



ミクロとマクロの間

—メゾスケール構造のダイナミクスへのチャレンジ—

Challenge to Mesoscopic Dynamics of Structure



北川 浩
Hiroshi KITAGAWA

- ◎1940年9月生まれ
1963年大阪大学工学部機械工学科卒業、1987年
大阪大学工学部教授
- ◎研究・専門テーマは材料力学、計算力学
- ◎正員、大阪大学大学院工学研究科知能・機械創
成工学専攻
(〒565-0871 吹田市山田丘2-1/
E-mail: kitagawa@ams.eng.osaka-u.ac.jp)

1 はじめに

ガリレオは、力学に関する生涯の仕事の集大成として著した「新科学対話」¹⁾を、ヴェネチアの機械工場で働く職工(artisan)に、代々受け継がれた経験と観察に基づく知と技の確かさに目を向けることから書き始めている。他の場所で“自然という書物は数学の言葉で書かれている”と述べると共に、望遠鏡を用いて(裸眼では見えない)木星の衛星を観測することによって‘地球が動いている’ことを見抜いたその人が、‘抽象的に(幾何学的に)考えた機械と具体的な機械の間の違い’を見極めるのに、老職工の経験に基づく指摘を規範とすべし、と述べていることはきわめて示唆に富んでいる。

機械工学が前の世紀において犯した過ちの一つに、情報工学分野の異常な大展開に押し流されて、無定見な抽象化

が機械技術の活性化/創造的物作りにつながると考えてしまったことがあると思う。設計学や生産・加工学に代表される機械工学の知識体系には、必ず身体感覚を呼び覚ます知恵が伴っていた。それを修得することのうちには、ファーガソンが言う技術屋の「心眼(マインズ・アイ)」²⁾を通じての非言語的な技術の伝承が含まれており、抽象化された情報が描き出す仮想現実の真偽を見抜くことに誇りを持つ技術が育っていた。それが必然的に多義となる技術の現場における具体化のプロセスにおいて、イリュージョナルな世界に紛れ込むことを恐れることなく、生き生きと創造活動に向かうことを可能にしていた。ところが昨今の情報技術を駆使して作り出される仮想現実の世界を前にするとき、自己の存在の根幹にかかわる問題意識でもってそれに主体的に対峙(じ)することが難しくなっている。自らの内なる身体感覚を欠いた想像力で、力強い創造的活動を行うことなどできるはずがないのだが、

新しい世紀を迎えた今、機械工学はミクロからさらに進んでナノメータスケールの構造設計・製造を技術の対象とすることになるであろう。それはすでに獲得されている科学的知見の集大成によって前進するような性質のものでは決してない。自然現象を説明するための科学は、本来、不健全な知の体系である。ここにおいてガリレオの言う故知に規範を求める心と呼び覚まし、‘心眼’を研ぎすますこととはどういうことなのか、そして直接見ることも触ることもできないもの、表現することができないものを、いかにすれば現実と主体的にかかわりつつ評価することができるのか。

論考に入る前に、一つの例を見ていただきたい。図1はアモルファス薄膜中を進展するき裂先端のある瞬間の原子配置を示したもので、分子動力学シミュレーションによっ

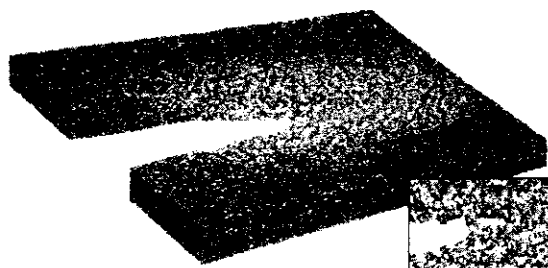


図1 アモルファス薄膜中を進展するき裂
(分子動力学シミュレーションによる解析結果)

¹⁾ 正藤には「機械学および地上の運動に関する二つの新しい科学についての対話および数学的証明」。(1638年出版)。

て計算された結果である。これは単なる絵空事にすぎないのか、あるいは心眼にかなうものなのか、まずはガリレオのひそみに倣って、“物質世界は力学によって書かれており、“仮想現実”と“現実”の違いは力学によって見抜くことができる”と主張しておきたい。事実、“力学は、適切に用いられれば、いかなる実験的検証にも耐えうるきわめて正確な自然画像を与える。人類が手にしているもっとも精密な知識体系である”と言い切ることができるからである。

2 離散的構造を有している物質は 離散モデルで取り扱えるか

私たちの周りにあるほとんどの物質の密度は、物質界において知られている相互作用（重力、弱い力、電磁力、強い力）のうち電磁力（クーロン力）によって原子（核）が凝集していることを反映して、大まかに見れば $\rho \sim 10^3 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 程度の密度を持つ¹³⁾。そして、そうした通常のエネルギー・レベルにある原子と電子から成る物質系の状態は、原子核と電子の運動エネルギーと核同士、電子同士、および核と電子間のクーロン相互作用に由来するポテンシャルエネルギーの和をハミルトニアンとするシュレーディンガー方程式によって正確に記述され、その解である波動関数から系のすべての特性を評価することができることはよく知られている。物質は基本構造からしてこのように明確に同定することができる有限で離散的であり¹⁴⁾、その基本的挙動を正確に理論予測すること（第一原理評価）が可能であると認識することはきわめて重要なことである。しかしながら、そうであるからと言って自然界に生起する事象はことごとく把握できると考えることができるであろうか、言うまでもなく、“NO”である。

直感的に考えて、物質が有限離散構造を持っているからといって、その挙動のすべてを有限可算集合上に写して捉えることなど到底できそうにない。なぜそうなのかを理屈の上で考えることはさておいても、私たちが持っている論理の枠組みでは、離散的世界は抽象化が難しく見通しのきかない対象であることは確かである。

占来、物質は連続体であるとする観点は、時間の連続性と共にごく自然に受け入れられてきた。そしてその力学的挙動の取扱いは、微積分学の成立を促しつつ、実数体上の数学をベースに連続体力学として体系化された。その一方で、物質の基本構造は離散的であるという考え方は、変転してやまない自然現象の中に、変化しないものを位置づけようとした古代ギリシャの自然哲学の流れの中で生まれたものであった。また、18世紀から19世紀にかけての時期に Navier, Poisson, Cauchy, Maxwellらによって進められた連続体力学理論の確立にも、原子（粒子離散）モデルが決定的に重要な役割をなしたが、今日的観点からは間違っただけのモデルが用いられていたことも忘れてはなるまい。

元来、離散的な構造を持つ物質系を、連続体モデル/離散モデルのいずれで取扱うのが正当であるのかについては、コンピュータを用いた解析アルゴリズムの優劣を検討することと関連させた最近のものまで広げると、きわめて多くの議論がなされてきた。最近の論点を二、三拾い出してみると、古くは、Todhunterにより、数理弾性論の成立期における独立な弾性係数の数を巡る論争を克明に追求したテキストの中で、“弾性論の基礎は粒子（分子）集合体の法則に置くべきであり、そのことより重力場の理論が天文学に与えたのと同様の大変革を引き起こすであろう”と論じられ、弾性論者と原子物理学者の互いの協力がよい結果を生むであろうことが指摘されている¹⁵⁾。数理学者の側からは、もうすこし厳しい主張がなされている。連続体力学は粒子離散力学（と呼ぶことにすれば）とは全く別のものであって、得られる結果の優劣を方法論の対比で比べることはできない。連続体力学の正当性（妥当性）は、実験によって実証される性質のものである¹⁶⁾等々。そして一方が他方の近似モデルであるといった安易な見方は排除すべきであり、共に物質の力学特性を取扱うための優れた方法論である¹⁷⁾と認識して、両者を鋭く対立させて見た上で補完的な関係を見出す視点が必要であるとも指摘されている。

最後の指摘はごく当たり前に見えるがきわめて重要である。ここではこの見方を順序だてて、連続体モデルと離散モデルが双対的な関係にあることを古典力学の枠組みの中で示し、両者が全く違った視点から物質系への接近する独立した方法論であるのではなく、より高い次元で統合すべき関係にあるという、いわば力学理論における最も大きな双対性を指摘しようと思う。

3 連続体力学の構成とパラドックス

連続体力学の基本的枠組みは図2のような形にまとめられる。物体の挙動は、それが占めている任意の領域（と表面） $V + \partial V$ 上における、① 幾何学（運動学）的関

運動学(幾何学)的關係
時空間における運動の表現

物理法則
平衡条件： $\frac{d}{dt} \int_V \rho \, dv = \int_V \rho \, \text{div} \, a + \int_V \rho \, g \, dv + \int_S q \, dv$

質量、運動量、角運動量、エネルギー保存則

構成関係式の表式化
因果律、決定原理、等存在原理、客観性原理
物質不変性原理、局所作用原理、減衰記憶原理。

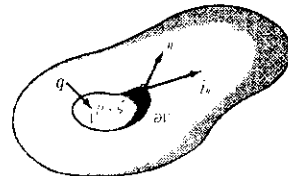


図2 連続体力学の構成

¹³⁾ 宇宙全体の核子（陽子と中性子）の数は 10^{80} 程度と見積もられる。素粒子のレベルでカウントしても、宇宙が生まれてから有限時間しか経っていないこと（そして宇宙の体積が有限であること）から、有限可算個であることは確かである。

係、② 物理的（保存）法則、それに③ 構成関係式によって記述される。この枠組みを具体的な問題の解析に当てはめるときに注意すべき問題点はいくつかあるが、その中でもっとも根本的なものは、構成式は力学理論を閉じさせるために理論の枠外から持ち込まれる命題系であると厳密に考えなければならないことである。物質特性の取扱いを理論の枠組みの外の置いているこの論理構成は、連続体力学が物理理論ではない（数学理論である）ことを如実に示している。このことをあいまいに考えて、単に現象をうまく説明するという視点から具体的な構成式の定式化を行うと、‘構成式を精ち化すればするほど、力学的に解明できるはずのことが霞んでしまい、とくにマイクロ状態にアクセスできる道筋がどんどん失われてしまう’というパラドキシカルな状況が生じてしまうことは別に論じた¹⁹⁾。

このような不都合があるからといって、通俗的によく解釈されるように、連続体が現実の物体系の‘変形の可能性が失われないう程度の微小部分までしか分割が許されない’近似モデル²⁰⁾であると考えてしまうことは正しいことであろうか、決してそうではない。連続体モデルは鋭く真実在の切口を示していると心眼でもって受けとめ、実在体の理解とさらに進んでそれを制御することに臨むべきなのである。古くは、Navierが、線形弾性解を構造設計に役立てるに際して考えたこと²¹⁾に例を見るまでもなく、これが工学、技術の世界における伝統的で健全な受止め方であった。

ところがナノスケールの世界では、もはや、連続体モデルは意味を持たないと断じられている。現象を説明せんがための科学的視点からはともかく、創造活動を起こそうとする工学の視点からはその判断はやはり間違っている。連続体力学が力学理論としては閉じていないことを認識して、それを閉じさせるには、より大きな枠組みを用意しなければならないと考えるべきなのである。

4 離散モデルと連続体モデルの整合性

正確な考察を行うためにはいくぶん煩わしい式を書き並べなければならないが、ここでは厳密さを犠牲にして数式抜きで、連続体の力学的挙動を記述する場の方程式と、微視的（有限）離散的な実体—原子—に対する力学的関係式は、よく知られた古典（統計）力学の枠組み内で完全に整合する関係にある²²⁾ことを説明しよう。これはより正確に言い換えると（奇妙な言い方であるが）、マクロ現象論的な場を適切に定義すれば、連続体に対する場の方程式は微視的離散系の力学から誘導することができるということである。

マイクロ状態に目を向けると、互いに相互作用しながら運動している N 個の粒子（原子）よりなる多粒子系が対応している。古典力学理論に従って運動していると仮定すると、系の力学的状態は、全粒子の位置と運動量を指定すれば規定することができる。各粒子の運動は、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和として表されるハミルトニアンより誘導されるハミルトンの運動方程式の解として決定さ

れ、系の状態変化には $6N$ 次元の位相空間内の連続曲線が対応する。

このような描像を巨視的な物質挙動と結びつけることができないのは、運動方程式の解を定めるのに必要な粒子の位置と運動量についての初期値・境界値を指定できないためである。そこで、系の力学的状態の大局的な記述を獲得する目的で、ある時刻で位相空間の一点を系が状態として取る確率、（位相空間）確率分布関数が導入され、系の状態に対して計算される任意の力学量の確率分布関数を重みとする位相空間内の平均が、期待値—マクロ的量—を与えると見なされる。この関係は、ミクロ力学量と確率分布関数との（位相空間上での）内積がマクロ的力学量を与えることと読めることが重要である。

この観点では、系のダイナミクスは確率分布関数の時間発展によって表現され、位相空間内の閉曲面で囲まれた体積が、多粒子系の運動に沿って不変である条件（Liouvilleの定理）から誘導されるLiouville方程式により記述されると考えていることになっている。

そこで、各粒子（原子）の空間位置に（粒子の）質量と運動量が集中しているとして、それを全粒子について重ね合わせたものが（ミクロ的な）質量と運動量の場であるとの表式を作る。そしてそれらの確率分布関数を重みとする位相空間平均（確率分布関数との内積）を取ることでマクロ場としての質量と運動量についての表式を得て、Liouville方程式を考慮しつつ時間変化率を計算して整理すると、連続体力学という連続の式（質量保存則）と運動方程式（運動量保存則）が誘導される。そして運動方程式中の発散項から、応力テンソルについての表式が得られ、それは各粒子について計算される力学量（原子応力）を重ね合わせて、確率分布関数との内積になっている²³⁾。

5 離散モデル（ミクロ場）と連続モデル（マクロ場）の双対性

以上の議論から明らかになったことをまとめると、“マクロ的場の量は各粒子（原子）に集中したミクロ力学量に確率密度関数を乗じたものを変関数とする、（超関数の意味での）線形はん関数である”ということになる。そしてこの関係は、応力についての関係が明確に示しているように構成式に対応している。この結果より、まず、構成式の定式化論において、決定の原理の帰着として最初に導入される関係である構成はん関数(constitutive functional)²⁴⁾は、物理的にはこのような意義付けが可能であることがわかる。ついで、マクロ的場の量とミクロ力学量（から誘導される量）の間の双対な関係の存在が確認される（図3参照）。

これで、物理理論として連続体力学を完成させるに当たってのミッシングリンクであった構成式の定式化の方法論は、ミクロ力学場との双対な関係を書き表すことに解決が求められることが示されたことになる。そして、ミクロ場を原子（分子）モデルで解く場合に、マクロ的条件をどのように持ち込むかに関して、（熱力学的）平衡状態を仮定する必要が必ずしもなくなっている。

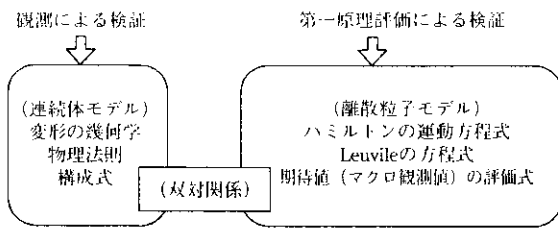


図3 連続体モデルと離散粒子モデルの双対性

6 双対性という視点

外延/内包といった、互いに異質（場合によっては排他的）でありながら密接に関連していて、一組にすると事物をより広く捉える観点が獲得される時、双対性(duality)があるといわれる。幾分あいまいな内容を含むこの概念は、場合によっては、共役や相補などの用語が用いられることがあるが、歴史的に見れば自然観の拡大に大きな役割を果たしてきている。対象を限定すれば厳密な概念規定ができその役割を明確に示すことができるが、ここはそうしたことをなすのではなく、ある一つの理論枠で問題解決に取り組んでいて、枠内でどうしようもない（と思われる）事態に遭遇したとき、都合のよい理屈を枠外から借りてくるのではなく、世界観を拡大することにより乗り越える方策を示唆する一つの規範としての意味を指摘しておきたい。

例をあげて見ると、力学的に許容な（応力）場と運動学的に許容な（ひずみ、変位）場の間に成立する仮想仕事の原理は、両許容場が互いに共役であるという双対性を表現したものである。そこから最小ポテンシャルエネルギー原理や最小相補エネルギー原理、そしてHamilton原理といった力学系の根底に横たわる変分原理が誘導されることを見れば、双対性の原理が力学系の骨格を作り上げているともいえる。

双対性から導かれる変分原理が、さらに自己随伴問題を対象とする古典的なものから非自己随伴系に拡張されるのに際して、またその一つの応用になるが、変分原理に基づく近似解法が、Rayleigh-Ritz型の古典的なものから、重付き残差法の一部として位置づけされることを通じて一般化され、そこから新しい近似解法が次々と生み出された経緯においても、双対性という観点での取り扱う世界の拡大が果たした役割の大きさを見ることができる。

7 無限と有限の間の深淵^{えん}

先に述べたようにNavierが考えた物質のマイクロ構造モデルは、今日の視点からは正しいとはいえないが、そこから誘導された線形弾性・粘性体に対する場の方程式は、連続体力学における最も基本的で確かなものとして広く用いられている¹⁾。これは連続体モデルそのものがマイクロ構造の詳細にきわめて鈍感であることを意味している。これまで物質の多様性（これは、現象の多様性と同義である）は構

成式の多様性として対処されてきた。言い換えると、物質（の性質）ごとに一つの連続体力学が作られ用いられてきた。この何とも奇妙な*ad hoc*性を克服する方が、以上に述べてきた双対原理に基づく連続-離散モデルの統合であるともいえる。しかしこれで取扱う問題が単純化されたわけでは決してない。むしろ、対処のしようがないほど巨大で複雑な対象を抱え込んだことになっている。思えば、構成式の定式化論は、メゾスケール構造のダイナミックスの複雑さを力学理論の中に適切に取り込む方法論でもあった。それを力学問題として頑固に取り出さなければならぬというのが本論考の主張である。少し舌足らずの表現であるが、無限と有限の間の恐るべき深淵に、コンピュータを武器として構成論的にどこまで果敢にチャレンジできるのかにかかっている。

8 むすびにかえて

昨今、マイクロな物質構造に接近するために、さまざまなマルチスケール解析が試みられているが、そのほとんどにおいて何らかの意味でスケールが含まれた連続体モデルを解く手法が採用されている。連続体力学はマイクロ構造に対してカオテックな描像しかもちえないのであるから、こうした方法で本質的な解に接近できるはずがない。一般的に言って、現象論的にメゾスケールの複雑系にアプローチする考え方は、自然現象（の一側面）を（後追いの）説明、解釈することはできても、技術として健全な知識体系を引き出す視点を備えていない。それを補完するものは、マイクロ離散系に対して可能な第一原理的評価を取り込んだ力学解析しかない。図1の結果が技術者の心眼にかなうものとして受け入れられるようになったときに、新しい材料力学の展開が始まると確信している。

(原稿受付 2000年9月8日)

● 文 献 ●

- (1) ファーガソン, E.S. (藤原良樹, 砂山久吉訳), 技術屋の心眼. (1995). 平凡社.
- (2) 池内 了, 宇宙と自然界の成り立ちを探る. (1995). 35. サイエンス社.
- (3) Todhunter, I. and Pearson, K., *A History of the Theory of Elasticity and of the Strength of Materials*, II - 1 (1893), 183 - 186, Cambridge at the University Press.
- (4) Truesdell, C. and Toupin, R., *The Classical Field Theories*, *Encyclopedia of Physics*, III - 2 (1960), 226 - 228, Springer-Verlag; Truesdell, C. and Noll, W., *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*, *Encyclopedia of Physics*, III - 3 (1965), 5 - 8, Springer-Verlag.
- (5) Kröner, E., *Interrelations between Various Branches of Continuum Mechanics*, *Proc. IUTAM Symp. on Mechanics of Generalized Continua*, (1968), 330 - 340.
- (6) 北川 浩, 連続体力学と離散モデル, 第48回理論応用力学講演会講演論文集 (Japan NCTAM, 1999 Reprint). (1999 - 1), 4 - 7.
- (7) 大南正瑛編, (1980). 1 - 23. オーム社.
- (8) Timoshenko, S.P., *History of Strength of Materials*, (1953), 74, McGraw-Hill.
- (9) Irving, J.H. and Kirkwood, G., *The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes. IV. The Equations of Hydrodynamics*, *J. Chem. Phys.*, 13 - 6 (1950), 817 - 829.