

離散格子上での Cahn-Hilliard 方程式におけるパターン形成

野口 雄一郎[†] 谷 温之[†] 野寺 隆[†]

離散空間において Cahn-Hilliard 方程式や Allen-Cahn 方程式と同じ形をした非線形拡散方程式を考える。これらの方程式は Lyapunov 関数を持ち、方程式の解はパラメータの値によってチェックヤストライプなどの形をしたパターンを形成する。ヤコビ行列の固有値を調べる方法と、平衡解の近傍に不変領域を構成する方法の2つを使って、このパラメータの値とパターンの形についての関係を求める。これらの方程式は数値的に不安定であるので、その解析方法には注意を要する。そのため解法には安定な陰解法である台形法を使い、計算には分散メモリ型の並列計算機を使って数値実験を行う。台形法で現れる連立1次方程式を解く部分では、反復法の BiCGStab(ℓ)法を使うことで、アルゴリズムの並列計算機への実装を単純化することができる。最後に、分散メモリ型の並列計算機 AP1000(富士通)を使った数値実験によって、さまざまなパラメータの値に対してパターンが出現することを実証する。

Pattern Formations in the Spatially Discrete Cahn-Hilliard Equation

YUUCHIROU NOGUCHI,[†] ATUSI TANI[†] and TAKASHI NODERA[†]

We consider spatially discrete nonlinear diffusion equations similar to Cahn-Hilliard's or Allen-Cahn's. These equations have a Lyapunov function and solutions bring about checkerboard or striped patterns for various values of parameters. Through the analysis of the eigenvalues of Jacobian matrices and the construction of the invariant sets around the equilibrium, we investigate the relations between the parameters and the pattern formations. These equations are numerically unstable, and the methods for numerical simulations have to be carefully constructed. We use the implicit trapezoidal method for the analysis of nonlinear diffusion equations on a parallel computer. In solving the linear systems of equations that arise from the trapezoidal method, we use an iterative solver, the BiCGStab(ℓ) method, and the algorithm for it is easily implemented on a parallel computer. Finally, numerical simulations on a parallel computer Fujitsu AP1000 present the pattern formations for the various values of parameters.

1. はじめに

離散空間上において Cahn-Hilliard 方程式や Allen-Cahn 方程式と同じ形をした非線形拡散方程式を考える。これらの現象は実際に離散格子における現象であり、必ずしも連続空間で微分方程式を考える必要はない²⁾。実際、本稿で扱う離散空間上の方程式のパラメータは、連続空間における偏微分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。

Cahn-Hilliard 方程式³⁾は2種類の金属が均一に混ざった状態から、だんだん分離していく現象(スピノーダル現象)をモデル化した方程式であり、2種類の金属のうちの1つの濃度を $u = u(x, t)$ とするとき、

$$\dot{u} = \Delta(f(u) - \alpha \Delta u), \quad x \in \Omega, \quad (1)$$

$$n \cdot \nabla u = n \cdot \nabla(f(u) - \alpha \Delta u) = 0, \quad x \in \partial\Omega \quad (2)$$

と表される。ただし、 α はパラメータであり、 $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ として2次元領域を考え、 x はその領域上の座標を表すものとする。また $f(u)$ は3次関数で、 $f(u) = u^3 - u$ や $f(u) = u(u-a)(u-1)$ ($0 < a < 1$) などが用いられる。境界条件(2)は領域内の粒子の数およびエネルギーの保存を意味する。

Cahn-Hilliard 方程式と関係の深い方程式として Allen-Cahn 方程式¹⁾がある。この方程式は

$$\dot{u} = -f(u) + \alpha \Delta u, \quad x \in \Omega, \quad (3)$$

$$n \cdot \nabla u = 0, \quad x \in \partial\Omega \quad (4)$$

と表される。非線形項 $f(u)$ は、Cahn-Hilliard 方程式と同様に3次関数が用いられる。

離散空間上において Allen-Cahn 方程式と同じ形をした方程式についての研究は数多くある。Nekorkin ら⁸⁾は、拡散係数 α が小さな正数のときにパターン形

[†] 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

成が起こることを示した。Chow ら^{4),14)}は、非線形項 $f(u)$ になめらかでない関数を使って、パターン形成に必要な条件を求めた。しかし、離散空間上で Cahn-Hilliard 方程式と同じ形をした方程式についての理論的な研究は少ない。本稿ではこれら2つの方程式について理論的な解析を行う。これらの方程式の解はパラメータの値によってさまざまなパターンを示すことが分かっている¹³⁾。このパラメータの値とパターンの形との関係を、パターンを形成する平衡解に対するヤコビ行列の固有値を調べる方法と、平衡解の近傍に不変領域を構成する方法の2つを用いて求める。これらは、平衡解がある特別な値しかとらないことを利用したものである。

Cahn-Hilliard 方程式は負の拡散項 $-\Delta u$ 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、計算機を使って解を求めようとすると発散してしまうことが多い。そのため解を直接数値計算で求めた例はあまりなく^{6),7)}、通常は物理的性質に注目して、問題を分離した層の境界面に対する方程式などに書き換えて計算を行うことが多い。ここでは、陰解法である台形法を用いて方程式の解を直接安定に求める。一般に、陰解法はオイラー法などの陽解法と比べて安定ではあるが、膨大な計算時間を必要とする。さらに連立方程式が非線形項 $f(u)$ を含むため、近似解を求めるのにニュートン法を使う必要があり、その際、大規模な連立1次方程式を解かなければならない。またここで扱う2階の拡散作用素 $\Delta^2 u$ の計算は複雑で、解を構成する方法も複雑になる。これらを解決し、計算時間を短縮するためには分散メモリ型の並列計算機を使う。大規模な連立1次方程式を解くためには、並列計算機上で並列化が容易であり、しかも並列化効果の高い反復法である BiCGStab (ℓ) 法^{9),12),15)}を用いた。さらに、並列計算機上では扱いが難しい $\Delta^2 u$ の計算や境界部分の計算も BiCGStab (ℓ) 法の利点を利用して容易に行うことができる。

2章では本稿で扱う離散型 Cahn-Hilliard 方程式と離散型 Allen-Cahn 方程式を紹介する。また、これらの方程式が Lyapunov 関数を持ち、方程式の解が平衡解の集合となっていることを示す。3章では2つの方程式に対して平衡解が存在する条件を求める。さらに、ヤコビ行列の固有値を考える方法と、解の近傍に不変領域を構成する方法の2つを使って平衡解が安定となる条件を求める。4章では離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解を分散メモリ型の並列計算機を使って求める場合の方法を示し、実際に並列計算機を使って行った数値実験の結果を示す。そして、3章で求めた平衡解が安定になる条件のもとでは、方程式の解はその平衡解

に向かい、パターンを形成することを実証する。最後に理論的解析と実際の数値実験から得た結論を述べる。

2. 非線形拡散方程式

2次元離散格子 $L \subset \mathbf{N}^2$ 上における非線形拡散方程式を考える。離散格子を $L = \{(i, j) | i, j = 1, 2, \dots, N\}$ として、この格子上的点 $\eta = (i, j) \in L$ における u の値を $u(i, j)$ と表す。拡散項 Δu として

$$\begin{aligned} \Delta^+ u(i, j) &= u(i-1, j) + u(i+1, j) \\ &\quad + u(i, j-1) + u(i, j+1) \\ &\quad - 4u(i, j) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Delta^\times u(i, j) &= u(i-1, j-1) + u(i-1, j+1) \\ &\quad + u(i+1, j-1) + u(i+1, j+1) \\ &\quad - 4u(i, j) \end{aligned} \quad (6)$$

を組み合わせたものを採用する。

このとき、離散空間上で式(1)と同じ形をした離散型 Cahn-Hilliard 方程式

$$\begin{aligned} \dot{u}(i, j) &= (\beta^+ \Delta^+ + \beta^\times \Delta^\times) \\ &\quad (f(u(i, j)) - (\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u(i, j)) \end{aligned} \quad (7)$$

を考える。 $\beta^+, \beta^\times \in \mathbf{R}$ 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。

\dot{u} は u の時間微分を表す。 $f(u)$ としては3次関数

$$f(x) = px^3 - qx, \quad p, q > 0 \quad (8)$$

を用いる。境界条件(2)に対して、周期境界条件

$$\begin{aligned} u(i, k) &= u(i, N+k), \\ i &= -1, \dots, N+2, \quad k = -1, 0, 1, 2 \\ u(k, j) &= u(N+k, j), \\ j &= -1, \dots, N+2, \quad k = -1, 0, 1, 2 \end{aligned} \quad (9)$$

が考えられる。境界条件(9)より条件(2)が満たされることは、Cahn ら²⁾が証明している。

式(3)に対しては離散型 Allen-Cahn 方程式

$$\begin{aligned} \dot{u}(i, j) &= -f(u(i, j)) \\ &\quad + (\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u(i, j) \end{aligned} \quad (10)$$

を考える。境界条件(4)に対して、周期境界条件

$$\begin{aligned} u(i, k) &= u(i, N+k), \\ i &= 0, \dots, N+1, \quad k = 0, 1 \\ u(k, j) &= u(N+k, j), \\ j &= 0, \dots, N+1, \quad k = 0, 1 \end{aligned} \quad (11)$$

を使う。

離散型 Cahn-Hilliard 方程式と離散型 Allen-Cahn 方程式は離散領域 $L \subset \mathbf{N}^2$ において同じ Lyapunov 関数 (自由エネルギー関数)

$$V(u) = \sum_{(i,j) \in L} \left\{ Q(u(i,j)) + \frac{1}{4}\alpha^+ \sum_{(m-i)^2+(n-j)^2=1} (u(m,n) - u(i,j))^2 + \frac{1}{4}\alpha^\times \sum_{(m-i)^2=(n-j)^2=1} (u(m,n) - u(i,j))^2 \right\}$$

を持つ。ここで $Q(x) = \frac{1}{4}px^4 - \frac{1}{2}(q - 4(\alpha^+ + \alpha^\times))x^2$ である。つまり、離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対しては

$$\dot{u}(i,j) = (\beta^+ \Delta^+ + \beta^\times \Delta^\times) \left(\frac{\partial V(u)}{\partial u(i,j)} \right),$$

離散型 Allen-Cahn 方程式に対しては

$$\dot{u}(i,j) = - \frac{\partial V(u)}{\partial u(i,j)}$$

が満たされ、Lyapunov 関数 $V(u)$ の時間微分を考えると離散型 Cahn-Hilliard 方程式、離散型 Allen-Cahn 方程式いずれに対しても

$$\frac{\partial V(u)}{\partial t} < 0$$

が成り立つ。これは 1 次元の離散型 Allen-Cahn 方程式に対する Edwards⁵⁾の方法を、2 次元の離散型 Cahn-Hilliard 方程式に拡張することで得られる¹¹⁾。よって、それぞれの方程式の解は安定であり、空間 \mathbf{R}^L 上で、解は振動しない状態だけが存在しうる。このため解 u はどんな初期値からスタートしても $V(u)$ を小さくする方向に、すなわち安定な平衡解に向かう。3 次元空間 $\{\mathbf{R}, L\}$ において安定な状態はパターンを形成すると考えられる^{2),8)}。よって、安定な平衡解を求めると、解が示すパターンを推測することができる。

3. 平衡解の存在と安定性

この章では離散型 Allen-Cahn 方程式 (10), (11) と離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9) に対して、チェック型とストライプ型の平衡解が存在し、安定となる条件を求める。平衡解が安定となる条件を求めるには、変換のヤコビ行列の固有値を調べる方法と、平衡解の近傍における解の動きを調べる方法の 2 通りの方法を使う。これにより、解が示すパターンの形と方程式のパラメータとの関係を求める。

3.1 平衡解の存在

離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9)、離散型 Allen-Cahn 方程式 (10), (11) に対して平衡解が存在することを示す。平衡解は次のように定義する。
定義 (平衡解)

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

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

チェック (Check) 型

$$u(i,j) = \begin{cases} b & \text{if } i+j = \text{odd} \\ -b & \text{if } i+j = \text{even} \end{cases} \quad (12)$$

ストライプ (Stripe) 型

$$u(i,j) = \begin{cases} b & \text{if } j = \text{odd} \\ -b & \text{if } j = \text{even} \end{cases} \quad (13)$$

(b は正定数) を考える。

離散型 Allen-Cahn 方程式に対してチェック型の平衡解が存在するためには、式 (12) を式 (10), (11) に代入して、

$$u(i,j) = b \implies -f(b) - 8\alpha^+ b = 0 \quad (14)$$

$$u(i,j) = -b \implies -f(-b) + 8\alpha^+ b = 0 \quad (15)$$

を満たすような $b > 0$ が存在すればよい。式 (8) から $f(-x) = -f(x)$ となることに注意すれば式 (14), (15) は、1 つの同じ条件

$$f(b) + 8\alpha^+ b = 0 \quad (16)$$

になる。式 (16) が $b = 0$ 以外の解を持つ条件は

$$q - 8\alpha^+ > 0 \quad (17)$$

であり、このとき正の解は $b = \sqrt{(q - 8\alpha^+)/p}$ となる。

同様にストライプ型の平衡解 (13) を考えると、 b の満たすべき条件は

$$f(b) + (4\alpha^+ + 8\alpha^\times)b = 0 \quad (18)$$

であり、これを満たす b が存在するのは

$$q - (4\alpha^+ + 8\alpha^\times) > 0 \quad (19)$$

のときである。

一方、離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9) に対してチェック型およびストライプ型の平衡解が存在する条件は、離散型 Allen-Cahn 方程式に対して求めたものと同様に、それぞれ式 (17), (19) となり、平衡解が満たす条件は式 (16), (18) となる。

3.2 固有値を使った平衡解の安定性

平衡解の安定性を求める 1 つめの方法として、ヤコビ行列の固有値を調べる。つまり、 \dot{u} を変換と考え、この変換のヤコビ行列の固有値 λ を考えることにする。一般に $\text{Re} \lambda < 0$ ならばこの平衡解は安定である。ここでは、Gershgorin の定理を使って固有値の存在する範囲を求め、それにより、平衡解の安定性を調べる。

3.2.1 固有値による離散型 Allen-Cahn 方程式の平衡解の安定性

チェック型の平衡解 (12) に対する離散型 Allen-Cahn 方程式 (10), (11) のヤコビ行列の対角成分は $-f'(\pm b) - 4(\alpha^+ + \alpha^\times)$ であり、非対角成分は α^+ , α^\times がそれぞれ 4 個で、その他は 0 である。よって、

表1 $(\Delta^+ + \Delta^\times)(\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u$ の座標 (i, j) のまわりにおける係数
 Table 1 The coefficients of $(\Delta^+ + \Delta^\times)(\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u$ around the coordinate (i, j) .

座標	$j-2$	$j-1$	j	$j+1$	$j+2$
$i-2$	α^\times	$\alpha^+ + \alpha^\times$	$\alpha^+ + 2\alpha^\times$	$\alpha^+ + \alpha^\times$	α^\times
$i-1$	$\alpha^+ + \alpha^\times$	$-2\alpha^+ - 12\alpha^\times$	$-10\alpha^+ - 2\alpha^\times$	$-2\alpha^+ - 12\alpha^\times$	$\alpha^+ + \alpha^\times$
i	$\alpha^+ + 2\alpha^\times$	$-10\alpha^+ - 2\alpha^\times$	$36(\alpha^+ + \alpha^\times)$	$-10\alpha^+ - 2\alpha^\times$	$\alpha^+ + 2\alpha^\times$
$i+1$	$\alpha^+ + \alpha^\times$	$-2\alpha^+ - 12\alpha^\times$	$-10\alpha^+ - 2\alpha^\times$	$-2\alpha^+ - 12\alpha^\times$	$\alpha^+ + \alpha^\times$
$i+2$	α^\times	$\alpha^+ + \alpha^\times$	$\alpha^+ + 2\alpha^\times$	$\alpha^+ + \alpha^\times$	α^\times

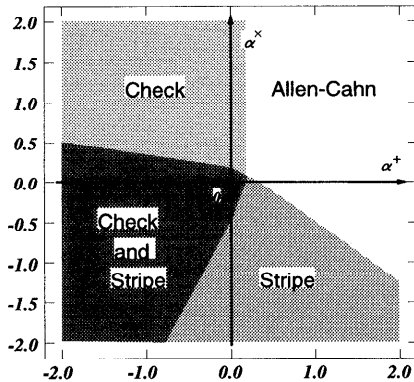


図1 離散型 Allen-Cahn 方程式 (10), (11) に対して平衡解が安定となるパラメータの範囲, ヤコビ行列の固有値を考えた場合 (横軸: α^+ , 縦軸: α^\times , $p = 2, q = 2$)

Fig. 1 The parameter region corresponding to the stable state of the equilibriums in the spatially discrete Allen-Cahn equation (10), (11), from eigenvalues of Jacobian matrices (The horizontal axis is α^+ , the vertical axis is α^\times , $p = 2, q = 2$).

Gershgorin の定理より λ に対して次が成り立つ.

$$|\lambda - (-f'(b) - 4(\alpha^+ + \alpha^\times))| < |4\alpha^+| + |4\alpha^\times|$$

$\text{Re} \lambda < 0$ であるためには

$$f'(b) + 4(\alpha^+ + \alpha^\times) > |4\alpha^+| + |4\alpha^\times| \quad (20)$$

であればよい. $f'(b) = 2q - 3 \cdot 8\alpha^+$ となることに注意すれば, 式 (20) は

$$2q - 20\alpha^+ + 4\alpha^\times > |4\alpha^+| + |4\alpha^\times| \quad (21)$$

となる.

ストライプ型の平衡解が安定である条件は, 式 (18) を満たす b を式 (20) に代入すればチェック型の場合と同様に求めることができる.

離散型 Allen-Cahn 方程式に対してチェック型とストライプ型の平衡解がそれぞれ存在し, 安定となるパラメータ領域を $\alpha^+ \alpha^\times$ 平面上に図示すると図 1 のようになる. ただし $p = 2, q = 2$ とした.

3.2.2 固有値による離散型 Cahn-Hilliard 方程式の平衡解の安定性

離散型 Cahn-Hilliard 方程式の拡散の係数のうち β^+, β^\times については $\beta^+ = \beta^\times = 1$ とし, 以下では

β^+, β^\times はすべてこの値をとるものとする.

$(\Delta^+ + \Delta^\times)(\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^\times \Delta^\times)u(i, j)$ の座標 (i, j) のまわりの係数が表 1 のようになることより, 離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9) のヤコビ行列は, 対角成分が $-8f'(b) - 36(\alpha^+ + \alpha^\times)$ であり, 非対角成分が $4(f'(b) + 10\alpha^+ + 2\alpha^\times), 4(f'(b) + 2\alpha^+ + 12\alpha^\times), -4(\alpha^+ + 2\alpha^\times), -8(\alpha^+ + \alpha^\times), -4\alpha^\times$ もしくは 0 となる. このヤコビ行列は固有値 $\lambda = 0$ をつねに持っている. よってここでは固有値の実部の最大値が 0 となるような場合を求め, 平衡解が安定であると考ええる.

まず, チェック型の平衡解 (12) を考える. b は式 (16) を満たすものとする. ヤコビ行列の固有値 λ は Gershgorin の定理より

$$\begin{aligned} & |\lambda - (-8f'(b) - 36(\alpha^+ + \alpha^\times))| \\ & \leq 4 |f'(b) + 10\alpha^+ + 2\alpha^\times| \\ & \quad + 4 |f'(b) + 2\alpha^+ + 12\alpha^\times| \\ & \quad + 4 |\alpha^+ + 2\alpha^\times| \\ & \quad + 8 |\alpha^+ + \alpha^\times| + 4 |\alpha^\times| \end{aligned}$$

を満たす. 固有値の実部の最大値が 0 以下となるためには

$$\begin{aligned} & 2f'(b) + 9(\alpha^+ + \alpha^\times) \\ & \geq |f'(b) + 10\alpha^+ + 2\alpha^\times| \\ & \quad + |f'(b) + 2\alpha^+ + 12\alpha^\times| \quad (22) \\ & \quad + |\alpha^+ + 2\alpha^\times| \\ & \quad + 2 |\alpha^+ + \alpha^\times| + |\alpha^\times| \end{aligned}$$

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 (22), 存在する条件は式 (17) となる.

ストライプ型の平衡解についても, 同様に平衡解が安定となる条件が求まる. チェック型とストライプ型の平衡解がそれぞれ安定に存在するパラメータ領域を図 2 に示す.

固有値を調べることによって離散型 Cahn-Hilliard 方程式の平衡解が安定になるパラメータ領域を求めたが, これは離散型 Allen-Cahn 方程式に対して求め

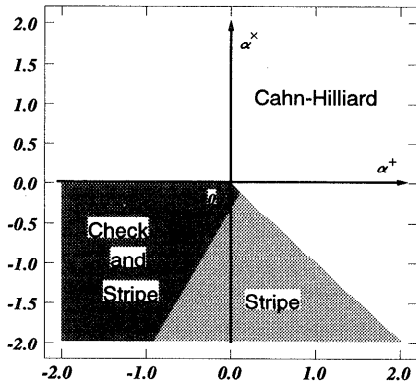


図2 離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9) に対して平衡解が安定となるパラメータの範囲, ヤコビ行列の固有値を考えた場合 (横軸: α^+ , 縦軸: α^x , $p = 2, q = 2$)

Fig. 2 The parameter region corresponding to the stable state of the equilibriums in the spatially discrete Cahn-Hilliard equation (7), (9), from eigenvalues of Jacobian matrices (The horizontal axis is α^+ , the vertical axis is α^x , $p = 2, q = 2$).

たパラメータ領域に比べて小さいものとなっている。また、 $\alpha^x > 0$ の領域がチェック型の平衡解の安定となる領域に含まれていないなど、後の数値実験の結果に対しても不十分なものになっている。

3.3 不変領域の構成による平衡解の安定性

3.2 節ではヤコビ行列の固有値を用いて平衡解の安定性を調べた。ここでは平衡解の近傍に不変領域を構成することにより、平衡解が安定になる条件をより正確に求める。ただし、平衡解の近傍に不変領域が構成されたときに平衡解は安定であると考え、不変領域は次のように定義する。

定義 (不変領域) 不変領域 Ω の近傍から出発した解はある時間の後に Ω の中に入り、いったん領域 Ω に入った解は領域の外へは出ない。

このような不変領域が存在するためには、不変領域の境界において \dot{u} の値が領域の内側を向いていけばよい。

3.3.1 離散型 Allen-Cahn 方程式の平衡解の近傍での安定性

離散型 Allen-Cahn 方程式に対してチェック型の平衡解 (12) の安定性を考える。この平衡解の近傍に集合 $\Omega(\epsilon)$ を

$$\Omega(\epsilon) = \left\{ u(i, j) \left| \begin{array}{l} i + j = \text{odd,} \\ u(i, j) \in \Omega^+(\epsilon) \\ i + j = \text{even,} \\ u(i, j) \in \Omega^-(\epsilon) \end{array} \right. \right\} \quad (23)$$

と定義する。ここで、 $\Omega^+(\epsilon), \Omega^-(\epsilon)$ は

$$\Omega^+(\epsilon) = \{x \in \mathbf{R} \mid |x - b| \leq \epsilon\} \quad (24)$$

$$\Omega^-(\epsilon) = \{x \in \mathbf{R} \mid |x + b| \leq \epsilon\} \quad (25)$$

とする。ただし、 ϵ は十分小さな正数とする。この $\Omega(\epsilon)$ が不変領域となるためには、すべての格子点の値が $\Omega(\epsilon)$ に含まれているときに、 $\Omega(\epsilon)$ の境界 $u(i, j) = b \pm \epsilon, -b \pm \epsilon$ において $\dot{u}(i, j)$ が $\Omega(\epsilon)$ の内側を向いていけばよい。これは

$$\text{For } \forall(m, n), u(m, n) \in \Omega(\epsilon)$$

$$\dot{u}(i, j) |_{u(i, j)=b+\epsilon} < 0, \dot{u}(i, j) |_{u(i, j)=-b+\epsilon} < 0$$

$$\dot{u}(i, j) |_{u(i, j)=b-\epsilon} > 0, \dot{u}(i, j) |_{u(i, j)=-b-\epsilon} > 0 \quad (26)$$

という条件になる。チェック型の平衡解は $u(i-1, j) = u(i+1, j) = u(i, j-1) = u(i, j+1) = -b, u(i-1, j-1) = u(i-1, j+1) = u(i+1, j-1) = u(i+1, j+1) = b$ となっている。また、 $\dot{u}(i, j)$ において、格子点 $(i-1, j), (i+1, j), (i, j-1), (i, j+1)$ の係数は α^+ 、格子点 $(i-1, j-1), (i-1, j+1), (i+1, j-1), (i+1, j+1)$ の係数は α^x となっている。よって、 $\dot{u}(i, j)$ に含まれる (i, j) のまわりの8個の格子点は、係数が α^+ で値が $-b$ の近傍を動く4つの格子点と、係数が α^x で値が b の近傍を動く4つの格子点の2つに分類することができる。この2種類の格子点をそれぞれひとまとまりの変数と考え、 $-b$ の近傍を動く変数を $u_1 \in \Omega^-(\epsilon)$ 、 b の近傍を動く変数を $u_2 \in \Omega^+(\epsilon)$ として $\dot{u}(i, j)$ に代入し、関数 $g(x)$ を

$$g(x) = -f(x) - 4(\alpha^+ + \alpha^x)x + 4\alpha^+u_1 + 4\alpha^xu_2 \quad (27)$$

と定義すれば、条件 (26) は

$$\text{For } \forall u_1 \in \Omega^-(\epsilon), \forall u_2 \in \Omega^+(\epsilon) \\ g(b+\epsilon) < 0, g(b-\epsilon) > 0 \quad (28)$$

と書くことができる。 $f(x)$ が奇関数であるから、式 (26) の $u = -b \pm \epsilon$ における条件も式 (28) に一致する。この条件は、関数 $g(x)$ が u_1, u_2 について最大値をとった場合に $g(b+\epsilon) < 0$ が成り立ち、 $g(x)$ が u_1, u_2 について最小値をとった場合に $g(b-\epsilon) > 0$ が成り立てばよい。式 (27) の第3項 $4\alpha^+u_1$ の $-b-\epsilon \leq u_1 \leq -b+\epsilon$ における最大値、最小値については、

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \geq 0 \\ -1 & \text{if } x < 0 \end{cases} \quad (29)$$

と定義される関数 $\text{sgn}(x)$ を用いて、最大値は $4\alpha^+(-b + \epsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^+))$ 、最小値は $4\alpha^+(-b - \epsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^+))$ となる。

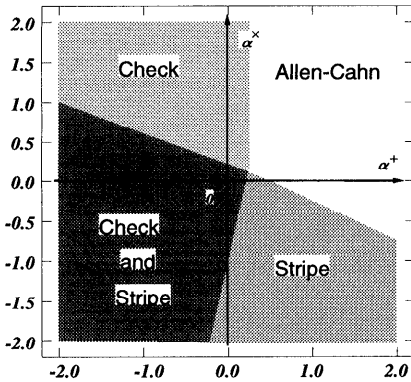


図3 離散型 Allen-Cahn 方程式 (10), (11) に対して平衡解の近傍が不変領域となるパラメータの範囲 (横軸: α^+ , 縦軸: α^- , $p = 2$, $q = 2$, $\varepsilon = 10^{-6}$)

Fig. 3 The parameter region corresponding to the existence of invariant sets around the equilibria in the spatially discrete Allen-Cahn equation (10), (11) (The horizontal axis is α^+ , the vertical axis is α^- , $p = 2$, $q = 2$, $\varepsilon = 10^{-6}$).

$\text{sgn}(\alpha^+)$ と表すことができる。 $4\alpha^+ u_2$ に対しても同様に考えられる。これらのことより, $g(x)$ が u_1, u_2 に関して最大の値をとるときの関数を

$$\begin{aligned} \dot{u}_{\max}(x) = & -f(x) - 4(\alpha^+ + \alpha^-)x \\ & + 4\alpha^+(-b + \varepsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^+)) \\ & + 4\alpha^- (b + \varepsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^-)) \end{aligned}$$

とし, $g(x)$ が u_1, u_2 に関して最小の値をとるときの関数を

$$\begin{aligned} \dot{u}_{\min}(x) = & -f(x) - 4(\alpha^+ + \alpha^-)x \\ & + 4\alpha^+(-b - \varepsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^+)) \\ & + 4\alpha^- (b - \varepsilon \cdot \text{sgn}(\alpha^-)) \end{aligned}$$

とすれば, 条件 (28) は

$$\dot{u}_{\max}(b + \varepsilon) < 0, \quad \dot{u}_{\min}(b - \varepsilon) > 0 \quad (30)$$

と書くことができる。

チェック型の平衡解が存在する条件 (17) と, ここで求めた不変領域が構成できる条件 (30) を合わせることで平衡解が安定に存在する条件になる。

ストライプ型についても同様に平衡解が安定に存在する条件が求まる。チェック型, ストライプ型それぞれの平衡解が安定に存在するパラメータ領域を $\alpha^+ \alpha^-$ 平面上で図示すると図 3 のようになる。ここで求めた領域は, 固有値を使って平衡解が安定に存在するように求めた図 1 のパラメータ領域を含んでいる。

3.3.2 離散型 Cahn-Hilliard 方程式の平衡解の近傍での安定性

離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対してチェック型の平衡解の近傍の集合 $\Omega(\varepsilon)$ (23) が不変領域となるパラメータの範囲を求める。離散型 Allen-Cahn 方

式の平衡解の近傍での安定性を調べたときと同様にして, $\dot{u}(i, j)$ において係数と平衡解の値が同じであるような格子点をひとまとまりの変数と考えると, $(\Delta^+ + \Delta^-)(\alpha^+ \Delta^+ + \alpha^- \Delta^-)u$ の係数が表 1 のようになることを考慮することによって, $\dot{u}(i, j)$ に含まれる (i, j) のまわりの 24 個の格子点は 5 つに分類することができる。これらをそれぞれ u_1, u_2, \dots, u_5 とおくことにより, 離散型 Cahn-Hilliard 方程式に対して $\Omega(\varepsilon)$ が不変領域になる条件は関数

$$\begin{aligned} g(x) = & -8f(x) - 36(\alpha^+ + \alpha^-)x \\ & + 4\{f(u_1) + (10\alpha^+ + 2\alpha^-)u_1\} \\ & + 4\{f(u_2) + (2\alpha^+ + 12\alpha^-)u_2\} \\ & + 4(-\alpha^+ - 2\alpha^-)u_3 \\ & + 4(-2\alpha^+ - 2\alpha^-)u_4 + 4(-\alpha^-)u_5 \end{aligned} \quad (31)$$

に対して次式が成り立つことである。

$$\begin{aligned} \text{For } \forall u_1, u_4 \in \Omega^-(\varepsilon), \\ \forall u_2, u_3, u_5 \in \Omega^+(\varepsilon) \\ g(b + \varepsilon) < 0, \quad g(b - \varepsilon) > 0 \end{aligned} \quad (32)$$

ここで, 式 (32) に含まれる関数 $h(u_1) = f(u_1) + (10\alpha^+ + 2\alpha^-)u_1$ の, $-b - \varepsilon \leq u_1 \leq -b + \varepsilon$ における最大値, 最小値を考える。 ε が十分小さいとすると, $h'(-b)$ の値に応じて $h(u_1)$ 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 $h'(-b) \geq 0$ のときには, 最大値は $h(-b + \varepsilon)$, 最小値は $h(-b - \varepsilon)$ となる。 $h'(-b) < 0$ の場合は最大値は $h(-b - \varepsilon)$, 最小値は $h(-b + \varepsilon)$ となる。両方の場合を合わせると, 最大値は $h(-b + \varepsilon \cdot \text{sgn}(h'(-b)))$, 最小値は $h(-b - \varepsilon \cdot \text{sgn}(h'(-b)))$ と書くことができる。関数 $\text{sgn}(x)$ は式 (29) で定義される。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。 $h'(x) = 0$ のゼロ点は $x = \pm \sqrt{(q - 10\alpha^+ - 2\alpha^-)/3p}$ であり, 式 (16) より $-b = -\sqrt{(q - 8\alpha^+)/p}$ であるから, この条件は

$$\left| \sqrt{\frac{q - 10\alpha^+ - 2\alpha^-}{3p}} - \sqrt{\frac{q - 8\alpha^+}{p}} \right| \leq \varepsilon$$

となる。ところが, ε を十分小さくするとこの条件を満たす領域は空になる。これらのことより, $g(x)$ が u_1, u_2, \dots, u_5 に関して最大の値をとるときの関数を

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \dot{u}_{\max}(x) = & -2f(x) - 9(\alpha^+ + \alpha^-)x \\ & + f(-b + \varepsilon_1) + (10\alpha^+ + 2\alpha^-)(-b + \varepsilon_1) \\ & + f(b + \varepsilon_2) + (2\alpha^+ + 12\alpha^-)(b + \varepsilon_2) \\ & + (-\alpha^+ - 2\alpha^-)(b + \varepsilon_3) \\ & + (-2\alpha^+ - 2\alpha^-)(-b + \varepsilon_4) \\ & + (-\alpha^-)(b + \varepsilon_5) \end{aligned}$$

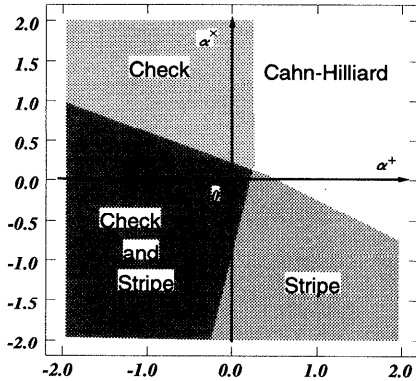


図4 離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7), (9) に対して平衡解の近傍が不変領域になるパラメータの範囲 (横軸: α^+ , 縦軸: α^x , $p = 2, q = 2, \varepsilon = 10^{-6}$)

Fig. 4 The parameter region corresponding to the existence of invariant sets around the equilibriums in the spatially discrete Cahn-Hilliard equation (7), (9) (The horizontal axis is α^+ , the vertical axis is α^x , $p = 2, q = 2, \varepsilon = 10^{-6}$).

とし, $g(x)$ が u_1, u_2, \dots, u_5 に関して最小の値をとるときの関数を

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \dot{u}_{\min}(x) = & -2f(x) - 9(\alpha^+ + \alpha^x)x \\ & + f(-b - \varepsilon_1) + (10\alpha^+ + 2\alpha^x)(-b - \varepsilon_1) \\ & + f(b - \varepsilon_2) + (2\alpha^+ + 12\alpha^x)(b - \varepsilon_2) \\ & + (-\alpha^+ - 2\alpha^x)(b - \varepsilon_3) \\ & + (-2\alpha^+ - 2\alpha^x)(-b - \varepsilon_4) \\ & + (-\alpha^x)(b - \varepsilon_5) \end{aligned}$$

とすれば, $\Omega(\varepsilon)$ が不変領域になる条件 (32) は

$$\dot{u}_{\max}(b + \varepsilon) < 0, \quad \dot{u}_{\min}(b - \varepsilon) > 0 \quad (33)$$

と書くことができる. ただし, $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_5$ については,

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon \cdot \text{sgn}(f'(-b) + (10\alpha^+ + 2\alpha^x)) \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon \cdot \text{sgn}(f'(b) + (2\alpha^+ + 12\alpha^x)) \\ \varepsilon_3 &= \varepsilon \cdot \text{sgn}(-\alpha^+ - 2\alpha^x) \\ \varepsilon_4 &= \varepsilon \cdot \text{sgn}(-\alpha^+ - \alpha^x) \\ \varepsilon_5 &= \varepsilon \cdot \text{sgn}(-\alpha^x) \end{aligned}$$

と定義する.

ストライプ型についても同様に, 平衡解の近傍が不変領域になるパラメータ領域が求まる. チェック型, ストライプ型の平衡解が存在し, それぞれの平衡解の近傍が不変領域となるパラメータ領域, つまり平衡解が安定となるパラメータ領域を図4に示す.

3.4 その他の平衡解

離散型 Cahn-Hilliard 方程式, 離散型 Allen-Cahn 方程式にはチェック型, ストライプ型以外にも平衡解が存在し, それらの平衡解が安定に存在する条件を求

めることができる¹¹⁾. そこで求められた条件のもとでは, 平衡解の近傍から出発した解はその平衡解に近づく. しかし, 後の数値実験が示すように, 任意の初期値から出発した解はこれらの平衡解に近づくことは少なく, 解が示すパターンの多くはチェック型やストライプ型の平衡解に近いものになっている. そのため本稿では, 特にこれら2つの平衡解に注目し, 議論を行っている.

4. 並列計算機を使った数値実験

4.1 並列計算機を使った離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解法

離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7) の並列計算機を使った解の求め方について述べる. 領域は $N \times N$ 個の格子点を含む正方領域とし, 境界条件は周期境界条件 (9) とする. 計算の並列化ではこの領域を並列計算機の $c \times c$ 個のプロセッサに均一に割り当てる領域分割法を使う. 1つのプロセッサの担当する格子点の数は $N/c \times N/c$ となる. 周期境界条件を考えているので, 領域全体の境界部分とそれぞれのプロセッサの境界部分を区別することなく同じように扱うことができる. Cahn-Hilliard 方程式は4階の微分 ($\nabla^4 u \equiv \Delta^2 u$) を含むので, 領域はすべての方向に対して境界部分を2列必要とする. 離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7) を

$$H(\mathbf{u}) = (\dot{u}(1, 1) \cdots \dot{u}(i, j) \cdots \dot{u}(N, N))^T$$

として, この方程式の解を台形法で求める. 時間さきみの幅を Δt , 時間 $n\Delta t$ における解を \mathbf{u}_n とするとき, \mathbf{u}_{n+1} を台形法で求めるには

$$\mathbf{u}_{n+1} - \frac{\Delta t}{2} H(\mathbf{u}_{n+1}) - \left(\mathbf{u}_n + \frac{\Delta t}{2} H(\mathbf{u}_n) \right) = 0 \quad (34)$$

を満たすような \mathbf{u}_{n+1} を求めればよい. これを未知ベクトル $\mathbf{u} = \mathbf{u}_{n+1}$ の連立方程式と考えて左辺を $G(\mathbf{u})$ とおけば, 式 (34) を解くためのニュートン法は

$$\begin{cases} m = 1, 2, 3, \dots \\ JG(\mathbf{u}^{(m)}) \delta \mathbf{u} = G(\mathbf{u}^{(m)}) \\ \mathbf{u}^{(m+1)} = \mathbf{u}^{(m)} - \delta \mathbf{u} \end{cases} \quad (35)$$

となる. ここで $JG(\mathbf{u})$ は G のヤコビ行列にベクトル \mathbf{u} を代入したものである. このニュートン法の計算では, 大型疎行列 $JG(\mathbf{u}^{(m)})$ を係数とする連立1次方程式を解かなければならない. 並列計算機を使うこと, 係数行列が疎で非常に大きいことを考えると, この連立1次方程式の近似解を求めるには反復法を用いるのが有効である. さらにここでは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

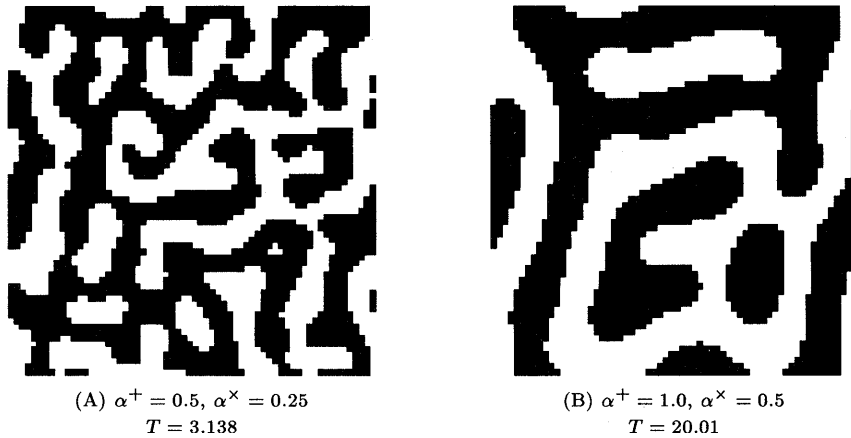


図5 通常の Cahn-Hilliard 方程式
Fig. 5 Well-posed Cahn-Hilliard equation.

BiCGStab (ℓ) 法^{9),10),12),15)} を解法として用いる。この解法は並列計算機への実装が容易であり、並列化の効果が大きい¹²⁾。さらに、BiCGStab (ℓ) 法では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。つまり $Ax = b$ という連立 1 次方程式を解く場合、 A は行列の形をしている必要はなく、任意のベクトル x との積 Ax という計算ができればよい。これを式 (35) のニュートン法に適用すると、任意のベクトル x に対して G のヤコビ行列との積 $JG(u^{(m)})x$ が計算できればよいことになる。 $G(u^{(m)})$ の第 3 項は定数であり、第 1 項が線形であることを考えると、関数 $H(u^{(m)})$ のヤコビ行列と x との積 $JH(u^{(m)})x$ が求まれば、 $JG(u^{(m)})x$ は

$$JG(u^{(m)})x = x - \frac{\Delta t}{2} JH(u^{(m)})x \quad (36)$$

と計算できる。 $JH(u^{(m)})x$ の計算に関しては、 Δu の計算が線形であることを考慮すると、

$$\begin{aligned} JH(u^{(m)})x &= J\Delta(f(u^{(m)}) - \Delta u^{(m)})x \\ &= \Delta(Jf(u^{(m)}) - J\Delta u^{(m)})x \\ &= \Delta(f'(u^{(m)})x - \Delta x) \end{aligned}$$

とできる。このようにして関数 $JH(u^{(m)})x$ は関数 $H(u)$ と同様の方法で容易に構成することができる。

4.2 数値実験の結果と考察

この節では並列計算機を使って離散型 Cahn-Hilliard 方程式 (7) の解を求め、その結果を示し、考察を述べる。境界条件は周期境界条件 (9) を使った。非線形項 $f(x)$ については $p = 2, q = 2$ とした。拡散係数は $\beta^+ = \beta^x = 1$ とし、 α^+, α^x をパラメータとして実験を行う。3 章で述べたように、この場合のパラメータとパターンの形の関係は、ヤコビ行列の固有値から

推測すると図 2 のように、不変領域を構成する方法を使うと図 4 のようになると推測される。方程式の解の初期値は平均が 0 となるような区間 $[-0.5, 0.5]$ 内の乱数とし、離散空間のメッシュは 64×64 とする。計算は富士通の分散メモリ型並列計算機 AP1000 を使った。実験で用いた AP1000 のプロセッサ数は 64 個で、プロセッサ 1 個が SUN S-4/2 と同程度の性能を持つ。それぞれの実験における計算は AP1000 を用いて 600 秒程度を要している。台形法で現れる非線形方程式の解法にはニュートン法を使い、その中で現れる連立 1 次方程式の解法には BiCGStab (ℓ) 法を使った。計算はすべて倍精度の浮動小数点演算 (64 bit) を行っている。非線形方程式 $G(x) = 0$ に対するニュートン法の収束判定には $|G(x_n)|/|G(x_0)| < 10^{-12}$ を使い、BiCGStab (ℓ) 法の収束判定には $|r_n|/|r_0| < 10^{-12}$ を使った。ただし、 x_n はニュートン法における近似解であり、 r_n は BiCGStab (ℓ) 法で使われる残差ベクトルである。

離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解は十分時間が経過した後もわずかず動いているので、計算で得られた図にはある時間における解の様子 (スナップショット) を示した。それらの図は $u(i, j) \leq 0$ の場所を黒くぬりつぶし、その他の場所は空白とした。また、時間きざみ Δt を積み重ねたものを T として示す。

実験 1: 通常の Cahn-Hilliard 方程式

図 4 においてチェック型の平衡解もストライプ型の平衡解も安定になっていない領域からパラメータを選んで実験を行った。 $\alpha^+ = 0.5, \alpha^x = 0.25$ として行った実験の結果を図 5 (A) に、 $\alpha^+ = 1.0, \alpha^x = 0.5$ として行った実験の結果を図 5 (B) に示す。この実験では連続空間における Cahn-Hilliard 方程式を離散化し

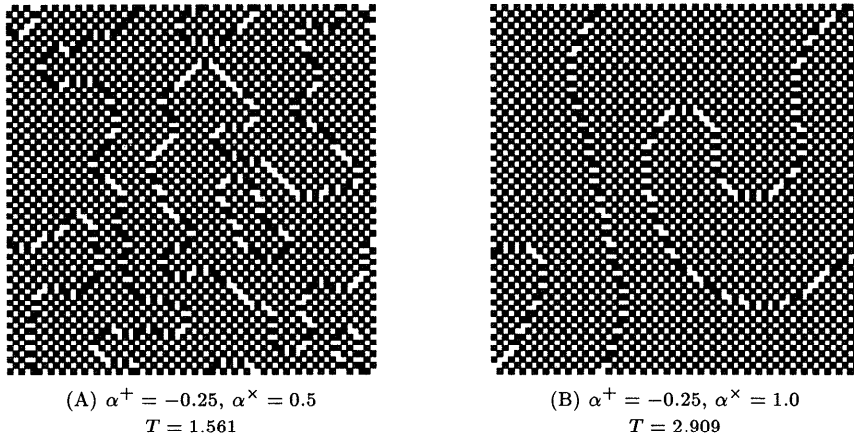


図6 チェックのパターン

Fig. 6 The checkerboard pattern.

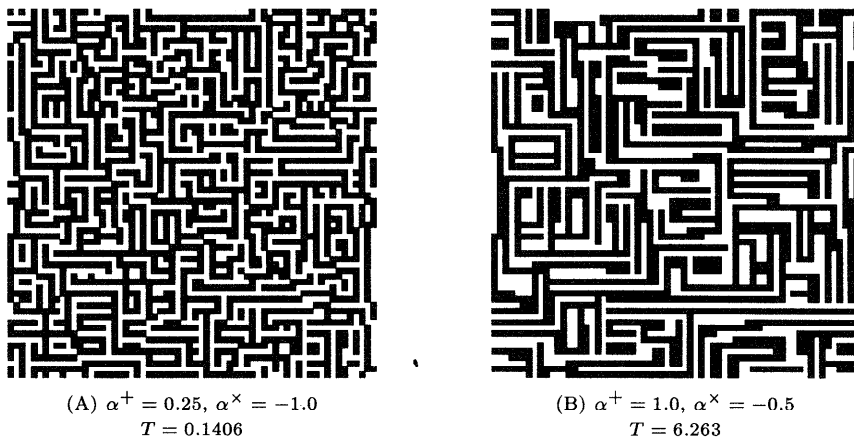


図7 ストライプのパターン

Fig. 7 The striped pattern.

でシミュレーションをしたときに現れるようなパターンが形成されている。

実験 2: チェックのパターン

図 4 においてチェック型の平衡解が安定になっている領域からパラメータを選んで実験を行った。 $\alpha^+ = -0.25, \alpha^x = 0.5$ として行った実験の結果を図 6 (A) に、 $\alpha^+ = -0.25, \alpha^x = 1.0$ として行った実験の結果を図 6 (B) に示す。これらの図中にはチェック型とは異なる鎖模様が見られるが、この鎖模様は時間の経過とともに少なくなり、解はほぼ完全なチェック型のパターンに近づく。

実験 3: ストライプのパターン

図 4 においてストライプ型の平衡解が安定になっている領域からパラメータを選んで実験を行った。 $\alpha^+ = 0.25, \alpha^x = -1.0$ として行った実験の結果を図 7 (A) に、 $\alpha^+ = 1.0, \alpha^x = -0.5$ として行っ

た実験の結果を図 7 (B) に示す。図 7 (B) で用いたパラメータは、ストライプ型の平衡解が安定であるパラメータ領域の中で通常の Cahn-Hilliard 方程式との境界に近いところから選んだものである。このため、図 7 (B) は連続空間における Cahn-Hilliard 方程式で見られるような、平面的な要素を含むパターンになっている。

実験 4: チェックとストライプのパターンの混在

図 4 においてチェック型の平衡解もストライプ型の平衡解も安定になっている領域からパラメータを選んで実験を行った。 $\alpha^+ = -0.5, \alpha^x = -0.25$ として行った実験の結果を図 8 (A) に、 $\alpha^+ = -0.25, \alpha^x = -1.0$ として行った実験の結果を図 8 (B) に示す。図 8 (A) はチェック型の平衡解だけが安定であるパラメータ領域の近くにパラメータを選んで行った実験の結果であり、逆に図 8 (B) はパラメータをストラ

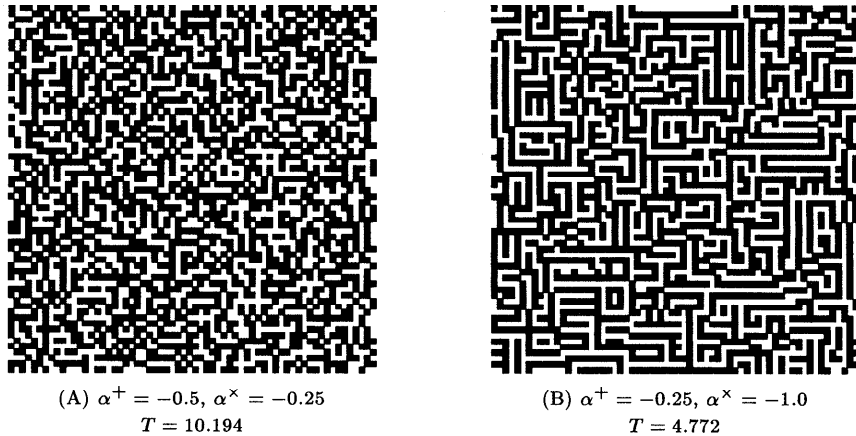


図8 チェックとストライプのパターンの混在

Fig. 8 The mixture of the checkerboard and striped pattern.

イブ型の平衡解だけが安定である領域の近くを選んだ実験の結果である。パラメータをチェック型の平衡解だけが安定な領域の近くから選ぶとパターンはチェック型に、ストライプ型の平衡解だけが安定な領域の近くから選ぶとストライプ型にそれぞれ近づくことが分かる。

4つの実験に用いたパラメータは図4においてそれぞれの平衡解が安定である領域から選んだものである。これらの実験の結果より、不変領域を構成する方法で平衡解の安定性を求めたパラメータ領域(図4)は正しいと考えられる。一方、ヤコビ行列の固有値を調べる方法で求めたパラメータ領域(図2)は実験2の結果に対して不十分なものになっている。

チェック型とストライプ型の両方が安定である領域からパラメータを選んで行った実験4では、最終的に2つのパターンが混在するのか、どちらかのパターンが残るのかを予測することはできなかった。

これらの実験結果より、あるパラメータを選んで実験を行うと、そのパラメータにおいて安定ないくつかの平衡解が集まってパターンが形成されるが、パラメータ領域の境界部分では平衡解がパターンとして現れる力が弱まるものと考えられる。

5. おわりに

離散空間における非線形拡散方程式の解にパターン形成が起こるような条件を求め、それを数値実験によって実証した。

離散型 Cahn-Hilliard 方程式, 離散型 Allen-Cahn 方程式において、チェック型やストライプ型などの平衡解が安定となり、解にパターンが出現する拡散のパラメータの値の範囲を $\alpha^+ \alpha^x$ 平面上で求めることがで

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を調べる方法に加え、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、固有値を調べる方法に比べて、正確なパラメータ領域を求めることができた。2つの平衡解がどちらも安定であるパラメータ領域から拡散の係数を選んだとき、最終的に2つの平衡解が混在するのか、どちらかの平衡解が残るのかについては、今後の課題として残されている。

数値実験では並列計算機を使って離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解を安定に求めることができた。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、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。

数値実験の結果より、チェック型やストライプ型の平衡解が安定になる条件のもとでは、離散型 Cahn-Hilliard 方程式の解はその平衡解に向かうことが実証された。

参考文献

- 1) Allen, S.M. and Cahn, J.W.: A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening, *Acta Meta.*, Vol.27, pp.1085-1095 (1979).
- 2) Cahn, J.W., Chow, S.N. and Vleck, E.S.V.: Spatially discrete nonlinear diffusion equations, *Rocky Mountain J. Math.*, Vol.25, No.1, pp.87-118 (1995).
- 3) Cahn, J.W. and Hilliard, J.E.: Free Energy of

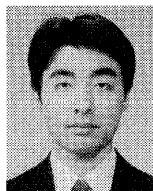
- a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy, *J. Chem. Phys.*, Vol.28, No.2, pp.258-267 (1958).
- 4) Chow, S.N. and Paret, J.M.: Pattern Formation and Spatial Chaos in Lattice Dynamical Systems—Part I, *IEEE Trans. Circuits Syst.*, Vol.42, No.10, pp.746-751 (1995).
- 5) Edwards, R.: Stable pattern in spatially discrete reaction-diffusion models, *Dynam. Syst. Appl.*, Vol.5, pp.245-262 (1996).
- 6) Elliott, C.M. and French, D.A.: Numerical studies of the Cahn-Hilliard equation for phase separation, *IMA J. Appl. Math.*, Vol.38, pp.97-128 (1987).
- 7) 降旗, 恩田, 森: Cahn-Hilliard 方程式の差分法による数値的解析, 日本応用数理学会論文誌, Vol.3, No.3, pp.217-228 (1993).
- 8) Nekorkin, V.I., Makarov, V.A., Kazantsev, V.B. and Velarde, M.G.: Spatial disorder and pattern formation in lattice of coupled bistable elements, *Physica D*, Vol.100, pp.330-342 (1997).
- 9) 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).
- 10) Nodera, T. and Noguchi, Y.: A note on BiCGStab (ℓ) method on AP1000, IMACS Lecture Note on Computer Science (1998), to appear.
- 11) 野口雄一郎: 離散格子上的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).
- 12) 野口, 稲津, 野寺: BiCGStab (ℓ) 法の収束特性について, 情報処理学会 HPC 研究会, Vol.60, pp.13-18 (1996).
- 13) 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).
- 14) Paret, J.M. and Chow, S.N.: Pattern Formation and Spatial Chaos in Lattice Dynamical Systems—Part II, *IEEE Trans. Circuits Syst.*,

Vol.42, No.10, pp.752-756 (1995).

- 15) Sleijpen, G.L.G. and Fokkema, D.R.: BiCGSTAB (ℓ) for linear equations involving unsymmetric matrices with complex spectrum, *ETNA*, Vol.1, pp.11-32 (1993).

(平成 9 年 11 月 25 日受付)

(平成 10 年 5 月 8 日採録)



野口雄一郎 (学生会員)

1974 年生。1996 年慶應義塾大学理工学部数理科学科卒業。1998 年同大学大学院理工学研究科数理科学専攻修士課程修了。同年東日本旅客鉄道 (株) 入社。非線形現象の数値的解析に興味を持つ。



谷 温之

1976 年東京工業大学大学院理工学研究科博士課程 (応用物理学専攻) 修了。現在、慶應義塾大学理工学部数理科学科教授。非線形の偏微分方程式の解析に従事。非線形現象の数値に興味を持つ。理学博士。日本数学会、日本流体力学会各会員。



野寺 隆 (正会員)

1982 年慶應義塾大学大学院工学研究科博士課程 (数理工学専攻) 修了。現在、同大学助教授。その間、'86 年より 1 年間米国スタンフォード大学客員教授。大規模な行列計算の算法の研究開発に従事。ハイパフォーマンス・コンピューティングや文書処理に興味を持つ。著書に「楽々 L^AT_EX」(共立出版) などがある。工学博士。エッセイスト。SIAM、日本応用数理学会各会員。