

特異性を持つ多角形運動と 雪の結晶成長モデルへの応用

金沢大学自然科学研究科数物科学専攻 田中 智恵 (Tomoe Tanaka)
Division of Mathematical and Physical Sciences,
Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University
E-mail : tt1856@stu.kanazawa-u.ac.jp

金沢大学理工研究域数物科学系 木村 正人 (Masato Kimura)
Faculty of Mathematics and Physics,
Institute of Science and Engineering, Kanazawa University
E-mail : mkimura@se.kanazawa-u.ac.jp

1 はじめに

本研究では、雪の結晶成長を記述する数理モデルへの応用を目指して、辺の分裂と衝突を許した拡張されたクリスタライン法の数学的定式化と、ある簡略化された雪の結晶成長モデルに対する数値シミュレーションを行った。

雪の結晶成長に関しては、中谷宇吉郎 [11] による人工雪を用いた実験と、現在中谷ダイアグラムと呼ばれる水蒸気の過飽和度と温度と結晶形状の間の関係を明らかにした研究が有名である。物理の面からは、黒田・横山 [10, 15] などその後も多くの研究がある。また、最近ではそれらの成果を数学的に定式化して得られた偏微分方程式モデルの大規模数値シミュレーションを行った Barrett-Garcke-Nürnberg [2] の研究や、セルオートマトンによる結晶成長モデルの研究 Reiter [12] や Gravner-Griffeath [4, 5] などがあり、2次元のみならず3次元シミュレーションが可能になって来ていることが注目される。

今回は、上記のような複雑な3次元モデルではなく、2次元結晶成長に限定し、簡略化されているが厳密な数学的形式化の可能な雪の結晶成長モデルの構築を目指して研究を行った。2次元の結晶成長モデルとして、J. Taylor [13] および Angenent-Gurtin [1] によるクリスタライン曲率運動 (3.7) と、その様々な拡張 [8, 14] が知られている。そこでは、ある辺が消滅することでおきる辺の結合は許されているが、辺同士の衝突や分裂などは考えていなかった。

本論文では雪の2次元結晶を想定し、Wulff 図形 [8, 14] が正六角形であるとし、3節において辺の結合、分裂、衝突などの特異性の分類と、それらの特異性を許容する新しい広義解を定義し、4節ではその解の性質を数学的に調べる。特に、辺の衝突後にしばしば現れる長さ0の辺を持つ多角形を初期値とする拡張されたクリスタライン曲率運動の解の一意存在を証明する (定理 4.1)。また5節では、非分裂解と分裂不可能解という2つの解の概念を導入し、特に非分裂解の大域解の存在に関する結果を紹介する (定理 5.2)。特に、簡略化された形で過飽和度の効果を取り込んだモデルに対して、6節では分裂不可能解の数値シ

ミュレーション結果を紹介する。辺が分裂可能かどうかを判定するための辺の臨界長さを形式的な漸近展開を用いて導出し、それを用いた数値計算例を示す。

2 多角形運動

2.1 許容多角形

Beneš-Kimura-Yazaki [3] に従って以下の記号を用いる。本論文では、平面内の折れ線で囲まれた有界な多角形領域を Ω とし、その境界である閉じた多角形曲線を多角形と呼び、しばしば Γ で表す。辺の数は有限で N とする。但し、 Ω や Γ は連結とは限らないが、条件

$$\text{int } \bar{\Omega} = \Omega, \quad \partial\Omega = \Gamma, \quad (2.1)$$

を満たすものとする。 Γ の N 個の辺 (両端の頂点を含む) を Γ_j ($j = 1, \dots, N$) とおく。以下、説明を簡単にするために、 Γ の連結成分は 1 つ (この場合 Γ は Jordan 曲線になる) とし、番号 j は考えている辺のまわりで反時計回りに振られているものとする。ただし、 Γ が複数の連結成分を持つ場合にも以下の定義などは容易に拡張可能である。

また、 Γ_j 上の外向き単位法線ベクトルを $\mathbf{n}_j = (\cos \theta_j, \sin \theta_j) \in \mathbb{R}^2$ とし、

$$h_j = h_j(\Gamma) := \mathbf{n}_j \cdot \mathbf{x} \quad (\mathbf{x} \in \Gamma_j),$$

を、辺 Γ_j の高さ関数と呼び、

$$\mathbf{h}(\Gamma) = (h_1(\Gamma), \dots, h_N(\Gamma)) \in \mathbb{R}^N$$

を N 多角形 Γ の高さ関数とする。

本論文では、雪の結晶成長モデルを念頭に置き、正六角形を Wulff 図形とする以下のような許容多角形のクラス [8, 14] を考える。

$$\mathcal{P} := \left\{ \Gamma \mid (2.1) \text{ を満たす, } \theta_j \in \left\{ \frac{k\pi}{3} \right\}_{k=0, \dots, 5} \quad (j = 1, \dots, N), \text{ 各頂点の外角は } \pm \frac{\pi}{3} \right\}$$

\mathcal{P} には図 1 や図 2 のような多角形が含まれる。

$\Gamma \in \mathcal{P}$ の辺を図 3 のように 4 つのタイプに分類し、 Γ_j の遷移数 (transition number) χ_j を次のように定める。

$$\chi_j = \begin{cases} 1 & \Gamma_j \text{ の両端の外角が共に } \pi/3 \text{ の場合 (図 3 の左上)} \\ 0 & \Gamma_j \text{ の両端の外角が } \pi/3 \text{ と } -\pi/3 \text{ の場合 (図 3 の右上または左下)} \\ -1 & \Gamma_j \text{ の両端の外角が共に } -\pi/3 \text{ の場合 (図 3 の右下)} \end{cases}$$

以下簡単のため、 $\alpha = \frac{2}{\sqrt{3}}$ とおく。辺 Γ_j の長さ $|\Gamma_j|$ は、次で定義される l_j で与えられる。

$$l_j := \begin{cases} \alpha \chi_j (h_{j-1} - h_j + h_{j+1}) & (\chi_j = \pm 1) \\ \pm \alpha (h_{j-1} - h_{j+1}) & (\chi_j = 0, \text{ 図 3 の右上のときは } +, \text{ 左下のときは } -) \end{cases}$$

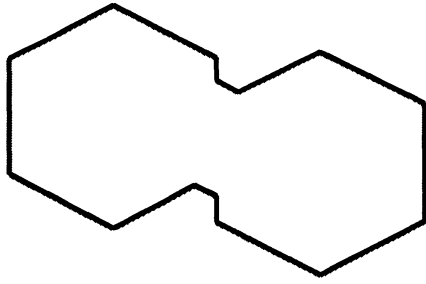


図 1: \mathcal{P} に含まれる図形 1

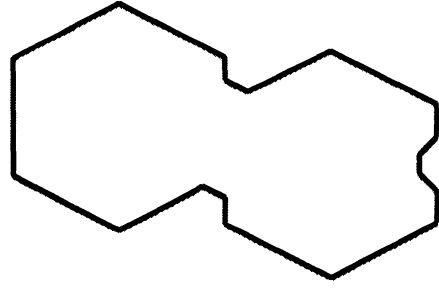


図 2: \mathcal{P} に含まれる図形 2

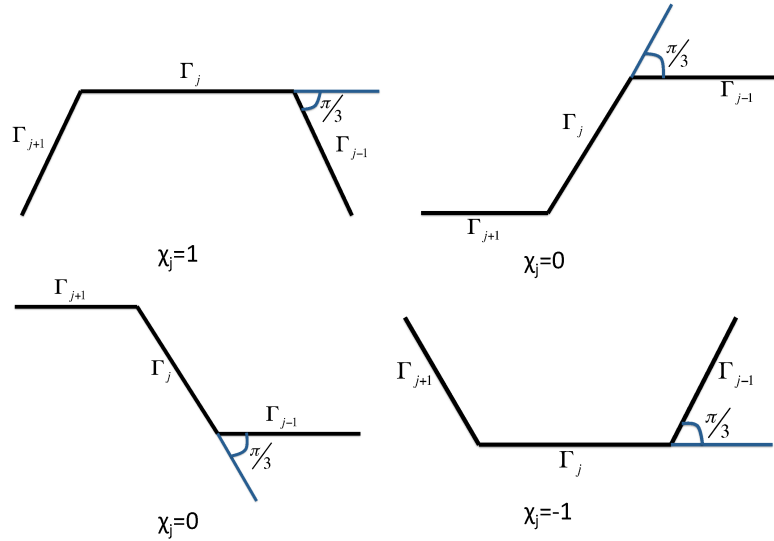


図 3: 辺の分類と遷移数 χ_j

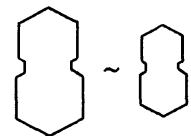
また、辺 Γ_j の多角形曲率（クリスタライン曲率）[3, 7, 14] は

$$\kappa_j := \frac{\alpha \chi_j}{l_j}$$

で与えられる。

2つの（連結な）多角形 $\Gamma, \Sigma \in \mathcal{P}$ の間の同値関係 \sim を次のように定義する（図 4）。

$\Gamma \sim \Sigma \Leftrightarrow$ 辺の数 N が同じで、反時計回りの辺番号 j をうまく選ぶと、
 $n_j(\Gamma) = n_j(\Sigma)$ ($j = 1, \dots, N$) となる。



このとき、各同値類 $Q \in \mathcal{P}/\sim$ は、高さ関数 $Q \ni \Gamma \mapsto h(\Gamma) \in \mathbb{R}^N$ によって \mathbb{R}^N のある開集合 $h(Q)$ と同一視され、 Q は次の距離：

図 4: 同値な図形

$$d(\Gamma, \Sigma) := \max_{1 \leq j \leq N} |h_j(\Gamma) - h_j(\Sigma)| \quad (\Gamma, \Sigma \in Q \in \mathcal{P}/\sim),$$

によって距離空間となる。連結ではない多角形についても同様に同値関係を定義できるが、各同値類 $Q \in \mathcal{P}/\sim$ は、高さ関数による Q の像 $h(Q) \subset \mathbb{R}^N$ の各連結成分毎に同値類とみなすこととする。

次に、本論文では多角形がその同値類の中で連続に変形し、辺の衝突・分裂・消滅・生成などの特異性を持つことを許すため、各同値類 $Q \in \mathcal{P}/\sim$ の上の距離に関する完備化を Q^0 とする。 Q^0 は \mathbb{R}^N における $h(Q)$ の閉包 $\overline{h(Q)}$ と同一視される。 Q^0 は図 5, 図 6 のような図形が含まれ、辺同士が衝突していたり、辺が 1 点に退化している ($l_j = 0$) ものも許している。

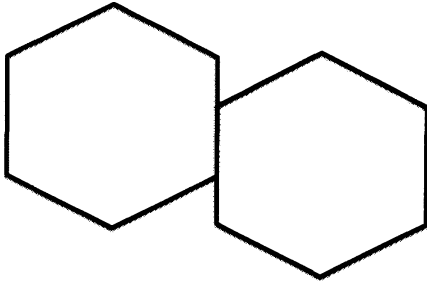


図 5: Q^0 に含まれる図形 1

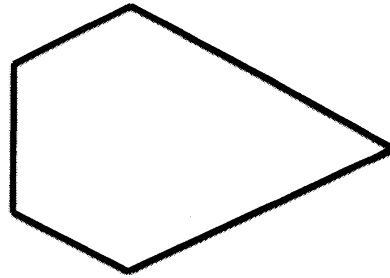


図 6: Q^0 に含まれる図形 2

$\Gamma \in Q^0 \setminus Q$ のとき、辺の衝突部分の長さ $l^*(\Gamma)$ を

$$l^*(\Gamma) := \max \{ |\Gamma_k \cap \Gamma_j| \mid \mathbf{n}_k + \mathbf{n}_j = \mathbf{0} \ (k \neq j) \},$$

で定める。但し、 $|\Gamma_k \cap \Gamma_j|$ は $\Gamma_k \cap \Gamma_j$ の長さで、 $|\emptyset| = 0$ とする。また、 $\Gamma(t) \in Q \in \mathcal{P}/\sim$ のとき $\Gamma_j(t)$ の法線方向速度 V_j を

$$V_j := \frac{dh_j}{dt} \quad (2.2)$$

で定める。

2.2 多角形運動による雪の結晶成長モデル

本論文では、次の形の結晶成長モデルの初期値問題を考える。 $\Gamma(t)$ ($t \geq 0$) は、ある同値類 $Q \in \mathcal{P}/\sim$ に含まれるものとする。

$$\begin{cases} V_j = F_j(t, \Gamma(t)) & (j = 1, \dots, N) \\ \Gamma(0) = \Gamma^0 \end{cases} \quad (2.3)$$

ただし、各 $Q \in \mathcal{P}/\sim$ について、 $F_j \in C^0(\mathbb{R} \times Q^0)$ で Lipschitz 条件

$$|F_j(t, \Gamma) - F_j(t, \Sigma)| \leq K(Q)d(\Gamma, \Sigma) \quad (\Gamma, \Sigma \in Q^0) \quad (2.4)$$

を満たすものとする。これは (2.2) より h_j についての常微分方程式の初期値問題であり、局所一意可能性が [3] で示されている。この形に含まれるモデルの具体例をいくつか示す。

(1) 曲率流モデル

$$V_j = -\kappa_j \quad (j = 1, \dots, N) \quad (2.5)$$

このモデルはクリスタライン法で扱われており、周長が単調に減少するなどの性質が知られている [1, 3, 7, 8, 14, 13].

(2) Gurtin モデル

$$\alpha(\mathbf{n}_j)V_j = F - \kappa_j \quad (2.6)$$

このモデルにおいて F は成長項であり、各辺の動きやすさ $\alpha(\mathbf{n}_j) > 0$ は \mathbf{n}_j によって変わる [8].

(3) 雪の結晶成長モデル I

温度は一定とし、 u を水蒸気の過飽和度として、

$$\begin{cases} \Delta u = 0 \text{ in } D \setminus \overline{\Omega(t)} \\ \int_{\Gamma_j} u ds = c\kappa_j \text{ on } \Gamma_j(t) \\ V_j = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}_j}(\text{const.}) \text{ on } \Gamma_j \\ u = u_1 \text{ on } \partial D \end{cases} \quad (2.7)$$

このモデルでは、多角形の成長を図7のように領域 D の中で考え、十分水蒸気の拡散が速いものとする。また、 Γ_j 上での u の積分平均は $c\kappa_j$ とし、各辺の成長速度は各 Γ_j 上で一定であるとする。そして、 D の境界上での u の値を u_1 とする。このモデルの局所解の一意存在は既に証明されている [9].

(4) 結晶成長モデル II

モデル I を簡略化して過飽和度の効果を組み込んだモデルは次のようなモデルである。

$$V_j = \beta(\chi_j)F - c\kappa_j \quad (2.8)$$

ここで $c > 0$ である。 F は成長項であり、それにかかる β は結晶成長における過飽和度の効果を簡略化したものである。このとき β の値の関係は $\beta(1) > \beta(0) > \beta(-1) > 0$ となっている。つまり、 $\chi_j = 1$ の辺が最も成長しやすく、 $\chi_j = -1$ の辺が最も成長しにくいという効果を表している図8。

(5) 結晶成長モデル III

$$\begin{cases} V_j = F_j(t, \Gamma(t)) - c_j\kappa_j \quad (j = 1, \dots, N) \\ \Gamma(0) = \Gamma^0 \end{cases} \quad (2.9)$$

ただし、 $c_j > 0$ である。この結晶成長モデルは、(2.5)、(2.6)、(2.8) の形の結晶成長モデルを含む。

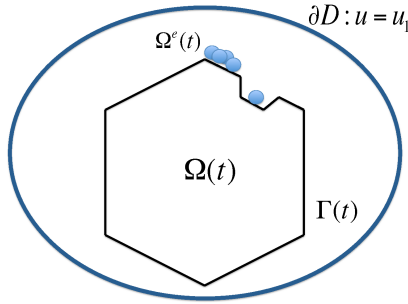


図 7: 結晶成長モデル I のイメージ

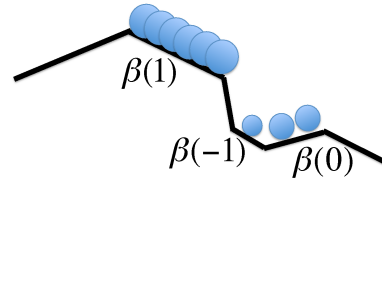


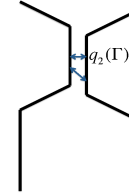
図 8: 結晶成長モデル II のイメージ

3 多角形運動における特異性

3.1 特異性の分類

結晶成長において起こりうる特異性を定めるために、次の 4 つの量を定義する。

$$\begin{aligned} q_0(\Gamma) &:= \min_j \{ |\Gamma_j| \mid \chi_j = 0 \} \\ q_1(\Gamma) &:= \min_j \{ |\Gamma_j| \mid \chi_j = \pm 1 \} \\ q_2(\Gamma) &:= \min_{i,j} \{ |x - y| \mid x \in \Gamma_j, y \in \Gamma_i, \mathbf{n}_j + \mathbf{n}_i = 0 \} \\ q(\Gamma) &:= \min(q_0(\Gamma), q_1(\Gamma), q_2(\Gamma)) \end{aligned}$$



$\Gamma(t)$ は $Q \in \mathcal{P}/\sim$ における (2.3) の多角形運動の古典解とする。ある時刻 t_i において、 $\lim_{t \rightarrow t_i - 0} q(\Gamma(t)) > 0$ ならば、 $\Gamma(t_i) \in Q$ であり、 $t > t_i$ まで滑らかに (2.3) の解は延長可能である。逆に、 $\lim_{t \rightarrow t_i - 0} q(\Gamma(t)) = 0$ となるとき、 $t = t_i$ で、何らかの特異性 (singularity) が発生している。同様に $\lim_{t \rightarrow t_i + 0} q(\Gamma(t)) = 0$ となるときは、 $t = t_i$ において特異性を持った状態から $t > t_i$ へ結晶が成長している。関数 $q_0 \sim q_2$ を用いて、次のように起こりうる特異性を分類し名称を定める。

図 9: $q_2(\Gamma)$ のイメージ

$$\lim_{t \rightarrow t_i - 0} q_0(\Gamma(t)) = 0 \text{ (facet merging(辺の結合))} \quad (3.1)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_i + 0} q_0(\Gamma(t)) = 0 \text{ (facet breaking(辺の分裂))} \quad (3.2)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_i - 0} q_1(\Gamma(t)) = 0 \text{ (facet degeneration(辺の縮退))} \quad (3.3)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_i + 0} q_1(\Gamma(t)) = 0 \text{ (facet generation(辺の生成))} \quad (3.4)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_i - 0} q_2(\Gamma(t)) = 0 \text{ (facet collision(辺の衝突))} \quad (3.5)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_i + 0} q_2(\Gamma(t)) = 0 \text{ (domain splitting(領域分裂))} \quad (3.6)$$

特異性を図で表すと下図のようになる。図 10 は結晶成長において起こりうる特異性とし、

図 11 は本研究では扱わない特異性とする. facet degeneration は今回扱う結晶成長モデルでは起こらないものとし, domain splitting は結晶成長の解としては許さない現象とする.

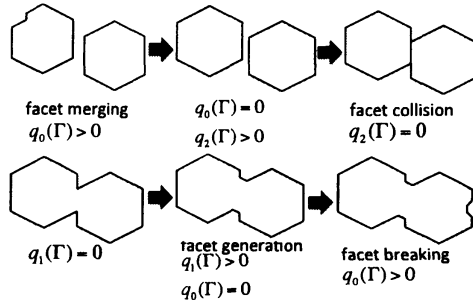


図 10: 扱う特異性

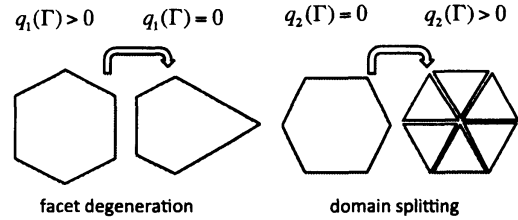


図 11: 扱わない特異性

3.2 広義解

多角形運動の初期値問題 (2.3) の広義解を次のように定義する. $\Gamma(t)$ で囲まれる領域 $\Omega(t)$ の特性関数を下のようにおく.

$$\chi_{\Omega(t)}(x) := \begin{cases} 1 & (x \in \Omega(t)) \\ 0 & (x \notin \Omega(t)) \end{cases}$$

定義 3.1. $I = [0, T)$, $T < \infty$ として $\Gamma(t) (t \in I)$ が次の条件をみたすとき (2.3) の広義解であるという.

1. $[t \rightarrow \chi_{\Omega(t)}] \in C^0(I, L^1(\mathbf{R}^2))$
2. $0 = t_0 < \exists t_1 < t_2 < \dots < t_{m-1} < t_m = T$, $\Gamma(t)$ は $t \in (t_i, t_{i+1})$ において同値類 $Q_i \in P/\sim$ に属する (2.3) の古典解である.
3. $\Gamma(t_i) \in Q_i^0, \lim_{t \rightarrow t_i+0} \Gamma(t) = \Gamma(t_i)$ in $Q_i^0, l^*(\Gamma(t_i)) = 0$
(domain splitting は起こらない)

クリスタライン法 [1, 13] では, 結晶界面が辺の向きを変えずに多角形曲率によって成長する運動の基本的枠組みを与えており, 次の形の多角形運動を扱う.

$$V_j = F - \kappa_j \tag{3.7}$$

$F = 0$ のときには, 辺の縮退 (3.3) や, 辺の衝突 (3.5) が起こらないことは示されている [7]. また, クリスタライン法では, (3.1) の辺の結合の特異性を許しており, (3.1) が起こるとき以外は同じクラス Q の中で多角形運動する. そして, クリスタライン法で考えられる解は定義 3.1 で定められる広義解に含まれている. (3.1) のみ扱えば, 解が存在することは示されている [7].

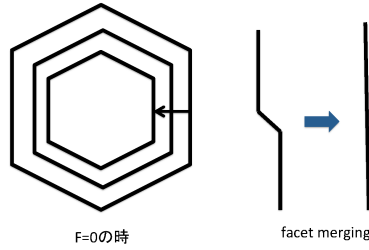


図 12: クリスタライン法で表される多角形運動

4 辺の生成が起きる場合

辺の衝突を許す結晶成長モデルの解を考えると右図のように外角 $\pm \frac{2}{3}\pi$ となる許容多角形の条件を満たさない多角形が表れる。この頂点を長さ 0 の $\chi_j = \pm 1$ の辺として、この場合でも解が延長できることを示す。以下、高さ関数 \mathbf{h} についての初期値問題について考える。多角形運動の初期値問題 (4.1) について次の定理が成り立つ。ある Q^0 を 1 つ固定し、 F_j を t と $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^N$ の関数とみなし、 $c_j > 0$ とする。

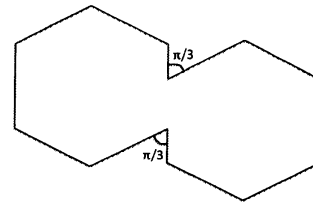


図 13: 辺の衝突後の多角形

$$\begin{cases} V_j = F_j(t, \mathbf{h}) - c_j \kappa_j \\ \mathbf{h}(0) = \mathbf{h}^0 \end{cases} \quad (4.1)$$

また、 F_j は連続で、Lipschitz 条件

$$|F_j(t, \mathbf{h}) - F_j(t, \tilde{\mathbf{h}})| \leq K \|\mathbf{h} - \tilde{\mathbf{h}}\|_\infty \quad (\forall \mathbf{h}, \tilde{\mathbf{h}} \in \mathbb{R}^N) \quad (4.2)$$

を満たすものとする。

定理 4.1. $\Gamma_0 \in Q^0, Q \in \mathcal{P} \setminus \sim, q_0(\Gamma_0) > 0, q_2(\Gamma_0) > 0$ ならば次のことをみたす T_0 と、(4.1) の広義解 $\{\Gamma(t)\}_{0 \leq t \leq T_0} \subset Q^0$ がただ 1 つ存在し次のことをみたす。

1. $\Gamma(t) (0 < t \leq T_0)$ は (4.1) の古典解
2. $\lim_{t \rightarrow +0} \mathbf{h}(t) = \mathbf{h}(\Gamma_0)$

また、 h_j は、 $\dot{h}_j = F_j - c_j \kappa_j, \mathbf{h} \in C^0([0, T_0]) \cap C^1((0, T_0])$ をみたす。

[証明] 定理の仮定より $l_j(0)$ について $l_j(0) \geq 0$ である。もし、 $l_j(0) = 0$ であるならば $\chi_j = \pm 1$ であり、任意の j に対して $\max(l_j(0), l_{j \pm 1}(0)) > 0$ が成り立つ。ここで高さ関数 \mathbf{h} と l の変数変換について考える。まず、集合 J_0, J_1 を次のように定める。

$$\begin{aligned} J_0 &:= \{j \in \{1, \dots, N\} \mid l_j(0) = 0\} \\ J_1 &:= \{1, \dots, N\} \setminus J_0 \end{aligned}$$

$J_0 = \phi$ のとき解が存在するのはあきらか. $J_0 \neq \phi$ のとき, $\alpha = \frac{2}{\sqrt{3}}$ とすると $j \in J_0$ のとき l_j は高さ関数を用いて次のように表すことができる.

$$l_j = \alpha \chi_j (h_{j-1} - h_j + h_{j+1}) \quad (4.3)$$

また, κ_j は l_j を用いて, $\kappa_j = \frac{\alpha \chi_j}{l_j}$ と表すことができる. ここで,

$$\mathbf{y}(t) = ((l_j(t))_{j \in J_0}, (h_j(t))_{j \in J_1}) \in \mathbb{R}^N \quad (4.4)$$

と置き, $\mathbf{y} = ((l_j), (h_j)) \rightarrow \mathbf{h}$ を $\mathbf{h} = \Phi(\mathbf{y})$, $\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{l} = (l_1, \dots, l_N)$ を, $\mathbf{l} = \Psi(\mathbf{h})$, $l_j = \psi_j(\mathbf{h})$ とする. $j \in J_0$ のとき \dot{l}_j は次の式で表される.

$$\begin{aligned} \dot{l}_j &= \alpha \chi_j (\dot{h}_{j-1} - \dot{h}_j - \dot{h}_{j+1}) \\ &= \alpha \chi_j (F_{j-1} - F_j - F_{j+1} - c_{j-1} \kappa_{j-1} + c_j \kappa_j - c_{j+1} \kappa_{j+1}) \\ &= \alpha \chi_j (F_{j-1} - F_j - F_{j+1} - c_{j-1} \frac{\alpha \chi_{j-1}}{l_{j-1}} + c_j \frac{\alpha \chi_j}{l_j} - c_{j+1} \frac{\alpha \chi_{j+1}}{l_{j+1}}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$G_j(t, \mathbf{h}, p, q) = (F_{j-1}(t, \mathbf{h}) - F_j(t, \mathbf{h}) + F_{j+1}(t, \mathbf{h}) - c_{j-1} \frac{\alpha \chi_{j-1}}{p} - c_{j+1} \frac{\alpha \chi_{j+1}}{q}) \quad (4.6)$$

とおくと

$$\dot{l}_j = \frac{\alpha^2 c_j}{l_j} + \alpha \chi_j G_j(t, \mathbf{h}(t), l_{j-1}(t), l_{j+1}(t)) \quad (4.7)$$

となる. $\mathbf{y}(t) = ((l_j(t))_{j \in J_0}, (h_j(t))_{j \in J_1})$ の常微分方程式は次のように表すことができる.

$$\begin{cases} \dot{l}_j = \frac{\alpha^2 c_j}{l_j} + g_j(t, \mathbf{y}) & (j \in J_0) \\ \dot{h}_j = g_j(t, \mathbf{y}) & (j \in J_1) \\ \mathbf{y} = \mathbf{y}^0 \end{cases} \quad (4.8)$$

ここで,

$$g_j(t, \mathbf{y}) = \begin{cases} \alpha \chi_j G_j(t, \Phi(\mathbf{y}), \psi_{j-1}(\Phi(\mathbf{y})), \psi_{j+1}(\Phi(\mathbf{y}))) & (j \in J_0) \\ F_j(t, \Phi(\mathbf{y})) - \frac{\alpha \chi_j c_j}{\psi_j(\Phi(\mathbf{y}))} & (j \in J_1) \end{cases} \quad (4.9)$$

また $\mathbf{y}^0 = (y_j^0)$ として,

$$y_j^0 = \begin{cases} 0 & (j \in J_0) \\ h_j(0) & (j \in J_1) \end{cases} \quad (4.10)$$

である. ここで d_0 を適当にとり, D を次のようにおく.

$$D = \left\{ \mathbf{y} = ((l_j)_{j \in J_0}, (h_j)_{j \in J_1}) \in \mathbb{R}^N \mid \begin{array}{l} 0 \leq l_j \leq d_0 \quad (j \in J_0) \\ |h_j - h_j^0| \leq d_0 \quad (j \in J_1) \end{array} \right\}$$

$j \in J_0$ のとき, $d_0 > 0$ を十分小さく選ぶと, $\mathbf{y} \in D$ に対し, $\psi_{j \pm 1}(\Phi(\mathbf{y})) > 0$ より,

$$g_j = \alpha \chi_j (F_{j-1}(t, \Phi(\mathbf{y})) - F_j(t, \Phi(\mathbf{y})) - F_{j+1}(t, \Phi(\mathbf{y})) - c_{j-1} \frac{\alpha \chi_{j-1}}{l_{j-1}} - c_{j+1} \frac{\alpha \chi_{j+1}}{l_{j+1}}) \quad (4.11)$$

$F_j, F_{j\pm 1} \in C^0$ ならば $g_j \in C^0([0, T] \times D)$ である。ここで、 \mathbf{y} について $g_j(t, \mathbf{y})$ が Lipschitz 連続であることを示す。 $\Phi(\mathbf{y}), \Psi(\Phi(\mathbf{y}))$ は一次変換である。 A を行列とすると $\Phi(\mathbf{y}) = A\mathbf{y}$ と表すことができ、ある $K > 0$ が存在して $|F_j(t, \mathbf{h}) - F_j(t, \tilde{\mathbf{h}})| \leq K|\mathbf{h} - \tilde{\mathbf{h}}|$ をみたすとすると、

$$\begin{aligned} |F_j(t, \Phi(\mathbf{y})) - F_j(t, \Phi(\tilde{\mathbf{y}}))| &\leq K|\Phi(\mathbf{y}) - \Phi(\tilde{\mathbf{y}})| \\ &= K|A(\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}})| \\ &\leq K\|A\| |\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}| \end{aligned} \quad (4.12)$$

よって $F_j(t, \mathbf{h})$ は Lipschitz 連続である。同様に $\psi_j(\Phi(\mathbf{y}))$ は C^1 級で、 $\psi_{j\pm 1}(\Phi(\mathbf{y})) \neq 0$ より、 $c_j \frac{\alpha_{j\pm 1}}{\psi_{j\pm 1}(\Phi(\mathbf{y}))}$ も Lipschitz 連続である。 $j \in J_1$ のときも同様に示すことができる。よって、 $g_j(t, \mathbf{y})$ が Lipschitz 連続であることが示された。以上のことを用いて (2.40) 式は j によって次のように変数変換を行うことができる。

$$\begin{cases} \dot{l}_j = \frac{\alpha^2 c_j}{l_j} + g_j(t, \mathbf{y}) & (j \in J_0) \\ \dot{h}_j = g_j(t, \mathbf{y}) & (j \in J_1) \\ l_j(0) = 0 & (j \in J_0) \\ h_j(0) = h_j^0 & (j \in J_1) \end{cases} \quad (4.13)$$

この変数変換は 1 対 1 に対応している。(4.13) の解が存在して一意であることは次の補題 4.2 によって示される。 \square

補題 4.2.

$$c_j \begin{cases} > 0 & (j = 1, \dots, N_0) \\ = 0 & (j = N_0 + 1, \dots, N) \end{cases}, \quad \mathbf{x}^0 = (0, \dots, 0, x_{N_0+1}^0, \dots, x_N^0)$$

とする。 $d_0 > 0, T > 0$ として

$$D = \left\{ \mathbf{x} \mid \begin{array}{l} 0 < x_j < d_0 \quad (1, \dots, N_0) \\ |x_j - x_j^0| < d_0 \quad (N_0, \dots, N) \end{array} \right\}$$

$g_j \in C^0([0, T] \times \bar{D})$ として、ある $K > 0$ が存在し、

$$|g_j(t, \mathbf{x}) - g_j(t, \mathbf{y})| \leq K|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \quad (\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D, t \in [0, T])$$

をみたすとする。このときある $T_0 \in (0, T]$ にたいして、初期値問題

$$\begin{cases} \dot{x}_j(t) = \frac{c_j}{x_j(t)} + g_j(t, \mathbf{x}(t)) & (t > 0, j = 1, \dots, N) \\ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}^0 \\ x_j(t) \in D & (0 < t \leq T, j = 1, \dots, N) \end{cases} \quad (4.14)$$

の解 $\mathbf{x} \in C^0([0, T_0], \mathbb{R}^N) \cap C^1((0, T_0], \mathbb{R}^N)$ が一意に存在する。

[証明] まずは, 解が存在することを証明する. x_j を用いて y_j を次のように定める.

$$y_j(t) := \begin{cases} \frac{1}{2}x_j^2(t) & (j = 1, \dots, N_0) \\ x_j(t) & (j = N_0 + 1, \dots, N) \end{cases} \quad (4.15)$$

このとき

$$\dot{y}_j(t) = \begin{cases} c_j + \sqrt{2y_j}g_j(t, \sqrt{2y_1}, \dots, \sqrt{2y_{N_0}}, y_{N_0+1}, \dots, y_N) \\ g_j(t, \sqrt{2y_1}, \dots, \sqrt{2y_{N_0}}, y_{N_0+1}, \dots, y_N) \end{cases} \quad (4.16)$$

ここで, g_j を $C^0([0, T] \times \mathbb{R}^N)$ に拡張しておく, Peano の定理より, ある $\gamma > 0$ に対し (4.16) の古典解 $\mathbf{y} \in C^1([0, \gamma], \mathbb{R}^N)$ が存在する. $j \in J_0$ のとき, $\dot{y}_j(0) = c_j > 0$ より, $y_j(t) > 0$ ($0 < t \leq \gamma$) より, このとき, 次のように $x_j(t)$ を定めると, $x_j \in C^0[0, \gamma] \cap C^1(0, \gamma)$ である (4.14) の解が存在する.

$$x_j(t) := \begin{cases} \sqrt{2y_j(t)} & (j = 1, \dots, N_0) \\ y_j(t) & (j = N_0 + 1, \dots, N) \end{cases} \quad (4.17)$$

よって解が存在することが示された. 次に, この解が一意であることを証明する. $0 < \epsilon < t < \gamma$ とする.

$$x_j(t) - x_j(\epsilon) = \int_{\epsilon}^t \left\{ \frac{c_j}{x_j(s)} + g_j(s, \mathbf{x}(s)) \right\} ds$$

において, $\epsilon \rightarrow +0$ とすると,

$$x_j(t) - x_j(0) = \int_0^t \left\{ \frac{c_j}{x_j(s)} + g_j(s, \mathbf{x}(s)) \right\} ds \quad (\forall t \in [0, \gamma]) \quad (4.18)$$

もし $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}$ が共に解ならば, $\gamma = \frac{1}{2K}$ として, 不等式 $\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2\|_{\infty} \leq K\gamma\|\mathbf{x}^1 - \mathbf{x}^2\|_{\infty}$ が成り立つことを示す. ここで $\|\cdot\|_{\infty}$ は $0 \leq t \leq \gamma$ における最大値ノルムを表す. この不等式より, $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{x}^{(2)}$ が従う. 任意の $t \in [0, \gamma]$ を取り固定する. $x_j^{(1)}(t) > x_j^{(2)}(t)$ のとき, $t_0 := \max\{s \mid 0 \leq s \leq t, x_j^{(1)}(s) \leq x_j^{(2)}(s)\}$ とおくと, $0 \leq t_0 < t$, $x_j^{(1)}(t_0) = x_j^{(2)}(t_0)$, $x_j^{(1)}(s) > x_j^{(2)}(s)$ ($t_0 < s \leq t$) より,

$$\begin{aligned} |x_j^{(1)}(t_1) - x_j^{(2)}(t_1)| &= x_j^{(1)}(t_1) - x_j^{(2)}(t_1) \\ &= \int_{t_0}^t \{\dot{x}_j^{(1)}(s) - \dot{x}_j^{(2)}(s)\} ds \\ &= \int_{t_0}^t \left(\frac{c_j}{x_j^{(1)}} - \frac{c_j}{x_j^{(2)}} \right) ds + \int_{t_0}^t (g_j(s, \mathbf{x}^{(1)}(s)) - g_j(s, \mathbf{x}^{(2)}(s))) ds \\ &\leq \int_{t_0}^t \left(\frac{c_j}{x_j^{(1)}} - \frac{c_j}{x_j^{(2)}} \right) ds + K(t - t_0)\|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(2)}\|_{\infty} \\ &\leq K\gamma\|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(2)}\|_{\infty}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

$x_j^{(2)}(t) = x_j^{(1)}(t)$ のときは明らかであり, $x_j^{(2)}(t) > x_j^{(1)}(t)$ のときは $x_j^{(1)}(t) > x_j^{(2)}(t)$ の時と同様に示すことができる. 以上より解が一意的であることは示された. \square

この定理によって 図 14 のように $\chi_j = \pm 1$ であるような辺の長さの初期値からも, 初期速度 ∞ であるような解が存在することが示された. また, そのような長さ 0 の辺は何カ所あってもよい.

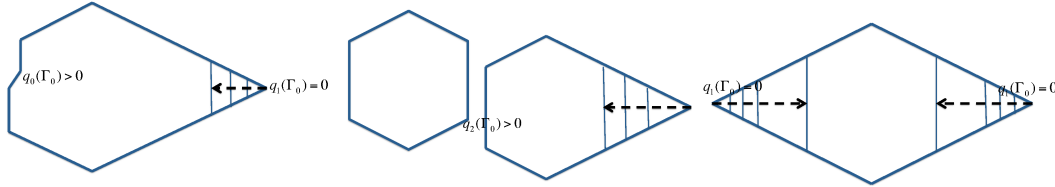


図 14: 初期値の例

5 非分裂解と分裂可能解

広義解では辺の分裂 (3.2) を許しているため, 辺の分裂が起きる場合には一般に広義解の一意性が成り立たない. そのため, 以下のように「非分裂解」=「辺の分裂を起こさない解」と「分裂不可能解」=「それ以上分裂を起こさせられない解」を定義する.

定義 5.1. $\{\Gamma(t)\}_{0 \leq t \leq T}$ を広義解, $\{t_i\}_{i=0}^m$ を $\{\Gamma(t)\}$ の特異性の表れる時刻の集合とする.

1. $\Gamma(t)$ が $i = 0, \dots, m-1$ について $\lim_{t \rightarrow t_i+0} q_0(\Gamma_j(t)) > 0$ をみたすとき $\{\Gamma(t)\}$ を**非分裂解**とよぶ.
2. $\tilde{\Gamma}(t) = \Gamma(t)$ ($0 \leq t \leq t_*$), $\tilde{\Gamma}(t) \neq \Gamma(t)$ ($t_* < t < t_* + \epsilon$) をみたす広義解 $\{\tilde{\Gamma}(t)\}_{0 \leq t \leq \tilde{T}}$ と, $t_* \in [0, \tilde{T}] \setminus \{t_1, \dots, t_l\}$ が存在するとき $\{\Gamma(t)\}$ を**分裂可能な解**とよぶ.
3. $\{\Gamma(t)\}$ が分裂可能でないとき, この解を**分裂不可能解**とよぶ.

これから, 次の多角形運動について考える.

$$V_j = \beta(\chi_j)F - \kappa_j \tag{5.1}$$

この多角形運動について次の定理が成り立つ.

定理 5.2. $\forall \Gamma^0 \in P$ に対し, 非分裂解 $\{\Gamma(t)\}_{0 < t < T \leq \infty}$ が存在し, 次のどれかが起こる.

- (1) $T = \infty$ まで広義解が存在する.
- (2) $T < \infty$ で $\lim_{t \rightarrow T-0} |\Omega(t)| = 0$
- (3) $T < \infty$ で無限回辺の衝突が起きる

(1) のイメージは図 15 であり, (2) のイメージは図 16 である. (3) は起こらないと予想している. この定理の証明は, 現在準備中の論文で発表予定である.

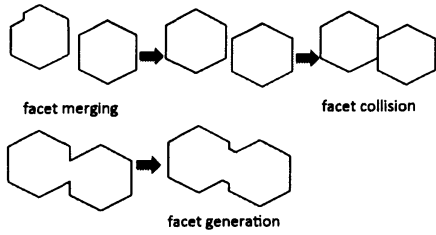


図 15: (1) のとき

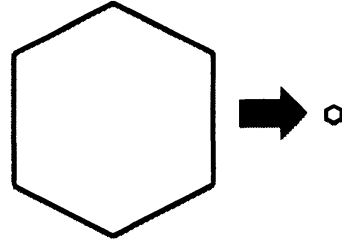


図 16: (2) のとき

6 雪の結晶成長のシミュレーション

数値計算においては次の結晶成長モデルを考える.

$$V_j = \beta(\chi_j)F - \kappa_j \tag{6.1}$$

6.1 辺の分裂の臨界長さ

分裂の条件

結晶成長において辺の数を増やす条件を定める. このとき図 17 のように同じ初期値から分裂する解がいくつも予想される. 数値計算においては, 辺の成長速度が正で凹凸の差の大きさが一番速く広がる時に分裂できるものと考え. つまり, 図 17 の時は右の成長速度のときに分裂が起きるものと考え. このとき, 辺の分裂が起きるための条件は次のようになる. $\Gamma(t) \in Q(t_* < t < t_{**})$: 古典解, $\Gamma^\epsilon(t) \in \tilde{Q}(t_* < t < t_{**})$: 古典解とする. また, $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Gamma^\epsilon(t_1) = \Gamma(t_1)$ in L^1 が成り立つとし, $\Gamma(t_1)$ の j 番目の辺 $\Gamma_j(t_1)$ の安定性を以下の様に調べる. $t = t_1$ で $\Gamma_j(t)$ が \tilde{Q} のクラスに分裂するものとし, $\Gamma_i^\epsilon(t)$ と $\Gamma_l^\epsilon(t)$ を $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Gamma_i^\epsilon(t_1) \subset \Gamma_j(t_1)$, $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Gamma_l^\epsilon(t_1) \subset \Gamma_j(t_1)$ を満たす辺とする. このとき,

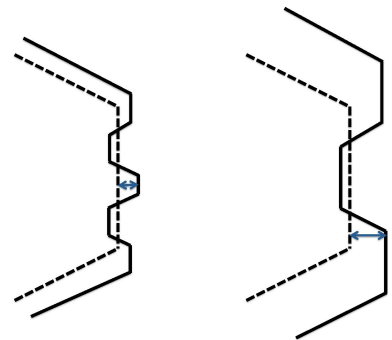


図 17: 辺の分裂が起こる解

$$h_i^\epsilon(t) - h_l^\epsilon(t) = (h_i^0(t) - h_l^0(t)) + o(\epsilon) \tag{6.2}$$

$$\dot{h}_i^\epsilon(t) - \dot{h}_l^\epsilon(t) = (\dot{h}_i^0(t) - \dot{h}_l^0(t)) + o(\epsilon) \tag{6.3}$$

と仮定する. ここで, $\dot{h}_i(t_*) - \dot{h}_l(t_*) = \max_{i,l} (\dot{h}_i^0(t_*) - \dot{h}_l^0(t_*))$ により, i と l を決める. そして $r_j^\epsilon(t) := h_i^\epsilon(t) - h_l^\epsilon(t)$ とおくと $\dot{r}_j^\epsilon(t_*) = \dot{h}_i^0(t_*) - \dot{h}_l^0(t_*) + o(\epsilon)$ となり, $\dot{r}_j^0(t_*) := \dot{h}_i^0(t_*) - \dot{h}_l^0(t_*)$ として展開すると,

$$\begin{aligned} \dot{r}_j^0(t_*) &:= \dot{h}_i^0(t_*) - \dot{h}_l^0(t_*) \\ &= (\beta(\chi_i) - \beta(\chi_l))F - c\gamma \left(\frac{\chi_i}{|\Gamma_i|} - \frac{\chi_l}{|\Gamma_l|} \right) \end{aligned} \tag{6.4}$$

このとき辺の成長について次のように考える.

1. (6.4) の値が最大になる方向に辺が成長すると考える
2. 各 χ_j の値について \dot{r}_j^0 が全ての同値類の中で正で最大となるような辺の長さを定める
3. この辺の長さを critical length と呼ぶ.

critical length

辺のタイプによって critical length の値を求める.

- $\chi_j = \pm 1$ のとき

(6.4) の値が最大になるのは $|\Gamma_i| = |\Gamma_l| = \frac{|\Gamma_j|}{3}$ のときである. このとき式を展開すると,

$$\dot{r}_j^0 = (\beta(1) - \beta(-1))F - \frac{4\sqrt{3}c}{|\Gamma_j|} > 0 \quad (6.5)$$

ならば辺を分割する. よって

$$|\Gamma_j| > \frac{4\sqrt{3}c}{(\beta(1) - \beta(-1))F} \quad (6.6)$$

Γ_j が成長して, この長さより長くなったら辺を 3 分割する.

- $\chi_j = 0$ のとき

(6.4) の値が最大になるのは $|\Gamma_i| = |\Gamma_l| = \frac{|\Gamma_j|}{2}$ のときである. このとき式を展開すると,

$$\dot{r}_j^0 = (\beta(1) - \beta(-1))F - \frac{8c}{\sqrt{3}|\Gamma_j|} > 0 \quad (6.7)$$

ならば辺を分割する. よって

$$|\Gamma_j| > \frac{8c}{(\beta(1) - \beta(-1))F} \quad (6.8)$$

ならば辺を 2 分割する.

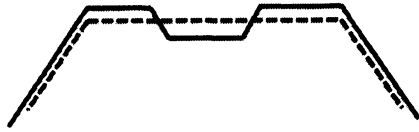


図 18: $\chi_j = \pm 1$ のとき

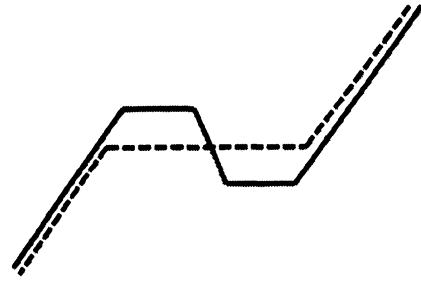


図 19: $\chi_j = 0$ のとき

6.2 分裂可能解の計算例

雪の結晶成長において、温度を固定し過飽和度のみを変えて結晶形状を見ると、過飽和度が大きくなると枝の数が増え、結晶も大きくなっていることが分かる [6]。本研究における数値計算では、図 20 の枠で囲まれた部分の結晶形状の再現を目指す。

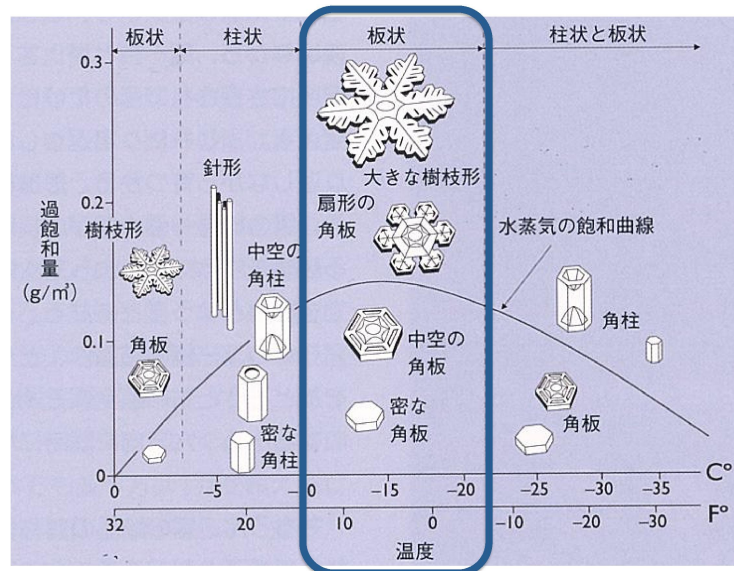


図 20: 雪の結晶成長の中谷ダイヤグラム [6] より

次に、数値計算結果によって得られた結果を見る。(6.1)において、 $\beta(0) = 0.3$, $\beta(-1) = 0.08$ と固定して、 $\beta(1)$ の値を変えて前説で得られた critical length を用いて同じ時刻まで数値計算を行った結果、次のような結果が得られた。

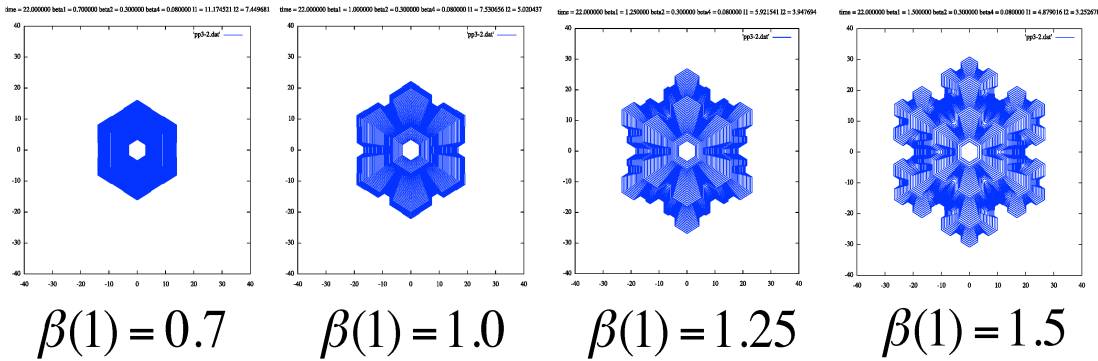


図 21: 数値計算結果

$\beta(1)$ の値を変えて温度は一定 (-15℃付近) として、ダイヤグラムを作成すると次のような結果になる。

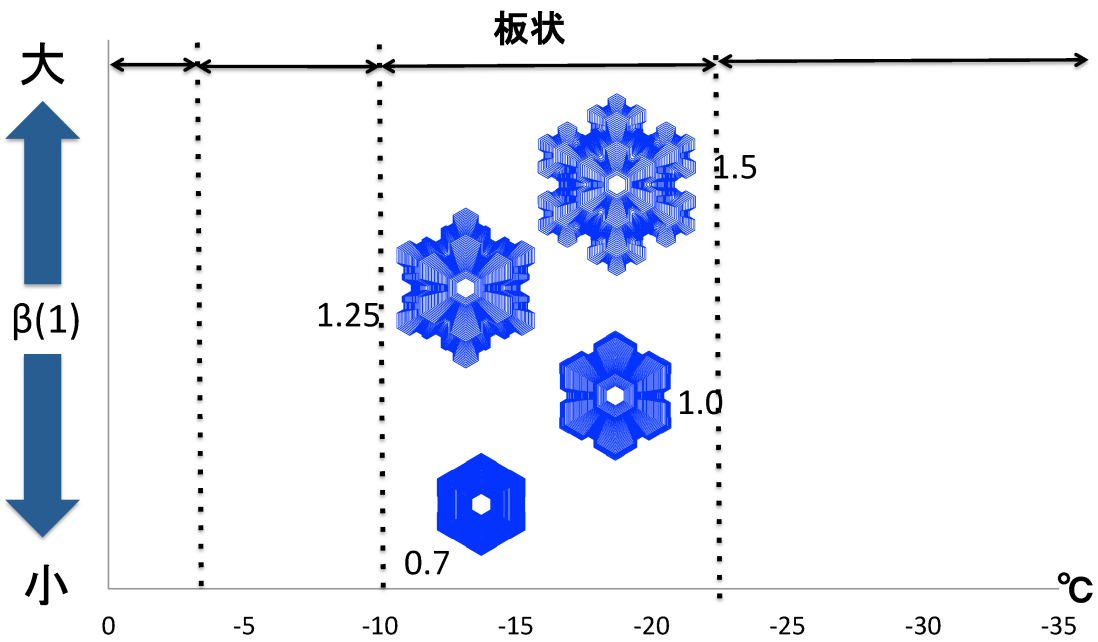


図 22: 数値計算結果

この結果をみると、 $\beta(1)$ の値が大きくなると結晶の大きさが大きくなっており、また枝の数も多くなっている事がわかる。このことから、 $\beta(x_j)$ は過飽和度の効果をとらえることができているのではないかと考えられる。また、数値計算において critical length は意味

があるのかを確かめる。critical length をそのままの値で計算したものと、0.5 倍して計算したものを比較する。図 23 の丸で囲った部分を拡大してみると、一度分裂の起こった辺の凸な部分の成長が遅いことがわかる。図 24 では分裂が起きたあと、凸な部分の成長が凹な部分より速いことがわかる。 $\beta(\chi_j)$ の効果より、凸な部分の成長速度は図 24 の方が自然である。数学的には 5 節で定義した分裂不可能解を数値計算したことになっていると考えられる。

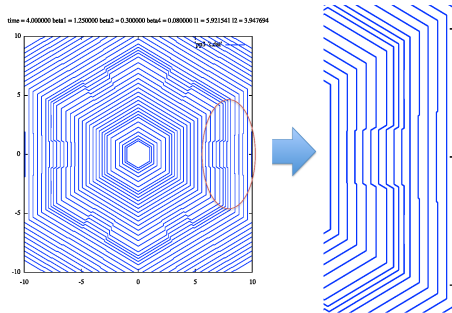


図 23: critical length を 0.5 倍

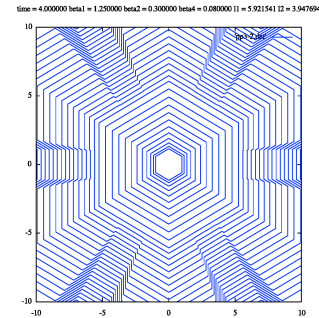


図 24: critical length をそのまま

7 まとめと今後の課題

本研究では、辺の衝突・分裂を扱うことのできる多角形運動を構築し、その数学的広義解を定義した。そして、衝突などの特異性が起きた後も広義解が存在することを示した。数値計算においては分裂不可能解を計算し、結晶成長において起こりうる特異性を扱うことのできるアルゴリズムを構築した。今後の目標は数学的解についての予想が正しい事を証明すること、そしてより一般的な結晶成長モデル (2.7) に対して、数値計算を行ったり、今回の数学的定義がそのようなモデルにおいても適応するかを確かめる事があげられる。

参考文献

- [1] S. Angenent and M. E. Gurtin: Multiphase thermomechanics with interfacial structure, 2. Evolution of an isothermal interface. Arch. Rational Mech. Anal. Vol.108, (1989) pp.323-391.
- [2] 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.
- [3] 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, (2009) pp.515-536.

- [4] J. Gravner and D. Griffeath: Modeling snow crystal growth II: A mesoscopic lattice map with plausible dynamics. *Physica D*, Vol.237, (2008) pp.385-404.
- [5] J. Gravner and D. Griffeath: Modeling snow-crystal growth: A three-dimensional mesoscopic approach. *Phys. Rev. E*, Vol.79, (2009) 011601.
- [6] ケン・リブレクト (2014) 「雪の結晶を科学する」 ケン・リブレクト・矢野真千子訳 『雪の結晶—小さな神秘の世界—』 河出書房新社 pp.11
- [7] T. Ishiwata: Motion of non-convex polygonal by crystalline curvature and almost convexity phenomena. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, Vol.25 (2008) pp.233-253.
- [8] 石渡哲哉: あるクリスタライン運動の多角形解の挙動について数理解析研究所講究録, Vol.1633, (2009) pp.1-10.
- [9] M. Kimura, D. Tagami and S. Yazaki: Polygonal Hele-Shaw problem with surface tension. *Interface and Free Boundaries*, Vol.15, (2013) pp.77-93.
- [10] 黒田登志雄, 横山悦郎: 雪の形態形成および氷の表面融解現象. *日本物理學會誌*, Vol.45, No.8, (1990) pp.541-548.
- [11] U. Nakaya: *Snow Crystals, Natural and Artificial*. Harvard Univ. Press, Cambridge, (1945).
- [12] C. A. Reiter: A local cellular model for snow crystal growth. *Chaos, Solitons & Fractals*, Vol.23, (2005) pp.1111-1119.
- [13] J.E. Taylor, *Constrution and conjectures in crystalline nondifferential geometry*, Proceedings of the Conference on Differential Geometry, Rio de Janeiro, Pitman Monographs Surveys Pure Appl. Math.52 (1991) 321-336, Pitman London.
- [14] 矢崎成俊: クリスタライン曲率流方程式の解の漸近挙動について. 小藺英雄・小川卓克・三沢正史編 「これからの非線型偏微分方程式」 第 12 章, 日本評論社, (2007) pp.244-277.
- [15] 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, (1990) pp.2038-2049.