

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 20 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2009～2011

課題番号：21654024

研究課題名（和文）樹枝状結晶成長モデルの数学解析

研究課題名（英文）Mathematical analysis of dendritic crystal growth

研究代表者

高木 泉（TAKAGI IZUMI）

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：40154744

研究成果の概要（和文）：過冷却状態の液体に加えられた小さな擾乱が誘発する結晶成長では、放物面状の界面の先端からある程度離れたところから側枝が伸び、樹枝状の結晶が生まれる。数学的には、界面の表面張力を考慮したステファン問題として定式化され、放物面状の進行波解が不安定化し、側枝が現れるというシナリオが考えられる。本研究では、このシナリオを数学的に正当化するために乗り越えなければならない諸問題を明確化した。

研究成果の概要（英文）：A small disturbance in the overcooled liquid triggers the formation of paraboloidal interface growing into the bulk with constant speed, and side branches are formed, resulting in dendrites. To understand this phenomenon mathematically, we consider the existence of paraboloidal traveling wave solutions of the Stefan problem with surface tension on the interface and their stability.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2011年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

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：針状結晶・側枝の形成・Hele-Shaw流・粘性指・先端の分裂

1. 研究開始当初の背景

雪の結晶の美しさ、多様さは中谷宇吉郎を始め多くの研究者の興味を引いてきた。過冷却状態の液体に小さな擾乱を加えるとそれが引金になって、相転移が起こり、結晶が成

長していく。そのとき、界面が一定の速度で進行する放物面（針状結晶）を基礎として、先端からある程度離れたところから側枝が伸びる樹枝状結晶（デンドライト）が現れることが多い。雪の結晶もそのようなものと理

解できる。1980年代には、パターン形成の観点から樹枝状結晶の成長過程が物理学者や数学者の関心を集め、優れた研究が行われた。これらは、古典的なステファン問題を表面張力の影響を考慮して精密化したモデルやその取扱いを単純化するために提唱された局所的幾何学モデル、あるいは、反応拡散系の考えに沿って立てられた位相場モデルを用いた研究として出発した。その過程で、曲率によって駆動される曲面の運動の研究が粘性解の導入により大きく進展したことを受け、そのような方向での研究も始められた。しかし、針状結晶の存在や安定性、また側枝の生成のメカニズムの解明など、基本的な問題が数学的には未解決のまま20年ほどが経過していた。

2. 研究の目的

数学的に最も基本的と思われる次の問題を提起し、数学的に厳密な理論を構築する。

- (A) 針状進行波解の構成
- (B) 針状進行波解の安定性の解析
- (C) 側枝をもつ界面の構成

側枝をもたない、一定速度で進行する放物面状の界面 (Ivantsov 解) の存在は、1940年代から知られていた。これは表面張力を無視したもので、尖端の曲率と進行速度の積が決まるだけなので、実際には、連続濃度の解の族となる。表面張力の効果を考慮したモデルでも曲率と進行速度が定まらず、異方性を導入して初めて両者が決まること、形式的計算により、予想されている。これを厳密に証明することから始める。

針状進行波解の存在が分かれば、次は、その安定性を判定する必要がある。側枝は針状進行波解が不安定化してできるものと考えられるから、安定性の意味をはっきりさせることが重要である。

3. 研究の方法

(1) まず、1980年代からの(主として物理学者による)先行論文で得られていた結果を系統的に整理し、数学的問題を抽出する。

(2) 数値的方法により、近似解をもとめその挙動を研究する。そのため、効率の良い解法を工夫するとともに、精度を高めた解法も考案する。

(3) 厳密な解析を行うために必要な理論的枠組みを用意する。

(4) 専門家との討論を積極的に推進する。

4. 研究成果

(1) 本研究課題に関連する物理学者の研究と数学者の研究を概観し、それらを総合するために、2011年12月に仙台市において研究集会「杜の学校 2011—複素解析的方法による自由境界問題の解析」を開催した。以下の知見は、この研究集会において得られたものである：

針状結晶の成長と類似の現象として、Hele-Shaw 流の粘性指がある。これは、狭い間隔で置かれた平行平面の間に流体が入られていて、それに粘性率の異なる流体が注入されたときにできる両流体間の界面が指状のパターンをつくることを云う。粘性指についても、1980年代に主に物理学者により活発に研究されて、針状結晶成長の問題との数学的共通性が明らかにされていた。これらは、たとえば、Pelce による総合報告 “Dynamics of Curved Fronts” (1988年)にまとめられている。

2000年代に入り、進行波解の存在に関する画期的な成果が S. Tanveer と X. Xie によりもたらされた。もともと、Tanveer は1980年代に Hele-Shaw 流の粘性指について詳細な研究をしており、形式的漸近展開により、粘性指解の存在条件などについて様々な結果を得ていた。(実際、本研究も、Tanveer の

先行結果を正当化することを目標の一つに据えていた。) 彼らは, 平面内の界面を表す曲線を半円から帯状領域内への等角写像によって表示するという古典的な方法を精密に議論し, 形式的漸近展開を正当化することに成功した.

Hele-Shaw 流の粘性指に対するのと同様の方法で, 固体中の熱拡散を無視した片側モデルの場合に針状結晶の進行波解について, 形式的漸近展開を正当化することに成功した. 彼らは上半平面を液相の領域に写す等角写像を導入し, 進行軸に関して左右対称であるような界面を探した. 表面張力を無視した場合, Ivantsov 解が連続濃度の解の族を与えるが, 表面張力を考慮に入れると, 左右対称な解は存在しない. さらにモデルに異方性を導入すると, ようやく可算個の解が得られる. このシナリオが正しいことを Tanveer と Xie は複素解析的方法を駆使して証明した. 等角写像は, 実軸を含むある非有界領域における二階の微分積分方程式を解くことにより求める. 積分は実軸に沿って行うが, 被積分関数は特異性をもつため, 積分路を変更して, 特異性をもたないようにする. この修正された問題について, 左半平面 (の非有界領域) でのみ微分積分方程式を満たす解を構成し, それを対称に右半平面に滑らかに拡張できるかどうかを考察する. 対称解が存在するための条件は, 左半平面の解が虚軸の原点の近傍で純虚数になることである. この条件が満たされるかどうかを知るためには, 得られた関数を下半平面の虚軸上のある点 (変わり点) の近傍における挙動を調べる必要がある. 適当な変数変換の後, 調べるべき関数は複素平面のある角領域において二階の常微分方程式を満たすことを示し, 虚軸上から無限遠点に近づくときの漸近展開の主要項を抽出する. 主要項は, Stokes 乗数を係数として含

み, この Stokes 乗数が異方性の強さを表すパラメータの関数になっている. 結局, 左半平面の解が対称な滑らかな関数として右側に拡張されるための条件は, Stokes 乗数が零になるようなパラメータの値が存在することと同値になる.

以上のように, Tanveer と Xie の方法は, 空間次元が 2 の場合にのみ有効であり, 3 次元の場合を取り扱うには, 別の枠組みが必要と思われる. そのためにも, Tanveer-Xie 理論で得られた結果に対して, 固相と液相の熱拡散係数が等しいと仮定する対称モデルへの拡張を視野に入れて, より函数解析的な方法を用いた別証明を与えることが当面の現実的な目標となると結論づけられる.

(2) 本研究と関連する反応拡散系の進行波解の存在について研究した. 二宮広和 (明治大学) と谷口雅治 (東京工業大学) は, Allen-Cahn 方程式に対する様々な非平面進行波解の構成を行ってきた. また, 石渡哲哉 (芝浦工業大学) は, 離散的結晶モデルについて, やはり非平面進行波解について研究している. そこで, 二宮, 石渡両氏を本研究課題の協力研究者として迎え, 針状結晶成長に対応する進行波解の構成について検討した. これまでに得られている非平面進行波解は, 針状結晶とは逆に, いわば尖端部が後退していくようなタイプであって, その方法では針状結晶のような進行波解が得られないことが判明した.

(3) 本研究と関連する反応拡散系の進行波解の存在について研究した. 二宮広和 (明治大学) と谷口雅治 (東京工業大学) は, Allen-Cahn 方程式に対する様々な非平面進行波解の構成を行ってきた. また, 石渡哲哉 (芝浦工業大学) は, 離散的結晶モデルにつ

いて、やはり非平面進行波解について研究している。そこで、二宮、石渡両氏を本研究課題の協力研究者として迎え、針状結晶成長に対応する進行波解の構成について検討した。これまでに得られている非平面進行波解は、針状結晶とは逆に、いわば尖端部が後退していくようなタイプであって、その方法では針状結晶のような進行波解が得られないことが判明した。

(4) Hele-Shaw 流の粘性指と樹枝状結晶成長モデルに関する数値解析について。John Lowengrub 教授 (California 大学 Irvine 校) は、Hele-Shaw 流の粘性泡や樹枝状結晶成長モデルの数値解析で重要な結果を得ている。数値解法では、界面が曲がり始めると格子点の箇数を増やして精度を保つなどの工夫が必要となり、長時間にわたり解の挙動を調べるのは容易ではない。特に、側枝の発生は尖端部の不安定化による振動 (つまり Hopf 分岐) によるものであることを数値的に確認した結果は、今後の理論的研究に大きな影響を与えるものである。つまり、針状結晶解を構成したのちは、その安定性を解析し、Hopf 分岐が起ることを確認することが次の目標になる。また、Hele-Shaw 流の粘性泡では、異なるタイプの漸近形が存在することが数値的に発見された。その厳密な解析が残された魅力ある問題の一つである。

(5) 樹枝状結晶の成長は、側枝からまた側枝が生まれることから分かるように、本質的に不安定な遷移過程である。しかし、不安定であることとそれが直ちに壊れて別の状態に移行することとは同じではない。本研究の対象は、いわば、中途半端に安定な現象である。そのような例は、反応拡散系でも見られる。そこで関連研究として、境界上にただ一

つのスパイクをもちながら、そのスパイクが境界上を動いていくような解の挙動を精密に追跡する方法の開発を試みた。法双曲型不変多様体の理論は、そのための強力な枠組みを与えてくれるが、不変多様体の構成とその上での解のダイナミクスの解明は複雑な計算を要する。研究協力者の工藤正明氏とともに、不変多様体上の解の挙動を調べるアルゴリズムを見つけた。

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)

[学会発表] (計 1 件)

- ① Izumi Takagi, On the movement of a boundary-spike solution of a semilinear parabolic equation, Applied and Computational Mathematics Seminar, 2013 年 3 月 11 日, University of California, Irvine, 米国

[その他]

ホームページ等

<http://morpho.sci.tohoku.ac.jp/~dendrites/>

<http://morpho.sci.tohoku.ac.jp/~morpho/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

高木 泉 (TAKAGI IZUMI)

東北大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：40154744

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：