Glauber–Kawasaki 過程に対するスケール極限

Scaling limits for a Glauber-Kawasaki model

角田 謙吉 (TSUNODA Kenkichi)
九州大学大学院数理学研究院
e-mail : tsunoda@math.kyushu-u.ac.jp

1 概要

本講演では Glauber–Kawasaki 過程に対するスケール極限について説明を行う。特にこの確率模型に対するスケール極限の一つとして、Glauber+Kawasaki 過程に対する大偏差原理のレート関数に対する特異極限について説明を行う. [Bertini-Buttà-Pisante, AHP, 2019] においてこの問題が研究されている. 先行研究では拡散項が線型である場合が研究されているが, 拡散項が準線型である場合にも同じ結果を得ることができた. 本講演ではこの結果と関連する研究について説明を行う. 本講演は室蘭工業大学の可香谷隆氏との共同研究に基づく.

2 設定

初めに Glauber+Kawasaki 過程に対する大偏差原理のレート関数を定義する. d を自然数とし, $\mathbb{T}^d$ を d 次元連続トーラス $(\mathbb{R}/\mathbb{Z})^d = [0,1)^d$ とする. また時刻 $T > 0$ は固定しておく. 各 $\varepsilon > 0$ と滑らかな関数 $\phi : [0,T] \times \mathbb{T}^d \to [0,1]$ に対して $S_\varepsilon(\phi)$ を次で定める.

$$
\begin{aligned}
S_\varepsilon(\phi) &= \sup_{H \in C^{1,2}([0,T]\times\mathbb{T}^d)} J_\varepsilon^H(\phi), \\
J_\varepsilon^H(\phi) &= \frac{1}{\varepsilon}\int_{\mathbb{T}^d} \phi(T,x)H(T,x)\,dx - \frac{1}{\varepsilon}\int_{\mathbb{T}^d} \phi(0,x)H(0,x)\,dx \\
&\quad - \frac{1}{\varepsilon}\int_0^T \int_{\mathbb{T}^d} \left\{ \phi\partial_t H + P(\phi)\Delta H + \sigma(\phi)|\nabla H|^2 \right\} dxdt \\
&\quad - \frac{1}{\varepsilon^3}\int_0^T \int_{\mathbb{T}^d} \left\{ B(\phi)\left(e^H - 1\right) + D(\phi_t)\left(e^{-H} - 1\right) \right\} dxdt.
\end{aligned}
$$

ここで $P, B, D, W, \sigma : [0,1] \to \mathbb{R}$ は滑らかな関数で次の条件を満たすとする.

(A0) $W'(\rho) = -B(\rho) + D(\rho)$ かつ $\sigma(\rho) = P(\rho)\rho(1-\rho)$.

(A1) $P(0) = 0$ かつ任意の $\rho \in [0,1]$ に対して $P'(\rho) > 0$.

(A2) 任意の $\rho \in [0,1]$ に対して $B(\rho) + D(\rho) > 0$.

(A3) W は双安定なポテンシャルである. つまり, W の臨界点は $0 < \rho_- < \rho_* < \rho_+ < 1$ のみであり, 任意の $\rho \neq \rho_\pm$ に対して $W(\rho_\pm) < W(\rho)$, $W''(\rho_\pm) > 0$.

(A4) W は P 安定とする. つまり次をみたすとする.

$$
\int_{\rho_-}^{\rho_+} W'(\rho)P'(\rho)\,d\rho = 0.
$$

我々の主結果を述べるために必要な記号を更に設定する. $\Gamma = \{\Gamma\}_{t\in[0,T]} \subset \mathbb{T}^d$ を向きづけられた滑らかな超曲面であって, ある開集合 $\Omega_t \subset \mathbb{T}^d$ に対して $\Gamma_t = \partial\Omega_t$ となるものとする. また各 $t \in [0,T]$ に対して $d(t,\cdot)$ を Γ_t からの (正則化された) 符号付き距離とし, Γ_t の内部で負, Γ_t の外部

で正となるようしておく. 次に $\bar{u}:\bar{\mathbb{R}}\to[0,1]$ を次の常微分方程式の解とする.

$$\begin{cases}(P(\bar{u}))''+B(\bar{u})-D(\bar{u})=0 \quad \text{in } \mathbb{R},\\ \bar{u}(\pm\infty)=\rho_\pm, \quad \bar{u}(0)=\dfrac{\rho_+ + \rho_-}{2}.\end{cases}$$

以上の記法のもと滑らかな $Q:[0,T]\times\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ に対して $\phi_\varepsilon:[0,T]\times\mathbb{T}^d\to[0,1]$ を次で定義しておく.

$$\phi_\varepsilon(t,x)=\bar{u}\left(\frac{d(t,x)}{\varepsilon}+\varepsilon Q\left(t,x,\frac{d(t,x)}{\varepsilon}\right)\right)$$

最後に極限に現れる定数を述べるために, $L^2(\mathbb{R})$ 上の線型作用素 $L_{\bar{u}}$ を次で定義する.

$$L_{\bar{u}}\psi(\xi)=[2\sigma(\bar{u}(\xi))\psi'(\xi)]'-[B(\bar{u}(\xi))+D(\bar{u}(\xi))]\,\psi(\xi)$$

ここで ν,θ_1,θ_2 をそれぞれ次で定義される定数とする.

$$\nu=\langle\bar{v}',(-L_{\bar{u}})\bar{v}'\rangle_{L^2}/2, \quad \theta_1=\int_{\rho_-}^{\rho_+}\sqrt{2\tilde{W}(\rho)}\,d\rho, \quad \theta_2=\int_{\rho_-}^{\rho_+}P'(\rho)\sqrt{2\tilde{W}(\rho)}\,d\rho.$$

ただし, $\tilde{W}$ は次で定義される関数である.

$$\tilde{W}(\rho)=\int_{\rho_-}^{\rho}W'(\tilde{\rho})P'(\tilde{\rho})\,d\tilde{\rho}.$$

最後に, 移動度 μ と輸送係数 θ を次で定める.

$$\mu:=\nu/\theta_1^2, \quad \theta:=\theta_2/\theta_1.$$

3 主結果

我々の主結果は以下の定理である.

定理 1. $\hat{Q}=\hat{Q}(\Gamma)$ を適切に選ぶことにより, 次が成立する.

$$\lim_{\varepsilon\to 0}S_\varepsilon(\phi_\varepsilon)=\int_0^T\int_{\Gamma_t}\frac{(v_t-\theta h_t)^2}{4\mu}\,d\mathcal{H}^{d-1}dt=:S_{\mathrm{ac}}(\Gamma)$$

ただし, $\mathcal{H}^{d-1}$ は $d-1$ 次元の Hausdorff 測度である.

実際には $S_\varepsilon(\phi_\varepsilon)$ の $S_{\mathrm{ac}}(\Gamma)$ へのある意味での Γ 収束も示すことができるが, 本講演では上記の定理に限って説明を行う.

結晶界面の原子構造解析

Atomic structure analysis of crystalline interfaces

井上 和俊 [1,2]
[1] 東北大学材料科学高等研究所, [2] 東京理科大学総合研究院
e-mail：kinoue@tohoku.ac.jp

1　背景

材料中には無数の格子欠陥が存在し, 多様な原子配置を許容する．このような格子欠陥は, 材料の特性に多大な影響を及ぼすことが知られている．特に結晶界面は, 結晶中には存在しない特異な原子構造を有するため, これを制御した新機能の発現が期待されている．結晶界面は, 同種結晶の界面である粒界と異種結晶の界面である異種界面に大別される．結晶界面の原子構造を予測し効率的なモデリングや機能設計を行うためには, 多くの場合適切な実数 $x > 0$ に対して連分数展開を用いることが有用である:

$$\begin{aligned} x &= a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{a_3 + \cfrac{1}{\ddots}}}} \\ &= a_0 + 1/(a_1 + 1/(a_2 + 1/(a_3 + 1/(\cdots)))), \\ &= [a_0; a_1, a_2, a_3, \cdots]. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで, a_i $(i \geqq 0)$ は正整数であり, 展開を打ち切ることで逐次 x の近似分数が得られる:

$$\begin{aligned} &b_0 = a_0 = [a_0] \\ &b_1 = a_0 + 1/a_1 = [a_0; a_1] \\ &b_2 = a_0 + 1/(a_1 + 1/a_2) = [a_0; a_1, a_2] \\ &\cdots . \end{aligned} \tag{2}$$

例えば界面を構成する 2 つの結晶の格子定数が d_1 および d_2 であるなら, $x = d_1/d_2$ と取れば良い．粒界の場合は, 粒界を構成する結晶方位関係に依存した関数を x とする [1,2].

連分数展開には, 次の公式が知られている:

$$[a_0; a_1, \cdots, a_n] = [a_0; a_1, \cdots, a_{n-1}] \boxplus [a_0; a_1, \cdots, a_{n-1}, a_n - 1]. \tag{3}$$

ここで, $\boxplus$ は正整数 a, b, c, d $(b, d \neq 0)$ に対して

$$\frac{a}{b} \boxplus \frac{c}{d} = \frac{a+c}{b+d} \tag{4}$$

と定義される．また, 正整数 N に対しファレイ数列 F_N とは, 分母が N 以下の既約分数を昇順に並べた数列である．$F_1 = \{0/1,\ 1/1\}$ として, 式 (4) をファレイ数列 F_N の各隣接する既約分数に施し分母が $N+1$ 以下の部分集合を取ることでファレイ数列 F_{N+1} を得る．ファレイ数列は式 (4) に関して二分木を構成しファレイ木と呼ばれる．

2 結果

例として, 立方晶の $\{100\}$ 面と $\{110\}$ 面が平行となるように接合した粒界を考える．このとき格子面間隔比を考慮して $x=\sqrt{2}$ ととると, $x=[1,2,2,2,\cdots]$ であることから, 1, 3/2, 7/5, 17/12 $\cdots$ と近似分数が逐次得られる．これらの近似分数はあるファレイ数列に現れる既約分数であり,

$$17/12=[1;2,2,2]=[1;2,2]\boxplus[1;2,2,1]=7/5\boxplus 10/7 \tag{5}$$

を満たす．この式は, 17/12 近似構造がより小さい 7/5 および 10/7 近似構造により構成されることを意味する．本研究では, 実材料を用いて $\{100\}$ 面と $\{110\}$ 面が平行となるように高温接合し, 粒界近傍を走査透過型電子顕微鏡により断面観察したところ, 予測通りの構造が観察された．この手法は, 異種界面の構造解析にも有効である [3].

この手法は, 結晶同士が方位関係を有する場合にも適用出来る．まず, $\mathbb{R}^3$ 内の 3 次元格子 L_1 および L_2 を, $R\in\mathrm{SO}(3)$ で回転することを考える．このとき $\mathrm{L}_1\cap R\mathrm{L}_2$ もまた格子を形成するとき, R を対応回転 (coincidence rotation), $\mathrm{L}_1\cap R\mathrm{L}_2$ を対応格子 (coincidence-site lattice) といい, L_1 と $R\mathrm{L}_2$ は対応方位関係にあるという．さて, $\mathbb{R}^3$ を 2 次元平面 Π を境界に持つ半空間 R_1 と R_2 に分割する: $\mathbb{R}^3$=$\mathrm{R}_1\cup\mathrm{R}_2$, $\mathrm{R}_1\cap\mathrm{R}_2=\Pi$. このとき, Π が 2 つの半格子 $\mathrm{L}_1\cap\mathrm{R}_1$ と $R\mathrm{L}_2\cap\mathrm{R}_2$ の界面と見做せるので, Π の近傍を結晶界面と呼ぶ．L_1 と L_2 が同一の格子である場合, $\mathrm{L}_1=\mathrm{L}_2=\mathrm{L}$ と $\mathrm{L}\cap R\mathrm{L}$ の単位胞の体積比

$$\Sigma=|\mathrm{L}\cap R\mathrm{L}|/|\mathrm{L}| \tag{6}$$

は整数であり, 粒界整合指標として材料科学分野で広く用いられている．この指標は以下のように拡張することが出来る:

$$\tilde{\Sigma}=\sqrt{\frac{|\mathrm{L}_1\cap R\mathrm{L}_2|}{|\mathrm{L}_1+R\mathrm{L}_2|}}. \tag{7}$$

式 (8) は $\mathrm{L}_1=\mathrm{L}_2=\mathrm{L}$ の場合に式 (7) に帰着する．この指標と上記結晶界面の近似法を用いることで, 異種界面の作製可能性を整合性の観点からスクリーニング出来るようになり, 今後の材料設計に貢献できると期待される [3].

謝辞　本研究は, 川原一晃博士 (東大), 斎藤光浩博士 (東大), 陳茜博士 (東北大), 小谷元子教授 (理研/東北大), 幾原雄一教授 (東大/東北大) との共同研究の成果である．本研究は, JST 創発的研究支援事業 (JPMJFR213B) および, 科学研究費補助金 (21H01612) の助成を受けて行われた.

参考文献

[1] K. Inoue, K. Kawahara, M. Saito, M. Kotani, Y. Ikuhara: “3D arrangement of atomic polyhedra in tilt grain boundaries”, Acta Mater., 202, (2021), 266–276.

[2] K. Inoue, J.-Y. Roh, K. Kawahara, M. Saito, M. Kotani, Y. Ikuhara, “Arrangement of polyhedral units for [0001]-symmetrical tilt grain boundaries in zinc oxide”, Acta Mater., 212, (2021) 116864.

[3] K. Inoue, K. Kawahara, M. Saito, Q.Chen, M. Kotani, Y. Ikuhara: “Modeling and epitaxial matching of incoherent interfaces”, under review, (2025).

クリスタライン曲率流によるスパイラル成長の一般化された等高線法を用いた最適化運動アルゴリズム

A minimizing movements approach with a generalized level set formulation for evolving spirals driven by crystalline curvature

大塚 岳 (Takeshi Ohtsuka)[1], Yen-Hsi Richard Tsai[2]
[1] 群馬大学 (Gunma University), [2] The University of Texas at Austin
e-mail : tohtsuka@gunma-u.ac.jp

1 概要

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$ は滑らかな境界をもつ有界領域とする. Ω 上に点 $a_1, a_2, \ldots, a_N$ を端点 (以下, これを渦巻の中心と呼ぶ) とする渦巻状の曲線 $\Sigma(t)$ が存在して, クリスタライン曲率流方程式

$$V_\gamma = -\kappa_\gamma + f \tag{1}$$

にしたがって時間発展する問題を考える. ここで V_γ は κ_γ は非局所, 特異的かつ異方的な表面エネルギー密度関数 γ により定められる $\Sigma(t)$ の法速度および曲率である. $\gamma\colon \mathbb{R}^2 \to [0,\infty)$ は凸, 正斉次 1 次, S^1 上で正値をとる関数である.

本講演では複数の中心 $a_1, \ldots, a_N$ から成長する渦巻曲線を考えるため, 成長の過程で渦巻曲線同士が衝突・融合する. そのため, ここでは [1] による等高線法を用いて $\Sigma(t)$ を表す. $B_j = \{x \in \mathbb{R}^2;\ |x - a_j| < r\}$ とし, $r > 0$ を十分小さくとってすべての $i = 1, \ldots, N$ に対し $\overline{B_j} \subset \Omega$, かつ $i \neq j$ のとき $\overline{B_i} \cap \overline{Bj} = \emptyset$ となるようにする. $W = \Omega \setminus (\bigcup_{j=1}^N \overline{B_r(a_j)})$ とおく. $m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ を, a_j を端点とする渦巻曲線の符号付き本数 (詳しい定義は [1] を参照のこと) とし, θ を

$$\theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j)$$

で定義される多価関数とする. このとき $\Sigma(t)$ および, その運動の方向を表す $\Sigma(t)$ の連続単位法ベクトル場 $\mathbf{n}$ は

$$\Sigma(t) = \{x \in \overline{W};\ u(t,x) - \theta(x) \equiv 0 \mod 2\pi\mathbb{Z}\}, \quad \mathbf{n} = -\frac{\nabla(u-\theta)}{|\nabla(u-\theta)|}$$

で表される. この定式化により, (1) は

$$u_t - \gamma(\nabla(u-\theta))\left\{\mathrm{div}\Big(\xi(\nabla(u-\theta))\Big) + f\right\} = 0 \quad \text{in } (0,T) \times W \tag{2}$$

と表される. ここで $\xi = \nabla\gamma$ である. 等高線方程式の導出について, 詳しくは [2] を参照せよ.

クリスタライン曲率流とはその平衡形, すなわち κ_γ が定数となる図形である Wulff 図形

$$\mathcal{W}_\gamma = \{p \in \mathbb{R}^2;\ \gamma^\circ(p) \leq 1\}$$

が閉凸多角形になるときの γ から定められた異方的曲率流をいう. ここで γ° は Frank 図形 $\mathcal{F}_\gamma = \{p \in \mathbb{R}^2;\ \gamma(p) \leq 1\}$ の支持関数である. この状況を与えるため γ° は区分的 1 次関数, すなわち

$$\gamma^\circ(p) = \max_{0 \leq j \leq N_\gamma - 1} \tilde{n}_j \cdot p, \quad \tilde{n}_j = \tilde{r}_j(\cos\tilde{\vartheta}_j, \sin\tilde{\vartheta}_j)$$

で表す．しかしこのとき, $\gamma^{\circ\circ} = \gamma$ により γ も同じく区分的 1 次関数

$$\gamma(p) = \max_{0 \le j \le N_\gamma - 1} n_j \cdot p, \quad n_j = r_j(\cos\vartheta_j, \sin\vartheta_j) \tag{3}$$

と表され, したがって (2) は古典的な意味で定義できない．そこで本講演では (3) で与えられた γ に対して γ に対する適切な仮定のもと, Chambolle [3] のアルゴリズムを一般の等高線関数に拡張して (2) に適用した数値解法アルゴリズムを提案する．

そのアルゴリズムの基本的な方針は以下の通りである．まず, 時間間隔のパラメータ $h > 0$ により離散化した時刻列 $t_n = nh$ における渦巻曲線が補助関数 $u_n \in C(\overline{W})$ により

$$\Sigma_n = \{x \in \overline{W};\ u_n(x) - \theta(x) \equiv 0 \mod 2\pi\mathbb{Z}\}$$

で与えられているとする．これに対し, 汎関数

$$E(w; u_n) = \int_W \gamma(\nabla(w - \theta))dx - \int_W fwdx + \frac{1}{2h}\left\|\frac{w - u_n}{\sqrt{\gamma(\nabla(u_n - \theta))}}\right\|_{L^2}^2 \tag{4}$$

の最小元 w^* を考えると, もし γ が十分に滑らかならば, 形式的な計算から w^* は

$$w^* = u_n + h\gamma(\nabla(u_n - \theta))\left\{\mathrm{div}\Big(\xi(\nabla(w^* - \theta))\Big) + f\right\}$$

をみたすことがわかる．他方, (2) の陰的差分方程式は

$$u(t+h) = u(t) + h\gamma(\nabla(u(t+h) - \theta))\left\{\mathrm{div}\Big(\xi(\nabla(u(t+h) - \theta))\Big) + f\right\}$$

となるので, w^* は $u(t+h)$ を近似するものと考えることができる．したがって $u_{n+1} = w^*$ とおき再び (4) の最小元を求める, すなわち $u_{n+1} = \arg\min E(\cdot; u_n)$ なる関数列を構成して $\Sigma_n = \{x \in \overline{W};\ u_n(x) - \theta(x) \equiv 0 \mod 2\pi\mathbb{Z}\}$ とすれば, (1) をみたす渦巻曲線の近似列 $\{\Sigma_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ を構成できる．講演では [4] による split Bregman method を (4) に適用して u_n を求めるアルゴリズムと, それによる数値計算結果の妥当性を示す数値解析結果についても紹介する．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP21K03319 の助成を受けている．

参考文献

[1] T. Ohtsuka, Y. H. R. Tsai, Y. Giga, A level set approach reflecting sheet structure with single auxiliary function for evolving spirals on crystal surface, *J. Sci. Comput.*, 62(2015), 831–874.

[2] Y. Giga, *Surface evolution equations: A level set approach*, Monographs in Mathematics, Birkhäuser Verlag, Basel, 2006.

[3] A. Chambolle, An algorithm for mean curvature motion, *Interfaces Free Bound.*, 6(2004), 195–218.

[4] A. Oberman, S. Osher, R. Takei, and R. Tsai, Numerical methods for anisotropic mean curvature flow based on a discrete time variational formulation, *Commun. Math. Sci.*, 9(2011), 637–662.

熱交換および相依存駆動力を組み込んだ結晶粒界運動モデルの最適制御問題

Optimal Control Problem of a Grain Boundary Motion Model Incorporating Heat Exchange and Phase-Dependent Mobilities

白川 健 (SHIRAKAWA, Ken)[1], 水野 大樹 (MIZUNO, Daiki)[2],
アンティル ハルビル (ANTIL, Harbir)[3]
[1,2] 千葉大学 (Chiba University), [3] ジョージ・メイソン大学 (George Mason University)
e-mail : sirakawa@faculty.chiba-u.jp

1 概要

$0 < T < \infty$ を時間の定数, $n \in \{1,2,3\}$ を空間次元とする. $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ は, 十分に滑らかな境界 $\Gamma = \partial\Omega$ を持つ N 次元有界領域とし, $n_\Gamma : \Gamma \longrightarrow \mathbb{S}^{n-1}$ は Γ の外向き単位法線ベクトルとする.

本講演では, $\varepsilon \geq 0$ に対し次の最適制御問題 $(\mathrm{OCP})_\varepsilon$ を考える:

$(\mathbf{OCP})_{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 次のコスト汎関数 $\mathcal{J}_\varepsilon$ を最小とする関数 $f^* \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$ (最適制御) を求める問題:

$$\mathcal{J}_\varepsilon : f \in L^2(0,T;L^2(\Omega)) \mapsto \mathcal{J}_\varepsilon(f) := \frac{1}{2}\int_0^T |f(t)|^2_{L^2(\Omega)}\,dt$$
$$+\frac{1}{2}\int_0^T \left(|(u-u_{\mathrm{ad}})(t)|^2_{L^2(\Omega)} + |(\eta-\eta_{\mathrm{ad}})(t)|^2_{L^2(\Omega)} + |(\theta-\theta_{\mathrm{ad}})(t)|^2_{L^2(\Omega)}\right)dt \in [0,\infty)$$

ここに, $[u,\eta,\theta]$ は以下の放物型システムによる状態系 $(\mathrm{S})_\varepsilon$ の解である:

$$(\mathrm{S})_\varepsilon : \begin{cases} \partial_t(u-\eta) - \mathit{\Delta} u = f \text{ in } Q, & (1) \\ \partial_t\eta - \mathit{\Delta}\eta + g(\eta) + \alpha'(\eta)\sqrt{\varepsilon^2+|\nabla\theta|^2} = -u \text{ in } Q, & \\ \alpha_0(\eta)\partial_t\theta - \mathrm{div}\left(\alpha(\eta)\dfrac{\nabla\theta}{\sqrt{\varepsilon^2+|\nabla\theta|^2}} + \kappa\nabla\theta\right) = 0 \text{ in } Q, & (2) \\ \nabla u\cdot n_\Gamma = \nabla\eta\cdot n_\Gamma = \left(\alpha(\eta)\dfrac{\nabla\theta}{\sqrt{\varepsilon^2+|\nabla\theta|^2}} + \kappa\nabla\theta\right)\cdot n_\Gamma = 0 \text{ on } \Sigma, & \\ u(0,x) = u_0(x),\ \eta(0,x) = \eta_0(x),\ \theta(0,x) = \theta_0(x),\ x\in\Omega. & \end{cases}$$

状態系 $(\mathrm{S})_\varepsilon$ は [1] によって提案された, 熱交換を考慮した結晶粒界運動を記述する数理モデルに基づいている. ここに, 未知変数 u,η,θ はそれぞれ相対温度, 結晶の配向度, 結晶の配向方位を表しており, f は熱源による温度制御に相当する外力である. $[u_{\mathrm{ad}},\eta_{\mathrm{ad}},\theta_{\mathrm{ad}}] \in [L^2(0,T;L^2(\Omega))]^3$ は $[u,\eta,\theta]$ の再現目標 (target profile) である. $\kappa > 0$ は与えられた正の定数である. $g \in C^1(\mathbb{R}) \in C^{0,1}(\mathbb{R})$ は非負の原始関数 $G \in C^2(\mathbb{R})$ を持つ関数である. $\alpha \in C^2(\mathbb{R}) \cap C^{1,1}(\mathbb{R})$ は $\alpha'(0) = 0$, $\alpha'' \geq 0$ on $\mathbb{R}$ を満たす関数であるとし, $\alpha_0 \in C^1(\mathbb{R}) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R})$ は $\inf\alpha_0(\mathbb{R}) > 0$ を満たす. $[u,\eta,\theta]$ の初期値 $[u_0,\eta_0,\theta_0]$ は以下の条件を満たす関数である:

$$\begin{cases} u_0 \in H^2(\Omega),\ \eta_0 \in H^3(\Omega),\ \theta_0 \in H^2(\Omega),\ \mathrm{div}\left(\alpha(\eta_0)\frac{\nabla\theta_0}{\sqrt{\varepsilon^2+|\nabla\theta_0|^2}} + \kappa\nabla\theta_0\right) \in H^1(\Omega), \\ \nabla u_0\cdot n_\Gamma = \nabla\eta_0\cdot n_\Gamma = \left(\alpha(\eta_0)\frac{\nabla\theta_0}{\sqrt{\varepsilon^2+|\nabla\theta_0|^2}} + \kappa\nabla\theta_0\right)\cdot n_\Gamma = 0 \text{ on } \Gamma. \end{cases} \quad (3)$$

本研究の新規性は、状態系システム $(\mathrm{S})_\varepsilon$ に熱方程式を組み込んだカップリング構造を導入している点と, 駆動力 α_0 が未知変数 η, すなわち結晶配向度の相, に依存する設定のもとで最適制御問題を検討可能とした点にある. 従来, 状態系が熱方程式を含まないケースにおいても、α_0 が η に依存する場合には解の一意性が得られておらず, これは長年の未解決課題の一つであった. そのため, 多くの関連研究 (cf. [2, 3]) では状態系の一意性を確保するため, α_0 を実質定数とする設定のもとで, 議論が進められている.

しかしながら、近年この未解決問題に進展があり (cf. [4, 5]), 初期値および外力に十分な正則性が与えられた場合には、α_0 が未知変数 η に依存する場合でも一意性が成立することが示され、関連する制御問題に向けた展望が開かれた。実際、この結果に基づき、[5] では制御の正則性に関する制約を課した最適制御問題についても考察が進んでいる。ただし、これらの先行研究はいずれも温度変化そのものを直接制御変数とする設定に限られており、実際の応用場面を想定した「熱源（ヒーターやクーラー）を通じた間接的な温度制御」の枠組みについては、いまだ十分な成果が得られていない。

本講演では, [4, 5] による研究の進展を踏まえ, 熱方程式を状態方程式に組み込むことによって, より実践的な設定を反映した最適制御問題の定式化と数理解析を目的とする. その上で, 最適制御問題 $(\mathrm{OCP})_\varepsilon$ において, 以下の事項に焦点を当て, 得られた結果を報告する.

(A) $\varepsilon \geq 0$ における最適制御の存在.
(B) 最適制御問題群 $\{(\mathrm{OCP})_\varepsilon\}$ の, パラメータ ε に関する連続依存性.
(C) $\varepsilon > 0$ における, 最適制御が満たすべき必要条件 (随伴系) の考察.
(D) $\varepsilon \downarrow 0$ とするときの, 必要条件の極限系の考察.

謝辞 ……………………………………………………………………………………
本研究は JST SPRING, No. JPMJSP2109 の助成を受けたものである.
……………………………………………………………………………………

参考文献

[1] James A Warren, Ryo Kobayashi, Alexander E Lobkovsky, and W Craig Carter. Extending phase field models of solidification to polycrystalline materials. *Acta Materialia*, 51(20):6035–6058, 2003.

[2] Harbir Antil, Shodai Kubota, Ken Shirakawa, and Noriaki Yamazaki. Constrained optimization problems governed by PDE models of grain boundary motions. *Adv. Nonlinear Anal.*, 11(1):1249–1286, 2022.

[3] 白川 健, 久保田 翔大. Optimal inner-heat controls of Warren–Kobayashi–Lobkovsky–Carter type systems under higher dimensional settings, 日本数学会 2022 年度秋季総合分科会 実函数論分科会講演アブストラクト. pp. 61–62.

[4] 水野 大樹, 白川 健. 緩和項付き放物型 KWC システムにおける解の擬放物型正則性. 日本数学会 2024 年度秋季総合分科会 実函数論分科会講演アブストラクト, pp. 53–54.

[5] 水野 大樹, 白川 健. 緩和項付き放物型 KWC システムと関連する制約条件付き最適制御問題. 日本数学会 2025 年度年会 実函数論分科会講演アブストラクト, pp. 91–92.