解析力学に関するまとめ

by T.Koyama

１．解析力学の簡単なまとめ

以下、仮想仕事の原理、ダランベールの原理、およびハミルトンの原理について説明する。

（１）仮想仕事の原理[ベルヌーイ(D.Bernoulli)]

つり合い状態(静止状態)にある質点系において、i 番目の質点に作用する力を $\mathbf{F}_i$ とすると、

$$\sum_i \mathbf{F}_i \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0, \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{1}$$

が成立する。$\delta \mathbf{r}_i$ は各質点に対する任意の可能な微小仮想変位である。逆にこれが成立すれば、系はつり合い状態にある。この原理を仮想仕事の原理という。

（２）ダランベールの原理[ラグランジュ(Lagrange)+ダランベール(D'Alembert)]

質点 i の変位に対して垂直に作用する束縛力（張力や抗力等）を $\mathbf{f}_i$ とし、質点 i の質量を m_i とする。$\mathbf{F}_i$ を質点に作用する重力等の既知の力とする。$\mathbf{f}_i$ と $\mathbf{F}_i$ の相違点は以下のように考える。$\mathbf{f}_i$ は問題を解いて初めて決定できる未知力であり、 $\mathbf{F}_i$ は問題を解く以前から設定できる既知力である。

さて、力のつり合い条件から、

$$\begin{aligned} &\mathbf{F}_i + \mathbf{f}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \\ &\mathbf{F}_i + \mathbf{f}_i - m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

が成立する。もともとこれは動力学的な力のつり合いの方程式であるが、これを単純に３つの力の静力学的な力の方程式と解釈し直す。静力学的な力と見なせば仮想仕事の原理を使用できるので、

$$\sum_i (\mathbf{F}_i + \mathbf{f}_i - m_i \ddot{\mathbf{r}}_i) \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0 \tag{3}$$

と表現することができる。さらに束縛力には、

$$\sum_i \mathbf{f}_i \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0 \tag{4}$$

の性質があるので、結局、

$$\sum_i (\mathbf{F}_i - m_i \ddot{\mathbf{r}}_i) \cdot \delta \mathbf{r}_i = 0 \tag{5}$$

が得られる。以上の考え方において、動力学を静力学の問題に帰着させるアイデアはラグランジュにより考案され、ダランベールは、束縛力を考慮する必要がない点を見出した。したがって、これは本当ならばラグランジュ・ダランベールの原理と呼ばれるべきであろうが、なぜかダランベールの原理と呼ばれている。

（３）ハミルトン(Hamilton)の原理

運動エネルギーを汎関数形式にて、

$$I = \int_{t_1}^{t_2} T dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{1}{2} m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 (t) \right) dt \tag{6}$$

と表現する。ここで、軌跡$\mathbf{r}_i(t)$の関数形を

$$\mathbf{r}_i(t) \to \mathbf{r}_i(t) + \delta\mathbf{r}_i(t) \tag{7}$$

のように微小変化させる。注意すべきは、これは時間t_1からt_2までの軌跡$\mathbf{r}_i(t)$の関数形を変化させたのであって、移動ベクトルの微小量：$d\mathbf{r}_i(t) = \mathbf{r}_i(t+dt) - \mathbf{r}_i(t)$とは異なる点である。この時、汎関数の変動量は、

$$\begin{aligned}
\delta I = \delta\int_{t_1}^{t_2} T dt &= \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{1}{2} m_i [(\dot{\mathbf{r}}_i + \delta\dot{\mathbf{r}}_i)^2 - \dot{\mathbf{r}}_i^2] \right) dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \left(\frac{1}{2} m_i [2\dot{\mathbf{r}}_i \cdot \delta\dot{\mathbf{r}}_i + (\delta\dot{\mathbf{r}}_i)^2] \right) dt \\
&\cong \int_{t_1}^{t_2} \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \delta\dot{\mathbf{r}}_i dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \left(\frac{d}{dt} \delta\mathbf{r}_i \right) dt \\
&= \left[\sum_i m_i \dot{\mathbf{r}}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \sum_i m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt = -\int_{t_1}^{t_2} \sum_i m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt = -\int_{t_1}^{t_2} \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt
\end{aligned} \tag{8}$$

と計算できる。なお、$\delta\mathbf{r}_i(t_1) = 0$および$\delta\mathbf{r}_i(t_2) = 0$　と仮定し、式(5)を用いた。上式は、通常、

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} T dt + \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt = 0 \tag{9}$$

のように表記され、ハミルトンの原理と呼ばれる。

さてここでポテンシャル場$U(\mathbf{r}_i)$を導入しよう。力$\mathbf{F}_i$は、

$$\mathbf{F}_i \equiv -\nabla U(\mathbf{r}_i) \tag{10}$$

にて定義されるので、これより、

$$\begin{aligned}
\int_{t_1}^{t_2} \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt = \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \{-\nabla U(\mathbf{r}_i)\} \cdot \delta\mathbf{r}_i dt &= -\int_{t_1}^{t_2} \sum_i \nabla U(\mathbf{r}_i) \cdot \delta\mathbf{r}_i dt \\
&= -\int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial U}{\partial x_1} \delta x_1 + \frac{\partial U}{\partial y_1} \delta y_1 + \cdots + \frac{\partial U}{\partial z_n} \delta z_n \right) dt \\
&\cong -\int_{t_1}^{t_2} \{U(\mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}_i) - U(\mathbf{r}_i)\} dt = -\delta\int_{t_1}^{t_2} U dt
\end{aligned} \tag{11}$$

である。したがって、式(9)は、

$$\begin{aligned}
&\delta\int_{t_1}^{t_2} T dt + \int_{t_1}^{t_2} \sum_i \mathbf{F}_i \cdot \delta\mathbf{r}_i dt = 0 \\
&\delta\int_{t_1}^{t_2} T dt - \delta\int_{t_1}^{t_2} U dt = 0 \\
&\delta\int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = 0 \\
&\therefore\ \delta\int_{t_1}^{t_2} L dt = 0
\end{aligned} \tag{12}$$

と簡潔に表現される。Lは

$$L \equiv T - U \tag{13}$$

にて定義され、ラグランジュアンと呼ばれる。また式(13)のUの前のマイナスは、式(10)のマイナスが引き継がれたものであることがわかる。

以上をまとめると、ハミルトンの原理は「時間t_1に位置$\mathbf{r}_i(t_1)$を出て、時間t_2に位置$\mathbf{r}_i(t_2)$に到着する経路のうちで、$\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt = 0$となる経路が実際に起こる、すなわち力学法則に従う経路である。」となる。

（4）一般化座標とルジャンドル変換

$3n$個の変数$x_i, y_i, z_i,\quad (i=1,2,\cdots n)$、および$h$個の束縛条件があるとしよう。したがって独立変数の個数fは、$f=3n-h$である。このf個の独立変数を$q_j,\ (j=1,2,\cdots,f)$とすると、

$$x_1 = x_1(q_j),\ \ y_1 = y_1(q_j),\ \ \cdots,\ \ z_n = z_n(q_j), \qquad (j=1,2,\cdots f)$$

と表されることから、一般的に、

$$L = L(q_j, \dot{q}_j), \quad (j=1,2,\cdots f)$$

と置くことが出来る。このq_jは一般化座標と呼ばれる。ハミルトンの原理に基づき、

$$\begin{aligned}
\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt &= \int_{t_1}^{t_2}\left\{L(q_j+\delta q_j, \dot{q}_j+\delta\dot{q}_j) - L(q_j,\dot{q}_j)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\delta\dot{q}_j\right)dt = \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{d}{dt}(\delta q_j)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j\right)dt + \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\frac{d}{dt}(\delta q_j)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j\right)dt + \left[\sum_j\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\delta q_j\right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\right\}\delta q_j dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left(\frac{\partial L}{\partial q_j}\delta q_j\right)dt - \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\right\}\delta q_j dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right)\right\}\delta q_j dt = 0
\end{aligned} \tag{14}$$

であるので、

$$\therefore\ \frac{\partial L}{\partial q_j} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}\right) = 0, \quad (j=1,2,\cdots,f) \tag{15}$$

を得る。この式がラグランジュの微分方程式である。ここで独立変数がf個有り、方程式もf個ある点を注意しておく。

さて、ハミルトニアンの説明に移る前に、ルジャンドル変換について説明しておこう。独立変数vからVに変換して、関数$L(q,v)$を

$$\begin{aligned} v &\to V \\ L(q,v) &\to H(q,V) \end{aligned} \tag{16}$$

に書き換える操作について考える。ここで、

$$V \equiv \frac{\partial L}{\partial v} \tag{17}$$

と定義される。以上から、$H(q,V)$ は、

$$H(q,V) \equiv vV - L(q,v) \tag{18}$$

にて与えられ、

$$v = \frac{\partial L}{\partial V} \tag{19}$$

が成立する（熱力学におけるルジャンドル変換では、$-H(q,V) \equiv vV - L(q,v)$ と定義され、マイナス記号がつく点に注意すること）。

さてハミルトニアンの説明に戻ろう。ラグランジュアンを考えた時、独立変数は f 個であった。ここで見方を変えて、

$$q_j \to q_j, p_j, \quad (j = 1, 2, \cdots, f)$$

のように、独立変数を 2 倍の $2f$ 個に増やす。ルジャンドル変換における変数変換は、この場合、形式的に $\dot{q}_j \to p_j$ であり、

$$L(q_j, \dot{q}_j) \to H(q_j, p_j)$$

$$H(q_j, p_j) \equiv \sum_j p_j \dot{q}_j - L(q_j, \dot{q}_j) \tag{20}$$

となる。この関数 H がハミルトニアンである。これを変形し、

$$L(q_j, \dot{q}_j) = \sum_j p_j \dot{q}_j - H(q_j, p_j)$$

であるので、ハミルトンの原理から

$$
\begin{aligned}
\delta\int_{t_1}^{t_2} L dt &= \int_{t_1}^{t_2}\left\{L(q_j+\delta q_j, \dot{q}_j+\delta\dot{q}_j) - L(q_j,\dot{q}_j)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\left\{\sum_j (p_j+\delta p_j)(\dot{q}_j+\delta\dot{q}_j) - \sum_j p_j\dot{q}_j\right\}dt - \int_{t_1}^{t_2}\left\{H(q_j+\delta q_j, p_j+\delta p_j) - H(q_j,p_j)\right\}dt \\
&\cong \int_{t_1}^{t_2}\left\{\sum_j (p_j\delta\dot{q}_j + \dot{q}_j\delta p_j)\right\}dt - \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j}\delta p_j\right)dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{(p_j\delta\dot{q}_j + \dot{q}_j\delta p_j) - \left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j}\delta p_j\right)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{(-\dot{p}_j\delta q_j + \dot{q}_j\delta p_j) - \left(\frac{\partial H}{\partial q_j}\delta q_j + \frac{\partial H}{\partial p_j}\delta p_j\right)\right\}dt \\
&= \int_{t_1}^{t_2}\sum_j\left\{\left(-\dot{p}_j - \frac{\partial H}{\partial q_j}\right)\delta q_j + \left(\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j}\right)\delta p_j\right\}dt = 0
\end{aligned}
$$

となり、ハミルトンの正準方程式

$$
\therefore\ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j},\quad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j},\quad (j=1,2,\cdots,f) \tag{22}
$$

を得る。注意すべき点は、$2f$ 個の独立変数に対して、$2f$ 個の方程式が得られた点である。
　ところで、

$$
H = p\dot{q} - L = 2T - (T-U) = T + U \tag{23}
$$

であるので、ハミルトニアンは、結果的に系の全エネルギーを表現していることになっている。
　具体的に、

$$
H(q_j,p_j) = T + U = \frac{1}{2}m\dot{q}_j^2(t) + U\{q_j(t)\} = \frac{p_j^2(t)}{2m} + U\{q_j(t)\}
$$

についてハミルトンの正準方程式を書き下して見ると、

$$
\begin{aligned}
&\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} = -\frac{\partial U}{\partial q_j},\quad \dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{p_j(t)}{m} \\
&p_j = m\dot{q}_j \to \dot{p}_j = m\ddot{q}_j \\
&\therefore\ m\ddot{q}_j = -\frac{\partial U}{\partial q_j}
\end{aligned}
$$

となり、当然ながら、力のつり合いの式が得られる。
　また、ポアソン括弧式を

$$
(u,v) = \sum_j\left(\frac{\partial u}{\partial q_j}\frac{\partial v}{\partial p_j} - \frac{\partial u}{\partial p_j}\frac{\partial v}{\partial q_j}\right) \tag{24}
$$

にて定義すると、任意の物理量 $A(q_j, p_j)$ の時間変化は、

$$
\begin{aligned}
&A = A(q_j, p_j) \\
&dA = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} dq_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} dp_j \right) \\
&\therefore\ \frac{dA}{dt} = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) = \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = (A, H)
\end{aligned}
\tag{25}
$$

のようにポアソン括弧式を用いて表現することができる。

2．ハミルトン系とエネルギー散逸系の定常状態に関する物理的考え方の相違点

定常状態を求める問題においては、ハミルトン系（エネルギー保存系：孤立系）とエネルギー散逸系（エネルギー非保存：閉鎖系もしくは開放系）を明確に区別する必要がある。目的は、定常状態（条件によっては平衡状態）を表現する構成式を、なんらかのスカラーポテンシャルの極値問題に置き換えることである。最も重要な点は、いま着目している現象について、どのようなスカラーポテンシャルを見出せば意味があるかを物理的に洞察することである。

ハミルトン系は、基本的にエネルギーが保存してしまうので、全エネルギーに関する極値は、静止状態（もしくは等速直線運動）の場合しかありえない。これは初めから答がわかっていることになり、問題として成立し得ない。したがって、ハミルトン系では、全エネルギーの極値問題ではなく、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差に関する極値問題を設定する。これがラグランジュアンである。ラグランジュアンは物理的に運動エネルギーとポテンシャルエネルギー間のエネルギーの授受を表し、その変分が 0 となる条件は、その授受が過不足無く最もスムーズに行われる状態に対応していることになる。実はこれは、仮想仕事の原理を言葉で言い直しただけであり、したがって、この状態は力のつりあいの状態に一致する。

ここでいちおうハミルトン系についてラグランジュアンに極値が存在し得ることをイメージ的に確認しておこう。例として、バネにつながれた質量 m の質点の１次元 x 方向の振動について考える。まず全エネルギーであるハミルトニアン H は、

$$
H = T + U = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 + \frac{1}{2} kx^2
$$

にて表される。 $x = \pm x_1$ で $\dot{x} = 0$ となるとする。したがって、全エネルギーは、

$$
H = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 + \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} kx_1^2
$$

であるので、運動エネルギー T は、

$$
T = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 = \frac{1}{2} kx_1^2 - \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} k(x_1^2 - x^2)
$$

にて与えられる。これより、ラグランジュアンを x のみの関数として表すと、

$$
L = T - U = \frac{1}{2} m\dot{x}^2 - \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} k(x_1^2 - x^2) - \frac{1}{2} kx^2 = -kx^2 + \frac{1}{2} kx_1^2
$$

$$L(x=0)=\frac{1}{2}kx_1^2$$

$$L(x=\pm x_1/\sqrt{2})=-\frac{1}{2}kx_1^2+\frac{1}{2}kx_1^2=0$$

$$L(x=\pm x_1)=-kx_1^2+\frac{1}{2}kx_1^2=-\frac{1}{2}kx_1^2$$

となる。つまりラグランジュアンは$x=0$に極大値を持つ 2 次式である。同様にラグランジュアンを$\dot{x}$のみの関数として表すと、$x=0$における質点の速度を$\dot{x}_0$として、

$$H=\frac{1}{2}m\dot{x}^2+\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2, \qquad \therefore\ U=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2-\frac{1}{2}m\dot{x}^2=\frac{1}{2}m(\dot{x}_0^2-\dot{x}^2)$$

であるから、

$$L=T-U=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m(\dot{x}_0^2-\dot{x}^2)=m\dot{x}^2-\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2$$

$$L(\dot{x}=0)=-\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2$$

$$L(\dot{x}=\pm\dot{x}_0/\sqrt{2})=\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2-\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2=0$$

$$L(\dot{x}=\pm\dot{x}_0)=m\dot{x}_0^2-\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2=\frac{1}{2}m\dot{x}_0^2$$

となり、ラグランジュアンは$\dot{x}=0$に極小値を持つ 2 次式となる。ハミルトン系における定常状態の構成式は、ラグランジュアンに基づく極値解析から導かれる。

次にエネルギー散逸系について考えてみよう。エネルギー散逸系における定常状態とは何か。実はこれには2通りの考え方が存在する。1つは全エネルギーが極小化した状態であり、もう１つは、エネルギー散逸量が極小化した状態である。条件によって両状態はしばしば一致し、特に前者が成り立てば後者は自動的に成立する（例えば、全エネルギーが極小化していれば、微分の定義からその近傍からのエネルギー散逸量も無限小となっている）。

ハミルトン系では全エネルギーが保存してしまうので、全エネルギーを起点とした議論が出来ず、ラグランジュアンのようにエネルギー差に着目した定式化がなされた。しかし、エネルギー散逸系では、基本原理として、全エネルギーは定常状態に向かって減少すると仮定でき、全エネルギーを起点とした議論が成立する。つまり、ハミルトン系では考え方の起点に力のつり合いの方程式を置き、これを導くスカラーポテンシャルとしてラグランジュアンを考えるといった道筋を経たのに対して、エネルギー散逸系では、考え方の起点に全エネルギーであるハミルトニアンを置き、これから定常状態を表す構成式を導くといった手順となる。根本的な相違点は、ハミルトン系ではエネルギー差が極値持つ状態を探索するのに対し、エネルギー散逸系ではエネルギーそのものが極値を持つ状態を探索する点である。特にこの後者に基づく基本原理は、最小ポテンシャルエネルギーの原理とも呼ばれる。

３．スピノーダル分解理論との対応

数学的に汎関数の極値問題には、ラグランジュアンを用いた汎関数積分からラグランジュの微分方程式を導く手法、つまり変分法が利用できる。エネルギー散逸系では、

$$H\{q(t),\dot{q}(t)\}=T+U$$
$$I=\int_{t_1}^{t_2}H\{q(t),\dot{q}(t)\}dt$$
$$\delta I=0\rightarrow\frac{\partial H}{\partial q}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial H}{\partial\dot{q}}\right)=0$$

となる。一見すると、単にラグランジュアンがハミルトニアンにかわっただけであるので、ハミルトン系の議論とエネルギー散逸系の議論が、あたかも同じ原理に基づいているように見えてしまう点に混乱の原因がある。前章の議論を良く理解することが重要である。

さて、以上説明した解析力学の手法をスピノーダル分解の定式化の解釈に使用する。まず変数の対応については、

$$\begin{aligned}t&\rightarrow\mathbf{r}\\ q(t)&\rightarrow c(\mathbf{r})\\ \dot{q}(t)&\rightarrow\nabla c(\mathbf{r})\end{aligned}\tag{26}$$

と考える。これより、全エネルギーであるハミルトニアンは、

$$\begin{gathered}H(q,\dot{q})=T+U=\frac{1}{2}m\dot{q}^2(t)+U\{q(t)\}\\ \downarrow\\ H(c,\nabla c)=\frac{1}{2}\kappa\{\nabla c(\mathbf{r})\}^2+F\{c(\mathbf{r})\}\end{gathered}\tag{27}$$

となる。さらにこの場合、濃度場が保存変数であるので、エネルギー汎関数にこの拘束条件を加える。ラグランジュの未定乗数を χ とすると、エネルギー汎関数およびラグランジュの微分方程式は は、

$$\begin{gathered}I=\int_{\mathbf{r}}\left\{H(c(\mathbf{r}),\nabla c(\mathbf{r}))-\chi(c(\mathbf{r})-c_0)\right\}d\mathbf{r}\\ \frac{\partial H}{\partial c}-\nabla\left(\frac{\partial H}{\partial(\nabla c)}\right)=\chi\end{gathered}\tag{28}$$

と表現される。式(27)を(28)に代入し、

$$\chi=\frac{\partial F}{\partial c}-\kappa\nabla^2c=\mu-\kappa\nabla^2c\tag{29}$$

を得る。ラグランジュの未定乗数 χ が位置に依存しない定数になった状態が定常状態である。非定常状態では、χ は一定ではなく時間および位置の関数である。この χ を用いた構成式が広義のフィックの第一法則で、

$$J=-M\{c(\mathbf{r},t)\}\nabla\chi\{c(\mathbf{r},t)\}\tag{30}$$

にて与えられる。また広義のフィックの第ニ法則は、

$$\frac{\partial c}{\partial t}=\nabla\left[M\{c(\mathbf{r},t)\}\nabla\chi\{c(\mathbf{r},t)\}\right]\tag{31}$$

となり、これが Cahn-Hilliard の非線形拡散方程式の一般形である。Cahn-Hilliard の非線形拡散方程式では、さらに

$$M\{c(\mathbf{r},t)\} = M_0, \quad \kappa = 2\kappa_0 \tag{32}$$

が仮定されている。具体的に書き下して見よう。

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla\left[M\{c(\mathbf{r},t)\}\nabla\chi\{c(\mathbf{r},t)\}\right] = \nabla M_0 \nabla(\mu - 2\kappa_0\nabla^2 c) \\ &= M_0\nabla^2\mu - 2M_0\kappa_0\nabla^4 c = \nabla\left\{M_0\left(\frac{\partial\mu}{\partial c}\right)\nabla c\right\} - 2M_0\kappa_0\nabla^4 c = \nabla\{\tilde{D}(c)\nabla c\} - 2\tilde{K}\nabla^4 c \end{aligned} \tag{33}$$

となる。ここで、

$$\tilde{D}(c) \equiv M_0\left(\frac{\partial\mu}{\partial c}\right) = M_0\left(\frac{\partial^2 F}{\partial c^2}\right), \quad \tilde{K} \equiv M_0\kappa_0 \tag{34}$$

と置いた。