Graduate School of Advanced Science and Engineering
Waseda University

博 士 論 文 審 査 報 告 書
Doctoral Dissertation Review Report

論　文　題　目
Dissertation Title

Mathematical and Numerical Analysis of the Cahn–Hilliard Equation

Cahn–Hilliard方程式の数理解析及び数値解析

申　請　者
(Applicant Name)
Keiichiro KAGAWA
香川　渓一郎

Department of Pure and Applied Physics　Research on Physics of Nonequilibrium Systems

February, 2023

Cahn-Hilliard 方程式は，二種の金属からなる合金などの二元流体の二成分の相分離現象を記述する方程式として，J. W. Cahn と J. E. Hilliard によって 1958 年に提案され，その後，Cahn-Hilliard 方程式とそれから派生した方程式の研究は物理学の中での一つの大きな潮流を形成してきた．Cahn-Hilliard 方程式関連の数学的研究は，1980 年代に始まり，近年その勢いを加速させて，現在では非線形偏微分方程式論の重要な一分野を形成している．その主たる理由として，Cahn-Hilliard 方程式及びそれに関連する方程式は，４階の空間微分が現れる放物型方程式であるため，従来の非線形放物型方程式研究におけるラプラシアンに代表される２階の空間微分が主要項となる放物型方程式に対する研究で利用されてきた比較定理などの数学的道具の多くが使えない為，その研究の遂行には，大胆な視点の変更と共にそれに基づく新たな手法の開発が迫られる未開拓かつ広範な挑戦的研究分野を提供していることが挙げられる．

Cahn-Hilliard の原論文では，系の保存性を仮定した事から起因して，未知関数の境界条件が斉次 Neumann 条件を満たすとされていた為，その後の研究では長くこれが踏襲されていた．

しかしながら，最近の研究では，これをいろいろな観点から見直し，斉次 Dirichlet 条件や動的境界条件等の異なる境界条件が提唱され，これ等の境界条件に基づくモデルの研究が盛んに行われるようになって来た．

本論文では以上の背景を踏まえ，Cahn-Hilliard 方程式から派生する以下の viscous Cahn-Hilliard 方程式 (VCH) に対して， 斉次 Dirichlet 境界条件を課した場合の数学的な解析と Cahn-Hilliard 方程式に動的境界条件を課した場合の数値的な解析について考察している．

$$
\text{(VCH)} \quad \begin{cases} \gamma\,\partial_t u(t,x) = \Delta\,\mu(t,x), & (t,x) \in (0,T)\times\Omega, \\ \mu(t,x) = \varphi(u(t,x)) - \alpha\Delta u(t,x) + \beta\partial_t u(t,x) - h(t,x), & (t,x) \in (0,T)\times\Omega, \end{cases}
$$

ここで Ω は十分なめらかな境界 $\partial\Omega$ を持つ $\mathbb{R}^N$ の有界領域，$T > 0$ は任意に固定された時刻，u, μ は実数値の未知関数，$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}$ は時間に関する偏微分，Δ はラプラス作用素，$\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は与えられた非線形関数，h は与えられた外力，α, β, γ は与えられた正のパラメターである．

物理学的には，u は order parameter，φ は chemical potential から起因する非線形項を表し，$\varphi(u) = u^3 - u$ が良く用いられる．この時，$u = \pm 1$ は，それぞれ一方の成分（金属原子）の占有状態を表し，$u = 0$ は両成分が均等に混合している状態を表している．よって，斉次 Dirichlet 境界条件は，境界で両成分が均一に分布している事を意味し，これは境界の温度制御により実現可能な，物理的にはより現実的な境界条件とも言える．

粘性項 $\beta\,\partial_t u$ は，1996 年 Gurtin により提唱された二成分間のミクロな摩擦から生じる粘性効果を表しており，$\beta = 0$ の時が Cahn-Hilliard 方程式に相当している．更に $\gamma = 0$ の時には，(VCH) は形式的に Allen-Cahn 方程式を与えている．

本論文は，第１章の導入部，それに続く数学的解析を述べた第１部（第２章〜第４章）及び数値解析を扱った第２部（第５章）の全５章から構成される．以下, 各章の概要とその意義及び評価を述べる．

第１章では，Cahn-Hilliard 方程式及び viscous Cahn-Hilliard 方程式の物理的背景及び先行研究について述べた上で，本論文の概観が与えられている．

第２章では次章以降の準備として，記法の定義及び問題の数学的定式化に重要な役割を演じる，劣微分作用素等に関する数学的基本事項の確認に充てられている．

第３章では，(VCH) に斉次 Dirichlet 境界条件「$u = \mu = 0 \quad (t,x) \in (0,T)\times\partial\Omega$」及び初期条件 「$u(t=0) = u_0 \quad x \in \Omega$」を課した初期値境界値問題（以後これを (IVP) と記す）に対して，解の存在と $\gamma \to 0$ 又は $\beta \to 0, \alpha \to 0$ とした時の解の漸近挙動を調べる「漸近極限問題」が考察されている．これ等の問題に関して従来の研究では，非線形項 $\varphi(u)$ に空間次元に依存する増大度 (Sobolev subcritical) 条件や単調性条件 $\varphi(u)\,u \geq 0 \quad (\forall u \in \mathbb{R})$ などの強い条件が必要であり，物理学で良く使われるモデルの $\varphi(u) = u^3 - u$ はこれ等を満たしていないという難点があった．

申請者は，$r \mapsto \varphi(r)$ が単調増加である場合には，φ に従来課されていた増大度条件は不要となることに注目して，これに単調性を崩す相対的に小さな摂動を加えても (IVP) の可解性は保証できるのではないかと着想した．即ち，φ を $\varphi = f - g$ と分解し，f, g に次の (A1) を仮定する．

(A1) f は 下半連続凸関数 $\hat{f} : \mathbb{R} \to (-\infty, +\infty]$ の劣微分で与えられる極大単調（多価）作用素．g は f と同じく下半連続凸関数 $\hat{g}$ の劣微分で与えられる作用素または $\mathbb{R}$ 上で定義された局所 Lipschtz 関数であり，ある定数 $k \in [0,1)$, $K_0, K_1 \in [0,\infty)$ が存在して次を満たす．

(g) $\quad |g_0| \leq k\,|f_0| + K_1|r| + K_0 \qquad \forall g_0 \in g(r),\ \forall f_0 \in f(r),\ \forall r \in D(f) := \{r \in \mathbb{R}; f(r) \neq \emptyset\}.$

この時，任意の $u_0 \in D(\hat{F}) := \{u \in H_0^1(\Omega); \int_\Omega \hat{f}(u(x))dx < +\infty\}$ 及び 任意の $h \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$ に対して (IVP) は強解（方程式に現れる各項が $L^2(0,T;L^2(\Omega))$ の元として方程式が満たされているような解）を持つことが示される．この結果は，非線形項 φ に関する従来の制限を大幅に緩和しており，物理学で用いられるモデルはもとより，極めて広範な非線形性をカバーするものであり，極めて高く評価される．申請者はさらに，f に関するかなり一般的な仮定を追加することで，$D(\hat{F})$ の L^2-閉包に属する初期値に対しても強解が存在するという (IVP) の極めて強い平滑化現象や，空間次元が３以下であれば，g の局所 Lipschitz 性と $u_0 \in L^\infty(\Omega) \cap D(\hat{F})$ なる仮定のもとに，解の一意性が成り立つことを示していることは新たな知見であり大変意義深い．

「漸近極限問題」に関しては，解の存在の為と同じ条件下で，まず $\gamma \to 0$ とした時，(IVP) の解はある部分列に沿って Allen-Cahn 方程式の強解に収束することが示される．また $\beta \to 0$ とする時には，h のより高い regularity の仮定のもとに (IVP) の解は，ある部分列に沿って Cahn-Hilliard 方程式の弱解（方程式に現れる各項が $L^2(0,T;H^{-1}(\Omega))$ に属し方程式を満たす解）に収束することが示される．この際，解の一意性が成り立つ場合には部分列ではなく元の列の収束が保証される．$\alpha \to 0$ とする時には，解の一意性を保証する条件下で，(IVP) の解は粘性拡散方程式（形式的に (IVP) において $\alpha = 0$ とした方程式）の強解に収束することが示される．これ等の結果を導くためには，(IVP) の解の存在証明の際に導かれたアプリオリ評価の α, β, γ の依存性を詳細に再検討し適切に処理する必要がある．従来の φ の対する仮定を大幅に緩和した (IVP) に対する同じ仮定のもとに「漸近極限問題」を解決しているという意味で，これ等の成果にも高い評価が与えられるべきである．

第４章では，斉次 Dirichlet 境界条件の下における (VCH) の時間周期問題, i.e., 時間周期条件 $u(t=0) = u(t=T)$ を課した問題（以下，これを (TPP) と記す）について考察されている．

時間周期解の存在の為には，(IVP) の解の存在はもとより，これに加えて解の再帰性を保証する為に，φ に対して課されるべき条件は (IVP) の解の存在の為のものよりもかなり制限的にならざるを得ない．この為，従来の研究ではその対象が，空間１次元かつ φ がかなり特殊なケースに限定されていた．

申請者は，このような制限を一挙に取り払い，初期値境界値問題 (IVP) の解の存在の為の仮定より強くなるものの，同レベル仮定のもとに (TPP) の解の存在を示すことに成功しており，Cahn-Hilliard 型方程式の時間周期問題の解法に大きなブレークスルーを与えたと言える．

実際，(IVP) 問題と同様に仮定 (A1) の (g) において

$$K_1 = 0, \qquad k \in [0, k_*), \qquad k_* := \frac{1}{\sqrt{\frac{\gamma C_P^2}{4\beta} + 1}}, \qquad C_P := \sup_{u \in H_0^1(\Omega)\setminus\{0\}} \frac{|u|_{L^2(\Omega)}}{|\nabla u|_{L^2(\Omega)}}$$

とした条件を $(\mathrm{A1})_\pi$ とすれば，条件 $(\mathrm{A1})_\pi$ 下で，任意の外力 $h \in L^2(0,T;L^2(\Omega))$ に対して時間周期問題 (TPP) の強解が存在することが示されている．

申請者はさらに，(TPP) に対する「漸近極限問題」を解決する事にも初めて成功している事は特筆すべき成果と言える．この問題の解析には，条件 $(\mathrm{A1})_\pi$ における k の上限 k_* の γ, β に関する依存性を明らかにした事が重要な役割を担っている．即ち，$\gamma \to 0$ とする時 $k_* \to 1$ となる

から，$(\mathrm{A1})_\pi$ において $k_* = 1$ とした条件下で，(TPP) の強解は Allen-Cahn 方程式の時間周期問題の強解に収束することが示される．一方，$\beta \to 0$ とする時には $k_* \to 0$ となるので，更に強い条件が必要となる事が推測できる．実際，任意の $\eta > 0$ に対して，$K_\eta > 0$ が存在して

$$(\mathrm{g})_\beta \qquad |g_0| \leq \eta\,|f_0| + K_\eta \qquad \forall g_0 \in g(r),\ \forall f_0 \in f(r),\ \forall r \in D(f).$$

となる条件下で，(TPP) の強解は Cahn-Hilliard 方程式の時間周期問題の弱解に収束することが示される．

第５章では，近年 Cahn-Hilliard 方程式に対する動的境界条件が数多く提案され，その数学的解析が精力的に進められている事を受けて，Racke-Zheng によって提案された「単純型動的境界条件」に従う，以下の１次元空間 $(0, L)$ における Cahn-Hilliard 方程式の初期値問題 (P) に対して，Okumura 等 (2022) の離散スキームを用いて行った数値実験の結果が報告されている．

$$(\mathrm{P})\begin{cases} \partial_t u(t,x) = D\,\partial_x^2 \mu(t,x) & t > 0,\ 0 < x < L, \\ \mu = c\,(u^3 - u) - \alpha\,\partial_x^2 u & t > 0,\ 0 < x < L, \\ \partial_x \mu(t,0) = \partial_x \mu(t,L) = 0 & t > 0, \\ \varepsilon\,\partial_t u(t,0) = \alpha\,\partial_x u(t,0),\ \varepsilon\,\partial_t u(t,L) = -\alpha\,\partial_x u(t,L) & t > 0, \\ u(0,x) = u_0(x) & 0 \leq x \leq L, \end{cases}$$

ここで，$D, c, \alpha, \varepsilon$ は正のパラメータである．形式的 $\varepsilon = 0$ とすると u に対する境界条件は，斉次 Neumann 型になり，$\varepsilon = +\infty$ とすると u の境界条件は，初期値の境界値から定まる Dirichlet 条件 $u(t,0) = u_0(0), u(t,L) = u_0(L)$ となる．

実際，申請者の数値実験でも，(P) の解は ε を 0 に近づけると，Neumann 条件の解に近づき，ε を大きくしていくと，上記の Dirichlet 条件の解に近づく事が確認されている．

申請者はさらに，(P) の解が平衡状態に近づく緩和時間を T_ε とし，$\varepsilon = 0$ とした 斉次 Neumann 条件の場合の解がその平衡状態に近づく緩和時間を T_0 とする時，$T_\varepsilon - T_0$ の ε 依存性に関して，パラメータ (D, c, α) の選び方に依存して，次の２つのケースがあることを初めて発見している．

(1) $T_\varepsilon - T_0$ は正かつ ε に関して単調に増加であり ε に線形に依存する．

(2) ある $\varepsilon_c > 0$ が存在し，$T_\varepsilon - T_0$ は正かつ ε が ε_c に近づくにつれて対数関数的に発散する．

以上を要約すると, 本論文は Cahn-Hilliard 方程式及びそれに関係する方程式に関する数学的及び数値解析的両側面からの総合的な研究であるという点で意義深いものであり，さらに，方程式を特徴づける非線形項に初期値境界値問題や時間周期問題の解の存在の為に要求されていた従来の条件を大幅に緩和し，時間周期問題の「漸近極限問題」を解決するなどの新しい重要な知見を数多く与えている．また，本研究の議論・手法は近年盛んに研究が行われている，動的境界条件に従う Cahn-Hilliard 型の方程式に対して幅広く応用できる汎用性を備えており, この分野の数学的研究に貢献するところ大である. 数値解析においては，動的境界条件に含まれるパラメータの値によって，平衡状態への緩和が凍結するという新奇な現象を発見しており，この事実は今後の数学的解析へ重要な道標を与えている．

よって本論文は博士 (理学) の学位論文として価値あるものと認める.

2023 年 2 月

審査員

(主査)	早稲田大学教授	博士（理学）(京都大学)	山崎義弘
	早稲田大学教授	理学博士（早稲田大学)	小池茂昭
	早稲田大学教授	理学博士 (京都大学)	小澤　徹
	早稲田大学名誉教授	理学博士 (東京大学)	大谷光春