

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：12301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26400158

研究課題名(和文) 複数の界面ダイナミクスの組み合わせで現れる解の不連続化の研究

研究課題名(英文) Study on bunching phenomena of interface motion by combined dynamics

研究代表者

大塚 岳 (Ohtsuka, Takeshi)

群馬大学・大学院理工学府・講師

研究者番号：00396847

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：解の不連続化現象に関する問題で、駆動力項を含む平均曲率流方程式の等高面方程式において、不連続関数による定常解の構成およびその安定性・不安定性を証明した。また、中心を固定された多角形型渦巻曲線のクリスタライン曲率流による運動について、中心から新しい辺を生成するスキームと各辺長を未知関数とする常微分方程式系の数理モデルと、表面エネルギーの最適化問題から渦巻曲線の運動を離散化する手法を二つ構築した。

研究成果の概要(英文)：Existence and stability or instability of discontinuous stationary solution to the level set equation of eikonal mean curvature flow is proved. For the crystalline motion of spirals, an ODE scheme by evolution equation of each facet length, and two minimizing movement approach for spirals evolving with crystalline eikonal-curvature flow are proposed.

研究分野：非線形偏微分方程式論

キーワード：平均曲率流方程式 等高面法 特異拡散方程式 粘性解

### 1. 研究開始当初の背景

研究代表者は本研究開始前より、結晶のスパイラル成長を表す数理モデルと、それに関連して界面の発展現象を記述する手法である等高面(線)法・フェーズフィールド法について数学・数値解析を行ってきた。等高面(線)法は界面の発展現象において生じる衝突、融合、消滅といった特異挙動を含めてその現象を数理モデル化する手法で、界面を補助超曲面の等高面(線)集合により表す。フェーズフィールド法は界面の内と外に現れる二つの相の間の相転移現象として界面の発展を記述する方法である。これらの手法の可解性や解の定性的性質の他、等高面(線)法による界面発展方程式とフェーズフィールド法の関連などの研究を行ってきた。これらの手法は界面の内と外が明確に分かれる閉曲面・閉曲線の運動に用いられてきたが、研究代表者はこれを改良して、渦巻状ステップの時間発展現象に対する等高線法の数理モデルを確立した。渦巻曲線の運動の等高線法による数理モデルは退化放物型と呼ばれる特異性の強い非線形偏微分方程式となり、通常の意味での解の存在は期待できない。研究代表者は粘性解理論と呼ばれる弱解理論から、前述の渦巻状ステップの発展を含む退化放物型方程式について研究を行ってきた。

他方、結晶成長の理論・実験研究では、結晶表面上のステップが束を為すバンチング現象、異方的なステップの成長の組み合わせから生じる渦巻状ステップの綾織り模様、渦巻状ステップの中心に見られる中空孔現象といった、これまでの数理モデルでは定式化出来ない現象が報告されている。それぞれの現象で共通して言えることは、同じ方向を持つステップが束を為すことで、結晶表面に不連続面が生じる点である。この特異挙動は非線形保存則におけるショックウェーブに近く、等高面(線)法では想定していない特異性である。また、綾織り模様など結晶に見られる多角形型ステップおよび多面体形状は、ステップや結晶表面の向きに対し滑らかでない依存性を示す表面エネルギー密度(クリスタラインエネルギーと呼ばれる)による発展問題または形状最適化問題としても捉えられる。しかしこの枠組みを等高面(線)法やフェーズフィールド法で実現することは、その滑らかでない表面エネルギー密度の微分を用いることになるので難しいとされてきた。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は界面やステップの集中現象がもたらす、結晶表面や等高面(線)法の解の不連続面形成の数学的構造を明らかにすることである。本研究では界面およびステップがバンチングを引き起こす現象の数理モデルや、異方的な界面の発展方程式ならびにその組み合わせによりステップが綾織り模様を形成する現象の数理モデルを主な課題として、これを表す等高面(線)法および多重

安定反応拡散方程式による解の不連続面形成の数学および数値解析を行う。ステップが集中する点は等高面(線)法において補助超曲面が不連続化している点であり、従来の数理モデルや定式化法、その微分方程式の弱解理論が破綻する点になっている。本研究はこれらの不連続化現象の研究を通して、非線形偏微分方程式論における解の正則性または非正則性などを明らかにし、加えて解の不連続化現象を許して時間大域的に現象を解析できる新たな数学的理論の構築を目標とする。

### 3. 研究の方法

まず解の不連続化については、粘性解理論は解の連続性を仮定しない点に着目し、従来の等高面法の数理モデルにおける不連続関数の解について考察する。特性関数を用いた解の考察は、界面の時間発展現象を集合論的アプローチから考察する手法ではしばしば見られる方法のため、これに関する研究論文の精査やその著者との意見交換を行う。

綾織り模様の形成現象については、これまでの研究で簡易的な数理モデルを構築している。しかしまずはその数学的定式化手法を見直し、より厳密な数理モデル構築とその解析手法の確立を目指す。とくに、滑らかでない表面エネルギー密度による異方的発展問題については、単独の渦巻状ステップであっても未だ厳密な数理モデルが構築されていない。他方、クリスタラインエネルギーによる界面現象の数理モデルについては、その多角形型曲線を構築する各辺長の増減に着目した常微分方程式系による数理モデル、および最適化問題の観点から微分方程式を介さずに界面の発展現象を記述する離散化手法が提案されている。そこでまずは常微分方程式系による数理モデルの構築を行い、等高線法の拡張などより発展的な手法を用いたときの評価法を確立する。以上の方針のもと、数学解析の他数値計算実験を活用して研究を行う。

### 4. 研究成果

以上の研究によって得られた成果は、主に次の3つである。

(1) 平均曲率流方程式の等高線法数理モデルに対する不連続関数の定常解の存在とその安定性

とくに定数の駆動力項を含む平均曲率流方程式においては、ちょうどその駆動力を曲率とする球面が定常解である。この定常解は不安定であることが知られている。他方、界面が境界と直交する境界条件において、シリンダー型の領域に張られた界面の平均曲率流方程式による運動は、いずれそのシリンダーのもっともくびれた部分に張られる平面へ収束することが予想される。本研究ではこれらの定常曲面が、等高面法においては連続関数の定常解として表すことができず、不連

続関数の定常解を用いて表すことができることを証明した。さらに前述の不安定性・安定性について、ある等高面がその定常曲面を与えるような連続関数を非定常問題の初期値にとると、その解のすべての等高面が前者の場合は定常曲面から離れる、後者の場合は定常曲面に収束することを示した。この後者の結果が、バンチング現象の研究に繋がると考えている。

(2) クリスタライン曲率流方程式により運動する、中心を固定された多角形型渦巻曲線の常微分方程式系数理モデル構築とその数学解析

界面の法速度がクリスタラインエネルギーのL2勾配流として与えられる界面の発展問題を、クリスタライン曲率流と呼ぶ。本研究では中心を固定された多角形型渦巻曲線が、定数の駆動力項を含むクリスタライン曲率流方程式により時間発展する現象を表す数理モデルについて考察した。

従来ではクリスタライン曲率流による多角形型曲線の時間発展については、各辺の法線方向への移動による辺長の変化とその運動法則の関係から、辺長を未知関数とする常微分方程式系で表す手法がしばしば用いられる。他方渦巻曲線の成長では、各辺の前進にしたがって渦巻の中心で新しい辺を生成しないと、渦巻としては成長しない。他方過去の研究で、渦巻の中心点を運動させ、その軌道によって新しい辺を生成させる数理モデルが提案されている。ただし、中心の挙動は既知のものとして与える。これに対し本研究では、中心とそれに付随した辺は固定され、その隣の辺が前進して中心に付随する辺が十分に成長したとき新しい辺を中心に生成し、それまで固定されていた辺は運動法則にしたがって前進する、とする新しいスキームを提案した。この数理モデルに対する解が存在することを証明し、新しい辺の生成は定期的に生じること、その発展の過程で辺同士が自己交差をしないことを証明した。中心を固定することを想起した主な理由は、等高線法による渦巻曲線の運動では中心を固定しており、これに対応する常微分方程式系の数理モデルがあると数理モデルの妥当性の評価に有用であると考えたからである。

(3) クリスタライン曲率流方程式による渦巻状ステップの運動の、等高線関数を用いた最適化問題アプローチ法の確立

前述の常微分方程式系では、渦巻の中心が複数存在して互いに衝突・融合を繰り返す現象を扱うことが難しい。しかし実際の結晶表面における渦巻状ステップの成長ではその現象が生じている。そのため等高線法を用いた問題の定式化をうたいたいが、こちらでは前述したとおり滑らかでないエネルギー密度関数の微分を考えることになる。過去の綾織り模様の数理モデルではその表面エネルギー

密度を滑らかな関数で近似したが、それにより多角形型ステップはその誤差によって少々変形してしまう。これに対し、本研究では等高線関数を用いたクリスタラインエネルギーを含む汎関数の最適化問題を用いて運動を離散化し、これを逐次近似的に解く方法を構築した。

この最適化問題による離散化アプローチの問題は、通常の界面の運動に対するこれまでの研究において、運動を離散化する際に界面からの符号付き距離関数を用いる点にある。渦巻曲線の場合符号付き距離関数は有意な形で定義することが出来ない。そこで本研究では、渦巻曲線の周りでのみ有意な符号付き距離関数を構成する方法と、渦巻曲線に対する等高線法の関数をそのまま用いる方法の、二つの手法を構築した。

#### 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. T. Ohtsuka, Y.-H. R. Tsai, and Y. Giga, A level set approach reflecting sheet structure with single auxiliary function for evolving spirals on crystal surfaces, *Journal of Scientific Computing*, 62(2015), 831-874. (査読有り)
2. T. Ohtsuka, Discontinuous stationary solution to generalized eikonal-curvature equation and its stability, *Commentarii Mathematici Sancti Pauli*, 63(2014), 233-260. (査読有り)
3. 大塚岳, 渦巻成長のインアクティブペアにおける成長上限と定常解の構成について, 第 36 回発展方程式若手セミナー報告集, 2014, 35-43. (査読無し)

〔学会発表〕(計 18 件)

1. 大塚岳, 駆動力付きクリスタライン曲率流によるスパイラル成長に対する最小化問題アプローチ, 第 8-9 回神戸大学解析セミナー, 神戸大学理学部(兵庫県), 2017 年 2 月 16 日.
2. T. Ohtsuka, Minimizing movement approach for spirals evolving by crystalline curvature using level set functions, *Emerging Developments in Interfaces and Free Boundaries*, Mathematisches Forschungsinstitut(Oberwolfach, Germany), 2017 年 1 月 26 日.
3. 大塚岳, クリスタライン曲率流方程式による渦巻の成長について, 2016 年度第 10-12 回明治非線形数理セミナー, 明治大学中野キャンパス(東京都), 2016 年 11 月 7 日.

4. T. Ohtsuka, A level set approach for spirals and its application to spiral crystal growth, NTT-BRL Seminar, NTT 物性科学基礎研究所(神奈川県), 2016年10月3日.
  5. T. Ishiwata and T. Ohtsuka, Evolution of polygonal spirals by crystalline eikonal-curvature flow with pinned center, Czech-Japanese-Polish Seminar in Applied Mathematics 2016, AGH University of Science and Technology(Kraków, Poland), 2016年9月7日.
  6. T. Ohtsuka, Optimal control problem for Allen-Cahn type equation associated with total variation energy, The Fifth International Conference on Continuous Optimization, 政策研究大学院大学(東京都), 2016年8月10日.
  7. T. Ohtsuka, A level set method for evolution of spirals and its numerical simulations for crystal growth with evolving spiral steps, Shokaku Mathematical Lecture Series by Professor Lawrence C. Evans and Nonlinear PDE satellite Workshop, 東北大学(宮城県), 2016年7月20日.
  8. T. Ohtsuka, A level set method for evolving spirals and its numerical simulations on the vertical growth rate of crystal surface by several spiral steps, Karuizawa camp Workshop on Interface motions and free boundary problems: mathematical analysis, modellings and experiments, いするの家 西原脩三記念館(長野県), 2016年7月10日.
  9. T. Ohtsuka, A new level set method for spirals evolving by eikonal-curvature equation and its application to spiral crystal growth, The 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, Hyatt Regency Orland(Florida, USA), 2016年7月1日.
  10. 大塚岳, 結晶のスパイラル成長におけるインアクティブ・ペアについて, 表面・界面ダイナミクスの数理 11, 東京大学大学院数理科学研究科(東京都), 2016年4月20日.
  11. T. Ohtsuka, A level set method for geometric evolution of spirals and its application, SEMINAR, NUMERICAL ANALYSIS, KTH Royal Institute of Technology(Stockholm, Sweden), 2016年3月17日.
  12. 石渡哲哉, 大塚岳, 中心を固定された多角形型渦巻曲線の駆動力付きクリスタライン曲率流方程式による運動について, 2016年度応用数学合同研究会, 龍谷大学瀬田キャンパス(滋賀県), 2015年12月19日.
  13. T. Ohtsuka, A level set method for evolution of several spiral steps and its applications to spiral crystal growth, Mathematical Aspects of Surface and Interface Dynamics X, 東京大学大学院数理科学研究科(東京都), 2015年10月28日.
  14. T. Ohtsuka, Evolution of spirals by crystalline curvature and eikonal equation, Mathematics for Nonlinear Phenomena: Analysis and Computation -International Conference in honor of Professor Yoshikazu Giga on his 60th birthday-, 札幌コンベンションセンター(北海道), 2015年8月16日.
  15. 大塚岳, 異方的曲率流方程式によるスパイラルステップの運動, 表面・界面ダイナミクスの数理 IX, 東京大学大学院数理科学研究科(東京都), 2015年4月22日.
  16. T. Ohtsuka, Growth rate of a surface by co-rotating pair of spiral steps evolving by an eikonal-curvature equation, 反応拡散現象に見られる境界層とその周辺の数理, 明治大学中野キャンパス(東京都), 2014年11月28日.
  17. 大塚岳, 渦巻成長のインアクティブペアにおける成長上限と定常解の存在について, 第36回発展方程式若手セミナー, 休暇村南阿蘇(熊本県), 2014年8月30日.
  18. 大塚岳, 複数のらせん転位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 VII, 東京大学大学院数理科学研究科(東京都), 2014年4月23日.
- 〔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:  
 出願年月日:  
 国内外の別:
- 取得状況(計 0件)
- 名称:

発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕  
ホームページ等

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

大塚 岳 (OHTSUKA TAKESHI)  
群馬大学・大学院理工学府・講師  
研究者番号：00396847

##### (2) 研究分担者

( )

研究者番号：

##### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：

##### (4) 研究協力者

( )