

# セルオートマトンの逆超離散化と BZ 反応への応用

島根大学物質科学科 田中 宏志(Hiroshi Tanaka), 西山 了允(Akimbo Nishiyama)

Dept. of Materials Science, Shimane University

東京大学大学院数理科学研究科 時弘 哲治(Tetsuji Tokihiro)

Graduate School for Mathematics, Tokyo University

## 1. はじめに

近年, ソリトンに代表される可積分な偏微分方程式において, 解の性質を保存したまま解析的にセルオートマトン(CA)に移行する手法として超離散化が提案され, 色々な系に適用され大きな成果を上げている[1]. しかし, 逆のプロセスである逆超離散化には様々な困難があり長年の問題であった. 我々は昨年, エレメンタリー・セルオートマトン(ECA)において逆超離散化を行い, フラクタル図形の1つであるシェルピンスキー・ガスケット・パターンを解として持つ偏微分方程式の導出に成功した[2].

本研究の目的は, これをさらに一般化し, 任意の CA に対応する偏微分方程式を逆超離散化により導出する普遍的な方法確立することである. これにより, 偏微分方程式と CA の関係を明らかにし, さらに両者の間を自由に行き来できるようにする.

そこで, 偏微分方程式の中でも解の性質が十分に解析されている反応拡散方程式を例にとり, その CA モデルの逆超離散化を試みた.

## 2. BZ 反応のモデル CA

BZ 反応は, 反応拡散方程式,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \Delta u + f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \Delta v + g(u, v) \end{cases} \quad (1)$$

により再現できることが知られており, その時間発展はターゲット・パターンやスパイラル・パターンを示す.

反応項としては様々なものが提唱されているが, 基本的にはヌルクラインが図 1 のようになっており, 点 A が不安定であるために  $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A \rightarrow \dots$  というリミットサイクルを繰り返す[3].

これをモデル化した CA で最も簡単なモデルは, 図 2 で表せるものであろう[4]. 各セルの状態( $u$  と  $v$ )は時

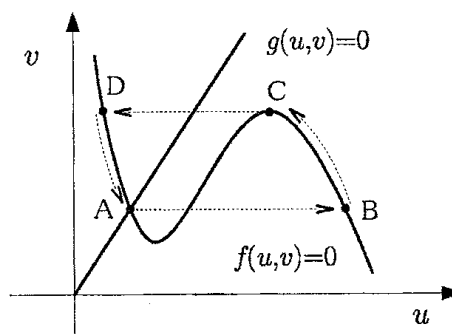


図 1 BZ 反応を再現する反応拡散方程式の反応項のヌルクライン

間ステップが進むごとに  $B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow A$  と自動的に移っていくものとする。ただし、A 点にいるときは隣接するセルの状態により A 点にとどまるか B 点に移るとする。以下では、ムーア近傍のセルの状態を見て次の時間ステップの状態を決める場合を考える。時刻  $t$  での  $m$  行  $n$  列の状態を  $u_{m,n}^t$  とする。時刻  $t$  にムーア近傍で活性化しているセルの数を  $x$  とする。即ち、

$$x = u_{m-1,n-1}^t + u_{m-1,n}^t + u_{m-1,n+1}^t + u_{m,n-1}^t + u_{m,n+1}^t + u_{m+1,n-1}^t + u_{m+1,n}^t + u_{m+1,n+1}^t \quad (2)$$

とすると、上の CA ルールは表 1 のように書ける。また、このルールにより得られたスパイラル型の時間発展パターンを図 3 に示す。

| $(u_{m,n}^t, v_{m,n}^t)$ | $(u_{m,n}^{t+1}, v_{m,n}^{t+1})$                    |
|--------------------------|-----------------------------------------------------|
| A : (0, 0)               | B : (1, 0) ( $x \geq 2$ )<br>A : (0, 0) ( $x < 2$ ) |
| B : (1, 0)               | C : (1, 1)                                          |
| C : (1, 1)               | D : (0, 1)                                          |
| D : (0, 1)               | A : (0, 0)                                          |

表 1 BZ 反応のモデル CA の時間発展ルール

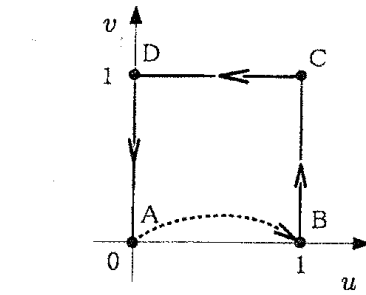


図 2 BZ 反応の CA モデル

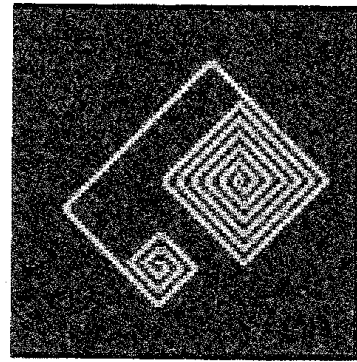


図 3 BZ 反応のモデル CA の時間発展パターン

### 3. 逆超離散化

以下では、表 1 で与えられる CA ルールを逆超離散化することで対応する偏微分方程式を求めることを考える。ステップとしては、まず(1)逆超離散化を行い差分方程式を求め、(2)これを時間方向に連続化して微差分方程式とし、(3)最後に空間方向にも連続化して偏微分方程式にする。以下、この順番に説明していく。

#### 3. 1. 差分方程式への変換

まず、表 1 で与えられる CA ルールを逆超離散化する。その際、マックス・プラス代数を用いることも可能であるが、ここではより簡便なアプローチをとることにする。そのためにステップ関数を滑らかにしたような図 4 で示される関数  $\theta_\epsilon^2(x)$  を用意する。概形がこのような形をしていれば具体的にはどのような関数でも良い。すると、表 1 のルールは、

$$\begin{cases} u_{m,n}^{t+1} = (1-u_{m,n}^t)(1-v_{m,n}^t)\theta_\varepsilon^2(x) + u_{m,n}^t \cdot (1-v_{m,n}^t) \equiv E(u_{m,n}^t, v_{m,n}^t, x) \\ v_{m,n}^{t+1} = u_{m,n}^t \end{cases} \quad (3)$$

と書き換えることが出来る。これで差分方程式が求まったことになるが、これをそのまま時間発展させるとパターンは安定しない。状態  $u_{m,n}^t$  が 0 から 1 までの連続的な値をとるため、ECA

の場合と同じである。そこで、ECA の逆超離散化の時と同じように[5],  $u_{m,n}^t$  の値を強制的に 0

か 1 に引き戻すフィルターを導入することで次の連立差分方程式を得る。

$$\begin{cases} u_{m,n}^{t+1} = E(\tilde{u}_{m,n}^t, \tilde{v}_{m,n}^t, \tilde{x}) \\ v_{m,n}^{t+1} = \tilde{u}_{m,n}^t \\ \tilde{u}_{m,n}^t = F_\varepsilon(u_{m,n}^t) \\ \tilde{v}_{m,n}^t = F_\varepsilon(v_{m,n}^t) \end{cases} \quad (4)$$

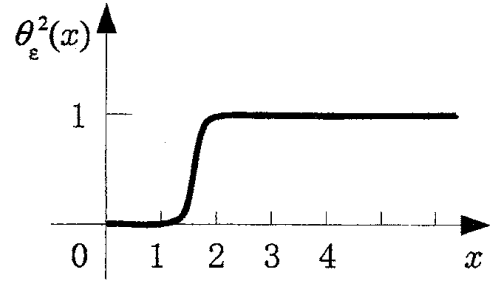


図 4 逆超離散化で使用する関数

ここで、

$$F_\varepsilon(u) = \frac{1}{1 + e^{-(u-\Delta)/\varepsilon}}, \quad (5)$$

$$\tilde{x} = \tilde{u}_{m-1,n-1}^t + \tilde{u}_{m-1,n}^t + \tilde{u}_{m-1,n+1}^t + \tilde{u}_{m,n-1}^t + \tilde{u}_{m,n+1}^t + \tilde{u}_{m+1,n-1}^t + \tilde{u}_{m+1,n}^t + \tilde{u}_{m+1,n+1}^t \quad (6)$$

この連立差分方程式は、元の CA と同じ時間発展パターンを示す。

### 3. 2. 時間連続微差分方程式への変換

次に、式(4)を時間方向に連続化することで偏微分方程式を導出する。しかし、単純に連続化したのでは上手く行かないので ECA の逆超離散化のときと同じように時間遅れを導入することにする[2]。得られる方程式は、

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} u_{m,n}(t) = -(u_{m,n}(t) - E(\tilde{u}_{m,n}(t), \tilde{v}_{m,n}(t), \tilde{x}(t))) \\ \frac{\partial}{\partial t} v_{m,n}(t) = -(v_{m,n}(t) - \tilde{u}_{m,n}(t)) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{u}_{m,n}(t) = -\gamma(\tilde{u}_{m,n}(t) - F_\varepsilon(u_{m,n}(t))) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{v}_{m,n}(t) = -\gamma(\tilde{v}_{m,n}(t) - F_\varepsilon(v_{m,n}(t))) \end{cases} \quad (7)$$

ただし、

$$\begin{aligned}\tilde{x}(t) = & \tilde{u}_{m-1,n-1}(t) + \tilde{u}_{m-1,n}(t) + \tilde{u}_{m-1,n+1}(t) + \tilde{u}_{m,n-1}(t) \\ & + \tilde{u}_{m,n+1}(t) + \tilde{u}_{m+1,n-1}(t) + \tilde{u}_{m+1,n}(t) + \tilde{u}_{m+1,n+1}(t)\end{aligned}\quad (8)$$

となる。ここで、 $\gamma=1$ とすると(4)式を単純に時間連続化した方程式に対応する。実際には $\gamma$ を1より大きい適当な値にとることで、 $u_n(t)$ と $v_n(t)$ が $\tilde{u}_n(t)$ と $\tilde{v}_n(t)$ よりも一定時間遅れるようにする。もとのセルオートマトンでは、1ステップ前の時刻の状態から現在の状態を決定する。従って偏微分方程式にしたときも、セルオートマトンの1時間ステップに対応する時間だけ前の状態を見て現在の状態を決めるようにしなければいけないため時間遅れを導入する必要があるのである。

微差分方程式(7)を数値的に解いて得られた時間発展パターンを図5に示す。時間連続微差分方程式の解が元のCAの時間発展パターンを保存していることが分かる。

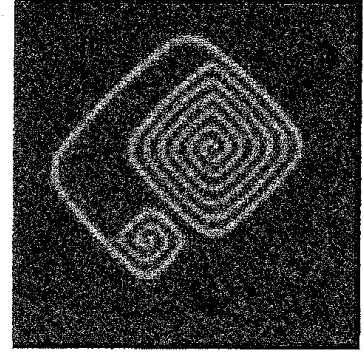


図5 BZ反応モデルCAを時間連続化した微差分方程式の時間発展パターン

### 3. 3. 時空間連続偏微分方程式への変換

最後に、式(7)を空間方向に連続化することで偏微分方程式を導出する。その際、CAでは1ステップ前のムーア近傍のセルの状態から現在の状態を決めるので、CAでムーア近傍のセルの状態に対応する補助場を導入する必要がある。結局得られる偏微分方程式は次式のようにになる。

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(x, y, t) &= -(u(x, y, t) - E(\tilde{u}(x, y, t), \tilde{v}(x, y, t), \tilde{x}(t))) \\ \frac{\partial}{\partial t} v(x, y, t) &= -(v(x, y, t) - \tilde{u}(x, y, t)) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{u}(x, y, t) &= -\gamma(\tilde{u}(x, y, t) - F_\epsilon(u(x, y, t))) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{v}(x, y, t) &= -\gamma(\tilde{v}(x, y, t) - F_\epsilon(v(x, y, t))) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{u}^{\pm x}(x, y, t) &= -\gamma \left( \pm \lambda \frac{\partial}{\partial x} \tilde{u}^{\pm x}(x, y, t) + \tilde{u}^{\pm x}(x, y, t) - F_\epsilon(u(x, y, t)) \right) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{u}^{\pm y}(x, y, t) &= -\gamma \left( \pm \lambda \frac{\partial}{\partial x} \tilde{u}^{\pm y}(x, y, t) + \tilde{u}^{\pm y}(x, y, t) - F_\epsilon(u(x, y, t)) \right) \\ \frac{\partial}{\partial t} \tilde{u}^{\pm x \pm y}(x, y, t) &= -\gamma \left( \pm \lambda \frac{\partial}{\partial x} \tilde{u}^{\pm x \pm y}(x, y, t) \pm \lambda \frac{\partial}{\partial y} \tilde{u}^{\pm x \pm y}(x, y, t) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{u}^{\pm x \pm y}(x, y, t) - F_\epsilon(u(x, y, t)) \right) \end{aligned} \right. \quad (9)$$

ただし、

$$\begin{aligned}\tilde{u}(t) = & \tilde{u}^x(x, y, t) + \tilde{u}^{-x}(x, y, t) + \tilde{u}^y(x, y, t) + \tilde{u}^{-y}(x, y, t) \\ & + \tilde{u}^{x+y}(x, y, t) + \tilde{u}^{x-y}(x, y, t) + \tilde{u}^{-x+y}(x, y, t) + \tilde{u}^{-x-y}(x, y, t)\end{aligned}\quad (10)$$

ここで,  $u^{\pm x}(x, y, t)$  は,  $\pm x$  方向に伝播する補助場で, セルオートマトンの  $\pm x$  方向の近傍セルの状態  $u_{m, n \pm 1}^t$  に対応する. また,  $u^{\pm y}(x, y, t)$  は,  $\pm y$  方向に伝播する補助場で, セルオートマトンの  $\pm y$  方向の近傍セルの状態  $u_{m \pm 1, n}^t$  に対応する. 同様に,  $u^{\pm x \pm y}(x, y, t)$  は,  $\pm x \pm y$  方向に伝播する補助場で, セルオートマトンの  $\pm x \pm y$  方向の近傍セルの状態  $u_{m \pm 1, n \pm 1}^t$  に対応する.

この偏微分方程式を数値的に解いて得られた時間発展パターンを図 6 に示す. もとの CA モデルのパターンが再現されていることが分かる.

#### 4. 今後の課題

ここでは BZ 反応の CA モデルから出発して逆超離散化を行い, 解の性質を保存した偏微分方程式が求まることを示した. しかしながら得られた偏微分方程式と反応拡散方程式の関係はまだ明らかではない. 特に, CA モデルから求めた偏微分方程式は陽には拡散項を含んでいない. 今後は両者の関係を明らかにし, 反応拡散方程式と CA モデルを 1 対 1 に対応させる必要がある.

また, 応用の立場からすると等方的なパターンを再現する CA モデルを構築する必要がある. CA モデルでは, 多くの場合セル形状の対称性により時間発展パターンが非等方的に成ってしまう. Markus らは, CA の時間発展ルールにおいて遠くのセルまで考慮に入れることで等方的なパターンを再現している[6]. しかし, これでは「簡単なルールで複雑なパターンを再現する」という CA の利点は薄れてしまう(偏微分方程式を差分で解くのと手間は変わらなくなってしまう).

これら 2 つの問題を解く鍵は, CA ルールに確率過程を導入することであると考えている. 図 7 は予備的な結果であるが, CA ルールに確率過程を導入することでムーア近傍を考えるだけで等方的なターゲット・パターンを得ることに成功している.

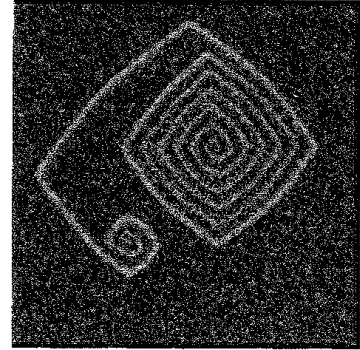


図 6 BZ 反応モデル CA を時空間で連続化した偏微分方程式の時間発展パターン

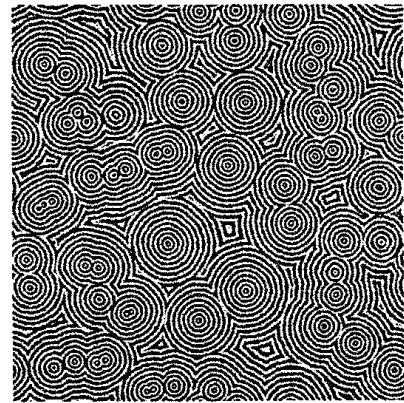


図 7 確率過程を導入することで等方性を回復した BZ 反応の CA モデル

## 参考文献

- [1] T.Tokihiro, D.Takahashi, J.Matsukidaira, and J.Satsuma, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3247 (1996).
- [2] W.Kunishima, A.Nishiyama, H.Tanaka, and T.Tokihiro, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 2033 (2004).
- [3] 加藤恭義, 光成友孝, 築山洋, 「セルオートマトン法」, 北森出版.
- [4] 道端信貴, 東京大学大学院数理科学研究科修士論文(平成 12 年度).
- [5] A.Nobe, J.Satsuma, and T.Tokihiro, *J. Phys. A* **34**, L371 (2001).
- [6] M. Markus, *Biomed. BioChim. Acta*, **49**, 681-696 (1990).