

反応拡散系と max-plus 方程式

早稲田大学 理工学部 数理科学科
高橋 大輔

1 はじめに

反応拡散系は神経パルス波や Belousov-Zhabotinsky (BZ) 反応などに代表されるパターン形成系である [1, 2, 3, 4]。反応拡散の反応という言葉が示すように、神経パルス波では 2 種のパルス、BZ 反応では複数の化学物質というふうに 2 種あるいはそれ以上の成分同士が相互作用することが系の第一の特徴である。さらに、反応拡散の拡散という言葉が示すように、ある成分が空間内で局在していても拡散効果によっていずれ周囲へ広がろうとする。そしてこの反応の効果と拡散の効果があいまって、特徴的な波が多様な相互作用を示し、そのグローバルパターンがしばしば興味深い秩序だった変化を示すのである。

反応拡散系全体を統一的に論じるのはたいへんなので、以下では BZ 反応に話題を限定しよう。BZ 反応ではシャーレ内の化学反応によって図 1 のような美しいパターンが実験で観察できる。図 1 (a) はターゲットパターンといい、中央から周囲に同心円状のリングが周期的に発生しては広がっていく。図 1 (b) はスパイラルパターンといい、らせん（図の場合は二重のらせん）が安定に回り続ける。このようなパターンの生成メカニズムについては、すでにさまざまな研究者がいろいろ解析を行っている。そして化学反応の詳細を調べることから始まる一連の研究によって、微分方程式モデルとしてたとえば次式が提案されている [3]。

$$\begin{cases} u_t = D_u \Delta u + \frac{1}{\varepsilon} \{u(1-u) - \frac{Fv(u-q)}{u+q}\} \\ v_t = D_v \Delta v + u - v \end{cases} \quad (1)$$

$D_u, D_v, \varepsilon, F, q$ は物理定数であり、 Δ は 2 次元のラプラシアン $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ である。この方程式の数値計算を行うと図 2 のようにパターンが再現できる。またなぜそのようなパターンが生じるかの理由も (1) を用いて理解できる。そしてその理解は他の反応拡散系にも応用可能な汎用性をもっている。

ところで、このパターン生成メカニズムを模倣した Gerhardt らによる Cellular Automaton (CA) モデルというものがある [5, 6]。モデルの詳細はここではふれ

ないが元の現象を驚くほどよく再現している (図 3)。CA の定義自身は元の系の本質を抽出した簡単なものである。パターンを再現するメカニズムとして、微分方程式よりも CA の方がある意味で柔軟性に富み、応用の別の可能性が開かれることになる。

さて、本研究では BZ 反応のモデルとして上記の CA のようにすべての量が離散的なモデルを提案することを目指している。ただし上記 CA では微分方程式のパターンを再現するためにメカニズムの模倣が行われている。これに対し、本研究では以下に述べる超離散化手法によって微分方程式のパターン生成メカニズムの本質的な部分だけを離散モデル上で数学的に直接かつ厳密に実現することを目指している。言い換えると、シミュレーターとして現象を忠実に再現することよりも、元の系に潜んでいる数理構造を可能な限り忠実に離散系で再現することを優先させるのである。

超離散化手法は可積分系の分野で生まれた手法であり、微分方程式と完全離散系 (たとえば CA) とを結びつける新しい道筋をつけた [7]。その典型例を以下に示す。差分方程式

$$u_j^{t+1} = u_{j-1}^t \frac{1 + u_j^t u_{j+1}^t}{1 + u_{j-1}^t u_j^t} \quad (2)$$

を考えよう。ここで j, t はそれぞれ整数の空間、時間変数である。 $v(x, t)$ を $v(j\Delta x, t\Delta t) = (\log u_j^t)/\Delta x$ で定義し $\Delta t/(\Delta x)^2 = 1/2$ を保ちながら $\Delta x \rightarrow 0$ とすると (2) から

$$v_t = 2vv_x + v_{xx} \quad (3)$$

が得られる。すなわち (2) は (3) の差分近似となっている。さらに u から U への変数変換 $u_j^t = e^{(U_j^t - 1/2)/\varepsilon}$ を用いて $\varepsilon \rightarrow +0$ とすると (2) から

$$U_j^{t+1} = U_j^t + \min(U_{j-1}^t, 1 - U_j^t) - \min(U_j^t, 1 - U_{j+1}^t) \quad (4)$$

が得られる。この式は $U \in \{0, 1\}$ のルール番号 184 の CA と等価であるとみなせる。(3) から (4) を得るような手続きを超離散化と呼び、(4) のような方程式を超離散方程式と総称する。(2), (3), (4) は方程式・解の離散度合いが異なるが、どれも Cole-Hopf 変換で線形の拡散方程式に帰着でき、解の代数構造が同じという点において等価なものであるとみなせる。すなわち、方程式の性質を壊さずに微分方程式、差分方程式、CA を自由に行き来できるのである。

2 BZ 反応のパターンを再現する max-plus 方程式

ではいよいよ (1) の超離散化を行うといきたいところであるが、実は現在のところ成功していない。微分方程式から出発して超離散方程式を得るには、まず微分方程式を差分化し、得られた差分方程式を超離散化するのであるが、以下の理由によりいつでもこのことが可能であるとは限らない。

- 差分方程式から超離散方程式を得る際に $u = \exp(U/\varepsilon)$ タイプの変数変換を行う。このため差分方程式とその解に正值性が要求される。
- この点をクリアしつつ、元の微分方程式をその性質を壊さずに差分化しなければならない。ただし差分方程式の候補は無限にあり、その中から超離散化したときに意味のあるものを得なければならない。

現在は上の困難がクリアできず、微分方程式→差分方程式→超離散方程式という正攻法が難しい。そこで、微分方程式の性質をにらみながらいきなり超離散方程式をでっちあげるといふ搦め手の攻め方を試みた。もちろん超離散方程式であるかどうかは対応する差分方程式があるか否かによっているので、その点がクリアされない限り超離散方程式とは呼びたくない。むしろ得られた方程式が max 関数と和で構成されているので、max-plus 方程式と呼ぶ方がふさわしいであろう。

さて、BZ 反応を特徴づけているのは

- (a) 2 成分の相互作用（反応効果）
- (b) 拡散効果
- (c) ターゲット、スパイラルパターン

である。そこで唐突であるが、

$$\begin{cases} U_{i,j}^{t+1} = \max(U_{i-1,j}^t, U_{i+1,j}^t, U_{i,j-1}^t, \\ U_{i,j+1}^t, U_{i,j}^t) - V_{i,j}^t \\ V_{i,j}^{t+1} = U_{i,j}^t \end{cases} \quad (5)$$

という max-plus 方程式を考える。この方程式は U, V の 2 成分相互作用の式である。また $\max(U_{i-1,j}^t, \dots)$ という効果により任意の格子点での U は周囲に影響を及ぼし、この意味で拡散効果に近いものが期待でき

る。(周囲に情報を伝えるという意味合いだけであるので拡散とは呼べないかもしれないが。) そしてその効果は相互作用を通じて V にも影響する。また図 4 に示すように、適当な初期値よりターゲット、スパイラルパターンが生まれる。さらにスパイラルパターンは図 1 にも見られるように実験でしばしば二重スパイラルとして実現されるが、(5) の解にも図 5 に示すように二重スパイラルが安定して存在する。以上のことから (5) は BZ 反応の本質 (a)–(c) をある程度実現した単純な離散モデルと考えられなくはない。

一方、物理的なしかけに立ち戻って考えると (1) と大きく異なる特徴も目につく。(5) はまず時間に関して可逆な方程式である。このことは (5) で記号 U と V を入れ替えて $t \rightarrow -t$ とすれば再び同じ方程式が得られることからすぐにわかる。これに対し現実の BZ 反応系や (1) は拡散過程が存在することより明らかに非可逆である。また、(5) は (1) と異なり U – V 相平面において単一のリミットサイクルを持たない。実は (5) で $U \rightarrow \alpha U, V \rightarrow \alpha V$ とスケール変換をしてもやはり同じ式が導かれ、(5) がこの意味でスケール不変な方程式になっているので「単一の」リミットサイクルはありえない。このようにしかけが異なるふたつの方程式を同一視することには議論の余地が大いにある。しかし、たとえば可積分な Korteweg–de Vries 方程式は、元の流体系と明らかに異なる性質を持っておりながら、元の流体系に現れるある現象の本質を美しい数理構造として表現できている。このことを考えあわせると、先ほど述べたことからただちに BZ 反応系と (5) との関連性について否定的な見解を持つ必要はないであろう。

3 パターンの生成メカニズム

以下では元の BZ 反応系のことを脇におき、(5) がなぜターゲット、スパイラルパターンを生成できるかについて議論する。まず (5) の 1 次元版の

$$\begin{cases} U_i^{t+1} = \max(U_{i-1}^t, U_i^t, U_{i+1}^t) - V_i^t \\ V_i^{t+1} = U_i^t \end{cases} \quad (6)$$

を考えよう。この方程式をひとつにまとめると

$$U_i^{t+1} = \max(U_{i-1}^t, U_i^t, U_{i+1}^t) - U_i^{t-1} \quad (7)$$

という U についての時間 2 階の方程式になる。さらに速さ ± 1 の進行波を仮定して $U_i^t = F_{i\pm t}$ を仮定すると F は

$$F_{i+1} + F_{i-1} = \max(F_{i-1}, F_i, F_{i+1}) \quad (8)$$

を満たす。これは常差分方程式なので解くことができ、解 F_i は i 格子空間上で「0 a a 0」タイプか「0 a a + b b 0」タイプの値のパターンを適当な間隔で並べ、間を 0 で埋めればよいことがわかる。たとえば

$$\dots 00011001100013200220000242000 \dots$$

は (8) を満たしているの、右あるいは左へ速さ 1 で進む (6) の進行波解となりうる。

(8) 式は実は Quispel–Roberts–Thompson (QRT) 系と呼ばれる可積分方程式

$$g_{i+1} g_{i-1} = 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} g_i \quad (9)$$

の超離散化によって得ることができる。実際 $F = \varepsilon \log(1 + \sqrt{2}g)$ という変数変換を行い $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限をとると (9) から (8) が得られる。また (9) の解は一般に楕円関数を用いて表すことができ、その解の超離散化によって (8) の解が得られることも容易に示すことができる。図 6 (a), (b) に (9) の解とそれに対応する (8) の解をそれぞれ示す。楕円関数の周期を無限大にする極限からコンパクトな台を持つ (8) の解を得ることもできるであろう。

では次に (5) の解を構成しよう。今、ある j に対して $U_{i,j}^t = F_{i-t}$ であるとしよう。すると $U_{i,j\pm 1}^t$ はそれぞれ $F_{i-t}, F_{i-t-1}, F_{i-t+1}$ のどれかであれば、その j で (5) が満たされることがわかる。というのは、もしそうならば $U_{i,j\pm 1}^t$ が $U_{i,j}^t, U_{i+1,j}^t, U_{i-1,j}^t$ のどれかと等しく、(5) が (6) に帰着するからである。ということは、ある j_0 で $U_{i,j_0}^t = F_{i-t}$ を満たし、任意の j で $U_{i,j+1}^t = U_{i,j}^t$ or $U_{i-1,j}^t$ or $U_{i+1,j}^t$ を満たせば、それによって得られた $U_{i,j}^t$ が右へ 1 の速さで進む (5) の進行波 (平面波) になることがわかる。図 7 にこの進行波の例を示す。左、上、下方向に 1 の速さで進む進行波も同様にして (6) の 1 次元進行波を「ずらして並べる」ことにより作ることができる。

すると、図 8 (a) に示すような正方形のパターンは 1 時刻で格子 1 つ分だけ周囲へ広がる安定なパターンになることがわかる。なぜならばその正方形の左半分

は左へ速さ 1 で進む進行波の一部であるとみなせ、右半分は右へ速さ 1、上半分は上へ速さ 1、下半分は下へ速さ 1 で進む進行波の一部とみなせ、それぞれが矛盾無く接続できるからである。さらに 1 次元の進行波は、前に述べたように進行波を構成するパターン同士の間には適当な個数の 0 をはさめば相互作用することがない。ということは図 8 (b) のように同心 (?) 円上に正方形パターンをおけばそれらは安定に同じ速度で外へ広がる波になりうるのである。

以上のようにして、ターゲットパターンの周辺の同心円部がなぜ外方向に安定に伝播するかを説明できた。その波動の基本部品は、(9) という 1 次元可積分方程式の超離散化解から作ることができるのである。ただし、ターゲットパターンの中央部の同心円パルスを常に生み出す部分についてはこれでは説明できない。なお、スパイラルパターンの周辺部の伝播の様子も上と同様の理由で説明できる。なぜならターゲットパターンのひとつの同心円では上下左右に進む 4 種類の進行波をたまたま閉じた形で接続しているが、スパイラルパターンではその接続をうまくずらしてスパイラル状にしているだけであり、周囲に伝播していくことの理由はターゲットパターンと同じなのである。この場合も中央でスパイラルを常に生み出している部分についての説明はできない。

4 おわりに

以上のようにして、BZ 反応で見られるパターンと似たものを生み出す max-plus 方程式を提案することができた。そのパターンが安定に伝播する理由については、1 次元の超離散化可積分方程式から作られる進行波をもとにして部分的に説明がついた。(5) は一見したところ非常に単純な式であり、パターンの変化を手にとるように説明できる。この利点を大事にしつつ、今後は元の物理系や微分方程式系とのもっと直接的なつながりを解明し、パターン形成に対する新たな見方を提案したい。

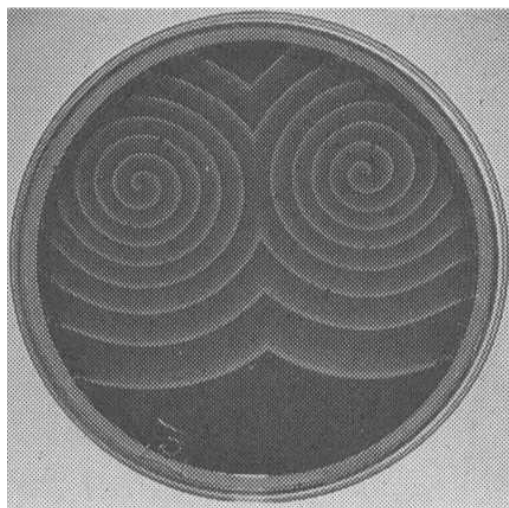
参考文献

- [1] 太田隆夫, 「界面ダイナミクスの数理」 (チュートリアル／応用数理の最前線), 日本評論社 (1997).
- [2] 西浦廉政, 「非線形問題 1 パターン形成の数理」 (岩波講座 現代数学の展開), 岩波書店 (1999).
- [3] 三浦秀俊・森義仁・山口智彦, 「非平衡系の科学 III 反応・拡散系のダイナミクス」, 講談社サイエンティフィク (1998).
- [4] 森肇・蔵本由紀, 「散逸構造とカオス」 (岩波講座 現代の物理学 15), 岩波書店 (1994).
- [5] M.Gerhardt, H.Schuster and J.J.Tyson, "A cellular automaton model of excitable media including curvature and dispersion", *Science* **247** (1990) 1563–1566.
- [6] A.K. デュードニー, 「遊びの探索」別冊サイエンス コンピューターレクリエーション II, 日経サイエンス (1989).
- [7] (例えば) 高橋大輔, "超離散的からくり", 数理科学 **435** (1999) 12–17.

図



(a)



(b)

図 1: シャーレで観察される BZ 反応のパターン (a) ターゲットパターン ([3] から引用), (b) スパイラルパターン ([4] から引用)

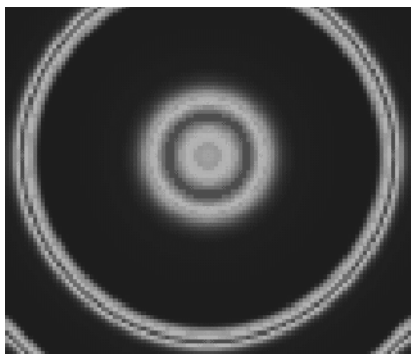


図 2: (1) の数値計算によるパターンの再現。 u のプロット

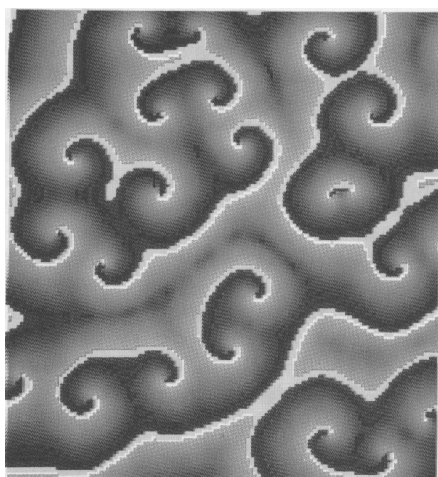
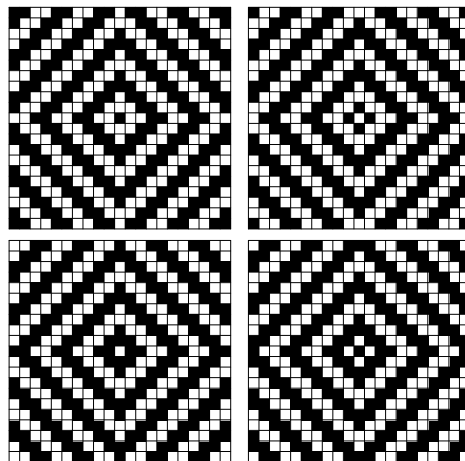
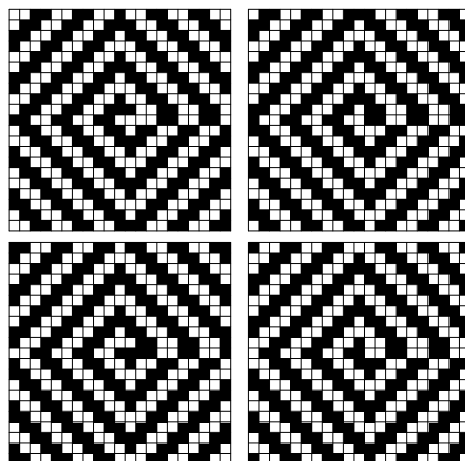


図 3: Gerhardt らの CA によるパターンの再現。([6] から引用)



(a)



(b)

図 4: (5) の (a) ターゲット, (b) スパイラルパターンの時間変化。 U のプロットで、■が 1 を□が 0 を表す (以降の図も同様)。どちらも 4 ステップで元に戻る周期パターンとなる

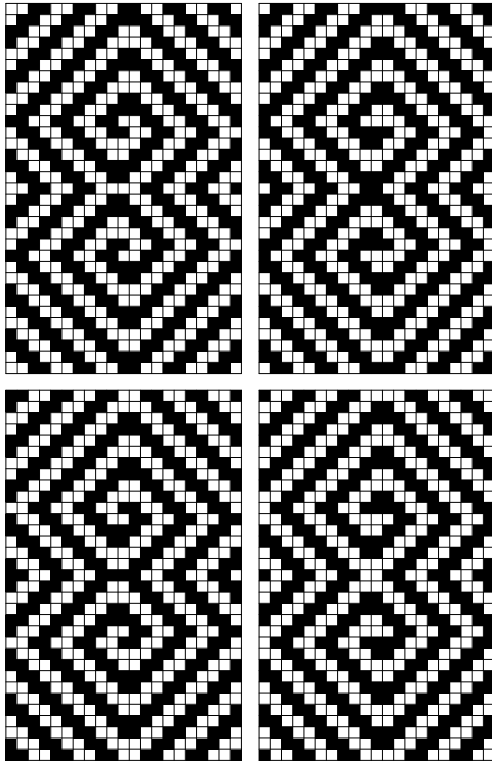
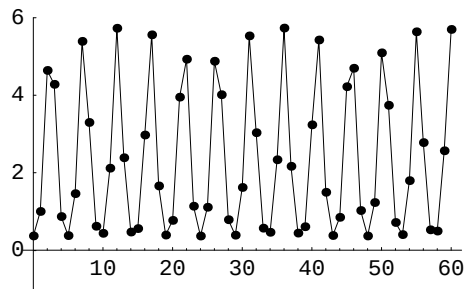
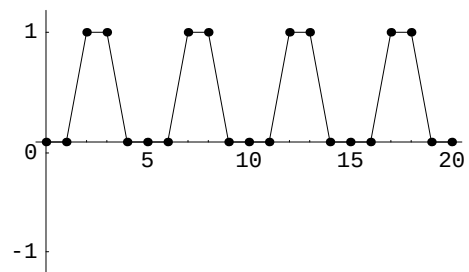


図 5: (5) の二重スパイラルパターンの時間変化



(a)



(b)

図 6: (a) (9) の解の例、(b) 対応する (8) の解

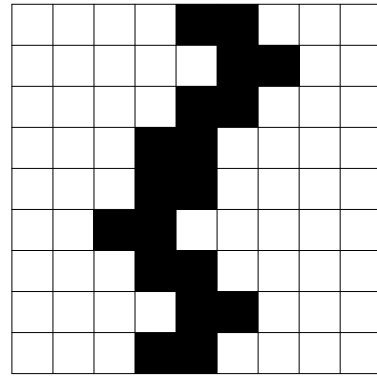
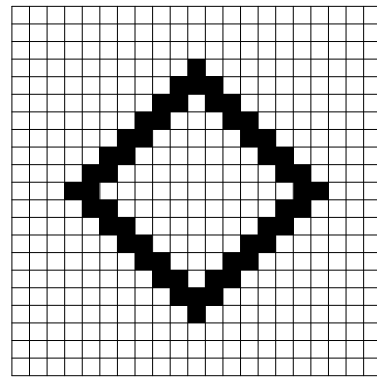
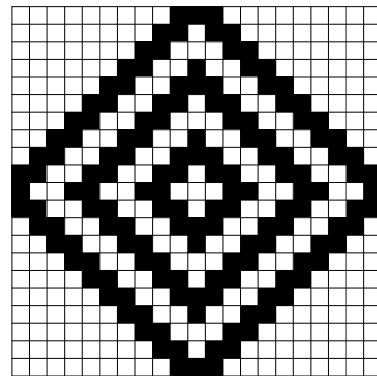


図 7: (5) の進行波。右あるいは左へ 1 の速さで進む



(a)



(b)

図 8: 安定に外へ拡がる (a) ひとつの同心円, (b) 3 つの同心円