# クリスタライン曲率流によるスパイラル成長の最適化運動アプローチ

大塚岳

本講演はテキサス大学オースティン校/スウェーデン王立工科大学の Y.-H. R. Tsai 氏との共同研究に基づくものである.

らせん転位の助けを借りた結晶成長では, らせん転位により供給されたステップが分子を取り込んで前進し, 渦巻状の模様を形成しながらステップが螺旋階段を駆け上がるようにして成長する. ステップは結晶格子の異方性に由来する異方的表面エネルギーから定義された曲率 $H_\gamma$ と成長の駆動力 $f$ による駆動力つき異方的曲率流方程式

$$V_\gamma = -H_\gamma + f \tag{1}$$

により成長すると考えられている. 結晶表面ではしばしば結晶格子の多面体構造に基づく, 多角形型の渦巻状ステップも観測されている.

本講演ではこの多角形型渦巻状ステップの時間発展を, [5] の等高線法を用いて考察する. いま $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ は有界領域とし, 渦巻状ステップを $\Omega$ の中の時間発展する曲線 $\Gamma(t)$ で表す. $a_1, a_2, \ldots, a_N \in \Omega$ を $\Gamma(t)$ の中心とし, $W = \Omega \setminus (\bigcup_{j=1}^N B_\rho(a_j))$ とする. ただし $\rho > 0$ は定数, $B_\rho(a) = \{x \in \mathbb{R}^2;\ |x-a| < r\}$ である. このとき, $\Gamma(t)$ とその成長の向きを表す連続単位法ベクトル場 $\mathbf{n}$ は未知関数 $u(t,x)$ を用いて

$$\Gamma(t) = \{x \in \overline{W};\ u(t,x) - \theta(x) \equiv 0 \mod 2\pi\mathbb{Z}\}, \quad \mathbf{n} = -\frac{\nabla(u-\theta)}{|\nabla(u-\theta)|} \tag{2}$$

で表される. (詳しくは [3]) ただし $\theta$ はらせん転位がもたらす結晶格子の層構造を表す関数で,

$$\theta(x) = \sum_{j=1}^N m_j \arg(x - a_j) \quad (m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\})$$

で与える. ここで $m_j \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$ は $a_j$ に触れている曲線 $\Gamma(t)$ の符号つき本数で, $V_\gamma > 0$ のとき, $a_j$ を端点とする $|m_j|$ 本の曲線が $a_j$ の周りを反時計回りに回転する状況を $m_j > 0$, 時計回りに回転する状況を $m_j < 0$ として表す. 曲線とその単位法ベクトル場の (2) による定式化を用いると, (1) は

$$u_t - \gamma(\nabla(u-\theta))\{\mathrm{div} D\gamma(\nabla(u-\theta)) + f\} = 0 \quad \text{in } (0,T) \times W \tag{3}$$

となる. ここで $\gamma\colon \mathbb{R}^2 \to [0,\infty)$ は異方的表面エネルギー

$$J_\gamma(u) = \int_W \gamma(\nabla(u-\theta))\mathrm{d}x \tag{4}$$

を与える密度関数で, 正斉次一次, 凸, $S^1$ 上で $\gamma > 0$ であるとする．このとき $H_\gamma$ は $J_\gamma$ の $L^2$ の意味での第一変分, すなわち $H_\gamma = -\mathrm{div} D\gamma(\nabla(u-\theta))$ である．また (3) では法速度 $V_\gamma$ を $\gamma$ から定義される計量

$$d(x,y) = \gamma^\circ(x-y), \quad \text{ただし } \gamma^\circ(p) = \sup\{p\cdot q;\ \gamma(q)\le 1\} \tag{5}$$

異方的法速度 $V_\gamma = u_t/\gamma(\nabla(u-\theta))$ を考えている．

さて $\Gamma(t)$ が多角形曲線となる状況は, 表面エネルギー (4) の極小曲面である Frank 図形

$$\mathcal{F}_\gamma = \{p \in \mathbb{R}^2;\ \gamma^\circ(p)\le 1\}$$

が閉凸多角形となるときと考えられる．このときの $H_\gamma$ をクリスタライン曲率, (1) をクリスタライン曲率流方程式と呼ぶ．さて $\mathcal{F}_\gamma$ が閉凸多角形となるには, $\gamma^\circ$ が区分的一次関数

$$\gamma^\circ(p) = \max_{1\le j\le N_\gamma} m_j \cdot p$$

で与えられていると考えるのが一つの容易な方法である．ただし, 例えば $\gamma^\circ(p) = \max\{|p_1|, |p_2|\}$ (すなわち $\mathcal{F}_\gamma$ は正方形) とすると $\gamma(p) = |p_1| + |p_2|$ となるように, $\gamma$ もまた区分的一次関数となってしまい, (3) のとくに等高線法における $H_\gamma$ が定義できない．しかし, 渦巻状ステップ同士の衝突・融合を許す数理モデルとして等高線法は有力な手法である．そこで, 本講演では

(A1) $\gamma\colon \mathbb{R}^2 \to [0,\infty)$ は凸,

(A2) $\gamma$ は正斉次一次, すなわち任意の $\lambda > 0$, $p\in\mathbb{R}^2$ に対し $\gamma(\lambda p) = \lambda\gamma(p)$,

(A3) $\gamma > 0$ on $S^1$,

(A4) $\gamma$ は区分的一次関数

を仮定し, Almgren–Taylor–Wang[1], Chambolle[2], Oberman–Osher–Takei–Tsai[4] に基づく (3) の弱い意味での数値解法を導入する．

Almgren–Taylor–Wang は (1) が異方的表面エネルギー汎関数

$$\widetilde{J}_\gamma(\Gamma) = \int_\Gamma \gamma(-\mathbf{n})\mathrm{d}\sigma$$

の勾配流として定式化されることに着目し, 時間変数のみを離散化して短い時間ステップごとに $\widetilde{J}_\gamma$ と $\Gamma$ の移動量の最適化問題を解く変分的アプローチを導入した．Chambolle[2] はこれを符号つき距離関数による等高線法で表したアルゴリズムを導入した．すなわち通常の意味での界面 $\Gamma$ に対し, その内側で正, 外側で負となる, 計量 (5) を用いた異方的距離関数 $u = d_\gamma(x)$ を考え, 汎関数

$$F(w;u) = \int_\Omega \gamma(\nabla w)\mathrm{d}x + \frac{1}{2h}\|w-u\|^2_{L^2}$$

を導入する．すると $F(w)$ の最小元 $w^*$ は

$$-\mathrm{div} D\gamma(\nabla w) + \frac{w^*-u}{h} = 0$$

をみたすので,

$$T_h\Gamma = \{x \in \Omega;\ w^*(x) = 0\} = \{x \in \Omega;\ -d_\gamma = h\mathrm{div} D\gamma(\nabla w)\}$$

は $\Gamma$ を $V_\gamma = -H_\gamma$ で時間ステップ $h > 0$ だけ成長させる陰的差分解法を与える．Oberman–Osher–Takei–Tsai[4] は Chambolle のアルゴリズムに対し, $F(w)$ の最小化元を求める方法として Split Bregman iteration と呼ばれる手法を導入した．すなわち, まず $w^*$ を求める問題について, その変数を $w$ と $d = \nabla w$ 部分に分割して制約項を加えた

$$F(w, d; u) = \int_\Omega \gamma(d)\mathrm{d}x + \frac{1}{2h}\|w - u\|_{L^2}^2 + \frac{\mu}{2}\|d - \nabla w\|_{L^2}^2$$

の最小元 $(w^*, d^*)$ を求める問題に読み替える．この最小元 $(w^*, d^*)$ を求める方法として, Bregman iteration と呼ばれる逐次解法を用いると, これは

$$\begin{aligned}(w_{k+1}, d_{k+1}) &= \arg\min_{(w,d)} \left\{ \int_\Omega \gamma(d)\mathrm{d}x + \frac{1}{2h}\|w - u\|_{L^2}^2 + \frac{\mu}{2}\|d - \nabla w - b^k\|_{L^2}^2 \right\}, \\ b^{k+1} &= b^k + \nabla w^{k+1} - d^{k+1}, \quad w^0 = 0, \quad d^0 = 0\end{aligned}$$

と書き換えられ, さらに上段の逐次近似解法は

$$\begin{aligned}w^{k+1} &= \arg\min_w \left\{ \frac{1}{2h}\|w - u\|_{L^2}^2 + \frac{\mu}{2}\|d^k - \nabla w - b^k\|_{L^2}^2 \right\}, \\ d^{k+1} &= \arg\min_d \left\{ \int_\Omega \gamma(d)\mathrm{d}x + \frac{\mu}{2}\|d - \nabla w^{k+1} - b^k\|_{L^2}^2 \right\}\end{aligned}$$

なる, 2 ステップの最適化問題と同値になることがわかる．ここで, とくに $d^{k+1}$ を求める最適化問題を直接計算から解くことにより, $\gamma$ に滑らかさの仮定を必要とせずこの最適化問題を解くことができる．

本講演ではこのアプローチをスパイラル成長の問題に適用する．すなわち (1) および (2) によるスパイラル成長の数理モデルを

$$F(w; u) = \int_W \gamma(\nabla(w - \theta))\mathrm{d}x - \int_W fw\mathrm{d}x + \frac{1}{2h}\|w - u\|_{L^2}^2$$

の最適化問題として離散化する．スパイラル成長に対し Chambolle のアルゴリズムを適用させるときの最大の問題は, $\Gamma(t)$ が単純閉曲線などの領域を内外に分割する曲線とならないため, $\Gamma(t)$ の符号つき距離関数が定義できない点である．これに対し本講演では,

(I) **距離関数を用いるアプローチ:** $\Gamma(t)$ の帯状近傍上で符号つき距離関数を定義し, Chambolle のアルゴリズムを適用する．

(II) **距離関数を用いないアプローチ:** $u$ は一般の等高線関数として, そのまま $F(w; u)$ の最適化問題を考える

なる二つのアプローチを紹介する．(II) のアイデアの根幹部分について紹介すると，$F(w;u)$ の最小元 $w^*$ は

$$-\mathrm{div} D\gamma(\nabla(w^*-\theta)) - f + \frac{w^*-u}{h} = 0$$

をみたすことが分かる．すなわち

$$w^* - u = h(\mathrm{div} D\gamma(\nabla(w^*-\theta)) + f)$$

となるので，

$$u^* = u + \gamma(\nabla(w^*-\theta))(w^*-u)$$

とおくと，これが (3) の差分解法

$$u(t+h) = u(t) + h\gamma(\nabla(u(t+h)-\theta))\left\{\mathrm{div} D\gamma(\nabla(u(t+h)-\theta)) + f\right\}$$

を近似すると考える．講演では上の方法に改良を加えた数値解法を紹介する．

## 参考文献

[1] F. Almgren, J. E. Taylor, and L. Wang, Curvature driven flows: a variational approach, SIAM J. Cont. Optim., **31**(1993), 387–438.

[2] A. Chambolle, An algorithm for mean curvature motion, Interfaces and Free Boundaries, **6**(2004), 195–218.

[3] Y. Giga, *Surface evolution equations. A level set approach*, Monographs in Mathematics, 99. Birkhäuser Verlag, Basel, 2006.

[4] A. Oberman, S. Osher, R. Takei, and R. Tsai, Numerical methods for anisotropic mean curvature flow based on a discrete time variational formulation, Communications in Mathematical Sciences, **9**(2011), 637–662.

[5] 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 surface, Journal of Scientific Computing, **62**(2015), 831–874.