第 2 章

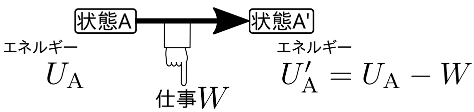
熱力学への準備としての力学

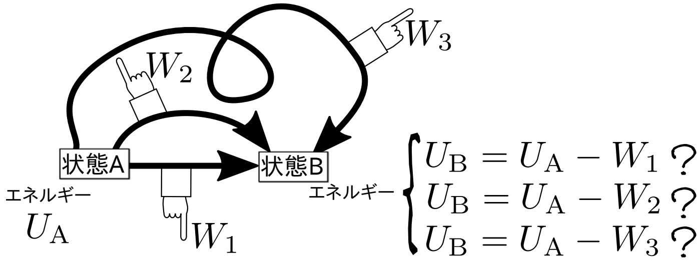
力学における「仕事」と「エネルギー」の関係を振り返ろう。と同時に、後で使う「Legendre 変換」という計算を、力学の場合で体験しておこう。

本講義では「仕事とエネルギー」を手がかりに熱力学へと進んで行く予定なので、まずは初等力学における「仕事とエネルギー」[†1]を振り返っておく。

2.1　エネルギーが定義できる条件

エネルギーの定義は右の図のようなものであったが→ p12、このような形でエネルギーが状態量（stock）として表現されるためには、いくつかの条件が必要である。





[†1] この章で取り上げる「エネルギー」はいわゆる「位置エネルギー」または「ポテンシャルエネルギー」（省略して「ポテンシャル」と呼ぶこともある）である。「運動エネルギー」との関係については【演習問題2-5】を見よ。
→ p46

上の図のように、$\boxed{\text{状態}\,A}$から$\boxed{\text{状態}\,B}$へと変化させる方法が複数個ある場合を考えよう。このとき、W_1, W_2, W_3 が違う値であれば、$\boxed{\text{状態}\,B}$でのエネルギー U_B が一つに決まらない。U_B が決まるためには、

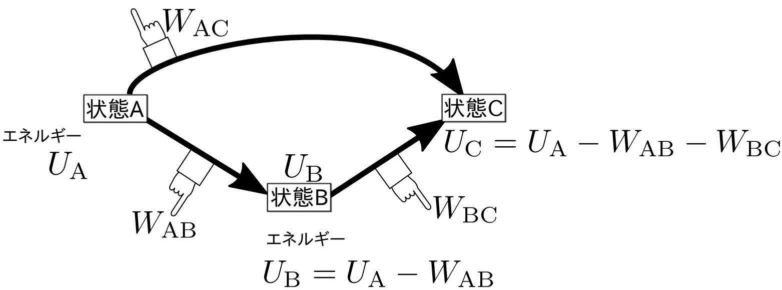
エネルギーが定義できるための条件

ある状態から別の状態へ変化させるときに系のする仕事が

- 途中の経路によらない。
- 途中の経路によるのだが、なんらかの形で「代表」となる経路を選び出すことができる。

のどちらかが必要である。初等力学では、仕事が途中の経過によらない場合、その系の出す力を「保存力」と呼び、そうでない場合は力に対応する位置エネルギーを定義することはできないと考える。重力、万有引力、バネの弾性力などは保存力であり、摩擦力、垂直抗力などは保存力ではない。

なお、上の条件が満たされていてエネルギーがちゃんと定義できる場合だったならば、



のように三つの状態を考えたとき、$\boxed{W_\mathrm{AB} + W_\mathrm{BC} = W_\mathrm{AC}}$ が成り立つべきである。これは二つ目の条件の場合も同様で、代表である仕事がこの性質をもっていないとエネルギーが定義できなくなる。

質点の力学における仕事の定義を確認しておこう。質点の位置が微小変位したときの微小な仕事を以下のように定義する。

仕事の定義

質点が力 $\vec{F}$ を他の物体に及ぼしつつ、微小変位 $\mathrm{d}\vec{x}$ だけ移動したとすると、その質点は $\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x}$ だけの仕事をする。

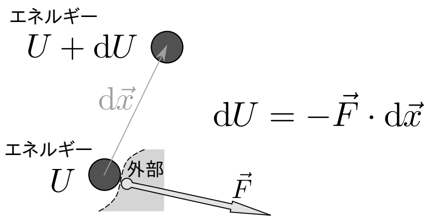
上で定めた微小変位が行われるとき、以下のようにして系のエネルギーを定義する。

微小変位を使ったエネルギーの定義

質点が力 $\vec{F}$ を他の物体に及ぼしつつ、微小変位 $\mathrm{d}\vec{x}$ だけ移動したときに

$$\mathrm{d}U = -\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x} = -F_x\,\mathrm{d}x - F_y\,\mathrm{d}y - F_z\,\mathrm{d}z \tag{2.1}$$

のような微小変化を起こす物理量 U が定義できたとき、系の持つエネルギーは U である。



図に示すと右のようになる。この図では移動は図の下から上へと起こっているとした。そのため、下での位置エネルギーが U ならば上での位置エネルギーは $U+\mathrm{d}U$ である（この場合仕事をした分エネルギーが「減る」のだが、それは $\boxed{\mathrm{d}U = -\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x}}$ の右辺のマイナス符号によって表現されている[†2]）。

【補足】 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++

(2.1) の左辺は偏微分記号を使えば $\mathrm{d}U = \frac{\partial U}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial U}{\partial y}\mathrm{d}y + \frac{\partial U}{\partial z}\mathrm{d}z$ と書くことができるので、

$$\frac{\partial U}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial U}{\partial y}\mathrm{d}y + \frac{\partial U}{\partial z}\mathrm{d}z = -F_x\,\mathrm{d}x - F_y\,\mathrm{d}y - F_z\,\mathrm{d}z \tag{2.2}$$

と表すこともできる。$\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z$ の前の係数を比較すると

$$\frac{\partial U}{\partial x} = -F_x,\quad \frac{\partial U}{\partial y} = -F_y,\quad \frac{\partial U}{\partial z} = -F_z \tag{2.3}$$

[†2] よくある間違いは「減っているから」と上でのエネルギーを $U-\mathrm{d}U$ にしてしまうことだが、それは大きなお世話である。

という三つの式ができる。

式(2.2)は
→ p21

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial x}\vec{\mathbf{e}}_x + \frac{\partial U}{\partial y}\vec{\mathbf{e}}_y + \frac{\partial U}{\partial z}\vec{\mathbf{e}}_z}_{\mathrm{grad}\ U} = -F_x\vec{\mathbf{e}}_x - F_y\vec{\mathbf{e}}_y - F_z\vec{\mathbf{e}}_z \tag{2.4}$$

というベクトルの式の両辺と $\boxed{\mathrm{d}\vec{x} = \mathrm{d}x\,\vec{\mathbf{e}}_x + \mathrm{d}y\,\vec{\mathbf{e}}_y + \mathrm{d}z\,\vec{\mathbf{e}}_z}$ と内積を取ったもの、と考えることもできる。つまり、

$$\mathrm{d}U = -\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x} \quad \leftarrow \text{（同じことの別の表現）} \rightarrow \quad \vec{F} = -\mathrm{grad}\ U$$

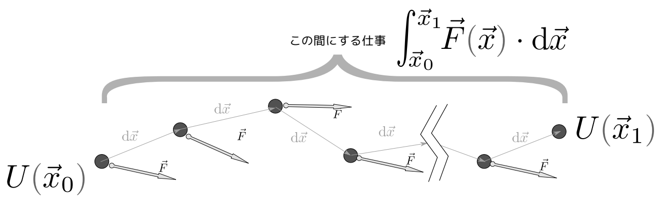
と言える。

この後の熱力学では、$\boxed{\mathrm{d}U = -\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x}}$ に似ている形をよく使う。この形の式、たとえば $\boxed{\mathrm{d}U = -F_x\,\mathrm{d}x}$ を見たら「x が変化したときの U の変化の割合が $-F_x$ である」という情報を読取るようにしよう。

✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣ **【補足終わり】**

上の定義ではエネルギーは $\boxed{\mathrm{d}U = -\vec{F}\cdot\mathrm{d}\vec{x}}$ という「微分形」で表現されていたが、積分形で表現するなら以下のようになる。

積分形のエネルギーの定義



質点が $\vec{x}_0$ から $\vec{x}_1$ まで、途中の点で $\vec{F}(\vec{x})$ なる力を外部に及ぼしながら移動したときの変化量が

$$U(\vec{x}_1) - U(\vec{x}_0) = -\int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_1}\vec{F}(\vec{x})\cdot\mathrm{d}\vec{x} \tag{2.5}$$

で表される物理量が位置エネルギー $U(\vec{x})$ である。

微分形の式 (2.1) と積分形の式 (2.5) の示す物理的内容は同じである。

もちろん上のようにして定義できるのは、21ページに書いた「エネルギーが定義できるための条件」が満たされている場合に限る。

2.2　力が保存力である条件

場所に依存する力 $\vec{F}(\vec{x})$ がそれに対応する位置エネルギー $U(\vec{x})$ を持っている（つまり $\boxed{\mathrm{d}U\left(\vec{x}\right)=-\vec{F}(\vec{x})\cdot\mathrm{d}\vec{x}}$ となるような U が存在する）とき、この力は保存力となるが、保存力となるためにはこの $-\vec{F}(\vec{x})\cdot\mathrm{d}\vec{x}$ という量が $\mathrm{d}U$ と書ける条件を満たしていなくてはいけない。それは「積分可能条件」と呼ばれていて、→ p160

$$\left(\frac{\partial F_x(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}-\left(\frac{\partial F_y(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}=0 \tag{2.6}$$

$$\left(\frac{\partial F_y(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}-\left(\frac{\partial F_z(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,y}=0 \tag{2.7}$$

$$\left(\frac{\partial F_z(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}-\left(\frac{\partial F_x(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}=0 \tag{2.8}$$

のように書くことができる。$\boxed{F_x=-\frac{\partial U}{\partial x},F_y=-\frac{\partial U}{\partial y},F_z=-\frac{\partial U}{\partial z}}$ ならばこれが満たされる（十分条件）であることはすぐにわかるし、逆（必要条件であること）も計算できる（付録のA.1.3項を見よ）。→ p160

【補足】 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++

なお、静電気現象における電場 $\vec{E}(\vec{x})$ の定義は、

単位試験電荷をその場所においたときに受ける力

であるが、$\boxed{\vec{E}(\vec{x})=-\mathrm{grad}\ V(\vec{x})}$ のように対応する位置エネルギー（こちらも単位試験電荷の持つエネルギーになる）を持っている、保存力である。これが保存力であるための条件は $\boxed{\mathrm{rot}\ \vec{E}(\vec{x})=0}$ である。これはMaxwell方程式の一つである $\boxed{\mathrm{rot}\ \vec{E}(\vec{x},t)=-\frac{\partial\vec{B}(\vec{x},t)}{\partial t}}$ の　時間変化がない場合である。

++++++++++++++++++++++++++++++++++++ **【補足終わり】**

2.3　初等力学の簡単な例

一様な重力

地面（どこかの基準点）からの高さを z 座標になるように（結果、x と y は水平方向の座標となる）で考えると、z が増える方向は「上」だから、下向きであるところの重力は $F_x = F_y = 0, F_z = -mg$（一つにまとめて書くと $\vec{F} = -mg\vec{\mathbf{e}}_z$）で表現される。この場合の位置エネルギーは $U(z) = mgz$ である[†3]。こうしておけば、

$$\vec{F} = -\mathrm{grad}\ (mgz) = -\vec{\mathbf{e}}_z \frac{\partial}{\partial z}(mgz) = -mg\vec{\mathbf{e}}_z \tag{2.9}$$

となり、確かにエネルギーの grad にマイナス符号をつけたものが力となる。

または、

$$\mathrm{d}U = mg\,\mathrm{d}z = -\underbrace{(-mg)}_{F_z}\,\mathrm{d}z \tag{2.10}$$

となるから、エネルギーの全微分は（力）×（座標の微分）にマイナスをつけたものになる、と言ってもよい。

調和振動子

1次元調和振動子の位置エネルギーは $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$ であり、これを微分すると

$$\vec{F} = -\mathrm{grad}\ \left(\frac{1}{2}kx^2\right) = -kx\vec{\mathbf{e}}_x \tag{2.11}$$

または

$$\mathrm{d}U = kx\,\mathrm{d}x = -\underbrace{(-kx)}_{F_x}\,\mathrm{d}x \tag{2.12}$$

となる。

3次元調和振動子の位置エネルギーは $U(x,y,z) = \frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right)$ であり、これを微分すると

$$\vec{F} = -\mathrm{grad}\ \left(\frac{1}{2}k\left(x^2+y^2+z^2\right)\right) = -kx\vec{\mathbf{e}}_x - ky\vec{\mathbf{e}}_y - kz\vec{\mathbf{e}}_z \tag{2.13}$$

---

†3 この場合の U は x, y に依らないので $U(x)$ と書いたが、$U(x,y,z) = mgz$ と書いても問題はない。

または

$$\mathrm{d}U = kx\,\mathrm{d}x + ky\,\mathrm{d}y + kz\,\mathrm{d}z = -\underbrace{(-kx)}_{F_x}\mathrm{d}x - \underbrace{(-ky)}_{F_y}\mathrm{d}y - \underbrace{(-kz)}_{F_z}\mathrm{d}z \tag{2.14}$$

となる。

同じ位置エネルギーを極座標を用いて書くと $\boxed{U(r) = \frac{1}{2}kr^2}$ であり[†4]、

$$\vec{F} = -\mathrm{grad}\left(\frac{1}{2}kr^2\right) = -kr\vec{\mathbf{e}}_r \tag{2.15}$$

または

$$\mathrm{d}U = kr\,\mathrm{d}r = -\underbrace{(-kr)}_{F_r}\mathrm{d}r \tag{2.16}$$

となる。(2.13)→ p24と (2.15) は同じ式であるし、(2.14) と (2.16) は同じ式である。

練習問題

【問い 2-1】 (2.13)→ p24と (2.15)、(2.14) と (2.16) がそれぞれ同じ式であることを確認せよ。 ヒント → p169 へ　解答 → p171 へ

万有引力

原点に質量 M の物体（こちらは不動点とする）があるときにそこから距離 r の位置（直交座標で (x, y, z) の点）にある質量 m の質点の持つ万有引力の位置エネルギーは極座標なら $\boxed{U(r) = -\frac{GMm}{r}}$、直交座標なら $\boxed{U(x, y, z) = -\frac{GMm}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}}$ である（万有引力定数 G とした)。その微分は

$$\mathrm{d}U = \frac{GMm}{r^2}\mathrm{d}r = \frac{GMm\overbrace{(x\,\mathrm{d}x + y\,\mathrm{d}y + z\,\mathrm{d}z)}^{r\,\mathrm{d}r}}{\underbrace{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}}_{r^3}} \tag{2.17}$$

[†4] $\boxed{U(r, \theta, \phi) = \frac{1}{2}kr^2}$ と書いても同じこと。

となり[†5]、力は極座標なら $\boxed{\vec{F}=-\frac{GMm}{r^2}\vec{\mathbf{e}}_r}$ （r 方向に $-\frac{GMm}{r^2}$）、直交座標なら

$$\vec{F}=-\frac{GMmx}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}}\vec{\mathbf{e}}_x-\frac{GMmy}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}}\vec{\mathbf{e}}_y-\frac{GMmz}{(x^2+y^2+z^2)^{\frac{3}{2}}}\vec{\mathbf{e}}_z \quad (2.18)$$

であることがわかる。

練習問題

【問い2-2】 (2.18) が積分可能条件を満たしていることを確認せよ。解答 → p??へ

2.4　位置エネルギーと一般化力

2.4.1　一般化力

ここで

> エネルギーの全微分を考えると、それぞれの変数を変化させるのにどの程度の「一般化された力」が必要かを知ることができる。

ということを確認しておこう。$U(x,y,z)$ のように x,y,z を変数に持つエネルギーがあれば、

$$\mathrm{d}U=\left(\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\mathrm{d}x+\left(\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}\mathrm{d}y+\left(\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}\mathrm{d}z \quad (2.19)$$

のように全微分を計算することができる。たとえば $\left(\frac{\partial U(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\mathrm{d}x$ は「x を $\mathrm{d}x$ 変化させるのに必要な仕事」を表している。仕事は

（仕事）＝（力）×（移動距離）

と定義するのが普通だが、移動距離は通常（座標の変化）だから、

（仕事）＝（力）×（座標の変化）

[†5] （$\boxed{r^2=x^2+y^2+z^2}$ を微分すると $\boxed{2r\,\mathrm{d}r=2x\,\mathrm{d}x+2y\,\mathrm{d}y+2z\,\mathrm{d}z}$ になることに注意）、

と書こう。これは座標が「x 座標」などの距離を直接表現する場合に正しいのだが、そうではなく「角度座標 (θ, ϕ)」やあるいは「面積」や「体積」のような一般化座標でも正しくなるように

$$（仕事）=（一般化力）\times（一般化座標の変化）$$

と書き直す。

つまり、x がいわゆる普通の座標でない場合でも、係数 $\left(\dfrac{\partial U(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}$ は「x を $\mathrm{d}x$ 変化させるのに必要な一般化力」を表すことにする（これが「一般化力」という言葉の定義であると言ってもいい）。x が普通の座標なら「一般化力」は「力」そのものである。もし x が角度変数ならその場合の「一般力」は「力」ではなく「トルク（力のモーメント）」となる[†6]。また、この後、何度も出てくるのは一般化座標として体積を使った場合で、（圧力）×（体積変化）が仕事なので一般化力に対応するものは圧力となる[†7]。

2.4.2　つりあいと変分原理

いろいろな保存力が働いていて、それぞれの保存力に対して位置エネルギー $U_i(\vec{x})$ が定義されている場合、合力は

$$\vec{F}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}\left(\sum_i U_i(\vec{x})\right) \quad \text{または}\,\mathrm{d}\left(\sum_i U_i(\vec{x})\right) = -\vec{F}(\vec{x})\cdot \mathrm{d}\vec{x} \tag{2.20}$$

で求めることができる。これからわかるように、力がつりあう（合力が 0 になる）点では、

$$\vec{\nabla}\left(\sum_i U_i(\vec{x})\right) = 0 \quad \text{または} \quad \mathrm{d}\left(\sum_i U_i(\vec{x})\right) = 0 \tag{2.21}$$

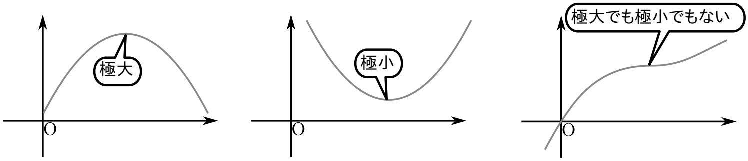
となる[†8]。つまり、位置エネルギーの和 $\displaystyle\sum_i U_i(\vec{x})$ の微分が 0 であるということからつりあいの位置を求めることができる。

実際には、微分（変化量）が 0 というだけでは、

[†6] （トルク）×（角度）で仕事になる。

[†7] 面積変化に対する一般化力は表面張力になる。

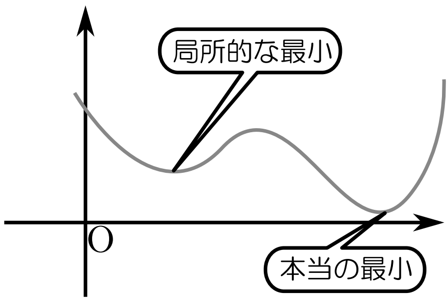
[†8] この式は「力がつりあっているならば、考えている物体を仮想的に $\mathrm{d}\vec{x}$ だけ移動させたときに仕事が 0 である」と読み取ることができる。これを「**仮想仕事の原理**」と呼ぶ。



のようないろいろなケースが有り得る（ここでは1変数で考えているが、多変数の場合「x 方向は極大だが y 方向には極小」というようなこともある)。

極大・極小のどれになっているかを指定せず、単に微小変化量が0になっている状況は「**停留**」している、と言う。

極小になっている時は「安定」、極大になっている時は「不安定」と表現することも多い。このグラフを高さのようなものと考えると、極大の場所は少しでもそこを外れると転がり落ちてしまう状況になっているので「不安定」だというわけである。



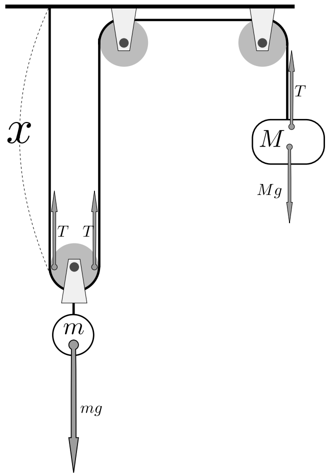
極小（または極大）だとわかっても、それが最小（または最大）とは限らない場合もある。右の図の「局所的な最小」(local minimum) と書いている部分は、極小ではあるが最小ではない。$\boxed{変化量=0}$ という条件を満たしても、その状態が考えている状況にあっているかどうかは個々に調べる必要がある。

位置エネルギー U の微分（微小変化）が0になる点を探してつりあいを求めるこの手法は物理のあらゆるところで使われていて、一般的に「**変分原理**」と呼ばれる。「変分」は微分などの微小変化をもっと一般的にした概念で、「ある積分の積分経路を少し変形する」というような操作も変分と呼ぶ。そのような操作（変分）を行ったときにある量（位置エネルギーに対応する量）の変化の1次部分が0になることから「つりあい点」を求めるというのが「変分原理」である。熱力学ではこの変分原理を多用するのだが、以下で力学の例で変分原理を使って練習してみよう。

2.4.3　例：糸と滑車

動滑車と質点

図のように、天井から掛けた糸、動滑車と定滑車（この滑車や糸の質量は無視できるものとする）を使って質量 m, M の二つの荷物を吊り下げる。



m, M が満たすべき条件をつりあいの式を使って考えるとするならば、糸の張力を T として図に描いたような力が働く（質量 m のおもりは 2 本の糸で吊るされているから、張力 T も二つ勘定することに注意）と考えれば、つりあいの式は

$$2T = mg \tag{2.22}$$

$$T = Mg \tag{2.23}$$

となり、$\boxed{2M = m}$ ならつりあうということがわかる。

これを位置エネルギーの変分原理から考えてみよう。質量 m の物体の位置エネルギーを $-mgx$ と書く（基準を天井に置いている）。質量 M の方の物体は、糸の長さを全部で ℓ とすると、天井から物体までの距離は $\ell - 2x$ となる [†9]。よって、

$$U = -mgx - Mg(\ell - 2x) \tag{2.24}$$

となる [†10]。これを微分して 0 と置けば

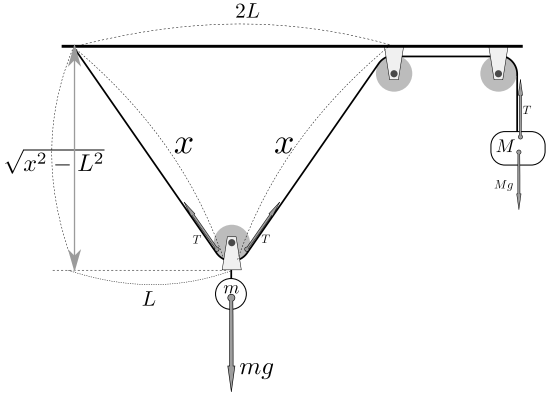
$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x} = -mg + 2Mg = 0 \tag{2.25}$$

より、やはり $\boxed{m = 2M}$ がつりあいの条件となる。この問題の場合、つりあいの式とエネルギーの変分原理、どちらで考えても難しさはそう違わないだろう（変分原理では張力 T を導入する必要がない分だけ、楽）。

[†9] 滑車の大きさは小さいとして（図では結構大きいが）無視して考える。もっとも、滑車の大きさを考慮することによるずれは U に定数を付け加えるだけの変化しかもたらさないので、本質的な結果は変わらない。気になる人は実際にやってみること。

[†10] エネルギーの定数部分は無視していいので、$\boxed{U = -mgx + 2Mgx}$ としても結果は同じになる。

斜めの動滑車



次に少し状況を変えて、質量mのおもりをつるす糸が鉛直でない場合を考えよう。図のように、天井の糸の固定点と左側定滑車が$2L$だけ離れているものとする（$\boxed{L=0}$にすると先の問題に戻る）。

今度はエネルギーの変分原理の方から考えてみよう。やはり滑車の大きさを無視して考えると、質量mのおもりは天井から測って高さ$\sqrt{x^2-L^2}$のところにいる（図に辺の長さが$x, L, \sqrt{x^2-L^2}$の直角三角形があることに注意）。一方質量Mのおもりは天井から$\ell-2x$だけ低い位置にいるから、

$$U=-mg\sqrt{x^2-L^2}-Mg(\ell-2x) \tag{2.26}$$

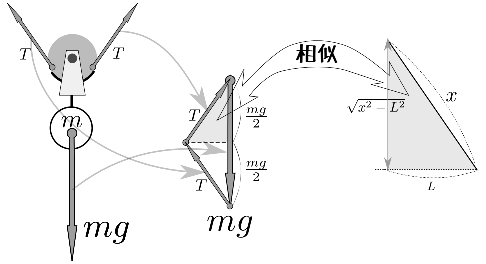
（第2項は$+2Mgx$にしてもよい）であり、これを微分すると

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}=-\,mg\times\frac{x}{\sqrt{x^2-L^2}}+2Mg \tag{2.27}$$

となるから、$\boxed{\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}=0}$は

$$2M=m\frac{x}{\sqrt{x^2-L^2}} \tag{2.28}$$

を意味する。



同じ問題を力のつりあいから考えてみることにする。図のように力のつりあいを考える（T二つとmgの、合計三つの力が閉じた三角形をなす）。そのときできる三角形の半分（灰色に塗りつぶした部分）が、さっき考えた「長さが$x, L, \sqrt{x^2-L^2}$の直角三角形」と相似であることから

$$\frac{mg}{2}:T=\sqrt{x^2-L^2}:x \tag{2.29}$$

がわかる。さらに$\boxed{T=Mg}$であるから

$$Mg\sqrt{x^2-L^2}=\frac{mg}{2}x \tag{2.30}$$

という式が出る。この式は(2.28)→ p30と同じ式となる。張力Tを考えたりその方向を考えなくてはいけない分だけ、力のつりあいで考える方がややこしくなっている。

ここで、Mという質点が眼に見えないブラックボックスの中に入っていたとしよう。「ブラックボックスの中にある何かが$\boxed{T=Mg}$の力でこの糸を引っ張っている」ということだけはわかっていたとする。この場合でもつりあいの式$\boxed{2T\frac{\sqrt{x^2-L^2}}{x}=mg}$は成立するし、エネルギーの式は、$\boxed{Mg=T}$とした

$$U=-mg\sqrt{x^2-L^2}+2Tx \tag{2.31}$$

（定数項も落としてある）を使えばつりあいの式が出る。

【補足】 ✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣

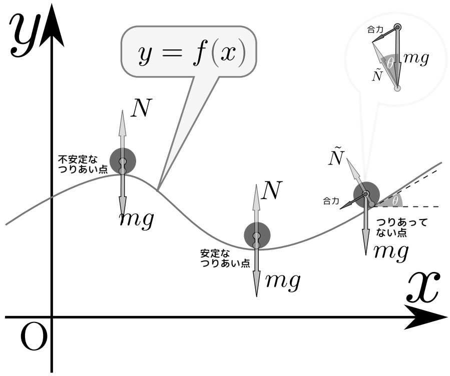
xは今の場合、「x座標」ではない。質量mの物体の位置も単純にxでは表現できないのもちろんのことだが、質量Mの物体の位置は「天井から$\ell-2x$低い場所」であって、xは「2倍してℓから引く」という操作をして始めて位置を表現できる変数なのである。よって$\mathrm{d}U=-F\,\mathrm{d}x$と考えたときの$F$も、通常の意味の「力」ではなく、「一般化力」である。(2.27)→ p30の第1項$-mg\times\dfrac{x}{\sqrt{x^2-L^2}}$も第2項$2Mg$も、$m$や$M$に働く重力そのものにはなっていないことに注意しよう。

✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣✣ **【補足終わり】**

2.4.4　曲線に乗った小球

摩擦のない曲線の上に乗った小球[†11]の静力学という、簡単な場合を考えよう。この曲線のいわば「平坦」な場所では、重力mgと垂直抗力Nがつりあって（合力が0となって）、小球は静止する。「斜面」では重力と垂直抗力$\tilde{N}$（文字を変えた）の合力は斜面をすべりおりる方向へと向く。

[†11] 「小球」というのは「こう書いているときは大きさを無視してね」という符牒。



合力の大きさを、図を描いて考えてみよう。斜面の傾きを θ とすれば、$\tilde{N}$ は鉛直に対して θ 傾いている。このことから合力の大きさは $mg\sin\theta$ となる。図から見ても、$\boxed{\theta=0}$ が成り立つときが「つりあい点」なのは確かである。

曲線を $\boxed{y=f(x)}$ とするとき、この物体の位置エネルギーは $\boxed{U(x)=mgf(x)}$ と書けて、つりあいの位置の条件は

$$\frac{\mathrm{d}U(x)}{\mathrm{d}x}=mgf'(x)=0 \tag{2.32}$$

である。この場合の水平方向に働く力は $\boxed{F=-\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}}$、すなわち「$U(x)$ の傾きが 0 であること」がつりあいの条件である。別の書き方をすると、

$$\mathrm{d}U=mgf'(x)\,\mathrm{d}x \tag{2.33}$$

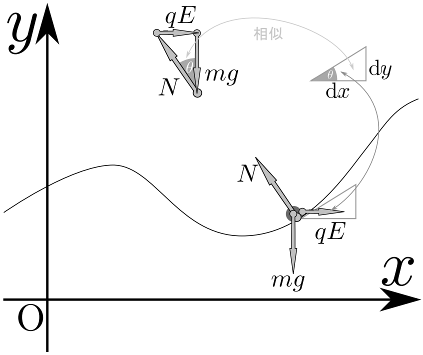
という $\boxed{U\text{の全微分}}$ を考えて、各項（今は項は一つしかないが）の係数が 0 になるのがつりあいの条件である。

このように、「ある関数の変化量を計算すると（微分すると）0 であれ」という条件から何かの式（今の場合は「つりあいの式」）を導くことを「**変分原理**」と呼ぶ[†12]。

ここでこの小球が電荷 q を持っていて、この場所に x 方向に電場 E が掛かっているとしよう。

[†12] 実はつりあっている条件 $\boxed{\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}=0}$ だけでは「安定なつりあい点」か「不安定なつりあい点」かはわからず、二階微分 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}U$ の符号を見て判断する必要がある。$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}U>0}$ なら安定なつりあい点、$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}U<0}$ なら不安定なつりあい点である。物理的に実現する場所としては「安定なつりあい点」だけを考えればよい。

その場合、物体には三つの力（これまでの重力と垂直抗力に合わせて、電場によるクーロン力）が働く。三つの力のベクトル和が0というのがつりあいの式である（図に描き込まれている三角形が閉じることが力のベクトル和が0であることを表現している）が、この図を見ると三角形の相似から

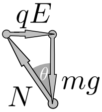


$$qE = mg\tan\theta \tag{2.34}$$

がわかる。$\boxed{\tan\theta = f'(x)}$だから

$$mgf'(x) = qE \tag{2.35}$$

という式がつりあいの式となることがわかる。クーロン力 qE が働かないときなら$\boxed{f'(x) = 0}$（つまり傾きが0）というのがつりあいの式だが、この場合はグラフの傾きが $\dfrac{qE}{mg}$ になるのがつりあいとなるというのが上の式の意味である。

この場合のつりあいの式は 

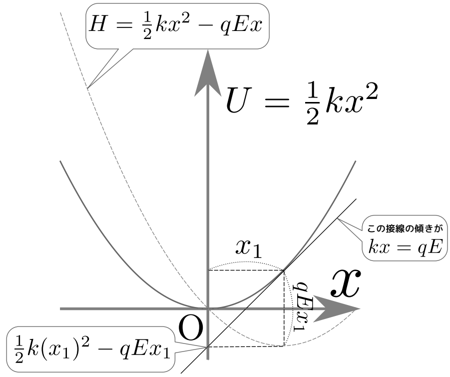
のような図を描いてベクトルの和を考えなくてはいけない分だけ複雑になっているが、変分原理を使って表現すると意外なほど簡単になる。というのは

$$U_{全}(x) = \overbrace{mgf(x)}^{U(x)}\overbrace{-qEx}^{qV(x)} \tag{2.36}$$

という関数の停留条件（x で微分して0）がまさに (2.35) なのだ。

つまり、重力の位置エネルギー$\boxed{U(x) = mgf(x)}$と、電場による位置エネルギー$\boxed{U_V(x) = qV(x)}$の和である $U_{全}(x)$ が停留値を取るという条件$\boxed{\dfrac{\mathrm{d}U_{全}(x)}{\mathrm{d}x} = 0}$から自動的につりあいの式が出てくる。

変分原理を使って考えると、以上のように計算が自動的に行われて楽な計算になる。これは変分を取っている関数（$U(x)$ だったり $U_{全}(x)$ だったり）がスカラーであって、力という、向きのあるベクトル量を使って考えるより（成分というものがない分）楽になっていると考えることもできる。

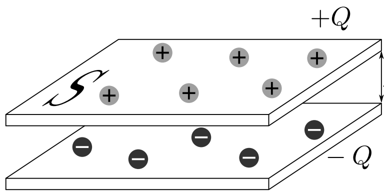


次に、バネにつながれた質点を考えてみよう（重力はないことにする)。このときはバネの位置エネルギーが $\boxed{U(x)=\dfrac{1}{2}kx^2}$ であるから、

$$U_{全}(x)=\frac{1}{2}kx^2-qEx \quad (2.37)$$

となる。電場が0なら $\boxed{x=0}$ がつりあい点だが、そうでないならつりあい点は $\boxed{kx-qE=0}$ から決まる $\boxed{x=\dfrac{qE}{k}}$ である。

ここで $U\to U_{全}$ への「変換」で行っていることは、電場のエネルギーを足したと考えてもよいし、グラフに示したように接線を引いて切片を計算したと考えてもよい。



2.5　例：コンデンサの電荷

2.5.1　孤立したコンデンサ

静電容量 C で電荷 Q が溜まっているコンデンサの持っているエネルギーは $\dfrac{Q^2}{2C}$ である。面積 S で極板間距離が ℓ で、間に誘電率 ε の誘電体が詰まった平行平板コンデンサの静電容量は $\boxed{C=\dfrac{\varepsilon S}{\ell}}$ であるから、コンデンサのエネルギーは $\boxed{U=\dfrac{Q^2\ell}{2\varepsilon S}}$ と書くことができる。Q と ℓ を一般化座標と考えよう。U の全微分は

$$\mathrm{d}U=\frac{Q\ell}{\varepsilon S}\,\mathrm{d}Q+\frac{Q^2}{2\varepsilon S}\,\mathrm{d}\ell \tag{2.38}$$

となる（ここでは ε と S は定数とした)。

【補足】 ++++++++++++++++++++++++++++++++++++

具体的な全微分を計算するには、変化後と変化前の差である

$$\frac{(Q+\mathrm{d}Q)^2(\ell+\mathrm{d}\ell)}{2\varepsilon S}-\frac{Q^2\ell}{2\varepsilon S} \tag{2.39}$$

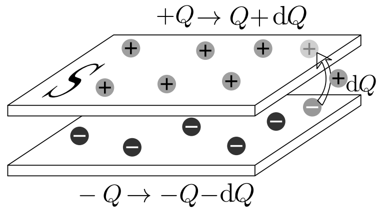
を微小量の１次のオーダーまでを計算してもよいし、以下のように「U の偏微分の計算」を変数の数だけ繰り返してもよい。すなわち

U を $\boxed{Q\text{ で偏微分すると }\left(\frac{\partial U}{\partial Q}\right)_\ell=\frac{Q\ell}{\varepsilon S}}$ と $\boxed{\ell\text{ で偏微分すると }\left(\frac{\partial U}{\partial \ell}\right)_Q=\frac{Q^2}{2\varepsilon S}}$ より

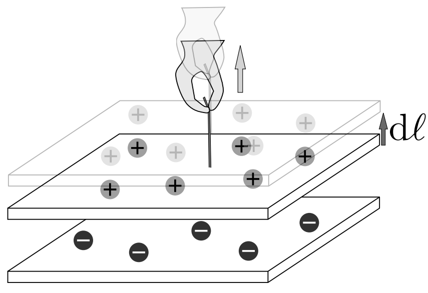
$$U=\frac{\partial U}{\partial Q}\mathrm{d}Q+\frac{\partial U}{\partial \ell}\mathrm{d}\ell=\frac{Q\ell}{\varepsilon S}\mathrm{d}Q+\frac{Q^2}{2\varepsilon S}\mathrm{d}\ell \tag{2.40}$$

と計算しても(2.38)が得られる。
→ p34

++++++++++++++++++++++++++++++++++ **【補足終わり】**



第１項の $\mathrm{d}Q$ の係数 $\frac{Q\ell}{\varepsilon S}$（$Q$ という一般化座標に対する一般化力）は実は $\boxed{\frac{Q}{C}=V}$（コンデンサの極板間電位差）である。電位差が V であるコンデンサにさらに電荷 $\mathrm{d}Q$ を追加する（正極板に $\mathrm{d}Q$、負極板に $-\mathrm{d}Q$ の電荷を追加する）には $V\,\mathrm{d}Q$ の仕事が必要だ、ということを示している。



第２項は「コンデンサの極板間距離 ℓ を $\mathrm{d}\ell$ だけ伸ばすには $\frac{Q^2}{2\varepsilon S}\mathrm{d}\ell$ の仕事が必要」ということを示している。この係数力 $\frac{Q^2}{2\varepsilon S}$ は ℓ に対する一般化力であり、極板を離すときにこれだけの力が必要であること（つまりこの状態で $\boxed{F=\frac{Q^2}{2\varepsilon S}}$ の極板間引力が働いていること）を示している。

どちらも物理的にはもっともな結果である。

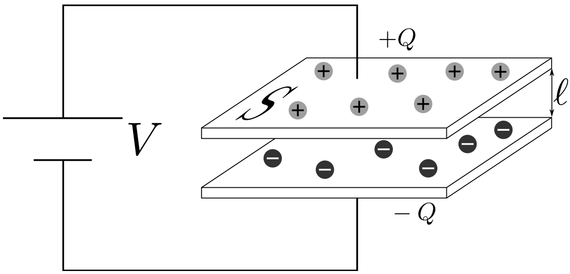
練習問題

【問い2-3】 S が定数ではなかったとすると(2.38)はどのように変わるか。その物理的意味は何か？
→ p34

ヒント → p169 へ　解答 → p171 へ

2.5.2 電池をつないだコンデンサ

独立変数のうち、「実験前に決めておいて、実験を行っている間は動かさない変数」を「**制御変数 (cotrol variable)**」という名前で呼ぶことにする。前節で考えたコンデンサの場合、実験開始時に与えた電荷 Q は ℓ を変えるという操作を行っても変化しない。つまりこの場合 Q が制御変数である。ℓ が独立変数で、結果として変わる V が従属変数だということになる[†13]。V は $V(Q,\ell)$ のように書かれる Q,ℓ の関数である。



コンデンサに起電力 V の電池をつないでみる。こうするとコンデンサの電荷 Q は V によって決まる $Q=\dfrac{\varepsilon S}{\ell}V$ から、「制御変数」は Q ではなく V になる。ℓ が独立変数であるのは変わらないが、制御変数であった Q が今度は従属変数になる（ℓ を変えると Q が変化する）。$U(Q,\ell)$ を書きなおして

$$U(V,\ell)=\frac{\varepsilon S}{2\ell}V^2 \tag{2.41}$$

となる[†14]。U の全微分は

$$\mathrm{d}U=\frac{\varepsilon S}{\ell}\,\mathrm{d}V-\frac{\varepsilon S}{2\ell^2}V^2\,\mathrm{d}\ell \tag{2.42}$$

[†13] 制御変数は独立変数の一部である。独立変数のうちどれが制御変数でどれが制御変数でないかは、実験者によって決められる。

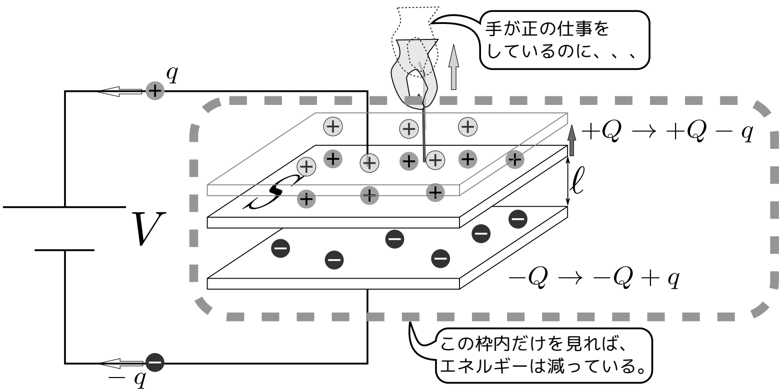
[†14] $U(V,\ell)$ と $U(Q,\ell)$ は同じ関数で何を独立変数として表現しているかが違うが、表している値は同じである。紛らわしいが $U(Q,\ell)$ に $Q=V$ を代入すると $U(V,\ell)$ になるのでは**ない**。

となる。ここで $\mathrm{d}\ell$ の前の係数が負になっていることを「あれっ？」と思うだろうか？—前節の考え方に従い「$\mathrm{d}\ell$ の前の係数は極板間引力を示す」とするならば、これが負になったということは 極板間には斥力が働く ということを主張していることになる—ように思われる（もちろんこれは誤解なのだ）。

極板間に働く力は正電荷と負電荷の力なのだから、引力に決まっている。ということは、上の考えはどこかで「間違えた」のである。

なお、「ℓ が増加すると U が減る」という点は全く間違っていない。ℓ が増加すると静電容量は小さくなる。今の場合は V が一定の条件で動かしているから、$\boxed{Q = CV}$ からすると、C が小さくなると電荷は減る。この電荷は電池の方へ移動するということになる。この状況では確かに「コンデンサの持つエネルギー U」は減少している。従って(2.42)の第2項の $\mathrm{d}\ell$ の係数が負なのはそれで正しいのである。

→ p36



手が正の仕事をしているのにエネルギーが減ったとなると、どこかが間違っている。どこだろう？？？—上の図を見ながらじっくり考えてみよう（かなりヒントは与えてある）。

答えは次のページだが、めくる前にちゃんと「自分の答え」を見つけること！

前節と本節の設定の違いは「電池をつないだ」ことである。よって「$U(V,\ell)$ には、電池のエネルギーが考慮されてないじゃないか！」と気づいて欲しい。

電池は電位差 V を作り出すメカニズムを持っており、内包している電荷 $Q_{全}$ を流しきるとそこでもう電流を流すことはできなくなる[†15]。コンデンサにつながる前の電池は $Q_{全}V$ のエネルギーを持っていたと考えることができる[†16]。コンデンサに電荷 Q がたまった時点で電池の蓄える電気量は $Q_{全}-Q$ に変わっている。よってこの（電池も含めた）系のエネルギーは

$$U_{全}(V,\ell)=U(V,\ell)+(Q_{全}-Q)V=\frac{\varepsilon S}{2\ell}V^2+(Q_{全}-Q)V=-\frac{\varepsilon S}{2\ell}V^2+Q_{全}V \tag{2.43}$$

になるのである（$\boxed{Q=\frac{\varepsilon S}{\ell}V}$ を代入した[†17]）。

この $U_{全}$ の全微分を求めると（$\boxed{\mathrm{d}\left(\frac{1}{\ell}\right)=-\frac{1}{\ell^2}\,\mathrm{d}\ell}$ に注意）

$$\mathrm{d}U_{全}=\underbrace{\left(-\frac{\varepsilon S}{\ell}V+Q_{全}\right)}_{Q_{全}-Q}\mathrm{d}V+\frac{\varepsilon SV^2}{2\ell^2}\,\mathrm{d}\ell \tag{2.44}$$

となって、ℓ を $\mathrm{d}\ell$ だけ変化させるのに必要な仕事は $\frac{\varepsilon SV^2}{2\ell^2}\,\mathrm{d}\ell$ となり、その係数は正であるからちゃんと引力になっているし、実はその力の大きさは

$$\frac{\varepsilon SV^2}{2\ell^2}=\frac{Q^2}{2\varepsilon S} \tag{2.45}$$

となって、電池がない場合と同じになる。そもそもこの力は「極板に溜まった電荷によるクーロン力に逆らうための力」なのだから、極板に溜まっている電荷が同じなら同じになることは、物理的にみて全く正しい。

[†15] 電気回路などの「練習問題」で出てくる「起電力 V の電池」はいくら電流を流してもへたることなく電流を流し続けてくれるが、現実にはそんなものはない。

[†16] ここで、「コンデンサのエネルギーは $\frac{1}{2}QV^2$ なのに電池のエネルギーは QV なの？」と不思議に思う人もいるかもしれないが、コンデンサは放電するに従い電位差も下がる。一方理想的な電池は常に電位差は V のままである（これは電池が化学的変化によって電位差を作っているからである）。この違いが係数 $\frac{1}{2}$ を作る。

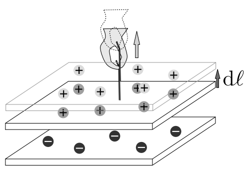
[†17] この計算手順は必須。今考えている $U_{全}(V,\ell)$ は V と ℓ の関数として求めたいのだから、V,ℓ で表されている Q を残してはいけない。

こうして、状況が違えば考えるエネルギーが違う（U ではなく $U_{全}$ になる）が、それによって計算される一般化力については、

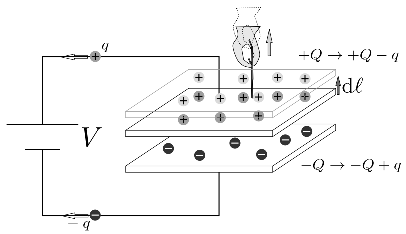
$$\left(\frac{\partial U(Q,\ell)}{\partial \ell}\right)_Q = \left(\frac{\partial U_{全}(V,\ell)}{\partial \ell}\right)_V \tag{2.46}$$

が成り立つようになった（U を使っても $U_{全}$ を使っても同じ結果が出た）。

次の図に示すように、(2.46) の左辺と右辺の示す物理現象は違う。



$\left(\frac{\partial U(Q,\ell)}{\partial \ell}\right)_Q$ の表す物理現象



$\left(\frac{\partial U_{全}(V,\ell)}{\partial \ell}\right)_V$ の表す物理現象

しかし、この式で表現しているものは「極板間の引力」[†18]という同じ物理量だから等式が成立するのは当然である。

コンデンサだけがあるとき、電荷の移動する場所がないから Q が制御変数である。一方電池をつないだ場合は電池が電位差を決めるから、V が制御変数になる（電池を取り替えたり、電圧可変の電源装置を使うなどして V が制御される）。

「エネルギーの微分はエネルギーを変化させるのに必要な仕事である」というのが前節の結果であるが、この項でわかったことは、

> 独立変数や制御変数を変えてしまうとエネルギーの方も変更しないと正しい一般化力が計算できない

という事実である。力学的に考えると「電池とつながっていてエネルギーのやりとりをしているんだから、電池のエネルギーとの和が保存量だよね！」という、あたりまえのことである。

[†18] 正確には、「極板間を広げるために必要な仕事÷（極板間距離の増加量）」ということになるが、それはつまり極板間の引力である。

熱力学では様々な「エネルギー」に対応する量が出現するが、それはどれを独立変数とするかが違う。それは使うべき状況が物理的に違うためである。この考え方に今から慣れておこう。

2.6 Legendre変換とその物理的意味

前節で考えたことからわかる教訓は、

系（前節の例ではコンデンサ）が外界（前節の例では電池）となんからの意味でつながっている場合、状況に応じてエネルギーを変更しなければいけない。

ということである。この「エネルギーの変更」を、数学的に一般的な手順としてまとめておこう。ある物理量 $f(x,y)$ が表す物理現象を考えるときに、「独立変数を (x,y) から (p_x,y) に変えたい（ただし、p_x は $\dfrac{\partial f(x)}{\partial x}$）に変えたい」という状況がよくある。前節で行った $Q\to V$ の変換も、$\boxed{V=\left(\dfrac{\partial U}{\partial Q}\right)_d}$ と考えるとまさにこの状況であるし、この後もそういう変数の取り換えをしたくなることがよくある。

しかし、単に変数を書き換えるだけででは、その関数から得られる情報が失われてしまう。そうならないように関数の形を調整しつつ独立変数を変える方法を「**Legendre変換** (Legendre transfomation)」と呼ぶ。

Legendre変換がどのような計算であるかを以下で説明していこう。

$f(x,y)$ という関数があるとしよう。この関数の偏微分係数 $\boxed{p_x=\left(\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y}$ と、$\boxed{p_y=\left(\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x}$ にはそれぞれに物理的意味があって、計算できるようにしておきたい（計算する手段が失われると困る）量であるとする[†19]。

計算をやっていくうちに、x を変数にするよりも p_x を変数に使った方が扱い易いということが判明し、(x,y) から (p_x,y) に変数を変えたいという事態

[†19] $f(x,y)$ がエネルギーだと思えば、p_x は x の変化に対応する一般化力、p_y は y の変化に対応する一般化力である。

が発生したとする（コンデンサの話で、Q じゃなく V を変数にしたくなったときと同様である）。

しかし、単に $\boxed{p_x=\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}}$ を $\boxed{x=x(p_x,y)}$ と変形して代入しただけの $f(x(p_x,y),y)$ を使うことにすると、少し困った状況が生じる。この関数 $f(x(p_x,y),y)$ を $\boxed{p_x\text{を一定として}\ y\ \text{で偏微分}}$ した量は、元々の $f(x,y)$ を y で偏微分した量と違うものになってしまうのである。

そこで、

$$\tilde f(p_x,y)=f(x(p_x,y),y)-x(p_x,y)p_x \tag{2.47}$$

で p_x,y の新しい関数を定義する。

上の式では x は $x(p_x,y)$ という「p_x と y の関数」であってもはや独立変数ではないことに注意しよう。同じ式を x,y を独立変数として書くならば（その場合は p_x が独立変数ではなくなる）、

$$\tilde f(p_x(x,y),y)=f(x,y)-xp_x(x,y) \tag{2.48}$$

となる。しばしばこれらの式は省略形を使って

$$\tilde f(p_x,y)=f(x,y)-xp_x \tag{2.49}$$

のように書かれるが、「この式は何を独立変数として書いた式なのか」を忘れてしまうと、(2.49) が (2.47) の意味なのか (2.48) の意味なのかわからなくなる。だから、慣れていない間は関数の引数は省略しない方がいい（慣れるといちいち書くのが億劫になる）。

(2.47) を p_x を一定にして y で微分すると、

$$\left(\frac{\partial \tilde f(p_x,y)}{\partial y}\right)_{p_x}=\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial x(p_x,y)}{\partial y}\right)_{p_x}+\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x-\left(\frac{\partial x(p_x,y)}{\partial y}\right)_{p_x}p_x \tag{2.50}$$

となるが、第１項の $\left(\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y$ は p_x そのものだから、第１項と第３項は相殺して、

$$\left(\frac{\partial \tilde f(p_x,y)}{\partial y}\right)_{p_x}=\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x \tag{2.51}$$

となる。つまり、$\left\{\begin{array}{l}\boxed{f(x,y)\ \text{の}\ x\ \text{を一定とした}\ y\ \text{による偏微分}}\\ \boxed{\tilde f(p_x,y)\ \text{の}\ p_x\ \text{を一定とした}\ y\ \text{による偏微分}}\end{array}\right.$ が等しくなる。

なお、(2.47) の両辺を$\boxed{y\text{を一定にして}p_x\text{で偏微分}}$すると、

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\tilde{f}(p_x,y)}{\partial p_x}\right)_y &= \underbrace{\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y}_{p_x}\left(\frac{\partial x(p_x,y)}{\partial p_x}\right)_y - \left(\frac{\partial x(p_x,y)}{\partial p_x}\right)_y p_x - x(p_x,y)\\ &= -x(p_x,y)\end{aligned} \tag{2.52}$$

となる。つまり、$\begin{cases} f(x,y)\text{を}x\text{で偏微分すると}p_x \\ \tilde{f}(p_x,y)\text{を}p_x\text{で偏微分すると}-x \end{cases}$ という（符号が違うが）対称な関係になっている。

まとめて表にすると、以下のようになる。

	$f(x,y)$	$\tilde{f}(p_x,y)$
xで微分	$\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y = p_x(x,y)$	できない
p_xで微分	できない	$\left(\frac{\partial\tilde{f}(p_x,y)}{\partial p_x}\right)_y = -x(p_x,y)$
yで微分	$\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x$ =	$\left(\frac{\partial\tilde{f}(p_x,y)}{\partial y}\right)_{p_x}$

このようにして、「偏微分の “何を固定するか” という条件が変化するのに対応して、関数の方を変えて偏微分の結果が変わらないようにする変換」を作ることができた。これが「Legendre 変換」の意義である。

なぜ Legendre 変換でうまく独立変数の変換ができるのかを全微分の式を書いて示しておこう。

xが $\mathrm{d}x$ 、yが $\mathrm{d}y$ 変化した時の$f(x,y)$の変化量は

$$\mathrm{d}f(x,y) = \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}x + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x \mathrm{d}y \tag{2.53}$$

と書ける。一方、$\boxed{\tilde{f} = f - p_x x}$の微分を考えると、

$$\mathrm{d}\tilde{f} = \overbrace{\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y}^{\mathrm{d}f} - \overbrace{(\mathrm{d}p_x x + p_x\,\mathrm{d}x)}^{\mathrm{d}(p_x x)}$$

$$= \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x}}_{p_x} \mathrm{d}x + \frac{\partial f}{\partial y} \mathrm{d}y - \mathrm{d}p_x x - p_x \mathrm{d}x \tag{2.54}$$

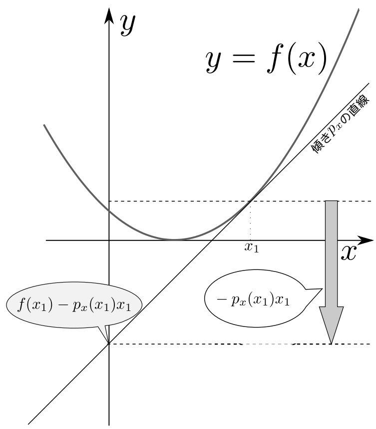
となって、第 1 項 $\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x$ と第 4 項 $-p_x \mathrm{d}x$ がちょうど消えて、

$$\mathrm{d}\tilde{f} = \frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y - \mathrm{d}p_x x \tag{2.55}$$

となる。これと、

$$\mathrm{d}\tilde{f}(p_x, y) = \left(\frac{\partial \tilde{f}(p_x, y)}{\partial y}\right)_{p_x} \mathrm{d}y + \left(\frac{\partial \tilde{f}(p_x, y)}{\partial p_x}\right)_{y} \mathrm{d}p_x \tag{2.56}$$

を見比べれば、$\boxed{\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial y}}$ が確認できるし、これからも、$\boxed{\frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_x} = -x}$ となっていることがわかる。

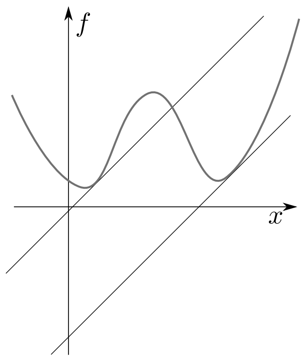


少し y を忘れて 1 変数関数 $f(x)$ を考えることにして、Legendre 変換をグラフの上の図形的操作としてはどのようなものになるのかを確認しておこう。1 変数の場合の Legendre 変換は $\boxed{p_x = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}}$ として $\boxed{\tilde{f} = f - p_x x}$ であるが、p_x の意味は「グラフの傾き」だから、$p_x x$ を引くということは、右の図のようにその点で接線（傾きが p_x の線）を引いて、その y 切片を求めることに対応する。

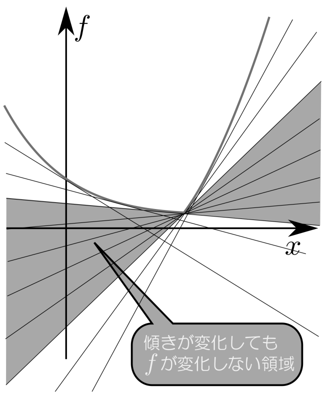
Legendre 変換は「情報を失わない変換」なので、

$$\underbrace{\tilde{f}(p_x) = f(x) - x\frac{\partial f}{\partial x} \quad \left(p_x = \frac{\partial f}{\partial x}\right)}_{\text{Legendre 変換}}, \qquad \underbrace{f(x) = \tilde{f}(p_x) - p_x\frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_x} \quad \left(x = -\frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_x}\right)}_{\text{逆 Legendre 変換}} \tag{2.57}$$

と同じ形（$x \leftrightarrow p_x, f \leftrightarrow \tilde{f}$ と取り替えた形）の変換を 2 回やると元に戻る。



ここまでではある意味「危なくない状況」を選んで考えたが、目ざとい人ならば「同じ p_x に対して二つ以上 $\tilde{f}$ の値があったりしないのか？」という点が心配になるのではないかと思う（たとえば右のような状況では、$\tilde{f}$ が一つに決まらない）。こうならないためには、グラフは常に「**凸関数**」[†20]でなくてはならない。別の言い方をすれば、$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}}$ が符号を変えてはいけない。凸関数であれば、p を決めれば x が決まり、ひいては f も $\tilde{f}$ も決まる。



もう一つ問題になるのは凸関数であっても、微分が連続ではない場合である。その場合は変数 p_x すなわち傾きが変化しても f が変化しない領域ができる。左図では接線が灰色に塗りつぶされた部分を動いている間は、p_x が変化しても f が変化しない。Legendre 変換後は、「x が変化しないのに $\tilde{f}$ が変化する」という現象が起こることになる。

なお、解析力学で使ったラグランジアンとハミルトニアンを相互に変換するときの Legendre 変換は、以下のように、上とは符号を変えた定義になっている。

符号が反転する Legendre 変換

Legendre 変換 $$\tilde{f}(p_x) = xp_x - f(x) \quad \text{ただし、} p_x = \frac{\partial f(x)}{\partial x} \tag{2.58}$$

逆 Legendre 変換 $$f(x) = xp_x - \tilde{f}(p_x) \quad \text{ただし、} x = \frac{\partial \tilde{f}(p_x)}{\partial p_x} \tag{2.59}$$

[†20] グラフの状況は「下に凸」なので「凹関数」に近いが、この場合でも凸関数と呼ぶ。

数学的な意味での Legendre 変換を見ていくと面白いのは、（コンデンサの場合に電池を考えたように）「外部につながっている何か」の詳細を考えることをしなくても、この計算は実行できることである。すなわち、「独立変数（制御変数）が変わった場合のエネルギーに対応するもの」を求めるには、外部につながっている「制御変数を一定にしようとしてくれるもの」（コンデンサの場合、電池が V を一定にしてくれるので V が制御変数になった）の詳細は必要ない（もちろん知っていた方がわかりやすいだろうけど、知らなくても問題はない）。

熱力学では「何を固定して変化させるか（制御変数に何を選ぶか）」を状況により変化させる（あるときは体積固定、あるときは圧力固定、あるときは温度固定…など）。そのために Legendre 変換が各所で活躍する。

2.7　章末演習問題

★【演習問題 2-1】

以下の関数を Legendre 変換（x から $\boxed{p_x = \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}}$ へと独立変数を変える）し、変換の前後で「y で偏微分した結果」が変わってないことと「p_x で偏微分すると $-x$ になること」を確認せよ。

(1)　$f(x,y) = x^2 y$

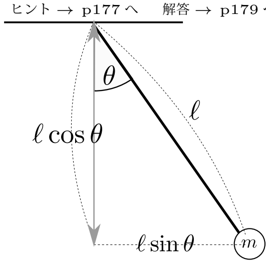
(2)　$f(x,y) = \mathrm{e}^x y$

ヒント → p177 へ　解答 → p179 へ

★【演習問題 2-2】

天井から長さ ℓ の糸をつないで質量 m の質点を吊るす。糸はたるんだりしないとすると、この質点の位置エネルギーを（基準点を天井として）求め、これを θ で微分することで力のモーメントを計算せよ。

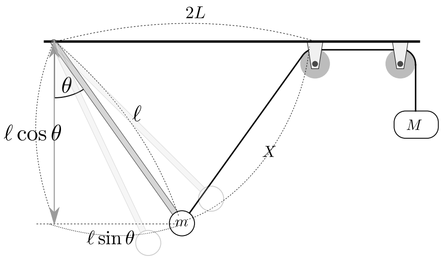
θ で微分することによって出るのは「力」ではなく「力のモーメント（角度に対する一般化力）」であることに注意。



ヒント → p177 へ　解答 → p179 へ

★【演習問題2-3】

図のように長さℓで軽くて硬い棒[†21]の一端を天井に固定する（棒は自由に回転できるものとする）。もう一端に質量mの質点を取り付け、それに糸をつないでその先に質量Mの物体を定滑車を通してつなげる。



(1)　位置エネルギーを表す式を作れ。
(2)　つりあいの条件を求めよ。

ヒント → p177へ　解答 → p180へ

★【演習問題2-4】

静電容量がC_1, C_2である二つのコンデンサを並列につないでみよう。それぞれにQ_1, Q_2の電荷が溜まったとすると、コンデンサのエネルギーの和は

$$U = \frac{(Q_1)^2}{2C_1} + \frac{(Q_2)^2}{2C_2} \tag{2.60}$$

である。$Q_1 + Q_2 = Q_{全}$が一定であるという条件をつけたのち、Uを微分して0と置くとある条件が得られるが、その条件の物理的意味は何か？

ヒント → p177へ　解答 → p180へ

★【演習問題2-5】

この章では「運動エネルギー」は考えなかった。運動エネルギーは位置の関数ではない（$U(\vec{x})$のように書けない）が、$\boxed{K = \frac{1}{2}mv^2}$とすると$\boxed{\mathrm{d}K = \vec{F}\cdot\vec{x}}$が成り立つことを示せ。これから、力$\vec{F}$が保存力であるときには$\boxed{\mathrm{d}(K+U) = 0}$が言える。

ヒント → p178へ　解答 → p181へ

[†21] 「軽くて硬い」というのは「質量と変形が無視できる」ということを表す符牒である。

付録 A

熱力学で使う数学

A.1　偏微分と全微分

A.1.1　常微分の復習

1変数の関数 $y = f(x)$ の微小変化、すなわち $x \to x + \mathrm{d}x$ としたときの変化量 $\mathrm{d}y = f(x + \mathrm{d}x) - f(x)$ を、

$$\mathrm{d}y = \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x \quad \text{あるいは} \, \mathrm{d}y = f'(x)\,\mathrm{d}x \tag{A.1}$$

と表す。$\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ または $f'(x)$ は $f(x)$ から決まる新しい関数であり、「微係数」または「導関数」と呼ばれる。たとえば

$$y = x^3 \text{ ならば } \mathrm{d}y = (x + \mathrm{d}x)^3 - x^3 \tag{A.2}$$

であるが、この計算は

$$(x+\mathrm{d}x)^3 - x^3 = x^3 + 3x^2\,\mathrm{d}x + 3x\,\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}x^3 - x^3 = 3x^2\,\mathrm{d}x \underbrace{+3x\,\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}x^3}_{\text{無視する部分}} \tag{A.3}$$

と考えて後ろの部分は無視する。なぜなら、今は $\mathrm{d}x$ という微小量が非常に小さい状況を考えており、その状況では $\mathrm{d}x^2$ や $\mathrm{d}x^3$ は考えるのに値しないのである[†1]。

よって、

$$y = x^3 \text{ ならば } \mathrm{d}y = 3x^2\,\mathrm{d}x \tag{A.4}$$

[†1] 大雑把な言い方をすれば、「x がオーダー1の量であるときに $\mathrm{d}x = \dfrac{1}{100}$ のような状況を考えると、それに比べて $\mathrm{d}x^2 = \dfrac{1}{10000}$ や $\mathrm{d}x^3 = \dfrac{1}{1000000}$ は考えなくてよい」ということになる。もちろんこの考え方は大雑把すぎるのだが、考え方のとっかかりとしてこう考えてよい。

となる。すなわち、$\boxed{\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=f'(x)=3x^2}$である。

この考えで他の関数に適用すると、

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}(x^n) &= nx^{n-1}\,\mathrm{d}x &\quad (A.5)\\
\mathrm{d}(\mathrm{e}^x) &= \mathrm{e}^x\,\mathrm{d}x &\quad (A.6)\\
\mathrm{d}(\log x) &= \frac{1}{x}\,\mathrm{d}x &\quad (A.7)\\
\mathrm{d}(\sin x) &= \cos x\,\mathrm{d}x &\quad (A.8)\\
\mathrm{d}(\cos x) &= -\sin x\,\mathrm{d}x &\quad (A.9)
\end{aligned}$$

などが計算できる。

練習問題

【問いA-1】 上の(A.5)から(A.9)までを(A.2)と同様にして導け。 → p155

ヒント → p169へ　解答 → p171へ

微分という計算は「どんな関数も、微小な範囲を考えると（つまり $\mathrm{d}x$ が小さいという極限で考えると）線形に近似できるだろう」という考え方に基づいている。ゆえに微小範囲を見ても線形にならない関数—たとえば不連続点（グラフの「飛び」）や微分の不連続点（グラフの「角」）のある関数には適用できない。熱力学でも勉強が進むと「飛び」や「角」のある関数が出てくるので、その点には注意が必要である。

そういうややこしい関数のことはここでは考えないことにして少し忘れておく。$f(x)$ という関数をある点の近くで近似すると $\mathrm{d}x$ に関して1次式になるから、

$$f(x+\mathrm{d}x)=f(x)+\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x \tag{A.10}$$

と置いてしまえ、というのが微分の考え方である。なお、$\mathrm{d}x$ について高次の項を残す場合は、

$$f(x+\mathrm{d}x)=f(x)+\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2f(x)}{\mathrm{d}x^2}\,\mathrm{d}x^2+\frac{1}{3!}\frac{\mathrm{d}^3f(x)}{\mathrm{d}x^3}\,\mathrm{d}x^3+\cdots \tag{A.11}$$

のようにさらに係数を増やして展開を続ける。

これを2変数以上に拡張するのが偏微分である。

A.1.2 偏微分の計算

2変数の関数 $f(x,y)$ があるとする。x,y は独立変数であるので、それぞれ独立に $\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}y$ だけ変化させることができる。このとき関数の微小変化は

$$\mathrm{d}f(x,y)=f(x+\mathrm{d}x,y+\mathrm{d}y)-f(x,y) \tag{A.12}$$

のような引き算で定義できる。$\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}y$ は微小量（いくらでも小さくすることができる量）であるので、$\mathrm{d}x$, $\mathrm{d}y$ に関して 2 次以上の項は考えなくてもよいことにしよう。つまり、a, b をある係数として、

$$f(x+\mathrm{d}x, y+\mathrm{d}y) = f(x,y) + a\,\mathrm{d}x + b\,\mathrm{d}y \tag{A.13}$$

と展開できると考える。この係数 a, b はそれぞれ「x 方向の移動による f の増加の割合」と「y 方向の移動による f の増加の割合」であるから、微係数 $\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ に似た記号をつかって表現して

$$f(x+\mathrm{d}x, y+\mathrm{d}y) = f(x,y) + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}x + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x \mathrm{d}y \tag{A.14}$$

と書くことができ、以下のようにまとめることができる。

関数 $f(x,y)$ の微小変化

$$\mathrm{d}f(x,y) = \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}x + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x \mathrm{d}y \tag{A.15}$$

$\left(\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y$ と $\left(\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x$ は $f(x,y)$ がどんな関数であるかによって決まる係数（「偏微分係数」または「偏導関数」と呼ばれる）で、一般にはこれも x, y の関数となる。記号の $\Big)_y$ は「y を一定にしての微分」であることを示している（しばしば省略される）。

一例として $\boxed{f(x,y) = x^3y^2}$ の場合を真面目に計算しておくと、

$$\begin{aligned}(x+\mathrm{d}x)^3(y+\mathrm{d}y)^2 =& (x^3 + 3x^2\,\mathrm{d}x \underbrace{+3x\,\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}x^3}_{\text{無視}})(y^2 + 2y\,\mathrm{d}y \underbrace{+\mathrm{d}y^2}_{\text{無視}}) \\ =& x^3y^2 + 3x^2y^2\,\mathrm{d}x + 2x^3y\,\mathrm{d}y \underbrace{+6x^2y\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y}_{\text{無視}} \\ =& x^3y^2 + \underbrace{3x^2y^2}_{\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_y}\mathrm{d}x + \underbrace{2x^3y}_{\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_x}\mathrm{d}y \end{aligned} \tag{A.16}$$

となる。$\boxed{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x}\right)_y = 3x^2y^2, \left(\dfrac{\partial f}{\partial y}\right)_x = 2x^3y}$ であるが、これは上のように真面目に計算しなくても、「$\boxed{f(x,y) = x^3y^2}$ において y は定数だと思って x で微分」という手順を踏めば $\boxed{\left(\dfrac{\partial f}{\partial x}\right)_y = 3x^2y^2}$ はすぐに出てくる（実用上はこのように計算した方が速い）。

偏微分の場合の高階微分を 2 階まで書くと

$$
\begin{aligned}
f(x+\mathrm{d}x\,,y+\mathrm{d}y\,) =& f(x,y) + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}x + \left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}y \\
&+ \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x^2}\right)_y \mathrm{d}x^{\,2} + \frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial y^2}\right)_x \mathrm{d}y^{\,2} + \cdots
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

となる。この式に現れる $\dfrac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y}$ は

$$
\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y\right)_x = \left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x\right)_y \tag{A.18}
$$

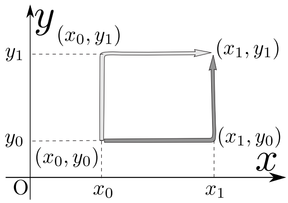
という意味である。つまり、関数 $f(x,y)$ を「x で偏微分してから y で偏微分したもの」または「y で偏微分してから x で偏微分したもの」を意味する。

この二つが等しいことは実は

$$
\int_{x_0}^{x_1} \mathrm{d}x \left(\frac{\partial f(x,y_0)}{\partial x}\right)_y + \int_{y_0}^{y_1} \mathrm{d}y \left(\frac{\partial f(x_1,y)}{\partial y}\right)_x \tag{A.19}
$$

と

$$
\int_{y_0}^{y_1} \mathrm{d}x \left(\frac{\partial f(x_0,y)}{\partial x}\right)_y + \int_{x_0}^{x_1} \mathrm{d}y \left(\frac{\partial f(x,y_1)}{\partial x}\right)_y \tag{A.20}
$$



という二つの積分の値が等しいことを意味する。実際に積分してみれば

$$
\overbrace{f(x_1,y_0)-f(x_0,y_0)}^{\int_{x_0}^{x_1}\mathrm{d}x\left(\frac{\partial f(x,y_0)}{\partial x}\right)_y} + \overbrace{f(x_1,y_1)-f(x_1,y_0)}^{\int_{y_0}^{y_1}\mathrm{d}y\left(\frac{\partial f(x_1,y)}{\partial y}\right)_x} = f(x_1,y_1)-f(x_0,y_0) \tag{A.21}
$$

$$
\overbrace{f(x_0,y_1)-f(x_0,y_0)}^{\int_{y_0}^{y_1}\mathrm{d}x\left(\frac{\partial f(x_0,y)}{\partial x}\right)_y} + \overbrace{f(x_1,y_1)-f(x_0,y_1)}^{\int_{x_0}^{x_1}\mathrm{d}y\left(\frac{\partial f(x,y_1)}{\partial x}\right)_y} = f(x_1,y_1)-f(x_0,y_0) \tag{A.22}
$$

となり、どちらも（到着点での値）−（出発点での値）になっている。

練習問題

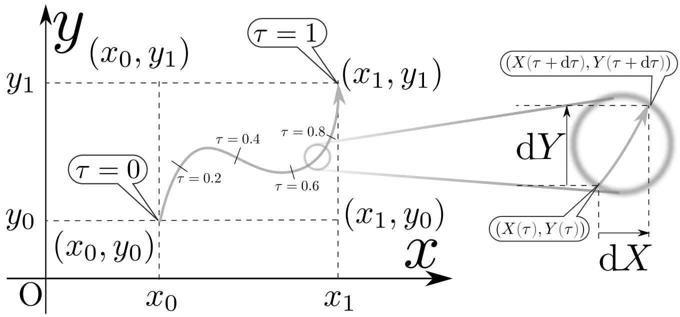
【問い A-2】 上の二つの式の積分範囲 $\boxed{\Delta x = x_1 - x_0}$ と $\boxed{\Delta y = y_1 - y_0}$ を微小量だとして、$\boxed{\text{(A.19)}-\text{(A.20)}=0}$ を展開して考えると (A.18) が導かれることを示せ。

解答 → p173 へ

上の二つの積分はグラフに書いた長方形の辺を通るような経路であるが、(x_0,y_0) で始まり (x_1,y_1) で終わる任意の曲線を積分経路にしても、積分結果が等しいことは証明できる。

今考えている経路が関数 $\boxed{x=X(\tau), y=Y(\tau)}$ で表現されているとしよう。この関数 X, Y は連続な関数[†2]であり、$\boxed{\tau=0}$ で $\boxed{x=x_0, y=y_0}$ に、$\boxed{\tau=1}$ で $\boxed{x=x_1, y=y_1}$ になるように境界条件が決められているとする。

この関数は今考えている経路上では $f(X(\tau), Y(\tau))$ という値を持つ（f は x, y の 2 変数関数だが、経路上では τ を決めると x, y が決まるから、$f(X(\tau), Y(\tau))$ という τ の 1 変数関数だと考えていい。



f を τ で微分すると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} f(X(\tau), Y(\tau)) = \underbrace{\left(\frac{\partial f(X, Y)}{\partial X}\right)_Y}_{P(X,Y)} \frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}\tau} + \underbrace{\left(\frac{\partial f(X, Y)}{\partial Y}\right)_X}_{Q(X,Y)} \frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}\tau} \tag{A.23}$$

となる。この式の両辺に $\mathrm{d}\tau$ を掛けて積分すると、右辺では $\mathrm{d}\tau$ が約分され、

$$\int_0^1 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} f(X(\tau), Y(\tau))\,\mathrm{d}\tau = \int_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} \left(P(X, Y)\,\mathrm{d}X + Q(X, Y)\,\mathrm{d}Y\right) \tag{A.24}$$

となり、左辺は τ で微分して τ で積分するのだから結果は $f(X(1), Y(1)) - f(X(0), Y(0))$ になる。右辺は X, Y と書いている部分を x, y に戻せば[†3]、

$$f(x_1, y_1) - f(x_0, y_0) = \int_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} \left(P(x, y)\,\mathrm{d}x + Q(x, y)\,\mathrm{d}y\right) \tag{A.25}$$

となって積分結果はやはり $f(x_1, y_1) - f(x_0, y_0)$ である。

1 変数の場合の 微分してから定積分する ときの式

$$f(x_1) - f(x_0) = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(t)\,\mathrm{d}t \tag{A.26}$$

[†2] X, Y が連続でないと積分経路が途中で不連続になってしまう。

[†3] 定積分の積分変数はダミーであり、どんな文字を書くかは自由。

は、N 変数では積分が線積分になり、微分が $\vec{\nabla}$（あるいは grad ）に変わって、

$$f(\vec{x}_1) - f(\vec{x}_0) = \int_{\vec{x}_0}^{\vec{x}_1} \left(\vec{\nabla} f(\vec{x})\right) \cdot \mathrm{d}\vec{x} \tag{A.27}$$

と拡張される。

A.1.3　全微分と積分可能条件

前項で行ったのは関数 $f(x, y)$ が与えられていてそれを偏微分していくという方向の計算だが、この逆の方向の計算も必要になる。微分の反対は積分、すなわち「微分したらこうなる関数は何か？」を求めていくことである。

ある関数 $U(x, y)$ の全微分は

$$\mathrm{d}U(x, y) = \left(\frac{\partial U(x, y)}{\partial x}\right)_y \mathrm{d}x + \left(\frac{\partial U(x, y)}{\partial y}\right)_x \mathrm{d}y \tag{A.28}$$

であるが、逆に

$$P(x, y)\,\mathrm{d}x + Q(x, y)\,\mathrm{d}y \tag{A.29}$$

のような式[†4]が与えられたとき、これが「何かの関数 $U(x, y)$ の全微分になっている（つまり、$\boxed{\left(\frac{\partial U(x, y)}{\partial x}\right)_y = P(x, y)}$, $\boxed{\left(\frac{\partial U(x, y)}{\partial y}\right)_x = Q(x, y)}$ が成り立っている）」かどうか、別の言い方をすれば「積分できるか」は自明ではない。何かの微分になっているとは限らないので、

$$\text{đ}F = P(x, y)\,\mathrm{d}x + Q(x, y)\,\mathrm{d}y \tag{A.30}$$

のように、微分の記号 d とはちょっと違う記号を使って表現する[†5]。$\text{đ}F$ が「何かの関数の全微分」であるためにはある条件が必要である。

以下のことを示そう。

積分可能条件

$\text{đ}F = P(x, y)\,\mathrm{d}x + Q(x, y)\,\mathrm{d}y$ が全微分である必要十分条件は

$$\left(\frac{\partial P(x, y)}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial Q(x, y)}{\partial x}\right)_y \tag{A.31}$$

である。

[†4] このような式（$\mathrm{d}x$ などの微小量の線形結合）を「**Pfaff 形式**」と呼ぶ。

[†5] $\mathrm{d}F$ は「F の微分」または「F の微小変化」だが、$\text{đ}F$ はそのどちらでもない。「$\text{đ}F$」という名前の微小量だと思って欲しい。「不完全微分」と呼ぶこともある。

必要条件であること、つまり $\boxed{đF = \mathrm{d}U}$ であるためには (A.31) を満たさなくてはいけないということはすぐに示せる。dU を

$$đF = \mathrm{d}U(x,y) = \underbrace{\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial x}\right)_y}_{P(x,y)} \mathrm{d}x + \underbrace{\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial y}\right)_x}_{Q(x,y)} \mathrm{d}y \tag{A.32}$$

と書けば、$\boxed{\left(\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial Q(x,y)}{\partial x}\right)_y}$ でなくてはいけない。それは(A.18)で示した偏微分の交換性
→ p158

$$\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial x}\right)_y\right)_x}_{\left(\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\right)_x} = \underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial y}\right)_x\right)_y}_{\left(\frac{\partial Q(x,y)}{\partial x}\right)_y} \tag{A.33}$$

（文字は f から U に変えたが同じ式である）からすぐにわかる。

十分条件であること、すなわち「積分可能条件が満たされるならば $\boxed{đF = \mathrm{d}U}$ となる $U(x,y)$ が存在する」を示すには、以下のように実際に作ってみればよい。

積分可能条件が満たされているならば、

$$U(x_1,y_1) = \int_{x_0}^{x_1} P(x,y_0)\,\mathrm{d}x + \int_{y_0}^{y_1} Q(x_1,y)\,\mathrm{d}y + U(x_0,y_0) \tag{A.34}$$

および

$$U(x_1,y_1) = \int_{y_0}^{y_1} Q(x_0,y)\,\mathrm{d}y + \int_{x_0}^{x_1} P(x,y_1)\,\mathrm{d}x + U(x_0,y_0) \tag{A.35}$$

は同じ関数になり、ともに $\boxed{\left(\frac{\partial U(x_1,y_1)}{\partial x_1}\right)_{y_1} = P(x_1,y_1), \left(\frac{\partial U(x_1,y_1)}{\partial y_1}\right)_{x_1} = Q(x_1,y_1)}$ を満たす。

練習問題

【問い A-3】

(1) 上の式 (A.34) と (A.35) を x_1 と y_1 で微分して、結果がそれぞれ $P(x_1,y_1)$ と $Q(x_1,y_1)$ になることを確認せよ。

(2) $\boxed{\left(\frac{\partial U(x_1,y_1)}{\partial x_1}\right)_{y_1} = P(x_1,y_1), \left(\frac{\partial U(x_1,y_1)}{\partial y_1}\right)_{x_1} = Q(x_1,y_1)}$ を代入して積分するとこの二つの式はどちらも $U(x_1,y_1)$ になることを確認せよ。

解答 → p173 へ

積分可能条件が満たされているなら、もっと一般的に $(x_0, y_0) \to (x_1, y_1)$ への積分経路は任意[†6]であり、

$$U(x_1, y_1) = \int_{(x_0,y_0)}^{(x_1,y_1)} \left(P(x,y)\,\mathrm{d}x + Q(x,y)\,\mathrm{d}y\right) + U(x_0, y_0) \tag{A.36}$$

が成り立つ。$\boxed{\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial x}\right)_y = P(x,y)}$, $\boxed{\left(\frac{\partial U(x,y)}{\partial y}\right)_x = Q(x,y)}$ として、後は(A.25) → p159 を導いたときと同様の計算を行えば上の式は示せる。

A.1.4　積分因子・積分分母

ある $đF$ が積分可能条件を満たしてなかったとしよう。その場合も、$đF$ にある関数 $\lambda(x,y)$ を掛けて

$$\lambda(x,y)\,đF = \lambda(x,y)P(x,y)\,\mathrm{d}x + \lambda(x,y)Q(x,y)\,\mathrm{d}y \tag{A.37}$$

にすると積分可能条件

$$\left(\frac{\partial(\lambda(x,y)P(x,y))}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial(\lambda(x,y)Q(x,y))}{\partial x}\right)_y \tag{A.38}$$

が満たされる場合がある。この $\lambda(x,y)$ を「**積分因子**」と呼ぶ。

積分因子が $\boxed{\lambda(x,y) = \frac{1}{\tau(x,y)}}$ のように書かれるとき、$\tau(x,y)$ を「**積分分母**」と呼ぶ。積分因子も積分分母も 0 になってはならないことに注意しよう。

(A.38) は（節約のため (x,y) を省いて書くと）

$$\lambda\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_y + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)_y P = \lambda\left(\frac{\partial Q}{\partial y}\right)_x + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)_x Q \tag{A.39}$$

$$\lambda\left(\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_y - \left(\frac{\partial Q}{\partial y}\right)_x\right) = \left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)_x Q - \left(\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)_y P \tag{A.40}$$

となるからこれを λ に対する偏微分方程式として解けばよい。

3 変数の場合の

$$đF = P(x,y,z)\,\mathrm{d}x + Q(x,y,z)\,\mathrm{d}y + R(x,y,z)\,\mathrm{d}z \tag{A.41}$$

が全微分である条件は

$$\left(\frac{\partial P(x,y,z)}{\partial y}\right)_x = \left(\frac{\partial Q(x,y,z)}{\partial x}\right)_y \tag{A.42}$$

[†6] (A.34) と (A.35) は任意である経路のうち、もっとも簡単な例を選んだ結果になっている。

$$\left(\frac{\partial Q(x,y,z)}{\partial z}\right)_y=\left(\frac{\partial R(x,y,z)}{\partial y}\right)_z \tag{A.43}$$
$$\left(\frac{\partial R(x,y,z)}{\partial x}\right)_z=\left(\frac{\partial P(x,y,z)}{\partial z}\right)_x \tag{A.44}$$

の三つになる [†7]（4変数以上も同様に条件式が増えていく）。どれか一つでも満たされてない場合はやはり積分因子を掛けて（あるいは積分分母で割って）

$$\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)P(x,y,z))}{\partial y}\right)_x=\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)Q(x,y,z))}{\partial x}\right)_y \tag{A.45}$$
$$\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)Q(x,y,z))}{\partial z}\right)_y=\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)R(x,y,z))}{\partial y}\right)_z \tag{A.46}$$
$$\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)R(x,y,z))}{\partial x}\right)_z=\left(\frac{\partial(\lambda(x,y,z)P(x,y,z))}{\partial z}\right)_x \tag{A.47}$$

が満たされるようにする。

A.1.5　積分分母が見つかる条件

この節の内容は授業では扱わないつもりだが、数学的な基礎が気になる人は読んでおくこと。

前項の最後で「満たされるようにする」と書いたが、これが可能ではない場合がある。以下で示すように、3変数以上ではある条件を満たしていないと積分因子が絶対に見つからないことがわかるのである。

積分因子が見つかる条件を求めるには、上の三つの式から $\lambda(x,y,z)$（およびその微分）を消去するとよい。以下では式を短くするために (x,y,z) を省略する。まずライプニッツ則を使って

$$\overbrace{\lambda\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_x+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)_x P}^{\left(\frac{\partial(\lambda P)}{\partial y}\right)_x}=\overbrace{\lambda\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_y+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)_y Q}^{\left(\frac{\partial(\lambda Q)}{\partial x}\right)_y} \tag{A.48}$$
$$\lambda\left(\frac{\partial Q}{\partial z}\right)_y+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial z}\right)_y Q=\lambda\left(\frac{\partial R}{\partial y}\right)_z+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial y}\right)_z R \tag{A.49}$$
$$\lambda\left(\frac{\partial R}{\partial x}\right)_z+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial x}\right)_z R=\lambda\left(\frac{\partial P}{\partial z}\right)_x+\left(\frac{\partial \lambda}{\partial z}\right)_x P \tag{A.50}$$

という式を作り、「(A.48)$\times R$+(A.49)$\times P$+(A.50)$\times Q$」という計算をすると、微分の項がちょうどうまく消し合って、

$$\lambda\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_x R+\lambda\left(\frac{\partial Q}{\partial z}\right)_y P+\lambda\left(\frac{\partial R}{\partial x}\right)_z Q=\lambda\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_y R+\lambda\left(\frac{\partial R}{\partial y}\right)_z P+\lambda\left(\frac{\partial P}{\partial z}\right)_x Q \tag{A.51}$$

[†7] この式は電磁気学などでお馴染みの rot $\vec{E}=0$ と同じ式である。

という式が出る。全ての項にλが1次で入っているので、両辺をλで割ることで

$$\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_x R+\left(\frac{\partial Q}{\partial z}\right)_y P+\left(\frac{\partial R}{\partial x}\right)_z Q=\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_y R+\left(\frac{\partial R}{\partial y}\right)_z P+\left(\frac{\partial P}{\partial z}\right)_x Q \quad \text{(A.52)}$$

というλもその微分も含まない式ができる。さらに整理すると

$$\left(\left(\frac{\partial P}{\partial y}\right)_x-\left(\frac{\partial Q}{\partial x}\right)_y\right)R+\left(\left(\frac{\partial Q}{\partial z}\right)_y-\left(\frac{\partial R}{\partial y}\right)_z\right)P+\left(\left(\frac{\partial R}{\partial x}\right)_z-\left(\frac{\partial P}{\partial z}\right)_x\right)Q=0 \quad \text{(A.53)}$$

となる（積分可能条件が満たされていればこの式はもちろん成り立つ）。

あたえられたP,Q,Rがこの式(A.53)を満たさない場合はどのような積分因子（積分分母）を選んでも積分可能条件を満たすようにすることができない。つまり、3変数の場合は、λに関する方程式を出すまでもなく、「積分可能ではない」と判定できる場合がある†8。

A.2　偏微分の相互関係

3変数x,y,zの間に$\boxed{f(x,y,z)=c\text{（定数）}}$という関係がある場合を考えよう。3変数あるが二つを決めれば最後の一つが決まる†9という形になっているので、自由度は2である。これを微分すると、

$$\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\mathrm{d}x+\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}\mathrm{d}y+\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}\mathrm{d}z=0 \quad \text{(A.54)}$$

という式が現れる。ここで$\boxed{z=z_0\text{（一定）}}$の状況を考えると、その時は$\mathrm{d}z=0$だから、

$$\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\mathrm{d}x+\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}\mathrm{d}y=0 \quad \text{(A.55)}$$

となり、これから

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\mathrm{d}x&=-\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}\mathrm{d}y\\ \left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}&=-\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}\end{aligned} \quad \text{(A.56)}$$

---

†8 この事情は4変数以上でも同じである（2変数のときはこの条件はでない）。

†9 厳密に言えば、y,zを決めたときに$\boxed{f(x,y,z)=c}$の解が複数個ある可能性もあるので、唯一に決まらない場合もある。たとえば$f=x^2+y^2+z^2=C$だと、$\boxed{x=\pm\sqrt{C-y^2-z^2}}$である（解は二つ）。

という式を作ることができる。ここに現れた $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}$ は $\boxed{z\text{が一定}}$ という条件のもとでの $\mathrm{d}x$ と $\mathrm{d}y$ の比だから、$\left(\dfrac{\partial x(y,z)}{\partial y}\right)_z$ である。これから

$$\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}\left(\frac{\partial x(y,z)}{\partial y}\right)_z = -\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z} \tag{A.57}$$

または、

$$\left(\frac{\partial x(y,z)}{\partial y}\right)_z = -\frac{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,z}}{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}} \tag{A.58}$$

という式ができる。どちらの式もマイナス符号が付くことに注意せよ[†10]。

以上と同じ計算を x,y,z の立場を取り替えつつ実行すれば、

$$\left(\frac{\partial y(x,z)}{\partial z}\right)_x = -\frac{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}}{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y}\right)_{x,y}},\qquad \left(\frac{\partial z(x,y)}{\partial x}\right)_y = -\frac{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x}\right)_{y,z}}{\left(\frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z}\right)_{x,y}} \tag{A.59}$$

のような式も作ることができる。また、今作った三つの式を掛けあわせることにより、

$$\left(\frac{\partial x(y,z)}{\partial y}\right)_z\left(\frac{\partial y(x,z)}{\partial z}\right)_x\left(\frac{\partial z(x,y)}{\partial x}\right)_y = -1 \tag{A.60}$$

という式が出てくる（こちらも字面だけを見て「答えは 1」と迂闊な計算をしないように！）。

練習問題

【問い A-4】 x,y,z の間に、x は y,z の関数 $\boxed{x=x(y,z)}$ であり、y は x,y の関数 $\boxed{y=y(x,z)}$ という関係があったとする。$\boxed{x=x(y,z)}$ の y に数 $\boxed{y=y(x,z)}$ を代入すると、

$$x = x(y(x,z),z) \tag{A.61}$$

という式を作ることができる。

(1) この式を x を一定として z で微分することにより、以下の式（上の (A.60) と同じ式である）が成り立つことを示せ。

$$\left(\frac{\partial x(y,z)}{\partial y}\right)_z\left(\frac{\partial y(x,z)}{\partial z}\right)_x = -\left(\frac{\partial x(y,z)}{\partial z}\right)_y \tag{A.62}$$

(2) この式を z を一定として x で微分するとどんな式を作ることができるか。

ヒント → p170 へ　解答 → p175 へ

†10 $\dfrac{\frac{\partial f}{\partial y}}{\frac{\partial f}{\partial x}}$ という式の字面だけを見て「∂f を約分して $\dfrac{\partial x}{\partial y}$」のような迂闊な計算をしてはいけない。

A.3　多変数関数の変数変換

「偏微分の計算はややこしい！」と思う人が多いが、慣れるまでは上のA.2 節でもやったように、「定義に戻って確認していく」ことを勧める。→ p164 使い勝手のいい「偏微分の定義の表現」は、$\boxed{\mathrm{d}f(x,y)=\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y\mathrm{d}x+\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x\mathrm{d}y}$ である。

A.3.1　2 変数の変数変換

$$\mathrm{d}P=\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\mathrm{d}y \tag{A.63}$$

の変数 x,y を X,Y に変える（二つの変数は $\boxed{\begin{array}{l}x=x(X,Y)\\ y=y(X,Y)\end{array}}$ および $\boxed{\begin{array}{l}X=X(x,y)\\ Y=Y(x,y)\end{array}}$ のように[†11]関係づけられているとしよう）。ということは

$$\mathrm{d}x=\frac{\partial x(X,Y)}{\partial X}\mathrm{d}X+\frac{\partial x(X,Y)}{\partial Y}\mathrm{d}Y \tag{A.64}$$

$$\mathrm{d}y=\frac{\partial y(X,Y)}{\partial X}\mathrm{d}X+\frac{\partial y(X,Y)}{\partial Y}\mathrm{d}Y \tag{A.65}$$

という関係があるということだから、

$$\begin{aligned}\mathrm{d}P=&\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\left(\frac{\partial x(X,Y)}{\partial X}\mathrm{d}X+\frac{\partial x(X,Y)}{\partial Y}\mathrm{d}Y\right)\\&+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\left(\frac{\partial y(X,Y)}{\partial X}\mathrm{d}X+\frac{\partial y(X,Y)}{\partial Y}\mathrm{d}Y\right)\end{aligned} \tag{A.66}$$

である。この式を $\mathrm{d}X$, $\mathrm{d}Y$ の係数で整理すれば

$$\begin{aligned}\mathrm{d}P=&\left(\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\frac{\partial x(X,Y)}{\partial X}+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\frac{\partial y(X,Y)}{\partial X}\right)\mathrm{d}X\\&+\left(\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\frac{\partial x(X,Y)}{\partial Y}+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\frac{\partial y(X,Y)}{\partial Y}\right)\mathrm{d}Y\end{aligned} \tag{A.67}$$

となることから、

$$\frac{\partial P(x(X,Y),y(X,Y))}{\partial X}=\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\frac{\partial x(X,Y)}{\partial X}+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\frac{\partial y(X,Y)}{\partial X} \tag{A.68}$$

[†11] 変数 X,Y と、関数 $X(x,y),Y(x,y)$ に同じ文字を使っている。単に X と書いたときは X そのものであるが、$X(x,y)$ は「x,y を決めると（実際には何らかの計算によって）決まる。たとえば、$r=\sqrt{x^2+y^2}$ という関係において、$\sqrt{x^2+y^2}$ を $r(x,y)$ のように x,y の関数として書く。混同しそうだという人は自分でこの式を $X=F(x,y),Y=G(x,y)$（および、$x=f(X,Y),y=g(X,Y)$）と書き直して理解して欲しい（とはいえ、こういう省エネ記述法にも慣れていきたいところだ）。

$$\frac{\partial P(x(X,Y),y(X,Y))}{\partial Y}=\frac{\partial P(x,y)}{\partial x}\frac{\partial x(X,Y)}{\partial Y}+\frac{\partial P(x,y)}{\partial y}\frac{\partial y(X,Y)}{\partial Y} \tag{A.69}$$

のように偏微分が変数変換される。

【補足】 ✢✢✢

常微分のときの $\boxed{\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}X}\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}x}=\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}}$ と同じように $\boxed{\frac{\partial P}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x}=\frac{\partial P}{\partial x}}$ とやってしまう「よくある間違い」がある。これは省略形の字面を見ているともっともらしいが、省略せずに書けば常微分の式（正しい式）は

$$\frac{\mathrm{d}P\left(X(x)\right)}{\mathrm{d}x}=\left.\frac{\mathrm{d}P\left(X\right)}{\mathrm{d}X}\right|_{X=X(x,y)}\frac{\mathrm{d}X\left(x\right)}{\mathrm{d}x} \tag{A.70}$$

偏微分の式（間違った式）は

$$\frac{\partial P(X(x,y),Y(x,y))}{\partial x}=\left.\frac{\partial P(X,Y)}{\partial X}\right|_{\substack{X=X(x,y)\\Y=Y(x,y)}}\frac{\partial X(x,y)}{\partial y} \tag{A.71}$$

である。（間違った式）の方は左辺の $Y(x,y)$ の中の x を微分するのを忘れている。「この間違いをやらかしそうだ」と思った人は、慣れるまでは省略せずにきっちり引数を書いて計算しよう。

✢✢ **【補足終わり】**

練習問題

【問い A-5】 $\boxed{\begin{aligned}x&=r\cos\theta\\y&=r\sin\theta\end{aligned}}$ という変数変換において、$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x},\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$ と $\frac{\partial f(r,\theta)}{\partial r},\frac{\partial f(r,\theta)}{\partial\theta}$ の関係式を作れ。 ヒント → p170 へ　解答 → p175 へ

熱力学では2変数のうち片方の変数は変えずにもう一方の変数を変える、という変換もよく行う。変数の組 x,y を p,y に変える（$p=p(x,y)$）場合を考えてみよう。

$$\mathrm{d}p=\frac{\partial p(x,y)}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial p(x,y)}{\partial y}\mathrm{d}y \tag{A.72}$$

と

$$\mathrm{d}f=\frac{\partial f(p,y)}{\partial p}\mathrm{d}p+\frac{\partial f(p,y)}{\partial y}\mathrm{d}y \tag{A.73}$$

から、

$$\mathrm{d}f=\frac{\partial f(p,y)}{\partial p}\overbrace{\left(\frac{\partial p(x,y)}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial p(x,y)}{\partial y}\mathrm{d}y\right)}^{\mathrm{d}p}+\frac{\partial f(p,y)}{\partial y}\mathrm{d}y$$

$$=\underbrace{\frac{\partial f(p,y)}{\partial p}\frac{\partial p(x,y)}{\partial x}}_{\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\right)_y}\mathrm{d}x+\underbrace{\left(\frac{\partial f(p,y)}{\partial p}\frac{\partial p(x,y)}{\partial y}+\frac{\partial f(p,y)}{\partial y}\right)}_{\left(\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\right)_x}\mathrm{d}y \tag{A.74}$$

のようにして偏微分の変換が計算できる。