

学 位 論 文 題 名

A level set approach for spirals, anisotropic mean curvature flow in the theory of crystal growth

(結晶のスパイラル成長や非等方的平均曲率流方程式に対する等高線の方法)

学位論文内容の要旨

結晶成長理論において平均曲率流方程式は重要な役割を果たす。ステップと呼ばれる段差が曲率に従って動くと考えられているからである。その運動は等方的なものだけでなく、非等方的な成長も数多く見られる。以上のことから、等方的、非等方的な平均曲率流方程式の研究は結晶成長の理論において非常に重要である。本論文の第1章では、結晶成長理論において重要なスパイラル成長について数学的な観点からの研究をした。スパイラル成長を記述する数理モデルを等高線法を用いて構成し、その解の存在や一意性について成果を得た。本論文の第2章では、非等方的 Allen-Cahn 方程式と非等方的平均曲率流方程式の等高面方程式の解の関係を研究した。

第1章では、結晶のスパイラル成長を記述する数理モデルを等高線の方法を用いて構成する。そのモデルに対し、粘性解の比較定理を示し、連続関数の初期値に対する解の存在を示した。結晶のスパイラル成長とは、1948年に F. C. Frank が提唱した結晶成長のモデルである。成長する結晶の表面上にあるステップと呼ばれる段差が螺旋模様を描くのが特徴である。その螺旋模様を描く曲線は次の

$$V = C - \kappa$$

なる曲率流方程式に従って動くと考えられている。ここで V は曲線の法速度、 C は駆動力を表す定数、 κ は曲率である。スパイラル成長を記述する数理モデルとしてこの幾何モデルが挙げられるが、このモデルは曲線が滑らかなときしか意味を持たず、複数の螺旋模様が存在するときなど曲線同士が接触するような状況ではその動きを追跡することはできない。そこで、その困難を解決する方法として Allen-Cahn 方程式を用いた近似モデルと、等高線法による記述が用いられた。等高線法を用いた方法では P. Smereka が 2000 年にモデルを提案している。ところが彼のモデルは、複数のステップが存在しそれぞれが異なる高さを持つような状況では使えない。そこで本研究において、R. Kobayashi が Allen-Cahn 方程式による近似モデルを用いてスパイラル成長のモデルを構成したときのアイデアを用いて、新しいモデルを構成した。等高線法とは、曲線のある曲面の等高線とみなし、曲線の運動をその曲面の運動とみなして方程式を構成する方法である。本論文で取り扱うモデルは駆動力項を持つため、その成長の法速度の方向が重要になってくる。ところが、通常の等高線法では螺旋模様のような領域を2つの部分に分割しないような曲線に対して、運動している曲面を表す補助関数のみで法速度の方向を定めることはできな

い。そこで、R. Kobayashi が Allen–Cahn 方程式による近似モデルを構成したときに用いたシートストラクチャ関数を用いてこの困難を回避した。シートストラクチャ関数とは、対象の結晶の結晶格子の構造を表す関数である。結晶表面上に存在する螺旋模様を、ある曲面のシートストラクチャ関数が表す曲面による切断面として定義する。幾何モデルを補助関数の方程式として書き直し、次の等高線方程式を得た。

$$\frac{\partial u}{\partial t} - |\nabla(u - \theta)| \left\{ \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} + C \right\} = 0.$$

ここで、 θ はシートストラクチャ関数である。一般にシートストラクチャ関数は空間変数にのみ依存する無限多価関数で、その微分が1価に定まるような関数である。この方程式を有界領域で考え、Neumann 境界条件を仮定して解の比較定理を示した。また、連続関数の初期値に対する時間大域的な解の存在を示した。それらの証明において非常に大きな困難はシートストラクチャ関数の存在である。この方程式において $u - \theta = v$ と考えると良く知られた平均曲率流方程式であるが、 θ が無限多価であるために値の比較ができなくなる。その困難を回避するために、比較定理の証明では領域の被覆空間を導入した。それにより、 $u - \theta$ を1価関数としてみなすことが可能になった。解の存在を示すときは、H. Ishii による Perron の方法を用いて証明した。無数の粘性優解の下限を取って初期条件をみたす粘性優解を構成するのだが、その際に個々の粘性優解を局所的に定義することにより、シートストラクチャ関数を1価にみなすことができた。

第2章では、異方性を持つ Allen–Cahn 方程式の内部遷移層が異方性を持つ平均曲率流方程式に従って動く界面の動きを近似していることを示す問題を扱った。この問題は C. M. Elliott–R. Schätzle が1997年に結果を与えている。彼らは異方性を持つ平均曲率流方程式の等高線方程式を考えた。そして Allen–Cahn 方程式の初期値を、その等高線方程式の解の初期値に対し符号が一致しつつ、界面からごく近い近傍を除いて値が1、-1にほとんど近いような初期値を考えた。その初期条件をみたす解が、等高線方程式の解が正の範囲で1に、負の範囲で-1になることを示し、その収束の評価を与えた。また、異方性に機動性も含まれていて、従来解の存在や比較定理が使えない困難もあった。その困難の回避は彼らの結果で重要な点の1つである。ところが彼らはその問題を、異方性を表すエネルギー密度関数の C^2 ノルムが有界であることを仮定して証明した。その証明では拡散項を直接計算によって評価したため、解の収束の評価がエネルギー密度関数の C^2 ノルムに依存する。現実の結晶成長の中で異方性はごくごく一般に見られる状況であり、ステップの曲線が滑らかでないものもしばしば見られる。そこで本研究ではその証明を見直し、エネルギー密度関数の C^2 ノルムに依存しない評価を導いた。その証明では、C. M. Elliott–R. Schätzle が直接計算によって得た評価を凸解析の一般論から導いた。機動性から来る困難に関しては、近似方程式を考えることによって回避した。

学位論文審査の要旨

主査	教授	儀我美一
副査	教授	神保秀一
副査	助教授	利根川吉廣
副査	教授	中村玄

学位論文題名

A level set approach for spirals, anisotropic mean curvature flow in the theory of crystal growth

(結晶のスパイラル成長や非等方的平均曲率流方程式に対する等高線の方法)

結晶成長理論において平均曲率流方程式は重要な役割を果たす。ステップと呼ばれる段差が曲率に従って動くと考えられているからである。その運動は等方的なものだけでなく、非等方的な成長も数多く見られる。以上のことから、等方的、非等方的な平均曲率流方程式の研究は結晶成長の理論において非常に重要である。本論文の第1章では、結晶成長理論において重要なスパイラル成長について数学的な観点からの研究をした。スパイラル成長を記述する数理モデルを等高線法を用いて構成し、その解の存在や一意性について成果を得た。本論文の第2章では、非等方的Allen - Cahn方程式と非等方的平均曲率流方程式の等高面方程式の解の関係を研究した。

第1章では、結晶のスパイラル成長を記述する数理モデルを等高線の方法を用いて構成する。そのモデルに対し、粘性解の比較定理を示し、連続関数の初期値に対する解の存在を示した。結晶のスパイラル成長とは、1948年にF. C. Frankが提唱した結晶成長のモデルである。成長する結晶の表面上にあるステップと呼ばれる段差が螺旋模様を描くのが特徴である。その螺旋模様を描く曲線は次の

$$V = C - \kappa$$

なる曲率流方程式に従って動くと考えられている。ここで V は曲線の法速度、 C は駆動力を表す定数、 κ は曲率である。スパイラル成長を記述する数理モデルとしてこの幾何モデルが挙げられるが、このモデルは曲線が滑らかなときしか意味を持たず、複数の螺旋模様が存在するときなど曲線同士が接触するような状況ではその動きを追跡することはできない。そこで、その困難を解決する方法としてAllen - Cahn方程式を用いた近似モデルと、等高線法による記述が用いられた。等高線法を用いた方法ではP. Smerekaが2000年にモデルを提案している。ところが彼のモデルは、複数のステップが存在しそれぞれが異なる高さを持つような状況では使えない。そこで本研究において、R. KobayashiがAllen - Cahn方程式による近似モデルを用いてスパイラル成長のモデルを構成したとき

のアイデアを用いて、新しいモデルを構成した。等高線法とは、曲線のある曲面の等高線とみなし、曲線の運動をその曲面の運動とみなして方程式を構成する方法である。本論文で取り扱うモデルは駆動力項を持つため、その成長の法速度の方向が重要になってくる。ところが、通常の等高線法では螺旋模様のような領域を2つの部分に分割しないような曲線に対して、運動している曲線を表す補助関数のみで法速度の方向を定めることはできない。そこで、R. KobayashiがAllen - Cahn方程式による近似モデルを構成したときに用いたシートストラクチャ関数を用いてこの困難を回避した。シートストラクチャ関数とは、対象の結晶の結晶格子の構造を表す関数である。結晶表面上に存在する螺旋模様を、ある曲面のシートストラクチャ関数が表す曲面による切断面として定義する。幾何モデルを補助関数の方程式として書き直し、次の等高線方程式を得た。

$$\frac{\partial u}{\partial t} - |\nabla(u - \theta)| \left\{ \operatorname{div} \frac{\nabla(u - \theta)}{|\nabla(u - \theta)|} + C \right\} = 0.$$

ここで、 θ はシートストラクチャ関数である。一般にシートストラクチャ関数は空間変数にのみ依存する無限多価関数で、その微分が1価に定まるような関数である。この方程式を有界領域で考え、Neumann境界条件を仮定して解の比較定理を示した。また、連続関数の初期値に対する時間大域的な解の存在を示した。それらの証明において非常に大きな困難はシートストラクチャ関数の存在である。この方程式において $u - \theta = v$ と考えると良く知られた平均曲率流方程式であるが、 θ が無限多価であるために値の比較ができなくなる。その困難を回避するために、比較定理の証明では領域の被覆空間を導入した。それにより、 $u - \theta$ を1価関数としてみなすことが可能になった。解の存在を示すときは、H. Ishiiによる Perron の方法を用いて証明した。無数の粘性優解の下限を取って初期条件をみたす粘性優解を構成するのだが、その際に個々の粘性優解を局所的に定義することにより、シートストラクチャ関数を1価にみなすことができた。

第2章では、異方性を持つAllen - Cahn方程式の内部遷移層が異方性を持つ平均曲率流方程式に従って動く界面の動きを近似していることを示す問題を扱った。この問題にはC. M. Elliott - R. Schätzleの結果がある。彼らは異方性を持つ平均曲率流方程式の等高線方程式を考えた。そしてAllen - Cahn方程式の初期値を、その等高線方程式の解の初期値に対し符号が一致しつつ、界面からごく近い近傍を除いて値が1、-1にほとんど近いような初期値を考えた。その初期条件をみたす解が、等高線方程式の解が正の範囲で1に、負の範囲で-1になることを示し、その収束の評価を与えた。また、機動性にも異方性が含まれていて、従来の解の存在や比較定理が使えない困難もあった。その困難の回避は彼らの結果で重要な点の1つである。ところが彼らはその問題を、異方性を表すエネルギー密度関数の C^2 ノルムが有界であることを仮定して証明した。その証明では拡散項を直接計算によって評価したため、解の収束の評価がエネルギー密度関数の C^2 ノルムに依存する。現実の結晶成長の中で異方性はごくごく一般に見られる状況であり、ステップの曲線が滑らかでないものもしばしば見られる。そこで本研究ではその証明を見直し、エネルギー密度関数の C^2 ノルムに依存しない評価を導いた。その証明では、C. M. Elliott - R. Schätzleが直接計算によって得た評価を凸解析の一般論から導いた。機動性から来る困難に関しては、近似方程式を考えることによって回避した。

著者は等高線法に対して新知見を得ている。

よって著者は北海道大学(理学)の学位を授与される資格があるものと認める。