Cahn–Hilliard 方程式の数値解析の関連論文

香川渓一郎

2020 年 5 月 28 日

目次

1 Cherfils, Petcu, Pierre (2010) day:200526

1.1 論文情報

Cherfils, Laurence, Madalina Petcu, and Morgan Pierre. "A numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions." Discrete Contin. Dyn. Syst 27.4 (2010): 1511-1533.

1.2 何に関する論文で何を示したのか

動的境界条件下における Cahn–Hilliard 方程式の有限要素空間半離散化を考える．考える問題は次の通り

$$
\begin{aligned}
u_t &= \Delta w, \quad t > 0, x \in \Omega \\
w &= f(u) - \Delta u, \quad t > 0, x \in \Omega \\
(1/\Gamma_s)\, u_t &= \sigma_s \Delta_{\|} u - \lambda_s u - g_s(u) - \partial_n u, \quad t > 0, x \in \Gamma \\
\partial_n w &= 0, \quad t > 0, x \in \Gamma
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

内部で Cahn–Hilliard 方程式を満たし，境界では Allen–Cahn 方程式を満たす．ここに空間領域は 2, 3 次元の平板とする．即ち

$$
\Omega = \Pi_{i=1}^{d-1} \left(\mathbb{R}/\left(L_i \mathbb{Z}\right)\right) \times (0, L_d), \quad L_i > 0, i = 1, \ldots, d, \quad d = 2 \text{ or } 3. \tag{1.2}
$$

1, 2 次元方向には周期境界条件を課す．解に十分な正則性があると仮定して，エネルギーノルムと弱いノルムで最適な誤差評価を示す．解の正則性が低い場合には弱位相で収束することを示す．また時間離散化のための後方オイラースキームに基づく完全離散問題の安定性を示す．いくつかの数値計算結果は本手法の適用性を示すものである．

1.3 先行研究と比べてスゴイこと

動的境界条件は二元混合系における相分離現象での境界の影響を記述したプロトタイプモデルである．この動的境界条件のモデルは閉じた系での相分離現象のモデルとして Fischer, Maass, Dieterich (1997) [4], Fixcher, Maass, Dieterich (1998) [3], Kenzler, et al. (2001) [6] によって考えられている．これらでは有限差分の枠組みを用いた数値的なスキームが検討されている．本論文では新たな離散化のための有限要素法を提案して解析する．Elliott, French, Milner (1989) [2] によって提案された，標準的な Cahn–Hilliard 方程式に対して提案された分割スキームを拡張した，空間半離散スキームを提案する．（同様の分割スキームは他の Cahn–Hilliard 方程式に対しても拡張されている．）

1.4 論文の核となるモノ

本論文の主定理である定理 3.3 では空間分割幅 h が 0 に近づくときのエネルギーノルムと弱位相でのノルムの差の最適誤差評価を述べている．

1.5 どのような手法で示したのか

定理 3.3 の証明の概要は放物型問題の標準的な手法を用いたが，ここではいくつかの評価がより複雑になる．時間離散化には後方オイラースキームを用いた完全離散スキームを提案している．完全離散スキームの解はメッシュ依存性がなく安定であり，分割数無限大の極限で平衡に収束することを示した．最後に半陰解法に基づく 2 次元空間での FreeFem++ ソフトウェアによる数値シミュレーションを示す．この問題に有限要素法を適用することは理論的，実用的に興味深い．

1.6 今後の展望や課題

1.7 この論文を引用している論文

1.8 この論文が引用している主要な先行研究

2 Cherfils, Petcu (2014) day:200526

2.1 論文情報

Cherfils, Laurence, and Madalina Petcu. "A numerical analysis of the Cahn–Hilliard equation with non-permeable walls." Numerische Mathematik 128.3 (2014): 517-549.

2.2 何に関する論文で何を示したのか

非透水性壁（non-permeable walls）を持つ有界領域における Cahn–Hilliard 方程式の数値解析を行った．ここでの動的境界条件は Goldstein, Miranville, Schimperna (2011) [5] によって考案された次の GMS 型動的境界条件を考察する．

$$\left\{\begin{array}{l} \rho_t = \Delta\mu, \quad t>0, x\in\Omega \\ \mu = -\Delta\rho + f(\rho), t>0, x\in\Omega \\ \rho_t = \delta\Delta_\Gamma\mu - \partial_n\mu, t>0, x\in\Gamma \\ \mu = -\sigma\Delta_\Gamma\rho + \lambda\rho + g(\rho) + \partial_n\rho, t>0, x\in\Gamma \end{array}\right. \tag{2.1}$$

考える空間領域は１方向に有限の厚さを持ち残りの１，２次元方向には周期性を課す．

$$\Omega = \Pi_{i=1}^{d-1}\left(\mathbb{R}/\left(L_i\mathbb{Z}\right)\right)\times\left(0, L_d\right), \quad L_i>0, i=1,\ldots,d, \quad d=2 \text{ or } 3 \tag{2.2}$$

この動的境界条件は二元物質と壁との相互作用を記述するために導入されたものである．この方程式の数値解析を行うには，空間変数に対して有限要素法を用いて半離散化され厳密解と近似解との誤差評価を得る．また時間離散化のための後方オイラースキームに基づく完全離散スキームの安定性を示した．理論的な結果を支持するための数値シミュレーションを行った．

2.3 先行研究と比べてスゴイこと

異なる動的境界条件に対する数値計算を行った先行研究として Cherfils, Petcu, Pierre (2010) [1] がある．これと同様のアプローチから始めるがモデルの違いにより多少の異なった扱いを行う．[1] の結果と比較すると境界での挙動が異なるが内部でのパターンは似ていることが示される．

2.4 論文の核となるモノ

空間変数については有限要素法を用いて半離散化を行い，時間離散化については後方オイラースキームに基づく完全離散スキームの安定性を考察する．

2.5 どのような手法で示したのか

[1] と同様の半離散化，後方オイラースキームを用いる．

2.6 今後の展望や課題

2.7 この論文を引用している論文

2.8 この論文が引用している主要な先行研究

3 Li, Lin, Gao (2019) day:200527

3.1 論文情報

Li, Na, Ping Lin, and Fuzheng Gao. "Energy law preserving finite element scheme for the cahn-hilliard equation with dynamic boundary conditions." Communications in Computational Physics 26.5 (2019): 1490-1509.

3.2 何に関する論文で何を示したのか

Liu, Wu (2019) [?] が提案した，内部と境界で Cahn–Hilliard 方程式を満たす動的境界問題についてエネルギー保存則を満たす数値シミュレーション手法を開発した．この動的境界問題は Miranville, Zelik (2005) [?] によって触発されて新たに導入された次に示す問題である．

$$\begin{cases} \phi_t = \Delta\mu, & \text{in } \Omega\times(0,T) \\ \mu = -\Delta\phi + F'(\phi), & \text{in } \Omega\times(0,T) \\ \partial_{\mathbf{n}}\mu = 0, & \text{on } \Gamma\times(0,T) \\ \phi|_\Gamma = \psi, & \text{on } \Gamma\times(0,T) \\ \psi_t = \Delta_\Gamma\mu_\Gamma, & \text{on } \Gamma\times(0,T), \\ \mu_\Gamma = -k\Delta_\Gamma\psi + \psi + \partial_{\mathrm{n}}\phi + G'(\psi), & \text{on } \Gamma\times(0,T) \\ \phi|_{t=0} = \phi_0(x), & \text{in } \Omega \\ \psi|_{t=0} = \psi_0(x) := \phi_0(x)|_\Gamma\,, & \text{on } \Gamma \end{cases} \tag{3.1}$$

モデル方程式を空間方向には連続有限要素法を，時間方向には中点スキームによって離散化を行い，動的境界条件を持つモデルに対する数値計算手法の離散エネルギー則を導出した．比較的粗いメッシュの場合でもこの動的境界条件を持つ Phase-field モデルの計算においてエネルギー保存則を保つ手法が効果を発揮することを確認した．

3.3 先行研究と比べてスゴイこと

[?] によって提案された動的境界条件は tomoving contact line 条件 (cf.) と密接な関係がある．既存の動的境界条件と比較して，この境界条件はエネルギー散逸のための十分条件として選択されているのではなく，運動的 (kinematic)，エネルギー的関係と力のつり合い即によって一意に決定されている．その結果としてより一般的な境界での力 (general boundary force) の関係については，質量保存，エネルギー散逸，力のつり合いなどの重要な物理的拘束条件を自然に満たす．
phase-field モデルの数値シミュレーションは多相流 (multiphase flow) やそのダイナミクスを視覚的に直感的に表現するための重要な手段となっている．phase-field モデルを解くための数値計算手法は次に上げるように様々に開発されてきた．

- フーリエスペクトル法 (Fourier-spectral method)
- スペクトル法 (spectral method)
- 適応移動メッシュ法 (adaptive moving mesh method)
- 有限差分法 (finite difference method)
- 有限要素法 (finite element method)
- 不連続有限要素法 (discontinuous finite element method)

これらの手法は完全離散系に引き継がれるエネルギー則を保つことにはあまり注意が払われていなかった．数値計算においてはより長い時間に渡って系の正しいダイナミクスを捉えるために，エネルギー則が保たれることは非常に重要である．また界面近傍では急激な変化が起こるため，メッシュサイズや時間ステップを適切に制御できなければ，エネルギー則が成り立たないような誤った数値解が得られる可能性がある．
近年，次に挙げるエネルギー則を保つ新しい数値解析手法の開発が行われた．

- 不変エネルギー四重化法 (invariant energy quadratization approach / IEQ 法)
- スカラー補助変数法 (scalar auxiliary variable approach / SAV 法)

IEQ 法は新しい変数の組を用いて体積ポテンシャルを二次形式に変換することで全ての非線形項を半明示的に扱い，新しい変数の支配方程式が線形楕円型方程式となるように離散化をする．SAV 法は IEQ 法の欠点を改良したものである．

3.4 論文の核となるモノ

Phase-field モデルのエネルギー則を保つ方法に焦点を当てている点.

3.5 どのような手法で示したのか

モデル方程式を空間方向には連続有限要素法を，時間方向には中点スキームによって離散化を行う.

3.6 今後の展望や課題

3.7 この論文を引用している論文

3.8 この論文が引用している主要な先行研究

参考文献

[1] Laurence Cherfils, Madalina Petcu, and Morgan Pierre. A numerical analysis of the cahn-hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, Vol. 27, No. 4, pp. 1511–1533, 2010.

[2] C. M. Elliott, D. A. French, and F. A. Milner. A second order splitting method for the Cahn-Hilliard equation. *Numerische Mathematik*, Vol. 54, No. 5, pp. 575–590, 1989.

[3] H. P. Fischer, P. Maass, and W. Dieterich. Diverging time and length scales of spinodal decomposition modes in thin films. *Europhysics Letters*, Vol. 42, No. 1, pp. 49–54, 1998.

[4] Hans Peter Fischer, Philipp Maass, and Wolfgang Dieterich. Novel surface modes in spinodal decomposition. *Physical Review Letters*, Vol. 79, No. 5, pp. 893–896, 1997.

[5] Gisle Ruiz Goldstein, Alain Miranville, and Giulio Schimperna. A Cahn-Hilliard model in a domain with non-permeable walls. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, Vol. 240, No. 8, pp. 754–766, 2011.

[6] R. Kenzler, F. Eurich, P. Maass, B. Rinn, J. Schropp, E. Bohl, and W. Dieterich. Phase separation in confined geometries: Solving the Cahn-Hilliard equation with generic boundary conditions. *Computer Physics Communications*, Vol. 133, No. 2-3, pp. 139–157, 2001.