

散逸系粒子解ダイナミクスの最近の話題

京都大学 数理解析研究所 上田 肇一 (Kei-Ichi UEDA)

Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University
千歳科学技術大学 物質光科学科 寺本 敬 (Takashi TERAMOTO)

Department of Photonics Material Science, Chitose Institute of Science and Technology

北海道大学 電子科学研究所 西浦 廉政 (Yasumasa NISHIURA)

Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University

1 はじめに

近年, 反応拡散系においては定常的な周期パターンに加え複雑時空間パターンや自己相似パターンといった遷移パターンが注目されている. 遷移パターンが発生するメカニズムを理解するためには Turing 不安定性に代表される定数定常解からのパターンの出現メカニズムのみならず, スポットパターンや縞状パターンといった局在パターン同士の相互作用を理解することが重要である. これまでの研究においてはパルス同士が速い速度で対衝突する場合など強い相互作用によってみられる散乱パターンを扱ってきた. Gray-Scott モデルや複素 Ginzburg-Landau 方程式においてはコントロールパラメータの変化によって散乱パターンが反射から対消滅へと変化する際に, 解は分水嶺解と呼ばれる不安定定常解や不安定周期解に近づくことを数値実験によって示した [4][5].

ここでは次の 3 変数反応拡散系にみられる散乱パターンについて考察する.

$$\begin{aligned}u_t &= D_u u_{xx} + k_2 u - u^3 - k_3 v - k_4 w + k_1, \\ \tau v_t &= D_v v_{xx} + u - \gamma v, \\ \theta w_t &= D_w w_{xx} + u - w.\end{aligned}\tag{1}$$

この方程式はガス放電系において導出された方程式である [6]. ここではパラメータは $D_u = 5.0 \times 10^{-5}$, $k_1 = -3.0$, $k_2 = 2.0$, $k_3 = 2.0$ に固定する. 数値シミュレーションは空間刻み $dx = 5.0 \times 10^{-3}$, 時間刻み $dt = 1.0 \times 10^{-3}$ とした. この方程式においては図 1, 図 4, 図 7 のように対衝突によって反射, 融合, 対消滅といった現象がみられる. 第 2 章では散乱パターンが変化するパラメータで分水嶺解が現れることを数値実験によって示す. 第 3 章では図 7 のような弱い相互作用による反射, 対消滅現象を扱う. ピッチフォーク分岐点近傍の弱い相互作用によってみられる反射現象については [2] において研究されている. ここではピッチフォーク分岐に加え Hopf 分岐点が現れることによって弱い相互作用でも対消滅がみられることを数値的に示し, その仕組みを縮約理論を用いて考察する.

2 強い相互作用

パラメータを $D_w = 0.01$, $k_4 = 2.4$, $\gamma = 2.5$, $\tau = 900$, $\theta = 1.0$ とし, D_v をコントロールパラメータとすると反射, 融合, 対消滅がみられる. 初期状態として 2 つのパルスを十分離れた

位置に配置し、パルスの衝突実験を行った。 D_v を 1.3×10^{-3} 程度にとると反射がみられるが、 $D_v = 1.282 \times 10^{-3}$ 付近で衝突後のパターンが融合へと変化する。(図1)。パルスは融合したのちしばらく1山の状態であるが、やがて左か右のどちらかに伝播する。融合した後どちらの方向に伝播するかは初期値の微小な違いに依存する。

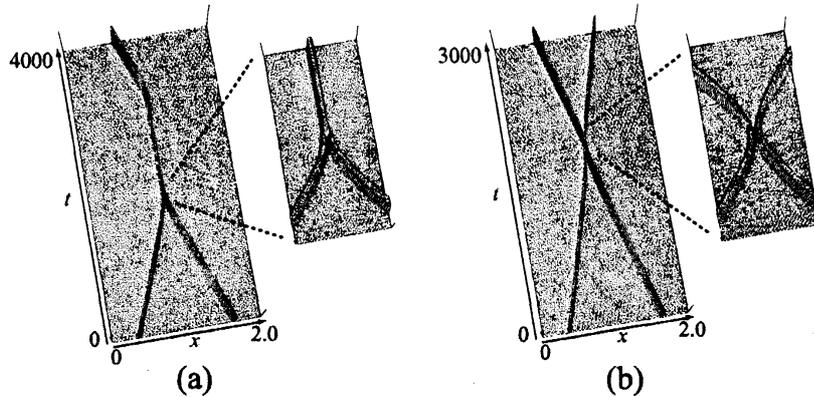


図1: (a) 融合 $D_v = 1.28208 \times 10^{-3}$, (b) 反射 $D_v = 1.28209 \times 10^{-3}$. u のみ表示。

ここで反射と融合を隔てるぎりぎりのパラメータにおいて解の様子をみるとある双角解に近づくことがわかる。数値シミュレーションによって解が双角解に十分近づいたときの状態を初期値としてNewton法を用いるとその双角解は不安定次元2の定常解であることがわかる(図2(a))。2つパルスが衝突する時点では解の形はほぼ左右対称となっているため衝突後の解の挙動において ϕ_2 の不安定成分は殆ど無視できる。つまり ϕ_1 方向の不安定成分が支配的になる。実際、双角不安定解に正(負)の摂動を加えると融合(反射)する様子が再現される(図2(e)(f))。つまり、双角解が分水嶺解の役割をしていることがわかる。

図3(a)は融合後の1山パルス解と双角解(分水嶺解)に関する分岐図である。Hopf分岐はサブクリティカルに起き、不安定な振動パルス解が現れる。分岐点近くにおけるフローを模式的に表すと図3(b)のようになる。 D_v をさらに小さくすると、対衝突後のパターンが融合から対消滅へと変化する。対衝突後のパターンが変化するパラメータ値に近い値で変化を調べると図4のようになることがわかる。 $D_v = 2.9480 \times 10^{-4}$ では融合し、 $D_v = 2.9465 \times 10^{-4}$ では融合した後に単角解(図3の単角解の枝の下側に対応する解)に近づき、一度パルスの幅が膨らんだ後消滅する。 $D_v = 2.9450 \times 10^{-4}$ では単角解に近づき、膨らむことなく消滅する。融合と対消滅を分けるパラメータはHopf分岐点の右側(図3(b)C)であり、シミュレーションで確認されるこれらの現象はHopf分岐点近くのフローに対応していることがわかる(図4)。単角解に対して摂動実験を行っても同様に一旦幅が膨らんでから消滅する場合と膨らまずに消滅する場合が再現され、単角解が分水嶺解の役割をしていることがわかる。(図5)

このように反射から融合、融合から対消滅へと散乱パターンが定性的に変化するときには解は不安定定常解の近くを通り、その不安定定常解から延びている不安定多様体の行き先が衝突後のパターンを決定していることがわかる。

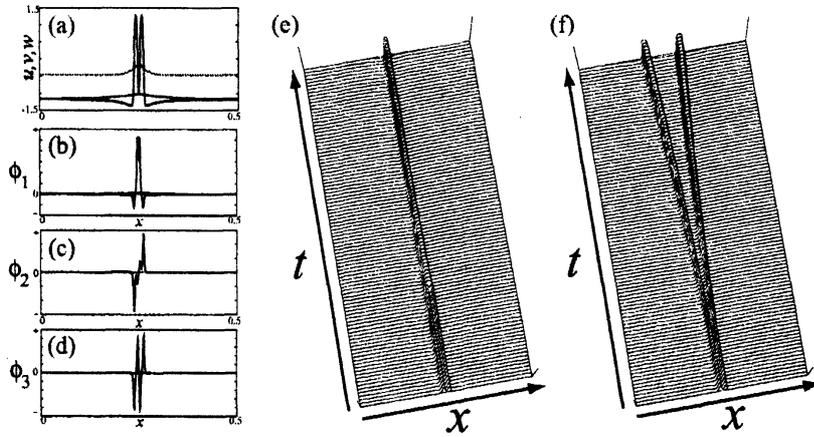


図 2: (a) 双角型分水嶺解 $D_v = 1.28208 \times 10^{-3}$. (b) 第一固有値 ($\lambda_1 = 3.442044 \times 10^{-1}$) に対する固有関数, (c) 第二固有値 ($\lambda_2 = 4.338311 \times 10^{-2}$) に対する固有関数, (d) Goldstone モード. 実線: u 成分. 点線: v 成分. 破線: w 成分. (e)((f)) 摂動実験. (a) に ϕ_1 の正(負)の摂動を加えたときの反応.

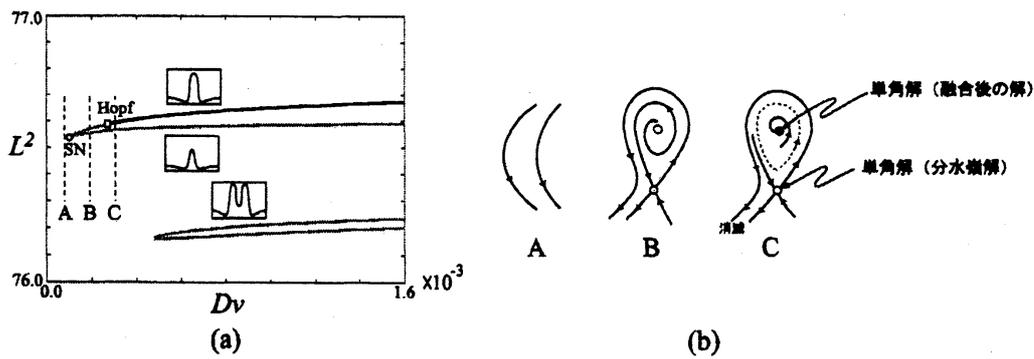


図 3: (a) 単角定常解 (上) と双角定常解 (下) に関する枝. 黒線は並進モードの不安定モードを持つ不安定次元 1 の定常解. 灰線は不安定次元 2 以上の定常解. SN はサドル・ノード分岐点, Hopf は Hopf 分岐点を示す. (b) 単角定常解のサドル・ノード分岐点近くのフロー.

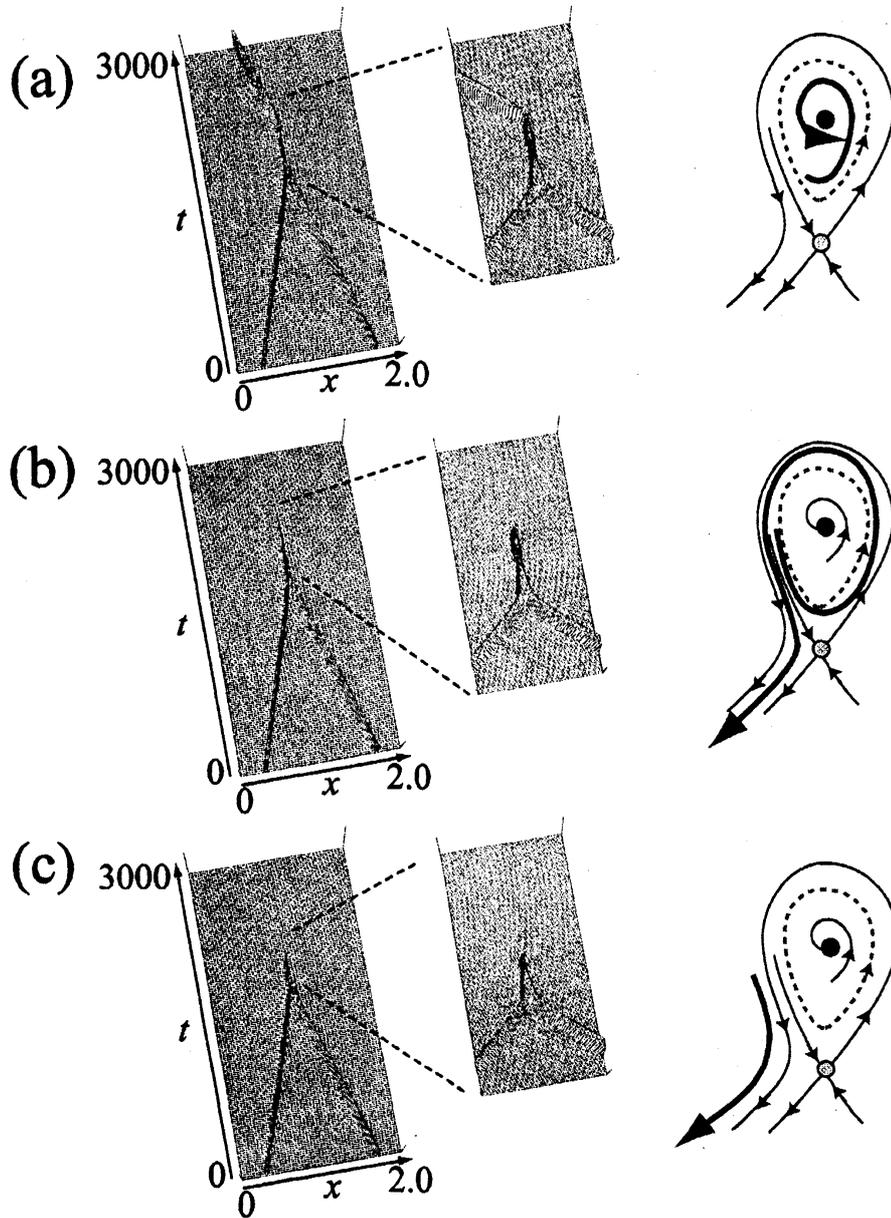


図 4: (a) 融合 ($D_v = 2.9480 \times 10^{-4}$). (b) 膨らんだ後消滅 ($D_v = 2.9465 \times 10^{-4}$). (c) 対消滅 ($D_v = 2.9450 \times 10^{-4}$). 右図はそれぞれの場合に対応した融合後の模式的な解の流れ. (図 3(b)C 参照)

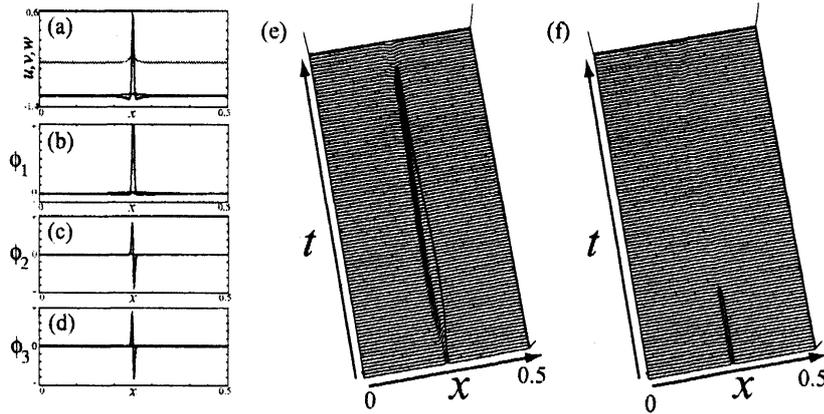


図 5: (a) 単角型の分水嶺解 ($D_v = 2.945 \times 10^{-4}$). (b) 最一固有値 ($\lambda_1 = 1.119969$) に対する固有関数. (c) 第二固有値 ($\lambda_2 = 3.337082 \times 10^{-2}$) に対する固有関数. (d) Goldstone モード. (e)((f)) 摂動実験. ϕ_1 の正 (負) 方向の摂動を加えたときの反応.

3 弱い相互作用

3.1 1山パルスの分岐構造

パラメータを $D_v = 6.5 \times 10^{-3}$, $D_w = 7.5 \times 10^{-3}$, $\gamma = 8.0$, $\theta = 10.0$ とする. τ, k_4 をコントロールパラメータにとる. 図 6 は (k_4, τ) をパラメータにとったときの相図である. 1山パルスのピッチフォーク分岐と Hopf 分岐が同時に起きる複合分岐点 (PH 点) が存在することがわかる. 図 6 のパラメータの範囲においてはピッチフォーク分岐はスーパークリティカル, Hopf 分岐はサブクリティカルに起きる. 注目すべき点は τ が PH 点より上の範囲ではピッチフォーク分岐点の近くにおいて (速度の遅い) パルスが反射 (領域 III) だけではなく対消滅 (領域 IV) する様子がみられる点である (図 7).

3.2 1山パルスのダイナミクス

非融合現象の対消滅と反射がみられるパラメータ領域はピッチフォーク分岐と Hopf 分岐が同時に起きる点近くでみられることがシミュレーションによってわかった. ここでは縮約理論 [1][2] を適用することで, 複合分岐点近くにおける 1山パルス解の分岐構造を調べ, なぜ弱い相互作用によって対消滅が起きるかについて考察する.

次のような N 変数反応拡散方程式について考察する.

$$u_t = Du_{xx} + F(u; k). \quad (2)$$

ここで $X := \{L^2(\mathbb{R})\}^N$, $u = (u_1, u_2, \dots, u_N) \in X$, $F: X \rightarrow X$ は滑らかな関数, $k = (k_1, k_2) \in \mathbb{R}^2$ をコントロールパラメータ, D は非負の対角成分を持つ対角行列とする.

S1) $\tilde{k} = (\tilde{k}_1, \tilde{k}_2) \in \mathbb{R}^2$ を Hopf 分岐とピッチフォーク分岐が同時に起きるパラメータとする. また (2) において定常 1 山パルス解 $S(x)$ が存在し, $S(x) = S(-x)$ を満たす.

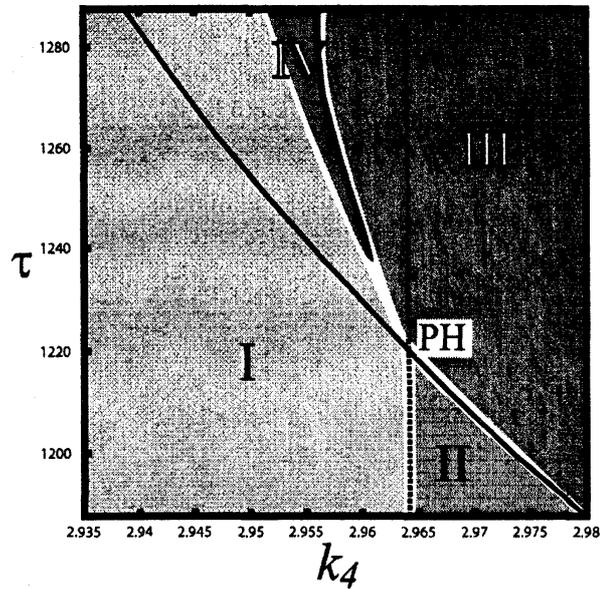


図 6: k_4 - τ をパラメータにとったときの相図. 実線 (点線) はピッチフォーク分岐点 (Hopf 分岐点). PH はピッチフォーク分岐と Hopf 分岐が同時に起きる点. I: 解は定数定常解に収束する. II: 安定定常パルス解が存在しトラベリングパルスは存在しない. III: 2つのパルスが対衝突した後に反射する. IV: 2つのパルスが対衝突した後に対消滅する.

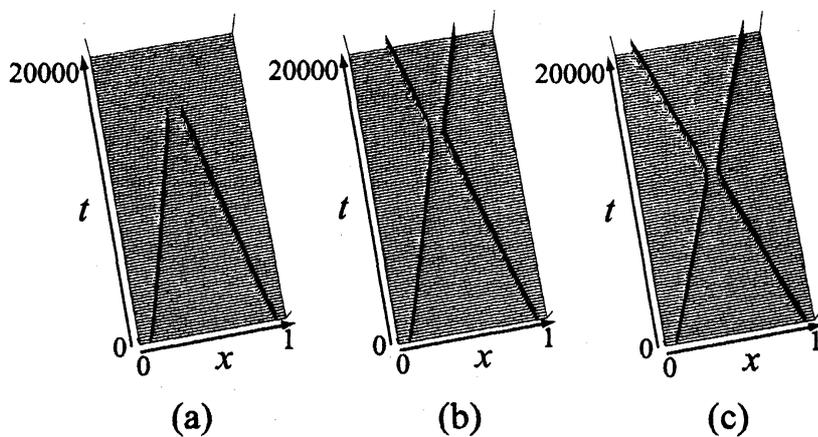


図 7: $\tau = 1262.5$ のときの散乱パターン. (a) 対消滅 ($k_4 = 2.956$). (b) 反射 ($k_4 = 2.96$). (c) 反射 ($k_4 = 2.97$).

$\mathcal{L}(\mathbf{u}; \mathbf{k}) := D\mathbf{u}_{xx} + F(\mathbf{u}, \mathbf{k})$, $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \boldsymbol{\eta} = (\tilde{k}_1 + \eta_1, \tilde{k}_2 + \eta_2)$ とすると (2) は

$$\mathbf{u}_t = \mathcal{L}(\mathbf{u}; \tilde{\mathbf{k}}) + \boldsymbol{\eta} \cdot g(\mathbf{u}; \boldsymbol{\eta}). \quad (3)$$

ただし, $\boldsymbol{\eta} \cdot g(\mathbf{u}; \boldsymbol{\eta}) = \mathcal{L}(\mathbf{u}; \tilde{\mathbf{k}} + \boldsymbol{\eta}) - \mathcal{L}(\mathbf{u}; \tilde{\mathbf{k}})$, $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$, $g(\mathbf{u}) = (g_1(\mathbf{u}), g_2(\mathbf{u}))$ となる. $L = \mathcal{L}'(S(x); \tilde{\mathbf{k}})$ とする. ピッチフォーク分岐と Hopf 分岐に関する固有値に対応する固有関数をそれぞれ ψ , ξ とし, それらは $L\psi = -S_x$ と $L\xi = i\omega_0\xi$ ($\omega_0 \in \mathbb{R}^+$) をみたす. L^* を L の共役作用素とすると $L^*\phi^* = 0$, $L^*\psi^* = -\phi^*$, $L^*\xi^* = -i\omega_0\xi^*$ となるような ϕ^*, ψ^*, ξ^* が存在する. $\psi, \xi, \phi^*, \psi^*, \xi^*$ は

$$\langle \psi, S_x \rangle_{L^2} = 0, \langle S_x, \psi^* \rangle_{L^2} = 1, \langle \psi, \psi^* \rangle_{L^2} = 0, \langle \xi, \xi^* \rangle_{L^2} = 1$$

を満たすように正規化する. またこのとき

$$\langle \psi, \phi^* \rangle_{L^2} = 1, \langle S_x, \phi^* \rangle_{L^2} = 0$$

が成り立つ. 固有関数に関して次のような空間対称性を仮定する.

S2) Hopf 分岐に関する不安定モードは偶関数, ピッチフォーク分岐に対応する不安定モードは奇関数とする. つまり,

$$\langle \psi, \xi^* \rangle = 0, \langle S_x, \xi^* \rangle = 0$$

が成り立つ.

$E_1 = \text{span}\{P_x, \psi\}$, $E_2 = \text{span}\{\xi, \bar{\xi}\}$ とする. $q \in \mathbb{R}$, $r \in \mathbb{C}$ を新たな変数, η_1, η_2 は十分小さなパラメータとし

$$\mathbf{u}(x, t) = S(x - p) + q\psi(x - p) + (r\xi(x - p) + c.c.) + \zeta(x - p) + \mathbf{w} \quad (4)$$

(c.c. は複素共役) と表す. ただし,

$$\zeta = q^2\zeta_{2000} + (r^2\zeta_{0200} + qr\zeta_{1100} + c.c.) + |r|^2\zeta_{0110} + \eta_1\zeta_{0001} + \eta_2\zeta_{0002}$$

とし, E_1, E_2 に直交する ζ_{ijkl} を関数で次の方程式を満たすようなものとする.

$$\begin{aligned} L\zeta_{2000} + \Pi_{2000} &= \alpha_{2000}\xi + \bar{\alpha}_{2000}\bar{\xi}, \\ (L - 2i\omega_0 I)\zeta_{0200} + \Pi_{0200} &= \alpha_{0200}\xi + \bar{\alpha}_{0200}\bar{\xi}, \\ (L - i\omega_0 I)\zeta_{1100} + \Pi_{1100} &= \alpha_{1100}\psi + \alpha'_{1100}\phi, \\ L\zeta_{0110} + \Pi_{0110} &= \alpha_{0110}\xi + \bar{\alpha}_{0110}\bar{\xi}, \\ L\zeta_{0001} + \Pi_{0001} &= \alpha_{0001}\xi + \bar{\alpha}_{0001}\bar{\xi}, \\ L\zeta_{0002} + \Pi_{0002} &= \alpha_{0002}\xi + \bar{\alpha}_{0002}\bar{\xi}. \end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned} \Pi_{2000} &= \frac{1}{2}F'''(S)\psi^2 + \psi_x, & \Pi_{0200} &= \frac{1}{2}F'''(S)\xi^2, & \Pi_{1100} &= F'''(S)\psi \cdot \xi + \xi_x, \\ \Pi_{0110} &= F''(S)\xi \cdot \bar{\xi}, & \Pi_{0001} &= g_1(S), & \Pi_{0002} &= g_2(S). \end{aligned}$$

$\alpha_{jklm} \in \mathbb{C}$ は次の方程式を満たす.

$$\begin{aligned} \langle \Pi_{2000} - \alpha_{2000}\xi, \xi^* \rangle_{L^2} &= 0, & \langle \Pi_{0200} - \alpha_{0200}\xi, \xi^* \rangle_{L^2} &= 0, & \langle \Pi_{1100} - \alpha_{1100}\psi, \phi^* \rangle_{L^2} &= 0, \\ \langle \Pi_{1100} - \alpha'_{1100}\phi, \psi^* \rangle_{L^2} &= 0, & \langle \Pi_{0110} - \alpha_{0110}\xi, \xi^* \rangle_{L^2} &= 0, & \langle \Pi_{0001} - \alpha_{0001}\xi, \xi^* \rangle_{L^2} &= 0, \\ \langle \Pi_{0002} - \alpha_{0002}\xi, \xi^* \rangle_{L^2} &= 0, & \alpha_{0020} &= \bar{\alpha}_{0200}, & \alpha_{1010} &= \bar{\alpha}_{1010}, & \alpha_{1010} &= \bar{\alpha}_{1100}. \end{aligned}$$

w に関して次を仮定する.

S3) $w \in E_1^\perp$ かつ $w \in E_2^\perp$ であり, $\|w\|_{L^2}, \|w_x\|_{L^2} \leq O(|q|^3 + |r|^3 + |\eta|^{3/2})$ をみたとす.

(4) を (3) に代入した後, 両辺を ψ^*, ϕ^*, ξ^* で内積をとると

$$\begin{aligned} \dot{p} &= q + (\alpha'_{1100}qr + c.c.) + (m_{1200}qr^2 + c.c.) \\ &\quad + m_{3000}q^3 + m_{1110}q|r|^2 + m_{1001}q\eta_1 + m_{1002}q\eta_2 + h.o.t., \\ \dot{q} &= g_{1001}q\eta_1 + g_{1002}q\eta_2 + (\alpha_{1100}qr + c.c.) \\ &\quad + g_{3000}q^3 + (g_{1200}qr^2 + c.c.) + g_{1110}q|r|^2 + h.o.t., \\ \dot{r} &= i\omega r + \alpha_{0001}\eta_1 + \alpha_{0002}\eta_2 + (g_{0101}r\eta_1 + c.c.) + (g_{0102}r\eta_2 + c.c.) \\ &\quad + \alpha_{2000}q^2 + (\alpha_{0200}r^2 + c.c.) + \alpha_{0110}|r|^2 + (h_{2100}q^2r + c.c.) \\ &\quad + (h_{0300}r^3 + c.c.) + (h_{0210}r|r|^2 + c.c.) + h.o.t., \end{aligned} \tag{5}$$

が得られる. ここで $m_{ijkl}, g_{ijkl}, h_{ijkl} \in \mathbb{C}$ は定数である.

適当な変数変換によって (5) は次のようにかける.

$$\begin{aligned} \dot{v} &= G_{1001}\eta_1 v + G_{1002}\eta_2 v + G_{3000}v^3 + G_{1110}v|w|^2, \\ \dot{w} &= i\omega w + H_{0101}\eta_1 w + H_{0102}\eta_2 w + H_{2100}v^2 w + H_{0210}w|w|^2. \end{aligned} \tag{6}$$

ここで $G_{ijkl}, H_{ijkl} \in \mathbb{C}$ である. また $w = Ae^{i\varphi}$ ($A, \varphi \in \mathbb{R}$) とし (6) に代入すると

$$\begin{aligned} \dot{\varphi} &= \omega_0 + \mu'_2 + h.o.t., \\ \dot{v} &= (-\mu_1 + p_{11}v^2 + p_{12}A^2)v + h.o.t., \\ \dot{A} &= (-\mu_2 + p_{21}v^2 + p_{22}A^2)A + h.o.t., \end{aligned} \tag{7}$$

が得られる. ここで $p_{11} = \text{Re}G_{3000}$, $p_{12} = \text{Re}G_{1110}$, $p_{21} = \text{Re}H_{2100}$, $p_{22} = \text{Re}H_{0210}$. $\mu_1 = -\text{Re}G_{1001}\eta_1 - \text{Re}G_{1002}\eta_2$, $\mu_2 = -\text{Re}H_{0101}\eta_1 - \text{Re}H_{0102}\eta_2$, $\mu'_2 = -\text{Im}H_{0101}\eta_1 - \text{Im}H_{0102}\eta_2$ である.

(7) の主要部のダイナミクスを調べる. 第 2, 第 3 式は φ と独立なのでここからは

$$\begin{aligned} \dot{v} &= (-\mu_1 + p_{11}v^2 + p_{12}A^2)v, \\ \dot{A} &= (-\mu_2 + p_{21}v^2 + p_{22}A^2)A, \end{aligned} \tag{8}$$

について考察する. 図 6 の PH 点 ($\mu_1 = \mu_2 = 0$) におけるパルス解から固有関数を数値的に求め係数 p_{ij} ($i, j = 1, 2$) を計算すると次の条件をみたとす.

$$p_{12}/p_{22} > 0, \quad p_{21}/p_{11} > 0, \quad p_{12}p_{21}/p_{11}p_{22} < 1, \quad p_{11} < 0.$$

この条件を満たすとき (8) に関して図 8 の phase portrait が得られる [3]. $\mu_1 = 0$ において $v \neq 0$ の定常解が分岐し, $\mu_2 = 0$ において $A \neq 0$ の定常解が分岐する. $\mu_2 \geq 0$ においては

$$EP_1^\pm : (v, A) = (0, \pm \sqrt{\frac{\mu_2}{p_{22}}})$$

の解が存在し, $\mu_1 \leq 0$ においては

$$EP_2^\pm : (v, A) = (\pm \sqrt{\frac{\mu_1}{p_{11}}}, 0)$$

が存在する. これらの定常解から $v \neq 0$ かつ $A \neq 0$ の解が

$$T_1 = \{(\mu_1, \mu_2) \mid \mu_1 = \frac{p_{12}}{p_{22}} \mu_2, \mu_2 > 0\}$$

と

$$T_2 = \{(\mu_1, \mu_2) \mid \mu_2 = \frac{p_{21}}{p_{11}} \mu_1, \mu_1 < 0\}$$

で分岐する. つまり, 図8の2,3,4の領域では

$$EP_3^{\pm, \pm} : (v, A) = \left(\pm \sqrt{\frac{-p_{12}\mu_2 + p_{22}\mu_1}{p_{11}p_{22} - p_{12}p_{21}}}, \pm \sqrt{\frac{-p_{21}\mu_1 + p_{11}\mu_2}{p_{11}p_{22} - p_{12}p_{21}}} \right)$$

の解が存在する. 図8と(1)の数値シミュレーションによって得られた分岐図を比較する. 変数変換の仕方から $v \neq 0$ の定常解はトラベリングパルス, $A \neq 0$ の定常解は振動パルスに対応する. つまり $v \neq 0, A \neq 0$ の解は振動トラベリングパルスに対応する. (μ_1, μ_2) を図8(a)において $6 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$ と変化させることで図8(b), $6 \rightarrow 5 \rightarrow 4$ と変化させることによって図8(c)の分岐図が得られる. IIの場合パラメータが T_2 に近づくにつれて安定トラベリングパルスに関する basin が狭くなることが確認できる. 弱い相互作用によって対消滅が起きる理由として, 安定単独トラベリングパルスの basin が狭くなることによって弱い相互作用によっても不安定化を起しやすくなっている点が挙げられる. 2つのパルスの相互作用を考慮に入れた常微分方程式を導出し, パルス同士が接近することで対消滅に至る過程を明らかにすることは今後の課題である.

参考文献

- [1] S. -I. EI, *The motion of weakly interacting pulses in reaction diffusion systems*, J.Dyn.Diff.Eqs., 14(1) (2002), pp. 85–137.
- [2] S. -I. EI, M. MIMURA AND M. NAGAYAMA, *Pulse-pulse interaction in reaction-diffusion systems*, Physica D, 165 (2002), pp. 176–198.
- [3] Y. A. KUZNETSOV, *Elements of Applied Bifurcation Theory*, Springer, (1998).
- [4] Y. NISHIURA, T. TERAMOTO AND K. -I. UEDA, *Scattering and separators in dissipative systems*, Phys. Rev. E 67 (2003), pp. 056210-1–056210-7.
- [5] Y. NISHIURA, T. TERAMOTO AND K. -I. UEDA, *Dynamic transitions through scatters in dissipative systems*, Chaos 13(3) (2003), pp. 962–972.
- [6] H. -G. PURWINS, YU. A. ASTROV AND I. BRAUER, *Proceedings of the Fifth Experimental Chaos Conference*, edited by M. Ding, W. L. Ditto, L. M. Pecora and M. L. Spano (World-Scientific, Singapore, 2001), pp. 3.–13.

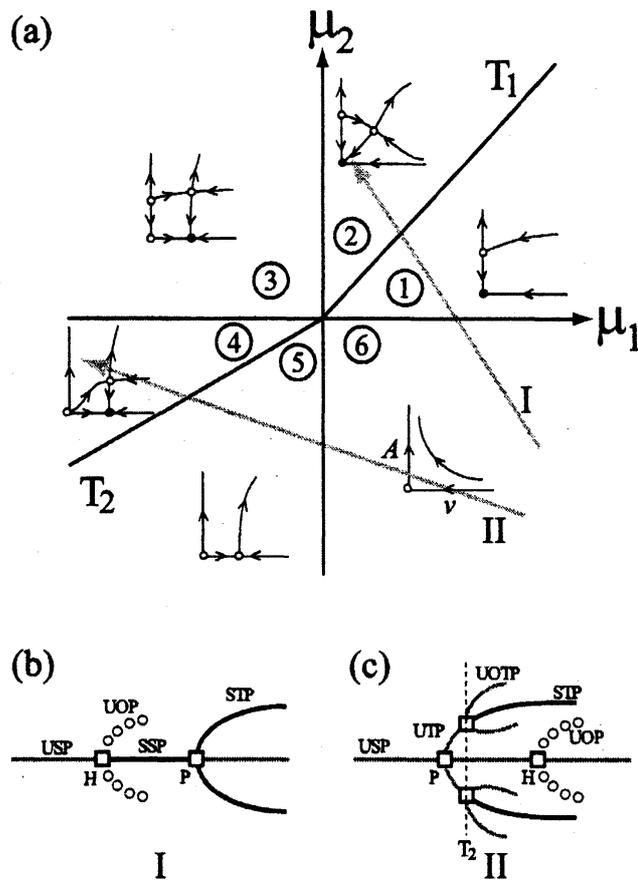


図 8: (a) μ_1 - μ_2 に関する分岐図と解のフローの模式図. (b)((c)) パラメータを I(II) のように変化させたときの模式的な分岐図. SSP:安定定常パルス. USP:不安定定常パルス. STP:安定トラベリングパルス. UTP:不安定トラベリングパルス. UOTP:不安定振動トラベリングパルス. UOP:不安定振動パルス.