結晶成長の確率モデルと揺動散逸定理

Yekaterina Epshteyn [*], Chun Liu [†], ○水野 将司 [‡]

結晶粒界の成長モデルは, 曲率に従って運動するネットワークの問題として, 多くの研究がなされてきた. 粒界や結晶が消滅するなどの臨界現象はネットワークの位相が変化する特異性を有しており, 解析が困難である. 我々は, 臨界現象を結晶粒界同士の相互作用として Brown 運動で定式化し, その確率微分方程式を解析することで, 結晶粒界の成長についての理解を進めた. 本講演では, Brown 運動と格子方位差, 三重点の発展についての関係を示す揺動散逸定理とその定理によって得られた公式を説明する.

1　方程式の導出

[4, 3] において, 結晶格子方位差と三重点におけるエネルギーの消散効果を加えたモデル

$$\begin{cases} \alpha_t^{(j)} = -\gamma\left(\sigma'(\Delta^{(j+1)}\alpha(t))|\boldsymbol{a}(t)-\boldsymbol{x}^{(j+1)}| - \sigma'(\Delta^{(j)}\alpha(t))|\boldsymbol{a}(t)-\boldsymbol{x}^{(j)}|\right), \quad j=1,2,3, \\ \boldsymbol{a}_t = -\eta\displaystyle\sum_{j=1}^{3}\frac{\boldsymbol{a}(t)-\boldsymbol{x}^{(j)}}{|\boldsymbol{a}(t)-\boldsymbol{x}^{(j)}|}, \quad t>0 \end{cases} \tag{1}$$

について可解性や長時間挙動を考察した. ここで, 固定点 $\boldsymbol{x}^{(j)} \in \mathbb{R}^2$ $(j=1,2,3)$ と, 時間変数 t を独立変数とする三重点 $\boldsymbol{a}(t) \in \mathbb{R}^2$ の 2 点を端点とする 3 つの線分を結晶粒界とみなす. $\alpha^{(j)}(t)$ は, 結晶の格子方位の角度を表す, t を独立変数とするスカラー値関数とし, $\Delta^{(j)}\alpha(t) = \alpha^{(j-1)}(t) - \alpha^{(j)}(t)$ は結晶粒界を構成する結晶の格子方位の差を表すものとする. ただし, $\alpha^{(0)} = \alpha^{(3)}$ と定める. $\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は表面張力を表し, 格子方位差に依存する非負の関数とする. [4, 3] における解析では, 粒界や結晶が消滅するなどの臨界現象は考慮していなかった. また, このモデルと Grain Boundary Character Distribution (GBCD と略す) との関係も明らかでなかった. 本節では, 臨界現象を結晶粒界同士の相互作用として Brown 運動とみなすことにより, (1) から確率微分方程式と対応する Fokker-Planck 方程式を導出する.

方程式 (1) は

$$E(\Delta\alpha, \boldsymbol{a}) = \sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{x}^{(j)}| \tag{2}$$

[*] Department of Mathematics, The University of Utah, USA
[†] Department of Applied Mathematics, Illinois Institute of Technology, USA
[‡] 日本大学理工学部数学科（〒 101-8308 東京都千代田区神田駿河台 1-8-14, E-mail: mizuno.masashi@nihon-u.ac.jp）

をエネルギーとする勾配流となっており,

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha^{(j)}} = \sigma'(\Delta^{(j+1)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(j+1)}| - \sigma'(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(j)}|, \quad \nabla_{\boldsymbol{a}} E = \sum_{j=1}^{3} \sigma(\Delta^{(j)}\alpha) \frac{\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(j)}}{|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(j)}|} \tag{3}$$

が成り立つ. GBCD を考えるうえでは, 格子方位 $\alpha^{(j)}$ ではなく格子方位差 $\Delta^{(j)}\alpha$ を変数とすることが自然である. さらに $-\pi/4 < \Delta^{(j)}\alpha < \pi/4$ を仮定すべきであること, $\Delta^{(1)}\alpha + \Delta^{(2)}\alpha + \Delta^{(3)}\alpha = 0$ となることから, $\Delta\boldsymbol{\alpha} = (\Delta^{(1)}\alpha, \Delta^{(2)}\alpha, \Delta^{(3)}\alpha)$ の状態空間は

$$\Omega := \left\{ \left(\Delta^{(1)}\alpha, \Delta^{(2)}\alpha, \Delta^{(3)}\alpha \right) \in \left(-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4} \right)^3 : \Delta^{(1)}\alpha + \Delta^{(2)}\alpha + \Delta^{(3)}\alpha = 0 \right\} \subset \mathbb{R}^3$$

ととることが自然である. そこで, (1) を格子方位差 $\Delta\alpha^{(j)}$ を変数として書きかえると

$$\begin{aligned} &\frac{d(\Delta^{(j)}\alpha)}{dt} \\ &= -\gamma \Big(2\sigma'(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}(t) - \boldsymbol{x}^{(j)}| - \sigma'(\Delta^{(j+1)}\alpha)|\boldsymbol{a}(t) - \boldsymbol{x}^{(j+1)}| - \sigma'(\Delta^{(j-1)}\alpha)|\boldsymbol{a}(t) - \boldsymbol{x}^{(j-1)}| \Big) \end{aligned}$$

となる. 次の命題により, (1) は $\Delta\alpha^{(j)}$ を独立変数としても勾配流となることがわかる.

命題 1. (2) で定めたエネルギー E の Ω 上の制約条件 $\Delta^{(1)}\alpha + \Delta^{(2)}\alpha + \Delta^{(3)}\alpha = 0$ のついた勾配 $\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} E$ は

$$\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} E = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} +2\sigma'(\Delta^{(1)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(1)}| - \sigma'(\Delta^{(2)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(2)}| - \sigma'(\Delta^{(3)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(3)}| \\ -\sigma'(\Delta^{(1)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(1)}| + 2\sigma'(\Delta^{(2)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(2)}| - \sigma'(\Delta^{(3)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(3)}| \\ -\sigma'(\Delta^{(1)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(1)}| - \sigma'(\Delta^{(2)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(2)}| + 2\sigma'(\Delta^{(3)}\alpha)|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{x}^{(3)}| \end{pmatrix} \tag{4}$$

となる.

(3), (4) より

$$\frac{d(\Delta\boldsymbol{\alpha})}{dt} = -3\gamma \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} E, \qquad \frac{d\boldsymbol{a}}{dt} = -\eta \nabla_{\boldsymbol{a}} E$$

となる. ただし, $\Delta\boldsymbol{\alpha} = (\Delta^{(1)}\alpha, \Delta^{(2)}\alpha, \Delta^{(3)}\alpha)$ である. そこで, 臨界現象を結晶粒界同士の相互作用として Brown 運動 B で表すことにし, 次の確率微分方程式

$$\begin{aligned} d(\Delta\boldsymbol{\alpha}) &= \boldsymbol{v}_{\Delta\alpha}\, dt + \beta_{\Delta\alpha}\, dB, & \boldsymbol{v}_{\Delta\alpha} &= -3\gamma \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} E, \\ d\boldsymbol{a} &= \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}}\, dt + \beta_{\boldsymbol{a}}\, dB, & \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}} &= -\eta \frac{\delta E}{\delta \boldsymbol{a}} = -\eta \nabla_{\boldsymbol{a}} E \end{aligned} \tag{5}$$

を考える. ここで, $\beta_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}, \beta_{\boldsymbol{a}} > 0$ はそれぞれ格子方位差 $\Delta\boldsymbol{\alpha}$, 三重点 $\boldsymbol{a}$ に対する揺動パラメータである. (5) の解に対する確率密度関数 を $f = f(\Delta\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{a}, t)$ とおくと, 伊藤の公式により, f は次の Fokker-Planck 方程式をみたす:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} \cdot (\boldsymbol{v}_{\Delta\alpha} f) + \nabla_{\boldsymbol{a}} \cdot (\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}} f) = \frac{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}{2} \Delta^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} f + \frac{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}{2} \Delta_{\boldsymbol{a}} f. \tag{6}$$

ここで, $\Delta^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} = \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} \cdot \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}$ であり, $\Delta_{\boldsymbol{a}}$ は三重点 $\boldsymbol{a}$ の状態空間 $\Omega_{\mathrm{TJ}} \subset \mathbb{R}^2$ 上の Laplacian である. この Fokker-Planck 方程式 (5) に自然境界条件

$$f \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} \left(\log f + \frac{6\gamma}{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}} E \right) \cdot \boldsymbol{\nu} \bigg|_{\partial(\Omega \times \Omega_{\mathrm{TJ}})} = 0, \quad f \nabla_{\boldsymbol{a}} \left(\log f + \frac{2\eta}{\beta^2_{\boldsymbol{a}}} E \right) \cdot \boldsymbol{\nu} \bigg|_{\partial(\Omega \times \Omega_{\mathrm{TJ}})} = 0 \tag{7}$$

をつけた問題を考える. ここで, $\boldsymbol{\nu}$ は $\partial(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}})$ の外向き法線ベクトルである.

2 揺動散逸定理

Fokker-Planck 方程式 (6) に自然境界条件 (7) をつけた問題

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} + \nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}\cdot(\boldsymbol{v}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}f) + \nabla_{\boldsymbol{a}}\cdot(\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}}f) = \dfrac{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}{2}\Delta^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}f + \dfrac{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}{2}\Delta_{\boldsymbol{a}}f, \quad (\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})\in\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}, \quad t>0, \\ \boldsymbol{v}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}} = -3\gamma\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}E, \qquad \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{a}} = -\eta\dfrac{\delta E}{\delta\boldsymbol{a}} = -\eta\nabla_{\boldsymbol{a}}E, \\ f\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}\left(\log f + \dfrac{6\gamma}{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}E\right)\cdot\boldsymbol{\nu}\Big|_{\partial(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}})} = 0, \qquad t>0, \\ f\nabla_{\boldsymbol{a}}\left(\log f + \dfrac{2\eta}{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}E\right)\cdot\boldsymbol{\nu}\Big|_{\partial(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}})} = 0, \qquad t>0, \\ f(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a},0) = f_0(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a}), \qquad (\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})\in\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}} \end{cases} \tag{8}$$

を考える. ここで, f_0 は確率密度関数である. (1) はエネルギー (2) が消散する, すなわち

$$\frac{d}{dt}E = -\frac{1}{3\gamma}\left|\frac{d(\Delta\boldsymbol{\alpha})}{dt}\right|^2 - \frac{1}{\eta}\left|\frac{d\boldsymbol{a}}{dt}\right|^2 \le 0 \tag{9}$$

をみたすように導いたモデルである. そこで, (8) において (9) と同等の評価が得られるための係数の条件を求める.

(8) の解 f に対し, 自由エネルギー F を

$$F[f] := \iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}} (Df\log f + fE)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a} \tag{10}$$

で定める. 自由エネルギーの消散レート $\frac{d}{dt}F[f]$ を計算すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}F[f] &= \frac{d}{dt}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}} (Df\log f + fE)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a} \\ &= -\frac{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}{2}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}\left(f\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}\left(\log f + \frac{6\gamma}{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}E\right)\right)\cdot\nabla^{\Omega}_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}\left(D\log f + E\right)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a} \\ &\quad - \frac{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}{2}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}\left(f\nabla_{\boldsymbol{a}}\left(\log f + \frac{2\eta}{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}E\right)\right)\cdot\nabla_{\boldsymbol{a}}\left(D\log f + E\right)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a} \end{aligned}$$

となる. このエネルギーが消散するための係数に対する条件は次の通りである.

定理 2 ([5, Theorem 2.3])**.** 緩和時間スケール γ,η と揺動パラメータ $\beta_{\Delta\boldsymbol{\alpha}},\beta_{\boldsymbol{a}}$ が条件

$$\frac{6\gamma}{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}} = \frac{2\eta}{\beta^2_{\boldsymbol{a}}} \tag{11}$$

をみたすとする. パラメータ D を

$$D := \frac{\beta^2_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}}{6\gamma} = \frac{\beta^2_{\boldsymbol{a}}}{2\eta}$$

で定めると, Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f に対して次のエネルギー消散評価が成り立つ.

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}(Df\log f+fE)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}\\&=-\frac{\beta_{\Delta\alpha}^2}{2D}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}f\left|\nabla_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}^{\Omega}(D\log f+E)\right|^2\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}-\frac{\beta_{\boldsymbol{a}}^2}{2D}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}f\left|\nabla_{\boldsymbol{a}}(D\log f+E)\right|^2\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}.\end{aligned}\tag{12}$$

(11) は揺動散逸定理と関係がある [2, 7]. そこで, (11) を揺動散逸関係と呼ぶ. この条件は Fokker-Planck 方程式 (8) の消散構造 (12) を保証するだけでなく, Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f の時間無限大における漸近形が自由エネルギー F の平衡点になり, Boltzmann 分布

$$f_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})=C_1\exp\left(-\frac{E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})}{D}\right)\tag{13}$$

となることも保証する. $C_1>0$ は f_∞ が確率密度関数になるように定めた定数である.

Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f が $t\to\infty$ としたときに (13) で定めた Boltzmann 分布 f_∞ に収束することは重み付き L^2 空間において正しいことが証明できる. 定理を述べるために, 2-Poincaré-Wirtinger 不等式を述べる. $\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}$ が 2-Poincaré-Wirtinger 不等式をサポートするとは, ある定数 $C_2>0$ が存在して, 任意の関数 $g\in C^\infty(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}})$ に対して

$$\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}|g-\bar{g}|^2\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}\le C_2\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}\left(|\nabla_{\Delta\boldsymbol{\alpha}}^{\Omega}g|^2+|\nabla_{\boldsymbol{a}}g|^2\right)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}$$

が成り立つことをいう. ここで, $\bar{g}$ は g の積分平均

$$\bar{g}=\frac{1}{|\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}|}\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}g\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}$$

である.

定理 3 ([5, Theorem 3.9])**.** σ は $\mathbb{R}$ 上の C^1 級関数とし, $\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}$ は 2-Poincaré-Wirtinger 不等式をサポートするとする. $f_0\in L^2(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}},e^{\frac{E}{D}}\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a})$ は確率密度関数であるとする. このとき, 正定数 $C_3,C_4>0$ が存在して, Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f と $t>0$ に対して次が成り立つ:

$$\iint_{\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}}|f(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a},t)-f_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})|^2\exp\left(\frac{E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})}{D}\right)\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a}\le C_3e^{-\frac{2\min\{3\gamma,\eta\}D}{C_4}t}.$$

注意 4. 定理 3 は Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f に対する長時間挙動を示している. [5, Theorem 3.10, 3.11] では, さらに $f_t,\nabla f$ に対する指数減衰評価も示している.

注意 5. Fokker-Planck 方程式 (8) は質量保存則をみたすことから, 漸近挙動を L^1 空間で考察することが自然である. 本問題では, 自由エネルギー F が (10) により定まっているので, エントロピー消散法を用いてエントロピーの指数減衰を導き, Csiszár-Kullback-Pinsker 不等式を用いて L^1 減衰を導くことが標準的な方法の 1 つである [1, 6]. しかし, 本問題におけるポテンシャル ∇E は滑らかでなく, 拡散項は制約条件による退化性を伴う. このことからエントロピー消散法の手法を拡張する必要があると思われる.

3　漸近形から得られる公式

定理 3 で得られた漸近形に対し, 同時確率分布

$$\rho(\Delta\boldsymbol{\alpha},t)=\int_{\Omega_{\mathrm{TJ}}} f(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a},t)\,d\boldsymbol{a},\qquad \rho_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha})=\int_{\Omega_{\mathrm{TJ}}} f_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})\,d\boldsymbol{a} \tag{14}$$

を考察する. この分布は GBCD, すなわち $\Delta\boldsymbol{\alpha}=(\Delta\alpha^{(1)},\Delta\alpha^{(2)},\Delta\alpha^{(3)})$ についての結晶粒界の相対的長さに対する経験確率分布と関係がある. GBCD は, 結晶粒界ネットワークの構造を特徴づけ, 実験やシミュレーションから結晶粒界エネルギーを推定することができると考えられている. 定理 3 の漸近形の結果より次が得られる.

命題 6. σ は $\mathbb{R}$ 上の C^1 級関数とし, $\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}}$ は 2-Poincaré-Wirtinger 不等式をサポートするとする. $f_0\in L^2(\Omega\times\Omega_{\mathrm{TJ}},e^{\frac{E}{D}}\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}d\boldsymbol{a})$ は確率密度関数であるとし, Fokker-Planck 方程式 (8) の解 f に対して, ρ を (14) で定める. このとき, 正定数 $C_5>0$ が存在して,

$$\int_\Omega |\rho(\Delta\boldsymbol{\alpha},t)-\rho_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha})|^2\,d\Delta\boldsymbol{\alpha}\le C_5 e^{-\frac{2\min\{3\gamma,\eta\}D}{C_4}t}$$

がすべての $t>0$ に対して成り立つ. ただし, 定数 $C_4>0$ は定理 3 で得られるものである.

同時確率分布の漸近形 ρ_∞ は一般に $\Delta\boldsymbol{\alpha}$ についての Boltzmann 分布にならない. そこで, Boltzmann 分布と ρ_∞ を比較するために, $\boldsymbol{a}_*\in\Omega$ に対して

$$E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})=\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{x}^{(j)}|=E_1(\Delta\boldsymbol{\alpha})+E_2(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})$$

とおく. ただし,

$$E_1(\Delta\boldsymbol{\alpha})=\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}_*-\boldsymbol{x}^{(j)}|,\quad E_2(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})=E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})-E_1(\Delta\boldsymbol{\alpha})$$

である. すると,

$$\rho_\infty(\Delta\boldsymbol{\alpha})=\left(C_1\int_{\Omega_{\mathrm{TJ}}}\exp\left(-\frac{E_2(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})}{D}\right)d\boldsymbol{a}\right)\exp\left(-\frac{E_1(\Delta\boldsymbol{\alpha})}{D}\right)$$

となり, $\exp(-E_1/D)$ の係数は一般に $\Delta\boldsymbol{\alpha}$ に依存する. この係数の $\Delta\boldsymbol{\alpha}$ の依存性が $\Delta\boldsymbol{\alpha}$ と $\boldsymbol{a}$ の相互作用を表していると考えられる. そこで, $\boldsymbol{a}_*$ をどのようにとるのが妥当であるかを考察する.

3.1　重み付き Fermat-Torricelli 点

$\boldsymbol{a}_*$ の候補の一つは, $\Delta\boldsymbol{\alpha}\in\Omega$ を固定したときの $E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})$ の最小値を達成する点 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$, すなわち

$$\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}-\boldsymbol{x}^{(j)}|=\inf_{\boldsymbol{a}\in\Omega_{\mathrm{TJ}}}\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{x}^{(j)}|=\inf_{\boldsymbol{a}\in\Omega_{\mathrm{TJ}}}E(\Delta\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{a})$$

をみたす $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ である. $\psi^{(i)}$ を $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{x}^{(i)}$ と $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{x}^{(i+1)}$ の三重点 $\boldsymbol{a}$ におけるなす角とする. $\psi^{(i)}$ をもちいて, 結晶粒界エネルギー σ と $\Delta\boldsymbol{\alpha}$ との関係を述べる.

命題 7. 重み付き Fermat-Torricelli 点 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ はすべての $j=1,2,3$ について $\boldsymbol{x}^{(j)}$ ではないとする. このとき, 三重点 $\boldsymbol{a}$ が $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ と一致するための必要十分条件は, $i=1,2,3$ に対して

$$1-\cos\psi^{(i)}=\frac{(\sigma(\Delta^{(i)}\alpha)+\sigma(\Delta^{(i+1)}\alpha))^2-\sigma(\Delta^{(i+2)}\alpha)^2}{2\sigma(\Delta^{(i)}\alpha)\sigma(\Delta^{(i+1)}\alpha)}, \tag{15}$$

が成り立つことである.

3.2 三重点と内心

次に, $\boldsymbol{x}^{(j)}$ の内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ を考える. $\boldsymbol{x}^{(j)}$ の内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ は, $\boldsymbol{x}^{(j)}$ を通る円の中心, すなわち

$$|\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}-\boldsymbol{x}^{(1)}|=|\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}-\boldsymbol{x}^{(2)}|=|\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}-\boldsymbol{x}^{(3)}|.$$

である. $\boldsymbol{a}_*$ が $\boldsymbol{x}^{(j)}$ の内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ であるとき,

$$E_1(\Delta\boldsymbol{\alpha})=|\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}-\boldsymbol{x}^{(1)}|\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha).$$

となることから, E_1 は E に対する Boltzmann 分布ではなく, $\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)$ に対する Boltzmann 分布になる, すなわち, ρ_∞ は $\exp\left(-\frac{|\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}-\boldsymbol{x}^{(1)}|}{D}\sum_{j=1}^{3}\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)\right)$ のように振る舞う.

三重点が $\boldsymbol{x}^{(j)}$ の内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ となるときの, $\boldsymbol{x}^{(j)}$ と角度 $\psi^{(j)}$ との関係を述べる.

命題 8. 三重点が $\boldsymbol{x}^{(j)}$ の内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ と一致するとき,

$$\frac{1-\cos\psi^{(1)}}{|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(2)}|^2}=\frac{1-\cos\psi^{(2)}}{|\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{x}^{(3)}|^2}=\frac{1-\cos\psi^{(3)}}{|\boldsymbol{x}^{(3)}-\boldsymbol{x}^{(1)}|^2} \tag{16}$$

が成り立つ.

次に, $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}=\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ が成り立つときの必要条件を求める. (15) と (16) を組み合わせると, 次の系が得られる.

系 9. 重み付き Fermat-Torricelli 点 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ は $j=1,2,3$ に対して $\boldsymbol{x}^{(j)}$ と一致しないとする. もし, 三重点が重み付き Fermat-Torricelli 点 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ と内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ の両方に一致するならば,

$$\begin{aligned}\frac{(\sigma(\Delta^{(1)}\alpha)+\sigma(\Delta^{(2)}\alpha))^2-\sigma(\Delta^{(3)}\alpha)^2}{2\sigma(\Delta^{(1)}\alpha)\sigma(\Delta^{(2)}\alpha)|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(2)}|^2}&=\frac{(\sigma(\Delta^{(2)}\alpha)+\sigma(\Delta^{(3)}\alpha))^2-\sigma(\Delta^{(1)}\alpha)^2}{2\sigma(\Delta^{(2)}\alpha)\sigma(\Delta^{(3)}\alpha)|\boldsymbol{x}^{(2)}-\boldsymbol{x}^{(3)}|^2}\\&=\frac{(\sigma(\Delta^{(3)}\alpha)+\sigma(\Delta^{(1)}\alpha))^2-\sigma(\Delta^{(2)}\alpha)^2}{2\sigma(\Delta^{(3)}\alpha)\sigma(\Delta^{(1)}\alpha)|\boldsymbol{x}^{(3)}-\boldsymbol{x}^{(1)}|^2}.\end{aligned} \tag{17}$$

が成り立つ.

Fermat-Torricelli 点 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{wFT}}$ と内心 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{cc}}$ が一致することは一件すると奇妙な条件のように思えるが,

$$\sigma(\Delta^{(j)}\alpha)=1+0.25\sin^2(2\Delta^{(j)}\alpha)$$

としたときの数値計算による定常状態を観察したところ, (17) がかなりの精度で成り立っていることが確認できた [5, Section 6]. (17) は結晶粒界の長さと格子方位差から, 結晶粒界エネルギーを推定するのに有用であると考えられる.

謝辞　本研究は，科学研究費補助金（若手研究，課題番号 18K13446）の助成を受けている．

参考文献

[1] A. Arnold, P. Markowich, G. Toscani, and A. Unterreiter, *On convex Sobolev inequalities and the rate of convergence to equilibrium for Fokker-Planck type equations*, Comm. Partial Differential Equations **26** (2001), 43–100.

[2] H. B. Callen and T. A. Welton, *Irreversibility and generalized noise*, Phys. Rev. **83** (1951), 34–40.

[3] Y. Epshteyn, C. Liu, and M. Mizuno, *Large time asymptotic behavior of grain boundaries motion with dynamic lattice misorientations and with triple junctions drag*, Commun. Math. Sci. **19** (2021), 1403–1428.

[4] ______, *Motion of Grain Boundaries with Dynamic Lattice Misorientations and with Triple Junctions Drag*, SIAM J. Math. Anal. **53** (2021), 3072–3097.

[5] ______, *A stochastic model of grain boundary dynamics: A fokker-planck perspective*, 2021.

[6] A. Jüngel, *Entropy methods for diffusive partial differential equations*, SpringerBriefs in Mathematics, Springer, [Cham], 2016.

[7] R. Kubo, *The fluctuation-dissipation theorem*, Reports on Progress in Physics **29** (1966), 255–284.