

令和 4 年 5 月 27 日現在

機関番号：32665

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K13446

研究課題名（和文）結晶成長モデルにおける結晶方位差と三重点に関する数学解析

研究課題名（英文）Mathematical analysis about misorientations and triple junctions effects on evolution of grain boundaries

研究代表者

水野 将司（MIZUNO, Masashi）

日本大学・理工学部・准教授

研究者番号：80609545

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,700,000 円

研究成果の概要（和文）：結晶粒界の運動に由来する数理モデルの導出とその数学解析を行った。特に、結晶方位差と三重点の相互作用を理解するためのモデルの導出と、そのモデルの適切性、長時間挙動の解析を行った。さらに、モデルの臨界現象を理解するために、空間非一様なエネルギーを有する非線形Fokker-Planck方程式の解析を行った。その結果、結晶方位差と三重点の効果を加えた新しい数理モデルの導出と、その可解性、長時間挙動を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

結晶粒界の運動における臨界現象の理解は特異性の解析の困難さにより、未解明な点が多い。本研究では、この困難さを克服するために、臨界現象による相互作用をホワイトノイズによって表した。このモデリングは、結晶粒界における臨界現象の解明のみならず、様々な特異性の解析に新たな手法を与えるものと考えられる。また、この解析によって得られた新しい公式は結晶粒界の運動の理解を助けるとともに、結晶粒界エネルギーの性質を導くことの助けになると考えられる。

研究成果の概要（英文）：I studied mathematical modeling related to grain boundary motion and its mathematical analysis. In particular, to understand the interaction between misorientations and triple junctions, I derived a new mathematical model of grain boundary motion. And I studied its well-posedness and long-time asymptotic behavior. Next, I considered nonlinear Fokker-Planck equations involving spatial inhomogeneous free energy to treat critical events. As a result, new mathematical models containing the interaction between the misorientations and the triple junctions and mathematical analysis, such as well-posedness and long-time asymptotic behavior for the models, were obtained.

研究分野：非線形解析学

キーワード：結晶成長 曲率流方程式 幾何学的変分問題 Fokker-Planck方程式 結晶方位差 三重点

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

平面上の曲線に対する曲率流方程式は、結晶成長モデルにおいて Mullins や Herring によって導出され、結晶成長モデルの本質を捉えた方程式として深く研究されてきた。結晶粒界エネルギーがその結晶粒界の表面張力のみにより決定されるとき、結晶粒界エネルギーの勾配流として曲率流方程式が導出される。しかし、Mullins や Herring は2つの結晶の方位差もまた結晶粒界エネルギーに影響しているとして、結晶成長モデルを提唱した。材料工学など応用上の観点では、結晶方位差をどのように扱えばよいか議論されている。しかし、これらの結果は実験結果との比較などに留まっており、結晶方位差に対する数学解析は未だ発展途上である。特に、結晶方位差を考慮した結晶成長モデルの可解性、漸近挙動などの数学解析は知られていなかった。

2. 研究の目的

結晶方位差を持つ結晶成長モデルからエネルギー消散を仮定すると、ある偏微分方程式系が得られる。動的境界条件を三重点に課すことにより、結晶粒界エネルギーの消散評価式が得られる。動的境界条件から、三重点による消散効果が得られることが重要である。本研究の目的は、偏微分方程式系に動的境界条件を課した問題を解析することである。

3. 研究の方法

1年目、2年目については研究集会に参加して、研究に関する知見の交換が中心となった。さらに専門的書籍の購入による解析手法の整理と理解、問題に関する材料科学、物理学の知見の整理を進めた。特に、絶対温度を状態変数に含めた数理モデリングに必要となる平衡熱力学や、2次元結晶粒界の成長を理解するための、結晶成長に関する基礎研究の理解を進めた。

3年目、4年目は新型コロナウイルス感染症の流行により、多くの研究集会が中止、延期となったことを受け、研究者とのオンラインによる研究打ち合わせが中心となった。研究打ち合わせと論文作成のために多数の資料が必要となったことから、専門書籍、電子資料の購入を進めた。熱力学のモデリングに必要となる確率微分方程式、Fokker-Planck 方程式のモデリング、研究手法の整理を行い、新しい問題への解析に役立てた。

4. 研究成果

(1) 数理モデリングと緩和極限問題の長時間挙動の解析

Epshteyn 氏、Liu 氏とともに、結晶方位差と三重点での消散効果を持つ、新しい結晶成長の数理モデルを提唱した [ELM1]。スケールに依存しないと考えられている結晶粒界エネルギーを基礎にして、エネルギーの消散構造を持つ数理モデルを、エネルギーに対する最大消散原理を用いて導出した。このモデルは、結晶方位と三重点、表面張力に対する L^2 勾配流とみなすことができる。結晶方位、三重点、表面張力はそれぞれ異なるスケールを持つことから、この問題はスケールに依らない構造を隠し持つ、マルチスケール問題となる。次に結晶方位差、三重点の相互作用を見るために、曲率に対して緩和極限をとった問題に対する時間局所可解性を導いた [ELM1]。この結果により、我々が得たモデルの数理的妥当性がわかる。さらなる解析のために初期状態が平衡状態に十分に近いき、時間大域解が存在すること、その大域解が平衡状態に指数的速度で収束すること、すなわち、系の指数安定性を導いた [ELM2]。この結果は、臨界現象がおきないことを初期状態が平衡状態に十分近いことで担保しており、微分方程式論として意義のある結果である一方、臨界現象を取り込んだ数値解析においては、指数安定性から導かれる結晶粒界エネルギーの指数的収束が必ずしも正しいとはいえないことが観察された [BDELM]。

(2) 確率モデルの構築と数学解析

結晶粒界エネルギーを推定するために有用である、結晶粒界性格分布 (Grain Boundary Character Distribution, GBGD) と新しい数理モデルとの関係は明らかでなかった。また、[ELM1] で得られたモデルにおいては、臨界現象の解析は困難であった。そこで、座標系を取り替えて、臨界現象による相互作用をホワイトノイズなどの確率項で表した確率モデルの構築が必要となった。このために [ELM1] で得られた決定論的モデルを書き換える必要が生じた。そこで、Epshteyn 氏、Liu 氏と引き続きの研究を行った。GBGD は結晶方位差を状態変数に持つことから、モデルの変数を結晶方位差と三重点に書き換え、座標系を取り替えることで、質量保存則をみたく密度関数のモデルに書き換えた。次に、結晶方位差と三重点の相互作用をホワイトノイズで表し、確率微分方程式の一つである Langevin 方程式を導いた。Langevin 方程式の解の確率密度関数は、退化拡散と特異なポテンシャルを持つ線形 Fokker-Planck 方程式で記述される。この Fokker-Planck 方程式の時間大域適切性と長時間挙動を重み付き L^2 空間で解析した。そして、同時確率分布を考えることで、結晶格子方位差に対する確率分布の長時間挙動を考察した [ELM3]。これは、GBGD と我々のモデルの違いを見るためのもので、実際に三重点の相互作用による相違が本研究によって見られた。この研究をさらに詳しく見るために、三重点が重み付き Fermat 点、

外心であるときの相違と、その相違によって得られる三重点に関する新しい公式を導いた。この公式は、数値計算による平衡状態において、かなりの精度で成り立っていることが観測された。

(3) 曲率効果を加えた数理モデルの可解性と長時間挙動

[ELM1] で導出した結晶粒界の数理モデルは曲率の効果、結晶方位差の効果、三重点の効果をエネルギー消散の観点でモデリングしたものであったが、その数学解析では曲率の効果を緩和したものであった。そこで、曲率と結晶方位差の効果の相互作用を見るために、曲線のグラフ表示と結晶方位差を状態変数に取り入れた結晶粒界エネルギーについて最大消散原理によって得られる、ある幾何学的発展方程式に対する先験勾配評価、解の一意存在性、大域解の長時間挙動の解析を行った [MT]。結晶方位差の効果により、得られるモデルはモビリティが時間依存する曲線短縮流方程式となるが、この時間依存性を加えた単調性公式を導くことで先験勾配評価を得た。次に、その勾配評価に不動点定理を組み合わせることで解の一意存在、長時間挙動を明らかにした。

(4) 曲率効果を加えた数理モデルのネットワークの可解性と長時間挙動

[MT] で得られた結果は、1つの結晶粒界の運動によるものであり、結晶粒界の運動の理解に必要である、多数の結晶粒界の相互作用は明らかでなかった。そこで、可香谷氏、高棹氏とともに、曲率と結晶方位差の効果を加えた結晶粒界ネットワークの可解性と長時間挙動を考察した [KMT]。可解性については、方程式を非線形放物型方程式系に書き換えたあとに、線形化方程式系の可解性を Solonnikov の方法で考察した。摂動理論と不動点定理を組み合わせることにより、結晶粒界ネットワークの時間局所可解性を導いた。長時間挙動の研究において、結晶方位差の効果によるモビリティの変化は、三重点で非等方的な相互作用を生み出し、その結果として単調性公式が三重点で成り立たなくなることにつながる。そこで、高階エネルギー評価を組み合わせることで、解の長時間挙動を導いた。

(5) 非線形 Fokker-Planck 方程式の解析

確率モデルにおいて、絶対温度を加えたモデルを構築する過程で、非一様な拡散係数を持つ Fokker-Planck 方程式の解析が必要であることが明らかとなった。Langevin 方程式や対応する Fokker-Planck 方程式は、一般的には自由エネルギーの消散構造を持つとは限らない。他方で、自由エネルギーの消散性を保証した上で、確率モデルと整合性のとれるモデルを構築したところ、非線形 Fokker-Planck 方程式を導くことができた。Epshteyn 氏、Chun Liu 氏に、Chang Liu 氏が加わり、絶対温度を状態変数に持つ結晶粒界の確率モデルを解析することを目指して、空間非一様性を持つ非線形 Fokker-Planck 方程式に対する時間局所可解性、解の長時間挙動を研究した [ELLM1], [ELLM2]。非線形性を取り扱うために、線形化と Schauder 評価、不動点定理を組み合わせた上、斉次初期値、斉次境界値となる変数変換を組み合わせたことで、時間局所可解性を導いた。さらに、Fokker-Planck 方程式の漸近挙動を調べる上で有用となるエントロピー消散法を、質量保存則の方程式における速度ベクトル場を用いて書き換えることで、非線形 Fokker-Planck 方程式に拡張できるように書き換えた。そして、空間非一様な自由エネルギーを有する非線形 Fokker-Planck 方程式に対して、長時間挙動が得られるための空間非一様性に関する十分条件を導いた。

(6) 積分境界条件を課した線形移流拡散方程式の解の一意性

Lee 氏、Moon 氏とともに、積分境界条件を課した線形移流拡散方程式の解の一意性と領域のサイズの考察を行った [LMM]。境界条件に積分項などの非局所的な効果を加えると、線形方程式であっても一意性が崩れる例がある。結晶粒界のモデルにおいては、三重点の効果を加えたときに、動的境界条件が課されることと、その問題における適切性の解析に深く関係する。そこで、ある線形移流拡散方程式において、解の一意性が得られるための十分条件を与えた。その結果、領域が十分に小さいとき、または十分に大きいときに解の一意性が得られることがわかった。領域のサイズが小さくも大きくもないときや、領域の拡大方法をかえたときの一意性を明らかにすることが今後の課題である。

<参考文献>

[BDELM] Katayun Barmak, Anastasia Dunca, Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, Masashi Mizuno, Grain Growth and the Effect of Different Time Scales, accepted to Springer AWM series volume "Research in the Mathematics of Materials Science".

[ELM1] Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, Masashi Mizuno, Motion of grain boundaries with dynamic lattice misorientations and with triple junctions drag, SIAM Journal on

Mathematical Analysis, 53 (2021), 3072--3097.

[ELM2] Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, Masashi Mizuno, Large time asymptotic behavior of grain boundaries motion with dynamic lattice misorientations and with triple junctions drag, Communications in Mathematical Sciences, 19 (2021), 1403--1428.

[ELM3] Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, Masashi Mizuno, A stochastic model of grain boundary dynamics: A Fokker-Planck perspective, preprint.

[ELLM1] Yekaterina Epshteyn, Chang Liu, Chun Liu, Masashi Mizuno, Local well-posedness of a nonlinear Fokker-Planck model, preprint.

[ELLM2] Yekaterina Epshteyn, Chang Liu, Chun Liu, Masashi Mizuno, in preparation.

[KMT] Takashi Kagaya, Masashi Mizuno, Keisuke Takasao Long time behavior for a curvature flow of networks related to grain boundary motion with the effect of lattice misorientations, preprint.

[LMM] Chiun-Chang Lee, Masashi Mizuno, Sang-Hyuck Moon, On the uniqueness of linear convection-diffusion equations in large domains with integral boundary conditions, preprint.

[MT] Masashi Mizuno, Keisuke Takasao, A curve shortening equation with time-dependent mobility related to grain boundary motions, Interfaces and Free Boundaries. 23 (2021), 169--190.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Epshteyn Yekaterina, Liu Chun, Mizuno Masashi	4. 巻 53
2. 論文標題 Motion of Grain Boundaries with Dynamic Lattice Misorientations and with Triple Junctions Drag	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SIAM Journal on Mathematical Analysis	6. 最初と最後の頁 3072 ~ 3097
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1137/19M1265855	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Epshteyn Yekaterina, Liu Chun, Mizuno Masashi	4. 巻 19
2. 論文標題 Large time asymptotic behavior of grain boundaries motion with dynamic lattice misorientations and with triple junctions drag	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications in Mathematical Sciences	6. 最初と最後の頁 1403 ~ 1428
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4310/CMS.2021.v19.n5.a10	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Mizuno Masashi, Takasao Keisuke	4. 巻 23
2. 論文標題 A curve shortening equation with time-dependent mobility related to grain boundary motions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Interfaces and Free Boundaries	6. 最初と最後の頁 169 ~ 190
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.4171/IFB/453	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Katayun Barmak, Anastasia Dunca, Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, Masashi Mizuno	4. 巻 -
2. 論文標題 Grain Growth and the Effect of Different Time Scales	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 accepted to Springer AWM series volume "Research in the Mathematics of Materials Science"	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

[学会発表] 計18件(うち招待講演 6件/うち国際学会 6件)

1. 発表者名 Epshteyn Yekaterina, Liu Chun, Mizuno Masashi
2. 発表標題 Evolution of grain boundaries with dynamic lattice orientations and triple junction drag
3. 学会等名 SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science(MS21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masashi Mizuno, Keisuke Takasao
2. 発表標題 A curve shortening equation with time-dependent mobility related to grain boundary motions
3. 学会等名 SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science(MS21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 水野 将司
2. 発表標題 Mathematical modeling for grain boundary motion with dynamic lattice misorientations and triple junction drag
3. 学会等名 第46回偏微分方程式論札幌シンポジウム(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Epshteyn Yekaterina, Liu Chun, 水野 将司
2. 発表標題 結晶成長の確率モデルと揺動散逸定理
3. 学会等名 2021年度応用数学合同研究集会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 水野 将司
2. 発表標題 A stochastic model of grain boundary dynamics
3. 学会等名 金沢解析セミナー（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Epshteyn Yekaterina, Liu Chun, 水野 将司
2. 発表標題 結晶粒界の運動モデルに由来する Fokker-Planck方程式の解の長時間挙動
3. 学会等名 日本数学会 2022年度 年会 函数方程式論分科会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 水野 将司
2. 発表標題 結晶粒界の成長モデルに由来する曲線短縮流方程式
3. 学会等名 応用解析研究会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 高棹 圭介, 水野 将司
2. 発表標題 結晶方位差を考慮した結晶粒界の発展方程式の解の存在について
3. 学会等名 日本数学会 2019年度 秋季総合分科会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水野 将司
2. 発表標題 変分解析による動的な結晶方位差と三重点を含む結晶粒界のモデリング
3. 学会等名 界面現象の数理・モデリング研究合宿 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masashi Mizuno
2. 発表標題 Grain boundary motion with time-dependent misorientation and mobility effects
3. 学会等名 Multi-scale seminar, Illinois Institute of Technology (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masashi Mizuno
2. 発表標題 Grain boundary motion with time-dependent misorientation and mobility effects
3. 学会等名 Applied Mathematics Seminar, The University of Utah (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masashi Mizuno
2. 発表標題 Mathematical modeling of grain boundary motion including dynamic misorientations and triple junction drag
3. 学会等名 The 84th Midwest PDE Seminar (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Masashi Mizuno
2. 発表標題 Dynamics of Grain Boundaries with Evolving Lattice Orientations and Triple Junctions
3. 学会等名 SIAM Conference on Analysis of Partial Differential Equations (PD19) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, 水野将司
2. 発表標題 結晶方位差と三重点による結晶粒界の発展方程式
3. 学会等名 日本応用数学会 2018年度 年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yekaterina Epshteyn, Chun Liu, 水野将司
2. 発表標題 結晶方位差と三重点による結晶粒界の発展方程式
3. 学会等名 日本数学会 2019年度 年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水野将司
2. 発表標題 結晶成長の数理と結晶方位差, 三重点の関係
3. 学会等名 南大阪応用数学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水野将司
2. 発表標題 結晶方位差と三重点が時間発展する結晶粒界のダイナミクス
3. 学会等名 表面・界面ダイナミクスの数理 17 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 水野将司
2. 発表標題 結晶方位差と三重点が時間発展する結晶粒界の発展方程式
3. 学会等名 解析学研究特別セミナー
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

日本大学理工学部数学科 水野将司 http://www.math.cst.nihon-u.ac.jp/~mizuno

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	E p s h t e y n Y e k a t e r i n a (EPSHTEYN Yekaterina)		

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	L i u C h u n (LIU Chun)		
研究協力者	高 棹 圭 介 (TAKASAO Keisuke)		
研究協力者	可 香 谷 隆 (KAGAYA Takashi)		

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	Illinois Institute of Technology	The University of Utah		
その他の国・地域	National Tsing Hua University			
韓国	Ulsan National Inst. of Sci. and Tech.			