

令和元年5月29日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K04996

研究課題名(和文) 結晶表面におけるステップダイナミクスの数理解析・数値解析

研究課題名(英文) Mathematical and numerical analysis for step dynamics on crystal surfaces

研究代表者

中村 健一 (Nakamura, Ken-Ichi)

金沢大学・数物科学系・准教授

研究者番号：40293120

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：結晶表面におけるステップの時間発展ダイナミクスを理解するために、研究分担者と協力して、数理解析・数値解析の両方の観点から多重安定型の非線形項をもつ反応拡散方程式のフロント相互作用の解析を行った。また、関連する空間離散的モデルの進行フロント波のプロファイルの単調性と安定性・一意性との関係を順序保存力学系の観点から一般的な枠組みで明らかにした。さらに、界面や自由境界の時間発展を効率的に精度よく追跡する数値計算スキームの開発を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

観測技術の進歩により詳細に調べられるようになった結晶表面のステップと呼ばれるわずか1原子層の高さしかない段差の時間変化について、多重安定型非線形項を持つ反応拡散方程式による定性的モデルの数学解析・数値解析を行い、微斜面に並ぶステップの空間パターンの形成メカニズムに関する新たな知見を得ることができた。また、本研究で開発した界面現象や自由境界を効率的に精度よく追跡する数値スキームは、今後の他の問題への適用が期待できる汎用的な手法であり、学術的意義のあるものである。

研究成果の概要(英文)：In order to understand step dynamics on crystal surfaces, from the viewpoint of mathematical and numerical analysis, we investigated front interaction arising in reaction-diffusion equations with multistable nonlinear terms. We also studied the relationship between the monotonicity of the profile of traveling fronts and their stability for related spatially discrete models in the framework of order-preserving dynamical systems. Furthermore, we developed several numerical computation schemes to track the time evolution of interfaces and free boundaries efficiently and accurately.

研究分野：応用解析学

キーワード：界面ダイナミクス 進行波 移動境界問題 順序保存力学系

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

観測技術の進歩により、結晶表面のステップと呼ばれるわずか1原子層の高さしかない段差の時間変化が詳細に調べられるようになってきている。気相における結晶成長では、気相から結晶表面への原子の供給、結晶表面における原子の拡散、およびステップ位置における原子の結晶への組み込みが重要な過程であることが知られており、実験・観察に基づく定量的な数理モデルが結晶科学者により提案されている。一方、十分に大きなスケールで見ると、1原子ごとの細かなずれはもはや認識できず、結晶表面のステップはなめらかな曲線を描いているとみなせる。この観点に基づき、多重安定型の非線形項を持つ反応拡散方程式によるモデリングが行われている。

そこで、結晶表面上に並ぶステップの時空間ダイナミクスに対しフロントの相互作用という観点から反応拡散系を用いた数理モデルの数理解析・数値解析を行うことにより、ステップの不安定化や微斜面に現れる空間パターンの形成メカニズムを理解することを目指し、本研究課題を着想した。

### 2. 研究の目的

#### (1) 反応拡散系を用いたステップダイナミクスの数理モデルの導出と解析

微斜面上におけるステップダイナミクスを記述する反応拡散方程式モデルにおいて、その全域解が本質的かつ重要な役割を果たしていることが予想される。したがって、多安定型非線形項を持つ反応拡散方程式に対し、全域解の一意存在および安定性を示すことを目標とする。さらに、解の挙動を詳細に調べることで、微斜面上の直線状ステップがどのように相互作用するかを明らかにする。また、結晶構造を考慮した離散モデルも考察し、フロント進行波解の安定性や一意性を明らかにする。

#### (2) 微斜面上におけるステップダイナミクスの数値計算法の開発

反応拡散系を用いた定性モデルの導出のためには、結晶科学者により提案された、実験・観察結果との定量的整合性を考慮した定量的モデルとの比較が不可欠である。定量的モデルでは、微斜面上のステップは曲線とみなされ、その運動はステップへの原子の供給によって定まるが、ギブス・トムソン効果によりステップの法線方向速度はステップの曲率に依存する。したがって、定量モデルの数値計算には曲率に依存した法線方向速度を持つ平面曲線の相互作用による運動方程式を解く必要がある。特に、前述のようなステップの不安定化により隣接するステップが融合することがあるので、曲線のトポロジーが変化し数値計算上の困難が生じることが予想される。そこで、曲線の融合・分離などのトポロジー変化に対応可能な数値計算手法を開発し、それに基づく数値シミュレーションを行うことで、反応拡散系による定性的モデルの導出に役立てる。

### 3. 研究の方法

数理解析・数値解析を担当する各班の連携により、以下の方法で研究を行った。

(数理解析班) 微斜面上のステップが直線状である場合の数理モデルとして、多安定型非線形項を持つ単独の反応拡散方程式の全域解について考察し、比較定理や中心多様体縮約の理論を利用して全域解の一意存在および漸近安定性について考察する。また、結晶構造を考慮した空間離散的な反応拡散系のフロント解について、順序保存力学系の理論を用いて、安定性や一意性を明らかにする。

(数値解析班) クリスタライン曲率による折れ線近似により、結晶表面のステップを離散化する手法を開発する。閉曲線の場合は、各時間ステップに分点を接線方向にも動かし再配置することで安定性の高い数値スキームが得られるが、本研究課題ではステップは端点を持つ曲線として表されるので、同様の手法で安定な数値スキームが得られるかどうかを境界条件との整合性を含めて検討する。特に、ステップの不安定化が起こり、隣接するステップが異なる位相で蛇行したり、バンチング現象が生じて隣接ステップが融合してしまう場合には、曲線のトポロジーが変化してしまうので、曲線の融合・分離も追跡可能な精度の高い数値スキームの構築を行う。また、導出したスキームによる定量的モデルの数値計算を行い、定性的モデルの構築に役立てる。また、基本解近似解法など他の計算方法についてもその基礎理論を発展させることで、問題への適用を試みる。

### 4. 研究成果

(1) 結晶表面のステップの時間発展ダイナミクスに関連する多安定型非線形項を持つ反応拡散方程式のフロント相互作用について考察し、階段状のステップ(複数段のフロント)の形成、フロントの消滅、準安定なパターンの形成、およびフロント間の相互作用による非常にゆっくりとした運動が異なるタイムスケールで次々に生じることを漸近解析的手法により明らかにした。

(2) 空間1次元反応拡散方程式の自由境界問題に対する有限差分スキームを提案し、その性質を数学的に明らかにした。特に、非線形反応項の離散化を工夫することにより、数値解の計算領域における一様有界性および1階差分の自由境界における一様有界性を示すことにより、

数値スキームの無条件安定性を証明した。さらに、通常の差分法の範囲で適用が困難な両端に自由境界条件を課した問題に対し、固定領域法とスペクトル選点法を併用した数値シミュレーションを行い、これまで知られていなかった解の形状および自由境界の挙動を明らかにした。

(3) 時間に依存した係数を持つランチェスタ型モデルと呼ばれる常微分方程式系の数理解析を順序保存力学系の観点から行い、解の定性的性質を調べるとともに、解の時間無限大での漸近挙動を完全に決定し初期値との関係(連続性依存性)を明らかにした。また、1次元格子上の反応拡散系に現れる進行波解について考察し、その空間プロファイルが狭義単調であることをパラメータに関する一般的な仮定の下で証明するとともに、さらに進行波解がリヤプノフ安定であることを形状の狭義単調性と比較定理を利用して示すことに成功した。

(4) 結晶の転位現象における転位線の厳密解を構成するとともに、その数値計算法の開発を行い、曲線を離散化する際の分点の配置方法(曲率依存型配置、一様配置など)に曲線の接線方向速度を利用することの有効性を明らかにした。さらに、この知見を他の問題に適用して、曲率流方程式を用いた画像輪郭抽出法の開発やある化学反応に見られるスパイラルパターンの数値的実現等の成果を得た。また、空像(負結晶)の時空間ダイナミクスを明らかにするために、面積保存型クリスタライン曲率流方程式を利用した数値モデリングを行うとともに、その数値計算法を提案した。さらに、提案した反復法が計算回数を任意の有限回で止めても必ず面積が保存する性質を持つことを明らかにした。

(5) 平面内の界面運動、平面曲線の時間発展問題に対する数値解法として基本解近似解法に関する新しい不変スキームを提案し、その性質を調べた。さらに、これまでよく研究されていた空間2次元における基本解近似解法の移動境界問題への適用を拡張し、神経細胞の3次元形状を考慮した興奮伝達の数値モデルに適用した。基本解近似解法によるラプラス方程式の解を反応拡散方程式と組み合わせることで、進行波の存在を数値的に示すことができた。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計8件)

- ① J.-S. Guo, K.-I. Nakamura, T. Ogiwara and C.-C Wu, Stability and uniqueness of traveling waves for a discrete bistable 3-species competition system, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 査読有, Vol.472, 2019, pp.1534-1550  
DOI: 10.1016/j.jmaa.2018.12.007
- ② K.-I. Nakamura, K. Sakakibara and S. Yazaki, Numerical approach to three-dimensional model of cellular electrophysiology by the method of fundamental solutions, JSIAM Letters, 査読有, Vol.11, 2019, pp.17-20  
DOI: 10.14495/jsiaml.11.17
- ③ M. Goto, K. Kuwana and S. Yazaki, simple and fast numerical method for solving flame/smoldering evolution equations, JSIAM Letters, 査読有, Vol.10, 2018, pp.49-52  
DOI: 10.14495/jsiaml.10.49
- ④ T. Ogiwara and H. Usami, On the behavior of solutions for Lanchester square-law models with time-dependent coefficients, Josai Mathematical Monographs, 査読有, Vol.11, 2018, pp.15-25  
[http://libir.josai.ac.jp/il/user\\_contents/02/G0000284repository/pdf/JOS-13447777-1105.pdf](http://libir.josai.ac.jp/il/user_contents/02/G0000284repository/pdf/JOS-13447777-1105.pdf)
- ⑤ K. Sakakibara and S. Yazaki, Method of fundamental solutions with weighted average condition and dummy points, JSIAM Letters, 査読有, Vol.9, 2017, pp.41-44  
DOI: 10.14495/jsiaml.9.41
- ⑥ H. Tani and S. Yazaki, Instability of a free boundary in a Hele-Shaw cell with sink/source and its parameter dependence, JSIAM Letters, Vol.9, 2017, pp.37-40  
DOI: 10.14495/jsiaml.9.37
- ⑦ P. Paus and S. Yazaki, Exact solution for dislocation bowing and a posteriori numerical technique for dislocation touching-splitting, JSIAM Letters, 査読有, Vol.7, 2015, pp.57-60  
DOI: 10.14495/jsiaml.7.57
- ⑧ K. Osaki, H. Satoh and S. Yazaki, Towards modelling spiral motion of open plane curves, Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series S, 査読有, Vol.8, 2015, 1009-1022  
DOI: 10.3934/dcdss.2015.8.1009

[学会発表] (計16件)

- ① Toshiko Ogiwara, Asymptotic behavior of solutions for nonautonomous Lanchester type system, NCTS 2019 Workshop on Applied Mathematics in Taichung, 2019
- ② Ken-Ichi Nakamura, Uniqueness and stability of monotone traveling waves for bistable

lattice dynamical systems, 2018 China-Japan Workshop on Nonlinear Diffusion Problems, 2018

③ Shigetoshi Yazaki, On flame/smoldering evolution equations and its numerical computations, Czech-Japanese Seminar in Applied Mathematics 2018, 2018

④ 中村健一, Asymptotic stability of traveling waves for bistable lattice dynamical systems, 非線形現象と反応拡散方程式, 2017

⑤ Ken-Ichi Nakamura, Asymptotic stability of traveling waves for bistable lattice dynamical systems, Free Boundary Problems and Nonlinear PDEs, 2017

⑥ 中村健一, Numerical methods for the Fisher equation with free boundaries, 非線形偏微分方程式の定性的理論, 2017

⑦ 矢崎成俊, A simple and fast numerical method for solving flame evolution equations, Qualitative theory on nonlinear partial differential equations, 2017

⑧ Shigetoshi Yazaki, Direct approaches for tracking the moving boundary arising in interfacial phenomena, Equadiff 2017, 2017

⑨ 荻原俊子, On the behavior of solutions for Lanchester square-law models with time-dependent coefficients, JMM Workshop on Applied Functional Analysis, 2017

⑩ T. Ogiwara, Asymptotic behavior of solutions for some diffusion equation with delay, 2017 NCTS Workshop on Applied Mathematics in Tainan, 2017

⑪ Shigetoshi Yazaki, Area-preserving crystalline curvature flow equation and analysis of Vapor figure in ice block, Czech-Japanese-Polish seminar in applied mathematics, 2016

⑫ Shigetoshi Yazaki, Positive and negative ice crystal growth: open problems in moving boundary problems, Workshop on interface motions and free boundary problems, 2016

⑬ Ken-Ichi Nakamura, Stability of traveling waves for some bistable lattice dynamical system, The 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, 2016

⑭ Ken-Ichi Nakamura, Stability of traveling waves for some bistable lattice dynamical system, 9th European Conference on Elliptic and Parabolic Problems, 2016

⑮ Shigetoshi Yazaki, A direct approach to image segmentation, ALGORITHM 2016, 2016

⑯ 伊藤貴啓, 荻原俊子, 時間に依存した係数を持つあるランチェスタ型モデルの解の漸近挙動, 2015年度応用数学合同研究集会, 2015

## 6. 研究組織

### (1) 研究分担者

研究分担者氏名：矢崎 成俊

ローマ字氏名：Shigetoshi Yazaki

所属研究機関名：明治大学

部局名：理工学部

職名：教授

研究者番号（8桁）：00323874

研究分担者氏名：中村 俊子（荻原 俊子）

ローマ字氏名：Toshiko Ogiwara

所属研究機関名：城西大学

部局名：理学部

職名：教授

研究者番号（8桁）：70316678

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。