仮想仕事率の原理

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
ψ： ヘルムホルツの自由エネルギー
ρ： 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ー
S： 全エントロピー
$\mathbf{u}$： 変位ベクトル
$\boldsymbol{\varepsilon}^{c}$： 拘束歪（全歪）
$\boldsymbol{\varepsilon}^{e}$： 弾性歪
$\boldsymbol{\varepsilon}^{T}$： eigen 歪
$\boldsymbol{\sigma}$： 応力（弾性応力と粘性応力の和）
$\boldsymbol{\sigma}^{e}$： 弾性応力
$\boldsymbol{\sigma}^{v}$： 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

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。）

$$P_{ac}^{*} = P_{in}^{*} + P_{ext}^{*} \tag{1}$$

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

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 ρ と置く。$\mathbf{v}$ は微小領域の移動速度である。$\boldsymbol{\sigma}$ 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、

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

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、

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

であり、これを用いて P_{in} を次のように書き直す。

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

ここで、ガウスの発散定理

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

および面力と内部応力との釣り合い条件

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

を用いた。式(3)と(5)を式(4)に代入して整理すると、

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

のように、コーシーの運動方程式が導かれる。

３．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。

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

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、

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

を得る。

さて以上で、運動場、力場、温度場のエネルギーが出揃ったので、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、

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

にて定義され、ここで、

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

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、

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

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 ψ 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、$\dot{F} = \rho\dot{\psi},\quad S = \rho s$ 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。

４．散逸関数

式(14)左辺は、散逸関数と呼ばれ、散逸関数 ϕ 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、

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

である。これより、

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

と書き直すことが出来る。ここで、

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

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

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

と変形できる。ϕ_{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

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

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。

５．内部変数

$\boldsymbol{\alpha}$ は内部変数（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。したがって、

$$\mathbf{A} = -\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\alpha}}$$

にて定義される。内部変数は、物質内部の状態を記述する一般的な変数である。

$\mathbf{A}$ 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。すたがって、$\boldsymbol{\alpha}$ の変化に対する一般化力は、$\mathbf{A}$ の空間微分にて展開できると仮定することが出来る。特に１階部分のみを残し高次項を省略した場合が、各種の発展方程式である。したがって、各種の発展方程式の導出の過程において、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発展方程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、発展方程式が定義できることはほぼ同値とも言える。発展方程式の具体的な形は、

[$\boldsymbol{\alpha}$ が非保存変数である場合]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} = -L\mathbf{A} = -L\frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{\alpha}}$$

[$\boldsymbol{\alpha}$ が保存変数である場合]

$$\frac{\partial \boldsymbol{\alpha}}{\partial t} = \nabla\cdot(M\nabla\mathbf{A}) = \nabla\cdot\left(M\nabla\frac{\delta F}{\delta \boldsymbol{\alpha}}\right)$$

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る。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。さらにこの場合は、変数として$\boldsymbol{\alpha}$のみを見出せばよい。