

# Phase-field 熱・力学

(Phase-field thermomechanics)

by T. Koyama

## 1. 変数設定

変数の意味を以下のように定義する。

- $P_{ac}^*$  : 運動エネルギー - に関する仮想仕事率 (エネルギー - の時間変化率)  
 $P_{in}^*$  : 応力場 (粘弾塑性) に関する仮想仕事率  
 $P_{ext}^*$  : 外場 (面力、体積力) に関する仮想仕事率  
 $K$  : 運動エネルギー -  
 $U$  : 全内部エネルギー -  
 $Q$  : 全熱供給量  
 $\psi$  : ヘルムホルツの自由エネルギー -  
 $\rho$  : 物質検査体積内の密度 (一定値と仮定)  
 $T$  : 絶対温度  
 $s$  : 単位質量当たりのエントロピ -  
 $S$  : 全エントロピ -  
 $\mathbf{u}$  : 変位ベクトル  
 $\varepsilon^c$  : 拘束歪 (全歪)  
 $\varepsilon^e$  : 弾性歪  
 $\varepsilon^T$  : eigen 歪  
 $\sigma$  : 応力 (弾性応力と粘性応力の和)  
 $\sigma^e$  : 弾性応力  
 $\sigma^v$  : 粘性応力  
 $\mathbf{X}$  : 面力  
 $\mathbf{f}$  : 体積力  
 $\mathbf{v}$  : 物質検査体積の移動速度  
 $\mathbf{v}^*$  : 形状関数 (任意関数と考えてよい)  
 $V_m(t)$  : いま着目している連続体の微小領域 (物質検査体積)  
 $h$  : 単位質量当たりの熱供給  
 $\mathbf{q}$  : 熱流速ベクトル

## 2. 仮想仕事率の原理

### 2-1 エネルギー - 収支式

仮想仕事率の原理は全エネルギー - の変化率に関する収支式である。したがって、運動場および力場におけるエネルギー - の時間変化率収支式として以下のように定義される。(ここではより一般的に弱形式まで考慮して以下のように定義する。)

$$P_{ac}^* = P_{in}^* + P_{ext}^* \quad (1)$$

$$\begin{aligned} P_{ac}^* &= \int_{V_m(t)} \rho \dot{v}_i v_i^* dV = \int_{V_m(t)} \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{v}^* dV \\ P_{in}^* &= - \int_{V_m(t)} \sigma_{ij} v_{j,i}^* dV = - \int_{V_m(t)} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v}^* dV \\ P_{ext}^* &= \int_{S_m(t)} X_i v_i^* dS + \int_{V_m(t)} \rho f_i v_i^* dV = \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v}^* dS + \int_{V_m(t)} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v}^* dV \end{aligned} \quad (2)$$

である。 $P_{ac}^*$  は運動エネルギー - に関する仮想仕事率、 $P_{in}^*$  は内部応力場 (粘弾塑性) に関する仮想仕事率、および  $P_{ext}^*$  は外場 (面力や体積力) に関する仮想仕事率である。 $V_m(t)$  は、いま着目している連続体の微小領域で物質検査体積と呼ばれる。この微小領域の密度は一定と仮定して  $\rho$  と置く。 $\mathbf{v}$

は微小領域の移動速度である。 $\sigma$ は応力で弾性応力と粘性応力の和である。 $\mathbf{X}$ は面力で、 $\mathbf{f}$ は体積力である。 $\mathbf{v}^*$ は形状関数で任意関数と考えてよい。特に $\mathbf{v}^* = \mathbf{v}$ と設定する場合、

$$\begin{aligned}
 P_{ac} &= \int_{V_m(t)} \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} \, dV = \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 \, dV = \dot{K} \\
 P_{in} &= - \int_{V_m(t)} \sigma : \nabla \mathbf{v} \, dV \\
 P_{ext} &= \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v} \, dS + \int_{V_m(t)} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, dV
 \end{aligned} \tag{3}$$

となり、

$$\dot{K} = P_{in} + P_{ext} \tag{4}$$

が成り立つことがわかる。 $K$ は運動エネルギーである。

式(4)がコーシーの運動方程式と等価な式であることを説明しよう。まず、テンソル場の公式から、

$$\nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) = (\nabla \cdot \sigma) \cdot \mathbf{v} + \sigma : \nabla \mathbf{v}$$

であり、これを用いて $P_{in}$ を次のように書き直す。

$$\begin{aligned}
 P_{in} &= - \int_{V_m(t)} \sigma : \nabla \mathbf{v} \, dV \\
 &= - \int_{V_m(t)} \{ \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) - (\nabla \cdot \sigma) \cdot \mathbf{v} \} \, dV \\
 &= - \int_{V_m(t)} \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) \, dV + \int_{V_m(t)} (\nabla \cdot \sigma) \cdot \mathbf{v} \, dV \\
 &= - \int_{S_m(t)} \mathbf{n} \cdot \sigma \cdot \mathbf{v} \, dS + \int_{V_m(t)} (\nabla \cdot \sigma) \cdot \mathbf{v} \, dV \\
 &= \int_{V_m(t)} (\nabla \cdot \sigma) \cdot \mathbf{v} \, dV - \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v} \, dS
 \end{aligned} \tag{5}$$

ここで、ガウスの発散定理

$$\int_{V_m(t)} \nabla \cdot (\sigma \cdot \mathbf{v}) \, dV = \int_{S_m(t)} \mathbf{n} \cdot \sigma \cdot \mathbf{v} \, dS$$

および面力と内部応力との釣り合い条件

$$\mathbf{n} \cdot \sigma = \mathbf{X}$$

を用いた。式(3)と(5)を式(4)に代入して整理すると、

$$\begin{aligned}
\dot{K} &= P_{in} + P_{ext} \\
\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 dV &= - \int_{V_m(t)} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} dV + \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{V_m(t)} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dV \\
\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 dV &= \int_{V_m(t)} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{v} dV - \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{S_m(t)} \mathbf{X} \cdot \mathbf{v} dS + \int_{V_m(t)} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dV \\
\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 dV &= \int_{V_m(t)} (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{v} dV + \int_{V_m(t)} \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} dV \\
\int_{V_m(t)} \left\{ \frac{d}{dt} \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 - (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{v} - \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \right\} dV &= 0 \\
\int_{V_m(t)} \{ \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} - (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{v} - \rho \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \} dV &= 0 \\
\int_{V_m(t)} \{ \rho \dot{\mathbf{v}} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{f} \} \cdot \mathbf{v} dV &= 0 \\
\therefore \rho \dot{\mathbf{v}} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \rho \mathbf{f} &= 0, \quad \rightarrow \quad \rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{f}
\end{aligned} \tag{6}$$

のように、コーシーの運動方程式が導かれる。

## 2-2 熱力学的拘束条件

エネルギー - 原理は以下のように与えられる。これは静止している連続体の内部エネルギー - 変化率の収支式である。

$$\begin{aligned}
\dot{U} + P_{in} &= \dot{Q} \\
\dot{U} &= \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho u dV \\
P_{in} &= - \int_{V_m(t)} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} dV \\
\dot{Q} &= \int_{V_m(t)} \rho h dV - \int_{S_m(t)} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{V_m(t)} \rho h dV - \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \mathbf{q} dV = \int_{V_m(t)} \{ \rho h - \nabla \cdot \mathbf{q} \} dV
\end{aligned} \tag{7}$$

ここで、 $U$  は全内部エネルギー - で、 $Q$  は全熱供給量である。また  $h$  は単位質量当たりの熱供給、 $\mathbf{q}$  は熱流速ベクトルである。ガウスの発散定理  $\int_{V_m(t)} \nabla \cdot \mathbf{q} dV = \int_{S_m(t)} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS$  を用いて式(7)を書き下すと、局所場の関係式、

$$\begin{aligned}
\dot{U} + P_{in} &= \dot{Q} \\
\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho u dV - \int_{V_m(t)} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} dV &= \int_{V_m(t)} \{ \rho h - \nabla \cdot \mathbf{q} \} dV \\
\int_{V_m(t)} \rho \dot{u} dV - \int_{V_m(t)} \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} dV &= \int_{V_m(t)} \{ \rho h - \nabla \cdot \mathbf{q} \} dV \\
\int_{V_m(t)} \{ \rho \dot{u} - \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \rho h + \nabla \cdot \mathbf{q} \} dV &= 0 \\
\rho \dot{u} - \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \rho h + \nabla \cdot \mathbf{q} &= 0 \\
\therefore \rho \dot{u} &= \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho h
\end{aligned} \tag{8}$$

を得る。

さて以上で、運動場、力場、温度場のエネルギー - が揃ったので、全エネルギー - 収支から、熱力学の第一法則を、以下のように定義することができる。

$$\begin{aligned}
\dot{U} + P_{in} &= \dot{Q} \\
\dot{K} &= P_{in} + P_{ext} \\
\therefore \dot{U} + P_{in} + \dot{K} &= \dot{Q} + P_{in} + P_{ext}, \quad \rightarrow \quad \dot{U} + \dot{K} = P_{ext} + \dot{Q}
\end{aligned} \tag{9}$$

この式は物理的に、全運動エネルギー - と内部エネルギー - の変化率が、外力と熱による全エネルギー - 供給と釣り合うことを意味している (エネルギー - 保存)

また熱力学の第二法則は、

$$\dot{S} \geq \dot{S}_{sup} \tag{10}$$

にて定義され、ここで、

$$\begin{aligned}
\dot{S} &= \frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho s dV \\
\dot{S}_{sup} &= \frac{\dot{Q}}{T} = \int_{V_m(t)} \frac{\rho h}{T} dV - \int_{S_m(t)} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{V_m(t)} \frac{\rho h}{T} dV - \int_{V_m(t)} \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) dV \\
&= \int_{V_m(t)} \left\{ \frac{\rho h}{T} - \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \right\} dV
\end{aligned} \tag{11}$$

である。  $T$  は絶対温度、  $s$  は単位質量当たりのエントロピー -、  $S$  は全エントロピー - である。この式

の変形にて、  $\int_{V_m(t)} \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) dV = \int_{S_m(t)} \frac{\mathbf{q}}{T} \cdot \mathbf{n} dS$  を用いた。式(11)を式(10)に代入して整理すると、

$$\begin{aligned}
\dot{S} &\geq \dot{S}_{sup} \\
\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho s dV &\geq \int_{V_m(t)} \left\{ \frac{\rho h}{T} - \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \right\} dV \\
\int_{V_m(t)} \rho \dot{s} dV &\geq \int_{V_m(t)} \left\{ \frac{\rho h}{T} - \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \right\} dV \\
\int_{V_m(t)} \left\{ \rho \dot{s} - \frac{\rho h}{T} + \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) \right\} dV &\geq 0 \\
\rho \dot{s} - \frac{\rho h}{T} + \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{q}}{T} \right) &\geq 0 \\
\rho \dot{s} - \frac{\rho h}{T} + \frac{1}{T} \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{T^2} (\mathbf{q} \cdot \nabla) T &\geq 0 \\
\therefore \rho T \dot{s} - \rho h + \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{T} (\mathbf{q} \cdot \nabla) T &\geq 0
\end{aligned} \tag{12}$$

が得られる。これが熱力学の第二法則の局所場における拘束条件である。ここで、ヘルムホルツの自由エネルギー - を  $\psi$  とすると、

$$\begin{aligned}
\psi &= u - Ts \\
\rho \psi &= \rho(u - Ts) = \rho u - T \rho s = \rho u - TS \\
\rho \dot{\psi} &= \rho \dot{u} - \dot{T} \rho s - T \rho \dot{s} \\
T \rho \dot{s} &= \rho \dot{u} - \dot{T} \rho s - \rho \dot{\psi}
\end{aligned} \tag{13}$$

であり、これに式(8)を代入して、

$$\begin{aligned} T\rho\dot{s} &= \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho h - \dot{T}\rho s - \rho\dot{\psi} \\ -\rho h + \nabla \cdot \mathbf{q} &= \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \dot{T}\rho s - \rho\dot{\psi} - T\rho\dot{s} \end{aligned}$$

を得る。さらにこれを式(12)に代入して、

$$\begin{aligned} \rho T\dot{s} - \rho h + \nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{T}(\mathbf{q} \cdot \nabla)T &\geq 0 \\ \rho T\dot{s} + (-\rho h + \nabla \cdot \mathbf{q}) - \frac{1}{T}(\mathbf{q} \cdot \nabla)T &\geq 0 \\ \rho T\dot{s} + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \dot{T}\rho s - \rho\dot{\psi} - T\rho\dot{s} - \frac{1}{T}(\mathbf{q} \cdot \nabla)T &\geq 0 \\ \therefore -\rho(\dot{\psi} + \dot{T}s) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{T}(\mathbf{q} \cdot \nabla)T &\geq 0 \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 $\dot{F} = \rho\dot{\psi}$ 、 $S = \rho s$ と置き直して、最終的に

$$\begin{aligned} -(\dot{F} + \dot{T}S) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \frac{1}{T}(\mathbf{q} \cdot \nabla)T &\geq 0 \\ -(\dot{F} + \dot{T}S) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) &\geq 0 \end{aligned} \tag{14}$$

となる。この式は Clausius-Duhem の不等式と呼ばれ、エネルギー - の時間変化率 (エネルギー - 散逸) の次元を持つ。ここで、微小変形を仮定すると、変位ベクトルを  $\mathbf{u}$  として

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{u}} \quad , \quad \nabla \mathbf{v} = \nabla \dot{\mathbf{u}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c$$

が成立するので、式(14)は、

$$-(\dot{F} + \dot{T}S) + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \tag{15}$$

とも表現される。 $\boldsymbol{\varepsilon}^c$  は拘束歪 (全歪) である。

### 2-3 散逸関数

式(14)左辺は、散逸関数と呼ばれ、散逸関数  $\phi$  は、

$$\phi = -(\dot{F} + \dot{T}S) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \tag{16}$$

にて定義される。ここで、

$$\begin{aligned}
\nabla \mathbf{v} &= \nabla \dot{\mathbf{u}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c \\
\boldsymbol{\varepsilon}^e &= \boldsymbol{\varepsilon}^c - \boldsymbol{\varepsilon}^T \\
\boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\sigma}^e + \boldsymbol{\sigma}^v \\
F &= U - TS
\end{aligned} \tag{17}$$

と置く。 $\boldsymbol{\varepsilon}^e$  と  $\boldsymbol{\varepsilon}^T$  はそれぞれ弾性歪および eigen 歪である。 $\boldsymbol{\sigma}^e$  と  $\boldsymbol{\sigma}^v$  は、それぞれ弾性応力および粘性応力である。また、

$$\begin{aligned}
T &= \frac{\partial U}{\partial S} \\
\dot{U} &= \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial S} \frac{\partial S}{\partial t} = T\dot{S} \\
\therefore \dot{F} + \dot{TS} &= \dot{U} - T\dot{S} - \dot{TS} + \dot{TS} = \dot{U} - T\dot{S} = 0
\end{aligned}$$

である。これより、

$$\begin{aligned}
\phi &= -(\dot{F} + \dot{TS}) + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= \boldsymbol{\sigma} : (\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T) + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= (\boldsymbol{\sigma}^e + \boldsymbol{\sigma}^v) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= \boldsymbol{\sigma}^v : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + \boldsymbol{\sigma}^e : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= \boldsymbol{\sigma}^v : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{u}} + T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \geq 0 \\
\phi &= \phi_v + \phi_p + \phi_q \geq 0
\end{aligned} \tag{18}$$

と書き直すことが出来る。ここで、

$$\begin{aligned}
\phi_v &= \boldsymbol{\sigma}^v : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e \\
\phi_p &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + \boldsymbol{\sigma}^e : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{u}} \\
\phi_q &= T\mathbf{q} \cdot \nabla \left( \frac{1}{T} \right)
\end{aligned} \tag{19}$$

である。 $\phi_q$  は熱散逸と呼ばれる。なお  $\boldsymbol{\sigma}^e : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e$  を  $\mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{u}}$  (後述) と置いた。また  $\phi_{inter}$  を

$$\phi_{inter} = \phi_v + \phi_p = \boldsymbol{\sigma}^v : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^T + \boldsymbol{\sigma}^e : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c \tag{20}$$

にて定義すると、式(8)のエネルギー - 原理式と  $\nabla \mathbf{v} = \nabla \dot{\mathbf{u}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c$  より、

$$\rho \dot{u} = \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho h, \quad \rho \dot{u} = \dot{U}$$

$$\therefore \dot{U} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho h$$

であるので、 $-\dot{U} + T\dot{S} = 0$ を考慮して、

$$\begin{aligned} \phi_{inter} &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c + 0 \\ &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c + (-\dot{U} + T\dot{S}) \\ &= \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c - \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^c + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho h + T\dot{S} = T\dot{S} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho h \end{aligned} \quad (21)$$

と変形できる。 $\phi_{inter}$  は物理的に粘性および塑性によって散逸するエネルギー - 変化率を意味し、実質散逸と呼ばれる。また式(21)は熱の空間的な収支を

$$\begin{aligned} \phi_{inter} &= T\dot{S} + \nabla \cdot \mathbf{q} - \rho h \\ \therefore \nabla \cdot \mathbf{q} &= T\dot{S} - \rho h - \phi_{inter} \end{aligned}$$

のように規定しているので、広義の熱拡散方程式でもある。

#### 2-4 散逸ポテンシャルの定義

一般化力ベクトルを  $\mathbf{A}$  とし、一般化速度 (流れ・変位) ベクトルを  $\dot{\mathbf{a}}$  と置く。散逸関数は、

$$\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}}) = \mathbf{A} * \dot{\mathbf{a}} \geq 0 \quad (22)$$

にて与えられる。なお演算\*は、それぞれ共役な一般化力と一般化速度が一次同次式になるように計算するものとする。さて散逸ポテンシャル  $\Phi$  (スカラーポテンシャル) は一般化力ベクトル  $\mathbf{A}$  と、

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \quad (23)$$

の関係が成立するように定義される。この式を式(22)へ代入することによって、

$$\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}}) = \mathbf{A} * \dot{\mathbf{a}} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\partial \dot{\mathbf{a}}} * \dot{\mathbf{a}} \geq 0 \quad (24)$$

を得る。これより散逸ポテンシャル  $\Phi$  は、形式的に散逸関数を用いて、

$$\Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}}) \equiv \int_0^{\dot{\mathbf{a}}} \frac{\phi(\mathbf{A}, s')}{s'} ds' = \int_0^1 \frac{\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{s\dot{\mathbf{a}}} \dot{\mathbf{a}} ds = \int_0^1 \frac{\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{s} ds, \quad (s' = \dot{\mathbf{a}}s, \rightarrow ds' = \dot{\mathbf{a}}ds) \quad (25)$$

にて定義される。 $s$  は任意積分変数である。式(25)の関係が成立することを確認して見よう。まず、式(24)から、

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}}) &= \mathbf{A} * \dot{\mathbf{a}} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\partial \dot{\mathbf{a}}} * \dot{\mathbf{a}} \\ \therefore \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\partial \dot{\mathbf{a}}} &= \frac{\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\dot{\mathbf{a}}} \end{aligned} \quad (26)$$

である。左辺が偏微分であるので、右辺の除算は、個々の一般化速度ベクトル成分における除算に

対応する。すぐにわかるように、式(25)の最初の等号は直接上式を積分した形式である。ここで式(25)を $\dot{\mathbf{a}}$ にて偏微分してみよう(ここで微分と積分の順序を入れ替えても良いと仮定している)。

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\partial \dot{\mathbf{a}}} &= \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \int_0^1 \frac{\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{s} ds = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \left\{ \frac{\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{s} \right\} ds = \int_0^1 \frac{\partial \phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{\partial (s\dot{\mathbf{a}})} \frac{s}{s} ds \\ &= \frac{1}{\dot{\mathbf{a}}} \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s} \phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}}) ds = \frac{1}{\dot{\mathbf{a}}} [\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})]_0^1 = \frac{\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})}{\dot{\mathbf{a}}}\end{aligned}\quad (27)$$

これより、当然ながら式(26)と対応していることがわかる。

式(25)の散逸ポテンシャル $\Phi$ の物理的意味について考えて見よう。

$$\Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}}) \equiv \int_0^{\dot{\mathbf{a}}} \frac{\phi(\mathbf{A}, s')}{s'} ds' = \int_0^1 \frac{\phi(\mathbf{A}, s\dot{\mathbf{a}})}{s} ds, \quad (s' = \dot{\mathbf{a}}s, \rightarrow ds' = \dot{\mathbf{a}}ds)$$

$\Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})$ は、 $\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})/\dot{\mathbf{a}}$ を $\dot{\mathbf{a}}=0$ から $\dot{\mathbf{a}}=\dot{\mathbf{a}}$ まで積分した関数である。 $\phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})/\dot{\mathbf{a}}$ は流れ $\dot{\mathbf{a}}$ に伴う正味のエネルギー - 散逸を $\dot{\mathbf{a}}$ にて規格化した量である。単位流れ当たりのエネルギー - 散逸に対応する。重要な点は $\Phi(\mathbf{A}, \dot{\mathbf{a}})$ という1つのスカラーポテンシャルを定義することによって、各種の力場と流れ(変位場)の関係式が偏微分操作を通じて得られる点である。

## 2-5 平衡(局所平衡・定常)状態にある一般化力と一般化速度の関係式

特に $\Phi$ が $\dot{\mathbf{a}}$ に対して一次同次関数となる場合、すなわち、

$$\Phi(\lambda\dot{\mathbf{a}}) = \lambda\Phi(\dot{\mathbf{a}}) \quad (28)$$

が成立する場合、オイラーの関係式から、

$$\Phi(\dot{\mathbf{a}}) = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}}} * \dot{\mathbf{a}} \quad (29)$$

が導かれる。さらにこの両辺を $\dot{\mathbf{a}}$ にて微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}}} &= \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}} \partial \dot{\mathbf{a}}} * \dot{\mathbf{a}} + \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \\ \therefore \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}} \partial \dot{\mathbf{a}}} * \dot{\mathbf{a}} &= \mathbf{0}\end{aligned}\quad (30)$$

であるので、 $\dot{\mathbf{a}} \neq \mathbf{0}$ ならば、クラマースの公式からスカラー条件式

$$\det \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}} \partial \dot{\mathbf{a}}} \right) = \det \left( \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \right) = \det \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \dot{\mathbf{a}}} \right) = 0 \quad (31)$$

が成立しなくてはならない(ここで式(26)を用いた)。つまり、一般化力ベクトル $\mathbf{A}$ と一般化速度ベクトル $\dot{\mathbf{a}}$ の間に条件式が存在することを意味している。式(31)の物理的に意味するものはなんだろうか。まず、式(31)は式(28)を仮定した帰結である。式(28)は、 $\mathbf{A} = \partial \Phi / \partial \dot{\mathbf{a}}$ が $\dot{\mathbf{a}}$ に関する0次の同次式になっていることを意味している( $\Phi$ は $\dot{\mathbf{a}}$ に関する1次の同次式)ので、式(28)は物理的に、一般化力が平衡(局所平衡・定常)状態にあることを主張している。つまり式(31)は、平衡(局所平衡・定常)状態にある場合の一般化力と一般化速度の関係式である。典型的な例としては、応力-歪曲線を挙げる事が出来る。

### 3 . 内部状態変数

#### 3-1 内部状態変数型構成関係の利点

内部状態変数は、マクロな（巨視的な）量間の現象論的な関係のみを扱ってきた連続体力学の中に、ミクロな（微視的な）レベルの知見を反映させ得る最もシンプルな方法である。金属材料の塑性変形やクリープ変形を解析するために、しばしば内部状態変数型の構成関係が用いられる。

内部状態変数型以外の構成関係では、取り扱う量はあくまでも巨視的な変数ばかりであって、そこには非弾性変形の原因である微視構造の変化との直接的な接点はどこにもない。したがって、複雑な変形挙動を表そうとするときには、巨視的な変数間のみの関係を得るために物理的にはなんの意味もない（実体の存在しない）パネ・ダッシュポット・スライダ - を縦横無尽に組み合わせて、粘弾性材料の挙動をシミュレートせざるを得ないような結果になる。どのような構成関係を用いようとも、それが満たすべき基本原理を満足し、かつ変形挙動を定量的に記述できれば、このようなやり方を誤りであるということはもちろんできない。しかし、物理的実体と遊離した手段で構成関係を定める方法論では、現象に対する洞察に関して有益な観点を見出すことが難しい。現象論的な変数間の関係を、単に巨視的な量に対して得られた実験結果からのみ決定しようとしても、非弾性変形に対してはほとんど不可能である。なぜなら非弾性変形は、一般に変形の履歴に依存する現象であり、あらゆる変形履歴のある物質の試験片に加えてその応答を確かめることは、とうてい実現できることではないからである。ある一つの物質に対して、その非弾性変形挙動を記述する構成関係を実験的に決定するさいには、どうしてもある程度まで構成式に仮定を置かざるを得ない。このときにも、内部状態変数型の構成関係を用いる場合には、物質の微視構造に関する情報を利用できるという点で有利である。

#### 3-2 内部状態変数と一般化力について

$\alpha$  は内部状態変数（示量変数とする）であり、 $\mathbf{A}$  はそれに共役な示強変数である。散逸ポテンシャル  $\Phi$  の定義から、

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\alpha})}{\partial \dot{\alpha}} = \frac{\phi(\mathbf{A}, \dot{\alpha})}{\dot{\alpha}} \quad (32)$$

であり、散逸関数  $\phi$  は系の全エネルギー - を  $G_{system}$  とすると、その定義から、

$$\phi(\mathbf{A}, \dot{\alpha}) = \frac{\partial G_{system}}{\partial t} \quad (33)$$

にて与えられる。これより、

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\alpha})}{\partial \dot{\alpha}} = \frac{\phi(\mathbf{A}, \dot{\alpha})}{\dot{\alpha}} = \frac{\frac{\partial G_{system}}{\partial t}}{\frac{\partial \alpha}{\partial t}} = \frac{\partial G_{system}}{\partial \alpha} \quad (34)$$

であることがわかる。非常に重要な点は、系の全エネルギー -  $G_{system}$  と散逸ポテンシャル  $\Phi$  がスカラーであり、通常、汎関数形式にて表現できる点である。時間を固定し空間的な全エネルギー - から、一般化力を定義する場合が、

$$\mathbf{A} = \frac{\partial G_{system}}{\partial \alpha} \quad (35)$$

であり、一方、空間位置を局所的に固定もしくは空間を平均化（平均場）し、時間的なエネルギー - 散逸から、一般化力を定義する場合は、

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{A}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} = \frac{\phi(\mathbf{A}, \dot{\boldsymbol{\alpha}})}{\dot{\boldsymbol{\alpha}}} \quad (36)$$

である。通常の粘弾塑性論では、内部状態変数として、空間的な局所位置依存性は考慮せず、介在物の体積分率や平均サイズ等の平均場の量が使用されるので、散逸ポテンシャルを基礎に一般化力場の定式化が行われる。他方、Phase-field 法では、局所的な内部状態変数（これが Phase-field 変数に他ならない）が直接利用されるので、全エネルギー - を基礎に一般化力場の定式化が行われる。

特に後者の場合、 $\mathbf{A}$  が空間的に均一になった状態が、 $\boldsymbol{\alpha}$  について力の釣り合った状態であるので、 $\boldsymbol{\alpha}$  は変化しない（平衡もしくは定常状態）。しかし  $\mathbf{A}$  が空間的に不均一である場合には、それを均一にしようとする方向に  $\boldsymbol{\alpha}$  が時間発展する。したがって、 $\boldsymbol{\alpha}$  を変化させようとする一般化力は、最もシンプルには  $\mathbf{A}$  の空間勾配にて展開できると仮定できる。特に 1 階微分のみを残し高次項を省略した場合が、各種の構成式（変数間の現象論的關係式）である。したがって、各種の構成式の導出過程において、しばしば高次項が省略されているので、通常、平衡の近傍でしか成立しないと言われている。ただし実際には  $\boldsymbol{\alpha}$  が定義できる時間および空間の最小領域においては、 $\boldsymbol{\alpha}$  が定義できること自体によって、局所平衡を設定することが可能であり、この範囲内において構成式を正当化することができる。逆に  $\boldsymbol{\alpha}$  が定義できることと、構成が定義できることはほぼ同値とも言える。構成式およびそれに基づく発展方程式の具体形は、

[ $\boldsymbol{\alpha}$  が非保存変数である場合]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} = -L\mathbf{A} = -L \frac{\delta G_{system}}{\delta \boldsymbol{\alpha}} \quad (37)$$

[ $\boldsymbol{\alpha}$  が保存変数である場合]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} = -\nabla \cdot (-M\nabla \mathbf{A}) = \nabla \cdot \left( M\nabla \frac{\delta G_{system}}{\delta \boldsymbol{\alpha}} \right) \quad (38)$$

となる。

結局、意味のある  $\boldsymbol{\alpha}$  と  $\mathbf{A}$  をいかに見出し定義するかが問題を解く本質である。特に、 $\mathbf{A}$  が  $\boldsymbol{\alpha}$  にて展開できるとした理論がランダウ理論であり、もちろん  $\boldsymbol{\alpha} \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha})$  が内部エネルギー - の一部になるように物理的考察の上から展開係数が決定される（ちなみにランダウ理論では、変数として  $\boldsymbol{\alpha}$  のみを見出せばよい）。