

# 界面ネットワークの平均曲率流の数値計算

京都大学・理学部数学教室\* カレル シュワドレンカ

Karel Svadlenka

Department of Mathematics, Faculty of Science

Kyoto University

## §1. 序

本稿では平均曲率による界面運動の近似を与える BMO アルゴリズムをより複雑な運動に対し一般化する方法を考える。面積保存条件がつく運動や接合点を含む界面ネットワークの運動や振動を伴う運動などを取り上げ、それぞれの問題について BMO アルゴリズムの拡張のアイデアを解説する。

## §2. 平均曲率流と BMO アルゴリズム

ここでは、平均曲率流の定義と基本的な BMO アルゴリズムを紹介する。以下の議論はすべて一般次元において成り立つが、説明を分かりやすくするために、2次元平面を代表例として扱う。このとき、滑らかな閉曲線  $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^2$  の平均曲率流は長さエネルギー

$$E(\gamma) = \int_a^b |\gamma'(s)| ds$$

の  $L^2$  勾配流として定義される。変分を計算すると、曲線の各点における法線方向の速度  $v(s)$  が

$$v = -\kappa$$

という関係を満たす動きであることがわかる。ただし、 $\kappa$  は考える点における曲線の (平均) 曲率である。

この平均曲率流を数値計算する方法の一つは [6] で発表されたいわゆる「BMO アルゴリズム」である。時刻  $t$  において曲線  $\gamma$  に囲まれた相領域を  $P_1(t)$ 、外側の相領域を  $P_2(t)$  とすると、BMO アルゴリズムは次の 2 つのステップを繰り返す近似法である：

1. 拡散させるステップ：次の方程式の解  $u(t, x)$  を求める

$$\begin{aligned} u_t &= \Delta u && \text{in } (0, \Delta t) \times \mathbb{R}^2 \\ u(0, x) &= \chi_{P_1}(x) - \chi_{P_2}(x) \end{aligned}$$

ここで、 $\chi_P$  は集合  $P$  の特性関数である。

2. レベルセットをとるステップ：時間  $\Delta t$  後の曲線の平均曲率流による変形の近似は

$$P_1(t + \Delta t) = \{x \in \mathbb{R}^2; u(\Delta t, x) > 0\}$$

で与えられる。

実際の数値計算では有界領域にノイマン境界条件を適用することが多い。

時間ステップ  $\Delta t$  を細かくすれば、BMO アルゴリズムで得られる曲線の族が平均曲率流に収束することは証明されている ([1, 2, 5])。BMO アルゴリズムはレベルセット法に基づいているため、位相変化などの曲線の特異性を自然に処理できることが主な利点である。さらに、曲率の計算をしなくてすむのも便利な点である。

### §3. BMO アルゴリズムの様々な拡張

以下では、曲率による界面のより一般的な動きを考え、対応する BMO アルゴリズムの拡張を簡単に記す。詳細については拙著を参照されたい。

#### 3.1 面積保存

制約条件

$$|P_1(t)| = A = \text{const.}$$

つきの長さエネルギーの勾配流は、BMO アルゴリズムの拡散ステップを離散勾配流の考え方を用い変分問題に直し、レベルセットの面積に対する制約条件をペナルティとしてつけることで近似できる [11]。つまり、上の BMO アルゴリズムにおいて  $u_0(x) = \chi_{P_1}(x) - \chi_{P_2}(x)$  とおき、時間ステップ  $\Delta t$  を差分幅  $h$  をもって分割し、以下の

最小化問題を  $n = 1, 2, \dots, N$  ( $N = \Delta t/h$ ) に対し帰納的に解いていく：

$$J_n(u) = \int_{\mathbb{R}^2} \left( \frac{|u - u_{n-1}|^2}{h} + |\nabla u|^2 \right) dx + \lambda (|P_1(u)| - A)^2 \rightarrow \min \quad (1)$$

ただし、 $J_n$  の minimizer を  $u_n$  としており、 $P_1(u)$  は関数  $u(x)$  がゼロより大きくなる  $x$  の領域を意味する。なお、ペナルティーは他の形も使用できる。

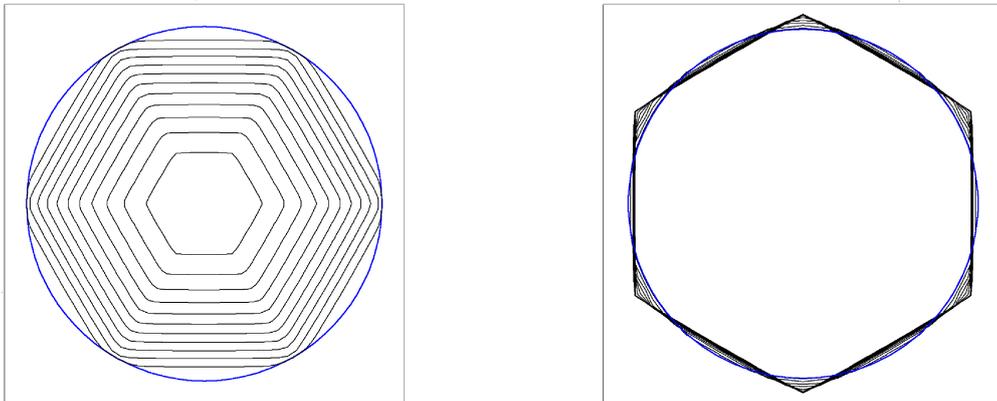
上のアルゴリズムが面積保存平均曲率流の近似になっていることは [11, 8] で形式的に示された。また、上の最小化問題に対応する自由境界問題の解析は [9] で行われ、固定した  $h > 0$  に対しペナルティー係数  $\lambda$  を十分大きくとれば、有限の  $\lambda$  でもすべての minimizer の面積がちょうど  $A$  になることが証明された。よって、ペナルティー法の適用は数値計算上でも妥当であると言える。

### 3.2 非等方的なエネルギー

界面の長さエネルギーがその法線ベクトル  $\mathbf{n}$  に依存するとき、つまり

$$E_\phi(\gamma) = \int_\gamma \phi(\mathbf{n})$$

のとき、(1) の汎関数  $J_n$  において  $|\nabla u|^2$  の項を  $|\phi(\nabla u)|^2$  で置き換えるだけで、非等方的平均曲率流の正しい近似が得られる。相の面積を保存したいときはペナルティーを付け加えればよい [7]。



Wulff 図形が六角形の非等方的エネルギーに対する運動（面積保存なし・あり） [7]

### 3.3 接合点を含む界面ネットワーク

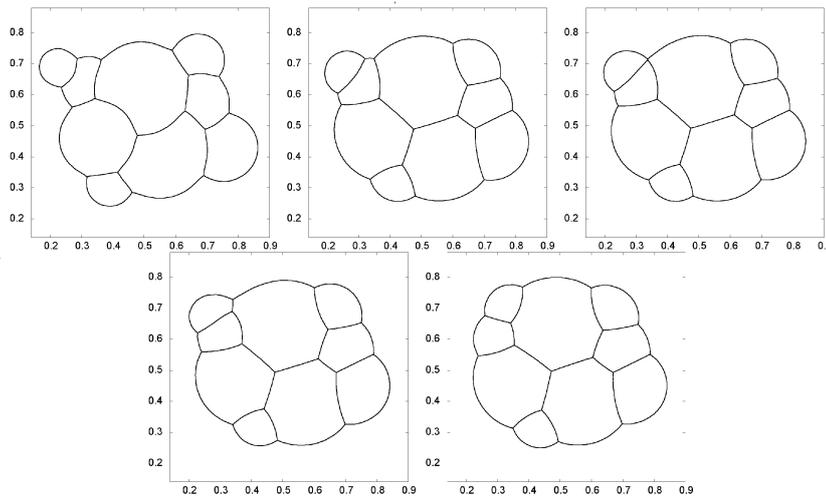
相が  $P_1, \dots, P_k$  と三つ以上 ( $k \geq 3$ ) あるとき、接合点という新たな特異性が現れ、スカラーの枠組みでは扱えなくなる。そこで、問題をベクトル値に拡張する。すなわち、 $k$ -単体の中心から頂点へ向かう  $k$  個の  $(k-1)$  次元の参照ベクトル  $p_l, l = 1, \dots, k$  を用意し、拡散ステップの初期値を次のようなベクトル値関数を考える：

$$u_0(x) = \chi_{P_1} p_1 + \dots + \chi_{P_k} p_k$$

ベクトル値の熱方程式を解いたあと、時間  $\Delta t$  後の新しい相領域を決めるには、 $u(\Delta t, x)$  とそれぞれの参照ベクトルの内積をとり、どの参照ベクトルに最も近いかを確認する：

$$P_j(t + \Delta t) = \{x \in \mathbb{R}^2; u(\Delta t, x) \cdot p_j = \max_{l=1, \dots, k} u(\Delta t, x) \cdot p_l\}$$

このアルゴリズムの解析は [11] でなされている。しかし、非等方的なエネルギーの場合はまだ不明な点が残っている [7]。



それぞれの相の面積が保存される多相平均曲率流の計算結果 [8]

### 3.4 界面の停滞を防ぐ方法

界面運動の有限要素法を用いた数値計算において、特性関数をベースにした初期値を使うと、BMO アルゴリズムの一ステップで界面が一つ以上の要素分の距離を移動しない限

り、停滞してしまうという問題が発生する。この問題は面積が保存される運動で特に顕著になる。

2相流の場合は、符号付き距離関数を初期値にとることによってこの問題が解消されることが知られている。[8]では、界面ネットワークにも対応できるベクトル値の符号付き距離関数への一般化を行い、それぞれの角度が120度になる接合点の安定性や界面の速度を解析している。具体的には、界面のまわりの帯の幅をパラメータ  $\varepsilon$  とすると、BMO アルゴリズムの拡散ステップの初期値は次のような関数をとる：

$$\delta_\varepsilon(x) = \sum_{i=1}^k \left[ 1 - \min \left\{ 1, \frac{d_i(x)}{\varepsilon} \right\} \right] p_i$$

ただし、 $p_i$  は上で定義した参照ベクトルで、 $d_i(x) = \text{dist}(x, P_i)$  とした。

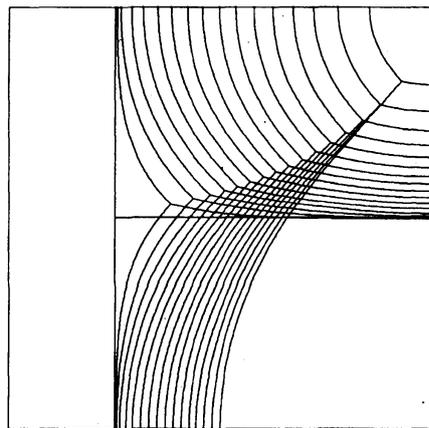
### 3.5 異なる表面張力

以上の議論はすべての界面の表面張力が等しいときにしか通用しない。相  $P_i$  と相  $P_j$  の間にある界面  $\gamma_{ij}$  の表面張力  $\sigma_{ij}$  が一般のとき、つまり、長さエネルギーが

$$E(\gamma) = \sum_{i < j} \int_{\gamma_{ij}} \sigma_{ij}$$

のとき、接合点の角度が非対称になり、もとの BMO アルゴリズムでは表現できない。

論文 [10] では、非対称な接合点にも対応できるよう BMO アルゴリズムを一般化した。非対称な参照ベクトルを用いるとともに、ベクトル値熱方程式の代わりに適切に選んだ係数をもつ一般の拡散系を導入し、接合点近傍の動きを修正するステップを加えるのが主なアイデアである。



150°, 90°, 120° の角度をもつ接合点の運動 [10]

### 3.6 bulk エネルギー

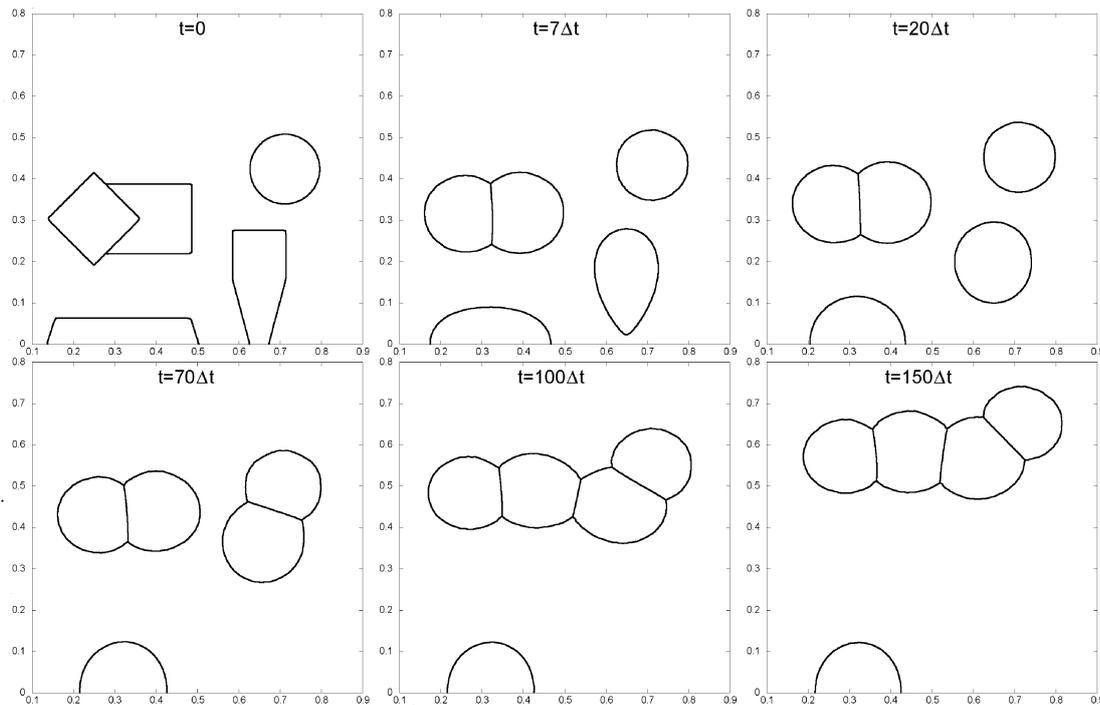
物理的な理由から長さエネルギーに bulk エネルギーを加えたエネルギーの勾配流モデルとしてよく現れる：

$$E(\gamma) = \sum_{i < j} \int_{\gamma_{ij}} ds + \sum_{i=1}^k \int_{P_i} e_i(x) dx$$

BMO アルゴリズムの拡散ステップの熱方程式に熱源項  $w$  を加えることでこの勾配流を近似できる。関数  $w$  を

$$w(x) \cdot (p_i - p_j) = \frac{k}{\varepsilon(k-1)} (e_i - e_j)(x)$$

を満たすように設計すればよい [7]。



外側の相の bulk エネルギー密度が垂直方向の距離に比例する場合に得られた計算結果 [7]

### 3.7 双曲型の運動

ニュートンの第2法則に従って界面の運動方程式を導くと、速度ではなく加速度が平均曲率に比例するモデルが得られる。そのような界面運動の近似法はほとんど研究されていないが、[3, 4]でBMOアルゴリズムに似た近似法を提案した。一つの時間ステップ前と二つの時間ステップ前の離散界面への符号付き距離関数の適切な線形結合を初期値とする波動方程式の解のレベルセットを考えるのがポイントである。基本的には勾配流問題に対するBMOアルゴリズムと同様な方法であるため、上で紹介した拡張はすべて双曲型の計算にも適用可能である。

### 参考文献

- [1] G. Barles, C. Georgelin: *A simple proof of convergence of an approximation scheme for computing motions by mean curvature*, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 32(2), pp. 484–500, 1995.
- [2] L.C. Evans: *Convergence of an algorithm for mean curvature motion*, Indiana U. Math. J., Vol. 42, pp. 533–557, 1993.
- [3] E. Ginder, K. Svadlenka: *On an algorithm for curvature-dependent interfacial acceleration*, Proceedings of Computational Engineering Conference JSCES, Vol. 19, 2014.
- [4] E. Ginder, K. Svadlenka: *A thresholding algorithm generating motion by hyperbolic mean curvature flow*, preprint, 2015.
- [5] Y. Goto and K. Ishii, T. Ogawa: *Method of the distance function to the Bence-Merriman-Osher algorithm for motion by mean curvature*, Comm. Pure Appl. Anal., Vol. 4, pp. 311–339, 2005.
- [6] B. Merriman, J. Bence, S. Osher: *Motion of multiple junctions: a level set approach*, Journal of Computational Physics, Vol. 112, pp. 334–363, 1994.
- [7] R.Z. Mohammad: *Numerical analysis of multiphase curvature-driven interface evolution with volume constraint*, PhD thesis, Kanazawa University, 2014.
- [8] R.Z. Mohammad, K. Svadlenka: *Multiphase volume-preserving interface motions via localized signed distance vector scheme*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, 2014 (accepted).

- [9] R.Z. Mohammad, K. Svadlenka: *On a penalization method for an evolutionary free boundary problem with volume constraint*, Advances in Mathematical Sciences and Applications, 2014 (accepted).
- [10] Nur Shofianah, R.Z. Mohammad, K. Svadlenka: *Simulation of triple junction motion with arbitrary surface tensions*, IAENG International Journal of Applied Mathematics, 2014 (accepted).
- [11] K. Svadlenka, E. Ginder, S. Omata: *A variational method for multiphase volume-preserving interface motions*, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 257, pp. 157-179, 2014.