

セルオートマトンモデルを用いた 反応・拡散・対流現象に関する考察

A study of a reaction-diffusion-convection phenomenon by using a cellular automaton model

梅木 真衣†
Mai Umeki

鈴木 泰博†
Yasuhiro Suzuki

1 はじめに

非平衡開放系の代表的な化学反応の一つに Belosov-Zhabotinsky (BZ) 反応がある。BZ 反応では、連続攪拌時には酸化反応と還元反応を繰り返す現象が現れ、非攪拌時には時間的・空間的に広がっていく動的な化学反応波の伝播がみられる。これは化学反応と溶液内部の対流によるもので、反応・拡散・対流現象と呼ばれている^[1]。反応・拡散・対流現象のダイナミクスは広く自然界にみられるリズムやパターンと類似しているため、かねてより興味をもたれてきた。なかでも溶液内部の対流現象は、反応・拡散・対流現象を考える際に重要とされている。だが、通常の化学反応系では溶液の不均一を避けるため攪拌により対流を抑制するため対流に特に着目した研究は少ない。そのなかでも、野村ら^[2]による反応拡散方程式とナビエ・ストークス方程式を組み合わせ、反応・拡散・対流現象を表現した研究はよく知られている^[2]。この野村らのモデルに対し、本研究では拡散と対流のみに着目し、それらの空間におけるスケールを同一とみなした一次元セルオートマトン (CA) を用いて拡散・対流現象を表現した Diffusion and Convection Model (DCM) を構築し、拡散と対流の関係性を考察した。

2 DCM

DCM は n 状態 3 近傍の一次元 CA であり、セルの値 (M) は左のセルの値 (L) と右のセルの値 (R) によって、拡散、もしくは、対流が生じ状態変化する。

拡散は物質粒子が溶液中の濃度が一樣になるように、高濃度の領域から低濃度の領域に広がる現象である。DCM では拡散を、値の大きいセルから値の小さいセルへの値の移動とする。

BZ 反応では波頭部分とそれ以外の部分では密度分布が異なるため、化学反応波の波頭部分に向かって対流が生じる。密度は表面張力と密接に関係しており、密度が高い場合は表面張力も強く、低い場合は表面張力も弱い。BZ 反応では反応等により溶液表面で表面張力が不均質となり表面張力の強い部分が弱い部分を引っ張るため対流が生じると考えられている。DCM では対流を、値の小さいセルから値の大きいセルへの値の移動とする。つまり、密度が高い (値が大きい) セルが、密度が低い (値が小さい) セルを引っ張っている、すなわち対流、とみなす。

ここで、セルの状態が近傍のセルの状態と差がない場合、拡散・対流は起こらない。また拡散・対流を同時に起こる場合、 R と M との差・ L と M との差を調べ、差が大きい方へ状態変化が生じるとする。また拡散は ($L < M > R$) ならば左右どちらにも生じるとするが、対流の場合は ($L > M < R$) ならば R と L とを比較し、値が大きい方へのみ対流が生じるとする。以上より、DCM の状態遷移規則は以下のように定義される。

($L < M > R$)	L : 拡散	かつ	R : 拡散
($L > M > R$)	L : 対流	もしくは	R : 拡散
($L = M > R$)	R : 拡散		
($L < M < R$)	L : 拡散	もしくは	R : 対流
($L > M < R$)	L : 対流	もしくは	R : 対流
($L = M < R$)	R : 対流		
($L < M = R$)	L : 拡散		
($L > M = R$)	L : 対流		
($L = M = R$)	何も起こらない		

3 シミュレーション

我々は、拡散と対流の強さが同じ場合、拡散が強い場合、対流が強い場合の 3 つの場合について、シミュレーションを行った。

シミュレーション条件は、セル数を 20、計算の実行回数を 1000 とした。また、セルの初期状態として 1~30 の範囲の乱数を割り当てた。実際の実験では、セル数は反応槽の容積に、実行回数は実験時間に、セルの状態は溶液内の総粒子数に相当する。

また、状態遷移規則の適用方法として、並列、逐次連続、逐次乱数の 3 種類の方式を用い比較した。並列方式では、予め全てのセルについて拡散と対流のどちらが生じるかを調べ、全てのセルを同時に状態変化させる。また、逐次連続方式では左のセルから順に、逐次乱数方式ではランダムにセルを選択し逐次的に状態変化させる。

4 シミュレーション結果

まず、拡散と対流の強さが同じ場合について述べる。並列方式では、比較的実行回数が少ない段階で、各セルの状態の変動はほぼ収まり、狭い範囲での振動 (例えば、 $3 \rightarrow 4 \rightarrow 5 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \dots$ のような状態変化) 以外での状態の大きな変動は見られなくなる。逐次連続方式でも、並列方式同様、実行回数の少ない段階で変動が収まり、状態の変動がなくなったセルの近傍から、徐々に変動が収ま

† 名古屋大学大学院 情報科学研究科 複雑系科学専攻

っていく。また、全てのセルで状態の変動が収まると、それ以降の変動は全く見られなくなる。逐次乱数方式では、変動が収まる部分と、絶えず変動が起こる部分に分かれる。

次に、拡散の働きが強い場合、並列方式と逐次乱数方式では状態は絶えず変動しており、実際の拡散現象に近い様子が見られる。ただ、並列方式は大きな値を持つセルが、空間的に偏る場合が見られる。また、逐次連続方式では、拡散と対流の強さが同じ場合と同様に、徐々に変動が収まり、最終的には変動が全く起こらなくなる。

最後に対流の働きが強い場合であるが、この場合は、大きな値を持ったセルは実行回数を重ねるごとにますます大きな値をとるようになり、一方、小さな値を持ったセルは、ますます小さな値をとるようになる。そして、ある一定のところで、それらの変動は収まる。この結果は、どの方式でも見られた。

5 まとめ・今後の課題

今回は本研究で提案した DCM を用いて、初期の溶液の状態が、拡散と対流を繰り返すことで、どのように状態変化していくかをシミュレーションした。その結果、以下のことが分かった。

まず、どの規則適用方式を用いても、平衡状態（状態が時間変化しない状態）への時間発展がみられた。例えば、各セルの値が「 $18 \cdot 18 \cdot 3 \cdot 3 \cdot 18 \cdot 16$ 」のような場合、 $18 \rightarrow 3$ の拡散による状態変化と、 $18 \leftarrow 3$ の対流による状態変化が互いに相殺され、この部分は平衡状態となる。この状態変化の相殺が DCM における平衡状態への収束条件である。

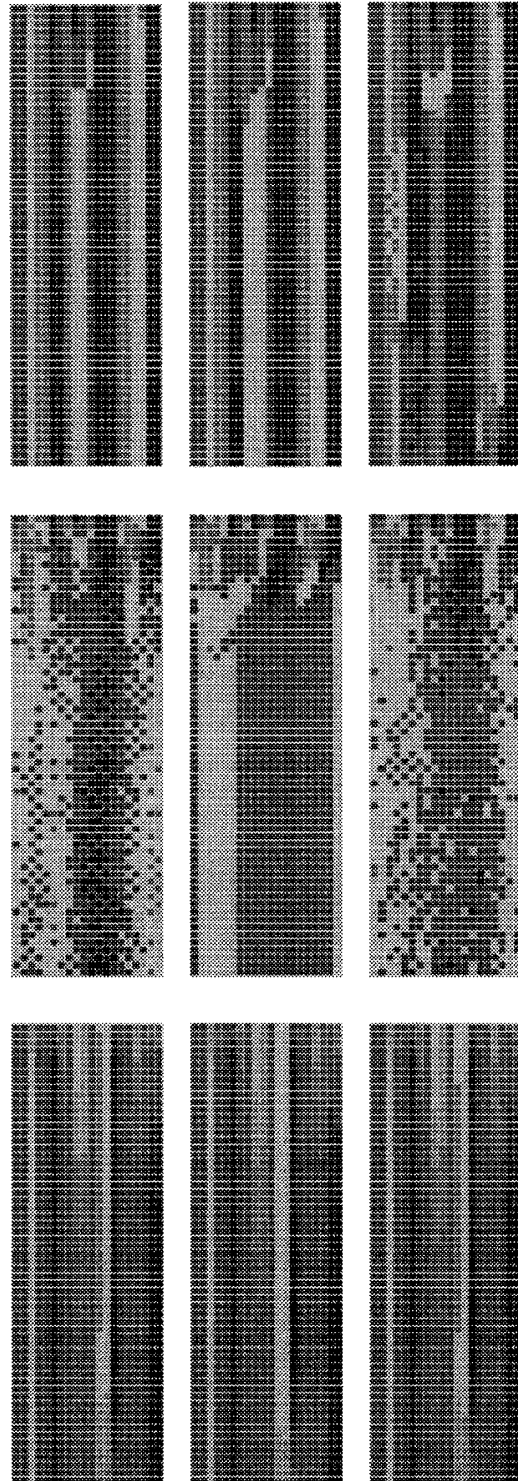
また、拡散の働きが強い場合は、セルの値の平均へと集まり収束しにくい。これは実際の現象に近い結果が得られたと考えられる。一方で対流の働きが強い場合は、セル間の状態の差が非常に大きくなるように状態変化を起こす。規則適用方式により時間発展に相違が生じる点に関しては今後の課題としたい。

また、今回は 3 近傍のモデルを用い、最近接の部分空間の相互作用のみにより拡散と対流を定義したが、実際の現象ではさまざまな距離間での相互作用がある。また相互作用以外にも熱などのパラメータを考える必要があるが、それらも今後の課題としたい。

我々が理解したい現象は反応・拡散・対流現象であるが、反応・拡散現象はよく研究されているため、まず DCM を用いて拡散・対流現象のダイナミクスを精査し、そこに反応の影響を付け加えることにより現象を理解していきたい。

参考文献

- [1] 三池秀敏・森義人・山口智彦：非平衡系の科学Ⅲ 反応・拡散系のダイナミクス、講談社、pp.1-39
- [2] A.Nomura, T.Sakurai, H.Miike, M.Hano : Model for Belousov-Zhabotinsky Reaction and Surface Flow Structure Induced by Chemical Concentration Gradients, 2004 International Symposium on Nonlinear Theory and its Application, Nov.29-Dec.3, pp.363-366



実行回数 60 までのシミュレーション結果

- 上段 : 拡散と対流の力が同程度の実行結果
- 中段 : 拡散の力が強い実行結果
- 下段 : 対流の力が強い実行結果
- 左列 : 並列方式
- 中央列 : 逐次連続方式
- 右列 : 逐次乱数方式

セルの値は、黒に近いほど大きい値をとる。