凝固による界面拡散を考慮した結晶粒界モデルにおけるエネルギー消散性 *

白川 健 (千葉大・教育)

講演要旨. 本講演での発表内容は, 渡邉 紘氏 (サレジオ高専・一般) と山崎 教昭氏 (神奈川大・工) との共同研究 [7] に基づいている.

$1 < N \in \mathbb{N}$ を空間次元, $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ を滑らかな境界 $\partial\Omega$ を持つ有界領域とし, $\nu_{\partial\Omega}$ を $\partial\Omega$ 上の外向単位法線ベクトルとする. また, $Q := (0, \infty) \times \Omega$, $\Sigma := (0, \infty) \times \partial\Omega$ とおく.

本講演では, $\nu \geq 0$ を与えられた定数とし, 以下の偏微分方程式によるシステム $(\mathrm{S})_\nu$ を考える.

$(\mathrm{S})_\nu$:

$$\begin{cases} w_t - \mathit{\Delta} w + \partial\gamma(w) + f_w(w, \eta) + \alpha_w(w, \eta)|D\theta| + \nu\beta_w(w, \eta)|D\theta|^2 \ni 0 \ \text{ in } Q, \\ Dw \cdot \nu_{\partial\Omega} = 0 \ \text{ on } \Sigma, \\ w(0, x) = w_0(x), \quad x \in \Omega; \end{cases} \tag{1}$$

$$\begin{cases} \eta_t - \mathit{\Delta} \eta + f_\eta(w, \eta) + \alpha_\eta(w, \eta)|D\theta| + \nu\beta_\eta(w, \eta)|D\theta|^2 = 0 \ \text{ in } Q, \\ D\eta \cdot \nu_{\partial\Omega} = 0 \ \text{ on } \Sigma, \\ \eta(0, x) = \eta_0(x), \quad x \in \Omega; \end{cases} \tag{2}$$

$$\begin{cases} \alpha_0(w, \eta)\,\theta_t - \mathrm{div}\left(\alpha(w, \eta)\dfrac{D\theta}{|D\theta|} + 2\nu\beta(w, \eta)D\theta\right) = 0 \ \text{ in } Q, \\ \left(\alpha(w, \eta)\dfrac{D\theta}{|D\theta|} + 2\nu\beta(w, \eta)D\theta\right) \cdot \nu_{\partial\Omega} = 0 \ \text{ on } \Sigma, \\ \theta(0, x) = \theta_0(x), \quad x \in \Omega. \end{cases} \tag{3}$$

ここに, $w_0 = w_0(x)$, $\eta_0 = \eta_0(x)$, $\theta_0 = \theta_0(x)$ は与えられた初期データ, $f = f(w, \eta)$ と $\alpha_0 = \alpha_0(w, \eta)$ は与えられた非負値関数, $\gamma = \gamma(w)$ は $\mathbb{R}$ 上の適正下半連続凸関数であり, $\alpha = \alpha(w, \eta)$ と $\beta = \beta(w, \eta)$ は与えられた正値凸関数である. また, (1)-(3) 中に現れる下付き記号 “$_w$”, “$_\eta$” はすべて, 指定の変数についての微分 (偏微分) を表す.

システム $(\mathrm{S})_\nu$ は, 凝固による界面拡散を考慮した結晶粒界現象の数学モデル (cf. [3]) に基づいており, 自由エネルギーと呼ばれる以下の汎関数の勾配流として導出される.

$$\begin{aligned} [w, \eta, \theta] \ \mapsto \ \mathscr{F}_\nu(w, \eta, \theta) &:= \frac{1}{2}\int_\Omega |Dw|^2\,dx + \frac{1}{2}\int_\Omega |D\eta|^2\,dx + \int_\Omega \gamma(w)\,dx \\ &\quad + \int_\Omega f(w, \eta)\,dx + \int_\Omega \alpha(w, \eta)|D\theta| + \nu\int_\Omega \beta(w, \eta)|D\theta|^2\,dx. \end{aligned} \tag{4}$$

その際, 3 つの未知関数 $w = w(t, x)$, $\eta = \eta(t, x)$, $\theta = \theta(t, x)$ のそれぞれは「物質の凝固度」「結晶の配向度」「結晶の方位角」を表す相関数として設定される. また特に, 2 つの相関数 w, η に対しては制約条件 “$0 \leq w, \eta \leq 1$ in Q” を課し, 閾値に近い 2 つの状況 $[w, \eta] \approx [1, 1]$

* 本研究は科研費 (課題番号: 24740099) の助成を受けたものである。

と $[w, \eta] \approx [0, 0]$ のそれぞれを「完全凝固かつ完全配向」と「完全融解かつ無配向」の 2 つの安定状態と対応させて考える.

システム $(\mathrm{S})_\nu$ を数学的に考察する際, 定数 ν および関数 f, γ, α_0, α, β の設定によって, 解の定義や解析法は異なったものになる. 本研究の大きな目標は, こうした設定上の相違を統一的に扱うことを可能とするような解析法を構築することである. この目標に基づき, 講演中では以下 3 つの項目に焦点をあてながら, 主定理やその証明方法について紹介する.

(A) エネルギー消散解の定義と定性的性質　エネルギー消散解とは, 自由エネルギーの時間的変化を単調非増加性とするような解のことであるが, もし仮にこのような解の存在を示せたならば, システム $(\mathrm{S})_\nu$ が勾配流としての基本性質を備えていることを数学的に保証できたことになる. 本講演では, このエネルギー消散解に関する「平滑化効果」および「漸近挙動」に関して得られた結果を, 主定理として報告する.

(B) 仮定の一般化　大雑把な捉え方をすれば, システム $(\mathrm{S})_\nu$ は Allen-Cahn 方程式 (cf. [1]) と結晶粒界の Kobayashi-Warren-Carter モデル (cf. [5]) をカップリングしたものになっており, これらに関しては現在までに多くの先行研究成果が報告されている (e.g. [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7]). 特に Allen-Cahn 方程式に関しては, その主な特徴である二重井戸型関数 (関数 f と関連) の代表的表現が多数あるので, 主定理の仮定はこれらを統一的に扱えるように出来るだけ一般化した条件を提示する.

(C) 有効な近似問題の構成法　システム $(\mathrm{S})_\nu$ に関しては, 解の一意性の保証が大変難しいことがわかっており, こちらに関しては現時点では全く見通しが立っていない. 本講演では, 一意性の問題を保留する代わりに, エネルギー消散解へのアプローチに対する「有効な近似の範囲」を, 近似関数列の満たすべき条件 (十分条件) を示すことによって明確にする.

参考文献

[1] Allen, S. M.,Cahn, J. W.: A microscopic theory for antiphase motion and its application to antiphase domain coarsening. Acta Metall., **27** (1979), 1085–1095.

[2] Ito, A., Kenmochi, N., Yamazaki, N.: A phase-field model of grain boundary motion. Appl. Math., **53**, no. 5, 433–454 (2008).

[3] Kobayashi, R.: Modelling of grain structure evolution. Variational Problems and Related Topics, RIMS Kôkyûroku, **1210** (2001), 68–77.

[4] Kobayashi, R., Giga, Y.: Equations with singular diffusivity. J. Statist. Phys., **95**, 1187–1220 (1999).

[5] Kobayashi, R., Warren, J.A., Carter, W.C.: A continuum model of grain boundary. Phys. D, **140**, no. 1-2, 141–150 (2000).

[6] Moll, S., Shirakawa, K.: Existence of solutions to the Kobayashi-Warren-Carter system. Calc. Var. Partial Differential Equations, **8**, no. 3-4. `DOI:10.1007/s00526-013-0689-2`

[7] Shirakawa, K., Watanabe, H., Yamazaki, N.: Existence for a PDE-model of a grain boundary motion involving solidification effect, *New Role of the Theory of Abstract Evolution Equations,* RIMS KôKyûroku (to appear).