

反応拡散系の超離散化可能な離散化とその Turing 不安定性について

武蔵野大学・工学部数理工学科* 松家 敬介

Keisuke Matsuya

Department of Mathematical Engineering, Faculty of Engineering
Musashino University

§1. はじめに

超離散化 [1, 2] とは有理式の形をした差分方程式に対して極限操作を行うことで新たな差分方程式を得る操作のことである。超離散化で得られた差分方程式はまるめ誤差を考慮する必要がなく、数値計算に適している。さらに、方程式の解として箱玉系 [1, 3, 4] を代表とするセルオートマトンが得られることもある。セルオートマトンとは有限の状態をとる離散力学系のことである。箱玉系はソリトン方程式に代表される可積分系の偏微分方程式と離散化・超離散化によってつながっている。筆者は可積分系の方程式とは限らない微分方程式の離散化や超離散化であって元の方程式の解の性質を保持するものを探すことに興味をもっている。ただ、差分方程式に減算があると極限をとることができないために超離散化を行うことができない [2]。そこで、本稿では反応項が有理式である反応拡散系に対して減算を含まない離散化を与え、得られた偏差分方程式系と元の反応拡散系の平衡解の安定性の関係について議論する。この内容は [5] にあるものである。また、補遺としてソリトン方程式の一つとして知られている KdV 方程式と箱玉系の関係について紹介する。

§2. 反応拡散系の減算のない離散化

以下の形をした反応拡散系：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u + f_1(u, v) - u g_1(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + f_2(u, v) - v g_2(u, v) \end{cases} \quad (1)$$

の離散化について考える．ただし, $u = u(t, x)$, $v = v(t, x)$, $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^d$, $D_u, D_v > 0$, Δ は d 次元ラプラシアンとし, $f_j(u, v)$, $g_j(u, v)$ ($j = 1, 2$) は減算を含まない u, v による有理式であるとする．本節では (1) の離散化の手法を紹介する．

§2.1. 反応拡散系に対応する常微分方程式系の離散化

(1) の離散化を議論する準備として, 本節では (1) の空間一様な解が満たす常微分方程式系：

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f_1(u, v) - u g_1(u, v) \\ \frac{dv}{dt} = f_2(u, v) - v g_2(u, v) \end{cases} \quad (2)$$

の離散化について紹介する．この離散化は [6] で報告されているものである．

(2) に対して微分を差分商に置き換えるという自然な離散化を施すと, 次の差分方程式系：

$$\begin{cases} \frac{u^{s+1} - u^s}{\delta} = f_1(u^s, v^s) - u^s g_1(u^s, v^s) \\ \frac{v^{s+1} - v^s}{\delta} = f_2(u^s, v^s) - v^s g_2(u^s, v^s) \end{cases}$$

が得られる．ただし, $s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ であり, $\delta > 0$ は時刻 t に対する差分刻みである．この差分方程式系に対して非負の初期条件を与えたとき, 差分刻み δ の値によっては必ずしも非負の解が得られるとは限らない．これは (2) の場合と異なる状況である．実際に, (2) に対して非負の初期条件を与えたとき, 非負の解が得られることが (2) の方程式系の形から分かる．そこで, 解の非負値性を保存する離散化を考えたい．そのような離散化を施すと, 次の差分方程式系：

$$\begin{cases} u^{s+1} = \frac{u^s + \delta f_1(u^s, v^{s+1})}{1 + \delta g_1(u^s, v^{s+1})} \\ v^{s+1} = \frac{v^s + \delta f_2(u^s, v^s)}{1 + \delta g_2(u^s, v^s)} \end{cases} \quad (3)$$

が得られる。実際に (3) の右辺を $\delta = 0$ のまわりで Taylor 展開すると

$$\begin{aligned} u^{s+1} &= u^s + \delta \{f_1(u^s, v^{s+1}) - u^s g_1(u^s, v^{s+1})\} + O(\delta^2) \\ v^{s+1} &= v^s + \delta \{f_2(u^s, v^s) - v^s g_2(u^s, v^s)\} + O(\delta^2) \end{aligned}$$

と変形できるからである。また、(3) に減算がないことから、(3) に対して非負の初期条件を与えると非負の解が得られることも分かる。

§2.2. 反応拡散系の減算のない離散化

ここでは (3) を元にして (1) の離散化を行う。以下に定義する量：

$$m_a(u_n^s) := \frac{a}{a+2d} u_n^s + \sum_{k=1}^d \frac{u_{n+e_k}^s + u_{n-e_k}^s}{a+2d}, \quad m_b(v_n^s) := \frac{b}{b+2d} v_n^s + \sum_{k=1}^d \frac{v_{n+e_k}^s + v_{n-e_k}^s}{b+2d}$$

を用いて拡散項の効果を取り入れる。ただし、 $n \in \mathbb{Z}^d$ 、 $a, b \geq 0$ であり、 $e_k \in \mathbb{Z}^d$ は第 k 成分が 1 の単位ベクトルとする。そこで、 $m_a(u_n^s)$ および $m_b(v_n^s)$ を用いた以下の偏差分方程式系：

$$\begin{cases} u_n^{s+1} = \frac{m_a(u_n^s) + \delta f_1(m_a(u_n^s), v_n^{s+1})}{1 + \delta g_1(m_a(u_n^s), v_n^{s+1})} \\ v_n^{s+1} = \frac{m_b(v_n^s) + \delta f_2(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s))}{1 + \delta g_2(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s))} \end{cases} \quad (4)$$

を考える。(4) に対して連続極限： $\delta \rightarrow +0$ を施すことで、(1) が得られる。実際に、(4) の右辺を $\delta = 0$ のまわりで展開すると、

$$\begin{aligned} u_n^{s+1} &= m_a(u_n^s) + \delta \{f_1(m_a(u_n^s), v_n^{s+1}) - m_a(u_n^s) g_1(m_a(u_n^s), v_n^{s+1})\} + O(\delta^2) \\ v_n^{s+1} &= m_b(v_n^s) + \delta \{f_2(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s)) - m_b(v_n^s) g_2(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s))\} + O(\delta^2) \end{aligned}$$

と変形でき、ここで、 a および b が

$$\xi = \sqrt{D_u \delta(a+2d)} = \sqrt{D_v \delta(b+2d)}$$

を満たすとする、

$$\begin{aligned} \frac{m_a(u_n^s) - u_n^s}{\delta} &= D_u \sum_{k=1}^d \frac{u_{n+e_k}^s - 2u_n^s + u_{n-e_k}^s}{\xi^2} \\ \frac{m_b(v_n^s) - v_n^s}{\delta} &= D_v \sum_{k=1}^d \frac{v_{n+e_k}^s - 2v_n^s + v_{n-e_k}^s}{\xi^2} \end{aligned}$$

となることから、(4) が (1) の離散化となっていることが分かる。

注意 1 ここで紹介した反応拡散系の離散化の手法は反応項の条件を緩めた方程式系：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u + \tilde{f}_1(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + \tilde{f}_2(u, v) \end{cases} \quad (5)$$

にも適用できる．実際に、この反応拡散系に対応する常微分方程式系の離散化として次の差分方程式系：

$$\begin{cases} u_n^{s+1} = \tilde{f}_1(u^s, v^s; \delta) := u^s + \delta \tilde{f}_1(u^s, v^s) + O(\delta^2) \\ v_n^{s+1} = \tilde{f}_2(u^s, v^s; \delta) := v^s + \delta \tilde{f}_2(u^s, v^s) + O(\delta^2) \end{cases}$$

が得られれば、偏差分方程式系：

$$\begin{cases} u_n^{s+1} = \tilde{f}_1(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s); \delta) \\ v_n^{s+1} = \tilde{f}_2(m_a(u_n^s), m_b(v_n^s); \delta) \end{cases}$$

とすることで、この方程式に連続極限： $\delta \rightarrow +0$ を施すと (5) が得られる．

注意 2 拡散項の離散化を今回と違ったものにしても拡散項の効果を取り入れられる．実際に、(4)において $m_a(u_n^s)$ および $m_b(v_n^s)$ の代わりに

$$\tilde{m}_p(u_n^s) := \sum_{k=1}^d \frac{u_{n+pe_k}^s + u_{n-pe_k}^s}{2} \quad \text{および} \quad \tilde{m}_q(v_n^s) := \sum_{k=1}^d \frac{v_{n+qe_k}^s + v_{n-qe_k}^s}{2}, \quad p, q \in \mathbb{Z}_{>0}$$

を用いても連続極限： $\delta \rightarrow +0$ を施すことで (1) が得られる偏差分方程式系が得られる．筆者はこれまでの研究で、拡散項をここで挙げた離散化を用いることで反応拡散系 Gray-Scott モデルの離散化を行い、その解が表す時空パターンについて調べた．詳しくは、[5, 7] を参照されたい．

§3. (1)および(4)それぞれの平衡解の安定性について

本節では、(1)および(4)それぞれの平衡解の安定性、特に線形安定性および $d = 1$ とした場合の Turing 不安定性の関連について議論する．ここで、(1)および(4)の平衡解とは (u, v) または (u_n^s, v_n^s) がそれぞれ定数関数となる解 (u^*, v^*) のことであり、それぞれの平衡解は完全に一致し、

$$\begin{cases} f_1(u^*, v^*) - u^* g_1(u^*, v^*) = 0 \\ f_2(u^*, v^*) - v^* g_2(u^*, v^*) = 0 \end{cases}$$

を満たす．

§3.1. (1)の平衡解の安定性について

まず, 平衡解 (u^*, v^*) の (2)における線形安定性および (1)における Turing 不安定性についてまとめる. 反応拡散系 (1)に対応する常微分方程式系 (2)をこの平衡解のまわりで線形化した方程式系は,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{1,u}^* - g_1^* - u^* g_{1,v}^* & f_{1,v}^* - u^* g_{1,v}^* \\ f_{2,u}^* - v^* g_{2,u}^* & f_{2,v}^* - g_2^* - v^* g_{2,v}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} =: A \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}$$

となる. ただし, $f_{1,u}^* = \partial_u f_1(u^*, v^*)$, $f_{1,v}^* = \partial_v f_1(u^*, v^*)$, $f_{2,u}^* = \partial_u f_2(u^*, v^*)$, $f_{2,v}^* = \partial_v f_2(u^*, v^*)$, $g_{1,u}^* = \partial_u g_1(u^*, v^*)$, $g_{1,v}^* = \partial_v g_1(u^*, v^*)$, $g_{2,u}^* = \partial_u g_2(u^*, v^*)$, $g_{2,v}^* = \partial_v g_2(u^*, v^*)$, $g_1^* = g_1(u^*, v^*)$, $g_2^* = g_2(u^*, v^*)$ とする.

平衡解 (u^*, v^*) の (2)における線形安定性は行列 $A = (A_{ij})_{i,j=1,2}$ の固有値の実部によって以下のように判定できることが知られている.

1. A のすべての固有値の実部が負のとき, 平衡解 (u^*, v^*) は線形安定.
2. A の固有値で実部が正のものがあるとき, 平衡解 (u^*, v^*) は不安定.

1. の場合が成り立つ条件は A の固有方程式, 即ち 2 次方程式のすべての解の実部が負になる条件なので,

$$\text{tr} A < 0 \quad (6)$$

$$\det A > 0 \quad (7)$$

であることが分かる.

また, (2)の平衡解 (u^*, v^*) が線形安定であるとし, (1)を平衡解 (u^*, v^*) のまわりで線形化した方程式系に対して,

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = (c_1 \exp(\omega_\kappa t + i\kappa x), c_2 \exp(\omega_\kappa t + i\kappa x))$$

という形の解を考えると

$$\omega_\kappa \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} - D_u \kappa^2 & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} - D_v \kappa^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} =: \hat{A} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

が得られる. これより, ω_κ は $\hat{A}$ の固有値であり, κ に対応する空間的振動を表す. ω_κ の実部が正となるものがあれば, 平衡解 (u^*, v^*) が (2)において線形安定であっても不安定化することを意味している. この現象は Turing 不安定化と呼ばれる. ここで,

$$\text{tr} \hat{A} = \text{tr} A - \kappa^2 (D_u + D_v), \quad D_u, D_v > 0$$

であり, 平衡解 (u^*, v^*) は (2) において線形安定であるので $\text{tr} A < 0$ であることから, $\text{tr} \hat{A} < 0$ となり, Turing 不安定化が起きる条件は $\det \hat{A} < 0$ を満たす κ が存在することであると分かる. さらに, このような κ が存在する条件は, $\sigma := D_u/D_v$ として,

$$\begin{aligned} \det \hat{A} &= D_u D_v \kappa^4 - (A_{22} D_u + A_{11} D_v) \kappa^2 + \det A \\ &= \sigma (D_v)^2 \left(\kappa^2 - \frac{A_{22} \sigma + A_{11}}{2 \sigma D_v} \right)^2 + \frac{4 \sigma \det A - (A_{22} \sigma + A_{11})^2}{4 \sigma} \end{aligned}$$

となることから, $\sigma > 0$ より,

$$4 \sigma \det A - (A_{22} \sigma + A_{11})^2 < 0$$

であり, Turing 不安定化が起きるか否かは拡散定数の比 σ が重要になっていることが分かる.

§3.2. (3)の平衡解の線形安定性について

この小節で述べる内容は [6] で報告されているものである. (4) に対応する常差分方程式系 (3) を平衡解 (u^*, v^*) のまわりで線形化した方程式系は,

$$\begin{cases} \tilde{u}^{s+1} = \frac{1 + \delta (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*)}{1 + \delta g_1^*} \tilde{u}^s + \frac{\delta (f_{1,v}^* - u^* g_{1,v}^*)}{1 + \delta g_1^*} \tilde{v}^{s+1} \\ \tilde{v}^{s+1} = \frac{\delta (f_{2,u}^* - v^* g_{2,u}^*)}{1 + \delta g_2^*} \tilde{u}^s + \frac{1 + \delta (f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*)}{1 + \delta g_2^*} \tilde{v}^s \end{cases}$$

であり, 右辺の係数行列を $\{\tilde{B}_{ij}\}_{i,j=1,2}$ とすると,

$$\begin{pmatrix} \tilde{u}^{s+1} \\ \tilde{v}^{s+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{B}_{11} + \tilde{B}_{12} \tilde{B}_{21} & \tilde{B}_{12} \tilde{B}_{22} \\ \tilde{B}_{21} & \tilde{B}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u}^s \\ \tilde{v}^s \end{pmatrix} =: B \begin{pmatrix} \tilde{u}^s \\ \tilde{v}^s \end{pmatrix}$$

が得られる. また, 線形化を行う際に平衡解 (u^*, v^*) が満たす関係式を用いている.

平衡解 (u^*, v^*) の (3) における線形安定性は微分方程式の場合と同じように行列 $B = (B_{ij})_{i,j=1,2}$ の固有値で判定できるが, 差分方程式の場合は固有値の絶対値によって以下のように判定できることが知られている.

1. B のすべての固有値の絶対値が 1 より小さいとき, 平衡解 (u^*, v^*) は線形安定.
2. B の固有値で絶対値が 1 より大きいものがあるとき, 平衡解 (u^*, v^*) は不安定.

1. の場合が成り立つ条件は B の固有方程式即ち 2 次方程式のすべての解の絶対値が 1 より小さくなる条件なので,

$$1 + \operatorname{tr} B + \det B > 0 \quad (8)$$

$$1 - \operatorname{tr} B + \det B > 0 \quad (9)$$

$$\det B < 1 \quad (10)$$

であることが分かる. (8)と(9)の 2 つの条件は $\operatorname{tr} B$ の符号によって一方が他方に包含されてしまう条件であることを注意しておく.

さらに, (2)の平衡解 (u^*, v^*) の線形安定性の条件と (3)のそれとの対応については,

$$1 - \operatorname{tr} B + \det B = \frac{\delta^2 \det A}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)}$$

$$1 - \det B = \frac{-\delta \operatorname{tr} A + \delta^2 \{g_1^* g_2^* - (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*)(f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*)\}}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)}$$

となることと $(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*) > 0$ から, (9)は(7)と一致しており, (10)は差分刻み δ が小さくなるほど(6)と近い条件となる. また, 差分刻み δ が十分小さいとき $\operatorname{tr} B > 0$ となり, (9)を判定するだけで十分である.

§3.3. (4)の平衡解の Turing 不安定性について

最後に (3)の平衡解 (u^*, v^*) が線形安定であるとし, Turing 不安定性について考える. (4)を平衡解 (u^*, v^*) のまわりで線形化した方程式系に対して,

$$(\tilde{u}_n^s, \tilde{v}_n^s) = (c_1 (\lambda_\kappa)^s \exp(i\kappa n), c_2 (\lambda_\kappa)^s \exp(i\kappa n))$$

という形の解を考えると

$$\lambda_\kappa \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} \frac{a+2\cos\kappa}{a+2} & B_{12} \frac{b+2\cos\kappa}{b+2} \\ B_{11} \frac{a+2\cos\kappa}{a+2} & B_{22} \frac{b+2\cos\kappa}{b+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} =: \hat{B} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

が得られる. 3.1 節と同じように λ_κ は $\hat{B}$ の固有値であり, その絶対値が 1 より大きいものがあれば, 平衡解 (u^*, v^*) が (3)において線形安定であっても不安定化することを意味している.

$$\det \hat{B} = \frac{(a+2\cos\kappa)(b+2\cos\kappa)}{(a+2)(b+2)} \det B, \quad -1 < \frac{(a+2\cos\kappa)(b+2\cos\kappa)}{(a+2)(b+2)} < 1$$

であり, 平衡解 (u^*, v^*) は (3) において線形安定だったので $\det B < 1$ であることから $\det \hat{B} < 1$ となる. したがって, Turing 不安定化が起きる条件は $1 + \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B} < 0$ または $1 - \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B} < 0$ を満たす κ が存在することであると分かる.

さらに, (1) の平衡解 (u^*, v^*) の Turing 不安定性の条件と (4) のそれとの対応については,

$$\alpha := \frac{1}{a+2}, \quad \beta := \frac{1}{b+2}, \quad \eta := \sin^2 \frac{\kappa}{2}$$

とすると,

$$1 - \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B} = \frac{16\alpha\beta \{1 + \delta (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*)\} \{1 + \delta (f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*)\}}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)} \eta^2 \\ + \frac{-4\delta (\alpha A_{22} + \beta A_{11}) + 4\delta^2 F}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)} \eta + \frac{\delta^2 \det A}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)}$$

となる. ただし,

$$F := \alpha \{ (f_{1,v}^* - u^* g_{1,v}^*) (f_{2,u}^* - v^* g_{2,u}^*) - (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*) (f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*) \} \\ - \beta (f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*) (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*)$$

である. $1 - \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B}$ は η の 2 次式であり, 差分刻み δ を 0 に近づけると η の 1 次の係数は符号を負に保ちつつ 0 に近づく. $0 \leq \eta \leq 1$ の範囲で負になるような κ が存在すれば Turing 不安定化が起きるので, δ が十分小さいときに次の条件:

$$\left\{ \frac{-2\delta (\alpha A_{22} + \beta A_{11}) + 2\delta^2 F}{(1 + \delta g_1^*)(1 + \delta g_2^*)} \right\}^2 \\ - \frac{16\delta^2 \alpha \beta \det A \{1 + \delta (f_{1,u}^* - u^* g_{1,u}^*)\} \{1 + \delta (f_{2,v}^* - v^* g_{2,v}^*)\}}{(1 + \delta g_1^*)^2 (1 + \delta g_2^*)^2} > 0$$

を満たせば Turing 不安定化が起きることが分かる. さらに, $\alpha/\beta = \sigma (= D_u/D_v)$ に注意すると, 差分刻み δ が小さくなるほどこの条件は (1) の平衡解 (u^*, v^*) に Turing 不安定性が起きる条件に近い条件となる. また, 差分刻み δ が十分小さいとき $1 + \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B} > 0$ となり, $1 - \text{tr} \hat{B} + \det \hat{B} < 0$ のみを判定するだけで十分である.

§4. 最後に

本稿では, [5] に基づき, 反応拡散系の超離散化可能な離散化を紹介し, もとの反応拡散系と離散化して得られた偏差分方程式系の定常解の Turing 不安定性について比較した. その結果, 差分刻みを十分小さくすることで離散化で得られた偏差分方程式系の Turing

不安定性が生じる条件が元の反応拡散系のそれに近づくことがわかった。今回の結果は、反応拡散系に対応する常微分方程式系の平衡解が安定であっても、差分刻みの値が大きくなると、今回与えた差分方程式系でも対応する常差分方程式系の平衡解が不安定になることも示唆している。こういった状況を改善する離散化の方法についても筆者は [8] で考察している。

今後は、この離散化で得られた偏差分方程式系の超離散化で得られる超離散系の解の構造と元の偏微分方程式系の解の構造について比較していきたい。

§.A.1. 超離散化

ここでは超離散化 [1, 2] の具体的な手続きを紹介する。超離散化は以下の極限が重要な役割を担う。

$$\begin{aligned}\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log \left(\exp \frac{A}{\varepsilon} + \exp \frac{B}{\varepsilon} \right) &= \max [A, B] \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log \left(\exp \frac{A}{\varepsilon} \exp \frac{B}{\varepsilon} \right) &= A + B\end{aligned}$$

ただし、 $A, B \in \mathbb{R}$ とする。超離散化の具体的な例として、拡散方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (11)$$

の超離散化を行う。ただし、 $u = u(t, x)$, $t \geq 0$, $x \in \mathbb{R}$ とする。(11)の離散化して得られる偏差分方程式は

$$u_n^{s+1} = \frac{u_{n+1}^s + u_{n-1}^s}{2} \quad (12)$$

等がある。ただし、 $s \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, $n \in \mathbb{Z}$ とする。

(12)において、 u_n^s に対して変数変換：

$$u_n^s = e^{U_n^s/\varepsilon} \quad (\varepsilon > 0)$$

を施す。その後に両辺の自然対数を取り、 ε 倍すると、

$$\varepsilon \log e^{U_n^{s+1}/\varepsilon} = \varepsilon \log \frac{e^{U_{n+1}^s/\varepsilon} + e^{U_{n-1}^s/\varepsilon}}{2}$$

が得られる。そこで両辺に対して、極限 $\varepsilon \rightarrow +0$ をとると、

$$U_n^{s+1} = \max [U_{n+1}^s, U_{n-1}^s] \quad (13)$$

が得られ, これが熱方程式の超離散化である. (13)の初期条件に対して, $U_n^0 \in \{0, 1\} (\forall n)$ を課すと, $U_n^s \in \{0, 1\} (\forall s, n)$ となる. これは, (13)の解はセルオートマトンを与えることを示しており, その一例を下図に示す. この解は, 一か所のみ 1 を与え残りを 0 とした初

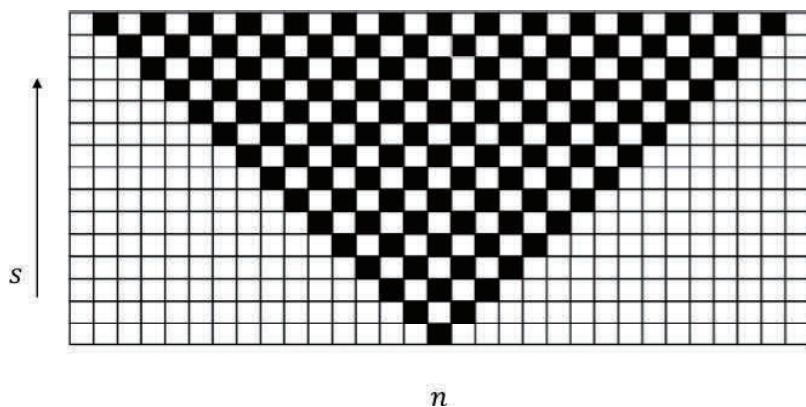


図1 (13) の解の例

□ : 0, ■ : 1

期条件を与えて 1 になるサイトが広がっている現象を確認でき, (13)でも拡散現象が確認できることがわかる.

差分方程式に対して超離散化を施すと変数変換と極限をとっているが, 元の差分方程式の加法を max に, 乗法を加法に, 除法を減法に置き換えたものになっていることに注意する. ただ, もとの差分方程式に減法があると超離散化での極限がとれないことがある. これは, 極限:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log \left(\exp \frac{A}{\varepsilon} - \exp \frac{B}{\varepsilon} \right)$$

が必ずしも存在しないことに起因している. この問題を解消するために微分方程式を離散化し超離散化するには, 離散化の際に減法が入らないように工夫する必要がある. 本稿の本論で与えた反応拡散系の離散化は超離散化可能, すなわち, 減法が入らないように工夫したものになっていた.

§.A.2. KdV 方程式と箱玉系の関係

ここではソリトン方程式の一つとして知られている KdV 方程式とセルオートマトンの一つである箱玉系が超離散化によってつながること [1, 9] を紹介する.

§.A.2.1 KdV 方程式と双線形形式とその離散化

KdV 方程式は浅水波を記述する偏微分方程式:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0 \tag{14}$$

で Korteweg と de Vries によって提案された [10]. (14)は以下に示す進行波解:

$$u(t, x) = 2\kappa^2 \operatorname{sech}^2 \kappa(x - ct + \delta) = 2\kappa^2 \left\{ \frac{2}{e^{\kappa(x-ct+\delta)} + e^{-\kappa(x-ct+\delta)}} \right\}^2 \tag{15}$$

を解にもつ. ただし, $c, \kappa, \delta \in \mathbb{R}$, $c = 4\kappa^2$ とする. (15)はソリトン解と呼ばれ, グラフとして描画してみると図 2 のようになる.

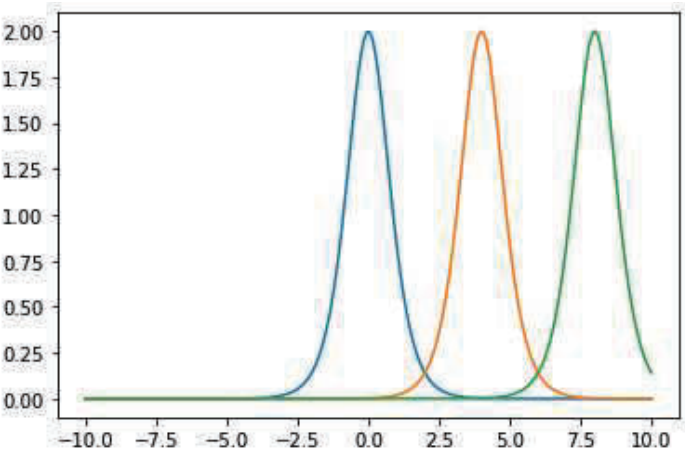


図 2 ソリトン解

図 2 は横軸が x , 縦軸が u の値を示しており, $\delta = 0, \kappa = 1$ として, 水色の曲線は $t = 0$, 橙色の曲線は $t = 1$, 緑色の曲線は $t = 2$ の場合のものである. ピークが高さを保存したまま右側に流れている様子が確認できる. ピークが高ければ高いほど速度が速くなることに注意する. (14)には, ソリトンが 1 つとは限らず, 2 種類以上の高さのソリトンが混在する解が存在する. 実際に, その解をグラフにしたものを並べると, 図 3 から図 6 のようになる.

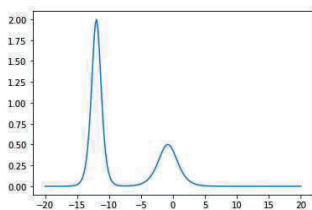
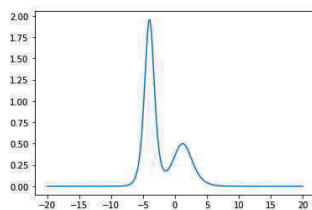
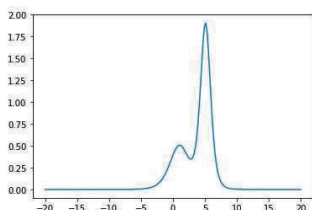
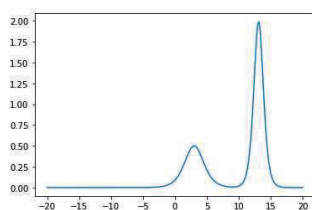
図 3 $t = -3$ 図 4 $t = -1$ 図 5 $t = 1$ 図 6 $t = 3$

図 3 から図 6 は、横軸を x 、縦軸を u としたものである。2 種類の高さのソリトンが、時間 t の経過とともに左から右へ動いていることが観察でき、さらには高い方のソリトンが低い方のソリトンを追い越していることが分かる。この様子を別の方向から見た図が図 7 となる。

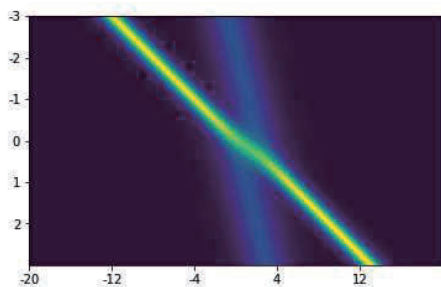


図 7 ソリトンの位相のずれ

図 7 は、横軸を x 、縦軸を t として、 u の値を色であらわしたものである。特に注意することは追い越しの後にそれぞれのソリトンの位相がずれていることである。実際に衝突がなかった場合に比べてソリトンの位置がずれていることがわかる。

(14)の従属変数 u に対して, 変数変換:

$$u = 2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \log f$$

を施すと, (14)から f の偏微分方程式:

$$f \frac{\partial^2 f}{\partial t \partial x} - \frac{\partial f}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} - 4 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} + 3 \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right)^2 = 0 \quad (16)$$

が得られる. (16)は KdV 方程式の双線形形式と呼ばれる偏微分方程式である [11]. 可積分方程式はその代数的性質から系統だった離散化を行うことができ [12, 13], (16)の離散化として,

$$(1 + \delta) \sigma_{n+1}^{s+1} \sigma_n^{s-1} = \delta \sigma_{n+1}^{s-1} \sigma_n^{s+1} + \sigma_n^s \sigma_{n+1}^s \quad (17)$$

が知られている. (17)に対して,

$$w_n^s = \frac{\sigma_n^s \sigma_{n+1}^{n-1}}{\sigma_{n+1}^s \sigma_n^{s-1}}$$

とし,

$$w_n^s = 1 + \lambda u \left(\delta \left(n - \frac{1}{2} \right) - \eta \left(s - \frac{1}{2} \right), \varepsilon \left(n - \frac{1}{2} \right) \right),$$

$\eta = (1 + 2\delta)\delta$, $\varepsilon = \delta^2/3$, $\lambda = 3\delta^2/2$ とし, 極限 $\delta \rightarrow 0$ をとることで (14)が得られる.

§.A.3 箱玉系とその発展方程式

箱玉系 [4] とは, 下図のような, 1 次元的に並んだ箱の中に有限個の球が存在する力学系である.



□ : 箱 ○ : 玉

箱玉系は以下に挙げるルールで時間発展する.

- (1) 全ての玉をただ一度だけ動かす.
- (2) まず一番左の球をその右の一番近い空箱に移す.
- (3) 残りの玉のうち最も左にある玉を, その右の最も近くの空箱に移す.
- (4) 以上の操作をすべての玉を動かすまで続ける.

このルールで時間発展した結果を下図に示す.

	○	○	○					○	○			○								
				○	○	○				○	○		○							

上の行から時間発展したものが下の行である. 箱玉系の時間発展を観察していると

- 長さ m の玉の列が速度 m で進む.
- 玉の列は衝突の前後で位置の‘ずれ’はあるものの形は変わらない.

といった性質が確認できる.

$u_n^s \in \{0, 1\}$ を時刻 s における n 番目の箱の状態を表すとし, 0 で空き箱, 1 で玉ありを意味するとする. 箱玉系の発展方程式は,

$$u_n^{s+1} = \min \left[1 - u_n^s, \sum_{n'=-\infty}^{n-1} u_{n'}^s - \sum_{n'=-\infty}^{n-1} u_{n'}^{s+1} \right] \quad (18)$$

で与えられる. (18)に対して,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} u_n^s = M \quad (\text{系全体の球の総数})$$

という条件を課し,

$$\rho_n^s = \sum_{n'=n}^{\infty} \sum_{s'=-\infty}^{s-1} u_{n'}^{s'}$$

とすることで,

$$\rho_{n+1}^{s+1} + \rho_n^{s-1} = \max [\rho_{n+1}^{s-1} + \rho_n^{s+1} - 1, \rho_n^s + \rho_{n+1}^s] \quad (19)$$

が得られる. (17)において,

$$\sigma_n^s = e^{\rho_n^s/\varepsilon}, \quad \delta = e^{-1/\varepsilon}$$

と変数変換し, 超離散化することで, (19)が得られ, KdV 方程式と箱玉系が超離散系によって関係づけられることがわかる.

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.* **76** (1996), 3247–3250.

- [2] 広田 良吾, 高橋 大輔, 『差分と超離散』 共立出版, (2003)
- [3] D. Takahashi and J. Matsukidaira, Box and ball system with a carrier and ultradiscrete modified KdV equation *J. Phys. A*, **30** (1997), L733.
- [4] D. Takahashi, On some soliton systems defined by using boxes and balls, *Proceedings of the International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications, NOLTA '93*, **555** (1991)
- [5] 松家 敬介, 反応拡散系の減算のない離散化と平衡解の安定性について, 武蔵野大学数理工学センター紀要, **4** (2019), 50–58.
- [6] Murray E. Alexander and Seyed M. Moghadas, $\mathcal{O}(\ell)$ shift in Hopf bifurcations for a class of non-standard numerical schemes *2004 Conference on Diff. Eqns. and Appl. in Math. Biology*, **Conference 12** (2005), 9–19.
- [7] K. Matsuya and M. Murata, Spatial pattern of discrete and ultradiscrete Gray-Scott model, *Discrete Continuous Dyn. Syst. Ser. B*, **20** (2015), 173–187.
- [8] 松家 敬介, 常微分方程式の平衡解の安定性を保存した離散化について, 武蔵野大学数理工学センター紀要, **8** (2023), 54–58.
- [9] 時弘哲治, 「箱玉系の数理」, 朝倉書店, (2010)
- [10] D. J. Korteweg and G. deVries On the Change of Form of Long Waves Advancing in a Rectangular Canal, and on a New Type of Long Stationary Waves *Phil. Mag.. Series 5*, **39** (1895), 422–443.
- [11] 広田良吾, 「直接法によるソリトンの数理」, 岩波書店, (1992)
- [12] R. Hirota, Discrete analogue of a generalised Toda equation, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50** (1981), 3785–3791.
- [13] T. Miwa, On Hirota's difference equations, *Proc. Jpn. Acad.*, **A 58** (1982), 9–12.