P-5

# 結晶成長に由来するある微分方程式系の数値解析

**Numerical analysis for a system of differential equations related to grain growth**

○山岸ゆきな [1]
*Yukina Yamagishi[1]

Abstract: We consider differential equations related to the mathematical model of grain growth. These equations ensure that the energy of grain boundaries decreases in time. In this research, we derive two discretizations for the equations: the forward difference methods, and the backward difference methods for the linearized equation. Next, we investigate the convergence order of the energy and the numerical solutions.

## 1. 微分方程式の導出

$x$ についての周期関数 $u = u(x,t) : [0,1] \times [0,\infty) \to \mathbb{R}$ と $\alpha = \alpha(t) : [0,\infty) \to \mathbb{R}$, $\sigma = \sigma(\alpha) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対し,

$$E[u,\alpha] = \int_0^1 \sigma(\alpha(t))\sqrt{1+u_x^2(x,t)}dx \tag{1}$$

を考える. ただし, ある正定数 $C > 0$ が存在して, 任意の $\alpha \in \mathbb{R}$ に対し $\sigma(\alpha) \geq C$ を仮定する. $y = u(x,t)$ のグラフは２つの結晶の境目 (結晶粒界), $\alpha(t)$ は２つの結晶の方位の差, $\sigma(\alpha(t))$ は $\alpha(t)$ から定まる係数であり, $E[u,\alpha]$ は結晶粒界がもつエネルギーを表す. これは [1] で結晶成長のモデルを導出するために考察されたエネルギーである. ここで, $E[u,\alpha]$ の時間微分を計算すると,

$$\frac{d}{dt}E[u,\alpha] = \alpha_t(t)\int_0^1 \sigma'(\alpha(t))\sqrt{1+u_x^2(x,t)}dx - \int_0^1 \left(\sigma(\alpha(t))\frac{u_x(x,t)}{\sqrt{1+u_x^2(x,t)}}\right)_x u_t(x,t)dx$$

となる. $\frac{d}{dt}E[u,\alpha] \leq 0$ を保証するために, 次を考える.

$$\frac{u_t(x,t)}{\sqrt{1+u_x^2(x,t)}} = \mu\sigma(\alpha(t))\left(\frac{u_x(x,t)}{\sqrt{1+u_x^2(x,t)}}\right)_x, \tag{2}$$

$$\alpha_t(t) = -\gamma\sigma'(\alpha(t))\int_0^1 \sqrt{1+u_x^2(x,t)}dx \tag{3}$$

ただし, $\mu, \gamma > 0$ は正定数である. このとき, 次のエネルギー則

$$\frac{d}{dt}E[u,\alpha] = -\frac{1}{\gamma}|\alpha_t(t)|^2 - \int_0^1 \frac{1}{\mu}\frac{|u_x(x,t)|^2}{\sqrt{1+u_x^2(x,t)}}dx \leq 0 \tag{4}$$

が得られる.

本講演では, 微分方程式 (2), (3) に対して周期境界条件を課した問題の数値計算と, その結果について述べる.

## 2. 差分式の導出

(2) の右辺は, 直接計算により

$$\left(\frac{u_x(x,t)}{\sqrt{1+u_x^2(x,t)}}\right)_x = \frac{u_{xx}(x,t)}{(1+u_x^2(x,t))\sqrt{1+u_x^2(x,t)}}$$

となり, これより (2) は

$$u_t(x,t) = \mu\sigma(\alpha(t))\frac{u_{xx}(x,t)}{1+u_x^2(x,t)} \tag{5}$$

となる.

差分化の手法として, 前進差分法と後退差分法がよく知られている [3]. そこで, 以下, (5) の差分化を考える. $\Delta x$, $\Delta t > 0$ に対し, $u_i^{(n)}$ を $u(i\Delta x, n\Delta t)$ の近似とする.

内部に関する式は, 前進差分法を用いると

$$\frac{u_i^{(n+1)} - u_i^{(n)}}{\Delta t} = \frac{\mu\sigma(\alpha^{(n)})}{\Delta x^2}\frac{u_{i+1}^{(n)} - 2u_i^{(n)} + u_{i-1}^{(n)}}{1+\left(\dfrac{u_{i+1}^{(n)} - u_{i-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2} \tag{6}$$

$$(i = 1, 2, \cdots, I-1)$$

となる. 後退差分法を考えるにあたっては, (7) の右辺の $u^{(n)}$ を $u^{(n+1)}$ に置き換えることになるが, 与えられた $u^{(n)}$ から $u^{(n+1)}$ を数値的に求められるかどうかは, 明らかではない. そこで, (5) を $u^{(n)}$ 周りで線形化した方程式に後退差分を用いる. すなわち,

$$\frac{u_i^{(n+1)} - u_i^{(n)}}{\Delta t} = \frac{\mu\sigma(\alpha^{(n+1)})}{\Delta x^2}\frac{u_{i+1}^{(n+1)} - 2u_i^{(n+1)} + u_{i-1}^{(n+1)}}{1+\left(\dfrac{u_{i+1}^{(n)} - u_{i-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}$$

$$(i = 1, 2, \cdots, I-1) \tag{7}$$

とする.

次に, 境界における差分式を考える. 周期境界条件より $u_{-1}^{(n)} = u_{I-1}^{(n)}$, $u_{I+1}^{(n)} = u_1^{(n)}$ であるから, 前進差分法を用い

1: 日大理工・院 (前)・数学

ると

$$\frac{u_0^{(n+1)}-u_0^{(n)}}{\Delta t}=\frac{\mu\sigma(\alpha^{(n)})}{\Delta x^2}\frac{u_1^{(n)}-2u_0^{(n)}+u_{I-1}^{(n)}}{1+\left(\dfrac{u_1^{(n)}-u_{I-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}$$

$$\frac{u_I^{(n+1)}-u_I^{(n)}}{\Delta t}=\frac{\mu\sigma(\alpha^{(n)})}{\Delta x^2}\frac{u_1^{(n)}-2u_I^{(n)}+u_{I-1}^{(n)}}{1+\left(\dfrac{u_1^{(n)}-u_{I-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}$$

となり, 後退差分法を用いると

$$\frac{u_0^{(n+1)}-u_0^{(n)}}{\Delta t}=\frac{\mu\sigma(\alpha^{(n+1)})}{\Delta x^2}\frac{u_1^{(n+1)}-2u_0^{(n+1)}+u_{I-1}^{(n+1)}}{1+\left(\dfrac{u_1^{(n)}-u_{I-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}$$

$$\frac{u_I^{(n+1)}-u_I^{(n)}}{\Delta t}=\frac{\mu\sigma(\alpha^{(n+1)})}{\Delta x^2}\frac{u_1^{(n+1)}-2u_I^{(n+1)}+u_{I-1}^{(n+1)}}{1+\left(\dfrac{u_1^{(n)}-u_{I-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}$$

となる.

続いて (3) を差分化する. 定積分部分を台形則を用いて近似すると,

$$\begin{aligned}&\int_0^1 \sqrt{1+u_x^2(x,t)}dx\\ &\simeq\sum_{l=1}^{I}\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{I}\left(\sqrt{1+u_x^2\left(\frac{l-1}{I},t_n\right)}+\sqrt{1+u_x^2\left(\frac{l}{I},t_n\right)}\right)\\ &=\frac{1}{2I}\left(\sqrt{1+u_x^2(0,t_n)}+\sqrt{1+u_x^2(1,t_n)}\right)\\ &\quad+\frac{1}{I}\sum_{l=1}^{I-1}\sqrt{1+u_x^2\left(\frac{l}{I},t_n\right)}\end{aligned}\tag{8}$$

となる. (3) を差分化した式は

$$\begin{aligned}\alpha^{(n+1)}&=\alpha^{(n)}-\gamma\sigma'(\alpha^{(n)})\\ &\quad\times\left(\frac{1}{I}\sqrt{1+\left(\frac{u_1^{(n)}-u_{I-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}\right.\\ &\quad\left.+\frac{1}{I}\sum_{l=1}^{I-1}\sqrt{1+\left(\frac{u_{l+1}^{(n)}-u_{l-1}^{(n)}}{2\Delta x}\right)^2}\right)\Delta t\end{aligned}\tag{9}$$

となる.

## 3. 数値計算結果と考察

第 2 節で導出した式を用いて数値計算を行った. 特に, エネルギー則 (4) が成り立つかどうか, また, [1], [2] で考察された $u(x,t), \alpha(t)$ の収束のオーダーについて調べた. ここでは, $\sigma(\alpha)=1+\frac{1}{2}\alpha^2$, $u(x,0)=\cos(2\pi x)$, $\alpha(0)=\frac{\pi}{4}$ とした. また, 数値誤差の影響を考慮し, $\max|u^{(n+1)}-u^{(n)}|<10^{-4}$, $\max|\alpha^{(n+1)}-\alpha^{(n)}|<10^{-6}$ を満たす $n$ で近似解は収束したと判定した.

$r=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ は, 収束の安定性を調べる上で重要なパラメータである. $r=0.6$ のとき, 後退差分では数値解は収束しているように見えるのに対し, 前進差分では振動が起こり収束していないように見える. 他方, $r=0.1$ のときは前進差分, 後退差分ともに収束するように見える. 以下は, $r=0.1$ とした場合の前進差分による数値計算結果である.

### 3.1　$E[u,\alpha]$ の挙動

数値計算結果より, $t$ と $\log E$ は一次関数のような関係にあり,

$$\log E=-6t+0.738$$

より

$$E=e^{0.738}e^{-6t}$$

となった. したがって $E[u,\alpha]$ は指数オーダーで減衰していると推察される.

### 3.2　$u(x,t)$ の挙動

$u(x,t)$ について $\max_i u_i^{(n)}=M^{(n)}$ とおき, $t$ と $\log M^{(n)}$ の分布を調べると, この 2 変数は一次関数のような関係にあり,

$$\log M^{(n)}=-7.6t$$

より

$$M^{(n)}=e^{-7.6t}$$

となった. したがって, $u(x,t)$ は指数オーダーで減衰していると推察される.

### 3.3　$\alpha(t)$ の挙動

数値計算結果より, $t$ と $\log\alpha$ はおおよそ一次関数のような関係に見えるが, 傾きを決定することはできなかった. [1] の結果によれば, $\alpha$ は指数オーダーで減衰する.

$\sigma(\alpha)=1+\frac{1}{4}\sin^4\alpha$ のような $\sigma(\alpha)$ は, [1] の仮定においては適用できないが, [2] の仮定においては適用できる. そのため, 今後は $\sigma(\alpha)$ の条件を変えることによって $E[u,\alpha]$ や $\alpha(t)$ の挙動がどのように変化するか, 研究を行いたい.

## 4. 参考文献

[1] Mizuno, M., and Takasao, K., *A curve shortening equation with time-dependent mobility related to grain boundary motions*, Interfaces Free Bound. **23**(2021),169–190.

[2] 﨑山 歩実. Łojasiewicz-Simon 不等式とその応用, 令和 4 年度日本大学理工学研究科修士論文.

[3] 柳田 英二, 中木 達幸, 三村 昌泰. 理工系の数理 数値計算, 2014.