

周期的な反応を考慮した相転移モデルの定常パターンについて

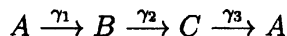
滋賀大学 教育学部 鈴木宏昌 (Hiromasa Suzuki)
Faculty of Education,
Shiga University

1 はじめに

最近, 奥園, 太田両氏によって, 空間伝搬する周期パターンを説明するモデル方程式系が提唱された [5]. それは, 相分離現象の典型的なモデル方程式である Cahn-Hilliard 方程式, またはブロックコポリマーの相分離モデル方程式の摂動系とみなすことができる. 彼らは [5] において, 2 次元領域における traveling lamellar pattern, traveling hexagonal pattern の数値シミュレーション, それらの理論解析を行っている. 本小論では, 彼らのモデル方程式を少し違った視点から取り上げ, 最も基本的な問題について考察する.

1.1 モデル方程式

ここでは [5] にもとづき, モデル方程式の導出を簡単に述べる. まず化学物質 A, B, C が



の順に, 周期的 (循環的) に変化する化学反応を考える. ψ_A, ψ_B, ψ_C をそれぞれ化学物質 A, B, C の濃度, $\gamma_i > 0$ ($i = 1, 2, 3$) を反応速度定数とすると, 濃度の時間変化は次の常微分方程式で与えられる.

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi_A}{\partial t} = -\gamma_1 \psi_A + \gamma_3 \psi_C \\ \frac{\partial \psi_B}{\partial t} = -\gamma_1 \psi_B + \gamma_3 \psi_A \\ \frac{\partial \psi_C}{\partial t} = -\gamma_1 \psi_C + \gamma_3 \psi_B \end{cases}$$

ここで正規化条件

$$\psi_A + \psi_B + \psi_C = 1$$

を仮定し, $\psi = \psi_A - \psi_B$, $\phi = \psi_A + \psi_B$ とおくと, ψ と ϕ に関する方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = h_1(\psi, \phi) := a_{11}\psi + a_{12}\phi \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} = h_2(\psi, \phi) := a_{21}\psi + a_{22}\phi \end{cases}$$

を得る。ただし

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} -(\gamma_1 + \frac{\gamma_2}{2}) & -(\gamma_1 - \frac{\gamma_2}{2} + \gamma_3) \\ -\frac{\gamma_2}{2} & -(\frac{\gamma_2}{2} + \gamma_3) \end{pmatrix}$$

である。彼らは一般的なモデル方程式として

$$(1.1) \quad \begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \cdot (M_1 \nabla \frac{\delta F}{\delta \psi}) + h_1(\psi, \phi) \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} = \nabla \cdot (M_2 \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi}) + h_2(\psi, \phi) \end{cases}$$

$$F = \int d\mathbf{r} \left[\frac{D_1}{2} |\nabla \psi|^2 + \frac{D_2}{2} |\nabla \phi|^2 + w(\psi, \phi) \right]$$

を提案した。[5]では、 $M_1 = M_2 = 1$, $D_2 = 0$, さらにポテンシャルを ϕ には依存しない

$$w(\psi, \phi) = -\frac{\tau}{2} \psi^2 + \frac{1}{4} \psi^4$$

と単純化したモデル方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 [-d \nabla^2 \psi - \tau \psi + \psi^3] + h_1(\psi, \phi), \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} = h_2(\psi, \phi) \end{cases}$$

について数値シミュレーションと理論解析を行っている。ここで τ は温度に関するパラメータであり、[5]における解析では重要な分岐パラメータである。

1.2 問題設定と主結果

ここでは、相分離現象を記述するひとつのモデル方程式として、

$$(1.2) \quad \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \Delta(-\epsilon^2 \Delta u - f(u)) + a_{11}u + a_{12}w + \gamma_3, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = a_{21}u + a_{22}w + \gamma_3, \end{cases} \quad x \in \Omega, \quad t > 0,$$

$$(1.3) \quad \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial(\Delta u)}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial n} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega$$

を扱う。ここで $f(u) = u - u^3$, ϵ は十分小さい正の数, $\Omega \subset \mathbf{R}^N (N \geq 1)$ である。 ϵ が十分小さいことは、相分離が十分に進んだ状態 (strong segregation limit) を考えることを意味する。

あとの解析のため, 新しい変数 $v(x, t)$ を導入し (1.2)-(1.3) を

$$(1.4) \quad \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -\Delta v + a_{11}u + a_{12}w + \gamma_3, \\ 0 = \epsilon^2 \Delta u - f(u) - v, \\ \frac{\partial w}{\partial t} = a_{21}u + a_{22}w + \gamma_3 \end{cases} \quad x \in \Omega, \quad t > 0,$$

$$(1.5) \quad \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial n} = 0 \quad x \in \partial\Omega$$

と書き換えておく. 本報告では方程式 (1.4)-(1.5) について, 最も基本的な次の問題についてのみ考察する.

問題. 空間 1 次元の有界領域 $(0, L)$ において, 空間非一様な定常解は存在するか. 存在すればその安定性はどうか.

高次元パターンの解の挙動を解析する際, 1 次元問題の考察は重要な役割を果たす. またここではふれないが, 空間 1 次元の問題に限っても, 解やその安定性のパラメータ a_{ij} 等への依存性など調べるべき問題は多くある.

1 次元定常問題は

$$(1.6) \quad \begin{cases} \epsilon^2 u_{xx} + f(u) - v = 0, \\ v_{xx} - a_{11}u - a_{12}w - \gamma_3 = 0, \quad 0 < x < L, \\ a_{21}u + a_{22}w + \gamma_3 = 0 \end{cases}$$

$$u_x(0) = 0 = u_x(L), \quad v_x(0) = 0 = v_x(L), \quad w_x(0) = 0 = w_x(L).$$

で与えられる. (1.6) の第 3 式を w について解き, 第 2 式に代入すると

$$(1.7) \quad \begin{cases} \epsilon^2 u_{xx} + f(u) - v = 0, \\ v_{xx} + \alpha u + \beta = 0, \end{cases}$$

ただし,

$$\alpha = \frac{a_{12}a_{21} - a_{11}a_{22}}{a_{22}} > 0, \quad \beta = \left(\frac{a_{12}}{a_{22}} - 1 \right) \gamma_3$$

である. (1.7) は activator-inhibitor 系の定常問題と同じであることに注意しよう. 接合漸近展開法によって (1.7) の特異摂動解を構成するためには, 縮約問題

$$(1.8)_- \quad \begin{cases} v_{xx}^- + \alpha h^-(v^-) + \beta = 0, \quad 0 < x < x_0, \\ v_x^-(0) = 0, \quad v^-(x_0) = v^*, \end{cases}$$

$$(1.8)_+ \quad \begin{cases} v_{xx}^+ + \alpha h^+(v^+) + \beta = 0, & x_0 < x < L, \\ v^+(x_0) = v^*, & v_x^+(L) = 0, \end{cases}$$

$$(1.9) \quad v_x^-(x_0) = v_x^+(x_0).$$

の解の存在しなければならない. ここで $u = h^\pm(v)$ は $f(u) - v = 0$ の零点集合の枝のうち $h^-(v) < h^0(v) < h^+(v)$ なるもの (図 1 参照), $v^*(=0)$ は

$$J(v) = \int_{h^-(v)}^{h^+(v)} (f(u) - v) du$$

の零点である.

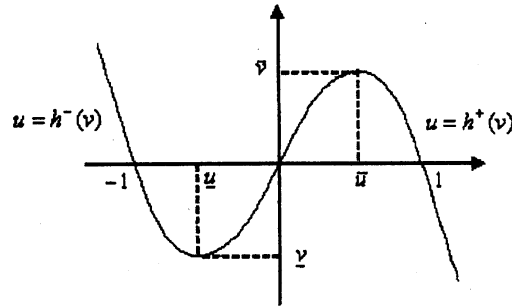


図 1: $f(u)$ の関数形

縮約問題の解の存在は, α, β, L に関する適当な条件のもとで保証される (後述の Proposition 2.1 参照). $(1.8)_\pm$ -(1.9) の解 $v^\pm(x)$ に対し, $V^*(x)$ を次で定義する.

$$V^*(x) = \begin{cases} v^-(x) & x \in (0, x_0) \\ v^+(x) & x \in (x_0, L) \end{cases}$$

定常解の存在について, 次の結果が得られる.

Theorem 1.1. $(1.8)_\pm$ -(1.9) の解 $V^*(x)$ の存在を仮定する. このとき, 次が成り立つような $\epsilon_0 > 0$ が存在する: $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ に対して定常問題 (1.6) の解 $(u^\epsilon(x), v^\epsilon(x), w^\epsilon(x))$ が存在し, 次の性質をもつ.

(i) $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} v^\epsilon(x) = V^*(x)$ uniformly on $[0, L]$

(ii) $0 < \delta < \min\{x_0, L - x_0\}$ なる δ に対し

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} u^\epsilon(x) = \begin{cases} h^-(V^*(x)) & \text{on } [0, x_0 - \delta] \\ h^+(V^*(x)) & \text{on } [x_0 + \delta, L]. \end{cases}$$

定常解 $(u^\epsilon(x), v^\epsilon(x), w^\epsilon(x))$ の安定性を調べるため、次の線形化固有値問題を考える。

$$(1.10) \quad \begin{cases} \lambda^\epsilon p = -q_{xx} + a_{11}p + a_{12}r, \\ 0 = \epsilon^2 p_{xx} + f'(u^\epsilon(x))p - q, \\ \lambda^\epsilon r = a_{21}p + a_{22}r, \end{cases}$$

$$(1.11) \quad p_x(0) = 0 = p_x(L), \quad q_x(0) = 0 = q_x(L), \quad r_x(0) = 0 = r_x(L).$$

この固有値問題の解析の結果、次のことがわかる。

Theorem 1.2. $a_{12} < 0$, $(a_{22} - \tau^*)^2 + 4a_{12}a_{21} \neq 0$ とする。このときある $\epsilon_0 > 0$ が存在し、すべての $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ に対して固有値問題 (1.10)-(1.11) の固有値 λ^ϵ の実部は負。すなわち、定常解 $(u^\epsilon(x), v^\epsilon(x), w^\epsilon(x))$ は局所漸近安定である。ここで τ^* は、固有値問題

$$\begin{cases} q_{xx} + (\tau^\epsilon - a_{11})p = 0, \\ \epsilon^2 p_{xx} + f'(u^\epsilon(x))p - q = 0, \end{cases}$$

$$p_x(0) = 0 = p_x(L), \quad q_x(0) = 0 = q_x(L)$$

の固有値 τ^ϵ の極限值 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tau^\epsilon = \tau^*$ である。

第2節では定常解の構成、第3節で線形化固有値問題の解析を行う。最後に第4節で考察を行う。

2 定常解の構成

縮約問題 (1.8)_±-(1.9) の解の存在について、次が成り立つ。

Proposition 2.1. $u^* = -\beta/\alpha$ とする。

(i) $\underline{u} < u^* < \bar{u}$ のとき、ある $L_0 > 0$ が存在し、 $L \in (0, L_0)$ なる L に対して (1.8)_±-(1.9) の解が存在する。

(ii) $-1 < u^* \leq \underline{u}$ または $\bar{u} \leq u^* < 1$ のとき、すべての $L > 0$ に対して (1.8)_±-(1.9) の解が存在する。

ここで、 $\underline{u}, \bar{u}$ ($\underline{u} < \bar{u}$) は $f'(u) = 0$ の2つの零点である (図1参照)。

Proof. 非線形項 $\alpha h^\pm(v) + \beta$ の零点の有無によって (ii) または (i) の状況となる。証明は通常の相平面解析によるため、詳細については省略する。

Proof of Theorem 1.1. 縮約問題の解の存在が保証されれば、[1], [2] と同様にして定常解を構成することができる。

3 線形化固有値問題

(1.10) の第3式を r について解き, 第1式に代入すると

$$(3.1) \quad \begin{cases} q_{xx} + (\tau^\epsilon - a_{11})p = 0, \\ \epsilon^2 p_{xx} + f'(u^\epsilon(x))p - q = 0, \end{cases}$$

$$(3.2) \quad p_x(0) = 0 = p_x(L), \quad q_x(0) = 0 = q_x(L)$$

ただし

$$(3.3) \quad \tau^\epsilon = \lambda^\epsilon - \frac{a_{12}a_{21}}{\lambda^\epsilon - a_{22}}$$

である. (3.1)-(3.2) は, $\int_I p(x)dx = 0$ という制約がつかないことを除いて, ブロックコポリマーの相分離モデルに関する固有値問題と同じ形をしていることに注意する. 式(3.1)-(3.2) を τ^ϵ を固有値とする固有値問題とみなして解くと, 次の結果が得られる.

Theorem 3.1. ある $\epsilon_0 > 0$ が存在し, すべての $\epsilon \in (0, \epsilon_0)$ に対して次が成り立つ:

- (i) (3.1)-(3.2) の固有値 τ^ϵ はすべて負の実数
- (ii) 極限值 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \tau^\epsilon = \tau^*$ が存在し, $\tau^* < 0$.

τ^ϵ の符号と $\epsilon \rightarrow 0$ の挙動がわかれば, Theorem 1.2 の証明は容易である.

Proof of Theorem 1.2. (3.3) を λ^ϵ について整理して

$$(3.4) \quad (\lambda^\epsilon)^2 - (\tau + a_{22})\lambda^\epsilon + \tau a_{22} - a_{12}a_{21} = 0.$$

(3.4) を λ^ϵ の2次方程式とみなすと, 判別式 D は

$$D = (a_{22} - \tau^\epsilon)^2 + 4a_{12}a_{21}$$

である. a_{ij} ($i, j = 1, 2$) と τ^ϵ の符号に注意すると, 十分小さい $\epsilon > 0$ に対して

$$D > 0 \quad \text{のとき} \quad \lambda_1^\epsilon + \lambda_2^\epsilon = a_{22} + \tau^\epsilon < 0, \quad \lambda_1^\epsilon \lambda_2^\epsilon = a_{22}\tau^\epsilon - a_{12}a_{21} > 0$$

$$D < 0 \quad \text{のとき} \quad 2\operatorname{Re}\lambda^\epsilon = a_{22} + \tau^\epsilon < 0, \quad \lambda^\epsilon \overline{\lambda^\epsilon} = |\lambda|^2 = a_{22}\tau^\epsilon - a_{12}a_{21} > 0$$

となることがわかる. ただし, λ_i^ϵ ($i = 1, 2$) は (3.4) の実数解, λ^ϵ は複素数解のひとつをそれぞれ表している. これより結論が得られる.

Remark 3.2. 周期的 (循環的) に変化する化学反応を考えている限り, a_{ij} ($i, j = 1, 2$) の符号は a_{12} を除き確定している. 上の証明から, γ_k ($k = 1, 2, 3$) のいずれかを分岐パラメータとして変化させたとき, $a_{12} > 0$ となった場合には, 実固有値が正となって不安定化が起こる可能性があることがわかる.

Proof of Theorem 3.1. 固有値が実数であることは、ブロックコポリマーに関する固有値問題が変分法的特徴付け可能であることからわかる。

以下、 τ^ϵ の符号について考察する。(3.1)第1式の両辺を0から L まで x について積分すると

$$(\tau^\epsilon - a_{11}) \int_0^L p(x) dx = 0.$$

$\tau^\epsilon - a_{11} = 0$ のときは、 $\tau^\epsilon = a_{11} < 0$ 。以下、 $\tau^\epsilon - a_{11} > 0$ かつ $\int_0^L p(x) dx = 0$ の場合について考える。

まず次の Sturm-Liouville 型固有値問題を考える。

$$\begin{cases} L^\epsilon \phi := \epsilon^2 \phi_{xx} + f'(u^\epsilon(x)) \phi = \zeta \phi, & x \in I, \\ \phi_x(0) = 0 = \phi_x(L), \end{cases}$$

L^ϵ の固有値を $\{\zeta_n^\epsilon\}_{n \geq 0}$ 、固有関数を $\{\phi_n^\epsilon\}_{n \geq 0}$ と表す。

(3.1)の第2式を p について解くと

$$(3.5) \quad p = (L^\epsilon)^{-1} q = \frac{\langle q, \phi_0^\epsilon \rangle}{\zeta_0^\epsilon} \phi_0^\epsilon + (L^\epsilon)^\dagger(q), \quad (L^\epsilon)^\dagger := \sum_{n \geq 1} \frac{\langle \cdot, \phi_n^\epsilon \rangle}{\zeta_n^\epsilon} \phi_n^\epsilon.$$

以下の補題はいずれも [2] と同様に示すことができる。

Lemma 3.3.

$$(i) \quad \zeta_0^\epsilon > 0 > -\delta > \zeta_1^\epsilon > \zeta_2^\epsilon > \cdots, \quad (\delta > 0 \text{ は } \epsilon \text{ に無関係})$$

$$(ii) \quad \lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{\zeta_0^\epsilon}{\epsilon} = \hat{\zeta}_0^* > 0.$$

Lemma 3.4. $h \in L^2(I) \cap L^\infty(I)$ に対して

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} (L^\epsilon)^\dagger(h) = \frac{h}{f_u^*}, \quad \text{strongly in } L^2\text{-sense.}$$

ただし、 $f_u^* := \lim_{\epsilon \rightarrow 0} f'(u^\epsilon(x))$ 。

Lemma 3.5.

$$\lim_{\epsilon \downarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \phi_0^\epsilon = c^* \delta_{x_0} \quad H^{-1}(I)\text{-sense } (c^* > 0).$$

(3.5)の両辺を0から L まで x について積分して

$$\langle q, \phi_0^\epsilon / \sqrt{\epsilon} \rangle \int_0^L \frac{1}{\zeta_0^\epsilon / \epsilon} \frac{\phi_0^\epsilon}{\sqrt{\epsilon}} dx + \int_0^L (L^\epsilon)^\dagger(q) dx = 0$$

Lemma 3.3-Lemma 3.5 より、次の極限值が存在することがわかる。

$$q^* := \frac{1}{c^*} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle q, \phi_0^\epsilon / \sqrt{\epsilon} \rangle.$$

(3.5) を (3.1) の第 1 式に代入して

$$(3.6) \quad q_{xx} + (\tau^\epsilon - a_{11}) \left[\frac{\langle q, \phi_0^\epsilon / \sqrt{\epsilon} \rangle}{\hat{\zeta}_0^\epsilon / \epsilon} \phi_0^\epsilon / \sqrt{\epsilon} + (L^\epsilon)^\dagger(q) \right] = 0$$

を得る.

$\tau^\epsilon = o(1)$ ($\epsilon \rightarrow 0$) のとき, (3.6) で $\epsilon \rightarrow 0$ とした極限方程式は次と同値である.

$$(3.7) \quad \begin{cases} q_{xx} - \frac{a_{11}}{f_u^*} q = 0, & x \in (0, x_0) \cup (x_0, L) \\ q_x(0) = 0 = q_x(L), & q(x_0) = 1, \\ \lim_{x \rightarrow x_0+0} q_x(x) - \lim_{x \rightarrow x_0-0} q_x(x) = \frac{(c^*)^2 a_{11}}{\hat{\zeta}_0^*}. \end{cases}$$

ここで $q(x)/q^*$ をあらためて $q(x)$ とし, $q(x_0) = 1$ となるよう正規化した. (3.7) は過剰決定問題となり, 一般に解は存在しない.

$\tau^\epsilon = O(1)$ ($\epsilon \rightarrow 0$) のとき, (3.6) の極限方程式は次と同値となる.

$$(3.8) \quad \begin{cases} q_{xx} + \frac{\tau^* - a_{11}}{f_u^*} q = 0, & x \in (0, x_0) \cup (x_0, L) \\ q_x(0) = 0 = q_x(L), & q(x_0) = 1, \\ \lim_{x \rightarrow x_0+0} q_x(x) - \lim_{x \rightarrow x_0-0} q_x(x) = -\frac{(c^*)^2 (\tau^* - a_{11})}{\hat{\zeta}_0^*}. \end{cases}$$

[2] の Lemma 2.4 と同様に, (3.8) に Neumann 境界条件ではなく Dirichlet 境界条件

$$q(0) = 0 = q(L)$$

を課した問題 (3.8)_D は, 解 $(q, \tau^*) = (q^D, 0)$ をもつことがわかる. 以後, 添字 D は Dirichlet 境界条件の場合を表す. また [2] の Lemma 2.5 より, $x = x_0$ における微分係数の差

$$[q_x] := \lim_{x \rightarrow x_0+0} q_x(x) - \lim_{x \rightarrow x_0-0} q_x(x)$$

に対して

$$[q_x^D] < [q_x] < 0,$$

すなわち

$$(3.9) \quad -\frac{(c^{*,D})^2 (-a_{11})}{\hat{\zeta}_0^{*,D}} < -\frac{(c^*)^2 (\tau^* - a_{11})}{\hat{\zeta}_0^*}$$

が成り立つことがわかる. さらに Lemma 3.5 に現れた定数 c^* と Sturm-Liouville 型固有値問題の固有値を ϵ で割ったものの極限 $\hat{\zeta}_0^*$ が, 境界条件によらず同じであることに注意すると, (3.9) から $\tau^* < 0$ を得る. 十分小さな $\epsilon > 0$ に対して $\tau^\epsilon < 0$ となることも, [2] と同様に示すことができる.

4 考察

本小論では、空間1次元の有界領域において、(1.4)-(1.5)の空間非一様な定常解の構成とその安定性解析を行った。ここで行った解析は最も基本的問題のみで、定常解やその安定性のパラメータ依存性等は今後の研究課題である。この方程式系は、Cahn-Hilliard方程式(CH)、ブロックコポリマーの相分離モデル方程式(BC)の摂動系であり、見方を変えれば、摂動されたCahn-Hilliard方程式系(1.1)の縮約系—ポテンシャル $w(\psi, \phi)$ の簡略化と $|\nabla u|$ の影響の無視($D_2 = 0$)—とみることもできる。いずれにせよ(CH)や(BC)ではみられないパターン形成のダイナミクスが内在する可能性があり、相分離現象を記述するひとつのモデル方程式系として興味深い。例えば、 a_{ij} の符号に関する制約がなければ、Remark 3.2で述べたもののほかにも様々な分岐現象が起こる可能性がある。

本小論で行った1次元問題の解析から、解の挙動や解析の手法について(BC)との関係が深いことが推測される。実際、次の問題に関しては(BC)と同様の解析が可能であると予想される。

- ・スケーリング則 ([3])
- ・矩形領域における平面波解, 球状領域における球対称解の存在と安定性解析 ([4])

[5]ではもともと、空間を伝搬する周期パターンを説明するために(1.1)を導出している。そのことを考慮すれば、周期境界条件のもと、strong segregation limitにおいて同様のパターンが存在しうるかを考察することにも意味がある。いずれも今後の研究課題である。

参考文献

- [1] M.Mimura, M.Tabata and Y.Hosono, Multiple solutions of two-point boundary value problems of Neumann type with a small parameter, SIAM J. Math. Anal., 11 (1980), 613-631.
- [2] Y.Nishiura and H.Fujii, Stability of singularly perturbed solutions to systems of reaction diffusion equations, SIAM J. Math. Anal., 18 (1987), 1726-1770.
- [3] Y.Nishiura and I.Ohnishi, Some aspect mathematical of the micro-phase separation in diblock copolymers, Physica D 84 (1995), 31-39.
- [4] Y.Nishiura and H.Suzuki, Higher dimensional SLEP equation and applications to morphological stability in polymer problems, Preprint (2003), submitted for publication.
- [5] T. Okuzono and T. Ohta, Traveling waves in phase-separating reactive mixtures, Phys. Rev. E 67, 056211 (2003).