

応用力学研究所研究集会報告 No.18ME-S5
「非線形波動現象における基礎理論, 数値計算および実験のクロスオーバー」
(研究代表者 西成 活裕)

Reports of RIAM Symposium No.18ME-S5
Crossover among theoretical, numerical and experimental studies on nonlinear waves
Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 6 - 8, 2006

Article No. 30

等方的なBZ反応セルオートマトンに ついて

西山了允 (NISHIYAMA Akinobu), 時弘哲治 (TOKIHIRO
Tetsuji), 田中宏志 (TANAKA Hiroshi)

(Received February 23, 2007)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
May, 2007

等方的な BZ 反応セルオートマトンについて

東京大学大学院数理科学研究科 西山了允 (NISHIYAMA Akinobu)
時弘哲治 (TOKIHIRO Tetsuji)
島根大学総合理工学部 田中宏志 (TANAKA Hiroshi)

概要

我々はセルオートマトン系において等方的なパターンを得るために非常にシンプルな方法を提案する. 従来のセルオートマトンモデルではパターンを等方化するために非常に広範囲に近傍セルを選ぶ必要があり, 反応拡散方程式を数値的に解くのに比べてセルオートマトンの利点を十分に生かしきれていなかった. 我々のモデルでは, ルールに適当なランダムネスを加えることで, ムーア近傍程度でこれが可能となる. これにより大規模な系で, より現実的な解析が容易に行えるようになる.

1. Introduction

反応拡散系における振動現象の例としてベルーソフ・ジャボチンスキー (Belousov-Zhabotinsky, 以下 BZ) 反応が知られている[1]. これはある状況下でターゲット・パターンやスパイラル・パターンとして観測され, 大変興味深い振る舞いを見せる.

この現象は次の反応拡散方程式でシミュレートできる[2],

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v) + D_u \Delta u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v) + D_v \Delta v \end{cases}$$

ここで u , v は物質の濃度に対応した状態変数, D_u , D_v は拡散係数である. 2つの関数 $f(u, v)$, $g(u, v)$ は u , v の相互作用を決定する反応項である. 図1に BZ 反応の振る舞いを再現する $f(u, v)$, $g(u, v)$ のヌルクラインの典型例を示す. 任意の u , v の組は $f(u, v)=0$, $g(u, v)=0$ の交点に平衡点を持つが, 拡散項によりある程度大きな摂動が加わると励起状態になり図の矢印の経路に沿って遷移し, 再び平衡点に戻る. これが繰り返し起こることでターゲット・パターンなどの周期パターンが得られる.

BZ 反応を再現する他のよく知られた数理モデルとして Cellular Automaton (以下 CA) がある[3]. CA は時間, 空間, 状態のすべての変数が離散的なモデルであり, 非常に少ない計算コストで複雑な自然現象や社会現象を再現できるという利点がある. しかし CA はその離散的な空間格子に起因して, 得られるパターンがしばしば非等方的なものになってしまうという問題を併せ持つ[4][5]. 等方化の試みは従来から知られているが, 良い結果が得られているとは言い難い.

等方的な BZ 反応のパターンを再現する CA モデルとしてはマーカスたちによるものが

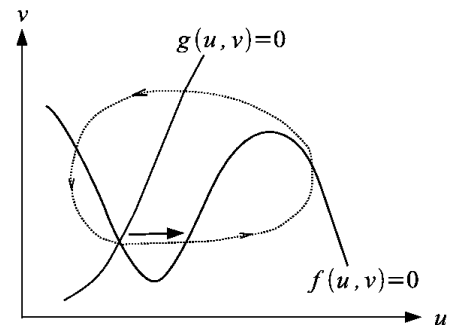


図1. BZ 反応の相平面図.

有名である[6]. このモデルはあらかじめ円形の近傍セルを選んでおくことで、パターンの等方性を回復するものであり、現象をよく再現することが知られている. しかし広範囲に近傍セルを選ぶ必要から多くの計算機資源を消費し、反応拡散方程式を数値的に解くの に比べて **CA** の利点を生かしきれていなかった.

我々の目的は等方的かつシンプルな **CA** を構築することにある. 次章で **BZ** 反応のパターンを再現する等方的 **CA** モデルを紹介する.

2.Model

本章では **BZ** 反応の等方的な **CA** モデルを以下の手順で紹介する. 最初に, 2.1 で単純な 正方格子モデルを導入する. 次の 2.2 でそのモデルを拡張し等方化を行う.

なお, 2.1 のモデルは[7]で提案されたモデルを改良したものである.

2.1.Simple Square Lattice Model

ここでは非等方パターンを与える **BZ** 反応の **CA** モデルについて説明する.

モデルは 2 次元正方格子上で定義される. 任意のセルは 2 つの状態変数 u_{mn}^t, v_{mn}^t を持ち, m, n および t はそれぞれ格子点の行, 列そして時間ステップである. この u_{mn}^t, v_{mn}^t はそれぞれ 0 から $N-1$ までの値をとるものとする. またルールはムーア近傍上で定義され, 時刻 t , 位置 m, n における u についての状態数の合計 S_{mn}^t を以下のように与えておく.

$$S_{mn}^t := u_{m-1,n-1}^t + u_{m,n-1}^t + u_{m+1,n-1}^t + u_{m-1,n}^t + u_{m+1,n}^t + u_{m-1,n+1}^t + u_{m,n+1}^t + u_{m+1,n+1}^t$$

時刻 $t+1$ における各セルの状態は以下のルールで決定される (図 2 参照).

(1) もし $u_{mn}^t = v_{mn}^t = 0$ かつ $S_{mn}^t \geq \Delta$ ならそのとき状態は $u_{mn}^t = 1, v_{mn}^t = 0$ の点に励起する. そうではなく $u_{mn}^t = v_{mn}^t = 0$ かつ $S_{mn}^t < \Delta$ なら各状態は $u_{mn}^t = v_{mn}^t = 0$ に留まる. ここで Δ は励起が起こるための閾値であり, 正の定数を取る.

(2) もし $u_{mn}^t + v_{mn}^t \neq 0$ ならそのときセルの状態は図 2 の矢印の経路に沿って毎時間ごとに次の状態に自動的に遷移する. 最終的に $u_{mn}^t = v_{mn}^t = 0$ に戻り, (1)のルールが再び適用される.

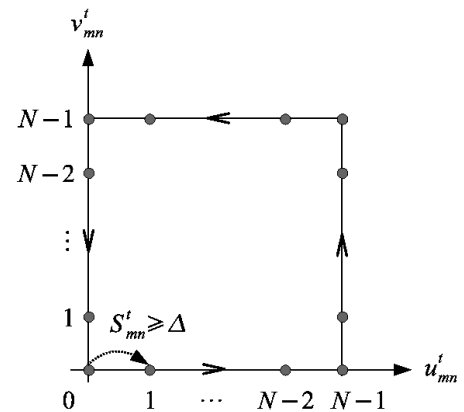


図 2. 時間発展ルール.

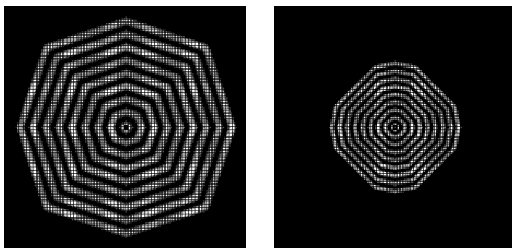


図 3 (a) $\Delta=3$ (b) $\Delta=6$

このモデルは図 1 の相平面で示したダイナミクスの単純な模倣である.

モデルが与えるパターンの例を図 3 (a), (b) に

示す. 2 つの図はどちらも得られたターゲット・パターン

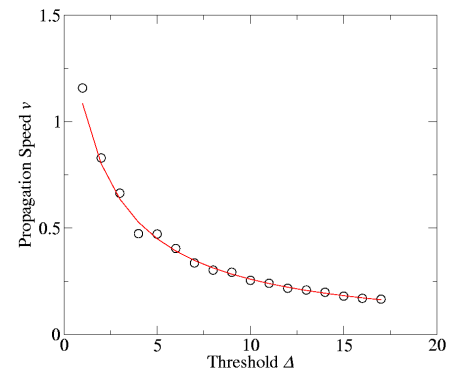


図 4. パターンの伝播速度の閾値 Δ 依存性.

ンであり、適当な初期条件の下、それぞれ同時刻まで時間発展させたものである。励起のための閾値 Δ がそれぞれ異なり、(a) $\Delta=3$, (b) $\Delta=6$ である。閾値の低いほうがパターンの伝播速度が速く、また(a)と(b)で得られたパターンの対称性が異なることが確認できる。解析の結果、パターンの伝播速度と対称性は閾値 Δ のみに依存することが分かっている。 Δ をコントロールすることでいくつかの異なるパターンを作り出すことができ、この Δ 依存性が等方化を行う際の重要な性質となる。図4にパターンの伝播速度の Δ 依存性を示しておく。

2.2. Isotropic Square Lattice Model

本節では2.1のモデルを拡張し、等方モデルを導出する。方法としては前節の時間発展ルールにある確率的なシステムを加えることでこれが可能となる。

2.1のモデルでは励起条件の閾値としてパラメータ Δ を導入した。この閾値は全格子点上で同一の値を取っていたが、これを次のように置き換える。

最初に2つの異なる閾値 Δ_1 と Δ_2 ($\Delta_1 > \Delta_2 \neq 0$) を用意する。そしてこれらを各格子点上にランダムに配置する。ただしこれら閾値は初期条件として配置し、時間発展中に値を変更しないものとする。以上の手順をまとめると、

$$\Delta_{mn} := \begin{cases} \Delta_1 & (p) \\ \Delta_2 & (1-p) \end{cases} .$$

ここで p はあるセル上に Δ_1 が配置される確率である。等方化の方法は励起の閾値 Δ を Δ_{mn} に置き換えるという操作だけである。他の時間発展ルールは2.1のものと同じであり、励起条件の部分を $S_{mn}^t \geq \Delta_{mn}$ に変更する。

3. Numerical Results

提案した等方モデルに対して得られたいくつかの数值結果を以下に紹介する。最初の例として、得られたシングル・リング・パターンを図5(a)に示す。等方的なパターンであることが分かる。図5(b)はリング・パターンの等方性に関する解析結果である。リングの半径が大きくなるにつれて、角度についての平均半径の分散が小さくなることを確認した。

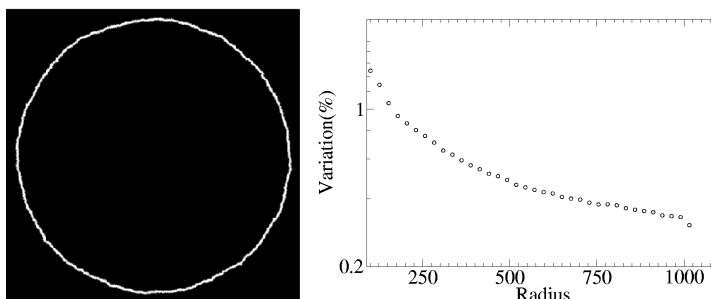


図5(a) シングル・リング・パターン (左) ,
 $N=5, \Delta_1=3, \Delta_2=7, p=0.5$.
 (b) 等方性に関する解析結果 (右) .

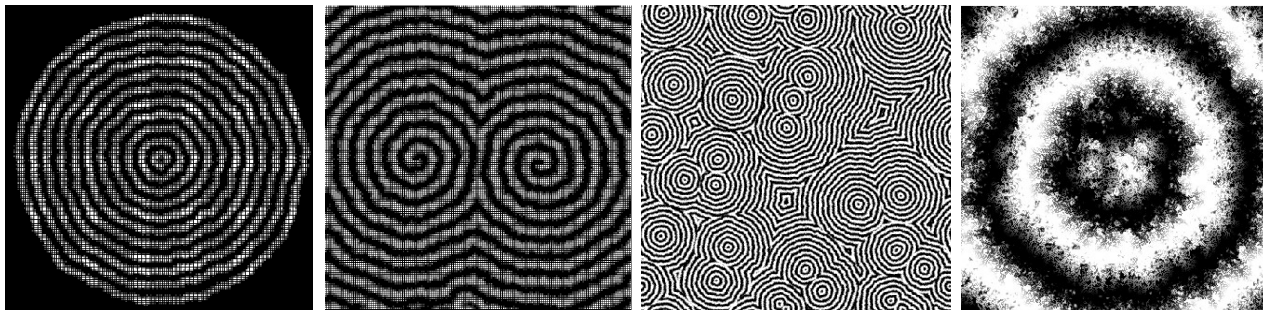
図6, 図7はそれぞれ得られたターゲット・パターンとスパイラル・パターン。図8はランダムな初期条件から発生した複数のターゲット・パターンである。また図9は状態数を大きな値に取って計算した場合に得られたターゲット・パターンである。いずれの結果も等方性を回復していることが確認できる。

4. Summary

今回我々はBZ反応のパターンを再現する非常にシンプルな等方的CAモデルの構築に成功した。このモデルは正方格子上で等方パターンを得ることができ、その時間発展ルールはたかだかムーア近傍程度で定義される。

等方性の起源となっているのは励起が起こるための閾値に対して導入した空間方向についてのランダムネスである。各格子点にランダムに配置された閾値が発展パターンの伝播速度と方向をばらつかせ、その等方パターンが得られる。

今後解決すべき重要な問題はより高次元の CA 系での応用と逆超離散化[8]であると考えられる。



左から、

図 6. ターゲット・パターン $N=4, \Delta_1=3, \Delta_2=6, p=0.5$.

図 7. スパイラル・パターン $N=4, \Delta_1=3, \Delta_2=6, p=0.5$.

図 8. ランダムな初期条件から得られたパターン $N=5, \Delta_1=3, \Delta_2=7, p=0.5$.

図 9. 状態数が大きな場合に得られたパターン $N=200, \Delta_1=10, \Delta_2=400, p=0.5$.

References

- [1] A. N. Zaikin and A. M. Zhabotinsky, *Nature*, **225**, 535 (1970)
- [2] E. Meron, *Phys Rep.*, **218**, 1 (1992)
- [3] S. Wolfram, *A New Kind of Science* (Wolfram Media, Champaign, IL, 2002)
- [4] M. Gerhardt, H. Schuster and J. J. Tyson, *Physica D*, **46**, 416 (1990)
- [5] M. Markus, *Biomed. Biochim. Acta*, **46**, 681 (1990)
- [6] M. Markus and B. Hess, *Nature*, **347**, 56 (1990)
- [7] N. Dohba, Master Thesis, University of Tokyo, 2000 [in Japanese]
- [8] W. Kunishima, A. Nishiyama, H. Tanaka and T. Tokihiro, *J. Phys. soc. Jpn.*, **73**, 2033 (2004)