

力学的境界条件下における 結晶粒界運動数理モデルの解の表現について

中屋敷 亮太 (NAKAYASHIKI, Ryota)*

千葉大学大学院 理学研究科 基盤理学専攻 数学・情報数理学コース 博士後期課程 3 年

概要

本講演では, 結晶粒界運動の数理モデルによるシステムを考える. このモデルは 2 つの放物型偏微分方程式の連立系で構成されている自由境界値問題である. 特異拡散を含む方程式に対して力学的境界条件を課して数学的観点から考察を行う. 劣微分作用素に支配される発展方程式によるアプローチからシステムの可解性及び, 解の数学的表現について詳しく説明する.

1 導入

$1 < N \in \mathbb{N}$, $T > 0$, $\kappa > 0$ はそれぞれ固定された定数とする. $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ は十分滑らかな境界 $\Gamma := \partial\Omega$ を持つ空間を表す有界領域とし, n_Γ は外向き単位法線ベクトルを表す. また $Q := (0, T) \times \Omega$ を時間区間 $(0, T)$ と領域 Ω との直積集合とし, $\Sigma := (0, T) \times \Gamma$ とする.

本稿では $\varepsilon \geq 0$ に対し, **Kobayashi–Warren–Carter 型システム** と呼ばれる以下の偏微分方程式による初期値境界値問題のシステム $(S)_\varepsilon$ を考える.

$$(S)_\varepsilon: \begin{cases} \partial_t \eta - \Delta \eta + g(\eta) + \alpha'(\eta)|\nabla \theta| = 0 \text{ in } Q, \\ \nabla \eta|_\Gamma \cdot n_\Gamma = 0 \text{ on } \Sigma, \\ \eta(0, x) = \eta_0(x), x \in \Omega, \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \alpha_0(\eta) \partial_t \theta - \operatorname{div} \left(\alpha(\eta) \frac{\nabla \theta}{|\nabla \theta|} + \kappa^2 \nabla \theta \right) = 0 \text{ in } Q, \\ \partial_t \theta_\Gamma - \Delta_\Gamma (\varepsilon^2 \theta_\Gamma) + \left(\alpha(\eta) \frac{\nabla \theta}{|\nabla \theta|} + \kappa^2 \nabla \theta \right)|_\Gamma \cdot n_\Gamma = 0, \text{ and} \\ \theta|_\Gamma = \theta_\Gamma \text{ on } \Sigma, \\ \theta(0, x) = \theta_0(x), x \in \Omega, \text{ and } \theta_\Gamma(0, y) = \theta_{\Gamma,0}(y), y \in \Gamma. \end{cases} \quad (2)$$

特に問題 (2) の方程式には**特異拡散**と呼ばれる次の項:

$$\operatorname{div} \left(\alpha(\eta) \frac{\nabla \theta}{|\nabla \theta|} + \kappa^2 \nabla \theta \right), \quad (3)$$

が含まれており, これによって強い特異性を伴う非線形偏微分方程式であることを表す.

システム $(S)_\varepsilon$ は R. Kobayashi, J. A. Warren, W. C. Carter (cf. [6]) による「多結晶体内の結晶粒界運動を記述する数理モデル」に基づいて構成されたシステムとして知られる. 一般に金属材料は結晶粒と呼ばれる, 原子配列の向きが異なる領域を多数もつ構造を

*e-mail: nakayashiki1108@chiba-u.jp

している. この結晶粒の境界が結晶粒界と呼ばれており, 多結晶体内で原子配列の乱れた領域に対応している. この原子配列の乱れ方は結晶粒界を作る 2 つの結晶粒の向きによって異なることから, Kobayashi, et al. は結晶粒界を数学的に制御することを目的とした上記 (S)_ε のような偏微分方程式によるシステムを提唱し, 数値シミュレーション及び解析的な解の構成について議論している [6].

一般に Kobayashi–Warren–Carter 型システムは, 自由エネルギーと呼ばれる物理量を表す汎関数の勾配流として与えられ, (S)_ε の場合は以下の汎関数 $\mathcal{F}_\varepsilon$ が対応する.

$$\begin{aligned} [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in L^2(\Omega)^2 \times L^2(\Gamma) &\mapsto \mathcal{F}_\varepsilon(\eta, \theta, \theta_\Gamma) := \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla \eta|^2 dx + \int_\Omega G(\eta) dx \\ &+ \int_\Omega \left(\alpha(\eta) |\nabla \theta| + \frac{\kappa^2}{2} |\nabla \theta|^2 \right) dx + \frac{1}{2} \int_\Gamma |\nabla_\Gamma(\varepsilon \theta_\Gamma)|^2 d\Gamma, \\ \text{if } [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in H^1(\Omega)^2 \times H^{1/2}(\Gamma), \varepsilon \theta_\Gamma \in H^1(\Gamma), \text{ and } \theta|_\Gamma &= \theta_\Gamma \text{ on } \Gamma. \end{aligned}$$

ここに未知変数 $\eta = \eta(t, x)$ と $\theta = \theta(t, x)$ は, それぞれ多結晶体内の結晶粒の「配向度」と「方位角」を表す相関数である. また未知変数 θ_Γ は方位角 θ の境界熱源として与えられる Σ 上の関数である. $g = g(\eta)$ は Lipschitz 連続な関数とし, $0 \leq G \in W^{2,\infty}(\mathbb{R})$ は g の原始関数を表す. $0 < \alpha_0 \in W_{\text{loc}}^{1,2}(\mathbb{R})$ と $0 < \alpha \in C^2(\mathbb{R})$ はそれぞれ速度のモビリティと空間拡散のモビリティであり, $\alpha' = \frac{d}{d\eta} \alpha$ である. さらに, “ $|_\Gamma$ ” は Γ 上のトレース (境界値) を表し, $d\Gamma$ は Γ の面積要素を表す. ∇_Γ は Γ 上の勾配を表し, Δ_Γ は Laplace–Beltrami 作用素を表す. $\eta_0, \theta_0 \in L^2(\Omega)$ と $\theta_{\Gamma,0} \in L^2(\Gamma)$ はそれぞれ与えられた初期値である. また自由エネルギーに現れる

$$[\eta, \theta] \mapsto \int_\Omega \alpha(\eta) |\nabla \theta| dx,$$

は全変動汎関数と呼ばれる特異拡散に対応する non-smooth な汎関数である.

結晶粒界運動を記述する数理モデルに対する解析は様々な状況下で研究の成果が挙げられている (cf. [4, 7, 8, 12]) が, 多くの先行研究では外力を定数とする等の静的な状況に的が絞られている. そこで本研究では θ に関する初期値境界値問題 (2) に対して力学的境界条件と呼ばれる境界条件を課したシステムを考察する. この境界条件は未知変数 $\theta_\Gamma : \Sigma \rightarrow \mathbb{R}$ をもつ放物型偏微分方程式と, 接合条件 “ $\theta|_\Gamma = \theta_\Gamma$ on Σ ” から構成されており, Ω の外部が時間とともに動的に変化する状況を再現している. 本研究では, 実際の物理現象においてより高度な動的変化にも対応可能な数学理論を確立することを大きな目標としており, 本稿では特にシステム (S)_ε の可解性について詳しく述べる.

システム (S)_ε は 3 つの未知変数 $[\eta, \theta, \theta_\Gamma]$ をもつ初期値境界値問題である. 本研究では (S)_ε の可解性を議論するために, 自由エネルギー $\mathcal{F}_\varepsilon$ を次のように変形した.

$$\mathcal{F}_\varepsilon(u) = \Phi_\varepsilon(u) + \int_\Omega G(\eta) dx - \frac{1}{2\kappa^2} \int_\Omega (\alpha(\eta))^2 dx;$$

with

$$\begin{aligned} u = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in D(\mathcal{F}_\varepsilon) &\mapsto \Phi_\varepsilon(u) = \Phi_\varepsilon(\eta, \theta, \theta_\Gamma) \\ &:= \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla \eta|^2 + \left(\frac{1}{\kappa} \alpha(\eta) + \kappa |\nabla \theta| \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_\Gamma |\nabla_\Gamma(\varepsilon \theta_\Gamma)|^2 d\Gamma. \end{aligned}$$

さらに解を次のような関数の組:

$$\begin{cases} u(t) = [\eta(t), v(t)] = [\eta(t), \theta(t), \theta_\Gamma(t)] \text{ in } \mathcal{H} := L^2(\Omega)^2 \times L^2(\Gamma) \\ \text{with } v(t) = [\theta(t), \theta_\Gamma(t)] \in H := L^2(\Omega) \times L^2(\Gamma), \text{ for any } t \in [0, T], \\ u_0 = [\eta_0, v_0] = [\eta_0, \theta_0, \theta_{\Gamma,0}] \text{ in } \mathcal{H} \text{ with } v_0 = [\theta_0, \theta_{\Gamma,0}] \in H, \end{cases}$$

として捉え, システムを次のような凸関数 Φ_ε の劣微分作用素に支配された発展方程式による **Cauchy 問題**とみなして考察を行った.

$$\begin{cases} A_0(u(t))u'(t) + \partial\Phi_\varepsilon(u(t)) + \mathcal{G}(u(t)) \ni 0 \text{ in } \mathcal{H}, \text{ a.e. } t \in [0, T], \\ u(0) = u_0 \text{ in } \mathcal{H}. \end{cases} \quad (4)$$

ここに A_0 は行列の値をとる作用素とし, $\mathcal{G} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ は Lipschitz 作用素としてそれぞれ次のように定義する.

$$u = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in \mathcal{H} \mapsto A_0(u) = A_0(\eta) := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_0(\eta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}; \mathcal{H}),$$

$$u = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in \mathcal{H} \mapsto \mathcal{G}(u) = \mathcal{G}(\eta) := {}^t[g(\eta) - \kappa^{-2}\alpha'(\eta)\alpha(\eta), 0, 0] \in \mathcal{H}.$$

また $\partial\Phi_\varepsilon$ は次で定義される凸関数 Φ_ε の劣微分作用素を表す.

定義 1 (劣微分作用素の定義). X は Hilbert 空間 とする. X 上の適正下半連続凸 (汎) 関数 ϕ を考える. このとき, 劣微分作用素 (以下, 劣微分) $\partial\phi$ は任意の $z_0 \in X$ に対し, 以下の変分不等式によって定義される.

$$(z_0^*, z - z_0)_X \leq \phi(z) - \phi(z_0), \text{ for any } z \in D(\phi).$$

ここに, $(\cdot, \cdot)_X$ は Hilbert 空間上の内積を表し, $D(\phi)$ は凸関数 ϕ の有効領域を表す.

劣微分は汎関数に対する弱微分のような位置づけであり, 特に本問題のような non-smooth な関数を扱う際に有効であるとされる. また一般に劣微分は, $X^2 := X \times X$ 上の集合値関数で与えられる極大単調作用素であることが知られている (cf [1–3, 5]). このことから非線形発展方程式の一般論 [2, 3] を用いることにより, Cauchy 問題 (4) は次の意味での解の存在が容易に示すことが可能である.

定義 2 (解の定義). 任意の $\varepsilon \geq 0$ に対して, 次の条件 (S1)–(S3) を満たす 3 つ組の関数 $u = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in L^2(0, T; \mathcal{H})$ を Cauchy 問題 (4) の解であるという.

$$(S1) \quad u = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in W^{1,2}(0, T; \mathcal{H}) \cap L^\infty(0, T; D(\Phi_\varepsilon)),$$

$$0 \leq \eta \leq 1, \quad m_0 \leq \theta \leq M_0, \text{ a.e. in } Q, \text{ and } m_0 \leq \theta_\Gamma \leq M_0, \text{ a.e. on } \Sigma.$$

(S2) η は初期条件 $\eta(0) = \eta_0$ in $L^2(\Omega)$ と次の変分等式を満たす.

$$\begin{aligned} \int_\Omega (\partial_t \eta(t) + g(\eta(t)) + \alpha'(\eta)|\nabla \theta(t)|) \varphi \, dx + \int_\Omega \nabla \eta(t) \cdot \nabla \varphi \, dx &= 0, \\ \text{for any } \varphi \in H^1(\Omega), \text{ a.e. } t \in [0, T]. \end{aligned}$$

(S3) $[\theta, \theta_\Gamma]$ は初期条件 $[\theta(0), \theta_\Gamma(0)] = [\theta_0, \theta_{\Gamma,0}]$ in H を満たし, 次の変分不等式を満たす.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \alpha_0(\eta(t)) \partial_t \theta(t) (\theta(t) - \psi) dx + \int_{\Omega} \nabla \theta(t) \cdot \nabla (\theta(t) - \psi) dx \\ & + \int_{\Gamma} \partial_t \theta_\Gamma(t) (\theta_\Gamma(t) - \psi_\Gamma) d\Gamma + \int_{\Gamma} \nabla_\Gamma(\varepsilon \theta_\Gamma(t)) \cdot \nabla_\Gamma(\varepsilon (\theta_\Gamma(t) - \psi_\Gamma)) d\Gamma \\ & + \int_{\Omega} \alpha(\eta(t)) |\nabla \theta(t)| dx \leq \int_{\Omega} \alpha(\eta(t)) |\nabla \psi| dx, \text{ for } t \in [0, T], \\ & \text{for any } [\psi, \psi_\Gamma] \in H^1(\Omega) \times H^{1/2}(\Gamma), \varepsilon \theta_\Gamma \in H^1(\Gamma), \text{ and } \theta|_\Gamma = \theta_\Gamma \text{ on } \Gamma. \end{aligned}$$

複雑に見えるシステムも Cauchy 問題として定式化すると上記の意味で解の存在は簡単に示すことが可能になるが, ここでいう「解」が果たしてシステムの厳密な「解」とすることができるかどうかは不明瞭である. そのことを踏まえ, 本研究では上記で定義された Cauchy 問題 (4) の解をシステム $(S)_\varepsilon$ の解として特徴づけることが主目的である. そのためにまず $(S)_\varepsilon$ 自身の可解性を別の方法 (時間離散化法という) で示し, Cauchy 問題の解がシステムの解であるか検証するために「解の数学的表現」を明らかにする. 本稿では以下の主定理を示す.

主定理 システム $(S)_\varepsilon$ は少なくとも一つ解が存在し, 上記の定義を満たす Cauchy 問題 (4) の解はシステムの解である.

2 記号の準備

$d \in \mathbb{N}$ を任意の次元とする. 任意の $a, b \in \mathbb{R}^d$ に対して, $|a|$ は通常の Euclid ノルム, $a \cdot b$ を通常のスカラー積とする. また $a \otimes b$ をテンソル積とする. $\mathcal{L}^d$ を d 次元 Lebesgue 測度, $\mathcal{H}^d$ を d 次元 Hausdorff 測度とする. 滑らかな境界 S に対して, S 上の面積要素を dS と書くことにする.

X を Banach 空間とすると, $|\cdot|_X$ は X のノルムとし, $\langle \cdot, \cdot \rangle_X$ は X と X^* との双対写像を表す. また $\mathcal{I}_X : X \rightarrow X$ は X 上の恒等写像を表す. もし X が Hilbert 空間ならば, $(\cdot, \cdot)_X$ は内積と定義する.

次に主定理の証明の鍵となる凸関数の収束, “Mosco 収束” を定義する.

定義 3 (Mosco 収束: cf. [9]). X を Hilbert 空間 とする. $\phi : X \rightarrow (-\infty, \infty]$ を適正下半連続凸関数, $\{\phi_n\}_{n=1}^\infty \subset X$ を適正下半連続凸関数の列で, $\phi_n : X \rightarrow (-\infty, \infty]$, $n \in \mathbb{N}$ とする. このとき, ϕ_n が ϕ に **Mosco 収束** するとは, 次の (M1), (M2) を満たすことをいう.

(M1) Lower-bound: 任意の $\tilde{z} \in X$ と $\{\tilde{z}_n\}_{n=1}^\infty \subset X$ に対して, “ $\tilde{z}_n \rightarrow \tilde{z}$ weakly in X , as $n \rightarrow \infty$ ” を満たすならば, “ $\liminf_{n \rightarrow \infty} \phi_n(\tilde{z}_n) \geq \phi(\tilde{z})$ ” が成り立つ.

(M2) Optimality: 任意の $\hat{z} \in D(\phi)$ に対して, 次を満たす列 $\{\hat{z}_n\}_{n=1}^\infty \subset X$ が存在する:

$$\hat{z}_n \rightarrow \hat{z} \text{ in } H \text{ and } \phi_n(\hat{z}_n) \rightarrow \phi(\hat{z}), \text{ as } n \rightarrow \infty.$$

次に境界に関して、記号を整理する。本稿を通して $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ は滑らかな境界 $\Gamma := \partial\Omega$ をもつ有界領域とし、 $n_\Gamma \in C^\infty(\Omega)^N$ は外向き単位法線ベクトルとする。さらに、距離 $x \in \mathbb{R}^N \mapsto d_\Gamma(x) := \inf_{y \in \Gamma} |x - y| \in \mathbb{R}$ と定義する。この距離関数は Γ 上の近傍で C^∞ -関数を形成する。これらを基に、**Laplace–Beltrami** 作用素 “ Δ_Γ ” を定義する。そのために、 Γ 上の勾配を表す “ ∇_Γ ” (surface-gradient) および、 Γ 上の発散を表す “ div_Γ ” (surface-divergence) を次のように定義する (cf. [11]).

$$\begin{cases} \bullet \varphi \in C^1(\Gamma) \mapsto \nabla_\Gamma \varphi := \nabla \varphi^{\text{ex}} - (\nabla d_\Gamma \otimes \nabla d_\Gamma) \nabla \varphi^{\text{ex}} \in L^2_{\text{tan}}(\Gamma) \cap C(\Gamma)^N; \\ \bullet \omega \in C^1(\Gamma)^N \mapsto \text{div}_\Gamma \omega := \text{div} \omega^{\text{ex}} - \nabla(\omega^{\text{ex}} \cdot \nabla d_\Gamma) \cdot \nabla d_\Gamma \in C(\Gamma). \end{cases}$$

ここに、

$$L^2_{\text{tan}}(\Gamma) := \{ \tilde{\omega} \in L^2(\Gamma)^N \mid \tilde{\omega} \cdot n_\Gamma = 0 \text{ on } \Gamma \}$$

である。 ∇_Γ は $H^1(\Gamma)$ から $L^2_{\text{tan}}(\Gamma)$ への線形作用素として拡張することができ、その拡張は Hilbert 空間 $H^1(\Gamma)$ の内積を用いて、次のように表せる。

$$(\varphi, \psi)_{H^1(\Gamma)} := (\varphi, \psi)_{L^2(\Gamma)} + (\nabla_\Gamma \varphi, \nabla_\Gamma \psi)_{L^2(\Gamma)^N}, \text{ for } \varphi, \psi \in H^1(\Gamma).$$

さらに div_Γ は $L^2(\Gamma)^N$ から $H^{-1}(\Gamma)$ への作用素として拡張可能である。これを踏まえると、 $-\Delta_\Gamma = -\text{div}_\Gamma \circ \nabla_\Gamma : H^1(\Gamma) \rightarrow H^{-1}(\Gamma)$ は双対写像を用いて、次のように表せる。

$$\langle -\Delta_\Gamma \varphi, \psi \rangle_{H^1(\Gamma)} = (\nabla_\Gamma \varphi, \nabla_\Gamma \psi)_{L^2(\Gamma)^N}, \text{ for } [\varphi, \psi] \in H^1(\Gamma)^2.$$

この節の最後に、本問題を考察する上で重要な定理を紹介する。

定理 1 (boundary operator). $\omega \in H^1(\Omega)^N \mapsto \omega|_\Gamma n_\Gamma \in H^{1/2}(\Gamma)$ は次で与えられる有界線形汎関数 $[(\cdot)|_\Gamma \cdot n_\Gamma] : L^2_{\text{div}}(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Gamma)$ が存在する (cf. [5]).

$$\begin{aligned} \langle [\omega|_\Gamma \cdot n_\Gamma], z|_\Gamma \rangle_{H^{1/2}(\Gamma)} &:= \int_\Omega \text{div} \omega z \, dx + \int_\Omega \omega \cdot \nabla z \, dx, \\ \text{for all } \omega \in L^2_{\text{div}}(\Omega) &:= \{ \tilde{\omega} \in L^2(\Omega)^N \mid \text{div} \tilde{\omega} \in L^2(\Omega) \}, \text{ and } z \in H^1(\Omega), \end{aligned}$$

3 主定理

まず以下の仮定を設定する。簡単のため、関数空間 $\mathcal{H} := L^2(\Omega)^2 \times L^2(\Gamma)$, $H := L^2(\Omega) \times L^2(\Gamma)$ とする。また、次の2つの関数空間 (Hilbert 空間) を定義する。

$$\begin{aligned} \bullet V_\varepsilon &:= \left\{ w = [\xi, \xi_\Gamma] \in H \mid \begin{array}{l} \xi \in H^1(\Omega), \xi_\Gamma \in H^{1/2}(\Gamma), \varepsilon \xi_\Gamma \in H^1(\Gamma), \\ \text{and } \xi|_\Gamma = \xi_\Gamma \text{ in } H^{1/2}(\Gamma) \end{array} \right\}, \\ \bullet \mathcal{V}_\varepsilon &:= \left\{ z = [\zeta, w] \in \mathcal{H} \mid \zeta \in H^1(\Omega) \text{ and } w = [\xi, \xi_\Gamma] \in V_\varepsilon \right\}, \text{ for any } \varepsilon \geq 0. \end{aligned}$$

これらを踏まえ本研究における仮定を次のように設定する。

(A1) $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ は Lipschitz 連続な関数とし, $g(0) \leq 0$ and $g(1) \geq 0$ を満たす.
また $G : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ を g の原始関数とする.

(A2) $\alpha_0 : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty)$ は Lipschitz 連続な関数とする. また $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow (0, \infty)$ は $\alpha'(0) = 0$,
 $\alpha' \in L^\infty(\mathbb{R})$ を満たす C^2 -級の凸関数で, $\alpha\alpha'$ を $\mathbb{R}$ 上の Lipschitz 連続な関数とする.

(A3) 関数 α_0 と α は次を満たす定数 $\delta_\alpha > 0$ が存在する:

$$\alpha_0(\sigma) \geq \delta_\alpha \text{ and } \alpha(\sigma) \geq \delta_\alpha, \text{ for any } \sigma \in \mathbb{R}.$$

(A4) $m_0, M_0 \in \mathbb{R}$ は固定された定数とする. このとき, 任意の $\varepsilon \geq 0$ に対して初期値
 $u_0 = [\eta_0, \theta_0, \theta_{\Gamma,0}]$ は以下のクラス $\mathcal{D}_\varepsilon \subset \mathcal{H}$ に属する.

$$\mathcal{D}_\varepsilon := \left\{ [\zeta, \xi, \xi_\Gamma] \in \mathcal{V}_\varepsilon \mid \begin{array}{l} 0 \leq \zeta \leq 1, m_0 \leq \xi \leq M_0, \text{ a.e. in } \Omega, \\ \text{and } m_0 \leq \xi_\Gamma \leq M_0, \text{ a.e. on } \Gamma. \end{array} \right\}$$

Remark 1. 上の仮定 (A1)–(A3) を満たす関数の例として次が挙げられる (cf. [6]).

$$g(\sigma) = \sigma - 1 \text{ with } G(\sigma) = \frac{1}{2}(\sigma - 1)^2, \text{ and } \alpha_0(\sigma) = \alpha(\sigma) = \frac{\sigma^2}{2} + \delta_\alpha, \text{ for any } \sigma \in \mathbb{R}.$$

以上を踏まえて, 本稿の主定理を紹介する.

主定理 1 (可解性および解の数学的表現). すべての仮定の下で, Cauchy 問題 (4) は少なくとも一つの解 $u \in L^2(0, T; \mathcal{H})$ が存在する. 特に α_0 が定数関数であれば, 解は一意的に定まる. さらに, Cauchy 問題 (4) の解は Kobayashi–Warren–Carter システム $(S)_\varepsilon$ の解である. すなわち, 特異拡散に対応するベクトル場 $\nu^* \in L^\infty(\Omega)^N$ が存在し, 次の関係を満たす.

$$\nu^* \in \text{Sgn}(\nabla \theta), \text{ a.e. in } Q.$$

さらにこのベクトル場を用いると定義 2 の (S1)–(S3) を満たす Cauchy 問題の解 $u(t) = [\eta(t), \theta(t), \theta_\Gamma(t)]$ は任意の $t \in (0, T)$ に対して以下の偏微分方程式及び接合条件, 初期条件を満たす.

$$\begin{cases} \partial_t \eta(t) - \Delta_N \eta(t) + g(\eta(t)) + \alpha(\eta(t)) |\nabla \theta(t)| = 0 & \text{in } L^2(\Omega), \\ \alpha_0(\eta(t)) \partial_t \theta(t) - \text{div}(\alpha(\eta(t)) \nu^*(t) + \kappa^2 \nabla \theta(t)) = 0 & \text{in } L^2(\Omega), \\ \theta|_\Gamma(t) = \theta_\Gamma(t), \text{ a.e. on } \Gamma, \\ \partial_t \theta_\Gamma(t) - \Delta_\Gamma(\varepsilon^2 \theta_\Gamma(t)) + [(\alpha(\eta) \nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma](t) = 0 & \text{on } L^2(\Gamma), \\ \eta(0, \cdot) = \eta_0, \theta(0, \cdot) = \theta_0 & \text{in } \Omega, \text{ and } \theta_\Gamma(0, \cdot) = \theta_{\Gamma,0} & \text{on } \Gamma. \end{cases}$$

システム $(S)_\varepsilon$ の可解性を証明するためには「時間離散化法」と呼ばれる近似方法を用いる. ここではこれに関する証明は割愛し, 「数学的表現」についての証明を見ていくことにする.

4 証明のポイント

解の数学的表現を示すためには次の劣微分作用素の表現定理と呼ばれる重要補題を示す必要がある。主張は以下の通りである。

重要補題 1 (劣微分の表現定理). 任意の $\varepsilon \geq 0$ に対して, 次の二つは同値.

(Key 1) $u = [\eta, v] = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in D(\partial_v \Phi_\varepsilon)$ and $v^* = [\theta^*, \theta_\Gamma^*] \in \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, v) = \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \theta, \theta_\Gamma)$ in H , with $v = [\theta, \theta_\Gamma] \in V_\varepsilon$.

(Key 2) $u = [\eta, v] = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in \mathcal{V}_\varepsilon$ に対し, 以下を満たす $\nu^* \in L^\infty(\Omega)^N$ が存在する.

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \nu^* \in \text{Sgn}(\nabla \theta), \text{ a.e. in } \Omega, \\ \bullet \alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta \in L^2_{\text{div}}(\Omega), \\ \bullet -\Delta_\Gamma(\varepsilon^2 \theta_\Gamma) + [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma] \in L^2(\Gamma), \end{array} \right. \quad (5)$$

and

$$\left\{ \begin{array}{l} \bullet \theta^* = -\text{div}(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta) \text{ in } L^2(\Omega), \\ \bullet \theta_\Gamma^* = -\Delta_\Gamma(\varepsilon^2 \theta_\Gamma) + [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma] \text{ in } L^2(\Gamma). \end{array} \right. \quad (6)$$

劣微分の表現の 1 つの例として符号関数 (**Sgn 関数**) が挙げられる。主定理でも登場した符号関数は集合値関数 $\text{Sgn} : \mathbb{R}^N \rightarrow 2^{\mathbb{R}^N}$ として次のように定義される。

$$\omega \in \mathbb{R}^N \mapsto \text{Sgn}(\omega) := \begin{cases} \frac{\omega}{|\omega|}, & \text{if } \omega \neq 0, \\ \overline{\{x \in \mathbb{R}^d \mid |x| < 1\}}, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

関数 Sgn は Euclid ノルム $|\cdot| : \omega \in \mathbb{R}^N \mapsto |\omega| := \sqrt{\omega \cdot \omega} \in [0, \infty)$ の劣微分と一致する。すなわち, $\text{Sgn} = \partial|\cdot|$ である。

以下では, 重要補題 1 の証明について簡単に説明する。

Proof. 任意の $\varepsilon \geq 0$ に対して, 次のような集合値写像 $\mathcal{A}_\varepsilon : D(\mathcal{A}_\varepsilon) \subset \mathcal{H} \rightarrow 2^H$ を考える。

$$D(\mathcal{A}_\varepsilon) := \left\{ u = [\eta, v] = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in \mathcal{V}_\varepsilon \left| \begin{array}{l} \text{there exists } \nu^* \in L^\infty(\Omega)^N, \\ \text{such that (5) holds} \end{array} \right. \right\}, \quad (7)$$

and

$$\begin{aligned} u = [\eta, v] = [\eta, \theta, \theta_\Gamma] \in D(\mathcal{A}_\varepsilon) \subset \mathcal{H} &\mapsto \mathcal{A}_\varepsilon u = \mathcal{A}_\varepsilon[\eta, v] = \mathcal{A}_\varepsilon[\eta, \theta, \theta_\Gamma] \\ &:= \left\{ v^* = [\theta^*, \theta_\Gamma^*] \in H \left| \begin{array}{l} \text{(6) holds, for some } \nu^* \in L^\infty(\Omega)^N, \\ \text{satisfying (5)} \end{array} \right. \right\}. \end{aligned} \quad (8)$$

このとき 重要補題の主張は任意の $\varepsilon \geq 0$ と $\eta \in H^1(\Omega)$ に対して以下のように言い換えることができることに注意する:

$$\partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \cdot) = \mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot) \text{ in } H^2. \quad (9)$$

集合が一致することを示せばよいので、次の 2 つの Claim によって上の等式は示される。

Claim 1. $\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot) \subset \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \cdot)$ in H^2 , for any $\eta \in H^1(\Omega)$.

$\eta \in H^1(\Omega)$ は任意として、 $v = [\theta, \theta_\Gamma] \in D(\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot))$ と $v^* = [\theta^*, \theta_\Gamma^*] \in \mathcal{A}_\varepsilon(\eta, v) = \mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \theta, \theta_\Gamma)$ in H とする。このとき、(5)–(8) より次が成り立つ。

$$\begin{aligned}
(v^*, w - v)_H &= (\theta^*, \xi - \theta)_{L^2(\Omega)} + (\theta_\Gamma^*, \xi_\Gamma - \theta_\Gamma)_{L^2(\Gamma)} \\
&= \int_{\Omega} -\operatorname{div}(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)(\xi - \theta) dx \\
&\quad + \int_{\Gamma} \left(-\Delta(\varepsilon^2 \theta_\Gamma) + [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma] \right) (\xi_\Gamma - \theta_\Gamma) d\Gamma \\
&= \int_{\Omega} (\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta) \cdot \nabla(\xi - \theta) dx - \left\langle [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma], (\xi - \theta)|_\Gamma \right\rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \\
&\quad + \int_{\Gamma} \nabla_\Gamma(\varepsilon \theta_\Gamma) \cdot \nabla_\Gamma(\varepsilon(\xi_\Gamma - \theta_\Gamma)) d\Gamma + \left\langle [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma], \xi_\Gamma - \theta_\Gamma \right\rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \\
&\leq \int_{\Omega} \alpha(\eta)(|\nabla \xi| - |\nabla \theta|) dx + \frac{\kappa^2}{2} \int_{\Omega} (|\nabla \xi|^2 - |\nabla \theta|^2) dx \\
&\quad + \frac{1}{2} \int_{\Gamma} (|\nabla_\Gamma(\varepsilon \xi_\Gamma)|^2 - |\nabla_\Gamma(\varepsilon \theta_\Gamma)|^2) d\Gamma \\
&= \Phi_\varepsilon(\eta, w) - \Phi_\varepsilon(\eta, v), \text{ for all } \eta \in H^1(\Omega), \text{ and } w = [\xi, \xi_\Gamma] \in V_\varepsilon.
\end{aligned}$$

ここに定理 1, 劣微分の定義を用いた。再び劣微分の定義から以下が成り立つ。

$$v = [\theta, \theta_\Gamma] \in D(\partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \cdot)) \text{ and } v^* = [\theta^*, \theta_\Gamma^*] \in \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, v) = \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \theta, \theta_\Gamma) \text{ in } H.$$

よって、 $\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot) \subset \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, \cdot)$ in H^2 , となりさらにこのことから $\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot)$ が単調作用素であることがわかる。

Claim 2. $\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot)$ の極大性。

任意の H 上の元を $w = [\xi, \xi_\Gamma] \in H$ とする。Claim 1 から $\mathcal{A}_\varepsilon$ の単調性を示すことができたので、Minty's の定理を用いて極大性を示す。すなわち $H = (\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot) + \mathcal{I}_H)H$ (レゾルベントが全射であること) を示すが、明らかに $H \subset (\mathcal{A}_\varepsilon(\eta, \cdot) + \mathcal{I}_H)H$ を示せば十分であることがわかる。そのためには凸関数 Φ_ε にある全変動汎関数を次の関数の列 $\{f_\delta\}_{\delta>0} \subset C^1(\mathbb{R})$ で近似する。

$$\omega \in \mathbb{R}^N \mapsto f_\delta(\omega) := \sqrt{\delta^2 + |\omega|^2}, \text{ for any } \delta > 0. \quad (10)$$

この関数を全変動汎関数と置き換えた凸関数 Φ_ε^δ を考え、近似問題を考える。ここでは詳細を割愛させて頂くが、この近似した凸関数の劣微分作用素の表現定理を前もって示しておくことで (cf. [10, Key-Lemma 2]), 再び Minty の定理を用いれば関数列 $\{v^\delta = [\theta^\delta, \theta_\Gamma^\delta] \mid 0 < \delta \leq 1\} \subset V_\varepsilon$ に関して次が成り立つ：

$$w - v^\delta = \partial_v \Phi_\varepsilon^\delta(\eta, v^\delta) \text{ in } H, \text{ for any } 0 < \delta \leq 1. \quad (11)$$

(11) はすなわち次の変分不等式を満たすことを表している.

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (\alpha(\eta) \nabla f_{\delta}(\nabla \theta^{\delta}) + \kappa^2 \nabla \theta^{\delta}) \cdot \nabla \psi \, dx + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma}(\varepsilon \theta_{\Gamma}^{\delta}) \cdot \nabla_{\Gamma}(\varepsilon \psi_{\Gamma}) \, d\Gamma \\ &= \int_{\Omega} (\xi - \theta^{\delta}) \psi \, dx + \int_{\Gamma} (\xi_{\Gamma} - \theta_{\Gamma}^{\delta}) \psi_{\Gamma} \, d\Gamma, \text{ for all } [\psi, \psi_{\Gamma}] \in V_{\varepsilon} \text{ and } 0 < \delta \leq 1. \end{aligned} \quad (12)$$

ここで (12) において, $[\psi, \psi_{\Gamma}] = [\theta^{\delta}, \theta_{\Gamma}^{\delta}] \in V_{\varepsilon}$ を代入し, 仮定 (A2) と Young の不等式を用いることで以下が成り立つ:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} |v^{\delta}|_H^2 + \kappa^2 |\nabla \theta^{\delta}|_{L^2(\Omega)^N}^2 + |\nabla_{\Gamma}(\varepsilon \theta_{\Gamma}^{\delta})|_{L^2(\Gamma)^N}^2 \leq \frac{1}{2} |w|_H^2 + \delta \int_{\Omega} \alpha(\eta) \, dx \\ & \leq \frac{1}{2} |w|_H^2 + (\mathcal{L}^N(\Omega)^{\frac{1}{2}} |\eta|_{L^2(\Omega)} + \delta_{\alpha} \mathcal{L}^N(\Omega)), \text{ for any } 0 < \delta \leq 1. \end{aligned} \quad (13)$$

この不等式 (13) から $\{v^{\delta} \mid 0 < \delta \leq 1\} \subset V_{\varepsilon}$ 有界数列となる. さらに, ∇f_{δ} を計算すると以下のようになる:

$$|\nabla f_{\delta}(\nabla \theta_{\delta})| = \left| \frac{\nabla \theta^{\delta}}{\sqrt{\delta^2 + |\nabla \theta^{\delta}|^2}} \right| \leq 1, \text{ a.e. in } \Omega, \text{ for any } 0 < \delta \leq 1.$$

したがって, (A2) と上記二つの評価から, 関数列 $\{v_{\delta}\}_{\delta} > 0$ は弱点列コンパクトとなり, $\delta_n \downarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$ を満たす部分列 $\{\delta_n\}_{n=1}^{\infty} \subset (0, 1]$ と極限関数 $v = [\theta, \theta_{\Gamma}] \in V_{\varepsilon}$ が存在する. さらに Alaoglu の定理からベクトル場 $\nu^* \in L^{\infty}(\Omega)^N$ が存在し, 以下が成り立つ:

$$v_n = [\theta_n, \theta_{\Gamma,n}] := v^{\delta_n} = [\theta^{\delta_n}, \theta_{\Gamma}^{\delta_n}] \rightarrow v = [\theta, \theta_{\Gamma}] \text{ in } H, \text{ weakly in } V_{\varepsilon}, \text{ as } n \rightarrow \infty, \quad (14)$$

and

$$\nabla f_{\delta_n}(\nabla \theta_n) \rightarrow \nu^* \text{ weakly-* in } L^{\infty}(\Omega)^N, \text{ as } n \rightarrow \infty. \quad (15)$$

さて (14) と (15) からテスト関数 $\psi_0 \in H_0^1(\Omega)$ を (12) に代入すると, 次のようなる:

$$\int_{\Omega} (\alpha(\eta) \nu^* + \kappa^2 \nabla \theta) \cdot \nabla \psi_0 \, dx = (\xi - \theta, \psi_0)_{L^2(\Omega)}.$$

これはすなわち以下を表している:

$$-\operatorname{div}(\alpha(\eta) \nu^* + \kappa^2 \nabla \theta) = \xi - \theta \in L^2(\Omega) \text{ in } \mathcal{D}'(\Omega). \quad (16)$$

今のことをもとに, 定理 1 および (14)–(16) を用いると

$$\begin{aligned} (\xi_{\Gamma} - \theta_{\Gamma}, \psi_{\Gamma})_{L^2(\Gamma)} &= \int_{\Omega} (\alpha(\eta) \nu^* + \kappa^2 \nabla \theta) \cdot \nabla \psi \, dx - (\xi - \theta, \psi)_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + \int_{\Gamma} \nabla_{\Gamma}(\varepsilon \theta_{\Gamma}) \cdot \nabla_{\Gamma}(\varepsilon \psi_{\Gamma}) \, d\Gamma \\ &= \left\langle [(\alpha(\eta) \nu^* + \kappa^2 \nabla \theta)|_{\Gamma} \cdot n_{\Gamma}], \psi|_{\Gamma} \right\rangle_{H^{\frac{1}{2}}(\Gamma)} \\ &\quad + \left\langle -\Delta_{\Gamma}(\varepsilon \theta_{\Gamma}), \varepsilon \psi_{\Gamma} \right\rangle_{H^1(\Gamma)}, \text{ for any } [\psi, \psi_{\Gamma}] \in V_{\varepsilon}. \end{aligned}$$

が成り立ち、劣微分の表現定理が以下のように導ける:

$$-\Delta_\Gamma(\varepsilon^2\theta_\Gamma) + [(\alpha(\eta)\nu^* + \kappa^2\nabla\theta)|_\Gamma \cdot n_\Gamma] = \xi_\Gamma - \theta_\Gamma \in L^2(\Gamma) \text{ in } H^{-1}(\Gamma). \quad (17)$$

最後に, Mosco 収束 [10, Key-Lemma 4], (11) と (14) を用いると以下が成り立つ:

$$w - v \in \partial_v \Phi_\varepsilon(\eta, v) \text{ in } H, \text{ and } \Phi_\varepsilon^{\delta_n}(\eta, v_n) \rightarrow \Phi_\varepsilon(\eta, v), \text{ as } n \rightarrow \infty. \quad (18)$$

さらに凸関数の下半連続性が成り立つことから (18) により

$$\theta_n \rightarrow \theta \text{ in } H^1(\Omega) \text{ } (\nabla\theta_n \rightarrow \nabla\theta \text{ in } L^2(\Omega)^N), \text{ as } n \rightarrow \infty. \quad (19)$$

が成り立つ. (15), (19) 及び [3, Proposition 2.16] を用いれば

$$\nu^* \in \text{Sgn}(\nabla\theta), \text{ a.e. in } \Omega.$$

となり, Claim 2 が示されたことになるため, 重要補題 1 の証明が完了する. $\square$

参考文献

- [1] Attouch, H. *Variational Convergence for Functions and Operators*. Applicable Mathematics Series. Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1984.
- [2] Barbu, V. *Nonlinear Differential Equations of Monotone Types in Banach Spaces*. Springer Monographs in Mathematics. Springer, New York, 2010.
- [3] Brézis, H. *Opérateurs Maximaux Monotones et Semi-groupes de Contractions dans les Espaces de Hilbert*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam-London; American Elsevier Publishing Co., Inc., New York, 1973. North-Holland Mathematics Studies, No. 5. Notas de Matemática (50).
- [4] Ito, A.; Kenmochi, N.; Yamazaki, N. A phase-field model of grain boundary motion. *Appl. Math.*, **53**(5): 433–454, 2008.
- [5] Kenmochi, N. Solvability of nonlinear evolution equations with time-dependent constraints and applications. *Bull. Fac. Education, Chiba Univ.* <http://ci.nii.ac.jp/naid/110004715232>, **30**: 1–87, 1981.
- [6] Kobayashi, R.; Warren, J. A.; Carter, W. C. A continuum model of grain boundaries. *Phys. D*, **140**(1-2): 141–150, 2000.
- [7] Moll, S.; Shirakawa, K. Existence of solutions to the Kobayashi–Warren–Carter system. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, **51**(3-4): 621–656, 2014.
- [8] Moll, S.; Shirakawa, K.; Watanabe, H. Energy dissipative solutions to the Kobayashi–Warren–Carter system. *Nonlinearity*, **30**(7): 2752–2784, 2017.
- [9] Mosco, U. Convergence of convex sets and of solutions of variational inequalities. *Advances in Math.*, **3**: 510–585, 1969.
- [10] Nakayashiki, R. Quasilinear type Kobayashi–Warren–Carter systems including dynamic boundary conditions. *Adv. Math. Sci. Appl.*, **27**(1): 401–435, 2018.
- [11] Savaré, G.; Visintin, A. Variational convergence of nonlinear diffusion equations: applications to concentrated capacity problems with change of phase. *Atti Accad. Naz. Lincei Cl. Sci. Fis. Mat. Natur. Rend. Lincei (9) Mat. Appl.*, **8**(1): 49–89, 1997.
- [12] Shirakawa, K.; Watanabe, H. Energy-dissipative solution to a one-dimensional phase field model of grain boundary motion. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S*, **7**(1): 139–159, 2014.