

無限 Y 字領域上の Allen-Cahn 方程式におけるフロントダイナミクスについて

北海道大学大学院理学院数学専攻
満園 健 (Ken MITSUZONO)*

概要

本研究は、北海道大学の栄伸一郎教授と島谷晴基氏との共同研究である。半区間 $[0, \infty)$ を 3 つ、原点でキルヒホッフの境界条件下で繋いだ領域（以後、無限 Y 字領域と呼ぶ）で Allen-Cahn 方程式を考える。近年、無限 Y 字領域や、星状グラフ上で反応拡散方程式を考える問題が精力的に研究されている [4][5]。本発表では、無限 Y 字領域での反応拡散方程式の数値計算の手法を紹介したい。またその数値計算結果と島谷氏が得た、Allen-Cahn 方程式のフロントダイナミクスの一部の結果が一致することも含めて紹介したい。

1 Allen-Cahn 方程式のフロントダイナミクスの理論による主結果

図 1 のように 3 個の半区間 $[0, \infty)$ を、原点で結合することで得られる領域 Ω を無限 Y 字領域と呼ぶ。また、結合させた半区間をそれぞれ $\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2$ とおく。

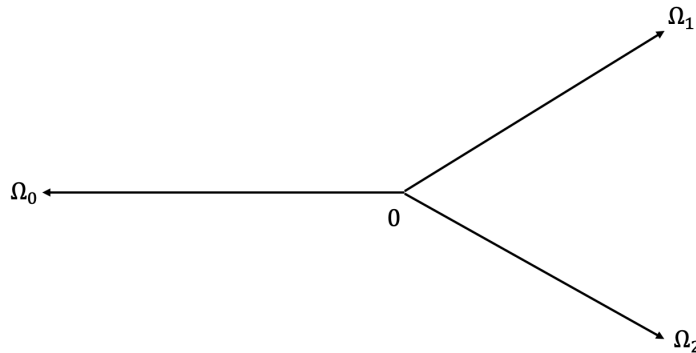


図 1: 無限 Y 字領域 Ω

位置 $x \in \Omega$ が Ω_i 上にあるとき x を x_i 、 $u = u(t, x)$ として Ω_i 上の関数 u を $u_i = u_i(t, x_i)$ と表すこととする。このような領域上で以下の反応拡散方程式を考える。

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2}(u_i - a)(1 - u_i^2), & (i = 0, 1, 2, D: \text{拡散係数 } (> 0), t > 0, x_i \in \Omega_i), \\ u_i(0, x_i) = u_{i0}(x_i), & (\text{初期値}), \\ \frac{\partial u_0}{\partial x_0}(t, 0) + \frac{\partial u_1}{\partial x_1}(t, 0) + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}(t, 0) = 0, & (\text{キルヒホッフの境界条件}), \\ u_0(t, 0) = u_1(t, 0) = u_2(t, 0). \end{cases} \quad (1)$$

この式は一般に Allen-Cahn 方程式と呼ばれており、原点にはキルヒホッフの法則に基づいた境界条件が課されている。本研究では $a = 0$ として、上式を満たす Ω_0, Ω_1 上の一般解 u_0, u_1 がフロント型

*Mail adress: mitsuzono.ken.w8@elms.hokudai.ac.jp

定常解を用いて表される場合の, u_0, u_1, u_2 のダイナミクスを調べる. ただし, フロント型定常解の定義としては次の通りである.

定義 1. $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 十分滑らかであると仮定する. $u = u(t, x)$ として, 反応拡散方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u), & (D: \text{拡散係数 } (> 0), t > 0, x \in \mathbb{R}), & (2) \\ u(0, x) = u_0(x), & (\text{初期値}), & (3) \\ u(t, \pm\infty) = S_{\pm}. & & (4) \end{cases}$$

における式 (2)~(4) と $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ をみたす解 $S(x)$ を定常解と呼ぶ. ただし, S_{\pm} は f の安定平衡点とする. $S(x) \rightarrow S_{\pm}(x \rightarrow \pm\infty)$ において, $S_+ \neq S_-$ であるときの定常解 $S(x)$ を特にフロント型定常解と呼ぶこととする.

例 1. 一次元の数直線上の Allen-Cahn 方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2}u(1 - u^2), & (D: \text{拡散係数 } (> 0), t > 0, x \in \mathbb{R}), \\ u(0, x) = u_0(x), & (\text{初期値}), \\ u(t, \pm\infty) = \pm 1. \end{cases}$$

において, フロント型定常解は $S(x) = \tanh(\frac{x-c}{2\sqrt{D}})$ ($c \in \mathbb{R}$) である (図 2).

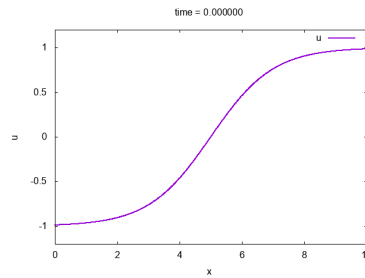


図 2: 一次元の数直線上の Allen-Cahn 方程式のフロント型定常解 ($c = 5$)

定理 1. (無限 Y 字領域上の Allen-Cahn 方程式におけるフロントダイナミクス)

無限 Y 字領域上の Allen-Cahn 方程式 (1) において $a = 0$ を仮定し, $S(x) = \tanh(\frac{x}{2\sqrt{D}})$ とする. $\sup_{x \in \Omega_0} |u_0(0, x_0) - S(x_0 - l_0(0))| \ll 1$, $\sup_{x \in \Omega_1} |u_1(0, x_1) - S(x_1 - l_1(0))| \ll 1$, $\sup_{x \in \Omega_2} |u_2(0, x_2) + 1| \ll 1$ ならば $\exists l^* > 0$ が存在し, $l_0(0), l_1(0) \gg l^*$ であるとする. $l_0(t), l_1(t) > l^*$ である限り, $\sup_{x \in \Omega_0} |u_0(t, x_0) - S(x_0 - l_0(t))| \ll 1$, $\sup_{x \in \Omega_1} |u_1(t, x_1) - S(x_1 - l_1(t))| \ll 1$, $\sup_{x \in \Omega_2} |u_2(t, x_2) + 1| \ll 1$ である. また次が成り立つ.

1) $l_0(0) = l_1(0) > l^*$ のとき.

$l_0(t), l_1(t) > l^*$ である限り, $l_0(t), l_1(t)$ は単調減少である.

2) $\log 2 < l_1(0) - l_0(0)$ のとき

$l_1(\tau) - l_0(\tau) = \log 2$ をみたす $\tau (> 0)$ が存在し, $t < \tau$ のとき $l_0(t)$ は単調増加, $l_1(t)$ は単調減少である. また, $t > \tau$ のとき $l_0(t), l_1(t) > l^*$ である限り, $l_0(t), l_1(t)$ は単調減少である.

では次節にて無限 Y 字領域上における反応拡散方程式の数値計算手法と, またその数値計算結果が定理 1 と相反しないことを紹介する. また定理 1 では $l_0(t), l_1(t)$ が原点に近い場合の解の振る舞いに関して理論的な証明はなされていない. そこで数値計算にて $l_0(t), l_1(t)$ が原点に近い場合の解 u_0, u_1, u_2 の振る舞いについても実験的に調べ, その結果を紹介する.

2 無限 Y 字領域上の数値シミュレーション

無限 Y 字領域での反応拡散方程式の数値計算手法をより理解しやすいものにするため、まずは 1 次元の数直線上での反応拡散方程式の計算手法と簡単を紹介する。

プログラミングでは例えば実数のような連続な空間を細かく分けて方程式を考える。一般的にこの空間を細分する行為は離散化と呼ばれる。以後、空間 x を離散化して得られる最小の区間を Δx と、時間 t を離散化して得られる最小の区間を Δt と表す。

次に実際に方程式の数値的な解析をする手法を紹介する。

$u_i^n := u(n \times dt, i \times dx)$ と定義し、式 (2) を

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = D \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} + f(u_i^n)$$

と離散化する。 $r = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$ としてこの式を u_i^{n+1} に関して解くと、

$$u_i^{n+1} = rD(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + \Delta t f(u_i^n) + u_i^n \quad (5)$$

となり、次の時間ステップでの解 u を数値的に求めることが出来る。この時間微分を前進差分によって記述した計算手法は陽解法と呼ばれる。

次に無限 Y 字領域上の反応拡散方程式の数値計算手法を紹介する。数値計算的には原点でのキルヒホッフの境界条件の処理が問題となる。以後、分かりやすいように差分の式では u_0 を u 、 u_1 を v 、 u_2 を w と表すこととする。

問題となっている Ω_0 、 Ω_1 、 Ω_2 の原点上での差分の式を書き出してみると、

$$\begin{cases} u_0^{n+1} = r(u_1^n - 2u_0^n + u_{-1}^n) + \Delta t f(u_0^n) + u_0^n, \\ v_0^{n+1} = r(v_1^n - 2v_0^n + v_{-1}^n) + \Delta t f(v_0^n) + v_0^n, \\ w_0^{n+1} = r(w_1^n - 2w_0^n + w_{-1}^n) + \Delta t f(w_0^n) + w_0^n. \end{cases} \quad (6)$$

である。しかし、 u_{-1}^n 、 v_{-1}^n 、 w_{-1}^n は定義されていない。よって、キルヒホッフの境界条件を用いて u_{-1}^n 、 v_{-1}^n 、 w_{-1}^n を用いずに原点での差分の式を書き表す。

キルヒホッフの境界条件を離散化し、前進差分商で記述すると、

$$\begin{cases} \frac{u_1^n - u_0^n}{\Delta x} + \frac{v_1^n - v_0^n}{\Delta x} + \frac{w_1^n - w_0^n}{\Delta x} = 0, \\ u_0^n = v_0^n = w_0^n. \end{cases} \quad (7)$$

$$(8)$$

となる。さらに式 (7) を変形すると、

$$u_1^n + v_1^n + w_1^n = u_0^n + v_0^n + w_0^n \quad (9)$$

が得られる。式 (8)、(9) から、

$$u_0^n = v_0^n = w_0^n = \frac{u_1^n + v_1^n + w_1^n}{3}$$

が得られ、 u_{-1}^n 、 v_{-1}^n 、 w_{-1}^n を用いずに原点での差分の式を書き表すことができる。では実際にプログラムを実行した例を紹介したい。

例 2. (無限 Y 字領域上の Allen-Cahn 方程式におけるフロントダイナミクス)

次の式を考える。 $u_i = u_i(t, x_i)$ 、 $a = 0$ として、

$$\begin{cases} \frac{\partial u_i}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2}(u_i - a)(1 - u_i^2), & (i = 0, 1, 2, D : \text{拡散係数} (> 0), t > 0, x_i \in \Omega_i), \\ u_i(0, x_i) = u_{i0}(x_i), & (\text{初期値}), \\ \frac{\partial u_0}{\partial x_0}(t, 0) + \frac{\partial u_1}{\partial x_1}(t, 0) + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}(t, 0) = 0, & (\text{キルヒホッフの境界条件}), \\ u_0(t, 0) = u_1(t, 0) = u_2(t, 0). \end{cases}$$

このとき、上式をみたま Ω_0, Ω_1 上の解 u_0, u_1 がフロント型定常解を用いて表される場合の、 u_0, u_1, u_2 のダイナミクスを数値計算によって解析する。

1) $l_0(0) = l_1(0) = 4.0$ の場合

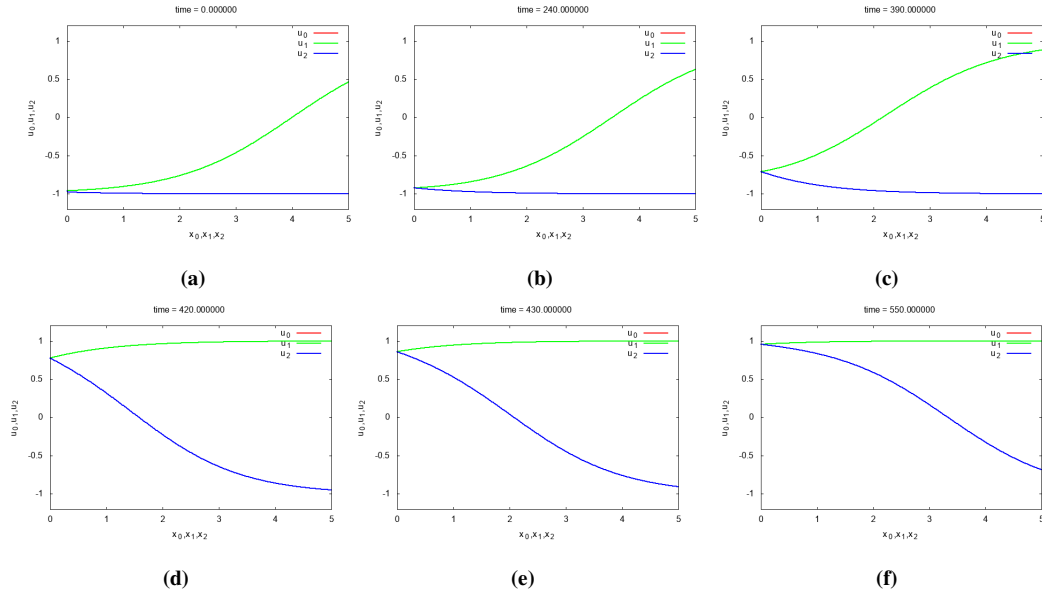


図 3:(数値計算で用いたパラメーター： $\Delta t = 0.00001, \Delta x = 0.01, D = 1.0$)

上の図は横軸に x_0, x_1, x_2 を縦軸に u_0, u_1, u_2 の値を 1 つのグラフにまとめて表示させた図であり対応する時間はグラフの上部に表示させている。また赤い線で描画しているものが u_0 のグラフであり、緑の線で描画しているものが u_1 のグラフ、青い線で描画しているものが u_2 のグラフである。図から $l_0(t), l_1(t)$ は時間とともに同じ速さで減少することが分かり、これは定理 1 の結果と同様である。また特に原点付近の解の振る舞いについては $l_0(t), l_1(t)$ が原点に近づくことにより、原点での u_0, u_1 の値が増加し、解 u_0, u_1 は最終的に $u_0(t, x_0), u_1(t, x_1) = 1$ に近づく。

2) $l_0(0) = 4.0, l_1(0) = 5.0$ の場合 ($l_1(0) - l_0(0) > \log 2$ が成り立つことに注意しておく。)

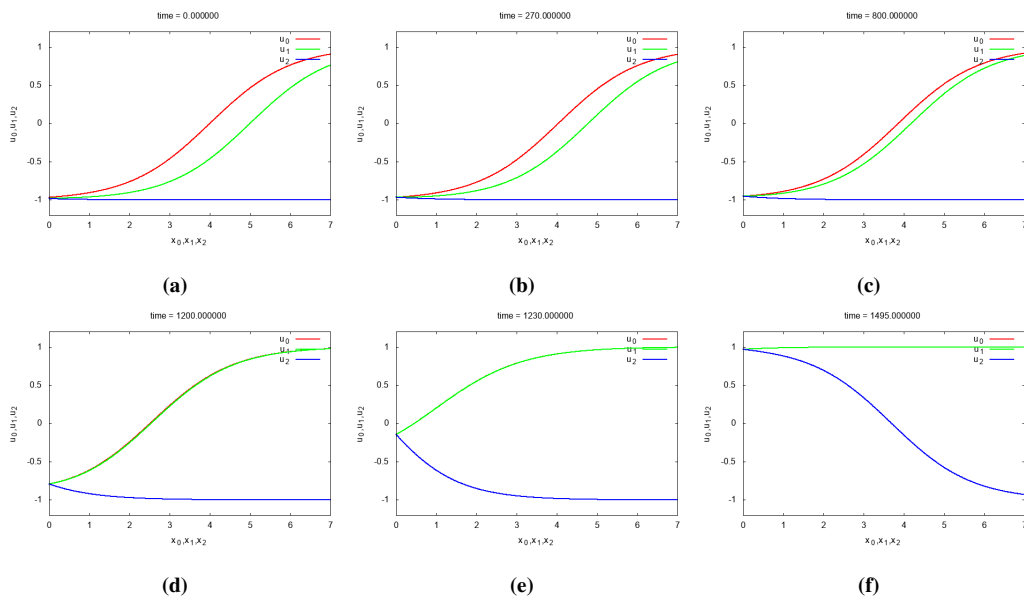


図 4:(数値計算で用いたパラメーター : $\Delta t = 0.00001, \Delta x = 0.01, D = 1.0$)

図の描画方法や u_0, u_1, u_2 に対応するグラフの色は 1) の場合と同じである。上の図 (a) から図 (b) から $t \leq 270$ では $l_0(t)$ は増加し, $l_1(t)$ は減少する。 $l_0(t), l_1(t)$ が原点付近に十分近いときの解の振る舞いは 1) の場合と同様である。また理論的には $l_1(\tau) - l_0(\tau) = \log 2$ なる $\tau (> 0)$ で $l_0(t)$ の増減が切り替わるが, 数値的には $t = 270$ のとき $l_1(270) - l_0(270) \cong 0.75$ をみたしながら $l_0(t)$ の増減が切り替わる。本来連続な空間を離散化し, 数値計算でも近似して計算しているためこのような誤差が生じている。

参考文献

- [1] 柴 伸一郎, 山田 光太郎, パターン形成の数理/技術者のための微分幾何学入門, 講談社, 2008.
- [2] 高橋 大輔, 理工学の基礎数学 8 数値計算, 岩波書店, 2014.
- [3] 長山 雅晴, ”私にとっての”反応拡散系数値シミュレーション入門基礎編,
(最終閲覧日: 2020 年 12 月 20 日) ,http://www-mmcs.hokudai.ac.jp/else/cdrom/main_part1.pdf
- [4] 高澤 佳宏, 無限 Y 字領域における反応拡散方程式の全域解について, 北海道大学大学院理学院数学専攻修士論文 (未公刊), 2016
- [5] S. Jimbo Y. Morita (2019). Entire solutions to reaction-diffusion equations in multiple half-lines with a junction, *Journal of Differential Equations*, **267**, 1247-1276.