

離散型相転移方程式におけるモザイク解と空間エントロピー

80123652 矢吹 祐一

指導教員 国松 昇

共同指導教員 谷 温之

1 はじめに

格子力学系による離散型相転移方程式は様々なモザイク解(空間パターン)をもたらす。モザイク解は安定な平衡解であるため、Lyapunov 関数のような安定解析手法によってモザイク解の秩序状態を示すことができない。そこで1996年にS.N.Chowらによってモザイク解の秩序状態を示す方法として空間エントロピーが定義され[1]、2000年にK.A.Abelらによって1次元空間の空間エントロピーに対する研究が行われた[2]。本研究では2次元空間における空間エントロピーを数値解析によって求め、空間エントロピーとパターンの安定性についてを議論する。

2 離散型相転移方程式

相転移方程式は非平衡系における秩序と乱れについてをモデル化した方程式である。相転移方程式で表される現象は方程式のパラメータによって様々な模様(モザイク解)を描くことがわかっている。

本研究では相転移方程式の一つ Allen-Cahn 方程式

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = \alpha \Delta u(x, y, t) - f(u(x, y, t))$$

$$(x, y) \in \Omega \in R^2, \quad (1)$$

$$n \cdot \nabla u = 0 \quad (x, y) \in \partial \Omega \quad (2)$$

$$f(u(x, y, t)) = pu(x, y, t)^3 - qu(x, y, t) \quad (3)$$

を解析に用いる。ただし、 $\alpha, p(>0), q(>0)$ は定数とする。Allen-Cahn 方程式(1)は格子力学系の適用により次のような離散型 Allen-Cahn 方程式となる。

$$\frac{du(i, j)}{dt} = \alpha^+ \Delta^+ u(i, j) + \alpha^\times \Delta^\times u(i, j) - f(u(i, j)) \quad (4)$$

$$\Delta^+ u(i, j) = u(i-1, j) + u(i+1, j) + u(i, j-1) + u(i, j+1) - 4u(i, j)$$

$$\Delta^\times u(i, j) = u(i-1, j-1) + u(i-1, j+1) + u(i+1, j-1) + u(i+1, j+1) - 4u(i, j) \quad (5)$$

境界条件は周期境界条件をとり

$$u(i, k) = u(i, N+k), \quad i = 0, \dots, N+1, k = 0, 1$$

$$u(k, j) = u(N+k, j), \quad j = 0, \dots, N+1, k = 0, 1 \quad (6)$$

となる。

離散型 Allen-Cahn 方程式(4)のパラメータ α^+, α^\times によって現れるパターンが変化する。それを分岐図としたのが図1である。

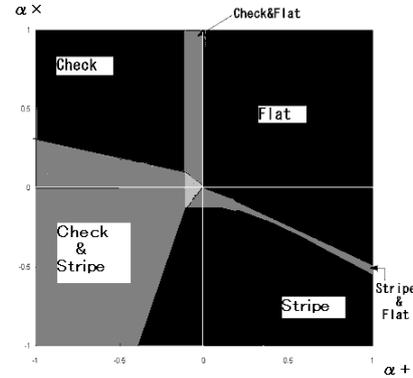


図1: 数値計算による分岐図

3 空間エントロピー

空間エントロピーは[1]において定義されている。式(4)の離散格子空間 i, j に対応する m, n により形成される $m \times n$ の空間窓内の要素をながめてみる。その際この窓のなかにみられる相異なるパターンの数を $c_{m,n}$ とする。 $c_{m,n}$ は $0 < c_{m,n} \leq 3^{mn}$ である。ここで、空間エントロピー h を次のように定める。

$$h = \lim_{m, n \rightarrow \infty} \frac{1}{mn} \log c_{m,n} \quad (7)$$

この極限は常に存在し、 $0 \leq h \leq \log 3$ となる。 \log の底を3とした場合、 $0 \leq h \leq 1$ として考えることができる。格子空間 $m, n \rightarrow \infty$ の極限においては $h = 0$ はパターンの形成、 $h > 0$ であるときは無秩序状態の発生に対応する。

4 計算方法

空間エントロピーを計算するときに、上述の m, n の極限にとることは難しい。また、式(7)の $c_{m,n}$ は一次元空間において32通りの組み合わせが存在したが、これは二次元空間で考えたときは 32×32 通りもの組み合わせを考えねばならない。したがって、このまま数値計算を行うことは非常に難しい。本研究では 3×3 の窓をつくり、窓を動かす(図2)ことでエントロピーをそれぞれ算出し平均を取るという方法を提案したい。そのときの空間エントロピーは次のような式となる。

$$h = \frac{1}{(m-2)(n-2)} \sum_{k=1}^{m-2} \sum_{l=1}^{n-2} \frac{1}{9} \log_3 c_{3,3} \quad (8)$$

5 計算結果

$m \times n$ を 30×30 としたときの計算結果を図3に示す。また、 60×60 としたときの計算結果を図4に示す。また、

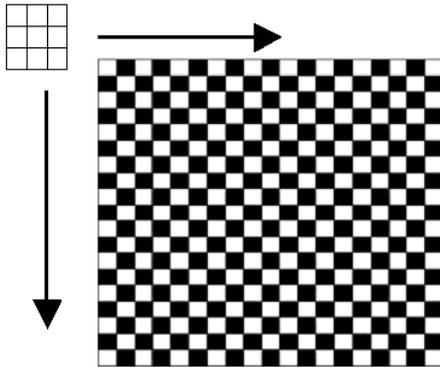


図 2: エントロピーの測定

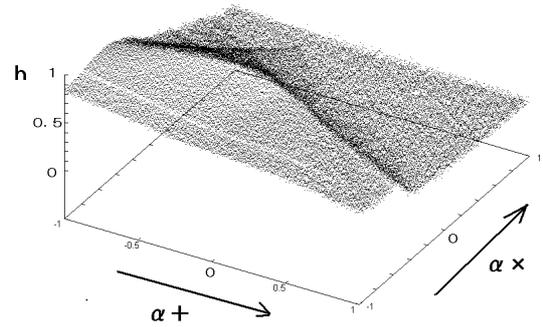


図 4: 空間エントロピー分布 (60 × 60)

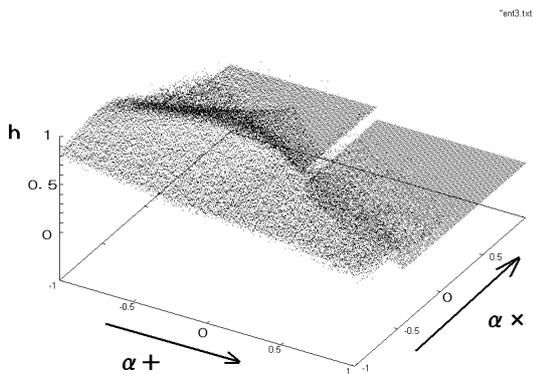


図 3: 空間エントロピー分布 (30 × 30)

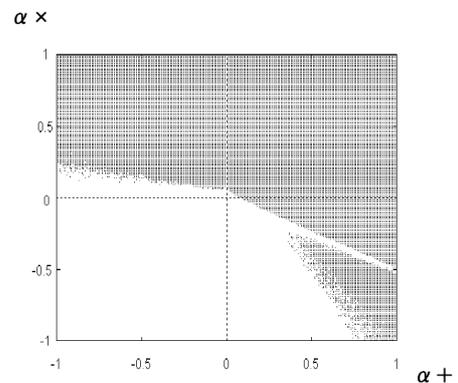


図 5: 閾値 0.5 で 2 値化した空間エントロピーの分布

閾値 0.5 で空間エントロピー h の値を二値化し、 α^+ , α^\times を軸とした空間に黒 ($h=0$), 白 ($h=1$) として計算した分岐図を図 5 に示す. 分岐図上の Flat パターンの領域と Check パターンの領域ではエントロピーがそれぞれ一定値を取ることがわかる. また, 30×30 と 60×60 の空間エントロピー分布に大きな違いが現れないことがわかった. ただし, Stripe パターンの領域において空間エントロピーが大きい値をとっているため, Stripe パターン領域における図 1 であげた以外のパターンの存在性を議論しなければならない.

6 まとめ

本研究では空間エントロピーを計算機にて扱える方法を提案した. しかし, 今回はあくまで Allen-Cahn 方程式への適用しか行っていないため, 他のモデルへの空間エントロピーの適用を試みる必要があると考えられる.

参考文献

- [1] S.N. Chow, J. Mallet-Paret and E.S. Van Vleck, "Pattern Formation and Spatial Chaos in Spatially Discrete Evolution Equations", *Random & Computational Dynamics*, 4, (1996), 109-178.
- [2] K. A. Abell, A.R. Humphries and E.S. Van Vleck, "Mosaic Solutions and Spatial Entropy for Spatially Discrete Cahn-Hilliard Equations", *IMA J. Appl. Math.*, 65, (2000), 219-255.