

曲率による界面運動の数値解法の一般化

Generalization of a numerical scheme for curvature driven interface motion

シュワドレンカ カレル¹⁾

Karel Svadlenka

¹⁾博 (理) 京都大学理学研究科 准教授 (〒 606-8502 京都市左京区北白川追分町, E-mail: karel@math.kyoto-u.ac.jp)

In this article, we report on methods of generalizing the so-called BMO algorithm approximating the mean curvature flow of interfaces for various types of more complex interfacial motions. In particular, we consider the flow with the constraint on volume, the motion of interface networks with junctions and inclusion of oscillations.

Key Words : Mean curvature flow, Numerical approximation, BMO algorithm.

1. はじめに

平均曲率流は界面運動のモデルとして頻用される。界面が滑らかな閉曲線の場合は効率的な数値解法が開発されているが、グローバルな拘束条件、特異性や位相変化を含む界面運動の正確な近似は現在でも困難とされている。

本稿ではまず平均曲率流の有効な近似として知られる BMO アルゴリズムを紹介し、上記のような複雑な運動に対する BMO アルゴリズムの拡張を提案する。

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。

2. 平均曲率流と BMO アルゴリズム

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。第一変分により、曲線の各点における法線方向の速度が

$$v = -\kappa$$

を満たす動きであることがわかる。ただし、 κ は考える点における曲線の曲率である。

平均曲率流の数値解法の一つはレベルセットのアプローチに基づいたいわゆる「BMO アルゴリズム」である。この方法は最初に [7] で発表され、曲率を直接に計算することなく位相変化など界面の特異性を自然に扱えるため、数値計算の観点から優秀とされる。

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 ステップを繰り返すことで平均曲率流を近似する：

1. 拡散ステップ：次の熱方程式の解 $u(t, x)$ 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

$$\chi_P(x) = \begin{cases} 1, & x \in P \text{ のとき} \\ 0, & x \notin P \text{ のとき} \end{cases}$$

で定義される集合 P の特性関数である。

2. レベルセットの抽出ステップ：時間 Δt 後の曲線の位置の近似は内部領域の更新、

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

により与えられる。

実際の数値計算では境界による影響がない場合、十分に広い有界領域においてノイマン境界条件のもとで解く。

時間ステップ Δt を細かくしていくと、BMO アルゴリズムで得られる曲線族が平均曲率流に収束することは証明されている [1,2,6]。

3. BMO アルゴリズムの拡張

次に、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。詳細については参考文献を紹介する。

(1) 面積保存

ここでは、相領域の面積に対する拘束条件

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

つきのエネルギー E の勾配流を考える。これに対し BMO アルゴリズムを修正するために、拡散ステップを離散勾配流の考え方をを用いて変分問題に直し、レベルセットの面積に対する制約条件をペナルティーとして近似的に扱うようにする [12]。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 Δt を差分幅 $h = \Delta t/N$ をもって分割し、以下の最小化問題を $n = 1, 2, \dots, N$ に対し帰納的に解いていく：

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

ただし，上式では J_n の minimizer を u_n とし，

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

とした．

このアルゴリズムが面積保存平均曲率流を正しく近似していることは [12,9] 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 [10] で行われ，固定した $h > 0$ に対しペナルティ係数 λ を十分大きくとれば，有限の λ 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．この結果により，ペナルティ法の適用は数値計算上でも妥当であると言える．

(2) 非等方的なエネルギー

界面の長さエネルギーが界面の法線ベクトル n に依存する場合を考える．つまり，与えられた anisotropy 関数 ϕ に対し，

$$E_\phi(\gamma) = \int_\gamma \phi(n)$$

の勾配流を求める．

この場合，(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を付け加えればよい [8] ．

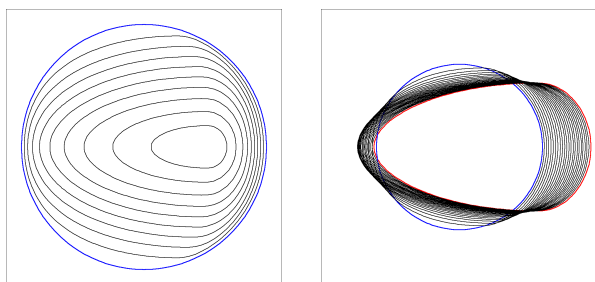


図-1 Anisotropy 関数 $\phi(x) = \sqrt{(a + b \text{sign}(x_1))x_1^2 + x_2^2}$ に対し円から始まる運動 (面積保存なし・あり) [8] ．

(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 ($k \geq 3$) ある場合，同様に長さエネルギーの勾配流を考える．このとき，接合点を含まない滑らかな界面の部分は平均曲率流に従って動き，三つの界面が 120° の角度で交わるという Herring 条件が満たされる．

接合点という新たな特異性が現れるため，一つのスカラー関数による BMO アルゴリズムでは扱えなくなる．そこで，レベルセット関数をベクトル値に一般化する．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として次のようなベクトル値関数を導入する：

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

ベクトル値の熱方程式を解いたあと，時間 Δt 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 [12] でなされている．すべての相の面積が保存されるという制約がある場合，(1) と同様に，それぞれの相の面積に対するペナルティを汎関数に追加すればよい．しかし，非等方的なエネルギーの場合はまだ解析がなされていない [8] ．

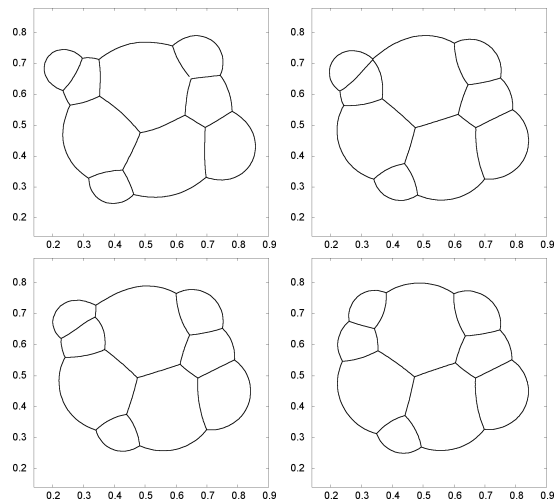


図-2 それぞれの相の面積が保存される多相平均曲率流の計算結果 [9] ．接合点の融合と分裂という位相変化が確認できる (左上, 右上, 左下, 右下の順) ．

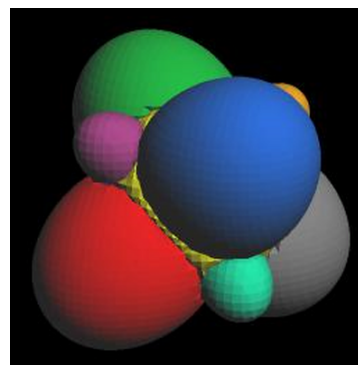


図-3 3次元での計算結果の一例．

(4) 界面の数値停滞について

界面運動の有限要素法による数値計算において，特性関数をベースにした初期値を用いると，BMO アルゴリズムの拡散ステップで界面に相当するレベルセットが一つ以上の有限要素分の距離を移動しない限り，レベルセット抽出ステップで元の位置に戻り停滞してしまうという問題が発生する．面積が保存される運動では界面の速度が小さいため，この問題は特に顕著になる．

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界面の位置の自由度が増え，上の問題が

解消されることが知られている．[9,3]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 ε 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：

$$\delta_\varepsilon(x) = \sum_{i=1}^k \max \left\{ 0, 1 - \frac{d_i(x)}{\varepsilon} \right\} p_i$$

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．

(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 γ_{ij} の表面張力を一般に σ_{ij} としたとき，つまり，長さエネルギーが

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

のとき，界面の法線速度がそれぞれの表面張力に比例するとともに，接合点の角度が非対称になり，Herring条件に適った対称な接合点を与えるもとのBMOアルゴリズムでは表現できない．

論文[11]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．主なアイデアは参照ベクトルと拡散方程式の変更である．参照ベクトルがあるルールに従って選ぶことによって，表面張力で定められた角度で交わる3本の半直線が安定になるようにできる．また，ベクトル値熱方程式の代わりに適切な係数をもつ一般の拡散系を用いることにより，界面の速度が表面張力が定める値になるようにできる．この係数を求めるには非線形な連立方程式を解かなければならない．しかし，曲がった界面が接合点で交わる状況に対応するために，BMOアルゴリズムに修正ステップを加える必要がある．

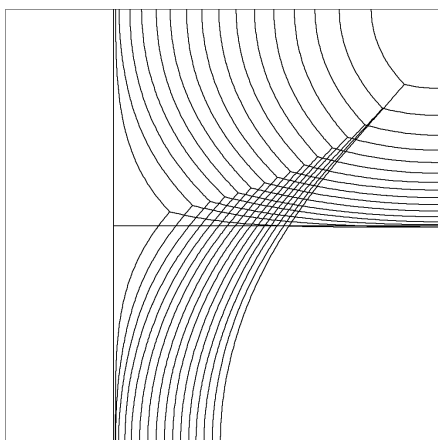


図-4 150°, 90°, 120°の角度をもつ接合点の運動 [11] .

(6) バルクのエネルギー

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も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．一般の多相の場合に関数 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 [8] .

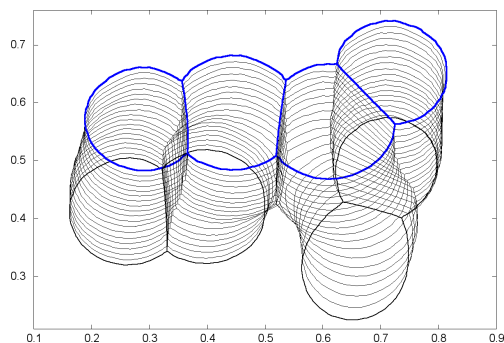


図-5 外側の相のbulkエネルギー密度が垂直方向の距離に比例する場合に得られた計算結果 [8] . 青い線は最終時刻における形状を表す .

(7) 曲率に比例する界面加速度

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，[4,5]でBMOアルゴリズムに似た近似法を提案した．

具体的には，界面への符号付き距離関数を初期値にした波動方程式のレベルセットを追うことで，曲率に等しい加速度をもつ界面運動の近似が得られることを発見した．界面の速度を時間を通して伝播させるためには，現在の界面と一つ前のステップの界面への符号付き距離関数の適切な線形結合を波動方程式の初期値とする．これによって，波動方程式の初速度をゼロにできて，界面の速度を陽的に計算する必要性をなくした．

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，これまで紹介した拡張はすべて双曲型運動の数値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: *A variational approach to volume-controlled evolutionary equations*, PhD thesis, Kanazawa University, 2012.
- [4] E. Ginder, K. Svadlenka: *On an algorithm for curvature-dependent interfacial acceleration*, Proceedings of Computational Engineering Conference JSCES, Vol. 19, 2014.
- [5] E. Ginder, K. Svadlenka: *Wave-type threshold dynamics and the hyperbolic mean curvature flow*, preprint, 2015.
- [6] 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.
- [7] B. Merriman, J. Bence, S. Osher: *Motion of multiple junctions: a level set approach*, Journal of Computational Physics, Vol. 112, pp. 334-363, 1994.
- [8] R.Z. Mohammad: *Numerical analysis of multiphase curvature-driven interface evolution with volume constraint*, PhD thesis, Kanazawa University, 2014.
- [9] 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).
- [10] 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, 2014.
- [11] Nur Shofianah, R.Z. Mohammad, K. Svadlenka: *Simulation of triple junction motion with arbitrary surface tensions*, IAENG International Journal of Applied Mathematics, 2014 (accepted).
- [12] 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.