様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２６ 年　 ６ 月 １３ 日現在

機関番号：１２３０１
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2010～2013
課題番号：２２７４０１０９
研究課題名（和文）複数の界面ダイナミクスとその組み合わせによる界面の特異的挙動の解析

研究課題名（英文）Analysis on singular behavior of interfaces by multiple interface dynamics

研究代表者
大塚　岳（Ohtsuka, Takeshi）

群馬大学・理工学研究院・講師

研究者番号：００３９６８４７

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　2,900,000円、（間接経費）　870,000円

研究成果の概要（和文）：結晶のスパイラル成長理論における、曲率流方程式にしたがって運動する渦巻状ステップの等高線方程式の数学および数値解析を行った。複数の渦巻状ステップの異方的成長による綾織り模様の数理モデル構築とその数値計算実験、渦巻状ステップの束が安定であることの数学的証明、単独および複数の渦巻状ステップによる結晶表面の成長速度の評価とその数値計算実験による検証、結晶表面が成長しないと言われる渦巻状ステップの逆回転対において不連続関数による定常解の構成、解のリプシッツ連続性に関する評価などの結果を得た。界面現象の研究の応用で、拡散方程式を用いたデータ分類法を構築した。

研究成果の概要（英文）：A level set method for evolving spirals by an eikonal-curvature equation on a crystal surface is studied. A level set equation for interlaced spiral is proposed and examined numerically. The stability of a bunch of spirals evolving with an eikonal-curvature equation is obtained. Growth rate of the crystal surface by a single or multiple spiral steps are estimated and examined numerically. Stationary solution to the level set equation with the situation of an inactive pair is obtained. A priori estimate for Lipschitz continuity of solutions to an approximating equation of the level set equation is obtained. A diffusion method for data separation is proposed as an application of the infinite propagation property on the heat equation.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学，大域解析学

キーワード：界面の発展方程式　等高線法　曲率流方程式　粘性解　結晶成長　退化放物型方程式　反応拡散方程式

１．研究開始当初の背景
研究代表者は本研究開始前において、結晶のスパイラル成長を表す数理モデルの数学解析を行ってきた。スパイラル成長においては結晶表面上に存在する渦巻状のステップが結晶表面を成長させる重要な役割を担う。ステップは曲率流方程式にしたがって運動するとされ、中心が複数ある場合には複数のステップが互いに衝突するなどして複雑かつ特異的な挙動を示す。研究代表者はこの問題に対し、渦巻曲線が表せるように改良した等高線法で表現し数理モデルを構築した。その数学解析により等高線方程式の可解性や解の一意性、等高線法により得られた曲線の一意性や比較定理などを示し、渦巻曲線の等高線法に対する基本的な数学的理論の構築を行った。ただしこの数理モデルは結晶成長理論においてもっとも基本的かつ単純な成長モデルを基にしており、実際の結晶成長実験等で見られる複雑なステップの運動を含んでいない。また、それまでの問題意識においてはステップの運動など表面上で起こる現象に集中し、実際にステップの運動が結晶表面の成長にどのような影響を与えるかという問題には十分な考察がされていなかった。
スパイラル成長の従来の研究では単独のステップによる回転から結晶表面の成長速度を計算するなど状況が限定的かつ理想的な問題での結果が存在するのみであった。

２．研究の目的
本研究の目的は界面や結晶表面上のステップの運動において、一つの系に複数のダイナミクスが組み合わされ顕在化する現象を数理モデル化し、解析する手法を確立することであった。そのような現象の具体例として、本研究では結晶表面上のステップの運動のバンチング現象、綾織り模様の形成、中空孔の形成現象を中心に考察し、その数理モデル化と数値計算実験および数学解析を行う。バンチング現象とは結晶表面における分子の濃度場の影響でステップ列が集中または拡散する現象である。綾織り模様は結晶格子が層ごとに異なる異方性を持つことからその速度差によってステップが集中するなどして本来の異方性とは異なる異方的模様を形成する現象である。中空孔は渦巻状ステップが形成されるための結晶格子のズレであるらせん転位について、そのズレの量が大きい場合にその周辺部分は成長しても中心付近でステップが逆進して孔が形成される問題である。これらの問題に共通する現象としてステップの集中と拡散、とくにステップが集中する箇所においては本来の運動方程式とは異なるダイナミクスでステップが動くように見える点である。本研究ではこれらのような、複数のダイナミクスの組み合わせから新たなステップのダイナミクスが現れる現象について数学的および数値解析的研究に必要な概念および理論の整備を行い、現象の解析手法を確立することを目的とする。

３．研究の方法
本研究で考察する各問題について、渦巻状ステップ列もしくは並行ステップ列の適切な定式化手法を含む数理モデルの構築を行う。現象はステップ列の衝突や押し合い等の特異的挙動を示すため、これらの問題を含んで問題を定式化できる等高線法や、相転移現象の視点を用いた Allen-Cahn 型方程式などの数理モデルから構築を考える。また Allen-Cahn 型方程式による数理モデルではいくつか先行研究があるため、これの漸近展開などによる界面の運動方程式の導出手法等を研究する。研究の方法としては先行研究の精査の他、現象の理解については結晶成長の理論および実験研究の研究者とのディスカッションを行う。等高線法や Allen-Cahn 型方程式による問題の定式化においてはこれらの数学手法の研究者らとディスカッションを行っていく。
研究で構築した数理モデルについては、数値計算実験と数学解析を相互に利用して現象の解析を進める。まずは得られた数理モデルの数値計算実験を行い、先行研究等で得られている既知現象や予想などの再現実験を行う。それと同時に、単純な状況下での理論的研究で得られている結果や数理モデルのあるパラメータによって現象の発生・非発生が変化する現象を利用して、とくに現象の発生・非発生を分ける臨界値付近での数値計算実験により数理モデルの妥当性を検証する。その上で数学解析により各現象の研究を行う。

４．研究成果
以上の研究によって得られた成果は、大きく分類して次の７つに分類される。

(1) 簡易的な綾織り模様の数理モデル
等高線法の先行研究において、相異なる等高線にそれぞれ異なる運動方程式を、二つの等高線方程式の補間により与える方法が提案されている。そこで本研究ではこの方法を渦巻状ステップに対する等高線法に応用して、実際に綾織り模様を形成する数理モデルを構築した。
この方法の数値計算実験にあたっては、本来の等高線方程式の意味からは曲線の追い越しが発生し、等高線方程式の解がオーバーハングを起こす可能性を示唆している。この現象は保存則の方程式における衝撃波の問題と本質的には同じである。参考にした先行研究ではこの問題を回避するために、適正粘性解理論に基づいて方程式を３次元空間の等高面方程式に拡張し、さらに垂直方向にかかる特異拡散項を導入してオーバーハングを防いでいる。本研究ではそこまでには至らず、拡散項の付与や二つの方程式の補間に用いるカットオフ関数の平滑化によってオーバ

ーハングが防げることを数値的に示した。今後は3次元等高面方程式による渦巻状ステップの定式化に問題を展開したいと考える。

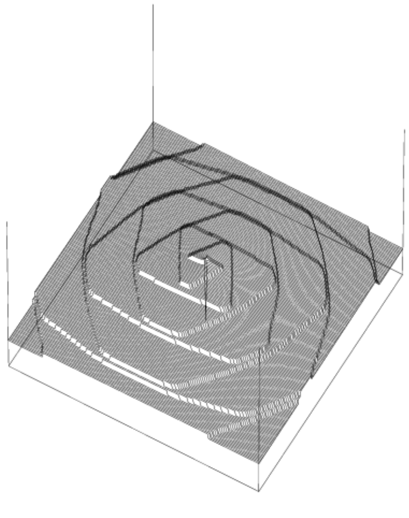

図 1 綾織り模様のシミュレーション

(2) 結晶表面の成長速度に関する研究
渦巻状ステップの運動を表す数理モデルにいて、これまでの研究では結晶表面を再構築する方法、そして再構築された結晶表面から成長高度および成長速度を計算する方法が導入されていなかった。そこでこれらを計算する方法について研究を行った。
本研究と異なるアイデアに基づく渦巻状ステップの等高線法では、線形弾性体理論から結晶表面がみたす微分方程式を導出し、それに適当な境界条件を与え数値的に解いて結晶表面を再構築している。
本研究では結晶表面がみたす微分方程式について、実は渦巻状ステップの中心を原点とする偏角の関数の、不連続点をステップの曲線上のみとして、不連続性のジャンプの高さがちょうどステップの高さになる関数がその解になることを発見した。そこで表面の高さ関数がみたす境界値問題を解く代わりに、等高線方程式の解からその関数を直接的に構成する方法を導入した。これにより結晶表面を再構築することが容易になった。
さらにこの方法について、単独の渦巻状ステップによる結晶表面の成長速度について、先行研究の結果に基づいて数値計算実験の検証研究を行った。単独の渦巻状ステップによる結晶表面の成長速度は、他者の先行研究において渦巻状ステップを定常回転する渦巻曲線で近似し、常微分方程式による数理モデルを導出して研究されている。その先行研究において数値計算実験から得られた結果と、本研究における等高線法から計算された成長速度がほぼ一致すること、また数値計算用の格子点を高精細化することによる誤差の縮小指数が十分大きな正値である結果を得た。

(3) 一つのらせん転位より現れる複数の渦巻状ステップの挙動
ステップのバンチング現象からの問題で、もともと束にされた渦巻状ステップが拡散するか否かについて考察した。この研究はバンチング現象によって形成される束が維持できるか否かと同時に、結晶成長理論の基本的なステップの運動方程式で単位高さと異なる高さのステップが結晶表面に存在できるかを考える問題でもある。
この問題について、本研究ではある渦巻曲線とその微小回転によって形成される帯状領域に含まれる渦巻状ステップの束は、その帯状領域を形成した曲線を初期値として同じ運動方程式で運動する渦巻曲線の、同じ微小回転角で形成される帯状領域の中にすべて含まれることを証明した。証明は曲線の内部および外部集合の比較定理による。
実はこの結果は、Allen-Cahn 型方程式にて同じ状況を考えたときの渦巻状ステップの挙動に関する先行研究と異なる結果である。その研究によると、Allen-Cahn 型方程式では m 本のステップの束は 1/m 回回転対称性をもつ模様の定常回転に収束する、すなわち束は拡散してしまうことを示している。Allen-Cahn 型方程式の特異極限から本研究で考察する等高線方程式が導出されることが知られているが、この結果はその近似が時間局所的になる可能性を示唆している。

(4) 共回転対における結晶表面の成長速度および共回転対の臨界距離
同じ回転方向をもつ渦巻状ステップの対を考える。先行研究ではこの対による結晶表面の成長速度について、対が十分離れているときには単独の渦巻状ステップによる成長速度とほぼ同じであり、対を限りなく近づけると単独の場合の2倍になると予想されていた。単独の場合より本質的に速い成長速度を与える対を共回転対と呼ぶ。先行研究において、渦巻状ステップの粗い近似から共回転対となる臨界距離が計算されていた。他方、共回転対における結晶表面の成長速度は評価されていなかった。
そこで本研究ではこの共回転対における成長速度の評価を行い、これを数値計算実験で検証した。本研究で与えた成長速度の評価は、行った数値計算実験の範囲で相対誤差 7%以内となる結果を得た。さらに、その数値計算実験から先行研究における共回転対の臨界距離に本質的なずれがあることを発見し、成長速度の評価式から導入した新たな臨界距離が数値計算実験から妥当であるという結果を得た。

(5) インアクティブペアにおける定常解および成長上限の存在
逆の回転方向をもつ渦巻状ステップの対について、その中心間の距離が、結晶成長理論における二次元核生成の臨界曲率半径の2倍より近いとき、その対はインアクティブペア

と呼ばれる。この対は結晶表面の成長になんら寄与しないと考えられている。
本研究では等高線方程式においてインアクティブペアが結晶表面に存在する状況を考察し、このときは定常解が存在することを証明した。ステップの法速度を与える運動方程式から考えると、臨界曲率半径をちょうど半径とする円はすべての点で法速度が 0 になるため、定常曲線になると考えられる。したがって対の距離が臨界曲率半径の 2 倍より近い場合はその定常円の一部で中心を結ぶことができるため、その曲線を表す定常解が存在すると考えられる。
しかし等高線方程式においては、その定常曲線を表す解が連続関数の範囲では存在しないことが予想されている。これは数値計算実験における結果で、インアクティブペアの場合は曲線がその定常曲線に収束する様子が見られ、したがって連続関数で定常曲線を表現すると比較原理によりすべての等高線が定常曲線まで移動して制止すると予想される。連続関数の定常解の存在はこの挙動と矛盾する。
そこで本研究では粘性解の定義に則り、不連続関数でこの定常曲線を表現する定常解を構成した。これと不連続関数の初期値に拡張された比較定理により、結晶表面の成長硬度に上限が存在することが証明できた。
次に数値計算実験において表面の高さ関数を用いて成長する曲線と定常曲線で囲まれた図形の面積を計算し、定常曲線と成長した曲線の静止位置との誤差を調べた。その結果、数値計算用の格子点の高精細化による誤差の縮小の指数がある正値以上になる結果を得た。これにより、インアクティブペアにおける渦巻状ステップの挙動は定常曲線の位置まで成長して静止すると予想される。

(6) 渦巻状ステップの運動に対する等高線方程式の解のリプシッツ連続性

本研究では渦巻状ステップに対する等高線方程式の解のリプシッツ連続性について研究を行った。解のリプシッツ連続性は数値計算実験の安定性に影響を与える性質であり、他方バンチング現象から見れば同じ運動方向のステップがある程度までは接近しても完全には接触しない、すなわちバンチングは発生しないことを示す結果である。
本研究では渦巻状ステップの等高線方程式を近似する放物型の近似方程式について、そのリプシッツ定数に関するアプリオリ評価と、近似パラメータに対する解の一様有界性および同程度連続性を証明した。この結果は、近似方程式の解がもとの方程式の解を近似していること、かつ近似方程式の解の評価で極限の解のリプシッツ連続性を示す、という観点から行った研究である。他者による同様の手法の先行研究では、凸の有界領域における問題でリプシッツ定数のアプリオリ評価を導出し、一様有界性および同程度連続性について初期値の 2 階偏導関数の有界性に依存する評価で証明を行っていた。本研究ではこの問題を非凸領域で考察し、リプシッツ定数の評価については指数増大するものの有限時間では有界であることを示した。一様有界性および同程度連続性は証明法を改良することで初期値のリプシッツ定数にのみ依存する証明に改めることができた。

(7) 拡散符号によるデータ分類法

Allen-Cahn 型方程式における相分離現象の研究を進めていくうちに、これを機械学習理論のデータ分類問題へと応用できることを発見した。さらに、それは拡散方程式の解の無限伝搬性で実現できることを発見した。
データ分類問題とは、すべてのデータがあるグループに属す物とそうでないものに分類できるが、双方の一部のみしか解らないときにどのようにそのグループとそうでないものの境界を定めるか、という問題で、文字の手書き入力やパターン認識、画像の分割問題に現れる問題である。従来の方法としてサポートベクターマシンと呼ばれる分類器が知られているが、これは線形クラス分類器と呼ばれ、もともと既知のデータが超平面で分割できるときに利用できるものである。現在ではそうでないデータへの拡張もなされているが、計算が複雑になるという問題がある。
そこで本研究では既知データでそのグループに属す点を+1，そうでない点を-1、それ以外をすべて 0 とした関数を初期値として熱方程式を解き、そのゼロ等高線を境界線とする方法を提案した。この方法は拡散方程式の解の無限伝搬性によるもので、したがって熱方程式を解く時間の範囲は短ければ短いほどよい。数学的には解の符号の、時間パラメータを 0 に近づけた極限を考える(これを拡散符号と呼ぶ)。拡散符号が 1,-1,0 になる点の集合をそれぞれそのグループに属す点の集合、そうでない点の集合、グループの境界線としてデータを分類する。この研究では以上の方法について数学的理論の研究を行った。

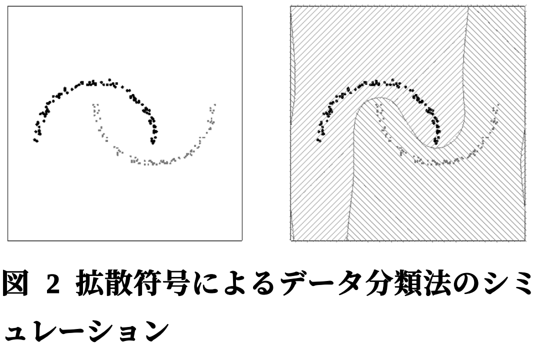

図 2 拡散符号によるデータ分類法のシミュレーション

まず拡散符号が well-defined にならない初期値の例を構成し、well-defined になる十分条件を与えた。次に、上記の方法は離散的なデータについて、数値計算では問題ないが数学的には解が恒等的に 0 になるため+1,-1 とする集合をそれぞれ拡張する必要がある。本研究では、立方体の和集合の特性関数で定義

された初期値に対し拡散符号がwell-definedになることを示した。また先行研究で変分問題によるデータ分類法が考えられていたのでそれらの手法との共通性および相違点を示した。最後に、拡散符号により現れる各集合について既知データからの本質的距離によって特徴付けを行った。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計　３件）

[1] M.-H. Giga, Y. Giga, T. Ohtsuka and N. Umeda, On behavior of signs for the heat equation and a diffusion method for data separation, Communications on Pure and Applied Analysis, 12(2013), 2277-2296, 査読有り.

[2] T. Ohtsuka, K. Shirakawa and N. Yamazaki, Optimal control problem for Allen-Cahn type equation associated with total variation energy, A special volume of Discrete and Continuous Dynamical Systems – Series S “PDE approximations in Fast reaction – Slow diffusion scenarios”, 5(2012), 159-181, 査読有り.

[3] T. Ohtsuka, Interface evolution by tristable Allen-Cahn equation with collision free condition, 数理解析研究所講究録 1693 非線形発展方程式と現象の数理, (2010), 168-179, 査読無し.

〔学会発表〕（計　35 件）

[1] 大塚岳, 符号拡散によるデータ分類法, 第 15 回さいたま数理解析セミナー, 大宮ソニックシティ, 2014 年 2 月 20 日.

[2] 大塚岳, 界面の発展現象に対する等高面の方法, 応用数学勉強会 2013, 芝浦工業大学, 2013 年 12 月 16 日.

[3] 大塚岳, 拡散方程式を用いたデータ分類法, Joint workshop on pure and applied mathematics, 東北大学, 2013 年 11 月 2 日.

[4] T. Ohtsuka, Growth rate of a crystal surface evolving with a pair of screw dislocations, Mathematical Aspects of Surface and Interface Dynamics VI, 東京大学大学院数理科学研究科, 2013 年 11 月 1 日.

[5] T. Ohtsuka, Growth rate of a crystal surface with a co-rotating pair of spiral steps evolving by an eikonal-curvature flow, RIMS 研究集会「非線形現象に現れるパターン形成の数理解析」, 京都大学, 2013 年 10 月 30 日.

[6] T. Ohtsuka, Evolution of a crystal surface by a co-rotating pair of screw dislocations, Workshop on Free Boundaries in Laplacian Growth Phenomena and Related Topics, 東北大学, 2013 年 10 月 14 日.

[7] 大塚岳・儀我美一・Y.-H. R. Tsai, Crystal growth by a co-rotating pair of screw dislocations, 日本数学会 2013 年度秋季総合分科会, 愛媛大学, 2013 年 9 月 26 日.

[8] 大塚岳, 結晶のスパイラル成長でのインアクティブペアにおける成長上限について, 第 2 回岐阜数理科学研究会, 飛騨高山まちの博物館研修室, 2013 年 9 月 18 日.

[9] 大塚岳, らせん転位の共回転対による結晶表面の成長速度, HMMC セミナー, 北海道大学電子科学研究所, 2013 年 8 月 1 日.

[10] T. Ohtsuka, Stability of a bunch of spirals evolving with an eikonal curvature flow equation, SIAM Conference on Mathematical Aspects of Materials Science, Philadelphia (USA), 2013 年 6 月 12 日.

[11] 大塚岳, スパイラル成長による結晶表面の成長速度の数値計算シミュレーション, 表面・界面ダイナミクスの数理 V, 東京大学大学院数理科学研究科, 2013 年 5 月 28 日.

[12] T. Ohtsuka, Stability of bunched spirals and inactive pair in evolution of spirals with an eikonal-curvature flow, Oberwolfach Workshop Interfaces and Free Boundaries: Analysis, Control and Simulation, Mathematisches Forshungsinstitut Oberwolfach gGmbH (Germany), 2013 年 3 月 28 日.

[13] 大塚岳, 結晶のスパイラル成長の等高線法による定式化と渦巻ステップの挙動の解析, 日本数学会 2013 年度年会, 応用数学分科会特別講演, 京都大学, 2013 年 3 月 22 日.

[14] 大塚岳, 曲率流方程式にしたがう渦巻曲線を表す等高線方程式の解の Lipschitz 連続性について, 東工大数理解析研究会, 東京工業大学, 2013 年 2 月 4 日.

[15] 大塚岳, 駆動力付き曲率流方程式における渦巻曲線の運動での束の安定性およびインアクティブペアにおける定常解について, 京都駅前セミナー, キャンパスプラザ京都, 2012 年 10 月 19 日.

[16] 大塚岳, Lipschitz continuity of solutions to an eikonal-curvature flow equation for spiral evolution, 東北大学非線形偏微分方程式ワークショップ, 東北大学, 2012 年 9 月 27 日.

[17] T. Ohtsuka, Surface evolution by a pair of spiral steps evolving with an eikonal-curvature equation, ALGORITMY 2012, Hotel Permon**** (Slovak), 2012 年 9 月 10 日.
[18] T. Ohtsuka, Evolution of spirals by an eikonal-curvature flow equation with a single level set formulation, The 37th Sapporo Symposium on Partial Differential Equations, 北海道大学, 2012 年 8 月 27 日.
[19] 大塚岳, 結晶表面上の渦巻模様の運動, 渦の特徴付け, 北海道大学, 2012 年 8 月 6 日.
[20] 大塚岳, 界面の運動を解析する数学的手法, 計算材料科学研究拠点(CMRI)第一回シンポジウム, 東北大学, 2012 年 6 月 19 日.
[21] 大塚岳, 複数のスパイラルステップに対する等高線の方法, 表面・界面ダイナミクスの数理 III, 東京大学大学院数理科学研究科, 2012 年 5 月 17 日.
[22] 大塚岳・儀我美一・Y.-H. R. Tsai, 駆動力付き曲率流方程式で運動する渦巻曲線の束の安定性, 日本数学会 2012 年度年会, 東京理科大学, 2012 年 3 月 29 日.
[23] 大塚岳, 結晶のスパイラル成長におけるインアクティブペアの存在と束状ステップの運動の安定性について, 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2012, 北海道大学, 2012 年 3 月 8 日.
[24] 大塚岳, 複数のスパイラルステップの等高線法によるシミュレーションと解析, ニセコ冬の学校「結晶・物性・素粒子・数学」北海道工業大学ニセコ山荘, 2012 年 1 月 8 日.
[25] T. Ohtsuka, Stability of bunched steps in spiral crystal growth, Dutch-Japan Workshop Analysis of non-equilibrium evolution problems: selected topics in material and life sciences, Technische Universiteit Eindhoven (Netherlands), 2011 年 11 月 9 日.
[26] 大塚岳, Inactive pair and stability of bunched steps in spiral crystal growth, N.L.P.M.サマーセミナー, 料理旅館紅葉屋(愛知県), 2011 年 8 月 6 日.
[27] 儀我美一, 大塚岳, 趣旨と渦巻模様, 渦の特徴付け, 北海道大学, 2011 年 8 月 3 日.
[28] T. Ohtsuka, Inactive pair and bunching phenomena in spiral crystal growth, ICIAM2011, Vancouver (Canada), 2011 年 7 月 18 日.
[29] 大塚岳, 綾織り模様について, 表面・界面ダイナミクスの数理 I, 東京大学大学院数理科学研究科, 2011 年 5 月 12 日.
[30] T. Ohtsuka, A level set method for evolving spirals by the mean curvature flow with driving force, Computing in Image Processing, Computer Graphics, Virtual Surgery, and Sports, University of Minnesota (USA), 2011 年 3 月 7 日.
[31] 大塚岳, スパイラル成長の数理モデルにおけるバンチング現象の安定性, および inactive pair における定常解について, 九州関数方程式セミナー, 福岡大学セミナーハウス, 2010 年 11 月 19 日.
[32] 大塚岳, Allen-Cahn type equation for multiple or spiral steps and its singular limit, 第 22 回 CREST セミナー, 東北大学, 2010 年 10 月 15 日.
[33] T. Ohtsuka, Level set method for spirals and evolution of crystal surface by a pair of screw dislocations, Workshop Extrinsic Geometric Flows, Valencia (Spain), 2010 年 9 月 4 日.
[34] T. Ohtsuka, A level set method for spiral crystal growth and growth rate of crystal surface, Tutorial Lectures and Interdisciplinary Conference "Mathematical Aspects of Crystal Growth", 北海道大学, 2010 年 7 月 26 日.
[35] T. Ohtsuka, Numerical simulations for spiral crystal growth with impurity, interlaced spiral and variable step velocity, Tutorial Lectures and Interdisciplinary Conference "Mathematical Aspects of Crystal Growth", 北海道大学, 2010 年 7 月 26 日.

6．研究組織
(1)研究代表者
大塚　岳（OHTSUKA TAKESHI）
群馬大学・理工学研究院・講師
研究者番号：00396847