3次元結晶粒界現象を記述する数学モデルに対する可解性と解挙動

渡邉 紘　(大分大学・理工学部)*

本研究はSalvador Moll氏(University of València)と白川健氏(千葉大学・教育学部)との共同研究である。

本講演では, 以下の連立偏微分方程式系の初期値境界値問題(P)を考察する:

$$\begin{cases}\partial_t \eta - \Delta\eta + g(\eta) + \alpha'(\eta)|\nabla \mathbf{u}| = f_0 \text{ in } Q := (0,\infty)\times\Omega,\\ \nabla\eta\cdot\mathbf{n}_\Gamma = 0 \text{ on } (0,\infty)\times\partial\Omega,\ \ \eta(0,x) = \eta_0(x),\ x\in\Omega;\end{cases}$$

$$\begin{cases}\partial_t \mathbf{u} - \mathrm{div}\left(\alpha(\eta)\dfrac{\nabla\mathbf{u}}{|\nabla\mathbf{u}|} + \kappa^2\nabla\mathbf{u}\right) = \bigl(\alpha(\eta)|\nabla\mathbf{u}| + \kappa^2|\nabla\mathbf{u}|^2\bigr)\mathbf{u} + \mathbf{f} - (\mathbf{f}\cdot\mathbf{u})\mathbf{u}\ \text{ in } Q,\\ \left(\alpha(\eta)\dfrac{\nabla\mathbf{u}}{|\nabla\mathbf{u}|} + \kappa^2\nabla\mathbf{u}\right)\mathbf{n}_\Gamma = 0 \text{ on } (0,\infty)\times\partial\Omega,\ \ \mathbf{u}(0,x) = \mathbf{u}_0(x),\ x\in\Omega.\end{cases}$$

ここで, $1 < N \in \mathbb{N}$, $1 < M \in \mathbb{N}$, $\kappa > 0$ とする. $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ はリプシッツ境界 $\Gamma := \partial\Omega$ を持つ有界領域とし, $\mathbf{n}_\Gamma$ を Γ 上の単位法線ベクトルとする. $\alpha \in C^2(\mathbb{R})$ は正値な凸関数であり, $g \in C^1(\mathbb{R})$ はリプシッツ連続な関数とする. 未知関数 $\eta \in \mathbb{R}$, $\mathbf{u} \in \mathbb{S}^{M-1}$ は多結晶の配向度, 回転をそれぞれ記述する. 実際 $M = 4$ のとき, $\mathbf{u}$ は3次元回転の四元数表現に用いられる3次元球面 $\mathbb{S}^3$ の要素である.

Kobayashi–Warren–Carter [8, 9] は, 2次元の結晶粒界現象を以下のエネルギー汎関数の L^2-勾配流としてモデル化した:

$$\begin{aligned}[\eta,\theta]\in[H^1(\Omega)]^2 \mapsto \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla\eta|^2\,dx + \int_\Omega G(\eta)\,dx\\ + \int_\Omega \alpha(\eta)|\nabla\theta|\,dx + \frac{\kappa^2}{2}\int_\Omega|\nabla\theta|^2\,dx \in [0,\infty].\end{aligned}$$

ここで, G は関数 g の原始関数であり, 未知関数 $\eta, \theta \in \mathbb{R}$ は多結晶の配向度と方位角を記述する. 上記のエネルギー内の $|\nabla\theta|$ は小スケールでの結晶学的配向の差(misorieatation)を表現している. 本講演の研究対象である3次元モデルを定式化するためには, 3次元空間内における配向および配向の差を考える必要がある.

Kobayashi–Warren [7] では, 上記のエネルギーにおいて θ の代わりに $\mathbb{R}^9$ の要素を用い, 3次の回転群 $SO(3)$ への制約条件付き L^2-勾配流としてモデルを定式化した. 一方で Pusztai–Bortel–Gránásy [13, 14] では $SO(3)$ の要素に対する四元数表現が用いられ, $|\nabla\theta|$ の表現に3次元球面 $\mathbb{S}^3$ の要素が用いられた. 3次元回転の四元数表現については, 例えば金谷 [6], Morawiec [12] に解説がある. 本講演では [13, 14] の観点に基づき, まず以下のエネルギー汎関数を定式化し, 制約条件 $\mathbf{u} \in \mathbb{S}^{M-1}$ を課す:

本研究は科学研究費 (基盤研究 (C) 課題番号: 20K03672, 20K03696, 21K03312) の助成を受けたものである.
2000 Mathematics Subject Classification: 35K67, 35K87, 35Q99
キーワード：放物型連立系, 結晶粒界運動, 3次元回転, 1-調和写像流, 外力, 時間大域的挙動
* 〒870-1192 大分市大字旦野原700番地 大分大学理工学部理工学科
e-mail: hwatanabe@oita-u.ac.jp

$$
\begin{aligned}
&[\eta,\mathbf{u}] \in L^2(\Omega)\times L^2(\Omega;\mathbb{R}^M) \mapsto \mathcal{F}(\eta,\mathbf{u}) \\
&\quad := \begin{cases} \dfrac{1}{2}\displaystyle\int_\Omega |\nabla\eta|^2\,dx + \int_\Omega G(\eta)\,dx + \int_\Omega \alpha(\eta)|\nabla\mathbf{u}|\,dx + \frac{\kappa^2}{2}\int_\Omega |\nabla\mathbf{u}|^2\,dx, \\ \qquad\quad \text{if} \ \ \eta\in H^1(\Omega) \text{ and } \mathbf{u}\in H^1(\Omega;\mathbb{R}^M), \\ +\infty, \quad \text{otherwise.} \end{cases}
\end{aligned}
$$

(P) は制約条件 $\mathbf{u}\in\mathbb{S}^{M-1}$ の下での $\mathcal{F}$ の L^2-勾配流の外力付き問題として導出される. ただし, $\mathbf{u}$ には値域制約が課されているため, $\mathbf{u}$ に関する外力付き勾配流は形式的に以下のように記述される:

$$
\partial_t\mathbf{u} = -\pi_{\mathbf{u}}\left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\mathbf{u}}(\eta,\mathbf{u}) + \mathbf{f}\right).
$$

ここで, $\pi_{\mathbf{u}}:\mathbb{R}^M\to T_{\mathbf{u}}\mathbb{S}^{M-1}$ は直交射影であり, $T_{\mathbf{u}}\mathbb{S}^{M-1}$ は $\mathbb{S}^{M-1}$ の $\mathbf{u}\in\mathbb{S}^{M-1}$ における接平面である. 外力項が無い問題については, Moll–Shirakawa–W.[10] により局所解の存在が得られている. 本講演では,

$$
\mathfrak{X} := L^2(\Omega)\times L^2(\Omega;\mathbb{R}^M), \quad \mathfrak{W} := H^1(\Omega)\times H^1(\Omega;\mathbb{R}^M)
$$

と表記し, 関数 g, α, f_0, $\mathbf{f}$, η_0, $\mathbf{u}_0$ に対して以下の仮定を課す.

- $g\in C^1(\mathbb{R})$ はリプシッツ連続で, 原始関数 $0\le G\in C^2(\mathbb{R})$ を持つ. さらに,

$$
\liminf_{s\to-\infty} g(s) = -\infty \quad \text{and} \quad \limsup_{s\to\infty} g(s) = \infty.
$$

- $0<\alpha\in C^2(\mathbb{R})$ は以下を満たす.
  - $\alpha'(0)=0$, $\mathbb{R}$ 上で $\alpha''\geqq 0$ かつ α, $\alpha\alpha'$ は $\mathbb{R}$ 上のリプシッツ連続な関数.
  - $\alpha^* := \inf\alpha(\mathbb{R}) > 0$.
- $\mathfrak{f} := [f_0,\mathbf{f}]\in L^2([0,\infty);\mathfrak{X})$, $f_0\in L^\infty((0,\infty)\times\Omega)$.
- $U_0 := [\eta_0,\mathbf{u}_0]\in L^\infty(\Omega)\times L^2(\Omega;\mathbb{R}^M)\cap\mathfrak{W}$.

上記の仮定の下で, 外力項付きの問題 (P) の時間大域解の存在および時間大域的挙動が得られたことを報告する.

Definition 1
関数の組 $U := [\eta,\mathbf{u}]\in L^2_{loc}([0,\infty);\mathfrak{X})$ が問題 (P) の解であるとは,

$$
U = [\eta,\mathbf{u}]\in W^{1,2}_{loc}([0,\infty);\mathfrak{X})\cap L^\infty_{loc}(0,\infty;\mathfrak{W}), \quad \eta\in L^\infty(Q) \text{ and } \mathbf{u}\in\mathbb{S}^{M-1} \text{ a.e. in } Q,
$$

$$
\begin{aligned}
&\big(\partial_t\eta(t) + g(\eta(t)) + \alpha'(\eta(t))|\nabla\mathbf{u}(t)|, \varphi\big)_{L^2(\Omega)} + \big(\nabla\eta(t),\nabla\varphi\big)_{L^2(\Omega)} = (f_0(t),\varphi)_{L^2(\Omega)}, \\
&\qquad \text{for any } \varphi\in H^1(\Omega), \text{ a.e. } t>0, \ \text{subject to } \eta(0)=\eta_0 \text{ in } L^2(\Omega),
\end{aligned}
$$

が成立し, さらに $\mathcal{B}^*\in L^\infty(Q;\mathbb{R}^{MN})$, $\mu^*\in L^1_{loc}([0,\infty);L^1(\Omega))$ が存在し,

$$
\mathcal{B}^*\in \mathrm{Sgn}^{M,N}(\nabla\mathbf{u}) \text{ in } \mathbb{R}^{MN}, \ \ \mu^* := (\alpha(\eta)\mathcal{B}^* + \kappa^2\nabla\mathbf{u}) : \nabla\mathbf{u}, \ \text{a.e. in } Q,
$$

$$\int_\Omega \partial_t \mathbf{u}(t)\cdot\boldsymbol{\psi}\,dx + \int_\Omega (\alpha(\eta(t))\mathcal{B}^*(t) + \kappa^2\nabla\mathbf{u}(t)) : \nabla\boldsymbol{\psi}\,dx = \int_\Omega \mu^*(t)\mathbf{u}(t)\cdot\boldsymbol{\psi}\,dx$$
$$+\int_\Omega (\mathbf{f}(t) - (\mathbf{f}\cdot\mathbf{u})(t)\mathbf{u}(t))\cdot\boldsymbol{\psi} dx$$
$$\text{for any } \boldsymbol{\psi}\in C^1(\overline{\Omega};\mathbb{R}^M),\ \text{a.e. } t>0,\ \text{subject to } \mathbf{u}(0)=\mathbf{u}_0 \text{ in } L^2(\Omega;\mathbb{R}^M),$$

が成立するときいう. ここで, $\mathrm{Sgn}^{M,N} : \mathbb{R}^{MN} \to 2^{\mathbb{R}^{MN}}$ は $\mathbb{R}^{MN}$-ユークリッドノルムの劣微分であり, $:$ は, $M\times N$ 行列に対する内積である.

Main Theorem 1. 初期関数 $U_0 = [\eta_0, \mathbf{u}_0] \in L^\infty(\Omega)\times L^2(\Omega;\mathbb{R}^M)\cap\mathfrak{W}$ は, Ω 内 a.e. で $\mathbf{u}_0 \in \mathbb{S}^{M-1}$ を満たすとする. また, $\mathfrak{f} := [f_0, \mathbf{f}] \in L^2_{loc}([0,\infty);\mathfrak{X})$ かつ $f_0 \in L^\infty(Q)$ を仮定する. このとき, 問題 (P) の解 $U = [\eta, \mathbf{u}] \in L^2_{loc}([0,\infty);\mathfrak{X})$ が少なくとも 1 つ存在し, 以下のエネルギー不等式を満たす:

$$\mathcal{F}(U(T)) + \frac{1}{2}\int_0^T \|\partial_t U(t)\|_{\mathfrak{X}}^2 dt \le \mathcal{F}(U_0) + \frac{1}{2}\int_0^T ||\mathfrak{f}(t)||_{\mathfrak{X}}^2 dt \quad \text{for all } T\ge 0.$$

さらにもし, $\mathfrak{f}\in L^\infty(Q)\times L^\infty(Q;\mathbb{R}^M)$ であり,

$$\exists\ \mathbf{p}_0 \in \mathbb{S}^{M-1}\ \text{ s.t. }\ \mathbf{u}_0 \in \overline{B_g(\mathbf{p}_0;R)} \text{ with } R\in\left(0,\frac{\pi}{2}\right),\ \text{ and }\ \frac{\mathbf{f}}{|\mathbf{f}|}\in\overline{B_g(\mathbf{p}_0;R)},\ |\mathbf{f}|\text{-}a.e.$$

ならば,

$$\mathbf{u}\in\overline{B_g(\mathbf{p}_0;R)},\quad \text{a.e. in } \Omega,\quad \text{for all } t\in[0,\infty).$$

ここで, $B_g(\mathbf{p}_0;R)$ は中心 $\mathbf{p}_0$, 半径 R の $\mathbb{S}^{M-1}$ 上の開球である.

Main Theorem 2. Main Theorem 1 と同様の仮定を課す. さらに,

$$\exists\ \mathfrak{f}^\infty \in \mathfrak{X}\ \text{ s.t. }\ \mathfrak{f}-\mathfrak{f}^\infty \in L^2(0,\infty;\mathfrak{X})$$

を仮定する. このとき, ω 極限集合:

$$\omega(U) := \left\{\ \bar{U} = [\bar{\eta}, \bar{\mathbf{u}}] \in \mathfrak{W}\ \middle|\ \begin{array}{l}\text{there exists a sequence } \{t_n\}_{n=1}^\infty \subset (0,\infty), \text{ such that}\\ t_n \uparrow \infty, \text{ and } U(t_n) = [\eta(t_n), \mathbf{u}(t_n)] \to \bar{U} = [\bar{\eta},\bar{\mathbf{u}}] \text{ in } \mathfrak{X},\\ \text{as } n\to\infty.\end{array}\right\}$$

は空集合でなく, $\mathfrak{X}$ 内でコンパクトになる. さらに, 任意の ω 極限点 $U^\infty = [\eta^\infty, \mathbf{u}^\infty] \in \omega(U)$ は以下の変分不等式の解となる:

$$\bigl(g(\eta^\infty) + \alpha'(\eta^\infty)|\nabla\mathbf{u}^\infty|, \varphi\bigr)_H + \bigl(\nabla\eta^\infty, \nabla\varphi\bigr)_H = \bigl(f_0^\infty, \varphi\bigr)_H,\ \text{for any } \varphi\in H^1(\Omega);$$

$$\int_\Omega (\alpha(\eta^\infty)\mathcal{B}^\infty + \kappa^2\nabla\mathbf{u}^\infty) : \nabla\boldsymbol{\psi}\,dx = \int_\Omega \mu^\infty\mathbf{u}^\infty\cdot\boldsymbol{\psi}\,dx$$
$$+\int_\Omega \bigl(\mathbf{f}^\infty - (\mathbf{f}^\infty\cdot\mathbf{u}^\infty)\mathbf{u}^\infty\bigr)\cdot\boldsymbol{\psi}\,dx,\ \text{for any } \boldsymbol{\psi}\in C^1(\overline{\Omega};\mathbb{R}^M).$$

ここで, $\mathcal{B}^\infty \in L^\infty(\Omega;\mathbb{R}^{MN})$, $\mu^\infty\in L^1(\Omega)$ は

$$\begin{cases}\mathcal{B}^\infty \in \mathrm{Sgn}^{M,N}(\nabla\mathbf{u}^\infty) \text{ in } \mathbb{R}^{MN},\\ \mu^\infty := (\alpha(\eta)\mathcal{B}^\infty + \kappa^2\nabla\mathbf{u}^\infty) : \nabla\mathbf{u}^\infty,\end{cases}\quad \text{a.e. in } \Omega.$$

Main Theorem 3. Main Theorem 1 と同様の仮定を課す. さらに, $\mathbf{f} \equiv 0$ かつ

$$\exists\ \mathbf{p}_0 \in \mathbb{S}^{M-1} \ \text{ s.t. } \mathbf{u}_0 \in \overline{B_g(\mathbf{p}_0; R)}, \text{ with } 0 \le R < \frac{\pi}{4}$$

を仮定する. このとき, $T^* \in [0, +\infty)$ が存在し, 以下が成立する:

$$\int_\Omega \mathrm{dist}_g(\mathbf{u}(t,x), \mathbf{p}_c(t))^2\, dx \to 0, \text{ as } t \uparrow T^*.$$

ここで, $\mathbf{p}_c(t)$ は押し出し測度 $\mu := \mathbf{u}(t)\sharp\mathcal{L}^N$ の重心, すなわち, 以下の関数の最小限である:

$$\mathbf{p} \in \mathbb{S}^{M-1} \mapsto \Psi_\mu(\mathbf{p}) := \frac{1}{2}\int_{\mathbb{S}^{M-1}} \mathrm{dist}_g(\cdot, \mathbf{p})^2 d\mu.$$

また, $\mathrm{dist}_g(\mathbf{u}(t,x), \mathbf{p}_c(t))$ は $\mathbf{u}(t,x)$ から $\mathbf{p}_c(t)$ までの球面上の (測地) 距離を表す.

参考文献

[1] B. Afsari. Riemannian L^p center of mass: existence, uniqueness, and convexity. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 139, 655–673, 2011.

[2] J. W. Barrett, X. Feng, and A. Prohl. On p-harmonic map heat flows for $1 \le p < \infty$ and their finite element approximations. *SIAM J. Math. Anal.*, 40(4):1471–1498, 2008.

[3] Y. M. Chen, M. C. Hong, and N. Hungerbühler. Heat flow of p-harmonic maps with values into spheres. *Math. Z.*, 215(1):25–35, 1994.

[4] L. Giacomelli, M. Łasica, and S. Moll. Regular 1-harmonic flow. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 58(2):Paper No. 82, 24, 2019.

[5] J. Jost. Riemannian geometry and geometric analysis. Universitext, Springer, Cham, seventh ed., 2017.

[6] 金谷 健一. 3次元回転 – パラメータ計算とリー代数による最適化 –. 共立出版, 2019.

[7] R. Kobayashi and J. A. Warren. Modeling the formation and dynamics of polycrystals in 3d. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 356(1):127–132, 2005.

[8] R. Kobayashi, J. A. Warren, and W. C. Carter. A continuum model of grain boundaries. *Phys. D*, 140(1-2):141–150, 2000.

[9] R. Kobayashi, J. A. Warren, and W. C. Carter. Grain boundary model and singular diffusivity. In *Free boundary problems: theory and applications, II (Chiba, 1999)*, volume 14 of *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.*, pages 283–294. Gakkōtosho, Tokyo, 2000.

[10] S. Moll, K. Shirakawa, and H. Watanabe. Existence of solutions to a phase-field model of 3D-grain boundary motion governed by a regularized 1-harmonic type flow. *J. Nonlinear Sci.*, 33(5):Article 68, 2023.

[11] S. Moll, K. Shirakawa, and H. Watanabe. Large-time behavior for a phase-field system of 3D-grain boundary motion. submitted.

[12] A. Morawiec. Orientations and rotations. *Computations in crystallographic textures. Springer-Verlag, Berlin*, 2004.

[13] T. Pusztai, G. Bortel, and L. Gránásy. Phase field theory of polycrystalline solidification in three dimensions. *EPL (Europhysics Letters)*, 71(1):131, 2005.

[14] T. Pusztai, G. Bortel, and L. Gránásy. *Phase field theory of polycrystalline freezing in three dimensions.* Minerals, Metals and Materials Society, 5700 Corporate Drive Suite 750, Pittsburgh, PA 15237, 2006.