離散格子上での非線形拡散方程式における

安定なパターンについて

慶應義塾大学 理工学研究科 野口 雄一郎 (Yuuichirou Noguchi)
慶應義塾大学 理工学部 谷 温之 (Atusi Tani)
慶應義塾大学 理工学部 野寺 隆 (Takashi Nodera)

1 はじめに

Cahn-Hilliard 方程式 [2] は 2 種類の金属の相分離現象を記述した方程式であり、片方の金属の 濃度を u(x,t) としたときに

$$\dot{u} = \Delta(f(u) - \alpha \Delta u), \qquad x \in \Omega$$
 (1.1)

$$n \cdot \nabla u = n \cdot \nabla (f(u) - \alpha \Delta u) = 0, \qquad x \in \partial \Omega$$
(1.2)

と表される. α は正定数であり, u は u の時間微分を表す. 典型的な非線形項 f(u) としては $f(u) = u^3 - u \Leftrightarrow f(u) = u(u - a)(u - 1), (0 < a < 1)$ が用いられる. 境界条件 (1.2) は「エ ネルギーの保存」と「粒子数の保存」を意味するものである. これに対して, ここで扱う離散型 Cahn-Hilliard 方程式は, 格子点 (i, j) $(i, j = 1, 2, \dots, N)$ でのみ値 u(i, j) を持ち,

$$\dot{u}(i,j) = (\beta^+ \Delta^+ + \beta^\times \Delta^\times)(f(u(i,j)) - (\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u(i,j))$$
(1.3)

と表される. $\beta^+, \beta^{\times} \in \mathbf{R}$ は正のパラメータであり、 $\alpha^+, \alpha^{\times} \in \mathbf{R}$ は正の値も負の値もとるパラ メータである. これらのパラメータは連続空間における Cahn-Hilliard 方程式を離散化したもの としては適さない値も含んでいる. 拡散項 $\Delta^+, \Delta^{\times}$ については

$$\Delta^{+}u(i,j) = u(i-1,j) + u(i+1,j) + u(i,j-1) + u(i,j+1) - 4u(i,j)$$
(1.4)

$$\Delta^{\times}u(i,j) = u(i-1,j-1) + u(i-1,j+1) + u(i+1,j+1) - 4u(i,j)$$
(1.5)

とする. f(x) としては 3 次関数

$$f(x) = px^{3} - qx, \qquad p, \ q > 0$$
(1.6)

を考え、境界条件 (1.2) に対して、周期境界条件

$$u(i,k) = u(i,N+k), \quad i = 0, \cdots, N+3, \quad k = 0, 1, 2, 3$$

$$u(k,j) = u(N+k,j), \quad j = 0, \cdots, N+3, \quad k = 0, 1, 2, 3$$
(1.7)

を考える. 離散型 Cahn-Hilliard 方程式はパラメータの値を変えることによって解がさまざまな パターンを示す [7]. また,負の拡散項 $-\Delta u$ と強い非線形項 Δu^3 を持つために数値的に不安定 であり,解を求める数値計算の方法には注意を要する.本稿では離散型 Allen-Cahn 方程式に関する Cahn 等 [1]の方法を参考にして,離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対してパラメータと解が示す パターンの関係について明らかにし,数値実験によってそれを実証する.また,分散メモリ型の 並列計算機を使った安定な方程式の解の求め方を示す.

2 平衡解の存在と安定性

離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対して平衡解が存在する条件と、安定になる条件を求める.平 衡解については次のように定義する.

定義 2.1 (平衡解) u が平衡解 $\iff \dot{u}(i,j) = 0$

ここでは形成されるパターンの形によって2つの平衡解

(A) チェック (Check) 型			(B) ストライプ (Stripe) 型				
$u(i,j) = \left\{ \left. $	b	if $i + j = \text{odd}$	$a(i, i) = \int$	`b'	if $j = \text{odd}$		(2.1)
	-b	if $i + j = even$	u(i,j) =	-b'	if $j = even$		

(b, b' は正定数)を考える. 離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (1.3), (1.7) に対してチェック型の平衡解 が存在するためには式 (2.1)(A) を式 (1.3), (1.7) に代入して,

$$u(i,j) = b \quad \Rightarrow \quad -f(b) - 8\alpha^+ b = 0, \qquad u(i,j) = -b \quad \Rightarrow \quad -f(-b) + 8\alpha^+ b = 0 \quad (2.2)$$

を満たすような b > 0 が存在すればよい. f(x) の定義 (1.6) から f(-x) = -f(x) となることに 注意すれば,式 (2.2) は一つの同じ条件

$$f(b) + 8\alpha^+ b = 0 \tag{2.3}$$

になる. 式 (2.3) が b = 0 以外の解をもつ条件は

$$q - 8\alpha^+ > 0 \tag{2.4}$$

である. 正の解は $b = \sqrt{(q - 8\alpha^+)/p}$ となり、これがチェック型の平衡解を与えている.

次に平衡解が安定になる条件を求める.はじめにヤコビ行列の固有値を使って平衡解の安定性 を求めるが,離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対してはこの方法による結果は不十分である.そこ で,それとは別の平衡解の近傍に不変領域を構成する方法を考え,平衡解の安定性を求めること にする.

2.1 離散型 Cahn-Hilliard 方程式のヤコビ行列の固有値による平衡解の安定性

離散型 Cahn-Hilliard 方程式のヤコビ行列は、対角成分として $-8f'(b) - 36(\alpha^+ + \alpha^{\times})$,非対角 成分として $4(f'(b) + 10\alpha^+ + 2\alpha^{\times})$, $4(f'(b) + 2\alpha^+ + 12\alpha^{\times})$, $-4(\alpha^+ + 2\alpha^{\times})$, $-8(\alpha^+ + \alpha^{\times})$, $-4\alpha^{\times}$ を持つ. ヤコビ行列のすべての固有値の実部が負であれば平衡解は安定となるが、このヤコビ行 列は固有値 $\lambda = 0$ を常に持っている.よって、ここでは固有値の実部の最大値が 0 となるような



図 1 離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対して平衡解が安定となるパラメータの範囲(横軸 α^+ , 縦 軸 α^{\times} , p = 2, q = 2). (A) ヤコビ行列の固有値を考えた場合, (B) 平衡解の近傍に不変領域を 構成することによって求めた場合 ($\varepsilon = 10^{-6}$)

場合を求め、安定なパラメータ領域とする.Gershgorin の定理を使うと、ヤコビ行列の固有値の 実部の最大値が 0 以下となるためには

$$2f'(b) + 9(\alpha^{+} + \alpha^{\times}) \geq |f'(b) + 10\alpha^{+} + 2\alpha^{\times}| + |f'(b) + 2\alpha^{+} + 12\alpha^{\times}| + |\alpha^{+} + 2\alpha^{\times}| + 2|\alpha^{+} + \alpha^{\times}| + |\alpha^{\times}|$$
(2.5)

となっていればよい. よって,離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対してチェック型の平衡解が安定と なる条件は式 (2.5),存在する条件は式 (2.4)となる. これを満たす領域を,ストライプ型の平衡 解に関する条件と共に 図1(A) に示す.

2.2 離散型 Cahn-Hilliard 方程式の平衡解の近傍での安定性

チェック型の平衡解の近傍における集合 $\Omega(\varepsilon)$

$$\Omega(\varepsilon) = \left\{ u(i,j) \middle| \begin{array}{l} i+j = \text{odd}, \quad u(i,j) \in \Omega^+(\varepsilon) \\ i+j = \text{even}, \quad u(i,j) \in \Omega^-(\varepsilon) \end{array} \right\}$$
(2.6)

 $\Omega^+(\varepsilon) = \{ x \in R \mid |x - b| \le \varepsilon \}$ (2.7)

$$\Omega^{-}(\varepsilon) = \{ x \in R \mid |x+b| \le \varepsilon \}$$
(2.8)

が不変領域になるようなパラメータの条件を求める. ただし, ε は十分に小さな正数とする. 平 衡解の近傍にこの不変領域が構成されたとき, その平衡解は安定であるとする.

 $\Omega(arepsilon)$ が不変領域になるためには, $\Omega(arepsilon)$ の四つの境界 $u(i,j)=b\pmarepsilon, u(i,j)=-b\pmarepsilon$ におい

て、u(i,j)が $\Omega(\varepsilon)$ の内側を向いていればよい. これは

For
$$\forall (m,n), u(m,n) \in \Omega(\varepsilon)$$

 $\dot{u}(i,j) \mid_{u(i,j)=b+\varepsilon} < 0, \dot{u}(i,j) \mid_{u(i,j)=-b+\varepsilon} < 0,$
 $\dot{u}(i,j) \mid_{u(i,j)=b-\varepsilon} > 0, \dot{u}(i,j) \mid_{u(i,j)=-b-\varepsilon} > 0$

$$(2.9)$$

と表される.格子点 (i,j)の周りでの u(m,n), $((m,n) \neq (i,j))$ の係数の値と, u(m,n)の値の関係を利用すると、この条件は

$$g(x) = -8f(x) - 36(\alpha^{+} + \alpha^{\times})x +4\{f(u_{1}) + (10\alpha^{+} + 2\alpha^{\times})u_{1}\} + 4\{f(u_{2}) + (2\alpha^{+} + 12\alpha^{\times})u_{2}\} +4(-\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})u_{3} + 4(-2\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})u_{4} + 4(-\alpha^{\times})u_{5}$$
(2.10)

に対して

For
$$\forall u_1, u_4 \in \Omega^-(\varepsilon), \quad \forall u_2, u_3, u_5 \in \Omega^+(\varepsilon)$$

 $g(b+\varepsilon) < 0, \quad g(b-\varepsilon) > 0$

$$(2.11)$$

が成り立てばよいことになる. ここで、 $u_1 \in \Omega^-(\varepsilon)$ に対して、 $h(u_1) = f(u_1) + (10\alpha^+ + 2\alpha^{\times})u_1$ の最大値、最小値を考えてみる. ε が十分小さいと考えるとh'(-b)の値によって $h(u_1)$ の $-b-\varepsilon \leq u_1 \leq -b+\varepsilon$ における最大値、最小値を求めることができる. つまり、

$$\operatorname{sgn}(x) = \left\{ egin{array}{ccc} 1 & ext{if } x > 0 \\ -1 & ext{other} \end{array}
ight.$$

とすれば,最大値 $h(-b+\varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(h'(-b)))$,最小値 $h(-b-\varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(h'(-b)))$ となる.ただし、これ らは -bの ε 近傍に h'(x)(=0)のゼロ点が入っている場合には成り立たない.しかし、 ε を十分 小さくすることによってこの場合は回避することができる.よって、

$$\frac{1}{4}\dot{u}_{max}(x) = -2f(x) - 9(\alpha^{+} + \alpha^{\times})x$$

+ $f(-b + \varepsilon_1) + (10\alpha^{+} + 2\alpha^{\times})(-b + \varepsilon_1) + f(b + \varepsilon_2) + (2\alpha^{+} + 12\alpha^{\times})(b + \varepsilon_2)$ (2.12)
+ $(-\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})(b + \varepsilon_3) + (-2\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})(-b + \varepsilon_4) + (-\alpha^{\times})(b + \varepsilon_5)$

 $\frac{1}{4}\dot{u}_{min}(x) = -2f(x) - 9(\alpha^{+} + \alpha^{\times})x$ $+ f(-b - \varepsilon_{1}) + (10\alpha^{+} + 2\alpha^{\times})(-b - \varepsilon_{1}) + f(b - \varepsilon_{2}) + (2\alpha^{+} + 12\alpha^{\times})(b - \varepsilon_{2})$ $+ (-\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})(b - \varepsilon_{3}) + (-2\alpha^{+} - 2\alpha^{\times})(-b - \varepsilon_{4}) + (-\alpha^{\times})(b - \varepsilon_{5})$ (2.13)

$$\varepsilon_{1} = \varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(f'(-b) + (10\alpha^{+} + 2\alpha^{\times})), \quad \varepsilon_{2} = \varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(f'(b) + (2\alpha^{+} + 12\alpha^{\times})),$$

$$\varepsilon_{3} = \varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(-\alpha^{+} - 2\alpha^{\times}), \quad \varepsilon_{4} = \varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(-\alpha^{+} - \alpha^{\times}), \quad \varepsilon_{5} = \varepsilon \cdot \operatorname{sgn}(-\alpha^{\times})$$
(2.14)

と定義したとき

$$\dot{u}_{max}(b+\varepsilon) < 0, \quad \dot{u}_{min}(b-\varepsilon) > 0$$
(2.15)

が不変領域を構成できる条件になる. つまりこの場合, チェック型の平衡解が存在する条件は式 (2.4), 安定となる条件は式(2.15)となる. これを満たす領域を, ストライプ型の平衡解に関する 条件と共に 図1(B) に示す.

3 並列計算機を使った離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解法

分散メモリ型の並列計算機を使って離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解を求めることを考える.境 界条件は周期境界条件 (1.7) とする.並列化の方法は領域分割法で,離散領域を $M \times M$ とし,並 列計算機のプロセッサを $c \times c$ 個とすると,一つのプロセッサの担当する格子点の数は $M/c \times M/c$ になる. これ以降はN = M/c とする.離散型 Cahn-Hilliard 方程式は4階微分 $\Delta^2 u$ を含むの で,各プロセッサのベクトルは各方向に境界部分を2列必要とする.このため、計算機が持つベ クトルの大きさは $(2 + N + 2) \times (2 + N + 2)$ になる.

離散型 Cahn-Hilliard 方程式は負の拡散項 $-\Delta u$ と強い非線形項 Δu^3 をもつために数値的に不 安定なので台形法で解を求める. 離散型 Cahn-Hilliard 方程式を

$$\dot{u}(i,j) = H(u(i,j)) \tag{3.1}$$

とおけば、時刻 $n\Delta t$ における解 u_n から u_{n+1} を求めるためには、非線形の連立方程式

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta t}{2} (H(u_n) + H(u_{n+1}))$$
(3.2)

を解けばよい. この方程式を変形して,

$$u_{n+1} - \frac{\Delta t}{2} H(u_{n+1}) - \left(u_n + \frac{\Delta t}{2} H(u_n)\right) = 0$$
(3.3)

とし、未知ベクトル $u = u_{n+1}$ の連立方程式

$$G(u) = 0 \tag{3.4}$$

と考える. これをニュートン法で解くと

$$\int JG(u^{(m)}) \, \delta u = G(u^{(m)}) \qquad m = 1, 2, 3, \cdots$$

$$u^{(m+1)} = u^{(m)} - \delta u$$

$$(3.5)$$

となる.以下、この計算の詳細部分について示す.

3.1
$$H(u(i,j)) = \Delta^+(f(u(i,j)) - \Delta^+u(i,j))$$
の計算

離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解法は $H(u(i,j)) = \Delta^+(f(u(i,j)) - \Delta^+u(i,j))$ の計算を組み合わせることによって実行される. 拡散項 $\Delta^+u(i,j)$ の計算を次のように定義する.

Laplacian(u, start, end, lap){

$$i, j = start, \dots, end \quad lap[i][j] - = 4.0u; lap[i][j - 1] + = u; \quad lap[i][j + 1] + = u; lap[i - 1][j] + = u; \quad lap[i + 1][j] + = u;$$

$$(3.6)$$

これを用いると、 $H(u(i,j)) = \Delta^+(f(u(i,j)) - \Delta^+u(i,j))$ の計算は以下のように記述することができる.

H(u,ans){

Laplacian(u, 2, N + 1, tmpa); $i, j = 1, \dots, N + 2 \quad tmpb[i][j] = -tmpa[i][j];$ $i, j = 2, \dots, N + 1 \quad tmpb[i][j] + = f[i][j];$

(3.7)

Laplacian(tmpb, 1, N+2, ans);

Boundary; }

193

これらの計算は全て並列計算機上でのアルゴリズムであるが、Boundaryの部分以外はプロセッ サごとに独立に計算することができる.Boundaryの部分については次に述べる.

3.2 分散メモリ型の並列計算機における境界部分の扱い方

シングルプロセッサの計算機では容易な境界部分の扱いも、並列計算機では注意を要する. 簡 単のため 1 次元の場合を例にとり、 $\Delta(f(u) - \Delta u)$ を計算することを考える. この場合 $\Delta u(i) = u(i-1) + u(i+1) - 2u(i)$ である. 2 次元の拡散 ($\Delta^+ u$)の計算方法が関数 (3.6)のようになることを考慮すると、1 次元で境界条件を含んだアルゴリズムは関数 Laplacian を呼んだあとに

$$u(2) + = u(n+2), \quad u(N+1) + = u(1)$$

とするべきである. しかし, この方法では式 (3.7)の関数 H(u, ans) に境界部分の足し合わせが2 回現れる. これは並列計算機のプロセッサ間の通信が2回必要であることを意味する. 分散メモ リ型の並列計算機においては, 通信の量が同じでもその回数が大きなタイムロスとなるので通信 回数は少ない方が好ましい. 関数 H の中の二つめの Laplacian に対応するΔu の計算が線形であ ることを考えると, 関数 H の最後の部分 (関数中の Boundary の部分) で

$$u(2) + = u(N+2), \quad u(N) + = u(0),$$

 $u(3) + = u(N+3), \quad u(N+1) + = u(1)$

とすることにより境界部分を含んだアルゴリズムが構成できる.2次元の場合には、以上のこと をまわりの8個のプロセッサについて行えばよい.

3.3 連立1次方程式の解法

ニュートン法の反復ごとに大型疎行列を係数とする連立 1 次方程式を解かなければならない. 係数行列が疎で非常に大きく,計算には分散メモリ型の並列計算機を使うことを考え合わせると, 非定常反復法である BiCGStab(ℓ)法[8]を用いるのが有効である. BiCGStab(ℓ)法は並列計算機 への実装が容易で,並列化の効果が高く,分散メモリ型の並列計算機で特に速く近似解を求める ことができる [5]. さらに,係数行列は任意のベクトルとの積という形でしか現れないことより, ニュートン法では,関数 G のヤコビ行列 $JG(u^{(m)})$ と任意のベクトル x との積 $JG(u^{(m)})x$ が計 算できればよいことになる. ところが,式 (3.4)で表される関数 G(u) は関数 H(u)の部分以外は 線形であるから,実際には $JH(u^{(m)})x$ が計算できればよい. $JH(u^{(m)})x$ については, Δu の計 算が線形であることを考えると,

$$JH(u^{(m)})x = J\Delta(f(u^{(m)}) - \Delta u^{(m)})x$$

= $\Delta(Jf(u^{(m)}) - J\Delta u^{(m)})x$
= $\Delta(f'(u^{(m)})x - \Delta x)$ (3.8)

とすることができる. この関数は、式 (3.7)の関数 H をわずかに修正することで構成できる.

4 数値実験

離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (1.3), (1.7) に対して数値実験を行った.計算には富士通の分散 メモリ型の並列計算機 AP1000 を使用した. AP1000 のプロセッサ数は 64 個である. 離散空間



図 4.1 通常の Cahn-Hilliard 方程式 $\alpha^+ = 1.0, \, \alpha^{\times} = 0.5, \, T = 20.013$



 $\alpha^+ = -0.25, \, \alpha^{\times} = 0.5, \, T = 2.909$

のメッシュは 64×64 とし, 連立 1 次方程式の解法には BiCGStab(ℓ) 法を使用した. 非線形項 $f(x) = px^3 - qx$ については p = 2, q = 2 とした. 変数の初期値は平均が 0 となるような区間 [-0.5, 0.5] において一様な乱数で決定した. 図は u(i, j) < 0 の部分は黒, $u(i, j) \ge 0$ の部分は白 で示す. 拡散係数は $\beta^+ = \beta^{\times} = 1$ とし, $\alpha^+, \alpha^{\times}$ をパラメータとして数値実験を行う.

実験は 図1(B) において4つに分けられたパラメータ領域からぞれぞれ一つずつ値を選んで行った. 図4.1 は、チェック型、ストライブ型の平衡解がどちらも安定となっていない領域からパラメータを選んで行った実験の結果である. 計算には905 秒を要している. 図4.2、図4.3 はチェック型、ストライブ型の平衡解がそれぞれ安定となっている領域からパラメータを選んで行った実験の結果である. 計算にはそれぞれ 597 秒、345 秒を要している. 加えて 図4.4 にはチェック型、ストライブ型の平衡解がどちらも安定となる領域からパラメータを選んで行った実験の結果を示した.

5 まとめ

離散型 Cahn-Hilliard 方程式でチェック型やストライプ型などの平衡解が安定となり、パターン が出現する拡散のパラメータの値の範囲を $\alpha^+ \alpha^{\times}$ 平面で求めることができた. 平衡解が安定とな る条件を求めるために、ヤコビ行列の固有値による方法に加え、平衡解の近傍に不変領域を構成 する方法を考えた. 不変領域を構成する方法を使うことにより、固有値による方法に比べて、正 確なパラメータ領域を求めることができた.

数値実験ではメモリ分散型の並列計算機を使った Cahn-Hilliard 方程式の安定な解析方法を示 した. 並列計算機を使った非線形方程式の数値計算は一般に複雑になりがちであるが、それを単 純化することができた. 特に、ニュートン法において出現する連立1次方程式を解く部分におい て BiCGStab(ℓ) 法を使い、反復法の性質を利用することによってヤコビ行列の計算方法、境界部 分の扱い方、拡散項の計算方法などを単純化することができた.



参 考 文 献

- J. W. Cahn, S. N. Chow, and E. S. Van Vleck. Spatially discrete nonlinear diffusion equations. Rocky Mountain J. Math., Vol. 25, No. 1, pp. 87-118, 1995.
- [2] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. J. Chem. Phys., Vol. 28, No. 2, pp. 258-267, 1958.
- [3] R. Edwards. Stable pattern in spatially discrete reaction-diffusion models. Dynam. Syst. Appl., Vol. 5, pp. 245-262, 1996.
- [4] T. Nodera and Y. Noguchi. A note on BiCGStab(ℓ) method on AP1000. *IMACS Lecture* Note to appear, 1998.
- [5] 野寺, 野口. AP1000 における BiCGStab(ℓ) 法の有効性について. 情報処理学会論文誌, Vol. 38, No. 11, pp. 2089–2101, 1997.
- [6] 野口雄一郎. 離散格子上での非線形拡散方程式におけるパター ン形成について. 慶應義塾大学 理工学研究科 数理科学専攻 修士論文, 1998.
- [7] 野口,谷,野寺.並列計算機による Cahn-Hilliard 方程式の数値解析. 情報処理学会 HPC 研究
 会, Vol. 68, pp. 51–56, 1997.
- [8] G. L. G. Sleijpen and D. R. Fokkema. BiCGSTAB(ℓ) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum. *ETNA*, Vol. 1, pp. 11-32, 1993.