# 反応拡散系の超離散化可能な離散化について

By

## 松家 敬介 (KEISUKE MATSUYA)\*

#### Abstract

In this paper, we propose a discretization and an ultradiscretization of Gray-Scott model which is not an integrable system and which gives various spatial patterns with appropriate initial data and parameters. The resulting systems give a traveling pulse and a self-replication pattern with appropriate initial data and parameters. This work is a joint work with Mikio Murata in Tokyo University of Agriculture and Technology.

### §1. はじめに

それぞれが対応した連続系,離散系そして超離散系は,可積分な方程式に対して盛ん に研究が進められてきた.非可積分な方程式に対しても,この三つでそれぞれが対応した ものを調べることで現象の一層の理解につながることを期待される.そのためにも,まず は非可積分な方程式に対して,この三つでそれぞれが対応した方程式系を構成することが 第一歩となる.本稿では非可積分系である反応拡散系のうち Gray-Scott モデルと呼ばれ る方程式系について議論する.本稿の内容は [2] を解説したものである.

Gray-Scott モデルは以下の反応拡散系である.

(GS) 
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - uv^2 + a(1-u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + uv^2 - bv \end{cases}$$

ただし,  $u := u(t,x), v := v(t,x), t \ge 0, x \in \Omega_c \subset \mathbb{R}, a, b, D > 0.$ この反応拡散系は自己触媒反応:

$$\begin{cases} U + 2V \to 3V \\ V \to P \end{cases}$$

Received December 2, 2013. Revised May 22, 2014. 2010 Mathematics Subject Classification(s): 39A14, 37L60

Key Words: 反応拡散系, 離散化, 超離散化

<sup>\*</sup>Graduate School of Mathematical Science The University of Tokyo, Interdisciplinary Center for Mathematical Sciences, Institute for Biology and Mathematics of Dynamical Cell Processes, 3-8-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153-8914, Japan. e-mail: matsuya@ms.u-tokyo.ac.jp

<sup>© 2014</sup> Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University. All rights reserved.

の数理モデル化 [1] として知られている. (GS) は初期条件だけでなくパラメータ *a*,*b*,*D* を変化させることで様々な時空パターンを与えることも知られている [4, 5].

(GS) の離散化として

(dGS) 
$$\begin{cases} u_n^{s+1} = \frac{m_p(u_n^s) + \delta\left(2m_p(u_n^s)w_n^{s+1} + a\right)}{1 + \delta\left\{(w_n^{s+1})^2 + a + 1\right\}}\\ w_n^{s+1} = \frac{m_q(w_n^s) + \delta\left\{m_p(u_n^s)(m_q(w_n^s)^2 + 1) + b\right\}}{1 + \delta\left(2m_q(u_n^s) + b\right)} \end{cases}$$

が,超離散化として

(udGS) 
$$\begin{cases} U_n^{s+1} = \max\left[M_p(U_n^s) + W_n^{s+1}, A\right] - \max\left[2W_n^{s+1}, A\right] \\ W_n^{s+1} = \max\left[M_p(U_n^s) + 2M_q(W_n^s), B\right] - \max\left[M_p(U_n^s), B\right] \end{cases}$$

ii [2,3]等で報告されている. ただし,  $s \in \mathbb{Z}_{>0}$ ,  $n \in \Omega_d \subset \mathbb{Z}$ ,  $p, q \in \mathbb{Z}_{>0}$ ,  $\delta > 0$ ,  $A, B \in \mathbb{Z}$ ,

$$m_p(u_n^s) := \frac{u_{n+p}^s + u_{n-p}^s}{2}, \ M_p(U_n^s) := \max\left[U_{n+p}^s, U_{n-p}^s\right], \dots$$

また,(dGS) の従属変数 *w* は (GS) の従属変数 *v* に 1 を加えた量と対応している. (udGS) の解については [3] で解説がなされている.本稿では (GS) の離散化である (dGS) について議論する.

### §2. (dGS)の平衡点とその周りの安定性について

この節では (dGS) の平衡点について議論する. また, (GS) の差分法による通常の離 散化との比較についても述べる.

(dGS)の平衡点について述べる前に (GS)の平衡点について簡単に纏める. (GS)の平衡点とは次の常微分方程式系:

(\*) 
$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = -uv^2 + a(1-u) \\ \frac{dv}{dt} = uv^2 - bv \end{cases}$$

の平衡点である.連立方程式を解くことで平衡点

$$P_{c,0}: (u_{c,0}, v_{c,0}) = (1,0),$$
$$P_{c,\pm}: (u_{c,\pm}, v_{c,\pm}) = \left(\frac{1}{2}\left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}}\right), \frac{a}{2b}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}}\right)\right)$$

が得られる.

 $P_{c,\pm}$ は $a - 4b^2 > 0$ の場合に生じる平衡点であり,  $P_{c,0}$ はa, bの値に関係せずに生じる平衡点となっている. さらに, これらの平衡点の周りの安定性について調べる. 例えば,  $P_{c,0}$ の周りで (\*)を線形化した方程式系は

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{u}}{dt} = -a\tilde{u}\\ \frac{d\tilde{v}}{dt} = -b\tilde{v} \end{cases}$$

となり, a, b > 0 から  $P_{c,0}$  が漸近安定な平衡点であることが分かる. ほかの平衡点についても纏めると以下のようになる.

$$P_{c,0} \Rightarrow$$
漸近安定  
 $P_{c,-} \Rightarrow$ 不安定  
 $P_{c,+} \Rightarrow (\dagger)$ が成立すれば漸近安定,しなければ不安定

(†) 
$$b - \frac{a^2}{2b^2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}}\right) < 0$$

§2.2. (dGS)の平衡点について

(dGS)の平衡点は次の常差分方程式系の平衡点.

$$(**) \begin{cases} u^{s+1} = \frac{u^s + \delta \left(2u^s w^{s+1} + a\right)}{1 + \delta \left\{(w^{s+1})^2 + a + 1\right\}} \\ w^{s+1} = \frac{w^s + \delta \left[u^s \left\{(w^s)^2 + 1\right\} + b\right]}{1 + \delta \left(2u^s + b\right)} \end{cases}$$

(GS)の場合とやはり同様に連立方程式を解くことで以下の平衡点が得られる.

$$P_{d,0}: (u_{d,0}, w_{d,0}) = (1,1),$$
  
$$P_{d,\pm}: (u_{d,\pm}, w_{d,\pm}) = \left(\frac{1}{2}\left(1 \mp \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}}\right), 1 + \frac{a}{2b}\left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}}\right)\right)$$

平衡点の位置は (GS) のそれらと同じものとなっている. さらに平衡点の周りの安定性を 調べる. 例えば, P<sub>d,0</sub> の周りで (\*\*) を線形化した方程式系は

$$\begin{cases} \tilde{u}^{s+1} = \frac{1+2\delta}{1+\delta(a+2)}\tilde{u}^s\\ \tilde{w}^{s+1} = \frac{1+2\delta}{1+\delta(b+2)}\tilde{w}^s \end{cases}$$

となり, a, b > 0 から  $P_{d,0}$  が漸近安定な平衡点であることが分かる. ほかの平衡点についても纏めると以下のようになる.

$$P_{d,0} \Rightarrow$$
漸近安定 $P_{d,-} \Rightarrow$ 不安定 $P_{d,+} \Rightarrow (\dagger\dagger)$ が成立すれば漸近安定,しなければ不安定

$$(\dagger \dagger) \quad b - \frac{a^2}{2b^2} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} \right) + \delta \left[ (2b - a) \left\{ 1 + \frac{a}{2b} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4b^2}{a}} \right) \right\} - a \right] < 0$$

(††) の左辺の  $\delta^0$  の項は (†) の左辺と一致しており,  $\delta$  を小さくしていくことで  $P_{d,+}$  の周 りの振る舞いが (GS) の  $P_{c,+}$  の周りの振る舞いに近づいていくことが分かる.

### §2.3. (dGS) と (GS)の通常の離散化の比較

ここで述べている (GS) の通常の離散化とは次の偏差分方程式系のことである.

(‡) 
$$\begin{cases} \frac{u_n^{s+1} - u_n^s}{\delta} = \frac{u_{n+1}^s - 2u_n^s + u_{n-1}^s}{\xi^2} - u_n^s (v_n^s)^2 + a(1 - u_n^s)\\ \frac{v_n^{s+1} - v_n^s}{\delta} = D\frac{v_{n+1}^s - 2v_n^s + v_{n-1}^s}{\xi^2} + u_n^s (v_n^s)^2 - bv_n^s \end{cases}$$

前小節と同様に (‡)の平衡点を求めると (GS) と同じ位置の平衡点が得られる. しかし,平 衡点の周りの安定性に関して (dGS) と違いがある. (u,v) = (1,0)の周りで線形化した方 程式系として次が得られる.

$$\begin{cases} \hat{u}^{s+1} = (1 - \delta a)\hat{u}^s \\ \hat{v}^{s+1} = (1 - \delta b)\hat{v}^s \end{cases}$$

この方程式系から $\delta < 2\min[1/a, 1/b]$ のときに (u, v) = (1, 0)は安定な平衡点となる.これは差分パラメータ $\delta$ が平衡点の安定性に影響を及ぼしており, (GS)の離散化としては (dGS)のほうが (‡) よりふさわしいものであると考えられる.

### §3. (dGS)の解について

本節では (dGS) の解として得られる時空パターンについて概説する.  $p = 3, q = 1, \delta = 0.1$ とし、初期条件として

$$u_0^j = \begin{cases} 1 - 0.3 \cos\left(\frac{\pi n}{50}\right) & |n| \le 25, \\ 1 & |n| > 25, \end{cases}$$
$$w_0^j = \begin{cases} 1 + 0.5 \cos\left(\frac{\pi n}{50}\right) & |n| \le 25, \\ 1 & |n| > 25. \end{cases}$$

を与え,空間方向に対して周期境界条件を課した下で計算した場合に *w<sup>s</sup>* の値をプロット することで得られる時空パターンを以下で挙げる. 縦軸は時間 *s*, 横軸は空間 *n* を表して いる. 値は, それぞれの図の右側の凡例による色の濃淡で表現されている.



Figure 1. a = 0.03, b = 0.10

Figure 2. a = 0.04, b = 0.06

Figure 1 では, 一つのピークが二つのピークに分裂し, 互いに反対の方向に動き, 境界 で衝突して反射している. Figure 2 では, 一つのピークが二つのピークに分裂し, 互いに 反対の方向に動くという点では Figure 1 と類似した時空パターンになっている. しかし, それぞれのピークの間は図の中の黒い部分より少し値が大きくなっている. これは,(dGS) の平衡点 *P*<sub>d,+</sub> に落ち込んでしまった部分である. また, 境界では二つのピークが衝突し, それぞれ消滅している. この点にも Figure 1 と異なる挙動が表れている.



Figure 3. a = 0.04, b = 0.09

Figure 4. a = 0.04, b = 0.11

Figure 3 では, 一つのピークが二つのピークに分裂し, 互いに反対の方向に動き, ある 程度ピーク同士が離れるとそれぞれ再び二つのピークに分裂し, 一方はその場に留まり, もう一方は一定の方向に動いていくという現象を繰り返している. Figure 4 では, 一つの ピークが二つのピークに分裂し, 互いに適当な方向に動き, ピーク同士の間隔がある程度 できたときに分裂するという現象を繰り返している.





Figure 5. a = 0.02, b = 0.09

Figure 6. a = 0.08, b = 0.17

Figure 5 では, 一つのピークが二つのピークに分裂し, ある程度離れたのちにほぼ同 じ場所に留まる現象がみられる. Figure 6 では, ピークが高さをある程度変えた後に, その 場にとどまり続けている.



Figure 7. a = 0.05, b = 0.15

Figure 7 では, ピークが高さを変えつつ時間の経過と共に低くなり消滅している. これらの時空パターンは, (GS)の数値計算として報告されているもの [4, 5] と類似し たものとなっている.また, [5] それぞれの時空パターンが得られるパラメータ *a*,*b* に関す る領域に関する結果も報告されている.このパラメータ *a*,*b* に関する領域を (dGS) に対 しても調べると Figure 8 が得られる.



Figure 8. p = 3, q = 1,  $\delta = 0.1$  の場合の a, b の相図

上側の曲線は $b = 4a^2$ であり, これは平衡点  $P_{d_{\pm}}$ が生じる境目となっている. 詳しくは, この曲線より下側の領域でこれらの平衡点が生じる. また, 下側の直線はb = aである. [5] では, パラメータに対してb > aという制約が入った場合のパラメータの相図が報告されており, 今回は対応する部分について調べた. パラメータのどの領域でどの時空パターンが見られるかは以下の通りになっている.

 $\triangle$ : Figure 1; +: Figure 2; ×: Figure 3;  $\diamond$ : Figure 4; ■: Figure 5;  $\Box$ : Figure 6;  $\bigtriangledown$ : Figure 7

Figure 8 は [5] で報告されているものと類似したものが得られている.

### §4. まとめ

本稿では、(dGS)の平衡点とその周りの挙動及び解として得られる時空パターンについて紹介した.平衡点とその周りの挙動については (GS)のそれと近いものになっていることが分かった.また、(GS)の通常の離散化として考えられる (‡)と (dGS)の比較も行った.その結果、(GS)において必ず漸近安定となる平衡点に対応する平衡点の周りの挙動が異なっていた.その点をもって、(dGS)は (GS)の離散化としてふさわしいものであると考えられる.

さらに,時空パターンについては (GS) から得られるパターンと対応しており,それと

同時に (udGS) から得られる時空パターンとも対応している.

実際に, (udGS) が与える時空パターンとしては以下の様なものが挙げられる. 縦軸は時間 s, 横軸は空間 n を表しており,  $W_n^s$  が白い部分で 0, 黒い部分で 1 の値をとっている.





Figure 9. A = -1, B = 1, p = q = 1 Figure 10. A = 0, B = 1, p = 2, q = 1

Figure 9 は Figure 2 と Figure 10 は Figure 3 と対応したパターンとなっている.

今回で,連続系,離散系そして超離散系のそれぞれが対応した形で,時空パターンというある現象を記述することが出来た.それぞれから解析を進めていくことで現象の一層の理解につながることが期待される.そのために,今後は三つの系の解の対応について検証を進めていきたい.例えば,離散系と超離散系のパラメータがどのように対応しているかを調べることで,それぞれの時空パターンの対応をさらに明確にしていきたい.

### 謝辞

本研究は,JSPS 科研費 23740125 及び生命動態システム科学推進拠点事業 東京大学 「生物医学と数学の融合拠点 (iBMath)」の助成を受けたものです.

#### References

- P. Gray and S. K. Scott, Sustained oscillations and other exotic patterns of behaviour in isothermal reactions, J. Phys. Chem., 89 (1985), 22–32.
- [2] K. Matsuya and M. Murata, Spatial pattern of discrete and ultradiscrete Gray-Scott model, arXiv:1305.5343.
- [3] M. Murata, Discretization and ultradiscretization of non-integrable system, RIMS Kôkyûroku Bessatsu, B41 (2013), 85–99
- [4] Y. Nishiura and D. Ueyama, A skeleton structure of self-replicating dynamics, *Physica D*, 130 (1999), 73–104.
- [5] Y. Nishiura and D. Ueyama, Spatio-temporal chaos for the Gray-Scott model, *Physica D*, 150 (2001), 137–162.