

セルオートマトンと差分方程式

早稲田大学理工学部

高橋大輔・木村欣司

超離散化はいまだ発展途上の手法であり、理論・応用ともに多くの蓄積を必要としている。可積分系で培われたノウハウも非可積分系への応用となると、とたんに脆弱になってしまう。そこで本稿では、まず、超離散化がどのような役割を担っている手法かという理論的位置づけに関する一考察を行う。そして次に、解の秩序だった振る舞いがしばしば観察される反応拡散系を非可積分系の例として取り上げ、超離散化の応用の可能性を議論する。2つの話題は、ある意味で理論と応用の両極端に位置しているが、全体像を描きながら蓄積を行っていくことも重要であり、あえてひとつにまとめて報告する。

1 CA90 の逆超離散化

空間格子と離散時刻で指定される状態値がある規則に従って時間発展するような離散系を考える。このような系の中で、取りうる状態値のすべてが有限離散集合をなすものを一般にセルオートマトン (Cellular Automaton, CA) という [1]。ここではまず、CA のひとつを具体的に取り上げて超離散化がどのように機能するかを検証してみることにする [2]。

まず、格子は 1 次元無限格子とし、 U_j^t を整数時刻 t における第 j 番目の格子点での状態値を表すとし、0 か 1 のどちらかの値しかとらないとする。そして時間発展則を

$U_{j-1}^t U_j^t U_{j+1}^t$	000	001	010	011	100	101	110	111
U_j^{t+1}	0	1	0	1	1	0	1	0

という表で定義することにする。この規則は次の時刻 $t+1$ の格子 j での値が前の時刻 t の 3 近傍 ($j-1, j, j+1$) から定義される形をしている。表の下の行の 0, 1 の並びを変えれば他の規則を作れ、一群の CA が得られる。このような一群の CA に対し Wolfram は Elementary CA (ECA) と名付けている。さらに ECA 同士を区別するためにルール番号が付けられており、上の表のルール番号は Wolfram の流儀に従うと下の行の 0, 1 の並びを 2 進数とみなして $(01011010)_2 = (90)_{10}$ となる。このルール番号 90 の CA を本稿では簡単に CA90 と呼ぶことにしよう。

CA90 の時間発展の例を図 1 に示す。縦軸下方向が時間の正方向であり、■ が 1 を、□ が 0 を表している。この図の初期値では、ある格子点だけ 1 であり、他の格子点ではすべて 0 になっている。これが時間発展をすると、時空間平面で特徴のある三角形パターンが規則正しく並ぶ。この三角形パターンは Sierpinski のガスケットと呼ばれるフラクタル図形の一部と同じ形をしている。上の表で与

えられる時間発展則を式で表すと

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

となる。ここで \boxplus は排他的論理和と呼ばれる 2 進演算であり、 $0 \boxplus 0 = 1 \boxplus 1 = 0$, $0 \boxplus 1 = 1 \boxplus 0 = 1$ となる。

実は、(1) はある意味で線形の式とみなすことができる。とりあえず、2 つの離れた格子点に 1 をおいた初期値を作り、その時間発展パターンを見てみよう。図 2 がそれであるが、(1) に通常の数之和「+」に関する線形性がないことは明らかである。もしそうなら、得られる図は図 1 の三角形パターンを 2 つずらして重ね合わせたようなものになるはずである。またそもそも + に関する線形性があるなら、 $1+1=2$ という状態値ができなければならず、この CA の構成からあり得ない。しかしながら、 \boxplus という演算自身が以下のように交換則・結合則を満たしている。

$$X \boxplus Y = Y \boxplus X, \quad (X \boxplus Y) \boxplus Z = X \boxplus (Y \boxplus Z) \quad (2)$$

ということは (1) はこの \boxplus に関してある意味で線形性がある。なぜならば (1) を満たす 2 通りの解を V_j^t, W_j^t とすると、これらの \boxplus による線形和 $U_j^t = V_j^t \boxplus W_j^t$ も解になるからである。

$$U_j^{t+1} = V_j^{t+1} \boxplus W_j^{t+1} = (V_{j-1}^t \boxplus V_{j+1}^t) \boxplus (W_{j-1}^t \boxplus W_{j+1}^t) = U_{j-1}^t \boxplus U_{j+1}^t$$

さて、微分方程式や差分方程式において、線形性という性質は解の構造を強く規定している。そこで、超離散極限

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \lim(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon} + \dots) = \max(A, B, \dots) \quad (3)$$

を利用して CA90 の従属変数を連続化し、対応する差分方程式を得ることで何がでてくるかを探ろう [2, 3, 4]。

まず、(2) の演算規則が線形性にとって大事なので、これを保持したまま \boxplus の演算を \max 関数で拡張すると、

$$X \oplus Y = \max(X, Y) - \max(0, X + Y - 1)$$

という演算が得られる。 \oplus は \boxplus という 2 進演算を拡張したものであり、 $X, Y \in \{0, 1\}$ ならば $X \oplus Y = X \boxplus Y$ となる。また、 $\max(A, B) + C = \max(A + C, B + C)$, $\max(\max(A, B), C) = \max(A, B, C)$ などの公式を用いれば、 \oplus でも交換則、結合則が成立することをすぐに確認できる。以上より、 \oplus に関して線形性を持ち、 $U \in \{0, 1\}$ に限定すれば (1) に帰着するような方程式

$$U_j^{t+1} = U_{j-1}^t \oplus U_{j+1}^t = \max(U_{j-1}^t, U_{j+1}^t) - \max(0, U_{j-1}^t + U_{j+1}^t - 1) \quad (4)$$

が得られた。この方程式は、右辺が区分線形写像型であり、整数値の初期値からは常に整数値しか生まれないという意味で従属変数に離散性を残している。

さらに、(3) の極限でこの式に帰着するような差分方程式を考えると、ひとつの候補として

$$u_j^{t+1} = (u_{j-1}^t + u_{j+1}^t) / (1 + u_{j-1}^t u_{j+1}^t) \quad (5)$$

が挙げられる。確かに $u = \exp((U - 1/2)/\varepsilon)$ として $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限をとると (4) が得られる。この式で線形性はもはや壊れたであろうか。実はちゃんと生き残っており、

$$x \oplus y = (x + y) / (1 + xy) \quad (6)$$

とすると \oplus は交換・結合法則を満たす。つまり (1), (4), (5) はどれも同じ線形性を持っており、(5) の超離散極限をとると (4) が得られ、(4) の値域を限定すると (1) が得られるという美しい構図が存在する。解についても関連性はこわれておらず、(5) の初期値を、たとえば $\dots 0010^200010^200\dots$ とすれば図 3 (a) が、 $\dots 0010^400010^400\dots$ とすれば図 3 (b) が得られる。

面白いことに、 \tanh の和公式 $\tanh(x+y) = (\tanh x + \tanh y) / (1 + \tanh x \tanh y)$ と (6) を見比べれば、 $u = \tanh v$ という形式的な変数変換から (5) が

$$v_j^{t+1} = v_{j-1}^t + v_{j+1}^t \quad (7)$$

という不安定であるが、 $+$ に関して線形な差分方程式に帰着する。実は、このことは超離散化の位置づけについて以下のような大事な点を指摘している。

いま、(7) から (5) への変換、(5) から (4) への変換ではともに従属変数変換を用いている。後者では極限も利用しているが、極限と変数変換は別の作業であるので切り離して考えるとする。

$$z = x + y$$

という和の演算があるときに、一般の変数変換 $X = f(x)$ を用いると、

$$Z = f(f^{-1}(X) + f^{-1}(Y)) \equiv X \oplus Y$$

が得られる。するとこの式で定義された \oplus についても交換・結合法則が成立することはすぐに確認できる。つまり、変数変換によって代数が変更されるのである。

ところで積はどうなるであろうか。積

$$z = x \times y$$

についても、同じ変数変換を用いると

$$Z = f(f^{-1}(X) \times f^{-1}(Y)) \equiv X \otimes Y$$

となり、 \oplus , \otimes について交換・結合・分配法則がすべて成立する。

このようなしかけを利用すると、いろいろ制限はあるにせよ、元の方程式の代数構造を壊すことなく従属変数変換によって別の方程式を得ることができる。

ところが一見うまくいくしかけにも弱点がある。上の $f(x) = \tanh x$ の変数変換で和を考えると、確かに

$$X \oplus Y = \tanh(\tanh^{-1}(X) + \tanh^{-1}(Y)) = (X + Y)/(1 + XY)$$

となる。しかしながら、積を考えると

$$X \otimes Y = \tanh(\tanh^{-1}(X) \times \tanh^{-1}(Y))$$

となり、右辺はその意味合いがよくわからない演算になってしまう。無理やりこのような変換を用いて積を含む式を変形しても、価値のある式が得られる可能性は低い（価値観によるが）。

一方、超離散化で行われた変数変換は和・積ともに単純な演算に置き換わる。超離散化では $f(x) = \exp(X/\varepsilon)$ の変換を用い、その後で $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限を用いる。まず極限をとる前には

$$\begin{aligned} X \oplus Y &= \varepsilon \log(e^{X/\varepsilon} + e^{Y/\varepsilon}) \\ X \otimes Y &= \varepsilon \log(e^{X/\varepsilon} \times e^{Y/\varepsilon}) = X + Y \end{aligned}$$

となる。そして $\varepsilon \rightarrow +0$ とすると

$$\begin{aligned} X \oplus Y &= \max(X, Y) \\ X \otimes Y &= X + Y \end{aligned}$$

という基本演算が得られるのである。右辺の演算はどちらも基本的なものであり、元の $+$, \times の演算と見かけの質がかなり異なっている。また \max と $+$ という演算からは区分線形型の写像が作られるので、しばしば従属変数の離散化が可能になる。こうして超離散化によって、方程式の代数構造を保持したまま見かけがかなり異なるデジタル方程式を得ることができるのである。なお、汎用性があるとしても意味のあるこの種の変換は限られており、筆者が知る範囲では現在のところ超離散化以外にない。

2 反応拡散方程式の超離散化の試み

前節で示したように超離散化は興味深い特徴をもった方程式の変換手法であるが、いろいろな連続系をまず差分系に翻訳しさらに超離散化しようとする際にしばしば困難が生じる。最大の困難は負の問題である。たとえば

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \varepsilon \log(e^{A/\varepsilon} - e^{B/\varepsilon})$$

の極限を考えると、 $A < B$ のときには複素領域まで拡張すればそれなりの式を得るが、 $A = B$ のときにどう考えるかが問題となる。また、(5) の符号を 1 カ所変更した

$$u_j^{t+1} = (u_{j-1}^t - u_{j+1}^t) / (1 + u_{j-1}^t u_{j+1}^t)$$

では、 $u = \exp(U/\varepsilon)$ タイプの変換を用いて $\varepsilon \rightarrow +0$ の極限を考えたとき、得られるであろう U の方程式をうまく表現できない。普通の差分方程式では特に意識されないこの種の負の問題が未解決であるため、どのような差分方程式でも超離散化できるというわけにはいかない。

今までの経験では、可積分差分方程式はうまく工夫をすればほとんど超離散化でき、解の変換も正值性が保証できるので成功する。しかしながら、超離散化は可積分性の要請を必要とせず、非可積分な方程式にも適用できて不思議はないにもかかわらず、連続非可積分系から超離散系を作れた例はほとんどない。もちろん、超離散化された後の方程式から逆の道筋をたどって差分方程式を作るとは容易である。しかしながらそのようにして作ると、ほとんどの場合において意味合いのよくわからない差分方程式が得られるだけである。

筆者が想像するに、何らかの意味で解のレベルまで対応がとれているような超離散化方程式を作るには、元の方程式自身も超離散化向けに修正を必要とするのではないのであろうか。もちろん元の方程式の解の振る舞いの本質的な部分は壊さないようにしてである。そこで、とりあえず連続系で観察される解の振る舞いをじつとにらんで、似たような振る舞いをする超離散系の方を作り、両方向から差分方程式レベルで一致させるという方策が考えられる。

そこで、ここでは反応拡散系を対象にして、 \max と $+$ だけで発展方程式を作るという試みを行う。反応拡散系は、解が作るパターンに興味深い振る舞いをするものが多く、連立偏微分方程式としてのモデル化手法が確立しており、方程式から解の振る舞いを予測する手だても豊富に存在する [5, 6, 7]。たとえば FitzHugh–Nagumo 方程式

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + u(1-u)(u-a) - v \\ v_t = \varepsilon(u - \gamma v) \end{cases}$$

では、パルス進行波の相互作用が詳しく調べられている。また、空間 2 次元の Belousov–Zhabotinsky 反応のモデル方程式

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

では、同心円状のターゲットパターンや渦巻き状のスパイラルパターンなどの解が知られている。そこで、ここでは 1 次元のパルス進行波に限定し、反応拡散系でしばしば観察される現象を粗い意味で再現する区分写像型方程式を作る試みを

行う。ただし残念ながら今のところ、対応する連続系は同定できず、あくまで真似事にすぎない。

さて、1次元反応拡散系の典型的なもののひとつは、2種の物質の反応と拡散が競合する連立偏微分方程式系である。仮にAとBという物質であるとする、たとえば次のようなメカニズムが方程式に要求される。

- Aは拡散効果によって空間的に広がっていく。
- AはBがいなければある程度まで増えることが可能である。
- BはAがいなければ消滅し、Aを消費することによって増える。
- Bは自らの拡散機構を持たない場合もあり、このときはAに追従してAを消費しながら空間的に広がる。

以上のメカニズムを再現するだけならば、いろいろな区分写像型方程式を作ることができる。方程式の形を複雑にすればするほど、反応拡散系で観察される現象に近づけることは可能である。しかしながら、ここでの目的は将来の超離散化による連続系・離散系の解構造の一致であるので、なるべく単純な形で最低限の要請だけは満たされるように作っておきたい。そこで、次のような方程式を提案する [8, 9]。

$$\begin{cases} u_j^{t+1} = \max(u_{j-1}^t, u_j^t, u_{j+1}^t) - v_j^t \\ v_j^{t+1} = u_j^t \end{cases} \quad (8)$$

まず (8) の上の式だけを考え、 v の影響を無視すると

$$u_j^{t+1} = \max(u_{j-1}^t, u_j^t, u_{j+1}^t)$$

という方程式になる。この方程式は u の「拡散」効果を表している。すなわち、もしある空間領域で u が正の値をもっており、他では0であるとする、時間が経つにつれて非零領域がまわりに広がっていく。では、元の (8) に戻って今度は v について考える。下の式は、1時刻遅れで v が u に置き換わることを意味している。そして上の式で v は u を減らす役割を持っている。すなわち v は粗く言えば「 u を消費して増加し、 u のいるところについていく」という動きをする。

式の形からは上で列挙した反応拡散系の要件を満たしているように見えるが、実際の解はどうであろうか。まず、図4にいろいろな初期条件からの数値計算結果を載せる。 v は1時刻前の u と同じなので、図では u の変化だけを載せている。まず、(a) は右に1の速さで進む進行波、(b) は左に1の速さで進む進行波を示している。進行波を作るには、まず $0 p p 0$ か $0 p p + q q 0$ ($p, q > 0$) の数字列を何種類か用意して、それらの間に適当な個数の0をはさんで並べ、それ以外をすべて0にしたパターンを用意する。 u をそのパターン自身にし、そのパターンのコ

ピーを格子ひとつ分左にずらして v にすれば右へ速さ 1 で進む複数のパルス進行波になり、格子ひとつ分右にずらせば左へ速さ 1 で進む進行波になる。

(c) は次々と左右にパルス進行波を生むパルスジェネレータの例である。(d) はパルスを左右に 2 つずつ生み出すようなローカルな非零初期値の例を示している。パルス進行波同士の相互作用は非常に多くのバリエーションが存在し、(e), (f), (g) のように位相のずれという非線形効果は生じるが個々のパルスが安定にすり抜ける場合や、(h) のように相互作用の後にパルス形状が変わる場合がある。さらに (i) の例では、0110 タイプの 2 つの進行波パルスと 01210 タイプとが衝突した後、0220 タイプの進行波パルスと (c) で述べたパルスジェネレータに変化する様子が示されている。

まだ (8) の解の一般的な振る舞いはわかっていない。しかしながら上で述べたパルスの振る舞いは、反応拡散系で観察されるパルスの振る舞いに似ていなくもない。さらに (8) は高い対称性のある式になっている。 u 一本で表現すると

$$u_j^{t+1} + u_j^{t-1} = \max(u_{j-1}^t, u_j^t, u_{j+1}^t)$$

となり、時間および空間に関して対称な形をしている。特に時間に関して対称なので、可逆な方程式である。このことは、拡散項を伴う反応拡散系ではおよそ考えられない対称性である。しかしながら、ある程度似た振る舞いをするデジタルモデルが存在するということは、連続系の中に可逆でかつ反応拡散系と同様のパルスダイナミクスを持っているものがあるのかもしれない、あるいは、我々が見当違いの方程式を提出しているだけかもしれない。この点も含め、まだまだ詰めて行くべき課題が多く、今後の発展に期待したい。

参考文献

- [1] S. Wolfram, 「Cellular Automata and Complexity」, Addison-Wesley (1994).
- [2] 高橋大輔, ‘超離散的からくり’, 数理科学 **435** (1999) 12–17.
- [3] 時弘哲治, 薩摩順吉, 松木平淳太, 高橋大輔, ‘可積分セルオートマトン — ソリトン方程式の離散化の果てに何が見えたか —’, 日本物理学会誌 **52** (1997) 276–279.
- [4] 高橋大輔, ‘ソリトン・セルオートマトン’, 数理科学 **405** (1997) 33–39.
- [5] 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).
- [6] 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).

