クリスタライン法の一般化について
ー構造保存型多角形運動と結晶成長モデルへの応用ー

木村正人（金沢大学数物科学系）
田中智恵（金沢大学大学院自然科学研究科）

本講演では，結晶成長モデルである 2 次元のクリスタライン法 [2, 6, 9, 11, 15, 16] の一般化した多角形運動を考える．前半では，主に面積保存性や曲線短縮性などの変分構造を持つより一般の移動境界問題の多角形版の構成法とその性質について述べる．後半では，雪の結晶モデルの構築を目指した，辺の衝突や分裂などを許容する新たな多角形運動の数学的枠組みについて紹介する．

1　変分構造を持つ多角形版移動境界問題の構成

講演前半では，木村と矢崎成俊氏（明治大学），Michal Beneš 氏（チェコ工科大学），田上大助氏（九州大学）との共同研究について，Beneš-Kimura-Yazaki [4] および Kimura-Tagami-Yazaki [13] での結果を中心に報告する．また，田上研究室の大学院生，古田賢司君と門田昴也君の修士論文 [5, 12] の数値計算例も紹介する．

次のような多角形版移動境界問題を考える．$\Gamma(t)$ を時刻 t における N 多角形とし，反時計周りに j 番目の辺を $\Gamma_j(t)$ とおく．クリスタライン法と同様に各 $\Gamma_j(t)$ の法線方向は t によらず一定とし，外向き法線方向の $\Gamma_j(t)$ の速度を $V_j(t)$ とする．但し，クリスタライン法と違い辺の数は変わらないものとする．次の形で書ける多角形運動の初期値問題を考える．

$$\begin{cases} V_j(t) = F_j(\Gamma(t), t) \qquad (j = 1, \cdots, N,\ t > 0), \\ \Gamma(0) = \Gamma^0, \end{cases} \tag{1}$$

ここで，Γ^0 は与えられた初期多角形である．κ_j を Γ_j のクリスタライン曲率とするとき，通常のクリスタライン法では $V_j = \kappa_j$ を考える．これは，曲率流と呼ばれる滑らかな移動境界問題の多角形版に相当する．本研究の目的は，曲率流以外にも様々な移動境界問題：面積保存曲率流，面積保存移流流れ問題，Hele-Shaw 移動境界問題，過飽和蒸気中の結晶成長モデル，Stokes 移動境界問題などについても多角形版の問題を構成し，元の移動境界問題の持つ面積保存性や曲線短縮性などの変分構造が自然に受け継がれることを示すことである．また，Stefan 問題や Navier-Stokes2 相流体問題などへの拡張も自然に出来る．同様のアイデアは，Hele-Shaw 問題 [1] や結晶成長モデル [7, 8] などでも利用されている．

講演では，様々な多角形版移動境界問題の構成と変分構造について述べるとともに，変分構造を保存する時間方向離散化手法を提案し数値例を示す．

2　多角形運動の結晶成長への応用

講演後半では，田中と木村による，辺の衝突や分裂などを許容する多角形運動の数学的枠組み構築の試みを紹介する．ここでは，正六角形をウルフ図形とするクリスタライン法の拡張を考える．多角形版の過飽和蒸気中の結晶成長モデルを用いて，雪の結晶に代表されるような樹枝状結晶成長モデルの構築を行うことが最終的な目標である．

多角形運動の方程式 (1) において扱っていなかった辺の消滅や衝突などの特異性を数学的に分類し，それを用いてそれらの特異性を許容する新たな (1) の広義解の定義を提案する．今回は，特に次の多角形運動モデルについて考察する．

$$V_j = \beta(\chi_j)F - \kappa_j. \tag{2}$$

この式は，ある意味で，過飽和蒸気中の結晶成長モデルを簡略化したモデルとみなすことが出来る．式 (2) において，$\chi_j = 0, \pm 1$ は Γ_j の transition number，$F > 0$ は成長項である．$\beta(1) > \beta(0) > \beta(-1) > 0$ は局所的な結晶の形状に依存して変わる固着する水蒸気量を表す量である．

講演では，(2) に対する広義解の存在など，得られた数学的結果とともに，開発した数値計算アルゴリズムによる数値計算例を紹介する．

多角形運動 (2) において，$\beta(0) = 0.30$, $\beta(-1) = 0.08$ とし，$\beta(1)$ の値を変えた結果は次のようなものである．ここで $\beta(1)$ は，簡略化された結晶成長モデル (2) における水蒸気の過飽和度に相当するパラメータであり，中谷ダイヤグラム [14] における平板結晶の形状変化に対応していることが見て取れる．

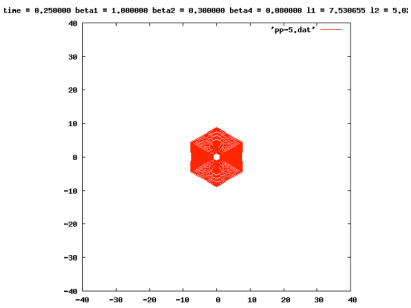

図 1: $\beta(1) = 1.00$

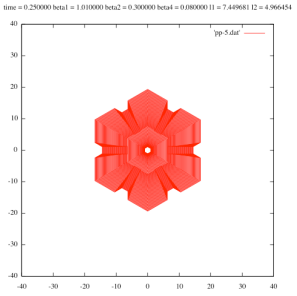

図 2: $\beta(1) = 1.01$

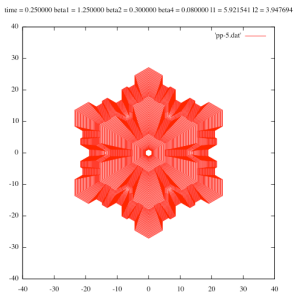

図 3: $\beta(1) = 1.25$

雪の結晶成長の数理モデルとしては，[3, 10, 17] などが知られているが，クリスタライン法の拡張としてモデリングを行う今回の試みはこれまでにない新たなアプローチである．

参考文献

[1] R. Almgren: Crystalline Saffman-Taylor fingers. SIAM J. Appl. Math., Vol.55, No.6 (1995), 1511-1535.

[2] S. Angenentand and M.E. Gurtin: Multiphase thermomechanics with interfacial structure 2. Evolution of an isothermal interface. Arch. Rational Mech. Anal., Vol.108 (1989), 323-391.

[3] J.W. Barrett, H. Garcke and R. Nürnberg: Numerical computations of faceted pattern formation in snow crystal growth. Phys. Rev. E, Vol.86 (2012), 011604.

[4] M. Beneš, M. Kimura and S. Yazaki: Second order numerical scheme for motion of polygonal curves with constant area speed. Interfaces and Free Boundaries, Vol.11, No.4 (2009), 515-536.

[5] 古田賢司: 移動境界を持つ流れ問題に対するある面積保存スキームの数値解析．平成 23 年度九州大学大学院数理学府修士論文 (2012), 45 pages.

[6] M.-H. Giga and Y. Giga: Crystalline and level set flow–convergence of a crystalline algorithm for a general anisotropic curvature flow in the plane. Free boundary problems: theory and applications, I (Chiba, 1999), Gakkotosho, Tokyo (2000), 64-79.

[7] Y. Giga and P. Rybka: Quasi-static evolution of 3-D crystals grown from supersaturated vapor. Differential Integral Equations, Vol.15, No.1 (2002), 1-15.

[8] Y. Giga and P. Rybka: Stability of facets of crystals growing from vapor. Discrete Contin. Dyn. Syst., Vol.14, No.4 (2006), 689-706.

[9] P. M. Girão: Convergence of a crystalline algorithm for the motion of a simple closed convex curve by weighted curvature. SIAM J. Numer. Anal., Vol.32 (1995), 886-899.

[10] J. Gravner and D. Griffeath: Modeling snow-crystal growth: A three-dimensional mesoscopic approach. Phys. Rev. E Vol.79 (2009) 011601.

[11] T. Ishiwata: Motion of non-convex polygonal by crystalline curvature and almost convexity phenomena. Japan J. Indust. Appl. Math., Vol.25 (2008), 233-253.

[12] 門田昴也: 移動境界を持つ流れ問題に対する面積保存スキームを用いた数値計算. 平成 24 年度九州大学大学院数理学府修士論文 (2013), 55 pages.

[13] M. Kimura, D. Tagami and S. Yazaki: Polygonal Hele-Shaw problem with surface tension. Interfaces and Free Boundaries, Vol.15 (2013), 77-93.

[14] U. Nakaya: Snow Crystals: Natural and Artificial. Harvard University Press (1954).

[15] J. E. Taylor: Motion of curves by crystalline curvature, including triple junctions and boundary points. Proc. Sympos. Pure Math., Vol.54, Part 1, Amer. Math. Soc., Providence, RI (1993), 417–438.

[16] S. Yazaki: On an area-preserving crystalline motion. Calculus of Variations and PDE, Vol.14 (2002), 85-105.

[17] E. Yokoyama and T. Kuroda: Pattern formation in growth of snow crystals occurring in the surface kinetic process and the diffusion process. Phys. Rev. A, Vol.41(4) (1990), 2038-2049.