

フェイズフィールド法の数学、入門と概説

北海道大学理学研究科 利根川吉廣 (Yoshihiro Tonegawa)
Department of Mathematics, Hokkaido University

この講義録では Modica-Mortola 問題のエネルギー汎関数

$$(1) \quad E_\varepsilon(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon |\nabla u|^2}{2} + \frac{W(u)}{\varepsilon} \right) dx$$

に関連するいくつかの問題について説明する．ここで $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ は滑らかな境界をもつ領域、 $u: \Omega \rightarrow \mathbf{R}$ 、 W は ± 1 で 0 となる非負関数 (double well potential)、 $\varepsilon > 0$ は小さなパラメータとする。 W としては $(1-u^2)^2/4$ がよく使われる (ここでは簡単のためこの W のみを考えることにする)． E_ε は相分離に関連して頻出する汎関数で、ある安定な 2 つの相が共存している状況を考えたとき、 u は (規格化された) 密度関数、 W はヘルムホルツ自由エネルギー、そして E_ε は現象論的な界面エネルギーを表すものと考えられる．とても単純な汎関数である一方で、多くの深い結果が知られている極小曲面の理論に関係しており、数学的に豊かな構造を持つ汎関数であることが近年分かってきた．ここでは著者の研究に近い話題に話を限って、以下、§1 では基本的な 1 次元の場合について、§2 では多次元の場合の問題について、§3 ではノイズ付きの Allen-Cahn 方程式に動機付けられた問題について説明する．§1、§2 に関しては多少異なるスタイルで [22] でも最近書いており、参照していただきたい．

§1. 1 次元の場合

簡単な場合として E_ε を $\mathbf{R}$ 上で最小化することから始めよう．ここでは Dirichlet 境界条件として、 $u_\varepsilon(-\infty) = -1$ 、 $u_\varepsilon(\infty) = 1$ を課すことにする．この条件下、 E_ε は簡単に最小化でき、最小解は Euler-Lagrange 方程式

$$-\varepsilon u_\varepsilon'' + W'(u_\varepsilon)/\varepsilon = 0$$

を満たす． u_ε' を式に掛けてやると

$$\left(-\frac{\varepsilon}{2} (u_\varepsilon')^2 + \frac{W(u_\varepsilon)}{\varepsilon} \right)' = 0$$

であることがわかるので、無限遠での条件をあわせて考えると $\mathbf{R}$ 上、

$$-\frac{\varepsilon}{2} (u_\varepsilon')^2 + \frac{W(u_\varepsilon)}{\varepsilon} = 0$$

であることがわかる．よって結局最小解は 1 階常微分方程式

$$\varepsilon u_\varepsilon' = \sqrt{2W(u_\varepsilon)} = (1 - u_\varepsilon^2)/\sqrt{2}$$

を満たし、よって $u_\varepsilon(x) = \tanh((x-c)/(\varepsilon\sqrt{2}))$ (c は任意) がその解となる. このとき $E_\varepsilon(u_\varepsilon)$ は

$$\begin{aligned} E_\varepsilon(u_\varepsilon) &= \int_{\mathbf{R}} \frac{\varepsilon}{2} (u'_\varepsilon)^2 + \frac{W}{\varepsilon} = \int_{\mathbf{R}} \varepsilon (u'_\varepsilon)^2 \\ &= \int_{\mathbf{R}} u'_\varepsilon \sqrt{2W(u_\varepsilon)} = \int_{-1}^1 \sqrt{2W(s)} ds \equiv \sigma (= \frac{2\sqrt{2}}{3}) \end{aligned}$$

となり、 W のみによって決まる定数である. $\tanh((x-c)/(\varepsilon\sqrt{2}))$ は $x=c$ の ε 近傍で -1 から 1 へ変化する関数であり、例えば c から 10ε でも離れてしまえば数値的には 1 または -1 と思ってさしつかえない数になる. また c を固定して $\frac{1}{\sigma}(\frac{\varepsilon}{2}(u'_\varepsilon)^2 + \frac{W(u_\varepsilon)}{\varepsilon})dx$ を $\mathbf{R}$ 上の測度として考えると、 $\varepsilon \rightarrow 0$ としたときには $x=c$ に集中するデルタ関数に測度として収束する. 以下、 $q(t) = \tanh(t/\sqrt{2})$ とおくことにする.

次に積分条件を課した有限区間 $[0, 1]$ 上での問題を考えよう. まず、 $m \in (-1, 1)$ を与えたとき、 $\int_0^1 u_\varepsilon = m$ で、

$$\min_{\int_0^1 v = m} E_\varepsilon(v) = E_\varepsilon(u_\varepsilon)$$

となる u_ε の存在は適当な関数空間での最小化をすることで示せる. 積分条件を課していることから、Euler-Lagrange 方程式には Lagrange 乗数が付き、

$$-\varepsilon u''_\varepsilon + \frac{W'(u_\varepsilon)}{\varepsilon} = \lambda_\varepsilon$$

が $\mathbf{R}$ 上で満たされる. 多少の議論が必要だが、 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lambda_\varepsilon = 0$ が示せ、最小性から 1 回しか -1 近傍から 1 近傍に u_ε は移らないこと、 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E_\varepsilon(u_\varepsilon) = \sigma$ であること、エネルギーは m によって決まる点に集中するデルタ関数になること、その近傍では u_ε は $q((x-c)/\varepsilon)$ に近づくことなどが示せる.

上の 2 つの問題は最小解についてであり、結論は ε の数倍程度の界面領域があって $\tanh$ の形で移っているというのが答えになっている. 余談になるが、ここで視点を変えて、最小解に捉われずに以下を考えてみよう. 区間 $[0, 1]$ に定義される任意の滑らかな関数列 $\{u_j\}$ が、ある 0 に収束する $\varepsilon_j > 0$ に対して

$$\limsup_{j \rightarrow \infty} E_{\varepsilon_j}(u_j) < \infty$$

であるとするならば、 u_j や、測度 $\frac{1}{\sigma}(\frac{\varepsilon_j}{2}(u'_j)^2 + \frac{W(u_j)}{\varepsilon_j})dx$ の極限 (もし存在するなら) について一般的に言えることは何であろうか? このようなエネルギー有界性をもつような関数列は、 $q((x-c)/\varepsilon)$ の形の関数をいくつか適当につなぎ合わせることで簡単に構成でき、その極限は $\sigma \times$ 有限個のデルタ関数となる. しかしすぐに分かることは、任意の関数列を考えたとき、測度の極限は必ずしもそのようなものばかりとは言えず、かなりの自由度があるということである. ではどのよう

な一般的な条件で、 u_j が $\tanh$ のような移り方をするように保障できるだろうか？
 いろいろな条件が考えられるが、興味深い例を後述する。

§ 2. 一般次元の場合

前節で考えた 2 番目の問題を一般次元で詳しく見てみよう。以下一般次元を考えるが、体積といえば n 次元ルベグ測度、曲面積といえば $n-1$ 次元ハウスドルフ測度を意味するものとする。 $n-1$ 次元ハウスドルフ測度は界面の ‘曲面積’ と思ってもらって差し支えない。 $m \in (-|\Omega|, |\Omega|)$ を与えたとき (ただし $|\Omega|$ は Ω の体積)、最小化問題

$$\min_{\int_{\Omega} v = m} E_{\varepsilon}(v)$$

を考える。変分法のスタンダードな方法でこの問題の最小解は存在し、 u_{ε} は Euler-Lagrange 方程式

$$-\varepsilon \Delta u_{\varepsilon} + \frac{W'(u_{\varepsilon})}{\varepsilon} = \lambda_{\varepsilon}$$

を満たす。ここで λ_{ε} は前節でも見られた Lagrange 乗数である。エネルギーに関しては m と Ω のみに依存する定数 c が存在して、任意の $0 < \varepsilon < 1$ に対して最小性から $E_{\varepsilon}(u_{\varepsilon}) \leq c$ となることが容易に示せる。1次元の問題でもそうだったが、 u_{ε} は ε 位の幅の界面領域以外は ± 1 にちかい値であることが期待される。 u_{ε} に対して $M_{\varepsilon} = \{u_{\varepsilon} = 0\}$ とおき、以下のような仮定を試みる。

$$d(x) = \begin{cases} \text{dist}(x, M_{\varepsilon}) & u_{\varepsilon}(x) \geq 0 \\ -\text{dist}(x, M_{\varepsilon}) & u_{\varepsilon}(x) < 0 \end{cases}$$

としたとき、 $u_{\varepsilon}(x) \approx q(d(x)/\varepsilon)$ 。これは界面近傍を拡大してみれば、おおよそ 1 次元的な移り具合をしたほうがエネルギー的に得であろうということに動機付けられた仮定である。このように仮定すると、距離関数に関しては $|\nabla d| \equiv 1$ であることを使って、

$$\begin{aligned} E_{\varepsilon}(u_{\varepsilon}) &\approx \int_{M_{\varepsilon} \text{ の近傍}} \frac{\varepsilon}{2} (q')^2 \frac{|\nabla d|^2}{\varepsilon^2} + \frac{W(q)}{\varepsilon} \\ &\approx \frac{1}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{\{d=s\}} \frac{1}{2} (q'(s/\varepsilon))^2 + W(q(s/\varepsilon)) d\mathcal{H}^{n-1} ds \approx \sigma \cdot M_{\varepsilon} \text{ の曲面積} \end{aligned}$$

となることが期待できる。ここで 1 行目から 2 行目への近似は Co-area formula ([6]) を使っており、また最後の近似は $\{d=s\}$ の $(n-1)$ 次元ハウスドルフ測度はほぼ M_{ε} の曲面積に等しいと考えて近似している。 u_{ε} は積分条件を満たしつつ E_{ε} を最小化しており、よって M_{ε} はおおよそ分割する体積比が指定された曲面積最小曲面に近いことが予想される。 Ω 内でそのような性質をもつ分割曲面は定平均曲率曲面であることが知られている。式を使えば

$$-\varepsilon \Delta u_{\varepsilon} + \frac{W'}{\varepsilon} \approx -\varepsilon q' \frac{\Delta d}{\varepsilon} - \varepsilon q'' \frac{|\nabla d|^2}{\varepsilon^2} + \frac{W'}{\varepsilon} \approx -q' \Delta d$$

であり、これは λ_ε に等しいこと、及び Δd は M_ε の平均曲率に等しい量であることから λ_ε は界面 M_ε の平均曲率を表す量に比例していることも期待できる。以上のことは実際に一般的な意味で正しい。ここで正確な定理を述べておこう。

定理 1 ([9, 10, 15]) Ω は有界でリプシッツ連続な境界をもつとする。 u_{ε_j} は $E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) = \min_{\int_\Omega v = m} E_{\varepsilon_j}(v)$ かつ $\int_\Omega u_{\varepsilon_j} = m$ 、 $\lim_{j \rightarrow \infty} \varepsilon_j = 0$ とする。このときある部分列（再び j で書く事にする）とある有界変動関数 ([6]) u_0 が存在して、

- (1) $\lim_{j \rightarrow \infty} \int_\Omega |u_{\varepsilon_j} - u_0| = 0$ で、 $u_0(x) = \pm 1$ がほとんど全ての点で成り立つ。
- (2) $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は同じ体積比を分割する曲面の中で最小の曲面積をもつ。つまり任意の $E \subset \Omega$ で $|E| - |\Omega \setminus E| = m$ であるものに対して

$$\mathcal{H}^{n-1}(\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}) \leq \mathcal{H}^{n-1}(\Omega \cap \partial E)$$

が成り立つ。ただし $\Omega \setminus E = \{x \in \Omega \mid x \notin E\}$ である。

- (3) $n \leq 7$ では $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は滑らかな曲面で、定平均曲率をもつ。その平均曲率は $\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{\lambda_{\varepsilon_j}}{\sigma}$ で与えられる。 $n \geq 8$ では $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は閉特異点を持つ可能性があるが、その特異点のハウスドルフ次元は高々 $n - 8$ である。

(4)

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{\sigma} E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) = \mathcal{H}^{n-1}(\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\})$$

が成り立つ。

(5)

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \int_\Omega \left| \frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 - \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right| = 0$$

が成り立つ。

正確に言えば $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ や $\Omega \cap \partial E$ の曲面積とは、それぞれ集合 $\{u_0 = 1\}$ 、 E の特性関数の Ω 内での BV ノルムとして定義されるものである。しかしここでは $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は $n \leq 7$ では滑らかであるし、比較する集合 E も滑らかな境界を持つものを考えれば特にその境界の曲面積についての定義は通常の曲面積を考えれば済むので以上のように述べていることを注意する。(1) と (2) は極限関数 u_0 の界面 $\partial\{u_0 = 1\}$ が Ω 内で体積条件付きで曲面積最小曲面になっていることを示している。界面の正則性については幾何学的測度論においてよく知られている事実である ([6, 14])。 (4) は E_ε/σ が ε が小さいときには界面曲面積に近いことを意味しており、また $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ の曲面積測度と、 $\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 + \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right) dx$ の極限測度が完全に一致することもわかる。(5) は 2 つの項がある意味でバランスをとっていることを示している。 $\mathbf{R}$ 上での $q(x/\varepsilon)$ はこの 2 つの項が丁度等しかったこと

を思い出して欲しい．この問題については多少テクニカルな点になるが、以下のことも示されている．

定理 2 ([7, 19]) 上記定理 1 と同様の仮定下、

- (1) (内部での界面領域の強収束) $(\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}) \cup (\partial\Omega)$ の任意近傍の補集合上、 u_{ε_j} は 1 または -1 に一様収束する．
- (2) (境界も含めての界面領域の強収束) Ω が凸領域とすると、 $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ の任意近傍の補集合上、 u_{ε_j} は 1 または -1 に一様収束する．

よって u_{ε_j} は L^1 ノルムで u_0 に収束するのみではなく、界面領域が極限の界面に近いことがわかる．定理 2 (1) の著しい応用としては、局所エネルギー最小の u_{ε_j} は局所的に曲面積最小の界面をもつ u_0 に収束することである ([7])．これは Γ 収束を用いた証明では得られなかった結果である．

極限の界面の‘形’について一般的なことはあまり言えないが、私の知っている範囲では Ω が狭義で凸である場合には関連する事実として以下が知られている．この結果自体は‘Sharp interface’の問題、つまり極限の曲面積最小問題に関する結果である．

定理 3 ([16]) Ω は狭義で凸とする． $E \subset \Omega$ が $|E| - |\Omega \setminus E| = m$ の制限を満たす領域の中で曲面積最小界面を持つとする．つまり

$$\mathcal{H}^{n-1}(\Omega \cap \partial E) = \min_{|F| - |\Omega \setminus F| = m} \mathcal{H}^{n-1}(\Omega \cap \partial F)$$

であったとする．すると $\Omega \cap \partial E$ は連結集合である．

多少詳細を言えば、この論文ではある程度滑らかで曲面積汎関数に関して安定性をもつ界面は連結であるということを示している．曲面積最小性はむしろ十分な滑らかさを保障しているだけで、本質的な評価の段階では安定性が重要となっている．この定理 3 より、もし Ω が狭義で凸であれば定理 1 の $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は連結であることが保障される．定理 3 の‘Phase field’版として

定理 4 ([17]) Ω は狭義で凸とする． u_ε は体積条件付きで E_ε に関して安定であるとする．つまり、任意の $\int_\Omega v = 0$ である $v \in H^1(\Omega) (= \{v \in L^2(\Omega) \mid \nabla v \in L^2(\Omega)\})$ に対して

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} E_\varepsilon(u_\varepsilon + tv) = 0, \quad \left. \frac{d^2}{dt^2} \right|_{t=0} E_\varepsilon(u_\varepsilon + tv) \geq 0$$

であるとする．すると十分小さなすべての ε に対して‘ u_ε の界面領域は連結である’．

ここで言う界面領域の定義は複雑なので詳細は [17] を参照して欲しい．定理 4 に定理 2 (2) を応用することで以下が示せる．

定理 5 ([19]) Ω は狭義で凸とする. u_{ε_j} は体積条件付きで E_{ε_j} に関して安定であるとする (定理 4 参照). また $\liminf_{j \rightarrow \infty} E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) < \infty$ とする. するとある部分列が存在して (同じ記号を用いる),

$$\mu = \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 + \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right) dx$$

を $\bar{\Omega}$ 上の測度としての極限とすると、 μ のサポート ($= \{x \in \bar{\Omega} \mid \mu(B_r(x)) > 0 \text{ が任意の } r > 0 \text{ で成り立つ}\}$) は連結である.

もし u_{ε_j} がエネルギー最小であったとすると、その極限界面は曲面積最小になるので定理 3 から連結であることがわかるのであるが、安定性だけを仮定してもやはり極限界面が連結になることが示せるのである. ただし安定性のみの仮定では極限界面の正則性についていえることが少ない (多分かなり正則であると思われる). また定理 5 ではエネルギーの一樣有界性を仮定の一部としたが、これも多分いらなであろう (あまり考えていないが..). 定理 5 の結果は μ のサポートが滑らかであるかどうかは示していない. 予想としては μ と、 $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ の曲面測度が一致して (つまり $\theta \equiv 1$ が成り立つ) また界面は曲面積最小の場合と同じタイプの正則性を持つのではないかというものである.

予想 Ω は狭義で凸とする. u_{ε_j} は体積条件付きで E_{ε_j} に関して安定であるとする (定理 4 参照). するとある部分列の極限 u_0 に対して、 $\Omega \cap \partial\{u_0 = 1\}$ は $n \leq 7$ では滑らかで連結な定平均曲率曲面である.

連結ではない状況というのは例えば 2 つ以上の ‘島’ があるような場合であるが、そのような相分離状況では必ず不安定性があるだろうということは予想できる. しかしこれを一般的に示すのはなかなか難しいのである. 安定解については他にも興味深いことが示されている ([20]).

さて仕切り直しをして、ここで再び最小化に捉われないで考えてみよう. Ω 上定義された滑らかな関数列 $\{u_{\varepsilon_j}\}_{j=1}^{\infty}$ 、 $\lim_{j \rightarrow \infty} \varepsilon_j = 0$ が

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) < \infty$$

であるとする. すると u_{ε_j} や $\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 + \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right) dx$ の適当な収束する部分列をとったとき、その極限について何が言えるだろうか. 1 次元のことを考えてもそうであったが、エネルギー有界性は必ずしも u_{ε_j} の界面領域が ‘界面的’ になるという保障を与えない. エネルギー有界の仮定はある意味で ‘滑らかな曲面の列でその曲面積が一樣に有界であるとき、その曲面の極限について一般的に何がいえるか?’ とたずねている状況と似ている. これだけでは例えば以下のような簡単な例が考えられる. $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ に一辺が $1/j$ の長さをもつ格子を入れてやり、各格子点を中心に半径 $1/j^2$ の円を界面としてやると、円の数 $O(j^2)$ であり、各円周長は $2\pi/j^2$ であるので総円周長は $O(1)$ となる. 一方、 $j \rightarrow \infty$ とすると、集合としてこ

れら円は稠密な‘有理点集合’に収束する．各 j に対して、このような円の和集合を界面領域としてもち、 $E_\varepsilon(u_\varepsilon)$ が有界であるような u_ε と ε は簡単に構成できるので $\{u_\varepsilon = 0\}$ がエネルギー有界性を保ちながら稠密な集合に収束するようなものは存在するわけである．さらにもっと中途半端な突起を沢山持つようなものも構成できるので、エネルギー有界性の仮定だけではとてもではないが界面的で $q(d/\varepsilon)$ のような状況になっていることを保障できないのである．もちろん考えている現象やスケーリングによってはそのような状況が正しく望ましいものであることもあると思うが、一方で‘どのような条件をさらに与えると u_ε は界面的に振舞うか’ということが自然な問題として提起される．この候補として、すこし天下りのだが、変分問題的、または幾何学的に自然なものとしては曲率、特に平均曲率の適当な積分量が良い候補と考えられる．エネルギー最小解の時にはその平均曲率に当たる量としては

$$f = -\varepsilon \Delta u + \frac{W'(u)}{\varepsilon}$$

が考えられたし、実際 f が定数の時には平均曲率に収束していた（定理 1 (3)）．ちなみに W を‘ヘルムホルツ自由エネルギー’と考えられると述べたが、熱力学的な枠組みではこの f は‘化学ポテンシャル’と見なせることに注意する．この f についてある種の有界性を仮定するといろいろな意味で（私見ではあるが）‘筋の良さそうな’結果が期待できるのである．幾何学的測度論では‘一般化された意味での界面’（例えばバリフォールド [1]）に対して‘一般化された平均曲率’が定義できるのであるが、その平均曲率が界面上で曲面測度に関して $p > n - 1$ で L^p 可積分であるとその界面は測度論的に良い性質をいろいろもつことが知られている．ここで注意したいのはこれが‘曲面測度に関して’の可積分性である事である．振り返ってこのアナロジーをフェイズフィールドで考えるとどのようなものが考えられるだろうか．まず自然に考えられるのは

$$\int_{\Omega} |f|^p \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla u_\varepsilon|^2 + \frac{W(u_\varepsilon)}{\varepsilon} \right), \quad p > n - 1$$

のコントロールをしていけば u_ε の界面領域は界面的で E_ε も界面測度のよう振舞うのではないかというものである．しかし私の知る限りこの条件下では既知の結果はないようで、正しいかどうかはわからない．別の方向で、部分的であるが以下の結果を得た．

定理 6 ([18, 21]) 滑らかな関数列 $\{u_{\varepsilon_j}\}_{j=1}^\infty$ は

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) < \infty, \quad \liminf_{j \rightarrow \infty} \|f_j\|_{W^{1,p}(\Omega)} < \infty$$

とする．ここで $f_j = -\varepsilon_j \Delta u_{\varepsilon_j} + W'(u_{\varepsilon_j})/\varepsilon_j$ 、 $\|f\|_{W^{1,p}(\Omega)}^p = \int_{\Omega} (|f|^p + |\nabla f|^p)$ で、 p は $p > \frac{n}{2}$ を満たす数である．するとある部分列（同じ記号 j を用いる）に対して測度の列 $\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 + \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right) dx$ ($j = 1, 2, \dots$) はある測度 μ に収束するが、そ

の μ に対して以下が成り立つ：ある閉の $(n-1)$ 次元修正可能集合 M 及び M 上で $\mathcal{H}^{n-1}$ に関してほとんど全ての点で定義される正整数値関数 θ が存在して、 $\partial\Omega$ 近傍で 0 となる任意の連続関数 ϕ に対して

$$\int_{\Omega} \phi d\mu = \int_M \phi \theta d\mathcal{H}^{n-1}$$

が成り立つ。

ここで M が $(n-1)$ 次元修正可能集合であるとは、ある $\mathcal{H}^{n-1}(M_0) = 0$ である集合 M_0 と、高々可算個の $(n-1)$ 次元 C^1 多様体 $M_1, M_2, \dots$ が存在して、

$$M \subset \bigcup_{j=0}^{\infty} M_j$$

となるときである。関数 θ は界面の整数個の ‘folding’ を極限で許しているということで、エネルギー最小性がない場合は実際に起こりえる状況である。もし $\theta \equiv 1$ であれば、 $\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} |\nabla u_{\varepsilon_j}|^2 + \frac{W(u_{\varepsilon_j})}{\varepsilon_j} \right) dx$ は M の界面測度を近似していることを示している。ここでなぜ f のソボレフノルムが出てくるのがそれほどおかしくないかというと、 f のソボレフノルムをコントロールすることによって界面上の適当な L^q ノルムがトレースの意味でコントロールできるであろうことが期待できるからである。 $p = n/2$ は臨界指数で、臨界の場合によくあるようにある種の ‘小ささ’ を仮定すれば $p > n/2$ の場合と同じような結果が出るのではと思っているが、まだわからない。

定理 6 とは異なるタイプの ‘界面的’ になるための条件として

予想 $n = 2, 3$ とする。滑らかな関数列 $\{u_{\varepsilon_j}\}_{j=1}^{\infty}$ が

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} E_{\varepsilon_j}(u_{\varepsilon_j}) < \infty, \quad \liminf_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{\varepsilon_j} \int_{\Omega} |f_j|^2 < \infty$$

であれば、定理 6 と同様の結果が成り立つ。

これは $n = 1$ の場合は実際正しいことが示されている（例えば [2, 8]）。 f_j に関する仮定は、およそ平均曲率が L^2 有界になっているというようなものであり、前述したように測度論的に良いクラスに入っている可能性が高い。関係する結果として [11] を挙げておく。また $n = 2$ でさらに弱い仮定を付加した場合の結果を現在準備中である ([12])。この問題は次の § 3 の問題に密接に関係していることがわかる。

§ 3. Allen-Cahn アクション

[4] で、Faris と Jona-Lasinio はノイズを加えた非線形方程式

$$u_t = u_{xx} - W'(u) + \gamma \eta, \quad [0, L] \times [0, T]$$

を Dirichlet 条件 $u(0, t) = u(L, t) = 0$ で考えた。ここで η は 2 次元でのホワイトノイズである。 L が十分大きいとすると、 $u_{xx} - W'(u) = 0$ には 2 つの安定解、 u^s と

$-u^s$ が存在する。ひとつは1に近い解で、もう一つは -1 に近い解と考えればよい。また、(L によって個数が決まる) 符合が変わるような不安定解も存在する。ノイズが無ければ、つまり $\gamma = 0$ であれば、 u^s は定常解となるのであるが、ノイズがあると小さい確率であるが u^s は $-u^s$ にスイッチすることがある。この確率の評価は Freidlin と Wentzell の理論 ([5]) によるもので、おおよそであるが以下のように説明できる (もう少し詳しくは [3] が簡潔に述べている)。 $S(\cdot)$ を $[0, L] \times [0, T]$ で定義される関数空間上での汎関数で

$$S(u) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_0^L (u_t - u_{xx} + W'(u))^2 dx dt$$

とおく。これを Allen-Cahn アクションと呼ぶ。 $S(\cdot)$ に対して

$$\delta S = \inf_{\substack{u(\cdot, 0) = u^s(\cdot) \\ u(\cdot, T) = -u^s(\cdot)}} S(u)$$

とおく (ただし $\inf$ を取る候補としての各 u は各時間で Dirichlet 条件を満たす)。つまり初期時間 $t = 0$ では1に近い安定解、そして最終時間 $t = T$ では -1 に近い安定解である無数の u の中で S を最小化するのである。この値はある意味で2つの安定解の間を時間 T でスイッチするための最低コストであると考えられる。このとき、時間 T 内で u^s から $-u^s$ へスイッチする確率 P_γ は ($\gamma \rightarrow 0$ において)

$$P_\gamma \approx \exp\left(-\frac{\delta S}{\gamma^2}\right)$$

となる、というものである (正確な定理については [4] を参照のこと)。またスイッチの起こり方は、 $S(\cdot)$ を最小化するような移り方の近傍で起こり、それ以外の移り方が起こる確率は指数関数的にさらに小さいことも示唆されている。1から -1 、またはその逆に移る確率は γ が小さいときに指数関数的に小さく、物理的には‘無視できる’場合もあるかもしれないが、これも時間スケールの取り方によってはそうでもない。例えば ([3]) 典型的な分子の熱ノイズは 10^{-15} 秒のオーダーでおこるが、日常的な時間スケールは数秒程度であり、小さい確率でも十分物理的にスイッチが起こりえるようになるのである。この結果を呼び水として、以下の汎関数を考える: $u : \Omega(\subset \mathbf{R}^n) \times [0, T]$ に対して

$$S(u) = \frac{1}{2} \int_0^T \int_\Omega (u_t - \Delta u + W'(u))^2 dx dt$$

とし、最小化問題

$$\delta S = \inf_{\substack{u(\cdot, 0) = 1 \\ u(\cdot, T) = -1}} S(u)$$

を考える．ただしここでは簡単のため境界条件は各時刻での 0 Neumann 条件を考えよう．すると 1 次元のアナロジーで 1 から -1 へ時間 T でスイッチする確率が上記で与えられていると考えられる．ただしこれは厳密には ($n > 1$ では) 全く示されていないようである． δS に関しては Reznikoff[13] が詳細な各種のスケーリングについて調べているが、特に空間的な非一様性が観察されるのは

$$x \rightarrow x/\varepsilon, \quad t \rightarrow t/\varepsilon^2,$$

で置き換え、適当な有界領域、有界時間で考えた場合（よって Ω 、 T はここでは新しく取り直したものである）、つまり

$$S_\varepsilon(u) = \frac{1}{4\varepsilon} \int_0^T \int_\Omega \left(\varepsilon u_t - \varepsilon \Delta u + \frac{W'(u)}{\varepsilon} \right)^2 dx dt$$

であることがわかった．ここで分母の 4 は以下便利のためこのように定義している．この汎関数について簡単なことを観察し、少ないながら既知の事柄について説明しよう．

u は $\Omega \times [0, T]$ で 0 Neumann 条件を満たし、 $u(\cdot, 0) = 1$ 、 $u(\cdot, T) = -1$ であるとする．この u に対して $f = -\varepsilon \Delta u + \frac{W'(u)}{\varepsilon}$ とおくと、

$$S_\varepsilon(u) = \frac{1}{4\varepsilon} \int_0^T \int_\Omega \varepsilon^2 (u_t)^2 + 2\varepsilon u_t f + f^2 dx dt = \frac{1}{4} \int_0^T \int_\Omega \varepsilon (u_t)^2 + \frac{1}{\varepsilon} f^2 dx dt$$

となる．ここで真ん中の項の積分が 0 となるのは部分積分、及び E_ε が時刻 0、 T では 0 となることを使っている．また $ab \leq \frac{1}{4}(a+b)^2$ が成り立つことを使って、

$$\frac{d}{dt} E_\varepsilon(u(\cdot, t)) = \int_\Omega u_t f \leq \frac{1}{4\varepsilon} \int_\Omega (\varepsilon u_t + f)^2$$

であること、及び $E_\varepsilon(u(\cdot, 0)) = 0$ であることから

$$E_\varepsilon(u(\cdot, t)) \leq S_\varepsilon(u), \quad 0 \leq t \leq T$$

であることがわかる．つまり $S_\varepsilon(u)$ は全時間におけるエネルギーの評価を与えるわけである．また、

$$\begin{aligned} |E_\varepsilon(u(\cdot, t_1)) - E_\varepsilon(u(\cdot, t_2))| &= \left| \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} E_\varepsilon(u(\cdot, t)) dt \right| \leq \int_{t_1}^{t_2} \int_\Omega |u_t f| dx dt \\ &\leq \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_2} \int_\Omega \varepsilon (u_t)^2 + \frac{1}{\varepsilon} f^2 dx dt \end{aligned}$$

であるので、エネルギーの全変動も $2S_\varepsilon(u)$ で評価できる．さて、 ε は小さいとして、 u は (ε に関して) $S_\varepsilon(u) = O(1)$ であるとする．すると $E_\varepsilon(u(\cdot, t))$ も $O(1)$ であり、また f もある意味でそれほど大きくない（かもしれない）と考えられ、 $u(\cdot, t)$ は ± 1 に分離した状況になっていることが期待できる．ここで仮定として、

- (1) ほとんどの時刻 t で、 $u(\cdot, t)$ は ‘界面的’ な状況になっていて、ある界面 M_t に対して $u(x, t) \approx q(d(x, t)/\varepsilon)$ ($d(\cdot, t)$ は M_t への符号付距離関数) となっており、 M_t は時間方向に滑らかに移動する。
- (2) 有限個の時刻 $T_1, \dots, T_N$ 近辺で、極めて短い時間内で新しい界面が発生（消滅）する。

δ を極めて小さい数であるとする、以上の仮定から

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N |E_\varepsilon(u(\cdot, T_k - \delta)) - E_\varepsilon(u(\cdot, T_k + \delta))| &\approx \sigma \sum_{k=1}^N \text{発生 (消滅) する界面曲面積} \\ &\leq \sum_{k=1}^N \frac{1}{2} \int_{T_k - \delta}^{T_k + \delta} \int_{\Omega} \varepsilon(u_t)^2 + \frac{1}{\varepsilon} f^2 dx dt \end{aligned}$$

が成り立つ。つまり発生、消滅する界面の曲面積は $2S_\varepsilon(u)$ で上から評価できることが期待できる。また $[0, T] \setminus \cup_{k=1}^N (T_k - \delta, T_k + \delta)$ においては界面は滑らかに移動しているとする、そこに含まれる時間 $[t_1, t_2]$ に対して

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \varepsilon(u_t)^2 + \frac{1}{\varepsilon} f^2 dx dt &\approx \frac{1}{4\varepsilon} \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} (q'd_t)^2 + (q'\Delta d)^2 dx dt \\ &\approx \frac{\sigma}{4} \int_{t_1}^{t_2} \int_{M_t} v^2 + H^2 d\mathcal{H}^{n-1} x dt \end{aligned}$$

となることが期待できる。ここで v は界面の移動速度、 H は界面の平均曲率であるが、これは d_t は界面の移動速度で $-\Delta d$ は界面の平均曲率に相当していることから推論される。また最後のステップは $|\nabla d| = 1$ であること及び $\{d(\cdot, t) = \text{const}\} \approx M_t$ であることから Co-area formula を使って計算した。これらから大雑把に言って

$$\begin{aligned} &\frac{\sigma}{2} \sum_j |\mathcal{H}^{n-1}(M_{T_j+\delta}) - \mathcal{H}^{n-1}(M_{T_j-\delta})| \\ &+ \frac{\sigma}{4} \sum \int_{[0, T] \setminus \cup_j (T_j - \delta, T_j + \delta)} \int_{M_t} v^2 + H^2 d\mathcal{H}^{n-1} x dt \\ &\leq \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} S_\varepsilon(u) \end{aligned}$$

という図式が期待される。1 項目は界面の生成または消滅に要するコスト、2 項目は界面を伝播するのに要するコストと考えられる。また $S_\varepsilon(\cdot)$ を最小化するような u はやはり上記の左辺をも最小化するような移動界面をもつようなものであることも期待される。以上の推論の詳細は [13] を参考にして欲しいが、これらはフォーマルな議論である一方、 $S_\varepsilon(\cdot)$ を評価するためには極めて有用な推論である。これらを厳密に示すためには、 $S_\varepsilon(\cdot)$ を最小化している、または有界であるような u に対して推論での仮定が正しいことを示すことが望まれる。 $S_\varepsilon(\cdot)$ が有界であると、 f は § 2 の最後で述べた条件である $\frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega} f^2$ の有界性が積分の意味で多くの時刻に

満たされていることがわかる．一般次元に関しての厳密な結果はまだないといってよいが、 $n = 1$ に関しては [8] で以上の推論の一部が厳密に示せた．

定理 7 ([8]) $[0, 1] \times [0, T]$ 上定義され、 $u_j(\cdot, 0) = 1$ 、 $u_j(\cdot, T) = -1$ で 0 Neumann 条件を満たす滑らかな関数列 $\{u_j\}_{j=1}^\infty$ と $\lim_{j \rightarrow \infty} \varepsilon_j = 0$ である数列に対して

$$\liminf_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{4} \int_0^T \int_0^1 \varepsilon_j ((u_j)_t)^2 + \frac{1}{\varepsilon_j} f_j^2 dx dt < \infty$$

であるとする．この時ある部分列（再び j で表す）と有限個の時刻 $0 \leq T_1 \leq \dots \leq T_N \leq T$ が存在して、

(1) 任意の $t \in [0, T] \setminus \cup_{j=1}^N \{T_j\}$ に対して、測度の列

$$\frac{1}{\sigma} \left(\frac{\varepsilon_j}{2} (u'_j(\cdot, t))^2 + W(u_j(\cdot, t)) / \varepsilon_j \right) dx$$

は収束する．その極限を μ^t とおく．

(2) $t \in [0, T] \setminus \cup_{j=1}^N \{T_j\}$ での μ^t は、有限個のデルタ関数の和で表される．またそれらデルタ関数の集中する点集合の位置は $T_1, \dots, T_N$ をのぞいた時刻では連続に時間変化する．

$n = 1$ では界面は点集合であり、その曲率というものは無いので、ある意味で $H = 0$ であり、よって

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} S_\varepsilon(u) \geq \frac{\sigma}{2} \sum_{j=1}^N (\text{時刻 } T_j \text{ での生成 (消滅) 界面数}) + \frac{\sigma}{4} \sum \int v^2 dt$$

となるとフォーマルにはわかる．ここで 2 項目の $\sum$ は、界面発生 (消滅) 時刻以外のそれぞれの界面の移動速度の 2 乗積分に関しての和である．もし u が $S_\varepsilon(\cdot)$ を最小化していればよって移動速度の 2 乗積分を最小化することが期待できるので、移動速度は定数、つまり定速度での移動が望ましいと予想される．また中途半端な時刻で新しい界面をつくることも余計なコストになるので避けたほうがよく、結局フォーマルには時刻 0 と T のみで界面を生成、消滅させた方がよい．よって界面は時刻 0 で発生して、定速度で動く界面がコスト最小であると予想され、またその場合のコストは

$$\liminf_{\varepsilon \rightarrow 0} S_\varepsilon(u) \geq \sigma \min_{N \in \mathbb{N}} \left(N + \frac{1}{4NT} \right)$$

であることが計算できる（ $\min$ 中の表現は、 N 個の界面が時刻 0 で等間隔に発生して等速度で動くときのコストであることがわかる）．実際、定理 7 を使ってこれは厳密に示すことができ、また上からの評価も [13] で示しているので、

定理 8 ([8]) $u \in C^\infty([0, 1] \times [0, T])$ で 0 Neumann 条件を満たし $u(\cdot, 0) = 1$, $u(\cdot, T) = -1$ であるもののうちの $S_\varepsilon(u)$ の下限を $S_\varepsilon^{\text{inf}}$ とおく. すると

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} S_\varepsilon^{\text{inf}} = \sigma \min_{N \in \mathbb{N}} \left(N + \frac{1}{4NT} \right)$$

である.

ある意味でこれは S_ε の Γ 収束を示しているといえる. 右辺の表現は T が小さくなると N を大きく取らなければならないことに注意する. つまり短い時間でスイッチするためには、ある程度の界面生成コストを払って伝播コストを低くしたほうが得ということである. これはフォーマルにはわかることであるがここでは厳密にそれを示すことができている.

$n > 1$ の場合についてはフォーマルな議論以外は定理 7、8 に類する結果はまだない. $n = 1$ 場合と大きく異なる点は、界面の発生、消滅コストは曲面積となるため、点として発生、消滅する界面はコスト 0 で作れることである. $n = 1$ の場合は新しい界面を 1 つ作るのには常に $\sigma/2$ のコストがかかることを考えて欲しい. また次元が 0 でない界面のダイナミクスとなるためより複雑なパターンが最小コストとなる可能性がある. 数値的な結果として [3] をここでは挙げるが、それによると時間が短くなるにつれてより複雑であるがある意味で規則正しいパッチワークのパターンが観察され、大変興味深い. アクションの最小化というのは極めて新しいトピックであり、難しくはあるがこれから研究の新展開が見られる分野であろう.

参考文献

- [1] Allard, W. *On the first variation of a varifold*, Ann. of Math. (2) 95, (1972), 417–491
- [2] Bellettini, G., Mugnai, L. *On the approximation of the elastica functional in radial symmetry*, to appear in Calc. Var. (2005)
- [3] E, W., Ren, W., Vanden-Eijnden, E. *Minimum action method for the study of rare events*, Comm. Pure App. Math. 57 (2004), 637–656
- [4] Faris, W.G., Jona-Lasinio, G. *Large fluctuations for a nonlinear heat equation with noise*, J. Phys. A: Math. Gen. 15 (1982), 3025–3055
- [5] Freidlin, M.E., Wentzell, A.D. *Random perturbations of dynamical systems*, Springer-Verlag, 2nd edition, New York, (1998)
- [6] Giusti, E. *Minimal surfaces and functions of bounded variation*, Birkhauser Boston (1984)

- [7] Hutchinson, J.E., Tonegawa, Y. *Convergence of phase interfaces in the van der Waals - Cahn - Hilliard theory*, Calc. Var. 10 (2000) 49–84
- [8] Kohn, R., Reznikoff, M., Tonegawa, Y. *The sharp interface limit of the action functional for Allen Cahn in one space dimension*, preprint
- [9] Luckhaus, S., Modica, L. *The Gibbs-Thompson relation within the gradient theory of phase transitions*, Arch. Rational Mech. Anal. 107 (1989), no. 1, 71–83
- [10] Modica, L. *The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion*, Arch. Rational Mech. Anal. 98 (1987), no. 2, 123–142
- [11] Moser, R. *A higher order asymptotic problem related to phase transitions*, preprint
- [12] Nagase, Y., Tonegawa, Y. in preparation
- [13] Reznikoff, M. *Rare events in finite and infinite dimensions*, Ph.D. Thesis, Courant Institute, New York University, (2004)
- [14] Simon, L. *Lectures on geometric measure theory*, Proceedings of the Centre for mathematical analysis, Australian National Univ. Vol. 3 (1983)
- [15] Sternberg, P. *The effect of a singular perturbation on nonconvex variational problems*, Arch. Rational Mech. Anal. 101 (1988), no. 3, 209–260
- [16] Sternberg, P., Zumbrun, K. *On the connectivity of boundaries of sets minimizing perimeter subject to a volume constraint*, Comm. Anal. Geom. 7 (1999), no. 1, 199–220
- [17] Sternberg, P., Zumbrun, K. *Connectivity of phase boundaries in strictly convex domains*, Arch. Rational Mech. Anal. 141 (1998), no. 4, 375–400
- [18] Tonegawa, Y. *Phase field model with a variable chemical potential*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 132(2002), no. 4, 993–1019
- [19] Tonegawa, Y. *Domain dependent monotonicity formula for a singular perturbation problem*, Indiana Univ. Math. J. 52 (2003), 69–84
- [20] Tonegawa, Y. *On stable critical points for a singular perturbation problem*, Comm. Anal. Geom. 13 (2005), no. 2, 441–461
- [21] Tonegawa, Y. *Diffused interface with the chemical potential in the Sobolev space*, preprint

- [22] 利根川吉廣 2 相分離問題への幾何学的測度論の応用, 数学 (日本数学会), 論説記事 (2005 年掲載予定)

これは 2004 年東京工業大学における非線形数理冬の学校の講義録として用意した原稿に手を加えたものです. よって曖昧で数学的に厳密ではない表現が多いですがご了承をお願いします. 近年の参考文献のいくつかはネット上でダウンロードでき、google 等を使いタイトルで検索すれば見つけることができます. ご意見、ご質問等ありましたら気軽にご一報ください. 最後になりますが物性研究への投稿を勧めて頂いた吉森明先生に感謝いたします.

Yoshihiro Tonegawa
Department of Mathematics
Hokkaido University
tonegawa@math.sci.hokudai.ac.jp
<http://www.math.sci.hokudai.ac.jp/~tonegawa/toppagejp.htm>