数理解析研究所講究録
第 1698 巻 2010 年 237-243

話題提供：数学と他分野との相互作用

西成　活裕（東京大学先端科学技術研究センター）

2009年1月5日 京都大学数理解析研究所
「離散力学系の分子細胞生物学への応用数理」

数学と他分野の相互作用

東京大学 大学院工学系研究科
西成 活裕

内容

- **数学の応用とは**
  理学と工学の壁(生物・医学はまだ良い、、)
  数学や基礎物理学は先端技術に役にたつ？
  生物・医学で使える最新の数学理論

- **実際の問題への適用例**
  粘弾性構造解析
  体の渋滞学

人類は非線形に弱い

フーリエ変換

- 線形なら我々は無敵の武器を持っている
  これまでの科学文明の成功は線形性に依存
  例）エレクトロニクス
- 非線形性は無視、あるいは弱いとして線形で近似してきた

これでいいのか？研究、技術の高度化非線形を正面から扱う必要あり！

問題点の例　1/3

- 構造解析
  ほとんど有限要素法を使っている。その結果は合っているのか？
  ○実例
  固有振動数解析で有限要素法汎用ソフトが誤った結果を出すテンセグリティ構造

剛性が動的に変化する場合などは弱点

問題点の例　2/3

- 数値計算はどれだけ信用できるか？
- 数値計算が「必ず」間違える例＝カオス

x → 1/2より小さいとき・・・$2x$
x → 1/2より大きいとき・・・$2-2x$
テント写像

正解例　0.1 -> 0.2 -> 0.4 -> 0.8 ->0.4 -> 0.8 -> あとは繰り返し

衝撃の数値計算結果は、、

問題点の例　3/3

- 離散モデル化

差分法　非線形項の適当な差分は危険

$$\frac{dy}{dx}=y(1-y) \quad \Longrightarrow \quad \frac{y_{n+1}-y_{n-1}}{2\Delta x}=y_n(1-y_n)$$

どんなにΔxが小さくてもカオスになり、もとの方程式とは違う。
正しい差分は

$$\frac{y_{n+1}-y_n}{\Delta x}=y_n(1-y_{n+1})$$

非線形項のずれに注意！

正しい計算がいかに重要か

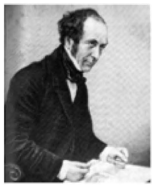
- 非線形 ➡ 数値計算？
  いつ計算機がミスをするのか知るべき
  （カオス、差分や離散要素近似）

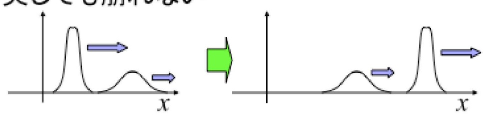
- 得られた結果はどれくらい正しいのかを評価
  このためには、厳密解が必要！

しかし、非線形問題で厳密解が得られるものはほとんど無い？？

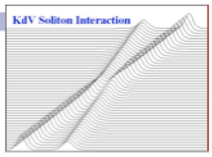
ソリトンとは？

- 崩れない波
- スコット＝ラッセルが1844年に発見
- 1960年代より理論が整備
  広田の方法、逆散乱法、佐藤理論
  「解ける」非線形方程式の理論
- ソリトン波は「粒子」のように振舞う
  衝突しても崩れない

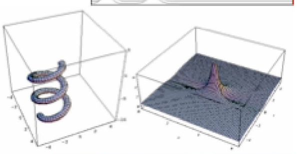




様々なソリトンの例



- 水の表面波、内部波、渦の運動
- 光ファイバー中の電磁波
- 弾性棒、曲面の大変形
- 車の流れ
- LC電気回路でのパルス
- 生物の個体数変化
- 血管と血流
- マグマの動き
- ブラックホール



ソリトン方程式の例

- KdV方程式
  $u_t+uu_x+u_{xxx}=0$　水の表面波、イオン音波など
- 変形KdV方程式
  $u_t+u^2u_x+u_{xxx}=0$　弾性ひもの運動、交通流など
- 非線形シュレディンガー方程式
  $i\psi_t+\psi_{\sigma\sigma}+|\psi|^2\psi=0$　光ファイバー中の光波、水の短波など
- サインゴルドン方程式
  $\theta_{tt}-\theta_{xx}=\sin\theta$　磁性体、ゴムの捻れ波動など

ソリトンはなぜ解けるのか？

たぶんどんな非線形でも解くマスターキーは存在しない。。。しかし、、

これまで知られている有用な概念は？
それは、「恒等式」

$$a(b-c)+b(c-a)+c(a-b)=0$$

これは、どんなa,b,cでも成立。
いくらでも複雑なものが作れそうである。

行列式の恒等式

$$\begin{vmatrix} a & b \\ e & f \end{vmatrix}\times\begin{vmatrix} c & d \\ g & h \end{vmatrix}-\begin{vmatrix} a & c \\ e & g \end{vmatrix}\times\begin{vmatrix} b & d \\ f & h \end{vmatrix}+\begin{vmatrix} a & d \\ e & h \end{vmatrix}\times\begin{vmatrix} b & c \\ f & g \end{vmatrix}=0$$

これは、任意の a,b,c,d,e,f,g,h で成立。

実はこの恒等式にソリトンの解ける秘密が隠されていた！

行列式を τ と書くと

$$\tau_1\tau_2-\tau_3\tau_4+\tau_5\tau_6=0$$

の2次形式（Bilinear form）の形をしている。

ソリトンと2次形式

$$u_t+6uu_x+u_{xxx}=0$$

$$\Downarrow\ u=2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ln f$$

$$f_{xt}f-f_xf_t+f_{xxxx}f-4f_{xxx}f_x+3f_{xx}f_{xx}=0$$

f についての2次形式になる！

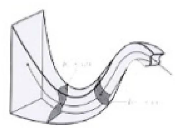
f や f についての微分はすべて行列式で表される

そして、この f についての2次形式は、行列式の恒等式になっている！

弾性論とソリトン理論の結婚

- 曲線のダイナミクス＝可積分方程式
- 1次元弾性体＝「太さ」のある曲線

したがって、弾性棒の中立軸を
可積分方程式で記述するような
枠組みを作る！

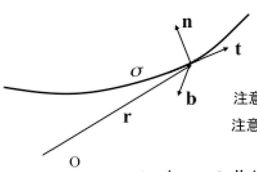


Katsuhiro Nishinari, Proc. R. Soc. Lond. A., Vol. 453 (1997) pp.817-833.

曲線の運動と可積分性について

3次元空間内の曲線はフレネーセレの式

$$\frac{\partial}{\partial\sigma}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & \kappa & -\eta\\ -\kappa & 0 & \tau\\ \eta & -\tau & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix} \qquad \frac{d\mathbf{r}}{d\sigma}=\mathbf{t}$$



κ,τ,η 曲率
σ 曲線に沿ったパラメータ

注意1：η は曲線が「太さ」を持つ場合に必要！
注意2：曲線が伸縮する場合、弧長とパラメータを区別！

いま、この曲線が運動するとしよう。

曲線の運動

運動を一般に次のように与える。時間を t として、

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & A & B\\ -A & 0 & C\\ -B & -C & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix} \qquad \frac{d\mathbf{r}}{dt}=U\mathbf{t}+W\mathbf{n}+V\mathbf{b}$$

A,B,C …回転の角速度　　U,W,V …並進の速度

ここで、新たに導入した A,B,C,U,W,V は勝手に選べない。
これらは曲率 κ,η,τ とどういう関係にあるのか？

両立条件

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\sigma}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix}=\frac{\partial}{\partial\sigma}\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\mathbf{t}\\ \mathbf{n}\\ \mathbf{b}\end{pmatrix}\qquad \frac{d}{dt}\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial\sigma}=\frac{\partial}{\partial\sigma}\frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

が成り立たなくてはならない。これより、

$$\kappa_t = A_\sigma - \eta C - \tau B \qquad A = W_\sigma + \kappa U - \tau V$$

$$\eta_t = -B_\sigma + \kappa C - \tau A \qquad B = V_\sigma + \tau W - \eta U$$

$$\tau_t = C_\sigma + \kappa B + \eta A \qquad 0 = U_\sigma - \kappa W + \eta V$$

これらは特別な場合、可積分方程式になる！

フレネーセレの式
曲線運動の式 ⟹ Laxペアとみなせる

ソリトン方程式の例

以下のような特別な運動を考える

$$U = W = 0,\ V = \kappa \qquad \text{すなわち} \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \kappa\mathbf{b} = \mathbf{r}_\sigma \times \mathbf{r}_{\sigma\sigma}$$

（渦の局所誘導方程式）

このとき曲率の発展方程式は
$$\begin{cases}\kappa_t = -(2\kappa_\sigma\tau + \kappa\tau_\sigma)\\ \tau_t = \left(\dfrac{\kappa^2}{2} + \dfrac{\kappa_{\sigma\sigma}}{\kappa} - \tau^2\right)_\sigma\end{cases}$$

橋本変換
$$\psi = \kappa\exp\left(i\int^\sigma \tau\, d\sigma'\right)$$

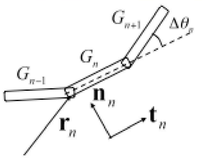
⇩

$$i\psi_t + \psi_{\sigma\sigma} + \frac{1}{2}|\psi|^2\psi = 0$$

（渦糸ソリトン）

非線形シュレディンガー方程式

離散要素の可積分性



$\mathbf{R}^2$ での伸縮する離散ひも

幾何
$$\begin{cases}E_n\mathbf{r}_n = \mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + G_n\mathbf{t}_n\\ E_n\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\Delta\theta_n) & -\sin(\Delta\theta_n)\\ \sin(\Delta\theta_n) & \cos(\Delta\theta_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix}\end{cases}$$

E_n はシフトオペレーター

力学を同様に以下のように与える

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & A_n\\ -A_n & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix}\qquad \frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = U_n\mathbf{t}_n + W_n\mathbf{n}_n$$

可解条件（Lax）

$$\frac{d}{dt}E_n\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix} = E_n\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\mathbf{t}_n\\ \mathbf{n}_n\end{pmatrix}\qquad E_n\frac{d}{dt}\mathbf{r}_n = \frac{d}{dt}E_n\mathbf{r}_n$$

これより、以下の式を得る。

$$A_nG_n = -W_n + \cos(\Delta_n)W_{n+1} + \sin(\Delta_n)U_{n+1}$$

$$\frac{d}{dt}G_n = -U_n + \cos(\Delta_n)U_{n+1} - \sin(\Delta_n)W_{n+1}$$

$$\frac{d}{dt}\Delta_n = A_{n+1} - A_n$$

⟹ U, W が特別な場合、離散可積分方程式になる！

ソリトン理論と弾性論の統合方程式

曲率３成分
$$\begin{cases}\dfrac{d\Delta\phi_n}{dt} = -A_{n-1} + A_n\dfrac{\cos\Delta\psi_n}{\cos\Delta\theta_n} - B_n\dfrac{\sin\Delta\psi_n}{\cos\Delta\theta_n}\\ \qquad + B_{n-1}\sin\Delta\phi_n\tan\Delta\theta_n - C_{n-1}\tan\Delta\theta_n\cos\Delta\phi_n\\ \dfrac{d\Delta\theta_n}{dt} = B_{n-1}\cos\Delta\phi_n - B_n\cos\Delta\psi_n + C_{n-1}\sin\Delta\phi_n - A_n\sin\Delta\psi_n\\ \dfrac{d\Delta\psi_n}{dt} = C_n - C_{n-1}\dfrac{\cos\Delta\phi_n}{\cos\Delta\theta_n} + B_{n-1}\dfrac{\sin\Delta\phi_n}{\cos\Delta\theta_n}\\ \qquad - B_n\sin\Delta\psi_n\tan\Delta\theta_n + A_n\tan\Delta\theta_n\cos\Delta\psi_n\end{cases}$$

速度３成分
$$\begin{cases}\dfrac{dU_n}{dt} = A_nW_n + B_nV_n + \dfrac{(\mathbf{F}_n)_{\mathbf{t}_n}}{m}\\ \dfrac{dW_n}{dt} = -A_nU_n + C_nV_n + \dfrac{(\mathbf{F}_n)_{\mathbf{n}_n}}{m}\\ \dfrac{dV_n}{dt} = -B_nU_n - C_nW_n + \dfrac{(\mathbf{F}_n)_{\mathbf{b}_n}}{m}\end{cases}$$

伸び
$$\frac{dG_n}{dt} = -U_n + P1_{n+1}U_{n+1} + P4_{n+1}W_{n+1} + P7_{n+1}V_{n+1}$$

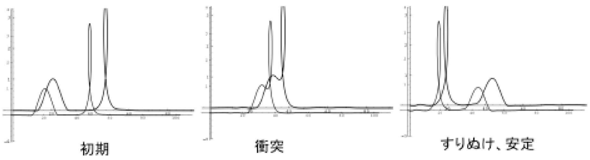
ねじり
$$\frac{dC_n}{dt} = \frac{h}{2\rho II^2}(\Delta\psi_{n+1}\cos\Delta\phi_{n+1}\cos\Delta\theta_{n+1} - \Delta\psi_n)$$

数値計算スキームとして有用！

シミュレーションの例
ループソリトンの安定性

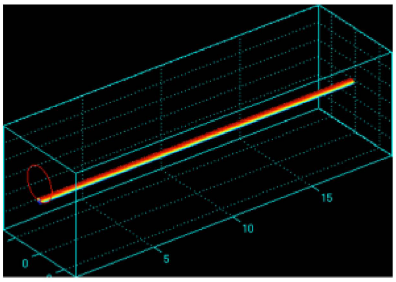
離散スキームによるシミュレーション

変形KdV方程式の厳密解（ループソリトン）に適当なたわみ波をぶつける



初期　衝突　すりぬけ、安定

先端が円運動する場合の運動（Helix）



材質は布. 長さ20m.（赤い円は運動の軌跡を描いたもの）

２次元物体の運動へ：膜の挙動

液滴の振動現象と分裂

$$\rho\frac{\partial\psi}{\partial t}+2\alpha H(\zeta)=0$$ H Mean curvature

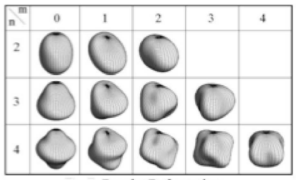
$$r(\theta,t)=R+\varepsilon Y_n^m\sin(\omega_n t)$$ Spherical harmonics

$$\omega^2=\frac{\alpha n(n-1)(n+2)}{\rho R^3}$$

Lamb oscillation frequency

非線形現象の解明が課題

回転・分裂問題



Droplet Deformation

セルオートマトン（CA）とは？

- 直訳すれば、、、「細胞＋自動機械」
- 0と1などを用いた、デジタルモデル化
  時間・空間・状態変数$\in\mathbf{Z}$ ＋ 更新ルール

- フォン＝ノイマンが考案（1950）
  計算機の故障に悩む
  ⇒ 自己修復、複製は可能か？
- ライフゲーム（1970）　ハッカー誕生
- ウルフラム　理論構築、物理応用、複雑系モデル化
- ラングトン　人工生命

ライフゲーム

バクテリアの生態系のシミュレーションモデル

		1
1	1	
	1	

自分の周囲に
1が1個以下なら死滅
（過疎状態）

1が2、3個の時はそのまま

1が4つ以上あれば死滅
（過密状態）

何もないセルの周りに1が3つあれば
そのセルは1になる
（最適状態、1の誕生）

デモ

セルオートマトン（CA）

	微分方程式	差分方程式	CA
独立変数（時間、位置）	連続	離散	離散
従属変数（物理量）	連続	連続	離散

偏微分方程式

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

$$\xrightarrow[u(t,n\Delta_x)\equiv u_n(t)]{x=n\Delta_x}$$

偏差分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}u_n(t)=\frac{1}{\Delta_x}\left(u_{n+1}(t)-u_n(t)\right)$$

$$t=\tau\Delta_t \quad u(\tau\Delta_t,n\Delta_x)\equiv u_n^\tau$$

差分方程式

$$\frac{1}{\Delta_t}\left(u_n^{\tau+1}-u_n^\tau\right)=\frac{1}{\Delta_x}\left(u_{n+1}^\tau-u_n^\tau\right)$$

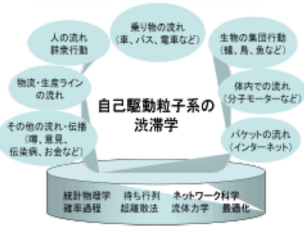
$$\xleftarrow{\Delta_t=\Delta_x}$$

CA

$$u_n^{\tau+1}=u_{n+1}^\tau$$

セルオートマトンの渋滞現象への応用

「渋滞学」の提唱

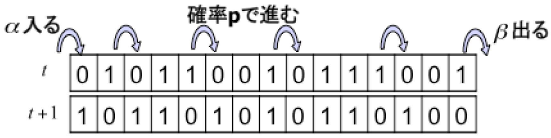


朝日新聞、読売新聞、日経新聞
など多数。
NHK 「爆笑問題の日本の教養」
NHK 「サイエンスZERO」
日本テレビ「世界一受けたい授業」
など多数。

渋滞を考えるための新しい数学

ASEP（非対称単純排除過程）
Asymmetric Simple Exclusion Process

ルール：前が空いているときだけ進む



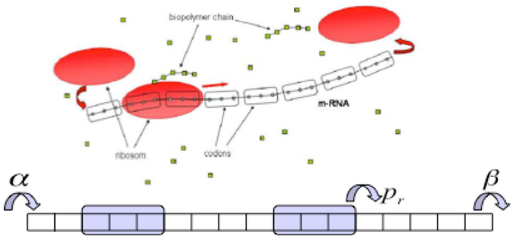
このモデルにより渋滞のできる様子が
より正確に分かるようになった（1993～）

ASEPをベースにして、車、アリ、人、神経などの渋滞を研究

ASEPは誰が考えたのか？

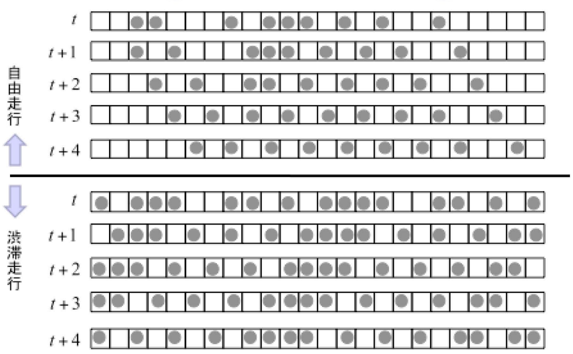
Macdonald & Gibbs, *Biopolymers*, vol.6 (1968) p.1.

mRNA上を動くリボゾームのたんぱく質合成機構のモデル



平均場近似により相分類まで計算されている

混んでいない時、混んでいる時

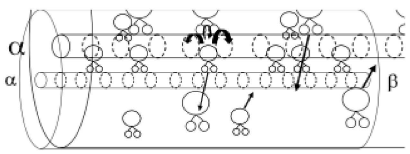


体の渋滞学
分子モーターの渋滞

神経の交通流

- 分子モーター＝車、微小管＝道路
  加水分解による能動的駆動
  渋滞が原因で様々な病気を引き起こす
- キネシン、ダイニンが主役
  微小管上を前進(ラチェット機構等)

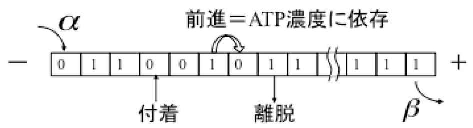
分子モーター「キネシン」のモデル化



微小管＝8nmのタンパク「格子」=CAそのもの！
分子モーター＝1回の加水分解で最大1格子分ホップする
微小管からの吸着と離脱がある

ASEP＋ラングミュアー運動

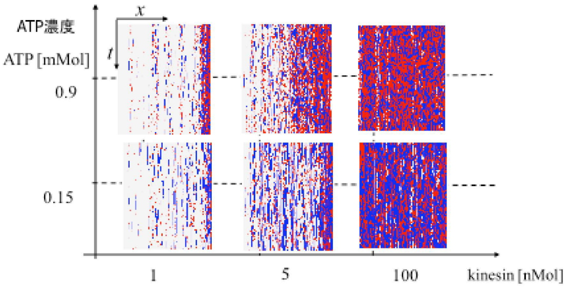
分子モーターの交通モデル



ルール
1）付着 0 ⟶ 1 ω_a
2）離脱 1 ⟶ 0 ω_d
3）前進 10 ⟶ 01 q

} ラングミュアー運動
⟶ ASEP

シミュレーション：キネシン濃度やATP濃度を変化



キネシン濃度が高くなると渋滞が発生している
ATP濃度が高くなるとお互い詰めやすい
渋滞長をATP濃度でコントロール

非線形数理の現実への応用例

美しい数理 ⇔（直接の応用）⇔ 重要応用課題

美しい数理	重要応用課題
• 不思議な予定調和を感じさせるようなもの • 普遍的な性質をもつもの • 恒等式 • パンルベ方程式、戸田格子、ソリトン理論 • 超幾何関数、直交多項式 • 表現論 • マルコフ過程 • 計算アルゴリズム • 微分幾何	• これまでほとんど数理など無関係の分野 • 重要で大金の絡む応用技術 スポーツ（ボブスレー） 交通渋滞、物流システム 生物集団行動 災害と避難 神経伝達とアルツハイマー （粘）弾性ひもの大変形問題

「厳密さ」と「直観」のバランス

おわりに：分野横断研究の重要性

- 今や研究上の諸課題は複合的
  ⇒ 多分野の協力が必要
- 一人の人間に多分野を詰め込む必要
  失敗例：プリンストン高等研究所
- 大学教育は専門性のみ重視
  単能型から多能型へ
  「T」ジェネラリストの養成
  専門性がないと「類推」が働かない