超離散反応拡散系

村田, 実貴生
青山学院大学理工学部

https://doi.org/10.15017/23448

出版情報：応用力学研究所研究集会報告. 23AO-S7 (2), pp.7-12, 2012-03. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University

応用力学研究所研究集会報告 No.23AO-S7
「非線形波動研究の進展 — 現象と数理の相互作用 —」（研究代表者　筧　三郎）
共催　九州大学グローバル COE プログラム
「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」

Reports of RIAM Symposium No.23AO-S7

Progress in nonlinear waves — interaction between experimental and mathematical aspects

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu Universiy,
Kasuga, Fukuoka, Japan, October 27 - 29, 2011

Co-organized by
Kyushu University Global COE Program
Education and Research Hub for Mathematics - for - Industry

Article No. 2 (pp. 7 - 12)

超離散反応拡散系

村田　実貴生（MURATA Mikio）

（Received 13 January 2012; accepted 14 February 2012）

Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2012

超離散反応拡散系

青山学院大学理工学部　村田実貴生　(MURATA Mikio)

概　要　我々は微分方程式に対して超離散化を行う系統的な方法を確立した．その方法は 1 階の微分方程式や反応拡散方程式に適用できるものである．今回は 1 成分の反応拡散系として知られている Allen-Cahn 方程式について，その手法で得られる方程式とその定常解や進行波解などの厳密解について報告する．また，2 成分の反応拡散系である Gray-Scott モデルについて得られた結果を簡単に紹介する．

1　はじめに

超離散化 [1] は差分方程式をセル・オートマトンに変換する極限操作である．この手法で構成されたセル・オートマトンは元の方程式の厳密解の構造などの本質的な特徴を保存することが知られている．

我々は [2] においてリッカチ型の微分方程式に対して超離散化を行う系統的な方法を提案した．そのアイデアを発展させて，一般の微分方程式に対して超離散化を行う系統的な方法 [3] を提案する．その方法は 1 階の微分方程式や反応拡散方程式に適用できるものである．1 成分の反応拡散方程式としてよく知られている Allen-Cahn 方程式にその方法を適用して，超離散 Allen-Cahn 方程式を導出する．超離散方程式は区分線形方程式であるので，その「線形性」から様々な厳密解を得ることができる．得られた超離散 Allen-Cahn 方程式に対して，定常解や進行波解および大域解を与える．これらの解は元の方程式の解と凡そ類似していることが分かる．

反応拡散系においては，偏微分方程式を用いる連続モデルとセル・オートマトンを用いる離散モデルの研究が並行して行われているが，両者のつながりは専ら挙動の定性的な性質にのみにより論じられており，直接的な対応は明らかでない．トロピカル離散化では，連続モデルに直接対応するセル・オートマトンモデルを構成することができる．したがって，両者の知見を他者に生かした研究が進められるものと期待される．

2　トロピカル離散化

この節では，1 階の常微分方程式から超離散化が適用可能な離散方程式を系統的に構成する「トロピカル離散化」を説明する．

次の形の反応拡散系の偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) - g(u) \tag{2.1}$$

の離散化を考える．ここでは $u > 0$ の解を考えることにし，$f(u), g(u) \geq 0$ とする．この式の離散化は函数

$$m(u_n^j) = \frac{1}{2}\left(u_n^{j+1} + u_n^{j-1}\right) \tag{2.2}$$

を用いて，

$$u_{n+1}^j = m(u_n^j)\frac{m(u_n^j) + \epsilon f(m(u_n^j))}{m(u_n^j) + \epsilon g(m(u_n^j))} \tag{2.3}$$

とすればよい．この式が離散化になっていることは，

$$\frac{u_{n+1}^j - u_n^j}{\epsilon} = \frac{\delta^2}{2\epsilon}\frac{2m(u_n^j) - 2u_n^j}{\delta^2} + \frac{m(u_n^j)\left\{f(m(u_n^j)) - g(m(u_n^j))\right\}}{m(u_n^j) + \epsilon g(m(u_n^j))} \tag{2.4}$$

と変形して $t = \epsilon n$, $x = \delta j$ とおき，$\delta = \sqrt{2D\epsilon}$ としてから $\epsilon \to 0$ とすると，式 (2.1) が得られることにより確認できる．また，超離散化も可能であり，

$$M(U_n^j) = \max\left(U_n^{j+1}, U_n^{j-1}\right) \tag{2.5}$$

を用いて，

$$U_{n+1}^j = M(U_n^j) + \max\left\{M(U_n^j), E + F(M(U_n^j))\right\} - \max\left\{M(U_n^j), E + G(M(U_n^j))\right\} \tag{2.6}$$

となる．また，空間 d 次元のラプラシアン $\Delta = \sum_{k=1}^{d} \partial^2/\partial {x_k}^2$ を用いた

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + f(u) - g(u) \tag{2.7}$$

という偏微分方程式についても

$$m(u_n^{\boldsymbol{j}}) = \frac{1}{2d}\sum_{k=1}^{d}\left(u_n^{\boldsymbol{j}+\boldsymbol{e}_k} + u_n^{\boldsymbol{j}-\boldsymbol{e}_k}\right) \tag{2.8}$$

を用いて，

$$u_{n+1}^{\boldsymbol{j}} = m(u_n^{\boldsymbol{j}})\frac{m(u_n^{\boldsymbol{j}}) + \epsilon f(m(u_n^{\boldsymbol{j}}))}{m(u_n^{\boldsymbol{j}}) + \epsilon g(m(u_n^{\boldsymbol{j}}))} \tag{2.9}$$

とすればよい．この離散化の方法は [4] で用いられているものである．更に，この離散化の式も超離散化可能であり，

$$M(U_n^{\boldsymbol{j}}) = \max_{k=1,\ldots,d}\left(U_n^{\boldsymbol{j}+\boldsymbol{e}_k}, U_n^{\boldsymbol{j}-\boldsymbol{e}_k}\right) \tag{2.10}$$

を用いて，

$$U_{n+1}^{\boldsymbol{j}} = M(U_n^{\boldsymbol{j}}) + \max\left\{M(U_n^{\boldsymbol{j}}), E + F(M(U_n^{\boldsymbol{j}}))\right\} - \max\left\{M(U_n^{\boldsymbol{j}}), E + G(M(U_n^{\boldsymbol{j}}))\right\} \tag{2.11}$$

となる．

3　超離散 Allen-Cahn 方程式

この節では，Allen-Cahn 方程式に対してトロピカル離散化を適用して，超離散 Allen-Cahn 方程式を構成し，解について考察する．

Allen-Cahn 方程式 [5] は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u\,(1-u)\,(u-a)\,, \quad 0 < a < 1 \tag{3.1}$$

という形の放物型偏微分方程式である．(2.1) において，$f(u) = (1+a)u^2$, $g(u) = u^3 + au$ と見てトロピカル離散化を行うと，次の離散方程式

$$u_{n+1}^j = \frac{m(u_n^j)\left\{1 + \epsilon\,(1+a)\,m(u_n^j)\right\}}{1 + \epsilon\left\{m(u_n^j)^2 + a\right\}} \tag{3.2}$$

を得る．次にこの式を変数変換

$$\epsilon = \exp\left(E/\varepsilon\right), \quad u_n = \exp\left(U_n/\varepsilon\right), \quad a = \exp\left(A/\varepsilon\right) \tag{3.3}$$

を行ってから，$\varepsilon \to +0$ の極限をとることで，

$$U_{n+1}^j = M(U_n^j) + \max\left\{0, E + \max(0, A) + M(U_n^j)\right\} - \max\left[0, E + \max\left\{2M(U_n^j), A\right\}\right] \tag{3.4}$$

を得る．元の方程式のパラメータの条件 $0 < a < 1$ に対応して $A < 0$ とし，以降 $E > -A$ の場合を考えると，式 (3.4) は

$$U_{n+1}^j = \max\left\{0, -E - M(U_n^j)\right\} - \max\left\{0, A - 2M(U_n^j)\right\} \tag{3.5}$$

とまとめられる．この式を超離散 Allen-Cahn 方程式と呼ぶことにする．

この式において拡散効果がないと仮定すると，常差分方程式

$$U_{n+1} = \max\left(0, -E - U_n\right) - \max\left(0, A - 2U_n\right) \tag{3.6}$$

になる．この方程式の平衡点は $U = 0, A$ である．任意の U_0 から出発したときの解は，$U_0 > A$ のときは

$$U_n = \min\{0, 2^n(U_0 - A) + A\} \quad (n \geq 1) \tag{3.7}$$

と書ける．$U_0 < A$ のときは

$$n_0 = \min\left\{0, \lceil \log_2 (A+E)/(A-U_0) \rceil\right\} \tag{3.8}$$

として

$$U_n = \begin{cases} 2^n(U_0 - A) + A & (n \leq n_0) \\ -(A+E)(n-n_0) + 2^{n_0}(U_0 - A) + A & (n \geq n_0 + 1) \end{cases} \tag{3.9}$$

と書ける．したがって $U = 0$ は安定平衡点であり．$U = A$ は不安定平衡点である．

次に，この方程式の進行解を求める．$U_n^j = V^{j-cn}$ を仮定して，

$$V^{j-c} = \max\left\{0, -E - M(V^j)\right\} - \max\left\{0, A - 2M(V^j)\right\} \tag{3.10}$$

を満たす解を求めればよい．次の定理が有効である．

定理 1 もし函数 $U_n = D(n)$ が

$$U_{n+1} = F(U_n) \tag{3.11}$$

を満たす広義単調減少函数ならば，$U_n^j = D((j-cn)/(1-c))$ $(c < 1)$ は

$$U_{n+1}^j = F(M(U_n^j)) \tag{3.12}$$

の速度 c の進行波解になる．もし函数 $U_n = I(n)$ が (3.11) を満たす広義単調増加函数ならば，$U_n^j = I((j-cn)/(-1-c))$ $(c < -1)$ は (3.12) の速度 c の進行波解になる．

さらに空間対称性から，$U_n^j = D((-j+cn)/(1+c))$ は速度 $c > -1$ の進行波解になり，$U_n^j = I((-j+cn)/(-1+c))$ は $c > 1$ の進行波解になる．今の場合，(3.7) と (3.9) より

$$D(n) = \begin{cases} -2^n(A+E)+A & (n \leq 0) \\ -(A+E)n - E & (n > 0), \end{cases} \tag{3.13}$$

$$I(n) = \min\{0, A(1-2^n)\} \tag{3.14}$$

ととれる．

進行波解 I:

$$U_n^j = D\left(\frac{j-cn}{1-c}\right) \tag{3.15}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = -\infty$ を満たす速度 $c < 1$ のフロント進行波解になる．特に $c = 0$ のときはフロント定常解になる．微分方程式ではこの形の $c \geq 0$ の解は存在しないので，そこが異なる．

進行波解 II:

$$U_n^j = \max\left\{D\left(\frac{j-cn+l}{1-c}\right), D\left(\frac{-j+cn}{1+c}\right)\right\} \tag{3.16}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = A$ を満たす速度 $|c| < 1$ のパルス進行波解になる．特に $c = 0$ のときはパルス定常解になる．この形の解は微分方程式では見られないものである．

進行波解 III:

$$U_n^j = \begin{cases} D\left(\frac{j+n+l}{2}\right) & (j \leq -n) \\ A & (j \geq -n+1) \end{cases} \tag{3.17}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = A$ を満たす速度 -1 のパルス進行波解になる．この解は進行波解 II の $c \to -1$ の極限に相当すると考えられる．この形の解も微分方程式では見られない．

進行波解 IV:

$$U_n^j = I\left(\frac{j-cn}{-1-c}\right) \tag{3.18}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = 0$ を満たす速度 $c < -1$ の進行波解になる．この形の解は微分方程式の解と対応する．

進行波解 V:

$$U_n^j = \begin{cases} A & (j \leq -n) \\ 0 & (j \geq -n+1) \end{cases} \tag{3.19}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = 0$ を満たす速度 -1 の進行波解になる．この解は進行波解 IV の $c \to -1$ の極限に相当すると考えられる．

進行波解 VI:

$$U_n^j = \begin{cases} D\left(\frac{j+n+l}{2}\right) & (j \leq -n) \\ A & (-n+1 \leq j \leq -n+k) \\ 0 & (j \geq -n+k+1) \end{cases} \tag{3.20}$$

は $\lim_{j\to-\infty} U_n^j = A$, $\lim_{j\to\infty} U_n^j = 0$ を満たす速度 -1 の進行波解になる．このような単調でない進行波は微分方程式でも存在し，それに対応する解と考えられる．

4　超離散 Gray-Scott モデル

Gray-Scott モデル [6] は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - uv^2 + a\left(1-u\right), \tag{4.1a}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + uv^2 - bv \tag{4.1b}$$

で与えられる．パルスの衝突や分裂現象が見られることから，反応拡散系においてよく研究されているモデルである．ここでは，$w = v + 1$, $D_w = D_v$ と変数変換し，

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u(w-1)^2 + a(1-u), \tag{4.2a}$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D_w \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + u(w-1)^2 - b(w-1) \tag{4.2b}$$

に対して，離散化を適用する．

式 (4.2) を式 (2.1) を元に離散化すると，

$$u^j_{n+1} = \frac{m_p(u^j_n) + \epsilon\left\{2m_p(u^j_n)w^j_{n+1} + a\right\}}{1 + \epsilon\left\{\left(w^j_{n+1}\right)^2 + 1 + a\right\}}, \tag{4.3a}$$

$$w^j_{n+1} = \frac{m_q(w^j_n) + \epsilon\left[m_p(u^j_n)\left\{m_q(w^j_n)^2 + 1\right\} + b\right]}{1 + \epsilon\left\{2m_p(u^j_n) + b\right\}} \tag{4.3b}$$

となる．但し，$m_p(u^j_n) = (u^{j+p}_n + u^{j-p}_n)/2$ とする．したがって，超離散化は

$$U^j_{n+1} = \max\left\{M_p(U^j_n) - E, M_p(U^j_n) + W^j_{n+1}, A\right\} - \max\left(-E, 2W^j_{n+1}, 0, A\right), \tag{4.4a}$$

$$W^j_{n+1} = \max\left[M_q(W^j_n) - E, M_p(U^j_n) + \max\left\{2M_q(W^j_n), 0\right\}, B\right] - \max\left\{-E, M_p(U^j_n), B\right\} \tag{4.4b}$$

となる．但し，$M_p(U^j_n) = \max(U^{j+p}_n, U^{j-p}_n)$ とする．以降 $W^j_n \geq 0$ のときを考えることにし，さらに簡単のために $E \to \infty$ とすると

$$U^j_{n+1} = \max\left\{M_p(U^j_n) + W^j_{n+1}, A\right\} - \max\left(2W^j_{n+1}, A\right), \tag{4.5a}$$

$$W^j_{n+1} = \max\left\{M_p(U^j_n) + 2M_q(W^j_n), B\right\} - \max\left\{M_p(U^j_n), B\right\} \tag{4.5b}$$

とまとめられる．さて，この式は値域をうまく制限するとセル・オートマトンにすることができる．たとえば $B \geq 1$ とすると，$U^j_n \in \{0, -1\}$, $W^j_n \in \{0, 1\}$ に制限できる．さらに，このときパラメータの取り方で 5 通りのセル・オートマトンになる．

$A \leq -1, B = 1$ のとき

$M_p(U^j_n), M_q(W^j_n)$	$0,0$	$0,1$	$-1,0$	$-1,1$
U^j_{n+1}, W^j_{n+1}	$0,0$	$-1,1$	$-1,0$	$-1,0$

(4.6)

$0 \leq A \leq 1, B = 1$ のとき

$M_p(U^j_n), M_q(W^j_n)$	$0,0$	$0,1$	$-1,0$	$-1,1$
U^j_{n+1}, W^j_{n+1}	$0,0$	$-1,1$	$0,0$	$0,0$

(4.7)

$A \geq 2, B = 1$ のとき

$$\begin{array}{c|c|c|c|c} M_p(U_n^j), M_q(W_n^j) & 0,0 & 0,1 & -1,0 & -1,1 \\ \hline U_{n+1}^j, W_{n+1}^j & 0,0 & 0,1 & 0,0 & 0,0 \end{array} \tag{4.8}$$

$A \leq -1, B \geq 2$ のとき

$$\begin{array}{c|c|c|c|c} M_p(U_n^j), M_q(W_n^j) & 0,0 & 0,1 & -1,0 & -1,1 \\ \hline U_{n+1}^j, W_{n+1}^j & 0,0 & 0,0 & -1,0 & -1,0 \end{array} \tag{4.9}$$

$A \geq 0, B \geq 2$ のとき

$$\begin{array}{c|c|c|c|c} M_p(U_n^j), M_q(W_n^j) & 0,0 & 0,1 & -1,0 & -1,1 \\ \hline U_{n+1}^j, W_{n+1}^j & 0,0 & 0,0 & 0,0 & 0,0 \end{array} \tag{4.10}$$

特に，$0 \leq A \leq 1, B = 1$ の場合 (4.7) は $U_{n+1}^j = -W_{n+1}^j$ となることから W_n^j の単独の方程式にでき，さらに $p = q = 1$ のときはフラクタル図形を描くことで知られる ECA ルール 90 と等価になる．

5　結論

1 階の常微分方程式を系統的に超離散方程式に変換する手順である「トロピカル離散化」の方法を提出した．更にその式に拡散項のついた放物型の偏微分方程式についても超離散方程式に変換できることを示した．特に，単独の反応拡散方程式である Allen-Cahn 方程式に対して，トロピカル離散化により対応する超離散方程式を構成した．更にその基本的な解である進行波解を求めた．超離散方程式は，区分的には線形方程式であるため厳密解を求めやすいという優れた特徴がある．そのことを用いて，さまざまな厳密解を提出した．今後はさまざまな方程式についてもトロピカル離散化の手法を用いて，解析が進行することが期待される．

参考文献

[1] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira and J. Satsuma: “From soliton equations to integrable cellular automata through a limiting procedure”, Phys. Rev. Lett. **29** (1996), 3247–3250.

[2] 村田 実貴生 :「微分方程式の系統立った離散化の方法」, 研究集会「非線形波動研究の新たな展開—現象とモデル化—」，九州大学応用力学研究所研究集会報告，22AO-S8 (2011), 1–6.

[3] M. Murata: “Tropical discretization: ultradiscrete Fisher-KPP equation and ultradiscrete Allen-Cahn equation”, Preprint.

[4] K. Matsuya and T. Tokihiro: “Existence and non-existence of global solutions for a discrete semilinear heat equation”, Discrete Contin. Dyn. Syst. **31** (2011), 209–220.

[5] S. Allen and J. W. Cahn: “A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening”, Acta. Metall. **27** (1979), 1084–1095.

[6] P. Gray and S. K. Scott: “Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions”, J. Phys. Chem. **89** (1985), 22–32.