反応拡散系近似：理論と応用

村川 秀樹　(九州大学大学院数理学研究院)

1. はじめに

集合$\Omega \subset \mathbb{R}^N$ $(N \in \mathbb{N})$を境界$\partial\Omega$が滑らかな有界領域とし，νを境界$\partial\Omega$上の外向き単位法ベクトルとする．また，Tを正の定数，$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \ldots, \beta_M)$, $\boldsymbol{f} = (f_1, \ldots, f_M)$: $\mathbb{R}^M \to \mathbb{R}^M$は与えられた関数であるとする．初期値$\boldsymbol{z}_0 = (z_{01}, \ldots, z_{0M})$: $\Omega \to \mathbb{R}^M$が与えられたときに

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \boldsymbol{z}}{\partial t} = \Delta\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z}) + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{z}) & \text{in} \quad Q := \Omega \times (0,T), \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z})}{\partial \nu} = 0 & \text{on} \quad \partial\Omega \times (0,T), \\ \boldsymbol{z}(\cdot, 0) = \boldsymbol{z}_0 & \text{in} \quad \Omega \end{cases} \tag{1}$$

を満たす$\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots, z_M) : \overline{\Omega} \times [0,T) \to \mathbb{R}^M$ $(M \in \mathbb{N})$を求める初期値境界値問題を考える．見ての通り，この問題には，拡散項に非線形関数$\boldsymbol{\beta}$が含まれている．この非線形性の違いにより，この問題は理工学分野における非常に多くの重要な問題を記述している．例えば, 氷の融解・水の凝固過程を記述するStefan問題や地下水の流れを表す多孔質媒体流方程式などの退化放物型方程式, 更に，2種生物種の競合問題におけるお互いの動的な干渉作用を記述する重定-川崎-寺本モデルに代表される交差拡散系などである．この種の非線形拡散問題の解析, 特に, 数値解析において, 拡散の非線形性をどのように扱うかが問題となっている．本研究では，これら非線形拡散問題の解が拡散が線形である半線形反応拡散系の解により近似されることを示す．このことは，半線形反応拡散系に比べて格段に豊富な構造を内包していると思われる退化拡散や交差拡散を含む準線形反応拡散系のメカニズムが，実は線形拡散と単純な反応の相互作用によって表現されることを示している．この研究で, 反応拡散系を用いることで, 拡散の非線形性を取り除くことができたため，この近似理論は非線形問題の解析や応用に役立つ可能性がある．実際に数値解析への応用が有効であることが分かった．提案する反応拡散系を用いることにより，一般的な問題 (1) に適用できる汎用的で簡便な数値解法と，退化放物型問題に対して効率的に高精度な数値解を求めることができる数値解法を構成し，解析することができた．

本稿は次のように構成されている．次節では非線形拡散問題 (1) がどのような問題か，数値例を織り交ぜながら述べる．第3節で反応拡散系近似を提出し，第4節でその解析結果について述べる．第5節では数値解析への応用について述べる．

2. 非線形拡散問題

ここでは，非線形拡散問題 (1) の例をいくつか紹介する．

2.1. 退化放物型方程式

ある領域が水と氷で満たされている場合に，水・氷が冷やされたり温められたりすることによりそれらの温度分布が変化する．それと共に氷の形状がどのように変化するであろうか．水と氷の界面 (自由境界) を定めると同時にそれぞれの領域での温度分布を求めるのがStefan問題である．この種の問題では界面上で満たされる方程式が特に重要である．最も典型的な問題である古典的Stefan問題では，界面上で2つの条件を課している．一つは界面上の温度は0であるという条件である．もう一つはStefan条件と呼ばれるものであり，界面が動く (法線方向

この研究は科学研究費補助金若手研究 (B)(No. 22740058) の補助を受けています．

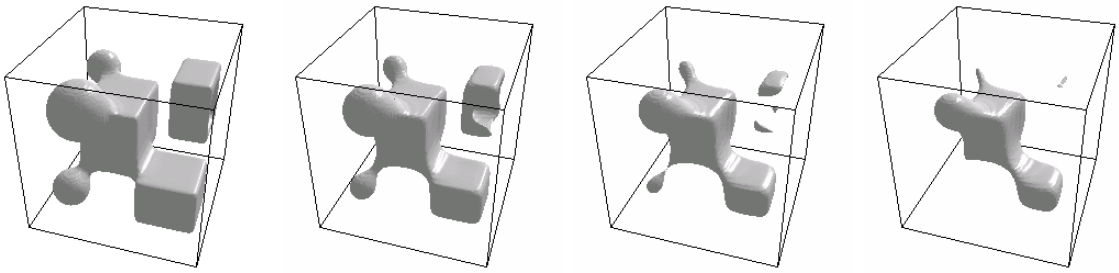

図 1: ステファン問題の数値解.

の) 速さが界面上での熱流の収支に比例しているという条件である．ある初期条件と境界条件の下で，界面上の 2 つの方程式，及び，その界面によって分けられる 2 つの領域での支配方程式 (熱方程式) といった複数の方程式を同時に満たす解を求めなければならない複雑な問題である．特に，空間多次元問題において，氷がちぎれたり，ひっついたり，尖ったり，といったように位相の変化がある場合や特異な点が出現する場合には数学的な取り扱いは非常に困難である．温度と潜熱の和であるエンタルピーに着目することにより，その困難を回避することができる．エンタルピーを用いて再定式化を行うと，古典的 Stefan 問題は (1) の形で書き表される．ここで，$M = 1$ であり，

$$\beta(r) = \boldsymbol{\beta}(r) = d_1 \min(r, 0) + d_2 \max(r - \lambda, 0), \quad r \in \mathbb{R}$$

である．また，d_1 と d_2 は非負定数であり，それぞれ氷と水の熱伝導係数である．非負定数 λ は単位体積の氷を溶かすのに必要な熱量を表す．このとき，解 z はエンタルピーを表し，氷と水の温度はそれぞれ $\min(\beta(z), 0)/d_1$ と $\max(\beta(z), 0)/d_2$ により表される．この方程式では，解 z が区間 $(0, \lambda)$ にあるときには拡散 $\beta'(z)$ の効果がなくなる．つまり拡散が退化するのである．拡散の効果がなくなることにより，解の滑らかさが失われる．特に，Stefan 問題の場合は解は不連続となり，その不連続面が氷と水の境界である自由境界を表す．自由境界の情報は陰的に含まれており，自由境界上での条件は (特異な部分を除いて) 自動的に満たされる．この方程式を用いて空間 3 次元の数値計算を行った．氷の形状の変化を図 1 に示す．氷が融解する過程が見て取れる．方程式 (1) を用いることにより，(方程式 (1) が数値的に解けさえすれば) 氷の形状が複雑な場合や位相が変化する場合なども気にすることなくシミュレーションすることができる．問題は幾分取り扱いやすくなっているが，拡散の退化性が問題を特徴づけ，退化性とそれに起因する解の不連続性が解析や数値解析を困難なものにしている．

多孔質媒体中を流れる流体の流れ現象を記述する方程式である多孔質媒体流方程式を簡単に紹介する．多孔質媒体流方程式は (1) において $M = 1$,

$$\beta(r) = \boldsymbol{\beta}(r) = |r|^{m-1} r, \quad r \in \mathbb{R}$$

と定義したものである．ただし，$m > 1$ である．このとき，$z = 0$ なる点において拡散が退化する．この退化性が引き起こす顕著な特徴として，次のものが挙げられる．初期関数 z_0 の台がコンパクトであるならば，解の台もコンパクトである．図 2 と図 3 はそれぞれ $m = 2$ と $m = 6$ の場合の初期値と Barenblatt 解と呼ばれる解析解をプロットしたものである．解の台もコンパクトであることが見られる．このように，$z > 0$ となる領域と $z = 0$ なる領域の間に自由境界が現れる．解の台は物理的には流体の存在範囲を表すものである．この性質は線形拡散方程式 $(m = 1)$ の性質とは明確に異なる．

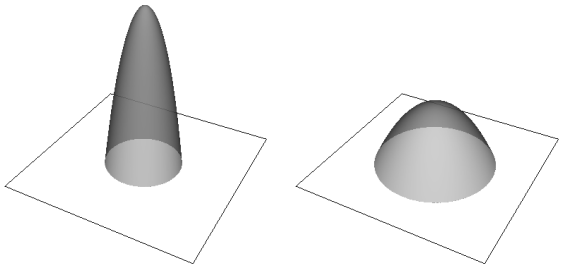

図 2: Barenblatt 解. $m = 2$.

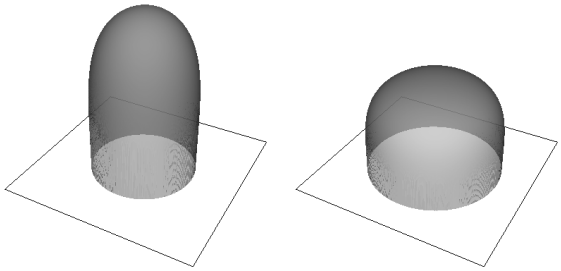

図 3: Barenblatt 解. $m = 6$.

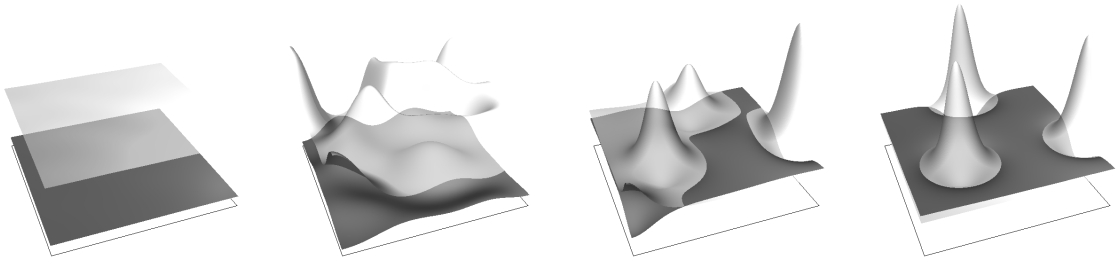

図 4: 重定-川崎-寺本モデル (2) の数値解. $\Omega = (0,1)^2$, $a_1 = a_2 = c_1 = 0.04, b_1 = b_2 = 0, c_2 = 2, g_{10} = 2.8, g_{20} = 3, g_{11} = g_{22} = 1.1, g_{12} = g_{21} = 1$. 濃い灰色は z_1 を表し，薄い灰色は z_2 を表している.

2.2. 交差拡散系

問題 (1) において，β_i は z_i のみにではなく，$z_j (j \neq i)$ にも依存していることに注意されたい. この様な場合の拡散は交差拡散と呼ばれ，そのことが興味深い現象を引き起こす．交差拡散系は個体群生態学における数理モデルの中にしばしば現れる．非線形交差拡散系の典型的な例は重定, 川崎, 寺本 [20] により提案された 2 種個体群の分散的移動を記述する次のモデルである.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial z_1}{\partial t} = \Delta\left[(a_1 + b_1 z_1 + c_1 z_2) z_1\right] + \left(g_{10} - g_{11} z_1 - g_{12} z_2\right) z_1, \\ \dfrac{\partial z_2}{\partial t} = \Delta\left[(a_2 + b_2 z_2 + c_2 z_1) z_2\right] + \left(g_{20} - g_{21} z_1 - g_{22} z_2\right) z_2. \end{cases} \tag{2}$$

ここで，a_i, b_i, c_i, g_{ij} $(i = 1, 2, j = 0, 1, 2)$ は非負定数である．i 番目の種の分散率 $a_i + b_i z_i + c_i z_j$ $(j \neq i)$ は密度 z_i, z_j に比例して増加するという形式をとっている．交差拡散の項は j 番目の種が高密度に棲む場所では個体間に働く干渉作用が強く，i 番目の種の各個体はその場から分散する傾向を強めることを示している．この効果により空間的な棲み分けが起こることが知られている．数値計算例を図 4 に示す．初期値は定数定常解に 1%のランダムなノイズを加えたものとした．交差拡散の効果がない $(c_1 = c_2 = 0)$ 場合は定数定常解 $(z_1, z_2) \equiv (8/21, 50/21)$ は安定であるが，この数値結果が示す通り，交差拡散の効果がある場合には，この定数定常解は不安定になり空間的なパターンが現れる.

個体群生態学には他にも興味深い交差拡散系の例がある. 例えば, Kadota と Kuto [9] により

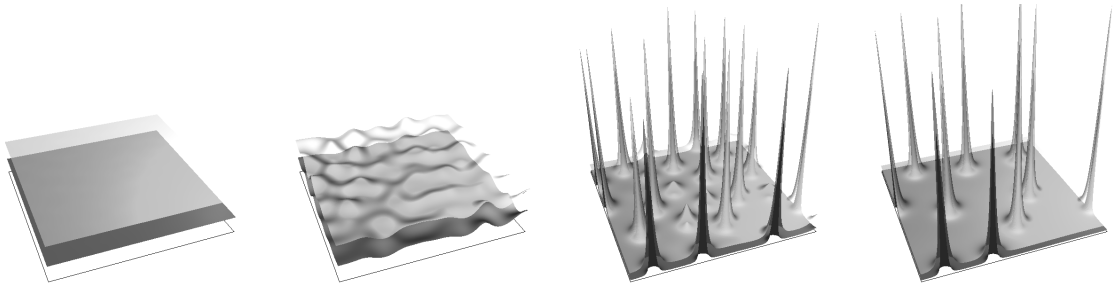

図 5: 交差拡散系 (3) の数値解. 濃い灰色は z_1 を表し，薄い灰色は z_2 を表している.

研究されている次の捕食者-被食者系の問題である.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial z_1}{\partial t} = \Delta[(1+b_1 z_2)z_1] + (g_{10} - g_{11}z_1 - g_{12}z_2)\, z_1, \\ \dfrac{\partial z_2}{\partial t} = \Delta\left[a_2 + \left(\dfrac{1}{1+c_2 z_1}\right) z_2\right] + (g_{20} + g_{21}z_1 - g_{22}z_2)\, z_2. \end{cases}$$

この系では，被食者の分散率は (2) と同様なタイプであるが，捕食者の分散率は分数の形になっている．これは，餌が多くなると捕食者の個体群圧が低くなることを示しており，結果として，餌が多く集まっている場所に捕食者が集まっていく効果を表している.

これに関連して，次の協調系の数値計算例を見てみよう.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial z_1}{\partial t} = \Delta\left[\left(\dfrac{1}{0.2+0.02z_2^2}\right) z_1\right] + (4-z_1)z_1 \quad \text{in} \quad Q = (0,1)^2 \times (0,50], \\ \dfrac{\partial z_2}{\partial t} = 0.005\Delta z_2 + (0.5 + z_1 - 0.5z_2)z_2 \qquad \text{in} \quad Q. \end{cases} \tag{3}$$

結果を図 5 に示す．交差拡散の項がない場合，つまり第 1 式の z_2 の前の係数が 0 の場合には，第 1 式は z_2 に独立であるため，定数定常解 $(z_1, z_2) \equiv (4, 9)$ が安定であることが直ちに分かるであろう．しかしながら，この例では，交差拡散の効果により，その定常解が不安定であり，凝集が起こることが見られる.

一言に交差拡散系といっても，様々な興味深い問題を含んでいる．この他にも，線形 (半線形) の交差拡散系 [10] や 3 重結節点を含む自由境界問題に関連する交差拡散系 [19] などが研究されている.

3. 急速反応極限と反応拡散系近似

この様に，式 (1) は興味深い問題を多く含んでいる．前節の例をみると，拡散の退化性や非線形性が問題の解析及び数値解析を複雑なものにしていることが想像できる．この拡散の退化性や非線形性を取り除くことは問題の解析や数値解析に役立つと思われる．拡散の退化性を取り除く試みはこれまでにいくつかあった．例えば，古典的 Stefan 問題においてエンタルピーと温度の関係式 β を拡散が退化しない形に書き換えて (例えば，β を $\beta + aI (0 < a \ll 1,\ I$:恒等写像) と置き換えて)，Stefan 問題の解を近似する方法がある．このとき，滑らかな解を取り扱うことができ，解析が比較的容易になる．このとき取り扱う問題は正則化 Stefan 問題と呼ばれるが，これらの問題も (1) の形である.

拡散の退化性を含め，非線形性を取り除く試みとして，本稿では一般的な問題である非線形拡散問題 (1) の反応拡散系近似を考える．反応拡散系近似の研究は，非線形問題の解を線形拡散項と非線形反応項から成る半線形反応拡散系の解により近似する研究である.

反応拡散系近似の他に関連する既存研究のキーワードは急速反応極限である．反応拡散系近似は上に述べたとおりであるが，急速反応極限の問題は反応項を含む方程式系に対して，その反応率が大きくなったときの極限における解の振る舞いを調べる問題である．研究の動機は異なるが，どちらも非線形問題と半線形反応拡散系との関係についての研究である．

Dancer 等 [4] は個体群生態学に現れる空間的パターンを理解するために，Lotka-Volterra-Gause 型の反応拡散系を考えた．彼等は特に，異種間の競合が非常に強い場合について研究した．その特異極限問題が潜熱係数が 0 の場合の古典的 Stefan 問題を表すことを示した．彼等の結果に動機付けられ，Hilhorst 等 [6] は潜熱係数が正の古典的 Stefan 問題の解を近似する反応拡散系は存在するかという問題を考えた．結果，ある反応拡散系を構成し，その収束性を示した．Knabner [11] は多孔質媒体中における非平衡吸着反応を示す反応性の溶質の振る舞いを記述するモデルとして，反応速度をパラメータとして持つ反応拡散系を提案した．さらに，非平衡吸着反応と平衡吸着反応の関係を調べるために，その反応速度が大きくなったときの解の振る舞いについて研究した．そして，その反応拡散系の弱解が多孔質媒体流方程式の弱解に収束することを示した．飯田等 [7, 8] は問題 (2) において $a_1, a_2, c_2 > 0$，$b_1 = b_2 = c_1 = 0$ という場合を取り扱った．交差拡散のメカニズムの理解のために，彼らは異種が高密度に棲む場所を避ける方法について，交差拡散とは異なるものを考えた．結果として，ある半線形反応拡散系を提出し，その解がパラメータに対して一様有界であることを仮定したときに，その解が交差拡散系の解に収束することを示した．さらに，彼らは交差拡散誘導不安定性と, 対応する反応拡散系のチューリング不安定性との関係についても議論している．この他にも，急速反応極限及び反応拡散系近似に関連する研究が近年精力的に行われている (例えば，[2, 3, 5, 19])．

このように，上記研究は動機は異なるにせよ，非線形拡散と反応拡散の関係について研究し，反応拡散系を用いて非線形拡散問題の解析に成功した例であろう．しかしながら，これらの研究は個別の問題に対する結果であり，方程式が少しでも変わると適応できない．適応できたとしても，やはり個々の問題に対する解析が必要になる．一見すると拡散の非線形性が取り除かれているようであるが，詳しく見るとそうではないことが分かる．ここでは，一般的な問題である方程式 (1) に対する反応拡散系近似を考える．一般的な問題を扱うため，非線形性 $\boldsymbol{\beta}$ の形が変わっても問題ない．一般的な非線形問題を半線形反応拡散系で近似することにより，非線形性を取り除くことを試みる．

反応拡散系を用いた近似のメカニズムの深い理解のために，我々はまず，古典的 Stefan 問題に対する反応拡散系近似について研究した．古典的 Stefan 問題に対する反応拡散系近似はすでに Hilhorst 等 [6] により提出されている．そのアイデアを正則化 Stefan 問題に適用し，それぞれの反応拡散系の収束性について調べた．正則化 Stefan 問題ではエンタルピーと温度の関係式 β を別の関数で近似しているため，間接的に異なる方程式を扱うことになる．そして，その違いを詳しく調べることは，より一般的な問題に対する反応拡散系近似の発見を可能にするであろう．実際に，この研究から，一般的な問題 (1) の解を近似する次の反応拡散系を構成した．

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = \dfrac{1}{\mu}\Delta \boldsymbol{u} - \dfrac{1}{\varepsilon}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{\beta}(\mu \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v})) + \dfrac{1}{\mu}\boldsymbol{f}(\mu \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}) & \text{in} \quad Q, \\
\dfrac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = \dfrac{\mu}{\varepsilon}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{\beta}(\mu \boldsymbol{u} + \boldsymbol{v})) & \text{in} \quad Q, \\
\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \nu} = \boldsymbol{0} & \text{on} \quad \partial\Omega \times (0, T), \\
\boldsymbol{u}(\cdot, 0) = \boldsymbol{u}_0^\varepsilon, \quad \boldsymbol{v}(\cdot, 0) = \boldsymbol{v}_0^\varepsilon & \text{in} \quad \Omega.
\end{cases}
\tag{4}
$$

ここで，μ と ε は正の定数である．導出の鍵となった古典的Stefan問題に対する反応拡散系近似の研究については [13] を，導出や意味付けなどは [7, 12, 14, 16] を参照されたい．

関係 $\mu \boldsymbol{u}_0^\varepsilon + \boldsymbol{v}_0^\varepsilon \approx \boldsymbol{z}_0$ を満たす初期値 $(\boldsymbol{u}_0^\varepsilon, \boldsymbol{v}_0^\varepsilon)$ に対する反応拡散系 (4) の弱解を $(\boldsymbol{u}^\varepsilon, \boldsymbol{v}^\varepsilon)$ とする．パラメータ ε が 0 に近づくとき，関数 $\boldsymbol{z}^\varepsilon := \mu \boldsymbol{u}^\varepsilon + \boldsymbol{v}^\varepsilon$ が方程式 (1) の弱解 $\boldsymbol{z}$ に収束するということが主張である．詳細については次節に述べる．

反応拡散系 (4) の拡散は線形であり，拡散の非線形性 $\boldsymbol{\beta}$ がそのままの形で反応拡散系 (4) の反応項の部分に含まれていることに注目されたい．一般に，非線形問題を扱うよりも半線形問題を取り扱う方が容易である．したがって，反応拡散系近似に関する理論は非線形問題の解析や数値解析に応用できることが期待される．実際に，数値解析への応用が有効であることを示した．そのことは第 5 節で述べる．

実は，研究を進めている中で，Visintin [22] により，退化放物型方程式に対して同様の系が提案され解析されていることが分かった．しかしながら，独立に研究を行うことにより，交差拡散系を含むより一般的な問題を扱うことができ，退化放物型方程式に対しても収束の速さなど詳細な研究を行うことができた．さらに，数値解析への応用も可能となった．

4. 収束性

本節では，反応拡散系 (4) の収束性に関する我々の結果について述べる．我々の結果は退化放物型問題及び非線形交差拡散系を含む問題についてのものであるが，退化性と交差性を同時に含む問題の解析は困難である．ここでは，拡散が交差していない退化放物型問題と拡散が退化しない交差拡散系を別々に取り扱う．退化放物型方程式については収束することのみでなく，収束の速さについても詳細な結果が得られた．

4.1. 退化放物型問題

退化放物型問題に対する結果を述べる．以下に，与えられた関数に対する条件を与える．

$(\mathrm{H1})_\mathrm{D}$ 各 $i = 1, 2, \ldots, M$ に対して，β_i は第 i 番目の変数にのみ依存しているとする (非交差拡散)．さらに，β_i は非減少 Lipschitz 連続関数であり，$\beta_i(0) = 0$ を満たすものとする．Lipschitz 定数を L_β と書く．また，次を満たす正定数 C_1 と C_2 が存在するとする．

$$|\beta_i(s)| \geq C_1|s| - C_2 \quad \text{for all } s \in \mathbf{R}.$$

$(\mathrm{H2})_\mathrm{D}$ $\boldsymbol{f}$ は Lipschitz 連続関数である．

$(\mathrm{H3})_\mathrm{D}$ μ は $0 < \mu < L_\beta^{-1}$ を満たす．

$(\mathrm{H4})_\mathrm{D}$ $\boldsymbol{z}_0 \in L^2(\Omega)^M$．$\boldsymbol{u}_0^\varepsilon \in H^1(\Omega)^M$ と $\boldsymbol{v}_0^\varepsilon \in L^2(\Omega)^M$ は $\mu \boldsymbol{u}_0^\varepsilon + \boldsymbol{v}_0^\varepsilon \to \boldsymbol{z}_0$ in $L^2(Q)^M$ as $\varepsilon \to 0$ を満たす．

ここで，μ の意味について考えよう．非線形拡散は $\Delta\beta(z) = \mathrm{div}(\beta'(z)\nabla z)$ と書き直すことができる．したがって，$\beta'(z)$ が拡散係数に相当する．仮定 $(\mathrm{H1})_\mathrm{D}$ ではその拡散係数が $0 \leq \beta'(z) \leq L_\beta$ を満たしていることを示している．一方，仮定 $(\mathrm{H3})_\mathrm{D}$ は $L_\beta < 1/\mu$ ということであり，u の拡散係数が z の拡散係数の上限よりも大きいことを表している．また，v の拡散係数 0 は拡散の最小値を表していると捉えることができる．反応拡散系 (4) では，(1) の解 z が拡散するもの u と拡散しないもの v に分けられており，全体の量 $\mu u + v$ と非線形性 β に応じてその 2 つの状態の量が素早く転換することによってその比率を変え，その比率によって非線形拡散を実現している

と考えることができる．このように, μ は拡散の上限をコントロールするパラメータであると考えられる．

本研究では, 弱解を考えるが, 弱解の定義や一意存在性については [12, 18] 及び, そこに書かれている参考文献を参照していただきたい．

上記の仮定の下で, 以下の定理が成り立つ．

定理 4.1 ([12]+α)**.** 関数 $\boldsymbol{z}$ を (1) の弱解であるとし, $(\boldsymbol{u}^\varepsilon, \boldsymbol{v}^\varepsilon)$ を (4) の弱解とする．仮定 $(\mathrm{H1})_\mathrm{D}$–$(\mathrm{H4})_\mathrm{D}$ が成り立つとき, 次を満たす ε に依存しない正の定数 C が存在する．

$$E^\varepsilon := \|\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z}) - \boldsymbol{u}^\varepsilon\|_{L^2(Q)^M} + \left\| \int_0^t (\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z}) - \boldsymbol{u}^\varepsilon) \right\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))^M}$$
$$+ \|\boldsymbol{z} - (\mu \boldsymbol{u}^\varepsilon + \boldsymbol{v}^\varepsilon)\|_{L^\infty(0,T;(H_1(\Omega))^*)^M} \le C\varepsilon^{1/4}.$$

もし，$\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z}_0) \in (L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega) \cap W^{2,1}(\Omega))^M$ であれば，初期値 $(\boldsymbol{u}_0^\varepsilon, \boldsymbol{v}_0^\varepsilon)$ を十分滑らかな近似ととれば，次を満たす ε に依存しない正の定数 C が存在する．

$$E^\varepsilon \le C\varepsilon^{1/2}.$$

もし, $\boldsymbol{z}_0 \in L^2(\Omega)^M$ であり,

$$\beta_i'(s) \ge l_\beta \quad \text{a.e. } s \in \mathbf{R},$$

を満たす正の数 l_β が存在するとすると，すなわち，拡散が退化しない問題については，次を満たす ε に依存しない正の定数 C が存在する．

$$\|\boldsymbol{z} - (\mu \boldsymbol{u}^\varepsilon + \boldsymbol{v}^\varepsilon)\|_{L^2(Q)^M} + E^\varepsilon \le C\varepsilon^{1/2}.$$

4.2. 交差拡散系

交差拡散系に対する結果を述べる．次の条件を仮定する．

$(\mathrm{H1})_\mathrm{C}$ $\boldsymbol{\beta} : \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$ はリプシッツ定数 L_β のリプシッツ連続関数であり，$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ を満たす．

$(\mathrm{H2})_\mathrm{C}$ ある正の定数 a が存在して，ほとんど全ての $\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\xi} \in \mathbf{R}^n$ に対して次を満たす．

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\beta_i)_j(\boldsymbol{\eta}) \xi_i \xi_j \ge a|\boldsymbol{\xi}|^2.$$

ここで，$(\beta_i)_j$ は β_i の第 j 番目の変数に関する微分を表す．

$(\mathrm{H3})_\mathrm{C}$ $\boldsymbol{f}$ はリプシッツ連続関数である．

$(\mathrm{H4})_\mathrm{C}$ $\boldsymbol{z}_0 \in L^2(\Omega)^n$. $\boldsymbol{u}_0^\varepsilon \in L^2(\Omega)^n$ and と $\boldsymbol{v}_0^\varepsilon \in H^1(\Omega)^n$ はある ε に依存しない正定数 C に対して次を満たす．

$$\|\boldsymbol{u}_0^\varepsilon\|_{L^2(\Omega)^n} + \sqrt{\varepsilon}\, \|\boldsymbol{v}_0^\varepsilon\|_{H^1(\Omega)^n} \le C,$$
$$\mu \boldsymbol{u}_0^\varepsilon + \boldsymbol{v}_0^\varepsilon \rightharpoonup \boldsymbol{z}_0 \quad \text{weakly in } L^2(\Omega)^n.$$

$(\mathrm{H5})_\mathrm{C}$ μ は次を満たす．

$$0 < \mu < a/(a^2 + a + L_\beta).$$

条件 $(\mathrm{H1})_\mathrm{C}$ と $(\mathrm{H2})_\mathrm{C}$ は問題が一様放物型であることを意味している．係数が

$$a_i > 0,\ 8b_1c_2 > c_1^2,\ 8b_2c_1 > c_2^2.$$

を満たし，解が非負で有界であるとき，交差拡散系 (2) は一様放物型である．一様放物型でなくても，係数が

$$a_i > 0,\ b_i, c_2 \geq 0,\ c_1 = 0$$

を満たしている場合，つまり弱結合系の場合にも，同様に (2) を取り扱うことができる．どちらの場合も含むさらに一般的な問題を考えることができる．詳細は [17, 18] を見よ．

本研究では，このような弱い仮定をおいているため，古典解ではなく，弱解を取り扱う．弱解の定義については [18] を参照せよ．仮定 $(\mathrm{H1})_\mathrm{C}$, $(\mathrm{H3})_\mathrm{C}$, $(\mathrm{H4})_\mathrm{C}$ と $\mu > 0$ が成り立つとき，任意の $\varepsilon > 0$ に対して，反応拡散系 (4) の弱解は一意に存在する．交差拡散系 (1) の弱解の存在は反応拡散系 (4) を用いて証明することができる．

以下に収束に関する我々の結果を述べる．

定理 4.2 ([18])**.** 仮定 $(\mathrm{H1})_\mathrm{C}$–$(\mathrm{H5})_\mathrm{C}$ が成り立つとする．反応拡散系 (4) の弱解を $(\boldsymbol{u}^\varepsilon, \boldsymbol{v}^\varepsilon)$ とする．このとき，交差拡散系 (1) の弱解 $\boldsymbol{z} \in (L^\infty(0,T;L^2(\Omega)) \cap L^2(0,T;H^1(\Omega)) \cap H^1(0,T;H^1(\Omega)^*))^n$ と $\{\boldsymbol{u}^\varepsilon\}$, $\{\boldsymbol{v}^\varepsilon\}$ の部分列 $\{\boldsymbol{u}^{\varepsilon_k}\}$, $\{\boldsymbol{v}^{\varepsilon_k}\}$ が存在して，ε_k が 0 に収束するとき，次が成り立つ．

$$\begin{aligned}
&\mu\boldsymbol{u}^{\varepsilon_k} + \boldsymbol{v}^{\varepsilon_k} \to \boldsymbol{z} && \textit{strongly in } L^2(Q)^n,\ \textit{a.e. in } Q,\\
& && \textit{and weakly in } L^2(0,T;H^1(\Omega))^n \textit{ and } H^1(0,T;H^1(\Omega)^*)^n,\\
&\boldsymbol{u}^{\varepsilon_k} \rightharpoonup \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{z}) && \textit{weakly in } L^2(0,T;H^1(\Omega))^n.
\end{aligned}$$

このように，拡散が交差していない退化放物型問題と拡散が退化しない交差拡散系のいずれの問題についても，その弱解が反応拡散系 (4) の弱解により近似されることが示めされた．退化交差拡散系についても一部結果を得ているが，応用に役立つような十分に広い枠組みでの結果は得られていない [14].

5. 数値解析への応用

本節では非線形拡散問題 (1) の数値解法を取り扱うが，特に，(1) の時間離散化方法について考える．時間離散のみを考えることは数値解法を考えることに比べて単純なものであるが，数値解法の開発において重要な役割を果たす．N_T を正の整数として，$\tau = T/N_T$ と置く．また，$\{z^n\}_{n=0}^{N_T}$ に対して $\bar{D}_\tau z^n = \frac{z^n - z^{n-1}}{\tau}$ $(1 \leq n \leq N_T)$ と書く．

5.1. 非線形拡散問題の汎用的数値解法

第 2 節で，数値実験を用いて系 (1) における興味深い様々な解の振る舞いを見た．数値実験を行う上で，系 (1) に現れる拡散の非線形性はどのように取り扱えば良いのかが問題になる．様々な問題の解の振る舞いを見たい，拡散の非線形性を少し変えたときの挙動を見たいというときに，汎用的な数値解法が便利である．実装が簡単であればなおさら良い．ここでは，(1) に対するそういった汎用的で実装が容易な数値解法について考える．

退化放物型方程式 (つまり (1) において $M = 1$ の場合) については古くから多くの研究があり，様々な数値解法が提案され解析されている．しかしながら，筆者の知る限り，交差拡散系に関しては個々の問題に対して数値解法が構成され，解析されるのが現状である．

退化放物型方程式の時間離散として，$\bar{D}_\tau Z^n = \Delta\beta(Z^n)$, もしくは，$\bar{D}_\tau \beta^{-1}(U^n) = \Delta U^n$ のタイプの陰的離散化が多く研究されている (例えば [21] や [15] の参考文献を参照)．それらから

得られる数値解法は，ロバストな解法であり，効率よく数値解が得られる方法が多い．しかしながら，方程式系を取り扱う際には実装が複雑であり，非線形性の変化への対応も面倒である．陰的解法は個々の問題に対する詳細な実験に向く解法である．汎用的で実装が容易なものとして陽解法が挙げられる．しかしながら，よく知られている通り，陽解法は時空間の分割に関する制約があり，効率的でないことが問題となっている．

我々は半線形反応拡散系 (4) を用いることにより，拡散の非線形性を反応項に移動することに成功した．この反応拡散系の半陰的時間離散を考えることにより，汎用的で実装が容易であり，ある程度効率の良い数値解法を得ることができる．

次の半陰的時間離散スキームを考える．

$$\begin{cases} \bar{D}_\tau \boldsymbol{U}^n = \dfrac{1}{\mu}\Delta \boldsymbol{U}^n - \dfrac{1}{\varepsilon}(\boldsymbol{U}^{n-1} - \boldsymbol{\beta}(\mu \boldsymbol{U}^{n-1} + \boldsymbol{V}^{n-1})) + \dfrac{1}{\mu}\boldsymbol{f}(\mu \boldsymbol{U}^{n-1} + \boldsymbol{V}^{n-1}) & \text{in} \quad \Omega, \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{U}^n}{\partial \nu} = \boldsymbol{0} & \text{on} \quad \partial\Omega, \\ \bar{D}_\tau \boldsymbol{V}^n = \dfrac{\mu}{\varepsilon}(\boldsymbol{U}^{n-1} - \boldsymbol{\beta}(\mu \boldsymbol{U}^{n-1} + \boldsymbol{V}^{n-1})) & \text{in} \quad \Omega. \end{cases} \tag{5}$$

このスキームにおいて，$\varepsilon = \tau$ と定め，$\boldsymbol{Z}^n = \mu \boldsymbol{U}^n + \boldsymbol{V}^n$ とおくと，次のよりシンプルなスキームを得る．

$$\begin{cases} \boldsymbol{U}^n - \dfrac{\tau}{\mu}\Delta \boldsymbol{U}^n = \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{Z}^{n-1}) + \dfrac{\tau}{\mu}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{Z}^{n-1}) & \text{in} \quad \Omega, \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{U}^n}{\partial \nu} = \boldsymbol{0} & \text{on} \quad \partial\Omega, \\ \boldsymbol{Z}^n := \boldsymbol{Z}^{n-1} + \mu(\boldsymbol{U}^n - \boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{Z}^{n-1})) & \text{in} \quad \Omega. \end{cases} \tag{6}$$

このスキームは時間ステップ毎に M 個の線形楕円型方程式を解き, 3 番目の式に従い $\boldsymbol{Z}$ を更新するという単純なものである．つまり，(1) の方程式の数の線形熱方程式を解くのとほとんど同じ実装の手間と計算コストがあれば (1) の数値計算が実行できる．第 2 節の数値計算は全てこのスキームに基づくものである．熱方程式の数値解を求めるという数値計算の初歩ができれば，第 2 節の数値計算のような複雑な現象をシミュレーションすることができる．

実は，$M = 1$ の場合には，このスキームは Berger, Brezis, Rogers [1] により提案された退化放物型方程式に対する時間離散スキームと一致している．その有効性からこのスキームについて ($M = 1$ の場合に) これまでに多くの研究が行われてきた ([18] の参考文献を参照)．スキーム (6) はその拡張になっているわけだが，その解析は今までに行われていない．スキームの方程式から系への拡張は直ちに行えるものであるが，その理論は系には応用できないからである．我々は，反応拡散系近似 (4) という鍵を持っている．反応拡散系 (4) を介することにより，時間離散スキーム (5) の，したがって (6) の安定性及び収束性を論ずることができる．実際，第 4 節と同様の状況下で条件 $\tau \le \varepsilon$ が成り立つときにスキーム (5) が安定であること，$\varepsilon, \tau \to 0$ のとき (5) の解 $\mu \boldsymbol{U} + \boldsymbol{V}$ が (1) の解 $\boldsymbol{z}$ に収束することを示した．パラメータ ε が小さければ小さいほど近似精度が高いと考えられるため，(5) において $\varepsilon = \tau$ と選ぶのが，つまり (6) が最適である．詳細は [18] に報告している．

5.2. 退化放物型方程式の数値解法

反応拡散系 (4) を用いることにより，効率的に精度の高い数値解が得られる数値スキームを構成することができる．方程式 ($M = 1$) について解析を行い，数値実験を用いてその有効性を確かめた．ここでは，概要を述べるにとどめるが，詳細は [15] を参照されたい．

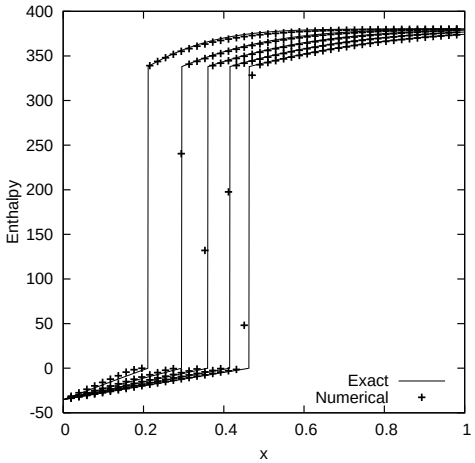

図 6: エンタルピー．真の解と数値解．

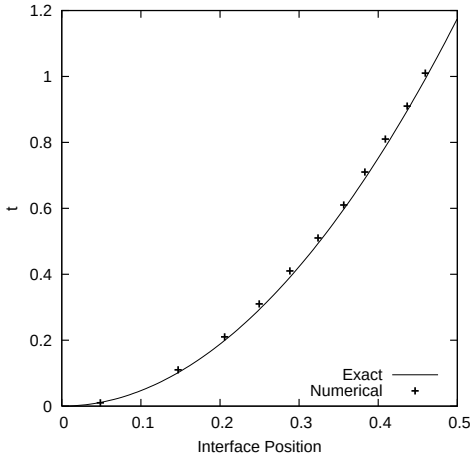

図 7: 自由境界．真の解と数値解．

反応拡散系 (4) の解は，ε が小さいときに (1) の解に近いと期待されるので，より良い数値解法は ε を小さくできる離散化において得られるかもしれない．しかしながら，上記の離散化 (5) では ε を時間分割幅 τ よりも小さくとることができない．したがって，ε が十分に小さくできるロバストな離散化を考える．その最も単純な方法は次の陰的離散化を採用することである．

$$\begin{cases} \bar{D}_\tau U^n = \dfrac{1}{\mu}\Delta U^n + \dfrac{1}{\mu}f(U^n) - \dfrac{1}{\varepsilon}(U^n - \beta(\mu U^n + V^n)), \\ \bar{D}_\tau V^n = \dfrac{\mu}{\varepsilon}(U^n - \beta(\mu U^n + V^n)) \qquad \text{for } n = 1, 2, \cdots, N_T. \end{cases} \tag{7}$$

このスキームも反応拡散系 (4) の単純な離散化であるため，その解析も困難ではない．実際に，このスキームが無条件安定であることや，誤差評価に関する結果を得た．

空間離散化を行えば数値スキームを得ることができる．我々は単独の方程式 (1)($M = 1$ の場合) を系で表現したので，実装が複雑になったと思われるかもしれない．しかしながら，数値スキームをきちんとかいてみれば，複雑になっていないことが分かる．実装の面でも計算コストにおいても単独の半線型方程式の陰解法の場合とほとんど変わりがない．方程式を系で表現したが，系であることの難しさはここでは全くない．

数値実験結果を一つ見てみよう．古典的 Stefan 問題についてある解析解を持つ状況下で数値実験を行った．計算領域 $Q = (0, 1) \times (0.01, 1.01)$，空間領域内の格子点数 $N_X = 50$，時間分割数 $N_T = 10$，$\mu = 0.79$，$\varepsilon = 10^{-4}$ とし，数値実験を行った．図 6 は，時刻 $t = 0.21, 0.41, 0.61, 0.81, 1.01$ における数値エンタルピーと真の解とを比較したものである．時間刻み幅は 0.1 と大きいにもかかわらず，数値解は真の解にかなり近いことが見て取れる．解の不連続性もよく捉えられている．図 7 は界面の位置を示している．ここで，空間について 1 次補間し，s^n を $Z^n(s^n) = \lambda/2$ となる点とする．このときの s^n を時刻 $t^n = n\tau + T_0$ における数値界面の位置とした．時間刻み幅 $\tau = 0.1$ の間に，界面の位置は劇的に移動するにもかかわらず，数値解は真の解をかなり良い精度で近似していることが分かる．この数値結果はエンタルピーと界面の位置の近似において我々のスキームが有効であることを示している．因みに，既存の他の方法を用いて多くの数値実験を行ったが，$\tau = 0.1$ という大きな時間刻み幅では近似と呼べるような数値解は得られなかった．

退化放物型問題は拡散の退化性のために，解が不連続になるなど，数値的に取り扱いにくい

性質を持っている．系 (4) では1つの方程式を1つの偏微分方程式と1つの常微分方程式により近似している．そこから得られた数値解法を用いると，空間的な分布は偏微分方程式で扱い，解の不連続性などの扱いにくい部分を計算コストが少なく, 空間的な制約のない常微分方程式で計算することができる．こうして，解が不連続な問題においても効率的に精度の高い数値解が得られるのである．

参考文献

[1] A. E. Berger, H. Brezis and J. C. W. Rogers, *A numerical method for solving the problem* $u_t - \Delta f(u) = 0$, R.A.I.R.O. Anal. Numér. **13** (1979), 297–312.

[2] D. Bothe and D. Hilhorst, *A reaction-diffusion system with fast reversible reaction*, J. Math. Anal. Appl., **268** (2003), 125–135.

[3] N. Bouillard, R. Eymard, M. Henry, R. Herbin and D. Hilhorst, *A fast precipitation and dissolution reaction for a reaction-diffusion system arising in a porous medium* Nonlinear Anal. Real World Appl., **10** (2009), 629–638.

[4] E. N. Dancer, D. Hilhorst, M. Mimura and L. A. Peletier, *Spatial segregation limit of a competition-diffusion system*, Euro. J. Appl. Math. **10** (1999), 97–115.

[5] R. Eymard, D. Hilhorst, H. Murakawa and M. Olech, *Numerical approximation of a reaction-diffusion system with fast reversible reaction*, Chinese Annals of Mathematics B, **31** (2010), 631–654.

[6] D. Hilhorst, M. Iida, M. Mimura and H. Ninomiya, *A competition-diffusion system approximation to the classical two-phase Stefan problem*, Japan J. Indust. Appl. Math. **18** (2001), 161–180.

[7] M. Iida, M. Mimura and H. Ninomiya, *Diffusion, cross-diffusion and competitive interaction*, J. Math. Biol., **53** (2006), 617–641.

[8] M. Iida and H. Ninomiya, *A reaction-diffusion approximation to a cross-diffusion system*, in "Recent Advances on Elliptic and Parabolic Issues" (eds. M. Chipot and H. Ninomiya), World Scientific, (2006), 145–164.

[9] T. Kadota and K. Kuto, *Positive steady states for a prey-predator model with some nonlinear diffusion terms*, J. Math. Anal. Appl., **323** (2006), 1387–1401.

[10] E. H. Kerner, *Further considerations on the statistical mechanics of biological associations*, Bull. Math. Biophys., **21** (1959), 217–255.

[11] P. Knabner, *Mathematische Modelle für Transport und Sorption gelöster Stoffe in porösen Medien*, Verlag Peter Lang, Frankfurt, 1991.

[12] H. Murakawa, *Reaction-diffusion system approximation to degenerate parabolic systems*, Nonlinearity, **20** (2007), 2319–2332.

[13] H. Murakawa, *A regularization of a reaction-diffusion system approximation to the two-phase Stefan problem*, Nonlinear Anal., **69** (2008), 3512–3524.

[14] H. Murakawa, *A solution of nonlinear diffusion problems by semilinear reaction-diffusion systems*, Kybernetika, **45** (2009), 580–590.

[15] 村川秀樹, 放物型自由境界問題における界面の近似, 数理解析研究所講究録, **1633** (2009), 62–79.

[16] 村川秀樹, 反応-拡散の相互作用と非線形拡散, 数理解析研究所講究録, **1704** (2010), 187–194.

[17] H. Murakawa, *A relation between cross-diffusion and reaction-diffusion*, Discrete Contin. Dyn. Syst. S, **5** (2012), 147–158.

[18] H. Murakawa, *A linear scheme to approximate nonlinear cross-diffusion systems*, Math. Mod. Numer. Anal., to appear.

[19] H. Murakawa and H. Ninomiya, *Fast reaction limit of a three-component reaction-diffusion system*, J. Math. Anal. Appl., **379** (2011), 150–170.

[20] N. Shigesada, K. Kawasaki and E. Teramoto, *Spatial segregation of interacting species*, J. Theor. Biol., **79** (1979), 83–99.

[21] C. Verdi, *Numerical aspects of parabolic free boundary and hysteresis problems*, Lecture Notes in Mathematics, **1584** (1994), 213–284.

[22] A. Visintin, *Models of phase relaxation*, Differential Integral Equations, **14** (2001), 1469–1486.