

平成 30 年 4 月 23 日現在

機関番号：32702

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400179

研究課題名(和文) 結晶粒界運動に関連する自由境界問題の数学解析と発展

研究課題名(英文) Mathematical analysis and development of free boundary problems arising in grain boundary motion phenomena

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) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、物質の状態変化を考慮した Kobayashi-Warren-Carter 結晶粒界モデルを理論解析し、解の存在や性質を明らかにした。また、閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を含む Allen-Cahn方程式の特異極限問題を考察し、劣微分項の元の特異極限の性質や解の特異極限関数との関係を明らかにした。さらに、純粋な液相と固相の時間的変化に関する数値実験を行うための安定性条件の導出、離散アルゴリズムの構築、数値実験の実施等を行った。

また、様々な相転移現象モデルの最適制御問題を考察するとともに、抽象非線形発展方程式に対する、解の一意性を必要としない特異最適制御理論の構築を行った。

研究成果の概要(英文)：In this research project, we showed the existence and properties of solutions to the grain boundary motion model of Kobayashi--Warren--Carter type. In addition, we considered the singular limit problem of the Allen--Cahn equation with nonlinear constraint that is the subdifferential of the indication function on the closed interval $[-1, 1]$. Then, we proved the existence and properties of the singular limit of solutions and the subdifferential of the indication function. Furthermore, we showed the stability conditions for numerical experiments on the Allen-Cahn equation with the Yosida approximation term, and performed numerical experiments of our problems by using the discrete algorithms proposed in this research project.

We also considered optimal control problems of various phase change models, and established the theory of singular optimal control problems to abstract nonlinear evolution equations governed by time-dependent subdifferentials.

研究分野：非線形実凸解析学

キーワード：関数方程式 実関数論 最適制御 自由境界

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（これを結晶構造という）をもっている。しかし、実際の金属材料は、すべ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（これを結晶粒という）が多数集まった構造をもっている。この結晶粒の境界は結晶粒界とよばれており、原子配列が乱れた領域に対応している。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。

近年、この結晶粒界のダイナミクスに関し、工学実験だけでなく、それを記述する数理モデルが提唱され、数値実験や理論解析が進んでいる。しかし、結晶粒界(自由境界)の挙動に関する詳細な理論解析が少ない。また、結晶粒界運動を記述する数理モデルは強い特異性や非線形性をもつため、結晶粒界の制御に関する研究は全く進んでいない。

そこで、Kobayashi - Warren - Carter (Phys. D., 140(2000), 141--150) が提唱した結晶粒界数理モデルを基礎とし、結晶粒界運動のさらなる解析を行うことを計画した。また、結晶粒界の制御問題を考察するための実解析的手法や数値解析手法の発展・開発を試みることも計画した。

2. 研究の目的

本研究では、結晶粒界運動に関する解析を行うとともに、結晶粒界の制御問題を考察するための実解析的手法の発展・開発を試みた。具体的には、以下の3つの課題を研究目的とした。

(1) 結晶粒界の挙動に関する理論解析

物質の状態変化を考慮した Kobayashi - Warren - Carter 結晶粒界数理モデルを理論解析し、解の存在、性質、正則性等を明らかにする。また、物質の状態変化過程における結晶の挙動に関する理論解析も行う。

(2) 結晶粒界の挙動に関する数値解析

純粋な液相と固相の時間的変化に関する数値実験を実施するための安定性条件の導出、離散アルゴリズムの構築等を行う。また、それらの妥当性や有効性を検証するため、コンピュータを用いた数値シミュレーションを実施する。

(3) 様々な結晶成長モデルの最適制御問題

結晶粒界は金属材料の性質にいろいろな影響を与えるため、結晶粒界の制御が重要である。Kobayashi - Warren - Carter 結晶粒界数理モデルは強い特異性や非線形性をもつため、解の一意性が保証されない。そこで、様々な相転移現象モデルの最適制御問題を考察しながら、解の一意性を必要としない特異最適制御問題の定式化・理論の構築を試みる。

3. 研究の方法

研究は下記のように実施した。

(1) 一定温度条件下で物質の状態変化（液体固体の相変化）を記述する Allen - Cahn 方程式と結晶粒界運動方程式とを組み合わせ、Kobayashi - Warren - Carter 結晶粒界モデルの理論解析を行った。その数理モデルは複雑な連立の偏微分方程式系であるため、抽象発展方程式理論の立場からの解析は難しい。そこで、時間離散化法を用いて、Kobayashi - Warren - Carter が提唱した結晶粒界数理モデルの解の存在、性質、正則性等の理論解析を行なった。また、結晶粒界運動を数学的に捉える方法の一つに、特異極限法がある。純粋な液相と固相の時間的変化に関する解析を特異極限法により行った。

(2) 純粋な液相と固相の時間的変化を捉えるため、閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を含む Allen-Cahn 方程式の数値解析を行った。特に、指示関数の劣微分項を吉田近似する数値計算手法の安定性条件を理論的に導出した。さらに、コンピュータを用いて数値実験を行い、安定性条件の確認、および(1)で得られた理論結果の妥当性の検証を行った。

(3) 強い特異性や非線形性をもち、かつ、解の一意性が保証されている様々な液体固体相転移数理モデルに対する最適制御問題を考察した。これらの研究活動を踏まえ、時間依存劣微分作用素に支配された抽象非線形発展方程式に対する、解の一意性を必要としない特異最適制御問題の理論の構築を行った。

4. 研究成果

平成 26 年から平成 29 年度までの 4 年間に下記の研究成果を得た。

(1) 温度が一定であるという状況の下で、物質の凝固現象を考慮した結晶粒界数理モデルの理論解析を行った。具体的には、物質の状態変化（液体固体の相変化）を記述する 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を行った。それは、Kobayashi - Warren - Carter により提唱された、線形拡散項を考慮した結晶粒界数理モデルである。線形拡散項があるが連立の偏微分方程式系であるため、抽象発展方程式理論の立場からの解析は困難を極めた。しかし、時間離散化法を用いることで、Kobayashi - Warren - Carter 結晶粒界数理モデルの解の存在を示すことができた。さらに、線形拡散項の係数を 0 とする手法（粘性消滅法）により、Kobayashi - Warren - Carter が提唱した本来の結晶粒界数理モデルと Allen - Cahn 方程式とを組み合わせた連立の結晶粒界数理モデルの解の

存在, 性質, 正則性等を証明することができた。

結晶粒界運動を数学的に捉える方法が幾つかあるが, 本研究課題では, 特異極限法による解析を試みた。実際, 純粋な液体・固体の変化を考察するため, 閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を含む Allen - Cahn 方程式の特異極限問題を考察した。その問題は, 既に, X. Chen と C. M. Elliott (Proc. Roy. Soc. London Ser. A, 444(1994))により理論解析されているが, 指示関数の劣微分項の元に関する特異極限の解析は行われていなかった。そこで, 指示関数の劣微分項を他の項と分離して解析し, 特に, H^1 の dual space の位相で解析することにより, 指示関数の劣微分項の元の特異極限を明らかにすることができた。また, その特異極限と解の特異極限関数との関係も明らかにすることができた。

さらに, 力学境界条件を課した, 閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を含む Allen - Cahn 方程式の特異極限問題を考察し, 界面運動の挙動の解析を行った。ノイマン境界条件の場合と同様に, H^1 の dual space の位相で解析することにより, 領域内と境界上, それぞれにおいて, 指示関数の劣微分項の元の特異極限を明らかにすることができた。また, 領域内と境界上, それぞれにおいて, 指示関数の劣微分項の元の特異極限と解の特異極限関数との関係も明らかにすることができた。力学境界条件の場合, 特異極限関数の境界値の性質もえることができ, 特異極限問題における力学境界条件とノイマン境界条件との相違を明らかにすることができた。この点は, 本研究課題の重要な研究成果である。

(2) (1)における特異極限問題の理論解析結果(指示関数の劣微分項の元の特異極限の性質)を利用した数値解析方法を構築した。このことにより, 指示関数の劣微分項を近似することなく, 閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を含む Allen-Cahn 方程式の数値実験を行うことができるようになった。実際, 構築したアルゴリズムを用いて数値実験を行ったところ, 物質の状態を表す関数の値が $[-1, 1]$ の間をとることが確認でき, 構築したアルゴリズムの有効性を示すことができた。この点も本研究課題の重要な研究成果である。

また, 閉区間 $[-1, 1]$ 上の指示関数の劣微分項を吉田近似することにより, 吉田近似項をもつ Allen-Cahn 方程式の数値実験を行うことができる。しかし, 吉田近似パラメータの取り方によっては, 数値計算結果が時間とともに振動して安定にならないことがある。そこで, 指示関数の劣微分項を吉田近似する数値計算法において, 安定した数値実験結果を与えるための条件(時間差分, 空間差分, 吉田近似パラメータ, 特異極限パラメータの関係)を理論的に明らかにした。さらに, コン

ピュータを用いて数値実験を行い, えられた理論結果が妥当であることを確認した。

一方, 指示関数の劣微分項を吉田近似した方法では, 解の値が閾値 $[-1, 1]$ を超えてしまうことが理論的にも実験的にも確認された。そこで, 近似解の値が閾値 $[-1, 1]$ を超えないような近似数値計算法を提案した。さらに, 提案した近似数値計算法において, 安定した数値実験結果を与えるための条件を理論的に導出するとともに, 数値実験を行い, えられた安定性条件の妥当性と提案した近似数値計算法の有効性を確認した。

(3) Kobayashi - Warren - Carter が提唱した結晶粒界数理モデルの最適制御問題を理論解析する前準備として, 様々な相転移現象モデルの最適制御問題を考察した。まず, 液体固体相転移現象を記述する, 特異拡散項を含む数理モデルの最適制御問題を数値解析の立場から解析した。実際, 適切な近似数理モデルや近似最適制御問題を提唱し, その近似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した。さらに, 提案したアルゴリズムの収束性を理論的に証明した。

また, 力学境界条件を課した Cahn - Hilliard 型の相転移現象モデルに対する境界最適制御問題を考察した。実際, 適切な近似方程式や近似最適問題を提唱し, それを経由することで, 力学境界条件を課した Cahn - Hilliard 型相転移現象モデルの境界制御問題に対する最適制御解の存在, 性質, 必要条件等を明らかにした。

上記の最適制御問題に関する一連の研究成果を踏まえ, 時間依存劣微分作用素に支配された抽象非線形発展方程式に対する, 解の一意性を必要としない特異最適制御問題の定式化・理論の構築を行った。Kobayashi - Warren - Carter により提唱された結晶粒界モデルでは, 解の一意性が保証されていない。本研究で構築した特異最適制御理論は, Kobayashi - Warren - Carter モデルには直接応用できないが, その方法論は有効であると考えている。

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 11 件)

[1] M.H. Farshbaf-Shaker, T. Fukao and N. Yamazaki, Lagrange multiplier and singular limit of double-obstacle problems for the Allen-Cahn equation with constraint, Math. Methods Appl. Sci., 40 (2017), 5-21, 査読有,
<https://doi.org/10.1002/mma.3905>

[2] M.H. Farshbaf-Shaker and N. Yamazaki, Optimal control of doubly nonlinear

evolution equations governed by subdifferentials without uniqueness of solutions, IFIP Conference on System Modeling and Optimization CSMO 2015: System Modeling and Optimization, Springer, 2017, 261--271, 査読有, https://doi.org/10.1007/978-3-319-55795-3_24

[3] N. Kenmochi, K. Shirakawa and N. Yamazaki, New class of doubly nonlinear evolution equations governed by time-dependent subdifferentials, Solvability, regularity, and optimal control of boundary value problems for PDEs, Springer INdAM Ser., 22, Springer, Cham, 2017, 281--304, 査読有, https://doi.org/10.1007/978-3-319-64489-9_11

[4] T. Fukao and N. Yamazaki, A boundary control problem for the equation and dynamic boundary condition of Cahn--Hilliard type, Solvability, regularity, and optimal control of boundary value problems for PDEs, Springer INdAM Ser., 22, Springer, Cham, 2017, 255--280, 査読有, https://doi.org/10.1007/978-3-319-64489-9_10

[5] N. Kenmochi, K. Shirakawa and N. Yamazaki, Singular optimal control problems for doubly nonlinear and quasi-variational evolution equations, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 26 (2017), 313--379, 査読有.

[6] T. Suzuki, K. Takasao and N. Yamazaki, Remarks on numerical experiments of the Allen--Cahn equations with constraint via Yosida approximation, Adv. Numer. Anal., 2016 (2016), Article ID 1492812, 16 pages, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1155/2016/1492812>

[7] T. Suzuki, K. Takasao and N. Yamazaki, New approximate method for the Allen--Cahn equation with double-obstacle constraint and stability criteria for numerical simulations, AIMS Mathematics, 1 (2016), 288--317, 査読有, <http://dx.doi.org/10.3934/Math.2016.3.288>

[8] K. Shirakawa and N. Yamazaki, Convergence of numerical algorithm for approximating optimal control problems of phase filed system with singular

diffusivity, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 25 (2016), 243--272, 査読有.

[9] M.H. Farshbaf-Shaker, T. Fukao and N. Yamazaki, Singular limit of Allen--Cahn equation with constraint and its Lagrange multiplier, Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, AIMS Proceedings, 2015, 418--427, 査読有, <http://dx.doi.org/10.3934/proc.2015.0418>

[10] K. Shirakawa, H. Watanabe and N. Yamazaki, Phase-filed systems for grain boundary motion under isothermal solidifications, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 24 (2014), 353--400, 査読有.

[11] L. Zhang, N. Yamazaki and R. Guo, Positive solutions for impulsive differential equations with mixed monotonicity and optimal control, Abstr. Appl. Anal., 2014, Art. ID 974968, 11 pp, 査読有, <http://dx.doi.org/10.1155/2014/974968>

[学会発表](計 12 件)

[1] 山崎教昭, 剣持信幸, 白川健, Quasi-variational evolution equations governed by double time-dependent subdifferentials, 日本数学会 2018 年度年会, 東京大学, 2018 年 3 月 21 日.

[2] 山崎教昭, 剣持信幸, 白川健, New class of doubly nonlinear evolution equations governed by double time-dependent subdifferentials, 日本数学会 2017 年度秋季総合分科会, 山形大学, 2017 年 9 月 14 日.

[3] N. Yamazaki, Doubly nonlinear quasi-variational inequalities with time-dependent constrains and nonlocal effects, The 14th International Conference on Free Boundary Problems: Theory and Applications, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai, 中国, 2017 年 7 月 5 日.

[4] 山崎教昭, 鈴木友之, 高棹圭介, Stability criteria for numerical experiments of Allen--Cahn equations with constraint via Yosida approximation, 日本数学会 2016 年度秋季総合分科会, 関西大学, 2016 年 9 月 18 日.

[5] N. Yamazaki, Stability criteria for numerical simulations of Allen--Cahn equation with double-obstacle constraint

via Yosida approximation, The 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, The American Institute of Mathematical Sciences, Orlando, Florida, アメリカ, 2016年7月2日.

[6] 山崎教昭, 深尾武史, M. H. Farshbaf-Shaker, Lagrange multiplier and singular limit of double obstacle problems for Allen-Cahn equation with constraint, 日本数学会 2016 年度年会, 筑波大学, 2016年3月19日.

[7] 山崎教昭, 鈴木友之, 高棹圭介, Remarks on numerical experiments of Allen-Cahn equations with constraint via Yosida approximation, 日本数学会 2015 年度秋季総合分科会, 京都産業大学, 2015年9月16日.

[8] N. Yamazaki, Singular limit of Allen-Cahn equation with dynamic boundary condition and constraints and its Lagrange multiplier, Equadiff 2015, Université Claude Bernard Lyon 1, Lyon, フランス, 2015年7月8日.

[9] N. Yamazaki, Optimal control of doubly nonlinear evolution equations governed by subdifferentials, The 27th IFIP TC7 Conference 2015 on System Modelling and Optimization, Inria, a public science and technology institution and Dieudonné Laboratory, University of Nice Sophia Antipolis, Sophia Antipolis, フランス, 2015年6月30日.

[10] 山崎教昭, 深尾武史, M. H. Farshbaf-Shaker, Numerical simulations of Allen-Cahn equation with constraints via Lagrange multiplier, 日本数学会 2015 年度年会, 明治大学, 2015年3月21日.

[11] 山崎教昭, 深尾武史, M. H. Farshbaf-Shaker, Singular limit of Allen-Cahn equation with constraints and its Lagrange multiplier, 日本数学会 2014 年度秋季総合分科会, 広島大学, 2014年9月28日.

[12] N. Yamazaki, Numerical experiments of Allen-Cahn equation with constraints via Lagrange multiplier, The 10th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, the Instituto de Ciencias Matematicas (ICMAT) and the Universidad Autonoma de Madrid (UAM), Madrid, スペイン, 2014年7月9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