

## 4 階全変動流方程式の解の挙動について

黒田 紘敏<sup>1</sup>, 儀我 美一<sup>2</sup>, Michał Łasica<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 北海道大学, <sup>2</sup> 東京大学, <sup>3</sup> ポーランド科学アカデミー  
e-mail: kuro@math.sci.hokudai.ac.jp

### 1 概要

全空間  $\mathbb{R}^n$  における 4 階全変動流方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\Delta \operatorname{div} \left( \frac{\nabla u}{|\nabla u|} \right) \quad \text{in } (0, \infty) \times \mathbb{R}^n \quad (1)$$

を考える. 2 階全変動流方程式の場合は, 初期値が有界ならば解が有限時間で定常解に到達すること (有限時間消滅性) が知られている [1]. また, 初期値をある凸集合の特性関数とした際に, 時間発展で解の特性関数の構造が保存される (較正可能性) 条件が求められている [2].

全変動流方程式は画像処理における画像整形のプロセスを記述するモデルや, 結晶成長を記述する数理モデルなどに現れ, 解の局所定数構造が時間発展で保たれるかは重要な性質である. そこで, 4 階全変動流方程式の解が 2 階の場合と同様の性質をもつかを考察する.

### 2 問題の定式化

2 階全変動流方程式は, 関数の全変動の  $L^2$ -勾配流として定式化される. 同様に, 4 階全変動流方程式 (1) は, 形式的には全変動の  $H^{-1}$ -勾配流として表せるので, 以下の様に方程式の解を定式化する. まず

$$D_0^1(\mathbb{R}^n) := \overline{C_c^\infty(\mathbb{R}^n)}^{D_0^1}, \quad (u, v)_{D_0^1} := \int_{\mathbb{R}^n} \nabla u \cdot \nabla v \, dx$$

とし,  $D^{-1}(\mathbb{R}^n) := (D_0^1(\mathbb{R}^n))^*$  とおく. ここで

$$\langle -\Delta u, v \rangle_{D^{-1}, D_0^1} := (u, v)_{D_0^1} = \int_{\mathbb{R}^n} \nabla u \cdot \nabla v \, dx \quad (u, v \in D_0^1(\mathbb{R}^n))$$

とおけば,  $-\Delta: D_0^1(\mathbb{R}^n) \rightarrow D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  は同相写像となる. さらに,  $\operatorname{TV}: D^{-1}(\mathbb{R}^n) \rightarrow [0, \infty]$  を

$$\operatorname{TV}(u) := \sup \{ \langle u, \operatorname{div} \psi \rangle_{D^{-1}, D_0^1} \mid \psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n), \|\psi\|_{L^\infty} \leq 1 \}$$

と定めると,  $D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  上で  $\operatorname{TV} \neq +\infty$  な下半連続凸汎関数となる. なお, 有効域  $D(\operatorname{TV})$  上では, この  $\operatorname{TV}$  は通常的全変動と一致することがわかる. よって, 4 階全変動流方程式は

$$\frac{du}{dt} \in -\partial_{D^{-1}} \operatorname{TV}(u)$$

として定式化される. ここで,  $\partial_{D^{-1}}$  は  $D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  における劣微分である. これにより, 非線形発展方程式の一般論から, 4 階全変動流方程式の時間大域解の一意存在が保証される.

また,  $D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  上に拡張した全変動  $\operatorname{TV}$  は斉次 1 次なので, 劣微分  $\partial_{D^{-1}} \operatorname{TV}$  の特徴づけが得られる [1].  $u \in D(\operatorname{TV})$ ,  $v \in D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  とするとき,  $v \in \partial_{D^{-1}} \operatorname{TV}(u)$  であるための必要十分条件は, あるベクトル場  $Z \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$  が存在して,  $\operatorname{div} Z \in D_0^1(\mathbb{R}^n)$  であり

$$|Z| \leq 1, \quad v = \Delta \operatorname{div} Z, \quad -\langle u, \operatorname{div} Z \rangle_{D^{-1}, D_0^1} = \operatorname{TV}(u)$$

がすべて成り立つことである. このとき,  $Z$  を Cahn-Hoffman ベクトル場と呼ぶ.

もし  $u$  が滑らかで  $\nabla u \neq 0$  ならば, Cahn-Hoffman ベクトル場  $Z$  は  $\nabla u/|\nabla u|$  と一致することがわかる. ただし,  $Z$  は  $(u, v)$  に対して一意には定まらない. 非線形発展方程式の一般論から, 解の挙動を決定するために, 劣微分  $\partial_{D^{-1}}\text{TV}(u)$  の中でノルム最小な元  $(\partial_{D^{-1}}\text{TV})^0(u)$  を計算すればよい.

### 3 集合の較正可能性

集合  $U \subset \mathbb{R}^n$  が (境界の向きを定める) 連続関数  $\chi: \partial U \rightarrow \{\pm 1\}$  について較正可能 (calibrable) であるとは,  $\nu$  を  $\partial U$  の外向き単位法ベクトル場とすると

$$\min \left\{ \int_U |\nabla \text{div } Z|^2 dx \mid \|Z\|_{L^\infty(U)} \leq 1, \nu \cdot Z = \chi, \text{div } Z = \chi \text{div } \nu \text{ on } \partial U \right\}$$

の解  $Z_0$  で, さらに  $U$  上で  $\Delta \text{div } Z_0$  が定数となるものが存在することと定義する [3].

$U$  を較正可能とし, 初期値を  $U$  の特性関数  $u_0 = \mathbf{1}_U$  とする. このとき, 4 階全変動流方程式は Cahn-Hoffman ベクトル場  $Z$  により  $u_t = -\Delta \text{div } Z$  と定式化されるため,  $U$  上で  $u_t$  が定数となり, 局所定数構造が保たれる. ただし,  $U$  の形や大きさは変化する.

### 4 主結果

$n \leq 3$  では解の有限時間消滅性が成り立たないような初期値の例が構成できる.  $n \geq 4$  のときは,  $u_0 \in D^{-1}(\mathbb{R}^n)$  を初期値とするときの解の消滅時刻  $T^*(u_0)$  について

- $n = 4$  のとき:  $T^*(u_0) \leq A_1 \|u_0\|_{D^{-1}}$
- $n \geq 5$  のとき:  $p > n/3$  とするとき

$$T^*(u_0) \leq \frac{\theta A_\theta}{2\theta - 1} \|u_0\|_{L^p}^{1/\theta - 1} \|u_0\|_{D^{-1}}^{2 - 1/\theta}, \quad \theta = \left( \frac{n+2}{2n} - \frac{1}{p} \right) \bigg/ \left( \frac{n-1}{n} - \frac{1}{p} \right)$$

が成り立つ. なお,  $A_\theta = S_n C_n^{1/\theta}$  で  $S_n$  や  $C_n$  はソボレフ型不等式に現れる定数である.

球やアニュラスの較正可能性は以下ようになる.

- (1)  $n \geq 1$  に対して, すべての球は較正可能である.
- (2)  $n \neq 2$  に対して, 球の補集合およびアニュラスはすべて較正可能である.
- (3)  $n = 2$  のときは, 球の補集合はすべて較正可能ではない.
- (4)  $n = 2$  のときは, 次をみたす定数  $Q_* > 1$  が存在する: アニュラスが較正可能であるための必要十分条件は, 内径  $R_0$  と外径  $R_1$  の比について  $R_1/R_0 \leq Q_*$  となることである.

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:18H05323) の助成を受けたものである.

### 参考文献

- [1] F. Andreu-Vaillio, V. Caselles and J. M. Mazón, *Parabolic quasilinear equations minimizing linear growth functionals*, Progress in Mathematics, 223, Birkhäuser, Basel, 2004.
- [2] F. Alter, V. Caselles and A. Chambolle, A characterization of convex calibrable sets in  $\mathbb{R}^N$ , *Math. Ann.*, **332** (2005), 329–366.
- [3] Y. Giga, H. Kuroda and M. Łasica, The fourth-order total variation flow in  $\mathbb{R}^n$ . *Math. Eng.* **5** (2023), no. 6, Paper No. 091, 45 pp.

# 動的境界条件下での 1 次元 Cahn–Hilliard 方程式の解の挙動

香川 溪一郎<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 北海道大学 電子科学研究所

e-mail : kkagawa@es.hokudai.ac.jp

## 1 問題設定

Cahn–Hilliard 方程式は Cahn と Hilliard によって提案された、保存則を有する相分離現象を記述するモデル方程式である [1]. 本研究では 1 次元区間  $[0, L]$  上の Cahn–Hilliard 方程式に動的境界条件を課した次の問題を考える：

$$(P) \begin{cases} \frac{\partial u(t, x)}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[ -\varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c(u^3 - u) \right] & \text{for } t > 0, x \in (0, L), & (1) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c(u^3 - u) \right] \Big|_{x \in \{0, L\}} = 0 & \text{for } t > 0, & (2) \\ \tau \frac{\partial u(t, 0)}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} & \text{for } t > 0, & (3) \\ \tau \frac{\partial u(t, L)}{\partial t} = -\varepsilon^2 \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=L} & \text{for } t > 0, & (4) \\ u(0, x) = u_0(x) & \text{for } x \in [0, L], & (5) \end{cases}$$

ここに  $u$  は未知関数であり、相分離現象においては秩序変数に相当し、非線形項に双安定ポテンシャル  $c(u^3 - u) = \frac{d}{du} \left[ \frac{c}{4}(1+u)^2(1-u)^2 \right]$  を採用しているように、 $u = 0$  で不安定、 $u = \pm 1$  で安定となる．また、 $\varepsilon$  は界面の厚さを決める正定数、 $c$  は非線形効果を制御する正定数、 $\tau$  は境界での時間発展の早さを制御する正定数である．式 (1) が Cahn–Hilliard 方程式に相当し、式 (2) は化学ポテンシャル  $-\varepsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c(u^3 - u)$  に対する斉次 Neumann 境界条件である．式 (3), (4) が秩序変数  $u$  に対する境界条件であり、境界に制限された  $u$  の時間発展を考える動的境界条件を課す．また、式 (5) は初期条件である．

## 2 動的境界条件

動的境界条件 (dynamic boundary condition) とは境界上の未知関数の時間発展を考慮する境界条件であり、境界での時間発展の仕方によって様々な型の動的境界条件が提案されている．従来の Cahn–Hilliard 方程式では秩序変数に対しても化学ポテンシャルと同様に斉次 Neumann 境界条件が課されており、考える空間を領域  $\Omega$  とすれば  $\int_{\Omega} u(t, x) dx = \text{const.}$  といった保存則が成立していたが、動的境界条件を課す場合にはこの保存則が若干変更されることがあり、その保存則の種類によって Cahn–Hilliard 方程式に対する動的境界条件は大まかに 3 種類に分類することができる．

Fischer, Maass, Dieterich らによる Allen–Cahn 方程式に境界微分の項が付いた型の動的境界条件（以下 Allen–Cahn 型）では上記と同じ保存則  $\int_{\Omega} u(t, x) dx = \text{const.}$  が成り立つ [2]. Goldstein, Miranville, Schimperna らによる Cahn–Hilliard 方程式に秩序変数と化学ポテンシャルの境界微分の項が付いた動的境界条件（GMS 型）では  $\int_{\Omega} u(t, x) dx + \int_{\partial\Omega} u(t, x) |_{\partial\Omega} dS = \text{const.}$  の形の保存則が成り立つ [3]. Liu, Wu らによる Cahn–Hilliard 方程式に秩序変数の境界微分の項のみが付いた動的境界条件（LW 型）では  $\int_{\Omega} u(t, x) dx = \text{const.}$  と  $\int_{\partial\Omega} u(t, x) |_{\partial\Omega} dS = \text{const.}$  の形に分離した保存

則が成り立つ [4]. ここで扱う動的境界条件 (3), (4) は空間 1 次元のために境界上のラプラス作用素が現れず, 非線形項を除去した Allen–Cahn 型の動的境界条件に分類される.

### 3 準備

Cahn–Hilliard 方程式の持つ重要な性質として前述の保存則に加えてエネルギー散逸則がある. 本問題 (P) では  $E[u] = \int_0^L \varepsilon^2 (\frac{\partial u}{\partial x})^2 + \frac{\varepsilon}{4} (u+1)^2 (u-1)^2 dx$  として  $\frac{d}{dt} \int_0^L E[u](t, x) dx \leq 0$  が成り立つ. 離散化した方程式についても元の方程式と同様の構造 (ここでは散逸則や保存則) が成り立つように方程式を離散化する構造保存数値解法の一つとして離散変分導関数法が知られているが, 動的境界条件を課した Cahn–Hilliard 方程式に対して離散変分導関数法に基づく離散スキームが Fukao ら [5] や Okumura ら [6] によって提案されており, その安定性についても議論されている. ここでは空間的に 1 次精度だった Fukao らのスキームを 2 次精度に改善した Okumura らのスキーム [6] を採用し, エネルギー散逸則や保存則の成立を確認しながら数値シミュレーションを実施する.

### 4 数値シミュレーション

動的境界条件を課した Cahn–Hilliard 方程式について数値シミュレーションを活用して解のダイナミクスを調べた研究として, [7] では問題 (P) について [6] の離散スキームに基づいた数値シミュレーションを実施し, 特定の初期値からの時間発展について境界上の時定数  $\tau$  をパラメタとして解のダイナミクスの変化を調べた. 本講演ではより一般に小さなランダム初期値に対する解のダイナミクスが境界上の時定数  $\tau$  をパラメタとしてどのように変化するかを調べた結果について報告する.

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 23K19003 の助成を受けたものである.

### 参考文献

- [1] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy, J. Chem. Phys., Vol. 28 (1958), 258–267.
- [2] H. P. Fischer, P. Maass and W. Dieterich, Novel surface modes in spinodal decomposition, Phys. Rev. Lett., Vol. 79 (1997), 893–896.
- [3] G. R. Goldstein, A. Miranville and G. Schimperna, A Cahn–Hilliard model in a domain with non-permeable walls, Physica D, Vol. 240 (2011), 754–766.
- [4] C. Liu, H. Wu, An Energetic Variational Approach for the Cahn–Hilliard Equation with Dynamic Boundary Condition: Model Derivation and Mathematical Analysis, Arch. Ration. Mech. Anal., Vol. 233 (2019), 167–247.
- [5] T. Fukao, S. Yoshikawa, S. Wada, Structure-preserving finite difference schemes for the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions in the one-dimensional case, Commun. Pure Appl. Anal., Vol. 16 (2017), 1915–1938.
- [6] M. Okumura, T. Fukao, D. Furihata, S. Yoshikawa, A second-order accurate structure-preserving scheme for the Cahn–Hilliard equation with a dynamic boundary condition, Commun. Pure Appl. Anal., Vol. 21 (2022), 355–392.
- [7] K. Kagawa and Y. Yamazaki, Critical slowing down for relaxation in the Cahn–Hilliard equation with dynamic boundary conditions, JSIAM Letters, (in press).

# 結晶成長における不純物効果の数理解モデル：ステップ動力学と吸着不純物の相互作用

三浦 均<sup>1</sup>, 木村 優大<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 名古屋市立大学大学院 理学研究科

e-mail: miurah@nsc.nagoya-cu.ac.jp

## 1 概要

結晶表面には原子スケールの段差 (ステップ) が存在し, 原子や分子などの成長単位がステップに取り込まれることで, 結晶表面は一層一層積み重なっていく。これを層成長という。結晶表面に不純物が吸着すると, ステップの前進が阻害され, 結晶成長に大きな影響を及ぼす。不純物は, 吸着, 脱離, 結晶表面での拡散, 前進ステップへの取り込みや反発など, 複雑な挙動を示す。我々は, ステップの動力学をフェーズフィールド (PF) モデルに基づいて数値計算することで, 結晶成長における不純物の作用の理論的解明に取り組んでいる。本講演では, 我々の近年の成果について紹介したい。

## 2 ステップ動力学の PF モデル

吸着不純物によるステップ前進阻害作用を考慮したステップ動力学 PF モデル [1–3] を用いる。結晶表面の高さを秩序変数  $\phi(\mathbf{r})$  で表す。 $\mathbf{r}$  は結晶表面上の座標である。結晶表面上の領域  $A$  における自由エネルギー  $\mathcal{F}$  を,  $\phi(\mathbf{r})$  の汎関数として以下で与える。

$$\mathcal{F}(\phi) = \int_A d\mathbf{r} \left[ \frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + f(\phi) \right] \quad (1)$$

ここで,  $\epsilon$  は定数である。 $f(\phi)$  は結晶表面のポテンシャルを表す関数であり, 以下で与えられる。

$$f(\phi) = \frac{W}{\pi} [\cos(\pi\phi) + 1] - \frac{1}{2} \left[ \frac{\Delta\mu}{s_m} - \frac{\Delta\mu_i}{s_i} h(\mathbf{r}) \right] \cdot \left[ \phi + \frac{\sin(\pi\phi)}{\pi} \right] \quad (2)$$

ここで,  $W$  は定数,  $\Delta\mu$  は結晶化駆動力,  $\mu_i$  は結晶が吸着不純物を取り込む際のエネルギー不利,  $s_m, s_i$  はそれぞれ溶質分子・不純物分子の面積である。 $h(\mathbf{r})$  は吸着不純物の分布を表し, 不純物が吸着している領域は  $h(\mathbf{r}) = 1$ , それ以外は  $h(\mathbf{r}) = 0$  とする。 $\frac{d\mathcal{F}}{dt} < 0$  が負になるという十分条件から  $\phi(\mathbf{r})$  の時間発展方程式が導出される。この方程式は熱伝導方程式と同じ放物型二階線形偏微分方程式であり, 一般的な差分法などを用いて数値的に解くことができる。計算例を図 1 に示す。

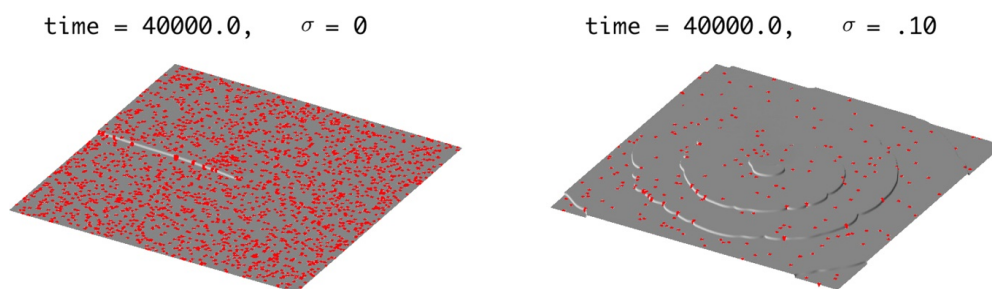


図 1. 不純物のランダムな吸着脱離を考慮したらせん成長の数値計算例 [3]. 赤い点が吸着不純物を表す。(左)  $\sigma = 0$  の場合。ステップは前進せず, 結晶表面が吸着不純物で汚染されている。(右)  $\sigma = 0.1$  の場合。前進するステップによって吸着不純物が周期的に結晶に取り込まれることにより, 結晶表面は相対的に清浄に維持される。

### 3 吸着不純物の表面拡散

結晶表面に吸着した不純物の表面拡散過程をモンテカルロ (MC) 法でモデル化する。ステップ近傍に吸着した不純物は、ステップとの相互作用による自由エネルギー変化に応じて、表面拡散の向きに偏りが生じる。ある吸着不純物の配置を仮想的に変化させたときの自由エネルギーの変化  $\Delta\mathcal{F}$  は、(1) 式より、以下で与えられる。

$$\Delta\mathcal{F} = \frac{\Delta\mu_i}{2s_i} \int_{A'} d\mathbf{r} [h'(\mathbf{r}) - h(\mathbf{r})] \cdot \left[ \phi + \frac{1}{\pi} \sin(\pi\phi) \right] \quad (3)$$

ここで、 $h(\mathbf{r}), h'(\mathbf{r})$  はそれぞれ変化前と後の吸着不純物の配置、 $A'$  は領域  $A$  においてこの吸着不純物が存在する部分領域を表す。不純物の拡散確率は、 $e^{-\beta(E_{\text{diff}} + \Delta\mathcal{F}/2)}$  に比例すると仮定する。ここで、 $E_{\text{diff}}$  は表面拡散の活性化エネルギー、 $\beta$  は逆温度である。吸着不純物がステップから離れる向きに移動するとき  $\Delta\mathcal{F} < 0$  となる。したがって、前進ステップによって吸着不純物が掃き出されていく挙動を再現できる。計算例を図 2 に示す。

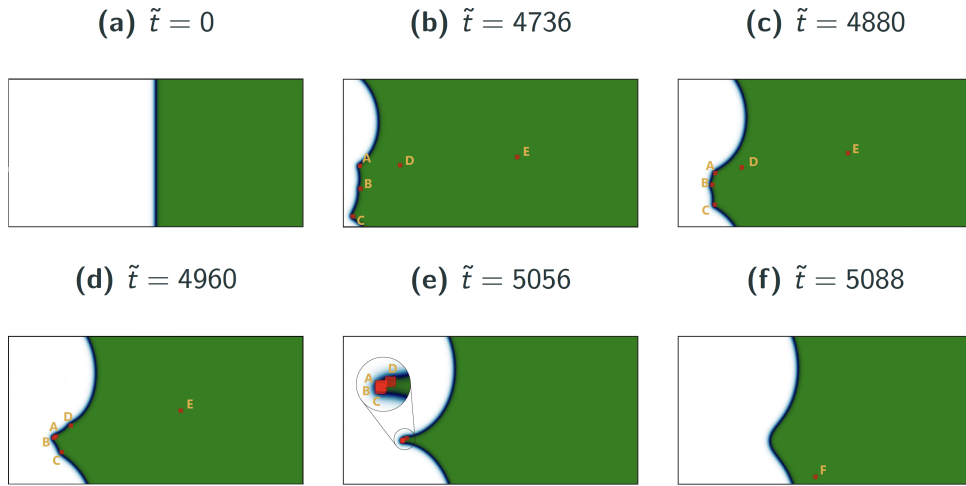


図 2. 吸着不純物 (赤点) の表面拡散を考慮した場合の数値計算例 [4]。白と緑の領域はそれぞれ高さの異なる平坦面であり、その境界がステップを表す。初期に、1 本の直線ステップと、不純物に汚染されていない結晶表面を想定する (a)。時間とともにステップは右に向かって前進し、左右の周期的境界条件によって計算領域を繰り返し通過する。同時に、結晶表面にはランダムに不純物が吸着脱離を繰り返す。吸着不純物はステップ前進を阻害する一方、前進するステップによって吸着不純物が“窪み”に掃き集められ、不純物クラスターを作る様子が再現されている (b–e)。不純物クラスターは、最終的にはステップに取り込まれて消滅する (f)。

### 参考文献

- [1] H. Miura, Phase-Field Modeling of Step Dynamics on Growing Crystal Surface: Step Pinning Induced by Impurities, Cryst. Growth Des., 15 (2015), 4142–4148.
- [2] H. Miura, Numerical Study of Impurity-Induced Growth Hysteresis on a Growing Crystal Surface, Cryst. Growth Des., 16 (2016), 2033–2039.
- [3] H. Miura, Crystal Growth Hysteresis in Spiral Growth, Cryst. Growth Des., 20 (2020), 245–254.
- [4] Y. Kimura, H. Miura, in prep.



# Helfrich 型エネルギーの勾配流に対する閾値型近似アルゴリズムについて

石井 克幸<sup>1</sup>, 高坂 良史<sup>1</sup>, 三宅 庸仁<sup>2</sup>, 榊原 航也<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 神戸大学, <sup>2</sup> 九州大学, <sup>3</sup> 金沢大学

e-mail: koksaka@maritime.kobe-u.ac.jp

## 1 概要

$\Gamma$  を滑らかな閉曲線または閉曲面とする.  $\Gamma$  上の汎関数

$$\mathcal{H}_{\lambda,\mu}[\Gamma] := \mathcal{W}[\Gamma] + \begin{cases} \lambda \text{Length}[\Gamma] + \mu \text{Area}[\Gamma] & (N = 2) \\ \lambda \text{Area}[\Gamma] + \mu \text{Volume}[\Gamma] & (N = 3) \end{cases} \quad (1)$$

を Helfrich 汎関数といい,  $\mathcal{H}_{\lambda,\mu}[\Gamma]$  の最小化問題を Helfrich 変分問題という.  $N$  は次元を表し,  $N = 2$  のとき  $\Gamma$  は閉曲線,  $N = 3$  のとき  $\Gamma$  は閉曲面である.  $\mathcal{W}[\Gamma]$  は弾性エネルギーであり,

$$\mathcal{W}[\Gamma] := \begin{cases} \frac{1}{2} \int_{\Gamma} \kappa^2 ds & (N = 2) \\ \frac{1}{2} \int_{\Gamma} H^2 dS_{\Gamma} & (N = 3) \end{cases}$$

で表される. ここで,  $\kappa$  は曲線  $\Gamma$  の曲率,  $H$  は曲面  $\Gamma$  の平均曲率である. また (1) において,  $\lambda, \mu$  は Lagrange の未定乗数である. Helfrich 変分問題は生体膜の形状解析の数理モデルであり, 例えば脂質ベシクルの形態変化を表すモデルの 1 つである ([1] を参照).

動曲線または動曲面  $\Gamma(t)$  に対する Helfrich 汎関数  $\mathcal{H}[\Gamma(t)]$  の  $L^2$ -勾配流  $V = -\nabla_{L^2} \mathcal{H}_{\lambda,\mu}[\Gamma(t)]$  を Helfrich 流という. ただし,

$$\nabla_{L^2} \mathcal{H}_{\lambda,\mu}[\Gamma(t)] = \begin{cases} \kappa_{ss} + \frac{1}{2} \kappa^3 - \lambda \kappa + \mu & (N = 2) \\ \Delta_{\Gamma(t)} H + H|A|^2 - \frac{H^3}{2} - \lambda H + \mu & (N = 3) \end{cases}$$

であり,  $V$  は  $\Gamma(t)$  の法速度,  $s$  は曲線  $\Gamma(t)$  の弧長パラメータ,  $\Delta_{\Gamma(t)}$  は曲面  $\Gamma(t)$  上の Laplace-Beltrami 作用素である. また, 曲面  $\Gamma(t)$  の第 1 基本量  $g = (g_{ij})$  と第 2 基本量  $A = (h_{ij})$  に対して  $|A|^2 = g^{ij} g^{kl} h_{ik} h_{jl}$  である. Helfrich 流で  $\lambda = \mu = 0$  の場合を Willmore 流という. 本講演では  $V = -\nabla_{L^2} \mathcal{H}_{\lambda,0}[\Gamma(t)]$  (Helfrich 流で  $\mu = 0$  の場合) の閾値型近似アルゴリズムを 4 階線形放物型偏微分方程式の基本解を利用して導出することを目的とする.

## 2 閾値型近似アルゴリズム

本講演の主題である幾何学的発展方程式に対する閾値型近似アルゴリズムに関しては, 平均曲率流に対する MBO アルゴリズム ([2, 3] を参照) がよく知られ研究されている. MBO アルゴリズムでは, コンパクト集合  $\Omega_0$  上の特性関数  $\chi_{\Omega_0}$  を初期値とする熱方程式の初期値問題の解  $u$  を区間  $(0, h]$  ( $h$  は時間刻み幅) で求め,  $u(\mathbf{x}, h) = 1/2$  を閾値として平均曲率流の近似アルゴリズムを構成する. 一方, Willmore 流に対する閾値型近似アルゴリズムは,  $N = 2$  の場合は Esedoglu-Ruuth-Tsai [4],  $N = 3$  の場合は Grzhibovskik-Heintz [5] によって最初に紹介されている. [4, 5] では, 熱核において自然な時空間スケールである  $|x|/t^{1/2}$  を  $|x|/t^{1/4}$  に変更し, その核と特性関数  $\chi_{\Omega_0}$  との合成積の漸近展開を

求め、その漸近展開を基に Willmore 流の閾値型近似アルゴリズムを構成している。しかし、時空間スケール  $|x|/t^{1/4}$  を自然な形でもつのは 4 階線形放物型偏微分方程式の基本解であり、それを利用して Willmore 流に対する閾値型近似アルゴリズムを導出する方が自然であると思われる。そこで、本講演では以下の閾値型近似アルゴリズムを提唱する。

以下  $N = 2$  または  $N = 3$  とする。  $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^N$  を境界  $\partial\Omega_0$  が滑らかなコンパクト集合とし、  $h > 0$  を時間刻み幅とする。このとき、  $\Omega_0$  上の特性関数  $\chi_{\Omega_0}$  を初期値とする初期値問題

$$\begin{cases} u_t = -\Delta^2 u + \lambda \Delta u & ((\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^N \times (0, h]) \\ u(\mathbf{x}, 0) = \chi_{\Omega_0}(\mathbf{x}) \end{cases} \quad (2)$$

の解を  $u$  とし、  $u_a(\mathbf{x}, t) := u(\mathbf{x}, a^4 t)$  ( $a > 0$ ) に対して閾値を与える関数  $U$  を

$$U(\mathbf{x}, t) := u_{3a}(\mathbf{x}, t) - 3u_{2a}(\mathbf{x}, t) + 3u_a(\mathbf{x}, t) \quad (3)$$

によって定め、新しい集合  $\Omega_1$  を

$$\Omega_1 := \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N \mid U(\mathbf{x}, h) \geq \frac{1}{2} \right\} \quad (4)$$

で構成する。次に  $\Omega_0$  を  $\Omega_1$  に置き換えて初期値問題 (2) を解き、その解を基に閾値を与える関数を (3) によって定め、新しい集合  $\Omega_2$  を (4) のように構成する。以後この操作を帰納的に繰り返すことにより、コンパクト集合列  $\{\Omega_k\}_{k \in \mathbb{Z}_+}$  を構成する。ここで、この集合列を次のように補間する：

$$\Omega^h(t) = \Omega_k \quad (t \in [kh, (k+1)h), k \in \mathbb{Z}_+)$$

$h \rightarrow 0$  とすると、形式的には  $\Omega^h(t)$  はコンパクト集合  $\Omega(t)$  に収束し、その境界の族  $\{\partial\Omega(t)\}_{t \geq 0}$  は  $\partial\Omega_0$  を初期曲面として、  $\mathcal{H}_{\lambda,0}[\Gamma(t)]$  の  $L^2$ -勾配流  $V = -\nabla_{L^2} \mathcal{H}_{\lambda,0}[\Gamma(t)]$  に挙動が支配されることが導かれる。講演では、上記の過程から  $V = -\nabla_{L^2} \mathcal{H}_{\lambda,0}[\Gamma(t)]$  がどのように導かれるかを解説し、本講演で提唱する閾値型近似アルゴリズムによる Willmore 流の数値計算例を  $N = 2$  の場合について紹介する。

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 23H00085, 23K03215, 22KJ0719, 22K03425, 19K03562 の助成を受けたものである。

## 参考文献

- [1] 梅田真郷 編, 生体膜の分子機構-リビッドワールドが先導する生命科学, 化学同人, 2014.
- [2] J. Bence, B. Merriman and S. Osher, *Diffusion generated motion by mean curvature*, *Computational Crystal Growers Workshop*, J. Taylored., Selected Lectures in Math., AMS, Providence, RI, 1992.
- [3] L. C. Evans, *Convergence of an algorithm for mean curvature motion*, *Indiana Univ. Math. J.*, 42 (1993), 533–557.
- [4] S. Esedoğlu, S. J. Ruuth and R. Tsai, *Threshold dynamics for higher order geometric motions*, *Interfaces Free Bound.*, 10 (2008), 263–282.
- [5] R. Grzhibovskik and A. Heintz, *A convolution thresholding scheme for the Willmore flow*, *Interfaces Free Bound.*, 10 (2008), 139–153.