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} v^k = v^i|_j g_{jl}$$

: テンソル量である。

$$v_i|_j = \frac{\partial v_i}{\partial x^j} - \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} v_k \equiv v_{i,j} - \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} v_k = v^l|_j g_{il}$$

: テンソル量である。

$$\varphi|_i = \varphi, i = \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} : \text{テンソル量ではない。}$$

φ はスカラー 量である。

回転座標系におけるベクトル

絶対座標系(記号*)

\mathbf{r}^* : 分子点の位置ベクトル

\mathbf{r}_0^* : 相対座標系の原点の位置ベクトル

\mathbf{g}_α^* : 分子点 (x^{*i}) における基底ベクトル

相対座標系(記号')

\mathbf{r}' : 分子点の位置ベクトル

\mathbf{g}'_i : 分子点 (x'^i) における共変基底ベクトル

\mathbf{g}^i : 分子点 (x'^i) における反変基底ベクトル

\mathbf{e}'_α : 直交座標の基底ベクトル

回転座標系

\mathbf{r} : 分子点の位置ベクトル

\mathbf{g}_i : 分子点 (x^i) における共変基底ベクトル

\mathbf{g}^i : 分子点 (x^i) における反変基底ベクトル

\mathbf{e}_α : 直交座標の基底ベクトル

とする。

1) 緒 言

大気循環の研究は民間航空機などによる計測，実験室での研究，また現地，遠隔操作による化学的，力学的，放射過程等の計測，解析によって行われている。しかし現在のところ計測の困難さ，不確実さなどから大型電子計算機によるシミュレーションに重点が置かれている。上層大気中，特に中間圏は光化学モデルとしては，非常に複雑であり，下層では対流，上層では上昇流の強い領域では渦拡散現象が，乱圏界面(110 km)以上では分子拡散現象が支配的に生じていることなどが報告されている。渦拡散の統計理論については現在も盛んに研究が行われている。一方，分子拡散から類推した微量物質の輸送が濃度勾配に比例するとした取り扱いによって拡散をシミュレートする方法も研究されている。また，拡散を扱う方法にはランダムウォーク理論によるモンテカルロ法も有効である。これにより微分方程式による拡散では扱えない現象が記述できる。また中間圏のデータは，最

も注目される対流圏での現象に決定的に影響を与える成層圏の上限における境界条件として使用され、そこに分布している微量物質、たとえば、*ozone*, *NO_x*, *CO₂*, エーロゾル、水蒸気等の拡散現象は非常に重要である。そこで中間圏、成層圏における混合物質の拡散に注目して、運動方程式、エネルギー式および混合、拡散方程式を導き拡散現象を数値解析的に求めることが必要である。

一方、回転系では乱れの運動エネルギーの減衰がゆるやかになる。すなわち、回転により乱れの高周波域にエネルギーが輸送されなくなりエネルギーの散逸率が減少する。また、回転系における乱流を考える場合重要なパラメータである *Rossby* 数

$$R_0 = \frac{U \cdot U / D}{2\Omega U}$$

が小さくなるにしたがって平均流は流れの発散のない地衡風に近づき、乱流構造は二次元的になることは知られている。

このように、回転系では散逸率が減少するため、それに相応して *Rossby* 数は小さくなり、したがって、流れの乱流構造にはますます回転の影響が表れる。また、回転している流体中に対してコリオリ力がその乱流構造に影響を及ぼすのでこの方面からの研究も最近注目されている。ところで、重力波などの振動数 σ がコリオリパラメータ f とくらべて非常に小さい場合、すなわち、長周期の波動を対象とする条件である

$$\sigma \leq f, \quad \sigma = \frac{C_p}{k} \quad C_p \text{ は位相速度, } k \text{ は波数}$$

$$f = 2\Omega \sin\varphi$$

の仮定のもとに流体現象をみると、水平スケールが地球と同程度のもが含まれる。このときは球面座標系によって各方程式を表し、問題を取り扱うのが適している。

回転している地球の回りの運動は回転座標において記述するのが最も適している。回転座標系において方程式を表示するために、まず方程式の一般曲線座標表示をした。次にこの座標系から回転座標系に変換した。まずここでは基本的な主に二種の物質の拡散方程式系を得て、一般曲線座標表示式に変換する。この表示式で直交性のみを考慮した式で計算を行うと、変数を出力が必要な場合のみ変換の計算を行うだけで、主なる計算の場合には係数の計算を省くことができるので大量の計算を実行するときにはそれだけ計算効率がよいという利点がある。

ここでは回転物体上の微量物質の混合、分子拡散に関する方程式を導いた。基礎方程式系、すなわち、運動方程式、連続式、エネルギー方程式、拡散方程式等を直交条件を付した一般曲線座標表示とともに回転座標系で示した。

2) 混合、拡散を記述する方程式

拡散現象は流体内で、ある部分から他の部分への分子輸送の結果生ずるものであり、流体内の各々の微小部分の間での成分の直接交換に基づく濃度の均一化である。したがって、不可逆過程であり、混合流体中でエネルギーの散逸を生ずる。

まず、運動をしている流体の一般的な運動方程式系について述べ、必要に応じて微量物質の混合、拡散についての方程式を導く。

2.1) 運動方程式 Navier-Stokes 方程式

運動方程式はベクトル成分 e_α に関しては

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} + v^\beta \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\beta} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y^\alpha} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left\{ \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \right\} + \frac{1}{\rho} \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\xi \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \quad (2.1.1)$$

ここで、粘性係数 η , ξ が流体中で大きく変わることがないとすれば、(2.1.1)式の右辺第2項以下で η , ξ は微分の外へ出る、いま ρ を省いて y^γ について微分をすると、

$$\eta \left\{ \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \right) + \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \right\} + \xi \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) = \eta \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \right) + \left(\xi + \frac{1}{3} \eta \right) \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right)$$

となる。

したがって運動方程式のベクトル e_α 分は

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} + v^\beta \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\beta} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y^\alpha} + \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \right) + \frac{1}{\rho} \left(\xi + \frac{1}{3} \eta \right) \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \quad (2.1.2)$$

で表わされる。

この式のベクトル表示式は

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)}) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \text{grad}_{(y)}(p) + \frac{\eta}{\rho} \nabla_{(y)}^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \left(\xi + \frac{1}{3} \eta \right) \text{grad}_{(y)} \cdot \text{div}_{(y)}(\mathbf{v}) \quad (2.1.3)$$

または、

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \text{grad}_{(y)} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right) = -\frac{1}{\rho} \text{grad}_{(y)}(p) + \frac{\eta}{\rho} \nabla_{(y)}^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \left(\xi + \frac{1}{3} \eta \right) \text{grad}_{(y)} \cdot \text{div}_{(y)}(\mathbf{v}) \quad (2.1.4)$$

である。

ここに、下付きの括弧の変数 (y) はデカルト座標系に関する grad や ∇^2 の式を意味する。ただし、(2.1.3)式から(2.1.4)式を導くとき

$$(\mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)}) \mathbf{v} = \text{grad}_{(y)} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right)$$

を利用した。(付録2の7) 公式7を参照)

ここで *stress tensor* を

$$\sigma_{\alpha\gamma} = -p\delta_{\alpha\gamma} + \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) + \delta_{\alpha\gamma} \left(\zeta \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}_{(y)}(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1.5) \quad (2.2.2)$$

で定義する。

すると(2.1.1)式は

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} + v^\beta \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\beta} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial y^\gamma} \quad (2.1.6)$$

となる。

ここに，右辺は(2.1.5)式の y^γ による微分で

$$\frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial y^\gamma} = -\frac{\partial p}{\partial y^\alpha} + \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left\{ \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} - \frac{2}{3}\delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\zeta \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \quad (2.1.7)$$

である。

また，(2.1.4)式は

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \text{grad}_{(y)} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right) = -\frac{1}{\rho} \text{grad}(\sigma_{\alpha\gamma}) \quad (2.1.8)$$

と表示できる。

混合流体において流体を非圧縮性であるものとして扱う場合には，

$$\text{div}_{(y)} \rho = 0$$

である。

非圧縮性流体の Navier-Stokes 方程式は(2.1.6)に対応して

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} + v^\gamma \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial (\sigma_{\alpha\gamma})_{in}}{\partial y^\gamma} \quad (2.1.9)$$

となる，添え字 in は非圧縮流体を意味するものとする。

ここに，stress tensor は

$$(\sigma_{\alpha\gamma})_{in} = -p\delta_{\alpha\gamma} + \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} \right) \quad (2.1.10)$$

であり，また，

$$\frac{\eta}{\rho} \nabla^2 \mathbf{v} = \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \right) e_\alpha$$

$$\frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\gamma} = \text{div}_{(y)} \mathbf{v} = 0$$

を利用した。

また，(2.1.8)式から非圧縮性流体に対しては，右辺に $(\sigma_{\alpha\gamma})$ を置きかえた式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \text{grad}_{(y)} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right) = -\frac{1}{\rho} \text{grad}(\sigma_{\alpha\gamma})_{in} \quad (2.1.11)$$

を得る。

2.2) 連続の式

ベクトル成分表示では

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (\rho v^\alpha) = 0 \quad (2.2.1)$$

ベクトル表示式は

である。

2.3) エネルギー方程式

流体の単位時間，単位体積あたりのエネルギーの変化量

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho \varepsilon \right)$$

はエネルギー-流束密度 $\rho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + w \right)$ の発散と，さらに粘性による内部摩擦の流束 $\mathbf{v} \sigma$ ，熱の輸送量によるエネルギー-移流量 $q = -\kappa \text{grad}_{(y)} \cdot T$ の発散の和になる。式に表わすと

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho \varepsilon \right) = -\text{div}_{(y)} \left[\rho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + w \right) - \mathbf{v} \sigma - \kappa \text{grad}_{(y)} \cdot T \right] \quad (2.3.1)$$

ここで，エネルギー-保存の関係式を熱輸送という観点からの考察が容易になるような表現に変換する。そのために(2.3.1)式の左辺の時間微分を実行する。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho \varepsilon \right) = \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

この式において， $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ に非圧縮性流体の運動方程式(2.1.11)を， $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ に連続の式を適用する。

また，

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = T \frac{\partial s}{\partial t} + \left(\frac{p}{\rho^2} \right) \frac{\partial \rho}{\partial t} = T \frac{\partial s}{\partial t} - \frac{p}{\rho^2} \text{div}_{(y)}(\rho \mathbf{v}) \quad (2.3.2)$$

$$v^\alpha \frac{\partial \sigma_{\alpha\gamma}}{\partial y^\gamma} = \frac{\partial}{\partial y^\gamma} (v^\alpha \sigma_{\alpha\gamma}) - \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} = \text{div}_{(y)}(\mathbf{v} \sigma) - \mathbf{v}_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \quad (2.3.3)$$

を得る。

ここに熱力学的関係式(付録3)の1)参照)

$$d\varepsilon = T ds + \frac{p}{\rho^2} d\rho \quad (2.3.4)$$

$$dw = d \left(\varepsilon + \frac{p}{\rho} \right) = T ds + \frac{dp}{\rho} \quad (2.3.5)$$

を利用した。

(2.3.2),(2.3.3)の関係式さらに(2.3.4),(2.3.5)を利用して，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho v^2 + \rho \varepsilon \right) = & -\text{div}_{(y)} \left[\rho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} v^2 + w \right) - \mathbf{v} \sigma - \kappa \cdot \text{grad}_{(y)} T \right] + \\ & + \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s \right) - \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \text{div}_{(y)}(\kappa \cdot \text{grad}_{(y)} T) \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

を得る。

(2.3.1)，(2.3.6)式を比較して次式を得る。

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s \right) = \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \text{div}_{(y)}(\kappa \cdot \text{grad}_{(y)} T) \quad (2.3.7)$$

ここで，もし 粘性，熱伝導によるエネルギーの移流が

なければ

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s = 0$$

となり、エントロピーが保存される。

2.4) 拡散方程式

濃度は、ある与えられた流体要素に関して、その流体要素の全質量に対する当該の成分の質量比

$$c \equiv \frac{m_c}{M} = \frac{\rho_c}{\rho} \quad (2.4.1)$$

として定義する。単位体積当りの ρc がその成分の質量であるから、拡散流束密度を用いて質量の時間変動量を微分形で書くと

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \text{div}_{(y)}(\rho c \mathbf{v}) + \text{div}_{(y)}(\mathbf{i}) = 0 \quad (2.4.2)$$

を得る。

上に連続の式(2.2.2)を適用して変形すると

$$\rho \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{div}_{(y)}(c) \right) + \text{div}_{(y)}(\mathbf{i}) = 0 \quad (2.4.3)$$

を得る。

次に、物質が任意の種類数 N だけある場合について述べる。

すべての物質に関する流束密度の和は $\rho \mathbf{v}$ でなければならないから制約の関係式

$$\sum_{i=1}^N (\rho c_i \mathbf{v} + \mathbf{i}_i) = \rho \mathbf{v} \quad (2.4.4)$$

拡散流束密度 \mathbf{i}_i の和に関しては

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{i}_i = 0 \quad (2.4.5)$$

濃度の和は定義により 1 であるから

$$\sum_{i=1}^N c_i = 1 \quad (2.4.6)$$

が成り立たなければならない。

これらが、拡散流束密度に付随する制限である。

(2.4.5)、(2.4.6)式の条件のもとに(2.4.3)式に相当して

$$\rho \frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{div}_{(y)}(c_i) + \text{div}_{(y)}(\mathbf{i}_i) = 0 \quad (2.4.7)$$

を得る。ただし、 $i = 1 \sim (N - 1)$ である。

2.5) 混合流体の方程式

濃度の拡散をエネルギーの概念と結びつける方程式で表わす。濃度とエネルギーの関係を結びつける量として化学ポテンシャルを導入する。(付録 3 参照)化学ポテンシャルは分子 1 個の *Gibbs* 自由エネルギーに等しく、しかも非加算量であり、圧力と温度の関数であり分子の濃度、すなわち、分子数には依存しない。

エネルギー ε 、エンタルピー w 等は加算量であり、加算

量は変数に関して 1 次の *homogeneous function* で表わされ、その全微分はパラメータをその物質の分子数 n_i とするとき

$$\sum_i \mu_i dn_i$$

を加えた量となる。すなわち

$$d\varepsilon = Tds + \left(\frac{p}{\rho^2} \right) d\rho + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.5.1)$$

$$dw = Tds + \left(\frac{1}{\rho} \right) d\rho + \sum_i \mu_i dn_i$$

ただし、 i は混合流体を構成する物質を意味する。また、混合流体は単位質量とするから

$$\sum_i n_i m_i = \sum_i c_i = 1$$

が成立する。

パラメータを粒子数 n_i から濃度 c_i 変える。そのために

$$dc_i = dn_i m_i \text{ として } \sum_{i=1}^N dn_i m_i = \sum_{i=1}^N dc_i = 0$$

を利用する。また、特に N 番目の粒子に関しては

$$dc_N = - \sum_{i=1}^{N-1} dc_i$$

とする。

(2.5.1)式は

$$d\varepsilon = Tds + \left(\frac{p}{\rho^2} \right) d\rho + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) dc_i \quad (2.5.2)$$

$$dw = Tds + \left(\frac{1}{\rho} \right) d\rho + \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) dc_i$$

となる。

(2.3.2)式を導いたのと同様に式の変形を行う。そのさい、 $d\varepsilon$ 、 dw の右辺に化学ポテンシャルの項が加わっているのが唯一異なる点であることに注意して計算を以下の章において実行する。

ただし、混合流体においては流体は非圧縮性とする、非圧縮性流体の *Navier-Stokes* 方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \text{grad}_{(y)} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right) = - \frac{1}{\rho} \text{grad}_{(y)} (\sigma_{\alpha\gamma})_{in} \quad (2.1.11)$$

である。

2.5.1) 流体の熱力学的量と化学ポテンシャルの関係

このままでは未知数 \mathbf{v} 、 ρ 、 T 、 c にたいして方程式が一つ欠如している。そのため、ここでは流体の熱力学的量が濃度に依存すること、さらに濃度の時間的变化は拡散流束密度の発散で表されることに注目することによって、エネルギー式の別の形の微分方程式を導くことができる。これはエネルギー方程式で(2.3.6)を導いたのと同様に

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho \varepsilon \right) = - \text{div}_{(y)} \left[\rho \mathbf{v} \left(\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + w \right) - \mathbf{v} \sigma \right] +$$

$$+ \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s \right) - \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v_{\gamma}^{\alpha}}{\partial y_{\gamma}} \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) \text{div}_{(y)} \mathbf{i}_i \quad \kappa = \gamma - \frac{\beta^2 T}{\alpha} \quad (2.5.3)$$

を得る。ただし，(2.4.3)および(2.5.2)式を利用した。

エネルギー式(2.3.1)の右辺を等置して

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s \right) = \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v_{\gamma}^{\alpha}}{\partial y_{\gamma}} - \text{div}_{(y)} \left[\mathbf{q} - \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) \mathbf{i}_i \right] - \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{i}_i \text{div}_{(y)} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) \quad (2.5.4)$$

を得る。ここに，

$$\left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) \text{div}_{(y)} \mathbf{i}_i = \text{div}_{(y)} \left[\left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right) \mathbf{i}_i \right] - \mathbf{i}_i \text{div}_{(y)} \left(\frac{\mu_i}{m_i} - \frac{\mu_N}{m_N} \right)$$

を利用した。

ところで，熱流束 \mathbf{q} および拡散流束密度 \mathbf{i}_i は温度勾配と濃度勾配に依存する。したがって，この方程式の解を得るには拡散流束密度 \mathbf{i}_i 熱流束 \mathbf{q} は温度勾配と濃度勾配の関数として表示されなければならない。

2.5.2) 拡散流束密度 \mathbf{i}_i と熱流束 \mathbf{q}

(2.4.3)式または(2.4.7)式および(2.5.4)式には， \mathbf{i}_i や \mathbf{q} なるベクトル量が含まれている。この量を決めないことには，これらの式は解けない。これらの式を理論的に取り扱うのは一般的に困難であるので実用的に興味のある場合に利用できるような制限を設ける。まず，混合流体は二種類の成分から成る場合を考える，また実用的にかなり応用範囲の広い条件を次のように与える。すなわち，濃度勾配，温度勾配が小さく，拡散流束密度 \mathbf{i}_1 も流束 \mathbf{q} も $\text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}}$ と $\text{grad}_{(y)} T$ の1次の関数で表現できるものとして次式で与えるものとする。

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_1 &= -\alpha \cdot \text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}} - \beta \cdot \text{grad}_{(y)} T \\ \mathbf{q}_1 &= -\delta \cdot \text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}} - \gamma \cdot \text{grad}_{(y)} T + \mu_{\text{mix}} \mathbf{i}_1 \end{aligned} \quad (2.5.5)$$

ここで

$$\mu_{\text{mix}} = \frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2}$$

であり(付録3)の4.2)参照)，拡散流束密度 \mathbf{i}_1 の中の温度勾配と熱流束 \mathbf{q} の中の化学ポテンシャルの勾配の係数 β, δ の間には

$$\delta = \beta T^1$$

の関係がある。さらに熱流束の式 $\text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}}$ を拡散流束密度の式の中の $\text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}}$ に代入すると

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_1 &= -\alpha \cdot \text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}} - \beta \cdot \text{grad}_{(y)} T \\ \mathbf{q}_1 &= (\mu_{\text{mix}} + \frac{\beta T}{\alpha}) \cdot \mathbf{i}_1 - \kappa \cdot \text{grad}_{(y)} T \end{aligned}$$

を得る。ここに，

は熱伝導度である。

独立変数として温度 T ，圧力 p と濃度 c_1 を選ぶとき

$$\text{拡散係数 } D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \right)_{T, P},$$

$$\text{熱拡散係数 } \frac{K_T D}{T} = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \right)_{c, P} + \frac{\beta}{\rho},$$

$$\text{圧拡散係数 } K_P D = \frac{\alpha p}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial c_1} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right)_{P, T}$$

等を使って(2.5.6)式を整理すると次式を得る。

$$\mathbf{i}_1 = -\rho D \left[\text{grad}_{(y)} c_1 + \left(\frac{K_T}{T} \right) \text{grad}_{(y)} T + \left(\frac{K_P}{p} \right) \text{grad}_{(y)} p \right]$$

$$\mathbf{q}_1 = \left[K_T \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \right)_{P, T} - T \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \right)_{P, c_1} + \mu_{\text{mix}} \right] \mathbf{i}_1 - \kappa \text{grad}_{(y)} T$$

この式の導き方を以下に述べる。

化学ポテンシャルは温度 T ，圧力 p の関数である。また，二種以上の異なる物質を含む物質の拡散に関しては濃度 c_1 の *explicit* な関数になる。(付録3)の4)参照)したがって，化学ポテンシャルの勾配は

$$d\mu_{\text{mix}} = \frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \cdot dT + \frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial p} \cdot dp + \frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \cdot dc_1$$

から

$$\begin{aligned} \text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}} &= \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \right)_{P, c_1} \text{grad}_{(y)} T + \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial p} \right)_{c_1, T} \cdot \text{grad}_{(y)} p + \\ &+ \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \right)_{T, p} \cdot \text{grad}_{(y)} c_1 \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

ここで，付録3の1.4)項で述べたようにエンタルピー φ に関してはパラメータとして濃度を考えると

$$\begin{aligned} d\varphi &= -(s)_{P, c_1} dT + (v)_{c_1, T} dp + (\mu_{\text{mix}})_{T, p} dc_1 = \\ &= \left(\frac{\partial \varphi}{\partial T} \right)_{P, c_1} \cdot dT + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right)_{c_1, T} \cdot dp + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial c_1} \right)_{T, p} \cdot dc_1 \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

あるから，

$$\left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial p} \right)_{c_1, T} = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial c_1} \right)_{T, p} = \frac{\partial}{\partial c_1} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial p} \right)_{T, p} = \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \right)_{T, p}$$

を利用すると(2.5.9)式は

$$\begin{aligned} \text{grad}_{(y)} \mu_{\text{mix}} &= \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \right)_{P, c_1} \cdot \text{grad}_{(y)} T + \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial c_1} \right)_{P, T} \cdot \text{grad}_{(y)} p + \\ &+ \left(\frac{\partial \mu_{\text{mix}}}{\partial T} \right)_{T, p} \cdot \text{grad}_{(y)} c_1 \end{aligned}$$

として(2.5.6)式の右辺に代入した。

二種の成分を持つ混合流体に関する拡散方程式は(2.5.4)式で $N=2$ であり，拡散流束密度 \mathbf{i}_1 熱流束 \mathbf{q}_1 は(2.5.8)である。

以上は完全な方程式系であるが微分方程式が複雑すぎ

るため実用に供するためには、さらに条件を付ける必要がある。

2.5.3) 圧力勾配は実際上無視でき、流体の温度および濃度はほとんど変化なく、流体の運動も非常に遅い場合

この場合は \mathbf{i} や \mathbf{q} における微分の係数、 $D, K_T D, K_p D, \kappa$ 等は濃度、温度に依存せず一定であるとする。速度の項は無視できる程度であり、また濃度勾配による運動の速度はその勾配に比例する。したがって、 $v_c (\infty \text{grad}_{(y)} \mu)$ は無視できないが v_c^2 は無視できるオーダーである。すると

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_1 &= -\rho D \left(\text{grad}_{(y)} c_1 + \left(\frac{K_T}{T} \right) \text{grad}_{(y)} T \right) \\ \mathbf{q}_1 &= \left[K_T \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1} + \mu_{mix} \right] \mathbf{i}_1 - \kappa \text{grad}_{(y)} T \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

この式で

$$\text{div}_{(y)} \mathbf{i}_1 = -\rho D \left(\nabla^2 c_1 + \frac{K_T}{T} \nabla^2 T \right)$$

であるから拡散方程式(2.4.3)から

$$\frac{dc_1}{dt} = D \left(\nabla^2 c_1 + \frac{K_T}{T} \nabla^2 T \right) \quad (2.5.12)$$

が得られた。濃度分布はこの式から求まる。

次に、温度分布の方程式を求める。

エネルギーの関係式(2.5.4)式の中における項 $\text{div}_{(y)} (\mathbf{q}_1 - \mu_{mix} \mathbf{i}_1)$ は

$$\text{div}_{(y)} (\mathbf{q}_1 - \mu_{mix} \mathbf{i}_1) = \text{div}_{(y)} \left[\left[K_T \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1} \right] \mathbf{i}_1 \right] - \kappa \nabla^2 T$$

であり、仮定により $\text{div}_{(y)}$ の項は無視できるから

$$\text{div}_{(y)} (\mathbf{q}_1 - \mu_{mix} \mathbf{i}_1) = -\kappa \nabla^2 T \quad (2.5.13)$$

を得る。

(2.5.10)式において

$$\left(\frac{\partial s}{\partial c_1} \right) = -\frac{\partial}{\partial c_1} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial T} \right)_{p,c_1} = -\left(\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial c_1} \right) \right)_{p,c_1} = -\left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1}$$

なる関係が得られる。また

$$C_p = \left(T \frac{\partial s}{\partial T} \right)_{p,c_1} \quad \text{から} \quad \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{p,c_1} = \frac{C_p}{T}$$

であるから、

$$\frac{ds(c_1, T)}{dT} = -\left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1} \frac{\partial c_1}{\partial T} + \frac{C_p}{T} \frac{\partial T}{\partial T} \quad (2.5.14)$$

を得る。

ここで、(2.5.4)式の左辺の $\frac{ds(c_1, T)}{dt}$ に(2.5.14)式を適

用し、右辺は(2.5.13)式を利用すると

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho C_p} \nabla^2 T \quad (2.5.15)$$

ここで、さらに熱拡散係数 $K_T D$ において β が $\alpha \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{c_1, p}$

に比べて小さければ

$$\frac{T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial T} \right)_{p,c_1} = \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial c_1} \right)_{p,T}$$

となり、温度方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_{mix}}{\partial c_1} \right)_{p,T} \frac{\partial c_1}{\partial T} = \frac{\kappa}{\rho C_p} \nabla^2 T \quad (2.5.16)$$

を得る。 T に関して線形であり、流体の温度分布、濃度分布を与える。

なお、二種の理想気体が混合した場合の熱拡散比 K_d と拡散係数 D を濃度の関数としての表示式を付録3)の4.2)に示した。

2.5.4 2.5.3の場合に加えて、実際上無視できるほど、流体の濃度が薄い場合

この場合には K_T は微量量になり

$$\frac{dc_1}{dt} = D \nabla^2 c_1 \quad (2.5.17)$$

となる。

拡散方程式(2.5.17)の一つの三次元の理論解は

$$c_1(r) = \frac{M}{8\rho (\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right) \quad (2.5.18)$$

で与えられる。ここに、 M は全溶質の量である。

この式は溶質が原点 $t = 0$ に集中している場合の任意の時刻における溶質の分布を表す式である。

3) 基礎方程式の一般曲線座標表示

基底ベクトル $\mathbf{g}_i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x_i}$ やメトリック・テンソル g_{ij} 、交

代記号 ε_{ijk} 、Christoffel 記号 $\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\}$ は空間の幾何形状のみに

関する量で時間に依存しない量として取り扱う。また、各運動方程式の g_i ベクトルの成分に関しては $J^{\alpha} \mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{g}_i$

なる関係があり、デカルト座標系(直交直線座標系)の \mathbf{e}_i 成分から一般曲線座標系の \mathbf{g}_i 成分への変換に利用される。

3.1) 運動方程式

一般曲線座標表示式は(2.1.2)式から付録1)、2)において示されるデカルト座標系と一般曲線座標系との関係により次のように与えられる。

ベクトル成分 \mathbf{g}_i に関しては

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j v^i |_{|j} &= \\ &= -\frac{1}{\rho} p_{,j} g^{ij} + \\ &+ \frac{\eta}{\rho} \left[(v^i |_{|j})_{,k} + v^l |_{|j} \left\{ \begin{matrix} i \\ kl \end{matrix} \right\} - v^i |_{|l} \left\{ \begin{matrix} l \\ jk \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} + \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{\rho} \left(\xi + \frac{1}{3} \eta \right) (v^j |_{j,k} \cdot g^{ik}). \quad (3.1.1)$$

となる。

この式は以下の関係式を利用して得られる。

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (J_i^\alpha v^i) = \frac{\partial}{\partial t} (J_i^\alpha) v^i + J_i^\alpha \frac{\partial v^i}{\partial t} = J_i^\alpha \frac{\partial v^i}{\partial t} \quad (3.1.2)$$

移流項は付録1の7)より

$$v^\beta \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\beta} = J_i^\alpha v^j \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + J_i^\alpha \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} v^j \cdot v_k = J_i^\alpha v^j \left(\frac{\partial v^i}{\partial x^j} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} v^k \right) \equiv J_i^\alpha v^j v^i |_{j,k}$$

圧力変動項は

$$\frac{\partial p}{\partial y^\alpha} \equiv p^\alpha = J_i^\alpha p^i = J_i^\alpha g^{ij} p_j = J_i^\alpha g^{ij} \frac{\partial p}{\partial x^j} \quad (3.1.3)$$

付録1の5)より

$$\frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} \right) = J_i^\alpha \left[(v^i |_{j,k} + v^l |_{j,kl}) - v^i |_{l,jk} \right] g^{jk}$$

付録1の8)より

$$\frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) = J_i^\alpha (v^j |_{j,k} \cdot g^{ik})$$

これらを(2.1.2)式に代入すれば(3.1.1)式が得られる。

3.2) 連続の式

一般曲線座標表示は(2.2.1)式から

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^i} \ln(\sqrt{g}) (\rho v^i) = 0 \quad (3.2.1)$$

となる。ただし， $g = |g_{ij}|$ である。

上式の導き方を以下に示す。

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho v^\alpha)}{\partial y^\alpha} &= J_i^\alpha \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho J_j^\alpha v^j) = J_i^\alpha J_j^\alpha \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^j) + J_i^\alpha \frac{\partial}{\partial x^i} (J_j^\alpha) (\rho v^j) = \\ &= \delta_j^i \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^j) + J_i^\alpha J_k^\alpha J_l^\alpha \frac{\partial}{\partial x^i} (J_j^\alpha) (\rho v^j) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^i) + \left\{ \begin{matrix} i \\ ij \end{matrix} \right\} \rho v^j = \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^i) + \frac{1}{|J|} \frac{\partial}{\partial x^j} (\rho v^j) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^j} \ln(\sqrt{g}) \cdot (\rho v^j) \end{aligned}$$

ここに，付録2)公式1および，公式3を利用した。

3.3) エネルギー 式

一般曲線座標表示では，エネルギー 式は(2.3.7)式より

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^i \frac{\partial s}{\partial x^i} \right) = \sigma_{ij} v^i |_{j,k} + \kappa T_j |_{i,k} \cdot g^{ij}$$

ただし，

$$\sigma_{ij} = \eta \left(v^k |_{l,ik} g^{jl} - \frac{2}{3} \delta_{ij} v^k |_{k,l} \right) + \zeta \delta_{ij} v^k |_{k,l} \quad (3.3.2)$$

である。式の導き方を以下に示す。

エネルギー 方程式はスカラー 量に関する方程式であるから直線直交座標系の方程式と同型になる。

$$\begin{aligned} \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s &= v^\alpha \mathbf{e}_\alpha \cdot \frac{\partial s}{\partial y^\beta} \mathbf{e}^\beta = J_i^\alpha J_j^\beta J_k^\gamma \cdot v^i \frac{\partial s}{\partial x^k} \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}^j \\ &= v^i \frac{\partial s}{\partial x^k} \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}^k = v^i \frac{\partial s}{\partial x^i} \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\alpha\gamma} &= \eta \left(J_\gamma^i J_k^\alpha \cdot v^k |_{i,l} + J_\alpha^i J_k^\gamma \cdot v^k |_{i,l} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\gamma} \cdot J_\delta^i J_k^\delta \cdot v^k |_{i,l} \right) \\ &\quad + \zeta \delta_{\alpha\gamma} \cdot J_\delta^i J_k^\delta \cdot v^k |_{i,l} \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

また，

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} = J_\gamma^m J_l^\alpha \cdot v^l |_{m,n} \quad (3.3.5)$$

$$\delta_{\alpha\gamma} = J_\alpha^i J_\gamma^j \delta_{ik} \quad (3.3.6)$$

を利用し計算を実行すると

$$\sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} = \sigma_{ik} v^i |_{k,l} \quad (3.3.7)$$

を得る。ただし，

$$\sigma_{ik} = \eta \left(v^j |_{k,l} + v^k |_{i,l} - \frac{2}{3} \delta_{ik} v^j |_{j,l} \right) + \zeta \delta_{ik} v^j |_{j,l} \quad (3.3.8)$$

とする。

ここにデカルト座標系では

$$\left\{ \begin{matrix} \alpha \\ \beta\gamma \end{matrix} \right\} = 0$$

であるから，直交直線座標系 y とその指標 (α, β, γ) に関しては

$$\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} = \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \left\{ \begin{matrix} \alpha \\ \beta\gamma \end{matrix} \right\} v^\beta \equiv v^\alpha |_{\gamma}$$

である。したがって，テンソル量(付録1の4)参照)であり，(3.3.7)によれば，式の形も，その量も座標系に依存して変化することはない。

$\kappa \text{div}_{(y)}(\text{grad}_{(y)} T)$ はテンソル量(付録1の8)参照)であるから座標系には無関係に成り立つ式である。よって，

$$\kappa \text{div}_{(y)}(\text{grad}_{(y)} T) = \kappa \text{div}(grad T) = \kappa (T_i) |_{j} g^{ij} \quad (3.3.9)$$

ただし，付録1の9)により

$$T_i |_{j} = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial T}{\partial x^j} \right) - \left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} \frac{\partial T}{\partial x^k} \right) \quad (3.3.10)$$

である。

3.4) 濃度分布式

デカルト座標系と一般曲線座標系との間には，

$$\text{div}_{(y)} \mathbf{i}_1 = \text{div}_{(y)} \cdot \text{grad}_{(y)} \psi = \psi |_{ij} \cdot g^{ij}$$

なる関係式が成立する。したがって，一般曲線座標系では(2.4.3)式より

$$\rho \left(\frac{\partial c}{\partial t} + v^i \frac{\partial c}{\partial x^i} \right) + \psi |_{ij} g^{ij} = 0 \quad (3.4.1)$$

である。ただし， $\mathbf{i} = \text{grad} \psi$ とした。

3.5) 二種の混合流体の場合

3.5.1) エネルギー式

化学ポテンシャルを導入した直交直線座標系における (2.5.4) 式より, $N=2$ として

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad}_{(y)} s \right) = \sigma_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} - \text{div}_{(y)} \left[\mathbf{q}_1 - \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \mathbf{i}_1 \right] - \mathbf{i}_1 \text{div}_{(y)} \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \quad (3.5.1)$$

を得る。ここに, (2.5.8) 式より

$$\mathbf{i}_1 = -\rho D \left[\text{grad}_{(y)} c_1 + \left(\frac{K_T}{T} \right) \text{grad}_{(y)} T + \left(\frac{K_p}{p} \right) \text{grad}_{(y)} p \right]$$

$$\mathbf{q}_1 = \left[K_T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T} \right)_{p,c_1} + \mu_1 \right] \mathbf{i}_1 - \kappa \cdot \text{grad}_{(y)} T \quad (3.5.2)$$

である。

一般曲線座標ではエネルギー方程式は

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^i \frac{\partial s}{\partial x^i} \right) = \sigma_{ij} v^i |_{j} + (\rho D) \left\{ \left[K_T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T} \right)_{p,c_1} + \mu_1 - \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \right] \times \left(c_1 |_{ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{ij} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{ij} \right) + \left[c_1 |_{i} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{i} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{i} \right] \times \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) |_{j} \right\} g^{ij} \quad (3.5.3)$$

である。

3.5.2) 濃度分布

直交直線座標系の (2.4.4) 式から

$$\rho \left(\frac{\partial c_1}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{div}_{(y)} (c_1) \right) + \text{div}_{(y)} (\mathbf{i}_1) = 0 \quad (3.5.4)$$

により与えられる。

ただし,

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (3.5.5)$$

一般曲線座標表示は

$$\rho \left(\frac{\partial c_1}{\partial t} + v^i \frac{\partial c_1}{\partial x^i} \right) - \rho D \left[c_1 |_{ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{ij} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{ij} \right] g^{ij} = 0 \quad (3.5.6)$$

である。ただし,

$$\text{div}_{(y)} \mathbf{i}_1 = -\rho D \left[c_1 |_{ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{ij} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{ij} \right] g^{ij}$$

を利用した。

以上が二種の微量物質の拡散のエネルギー-と濃度分布に関する完全な関係式である。

3.6) 圧力勾配は実際上無視でき, 流体の温度および濃度はほとんど変化なく, 流体の運動も非常に遅い場合 [付録 2.5.3) 章の場合]

3.6.1) エネルギー式

エネルギー式は温度方程式となり (2.5.16) 式より

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho C_p} \nabla^2_{(y)} T \quad (3.6.1)$$

を得る。

一般曲線座標表示は,

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho C_p} T |_{ij} g^{ij} \quad (3.6.2)$$

となる。ただし, 一般座標表示式においては, 付録 1 の 3) から

$$\nabla^2 \varphi = \varphi |_{ij} g^{ij}$$

であることを利用した。

3.6.2) 濃度分布

直交直線座標系における (2.5.12) 式は

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D \left(\nabla^2_{(y)} c_1 + \frac{K_T}{T} \nabla^2_{(y)} T \right) \quad (3.6.3)$$

であるから, 一般曲線座標表示では

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D \left(c_1 |_{ij} + \frac{K_T}{T} T |_{ij} \right) g^{ij} \quad (3.6.4)$$

を得る。

3.6.3) さらに濃度の薄い場合

(2.5.17) 式から

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D c_1 |_{ij} g^{ij} \quad (3.6.5)$$

を得る。

4) 回転座標系における方程式

空間に固定した直交直線座標系における絶対座標系 (慣性座標系) ($\mathbf{r}^*(y^{*\alpha})$) と, この座標系に相対的な相対座標系 ($\mathbf{r}'(y'^\alpha)$), および角速度 ω で回転している回転座標系 ($\mathbf{r}(y^\alpha)$) を導入する。

絶対座標系に並進している相対座標系では回転運動が行われているものとする。空間内に運動している分子が存在するとき, まず絶対座標系から見た速度 (\mathbf{v}^*) と相対座標系の原点の並進速度 (\mathbf{v}^*_0) と相対座標系から見た速度 (\mathbf{v}') の関係は, その位置ベクトルの関係

$$\mathbf{r}^* = \mathbf{r}^0 + \mathbf{r}' \quad (4.1)$$

から

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^0 + \mathbf{v}' \quad (4.2)$$

が得られる。

ある空間内に存在する分子点に注目したときの時間微

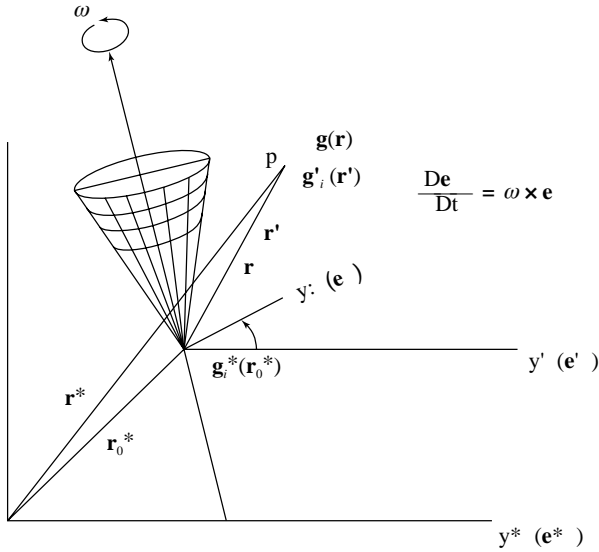


図1 絶対座標系 ($y^{*\alpha}$), 相対座標系 (y^{α})

分 *particle time derivative* を $\frac{D}{Dt}$ で表し，空間の点を固定して時間微分したときは *local time derivative* $\frac{\partial}{\partial t}$ を用いる。加速度は $\frac{D\mathbf{v}^*}{Dt} = \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D\mathbf{v}'}{Dt}$

すなわち，

$$\mathbf{v}^* = \mathbf{v}_0^* + \mathbf{v}' \quad (4.3)$$

一般曲線座標系において成分表示すると

$$a^{*i} \mathbf{g}_i^* = (v_0^{*i} + v_0^{*j} v_0^{*i}|_j) \mathbf{g}_i^* + (v' + v'^j v'^i|_j) \mathbf{g}'_i \quad (4.4)$$

次に相対座標系における回転運動を考える。

両座標系での分子の位置ベクトル \mathbf{r} は

$$\mathbf{r} = y^\alpha \mathbf{e}_\alpha = y'^{\alpha'} \mathbf{e}'_{\alpha'} = \mathbf{r}'$$

$$\mathbf{v} = \frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + y^\alpha \frac{D\mathbf{e}_\alpha}{Dt} = \frac{Dy^{\alpha'}}{Dt} \mathbf{e}'_{\alpha'} = \mathbf{v}' \quad (4.5)$$

ここで $\frac{D\mathbf{e}_\alpha}{Dt} = \omega \times \mathbf{e}_\alpha$ (4.6)

であるから

$$\mathbf{v} = \frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + \omega \times \mathbf{r} = \mathbf{v}' \quad (4.7)$$

(4.2),(4.7)式から絶対座標系での速度 \mathbf{v}^* は

$$\mathbf{v}^* = \frac{D\mathbf{r}^*}{Dt} = \mathbf{v}_0^* + \frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + \omega \times \mathbf{r} \quad (4.8)$$

で示されるように相対座標系の原点の並進速度 \mathbf{v}_0^* と回転速度の和で表される。

ここで注意しなければならないことは(4.8)式はテンソル両であるから座標系の如何に関わりなく成立する。すなわち，上式は形は異なるが一般曲線座標系でも成立する。また，相対座標系と回転座標系は異なる種類の座標系であってもよい。ただし， $\omega \times \mathbf{r}$ はテンソル量(付録1の10))ではあるが ω および位置ベクトル \mathbf{r} はテンソル量

ではない。

加速度は(4.8)式の *particle time derivative* をとると

$$\begin{aligned} \alpha^* &\equiv \frac{D\mathbf{v}^*}{Dt} = \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D}{Dt} \left(\frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha \right) + \frac{D\omega}{Dt} \times \mathbf{r} + \omega \times \frac{D\mathbf{r}}{Dt} = \\ &= \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D}{Dt} \left(\frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha \right) + \frac{D\omega}{Dt} \times \mathbf{r} + \omega \times \left(\frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + \omega \times \mathbf{r} \right) = \\ &= \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D\omega}{Dt} \times \mathbf{r} + \frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + 2\omega \times (v^\alpha \mathbf{e}_\alpha) + \omega \times (\omega \times \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

で表される。ここで

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{Dy^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha \right) = \frac{D}{Dt} (v^\alpha \mathbf{e}_\alpha) = \frac{Dv^\alpha}{Dt} \mathbf{e}_\alpha + \omega \times v^\alpha \mathbf{e}_\alpha$$

を利用した。

回転座標系の運動方程式はベクトル成分 \mathbf{e}_α に関しては

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^\alpha}{\partial t} + v^\beta \frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\beta} + 2\omega^\beta v'^\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} + \omega^\gamma \omega_\delta r_\varepsilon \varepsilon^{\delta\epsilon\beta} \varepsilon_{\gamma\beta\alpha} = \\ = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y^\alpha} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left\{ \eta \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial y^\gamma} + \frac{\partial v^\gamma}{\partial y^\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \right\} + \\ + \frac{1}{\rho} \delta_{\alpha\gamma} \frac{\partial}{\partial y^\gamma} \left(\xi \frac{\partial v^\delta}{\partial y^\delta} \right) \end{aligned} \quad (4.10)$$

である。

速度の式(4.8)および加速度の式(4.9)において加速度 $\frac{Dv^\alpha}{Dt}$ と速度 v^α すべて回転座標系に関する量である。ただし，相対座標系の原点に関しては \mathbf{v}_0^* ， $\frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt}$ が入っているが，これは回転体に関する物体の運動を考える場合本質的な意味を持っているものではない。(4.8)式(4.9)式はテンソル量であり，固着ベクトルである。したがって，成分表示が可能である。

(4.8)式は

$$\mathbf{v}^* = \frac{D\mathbf{r}^*}{Dt} = \mathbf{v}_0^* + \frac{Dy^\alpha}{Dt} J^i_\alpha \mathbf{g}_i + \omega^{jk} \varepsilon_{ijk} g^l g_l = \mathbf{v}_0^* + \left(\frac{DX^i}{Dt} + \omega^{jk} \varepsilon_{ijk} g^l \right) \mathbf{g}_i \quad (4.11)$$

(4.9)式は

$$\begin{aligned} \mathbf{v}^* &= \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D\omega}{Dt} \times \mathbf{r} + \left[\left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial t} \right)_{y^\alpha} + v^\beta v^\alpha |_\beta \right] J^i_\alpha \mathbf{g}_i + 2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} \mathbf{g}_i + \\ &+ \omega^j \omega_k r_l \varepsilon^{mkl} \varepsilon_{jmn} g^{in} \mathbf{g}_i = \\ &= \frac{D\mathbf{v}_0^*}{Dt} + \frac{D\omega}{Dt} \times \mathbf{r} + \left[\left(\frac{\partial v^i}{\partial t} \right)_{y^i} + v^j v^i |_j \right] + 2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} g^{il} + \omega^j \omega_k r_l \varepsilon^{mkl} \varepsilon_{jmn} g^{in} \mathbf{g}_i \end{aligned} \quad (4.12)$$

以上が速度，加速度についての回転座標系における完全な記述である。しかし，実用上次の仮定を置いて取り扱う。

$$\mathbf{v}_0^* = 0 \text{ で，かつ } \omega = \text{一定}$$

(4.8)式は

$$\mathbf{v}^* = \frac{D\mathbf{r}^*}{Dt} = \left(\left(\frac{\partial x^i}{\partial t} \right)_{,i} + v^j v^i |_{,j} + \omega^j r^k \varepsilon_{ijk} g^{il} \right) \mathbf{g}_i = \left(v^j x^i |_{,j} + \omega^j r^k \varepsilon_{ijk} g^{il} \right) \mathbf{g}_i \quad (4.13)$$

(4.9)式は

$$\alpha^* = \left[\left(\frac{\partial v^i}{\partial t} \right)_{,i} + v^j v^i |_{,j} + 2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} g^{il} + \omega^j \omega^k r^l \varepsilon_{mab} \varepsilon_{jmn} g^{in} g_{ka} g_{lb} \right] \mathbf{g}_i \quad (4.14)$$

よって、回転座標系における運動方程式は、共変基底ベクトル \mathbf{g}_i について

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial v^i}{\partial t} \right)_{,i} + v^j v^i |_{,j} + 2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} g^{il} + \omega^j \omega^k r^l \varepsilon_{mab} \varepsilon_{jmn} g^{in} g_{ka} g_{lb} = \\ & = -\frac{1}{\rho} p_{,j} g^{ij} + \\ & \quad + \frac{\eta}{\rho} \left[(v^i |_{,j})_{,k} + v^l |_{,j} \left\{ \begin{matrix} i \\ kl \end{matrix} \right\} - v^i |_{,l} \left\{ \begin{matrix} l \\ jk \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} + \\ & \quad + \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) (v^j |_{,j})_{,k} \cdot g^{ik} \end{aligned} \quad (4.15)$$

と表わされる。

以上をまとめて一般曲線座標系における表示式を次に示す。

3.1) 運動方程式

$$\begin{aligned} & \frac{\partial v^i}{\partial t} + v^j v^i |_{,j} = \\ & = -\frac{1}{\rho} p_{,j} g^{ij} + \\ & \quad + \frac{\eta}{\rho} \left[(v^i |_{,j})_{,k} + v^l |_{,j} \left\{ \begin{matrix} i \\ kl \end{matrix} \right\} - v^i |_{,l} \left\{ \begin{matrix} l \\ jk \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} + \\ & \quad + \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) (v^j |_{,j})_{,k} \cdot g^{ik} \end{aligned} \quad (3.1.1)$$

3.1.1) 回転体に関する運動方程式

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\partial v^i}{\partial t} \right)_{,i} + v^j v^i |_{,j} + 2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} g^{il} + \omega^j \omega^k r^l \varepsilon_{mab} \varepsilon_{jmn} g^{in} g_{ka} g_{lb} = \\ & = -\frac{1}{\rho} p_{,j} g^{ij} + \\ & \quad + \frac{\eta}{\rho} \left[(v^i |_{,j})_{,k} + v^l |_{,j} \left\{ \begin{matrix} i \\ kl \end{matrix} \right\} - v^i |_{,l} \left\{ \begin{matrix} l \\ jk \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} + \\ & \quad + \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) (v^j |_{,j})_{,k} \cdot g^{ik} \end{aligned} \quad (4.15)$$

3.2) 連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^i} (\rho v^i) + \frac{\partial}{\partial x^i} \ln(\sqrt{g}) (\rho v^i) = 0 \quad (3.2.1)$$

3.3) エネルギー 式

$$\rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^i \frac{\partial s}{\partial x^i} \right) = \sigma_{ij} v^i |_{,j} + \kappa T_{,j} |_{,i} \cdot g^i \quad (3.3.1)$$

$$\text{ただし, } \sigma_{ij} = \eta \left(v^k |_{,l} g_{ik} g^{jl} - \frac{2}{3} \delta_{ij} v^k |_{,k} \right) + \zeta \delta_{ij} v^k |_{,k} \quad (3.3.2)$$

である。

3.4) 濃度分布式

$$\rho \left(\frac{\partial c}{\partial t} + v^i \frac{\partial c}{\partial x^i} \right) + \psi |_{,ij} g^{ij} = 0 \quad (3.4.1)$$

ただし、 $\mathbf{i} = \text{grad} \psi$ とした。

3.5) 二種の混合流体の場合

3.5.1) エネルギー 式

$$\begin{aligned} & \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^i \frac{\partial s}{\partial x^i} \right) = \sigma_{ij} v^i |_{,j} + \\ & \quad + (\rho D) \left\{ K_T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T} \right)_{p,c_1} + \mu_1 - \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \right\} \\ & \quad \times \left[c_1 |_{,ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{,ij} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{,ij} \right] + \\ & \quad + \left[c_1 |_{,i} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{,i} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{,i} \right] \times \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) |_{,j} g^{ij} \end{aligned} \quad (3.5.3)$$

3.5.2) 濃度分布

$$\rho \left(\frac{\partial c_1}{\partial t} + v^i \frac{\partial c_1}{\partial x^i} \right) - \rho D \left[c_1 |_{,ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{,ij} + \left(\frac{K_p}{p} \right) p |_{,ij} \right] g^{ij} = \quad (3.5.6)$$

$$\text{ただし, } c_1 + c_2 = 1 \quad (3.5.5)$$

3.6) 圧力勾配は実際上無視でき、流体の温度および濃度はほとんど変化なく、流体の運動も非常に遅い場合

3.6.1) エネルギー 式は

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\kappa}{\rho C_p} T |_{,ij} g^{ij} \quad (3.6.2)$$

3.6.2) 濃度分布は、

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D \left(c_1 |_{,ij} + \left(\frac{K_T}{T} \right) T |_{,ij} \right) g^{ij} \quad (3.6.4)$$

3.6.3) さらに濃度の薄い場合

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D c_1 |_{,ij} g^{ij} \quad (3.6.5)$$

5) (r, θ, φ) 曲線座標系における方程式 (付録 4) 参照

これまで一般曲線座標系において各種の方程式を述べてきたがここでは具体的に (r, θ, φ) 曲線座標系における式を与える。変数 (r, θ, φ) およびベクトル $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ 等については図 2 を参照。

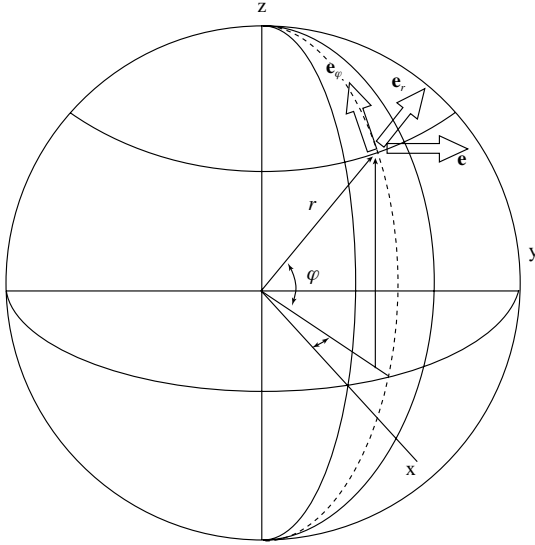


図2 局所直交座標系
 $e_r(\mathbf{g}_r), e_\theta(\mathbf{g}_\theta), e_\varphi(\mathbf{g}_\varphi)$

5.1) 運動方程式

r-成分

$$\begin{aligned} & \frac{\partial v^r}{\partial t} + v^r v^r |_{,r} + v^\theta v^r |_{,\theta} + v^\varphi v^r |_{,\varphi} + \\ & + 2\sqrt{g} \left[(\omega^\theta v^\varphi - \omega^\varphi v^\theta) g^{rr} + (\omega^\varphi v^r - \omega^r v^\varphi) g^{r\theta} + \right. \\ & \left. + (\omega^r v^\theta - \omega^\theta v^r) g^{r\varphi} \right] + \omega^r C_r - r^r C_\omega = \\ & = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial r} g^{rr} + \frac{\partial p}{\partial \theta} g^{r\theta} + \frac{\partial p}{\partial \varphi} g^{r\varphi} \right) + \\ & + \frac{\eta}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r} (v^r |_{,r}) g^{rr} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^r |_{,\theta}) g^{r\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^r |_{,\varphi}) g^{r\varphi} + \right. \\ & + \frac{\partial}{\partial r} (v^r |_{,\theta}) g^{\theta r} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^r |_{,\theta}) g^{\theta\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^r |_{,\theta}) g^{\theta\varphi} + \\ & + \frac{\partial}{\partial r} (v^r |_{,\varphi}) g^{\varphi r} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^r |_{,\varphi}) g^{\varphi\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^r |_{,\varphi}) g^{\varphi\varphi} + \\ & + \left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{rr} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} \right) g^{rr} + \\ & + \left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} \right) g^{r\theta} + \\ & + \left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} \right) g^{r\varphi} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{rr} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} \right) g^{\theta r} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} \right) g^{\theta\theta} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} + v^\theta |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} \right) g^{\theta\varphi} + \\ & + \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{rr} \right\} + v^\theta |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} \right) g^{\varphi r} + \\ & + \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} + v^\theta |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} \right) g^{\varphi\theta} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} + v^\theta |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} + v^\varphi |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} \right) g^{\varphi\varphi} - \\ & - \left(\left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{rr} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} \right) g^{rr} + \right. \\ & + \left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\theta} \right\} \right) g^{r\theta} + \\ & + \left(v^r |_{,r} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{r\varphi} \right\} \right) g^{r\varphi} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta r} \right\} \right) g^{\theta r} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\theta} \right\} \right) g^{\theta\theta} + \\ & + \left(v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\theta\varphi} \right\} \right) g^{\theta\varphi} + \\ & + \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi r} \right\} \right) g^{\varphi r} + \\ & + \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\theta} \right\} \right) g^{\varphi\theta} + \\ & + \left. \left(v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} + v^r |_{,\theta} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} + v^r |_{,\varphi} \left\{ \frac{r}{\varphi\varphi} \right\} \right) \right) g^{\varphi\varphi} + \\ & + \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \left[\frac{\partial}{\partial r} (v^r |_{,r} + v^\theta |_{,\theta} + v^\varphi |_{,\varphi}) g^{rr} + \right. \\ & + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^r |_{,r} + v^\theta |_{,\theta} + v^\varphi |_{,\varphi}) g^{r\theta} + \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^r |_{,r} + v^\theta |_{,\theta} + v^\varphi |_{,\varphi}) g^{r\varphi} \right] \end{aligned}$$

ただし,

$$\begin{aligned} C_\omega &= \omega^r \left(\omega^r g_{rr} + \omega^\theta g_{r\theta} + \omega^\varphi g_{r\varphi} \right) + \omega^\theta \left(\omega^r g_{\theta r} + \omega^\theta g_{\theta\theta} + \omega^\varphi g_{\theta\varphi} \right) + \\ & + \omega^\varphi \left(\omega^r g_{\varphi r} + \omega^\theta g_{\varphi\theta} + \omega^\varphi g_{\varphi\varphi} \right) \\ C_r &= \omega^r \left(r^r g_{rr} + r^\theta g_{r\theta} + r^\varphi g_{r\varphi} \right) + \omega^\theta \left(r^r g_{\theta r} + r^\theta g_{\theta\theta} + r^\varphi g_{\theta\varphi} \right) + \\ & + \omega^\varphi \left(r^r g_{\varphi r} + r^\theta g_{\varphi\theta} + r^\varphi g_{\varphi\varphi} \right) \end{aligned}$$

である。

θ -成分

$$\begin{aligned} & \frac{\partial v^\theta}{\partial t} + v^r v^\theta |_{,r} + v^\theta v^\theta |_{,\theta} + v^\varphi v^\theta |_{,\varphi} + \\ & + 2\sqrt{g} \left[(\omega^\theta v^\varphi - \omega^\varphi v^\theta) g^{\theta r} + (\omega^\varphi v^r - \omega^r v^\varphi) g^{\theta\theta} + \right. \\ & \left. + (\omega^r v^\theta - \omega^\theta v^r) g^{\theta\varphi} \right] + \omega^\theta C_r - r^\theta C_\omega = \\ & = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial r} g^{\theta r} + \frac{\partial p}{\partial \theta} g^{\theta\theta} + \frac{\partial p}{\partial \varphi} g^{\theta\varphi} \right) + \\ & + \frac{\eta}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial r} (v^\theta |_{,r}) g^{rr} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^\theta |_{,\theta}) g^{\theta\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^\theta |_{,\varphi}) g^{\theta\varphi} + \right. \\ & + \frac{\partial}{\partial r} (v^\theta |_{,\theta}) g^{\theta r} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^\theta |_{,\theta}) g^{\theta\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^\theta |_{,\theta}) g^{\theta\varphi} + \\ & + \frac{\partial}{\partial r} (v^\theta |_{,\varphi}) g^{\varphi r} + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^\theta |_{,\varphi}) g^{\varphi\theta} + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^\theta |_{,\varphi}) g^{\varphi\varphi} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(v^\varphi \Big|_r \left\{ \begin{matrix} r \\ \varphi \theta \end{matrix} \right\} + v^\theta \Big|_\theta \left\{ \begin{matrix} \theta \\ \varphi \theta \end{matrix} \right\} + v^\varphi \Big|_\varphi \left\{ \begin{matrix} \varphi \\ \varphi \theta \end{matrix} \right\} \right) g^{\varphi\theta} + \\
& + \left(v^\varphi \Big|_r \left\{ \begin{matrix} r \\ \varphi \varphi \end{matrix} \right\} + v^\theta \Big|_\theta \left\{ \begin{matrix} \theta \\ \varphi \varphi \end{matrix} \right\} + v^\varphi \Big|_\varphi \left\{ \begin{matrix} \varphi \\ \varphi \varphi \end{matrix} \right\} \right) g^{\varphi\varphi} + \\
& + \frac{1}{\rho} \left(\zeta + \frac{1}{3} \eta \right) \left[\frac{\partial}{\partial r} (v^r \Big|_r + v^\theta \Big|_\theta + v^\varphi \Big|_\varphi) g^{\varphi r} + \right. \\
& + \frac{\partial}{\partial \theta} (v^r \Big|_r + v^\theta \Big|_\theta + v^\varphi \Big|_\varphi) g^{\varphi\theta} + \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial \varphi} (v^r \Big|_r + v^\theta \Big|_\theta + v^\varphi \Big|_\varphi) g^{\varphi\varphi} \right]
\end{aligned}$$

5.2) 連続の式

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho v^r)}{\partial r} + \frac{\partial (\rho v^\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial (\rho v^\varphi)}{\partial \varphi} + \\
& + \frac{\partial \ln \sqrt{g}}{\partial r} (\rho v^r) + \frac{\partial \ln \sqrt{g}}{\partial \theta} (\rho v^\theta) + \frac{\partial \ln \sqrt{g}}{\partial \varphi} (\rho v^\varphi) = 0
\end{aligned}$$

5.3) エネルギー方程式

$$\begin{aligned}
& \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^r \frac{\partial s}{\partial r} + v^\theta \frac{\partial s}{\partial \theta} + v^\varphi \frac{\partial s}{\partial \varphi} \right) = \\
& = \sigma_{rr} v^r \Big|_r + \sigma_{r\theta} v^r \Big|_\theta + \sigma_{r\varphi} v^r \Big|_\varphi + \\
& + \sigma_{\theta r} v^\theta \Big|_r + \sigma_{\theta\theta} v^\theta \Big|_\theta + \sigma_{\theta\varphi} v^\theta \Big|_\varphi + \\
& + \sigma_{\varphi r} v^\varphi \Big|_r + \sigma_{\varphi\theta} v^\varphi \Big|_\theta + \sigma_{\varphi\varphi} v^\varphi \Big|_\varphi + \\
& + \kappa \left(T_r \Big|_r g^{rr} + T_r \Big|_\theta g^{r\theta} + T_r \Big|_\varphi g^{r\varphi} \right) \\
& + \kappa \left(T_\theta \Big|_r g^{\theta r} + T_\theta \Big|_\theta g^{\theta\theta} + T_\theta \Big|_\varphi g^{\theta\varphi} \right) \\
& + \kappa \left(T_\varphi \Big|_r g^{\varphi r} + T_\varphi \Big|_\theta g^{\varphi\theta} + T_\varphi \Big|_\varphi g^{\varphi\varphi} \right)
\end{aligned}$$

5.4) 濃度分布式

$$\begin{aligned}
& \rho \left(\frac{\partial c}{\partial t} + v^r \frac{\partial c}{\partial r} + v^\theta \frac{\partial c}{\partial \theta} + v^\varphi \frac{\partial c}{\partial \varphi} \right) + \\
& + \phi \Big|_{rr} g^{rr} + \phi \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + \phi \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \\
& + \phi \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + \phi \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + \phi \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& + \phi \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + \phi \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + \phi \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} = 0
\end{aligned}$$

5.5) 二種混合の場合は

5.5.1) エネルギー方程式

$$\begin{aligned}
& \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + v^r \frac{\partial s}{\partial r} + v^\theta \frac{\partial s}{\partial \theta} + v^\varphi \frac{\partial s}{\partial \varphi} \right) = \\
& = \sigma_{rr} v^r \Big|_r + \sigma_{r\theta} v^r \Big|_\theta + \sigma_{r\varphi} v^r \Big|_\varphi + \\
& + \sigma_{\theta r} v^\theta \Big|_r + \sigma_{\theta\theta} v^\theta \Big|_\theta + \sigma_{\theta\varphi} v^\theta \Big|_\varphi + \\
& + \sigma_{\varphi r} v^\varphi \Big|_r + \sigma_{\varphi\theta} v^\varphi \Big|_\theta + \sigma_{\varphi\varphi} v^\varphi \Big|_\varphi +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (\rho D) \left\{ \left[K_T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} - T \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial T} \right)_{p,c_1} + \mu_1 - \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \right] \times \right. \\
& \times \left[c_1 \Big|_{rr} g^{rr} + c_1 \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + c_1 \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& c_1 \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + c_1 \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + c_1 \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& c_1 \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + c_1 \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + c_1 \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \left. \right] + \\
& + \left(\frac{K_T}{T} \right) \left(T \Big|_{rr} g^{rr} + T \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + T \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& + T \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + T \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + T \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& + T \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + T \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + T \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \left. \right) + \\
& + \left(\frac{K_p}{p} \right) \left(p \Big|_{rr} g^{rr} + p \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + p \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& + p \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + p \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + p \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& + p \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + p \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + p \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \left. \right) + \\
& + \left(c_1 \Big|_r + \left(\frac{K_T}{T} \right) T \Big|_r + \left(\frac{K_p}{p} \right) p \Big|_r \right) \left[\left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_r g^{rr} + \right. \\
& + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\theta g^{r\theta} + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\varphi g^{r\varphi} \left. \right] + \\
& + \left(c_1 \Big|_\theta + \left(\frac{K_T}{T} \right) T \Big|_\theta + \left(\frac{K_p}{p} \right) p \Big|_\theta \right) \left[\left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_r g^{\theta r} + \right. \\
& + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\theta g^{\theta\theta} + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\varphi g^{\theta\varphi} \left. \right] + \\
& + \left(c_1 \Big|_\varphi + \left(\frac{K_T}{T} \right) T \Big|_\varphi + \left(\frac{K_p}{p} \right) p \Big|_\varphi \right) \left[\left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_r g^{\varphi r} + \right. \\
& \left. + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\theta g^{\varphi\theta} + \left(\frac{\mu_1}{m_1} - \frac{\mu_2}{m_2} \right) \Big|_\varphi g^{\varphi\varphi} \right] \left. \right\}
\end{aligned}$$

5.5.2) 濃度分布式

$$\begin{aligned}
& \rho T \left(\frac{\partial c_1}{\partial t} + v^r \frac{\partial c_1}{\partial r} + v^\theta \frac{\partial c_1}{\partial \theta} + v^\varphi \frac{\partial c_1}{\partial \varphi} \right) = \\
& = \rho D \left[c_1 \Big|_{rr} g^{rr} + c_1 \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + c_1 \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& + c_1 \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + c_1 \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + c_1 \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& + c_1 \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + c_1 \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + c_1 \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} + \\
& + \left(\frac{K_T}{T} \right) \left(T \Big|_{rr} g^{rr} + T \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + T \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& + T \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + T \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + T \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& + T \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + T \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + T \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \left. \right) + \\
& + \left(\frac{K_p}{p} \right) \left(p \Big|_{rr} g^{rr} + p \Big|_{r\theta} g^{r\theta} + p \Big|_{r\varphi} g^{r\varphi} + \right. \\
& + p \Big|_{\theta r} g^{\theta r} + p \Big|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + p \Big|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\
& \left. + p \Big|_{\varphi r} g^{\varphi r} + p \Big|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + p \Big|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \right]
\end{aligned}$$

5.6) さらに条件を付した、流体の運動が非常に緩やかな場合

5.6.1) エネルギー式

$$\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{K_T}{C_p} \left(\frac{\partial \mu_1}{\partial c_1} \right)_{p,T} \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\kappa}{p C_p} \left(T \Big|_{rr} g^{rr} + T \Big|_{r\theta} g^{r\theta} \right)$$

$$+T \left|_{r\varphi} g^{r\varphi} + T \left|_{\theta r} g^{\theta r} + T \left|_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + T \left|_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} \right. \right. \\ \left. \left. + T \left|_{\varphi r} g^{\varphi r} + T \left|_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + T \left|_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} \right. \right. \right)$$

5.6.2) 濃度分布式

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D [c_1 |_{rr} g^{rr} + c_1 |_{r\theta} g^{r\theta} + c_1 |_{r\varphi} g^{r\varphi} + \\ + c_1 |_{\theta r} g^{\theta r} + c_1 |_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + c_1 |_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\ + c_1 |_{\varphi r} g^{\varphi r} + c_1 |_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + c_1 |_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi} + \\ + \left(\frac{K_T}{T}\right) (T |_{rr} g^{rr} + T |_{r\theta} g^{r\theta} + T |_{r\varphi} g^{r\varphi} + \\ + T |_{\theta r} g^{\theta r} + T |_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + T |_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} \\ + T |_{\varphi r} g^{\varphi r} + T |_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + T |_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi})$$

5.6.3) さらに濃度の薄い場合

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D (c_1 |_{rr} g^{rr} + c_1 |_{r\theta} g^{r\theta} + c_1 |_{r\varphi} g^{r\varphi} + \\ + c_1 |_{\theta r} g^{\theta r} + c_1 |_{\theta\theta} g^{\theta\theta} + c_1 |_{\theta\varphi} g^{\theta\varphi} + \\ + c_1 |_{\varphi r} g^{\varphi r} + c_1 |_{\varphi\theta} g^{\varphi\theta} + c_1 |_{\varphi\varphi} g^{\varphi\varphi})$$

以上の式中使用されている各添え字付き変数の内容は以下に示す。

運動方程式

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial(\ln \sqrt{g})}{\partial r} \\ \frac{\partial(\ln \sqrt{g})}{\partial \theta} \\ \frac{\partial(\ln \sqrt{g})}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{r} \\ 0 \\ -\tan \varphi \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_{rr} & \sigma_{r\theta} & \sigma_{r\varphi} \\ \sigma_{\theta r} & \sigma_{\theta\theta} & \sigma_{\theta\varphi} \\ \sigma_{\varphi r} & \sigma_{\varphi\theta} & \sigma_{\varphi\varphi} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \eta^r |_{r + \left(\eta - \frac{2}{3}\right) \times dia} & \frac{1}{r^2 \cos^2 \varphi} \eta^r |_{\theta} & \frac{1}{r^2} \eta^r |_{\varphi} \\ r^2 \cos^2 \varphi \eta^{\theta} |_{r} & \eta^{\theta} |_{\theta + \left(\eta - \frac{2}{3}\right) \times dia} & \cos \varphi 2 \eta^{\theta} |_{\varphi} \\ \eta^{\varphi} |_{r r^2} & \frac{1}{\cos^2 \varphi} \eta^{\varphi} |_{\theta} & \eta^{\varphi} |_{\varphi + \left(\eta - \frac{2}{3}\right) \times dia} \end{bmatrix}$$

ただし、

$$dia = v^r |_{r + v^{\theta} |_{\theta + v^{\varphi} |_{\varphi}}$$

とする。

r-成分

$$\frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} v^r |_{r} & v^r |_{\theta} & v^r |_{\varphi} \\ v^{\theta} |_{r} & v^{\theta} |_{\theta} & v^{\theta} |_{\varphi} \\ v^{\varphi} |_{r} & v^{\varphi} |_{\theta} & v^{\varphi} |_{\varphi} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^r}{\partial r} \right) & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \theta} \right) - r \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \cos \varphi v^{\theta} \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} - \frac{v^{\theta}}{r^2} & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} - \frac{v^r}{r^2} \\ \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} - \frac{v^{\varphi}}{r^2} & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \theta} \right) + \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \\ & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \varphi} \right) - r \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} v^{\varphi} \\ & \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \\ & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial r} + \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} \right) - \frac{v^r}{r^2} \end{pmatrix}$$

θ-成分

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \begin{pmatrix} v^r |_{r} & v^r |_{\theta} & v^r |_{\varphi} \\ v^{\theta} |_{r} & v^{\theta} |_{\theta} & v^{\theta} |_{\varphi} \\ v^{\varphi} |_{r} & v^{\varphi} |_{\theta} & v^{\varphi} |_{\varphi} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^r}{\partial r} \right) & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \theta} \right) - r \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial \theta} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \theta} \right) + \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} \\ & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \varphi} \right) - r \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} \\ & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} \\ & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} \right) \end{pmatrix}$$

φ-成分

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \begin{pmatrix} v^r |_{r} & v^r |_{\theta} & v^r |_{\varphi} \\ v^{\theta} |_{r} & v^{\theta} |_{\theta} & v^{\theta} |_{\varphi} \\ v^{\varphi} |_{r} & v^{\varphi} |_{\theta} & v^{\varphi} |_{\varphi} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^r}{\partial r} \right) & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \theta} \right) - r \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} + r \sin \varphi v^{\theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial \varphi} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} - \frac{v^{\varphi}}{\cos^2 \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \theta} \right) + \sin \varphi \cos \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} + \cos 2\varphi v^{\theta} \\ & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^r}{\partial \varphi} \right) - r \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} \\ & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} \right) - \tan \varphi \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} - \frac{v^{\theta}}{\cos^2 \varphi} \\ & \frac{1}{r} \frac{\partial v^r}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} \right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} v^r |_{r} & v^r |_{\theta} & v^r |_{\varphi} \\ v^{\theta} |_{r} & v^{\theta} |_{\theta} & v^{\theta} |_{\varphi} \\ v^{\varphi} |_{r} & v^{\varphi} |_{\theta} & v^{\varphi} |_{\varphi} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial v^r}{\partial r} & \frac{\partial v^r}{\partial \theta} - r \cos \varphi v^{\theta} & \frac{\partial v^r}{\partial \varphi} - r v^{\varphi} \\ \frac{\partial v^{\theta}}{\partial r} + \frac{v^{\theta}}{r} & \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \theta} + \frac{v^r}{r} - \tan \varphi v^{\varphi} & \frac{\partial v^{\theta}}{\partial \varphi} - \tan \varphi v^{\theta} \\ \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial r} + \frac{v^{\varphi}}{r} & \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \theta} + \sin \varphi \cos \varphi v^{\theta} & \frac{\partial v^{\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{v^r}{r} \end{pmatrix}$$

運動方程式およびその他の方程式に関して

$$\begin{bmatrix} T_r | r & T_r | \theta & T_r | \varphi \\ T_\theta | r & T_\theta | \theta & T_\theta | \varphi \\ T_\varphi | r & T_\varphi | \theta & T_\varphi | \varphi \end{bmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial T_r}{\partial r} & \frac{\partial T_r}{\partial \theta} - r \cos \varphi T_\theta & \frac{\partial T_r}{\partial \varphi} - r T_\varphi \\ \frac{\partial T_\theta}{\partial r} + \frac{T_\theta}{r} & \frac{\partial T_\theta}{\partial \theta} + \frac{T_r}{r} - \tan \varphi T_\varphi & \frac{\partial T_\theta}{\partial \varphi} - \tan \varphi T_\theta \\ \frac{\partial T_\varphi}{\partial r} + \frac{T_\varphi}{r} & \frac{\partial T_\varphi}{\partial \theta} + \sin \varphi \cos \varphi T_\theta & \frac{\partial T_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{T_r}{r} \end{pmatrix}$$

スカラー量 (c₁, T, p に関して) の共変微分は

$$\begin{bmatrix} \psi |_{rr} & \psi |_{r\theta} & \psi |_{r\varphi} \\ \psi |_{\theta r} & \psi |_{\theta\theta} & \psi |_{\theta\varphi} \\ \psi |_{\varphi r} & \psi |_{\varphi\theta} & \psi |_{\varphi\varphi} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) r \cos \varphi \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{2} \sin 2\varphi \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \tan \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \tan \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \tan \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) + r \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \end{pmatrix}$$

また、スカラー量の一階共変微分は通常の偏微分と同じであるから

$$\psi |_{i \equiv \psi, i} = \frac{\partial \psi}{\partial x^i}$$

である。

6) 結 言

本第一報においては二種の微量物質の混合と分子拡散運動に関する方程式系を詳しく述べた。これらの式は分子運動が支配的となる宇宙空間とくに、対流圏以上の成層圏、中間圏における物質の混合、拡散を対象として取り扱うことに適している。目的に応じて、それぞれの方程式を組合せることができるが本文においては特に、二種混合気体の拡散を中心に述べている。運動方程式、連続方程式、エネルギー方程式、拡散方程式は一般曲線座

標と直交曲線座標系において示した。本報告はさらに乱流現象を含む、より実際的な場合に適用できる方程式を導くにあたっての基礎となる方程式系を得た。

参考文献

- 1) ランダウ, リフシッツ;流体力学 1, (1970), 東京図書株式会社
- 2) L. D. LANDAU AND E. M. LIFSHITZ; Statistical Physics, (1980) 3rd Edition Part 1 PERGAMON PRESS
- 3) 多谷虎男;力学におけるテンソルと変分解析(上)(下), (1980), 学会出版センター
- 4) I. S. SOKOLNIKOFF; TENSOR ANALYSIS THEORY AND APPLICATIONS TO GEOMETRY AND MECHANICS OF CONTINUA second edition, (1964), John Wiley and Sons, Inc
- 5) T. Satomura, F. Kimura, H. Sasaki, T. Yoshikawa; Numerical Simulation of Regional Scale Dispersion of Radioactive Pollutants from Accident at the Chernobyl Nuclear Power Plant, (1994), Meteorological Research Institute
- 6) K. Ya. Kondratyev, G. A. Nikolsky; SOLAR ACTIVITY AND CLIMATE, 1. Observation data Condensation and ozone hypotheses, (1995), Issledovanie zemli iz kosmosa No.5
- 7) Y.Mizuno; Analytical Mechanics of Viscous Fluid, (1991), Meteorological Research Institute
- 8) Y. Mizuno; Analytical Mechanics of Viscous Fluid(2), (1994), Meteorological Research Institute
- 9) R. L. Seliger and G. B. Whitham, F. R. S; Variational principles in continuum mechanics, (1968), California Institute of Technology
- 10) 小倉義光;気象力学通論,(1978),東京大学出版会
- 11) Karin Pleijel, Jana Moldanova, Yvonne Andersson-Sköld; Chemical modelling of an aeroplane exhaust plume in the free troposphere, Impact of Emissions from Aircraft and Spacecraft Upon the Atmosphere1, (1994), DLR-Mitteilung 94-06, pp. 280-285
- 12) G. Sonnemann, A. Ebel. Ch. Kremp, U. Berger and B. Fichtelmann; A three-dimensional dynamic model of the photochemistry of the mesosphere, Impact of Emissions from Aircraft and Spacecraft Upon the Atmosphere, (1994), DLR-Mitteilung 94-06, pp. 262-267

付録1) 一般曲線座標系における各種偏微分関係式の表示法

付録1)の目次

- 1) 座標系の定義と定義式
- 2) スカラー関数 φ の共変微分および2階の共変微分もテンソルであること
- 3) $\nabla(\nabla\psi)$ の反変成分, 共変成分表示式およびその導き方
- 3.1) 共変成分に関して

$$\nabla^2\varphi = \varphi|_i^i = \varphi|_{ij}g^{ij}$$

が成立する。

- 3.2) 反変成分に関して

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial x^j}\left(\sqrt{g}g^{ij}\frac{\partial\varphi}{\partial x^i}\right)$$

が成立する

- 4) 反変ベクトルの共変微分 $v^i|_j$ が一般曲線座標系においてテンソルであることの証明すなわち,

$$v^i|_j = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k\left\{\begin{matrix} i \\ j k \end{matrix}\right\} = \frac{\partial x^i}{\partial x^l}\frac{\partial x^m}{\partial x^j}\left(\frac{\partial x^l}{\partial x^m} + v^n\left\{\begin{matrix} l \\ m n \end{matrix}\right\}\right) = j^i_l j^m_j v^l|_m$$

が成立する

- 5) 2階の偏微分関係式 $\nabla^2\mathbf{v}$ の一般曲線座標表示式がテンソル量であり

$$\nabla^2\mathbf{v} = \left[(v^i|_j)_{,k} + v^l\left\{\begin{matrix} i \\ j k \end{matrix}\right\} - v^i\left\{\begin{matrix} l \\ j k \end{matrix}\right\} \right] g^{jk}\mathbf{g}_i$$

であること

- 6) ベクトルの共変微分とテンソルの共変微分の間

$$(v^i|_j)|_k = v_{,jk}\mathbf{g}_i - v^i|_l\left\{\begin{matrix} l \\ j k \end{matrix}\right\}$$

または,

$$(v^i|_j)|_k = (v^i|_j\mathbf{g}^l)_{,k}\mathbf{g}_i - v^i|_l\left\{\begin{matrix} l \\ j k \end{matrix}\right\}$$

なる関係が成立する

- 7) 移流項($\mathbf{v}\text{grad}$) \mathbf{v} , ($= v^\beta v^\alpha_{, \beta} \mathbf{e}^\alpha$) の一般曲線座標表示式

$$(\mathbf{v}\text{grad})\mathbf{v} = v^i v^j|_i \mathbf{g}_j = v^i \left(\frac{\partial v^j}{\partial x^i} + v^k \left\{ \begin{matrix} j \\ i k \end{matrix} \right\} \right) \mathbf{g}_j$$

- 8) 2階微分関係式 $\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v})$ の一般曲線座標表示式

$$\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v}) = \left[(v^i|_i)_{,j} + v^l|_i \left\{ \begin{matrix} i \\ j l \end{matrix} \right\} - v^i|_l \left\{ \begin{matrix} l \\ i j \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} \cdot \mathbf{g}_k \equiv (v^i|_i)_{,j} g^{jk} \mathbf{g}_k$$

が成立する

- 9) 共変ベクトルの共変微分

$$\text{div}(\text{grad } T) = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial T}{\partial x^j} \right) - \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial T}{\partial x^k} \right) g^{ij}$$

が成立する

- 10) $\omega \times \mathbf{r}$ がテンソルであること, 交代記号 e_{ijk} に重み $\sqrt{|g_{ij}|}$ を付けた $\sqrt{|g_{ij}|} e_{ijk}$ は交代テンソルであること, また同様に, 交代記号 e^{ijk} に重み $\frac{1}{\sqrt{|g_{ij}|}}$ を付けた

$\frac{1}{\sqrt{|g_{ij}|}} e^{ijk}$ は交代テンソルであること, および, $\omega \times \mathbf{r} = \omega_i r_j \varepsilon_{ijk} \mathbf{g}^k$ がテンソルであること

- 11) 参考文献

本文中に利用されるスカラー, テンソル, ベクトルに関する各種の式や式の変形法などを本付録にその主要な部分を記述した。これらの式は絶対的な空間に成り立つ関係ではなく, ある空間内の相対的な局所領域で成り立つ関係式である。特にテンソル量はこの空間においてのみ成り立つものであり, 座標系に依存しない, すなわち座標交換によって変わらない量であることを特徴としている。したがって, 物理的量を対称として考える場合その量がテンソル量であるかどうかを調っておくことは重要である。テンソル量ならば一般曲線座標系で成り立つことは, より一般に考え易い座標系である直交直線座標系でも成り立つわけである。しばしば利用される共変2階メトリック・テンソル g_{ij} の共変微分に関して

$$g_{ijk} \equiv \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} - g_{ij}\left\{\begin{matrix} l \\ ik \end{matrix}\right\} - g_{il}\left\{\begin{matrix} l \\ ik \end{matrix}\right\} = 0$$

が成り立つことはこの直交直線座標系で *Christoffel* 記号が零であることを考慮するとすぐに理解できる関係式である。

1) 座標系の定義と定義式

一般曲線座標系における座標の表示を x^i とし, そのときの反変基底ベクトルを \mathbf{g}^i , 共変基底ベクトルを \mathbf{g}_i とする。また, 直交直線座標系の座標を y^α とし, 単位ベクトルは反変単位ベクトルを \mathbf{e}^i , 共変単位ベクトルを \mathbf{e}_i とする。ただし, $\mathbf{e}^i = \mathbf{e}_i$ である。簡略化の場合や間違いの生じない場合は記号

$$J_i^\alpha = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i}, \quad J_i^\alpha = \frac{\partial x^\alpha}{\partial x^i}$$

等を用いる, またテンソルの微分表示は慣例に従って

$$\frac{\partial \psi}{\partial x^\alpha} = \psi_{, \alpha}$$

と記述する。

このとき, 以下の変数, 記号を定義する。

ただし, $(a, b, c), (i, j, k), (l, m, n)$ 系は一般曲線座標を表し (α, β, γ) 系は直交直線座標を表すものとする。

定義1 $\mathbf{g}^i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i}$ $\left(= \frac{\partial x^l}{\partial x^i} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^l} = g^{ij} \frac{\partial x^l}{\partial x^j} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^l} = g^{ij} J_j^l \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^l} = g^{ij} J_j^l \mathbf{g}_l \right)$

定義2 $\mathbf{g}^i = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i}$

定義3 $\left\{ \begin{matrix} k \\ j i \end{matrix} \right\} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j \mathbf{g}^k \left(= \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^j} \right) \frac{\partial x^k}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^j} \right) \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^k} \right)$

定義 4 $\left\{ \begin{matrix} k \\ j \ i \end{matrix} \right\} = \mathbf{g}_j^k \mathbf{g}_i$ $\left(= \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial x^k}{\partial y^\alpha} \right) \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^k} \right) \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^j} \right)$

定義 5 $v^i|_j = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ j \ k \end{matrix} \right\}, v_i|_j = \frac{\partial v_i}{\partial x^j} - v_k \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\}$

定義 6 $\nabla \mathbf{v} = \text{grad } \mathbf{v} = \mathbf{v}|_j \mathbf{g}^j = (v^i \mathbf{g}_i)|_j \mathbf{g}^j$
 $= v^i|_j \mathbf{g}_i \mathbf{g}^j = v^i|_j \delta_j^i = v^i|_j$

定義 7 $\nabla \psi = \text{grad } \psi = \psi|_j \mathbf{g}^j$

定義 8 $\mathbf{v} \nabla = \mathbf{v} \text{ grad} = v^i \mathbf{g}_i (|_j \mathbf{g}_i) = v^i (|_j) \delta_j^i = v^i (|_i)$

定義 9 $(\mathbf{v} \nabla) \mathbf{v} = (\mathbf{v} \text{ grad}) \mathbf{v} = v^i \mathbf{v}_i = v^i (v^k \mathbf{g}_k)|_i = v^i (v^k|_i) \mathbf{g}_k$

以下の各証明においてはベクトル表示式を利用した方が明らかに有利な場合を除いて原則的にベクトル表示式は利用しない。

2) スカラー関数 φ の共変微分および 2 階の共変微分もテンソルであること

スカラー関数 φ の共変微分は、普通の微分と同じになるから

$$\varphi|_i = \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \frac{\partial \varphi}{\partial x^a} \frac{\partial x^a}{\partial x^i} = \varphi|_a \frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J_i^a \varphi|_a$$

ここに、 a は i と異なる座標系の指標である。

上式より一階の共変微分 $\varphi|_i$ は一般の共変ベクトルと同じ座標変換を受けることが分かる。したがって、テンソルである。また、 $\varphi|_i$ はベクトル i 成分と考えることができる。

スカラー関数 ψ の 2 階共変微分、すなわち共変ベクトルの一階微分を意味する $\nabla(\nabla\psi)$ の式に関して一般曲線座標系における (i, j, k) 座標系から (a, b, c) 座標系への変換を行う。

$$\frac{\partial \psi}{\partial x^i|_j} \equiv \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x^i} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x^k} \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\}$$

において、右辺第一項は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial \psi}{\partial x^i} &= \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial x^a}{\partial x^i} \frac{\partial \psi}{\partial x^a} \right) = \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial x^a}{\partial x^i} \right) \frac{\partial \psi}{\partial x^a} + \frac{\partial x^a}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial \psi}{\partial x^a} \\ &= J_j^b \frac{\partial}{\partial x^b} (J_i^a) \frac{\partial \psi}{\partial x^a} + J_i^a J_j^b \frac{\partial}{\partial x^b} \frac{\partial \psi}{\partial x^a}, \end{aligned}$$

また、右辺第二項は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x^k} \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} &= \frac{\partial \psi}{\partial x^k} \left[J_i^a \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i} \right) \right] = \\ &= \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^c) = \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \left[\frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^c) J_c^d + J_b^c \frac{\partial}{\partial x^a} (J_c^d) \right] = \\ &= \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^c) + \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b J_c^d \frac{\partial}{\partial x^a} (J_c^d) = \\ &= \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^c) + \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b J_c^d J_e^c \frac{\partial}{\partial x^a} (J_e^c) = \end{aligned}$$

$$= \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^c) + \frac{\partial \psi}{\partial x^k} J_i^a J_j^b \left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\}$$

したがって、

$$\begin{aligned} \varphi|_i|_j &\equiv \psi|_{ij} = (\psi|_i)|_j - \psi|_k \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} = \\ &= J_i^a J_j^b \left[\frac{\partial}{\partial x^b} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x^a} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x^c} \left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\} \right] + \\ &+ J_j^b \frac{\partial}{\partial x^b} (J_i^a) \frac{\partial \psi}{\partial x^a} - J_j^b \frac{\partial \psi}{\partial x^b} \frac{\partial}{\partial x^a} (J_i^a) = \\ &= J_i^a J_j^b \left[\frac{\partial}{\partial x^b} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x^a} \right) - \frac{\partial \psi}{\partial x^c} \left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\} \right] \equiv J_i^a J_j^b \psi|_{ab} \end{aligned}$$

ここで、

$$J_j^b \frac{\partial}{\partial x^b} (J_i^a) \frac{\partial \psi}{\partial x^a} - J_j^b \frac{\partial \psi}{\partial x^b} \frac{\partial}{\partial x^a} (J_i^a) = 0$$

であることを利用した。

以上でスカラー関数の 2 階微分はテンソルであることが証明された。

3) $\nabla(\nabla\psi)$ の反変成分、共変成分表示式およびその導き方

発散の式は $\nabla \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \mathbf{g}^i$ と表示できることは次のようにして証明できる。

直交直線座標系で

$$\nabla \psi = \frac{\partial \psi}{\partial y^\alpha} \mathbf{e}^\alpha$$

が成立する。一方一般曲線座標系においては $\nabla \psi = \psi_i \mathbf{g}^i$ が成立するものとする。すると

$$\begin{aligned} \psi_i &= \nabla \psi \mathbf{g}_i = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y^\alpha} \mathbf{e}^\alpha \right) \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial x^i} = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y^\alpha} \mathbf{e}^\alpha \right) \left(\frac{\partial y^\beta}{\partial x^i} \mathbf{e}^\beta \right) = \\ &= \frac{\partial \psi}{\partial y^\alpha} \frac{\partial y^\beta}{\partial x^i} \mathbf{e}^\alpha \mathbf{e}^\beta = \frac{\partial \psi}{\partial y^\alpha} \frac{\partial y^\beta}{\partial x^i} \delta_\beta^\alpha = \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \end{aligned}$$

すなわち、 $\nabla \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x^i} \mathbf{g}^i$

したがって、直交直線座標系で成立する関係式から一般曲線座標系でも同じような形式の関係式がなりたつことがわかる。

3.1) 共変成分に関して

$$\nabla^2 \varphi = \varphi|_i = \psi|_{ij} g^{ij}$$

が成立する

証明

$$\begin{aligned} \nabla^2 \psi &= \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(J_i^a \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (J_i^a) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + J_i^a \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \\ &= J_i^a \frac{\partial}{\partial x^i} (J_i^a) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + J_i^a J_j^j \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \\ &= J_i^a J_j^j \frac{\partial}{\partial x^i} (J_i^a) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + J_i^a J_j^j \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \end{aligned}$$

$$= -g^{jk} \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + g^{ij} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) =$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \left\{ \begin{matrix} k \\ j i \end{matrix} \right\} \frac{\partial \varphi}{\partial x^k} \right) g^{ij} = \varphi_{;j} g^{ij}$$

3.2) 反変成分に関して

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right)$$

が成立する

証明

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \frac{\partial \varphi}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (J^i_\alpha) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + J^i_\alpha \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right)$$

この式の

第一項 $= J^j_\alpha J^k_\alpha J^i_\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} (J^i_\alpha) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = -g^{jk} \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i}$

第二項

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} \left(J^i_\alpha J^j_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) - \frac{\partial}{\partial x^j} (J^i_\alpha) J^j_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} - J^i_\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} (J^j_\alpha) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) - J^i_\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} (J^i_\alpha) J^j_\alpha \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} - J^i_\alpha J^j_\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} (J^i_\alpha) \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) + \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} g^{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i}$$

以上をまとめると、

$$\nabla^2 \varphi = -g^{jk} \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) + \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} g^{jk} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} + \left\{ \begin{matrix} j \\ j k \end{matrix} \right\} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) + g^{ik} \left\{ \begin{matrix} j \\ j k \end{matrix} \right\} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i}$$

Christoffel 記号に関する公式を利用すると上式は

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) + \frac{1}{|J|} \frac{\partial |J|}{\partial x^k} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i}$$

であるから

$$\nabla^2 \varphi = \frac{\partial}{\partial x^j} \left(g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right) + \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial \sqrt{g}}{\partial x^k} g^{ik} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} \right)$$

を得る。

ここに、関数式

$$|J| = \sqrt{g}$$

を利用した。

4) 反変ベクトルの共変微分 $v^i |_{;j}$ が一般曲線座標系においてテンソルであることの証明すなわち、

$$v^i |_{;j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} = \frac{\partial x^i}{\partial x^l} \frac{\partial x^m}{\partial x^j} \left(\frac{\partial x^l}{\partial x^m} + v^n \left\{ \begin{matrix} l \\ m n \end{matrix} \right\} \right) = J^i_l J^m_j v^l |_{;m}$$

が成立する。

証明

一般曲線座標系において (i, j, k) 座標系から (l, m, n) 座標系への変換を考える。

$$\frac{\partial v^i}{\partial x^j} = \frac{\partial x^l}{\partial x^j} \frac{\partial v^l}{\partial x^i} = J^l_j \frac{\partial}{\partial x^i} (J^i_m v^m) = J^l_j J^m_i \frac{\partial v^m}{\partial x^l} + J^l_j \frac{\partial}{\partial x^l} (J^i_m) v^m$$

$$v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} = -v^k \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^k} \frac{\partial}{\partial x^j} (J^i_\alpha) = -v^k \frac{\partial y^n}{\partial x^k} \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^n} \frac{\partial x^m}{\partial x^j} \frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_\alpha J^i_l) =$$

$$= -v^n J^m_j \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^n} \left[\frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_\alpha) J^i_l + \frac{\partial x^l}{\partial y^\alpha} \frac{\partial}{\partial x^m} J^i_l \right] =$$

$$= v^n J^m_j J^i_l \left\{ \begin{matrix} l \\ m n \end{matrix} \right\} - v^n J^m_j J^i_\alpha J^l_\alpha \frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_l) = v^n J^m_j J^i_l \left\{ \begin{matrix} l \\ m n \end{matrix} \right\} - v^l J^m_j \frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_l)$$

ゆえに、

$$v^i |_{;j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} =$$

$$= J^m_j J^i_l \left(\frac{\partial x^l}{\partial x^m} + v^n \left\{ \begin{matrix} l \\ m n \end{matrix} \right\} \right) + J^j_l \frac{\partial}{\partial x^l} (J^i_m) v^m - J^m_j \frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_l) v^l = 0$$

ここで、

$$J^l_j \frac{\partial}{\partial x^l} (J^i_m) v^m - J^m_j \frac{\partial}{\partial x^m} (J^i_l) v^l = 0$$

であるから、よって

$$v^i |_{;j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} = J^m_j J^i_l \left(\frac{\partial x^l}{\partial x^m} + v^n \left\{ \begin{matrix} l \\ m n \end{matrix} \right\} \right)$$

以上で $v^i |_{;j}$ はテンソルであることが証明された。

5) 2 階の偏微分関係式 $\nabla^2 v$ の一般曲線座標表示式がテンソル量であり

$$\nabla^2 v = \left[(v^i |_{;j})_{,k} + v^l |_{;j} \left\{ \begin{matrix} i \\ k l \end{matrix} \right\} - v^i |_{;k} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} g_i$$

であること

証明

まず、次の関係式を示すことから始める。

$$\frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial y^\alpha} \frac{\partial y^\beta}{\partial x^b} \left(\left\{ \begin{matrix} b \\ a c \end{matrix} \right\} v^c + \frac{\partial v^b}{\partial x^a} \right)$$

ここでは、次の二の方法を示す。

反変ベクトルは次の関係式を満たす。

$$v^\beta = J^b_\alpha v^a$$

これは、一般曲線座標系である (a, b, c) 座標系と直交直線座標系である (α, β, γ) 座標系間の変換を意味している。

イ) ベクトルの反変変換を最初から利用する。

$$\frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (J^b_\alpha) v^a + J^b_\alpha \frac{\partial v^a}{\partial y^\alpha} = J^b_\alpha \frac{\partial}{\partial x^b} (J^a_\alpha) v^a + J^b_\alpha J^a_\alpha \frac{\partial v^a}{\partial x^b} =$$

$$= J^b_\alpha J^c_\alpha J^c_\beta \frac{\partial}{\partial x^b} (J^a_\alpha) v^a + J^b_\alpha J^a_\alpha \frac{\partial v^a}{\partial x^b} = J^b_\alpha J^a_\alpha \left\{ \begin{matrix} a \\ b c \end{matrix} \right\} v^c + J^b_\alpha J^a_\alpha \frac{\partial v^a}{\partial x^b}$$

ロ) ベクトルの反変変換を式変形の途中で導入する。

$$\frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} = J^a_\alpha \frac{\partial v^\beta}{\partial x^a} = \frac{\partial}{\partial x^a} (J^a_\alpha v^\beta) - \frac{\partial}{\partial x^a} (J^a_\alpha) v^\beta =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^a} (J^a_\alpha J^b_\beta J^b_\gamma v^\beta) - \frac{\partial}{\partial x^a} (J^a_\alpha) J^b_\beta J^b_\gamma v^\beta =$$

ここで、座標系間の反変変換式を考慮すると

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x^a} (J_\alpha^a J_b^\beta v^b) - \frac{\partial}{\partial x^a} (J_\alpha^a) J_b^\beta v^b = \\ & = \frac{\partial}{\partial x^a} (J_\alpha^a) J_b^\beta v^b + J_\alpha^a \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^\beta) v^b + J_\alpha^a J_b^\beta \frac{\partial v^b}{\partial x^a} - \\ & - \frac{\partial}{\partial x^a} (J_\alpha^a) J_b^\beta v^b = J_\alpha^a J_b^\beta J_c^c \frac{\partial}{\partial x^a} (J_b^\beta) v^b + J_\alpha^a J_b^\beta \frac{\partial v^b}{\partial x^a} = \\ & = J_\alpha^a J_b^\beta \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} v^b + J_\alpha^a J_b^\beta \frac{\partial v^b}{\partial x^a} \end{aligned}$$

以上で両方法によって反変ベクトル成分の共変微分式を得ることができた。

次に $\nabla^2 \mathbf{v}$ の i 成分 $v^i |_{j_j}$ がテンソルであることの証明をする。

付録 2 の 7) 公式において示したように $\nabla^2 \mathbf{v}$ はベクトル量であるから、あるベクトル \mathbf{u} の内積をとるとスカラー量になる。すなわち、 Φ をあるスカラー量とすると

$$\nabla^2 \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = \Phi$$

成分表示すると、

$$v^i |_{j_j} \mathbf{g}_i \cdot u_k \mathbf{g}^k = v^i |_{j_j} \cdot u_i = v^a |_{j_j} \cdot u_a J_a^i J_b^j J_c^d J_i^d = v^a |_{j_j} u_a \delta_a^d \delta_b^c = v^a |_{j_j} u_a$$

となり変数変換により変化しない量であるから、あきらかにスカラー量であることがわかる。ゆえにテンソルの商法則により $\nabla^2 \mathbf{v}$ はテンソル量であるといえる。

つづいて $\nabla^2 \mathbf{v}$ の表示式を導く。まず、直交直線座標系 y^α と一般曲線座標系 x^α の間の関係式を導く。

直交直線座標系では

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial y^\alpha} \right) = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial (v^\beta \mathbf{e}_\beta)}{\partial y^\alpha} \right) = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} \right) \mathbf{e}_\beta$$

である。ここで、

$$\frac{\partial \mathbf{e}_\beta}{\partial y^\alpha} = 0$$

利用した。

一方、一般曲線座標系では、

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{v} &= \frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x^a} \right) = \frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial (v^b \mathbf{g}_b)}{\partial x^a} \right) = \frac{\partial}{\partial x^a} (v^b |_{aa} \mathbf{g}_b) = \\ &= v^b |_{aa} \mathbf{g}_b = \left(v^b |_{aa} J_b^\beta \right) \mathbf{e}_\beta \end{aligned}$$

である。

直交直線座標系での $\nabla^2 \mathbf{v}$ の右辺は

$$\frac{\partial}{\partial y^\alpha} \frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} = \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left[J_\alpha^b J_c^\beta \left(\left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} v^a + \frac{\partial v^c}{\partial x^b} \right) \right]$$

ここで [] 内を

$$H(a,b,c) \equiv \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} v^a + \frac{\partial v^c}{\partial x^b}$$

とおく。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y^\alpha} \frac{\partial v^\beta}{\partial y^\alpha} &= \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (J_\alpha^b) J_c^\beta H(a,b,c) + J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial y^\alpha} (J_c^\beta) H(a,b,c) + J_\alpha^b J_c^\beta \frac{\partial}{\partial y^\alpha} H(a,b,c) = \\ &= J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial x^d} (J_\alpha^b) H(a,b,c) J_c^\beta + J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial x^d} (J_c^\beta) H(a,b,c) J_\alpha^d + J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial x^d} H(a,b,c) J_\alpha^d J_c^\beta = \\ &= J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial x^d} (J_\alpha^b) H(a,b,c) J_\alpha^d J_c^\beta + J_\alpha^b \frac{\partial}{\partial x^d} (J_c^\beta) H(a,b,c) J_\alpha^d J_c^\beta + \\ &+ \frac{\partial}{\partial x^d} H(a,b,c) J_\alpha^d J_c^\beta = \\ &= - \left\{ \begin{matrix} b \\ d e \end{matrix} \right\} H(a,b,c) g^{de} J_c^\beta + \left\{ \begin{matrix} e \\ c d \end{matrix} \right\} H(a,b,c) g^{bd} J_c^\beta + \frac{\partial}{\partial x^d} H(a,b,c) g^{bd} J_c^\beta = \\ &= - \left\{ \begin{matrix} e \\ b d \end{matrix} \right\} H(a,e,c) g^{bd} J_c^\beta + \left\{ \begin{matrix} c \\ d e \end{matrix} \right\} H(a,b,e) g^{bd} J_c^\beta + \frac{\partial}{\partial x^d} H(a,b,c) g^{bd} J_c^\beta = \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial x^d} H(a,b,c) + \left\{ \begin{matrix} c \\ d e \end{matrix} \right\} H(a,b,e) - \left\{ \begin{matrix} e \\ b d \end{matrix} \right\} H(a,e,c) \right] g^{bd} J_c^\beta = \\ &= \left[(v^b)_{,d} + v^e |_{b} \left\{ \begin{matrix} c \\ d e \end{matrix} \right\} - v^c |_{e} \left\{ \begin{matrix} e \\ b d \end{matrix} \right\} \right] g^{bd} J_c^\beta \end{aligned}$$

ここで、

$$J_c^\beta \mathbf{e}_\beta = \mathbf{g}_c$$

を利用した。これが標題で示した式である。

6) ベクトルの共変微分とテンソルの共変微分の間に

$$(v_{ij})_{,k} = v_{,jk} \mathbf{g}_i - v_{,i} |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\}$$

または、

$$(v_{ij})_{,k} = (v_i |_{j} \mathbf{g}^l)_{,k} \mathbf{g}_i - v_i |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\}$$

なる関係が成立する

上式は 2 階テンソル $v_i |_{j_j}$ の x^k に関する共変微分はベクトル $v_{,j} = v_i |_{j_j} \mathbf{g}^i$ の共変微分、 $v_{,jk} = (v_i |_{j_j})_{,k}$ の \mathbf{g}^i 成分と基底ベクトル \mathbf{g}_i との内積と右辺第二項の Christoffel 記号を含む項との和を意味している。

証明

$v_i |_{jk}$ は 2 階のテンソル $v_i |_{j_j}$ の x^k に関する共変微分と考えると付録 2) の 5) 公式 5 から

$$T_{ij} = v_{,ij} = v_{i,j} - v_i |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ i j \end{matrix} \right\}$$

とし、

$$v_{i,jk} = v_{,ij,k} - v_{,i} |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ i j \end{matrix} \right\} - v_{,i} |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\}$$

を得る。また、 $v_{,j} = v_i |_{j_j} \mathbf{g}^i$ なるベクトルを考える。すなわちベクトル \mathbf{v} の j に関する微分は共変ベクトル成分の i の j に関する共変微分 $v_i |_{j_j}$ と基底ベクトル \mathbf{g}^i の積で表されるものとする。このベクトルの共変微分は

$$(v_{,j})_{,k} = (v_i |_{j_j} \mathbf{g}^i)_{,k} = (v_{,ij})_{,k} \mathbf{g}^i = \left[(v_{,ij})_{,k} - (v_{,i} |_{j} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\}) \right] \mathbf{g}^i$$

この式と上に得た $v_{ij} |_{k}$ 式から

$$v_{ijk} = (\mathbf{v} \cdot \mathbf{j})_{,k} \mathbf{g}_i - (v^i) \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\}$$

が得られる。

7) 移流項 $(\mathbf{v} \text{ grad}) \mathbf{v}$, $(= v^\beta v^\alpha, \beta e^\alpha)$ の一般曲線座表示式

$$(\mathbf{v} \text{ grad}) \mathbf{v} = v^i v^j \mathbf{g}_j = v^i \left(\frac{\partial v^j}{\partial x^i} + v^k \left\{ \begin{matrix} j \\ i k \end{matrix} \right\} \right) \mathbf{g}_j$$

証明

ベクトル表示式の関係においては

$$(\mathbf{v} \text{ grad}) \mathbf{v} = (v^i \mathbf{g}_i \cdot (\mathbf{v}) \mathbf{k} \mathbf{g}^k) = (v^i v^j \mathbf{k} \mathbf{g}^k) \mathbf{g}_j = v^i v^j \delta_i^k \mathbf{g}_j = v^i v^j \mathbf{g}_i$$

が得られる。共変微分 $v^i |_{,i}$ は定義 5 により与えられる。また, 3) において示したように, 一般曲線座標で成立する発散の式は直交直線座標系においても式の形は変わらないから

$$\begin{aligned} v^\beta v^\alpha, \beta &= J_j^\beta v^j J_\beta^\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} (J_i^\alpha v^i) = v^i \left(\frac{\partial}{\partial x^j} (J_i^\alpha) v^i + J_i^\alpha \frac{\partial v^i}{\partial x^j} \right) = \\ &= v^j \left(\left\{ \begin{matrix} k \\ ij \end{matrix} \right\} v^i J_k^\alpha + J_i^\alpha \frac{\partial v^i}{\partial x^j} \right) = J_i^\alpha \left(\frac{\partial v^i}{\partial x^j} + v^k \left\{ \begin{matrix} i \\ ik \end{matrix} \right\} \right) \end{aligned}$$

この式が標題に示した右辺の式である。ベクトル表示法によっても同じ結果が得られる。

次にこの移流項はテンソル量であることを証明する。

ベクトル v^i は次の座標交換を受ける

$$v^i = J_a^i v^a$$

また, 4) において反変ベクトルの共変微分はテンソルであることが証明されているから

$$v^j_{,k} = J_b^j J_k^c v^b_{,c}$$

よって

$$v^i v^j |_{,i} = J_a^i J_b^j J_k^c v^a v^b |_{,a} = J_k^c g^{ij} g_{ab} v^a v^b |_{,a}$$

が成立する。したがって移流項はテンソル量である。

8) 2 階微分関係式 $\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v})$ の一般曲線座標表示式

$$\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v}) = \left[(v^i)_{,j} + v^l \left\{ \begin{matrix} i \\ j l \end{matrix} \right\} - v^l \left\{ \begin{matrix} l \\ i j \end{matrix} \right\} \right] g^{jk} \cdot \mathbf{g}_k \equiv (v^i)_{,j} g^{jk} \mathbf{g}_k$$

が成立する。

証明

次の $\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v})$ とベクトル \mathbf{u} との内積を考える。

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot [\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v})] &= u_i g^i (\text{div } \mathbf{v})^j \cdot \mathbf{g}_j = u_i \cdot \mathbf{g}^i \left(v^l |_{,i} \mathbf{g}^k \mathbf{g}_k \right) = \\ &= u^i \cdot (v^k)_{,i} = J_a^i J_b^k J_c^d u_a \cdot v^b_{,c} = u^a \cdot v^b_{,c} \end{aligned}$$

すなわち, 座標軸の変換によって変化しない量であるからスカラー量である。したがって, $\text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v})$ はテンソル量である。まず, $\text{div } \mathbf{v}$ がテンソル量であることの証明をする。いま, 一つのベクトル \mathbf{u} との内積を考える。

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \text{div } \mathbf{v} &= u^i w_j (v^k)_{,i} \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}^j \cdot \mathbf{g}_k \cdot \mathbf{g}^l = u^i w_i (v^k)_{,i} = \\ &= J_a^i J_b^j J_c^k J_d^l u^a w_b (v^c)_{,d} = u^a w_a (v^c)_{,c} \end{aligned}$$

これも座標変換によって変化しない量であるから $\text{div} \cdot \mathbf{v}$ はテンソル量である。テンソル量の grad はテンソル量の微分公式が利用できる。よって, 関係式

$$\begin{aligned} \text{grad} \cdot (\text{div } \mathbf{v}) &= v^k |_{,i} \mathbf{g}_i = \left[(v^k)_{,j} + v^l \left\{ \begin{matrix} k \\ j l \end{matrix} \right\} - v^l \left\{ \begin{matrix} l \\ k j \end{matrix} \right\} \right] \mathbf{g}_i = \\ &= (v^k)_{,j} g^{ij} \cdot \mathbf{g}_i \end{aligned}$$

を得る。

9) 共変ベクトルの共変微分

$$\text{div} (\text{grad } T) = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial T}{\partial x^j} \right) - \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial T}{\partial x^k} \right) g^{ij}$$

が成立する。

証明

$$\begin{aligned} \text{div} (\text{grad } T) &= (\text{grad } T) |_{,i} \cdot \mathbf{g}^i = (T |_{,j} \mathbf{g}^j) |_{,i} \cdot \mathbf{g}^i = T |_{,i} \cdot \mathbf{g}^i \mathbf{g}^j = \\ &= T |_{,j} \cdot g^{ij} = \left(\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial T}{\partial x^j} \right) - \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial T}{\partial x^k} \right) g^{ij} \end{aligned}$$

である。

10) $\omega \times \mathbf{r}$ がテンソルであること, 交代記号 e_{ijk} に重み

$\sqrt{|g_{ij}|}$ を付けた $\sqrt{|g_{ij}|} e_{ijk}$ は交代テンソルであること, また同様に, 交代記号 e^{ijk} に重み $\frac{1}{\sqrt{|g_{ij}|}}$ を付けた $\frac{1}{\sqrt{|g_{ij}|}} e^{ijk}$ は交代テンソルであること, および, $\omega \times \mathbf{r} = \omega^i r^j \varepsilon_{ijk} \mathbf{g}^k$ がテンソルであること

証明

行列式の成分を g_{ij} として

$$g_{ij} = J_a^i J_b^j g_{ab}$$

の行列式を考える。

$$g = |g_{ij}| = |J_a^i | |J_b^j | |g_{ab}| = |J|^2 |g_{ab}|$$

ここに $|J| = |J_a^i |$

行列式 $|J| = \left| \frac{\partial x^a}{\partial x^i} \right|$ の展開式は

$$e^{abc}|J| = J_i^a J_j^b J_k^c e^{ijk}$$

$|J| = \sqrt{\frac{|g_{ij}|}{|g_{ab}|}}$ であるから上式に代入すると

$$\frac{e^{abc}}{\sqrt{|g_{ab}|}} = J_i^a J_j^b J_k^c \frac{e^{ijk}}{\sqrt{|g_{ij}|}}$$

を得る。ここで

$$\varepsilon^{abc} = \frac{e^{abc}}{\sqrt{|g_{ab}|}}, \quad \varepsilon^{ijk} = \frac{e^{ijk}}{\sqrt{|g_{ij}|}}$$

とすると

$$\varepsilon^{abc} = J_i^a J_j^b J_k^c \varepsilon^{ijk}$$

となり e^{ijk} はテンソル量ではないが ε^{ijk} はテンソル量であることが証明された。 ε^{ijk} がテンソル量であることが分かったので

$$\varepsilon_{lmn} = g_{il} g_{jm} g_{kn} \varepsilon^{ijk}$$

の関係で反変テンソルから共変テンソルが導入される。ただし、交代記号 e_{lmn} と共変テンソル ε_{lmn} の間には

$$\varepsilon_{lmn} = \sqrt{|g_{ij}|} e_{lmn}$$

なる関係がある。

さらに、上に得られた ε^{abc} の両辺に $g_{al} g_{bm} g_{cn}$ を乗ずると

$$\varepsilon_{lmn} = J_i^a J_m^b J_n^c \varepsilon_{abc}$$

が得られ、交代共変テンソルの座標変換が得られる。ただし、この式の変形において

$$J_i^a J_j^b J_k^c g_{al} g_{bm} g_{cn} = J_i^a J_m^b J_n^c g_{ai} g_{bj} g_{ck}$$

の変換を利用した。

$$(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})_k = w^i r^j \varepsilon_{ijk} = J_{\alpha'}^i J_{\beta'}^j w^{\alpha'} w^{\beta'} J_i^a J_j^b J_k^c \varepsilon_{abc} = J_k^c w^{\alpha'} r^{\beta'} \varepsilon_{abc} = J_k^c (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})_c$$

よって $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ の k 成分はテンソル量であることが分かる。

i, j 成分についても同様に証明できる。したがって、 $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$ はテンソル量である。

11) 参考文献

- 1) 多谷虎男; 力学におけるテンソルと変分解析 [上] [下], (1980), 学会出版センター
- 2) I. S. SOKOLNIKOFF; TENSOR ANALYSIS THEORY AND APPLICATIONS TO GEOMETRY AND MECHANICS OF CONTINUA *second edition*, (1964), John Wiley and Sons, Inc

付録2) 一般曲線座標系において使用される公式

付録2の目次

1) 公式1: 座標変換の行列式のテンソル表示

$$|J| = \sqrt{|g_{ij}|} = \sqrt{g}$$

$$|J| = |J_i^\alpha| = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i} \Delta_{\alpha i}, \text{ただし, } \Delta_{\alpha i} \text{は} \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i} \text{の余因子である。}$$

2) 公式2:

座標変換行列の変換係数による微分式のテンソル表示

$$\frac{\partial |J|}{\partial J_i^j} = \frac{1}{2} J_m^j J_n^k e^{lmn} e_{ijk}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial |J|}{\partial J_i^j} \right) = \frac{\partial}{\partial x^i} (|J| J_i^j) = 0$$

3) 公式3

Christoffel 記号の中に同じ指標を持つ場合の表示式

$$\left\{ \begin{matrix} j \\ j i \end{matrix} \right\} = \frac{1}{|J|} \frac{\partial |J|}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^i} (J_j^\alpha) J_i^\alpha$$

4) 公式4

テンソルの微分法

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial x^c}{\partial x^j} \right) = \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^c}{\partial x^k} - \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^a}{\partial x^i} \frac{\partial x^b}{\partial x^j}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^k}{\partial x^b} \right) = \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^k}{\partial x^c} - \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^i}{\partial x^a} \frac{\partial x^j}{\partial x^b}$$

または、直交直線座標系 y^α を考慮すると、

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} = \frac{\partial x^k}{\partial y^r} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^r}{\partial x^j} \right) - \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} = \frac{\partial y^\beta}{\partial x^b} \frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^c}{\partial y^\beta} \right)$$

注意)

$$\frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^a}{\partial x^i} \right) = \left\{ \begin{matrix} j \\ i j \end{matrix} \right\} - \left\{ \begin{matrix} a \\ b a \end{matrix} \right\} J_i^b$$

であって0ではない。

5) 公式5:

2階テンソルの共変微分

$$T_{ijk} = T_{ij,k} - T_{lj} \left\{ \begin{matrix} l \\ i k \end{matrix} \right\} - T_{il} \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\} \quad (1)$$

$$T^i_{jk} = T^i_{j,k} + T^i_j \left\{ \begin{matrix} i \\ k l \end{matrix} \right\} - T^i_l \left\{ \begin{matrix} l \\ j k \end{matrix} \right\} \quad (2)$$

$$T^j_{ik} = T^j_{i,k} - T^j_l \left\{ \begin{matrix} l \\ i k \end{matrix} \right\} + T^j_l \left\{ \begin{matrix} j \\ k l \end{matrix} \right\} \quad (3)$$

$$T^{ij}_k = T^{ij}_{,k} + T^{ij} \left\{ \begin{matrix} i \\ k l \end{matrix} \right\} + T^{il} \left\{ \begin{matrix} j \\ k l \end{matrix} \right\} \quad (4)$$

6) 公式6:

反変変数と共変変数の微分関係

$$\frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J_i^a, \quad \frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J_j^a g^{ij}, \quad \frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J_i^b g_{ab}, \quad \frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J_b^a g^{ib} g_{aj}$$

また、

$$\frac{\partial x_i}{\partial x^j} = g_{ij} = g_{ji} = \frac{\partial x_j}{\partial x^i}, \quad \frac{\partial x^i}{\partial x^j} = g^{ij} = g^{ji} = \frac{\partial x^j}{\partial x^i}$$

直交直線座標系においては、

$$\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i} = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x_i}$$

なる関係式が成り立つ。

7) 公式7: ベクトル公式

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}) + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v})$$

8) 参考文献

ここにおいて使用する記号、変数は全て付録1と同じとする。

1) 公式1 座標変換の行列式のテンソル表示

$$|J| = \sqrt{|g_{ij}|} = \sqrt{g}$$

および $|J| = |J_i^\alpha| = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i} \Delta_{\alpha i}$, ただし $\Delta_{\alpha i}$ は $\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i}$ の余因子である。

証明

直交座標変換に関して次の関数式が成立する。

$$g_{ij} = J_i^\alpha J_j^\beta g_{\alpha\beta}$$

この関係式の行列式は

$$|g_{ij}| = |J_i^\alpha| |J_j^\beta| \cdot |g_{\alpha\beta}| = |J|^2 |g_{\alpha\beta}|$$

直交直線座標系では $|g_{\alpha\beta}| = 1$ であるから、 $|g_{ij}| = |J|^2$ となる。

また、行列の展開式を余因子を使って表わすと上掲の式を得る。

2) 公式2 座標変換行列式の変換係数による微分式のテンソル表示

$$\frac{\partial |J|}{\partial J_i^j} = \frac{1}{2} J_m^j J_n^k e^{lmn} e_{ijk}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial |J|}{\partial J_i^j} \right) = \frac{\partial}{\partial x^i} (|J| J_i^j) = 0$$

証明

J_j^i を行列の要素とする行列式の展開は

$$|J| = J_1^i J_2^j J_3^k e_{ijk}$$

と表すことができる。また、次のようにも表すことができる。

$$|J| e_{lmn} = J_l^i J_m^j J_n^k e_{ijk}$$

$$|J| e_{lmn} e^{lmn} = J_l^i J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn}$$

ここで、

$$e^{lmn} e_{lmn} = (\delta_l^l \delta_m^m \delta_n^n - \delta_l^l \delta_n^m \delta_m^n) + (\delta_m^l \delta_n^m \delta_l^n - \delta_m^l \delta_l^m \delta_n^n)$$

$$+ (\delta_n^l \delta_m^m \delta_l^n - \delta_n^l \delta_m^m \delta_l^n)$$

$$= (\delta_l^l \delta_m^m \delta_n^n - \delta_l^l \delta_m^m) + (\delta_l^l - \delta_m^m \delta_n^n) + (\delta_l^l - \delta_m^m \delta_n^n)$$

$$= \delta_l^l \delta_m^m \delta_n^n - 3 \delta_l^l \delta_m^m + 2 \delta_l^l = 2 \times 3 = 6$$

この関係式を利用すると

$$6|J| = J_l^i J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn}$$

また、行列式 J は次のようにも表わすことができる。

$$|J| = J_i \Delta_{il}, \Delta_{il} \text{ は } J_i^i \text{ の余因子である。したがって、}$$

$$\frac{\partial |J|}{\partial J_i^i} = \Delta_{il} = |J| J_i^i = \frac{1}{6} J_l^i J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn} = \frac{1}{6} (J_l^i J_l^i) J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn}$$

$$= \frac{1}{2} J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn}$$

が成立する。

また、上に得られた式の両辺を x^i で除すると

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial |J|}{\partial J_i^i} \right) = \frac{\partial}{\partial x^i} (|J| J_i^i) = \frac{\partial}{\partial x^i} (J_m^j J_n^k e_{ijk} e^{lmn})$$

ここで $\frac{\partial}{\partial x^i} J_m^j = \frac{\partial}{\partial x^m} J_l^j$ であるから

$$\frac{\partial}{\partial x^i} (J_m^j) J_n^k e_{ijk} e^{lmn} - \frac{\partial}{\partial x^m} (J_l^j) J_n^k e_{ijk} e^{lmn} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^i} (J_m^j) J_n^k (e_{ijk} e^{lmn} - e_{ijk} e^{lmn}) = 0$$

を得る。したがって、括弧の中は 0 ではないから

$$\frac{\partial}{\partial x^i} (J_m^j) J_n^k = 0$$

である。よって、

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial |J|}{\partial J_i^i} \right) = \frac{\partial}{\partial x^i} (|J| J_i^i) = 0$$

である。

3) 公式3 Christoffel 記号の中に 同じ指標を持つ場合の表示式

$$\left\{ \begin{matrix} j \\ j i \end{matrix} \right\} = \frac{1}{|J|} \frac{\partial |J|}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^i} (J_j^j) J_i^j$$

証明

座標軸変換係数 J_i^α の行列式を $|J|$ で表すと

$$|J| = |J_i^\alpha| = J_i^\alpha \Delta_{\alpha i} \quad \text{ここに } \Delta_{\alpha i} \text{ は } J_i^\alpha \text{ の余因子である。}$$

行列式 $|J_i^\alpha|$ を x^j で微分すると

$$\frac{\partial |J|}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^j} (J_i^\alpha) \Delta_{\alpha i} +$$

$$+ J_i^\alpha \frac{\partial}{\partial x^j} \Delta_{\alpha i}$$

右辺第二項の余因子 $\Delta_{\alpha i}$ は x^j を含まないから 0 である。

また、 $|J| = J_i^\alpha \Delta_{\alpha i}$ より $\Delta_{\alpha i} = |J| J_\alpha^i$

あるから、したがって

$$\frac{\partial |J|}{\partial x^j} = \frac{\partial}{\partial x^j} (J_i^\alpha) |J| J_\alpha^i$$

式を整理すると次式を得る、

$$\frac{1}{|J|} \frac{\partial |J|}{\partial x^i} = \frac{\partial}{\partial x^i} (J_j^\alpha) J_\alpha^j = \left\{ \begin{matrix} j \\ j i \end{matrix} \right\}$$

なお、右辺最後の項に関しては、公式 4 参照。

4) 公式4 テンソルの微分法

二つの座標系の指標を (i, j, k) と (a, b, c) とし、両座標系間の変換関係を意味する

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial x^c}{\partial x^j} \right) = \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^c}{\partial x^k} - \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^a}{\partial x^i} \frac{\partial x^b}{\partial x^j}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^k}{\partial x^b} \right) = \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^k}{\partial x^c} - \left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^i}{\partial x^a} \frac{\partial x^j}{\partial x^b}$$

または、直交直線座標系 y^α を導入すると、

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ i j \end{matrix} \right\} = \frac{\partial x^k}{\partial y^\alpha} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^j} \right)$$

および、

$$- \left\{ \begin{matrix} c \\ a b \end{matrix} \right\} = \frac{\partial y^\beta}{\partial x^b} \frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^c}{\partial y^\beta} \right)$$

なる関係式を得る。

証明

この関係式は、一般曲線座標系において指標 (i, j, k) を持つ座標系と指標 (a, b, c) を持つ座標系の間に成りたつものである。したがって、直交直線座標系における指標 (α, β, γ) を持つ座標系を仲介として上掲の関係式を導く。付録 1 の定義 3 により、

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ j k \end{matrix} \right\} = \frac{\partial x^i}{\partial y^\alpha} \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial y^\alpha}{\partial x^k} \right) = J_\alpha^i J_j^b \frac{\partial}{\partial x^b} (J_k^\alpha) =$$

$$= J_\alpha^i J_j^b \left[\frac{\partial}{\partial x^b} (J_k^\alpha) J_c^\alpha + J_k^\alpha \frac{\partial}{\partial x^b} (J_c^\alpha) \right] =$$

$$= J_\alpha^i J_j^b \left[\frac{\partial}{\partial x^b} (J_k^\alpha) J_c^\alpha + J_k^\alpha J_a^\alpha J_a^c \frac{\partial}{\partial x^b} (J_c^\alpha) \right] =$$

$$= J^i_\alpha J^b_j \left[\frac{\partial}{\partial x^b} (J^c_k) J^a_c + J^c_\alpha J^a \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} \right] =$$

$$= J^i_c \frac{\partial}{\partial x^j} (J^c_k) + J^i_\alpha J^b_j J^c_k \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\}$$

両辺に J^d_i を乗ずる,

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ j \ k \end{matrix} \right\} J^d_i = \frac{\partial}{\partial x^j} (J^c_k) J^d_i + J^i_\alpha J^d_j J^b_k \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} (J^c_k) \delta^d_c + \delta^d_\alpha J^b_j J^c_k \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial x^j} (J^d_k) + \left\{ \begin{matrix} d \\ b \ c \end{matrix} \right\} J^b_j J^c_k$$

よって,

$$\frac{\partial}{\partial x^j} (J^d_k) = \left\{ \begin{matrix} i \\ j \ k \end{matrix} \right\} J^d_i - \left\{ \begin{matrix} d \\ b \ c \end{matrix} \right\} J^b_j J^c_k$$

を得る, これが標題における第一式である。

ここで, もし (a, b, c) 座標系を直交直線座標系にとると *Christoffel* 記号の値は

$$\left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\} = \mathbf{e}^c \cdot \mathbf{a} \mathbf{e}_b = 0$$

である。ただし, $\frac{\partial \mathbf{e}^c}{\partial x^a} = 0$ を利用した。

指標 (a, b, c) を持つ一般曲線座標系の変数と指標 (α, β, γ) を直交直線座標系の変数の間には

$$\frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\gamma}{\partial x^j} \right) = \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} \frac{\partial y^\gamma}{\partial x^k}$$

すなわち

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} = \frac{\partial x^k}{\partial y^\gamma} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{\partial y^\gamma}{\partial x^j} \right)$$

が成り立つ。

また, 逆に指標 (i, j, k) の座標系を直交直線座標系とすると *Christoffel* 記号の値は

$$\left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} = 0$$

であるから,

$$\frac{\partial}{\partial y^\alpha} \left(\frac{\partial x^c}{\partial y^\beta} \right) = - \left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^a}{\partial y^\alpha} \frac{\partial x^b}{\partial y^\beta}$$

が成りたち,

$$- \left\{ \begin{matrix} c \\ a \ b \end{matrix} \right\} = \frac{\partial y^\beta}{\partial x^b} \frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^c}{\partial y^\beta} \right)$$

なる関係式を得る。

ここで注意する必要があるのは

$$\frac{\partial}{\partial x^a} \left(\frac{\partial x^a}{\partial x^i} \right) = J^j_a \frac{\partial}{\partial x^j} \left(\frac{\partial x^a}{\partial x^i} \right) = J^j_a \left(\left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^a}{\partial x^k} - \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^b}{\partial x^i} \frac{\partial x^c}{\partial x^j} \right) =$$

$$= \left\{ \begin{matrix} k \\ i \ j \end{matrix} \right\} \delta^j_k - \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} \frac{\partial x^b}{\partial x^i} \delta^a_c = \left\{ \begin{matrix} j \\ i \ j \end{matrix} \right\} - \left\{ \begin{matrix} a \\ b \ c \end{matrix} \right\} J^b_i$$

であって直交直線座標系から直交直線座標系への変換でない限りこの微分は一般的には0ではない。

5) 公式5 2階テンソルの共変微分

$$T_{ij|k} = T_{ij,k} - T_{ij} \left\{ \begin{matrix} l \\ i \ k \end{matrix} \right\} - T_{il} \left\{ \begin{matrix} l \\ j \ k \end{matrix} \right\} \quad (1)$$

$$T^i_{j|k} = T^i_{j,k} + T^l_j \left\{ \begin{matrix} i \\ l \ k \end{matrix} \right\} - T^i_l \left\{ \begin{matrix} l \\ j \ k \end{matrix} \right\} \quad (2)$$

$$T^j_i|k = T^j_{i,k} - T^j_l \left\{ \begin{matrix} l \\ i \ k \end{matrix} \right\} + T^il \left\{ \begin{matrix} j \\ l \ k \end{matrix} \right\} \quad (3)$$

$$T^{ij}|k = T^{ij}_{,k} + T^{ij} \left\{ \begin{matrix} i \\ l \ k \end{matrix} \right\} + T^{il} \left\{ \begin{matrix} j \\ l \ k \end{matrix} \right\} \quad (4)$$

証明

(1) 式の証明のみを行う。

テンソルの微分はベクトル量の共変微分とスカラー量の共変微分が基本である。ベクトル量の共変微分は *Christoffel* 記号を用いて表されるがスカラー量の共変微分は単なる偏微分と同じである。一方, テンソル量の特徴は, あるテンソル量にその階数に応じたベクトル量を適当に乗ずるとスカラー量にできることである。

2階共変テンソル T_{ij} と二つのベクトル成分 v^i, v^j の積はスカラーであるから

$$\phi = T_{ij} v^i v^j$$

で与えられる ϕ はスカラー関数である。スカラー関数 ϕ の微分はベクトル成分で, かつテンソル量でもある。

$$\phi_{,k} = \phi|_k$$

反変変数 x^k で両辺を微分すると

$$\phi_{,k} = T_{ij,k} v^i v^j + T_{ij} v^i_{,k} v^j + T_{ij} v^i v^j_{,k}$$

を得る, この式の右边をテンソル量で表現すると

$$\phi_{,k} = T_{ij,k} v^i v^j + T_{ij} \left(v^i|_k - v^l \left\{ \begin{matrix} i \\ l \ k \end{matrix} \right\} \right) v^j + T_{ij} v^i \left(v^j|_k - v^l \left\{ \begin{matrix} j \\ l \ k \end{matrix} \right\} \right)$$

一方,

$$\phi|_k = T_{ij|k} v^i v^j + T_{ij} v^i|_k v^j + T_{ij} v^i v^j|_k$$

であるから, 両式を等置してダミ 指標を整理すると

$$T_{ij|k} v^i v^j = \left(T_{ij,k} - T_{ij} \left\{ \begin{matrix} l \\ i \ k \end{matrix} \right\} - T_{il} \left\{ \begin{matrix} l \\ j \ k \end{matrix} \right\} \right) v^i v^j$$

を得る。この式は任意のベクトル成分 v^i, v^j に対して成立するから

$$T_{ij|k} = T_{ij,k} - T_{lj} \left\{ \begin{matrix} l \\ ik \end{matrix} \right\} - T_{il} \left\{ \begin{matrix} l \\ jk \end{matrix} \right\}$$

が得られる。

6) 公式 6 反変変数と共変変数の微分関係

$$\frac{\partial x^a}{\partial x^i} = J^a_i, \frac{\partial x^a}{\partial x_i} = J^a_j g^{ij}, \frac{\partial x_a}{\partial x^i} = J^b_i g_{ab}, \frac{\partial x_a}{\partial x_i} = J^b_j g^{ij} g_{ab}$$

また,

$$\frac{\partial x_i}{\partial x^j} = g_{ij} = g_{ji} = \frac{\partial x_j}{\partial x^i}, \frac{\partial x^i}{\partial x_j} = g^{ij} = g^{ji} = \frac{\partial x^j}{\partial x_i}$$

直交直線座標系においては,

$$\frac{\partial y^a}{\partial x^i} = \frac{\partial x_i}{\partial y^a}$$

なる関係式が成り立つ。

証明

第一の関係式は

$$dx^a = \frac{\partial x^a}{\partial x_i} dx_i = \frac{\partial x^a}{\partial x_i} g_{ij} dx^j$$

$$dx^a = \frac{\partial x^a}{\partial x^i} dx^i = \frac{\partial x_b}{\partial x^i} g^{ab} dx^i$$

$$dx^a = \frac{\partial x^a}{\partial x_i} dx_i = \frac{\partial x_b}{\partial x_i} g^{ab} g_{ij} dx^j$$

から明らかであり、第二の関係式は

$$dx_i = \frac{\partial x_i}{\partial x^j} dx^j = g_{ij} dx^j$$

$$dx^i = \frac{\partial x^i}{\partial x_j} dx_j = g^{ij} dx_j$$

$g^{ij} = g^{ji}$ は定義より明らかである。

第三の関係式に関しては

$$ds^2 = dy^a e_a dy^b e_b = dx^i g_i dx_j g^j$$

であるから

$$dy^a dy^a = dx^i dx_i$$

が成り立つからである。

ここで注意しなければならないのは、変換 $x_i = g_{ij} x^j$ は x^j がテンソル量ではないから成立しないことである。 $dx^j = g_{ij} dx^i$ が成立する。

7) 公式 7

$$\nabla^2 \mathbf{v} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}) + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v})$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\nabla \nabla) \mathbf{v}$$

$$\nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\mathbf{b} \nabla) \mathbf{a} + \mathbf{a} (\nabla \mathbf{b}) - \mathbf{b} (\nabla \mathbf{a}) - (\mathbf{a} \nabla) \mathbf{b}$$

$$\mathbf{c} \times (\mathbf{a} \times \mathbf{v}) = (\mathbf{c} \mathbf{b}) \mathbf{a} - (\mathbf{c} \mathbf{a}) \mathbf{b}$$

$$(\mathbf{v} \cdot \text{grad}) \mathbf{v} = \text{grad} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right)$$

証明

7-1)

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{v} &= v^j |^j_j \mathbf{g}_j = v^i |^j_k \mathbf{g}_i \delta_j^k \delta_i^l = v^j |^j_k \mathbf{g}_i \left(\epsilon^{klm} \epsilon_{jim} + \delta_j^k \delta_i^l \right) = \\ &= \left(v^j |^j_k \epsilon_{jim} \right) |^k \epsilon^{klm} \mathbf{g}_i + v^j |^j_i \mathbf{g}_j = \\ &= (\nabla \times \mathbf{v})_m |^k \epsilon^{klm} \mathbf{g}_i + v^j |^j_i \mathbf{g}_j = \\ &= \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}) + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) \end{aligned}$$

により上掲の関係式が得られる。

ここに関係式

$$\epsilon^{ijk} \epsilon_{lmk} = \epsilon^{ij} \epsilon_{lm} = \delta_i^l \delta_j^m - \delta_m^i \delta_l^j$$

を利用した。

$$7-2) \nabla \times (\nabla \times \mathbf{v}) = (\nabla \times \mathbf{v})_k |^i_j \mathbf{g}^j |^i_k \times \mathbf{g}^k =$$

$$\begin{aligned} &= \left(v^j |^l \epsilon_{ijk} \right) |^i_j \mathbf{g}^k \times \mathbf{g}^k = v^j |^l \epsilon_{ijk} \epsilon^{ikm} \mathbf{g}_m = \\ &= v^j |^l \left(\delta_j^i \delta_l^m - \delta_l^i \delta_j^m \right) \mathbf{g}_m = v^j |^l_i \mathbf{g}_l - v^j |^i_j \mathbf{g}_j = \\ &= \nabla (\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\nabla \nabla) \mathbf{v} \end{aligned}$$

$$7-3) \nabla \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_j |^i_k \mathbf{g}^k |^i_j \times \mathbf{g}^j = (\mathbf{a}^k \mathbf{b}^l \epsilon_{jkl}) |^i_j \epsilon^{ijm} \mathbf{g}_m =$$

$$\begin{aligned} &= (\mathbf{a}^k \mathbf{b}^l) |^i_j \epsilon^{ijm} \mathbf{g}_m = (\mathbf{a}^k \mathbf{b}^l) |^i_j \left(\delta_j^i \delta_k^m - \delta_k^i \delta_j^m \right) \mathbf{g}_m = \\ &= \mathbf{a}^k |^i_j \mathbf{b}^j \mathbf{g}_k + \mathbf{a}^k \mathbf{b}^i |^i_j \mathbf{g}_k - \mathbf{a}^i |^i_j \mathbf{b}^j \mathbf{g}_i - \mathbf{a}^i \mathbf{b}^i |^i_j \mathbf{g}_i = \\ &= (\mathbf{b} \nabla) \mathbf{a} + \mathbf{a} (\nabla \mathbf{b}) - \mathbf{b} (\nabla \mathbf{a}) - (\mathbf{a} \nabla) \mathbf{b} \end{aligned}$$

$$7-4) \mathbf{c} \times (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{c}^i (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_j \epsilon_{ijk} \mathbf{g}^k = \mathbf{c}^i \mathbf{a}_m \mathbf{b}_n \epsilon^{ilm} \epsilon_{ijk} \mathbf{g}^k$$

$$\begin{aligned} &= \mathbf{c}^i \mathbf{a}_m \mathbf{b}_n \left(\delta_k^l \delta_i^m - \delta_i^l \delta_k^m \right) \mathbf{g}^k = \\ &= \mathbf{c}^i \mathbf{a}_k \mathbf{b}_i \mathbf{g}^k - \mathbf{c}^i \mathbf{a}_i \mathbf{b}^k \mathbf{g}^k = \\ &= (\mathbf{c} \mathbf{b}) \mathbf{a} - (\mathbf{c} \mathbf{a}) \mathbf{b} \end{aligned}$$

$$7-5) (\mathbf{v} \cdot \text{grad}) \mathbf{v} = v^i \cdot \mathbf{v} |^i_j = v^i (v^k |^i_j) \cdot \mathbf{g}_k$$

$$\text{一方 } \text{grad} \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}{2} \right) = \frac{1}{2} \left(v^j \cdot v_j |^i_i + v_j \cdot v^j |^i_i \right) \mathbf{g}^i =$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2} \left(v^j \cdot v^k g_{kj} |^i_i + v^l g_{il} \cdot v^j |^i_i \right) \mathbf{g}^{im} \mathbf{g}_m = \\ &= \frac{1}{2} \left(v^j \cdot v^k |^i_j \delta_j^k + v^l \cdot v^j |^i_l \delta_l^j \right) \mathbf{g}_m = \\ &= \frac{1}{2} \left(v^i \cdot v^k |^i_i + v^i \cdot v^k |^i_i \right) \mathbf{g}_k = \\ &= v^i \cdot v^k |^i_i \mathbf{g}_k \end{aligned}$$

8) 参考文献

- 1) 多谷虎男; 力学におけるテンソルと変分解析 [上] [下], (1980), 学会出版センター
- 2) I. S. SOKOLNIKOFF; TENSOR ANALYSIS THEORY AND APPLICATIONS TO GEOMETRY AND MECHANICS OF CONTINUA second edition, (1964), John Wiley and Sons, Inc

付録3) 異種分子を含む場合の熱力学方程式

付録3) の目次

- 1) 熱力学的関係の変数
 - 1.1) エネルギー $E(J; S, V)$
 - 1.2) エンタルピー $W(J; S, P)$
 - 1.3) Helmholtz の自由エネルギー $F(J; V, T)$
 - 1.4) Gibbs 自由エネルギー $\Phi(J; P, T)$
- 2) 熱力学的量の粒子数依存性
 - 2.1) 理想気体における $E(J; S, V), \Phi(J; P, T), F(J; V, T)$
- 3) 化学ポテンシャルの定義とその意味
 - 3.1) 化学ポテンシャルと粒子数の関係
 - 3.1.1) 重力場における平衡物体の化学ポテンシャル
 - 3.1.2) 平衡状態にある回転物体の化学ポテンシャル
- 4) 二種以上の異なる物質を含む系
 - 4.1) 溶媒と多種類の溶質の場合
 - 4.1.1) 溶媒の平衡 (浸透圧)
 - 4.1.2) 溶質の平衡
 - 4.1.3) 重力場における溶液の平衡
 - 4.1.4) 同一の溶媒中に存在する二種類の溶質の平衡
 - 4.1.5) 二種類の溶質の飽和蒸気圧の平衡
 - 4.2) 二種類の理想気体の混合
 - 4.2.1) 二種類理想気体が混合している場合の熱拡散比

$$k_p = \frac{p \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P, T}}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P, T}}$$

および、拡散係数

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P, T}$$

を求める。

- 4.2.2) 二種類の理想気体が混合しており、圧倒的多数の理想気体粒子 N の中に極く少数の理想気体粒子 n が存在する場合の熱拡散比

$$k_d = \frac{p \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P, T}}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P, T}}$$

および、拡散係数

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P, T}$$

を求める。

5) 参考文献

1) 熱力学的関係と変数

マクロ的にみた場合の熱力学的諸量はエネルギー、体積などの熱力学的ないしは純粋に力学的な意味をもつものや、またエントロピーなどミクロ的に見た場合意味のなくなる統計力学的量が持つ意味を持っている。

そのうち、

- エネルギー
- エントロピー
- 体積

は加算的の量である。

エネルギーが与えられるとエントロピーは体積のみの関数であり、また逆にエントロピーが与えられるとエネルギーは体積のみの関数である。したがって、独立変数としてエネルギー、エントロピー、体積のうち二つを選べる。

いま、一つの閉じた系において、物質はマクロな熱力学的平衡な状態にあるとする、すなわち、エントロピーが最大の状態であるとする。

1.1) エネルギー $E(J; S, V)$

定義1 絶対温度 $T(K)$

$$T = \frac{\partial E}{\partial S}$$

この定義では、温度 T はエネルギー量 (J) であり、エントロピーは無次元量である。通常、単位として *Kelvin* が用いられる、したがって温度の単位を K とするとエントロピーは (J/K) となる。*Boltzmann constant* κ を導入すると $T(J) = \kappa (J/K) T(K)$ と $S(J) = S(J/K) / \kappa (J/K)$ から温度 $T(K)$ としてエントロピー $S(J/K)$ としたとき

$$T(K) = \frac{\partial E(J)}{\partial S(J/K)}$$

が成立する。

定義2 圧力 $P(N/m^2)$:

$$P(N/m^2) = - \frac{\partial E(J)}{\partial V(m^2)}$$

と定義すると、基礎方程式

$$dE = \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_V dS + \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_S dV = TdS - PdV$$

を得る。

定義3 定積比熱 $C_V(J/Kg: K)$,

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial S} \right)_V \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V,$$

以上において示した方法を基本的な考え方として、さら

に異なる関数を導入する。

1.2) エンタルピー $W(J; S, P)$

$W = E + PV$ で定義される関数である。

全微分をとる

$$dW = \left(\frac{\partial W}{\partial S}\right)_P dS + \left(\frac{\partial W}{\partial P}\right)_S dP = dE + PdV + VdP$$

ここで, $dE = TdS - PdV$ を利用すると

$$dW = TdS + VdP$$

を得る。

定義 4 定圧比熱 $C_p(J/Kg \cdot K)$:

$$C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial W}{\partial S}\right)_P \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial W}{\partial T}\right)_P$$

となる。また, エンタルピーを利用すると温度, 体積は

定義 5) 絶対温度 $T(K)$:

$$T = \left(\frac{\partial W}{\partial S}\right)_P$$

定義 6) 体積 $V(m^3)$:

$$V = \left(\frac{\partial W}{\partial P}\right)_S$$

とも定義できる。

1.3) Helmholtz の自由エネルギー $F(J; V, T)$

$F = E - TS$ で定義される関数である。

全微分をとる

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T dV + \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V dT = dE - TdS - SdT$$

ここで, $dE = TdS - PdV$ を利用すると

$$dF = -PdV - SdT$$

を得る。

定義 7) エントロピー $S(J/K)$:

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$$

定義 8) 圧力 $P(N/m^2)$:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$$

と定義できる。

1.4) Gibbs 自由エネルギー $\Phi(J; P, T)$

$\Phi = W - TS$ で定義される関数である。

前と同時に全微分をとる

$$d\Phi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_P dT = dW - TdS - SdT$$

ここで, $dE = TdS - PdV$ を利用すると

$$d\Phi = VdP - SdT$$

を得る。

定義 9) エントロピー $S(J/K)$:

$$S = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_P$$

定義 10) 体積 $V(m^3)$:

$$V = - \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_T$$

と定義できる。

もし, エネルギー E がパラメータ λ_i を含んでいる場合には, その全微分は

$$dE = TdS - PdV + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i$$

となり, 右辺に $\sum_i \Lambda_i d\lambda_i$ の項が追加される。 Λ_i は物体の状態量の関数である。この微分項は, F, Φ, W などの熱力学的ポテンシアルにも同様な形で追加される。

$$dF = -SdT - PdV + \sum_i \Lambda_i d\lambda_i$$

などである。

2) 熱力学量の粒子数依存性

すべての熱力学的量は完全な熱平衡状態にあるとする。エネルギー, エントロピー, F, Φ, W などは加算量であり P, T は非加算量である。

ここで加算的熱力学量は加算的変数に関して 1 次の *homogeneous function* であるということ, すなわち

$$g(\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) = \lambda^1 g(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

であることに注目する。まず, 独立変数を S, E, V とし, さらに粒子数 N を考慮する。エネルギー $E(S, V, N)$ は, S と V は加算的熱力学変数であるから

$$E = Ng_E \left(\frac{S}{N}, \frac{V}{N} \right)$$

また, エンタルピー $W(S, P, N)$ は

$$W = Ng_w \left(\frac{S}{N}, P \right)$$

Helmholtz の自由エネルギー $F(V, T, N)$ は, T が非加算量であるから

$$F = Ng_F \left(\frac{V}{N}, T \right)$$

であり,

Gibbs の自由エネルギー $\Phi(P, T, N)$ は

$$\Phi = Ng_\Phi(P, T)$$

と関数表示できる。

2.1) 理想気体における $E(J; S, V)$, $\Phi(J; P, T)$, $F(J; V, T)$

分子の性質は, 温度に依存しないという仮定のもとに $F(J; V, T)$ は

$$F(J: V, T) = -NT \cdot \ln\left(\frac{eV}{N}\right) + Nf(T)$$

と書ける¹⁾。ここに、 e は自然数であり、 $f(T)$ はある温度のみに依存する関数を意味する。

定義 8 により圧力 P は、上式を利用すると

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{NT}{V}$$

を得る。もし、 T を Kelvin K で表すと Boltzmann 定数 κ を用いて

$$P = \frac{N\kappa T}{V}$$

と表わせる。

また、 $\Phi(J: P, T) = W - TS = PV + F$

であるから

$$NT = PV$$

を用いて

$$\Phi(J: P, T) = NT \cdot \ln P + Nf(T) - NT \cdot \ln T \quad (2.1)$$

と Φ を P, V の関数として表示できる。

エネルギー E は

$$\Phi E(J, S, V) = F + TS = Nf(T) - NT \left(\ln\left(\frac{eV}{N}\right) - \frac{S}{N} \right)$$

である。

理想気体では体積一定のもとでエネルギーは温度のみの関数であることが示される。するとエンタルピー W とエネルギー E の関係式が $W = E + PV = E + NT$ であること

を利用すると、比熱 $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V$, $C_P = \left(\frac{\partial W}{\partial T}\right)_P$ が得られ、これら比熱は温度のみの関数である。

3) 化学ポテンシャルの定義とその意味

上式において、粒子数 N を形式的独立数とすると

$$dE = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_{V, N} ds + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S, N} dV + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S, V} dN = Tds - PdV + \mu_E dN$$

ただし、 $\mu_E = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{S, V}$ であり、化学ポテンシャルである。同様に他の熱力学的量 $W(S, P)$, $F(V, T)$, $\Phi(P, T)$ についても

$$dW = \left(\frac{\partial W}{\partial S}\right)_{P, N} dS + \left(\frac{\partial W}{\partial P}\right)_{S, N} dP + \left(\frac{\partial W}{\partial N}\right)_{S, P} dN = Tds + VdP + \mu_w dN, \quad \mu_w = \left(\frac{\partial W}{\partial N}\right)_{S, P}$$

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V, N} dT - \left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T, N} dV + \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T, V} dN = -SdT - PdV + \mu_F dN, \quad \mu_F = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T, V}$$

$$d\Phi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_{P, N} dT + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_{T, N} dP + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N}\right)_{P, T} dN = -SdT + VdP + \mu_\Phi dN, \quad \mu_\Phi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N}\right)_{P, T}$$

であり、化学ポテンシャルはすべて同じである。

3.1) 化学ポテンシャルと粒子数の関係

化学ポテンシャル表示法は種々あり以下に述べるように定義できるものである。

定義 11 化学ポテンシャル μ

$$\mu = \left(\frac{\partial W}{\partial N}\right)_{P, S} = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T, V} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N}\right)_{P, T}$$

μ を以上のように定義すると、Gibbs の自由エネルギーは

$$\Phi(P, T, N) = Ng_\Phi(P, T)$$

$$\text{から } \mu = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N}\right)_{P, T} = g_\Phi(P, T) = \frac{\Phi}{N}$$

となり、 μ は分子 1 個の Gibbs 自由エネルギーに等しいことがわかる。しかも $\mu = g_\Phi(P, T)$ であるから分子数 N には無関係な量であることもわかる。したがって、

$$\mu = \mu(P, T)$$

であるから、

$$\begin{aligned} d\mu &= \left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P dT = \left(\frac{\partial g_\Phi}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial g_\Phi}{\partial T}\right)_P dT = \\ &= \frac{1}{N} \left[\left(\frac{\partial \Phi}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial T}\right)_P dT \right] = \frac{1}{N} (Vdp - SdT) = \\ &= \frac{V}{N} dP - \frac{S}{N} dT = v dP - s dT \end{aligned}$$

ここに、 $v = \frac{V}{N}$, $s = \frac{S}{N}$ である。

また

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial P}\right)_T = v, \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_P = -s$$

である。この式はよく使われる関係式である。

次に体積一定とし、その体積内に存在する N は変化するものとする。

$$dF = -SdT - PdV + \mu_F dN$$

なる関係式において、 $dV = 0$ であるから

$$dF = -SdT + \mu_F dN$$

独立変数を N の代わりに μ にすると、

$$dF = -SdT + d(\mu_F N) - N d\mu_F$$

したがって、

$$d(F - \mu_F N) = -SdT - N d\mu_F$$

ここで、 $\mu_F N = \Phi$ であるから、いま

定義 12

$$\Omega(P, V) \equiv F(V, T) - \Phi(P, T) = E(S, V) - W(S, P) = -PV$$

で $\Omega(P, V)$ を定義する。

そのとき，上式は

$$d\Omega = - SdT - Nd\mu_F = \left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{\mu_F, V} dT + \left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu_F}\right)_{T, V} d\mu_F$$

となり、分子数は

$$N = - \left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T, V} \equiv V \left(\frac{\partial P}{\partial\mu}\right)_{T, V}$$

で与えられる。

以上により，化学ポテンシャル μ と分子数 N の関係式が得られた。

3.1.1) 重力場における平衡物体の化学ポテンシャル

物体は非等質的であるとし，エネルギーは一定として平衡状態にあるとする。そのための一つの必要条件は熱力学的量として

エネルギー，エントロピー，体積

またこれらの量から発生する温度 T ，圧力 P ，すなわち

$$T = \left(\frac{\partial E}{\partial S}\right)_V, P = - \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_S$$

の関係において示すならば，エントロピーが最大であることである。エントロピー最大の状態では，つまり温度一定の状態では圧力のみが変化できる物理量である。もしさらに体積一定の条件を付するとエントロピーが最大ならばそのための必要条件として粒子数 N についての微分が 0 でなければならないから

$$dE = TdS + \mu_E dN$$

から

$$\frac{1}{T} dE = \frac{dS}{dN} + \frac{\mu_E}{T} = 0$$

すなわち，

$$\frac{dS}{dN} = - \frac{\mu_E}{T} = \text{const.}$$

を得る。この式は以下のようにして証明される。

ある物体を多くの部分に分割し，それらのうちから二つの部分を適当に選ぶとする。それぞれの部分のうちエントロピーを S_1, S_2 として粒子数を N_1, N_2 とする。エントロピー最大の必要条件は

$$\frac{\partial S}{\partial N_1} = \frac{\partial(S_1 + S_2)}{\partial N_1} = \frac{\partial S_1}{\partial N_1} + \frac{\partial S_2}{\partial N_2} \frac{\partial N_2}{\partial N_1} = \frac{\partial S_1}{\partial N_1} - \frac{\partial S_2}{\partial N_2} = 0$$

すなわち

$$\frac{\partial S}{\partial N} = \text{const.}$$

これが証明である。

温度一定の条件のもとに

$$\mu_E = \text{const.}$$

が得られる。

μ は上述のように温度と圧力の関数であるから平衡な系においては圧力，温度の関係として化学ポテンシャルは一定であると結論できる。

化学ポテンシャルの定義式

$$\mu_E = \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_{V, S}$$

から μ_E はエントロピー，体積を一定としたとき粒子当りの熱力学的ポテンシャルであることがわかる。

外力が存在する場合

ここでは，重力場で平衡状態にある分子のポテンシャルエネルギーは重力中心座標にのみ依存する。したがって，化学ポテンシャル μ_E は

$$\mu_E = \mu_0(P, T) + u(x, y, z) = \text{const.}$$

u は分子のポテンシャルエネルギー， μ_0 は外力がない場合の熱力学的ポテンシャルである。

一様な重力場では

$$\mu_E = mgz$$

である。

ここに， m は分子の質量， g は重力加速度， z はある基準位置から高さである。

ここで，化学ポテンシャル μ を z について微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_E}{\partial z} &\equiv \frac{\partial \mu_0}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial \mu_0}{\partial P} \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial \mu_0}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} = \\ &= v_0 \frac{\partial P}{\partial z} - s_0 \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \end{aligned}$$

仮定により T は一定であるから

$$v_0 \frac{\partial P}{\partial z} = - \frac{\partial u}{\partial z} = - mg$$

より，非圧縮性流体の圧力と密度の関係式

$$\frac{\partial P}{\partial z} = - \frac{m}{v_0} g = - pg$$

が得られる。

3.1.2) 平衡状態にある回転物体の化学ポテンシャル

熱力学的平衡にある物体のマクロ的運動は可能であるかどうかについて考察する。その概略を以下に述べる。物体をマクロ的に多くの部分に分割する，そのとき部分 α の質量，エネルギー，運動量を $M_\alpha, E_\alpha, \mathbf{P}_\alpha$ とする。

内部エネルギーは $E_\alpha - \frac{\mathbf{P}_\alpha^2}{2M_\alpha}$ であるからエントロピーは，関係形として

$$S_\alpha = S_\alpha \left(E_\alpha - \frac{\mathbf{P}_\alpha^2}{2M_\alpha} \right)$$

として表わされる。

一つの閉じた系を考え、その系の内では

1) 運動量一定

$$\sum_a \mathbf{P}_a = const.$$

2) 角運動量一定

$$\sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{P}_a = const.$$

である。

平衡状態では、閉じた系について全てエントロピーは運動量 \mathbf{P} の関数として 1), 2) の条件の下に最大値をとる。すなわち、ラグランジュの未定係数法により以下に示すように最大値を取るための必要条件が得られる。

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_a} \left[\sum_a (S_a + \mathbf{a} \cdot \mathbf{P}_a + \mathbf{b} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{P}_a) \right] = 0$$

\mathbf{a}, \mathbf{b} は定ベクトルである。

また、

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{P}_a} S_a \left(E_a - \frac{\mathbf{P}_a^2}{2M_a} \right) - \frac{\mathbf{P}_a}{M_a T}$$

であり、 $\mathbf{P}_a = M_a \mathbf{v}$ として、 $\mathbf{b}(\mathbf{r} \times \mathbf{P}_a) = \mathbf{P}_a(\mathbf{b} \times \mathbf{r})$ を利用すると

$$\mathbf{v}_a = \mathbf{u} + \Omega \times \mathbf{r}_a$$

を得る。ここに

$$\mathbf{u} = T \cdot \mathbf{a}, \Omega = T \cdot \mathbf{b}$$

とする。

したがって、閉じた系において熱力学的平衡状態にある物体は一樣並進運動か回転運動のみが可能であることがしめされた。一般には物体内部ではマクロな運動は生じないということである。

そこで、ここでは平衡状態において許される運動のうちで回転運動のみを考える。物体がある固定軸のまわりに角速度 Ω をもって回転しているものとする。固定座標軸に関する物体のエネルギーを $E_f(p, q)$ とする。ただし、 p, q はそれぞれ、一般座標系における運動量、座標とする。 $E_r(p, q)$ を物体とともに回転する座標系に関する物体のエネルギーとする。 $\mathbf{M}(p, q)$ を物体の角運動量とすると次の関係が成立する。

$$E_r(p, q) = E_f(p, q) - \Omega \cdot \mathbf{M}(p, q)$$

この式からエネルギー $E_r(p, q)$ をパラメータ Ω について微分すると関係式

$$\frac{\partial E_r(p, q)}{\partial \Omega} = - \mathbf{M}(p, q)$$

が得られるが $E_r(p, q)$ はパラメータとして Ω を考えると平衡状態、すなわちエントロピー一定の条件のもとに

$$\frac{\partial E_r(p, q; \Omega)}{\partial \Omega} = \left(\frac{\partial E_r}{\partial \Omega} \right)_S, \quad \frac{\mathbf{M}}{(p, q)} = \mathbf{M}$$

と表現できる。物体の統計力学的分布について平均した量では、結局

$$\left(\frac{\partial E_r}{\partial \Omega} \right)_S = - \mathbf{M}$$

が得られる。上式を考慮すると、回転物体のエネルギーの微分形は

$$dE_r = T dS - \mathbf{M} \cdot d\Omega$$

で与えられることがわかる。

(3.2) 式を同様に平均すると

$$E_r = E_f - \Omega \cdot \mathbf{M}$$

であるから、微分形として、固定座標軸に関しては

$$dE_f = T dS + \Omega \cdot d\mathbf{M}$$

を得る。

すなわち、固定座標軸系からみたエネルギーは与えられた熱的エネルギーに回転運動のエネルギーを加えたものに等しく、独立変数はエントロピーと角運動量であるといえる。

角速度は

$$\Omega = \left(\frac{\partial E_f}{\partial \mathbf{M}} \right)_S$$

の関係式から得られる従属変数である。

回転運動に関しては、遠心力とコリオリ力が考えられる、したがって、(3.1) 式のポテンシャルエネルギー $u(x, y, z)$ はコリオリ力と遠心力の和

$$2M\mathbf{R}(\Omega \times \mathbf{v}) - M \frac{(\Omega \cdot \Omega)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{R})}{2}$$

で表わされる。ここに、 M は分子量であり、 \mathbf{v} は回転座標系からみた速度ベクトルであり、 \mathbf{K} は回転軸から物体までの距離である。

マクロな物体にとっては遠心力に比べてコリオリ力は無視できるくらい小さいとみることができる、この式においてコリオリ力に関するエネルギーを遠心力によるエネルギーに比べて無視すると

$$\mu_0(p, T) - M \frac{(\Omega \cdot \Omega)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{R})}{2} = const.$$

となる。ここに、 μ_0 は物体の運動がないときの化学ポテンシャルエネルギーである。

さらに今まで述べてきたことを考慮するとこの現象はまた次のように理解することができる。熱力学的平衡状態にある物体の回転運動は慣性軸の主軸を回転軸として行われる。

このことは次の様にして理解できる。

回転体の全エネルギー E_t は内部エネルギー E_{in} と回転運動エネルギー $-\frac{\mathbf{M}^2}{2I}$ の和で表現できることが (3.2) 式から理解できる。

$$E_t = E_{in} + \frac{\mathbf{M}^2}{2I}$$

ここに I は回転軸に関する物体の回転モーメントである。

回転により物体内部の質量分布が変化し、そのことによって慣性モーメントや内部エネルギーが変化することがあるならば全エネルギーは回転数 Ω の関数となる。しかしこれらの回転による変化が起こらない回転が遅ければ全エネルギーは Ω に関係ない量と考えることができる。その場合にも一つの閉じた系において、全エネルギー、角運動量は保存され、エントロピーは \mathbf{M} 、 E が一定のもとにエントロピーは最大でなければならない。エントロピー S は

$$S = S(E_{in}) = S\left(E_t - \frac{\mathbf{M}^2}{2I}\right)$$

であるから、慣性モーメント I が最大のときエントロピー最大になる。すなわち、平衡状態になり、一方運動の面からみると、これは主軸の回りの回転を意味している。

4) 二種以上の異なる物質を含む系

2) では一種類の物質の場合を扱ったが、ここでは圧倒的に多数の物質 (溶媒) の中にそれとは異なる複数の種類の物質 (溶質) を含む場合の系について述べる。平衡状態にある系においては、熱力学的量は温度、圧力、溶質の粒子数によって完全に決定される。これは 2) の場合と本質的に同じである。また、2) と同様に熱力学的量は加算的熱力学的変数、すなわち、粒子数と体積の *homogeneous function* でなければならない。^{*})

$$\begin{aligned} &^*) g(\lambda_1(x_1)_{i1}, \lambda_2(x_2)_{i2}, \dots, \lambda_k(x_k)_{ik}, \dots, \lambda_n(x_n)_{in}) = \\ &= \lambda_1 g(\lambda_1(x_1)_{i1}, \lambda_2(x_2)_{i2}, \dots, \lambda_k(x_k)_{ik}, \dots, \lambda_n(x_n)_{in}) + \\ &+ \lambda_2 g(\lambda_1(x_1)_{i1}, \lambda_2(x_2)_{i2}, \dots, \lambda_k(x_k)_{ik}, \dots, \lambda_n(x_n)_{in}) + \\ &\dots + \lambda_k g(\lambda_1(x_1)_{i1}, \lambda_2(x_2)_{i2}, \dots, \lambda_k(x_k)_{ik}, \dots, \lambda_n(x_n)_{in}) + \\ &\dots + \lambda_n g(\lambda_1(x_1)_{i1}, \lambda_2(x_2)_{i2}, \dots, \lambda_k(x_k)_{ik}, \dots, \lambda_n(x_n)_{in}) \end{aligned}$$

また、化学ポテンシャル μ は関数 $\Phi(J; P, T, N_i)$ について考えると

$$d\Phi = -SdT + VdP + \sum (\mu_{\phi})_i dN_i$$

$$(\mu_{\phi})_k = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial N_k} \right)_{P, T}$$

となる。homogeneous function に関する Euler の定理より

$$\Phi = \sum N_i \frac{\partial \Phi}{\partial N_i} = \sum (\mu_{\phi})_i N_i$$

また、外力場における平衡状態の条件は系全体において温度一定と化学ポテンシャル一定となることである。すなわち、

$$T = const.$$

$$(\mu_{\phi})_i = const.$$

4.1) 溶媒と多種類の溶質の場合

この場合次の仮定を設ける。

$$c_i = \frac{n_i}{N} \ll 1$$

ただし、 n_i は溶質の粒子数、 N は溶媒の粒子数とする。すなわち、溶質はかなり薄い状態で溶媒に溶けている状態にある。

溶質の粒子数は溶媒の粒子数に比べて非常に少ないので、溶質の粒子はお互いに殆んど干渉することがなく、両者の干渉は無視できるものとする。

このとき関数 Φ は

$$\Phi(P, T, n_i, N) = N\mu_0 + \sum n_i T \ln \left(\frac{n_i}{eN} \right) + \sum n_i \psi_i + \sum \left(\frac{n_i n_k}{2N} \right) \beta_{ik} \quad (1)$$

μ_0 は溶媒のみが存在するときの化学ポテンシャル、 ψ_i は $f_i(P, T)/N$ の形の関数、 β_{ik} は P と T のみ関数である。右辺最後の項は、溶媒中に溶質が加われたときの熱力学的ポテンシャルの微小変化量を意味している。これは、溶媒、溶質の分子間相互作用の結果生ずるものであるが本文中では非常に小さい量として扱っている。

一種類の溶質が溶媒中に存在するとき溶媒の化学ポテンシャルを μ とし、溶質の化学ポテンシャル μ' とすると

$$\mu(P, T, \frac{n}{N}) = \mu_0 - T \frac{n}{N} = \mu_0 - Tc \quad (4.1)$$

$$\mu'(P, T, \frac{n}{N}) = T \cdot \ln \left(\frac{n}{N} \right) + \psi = T \cdot \ln c + \psi \quad (4.2)$$

である。

次に若干の具体的な場合について平衡条件について述べる。

4.1.1) 溶媒の平衡 (浸透圧)

浸透圧の場合の取り扱いと同じ溶媒に対して異なる溶質が半透膜を隔てて幾種類か存在するものとする。このとき平衡条件はすべての溶媒、溶質に関して温度が同じであり、浸透圧を考えているのであるから圧力は半透膜が存在するため異なるものとする。しかし、溶媒の化学ポテンシャルはすべての溶質に対して同じであることが条件になる。

すなわち、溶媒の化学ポテンシャルは (4.1) 式で与えられるから

$$\mu_0(P, T) - c_i = const. \quad i = 1, \dots, k$$

が平衡条件である。ただし、 i は溶質につけた種類を意

味する番号である。

4.1.2) 溶質の平衡

ここでは、例えば、油と水のように、ある溶媒中にそれと異なる溶質が幾種類が存在する溶液について考える。この場合、平衡条件は、温度、圧力が同じで溶質の化学ポテンシャルも同じである。

$$T \cdot \text{inc}_i + \psi(P,T) = \text{const.} \quad i = 1, \dots, k$$

ここでは、気体と液体が接して存在する場合の平衡について考える。

理想気体の場合の化学ポテンシャルはその定義から(2.1)式を利用すると

$$\mu_{PG}(P,T) = \frac{\partial \Phi}{\partial N} = T \cdot \ln P + f(T) - T \cdot \ln T$$

が得られる。したがって、平衡条件は

$$T \cdot \text{inc} + \psi(P,T) = T \cdot \ln P + f(T) - T \cdot \ln T$$

で表わされる。ただし $c = \frac{n}{N}$ であり、 N は気体の粒子数、 n は液体の粒子数である。

4.1.3) 重力場における溶液の平衡

3.1.1) および 4) において述べたように、外力場での平衡条件は化学ポテンシャルが一定であることである。重力場では化学ポテンシャルは

$$\mu_{GR} = T \cdot \text{inc} + \psi(P,T) + mgz$$

である。

4.1.4) 同一の溶媒中に存在する二種類の溶質の平衡

この場合、熱力学的ポテンシャル $\Phi(P, T, n_i, N)$ において、溶質間の相互干渉作用の効果を考慮しなければならないから、(4.2)式を利用しなければならない。粒子数 n_1 の溶質と n_2 の溶質が同時に存在する場合の熱力学的ポテンシャル Φ は

$$\begin{aligned} \Phi(P, T, n_1, N) = & N\mu_0 + n_1 T \cdot \ln \left(\frac{n_1}{eN} \right) + n_1 \psi_1 + \frac{n_1 n_1}{2N} \beta_{11} + \frac{n_2 n_2}{2N} \beta_{22} + n_2 T \times \\ & \times \left(\frac{n_2}{eN} \right) + n_2 \psi_2 + \frac{n_2 n_1}{2N} \beta_{21} + \frac{n_2 n_2}{2N} \beta_{22} \end{aligned}$$

である。したがって、粒子数 n_1 の溶質の化学ポテンシャル μ_1 は

$$\mu_1' = \frac{\partial \Phi}{\partial n_1} = T \cdot \text{inc}_1 + \psi_1 + c_1 \beta_{11} + c_2 \beta_{12}$$

ただし、 $\beta_{12}(P, T) = \beta_{21}(P, T)$ を利用した。

同様に粒子数 n_2 の溶質に対して

$$\mu_2' = \frac{\partial \Phi}{\partial n_2} = T \cdot \text{inc}_2 + \psi_2 + c_1 \beta_{12} + c_2 \beta_{22}$$

もし、一種類の溶質のみの量を考えるならば、粒子数 n_1 の溶質に対して化学ポテンシャルは

$$\mu_1^0 = T \cdot \text{inc}_1^0 + \psi_1 + c_1^0 \beta_{11}$$

であり、粒子数 n_2 の溶質のみが存在する場合は

$$\mu_2^0 = T \cdot \text{inc}_2^0 + \psi_2 + c_2^0 \beta_{22}$$

である。

変数の右肩上の 0 は一種類の溶媒の中に一種類の溶質が溶けている場合の量を示している。したがって、 c_1^0, c_2^0 と c_1, c_2 は異なる濃度を意味している。

4.1.5) 二種類の溶質の飽和蒸気圧の平衡

単独に粒子数 n_1 と n_2 の溶質が存在するときは 4.1.2) で述べたように圧力、温度で化学ポテンシャルを表すとそれぞれの溶質に対して

$$\begin{aligned} T \cdot \ln P_1^0 + f_1(T) - T \cdot \ln T &= T \cdot \text{inc}_1 + \psi_1 + c_1 \beta_{11} \\ T \cdot \ln P_2^0 + f_2(T) - T \cdot \ln T &= T \cdot \text{inc}_2 + \psi_2 + c_2 \beta_{22} \end{aligned}$$

である。

両溶質が同一の溶媒中に存在するときは部分圧が単独の溶質の場合の圧力 P_1^0, P_2^0 と異なるものになる。したがって、次の関係式を得る。

$$\begin{aligned} T \cdot \ln P_1 + f_1(T) - T \cdot \ln T &= T \cdot \text{inc}_1 + \psi_1 + c_1 \beta_{11} + c_2 \beta_{12} \\ T \cdot \ln P_2 + f_2(T) - T \cdot \ln T &= T \cdot \text{inc}_2 + \psi_2 + c_1 \beta_{21} + c_2 \beta_{22} \end{aligned}$$

4.2) 二種類の理想気体の混合

相互干渉のない粒子よりなる理想気体の場合には、やはり(4.2)式の関係が成り立つ。

粒子数 n_1, n_2 の理想気体に対して、熱力学的量 Φ は

$$\Phi(P, T, n_1, n_2, N) = N\mu_0 + n_1 T \cdot \ln \left(\frac{n_1}{eN} \right) + n_1 \psi_1 + n_2 T \cdot \ln \left(\frac{n_2}{eN} \right) + n_2 \psi_2$$

である。ここに粒子間には干渉がないから β_{ij} は考慮に入れていない。

また、 $n_1 + n_2 = N$

としている。したがって、化学ポテンシャルは粒子数 n_1 の気体に対して

$$\mu_1 = \frac{\partial \Phi}{\partial n_1} = T \cdot \ln \left(\frac{n_1}{N} \right) + \psi_1 \quad (4.3)$$

また、粒子数 n_2 の気体に対して

$$\mu_2 = \frac{\partial \Phi}{\partial n_2} = T \cdot \ln \left(\frac{n_2}{N} \right) + \psi_2 \quad (4.4)$$

また、このときの熱力学的関数に関しては、パラメーターの存在を *explicit* に表現するときは 1.4) でも述べたように右辺にパラメーターに関する項が附加される。具体的には 4) で述べてあるように関数 $\Phi(P, T)$ に関しては

$$d\Phi = -Sdt + Vdp + (\mu_\Phi)_1 dn_1 + (\mu_\Phi)_2 dn_2$$

と書ける。

いま、混合物 1 g 中に含まれる粒子 n_1 の分子量を m_1 とし、濃度を c すると

$$c = n_1 m_1$$

であり、同じく粒子数 n_2 の分子量を m_2 とすると

$$n_1 m_1 + n_2 m_2 = 1$$

である。

また、化学ポテンシャルは

$$(\mu_\phi)_1 \cdot dn_1 + (\mu_\phi)_2 \cdot dn_2 = \left(\frac{(\mu_\phi)_1}{m_1} - \frac{(\mu_\phi)_2}{m_2} \right) dc \equiv (\mu_\phi)_{mix} \cdot dc$$

である。ここに、

$$(\mu_\phi)_{mix} = \frac{(\mu_\phi)_1}{m_1} - \frac{(\mu_\phi)_2}{m_2} \quad (4.5)$$

とする。したがって、 $(\mu_\phi)_{mix}$ は二種類の理想気体からなる気体の化学ポテンシャルと考えられる。

4.2.1) 二種類の理想気体が混合している場合の熱拡散比

$$k_d = \frac{P \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P,T}}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P,T}}$$

および、拡散係数

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P,T}$$

を求める。

理想気体の圧力と体積の関係は 2.1) において示されているように

$$V = \frac{NT}{P}$$

であるから、二種類の理想気体の場合は体積は

$$V = \frac{(n_1 + n_2) T}{P}$$

で与えられる。

(4.2), (4.3) の関係式を混合気体の化学ポテンシャルの式 (4.5) に代入して計算をすると

$$(\mu_\phi)_{mix} = \frac{T}{m_1} \cdot \ln \left(\frac{n_1}{N} \right) - \frac{T}{m_2} \ln \left(\frac{n_2}{N} \right) + (\psi_1 - \psi_2)$$

であるから

$$\left(\frac{\partial (\mu_\phi)_{mix}}{\partial c} \right)_{P,T} = \frac{T}{m_2 c + m_1 (1 - c)} \left(\frac{1}{c} + \frac{1}{1 - c} \right)$$

であり、圧力の微分は

$$P \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P,T} = T \left(\frac{1}{m_1} - \frac{1}{m_2} \right)$$

したがって、熱拡散比 k_d は

$$k_d = \frac{P \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P,T}}{\left(\frac{\partial (\mu_\phi)_{mix}}{\partial c} \right)_{P,T}} = (m_2 - m_2) c (1 - c) \left(\frac{c}{m_1} + \frac{1 - c}{m_2} \right)$$

である。

拡散係数 D は

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P,T} = \frac{\alpha}{\rho} \frac{T}{m_2 c + m_1 (1 - c) c (1 - c)}$$

となる。

もし、温度の単位として度 (Kelvin) を用いるならば、上式で T は

$$T = x T_{deg}$$

で与えられる。ただし、 T_{deg} は温度を度 (Kelvin) で計った値であり x は Boltzmann 定数である。

4.2.2) 二種類の理想気体が混合しており、圧倒的多数の理想気体粒子 N の中に極く少数の理想気体粒子 n が存在する場合の熱拡散比

$$k_d = \frac{P \left(\frac{\partial V}{\partial c} \right)_{P,T}}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P,T}}$$

および、拡散係数

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right)_{P,T}$$

を求める。

化学ポテンシャルは、それぞれ

$$\mu_N(P, T) = \mu_0 - T \frac{n}{N}$$

$$\mu_n(P, T) = T \cdot \ln \left(\frac{n}{N} \right) + \psi$$

と表わせる。また、 μ_0 は粒子 N のみが存在する場合の化学ポテンシャルである。

このときの化学ポテンシャルは、二種類の気体が存在する場合には

$$(\mu)_{mix} = \frac{\mu_n}{m} - \frac{\mu_N}{M}$$

である。ただし、 m は粒子数 n の物質の分子量であり M は粒子数 N の物質の分子量である。また、上式を導くにあたり関係式

$$nm + NM = 1$$

を利用した。

また、理想気体の圧力と体積の関係は前章と同様

$$PV = (n + N) T$$

である。

少数の粒子からなる物資の濃度を c とすると $c = nm$ であるから μ_n, μ_N を濃度 c で表すと

$$\mu_N(P,T) = \mu_0 - T \frac{M}{m} \frac{c}{1-c}$$

$$\mu_n(P,T) = T \cdot \ln\left(\frac{M}{m} \frac{c}{1-c}\right) + \psi$$

である。また、両物質が共存する場合の化学ポテンシャルは

$$(\mu)_{mix} = \frac{\mu_n}{m} - \frac{\mu_N}{M}$$

で与えられるから

$$\left(\frac{\partial(\mu)_{mix}}{\partial c}\right)_{P,T} = \frac{T}{m} \cdot \frac{1}{c(1-c)} + \frac{T}{m} \frac{1}{(1-c)^2} = \frac{T}{m} \frac{1}{c(1-c)^2}$$

これは M に関係しないことは注目すべきである。また

$$P\left(\frac{\partial V}{\partial c}\right) = T\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M}\right)$$

であるから、熱拡散比 k_d は

$$k_d = \frac{P\left(\frac{\partial V}{\partial c}\right)_{P,T}}{\left(\frac{\partial \mu}{\partial c}\right)_{P,T}} = \left(1 - \frac{m}{M}\right)c(1-c)^2$$

あり、拡散係数は

$$D = \frac{\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c}\right)_{P,T} = \frac{\alpha T}{\rho m} \frac{1}{c(1-c)^2}$$

で与えられ、質量 M には関係しない量であることが分かる。

5) 参考文献

- 1) L. D. LANDAU AND E. M. LIFSHITZ; *Statistical Physics*, (1980) 3rd Edition Part 1 PERGAMON PRESS
- 2) ランダウ, リフシッツ; 流体力学 1, (1970), 東京図書株式会社

付録 4) 球面座標系

付録 4) の目次

- 4.1) 共変基底ベクトル
- 4.2) 反変基底ベクトル
- 4.3) 直交曲線座標系における Christoffel 記号の値
- 4.4) ベクトル量 (コリオリ力と遠心力について) の球面座標表示式

ここでは、次の三種の座標系を使用する。

共変基底ベクトル 共変単位ベクトル

- 1) 一般座標系 $(\mathbf{g}_i, \mathbf{g}_j, \mathbf{g}_k)$ $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k)$
- 2) 直交曲線座標系
 または球面座標系 $(\mathbf{g}_r, \mathbf{g}_\theta, \mathbf{g}_\varphi)$ $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$
- 3) 直交直線座標系 $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$ $(\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z)$

まず初めに、一般曲線座標系と直交曲線座標系の間になり立つベクトルの大きさに関する関係式を以下に示す。なお、直交曲線座標系では半径、経度、緯度方向の量をそれぞれ r, θ, φ の添え字を付けて表わす。

ベクトルの絶対値に関しては、 $|\mathbf{g}_r| = \sqrt{g_{rr}}, |\mathbf{g}_\theta| = \sqrt{g_{\theta\theta}}, |\mathbf{g}_\varphi| = \sqrt{g_{\varphi\varphi}}$ であるから共変基底ベクトルと共変単位ベクトルの間には

$$\mathbf{g}_r = \sqrt{g_{rr}} \mathbf{e}_r, \mathbf{g}_\theta = \sqrt{g_{\theta\theta}} \mathbf{e}_\theta, \mathbf{g}_\varphi = \sqrt{g_{\varphi\varphi}} \mathbf{e}_\varphi$$

なる関係があり、本文中で計算されベクトル量の実際のベクトル量は得られた反変成分の量に $\sqrt{g_{rr}}, \sqrt{g_{\theta\theta}}, \sqrt{g_{\varphi\varphi}}$ を乗じた量になる。

反変ベクトルについても同様に
 $|\mathbf{g}^r| = \sqrt{g^{rr}}, |\mathbf{g}^\theta| = \sqrt{g^{\theta\theta}}, |\mathbf{g}^\varphi| = \sqrt{g^{\varphi\varphi}}$

共変ベクトルの場合と同様に
 $\mathbf{g}^r = \sqrt{g^{rr}} \mathbf{e}^r, \mathbf{g}^\theta = \sqrt{g^{\theta\theta}} \mathbf{e}^\theta, \mathbf{g}^\varphi = \sqrt{g^{\varphi\varphi}} \mathbf{e}^\varphi$

なる関係があり、実際のベクトル量は得られた共変成分に $\sqrt{g^{rr}}, \sqrt{g^{\theta\theta}}, \sqrt{g^{\varphi\varphi}}$ を乗じた量になる。

さて、ここで実際の球面上について成立する関係式を以下に導く。

4.1) 共変基底ベクトル

球面上では直交曲線座標系 (r, θ, φ) と直交直線座標系 (x, y, z) の関係式は、

$$x = r \cos\varphi \cos\theta, y = r \cos\varphi \sin\theta, z = r \sin\varphi$$

であるから

$$\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z = r \cos\varphi \cos\theta \mathbf{e}_x + r \cos\varphi \sin\theta \mathbf{e}_y + r \sin\varphi \mathbf{e}_z$$

となる。

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial r} \\ \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial \theta} \\ \frac{\partial x}{\partial \varphi} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} & \frac{\partial z}{\partial \varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta \cos\varphi & \sin\theta \cos\varphi & \sin\varphi \\ -r \sin\theta \cos\varphi & r \cos\theta \cos\varphi & 0 \\ -r \cos\theta \sin\varphi & -r \sin\theta \sin\varphi & r \cos\varphi \end{bmatrix}$$

なる関係式を利用すると

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r} = \mathbf{g}_r = \cos\varphi (\cos\theta \mathbf{e}_x + \sin\theta \mathbf{e}_y) + \sin\varphi \mathbf{e}_z$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = \mathbf{g}_\theta = r \cos\varphi (-\sin\theta \mathbf{e}_x + \cos\theta \mathbf{e}_y)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \varphi} = \mathbf{g}_\varphi = -r \sin\varphi (\cos\theta \mathbf{e}_x + \sin\theta \mathbf{e}_y) + r \cos\varphi \mathbf{e}_z$$

したがって

$$\begin{bmatrix} g_{rr} & g_{r\theta} & g_{r\varphi} \\ g_{\theta r} & g_{\theta\theta} & g_{\theta\varphi} \\ g_{\varphi r} & g_{\varphi\theta} & g_{\varphi\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 \cos^2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \end{bmatrix}$$

を得る。共変基底ベクトルと共変単位ベクトルの間には
 $\mathbf{g}_r = \mathbf{e}_r, \mathbf{g}_\theta = r \cos\varphi \mathbf{e}_\theta, \mathbf{g}_\varphi = r \mathbf{e}_\varphi$

の関係がある。また、行列式の値は、 $g^v = |g_{ij}| = r^4 \cos^2\varphi$, したがって $\sqrt{g^v} = r^2 \cos\varphi$ である。

4.2) 反変基底ベクトル

ベクトル \mathbf{r} のスカラー r を \mathbf{r} の関数として表現する。

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \tan\theta = \frac{y}{x}, \tan\varphi = \frac{z}{y}$$

さらに、 $x = r \mathbf{e}_x, y = r \mathbf{e}_y, z = r \mathbf{e}_z$

なる関係がある。

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial r}{\partial x} & \frac{\partial r}{\partial y} & \frac{\partial r}{\partial z} \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} & \frac{\partial \theta}{\partial y} & \frac{\partial \theta}{\partial z} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} & \frac{\partial \varphi}{\partial y} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta \cos\varphi & \sin\theta \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\frac{1}{r} \frac{\sin\theta}{\cos\varphi} & \frac{1}{r} \frac{\cos\theta}{\cos\varphi} & 0 \\ -\frac{1}{r} \cos\theta \sin\varphi - \frac{1}{r} \sin\theta \sin\varphi & \frac{\cos\varphi}{r} & \frac{\cos\varphi}{r} \end{bmatrix}$$

なる関係式を利用すると

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{g}^r = \cos\varphi (\cos\theta \mathbf{e}_x + \sin\theta \mathbf{e}_y) + \sin\varphi \mathbf{e}_z$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = \mathbf{g}^\theta = \frac{1}{r \cos\varphi} (-\sin\theta \mathbf{e}_x + \cos\theta \mathbf{e}_y)$$

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \varphi} = \mathbf{g}^\varphi = -\frac{1}{r} \sin\varphi (\cos\theta \mathbf{e}_x + \sin\theta \mathbf{e}_y) + \frac{1}{r} \cos\varphi \mathbf{e}_z$$

したがって、

$$\begin{bmatrix} g^{rr} & g^{\theta r} & g^{r\varphi} \\ g^{\theta r} & g^{\theta\theta} & g^{\theta\varphi} \\ g^{\varphi r} & g^{\varphi\theta} & g^{\varphi\varphi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2 \cos^2\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2} \end{bmatrix}$$

を得る。反変基底ベクトルと反変単位ベクトルの間には

$$\mathbf{g}^r = \mathbf{e}^r, \mathbf{g}^\theta = \frac{1}{r \cos\varphi} \mathbf{e}^\theta, \mathbf{g}^\varphi = \frac{1}{r} \mathbf{e}^\varphi$$

の関係がある。行列式の値は、 $g^c = |g^{ij}| = \frac{1}{r^4 \cos^2\varphi}$ であるから、したがって、 $\sqrt{g^c} = \frac{1}{r^2 \cos\varphi}$ である。

4.3) 直交曲線座標系における Christoffel 記号の値

この場合定義式

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} g^{ih} \left(\frac{\partial g_{hj}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{hk}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{jk}}{\partial x^h} \right)$$

を利用する。また、

$$\begin{Bmatrix} i \\ jk \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} i \\ kj \end{Bmatrix}$$

であり、 i, j, k が全て異なる場合、 i, j, k が全て同じ場合

$$\begin{Bmatrix} i \\ jk \end{Bmatrix} = 0$$

になることに注意する。

Christoffel 記号 $\begin{Bmatrix} r \\ jk \end{Bmatrix}$ の値 Christoffel 記号 $\begin{Bmatrix} \theta \\ jk \end{Bmatrix}$ の値

		$\langle k \rangle$				
		r	θ	φ		
$\langle j \rangle$	r	0	0	0	r	0
	θ	0	$-r \cos \varphi$	0	θ	$\frac{1}{r}$
	φ	0	0	$-r$	φ	$-\frac{\sin \varphi}{\cos \varphi}$

Christoffel 記号 $\begin{Bmatrix} \varphi \\ jk \end{Bmatrix}$ の値

		$\langle k \rangle$				
		r	θ	φ		
$\langle j \rangle$	r	0	0	$\frac{1}{r}$		
	θ	0	$\sin \varphi \cos \varphi$	0		
	φ	$\frac{1}{r}$	0	0		

線分の長さは

$$d\mathbf{r}d\mathbf{r} = g_{ij}dx^i dx^j = dr^2 + r^2 \cos^2 \varphi d\theta^2 + r^2 d\varphi^2$$

体積は

$$d\mathbf{r}_r(d\mathbf{r}_\theta \times d\mathbf{r}_\varphi) = dr g_r(d\theta \mathbf{g}_\theta \times d\varphi \mathbf{g}_\varphi) = \sqrt{g} \begin{vmatrix} dr & 0 & 0 \\ 0 & d\theta & 0 \\ 0 & 0 & d\varphi \end{vmatrix} = r^2 \cos \varphi dr d\theta d\varphi$$

また、速度に関しては計算により得られた反変成分

$$v^r, v^\theta, v^\varphi$$

の実際の速度は共変単位ベクトル系 $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ においては、それぞれ

$$v^r, r \cos \varphi v^\theta, r v^\varphi$$

である。

4.4) ベクトル量 (コリオリ力と遠心力について) の球面座標表示式

ベクトル量を取り扱う場合にはその座標変換に伴う量の変換を考慮しなければならない。ここでは、まず本文中におけるコリオリ力と遠心力の一般曲線座標表示式から直交曲線座標表示式を導く方法を以下に示す。

コリオリ力は、一般曲線座標表示では $2\omega^j v^k \epsilon_{ijk} g^i g_j$ である。

直交曲線座標表示における共変基底ベクトル成分の係数は

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{g}_r(i=1) \\ \mathbf{g}_\theta(i=2) \\ \mathbf{g}_\varphi(i=3) \end{Bmatrix} \text{ に対して}$$

$$2\sqrt{g} \begin{Bmatrix} (\omega^\theta v^\varphi - \omega^\varphi v^\theta) g^{rr} + (\omega^\theta v^r - \omega^r v^\theta) g^{r\theta} + (\omega^r v^\theta - \omega^\theta v^r) g^{r\varphi} \\ (\omega^\theta v^\varphi - \omega^\varphi v^\theta) g^{\theta r} + (\omega^\theta v^r - \omega^r v^\theta) g^{\theta\theta} + (\omega^r v^\theta - \omega^\theta v^r) g^{\theta\varphi} \\ (\omega^\theta v^\varphi - \omega^\varphi v^\theta) g^{\varphi r} + (\omega^\theta v^r - \omega^r v^\theta) g^{\varphi\theta} + (\omega^r v^\theta - \omega^\theta v^r) g^{\varphi\varphi} \end{Bmatrix}$$

である。

遠心力は、一般曲線座標表示では

$$\omega^j \omega^k r^l \epsilon^{mab} \epsilon_{jmn} g_{ka} g_{lb} g^{in} \mathbf{g}_i = (\omega^j \omega^k r^l g_{kn} g_{lj} - \omega^j \omega^k r^l g_{kj} g_{ln}) g^{in} \mathbf{g}_i = \omega^j (\omega^r r^l g_{jl}) - r^i (\omega^k g_{jk}) g_i$$

であり、直交曲線座標表示では

$$C_\omega = \omega^r (\omega^r g_{rr} + \omega^\theta g_{r\theta} + \omega^\varphi g_{r\varphi}) + \omega^\theta (\omega^r g_{\theta r} + \omega^\theta g_{\theta\theta} + \omega^\varphi g_{\theta\varphi}) + \omega^\varphi (\omega^r g_{\varphi r} + \omega^\theta g_{\varphi\theta} + \omega^\varphi g_{\varphi\varphi})$$

$$C_r = \omega^r (r^r g_{rr} + r^\theta g_{r\theta} + r^\varphi g_{r\varphi}) + \omega^\theta (r^r g_{\theta r} + r^\theta g_{\theta\theta} + r^\varphi g_{\theta\varphi}) + \omega^\varphi (r^r g_{\varphi r} + r^\theta g_{\varphi\theta} + r^\varphi g_{\varphi\varphi})$$

とおくと、共変基底ベクトルの係数はそれぞれ

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{g}_r(i=1) \\ \mathbf{g}_\theta(i=2) \\ \mathbf{g}_\varphi(i=3) \end{Bmatrix} \text{ に対して } \begin{Bmatrix} \omega^r C_r - r^r C_\omega \\ \omega^\theta C_r - r^\theta C_\omega \\ \omega^\varphi C_r - r^\varphi C_\omega \end{Bmatrix}$$

を得る。

ここで、さらに地球の回転運動を考慮したコリオリ力と遠心力の表示式を示す。

直交曲線座標系では、

位置ベクトル	$\mathbf{r}(r^r, r^\theta, r^\varphi)$
回転速度をベクトル	$\omega(\omega^r \mathbf{e}_r, \omega^\theta \mathbf{e}_\theta, \omega^\varphi \mathbf{e}_\varphi)$
速度をベクトル	$\mathbf{u}(u^r \mathbf{e}_r, u^\theta \mathbf{e}_\theta, u^\varphi \mathbf{e}_\varphi)$

とするとき、球面座標系では、それぞれ

$$\mathbf{r}(R, 0, 0)$$

$$\omega \left(\omega^r \mathbf{g}_r, \frac{\omega^\theta}{r \cos \varphi} \mathbf{g}_\theta, \frac{\omega^\varphi}{r} \mathbf{g}_\varphi \right)$$

$$\mathbf{u} \left(u^r \mathbf{g}_r, \frac{u^\theta}{r \cos \varphi} \mathbf{g}_\theta, \frac{u^\varphi}{r} \mathbf{g}_\varphi \right)$$

であることに注意する必要がある。

また、球面座標単位ベクトル系 $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ では

$$\omega(\Omega \sin \varphi \mathbf{e}_r, 0 \mathbf{e}_\theta, \Omega \cos \varphi \mathbf{e}_\varphi)$$

とすると、球面座標基底ベクトル系 $(\mathbf{g}_r, \mathbf{g}_\theta, \mathbf{g}_\varphi)$ では

$$\omega \left(\Omega \sin \varphi \mathbf{g}_r, \frac{0}{r \cos \varphi} \mathbf{g}_\theta, \frac{\Omega \cos \varphi}{r} \mathbf{g}_\varphi \right)$$

であることを考慮すると、

コリオリ力 $2\omega^j v^k \varepsilon_{ijk} g^{il} g_i$ は

$(\mathbf{g}_r, \mathbf{g}_\theta, \mathbf{g}_\varphi)$ 一座標系では,

$$\begin{bmatrix} r - \text{成分} \\ \theta - \text{成分} \\ \varphi - \text{成分} \end{bmatrix} = 2\sqrt{g} \begin{bmatrix} \frac{\Omega u^\theta \cos\varphi}{R^2 \cos\varphi} \\ \frac{\Omega(u^r \cos\varphi - u^\varphi \sin\varphi)}{R^3 \cos^2\varphi} \\ \frac{\Omega u^\theta \sin\varphi}{R^3 \cos\varphi} \end{bmatrix}$$

であり, $2\sqrt{g} = 2R^2 \cos\varphi$ である。

$(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ 一座標系では,

$$= 2\sqrt{g} \begin{bmatrix} \frac{\Omega u^\theta \cos\varphi}{R^2 \cos\varphi} \\ \frac{\Omega(u^r \cos\varphi - u^\varphi \sin\varphi)}{R^2 \cos\varphi} \\ \frac{\Omega u^\theta \sin\varphi}{R^2 \cos\varphi} \end{bmatrix}$$

遠心力 $\omega^i \omega^k r^l \varepsilon^{mab} \varepsilon_{jmn} g_{ka} g_{lb} g^{in} g_i$ は, $C_r = \Omega R \sin\varphi, C_w = \Omega^2$

であるから

$(\mathbf{g}_r, \mathbf{g}_\theta, \mathbf{g}_\varphi)$ 一座標系においては $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ 一座標系では

$$\begin{bmatrix} r - \text{成分} \\ \theta - \text{成分} \\ \varphi - \text{成分} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Omega^2 R \cos^2\varphi \\ 0 \\ \Omega^2 \sin\varphi \cos\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Omega^2 R \cos^2\varphi \\ 0 \\ \Omega^2 R \sin\varphi \cos\varphi \end{bmatrix}$$

を得る。

以上において $(\mathbf{e}_r, \mathbf{e}_\theta, \mathbf{e}_\varphi)$ 一座標系で与えられる各係数がよくみられる球面座標系における式である。

航空宇宙技術研究所資料 720号

平成9年12月発行

発行所 科学技術庁航空宇宙技術研究所
東京都調布市深大寺東町7丁目44番地1
電話(0422)47-5911 ㊦182
印刷所 株式会社 東京プレス
東京都板橋区桜川2-27-12

© 禁無断複写転載

本書(誌)からの複写, 転載を希望される場合は, 企画室調査普及係にご連絡ください。

Printed in Japan