

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 4 日現在

機関番号：32702

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2010～2013

課題番号：22740110

研究課題名(和文) 材料物質内の結晶粒界を記述する数理モデルの解析と数学理論の新展開

研究課題名(英文) Analysis of mathematical model of grain boundary motions in materials and evolution of mathematical theory

研究代表者

山崎 教昭 (YAMAZAKI, NORIAKI)

神奈川大学・工学部・教授

研究者番号：90333658

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円、(間接経費) 810,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、Kobayashi - Warren - Carter型の結晶粒界数理モデルを考察し、結晶粒界の漸近安定性に関する理論解析(時間無限大での解の漸近挙動、定常解の存在とその安定性、アトラクターの存在とその特徴付け)を行った。また、Kobayashi 達が提唱した本来の線形拡散項がない数理モデルの可解性を示した。更に、物質の状態を表す Allen-Cahn 方程式と結晶粒界運動方程式とを組み合わせた連立の数理モデルの解の存在を示した。また、強い特異性や非線形性をもつ液体固体相転移現象を記述する特異拡散方程式系に対する最適制御問題を提唱し、その解の存在と解になるための必要条件を示した。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we consider mathematical models of grain boundary motion in materials, which is a Kobayashi-Warren-Carter type. Then, we showed the asymptotic behavior of solutions, the existence and stability of stationary solutions and the existence and characterization of attractors. Also, we proved the solvability of the original Kobayashi-Warren-Carter model of grain boundary motion. Moreover, we showed the existence of solutions to a system of Allen-Cahn equation and grain boundary motion model of Kobayashi-Warren-Carter type. Also, we studied optimal control problems for phase field system with total variation functional as the interfacial energy. Then, we proved the existence of an optimal control that minimizes the nonlinear and nonsmooth cost functional. Moreover, we showed the necessary condition of the optimal pair.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・大域解析学

キーワード：関数方程式 非線形解析 非線形現象 自由境界 最適制御

1. 研究開始当初の背景

金属材料は、原子が規則正しく配列した構造をもっている。原子が規則正しく配列した構造を結晶構造という。しかし、実際の金属材料は、大きな塊が全て同じ原子配列をもっているわけではなく、配列の向きが異なる領域（これを結晶粒と言う）が多数集まった構造をもっている。この結晶粒の境界を結晶粒界と呼び、原子配列が乱れた領域に対応している。しかも、そ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。この結晶粒界での原子配列の乱れ方は、金属材料の性質にいろいろな影響を与える。先端科学技術の向上・開発には、状態変化過程における金属材料の結晶粒の構造解析や結晶粒界の挙動の制御の研究が必要不可欠で、重要である。

結晶粒界のダイナミクスに関しては、工学実験により数多く研究されている。その一方、理論解析結果は少ない。その大きな要因は、結晶粒(界)の動きはとても複雑な為、それを記述する適切な数理モデルがないからである。従って、理論研究も極めて少なく、合金の安全性(未来の状態予測)に関する理論研究は進んでいないのが現状である。

2000年、Kobayashi, Warren and Carter (Phys. D, 140(2000), 141--150)により、平面上の結晶粒界の動きを記述する空間領域2次元数理モデルが提唱され、それに対する近似問題の可解性に関して、最近、考察されている。

そこで、Kobayashi - Warren - Carter 型の結晶粒界数理モデルの理論解析を行いながら、結晶粒界の漸近安定性等の理論解析を試みることを計画した。

2. 研究の目的

本研究では、金属材料内の結晶粒界に関する理論解析を行う。具体的には、以下の3つの課題を研究目的とした。

(1) 結晶粒界のダイナミクスの解析

Kobayashi et al. により提唱された結晶粒界数理モデルを理論解析し、解の一意性なしで時間無限大での解の漸近挙動、安定性、及び、その性質を明らかにする。

(2) 特異拡散方程式系の最適制御問題

解の一意性が得られている、液体固体相転移現象を記述する特異拡散方程式系に対する最適制御問題の理論解析を行い、Kobayashi - Warren - Carter 型の数理モデルに現れる特異拡散項と非線形項に対する解析手法を明らかにする。

(3) 様々な結晶粒界数理モデルの解析

Kobayashi et al. が提唱した本来の線形拡散項がない数理モデルや結晶角度速度のモビリティ項が時間に依存した数理モデルの理論解析を行う。また、実現場では物質の状態変化(液体固体の相変化)を考慮する必要があるので、物質の状態を表すAllen-Cahn 方程式と結晶粒界運動方程式とを組み合わせた連立の数理モデルの理論解析も行う。

3. 研究の方法

研究は下記のように実施した。

(1) Kobayashi et al. により提唱された結晶粒界モデルは、連立の特異拡散非線形偏微分方程式系である。その数理モデルは、特異拡散項やラドン測度を含む方程式系である。そのため、本来のモデルの理論解析は極めて困難である。そこで、線形拡散項をつけ加えた近似数理モデルに対する解の漸近挙動、安定性、及び、その性質に関する理論解析を行った。

(2) 強い特異性や非線形性をもつ液体固体相転移現象を記述する特異拡散方程式系に対しては、従来の最適制御理論は直接適用できない。そこで、その特異拡散項や非線形項を滑らかなもので近似した近似最適制御問題を考察しながら、強い特異性や非線形性をもつ特異拡散方程式系に対する最適制御問題の理論解析を行った。

(3)(1)で考察した、線形拡散項の係数を0とする手法(粘性消滅法)で、Kobayashi - Warren - Carter が提唱した本来の結晶粒界数理モデルの理論解析を行った。また、これまでの解析手法を利用して、結晶角度速度のモビリティ項が時間に依存した数理モデルの可解性や安定性等を考察した。更に、時間離散法等を利用して、物質の状態を表す Allen-Cahn 方程式と線形拡散項を考慮した結晶粒界数理モデルとを組み合わせた連立の数理モデルの理論解析を行った。

4. 研究成果

平成 22 年度から平成 25 年度までの 4 年間に下記の研究成果を得た。

(1) Kobayashi - Warren - Carter 型の結晶粒界数理モデルに対する解の漸近挙動を解の一意性なしで考察した。まず、定常問題を考察し、非線形項が一般の関数の場合、定常解(定常問題の解)は少なくとも1つ存在することを示した。また、結晶粒界モデルに対する解の時間無限大での挙動を考察した。実際、結晶粒界運動に関する自由エネルギー関数やエネルギー不等式を用いて、解の極限集合は定常解集合の一部であることを示した。

特に、非線形項が物理的に重要な関数の場合、定常解は一意に存在し、その一意定常解は安定である、つまり、結晶粒界モデルの任意の解はすべて一意定常解に時間無限大で収束することも示した。このことは既に Kobayashi - Warren - Carter による数値実験で示されていたが、それを数学的に理論的に裏付けできた点は極めて重要な成果である。

更に、非線形項が一般の関数のときの解の漸近安定性をアトラクターの立場から考察した。空間次元が一般の場合、結晶粒界モデルの解の一意性が期待できないので、対応する力学系は多価となるが、その多価力学系に対する大域的アトラクターの存在を示すこ

とに成功した。これにより、非線形項が一般の関数の場合、多価アトラクターの意味で結晶粒界モデルの解の漸近安定性を示すことができた。

次に、多価力学系に対するアトラクターの構造について考察した。まず、結晶粒界の角度速度のモビリティ項が未知関数に依存する場合を考察し、Kobayashi - Warren - Carter 型の結晶粒界モデルの多価力学系に対するアトラクターは Allen - Cahn 方程式のアトラクターと零関数との直積集合を含むことを示した。結晶角度速度のモビリティ項が未知関数に依存する場合、結晶粒界モデルの解の時間大域的な挙動の解析(例えば、定常解に収束するまでの解析)は非常に困難であることがわかった。そこで、次に、モビリティ項が定数である場合を考察した。このとき、結晶粒界モデルの解は一意に存在し、結晶粒界の角度を表す関数は時間大域的に一樣に零関数に収束することを示した。このことにより、モビリティ項が定数ならば、Kobayashi - Warren - Carter 型の結晶粒界モデルにより生成された力学系は一価であり、それに対するアトラクターは Allen - Cahn 方程式のアトラクターと零関数の直積集合と一致することが明らかになった。

(2) 液体固体相転移を記述する特異拡散を考慮した空間1次元数理モデルに対する最適制御問題を提唱し、非線形コスト関数を最小化する解(最適制御関数)の存在を証明した。また、特異拡散を滑らかな拡散で近似し、非線形項を滑らかな関数で近似した近似最適制御問題を提唱し、その解の存在と解になるための必要条件を示した。更に、近似パラメータを0とすると、近似最適制御の解の列はもとの最適制御問題の解に収束し、その解であるための必要条件是近似最適制御問題の解になるための必要条件の極限として得られることを示した。また、近似最適制御の解をコ

ンピュータを用いて数値実験的に求めるためのアルゴリズムを提案するとともに、その収束性を理論的に証明した。

(3) 様々な結晶粒界数理モデルの解析を行った。

結晶角度速度のモビリティ項が時間と未知関数に依存している結晶粒界数理モデルを提唱し、そのモデルの解の存在と一意性を証明した。また、モビリティ項が時間に依存していても、モビリティ項が未知関数にのみ依存している場合と同様な結果が成り立つことを示した。つまり、モビリティ項が時間に依存していても、定常解(定常問題の解)は少なくとも1つ存在し、解の ω -極限集合は定常解集合の一部であることを示した。更に、非自励系結晶粒界モデルの漸近安定性をアトラクターの立場から考察し、時間依存モビリティ項が時間無限大のときに時間依存しない関数に収束する場合、空間次元が1ならば、非自励系結晶粒界モデルにより生成された多価力学系のアトラクターは、Allen-Cahn方程式のアトラクターと零関数との直積集合を含むことを示した。また、空間次元が一般の場合、時間依存モビリティ項が時間無限大のときに定数関数に収束するならば、非自励系数理モデルに対するアトラクターは、Allen-Cahn方程式のアトラクターと零関数の直積集合と一致することを示した。

Kobayashi-Warren-Carter が最初に提唱した数理モデル、つまり、平均結晶方位に関する方程式に線形拡散項がない数理モデルについて考察した。これまで考察してきた結晶粒界モデルでは、平均結晶方位に関し線形拡散効果を考慮していた。そこで、その線形拡散の係数を0に収束させるという粘性消滅法により、平均結晶方位に関し線形拡散項がない空間1次元モデルの解の存在を示すことに成功した。Kobayashi-Warren-Carter が最初に提唱した数理モデル(平均結晶方位の方程式に線形拡散項がない結晶粒界モデル)

の解の存在を示すことができた点は、極めて重要な成果である。

等温度下で、物質の液体固体の状態変化を表す運動方程式と結晶粒界数理モデルとを組み合わせた連立の数理モデルの理論解析を行った。実際、非線形項が閉区間 $[0, 1]$ 上の指示関数の劣微分である場合、初期値が滑らかであれば、線形拡散項を考慮した近似結晶粒界モデルの時間大域解が少なくとも1つ存在することが明らかになった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

[1] N.Yamazaki, Global attractors for non-autonomous phase-field systems of grain boundary motion with constraint, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, 23, pp. 267-296, 2013, 査読有.

[2] K.Shirakawa, H.Watanabe and N.Yamazaki, Solvability for one-dimensional phase field system associated with grain boundary motion, *Mathematische Annalen*, 356, pp. 301-330, 2013, 査読有.

[3] K.Shirakawa and N.Yamazaki, Optimal control problems of phase field system with total variation functional as the interfacial energy, *Advances in Differential Equations*, 18, pp. 309-350, 2013, 査読有.

[4] L.Zhang, N.Yamazaki and C.Zhai, Optimal control problem of positive solutions to second order impulsive differential equations, *Zeitschrift fur Analysis und ihre Anwendungen*, 31, pp.237-250, 2012, 査読有.

[5] M.Kubo, K.Shirakawa and N.Yamazaki, Variational inequalities for a system of elliptic-parabolic equations, *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 387, pp.490-511, 2012, 査読有.

[6] T.Ohtsuka, K.Shirakawa and N.Yamazaki, Optimal control problem for Allen-Cahn type equation associated with total variation energy, *Discrete and Continuous Dynamical Systems, Series S*, 5, pp.159-181, 2012, 査読有.

[7] A.Ito, N.Kenmochi and N.Yamazaki, Global solvability of a model for grain boundary motion with constraint, *Discrete and Continuous Dynamical Systems, Series*

S, 5, pp.127-146, 2012, 査読有.

[8] N.Kenmochi and N.Yamazaki, Global attractor of the multivalued semigroup associated with a phase-field model of grain boundary motion with constraint, Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, Volume II, Discrete and Continuous Dynamical Systems, A Supplement Volume, pp.824-833, 2011, 査読有.

[9] N. Kenmochi and N. Yamazaki, Large-time behavior of solutions to a phase-field model of grain boundary motion with constraint, Current Advances in Nonlinear Analysis and Related Topics, GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl., 32, pp.389-403, 2010, 査読有.

〔学会発表〕(計13件)

[1] 山崎教昭, 白川健, Control problems of phase-field systems associated with total variation energy, 日本数学会2013年度秋季総合分科会, 愛媛大学, 2013年9月25日.

[2] 山崎教昭, L. Zhang, C. Zhai, Necessary conditions for optimal control of positive solutions to second order impulsive differential equations, 日本数学会2013年度年会, 京都大学, 2013年3月20日.

[3] 山崎教昭, L. Zhang, C. Zhai, Optimal control of positive solutions to second order impulsive differential equations, 日本数学会2012年度秋季総合分科会, 九州大学, 2012年9月21日.

[4] N.Yamazaki, L. Zhang, C. Zhai, Optimal control problem of positive solutions to second order impulsive differential equations, The 9th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, the Hyatt Grand Cypress Resort, Orlando, Florida, アメリカ, 2012年7月1日.

[5] N.Yamazaki, K.Shirakawa, Optimal control problems of phase field system with total variation functional as the interfacial energy, 12. International Conference on Free Boundary Problems, Theory and Applications, Frauenchiemsee, Chiemsee, ドイツ, 2012年6月11日-15日

[6] 山崎教昭, 久保雅弘, 白川健, A vector-valued elliptic-parabolic variational inequality with time-dependent constraint, 日本数学会2012年度年会, 東京理科大学, 2012年3月28日.

[7] 山崎教昭, 剣持信幸, Some characterization of attractor for a grain boundary motion model with constraint,

日本数学会2011年度秋季総合分科会, 信州大学, 2011年9月29日.

[8] 山崎教昭, 剣持信幸, Global attractor of a grain boundary motion model with constraint, 日本数学会2011年度年会, 早稲田大学, 2011年3月20日-23日.

[9] 山崎教昭, 剣持信幸, Asymptotic stability for a grain boundary motion model with constraint, 現象の数理解析に向けた非線形発展方程式とその周辺, 京都大学数理解析研究所, 2010年10月13日.

[10] 山崎教昭, 剣持信幸, Large-time behavior of solutions to a grain boundary motion models with constraint, 日本数学会2010年度秋季総合分科会, 名古屋大学, 2010年9月25日.

[11] 山崎教昭, Kobayashi-Warren-Carter型結晶粒界モデルの解の漸近挙動について, 第5回さいたま数理解析セミナー, 埼玉大学サテライトキャンパス, 2010年9月18日.

[12] N.Yamazaki, Mathematical analysis of grain boundary motion models of Kobayashi-Warren-Carter type, Tutorial Lectures and International Workshop "Singular Diffusion and Evolving Interfaces", 北海道大学, Sapporo, 日本, 2010年8月2日.

[13] N.Yamazaki, N. Kenmochi, Global attractor of a phase-field model of grain boundary motion with constraint, The 8th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, The Dresden University of Technology, Dresden, ドイツ, 2010年5月25日.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山崎 教昭 (YAMAZAKI NORIAKI)
神奈川大学・工学部・教授
研究者番号: 90333658

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者