Cahn-Hilliard 方程式の差分法による数値的解法

| 東京大学大学院工学系 | 降旗 大介 | (Daisuke Furihata) |
|------------|-------|--------------------|
| 東京大学工学部 | 恩田 智彦 | (Tomohiko Onda) |
| 東京大学工学部 | 森 正武 | (Masatake Mori) |

1 はじめに

スピノーダル分解に対するモデル方程式である Cahn-Hilliard 方程式は、非線形 の偏微分方程式であり、適当な数値解法により解けることが期待できる。しかし、 実際は Cahn-Hilliard 方程式の持つ数値計算上の困難(不安定性と呼ばれる)によ り、<u>そのまま</u>数値的に解いた例はわずか数例が報告されているのみである [1]¹。そ こで、普通は、モンテカルロ法や分離した相の境界の動きに話を reduce する方法 など、スピノーダル分解問題の物理的な性質に着目したアプローチが主流である (即ち、Cahn-Hilliard 方程式を解かずに済ませてしまう)。

∜

これに対し、「変則的な」フーリエ分解で混入誤差に対する差分スキームの「スペクトル」を計算し、「拡張安定性」という新しい概念で評価することにより「差分法で解ける」離散化のパラメータを与えられる事が期待された(つまり、Cahn-Hilliard 方程式を差分法で数値的に解ける可能性が出てきた)。

₽

また数値実験を行なうことにより、この一連の手法を用いて実際に差分スキーム で Cahn-Hilliard 方程式が数値的に解けることが示された。

2 スピノーダル分解と Cahn-Hilliard 方程式

スピノーダル分解とは?

複数種の物質を混ぜ合わせて得られる混合系などにおいて、組成 u(x,t₀) が空間的に均一であるよりも不均一である方が安定である場合(水と油を混ぜたもののように)、初期状態において空間的に均一にしておくと、時間発展にしたがって組成が空間的に不均一な状態へと変化してゆく。結果として均一な組成が二相に分離してゆくこの種の現象をスピノーダル分解と呼び、均一から不均一へという流れが普通の拡散現象の逆のため、この現象は異常拡散現象の一種でもある。系を視覚的にとらえた場合、一様な状態から時間発展に従いパターンが現れ変化してゆくため、パターン形成問題とも密接な関係を持つ問題である。

1これは有限要素法による成功例

Cahn-Hilliard 方程式

$$(CH eq.) \begin{cases} u_t - \nabla^2 \tilde{G}_u = 0 & \text{in } \Omega & (2.1) \\ \nabla u \cdot n = 0 & \text{on } \partial \Omega & (2.2) \\ \nabla \tilde{G}_u \cdot n = 0 & \text{on } \partial \Omega & (2.3) \\ \tilde{G}(u) = G - \frac{1}{2}q ||\nabla u||^2 & (q < 0) & (2.4) \\ G(u) = \frac{1}{2}pu^2 + \frac{1}{4}ru^4 & (p < 0 < r) & (2.5) \end{cases}$$

$$G(u) \qquad : \text{Ginzburg-Landau 自由エネルギ-} \\ (簡単のため、組成に対して対称) \\ : 拡張 Ginzburg-Landau 自由エネルギ- \\ 付加項 - \frac{1}{2}q ||\nabla u||^2 : ひずみエネルギ- に相当 (分離を抑制する) \end{cases}$$

境界条件

- Cahn-Hilliard 方程式の導出に必要な自然境界条件 Eq.(2.2)
- 全組成の保存則を満たすのに必要なもの Eq.(2.3)

↓ 単純化

$$u_t = \nabla^2 (pu + q \nabla^2 u + ru^3)$$
 in Ω $(p, q < 0 < r)$ (2.6)

(境界条件は変わらない)

注:原理的には Ginzburg-Landau 自由エネルギー G(u) は double-well 型であれ ばよいため、上の式 Eq.(2.5) はこうでなくともよい。言い替えると、これはパラ メータの数が最も少ない (p,q,rの3つ) 最も簡単な例であり、ここから様々な応 用が考えられよう。

数値計算で介何が困るのか?

条件により <u>dul</u> > 0 となるため、差分スキームの線形安定性(後述)が否定され、差分スキームを使うときの条件(空間、時間のメッシュ幅をどうとればよいか)が見えなくなってしまう。

3 数値損上の困難

- 1. 非線形性(低周波と高周波とでやり取りが存在する)
- 2.「不安定性」(混入誤差が成長する)
- 3. 理論的な厳密解が求められていない(得られる解の正当性を調べる手段が少 ない)

4. 初期値の微小な差が大きく影響する(時間反転した式を解くことは無意味に 近い)

5. 離散化パラメータに対する指針がない(どうすれば良いのか見当がつかない) 以上が、数値的に解くことを困難にしてきた点である。

4 数値解法の候補

有限要素法

- 計算領域の形状に対して柔軟に対応できる
- 数値計算以前の前処理、準備が大変
- 計算例が存在[1]

フーリエ変換法

- 理論的には最も素直
- 計算量が膨大になる
- 境界条件が離散化を正当化する

解の保証

- 解の範囲を区間で囲い込んで保証する方法
- 数学的な準備が大変(ほとんど数学的証明そのもの)だが、(できれば)最も 強力(数学的に正しさが保証される)

差分法

- 単純、かつ、計算が速い(プログラムが組みやすい)
- 安定性がやや低い(これに対し新しい概念を適用して今回成功した)
- ベクトル計算機向き
- 今回、計算に成功

5 線形安定性

線形安定性とは?

差分スキームに対する線形安定性とは、混入した誤差が成長しないこと。

混入誤差の成長率(スペクトル:後述)<1

この条件(線形安定性)を満たすメッシュ幅ならば差分スキームは安全であると される。

6 混入誤差に対する差分スキームのスペクトルとは

組成 u に対する混入誤差 v(局所的フーリエ分解? といった感じのもの)

$$\begin{cases} v = \epsilon \exp(i \mathbf{k} \mathbf{x}) & (\epsilon \ll 1) & (6.1) \\ u = u_0 + v & (u_0: \text{Const.}) & (6.2) \end{cases}$$

↓を用いて

Cahn-Hilliard 方程式 Eq.(2.6)

↓を線形近似

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \nabla^2 \{ (p + 3ru_0^2)v + q\nabla^2 v \} \quad \text{in } \Omega$$
(6.3)



図 1: 上のフーリエ分解の概念

定義1(スペクトル) 真のスペクト λ_c : 上の式の解 veに対し $\lambda_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{v_c(t + \Delta t)}{v_c(t)} \quad \in C$ (6.4)差分スキームによるスペクトルλ: 上の式を離散化した差分スキームの解vに対し

$$\lambda \stackrel{def}{=} \frac{v(t + \Delta t)}{v(t)} \in C \tag{6.5}$$

ただし、∆t は時間方向のメッシュ幅。

注1:スペクトルとは?

連続固有値といったもの。差分スキームを函数に対する作用素とみなしたとき、上 のスペクトルの定義は固有函数に対する固有値になる。気分的にはフーリエ成分 の1ステップでの増大率だとみれば良い。

注2:今回考えている Cahn-Hilliard 方程式は偶然、スペクトルλが実数になる。 よって、様々な解析が非常に単純になっているが、本質的にはこれからの話はス ペクトルが複素数範囲でも正しい。



図 2: スペクトル λ_c vs 波数 $k(u_0 = 0)$ (1次元) Eq.(10.1)



図 3: スペクトル λ vs 波数 k(u₀ = 0) (1 次元) Eq.(10.3)

7 スペクトル評価の範囲

変則的なフーリエ分解に対し、

- ●(フーリエ分解の波数である) k
- ●(フーリエ分解の中心である) u₀

の範囲を決めなければスペクトルの評価が(ほとんど)できない。

↓そこで

1. kの範囲の限定方法 差分スキームを使うために空間メッシュを切ることにより、空間座標の値が 離散化される。

∜

kの値の上限、下限が存在する。~非常に自然。 **k**の範囲を*K*とする。

2. u₀の範囲の限定方法
 Cahn-Hilliard 方程式の導出過程での局所自由エネルギーから物理的にとり得

ると思われる範囲(バイノーダル点の内側の組成)をとる。〜数学的ではない。

u₀の範囲をUとする。

↓ 結果として

(空間が1次元の場合)

$$\mathcal{K} = \left[-\frac{\pi}{\Delta x}, \frac{\pi}{\Delta x}\right] \tag{7.1}$$

$$\mathcal{U} = \left[-\sqrt{\frac{-p}{r}}, \sqrt{\frac{-p}{r}}\right] \tag{7.2}$$

以後、この条件の下で計算を進めた。

注:この条件を変えると、これより後にでてくる数式の具体的な数字が変わるだ けで、本質的な話はこの条件に関わらず成立する。

8 スペクトル評価: 拡張安定性

| 定義 2 (区間 I) | | |
|-------------|--|-------|
| | 区間 $I(\lambda) \stackrel{def}{=} \{ \lambda(k, u_0) : \forall k \in \mathcal{K}, \forall u_0 \in \mathcal{U} \}$ | (8.1) |

先に述べた「線形安定性」 $\approx I(\lambda) \subseteq [0,1]$

定義3((第1種)拡張安定) *I*(λ)⊆*I*(λ_c)が成り立つこと。

定義 4 ((第1種)完全拡張安定) $I(\lambda) = I(\lambda_c)$ が成り立つこと。 注意

- 1. 拡張安定の定義の動機は、差分スキームの性質が元の方程式のそれよりも悪 くならないようにというものである。
- 上の拡張安定性を第1種と呼ぶのは、スペクトル lambda は本来複素数のためより精密にとらえるには絶対値だけではなく位相も考えるべきであり、その点まで考慮した拡張安定性を第2種としてあるためである(ここではその詳細は省略)。
- 3. *K*, *U*の範囲にわたって均してしまう上の拡張安定の定義は広すぎるものであ るという考えがあり、<u>各 u₀に対してスペクトルの範囲を限定するものが考え</u> られている(とりあえず、局所拡張安定と呼んでいる:詳細は省略)。



図 4: スペクトルλc vs 分解中心 u0

9 スペクトル評価:古典的安定性、古典的無振動性

| 定義 5 (古典的安定) |
|---|
| u_0 の範囲の端点(バイノーダル点)の上で $ \lambda < 1$ であり、かつ、 u_0 の領域上 |
| でλが有界なこと。 |
| 定義 6 (古典的無振動) |
| u_0 の領域上で $\Re(\lambda)>0$ であること。 |
| |

注意

- 古典的安定の定義の動機は、通常用いる線形安定性をそのまま(一部分なりと)生かして使う方法はないかというものである。端点に注目しているのは、そこで抑えれば内部で何がおころうがとりあえず無限大への発散は抑えられるのではないかという期待からである。
- 古典的無振動性の定義の動機は、振動という現象が差分スキームでは時間を 離散化するために発生する可能性があり、その可能性を無くせば発散の可能 性が半減することがスペクトルの形状より明白なことによる。つまり、これ は振動というあり得ない現象を排除するうえ(ついでながら)発散の可能性 を減らすものと考えられた。
- うえの二つの定義に<u>古典的</u>とついているのは、この二つの定義は真のスペクトルλ_cを参照しないからである。逆にいえば、拡張安定性の<u>拡張</u>とは、真のスペクトルと差分スキームのスペクトルを比較するところに新しさがあるのである。

↓ 結論として

| 予想 及び 期待 | | |
|----------|-----|---------------|
| 古典的安定 | ~ | 発散するかどうかの目安 |
| 古典的無振 | 動 ~ | 振動するかどうかの目安 |
| 拡張安定 | ~ | 真の解に近い のでは・・・ |

10 スペクトル評価の具体例(空間1次元の例)

真のスペクトルの区間 $I(\lambda_c)$ CH-eq. の近似式 Eq.(6.3) に誤差 v Eq.(6.1) を代入 $\lambda_c = \exp[\{qk^4 - (p + 3ru_0^2)k^2\}\Delta t]$ (10.1) $I(\lambda_c) = \left[\exp\{\frac{\pi^2}{\Delta x^2} \Delta t (2p + \frac{\pi^2}{\Delta x^2}q)\}, \exp(-\frac{p^2}{4q} \Delta t)\right]$ (10.2)差分スキームのスペクトルの区間 $I(\lambda)$ CH-eq. の線形近似式 Eq.(6.3) を差分スキームにしてから誤差 v Eq.(6.1) を代 入して $\lambda = \frac{1 + \theta_{\xi}^{\eta} \{(\cos k \Delta x - 1 + \xi)^2 - \xi^2\}}{1 - (1 - \theta)_{\xi}^{\eta} \{(\cos k \Delta x - 1 + \xi)^2 - \xi^2\}}$ (10.3) $\begin{cases} \xi = \frac{\Delta x^2}{4q} (p + 3ru_0^2) \\ \eta = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (p + 3ru_0^2) \\ \theta : \quad \text{Bolt} (1:\text{Boll}, 0:\text{Boll}, other: \mathcal{P} \mathcal{B} \mathcal{O}) \end{cases}$ (10.4)(10.5) $I(\lambda) = \left[\frac{1 + \theta \frac{4}{\Delta x^2} \Delta t (2p + \frac{4}{\Delta x^2}q)}{1 - (1 - \theta) \frac{4}{\Delta x^2} \Delta t (2p + \frac{4}{\Delta x^2}q)}, \frac{1 - \theta \frac{p^2}{4q} \Delta t}{1 + (1 - \theta) \frac{p^2}{4q} \Delta t}\right]$ (10.6)

↓ 以上を用いて $I(\lambda) \subseteq I(\lambda_c)$ が可能かどうかを調べる。

11 スペクトル評価の結果

Cahn-Hilliard 方程式に対して差分スキームの各種安定性を調べてみた。

拡張安定性の解析 CH-eq. 差分スキーム $\Delta x \theta: z + - \Delta \phi$ 陽的度, $\Delta x: 空間, \Delta t: 時間方向の メッシュ幅。$

結果(各種安定性)

| 差分スキーム | 古典的安定 | 拡張〃 | 完全拡張〃 |
|--------|-------|-----|-------|
| 陽的差分 | 0 | 0 | × |
| 半陰的差分 | 0 | 0 | 0 |
| 陰的差分 | 0 | × | × |

(): 可能

× : 不可能

注意

- 古典的安定の適用性が広いように見えるが、これは真のスペクトルを参照しないこと、つまり差分スキームにどれくらい正当性があるか、を一切考えないことの裏返しととれる。
- 2. 半陰的差分スキームの適用範囲が広いのは、パラメータθを自由に選べる(要 するにパラメータの自由度が1つ高い)為でもある。

12 スペクトル評価の具体的結果

古典的安定、拡張安定を満たすパラメータを調べた。

古典的安定である条件

ただし、以下の前提条件を満足する必要がある。

$$\begin{cases} \begin{cases} \Delta t < \frac{-4q}{(1-\theta)p^2} & (\Delta x^2 \le \frac{8q}{p}) \\ \Delta t < \frac{\Delta x^4}{-16q(1-\theta)} & (\frac{8q}{p} < \Delta x^2) \\ \Delta t < \frac{\Delta x^4}{4(1-\theta)(4q-p\Delta x^2)} & (\frac{4q}{p} < \Delta x^2) \end{cases}$$
(12.2)

古典的無振動である条件

陽・陰的 1 次元
$$\Delta t < \frac{\Delta x^4}{8\theta(-2q - p\Delta x^2)}$$
 (12.3)

ただし、古典的安定同様に前提条件 Eq.(12.2) を満足する必要がある。

拡張安定である条件

数値計算により、完全拡張安定に最も近いうちで 最も計算量の少ないパラメー タを調べた。(Δt に関する陽な表式は出来ないため数値的に評価した。)下の表は、 その中の一つである。ただし、分かりやすいように、およその値(整数の逆数と いう形)で表記してある(計算した結果はきちんとした実数である)。

| | 陽的差分 | 半陰的差分 | |
|----------------|--------------------|-------------------|-------------|
| Δx | Δt | Δt | θ |
| $\frac{1}{10}$ | $\frac{1}{1016}$ | $\frac{1}{522}$ | 0.539790579 |
| $\frac{1}{20}$ | $\frac{1}{5868}$ | $\frac{1}{2923}$ | 0.507156719 |
| $\frac{1}{30}$ | $\frac{1}{20335}$ | $\frac{1}{10123}$ | 0.502058014 |
| $\frac{1}{40}$ | 1 54060 | $\frac{1}{26924}$ | 0.500773805 |
| $\frac{1}{50}$ | $\frac{1}{120512}$ | $\frac{1}{60044}$ | 0.500346969 |

p = -1.0q = -0.001

以上のグラフ



図 5: 安定臨界の相図

古典的無振動臨界が拡張安定とほぼ重なるのは、λ_cの最小値が非常に小さい正の 数(ほぼ0)であるという一種の偶然による。(例えば、λ_cの最小値がかなり大き い数であったら、古典的無振動臨界と拡張安定はかなり異なるはずである。) 陰的 1次元に対しては、Δx とθとによってΔt の上限が決定されるため、このグラフは 3次元になる(このときは拡張安定でかつ完全拡張安定に最も近いパラメータの 集合は3次元の中の曲線で表され、曲面で表される古典的安定、古典的無振動臨 界よりも精密な性質を持つことがうかがわれる)。

13 古典的安定性について

古典的安定について次の2点を調べた。

1. 発散するかどうかの目安になるか

2. 古典的安定なスキームの解は信用できるか

以下のグラフは、古典的安定ぎりぎりの△tから数%ずらした△tを実際に使った 差分法の数値実験で、発散によりプログラムが停止するまでどれくらいの内部時 間が経過するかを調べたものである。ちなみに、内部時間とは、Eq.(2.6) にでてく る変数 t のことである。

グラフよりおおよそ分かるように、△tのズレと発散までの内部時間には強い相 関関係がある。この相関関係から推測するに、発散の目安としての性質について は(この場合)正しい概念であるといえそうである。



古典的安定臨界からのズレと発散するまでの内部時間

図 6: 発散の目安としての正しさの傍証

以下のグラフは古典的安定な状態で実際に計算をした場合のものである。本来の 方程式では発生するはずのない(真のスペクトルには負の部分がない)振動が発 生していることがみてとれ、このことより古典的安定性はスキームの信用性とし ては使えない指標であることが分かる。



図 7: 振動する例1



図 8: 振動する例2

14 スペクトルの比較図

古典的安定な場合と、拡張安定な場合とで真のスペクトルと差分スキームのスペ クトルが Cahn-Hilliard 方程式ではどういう関係にあるのか、実際にグラフでみて みた。以下のグラフは、差分スキームが陽的、半陰的な場合の各々について、真 のスペクトルと差分スキームのスペクトルとを図示したものである。





図 10: 陽的差分スキーム:古典的安定:差分スキームのスペクトル



図 11: 陽的差分スキーム:拡張安定:真のスペクトル



図 12: 陽的差分スキーム:拡張安定:差分スキームのスペクトル



図 13: 半陰的差分スキーム:古典的安定:真のスペクトル



図 14: 半陰的差分スキーム:古典的安定:差分スキームのスペクトル



図 15: 半陰的差分スキーム:古典的安定:真のスペクトル



図 16: 半陰的差分スキーム:古典的安定:差分スキームのスペクトル



図 17: 半陰的差分スキーム:拡張安定:真のスペクトル



図 18: 半陰的差分スキーム:拡張安定:差分スキームのスペクトル

15 数值美験

拡張安定な差分スキームを用いて 以下の数値計算を行なった。

以下のグラフはその一部である。Fig.19は空間1次元、陽的差分スキームでの例 で、Cahn-Hilliard 方程式のパラメータがp = -1.0, q = -0.03, r = 0.03333333、空 間幅は6、離散化のメッシュサイズは空間が1/30、時間が1/396977である。重ね 書きしてある各々のグラフは図の左下にある時間ステップで得られたものである。 Fig.20は同じく空間1次元、陽的差分スキームでの例で、Cahn-Hilliard 方程式のパ ラメータがp = -1.0, q = -0.001, r = 1.0、空間幅は1、離散化のメッシュサイズ は空間が1/50、時間が1/120512である。Fig.21-26は空間2次元、陽的差分スキー ムでの例で、Cahn-Hilliard 方程式のパラメータがp = -1.0, q = -0.001, r = 1.0、 空間幅は両方1、離散化のメッシュサイズは空間が両方1/30、時間が1/66584 で ある。グラフは、上に鳥瞰図、下に等高線図が示してあり、同じものを表してい る。各グラフは図の右上にある時間ステップで得られたものである。このグラフ を得るにあたって、空間が多次元になってもプログラムが容易であるという差分 法の長所に大いに助けられた。



図 20: 陽的差分スキームによる計算例:1次元



図 21: 陽的差分スキームによる計算例:2次元



図 22: 陽的差分スキームによる計算例:2次元



図 23: 陽的差分スキームによる計算例:2次元



図 24: 陽的差分スキームによる計算例:2次元



図 25: 陽的差分スキームによる計算例:2次元



図 26: 陽的差分スキームによる計算例:2次元

16 結論

拡張安定性を考えた差分スキームによって、振動や発散といった現象を起こさず に Cahn-Hilliard 方程式を数値計算することに成功している。発散性や振動性を考 えるだけならば、古典的な考え方 (完全に古典的ではないが) でも良いらしいが、 スキームの信用性が得られないこともまた明らかになった。つまり、拡張安定性 を考える意義は、得られる解の信用性にある。しかしこのことを数学的にきちん とすることはこれからの課題である。また、これらの安定性の概念は、二つの変 数を持つ変則的なフーリエ展開による誤差の時間発展の解析にその基盤をおいて おり、これについても、理論的な裏付けがこれからの課題である。最後に一言で まとめると、拡張安定という新しい概念は差分スキームの適用範囲を広げるもの ではないかと期待される。

参考文献

- [1] Charles M.Elliott. Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation. *IMA J.Appl.Math.*, Vol.38:pp.97-128, 1987. 有限要素法による Cahn-Hilliard 方程式の数値解法.
- [2] J.W.Cahn and J.E.Hilliard. Free energy of a non-uniform system. Linterfacial free energy. J. Chem. Phys., Vol. 28:pp. 258-267, 1958.
- [3] J.W.Cahn. Phase separation by spinodal decomposition in isotropic systems. J.Chem.Phys., Vol.42(No.1):pp.93-99, Jan. 1965.
- [4] J.S.Langer, M.Bar-on, and Harold D.Miller. New computational method in the theory of spinodal decomposition. *Phys.Rev.A*, Vol.11(No.4):pp.1417-1429, Apr. 1975.
- [5] 宮崎 享. スピノーダル分解(i)(ii). 固体物理, Vol.13(No.1,3):pp.1-10,155-162, 1978.
- [6] Y.Oono and S.Puri. Study of phase-separation dynamics by use of cell dynamical systems. I.modeling. *Phys. Rev. A*, Vol.38(No.1):pp.434-453, Jul. 1988.
- [7] 古川 浩. スピノーダル分解. フィジクス, Vol.6(No.8):pp.449-453, 1985.