

令和元年6月10日現在

機関番号：32619

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15H03632

研究課題名(和文) 結晶の界面運動の数理解析の新展開～時間発展途中の現象の解析～

研究課題名(英文) Development of mathematical analysis for interface motions of crystals

研究代表者

石渡 哲哉 (Ishiwata, Tetsuya)

芝浦工業大学・システム理工学部・教授

研究者番号：50334917

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,970,000円

研究成果の概要(和文)：結晶の内部と外部を分ける相境界のように、2種の異なる状態を分離する曲線・曲面をここでは界面と呼ぶ。本研究では、界面が動く場合にどのような挙動を示すかについて解析を進め、結晶の面積が一定の場合の変形の挙動や結晶表面のスパイラル状の界面のモデル方程式の提案とその大域解の一意存在性と回転挙動の解析、辺の分裂現象や非一様場へのクリスタライン法の拡張、界面の特異性解析などの数学的結果を得た。また、面積保存性等の性質を保存する数値計算スキームの開発を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現実にかかる様々な現象を観測する際見ているのは、時間無限大ではなく有限時間での挙動である。よって、界面運動に限らず現象の数理解析において時間発展途中の挙動の解析は重要である。本研究では特に解の形状変化に着目し、時間発展途中で起こりうる解図形の凸性の変化や多角形曲線の辺の数の変化に焦点を当てこれらを明らかにした。また、高精度あるいは構造保存型の数値計算法を開発することで数値シミュレーションの信頼性を向上させた。

研究成果の概要(英文)：We consider the evolution problems of interfaces. Here, "interface" means that

separates more than two different states, such as surface of crystal. In this research project, we mainly discuss curvature dependent motions and obtain the following results: (1) Deformation process of (negative) crystals under the area preserving property. (2) Propose the mathematical model of growing spiral-shaped steps on the crystal surface and show the unique solvability and rotational behavior. (3) Extension of the framework of crystalline motion and discuss edge splitting phenomena. (4) Properties of singularities on the interface mathematically and numerically. (5) Propose structure-preserving numerical methods for area-preserving crystalline motion.

研究分野：非線形現象の数理解析

キーワード：界面ダイナミクス 結晶界面 自由境界問題 漸近挙動 特異点 曲率 数値解析 形状解析

1. 研究開始当初の背景

物質の2相を分ける相境界(以下これを界面と呼ぶ。)の運動は、20世紀後半よりステファン問題を代表として多くの研究がなされてきた。この中で、界面の運動がその曲率に依存して動く平均曲率流などの数学的研究が1980年代後半より活発に行われるようになった。平均曲率流方程式は結晶粒界の運動モデルとして古くは1950年代に材料科学の分野から提案された方程式であり、現在もなお研究が進められている。しかし、多くの界面運動の数理解析モデルは通常の意味の曲率を扱うといった数学的要請もあり滑らかな曲線・曲面が主に扱われており、またモデルも結晶構造に起因した異方性はあまり取り込まれていない。しかし、実際の結晶界面は滑らかで等方的(方向依存性を持たない)な性質を持つ界面とするには無理がある状況が多く、結晶構造等に起因した異方性を適切に取り込む必要がある。

このような中で、1990年前後にAngenent and Gurtin や Taylor によって多角形あるいは多面体状の界面を扱う枠組みが提案された。これは今日クリスタライン運動(Crystalline motion)と呼ばれており、結晶の平衡形であるウルフ図形を基本図形とした枠組みが整備されており、結晶界面として相応しい解図形のクラスやそのクラスに所属する滑らかでない多角形曲線等へ自然に導入されるクリスタライン曲率などがウルフ図形の幾何学的特性を使って定義されている。このクリスタライン運動であるが、問題の定式化以後、解の存在等の基本的な数学理論の構築や、近似理論の整備、今や界面運動のスタンダードな取扱い法となった等高面法による記述などが2000年ごろまでにM.E.Gurtin, Y.Giga, K. Ishii, H.M.Soner などにより行われた。それと並行して解の挙動に関する研究が進み、特に凸界面に対する漸近挙動が、研究代表者の石渡、分担者の矢崎、A. Stancu, B. Andrews, G. Bellettini らにより進められた。これについてもまだ未解決問題は残っているが、非凸界面の取扱いも2005,6年ごろより研究代表者やその共同研究者、G. Bellettini のグループなどにより進められた。特に、2次元平面上のクリスタライン曲率流や外力付きクリスタライン曲率流やその一般化については、有限時間で非凸界面が凸になる、という凸化理論の整備が進み(Ishiwata 2008,2011,2014 など)、初期界面や異方性のある程度限定すれば界面の時間発展途中での形状の変化を数学的に解析することが可能となってきている。

2. 研究の目的

研究代表者は1.の背景に述べた凸化理論の研究を行いながら、凸化現象が起きない場合についての実験的考察も進め、界面の自己交差による穴形成などの具体例の考察を進めてきた。時間発展途中に起こりうる現象としては、他にも界面の分裂や、複数の界面の合流現象などもあり得る。また、分担者の木村が界面の平らな部分(これをファセットという。)の不安定化の考察を進めており、「臨界長さ」という概念を導入して、ファセットの分割現象の数値シミュレーションを行っている。以上を受けて、本研究では結晶界面の運動の解析の中で、特に時間発展途中に起こる界面の形状変化やその際の界面の特異性形成に着目し、その詳細なダイナミクスを明らかにすることを目的とした。また、その数学解析および数値解析を通して現象の背後にある数学的構造を明らかにすると共に、時間発展途中の界面ダイナミクスを解析するための手法の基盤整備を行うことも目的とした。

3. 研究の方法

多角形状の異方性をもつ結晶界面の運動モデルであるクリスタライン運動の解の時間発展途中の挙動を解析するため、これまでクリスタライン曲率流の解の凸化現象の解析を進めていた研究代表者を中心に、クリスタライン運動や移動境界問題の数理解析・数値解析の経験をもつ矢崎と、多角形曲線近似による構造保存型数値計算法を構築し、クリスタライン運動の拡張を行っている木村を分担者に加えた研究体制をとる。4年間の研究期間では、面積保存型クリスタライン曲率流方程式や外力付きクリスタライン曲率流方程式、外部非一様場の効果を取り込んだクリスタライン運動などの各モデルに対して、数学解析と数値解析を相補的に進める。

研究の遂行に当たっては、研究グループの連絡を緊密に保ち適宜分担者会議を開き、更に関連する研究者の招聘・研究集会の開催を行い、情報交換を行う。

4. 研究成果

(1)中谷宇吉郎によって物理的に考察されてきた氷負結晶の変形挙動の数学的正当化を行った。具体的には、微小結晶面が出ている非凸界面を許容多角形として扱い、この変形の挙動を全表面エネルギーの面積保存条件下での勾配流として定式化し、面積保存型クリスタライン曲率流方程式を導出した。そして、非負曲率を持つ非凸初期界面に対する有限時間における凸化定理を示した。また、面積保存性をもつ数値計算法を設計し、これによる数値シミュレーションから、数学解析で扱ったより広い初期図形に対し凸化定理が成り立つことを確認した。また、凸化現象が起きず界面の自己交差が起きる具体例を構成し、すべての初期値に対しては凸化定理が成り立たないことも明らかにした。

(2)(1)の中谷の実験にある温度勾配のある場における負結晶界面の変形挙動を理解するため、非一様場における面積保存クリスタライン曲率流の定式化を行い、それに対する数値計算法を構築し、数値シミュレーションによる挙動の解析を行った。

(3)移動境界問題に対する接線速度を利用した漸近的一様配置法を組み込んだ数値計算法を構築した。また、外部ラプラス場の数値解法としての基本解近似解法の理論を整備し、これらを組み込んだ Hele-Shaw 流れの数値計算法を構築した。Hele-Shaw 流れについては、吸い込みと湧き出しを持つ場合について移動境界の不安定性のパラメータ依存性について解析した。また、基本解近似解法の不変スキームについての提案を行った。

(4)正六角形のウルフ図形をもつクリスタライン運動において、辺の衝突や分裂を許容する拡張されたクリスタライン運動の枠組みを提案し、その数学解析および数値シミュレーションを行った。また、雪結晶などのデンドライト型結晶成長問題への応用を試みた。

(5)結晶のらせん転位によるスパイラル結晶成長モデルの多角形曲線版のモデルを、中心における辺生成を伴う外力付きクリスタライン曲率流方程式として提案し、これに対する時間大域解の一意存在とスパイラル界面の回転数の挙動についての数学的結果を得た。更に、本モデルと従来から知られているレベルセット方程式による数値解の比較を行った。

(6)曲率流方程式に現れるタイプ2の特異性について、対称性などの特別な初期値に対する数学的結果を得た。更に、この問題を含むより広い枠組みに適用可能な、スケール不変性を利用した特異性同定の数値計算法を構築し、それにより数学解析では限定された初期値にのみ証明されていた重対数型の加速項をもつ爆発解が多くみられることを数値的に確認した。

(7)外力項をもつクリスタライン曲率流方程式について、定常解周りの解の挙動を明らかにした。特に、ウルフ図形が簡単な場合にセパトリクスを具体的に求め、解構造を完全に決定した。

(8)指数型の非線形性を持つ曲率流方程式を持つ様々なタイプの非一様な進行波の分類を行い、漸近挙動を明らかにした。

(9)平均曲率流に対する古典的な比較定理を n 次元空間内で曲率運動する空間曲線に対し拡張を行った。また、同時に効率的な数値計算スキームを提案し、いくつかの数値例を通してその有効性を確認した。本結果は渦糸や転位など様々な応用を持つ空間曲線運動に対する新たな数学解析手法・数値解析手法として、様々な拡張と応用が期待される。

(10)固体燃焼波面の運動モデルの1つとして蔵本シバシンスキー方程式を適用し、それに対する安定な数値計算方を提案し、燃焼実験との比較をおこなった。

また、4年間の研究期間では大きなもので以下の研究集会の開催を行った：(i) 界面ダイナミクスの研究を活発に行っているチェコの Benes 氏を中心とする中欧の研究者と本研究グループの3名がオーガナイザーとなり2016年度および2018年度に国際研究集会を開催、(ii) 本研究グループの3名がオーガナイザーとなり2016年から2018年度に界面ダイナミクスに関する研究合宿を開催、(iii) 代表者の石渡および神戸大の高坂氏と共催で、界面ダイナミクスを中心テーマとする勉強会を毎年開催、(iv) 2017年7月の国際研究集会 Equadiff において、代表者の石渡および Benes 氏、分担者の矢崎氏が界面ダイナミクスについてのセッションをそれぞれ企画・運営した。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計20件)

T. Ishiwata, On spiral solutions to generalized crystalline motion with a rotating tip motion, *Discrete and Continuous Dynamical Systems Ser. S* 8 (2015), No. 5, 881-888.

P. Paus and S. Yazaki, Exact solution for dislocation bowing and a posteriori numerical technique for dislocation touching-splitting, *JSIAM Letters* 7 (2015.9.5) 57-60.

K. Osaki, H. Satoh and S. Yazaki, Towards modelling spiral motion of open plane curves, *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S*, Vol. 8, Issue 5 (online: 2015.07, print: 2015.10) 1009-1022.

S. Yazaki, A numerical scheme for the Hele-Shaw flow with a time-dependent gap by a curvature adjusted method, *Nonlinear Dynamics in Partial Differential Equations*, Adv. Stud. Pure Math., 64, Math. Soc. Japan, Tokyo (2015.4.30) 253--261.

A. U. Maharani, M. Kimura, H. Azegami, K. Ohtsuka, and I. Armanda: Shape optimization approach to a free boundary problem. *Recent Development in Computational Science* Vol.6, (2015) pp.42-55

田中智恵, 木村正人, 特異性を持つ多角形運動と雪の結晶成長モデルへの応用, 京都大学数理解析研究所講究録 No.1979 (2015) pp.120-137.

K. Anada and T. Ishiwata, Blow-up Rates of Solutions of Initial-Boundary Value Problems for a Quasi-Linear Parabolic Equation, *Journal of Differential Equations* 262 (2017), 181--271.

S. Shioda, A. U. Maharani, M. Kimura, H. Azegami, and K. Ohtsuka: Shape optimization approach by traction method to inverse free boundary problems. *Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications*, Springer (2017) pp.111-123.

K. Ishii and M. Kimura: Convergence of a threshold-type algorithm using the signed distance function. *Interfaces Free Boundaries*, Vol.18 (2016) pp.479-522.

K. Sakakibara and S. Yazaki, Method of fundamental solutions with weighted average condition and dummy points, *JSIAM Letters* 9 (2017), 41-44.

H. Tani and S. Yazaki, Instability of a free boundary in a Hele-Shaw cell with sink/source and its parameter dependence, *JSIAM Letters* 9 (2017), 37-40.

K. Sakakibara and S. Yazaki, On invariance of schemes in the method of fundamental solutions. *Appl. Math. Lett.* 73 (2017), 16-21.

K. Anada, T. Ishiwata and T.K. Ushijima, A numerical method of estimating blow-up rates for nonlinear evolution equations by using rescaling algorithm, *Japan J. Indust. Appl. Math.*, vol. 35 (2018), 33-47.

T. Ishiwata and S. Yazaki, Structure-preserving numerical scheme for a generalized area-preserving crystalline curvature flow, *Computer Methods in Materials Science*, vol. 17, 2017, No. 2, 122-135

石渡哲哉 矢崎成俊, クリスタライン運動の数理 -- 空像変形現象と面積保存クリスタライン曲率流方程式, *応用数理* 28 巻 1 号, 岩波書店, 2018, 3-10.

T. Ishiwata and T. Ohtsuka, Evolution of spiral-shaped polygonal curve by crystalline curvature flow with a pinned tip, *DCDS-B* に掲載予定

J. Minarcik, M. Kimura, and M. Benes, Comparing motion of curves and hypersurfaces in \mathbb{R}^m . *DCDS-B* に掲載予定.

K.-I. Nakamura, K. Sakakibara and S. Yazaki, Numerical approach to three-dimensional model of cellular electrophysiology by the method of fundamental solutions, *JSIAM Lett.* 11 (2019) 17-20.

M. Goto, K. Kuwana, G. Kushida and S. Yazaki, Experimental and theoretical study on near-floor flame spread along a thin solid, *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (Online: 2018, Print: 2019) 3783-3791.

M. Goto, K. Kuwana and S. Yazaki, A simple and fast numerical method for solving flame/smoldering evolution equations, *JSIAM Lett.* 10 (2018) 49-52.

[学会発表](計 35件)

T. Ishiwata, Behavior of polygons by area-preserving crystalline curvature flow, *Mathematics for Nonlinear Phenomena: Analysis and Computation*, 2015.

T. Ishiwata, Interface Motion, Blow-up Problem, Numerical Analysis and so on, *The First Shibaaura Workshop on Mathematics, Systems and Control (SWMSC2015)*, 2015/

T. Ishiwata, The properties of type II blow-up solutions to some quasilinear parabolic equation, *2016 NCTS Workshop on Applied Mathematics at Tainan*, 2016.

K. Sakakibara and S. Yazaki, Structure-preserving numerical scheme for Hele-Shaw flows by the method of fundamental solutions combined with the uniform distribution method, *Computational and Geometric Approaches for Nonlinear Phenomena*, 2015.

S. Yazaki, A direct approach to image segmentation, *Algoritmy* 2016, 2016.

M. Kimura, An irreversible gradient flow and its application to a crack propagation model, *TCIAM2015*, 2015.

M. Kimura, Shape optimization approach by traction method to an inverse free boundary problem, *CoMFoS15*, 2015.

T. Ishiwata, Structure preserving finite difference scheme for the vortex filament motion, *NUMTA 2016 - Numerical Computations, Theory and Algorithms -*, 2016.

T. Ishiwata, Numerical and mathematical studies of some blow-up problems, *Mini-Workshop on Nonlinear phenomena, Modeling, PDEs and Simulation*, 2016.

T. Ishiwata, Behavior of polygonal curves by area-preserving crystalline curvature flow, *Banach Center Conference ``Mathematics of Pattern Formation``*, 2016.

T. Ishiwata, Behavior of polygonal curves by area-preserving crystalline curvature flow, *The 1st UOG-SIT Research Workshop in Mathematics and Computer Science in Guam*, 2017.

M. Kimura, Unidirectional gradient flow and its application to a crack propagation model, *Variational Models of Fracture (Banff International Research Station, Canada)*, 2016.

M. Kimura, Applications of a phasefield model for crack propagation, *WCCM*

XII&APCOM VI, 2016.

M. Kimura, Shape optimization approach to free boundary problems by traction method, ICCOPT2016, 2016.

M. Kimura, Phase field model for crack propagation and some applications (Keynote speaker), Japan-Taiwan Joint Workshop on Numerical Analysis and Scientific Computation, 2016.

M. Kimura, Generalized hexagonal crystalline motion with facet collision and breaking and application to a snow flake model, Emerging Developments in Interfaces and Free Boundaries, 2017.

矢崎成俊, 界面現象に現れる移動境界の追跡法, 日本数学会 2016 年度年会 (応用数学分科会), 特別講演, 2017.

S. Yazaki, How to track the moving boundary arising in interfacial phenomena, Invited talk, Reaction-diffusion system, theory and applications, 2017.

S. Yazaki, Area-preserving crystalline curvature flow equation and analysis of vapor figure in ice block, Czech-Japanese-Polish seminar in applied mathematics 2016, 2016.

T. Ishwiata, Motion by crystalline curvature of polygonal curves, Equadiff 2017, 2017.

① T. Ishwiata, Mathematical and numerical studies on the blow-up rate to a quasi-linear parabolic equation, Equadiff 2017, 2017.

② T. Ishwiata, Interface motion and singularities, Mini-Workshop 2018 on Nonlinear phenomena, Modeling, PDEs and Simulation, 2018.

③ T. Ishwiata, Numerical approach of estimating blow-up rate using the scale invariance, International Conference on Nonlinear Analysis and its Applications, 2018.

④ Masato Kimura, Analysis of unidirectional diffusion equation and its gradient flow structure. The 42nd Sapporo Symposium on Partial Differential Equations, 2017.

⑤ Masato Kimura, Hexagonal crystal growth model with singularities. Free Boundary Problems and Nonlinear PDEs, 2017.

⑥ Masato Kimura, Unidirectional diffusion equation and application to crack growth models. Karlstad Applied Analysis Seminar, 2017.

⑦ Masato Kimura, A phase field model for crack propagation and some applications. Applied Analysis Seminar, Louisiana State University, 2018.

⑧ S. Yazaki, Direct approaches for tracking the moving boundary arising in interfacial phenomena, Session organizer and talk: Moving boundaries and complex phenomena II, Equadiff 2017 at Slovak University of Technology in Bratislava (2017.7.27).

⑨ T. Ishwiata, Numerical approach of estimating blow-up rate using the rescaling algorithm, PANAM 2018 Symposium on Computational and Applied Mathematics, 2018.

⑩ T. Ishwiata, Mathematical and Numerical Studies on Blow-up Rate of Solutions to Some Quasilinear Parabolic Equation, AIMS 2018 2018.

⑪ Masato Kimura, Snow crystal growth model with supersaturation of vapor. Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2018, 2018.

⑫ 木村正人, 蒸気過飽和度を考慮した 2 次元雪結晶成長モデル, 日本数学会 2019 年度年会, 2019

⑬ Masato Kimura, Snow crystal growth model using generalized crystalline method. Taiwan-Japan Joint Workshop on Inverse Problems in Kyoto 2019, 2019.

⑭ S. Yazaki, On flame/smoldering evolution equations and its numerical computations, Czech- Japanese Seminar in Applied Mathematics 2018, 2018.

⑮ 矢崎成俊, さまざまな界面現象に現れる動く曲線の数値計算について, 表面・界面ダイナミクスの数理 15, 2018.

(他 34 件)

[図書](計 0 件)

[産業財産権]

出願状況(計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年:

国内外の別:

取得状況(計 0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

応用数学セミナー@芝浦工大

<http://www.sic.shibaura-it.ac.jp/~tisiwata/Workshops/ousuuseminar-sit.html>

界面現象の数理・モデリング研究合宿 2016、2017年度

<https://sites.google.com/site/masatowebj/interfacemodel>
<https://sites.google.com/site/masatowebj/interface-in-karuizawa2017>

応用数学勉強会 2015年度～2018年度

<http://www.sic.shibaura-it.ac.jp/~tisiwata/Workshops/ousuuws2015.html>
<http://www2.kobe-u.ac.jp/~kohsaka/WS/ousuuws2016.html>
<http://www.sic.shibaura-it.ac.jp/~tisiwata/Workshops/ousuuws2017.html>
<http://www2.kobe-u.ac.jp/~kohsaka/WS/ousuuws2018.html>

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名： 木村 正人

ローマ字氏名： Masato Kimura

所属研究機関名： 金沢大学

部局名： 数物科学系

職名： 教授

研究者番号(8桁)： 70263358

研究分担者氏名： 矢崎 成俊

ローマ字氏名： Shigetoshi Yazaki

所属研究機関名： 明治大学

部局名： 理工学部

職名： 教授

研究者番号(8桁)： 00323874

(2) 研究協力者 なし

研究協力者氏名：

ローマ字氏名：

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。