

## Numerical results for stability of stationary solutions to a phase field model

メタデータ	言語: jpn 出版者: 公開日: 2023-03-14 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 森, 竜樹 メールアドレス: 所属:
URL	<a href="https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1983">https://mu.repo.nii.ac.jp/records/1983</a>

# フェーズフィールドモデルの定常解の安定性に関する数値的結果

## Numerical results for stability of stationary solutions to a phase field model

森 竜 樹<sup>1</sup>

Tatsuki Mori

### 概要

1次元フェーズフィールドモデルの定常解の安定性について考える。これまで、1次元フェーズフィールドモデルの定常問題に関しては、Elliott-Zheng(1990)、および、Suzuki-Tasaki(2009)によって特殊な状況下での、解の存在・非存在、安定性についての部分的な結果が得られていた。最近、Mori-Tasaki-Tsujikawa-Yotsutani (2022)によって、一般の場合に対して、定常問題の非定数解の存在・非存在の情報を与える、全ての非定数定常解の大域的分岐ダイアグラムが明らかにされた。これにより、未解明であった詳細な定常解の安定性の解析への目途がたった。本稿では、安定性解明の第一歩として、解構造が比較的単純である状況に絞って定常問題の定数解・非定数解の安定性を数値的に調べた結果を報告する。

## 1 はじめに

### 1次元フェーズフィールドモデル

$$\begin{cases} \tau\varphi_t = d\varphi_{xx} + \varphi - \varphi^3 + 2u & \text{in } (0, 1) \times (0, \infty), & (1.1) \\ u_t + \frac{\ell}{2}\varphi_t = \kappa u_{xx} & \text{in } (0, 1) \times (0, \infty), & (1.2) \\ \varphi_x(0, t) = \varphi_x(1, t) = 0, \quad u_x(0, t) = u_x(1, t) = 0 & \text{in } (0, \infty), & (1.3) \\ \varphi(x, 0) = \varphi_0(x), \quad u(x, 0) = u_0(x) & \text{in } (0, 1) & (1.4) \end{cases} \quad (\text{TP})$$

の解の安定性について興味を持っている。ここで、 $\varphi = \varphi(x, t)$ ,  $u = u(x, t)$  は未知関数、 $\tau$ ,  $d$ ,  $\ell$ ,  $\kappa$  は正定数、このモデルは非等温な固体と液体に関する相転移現象を記述したもので、C. J. Fix [5], G. Caginalp [1], J. S. Langer [3], J. B. Collins and H. Levine [3] において多次元も含めた研究が開始された。また、T. Miyasita [6] により、(TP) は時間大域解を一意に持つことが知られている。ここでは1次元の場合に絞って、詳細な考察を行う。

物理的には、 $\varphi(x, t)$  はある場所、時刻での相を表しており、 $\varphi = 1$  付近では液体、 $\varphi = -1$  付近では固体を表す。 $u(x, t)$  はある場所、時刻での相対温度で、 $\tau$ ,  $d$ ,  $\ell$ ,  $\kappa$  はそれぞれ、時定数、液体の拡散係数、潜熱、熱伝導率を表している。

(1.2), (1.3) より、総エンタルピー保存則、

$$\frac{d}{dt} \left\{ \int_0^1 \left( u(x, t) + \frac{\ell}{2} \varphi(x, t) \right) dx \right\} = 0$$

<sup>1</sup> 武蔵野大学数理工学センター員 / 武蔵野大学工学部数理工学科助教

が成り立つ. これより, 総エンタルピーを  $m$  とすると, (TP) は以下の保存量を持つことがわかる.

$$\int_0^1 u(x, t) dx + \frac{\ell}{2} \int_0^1 \varphi(x, t) dx \equiv \int_0^1 u_0(x) dx + \frac{\ell}{2} \int_0^1 \varphi_0(x) dx = m. \quad (1.5)$$

(TP) において, 定常状態では,  $\varphi_t \equiv 0$ ,  $u_t \equiv 0$  となる. さらに, (1.2), (1.3) より,  $u$  は定数となる. この未知定数を  $\bar{u}$  とおく.

定常問題は,  $d, \ell$  は正数,  $m$  は実数とし,  $\varphi = \varphi(x)$  を未知関数,  $\bar{u}$  を未知定数とする

$$(SP; (0, 1)) \begin{cases} d\varphi_{xx} + \varphi - \varphi^3 + 2\bar{u} = 0 & \text{in } (0, 1), \\ \varphi_x(0) = \varphi_x(1) = 0, \\ \bar{u} + \frac{\ell}{2} \int_0^1 \varphi(x) dx = m \end{cases} \quad \begin{matrix} (1.6) \\ (1.7) \\ (1.8) \end{matrix}$$

となる.

この定常問題の定数解の存在・非存在と個数については次のようになる.

**Theorem A** (Elliott and Zheng [4, Theorem 3.3]). (SP; (0, 1)) の定数解について, 次のことが成り立つ.

- (i)  $\ell \geq 1$  ならば, 任意の  $m \in \mathbb{R}$  に対して, 定数解がただ 1 つ存在する.
- (ii)  $0 < \ell < 1$  かつ
  - (ii-1)  $|m| > \frac{\sqrt{3}}{9}(1 - \ell)^{3/2}$  ならば, 定数解がただ 1 つ存在する.
  - (ii-2)  $|m| = \frac{\sqrt{3}}{9}(1 - \ell)^{3/2}$  ならば, 定数解は 2 つ存在する.
  - (ii-3)  $|m| < \frac{\sqrt{3}}{9}(1 - \ell)^{3/2}$  ならば, 定数解は 3 つ存在する.

非定数解については, 特別な条件下での存在, 非存在が次のように Elliott and Zheng [4] と Suzuki and Tasaki [8] によって調べられている.

**Theorem B** ([4], [8]). (SP; (0, 1)) の  $k$  モード解について, 次のことが成り立つ.

- (i)  $d \geq 1/(k\pi)^2$  ならば,  $k$  モードの非定数解は存在しない.
- (ii)  $d < 1/(k\pi)^2$  かつ  $|m| < \frac{\sqrt{3}}{9}\sqrt{1 - dk^2\pi^2} \left| \frac{3}{2}\ell - \frac{1}{2}dk^2\pi^2 - 1 \right|$  ならば, 定数解から分岐する  $k$  モードの非定数解が存在する.

さらに, [4] ではリャプノフ関数を用いて  $m < \sqrt{3}/9\sqrt{1 - d\pi^2}((3/2)\ell - \pi^2 d/2 - 1)$  のときに, 単調な非定数定常解が大域安定となることが示された. 以上が, 既知の結果であった.

最近, Mori, Tasaki, Tsujikawa and Yotsutani [7] により, 一般の  $\ell, m$  に対して, 非定数解の存在・非存在の情報を与える, 全ての非定数定常解の大域的分岐ダイアグラムが明らかにされた. これにより, 各分岐ダイアグラムは曲線であり,  $\ell, m$  の値によって分岐構造は多彩に変化する.

全ての大域的分岐ダイアグラムは, [7] で示したように, 単調増加な解のスケーリングと折り返しから作られるので, (SP; (0, 1)) において, 単調増加な解のみに注目する. したがって,  $d, \ell$

は正数,  $m$  は実数とし,  $\varphi = \varphi(x)$  を未知関数,  $\bar{u}$  を未知定数とする

$$\begin{cases} d\varphi_{xx} + \varphi - \varphi^3 + 2\bar{u} = 0 & \text{in } (0, 1), & (1.9) \\ \varphi_x(0) = \varphi_x(1) = 0, & & (1.10) \\ \varphi_x(x) > 0 & \text{in } (0, 1), & (1.11) \\ \bar{u} + \frac{\ell}{2} \int_0^1 \varphi(x) dx = m & & (1.12) \end{cases} \quad (\text{SP})$$

の解の構造を理解することが重要である.

(SP) の解析のため, 正数  $d$  と実数  $\bar{u}$  を既知とし,  $\varphi = \varphi(x)$  を未知関数とする, 補助的な非線形境界値問題

$$\begin{cases} d\varphi_{xx} + \varphi - \varphi^3 + 2\bar{u} = 0 & \text{in } (0, 1), & (1.13) \\ \varphi_x(0) = \varphi_x(1) = 0, & & (1.14) \\ \varphi_x(x) > 0 & \text{in } (0, 1) & (1.15) \end{cases} \quad (\text{AP})$$

を導入する. (SP) の解は, (AP) の解の中で積分制約条件 (1.12) を満たすものである.

Smoller and Wasserman [9] により, (AP) の解が存在するための必要十分条件は  $(\bar{u}, d) \in \mathcal{G}$  であることが知られている. ただし,

$$\mathcal{G} := \left\{ (\bar{u}, d) : |\bar{u}| < \sqrt{3}/9, 0 < d < (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2 \right\}. \quad (1.16)$$

ここで,  $|\bar{u}| < \sqrt{3}/9$  のもとで  $z - z^3 + 2\bar{u} = 0$  は異なる 3 実根を持ち,  $\beta(\bar{u})$  は 3 実根のうちで大きさが真ん中のものである. さらに, (AP) の解は一意的である. この解を  $\varphi(x; \bar{u}, d)$  とかく. これより, (AP) の解全体は領域  $\mathcal{G}$  と 1:1 対応がつく.

図 1 は  $\bar{u}$  をとめるごとに,  $d$  を  $(1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  から 0 に近づけていったときの, (AP) の解  $\varphi(x; \bar{u}, d)$  の形状の変化の様子を示したものである. 解は境界  $d = (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  上で定数解である.  $d \rightarrow 0$  のとき,  $\bar{u} < 0$  では  $x = 0$  に境界層を持つ解,  $\bar{u} = 0$  では  $x = 1/2$  に遷移層を持つ解,  $\bar{u} > 0$  では  $x = 1$  に境界層を持つ解に近づいていく.

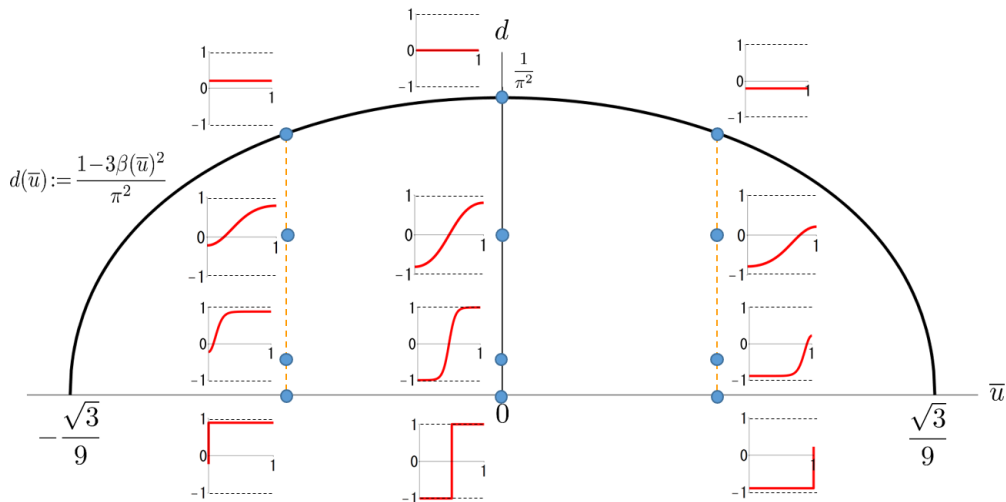


図 1 (AP) の解  $\varphi(x; \bar{u}, d)$  の形状

$\ell, m$  を与えたとき, (SP) の全ての非定数定常解の大域的分岐ダイアグラムを  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  とすると, 次のことが成り立つ.

$$\mathcal{B}^{\ell, m} := \{(\bar{u}, d) : (\text{SP}) \text{ has a solution for } (\bar{u}, d) \in \mathcal{G}\} \tag{1.17}$$

$$= \left\{ (\bar{u}, d) : \bar{u} + \frac{\ell}{2} \int_0^1 \varphi(x; \bar{u}, d) dx = m, (\bar{u}, d) \in \mathcal{G} \right\}. \tag{1.18}$$

図 2 から図 5 は  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  の形状を, 横軸に  $\bar{u}$ , 縦軸に  $d$  をとり, 描いたものである. 図中にある青色でかかれた放物線のような曲線と直線で囲まれた領域は  $\mathcal{G}$  であり, その内部にある橙色, 紫色の曲線が  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  である. 図 1 と併せて見ると,  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  は

- ・ 定数解と内部に遷移層を持つ解と繋ぐ曲線 (例えば図 2 の左から 2 番目の図中の曲線),
- ・ 境界層を持つ解と内部層を持つ解と繋ぐ曲線 (例えば図 2 の左から 4 番目の図中の曲線),
- ・ 定数解同士を繋ぐ曲線 (例えば図 4 の左から 2 番目の図中の紫色の曲線),
- ・ 定数解と境界層を持つ解を繋ぐ曲線 (例えば図 5 の左から 2 番目の図中の紫色の曲線)

といったような多様な構造を持つ.

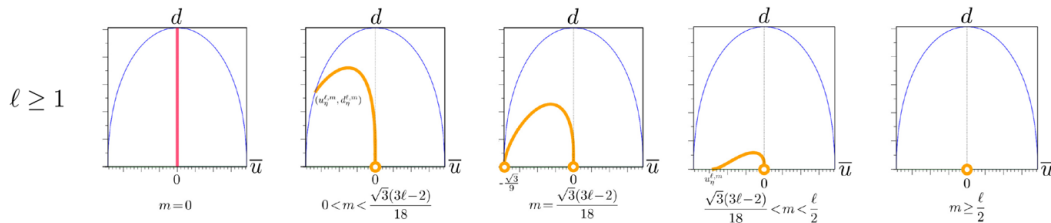


図 2  $\ell \geq 1$  の場合の  $m$  ごとの  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  の形状

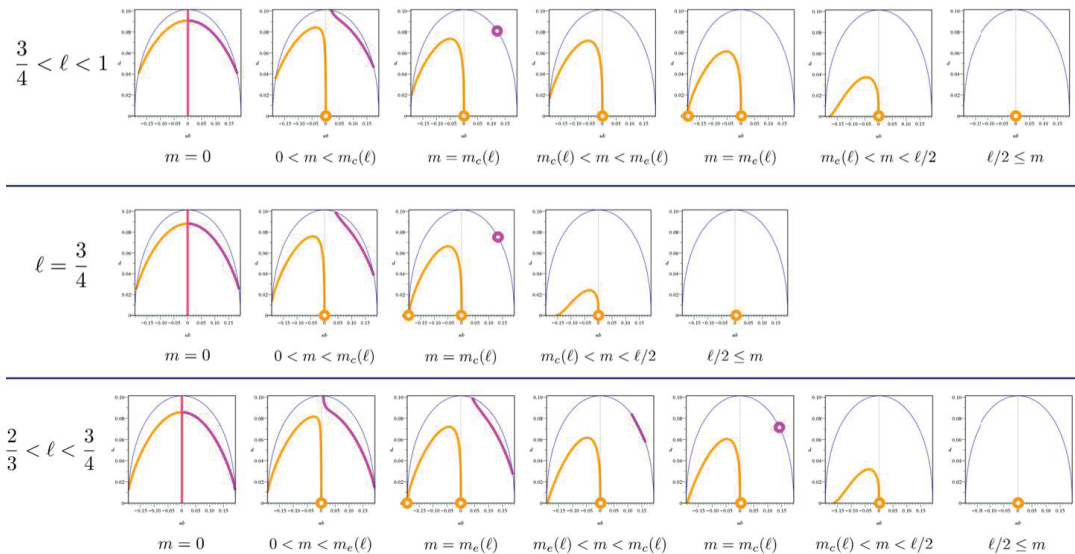


図 3  $2/3 < \ell < 1$  の場合の  $m$  ごとの  $\mathcal{B}^{\ell, m}$  の形状

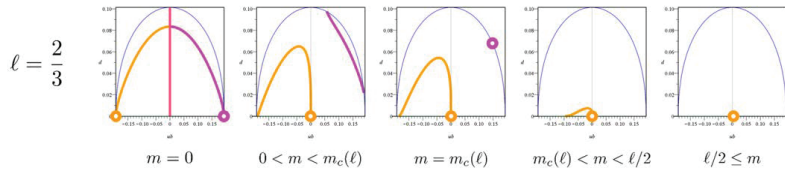


図4  $l = 2/3$  の場合の  $m$  ごとの  $B^{\ell,m}$  の形状

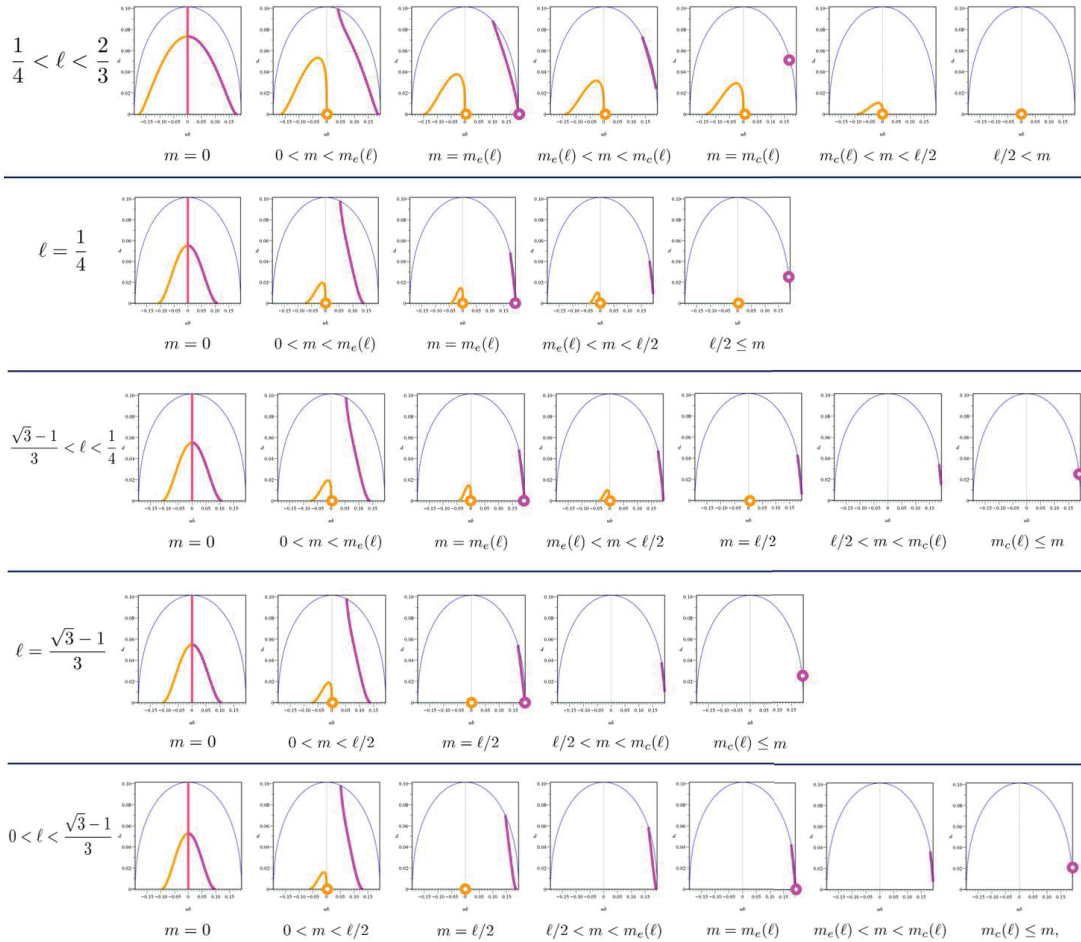


図5  $0 < l < 2/3$  の場合の  $m$  ごとの  $B^{\ell,m}$  の形状

[7] では、さらに、 $k$  モードの非定数解の存在・非存在について解析をしている。ここで、 $k$  モード ( $k = 1, 2, \dots$ ) の非定数解とは、 $k = 1$  に対しては、 $x \in (0, 1)$  で単調で、 $k = 2, 3, \dots$  に対しては、 $x \in (0, 1/k)$  を 1 周期として  $k - 1$  回だけ解を折り返して得られる解のことである。

図2から図5で示したものは1モード解の分岐ダイアグラムである。 $k$  モード解の分岐ダイアグラムの形状は、[7] の Theorem 2.6 に示しているように、1モード解の分岐ダイアグラムを縦方向に  $1/k^2$  倍したものである。

これまで述べたように、(SP) の大域的な分岐ダイアグラムは [7] において詳細に解明されてきたが、(TP) の解の安定性に関しては、リアプノフ関数等を構成できることで単調解、すなわち1モード解が大域安定となる特定の場合が分かっているだけで、詳細な安定性については未解

明である.

本稿では  $B^{\ell,m}$  の構造が比較的単純である  $\ell \geq 1$  の場合に, (SP) の定数解・非定数解の安定性を数値的に調べた結果を報告する. なお, 本結果は宮本安人氏 (東京大学), 田崎創平氏 (北海道大学), 辻川亨氏 (宮崎大学 名誉教授/明治大学), 四ツ谷晶二氏 (龍谷大学 名誉教授) との共同研究に基づくものである.

## 2 数値計算結果

$\ell = 1.1$  の場合の  $B^{\ell,m}$  は図 2 を見ると 4 つに分類されているが, 解形状に注目して分類するのであれば,  $m = 0, 0 < m \leq \sqrt{3}(3\ell - 2)/18, \sqrt{3}(3\ell - 2)/18 \leq m < \ell/2$  の 3 つに分類で十分である.

本章では  $m$  を上記の設定とし, (SP) の定数解・非定数解の安定性について, 時間発展問題 (TP) を解くことで数値的に調べた結果を述べる.

図 6 は数値計算結果から (SP) の定数解と非定数解の安定性が  $m = 0, 0 < m \leq \sqrt{3}(3\ell - 2)/18, \sqrt{3}(3\ell - 2)/18 \leq m < \ell/2$  ごとにどう変化するかを予想した図である. 図中の緑色とピンク色の直線上は, 定数解が存在する場所を示している. この直線上に緑字で書かれた sc は定数解が安定, ピンク字で書かれた uc は定数解が不安定であることを表す. また,  $B^{\ell,m}$  上に青色で書かれた s は非定数解が安定, 赤字で書かれた u は非定数解が不安定であることを表す. なお, 図中にある青色の放物線のような曲線は  $d = (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  である.

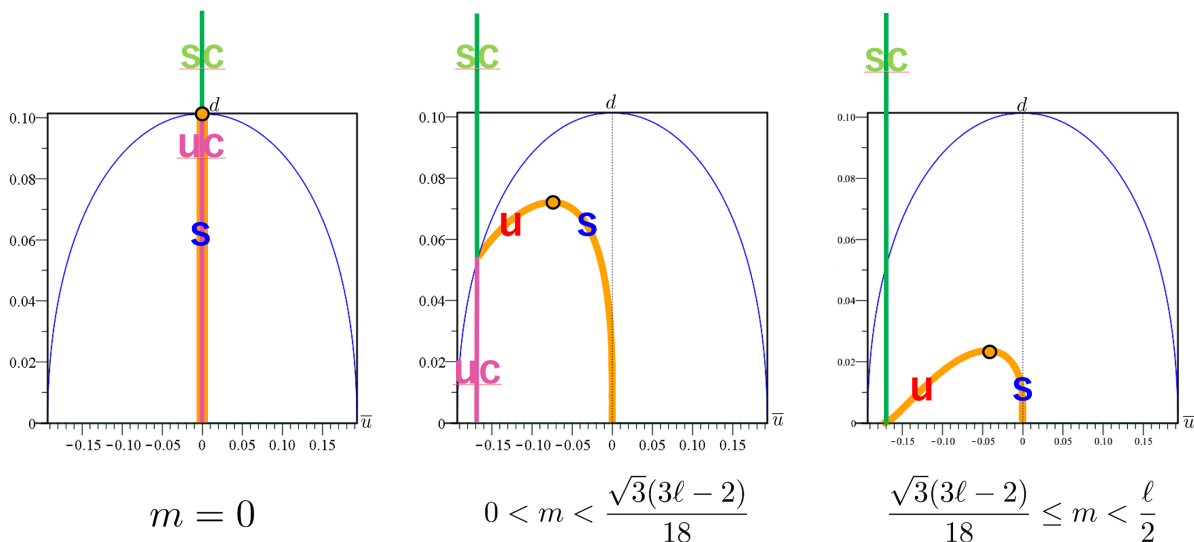


図 6 (SP) の定数解と非定数解の安定性の予想

まず,  $m = 0$  に注目する.  $d \geq 1/\pi^2$  のとき, 定数解のみが安定であるので, この解は大域安定であると予想される.  $0 < d < 1/\pi^2$  のとき, 定数解は不安定で, 非定数解が安定となるので, 非定数解が大域安定であると予想される.

$0 < m < \sqrt{3}(3\ell - 2)/18$  の場合, 解の安定性は  $m = 0$  よりも複雑となる.  $d \geq (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  のとき, 定数解は安定である.  $d < (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  のとき, 定数解は不安定で

ある. 非定数解は  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  上の  $d = (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  となる点から曲線上で  $d$  が最大となる点まで不安定であり, そこから, 原点まで安定である. 図からもわかるとおり,  $d$  が  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  上の  $d = (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$  となる点と  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  の曲線上で  $d$  が最大となる点の間にあるときには, 定数解と非定数解がともに安定となる  $d$  の区間が現れる. この区間では (TP) の解は初期値によって定数解か非定数解のどちらに収束するか変化する.

$\sqrt{3}(3\ell - 2)/18 \leq m < \ell/2$  の場合, 定数解は常に安定である. 非定数解は  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  の  $d = 0$  となる点から曲線の最大点まで, 不安定であるが, 頂点から原点では安定である. この場合も,  $0 < m < \sqrt{3}(3\ell - 2)/18$  の場合と同様に, 定数解と非定数解がともに安定となる  $d$  の区間が現れる.

以降は, 解の安定性が図 6 のようになっていることを確認できる数値計算結果の例を示す. 今回行った数値計算では (TP) において,  $\ell = 1.1$ ,  $\tau = 1.0$ ,  $\kappa = 1.0$  とし,  $m$ ,  $d$  と初期値のみを変化させた.

まずは,  $m = 0$  のときの結果に関して述べる. 図 7 は数値計算結果の代表例として  $d = 0.11$  と  $d = 0.070379$  の場合に初期値を  $\varphi(x, 0) = 0 +$  微少摂動,  $u(x, 0) = 0 +$  微少摂動として設定し, (TP) を解いた結果を描いたものである. 図 7 の中の左図にはどの  $(\bar{u}, d)$  に対応する定数解を初期値のベースに使用して, (TP) を解いたのかを示しており, 右図は (TP) の解  $\varphi(x, t)$ ,  $u(x, t)$  がどう時間発展していくかを  $d$  ごとに描いたものである. ここで, 横に  $x$ , 奥行に  $t$ , 高さに関数値をとり描いていることと, 図の手前側が  $t = 0$  であることに注意する.

$d = 0.11$  のときは  $\varphi(x, t), u(x, t)$  ともに, 定数解である 0 に収束しているのので, これらの定数解は安定であることがわかる.

$d = 0.070379$  のときは, 非定数解へと収束しており, 定数解は不安定である. 特に,  $t = 200$  付近でほとんど定数である形状から大きく変化を起し, 単調増加解へと変わっている. このとき,  $\varphi(x, t)$  と  $u(x, t)$  が保存則を満たすように連動している様子がわかる.

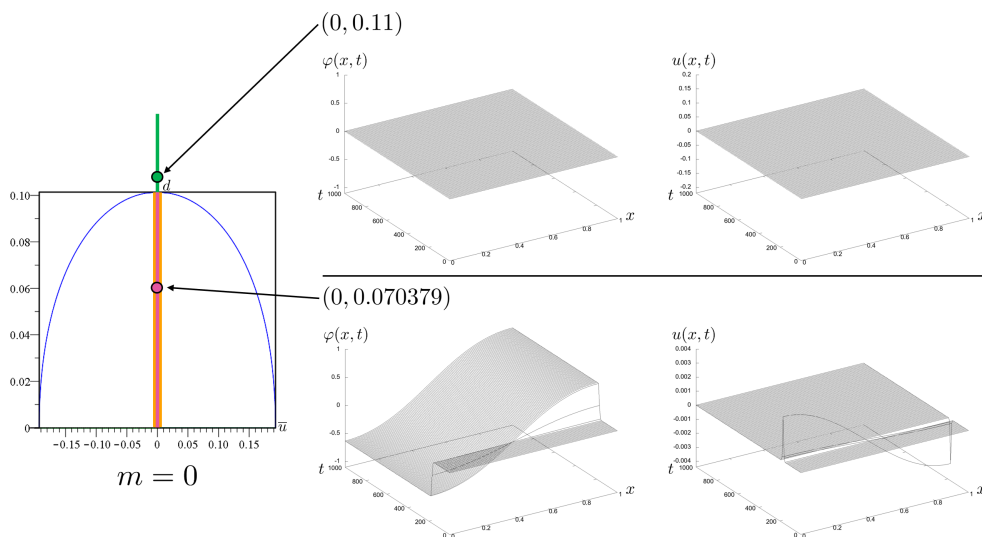


図 7  $m = 0$  の場合に定数解を初期値とした (TP) の計算結果



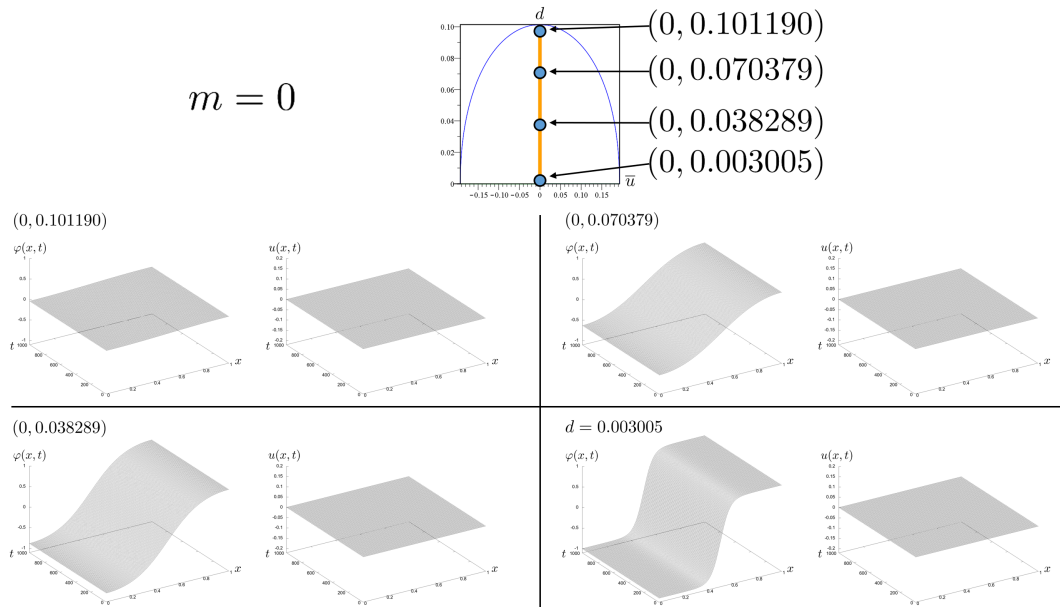


図8  $m = 0$  の場合の非定数解を初期値とした (TP) の計算結果

図8は  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  上の点  $(\bar{u}, d)$  に対応する (SP) の解  $\varphi(x; d, \bar{u})$  と  $d$  を使って, (TP) において, 初期値を  $\varphi(x, 0) = \varphi(x; d, \bar{u}) +$  微小摂動,  $u(x, 0) = \bar{u} +$  微小摂動 として設定し, 解くと, どのように時間発展するかを示した図である. 各図の上半分には  $\mathcal{B}^{\ell,m}$  上のどの点の  $(\bar{u}, d)$  を使用して得られる (SP) の解を用いたかを図示している. 図8の下半分を見ると, すべての場合において,  $\varphi(x, t), u(x, t)$  ともに, 初期値から変化しておらず, これらの非定数解は安定であることがわかる.

$0 < m < \sqrt{3}(3\ell - 2)/18$  の例として,  $m = 0.05$  のときの結果を,  $m = 0$  のときと同様の形式で描いた図を用いて述べる.

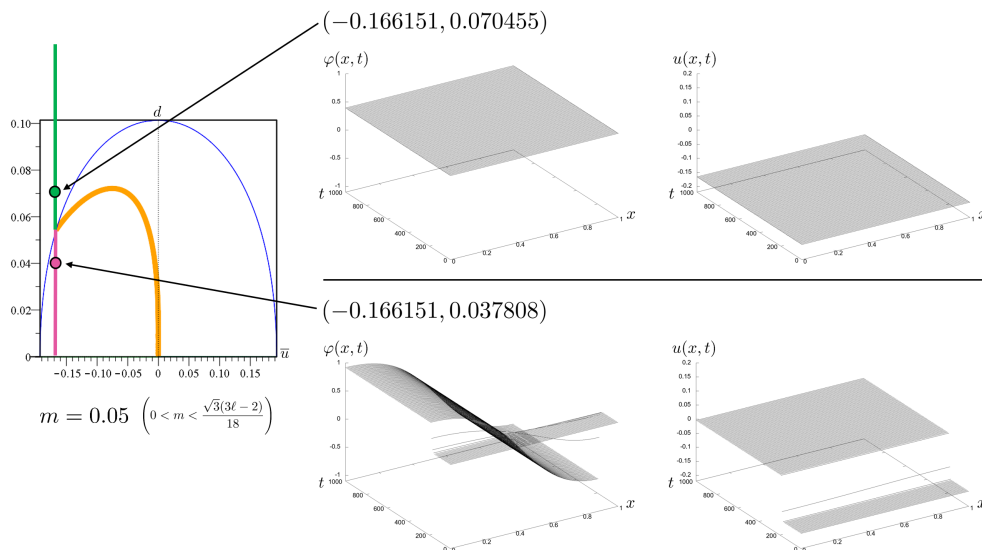


図9  $m = 0.05$  の場合の定数解を初期値とした (TP) の計算結果

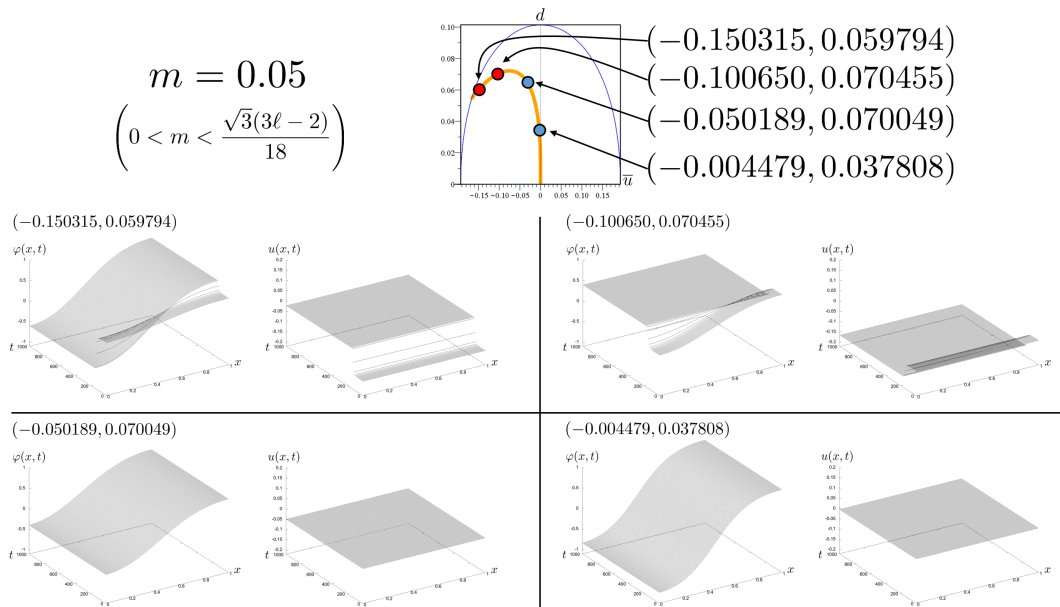


図 10  $m = 0.05$  の場合の非定数解を初期値とした (TP) の計算結果

図 9 の右の図の時間発展の結果を見ると,  $d = 0.070455$  ( $d \geq (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$ ) のとき, 定数解は安定であり,  $d = 0.037808$  ( $d < (1 - 3\beta(\bar{u})^2)/\pi^2$ ) のとき, 定数解は不安定となる. 不安定なときは遷移層を持つ解へと収束する. (TP) には解の単調増加性を課していないため, 解の摂動によって, 単調減少解が現れることに注意する.

図 10 を見ると定数解と非定数解がともに安定となる  $d$  の区間では, 初期値のわずかな違いによって, 解が定数解と非定数解のどちらかに収束する様子が確認できる.  $d = 0.059794$  のとき, 非定数解へと解は収束し,  $d = 0.070455$  のとき, 定数解へと解は収束している.

$\sqrt{3}(3\ell - 2)/18 \leq m < \ell/2$  の例として,  $m = 0.22$  のときの結果をこれまでと同様の形式で描いた図を用いて述べる.

$m = 0.22$  のとき, 常に定数解は安定である. どのような  $d$  に対しても定数解の時間発展の様子は図 11 のようになる. 図 11 では例として  $d = 0.02$  の場合を描いている. 図 12 の時間発展の様子を見ると, 安定な非定数解と不安定な非定数解があることがわかる.

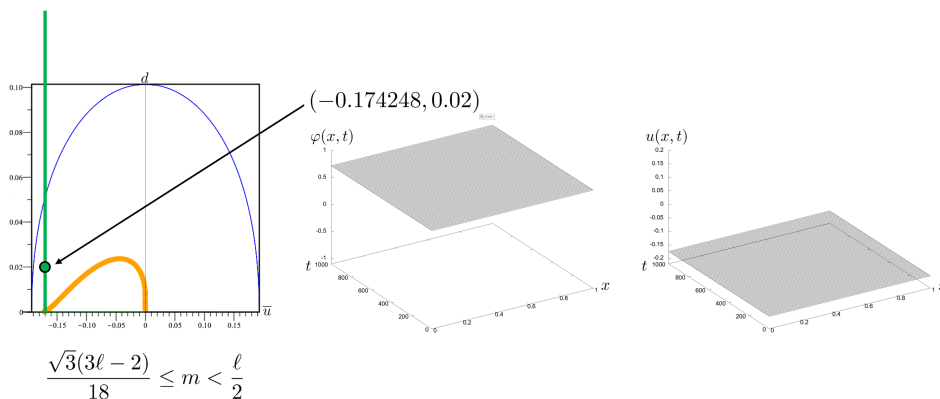


図 11  $m = 0.22$  の場合の定数解を初期値とした (TP) の計算結果

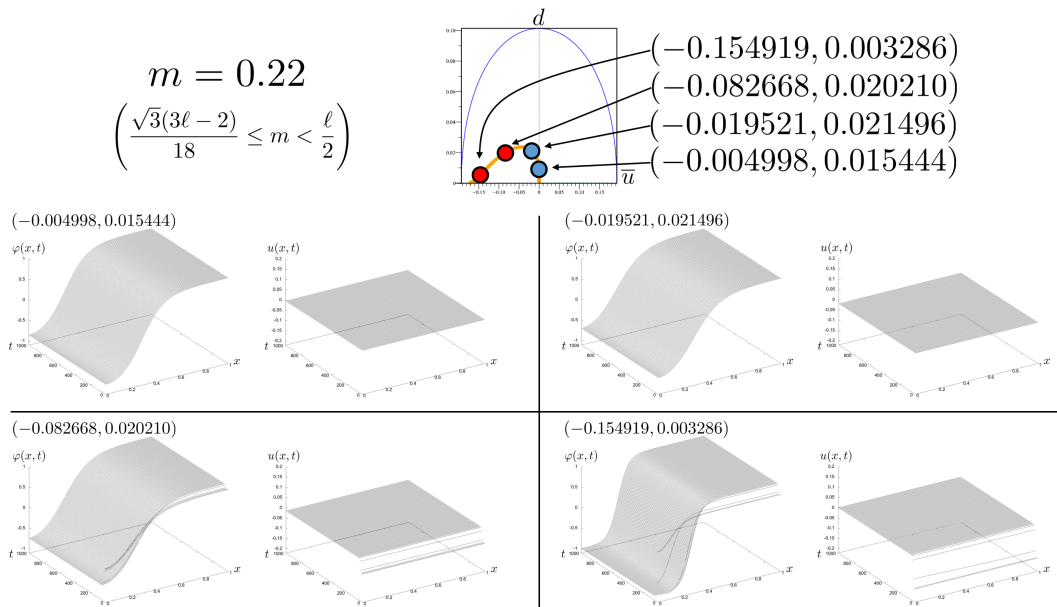


図 12  $m = 0.22$  の場合の非定数解を初期値とした (TP) の計算結果

最後に, [4] で示された, (SP;  $(0, 1)$ ) の単調な非定数定常解が大域安定となる場合, すなわち,  $m < \sqrt{3}/9\sqrt{1 - d\pi^2}((3/2)\ell - \pi^2 d/2 - 1)$  の場合の数値計算結果例を示す. 図 14 は (TP) において  $m = 0, d = 0.001$  とし, 初期値として 4 モード解に近い図 13 のような形状を設定し, (TP) を解くと, どのように時間発展するかを示した図である. 時間発展の様子を見ると, 初期値は最初に 4 モード解へと変化し, その後, 単調な非定数解へと収束する様子が確認できる.

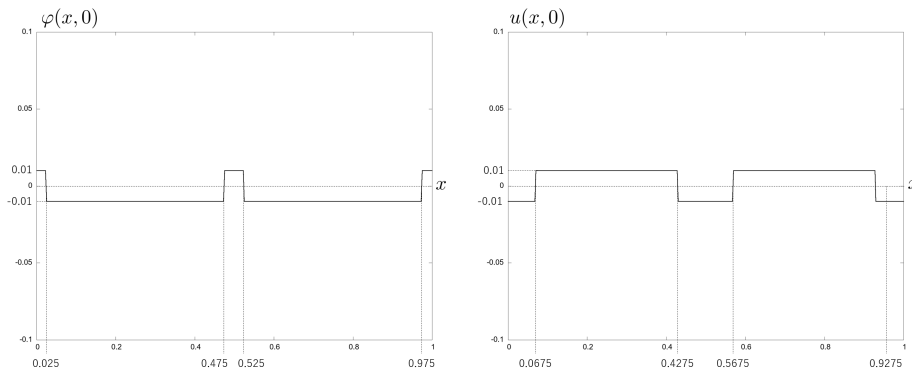


図 13 4 モード解に近い摂動が入った初期値

$m = 0, d = 0.001.$

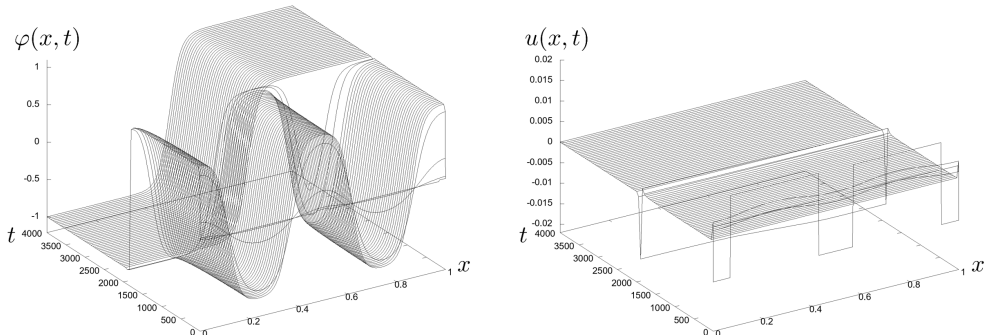


図 14  $m = 0.0$  の初期値に 4 モード解に近い摂動を入れた場合の計算例

### 3 まとめ

本稿では  $l \geq 1$  の場合に, (SP) の定数解・非定数解の安定性を数値的に調べた. 調べた結果から, 定数解と非定数解の安定性はパラメータにより, 複雑に切り替わることが予想される. また, 解の大域安定性について, 単調な非定数解の中でも境界層を持つ解ではなく内部層を持つ解が大域安定であると予想できる結果が得られた.

今後の課題は本研究で得られた数値的結果を数学的に示すことと,  $0 < l < 1$  の場合の (SP) の定数解・非定数解の安定性の解析を行うことである.

### 参考文献

- [1] G.Caginalp, An analysis of a phase field model of a free boundary, *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **92** (1986), 205–245.
- [2] J. B. Collins, H. Levine, Diffuse interface model of diffusion-limited crystal growth, *Phys. Rev. B* **31**, (1986), 6119–6122.
- [3] J. S. Langer, Models of pattern formation in first-order phase transitions, *Directions in Condensed Matter Physics*, (1986), 165–186.
- [4] C.M. Elliott and S. Zheng, Global existence and stability of solutions to the phase field equations, in: K.H. Hoffmann, J. Sprekels (Eds.), *Free Boundary Problems: International Series of Numerical Mathematics*, vol. 95, Birkhauser Verlag, Basel, 1990, 46–58.
- [5] G.J.Fix, Phase field methods for free boundary problems, in: A. Fasano, M. Primicerio (Eds.), *Free Boundary Problems: Theory and Applications*, Pitman, London, 1983, 580–589.
- [6] T. Miyasita, Global existence and exponential attractor of solutions of fix-caginalp equation, *Scientiae Mathematicae Japonicae*, **77**, No.3 (2014), 339—355
- [7] T. Mori, S.Tasaki, T. Tsujikawa and S.Yotsutani, All global bifurcation diagrams of stationary solutions to a phase field model, *Discrete and Continuous Dynamical Systems - B*, (2022).
- [8] T. Suzuki and S. Tasaki, Stationary Fix-Caginalp equation with non-local term, *Nonlinear Analysis*, **71** (2009), 1329–1349.
- [9] J.Smoller and A.Wasserman, Global bifurcation of steady-state solutions, *J. Differential Equations*, **39** (1981), 269–290.

(原稿提出: 2022 年 12 月 23 日; 修正稿提出: 2023 年 1 月 19 日)