非等方的 Allen–Cahn 方程式による界面運動の近似の一様性

大塚 岳 (東京大学大学院数理科学研究科 研究拠点形成特任研究員)

Abstract

The Allen–Cahn equation is introduced for approximating the motion of grain boundaries in a crystal. It is already known that internal transition layers of solutions of Allen–Cahn equations approximates the motion of interfaces by a mean curvature flow equation. We shall discuss on an anisotropic version of Allen–Cahn equations and a mean curvature equation. The convergence of solutions of anisotropic Allen–Cahn equations is studied when the interface thickness parameter (denoted by ε) tends to zero. It is shown that the convergence to a level set solution of the corresponding anisotropic interface equations is uniform with respect to the derivatives of a surface energy density function. As an application a crystalline motion of interfaces is shown to be approximated by anisotropic Allen–Cahn equations.

1. イントロダクション

本講演では非等方的 Allen–Cahn 方程式の内部遷移層による界面の運動の近似について考察する。非等方的 Allen–Cahn 方程式とは次のような方程式である。

$$\beta(\nabla v)\partial_t v - \operatorname{div}\{\gamma(\nabla v)D\gamma(\nabla v)\} + \frac{1}{\varepsilon^2}(f(v) - \varepsilon\lambda a) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^n \times (0,T). \tag{1.1}$$

ここで a は定数、$f(v) = 2v(v^2-1)$、λ は f から決まる定数でこの場合では $\lambda = 2/3$、β、γ は $\mathbb{R}^n$ 上の関数で次をみたすものとする。

(A1) $\beta \in C(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$、$\gamma \in C^2(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$。

(A2) 任意の $r > 0$ と $p \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ に対し $\beta(rp) = \beta(p)$、$\gamma(rp) = r^2\gamma(p)$。

(A3) 次をみたす正の定数 Λ_β、Λ_γ が存在する。

$$\Lambda_\beta^{-1} \le \beta \le \Lambda_\beta,\ \Lambda_\gamma^{-1} \le \gamma \le \Lambda_\gamma \quad \text{on } S^{n-1}.$$

(A4) γ は凸関数、γ^2 は狭義凸関数である。

(A5) $\sigma \mapsto f(\sigma) - \varepsilon\lambda a$ は 3 つの零点 h_-、h_0、$h_+ (h_- < h_0 < h_+)$ を持つ。

とくに $\beta \equiv 1$、$\gamma(p) = |p|$、$a = 0$ のとき (1.1) は Allen–Cahn 方程式と呼ばれる。方程式 (1.1) の解 v の内部遷移層が非等方的平均曲率流方程式と呼ばれる方程式によって動く界面を近似していることは知られている。本講演ではこの Allen–Cahn 方程式と平均曲率流方程式の関係を明らかにすることを目標とする。

1.1. 等方的な場合

まず Allen–Cahn 方程式、すなわち $\beta \equiv 1$、$\gamma(p) = |p|$、$a = 0$ の場合である

$$\partial_t v - \Delta v + \frac{1}{\varepsilon^2} f(v) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^n \times (0,T) \tag{1.2}$$

と平均曲率流方程式の関係について紹介する。

Allen–Cahn 方程式は Allen–Cahn が 1979 年に、結晶中の流界の運動を表す方程式として導入した ([AC])。粒界とは結晶中にある、2 つの向きの異なる結晶格子の境界のことである。一方の結晶格子の状態を $v = -1$、他方の結晶格子の状態を $v = 1$ とし、次のエネルギー汎関数

$$E(v) = \int \left[\frac{1}{2} |\nabla v|^2 + \frac{1}{\varepsilon^2} \left\{ \frac{1}{2} (v^2 - 1)^2 - \varepsilon \lambda a v \right\} \right] dx$$

の値を小さくするように変化する運動として、(1.2) が導出された。Allen–Cahn([AC]) は $a = 0$ の場合の方程式について、内部遷移層と呼ばれる、v の値が -1 から 1 へ移り変わる幅 $O(\varepsilon)$ の薄い層が平均曲率流方程式にしたがって動く界面を近似していることを指摘した。平均曲率流方程式とは、

$$V = -\kappa \quad \text{on } \Gamma_t \tag{1.3}$$

で表される界面 Γ_t の運動方程式である。ここで V は Γ_t の外向き単位法線ベクトル方向への移動速度、κ は Γ_t の平均曲率である。

両者の関係については、形式的には漸近展開によって得られている ([RSK])。Chen([C])、Evans–Soner–Souganidis([ESS]) らは両者の関係について厳密な議論を展開した。

以下に両者の結果の本質的な部分を述べる。方程式 (1.3) を Level set 法によって定式化した等高面方程式

$$\partial_t u - |\nabla u| \mathrm{div} \left(\frac{\nabla u}{|\nabla u|} \right) = 0 \quad \text{in } \mathrm{R}^n \times (0,T) \tag{1.4}$$

を考える。u を (1.4) の '解'、v を (1.2) の '解' で、$\{x; u(x,0) > 0\} = \{x; v(x,t) > 0\}$ かつ $\{x; u(x,0) < 0\} = \{x; v(x,t) < 0\}$ をみたすものとする。このとき次が成立する。

$$v \to \left\{ \begin{array}{l} +1 \text{ in } \{(x,t); u(x,t) > 0\} \\ -1 \text{ in } \{(x,t); u(x,t) < 0\} \end{array} \right\} \text{ locally uniformly as } \varepsilon \to 0. \tag{1.5}$$

[C] はこの収束の結果を古典解の範囲で得ている。しかし (1.3) にしたがって動く界面は有限時間で特異点を生じることがある。[ESS] は (1.5) を粘性解なる弱解の範囲で得ている。これは界面に特異点が生じた後も (1.2) の内部遷移層で界面の運動が近似できることを示している。Barles–Soner–Souganidis([BSS]) はこの結果を一般の駆動力 a について拡張した。

1.2. 非等方的な場合

非等方的 Allen–Cahn 方程式 (1.1) は [MWBCS] によって導入された。方程式 (1.1) に対応する界面の運動方程式は

$$\beta(\vec{\mathbf{n}})V = -\gamma(\vec{\mathbf{n}})\{\mathrm{div}_{\Gamma_t} D\gamma(\vec{\mathbf{n}}) + a\} \quad \text{on } \Gamma_t. \tag{1.6}$$

で与えられる。ここで $\vec{\mathbf{n}}$ は Γ_t の外向き単位法線ベクトル、div_{Γ_t} は Γ_t 上での表面拡散を表す。右辺の第 1 項は Γ_t の非等方的な曲率を表す。物理学的には γ は表面エネルギー密度関数、$D\gamma$ は Cahn-Hoffman vector、γ/β は mobility と呼ばれる量である。β、γ はそれぞれ移動速度の移動速度、界面の平衡状態の非等方性を与えるものである。方程式 (1.1) と (1.6) のと表した等高面方程式は次で与えられる。

$$\beta(\nabla u)\partial_t u - \gamma(\nabla u)\{\mathrm{div} D\gamma(\nabla u) + a\} = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^n \times (0, T). \tag{1.7}$$

方程式 (1.1) と (1.7) に対する収束の結果 (1.5) は、$\beta \equiv 1$ の場合に [ElS1]、一般の β については [ElS2] によって得られている。しかしこれらの結果では γ について

$$\|\gamma\|_{C^2(B_2(0)\setminus B_{1/2}(0))} \leq \Lambda \tag{1.8}$$

なる正の定数 Λ の存在を仮定している。これは平衡状態の界面の形状が一様にある程度滑らかであることを示している。それは単独の方程式を考える限り自明であるが、クリスタラインと呼ばれる、γ が滑らかでないような状況での (1.6) による界面の運動の近似方程式として (1.1) を用いようとすると (1.8) は取り除くべき仮定となる。とくに [ElS1] や [ElS2] において (1.5) の収束は Λ に依存することに注意する。

そこで、本講演ではこの γ の微分に対する仮定を取り除いた状況で (1.5) を示すことを目標とする。

収束定理の証明は比較定理を用いた解の評価による。ここで比較原理とは、方程式の劣解 (方程式の左辺が非正) と優解 (方程式の右辺が非負) が初期時刻 $t = 0$ において' 劣解 $\leq$ 優解' なる大小関係をもつとき、その大小関係が時刻 T まで保存される、という性質である。そこで界面の近傍で値が -1 から 1 に移り変わるような劣解と優解を構成し、比較原理によって解を評価することで収束定理を証明する。劣解と優解は界面からの距離関数と、進行波解なる $v(x,t) = q(\varepsilon^{-1}x \cdot e - \varepsilon^{-2}ct)$ の形で与えられる解のアイデアから構成される。

本講演では初期曲面 Γ_0 をコンパクトな曲面とし、有限時間での界面の動きを考える。したがって界面はある大きな立方体 Q の内部に留まる。そこで本講演では各方程式を周期境界条件を導入して考える。各方程式の解の存在は [ElS2]、[CGG]、[ES] を参照せよ。また本講演では粘性解を単に解と言い、全て粘性解の意味で考える。厳密な証明は粘性解の理論を介してなされるが、ここでは話の簡略化のために解を滑らかなものとして通常の微分のように計算する。粘性解の詳しい定義等は [CIL] を参照せよ。

2.　主結果

2.1.　Modified Allen–Cahn 方程式

本講演では非等方的 Allen–Cahn 方程式による界面運動の近似を、Evans–Soner–Souganidis([ESS]) の手法から考察する。この手法では Allen–Cahn 方程式の優解と劣解を構成し、比較定理を用いて解を評価する。ところが (1.1) は β による $\nabla v = 0$ での特異性が非常に強く、比較定理が得られない。Elliott–Schätzle([ElS2]) はこの困難を、比較定理を改良することで克服した。しかしここでは (1.1) を、[ElPS] にあるような比較定理が容易に得られる形に変形する。

関数 $\zeta\colon [0,\infty) \to \mathbb{R}$ を滑らかな関数で次をみたすものとする。

$$\zeta(\sigma) = \begin{cases} 1 & \text{if } \sigma \le 1/2, \\ 0 & \text{if } \sigma \ge 3/4. \end{cases}$$

これを用いて $\tilde{\beta}\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を

$$\tilde{\beta}(p) = (1 - \zeta(|p|))\beta(p) + \Lambda_\beta \zeta(|p|)$$

と定義する。そして (1.1) のかわりに次の方程式を考える。

$$\tilde{\beta}(\nabla v)\partial_t v - \operatorname{div}\{\gamma(\nabla v) D\gamma(\nabla v)\} + \frac{1}{\varepsilon^2}(f(v) - \varepsilon\lambda a) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^n \times (0,T). \tag{2.1}$$

方程式 (2.1) の (1.1) に対する優位性は粘性解の理論がそのまま適用できること、とくに一般の比較定理が成立することである。

2.2.　距離関数

Allen–Cahn 方程式では通常の距離で Γ_t からの符号つき距離関数を導入した。しかし (1.1) や (2.1) の考察では γ の支持関数から得られる非等方的な' 距離' を導入する方がより適切である。

関数 γ の支持関数 γ° を

$$\gamma^\circ(p) := \sup\{p \cdot q;\ \gamma(q) \le 1\}$$

で定義する。これを用い、非等方的な' 距離'$d(x,y)$ を

$$d(x,y) := \gamma^\circ(x-y)$$

で定義する。部分集合 K と点 x の距離は

$$d(x,K) := \inf\{d(x,y);\ y \in K\}$$

で与えられる。界面 $\Gamma_t = \{x;\ u(x,t) = 0\}$ の符号つき距離関数 $d(x,t)$ は

$$d(x,t) := \begin{cases} d(x,\Gamma_t) & \text{if } x \in \{y;\ u(y,t) \ge 0\}, \\ -d(x,\Gamma_t) & \text{if } x \in \{y;\ u(y,t) < 0\} \end{cases}$$

で定義する。

2.3. 進行波解

進行波解は、Allen–Cahn 方程式における進行波解と同じものを導入する。次の常微分方程式をみたす定数 c と関数 q の組 (c,q) を考える。

$$\begin{cases} q'' + cq' = f(q) - \varepsilon\lambda a \quad \text{in } \mathbb{R}, \\ q(\pm\infty) = h_\pm,\ q(0) = h_0. \end{cases} \tag{2.2}$$

Aronson–Weinberger([AW]) は (c,q) の組の一意存在を証明している。また、Barles–Soner–Souganidis([BSS]) は (c,q) が h_-、h_0、h_+ から得られることを示している。以下に q の性質をまとめておく。

(i) 次をみたす $\hat{\varepsilon}$ が存在する; 正の定数 C_1、C_2、C_3 で任意の $\varepsilon \in (0,\hat{\varepsilon})$ に対し

$$\left.\begin{aligned} |q(s)^2 - 1| &\le C_1 \exp(-C_2|s|) + C_3\varepsilon, \\ |q'(s)| &\le C_1 \exp(-C_2|s|), \\ |q''(s)| &\le C_1 \exp(-C_3|s|) \end{aligned}\right\} \quad \text{for } s \in \mathbb{R}$$

をみたすものが存在する。

(ii) 任意の $R > 0$ に対し

$$\inf_{\varepsilon\in(0,\hat{\varepsilon})} \inf_{s\in[-R,R]} q'(s) > 0$$

が成り立つ。

2.4. 収束定理

主結果を述べる。

Theorem 2.1. *(A1)–(A5)* を仮定する。O_0 を有界な開集合とし、$\Gamma_0 = \partial O_0$ とする。$d_0 \colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を O_0 で正である Γ_0 の符号つき距離関数とする。u は d_0 を初期値とする (1.7) の解とし、$d(x,t)$ を Γ_t の符号つき距離関数とする。v は $q(d_0/\varepsilon)$ を初期値とする (2.1) の解とする。このとき、任意の $\theta > 0$ に対し次をみたす $\delta = \delta(\theta)$、$\varepsilon_0 = \varepsilon_0(\theta, \Lambda_\beta, \Lambda_\gamma)$、$C = C(\theta, \Lambda_\beta, \Lambda_\gamma)$ が存在する*;*
任意の $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$、$(x,t) \in \{(y,s);\ d(y,s) \le -\theta\}$ に対し

$$v(x,t) \le -1 + C_1 \exp\left(-\frac{C_2\delta}{\varepsilon}\right) + C\varepsilon \tag{2.3}$$

となる。

上の評価から $\varepsilon \to 0$ として $\{u < 0\}$ 上局所一様に $v \to -1$ を得る。$\{u > 0\}$ 上での評価は $-v$ と $-u$ がみたす方程式、すなわち各項を $\bar{\beta}(p) = \beta(-p)$、$\bar{\gamma}(p) = \gamma(-p)$、$\bar{f}(\sigma) = f(-\sigma)$、$\bar{a} = -a$ に置き換えた非等方的 Allen–Cahn 方程式と非等方的平均曲率流方程式の等高面方程式を考え、上の議論を繰り返せばよい。

上の結果の重要な応用としてクリスタラインによる界面の運動の Allen–Cahn 方程式による近似を考える。クリスタラインによる界面の運動は表面エネルギー密度関数 γ が滑らかさを持たない、または $\partial\{\gamma \le 1\}$ が平らな面を持つような状況での非等方的平均曲率流方程式による運動として与えられる。Taylor([T]) などによって定式化されていて、Y. Giga–M.-H. Giga([GG]) が空間 2 次元でクリスタラインによる界面の運動の等高線法を与えている。我々の主結果は収束定理が γ の微分に依存しないことを示している。このことから、滑らかでない γ を近似する γ_τ を用いた非等方的 Allen–Cahn 方程式によりクリスタラインによる界面の運動の近似が得られる。

3. 証明のアイデア

主結果の証明は [ESS] の手法にそって解を評価するための優解を構成する。具体的には [ESS] の方法で次をみたす関数 $\psi = \psi_{\varepsilon,\delta}$ を構成する。

(i) 任意の θ に対しある $\delta > 0$、$C > 0$ で $\{(y, s);\ d(y, s) \le -\theta\}$ 上 (2.3) をみたす。

(ii) 任意の $\delta > 0$ に対しある $\varepsilon_0 > 0$ で任意の $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ に対し ψ は (1.1) の優解である。

(iii) $\psi(x, 0) \le q(d_0(x)/\varepsilon)$.

この構成した ψ が (2.1) の優解でもあることを証明する。

$$R_\varepsilon = \beta(\nabla\psi)\partial_t\psi - \mathrm{div}\{\gamma(\nabla\psi)D\gamma(\nabla\psi)\} + \frac{1}{\varepsilon^2}(f(\psi) - \varepsilon\lambda a)$$
$$\tilde{R}_\varepsilon = \tilde{\beta}(\nabla\psi)\partial_t\psi - \mathrm{div}\{\gamma(\nabla\psi)D\gamma(\nabla\psi)\} + \frac{1}{\varepsilon^2}(f(\psi) - \varepsilon\lambda a)$$

とおくと、直接計算から

$$\tilde{R}_\varepsilon = R_\varepsilon + (\Lambda_\beta - \beta(\nabla\psi))\zeta(|\nabla\psi|)\partial_t\psi$$

となることがわかる。したがってあとは $\partial_t\psi$ の評価が得られれば良い。

この $\partial_t\psi$ の評価が主結果の証明のもっとも重要なポイントである。何故ならばこの項を評価する際の証明において、[ElS2] は γ の微分のノルムを評価に用いているからである。その評価におけるもっとも重要な点は

$$\mathrm{div} D\gamma(D\gamma^\circ(p))$$

なる項の評価である。[ElS2] はこの項の評価を微分の直接計算から与えている。これに対し我々はこの項について、凸解析の理論を用いることにより

$$\mathrm{div} D\gamma(D\gamma^\circ(p)) = \frac{n-1}{\gamma^\circ(p)}$$

なる等式を得た。これにより γ の微分の依存なしに収束の評価を得ることができた。

References

[AC] S. Allen and J. Cahn, A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsing, Acta Metall 27(1979), 1084–1095

[AW] D. G. Aronson and H. F. Weinberger, Multidimensional nonlinear diffusion arising in population genetics, Adv. in Math., 30(1978), 33–76

[BSS] G. Barles, H. M. Soner and P. E. Souganidis, Front propagation and phase field theory, SIAM J. Cont. Opt. 31(1993), 439–469

[C] X. Chen, Generation and propagation of interface in reaction-diffusion equations, J. Differential Equations, 96(1992), 116–141

[CGG] Y.-G. Chen, Y. Giga and S. Goto, Uniqueness and existence of viscosity solutions of generalized mean curvature flow equations, J. Differential Geometry, 33(1991), 749–786

[CIL] M. G. Crandall, H. Ishii and P. L. Lions, User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations, Bull. Amer. Math. Soc., 27(1992), 1–67

[ElPS] C. M. Elliott, M. Paolini and R. Schätzle, Interface estimates for the fully anisotropic Allen-Cahn equation and anisotropic mean-curvature flow, Math. Models Methods. Appl. Sci., 6(1996), 1103–1118

[ElS1] C. M. Elliott and R. Schätzle, The limit of the anisotropic double-obstacle Allen-Cahn equation, Proc. Royal Soc. Edinburgh 126A(1996), 1217–1234

[ElS2] C. M. Elliott and R. Schätzle, The limit of the fully anisotropic double-obstacle Allen-Cahn equation in the nonsmooth case, SIAM J. Math. Anal., 28(1997), 274–303

[ES] L. C. Evans and J. Spruck, Motion of level sets by mean curvature, I, J. Differential Geometry, 33(1991), 635–681

[ESS] L. C. Evans, H. M. Soner and P. E. Souganidis, Phase transitions and generalized motion by mean curvature, Comm. Pure Appl. Math., 45(1992), 1097–1123

[GG] M.-H. Giga and Y. Giga, Generalized motion by nonlocal curvature in the plane, Arch. Ration. Mech. Anal., 159(2001), 295–333

[MWBCS] G. B. McFadden, A. A. Wheeler, R. J. Braun, S. R. Coriell and R. F. Sekerka, Phase field models for anisotropic interfaces, Phys. Rev. E, 48(1993), 2016–2024

[RSK] J. Rubinstein, P. Sternberg and J. B. Keller, Fast reaction, slow diffusion, and curve shortening, SIAM J. Appl. Math., 49(1989), 116–133

[T] J. Taylor, Constructions and conjectures in crystalline nondifferential geometry, In: Differential Geometry (eds. B. Lawson and K. Tanenblat), Proceedings of the Conference on Differential Geometry, Rio de Janeiro, Pitman Monographs in Pure and Applied Math., **52** (1991) pp.321–336, Pitman, London