計算工学講演会論文集 Vol. 28 (2023 年 5 月) 計算工学会

相分離問題の粗視化のための particle dynamics model

A particle dynamics model for coarse-grained phase separation problems

降籏 大介 [1)]
Daisuke Furihata

[1)]博 (工) 大阪大学 サイバーメディアセンター 教授 (〒 560-0043 大阪府豊中市待兼山町 1-32, E-mail: daisuke.furihata.cmc@osaka-u.ac.jp)

The Cahn-Hilliard equation describing phase separation phenomena is a nonlinear partial differential equation with a wide range of applications and is in high demand for numerical calculations, but stable and fast numerical calculations are somewhat difficult. It has been proven that this solution converges to the solution of the Hele-Shaw problem in the limit of one coefficient parameter to zero, which is mathematically very satisfactory as an order-reduction problem of the Cahn-Hilliard equation. However, the numerical computation of the Hele-Shaw problem is also difficult. Therefore, we observed the coarsening process of phase separation phenomena produced by the Cahn-Hilliard equation and subsequently considered a particle dynamics model that roughly reproduces the process.

Key Words : *phase separation problem, Cahn–Hilliard equation, Hele–Shaw problem, order-reduction problem, coarsening process*

1. はじめに

Cahn–Hilliard 方程式系統の問題（相分離現象などのモデル方程式）の数値解析を考えたい．この問題は質量保存やエネルギー減少性といった大域的な性質を持っており、こうした性質を持つ問題は多い．これらの性質を保存する数値解析法である構造保存数値解法（structure-preserving method）は、国内外で一定程度の発展を遂げており、例えば SciCADE という国際研究集会ではこのトピックに関するセッションが毎回開催される．structure-preserving method は、数値解の性能が優れていることが多く、ODE ではハミルトン系をベースに取り扱うことが一般的だが，PDE では変分構造を介して考えることができ，日本発の離散変分導関数法などがその例である．これらの手法は、微積分など「連続極限で定義されるオペレーター」を離散的に定義し一貫性を保証するアプローチであり、数学的に厳密であるが，計算量の大きさが難点である．

これらの現行の枠組みによる研究はすぐれて進展しているが，計算量によって対象問題の規模に制約がかかってしまう現状の打破は難しい．そのため，根本的に異なるアプローチも検討すべき段階と考える．そこで，Cahn–Hilliard 方程式による記述が代表的な相分離問題に対し，その時間発展の様相が初期状態 (局所性が強い，変化が高速) と中後期状態 (大域的効果がある，変化は大変に緩慢) とに大きく分かれることを鑑みて，この後者 (以降，粗視化過程 (coarsning process) とよぶ) を別モデル (particle dynamics model) にてシミュレーションすることを考える．

2. 相分離問題のモデル方程式 Cahn–Hilliard 方程式の既存の数値解法

Cahn–Hilliard 方程式に対する数値解法としては，まずは通常の解法である method of line がある．これは時間方向の離散化幅 Δt を小さくすれば一応使えるが，質量保存性，エネルギー減少性はときおり破れ，物理的にみておかしな数値解になりがちである． とくに長時間発展には不適である．構造保存数値解法としての離散変分導関数法 (差分法，有限要素法等いろいろあり，なかには線形スキームもある) は，長時間発展も考えると現在の本命といえる．とくに細かいパラメータ調整等もなくきちんと動作し，数値解の様子が物理的におかしいということもあまり無い．数値解の一意存在性や安定性が証明できるケースもある．ただし，多くの場合数値スキームが時間方向に陰的で，計算量は大きめとなる．多段化により線形スキームを設計する方法論もあるが，問題の非線形性が多項式の形状でないと使えず，また，次数が 4 次を越えると数値的な不安定性が強くなることなどの制限がある．このように，Cahn–Hilliard 方程式に対して妥当な数値解を高速に得るという方法論についてはは充実しているとはまだ言い難い．

3. Cahn–Hilliard 方程式の order reduction

Cahn–Hilliard 方程式のようなモデル方程式の数値計算量を低減するための一つのアプローチに，問題の order reduction がある．つまり，解がなんらかの意味でほぼ同等であるが，問題の難易度が異なる別の問題に (数学的に) 置き換えることを考えるのである．

これについては，Alikakos らが Cahn–Hilliard 方程式中の係数である ϵ について $\epsilon \to 0$ のとき，この粗視化過程の相の境界面の挙動が領域境界面の挙動問題である Hele–Shaw 問題の解に収束することを証明してい

る [1]．Hele–Shaw 問題は領域境界の挙動を記述する方程式であるから，これは Cahn–Hilliard 方程式に対して数学的に問題対象の次元が 1 低く，文字通りの order reduction となっており，数学的にはほぼ完璧な成果である．しかし Hele–Shaw 問題の数値解析はトポロジー変化も含む厄介な問題であり，むしろ「Hele–Shaw 問題の数値解法として Cahn–Hilliard 方程式を解く方法」が提案される状態であるため，Alikakos らの成果を持って Cahn–Hilliard 方程式の数値計算の計算量の低減下をはかることはできないのが現状である．

4. 相分離問題の粗視化過程の荒いモデリングへ

数学的な order reduction の成果が計算量低減に寄与しないため，他のアプローチを取る必要がある．そこで，アプローチの原点として，Cahn–Hilliard 方程式を数学的な手法で order reduction するのはいったん止め，もともとの相分離現象における粗視化過程のみを再現する素朴なモデルを考えることにする．ただし，その際，少なくとも質量保存性を再現するように考えたい．というのも，そうしないと物理的にかなり奇妙な結果になりうるからである．

そして，Cahn–Hilliard 方程式によって得られる数値解によりこの粗視化過程を観察すると，まず，全体に「流体」現象のような挙動であることに気づく．また，分離した小さな領域同士に，主に距離に依存した引力的な相互作用がありそうなことも観察される．ただし，全体が流体的挙動であることを考慮すると，領域間に他の領域があるときにその挟まった領域を越えて力が働くモデルをたててしまうと物理的な意味で違和感がある．そこで，領域間に働く力は，間に領域が挟まっているかいないかによってきちんと変わるようなモデルが望ましい．観察と考察により上記のような知見を得られることから，粗視化過程に対して 以下のような particle モデルを考えることができる．

- $u \cong 1$ で半径が一定の球 (particle) の位置移動のみを記述する．
- particle は増減しないし，大きさも変わらないし，重ならない (後述する退席排除効果による)．これによって質量保存性を確保する．
- particle 同士は，互いの距離に応じて引き合うものとする．とりあえず逆二乗則に近いものを考える．
- ただし，particle が重ならないように，非常に近い場合は体積排除効果的な力が働くものとする．
- また，近くの particle を何重にも越えての力はあまり働かない (流体的挙動を考慮した緩和隣接関係)

  これは例えば下記のようにしてモデル化する．
  1. 空間上の particle をそれぞれ母点として空間を Voronoi 分割し，Voronoi 領域の隣接関係から作られる隣接行列を M_{ad} とする．
  2. モデルパラメータ p (正整数) に対し，緩和隣接行列を $M_p \stackrel{\text{def}}{=} (M_{ad})^p$ とし，M_p によって隣接していると判断される particle 間でのみ力が発生するとする．
- 力と速度の関係については，Newton 力学ではなく，化学物質の易動度の概念にもとづいて particle に働く力 $\propto$ particle の速度 とする．
- 流体抵抗を鑑みて，particle の速度には上限があるものとする (tanh 関数などを用いて実現)．

このモデリングを数式にすると以下のようなものになる．

$$\frac{d\boldsymbol{x}_i(t)}{dt} = V_c\left(\frac{\tanh(C_3\tilde{\boldsymbol{v}}_i(t))}{C_3\|\tilde{\boldsymbol{v}}_i(t)\|}\right)\tilde{\boldsymbol{v}}_i(t),$$
$$\tilde{\boldsymbol{v}}_i(t) = \sum_j \boldsymbol{f}_{ij}(t),$$

$$\boldsymbol{f}_{ij}(t) = \begin{cases} C_1\dfrac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{\|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i\|^3} & : \ (\text{条件 i}), \\ -2C_1\dfrac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{\|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i\|^3} & : \ (\text{条件 ii}), \\ 0 & : \ (M_p)_{ij} \text{ が偽}, \end{cases}$$

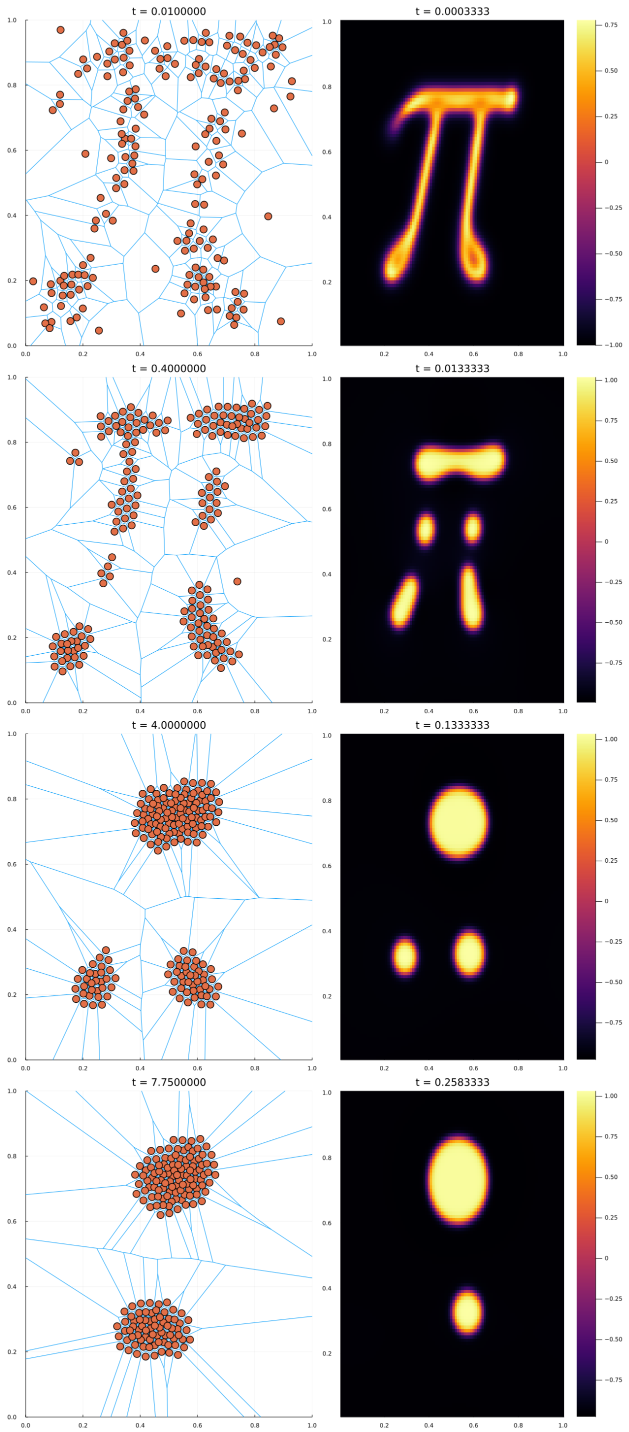
ただし V_c, C_1, C_3 は定数で，条件 i は $(M_p)_{ij}$ が真かつ $\|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i\| \geq r_{\mathrm{cri}}$ であること，条件 ii は $(M_p)_{ij}$ が真かつ $\|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i\| < r_{\mathrm{cri}}$ であることである．また，$\boldsymbol{x}_i(t)$ は i-番目の particle, $M_p = (M_{\mathrm{ad}})^p$ で p は正整数である．そして，M_p の定義に含まれる計算には bool 代数を用いる．つまり， $a \cdot b = a$ and b, $a + b = a$ or b とする．M_{ad} は Voroni 領域の隣接関係に基づく隣接行列である．つまり，母点 $\boldsymbol{x}_i$ による Voronoi 領域 V_i と母点 $\boldsymbol{x}_j$ による Voronoi 領域 V_j とが隣接関係にあるときに $(M_{\mathrm{ad}})_{ij}$ は真 (true) で，そうでないときは偽とする．

5. 数値計算例

図-1 に本モデルによる数値計算結果の例と，同等の初期値から計算を進めた Cahn–Hilliard 方程式の数値計算例を並べて図示する．あくまで観察による主観的な評価にはなるが，一定のモデリングはできているように思われる．講演時にはこの数値計算例のより詳細な解説も行いたい．

6. 現状と問題点

数値計算例などから，次のことが言えるように思われる．まず，良い点として，いくつかの「非常に遅いダイナミクス」が実際に particle モデルで再現されることが挙げられる．この挙動の遅さは、領域の移動や形状変化過程の重要な特徴の一つなので，この事実は大きな意味をもつと考えられる．また，領域の移動速度がそのサイズに依存することも，もとの問題の特徴をよく再現している．この particle モデルにはこうした効果を直接的には組み込んでいないため，この再現性は正直意外に感じるところである．また，これはこの particle モデルでは当然であるが，質量保存則が保たれていることも良い性質と言って良い．



図–1 左: **particle** モデルによる数値解 (青線は **particle** を母点とする **Voronoi** 領域の境界), 右: **Cahn–Hilliard** 方程式による数値解 (**method of line** による)

当然，問題も多く残っており，例えば，具体的なモデルを実装するために複数ある未知パラメータの値を決定しないといけない状況について，現状ではどのように決定すべきか，知見が得られていないという問題がある．これは今後の課題である．また，これはこのモデルでは当然であるが，領域の誕生・消滅を陽に見ることができない点が問題となりうることも考えられる．ただしこれは，領域の形状を考えなくて良い，すなわち，トポロジーの変化を追わなくて良いということであり，そうした意味ではむしろ利点と捉えるべきである．また，質量保存性は自然に再現できているが，Cahn–Hilliard 方程式の解がもつエネルギー減少性についてはこのモデルはどのような性質を持つのかが不明である．これについては particle の集合から領域境界を定義・計算するといったトポロジーの計算が必要になると思われるため容易ではない．また，この particle モデルは計算過程に Voronoi 分割を含むため 3 次元問題での計算量増大が懸念されるかもしれないが，これについては Dwyer らなどにより精力的に高速な計算方法の研究が進んでおり [2]，本質的に大きな懸念ではないと期待して良いと思われる．

参考文献

[1] N. D. Alikakos, P. W. Bates and X. Chen, Convergence of the Cahn–Hilliard equation to the Hele–Shaw model, Arch. Rat. Mech. Anal. 128 (1994), 165–205.

[2] R. A. Dwyer, A faster divide-and-conquer algorithm for constructing delaunay triangulations, Algorithmica 2 (1987), 137–151. https://doi.org/10.1007/BF01840356