

# 山崎研 「アレнкаーン方程式」

担当：M1 古市悠太郎 M1薄井耕助 M2渡部悠人

---

# 目次

---

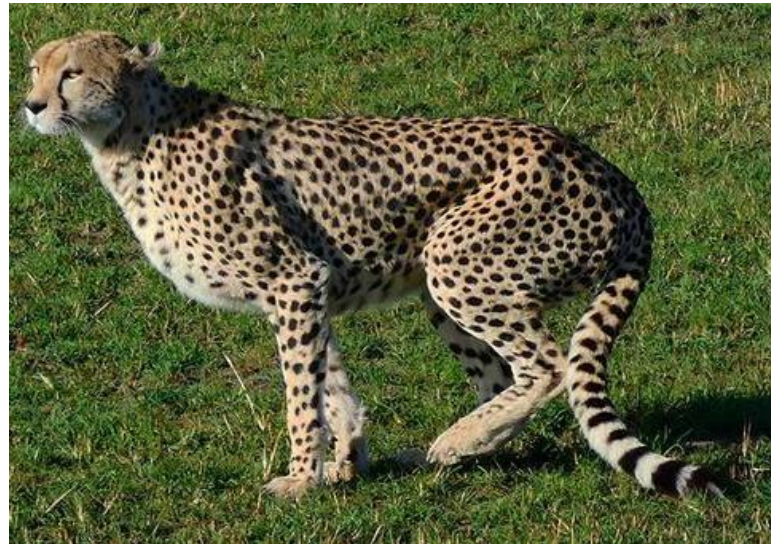
- ・ 反応拡散系の紹介
- ・ 常微分系のアレンカーン方程式
- ・ 反応拡散系のアレンカーン方程式

# 反応拡散系の紹介

自然界の模様、不思議ですよね？



シマウマ



チーター



貝殻

→これらの模様は「**反応拡散系**」という一つの式で説明できる

# 反応拡散系とは

**拡散現象**：物質が自発的に広がっていく現象

拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u$$

→広がり方は $u$ 勾配に依存

ex) 墨汁の液滴, 煙草の煙  
→濃度が状態変数 $u$



**反応拡散系**：化学反応と物質の拡散を組み合わせたモデル

反応拡散方程式(1成分)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + f(u)$$

拡散項    反応項

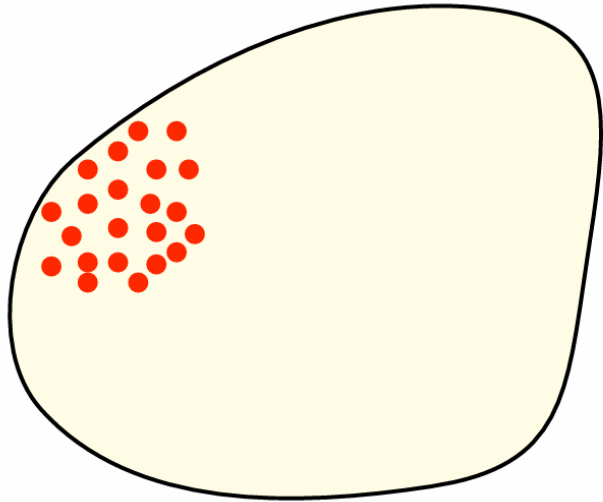
→状態AとBとで反応しながら広がっていく

⇒濃度の広がり+反応で広がり方が説明できる

# 反応拡散系の具体例

## 生物の繁殖

ある領域に侵入してきた生物は  
その後繁殖出来るのか？



赤：生物  
黒枠：領域

1次元反応拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \quad \text{で表される}$$

ただし、 $f(u) = u(1 - u)$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = 0$$

繁殖できるかどうか

→定常解の安定性によって判定できる

$t \rightarrow \infty$  で0 なら死滅

$t \rightarrow \infty$  で1 なら繁殖

# アレン=カーン方程式とは

アレン=カーン方程式	$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \epsilon^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - (\phi^3 - \phi)$
反応拡散方程式	$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u)$

$\phi(x, t)$ : 相を表す変数  
 $(\phi^3 - \phi)$ : 反応項の例

$u$ : 状態変数  
 $f(u)$ : 反応項

- 物質の相変化や結晶の成長などを記述する偏微分方程式
- 特に界面を自然にモデル化できる

Ex) 氷から水への変化

氷の部分→相A ( $\phi=1$ ) , 水の部分→相B ( $\phi=0$ )

→ $\phi$ の時間変化によって変化を表す

# アレン＝カーン方程式の導出

自由エネルギー汎関数を以下のように定義

$$F[\phi] = \int \left[ \frac{\epsilon^2}{2} (\nabla \phi)^2 + V(\phi) \right] dx$$

$\phi$  : 空間的に変化する場

$V(\phi)$  : 局所的な自由エネルギー密度

$\frac{\epsilon^2}{2} (\nabla \phi)^2$  : 空間変化に対するコスト

ここで、**系の時間発展は** $F[\phi]$ **が小さくなるように進んでいく**と仮定する

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi}$$

$F[\phi]$ を代入すると、

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = -\epsilon^2 \nabla^2 \phi + V'(\phi)$$

より、

の形になる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 \phi - V'(\phi)$$

$V(\phi)$ の例 :

$$V(\phi) = \frac{1}{4} (\phi^2 - 1)^2$$

→  $\phi = \pm 1$ で安定、  $\phi = 0$ で不安定

→ イジングモデルの対称性の破れに対応した形

## 2成分に拡張

- 2種類の化学物質の濃度 $a, b$ を考える → 細胞ごとにAとBを交換していく

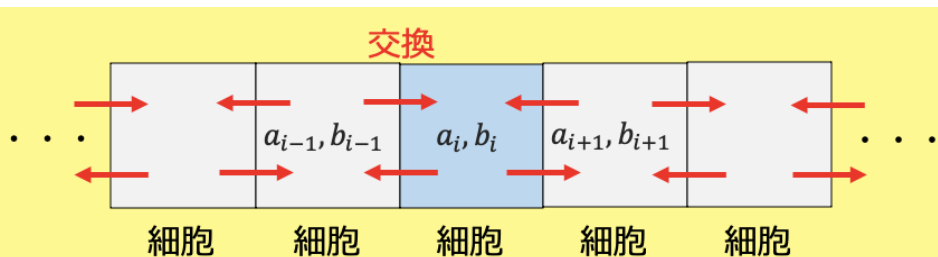
Ex) Grey-Scottモデル：

$$F(a, b) = -ab^2 + f(1 - a),$$

$$G(a, b) = ab^2 - (k + f)b,$$

を代入

場所ごとの濃度差が模様を表す



2成分反応拡散系	$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \Delta a + F(a, b)$ $\frac{\partial b}{\partial t} = D_b \Delta b + G(a, b)$
Grey-Scottモデル	$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \Delta a - ab^2 + f(1 - a)$ $\frac{\partial b}{\partial t} = D_b \Delta b + ab^2 - (k + f)b$

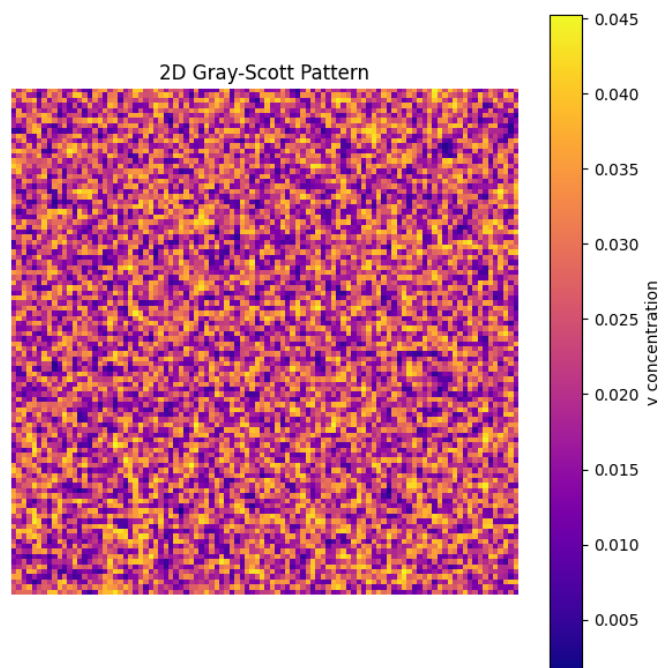


# シミュレーション

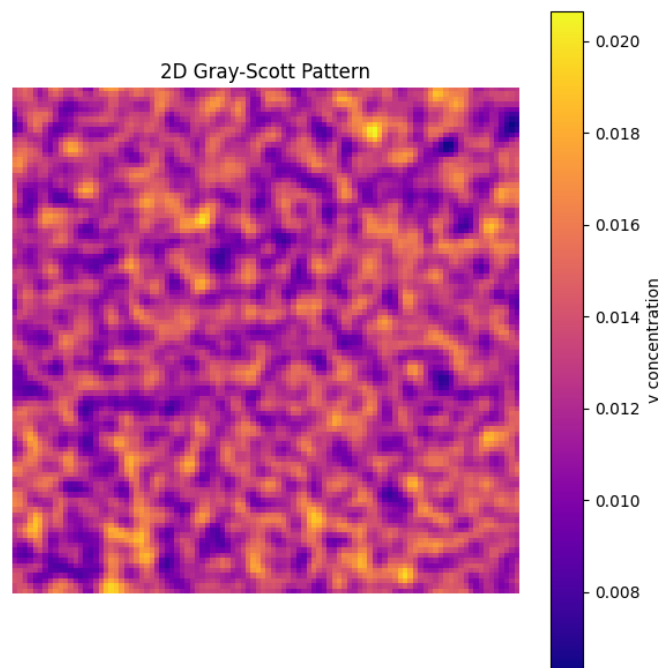
$f = 0.025$ ,  $Dv=0.16$

$K = 0.06$ ,  $Du=0.08$

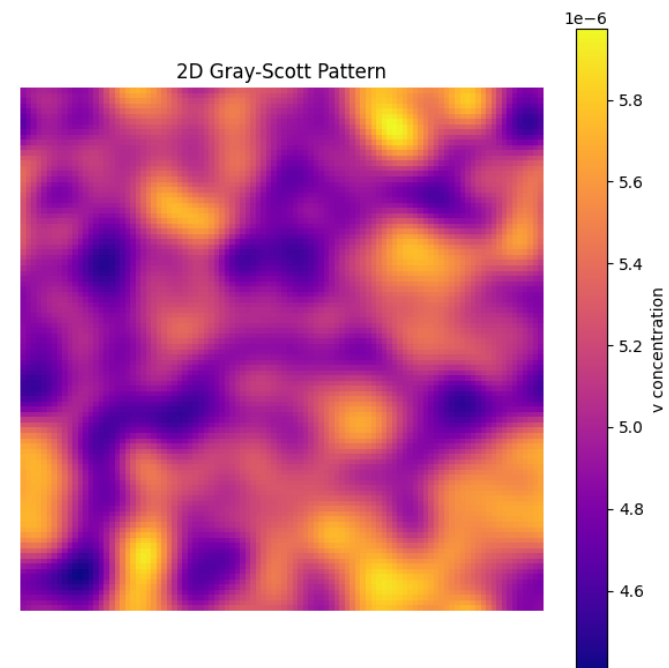
- 初期条件としてランダムに濃度を分布



T=1



T=10



T=100

Tは時間ステップ数

# その他の反応拡散系の例

状態変数 $u$ や反応項は自由  
→様々な現象を数式で表すことが可能

システム	状態変数 $u$	拡散項	反応項
化学反応	化学物質の濃度	分子の ブラウン運動	物質の生成と消費
発熱反応	温度	フーリエの法則	熱の発生と流出
生態系	生物個体群の密度	個体の ランダムな移動	増殖と死亡
神経線維	神経幕の電位	イオンの ブラウン運動	膜のイオンポンプ

# 反応拡散系の面白さ

---

- ・ **単純な数式から自然界の複雑な現象が再現できる**

反応項, 空間領域の形状, 境界条件などによって  
多種多様な性質の変化を見せる

- ・ **非線形偏微分方程式としての解析の難しさ**

手計算で解くことのできない問い  
→数値シミュレーションで初めて現象が見えるものも

# まとめ

---

## 反応拡散系とは

- ・ 物質の拡散と化学反応の組み合わせで模様が形成される仕組み
- ・ 自然界の複雑なパターンを数式で説明できる

### 見てきた例

- ・ 動物の模様、化学反応、生態系の発展 etc...

# これまでの研究の発展

---

## **アランチューリングのモデル(1952)**

- ・ 生物の形態形成を説明するモデルとして提案
- ・ 当時は受け入れられず

## **実験による検証(1990s～)**

- ・ 生物学や科学分野で理論の検証が進む
- ・ コンピュータの進化に伴い、数値シミュレーションが可能に

---

## Part 2

# 常微分系のアレンカーン方程式

# 常微分系のアレンカーン方程式

- ・ 目標：反応拡散系のアレンカーン方程式を理解する  
→ まずは簡単な常微分系のアレンカーン方程式を見る

反応拡散系では各点で常微分系の挙動をするというように見ることのできるため、常微分系を理解すれば反応拡散系の理解がよりしやすくなる

# アレンカーン方程式の常微分系

常微分系のアレンカーン方程式

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = (u - a)(u - 1)(u + 1) \end{cases} \quad \begin{array}{l} a : \text{正の定数} \\ u : \text{未知の時間による関数} \end{array}$$

これは非線形な1成分常微分方程式  $\longrightarrow$  力学系の簡単な知識を用いることができる

力学系とは**解がどこに収束するのか、制御パラメータ(今回は $a$ )によってどのように挙動が変わるのか**を調べる枠組み



# 力学系：解がどこに収束するのか

1成分の常微分方程式系の解がどこに収束するかは、**固定点**を調べればわかる

**固定点**

微分方程式  $\left\{ \frac{du}{dt} = f(u) \right.$  にいて、 $f(u) = 0$  となるような  $u$  の値

アレンカーン方程式

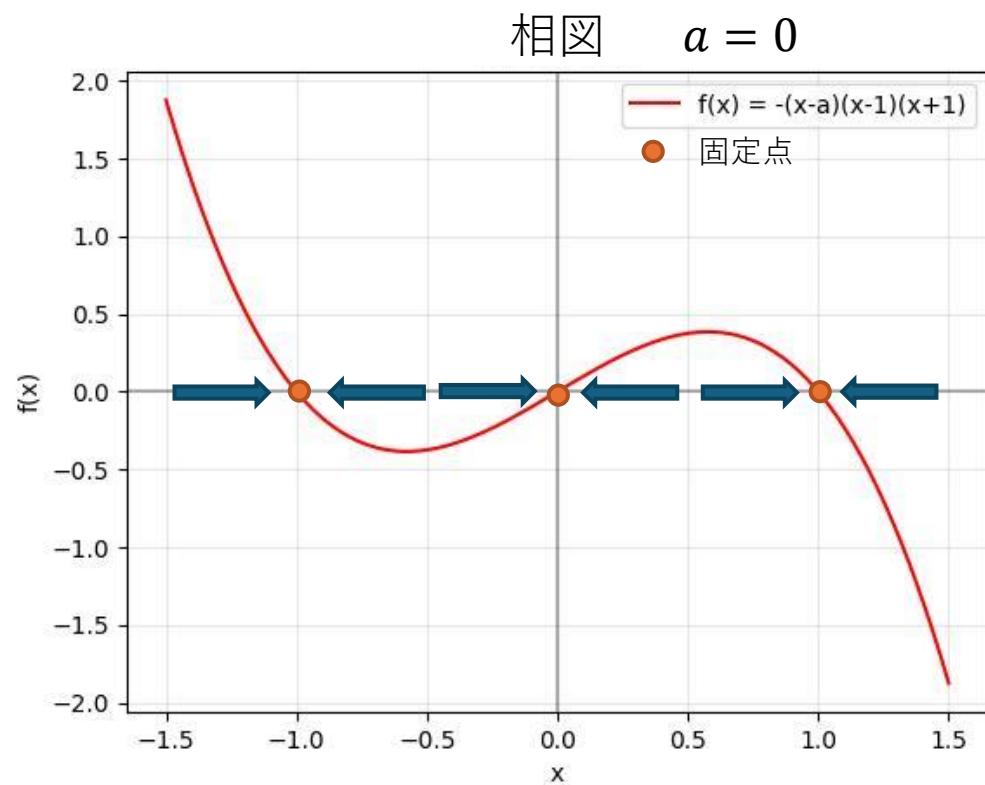
$$\left\{ \frac{du}{dt} = (u - a)(u - 1)(u + 1) \equiv f(u) \right. \quad f(u) = 0 \text{ となるような } u \text{ は、} \\ \mathbf{u = a, 1, -1}$$

# 力学系：解がどこに収束するのか

固定点を求めたうえで、相図を書く

相図

縦軸に $\frac{du}{dt}$ 、横軸に $u$ を描いた図



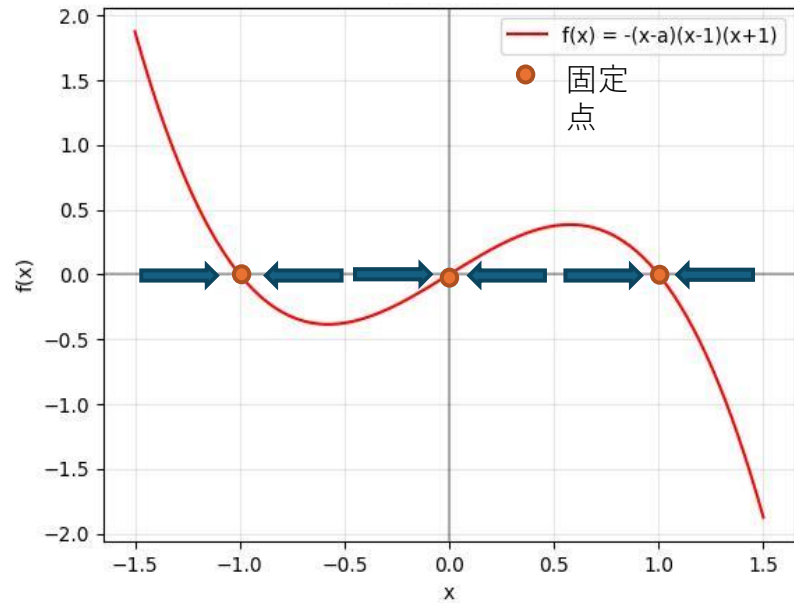
縦軸は $\frac{du}{dt}$ を表している。これは $u$ の速度  
ともとれる。

よって $\frac{du}{dt} > 0$ で $u$ が増える方向に、

$\frac{du}{dt} < 0$ で $u$ が減る方向に動くことがわかる

$u = 1, -1$ を安定固定点  
 $u = 0$ を不安定固定点という

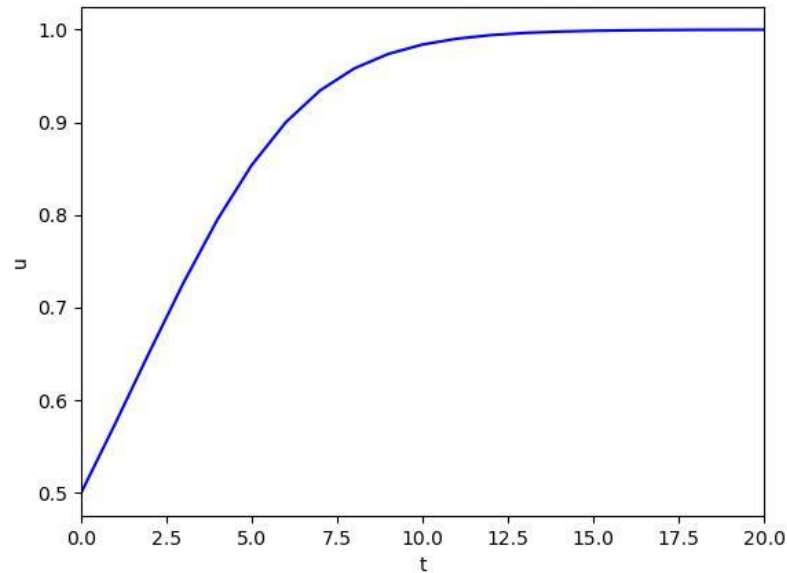
相図



この流れを見れば、解は固定点-1,1に収束することがわかる

解は固定点を求め、相図を書けばどこに収束するのかわかる！

解の軌道



実際解の軌道を見ると初期値 $u_0 = 0.5$ に対して1に収束していることが分かる

# 力学系：パラメータによる挙動の変化

アレンカーン方程式

$$\left\{ \frac{du}{dt} = (u - a)(u - 1)(u + 1) \right. \quad \text{ここでのパラメータは} a$$

固定点  $u = a, 1, -1$  からわかる通り、 $a$  が 1 より大きいのか、-1 よりも小さいかで挙動が変わってくることが予想できる。

この時のパラメータによる挙動の変化を分岐と呼び、分岐理論という体系でまとめられている

# 分岐理論

分岐には様々があるが、一番基本的でこの系にも起こる分岐を紹介

サドルノード分岐

パラメータによって固定点の数が変わる分岐

分岐現象を理解することでその系のすべてが理解できる！

演習

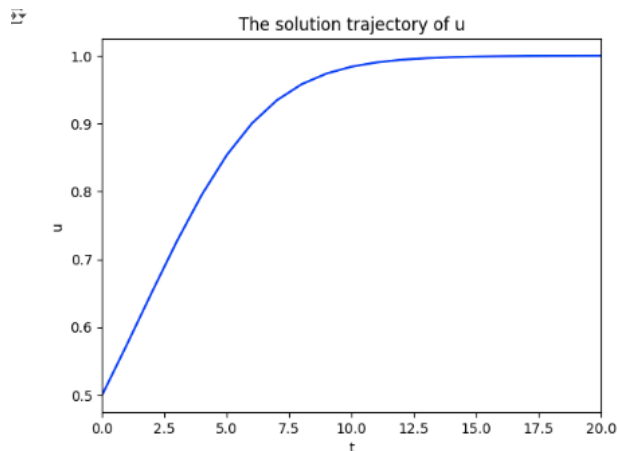
アレンカーン方程式

$$\left\{ \frac{du}{dt} = (u - a)(u - 1)(u + 1) \right.$$

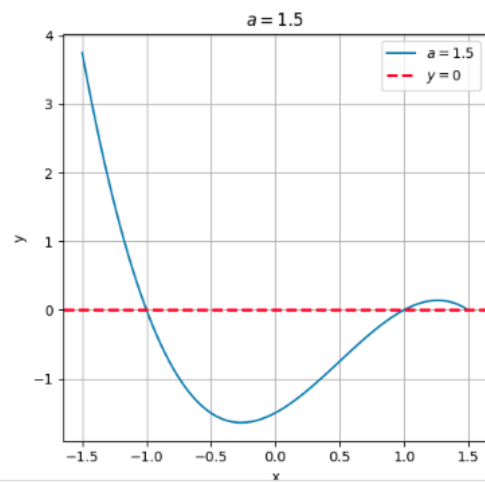
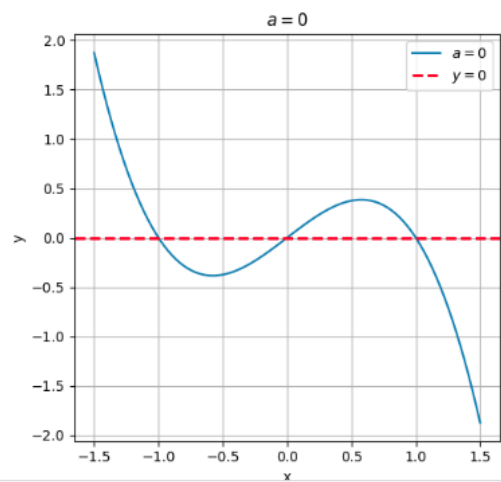
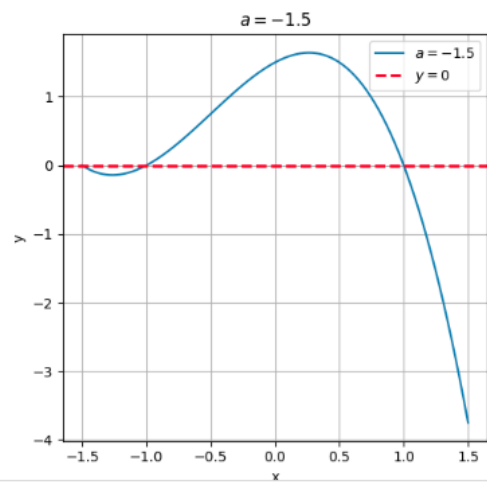
において、パラメータ  $a$  を変化させて系  
にどのような変化が起こるかみてみよう

# 演習1. (3分)

配布してあるgoogle colabの演習1の部分を回してみてください。



実際の解の軌道と、パラメータ $a$ による相図の違いが分かる

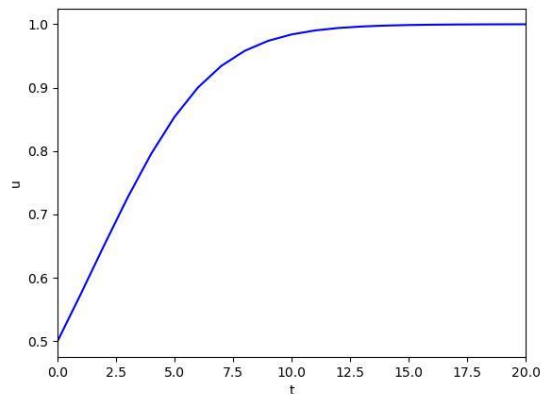


# まとめ

常微分系のアレンカーン方程式  $\left\{ \frac{du}{dt} = (u - a)(u - 1)(u + 1) \right.$

は1成分非線形常微分方程式。その体系は力学系にまとめられており、力学系には分岐理論が含まれる

この系は $u = 1, -1$ が安定固定点、 $u = a$  ( $-1 < a < 1$ )が不安定固定点なので、初期値が $a$ の上にあるとき $u = 1$ に、初期値が $a$ の下にあるとき $u = -1$ に収束する



図からわかる通り、任意の初期値に対して単調に収束する

計算科学クラスター演習  
山崎義弘研究室

## Part 3

# 界面ダイナミクスへの応用



### 3.1. 二分化と局所平均化が競合する系を記述するモデル

秩序変数  $u$  (局所濃度や密度など) に **2つの安定な値** ( $u = \pm 1$ ) が存在する系 e.g. 水 & 氷

- 各点でどちらかの安定値を選択する (**二分化**) Allen-Cahn方程式の常微分系
- 各点で周囲の平均に揃おうとする (**局所平均化**) 拡散方程式

⇒ これらの効果が  $u$  の時間発展において**競合**する場合, 何が起こるか?

記述するモデル  
Allen-Cahn方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 u - (u - a)(u + 1)(u - 1)$$

局所平均化

$\epsilon$  : 空間に関するパラメータ

二分化

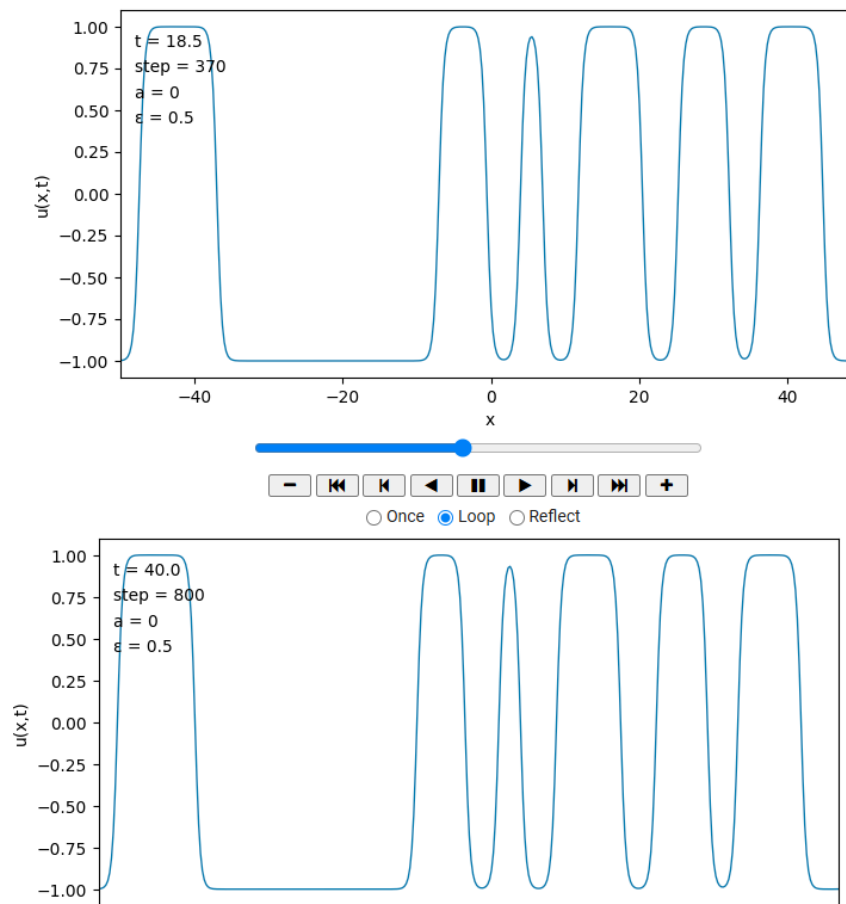
$a$  : 安定性に関するパラメータ ( $-1 < a < 1$ )

if  $u > a \longrightarrow +1$  へ向かう

if  $u < a \longrightarrow -1$  へ向かう

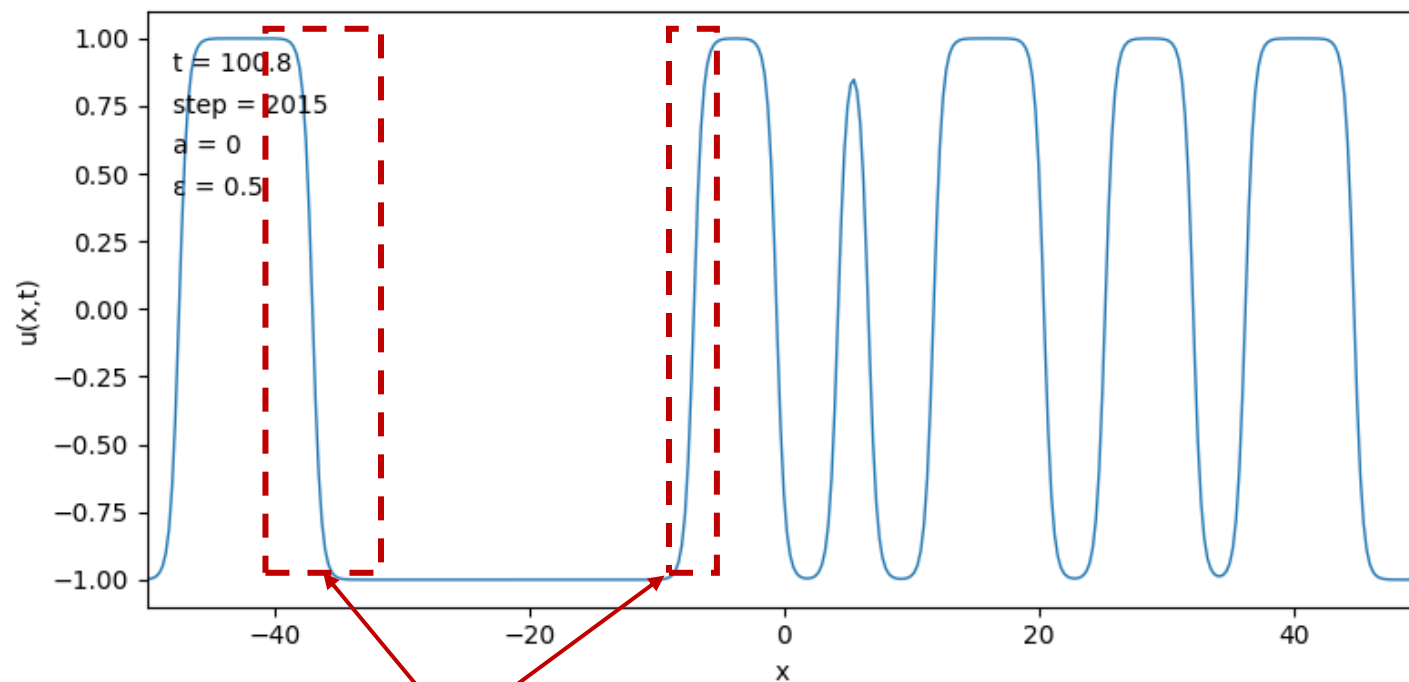
## 3.2. 演習2 (3分)

配布してあるgoogle colabの演習2の部分を回してみてください。



## 3.2. 界面の進行

◎ 界面

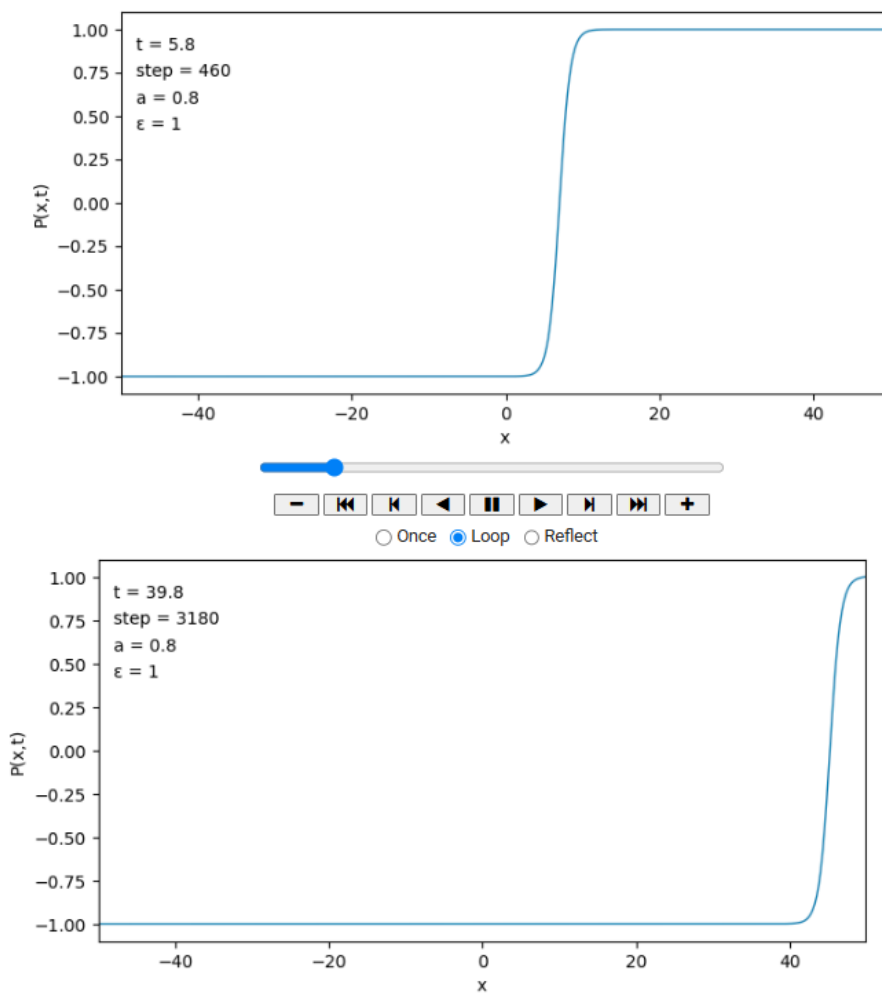


界面

$u = 1$ と $u = 0$ の領域の間にある，0と1の間の値をとる狭い領域  
界面の移動が状態の空間不均一性（＝**パターンの形成**）を特徴づける

## 3.2. 演習3 (3分)

配布してあるgoogle colabの演習3の部分を回してみてください。



## 3.2. 界面の進行

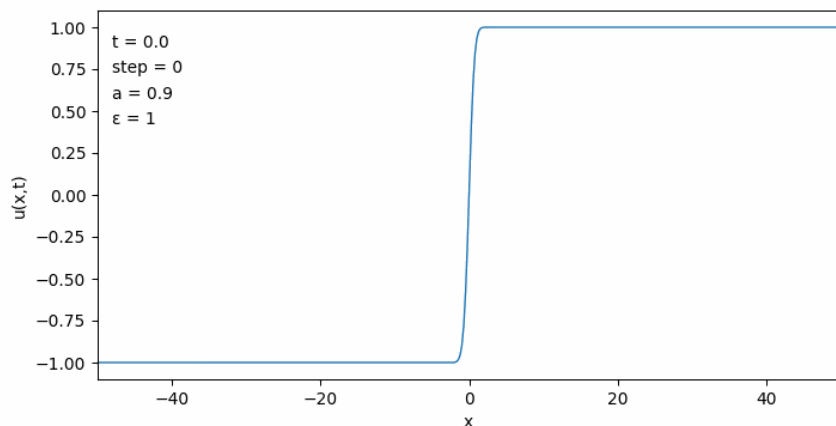
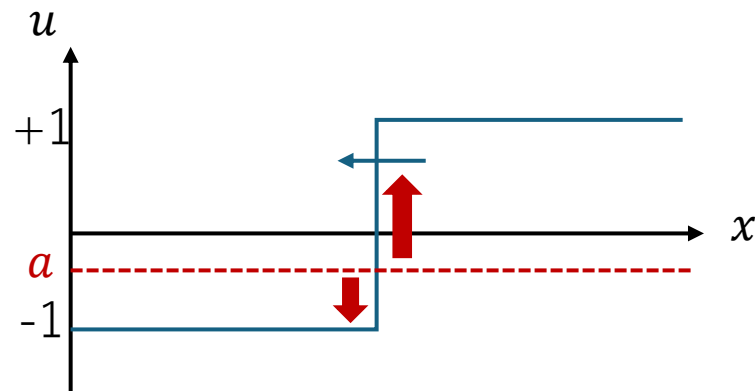
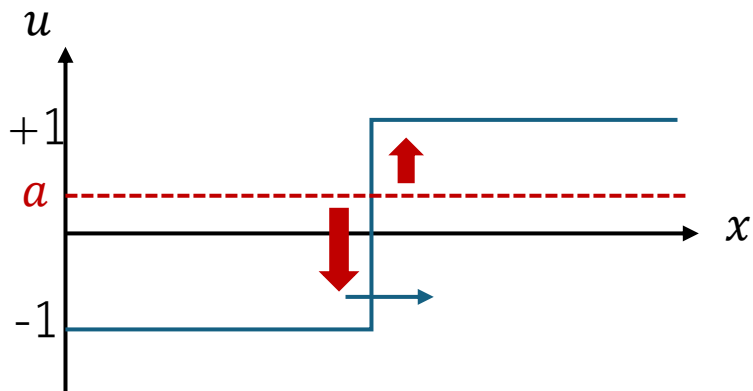
◎ 界面の進行速度の  $a$  依存性

$$v = a\sqrt{2\epsilon^2}$$

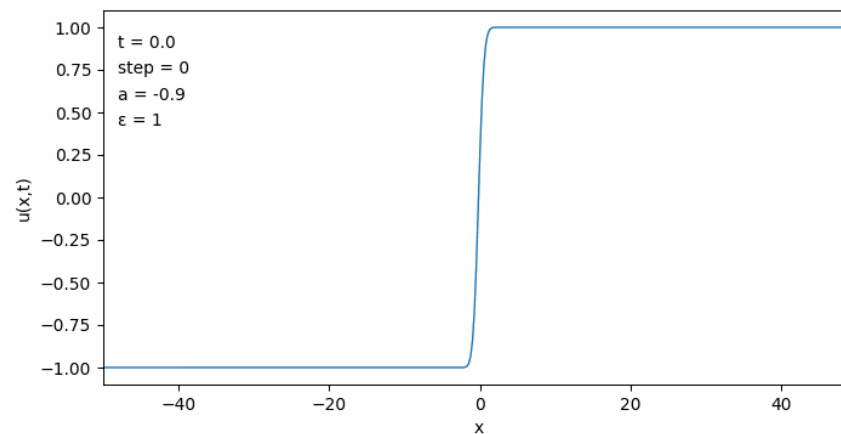
$a = 0$  : 界面は進行しない

$a > 0 \longrightarrow v > 0$  : 界面が**正**の向きに進行する  $\Leftrightarrow u = -1$ の領域が拡大

$a < 0 \longrightarrow v < 0$  : 界面が**負**の向きに進行する  $\Leftrightarrow u = +1$ の領域が拡大



$a = 0.9 > 0$



$a = -0.9 < 0$

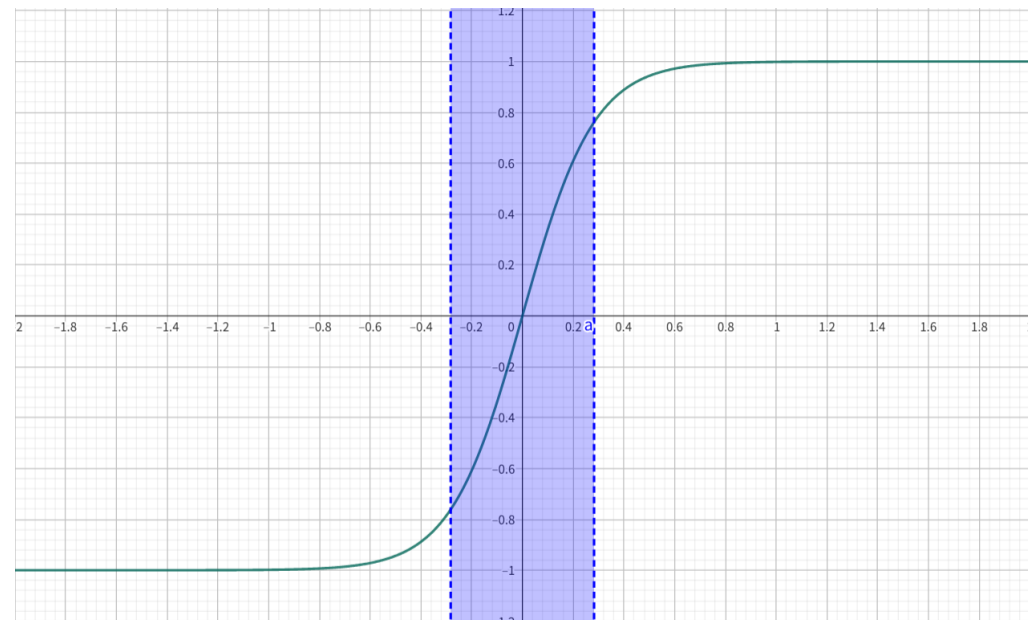
## 3.2. 界面の進行

◎ 界面の厚さの  $\epsilon$  依存性

$$(\text{界面の厚さ}) \sim \sqrt{2\epsilon^2}$$

平衡解の 1 つ:  $u_{\text{eq}}(x) = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2\epsilon^2}}\right)$

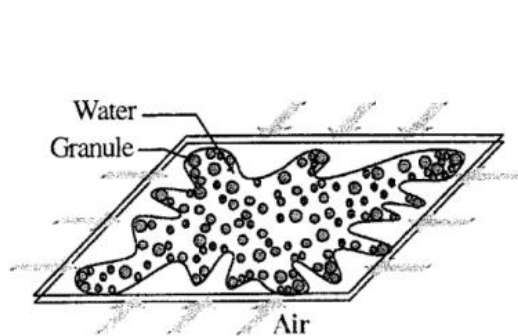
$$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$$



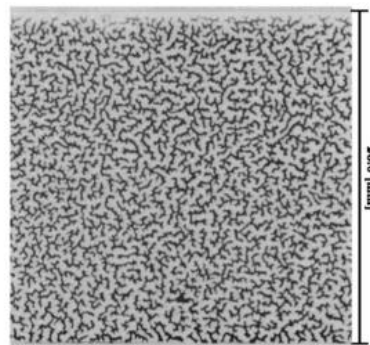
### 3.3. Allen-Cahn方程式の応用 (Phase-fieldモデル)

◎ 2次元の水-粉粒体混合系の乾燥過程で見られる迷路パターン

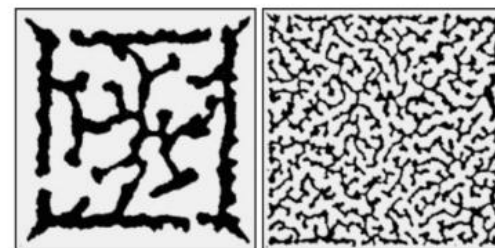
水・空気の2相が作る界面が（粉粒体の影響で複雑に）進行する ⇒ 迷路パターンの出現をもたらす



実験の概略図



実験結果



(a) (b)  
シミュレーション結果

#### □ 粉粒体粒子 $j$ の運動方程式

界面による力

摩擦力

粒子同士の衝突による力

$$m_j \frac{d^2 \vec{x}_j}{dt^2} = -(h_g - h_0) \int_{D_j} \vec{\nabla} \left( \frac{1}{3} u^3 - \frac{1}{2} u^2 \right) d\vec{r} - \mu m_j g \frac{\vec{v}_j}{v_j} + K \sum_{s_{ij} \leq a_i + a_j} (a_i + a_j - s_{ij}) \frac{\vec{s}_{ij}}{s_{ij}}$$

Allen-Cahn方程式

$$\tau \epsilon^2 \frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 u + u(1 - u) \left( u - \frac{1}{2} + h(\vec{x}, \{\vec{x}_j\}_j, t) \right)$$

$u = 1$  : 水  
 $u = 0$  : 空気

粉粒体があれば 界面が静止  
粉粒体がいなければ界面が進行

### 3.1. 二分化と局所平均化が競合する系を記述するモデル

#### 課題①

空間 1 次元におけるAllen-Cahn方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - (u - a)(u + 1)(u - 1)$$

の時間発展のシミュレーションを行う。

初期値 : x軸上の各格子点で正規分布に従う微小な乱数を割り当てる

境界条件 : 周期的境界条件

パラメータ :  $\epsilon = 1$ ,  $a = 0$

(1) 時間発展の様子を簡単に説明してください。

(2) パラメータ  $a$  を  $a = -0.5, 1, 0.5$  と変化させた時、  
時間発展の様子や解の形状にどのような変化が現れるか簡単に説明してください。  
(その理由はPart2の内容から簡単に理解できます)



## ✓ 演習2.

反応拡散系のアレンカーン方程式のシミュレーション 初期値：ランダム 境界条件：周期的境界条件

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.animation import FuncAnimation
from IPython.display import HTML

# パラメータ
epsilon = 0.5
a = 0          # (3) でここを変更 (-1<a<1) (このとき epsilon=1)
L = 100.0       # 系の長さ
Nx = 400        # 格子点数
```

赤線部を変えてください！

## 3.2. 界面の進行

### 課題②

空間 1 次元におけるAllen-Cahn方程式

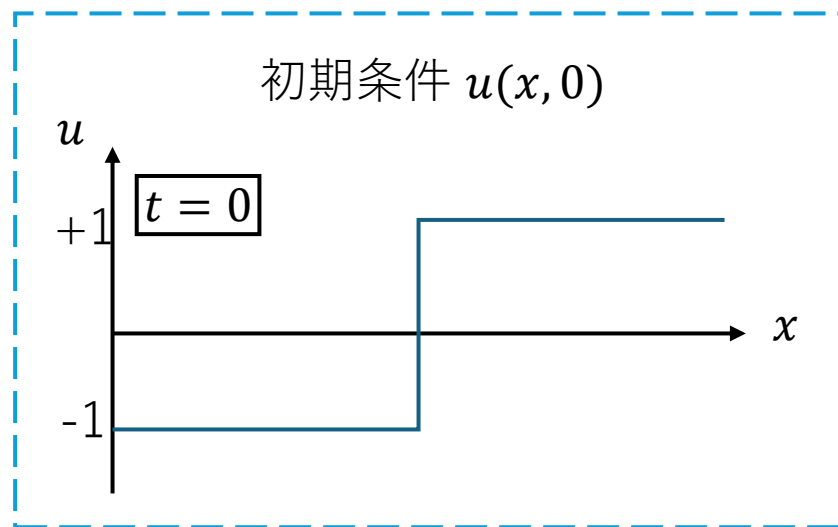
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - (u - a)(u + 1)(u - 1)$$

の時間発展のシミュレーションを行う。

初期値 :  $x > 0$  で  $u = +1$ ,  $x < 0$  で  $u = -1$

境界条件 : 両端を  $\pm 1$  で固定

パラメータ :  $\epsilon = 1$ ,  $a$  を変更



(1) パラメータ  $a$  を  $-1 < a < 1$  の範囲でいろいろと変化させてみてください。

(例えば  $a = -0.5, 0, +0.5$ )

ある値では界面が正に進行し、ある値では界面が負の向きに進行します。

その境目となる値  $a^*$  を調べてください。

$a$  が  $a^*$  より大きいのか、小さいかで界面の進行の向きはどう変わるか述べてください。

## ✓ 演習3.

反応拡散系のアレンカーン方程式のシミュレーション 初期値：ステップ関数 境界条件：ディリクレ境界条件

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.animation import FuncAnimation
from IPython.display import HTML

# —— パラメータ ——
epsilon = 1          # 拡散パラメータ  $\epsilon$ 
a = 0.8              # 安定性パラメータ  $a$  (ここを変更 ( $-1 < a < 1$ ))
L = 100.0            # 系の長さ
Nx = 400              # 格子点数
dx = L / Nx
x = np.linspace(-L/2, L/2, Nx, endpoint=False)
```

赤線部を変えてください！

## 発展課題（任意）

今回初期値がランダムなとき進行波は見られず、定常解はそう分離する形が見られ、初期値がステップ関数の時進行波が見られた。なぜこのような差が生まれたのか定性的な説明でいいので、自由に記述してみてください。

1. 課題①、②の回答
2. 発展課題（任意）
3. 発表の感想

をまとめ、学籍番号\_氏名\_所属研究室.pdfのファイル名で  
6月16日17：00までに  
[watanabe3y@ruri.waseda.jp](mailto:watanabe3y@ruri.waseda.jp)  
までご提出ください。

## 参考文献

1. 早稲田大学複雑系高等学術研究所, 複雑系叢書6 コンプレックス・ダイナミクスの挑戦 (共立出版, 2011).
2. 小村真也, 山崎義弘, 2相系の界面ダイナミクスによって引き起こされる粉粒体の集団運動について(複雑流体の数理とその応用), 数理解析研究所講究録, 1472, 211-219 (2006).
3. Y. Yamazaki and T. Mizuguchi, J. Phys. Soc. Jpn., **69**, 2387 (2000).
4. S. Komura and Y. Yamazaki, J. Phys. Soc. Jpn., **76**, 8 (2007).