

変分法による界面運動のシミュレーション

Elliott Ginder
Karel Svadlenka

1 はじめに

現代の工学における数理モデルは数値計算の立場から困難といえる要素を含むことが多い。そのような難点是非線形拘束条件と特異性、そして自由境界など多分にある。本稿ではこのような特異性を持つ発展方程式によって記述される問題に対する近似解法を紹介する。とりわけ界面運動のシミュレーションに着目し、従来の手法を数値計算に応用できない場合でも、ここで紹介する枠組みに基づいた数学的な考察をスキーム開発に活かすことが有益であることを示したい。

放物型偏微分方程式に対する有力な解法の一つとして、後退オイラー法に相当するRotheの方法がある。熱方程式の場合、この方法は初期条件 u_0 から出発し、離散化した時間ステップ $h > 0$ に対する近似解 u_n を次の方程式から求める：

$$u_n - h\Delta u_n = u_{n-1} \quad \text{in } \Omega. \quad (1)$$

ここでは、 Ω は偏微分方程式を考える領域であり、境界条件が与えられているとしている。

その一方、K. Rektorysによって開発された「Minimizing Movements (以下MM)」法がある。日本では「離散勾配流法」あるいは「discrete Morse flow」で知られ、De Giorgi^[3]およびN. Kikuchi^[11]やA. Tachikawa^[19]他の更なる研究により深められた近似法である。この手法は変分構造を持つモデル方程式を時間方向に離散化し、楕円型最小化問題として書き換える。熱方程式の場合は次を満たす関数列により構成される：

$$u_n = \arg \min_u \int_{\Omega} \left\{ \frac{|u - u_{n-1}|^2}{2h} + \frac{1}{2} |\nabla u|^2 \right\} dx. \quad (2)$$

筆者紹介



エリオット・ギンダー
北海道大学電子科学研究所人間数理研究分野助教。
ワシントン大学にて数学および応用数学のダブル
ディグリーを取得。その後、国費留学生として金
沢大学にて2012年博士号取得し、今に至る。趣味
は、地ビールと和食。



カレル・シュワドレンカ
京都大学理学研究科数学教室准教授。プラハのカ
レル大学数物学部計算科学科で修士課程修了後、
2008年金沢大学自然科学研究科数物科学専攻で博
士号を取得し、JSPSの外国人特別研究員と金沢大
学理工研究域准教授を経る。趣味は、ランニング
と尺八。

古典的な問題に対してはRotheの方法とMM法から得られる近似解が一致することがわかる。しかし、以下で述べるようにMM法は動く界面をはじめとする数理モデルのシミュレーションで見られる問題点において強力な助けとなる。

熱方程式のような問題の数値解法について言えば、数値解法に関する知識が豊富にあり、差分法やスペクトル法のような既に確立された標準的なテクニックが多く存在する以上、MM法を使用する習慣が定着しなかったのも不思議ではない。しかしながら、MM法の数理構造を利用すれば、古典的な問題にない上記のような挑戦的な課題を含む偏微分方程式を解くことが可能になる。この類の手法が効果的である理由は、考える問題をエネルギーのレベルのみで取り扱うことにより、対応する偏微分方程式に現れる強い特異性に直面せずに済むところにある。

本稿ではMM法とその数値解法を解説すると共に、特異性を持つ界面運動への応用に迫っていきたい。

2 Minimizing movements

まずは、与えられた境界条件とラグランジアン L に対して、エネルギー汎関数

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\Omega} L(\nabla u(x), u(x), x) dx \quad (3)$$

の勾配流について考える。

MM法は時間ステップ $h > 0$ に対し汎関数

$$\mathcal{F}_n(u) = \int_{\Omega} \frac{|u - u_{n-1}|^2}{2h} dx + \mathcal{E}(u) \quad (4)$$

を適切な関数空間において反復的に最小化することにより、(3)の勾配流を関数列 $\{u_n\}$ で近似する手法である。各汎関数 \mathcal{F}_n のEuler-Lagrange方程式は以下のようにエネルギー汎関数の最急降下の近似を表す：

$$u = u_{n-1} - h \frac{\delta \mathcal{E}(u)}{\delta u}. \quad (5)$$

ここで、 $\frac{\delta \mathcal{E}(u)}{\delta u}$ は(3)の汎関数微分である。例えば、ラグランジアンを $L = |\nabla u|^2 / 2$ とすると、(4)に対応する汎関数として(2)が得られ、Euler-Lagrange方程式は時間が離散化された熱方程式(1)となる。

また、同様なアプローチを用いて、

$$\mathcal{F}_n(u) = \int_{\Omega} \frac{|u - 2u_{n-1} + u_{n-2}|^2}{2h^2} dx + \mathcal{E}(u) \quad (6)$$

という形をとる汎関数を適切な u_{n-1} と u_{n-2} に対して最小化することにより、作用積分

$$\int_0^T \left\{ \frac{1}{2} \int_{\Omega} u_t^2 dx - \mathcal{E}(u) \right\} dt$$

の停留点の近似を構成できる。これにより双曲型偏微分方程式を含む「運動方程式」問題の近似も可能になる。例を挙げると、 $L = |\nabla u|^2/2$ とした場合、波動方程式 $u_{tt} = \Delta u$ の近似が導かれる。なお、放物型と双曲型のMM法の詳細な数学解析が[1, 19]などで行われている。

3 界面運動への Minimizing Movement の適用

結晶成長、多層流、液滴や泡の運動、フォームなどで重要な応用をもつ界面運動の解析にMM法によるアプローチが有利であることを示す研究結果を紹介する。以下で示す内容は一般次元で成り立つが、説明を明快にするために、ここでは平面内の閉曲線の運動という2次元の場合に限定する。

界面運動のモデルとして工学の応用で頻用されるのは平均曲率流である。この幾何学的運動では、界面の各点はその点での平均曲率 κ に比例する法線速度 v で動く：

$$v = \sigma \kappa.$$

ここで、 σ は表面張力という物理的な意味をもつことが多い。

平均曲率流のモデルは変分構造を備えている。すなわち、滑らかな閉曲線 $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}^2$ に対し、表面エネルギー

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

の L^2 -勾配流に対応する。

平均曲率流を計算する数値解法は数多く開発されている。これらの方法は、界面を近似する点の集まりの動きをそのまま求める界面追跡手法と、界面をレベルセット関数の等高面として表し陰的に扱う界面捕獲手法に分類される。界面追跡手法は界面捕獲手法より素直でシンプルな方法ではあるが、位相変化などの特異性に一般的には対処できない。一方で、特異性のような数学的な難点が研究対象となっている現象の重要な側面を表していることが多いため、我々はBMOアルゴリズム^[12]と呼ばれるレベルセット法に基づいたスキームに着目した。

時刻 t において曲線 γ 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、 χ_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 Δt 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 Δt 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^[2, 5, 10]。

ここで、数値スキームの設計において難題をつきつける界面運動の三つの例、つまり非局所的な拘束条件付きの運動、接合点の運動そして振動を伴う運動、を取り上げる。それぞれのケースについて順番に述べる。

体積を保存する運動

体積を一定に保つ物体の運動は数理モデリングにおいて頻繁に現れる設定である。平均曲率流の場合、相領域 P_1 の体積に対する制約

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

のもとでの表面エネルギーの勾配流を実現することが課題である。上記の条件が追加されることにより、曲率の界面上の平均に依存する非局所的な項が法線速度の式に加わり、数値計算の実行が複雑になる。この問題は[16]で扱われ、レベルセットをとるときのレベルセットの高さを調節することにより体積の条件を近似できることを提案している。しかし、この事実の証明が知られておらず、多相の問題に拡張できないという欠点がある。

この問題を解決するために、BMOアルゴリズムの拡散ステップにおける熱方程式をMM法で解き、上の拘束条件を最小化の制約として組み込む。この制約がペナルティーを通して実現でき、BMOアルゴリズムのすべての拡散ステップで次の問題を繰り返し解くことになる：

$$u_n = \arg \min_u \int_{\Omega} \left(\frac{|u - u_{n-1}|^2}{h} + |\nabla u|^2 \right) dx + \lambda (|P_1(u)| - A)^2. \quad (7)$$

ただし、 $u_0(x) = \chi_{P_1}(x) - \chi_{P_2}(x)$ は初期値で、BMOの時間ステップ幅 Δt を長さ h の N 個の部分区間に分割し、上の最小化問題を $n = 1, 2, \dots, N$ に対して順に解いてい

く。また、 λ は大きい値として選択されるペナルティパラメータで、 $P_1(u)$ は $u(x)$ が正になるような点 x の集合である。なお、ペナルティの形は他のものも使うことができる。

上に挙げたBMOスキームが正しい体積保存平均曲率流を与えることを[18, 14]で形式的に証明した。さらに、ペナルティ法による近似の妥当性について[15]で調べ、固定した $h > 0$ に対してペナルティパラメータに対する閾値が存在し、この閾値より強いペナルティパラメータを使用した最小化問題の解が完全に正確な体積をもつことを示した。

このスキームは実装においてより高度な準備が必要で近似法として一般的に利用されないことが多いが、それを利用することによって体積保存などの非局所的な拘束条件を自然に組み込むことに成功した。これらのスキームはしっかりした数学的な土台があり、数値計算において満足できる結果を示している。図1は(7)のような汎関数を用いて計算された体積保存平均曲率流による発展の例である。

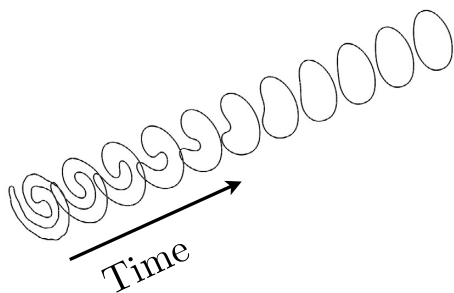


図1 体積保存平均曲率流

界面ネットワークの運動

三つ以上の相 P_1, \dots, P_k ($k \geq 3$)に対する表面エネルギーの勾配流を考えたとき、強い特異性を意味する接合点を含む界面のネットワークの運動が得られる。このような特異性は偏微分方程式の枠組みで扱うことが非常に困難で、位相変化を伴うような運動の場合に難しさが特に顕著になる。

この問題に対処する数学的なアイデアとして、BMOアルゴリズムをベクトル値に一般化することを提案した。すなわち、 $(k-1)$ -次元の正単体の中心と頂点を結ぶ k 個の $(k-1)$ -次元の参照ベクトル $p_l, l = 1, \dots, k$ を導入し、BMOアルゴリズムの拡散ステップにおける初期条件を

$$u_0(x) = \chi_{P_1} p_1 + \dots + \chi_{P_k} p_k \tag{8}$$

のように設定し、ベクトル値の熱方程式を解く。レベルセットを抽出するステップでは、次の式に従って新しい相領域を決定する：

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

上のベクトル値スキームの解析を[18]で行い、[17]では一般の表面張力(つまり、非対称な接合点)の場合に拡張した。ベクトル値スキームのポイントは、拡散ステップを前節の通り最小化問題として書いて、それぞれの相に対するペナルティを通して最小化に制約をかけることによりそれぞれの相の体積を保存する運動が実現できるところにある。さらに、このアプローチに強固な数学的な基盤があることから、相に別々のスカラー値レベルセット関数を設けるという先行研究でよく採用される方法によって生じる真空領域や重複領域の出現または接合点近傍での界面の不自然な変形といったトラブルを回避できた。

ベクトル値のMM法の適用を例示するために、Vapor-Liquid-Solid (VLS) シミュレーションへの応用を紹介する。VLS運動はナノワイヤーの成長のモデリングでよく使われる。液体相の発展は周囲の蒸気を吸収する液滴の運動に対応し、液体と固体の界面で起こる化学的反応により成長が促進される。液滴の運動は体積保存型の平均曲率流でモデル化され、成長のメカニズムは確率過程で表現される。なお、固体の体積は時間に依存するペナルティにより制御される。図2はシミュレーションで使用された3相に対する2次元の正単体と上記の手法で得られた成長の過程を示す。

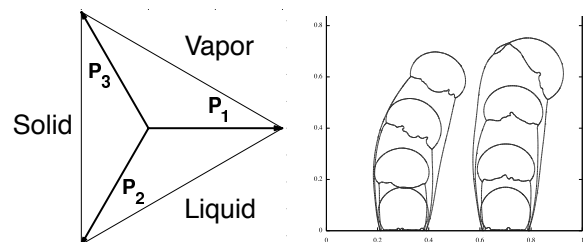


図2 (左) 2次元の正単体 (右) VLSシミュレーション

双曲型の運動

近年では、界面運動の振動を考慮したモデルが導入され注目を浴びている。特に、界面の法線加速度が曲率に比例することで定義される双曲型平均曲率流^[6]が研究の主眼となっている。[8, 9]では位相変化、接合点の存在と非局所的な拘束条件に自然に対応できるBMOアルゴリズムに似た数値解法を開発した。このような運動に対し双曲型の設定は数学的に非常に挑戦的な研究テーマとされ、その性質をより深く理解することにおいて我々の提案した近似法が考察の出発点として役に立てることを期待している。双曲型のBMO近似では波動方程式の解のレベルセットを抽出するが、(6)のような双曲型MM法を用いて波動方程式を最小化問題に帰着している。計算結果の一例を図3に示した。

なお、我々のレベルセット法に基づいたスキームは非等方的エネルギーやバルクエネルギーなどの界面運動の側面にも対応できる。詳しくは[13]を参照されたい。

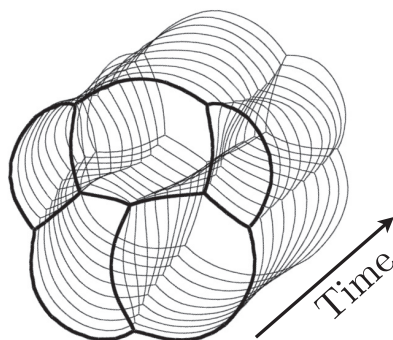


図3 多相の体積保存双曲型平均曲率流

4 数値実装について

上で紹介したスキームを実際に数値計算する際、領域を分割して汎関数の値を有限要素法を用いて近似し計算する(詳細は[8]とそこで挙げている参考文献を参照)。このように得られる有限次元の最小化問題を解く方法は複数知られている。例えば、非線形共役勾配法または最急降下法が利用できる。本稿で紹介した計算例では、 \mathbb{P}_1 要素を使用しているため、要素内の界面の位置を求めることが比較的簡単である。従って、体積保存を伴う運動の場合にペナルティ項の計算に必要な相領域の体積を算出できる。このような数値解法の収束性について[18]で調べている。

なお、界面の位置を記録するに当たって、(8)のように特性関数を用いるのではなく、符号付距離関数を運用する。これにより、時間の差分幅を小さくした場合にも界面が格子に引っかかり停滞してしまうという問題を防ぐことができた([4]も参照)。さらに、多相の体積保存問題の近似を可能にするために、符号付距離関数のベクトル値バージョンを開発した[7, 14]。

5 おわりに

界面運動の近似を変分的アプローチの観点から考え、複雑な問題のシミュレーションにおいて数学的な概念が大いに役立てることを例証した。具体的には、MM法では変分構造を利用して、ラグランジュ未定乗数を直接計算することなく非線形な制約条件を満たしながら、接合点を含む界面の形状の発展を計算した。また、現在、挑戦的な問題とされる振動型界面運動の計算に利用できる解法への拡張も紹介した。

6 謝辞

本研究はJSPS 科研費25800087、26870224の助成を受けたものである。また、議論の際、多くの有用なコメントをいただいた金沢大学の小俣正朗先生に感謝する。

■参考文献

[1] L. Ambrosio, N. Gigli, G. Savaré, *Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures*, Birkhäuser, (2005)

[2] 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, No.2, pp.484-500, (1995)

[3] E. De Giorgi, *Movimenti minimizzanti*, talk given at the meeting "Aspetti e problemi della matematica oggi", Lecce, October 20-22, (1992)

[4] S. Esedoglu, S. Ruuth, R. Tsai, *Diffusion generated motion using signed distance functions*, Journal of Computational Physics, Vol.229, No.4, pp.1017-1042, (2010)

[5] L.C. Evans, *Convergence of an algorithm for mean curvature motion*, Indiana U. Math. J., Vol.42, pp.533-557, (1993)

[6] P. G. LeFloch, K. Smoczyk, *The hyperbolic mean curvature flow*, J. Math. Pures Appl., Vol.90, pp.591-614, (2008)

[7] E. Ginder, *A variational approach to volumecontrolled evolutionary equations*, PhD thesis, Kanazawa University, (2012)

[8] E. Ginder, K. Svadlenka, *On an algorithm for curvature-dependent interfacial acceleration*, JSCES, Vol.19, (2014)

[9] E. Ginder, K. Svadlenka, *Wave-type threshold dynamics and the hyperbolic mean curvature flow*, preprint, (2015)

[10] 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)

[11] N. Kikuchi, *An approach to the construction of Morse flows for variational functionals*, Nematics: Mathematical and Physical Aspects, pp.195-199, (1991)

[12] B. Merriman, J. K. Bence, S. J. Osher, *Motion of multiple junctions: A level set approach*, J. Comp. Phys., Vol.112, pp.334-363, (1994)

[13] R.Z. Mohammad, *Numerical analysis of multiphase curvature-driven interface evolution with volume constraint*, PhD thesis, Kanazawa University, (2014)

[14] R.Z. Mohammad, K. Svadlenka, *Multiphase volume-preserving interface motions via localized signed distance vector scheme*, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, accepted, (2014)

[15] R.Z. Mohammad, K. Svadlenka, *On a penalization method for an evolutionary free boundary problem with volume constraint*, Advances in Mathematical Sciences and Applications, Vol.24, No.1, pp.85-101, (2014)

[16] S. Ruuth, B. Wetton, *A simple scheme for volumepreserving motion by mean curvature*, J. Sci. Comput., Vol.19, pp.373-384, (2003)

[17] N. Shofianah, R.Z. Mohammad, K. Svadlenka, *Simulation of triple junction motion with arbitrary surface tensions*, IAENG International Journal of Applied Mathematics, accepted, (2014)

[18] 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)

[19] A. Tachikawa, *A variational approach to constructing weak solutions of semilinear hyperbolic systems*, Advances in Mathematical Sciences and Applications, Vol.4, pp.93-103, (1994)