

講義ノート**パターン形成の数理**

広島大学大学院 理学研究科 小林 亮

記録係

京大・理・物理 加賀 雅文¹京大・理・物理 得田 英和²京大・基研 昌子 浩登³

(2005 年 9 月 5 日受理)

本講義ノートは 2005 年 6 月 15 日から 17 日に、京都大学大学院理学研究科で行われた、広島大学大学院理学研究科小林亮先生による集中講義「パターン形成の数理」をまとめたものである。本講義では、パターン形成の数理について、反応拡散系を中心に、具体例を踏まえ授業を進めていただいた。また数多くの動画やイラストを用い、視覚的にも理解しやすく展開していただいた。反応拡散系のみならず、さまざまな現象に応用可能なフェイズフィールドモデルや、生物に見られるフィボナッチ数列に関する話題も含まれ、自然のパターン形成メカニズムをどのように捉え、研究を行うかを教示していただいた。また、授業中に見せていただいた動画を Web に載せた。(URL <http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~busseied/lecture.note/kobayashi/index.html>) を適宜参照してください。

目 次

1 平衡点の安定性	462
1.1 平衡点	462
1.2 安定性	463
1.3 1次元の場合	464
1.4 多次元の場合	464
2 拡散現象 (不可逆な過程)	465
2.1 ランダムウォークから拡散方程式	465
2.2 拡散方程式のシミュレーション	469

¹E-mail: kaga@yukawa.kyoto-u.ac.jp²E-mail: tokuda@yukawa.kyoto-u.ac.jp³E-mail: shoji@yukawa.kyoto-u.ac.jp

3 反応拡散系: Turing 不安定性	471
3.1 反応拡散系の初歩	471
3.2 チューリングパターン (拡散が空間非一様性を創る!?)	473
3.3 興奮場 (Excitable Media) – FitzHugh-Nagumo 方程式	475
4 フェイズフィールド入門	477
4.1 フェーズフィールド	477
4.2 エネルギー形式	478
4.3 汎関数微分と勾配系	479
4.4 Allen-Cahn 方程式	480
4.5 空間 2 次元・3 次元の場合	483
4.6 シミュレーション	485
5 フィボナッチ数列と黄金比と葉序 -三題噺-	486
5.1 フィボナッチ数列	486
5.2 黄金比	486
5.3 松ぼっくり	489
6 無理数の連分数展開	492
6.1 斜列線	492
6.2 有理数の連分数展開	493
6.3 無理数の連分数展開	494
6.4 メビウス変換	495

1 平衡点の安定性

後の章の準備として本章では、平衡点の安定性について基本的な概念と方法について説明する。

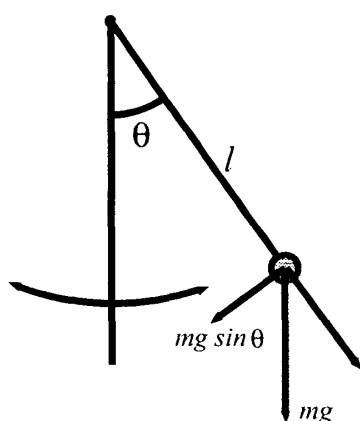
1.1 平衡点

常微分方程式系

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad \mathbf{u}(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_n(t) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} f_1(u_1, \dots, u_n) \\ \vdots \\ f_n(u_1, \dots, u_n) \end{pmatrix} \quad (1)$$

を考える。 $\mathbf{f}(\mathbf{u}_0) = 0$ を満たすような定数ベクトル $\mathbf{u}_0$ があれば、 $\mathbf{u}(t) \equiv \mathbf{u}_0$ は $\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ の解である。

この $\mathbf{u}_0$ を、常微分方程式系 $\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ の **平衡点** という。



例 抵抗力を受ける単振り子

$$ml \frac{d^2\theta}{dt^2} = -mg \sin \theta - kl \frac{d\theta}{dt} \quad (2)$$

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -a \sin \theta - b \frac{d\theta}{dt} \quad (3)$$

ただし $a = \frac{g}{l}, b = \frac{k}{m}$ である。

ここで $u = \theta, v = \frac{d\theta}{dt}$ とおくと、

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = v \\ \frac{dv}{dt} = -a \sin u - bv \end{cases} \quad (4)$$

Exercise 1.1 上の (u, v) に関する常微分方程式系のすべての平衡点 (u_0, v_0) を求めよ。

1.2 安定性

平衡点から出発した解は、未来永劫そこにいる。では、平衡点からほんの少し離れた初期値から出発した解はどうなるのだろうか？

定義

平衡点の近傍から出発した解が

- 必ず平衡点に収束する $\implies$ 平衡点は漸近安定
- 必ず平衡点の近くにいる $\implies$ 平衡点は安定

定義

- 平衡点が安定でない $\implies$ 平衡点是不安定

Exercise 1.2 前ページの抵抗力を受ける単振り子の系の平衡点の安定性を物理的に考えてみよ。

1.3 1次元の場合

$\frac{du}{dt} = f(u)$ が平衡点 u_0 を持つとする。すなわち $f(u_0) = 0$ が成立するとする。
 u が u_0 に近ければ、

$$f(u) = f(u_0) + f'(u_0)(u - u_0) + O(|\varphi|^2) \quad (5)$$

$\varphi(t) = u(t) - u_0$ とおくと、

$$\frac{d\varphi}{dt} = f'(u_0)\varphi + O(|\varphi|^2) \quad (6)$$

ここで、 $\varphi(t)$ が十分に小さければ、 $O(|\varphi|^2)$ の項は 1 次の項に比べて無視できる。このように 2 次以上の項を無視して得られた方程式

$$\frac{d\varphi}{dt} = f'(u_0)\varphi \quad (7)$$

を $\frac{du}{dt} = f(u)$ の平衡点 u_0 における **線形化方程式** という。

平衡点の安定性の判定

- $f'(u_0) < 0 \implies u_0$ は漸近安定
- $f'(u_0) > 0 \implies u_0$ は不安定

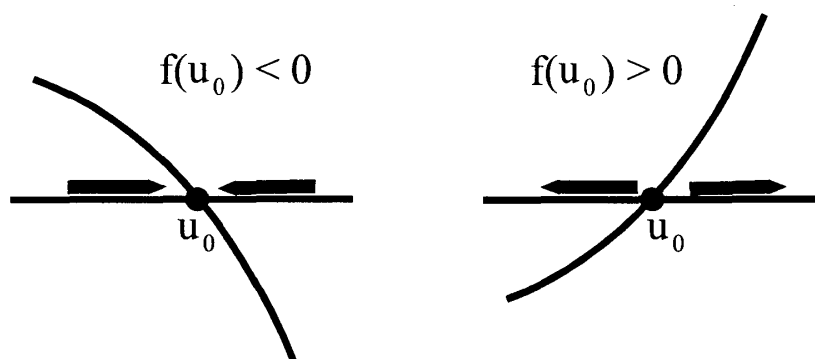


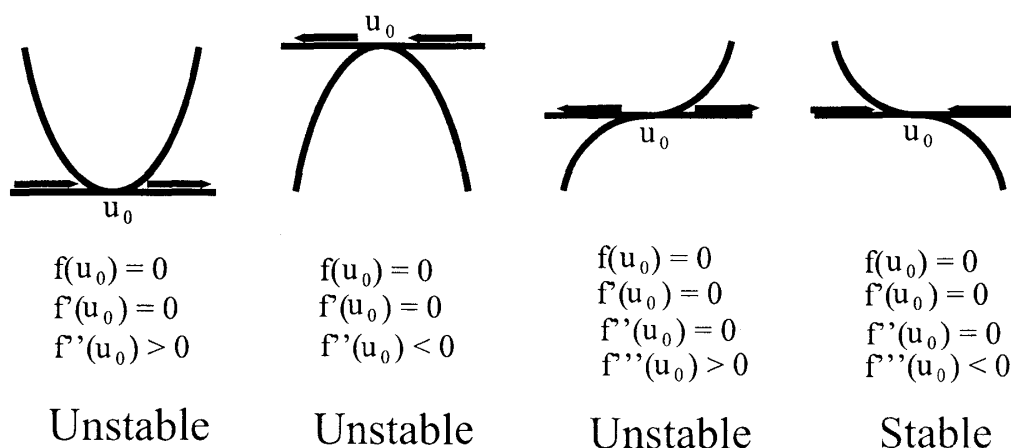
図 1: 平衡点 u_0 近傍での様子

[注] $f'(u_0) = 0$ ならば、さらに高階の微分係数の情報が必要である。

1.4 多次元の場合

$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$ が平衡点 $\mathbf{u}_0$ を持つとする。すなわち $\mathbf{f}(\mathbf{u}_0) = \mathbf{0}$ が成立するとする。
 $\mathbf{u}$ が $\mathbf{u}_0$ に近ければ、

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}) = \mathbf{f}(\mathbf{u}_0) + \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}_0)(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0) + O(|\mathbf{u} - \mathbf{u}_0|^2) \quad (8)$$



$\varphi(t) = u(t) - u_0$ と置くと、

$$\frac{d\varphi}{dt} = A\varphi + O(|\varphi|^2) \quad (9)$$

ただし、 $A = \frac{\partial f}{\partial u}(u_0)$: 平衡点でのヤコビ行列

1次元のときと同様 $|\varphi|$ が小さい限り、 φ の挙動は線形化方程式

$$\frac{d\varphi}{dt} = A\varphi \quad (10)$$

で近似できるであろう。多次元の場合の安定性に関する定理は次のようになる。

定理

A : 平衡点 u_0 におけるヤコビ行列とする

- A の全ての固有値の実部が負 $\implies u_0$ は漸近安定
- A が一つでも実部が正の固有値を持つ $\implies u_0$ は不安定

2 拡散現象 (不可逆な過程)

反応拡散系の準備のため、この章では拡散方程式について考える。

2.1 ランダムウォークから拡散方程式

ミクロな粒子の運動を理想化したランダムウォークを描写し、その粒子の数が多くなればランダムさを含まない決定論的方程式拡散のマクロな描像につながることを示す。

一次元ランダムウォーク

図 2.1 のように一次元格子上的粒子が τ 秒ごとに等確率で距離 δ だけ右か左に動くとする。どちらに動くかは、それ以前の運動にはよらないとする。このとき、最初原点にいた I 個の粒子の有限時間後の平均の位置を考える。 n ステップ移動したとき、第 i 番目の粒子の位置 $x_i(n)$ 、 n ステッ

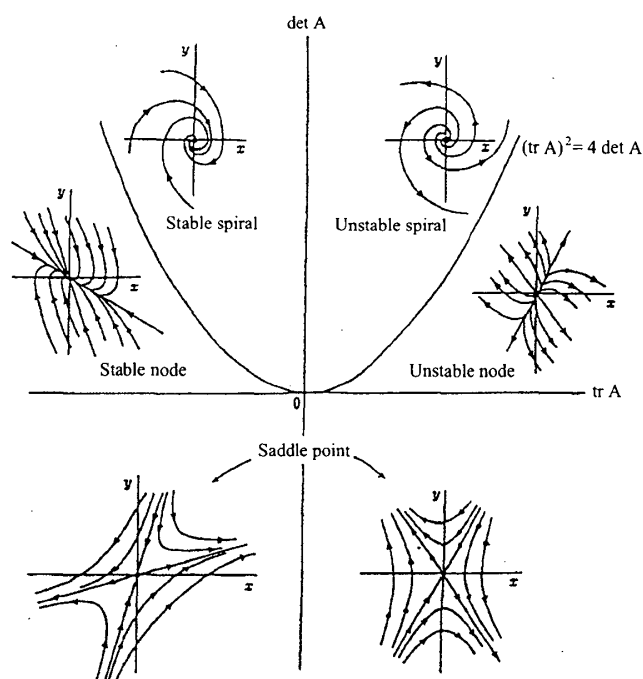


図 2: Mathematical Biology [2] より転載。

ブから $(n+1)$ ステップの間の粒子の変位を δ (確率 $1/2$ で +, 残り $1/2$ で -) で表すと、 $x_i(n)$ の時間発展は、

$$x_i(n) = x_i(n-1) \pm \delta \quad (11)$$

となる。 n ステップ移動した粒子の平均位置 $\langle x(n) \rangle = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I x_i(n)$ とする。粒子数 I が十分大きいとき $\langle x(n) \rangle$ は、

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I (x_i(n-1) \pm \delta) = \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I x_i(n-1) = \langle x(n-1) \rangle \quad (12)$$

が成り立つ。よって $\langle x(0) \rangle = 0$ のとき、 $\langle x(n) \rangle = 0$ になる。

Exercise 2.1 n ステップ移動した粒子の位置の分散 $\langle x(n)^2 \rangle$ が $\langle x(n)^2 \rangle = n\delta^2$ であることを確かめよ。

ここで、時間変数を $t = n\tau$ とおくと、 $\langle x(t)^2 \rangle = \frac{\delta^2}{\tau} t$ 。 $D = \frac{\delta^2}{2\tau}$ とおくと、 $\langle x(t)^2 \rangle = 2Dt$ が得られる。標準偏差 $\sigma(t) = \sqrt{2Dt}$ より、粒子数が十分大きい場合は、 D は拡散係数を表し、そのスケールは $[D] = L^2 T^{-1}$ と計算でき、粒子の広がり具合は $\sqrt{t}$ に比例することがわかる。

2 ボックスシステムから拡散方程式 (離散一次元版)

図 4(a) のように Box1 と Box2 とがつながっていて、その中を粒子がランダムに動き回るシステ

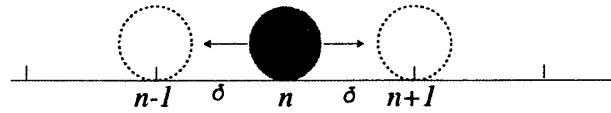


図 3: 一次元格子上的ランダムウォーク

ムを考える。それぞれの Box の粒子密度の時間経過を追跡すると、粒子の数が多いシステムでは、密度の揺らぎは小さくなることがわかる（Web 上のファイル参照）。アボガドロ数個のように極端に粒子数が多くなると、ランダムさを含まなくなり、決定論的方程式で記述できるようになる。これが、拡散のマクロな描像である。

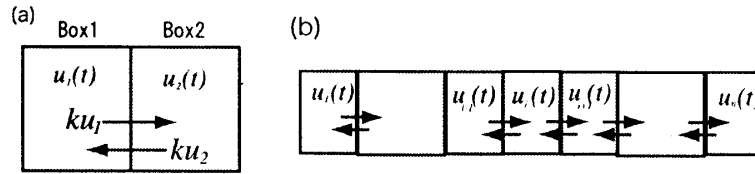


図 4: (a): 2 ボックスシステムの概念図。(b): I 個のボックスシステムの概念図。

図 4(b) のように、ある時刻 t での Box1,2 で粒子密度 $u_1(t), u_2(t)$ とする。単位時間あたり k の割合で移動するとき、時間変化は

$$\frac{du_1}{dt} = k(u_2 - u_1) \quad (13)$$

$$\frac{du_2}{dt} = k(u_1 - u_2) \quad (14)$$

と記述できる。ここで、初期値 $(u_1(0), u_2(0)) = (u_1^0, u_2^0)$ として、式 (13) と式 (14) を計算すると、 $u_1(t) + u_2(t)$ は保存され、十分時間が経つと u_1 と u_2 の差が 0 に近づくことがわかる。

この 2 ボックスシステムと同様に、図 4(b) のように一次元的に並んだ I 個のボックスシステムを考えると、

$$\frac{du_1}{dt} = k(u_2 - u_1) \quad (i = 1) \quad (15)$$

$$\frac{du_i}{dt} = k(u_{i-1} - u_i) + k(u_i - u_{i+1}) \quad (i = 2, 3, \dots, I-1) \quad (16)$$

$$\frac{du_I}{dt} = k(u_{I-1} - u_I) \quad (i = I) \quad (17)$$

と表せる。式 (16) は、 $\frac{du_i}{dt} = 2k\left(\frac{u_{i-1} + u_{i+1}}{2} - u_i\right)$ と見ると、拡散というのは隣接ボックスの平均値と自分自身の差を測って、隣接セルの平均値の方向に行こうとするダイナミクスであり、空間的な凹凸をなくそうとするメカニズムだとわかる。

Exercise 2.2 2次元離散拡散方程式を求め次元離散ラプラシアンの意味を考えよ。

拡散方程式 (一次元連続版)

前の章では、単位時間あたりボックスから出る物の個数と入ってくる個数を考えていた。ここで

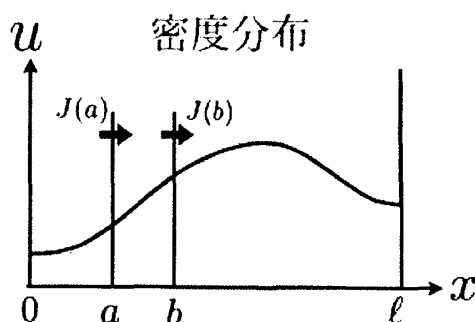


図 5: 流れの概念図

は、その出入りの差が正味の流れ（フラックス）だと考え、領域で物の密度が増加する方向を正として測ると、 $J = -D \frac{\partial u}{\partial x}$ と書ける。流れの大きさは、密度分布の勾配に比例するを考える。例えば、図のように適当な区間 $[a, b]$ での物の出入りを考えると、その区間での密度変化は、区間の境界から物が出て行く項と、入ってくる項で書くことができる。つまり、

$$\frac{d}{dt} \int_a^b u dx = -J(b) + J(a) \quad (18)$$

また、 $-J(b) + J(a) = D \int_a^b \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ が成り立つことから、任意の区間 $[a, b]$ で

$$\int_a^b \left(\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) dx = 0 \quad (19)$$

で成り立つので、一次元拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (20)$$

である。

多次元の場合を考えると、流速は勾配に比例して流れるので、 $\mathbf{J} = -D \nabla u$ 。一次元と同様に、任意の領域 V における保存則と、ガウスの発散定理より拡散方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D \nabla^2 \mathbf{u} \quad (21)$$

が導かれる。

初期値、境界値問題

拡散方程式 (21) を解いて $u(x, t)$ を定めるには、時刻 $t = 0$ における u の空間分布と、空間領域の端における密度に関する条件が必要である。時刻 $t = 0$ での分布を初期条件、端の条件を境界条件と呼ばれている。境界条件の代表的な例は、

- (1) デイリクレ (Dirichlet) 条件: $u(0, t) = u(l, t) = 0$ のように境界で u の値が与えられる。
- (2) ノイマン (Neumann) 条件: $\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(l, t) = 0$ のように境界で物の出入りを考えない。

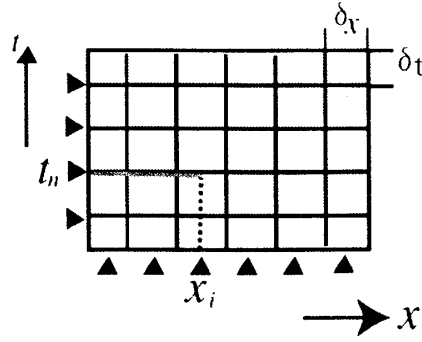


図 6: 時空間の離散化

(3) 周期境界条件：一次元領域だと端と端でつながっている、つまり境界がなく、空間が永遠と広がっていると考ええるという条件で、 $u(0, t) = u(l, t)$, $\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(l, t)$ 。が知られている。

拡散方程式を解くときには、境界条件に合わせて解を構成する。例えば、ディリクレ条件のもとで初期値が m -モード正弦波： $f(x) = \sin \frac{\pi m x}{l}$ を満たす解、

$$u_m(x, t) = a_m(t) \sin \frac{\pi m x}{l} \quad (m = 1, 2, 3, \dots) \quad (22)$$

を考える。(22) を拡散方程式 (21) に代入し、解くと、

$$\frac{da_m}{dt} = -D \left(\frac{\pi m}{l} \right)^2 a_m, \quad a_m(0) = 1 \quad (23)$$

$$a_m(t) = e^{-D \left(\frac{\pi m}{l} \right)^2 t}, \quad u_m(t) = e^{-D \left(\frac{\pi m}{l} \right)^2 t} \sin \frac{\pi m x}{l} \quad (24)$$

が得られる。

得られた解を見てみると、モード数の 2 乗に比例して素早く減衰することがわかる。実際に数値計算結果を見ると、4 モード解と 8 モード解を見比べてみると、8 モード解は 4 モード解の 4 倍の速さで減衰することがわかる (Web ページ参照)。

2.2 拡散方程式のシミュレーション

離散化の方法

次に、拡散方程式の初期値問題を差分法により数値的に解くときの手続きを説明する。拡散方程式を数値的に解くには、空間と時間の変数をそれぞれ離散化する必要がある。図 6 のように、 $x-t$ 面における半無限長方形領域 ($0 < x < \delta x I, t > 0$) で、 t 軸に平行な直線群 $x = x_j = j \delta x$ ($j = 1, 2, 3, \dots, I$) と x 軸に平行な直線群 $t = t_n = n \delta t$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) で構成される格子を作成する。そして、計算すべき要素の値を格子のどこにとるかを定める。例えば、図 6 のように、 x 軸 (空間軸) では $x_i = (i - 1/2) \delta x$ ($i = 1, 2, \dots, I$) のように、各格子の中心で値をとる。 t 軸 (時間軸) では、各格子の端で値をとる。つまり $t_n = n \delta t$ ($n = 1, 2, \dots$) とする。計算したいのは各格子点での関数値 $u(x_i, t_n)$ であるが、その近似値 u_i^n を求める。その近似値を求めるのに、拡散方程式を差分化して、

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\delta t} = D \frac{u_{i-1}^n + u_{i+1}^n - 2u_i^n}{\delta t} \quad (25)$$

を用いて近似値を計算する。

格子上のどこに値をとるかはいくらでも方法があるが、ここで説明した離散化の方法を使うと境界条件の取り扱いが下のように統一的行うことができる。つまり、領域の一つ外側の格子（ダミーセル）を用意し、そこでの値の取り方を

$$\text{ディリクレ条件では、} u_0^n = -u_1^n, u_I^n = -u_{I+1}^n$$

$$\text{ノイマン条件では、} u_0^n = u_1^n, u_{I+1}^n = u_I^n$$

$$\text{周期境界条件では、} u_0^n = u_I^n, u_{I+1}^n = u_1^n$$

とすれば、未知数の数にかかわらず、数値の代入の方法だけかえればすべての境界条件を系統的に値を代入することができる。そしてまた、拡散の離散式の対称行列になるため、実際の数値計算を解く段階で、計算手順が容易になる。

このように格子を準備して、初期条件： $u_i^0 = f(x_i) (i = 1, 2, \dots, I)$ を時間 t_0 の値として代入し、境界条件を用いてダミーセルの値を決める。そして、 $\lambda = \frac{D\delta t}{\delta x^2}$ とおき

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \lambda(u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \quad (26)$$

を計算する。この式より時間ステップを一段進めた t_1 の各格子の値 $u_i^1 (i = 1, 2, \dots, I)$ が計算できる。この過程を各時間ステップに対して繰り返すことで、拡散方程式の数値計算ができる。

vonNeumann の安定性解析

数値計算によって得られる値は、真の解からの微小な誤差がある。この誤差が原因で得られる解が変わらないかどうか慎重にならなければならない。つまり、誤差が計算ステップとともに指数的に成長しないように解の安定性を保証する必要がある。この差分法の安定性を判断する von Neumann の安定性解析が知られている。この安定性解析を見てみよう。

境界条件は考えず、波数 k の周期関数 $e^{\sqrt{-1}kx_i}$ の成長を見る。ここで、 $u_i^n = \mu^n e^{\sqrt{-1}kx_i}$ として差分方程式に代入し、成長係数 μ を調べる。すべての波数 k に対し、 $|\mu| \leq 1$ ならば、誤差は収束し、安定であるが、ある波数 k に対して $|\mu| > 1$ ならば不安定になり、誤差が成長してくる。

ここでは拡散方程式の差分式 (26) の安定性を調べる。 $u_i^n = \mu^n e^{\sqrt{-1}kx_i}$ を代入すると、

$$\mu - 1 = \frac{D\delta t}{\delta x^2} (e^{\sqrt{-1}k(x_i - x_{i-1}))} - 2 + e^{\sqrt{-1}k(x_{i+1} - x_i)}) \quad (27)$$

$$\simeq \frac{D\delta t}{\delta x^2} (2 \cos k\delta x - 2) \quad (28)$$

$$= -\frac{4D\delta t}{\delta x^2} \sin \frac{k\delta x^2}{2} \quad (29)$$

が得られる。 $\sin$ 関数の値を考えると $1 - \frac{4D\delta t}{\delta x^2} \leq \mu < 1$ である。つまり、 $\delta t \leq \frac{\delta x^2}{2D}$ が差分式 (26) の安定条件であることがわかる。

この安定性条件が破れると、 $\frac{2D\delta t}{\delta x^2} > 1$ より、隣接格子の平均値 $\frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n}{2}$ と計算格子 u_i^n との差を埋め合わせる範囲を超えてしまう。そのためメッシュごとにジグザグ波形になってしまい、得られる分布が指数発散を起こしてしまう。

差分計算スキームとしてここで紹介した式 (26) の他に、

$$(1) \text{Fully Implicit scheme: } \frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\delta t} = D \frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\delta x^2}$$

$$(2) \text{Cranck-Nicolson scheme: } \frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\delta t} = \frac{D}{2} \left(\frac{u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n}{\delta x^2} + \frac{u_{i-1}^{n-1} - 2u_i^{n-1} + u_{i+1}^{n-1}}{\delta x^2} \right)$$

がある。式 (26) と同様に安定解析を行うと、これらは無条件に安定であることがわかる。

計算スキームを比較すると、Explicit scheme(26) は、きびしい安定条件が課せられるが、単なる代入計算で次のステップが決まるため、簡単にプログラムが作成できるという利点がある。

Implicit scheme(1),(2) では、無条件に安定であるが、解を得るためには各空間格子分の要素の連立一次方程式を解かなくてはならない。

3 反応拡散系: Turing 不安定性

今回の集中講義のメインテーマである反応拡散系について考える。これまでの章で、拡散を表す方程式と状態のダイナミクスを表す常微分方程式のそれぞれの性質を考えてきた。この項では、これらの2つを拡散項と反応項として組み合わせた、反応拡散方程式について考える。

3.1 反応拡散系の初歩

最初に簡単な反応拡散系の例として、生物集団の個体数変化が従うダイナミクスを考える。そしてその各個体がランダムに動き回る状況を考える。このときの個体数動態を調べる。

生物集団の個体数の変化: ロジスティック方程式

時刻 t における生物集団の個体数を $u(t)$ とする。単位時間あたり $\alpha u(t)$ 新しい個体が生まれ、 $\beta u(t)$ 死亡する。微小時間 δt に間の個体数の増加は、 $\alpha u(t)\delta t - \beta u(t)\delta t$ のように表される。 $r = \alpha - \beta$ とおき、 δt を 0 に近づけると、

$$\frac{du}{dt} = ru \quad (30)$$

のように表される。初期条件 $u(0) = u_0$ のもとで、この方程式を解くと、 $u(t) = e^{rt}u_0$ と表される。つまり、サイズに依存せず、 $r > 0$ 、つまり出生率が死亡率より大きければ、個体数は指数的に増えていく。逆に、 $r < 0$ 、つまり死亡率が出生率よりも大きければ、個体数は指数的に減衰することがわかる。

しかし、細菌をシャーレの中で培養するような状況を考えると、個体数が少ないとき、指数増加に従って個体数を増える。が、時間が経つに従って、個体の老廃物による環境の劣化が顕著になり、指数的増殖に破綻が生じる。ここでのモデルの問題点は、増殖率 r が u にかかわらず一定であるという点である。この増殖率 r を、例えば、 $r(1 - \frac{u}{K})$ のような u の減少関数で置き換え

る(ただし、 r, K は正の定数)。この増殖率を用いて式 (30) を

$$\frac{du}{dt} = ru(1 - \frac{u}{K}) \quad (31)$$

と表す。この方程式は、ロジスティック方程式と呼ばれている。

1章で行ったように、右辺のグラフを書き、平衡点の性質を調べると、 $u = 0$ は不安定平衡点、 $u = K$ が安定平衡点である。シムテムの挙動は、 $0 < u < K$ ならば u は増加し、 $u > K$ ならば u は減少し K に落ち着く。この環境が養えるぎりぎりの個体数 K を環境収容力 (Carrying capacity) と呼ぶ。また、 r は原点での微分係数で、環境の劣化がないときの増加率であり、内的自然増加率というように呼ばれている。

また、この方程式は、 $\tilde{u} = K\tilde{u}$, $t = \tilde{u}/c$ とおくことにより次の形に無次元化できる。

$$\frac{d\tilde{u}}{d\tilde{t}} = \tilde{u}(1 - \tilde{u}) \quad (32)$$

反応拡散系の簡単な例: フィッシャー方程式

ロジスティック方程式に従うポピュレーションダイナミクスを持つ生物の個体群が、ある領域に侵入してきたとき、この個体群は繁栄できるか、否かという問題を考える。ただし各個体は、ランダムに動きまわるとする。個体の運動による効果を拡散方程式で記述して、増殖や死滅の効果をロジスティック方程式で記述する。これらを組み合わせた反応拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u) \quad (33)$$

は、フィッシャー方程式と呼ばれている。ここでは、境界には壁があり外には逃げ出すことができないというノイマン条件境界条件を考える。

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(1, t) = 0 \quad (34)$$

フィッシャー方程式の線形化方程式と安定性

式 (33)、(34) に対する線形解析を行う。まず、定数定常解を求めると $u(x, t) = 0$ と $u(x, t) = 1$ である。それぞれ死滅と繁栄を表す。次に、それぞれにおいて安定性を調べる。 $u = 1$ のまわりでは、1章で示した常微分方程式の解析と同様に、 $u(x, t) = 1 + \delta\varphi(x, t)$ ($|\delta| \ll 1$) を Eq. (33) (34) に代入し、 δ^2 の項を無視すると、

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \varphi \quad (35)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial \varphi}{\partial x}(1, t) = 0 \quad (36)$$

φ はノイマン境界条件を満たすように、初期値 $\varphi_m(x, 0) = \cos \pi m x$ に対して、

$\varphi_m(x, t) = e^{\lambda_m t} \cos \pi m x$ と置くと、 $\lambda_m = -1 - D\pi^2 m^2$ ($m = 0, 1, 2, \dots$) と計算される。 $\cos$ 波の

モードは0から始まることに注意して、 $0 > -1 = \lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \dots$ となり、すべての解 λ_0 が負なので、 φ_m は0に落ち着き、安定であることがわかる。

同様に初期値、 $\varphi_m(x, t)$ を代入して、 $u = 0$ の安定性を調べると、 $\lambda_m = -1 - D\pi^2 m^2 (m = 0, 1, 2, \dots)$ が得られる。 $1 = \lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \dots$ より、 $\lambda_0 = 1$ より $\cos$ 波が成長する。この定数定常解は不安定である。

Exercise: 次の方程式の定数定常解とその安定性を調べよ。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u) \quad (37)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (38)$$

3.2 チューリングパターン (拡散が空間非一様性を創る!?)

Alan M. Turing [3] は、濃度の不均一性を解消する効果を持たせるための拡散が、相互作用の効果を導入すると空間対称性の破れを起こすことがあることを示した。これを例を用いて示す。

活性因子-抑制因子系 (Activator - Inhibitor System)

活性因子 (Activator) の濃度 u と抑制因子 (Inhibitor) の濃度 v とする。 u が自己触媒系のような働きをし、また v を生成させる。 v は、 u の生成を抑制し、自分自身 v も抑制するような系を考える。

例えば反応項として下のようなダイナミクスを考える。

$$\frac{du}{dt} = u(1 - u^2) - v \quad (39)$$

$$\frac{dv}{dt} = 3u - 2v \quad (40)$$

この系のヌルクラインは図のようになり、平衡点 (u^*, v^*) は $(0, 0)$ のみである。

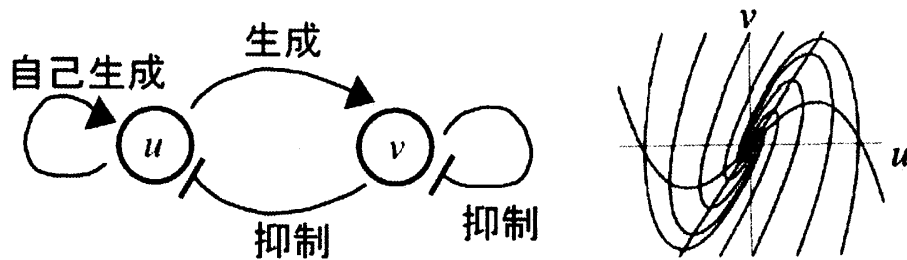


図 7: ダイナミクスの概念図とヌルクライン

そこでヤコビ行列を A とすると

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 3 & -2 \end{pmatrix} \quad (41)$$

$\text{tr} A = -1$, $\det A = 1$ なので (u^*, v^*) では安定渦状点である。注意として、このヤコビ行列で活性

因子と抑制因子の関係が成り立っている。この方程式に、それぞれの因子の拡散を導入すると、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u^2) - v \quad (42)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 3u - 2v \quad (43)$$

のように反応拡散系が構成される。ここで D_u, D_v はそれぞれの成分の拡散係数を表し、正定数である。式 (42)、(43) の時間変化のしない $(u, v) \equiv (0, 0)$ において、 $u(x, t) = \delta\varphi(x, t)$, $v(x, t) = \delta\psi(x, t)$ とおくと、線形化方程式は、

$$\frac{\partial \delta\varphi}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 \delta\varphi}{\partial x^2} + \delta\varphi - \delta\psi \quad (44)$$

$$\frac{\partial \delta\psi}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 \delta\psi}{\partial x^2} + 3\delta\varphi - 2\delta\psi \quad (45)$$

と表せる。この線形安定性を調べる。拡散項がない場合は 1 章で行っている。

$\begin{pmatrix} \varphi(x, t) \\ \psi(x, t) \end{pmatrix} = e^{\lambda_k t + i k x} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix}$ とおき、これを線形化方程式に代入し、 (φ_0, ψ_0) に関する方程式を求めると、

$$\lambda_k \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k^2 D_u + 1 & -1 \\ 3 & -k^2 D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad (46)$$

と書ける。右辺の行列を A_k と置く。式 (46) が $\begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \psi_0 \end{pmatrix}$ が自明な解以外の解を持つためには、

$$\lambda_k^2 - \text{tr} A_k \lambda_k + \det A_k = 0 \quad (47)$$

$$\text{tr} A_k = -1 - (D_u + D_v)k^2 < 0 \quad (48)$$

$$\det A_k = (1 - D_u k^2)(-2 - D_v k^2) + 3 \quad (49)$$

でなければならない。式 (47) の固有値 λ_k の一つが正になる条件、すなわち不安定性の十分条件は、 $\det A_k < 0$ である。ここで、 $\mu = \frac{D_v}{D_u}$, $\xi = D_u k^2$ をパラメータにとると、

$$\det A_k = 1 + (2 - \mu)\xi + \mu\xi^2 \quad (\xi \geq 0) \quad (50)$$

ここで、 $D_v = D_u$, $(\mu = 1)$ とすると、

$$\det A_k = 1 + \xi + \xi^2 \quad (51)$$

これはすべての $\xi \geq 0$ に対して正なので不安定化せず、一様解が安定に存在する。

しかし、 $D_v = 10D_u$ ($\mu = 10$) のとき、

$$\det A_k = 1 - 8\xi + 10\xi^2 = 10(\xi - 2/5)^2 - 3/5 \quad (52)$$

より、ある区間 $\xi_1 < \xi < \xi_2$ で、 $\det A_k < 0$ を取る。つまり不安定化をおこし、 $\frac{\xi_1}{D_u} < k^2 < \frac{\xi_2}{D_u}$ を満たす波数 k のゆらぎが成長する。つまり、ある安定と不安定の境界を与える μ_c があって、 μ が

μ_c よりも大きければ、ある範囲の波長の揺らぎが成長し、不安定化してくる構造が生成される。このことを”チューリング不安定性”もしくは、”拡散が誘導した不安定性”と呼ぶ。

チューリング [3] は、受精卵のような空間対称性が高いものから、この拡散が誘導した不安定性が物理的、化学的なベースとなって、対称性がくずれ、生物の複雑な構造が形成されるのではないかと提唱した。しかし、その反応物質が同定されていないため、ほとんどの生物学者には全く信じられていなかった。

ところが、近藤滋（名古屋大学）ら [4] は、タテジマキンチャクダイの体表模様が成長とともに変化する観察から、この模様変化は、経過も含めて Turing の反応拡散系の生きた系であると提唱している。また、魚の模様だけでなく、毛の合成に異常を持つある種の mutant mouse では、次の項で説明する動く波のダイナミクスまで体表で観察することができる [5]。ここにはきつと物理的、科学的な普遍性が潜んでいるに違いないと誰もが思うであろう。

3.3 興奮場 (Excitable Media) – FitzHugh-Nagumo 方程式

この項では、さまざまな挙動をしめす反応拡散系の代表的な例である FitzHugh-Nagumo 方程式を挙げ、その挙動を見る。もともこの方程式は神経の発火のダイナミクスを表す式として用いられていた。

双安定系

$u = 0, 1$ の 2 つの安定点を持ち、 $u = a$ が不安定点をもつ系、

$$\frac{du}{dt} = u(1-u)(u-a) \quad (53)$$

を考える。ただし、 $0 < a < 1$ 。 u の挙動は、図 3.3 の矢印のような挙動をする。ここで、 $u = 0$ の状態を休息、 $u = 1$ の状態を興奮、 $u = a$ を閾値と呼ぶことにする。閾値 a が 0 に近いほど少しの刺激にも反応して興奮しやすく、逆に、1 に近いほど興奮しにくくなる。

また、 a を固定して、興奮性のコントロールパラメータ v を導入し、

$$\frac{du}{dt} = u(1-u)(u-a) - v \quad (54)$$

で v を大小動かすことで、興奮のしやすさを制御できる。

FitzHugh – Nagumo 方程式

前の節で考えた閾値をこえると活性化される系と、時間遅れのある v を介した負のフィードバックループのある系である

$$\frac{du}{dt} = u(1-u)(u-a) - v \quad (55)$$

$$\frac{dv}{dt} = \epsilon(u - rv) \quad (56)$$

を考える。 ϵ は、小さくなると時間遅れが大きくなるという時間遅れの度合いを表すパラメータである。この系での (u, v) のダイナミクスを見るため、 $\frac{du}{dt} = 0$ と $\frac{dv}{dt} = 0$ のヌルクライン図 (3.3)c

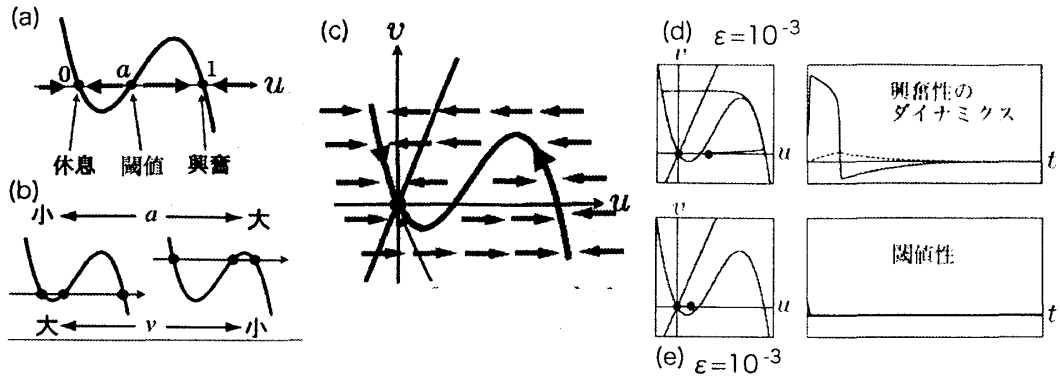


図 8: (a):式 (53), (b): 式 (54) の振舞い。(c): 式 (55),(56) のヌルクライン。(d), (e):式 (55),(56) に程度の違う刺激をあたるときの振舞い。

を書く。その2線の交点、つまり平衡点の安定性を1章で行った方法に従って調べると、安定であることがわかる。また、 ϵ が十分小さい (v が u に比べてゆっくり変化する) とすると、ほとんどのベクトル場が水平方向になり、図 3.3c の矢印にそって (u, v) は挙動する。図??dのように刺激の強さをとると、 u の変化が素早くヌルクラインに落ち着き、外側の $\dot{v} = 0$ にそって動き、極値に達すると u の変化が v に比べて早いため、他方のヌルクラインに移動よう振舞う。そして図のようにヌルクラインに沿って、最終的な安定状態は「休息状態」になる。また、3.3eのように少ししか平衡点から離れない弱い刺激に対しては、休息状態から少し離れただけでは、矢印に従い休息状態に戻る。このように、刺激の値が閾値をすこしでも超えると、相図のような軌道を取り戻ってくるため、神経のモデルとして使われている。

上の興奮性のモデルに、拡散項を導入すると、

$$\frac{du}{dt} = u(1-u)(u-a) - v + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (57)$$

$$\frac{dv}{dt} = \epsilon(u - \gamma v) + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (58)$$

の反応式が得られる。この方程式は FitzHugh-Nagumo 方程式と呼ばれる。この方程式は、神経系の現象を記述した4変数の Hodgkin-Huxley 方程式を簡単化した式にもなっている。

ここで、活性化因子の拡散係数が抑制因子の拡散因子よりも大きい ($D_u \gg D_v$) と、興味的なダイナミクスが見られる。領域の左端に少し刺激を加えると、その刺激から図 3.3d のような分布のパルスが形成され、このシングルパルスが右の方向に走っていく。またいくつもの刺激を与えると、いくつものパルスが同じ方向に走っていく。また、両端でパルスを形成し、中心に向けてパルスを形成すると、パルス同士の衝突がおこる。

集中講義中では、さまざまな空間2次元 FHN 方程式のシミュレーション結果を見せていただいた。Web を参照して下さい。

4 フェーズフィールド入門

凝固および結晶成長現象など物質の相変化に伴う界面の運動を記述する強力なモデルとしてフェーズフィールドモデルがある。フェーズフィールドモデルは最初は純物質の凝固のモデルとして定式化されたが、その後二相合金系や多相系、多成分系にも拡張されてきた。

さて本章では、フェーズフィールドモデルの最も簡単なバージョンである純物質の凝固モデルの基礎の部分を解説する。

4.1 フェーズフィールド

凝固は結晶成長の一種であり、一般に結晶成長を扱うモデルは時間とともに変化する形状を扱わなくてはならない。形状とはすなわち結晶の界面の形であり、これを表現するための一つの方法は、結晶界面を3次元空間の中の厚みが0であるような曲面として扱うことである。もう一つは、薄くはあるが有限の厚みを持ったオブジェクトとして界面を表現する方法であり、フェーズフィールドモデルはこの後者の方法に立脚している。具体的には、次のような秩序変数の場 $\phi(\mathbf{r}, t)$ を導入することによって結晶の形状を表現するのである。図9のように、固体相では $\phi = 1$ 液体相では $\phi = 0$ をとるような $\phi(\mathbf{r}, t)$ を考える。ただし、 $\phi(\mathbf{r}, t)$ は固液界面において不連続な階段関数ではなく、非常に薄い遷移層によって $\phi = 0$ と $\phi = 1$ を結んでいるとする。すなわち、この内部遷移層がフェーズフィールドモデルにおける固液界面の表現である。そして $\phi(\mathbf{r}, t)$ の時間発展によって界面の運動が表わされるわけである。この秩序変数の場 $\phi(\mathbf{r}, t)$ をフェーズフィールドと呼ぶ。

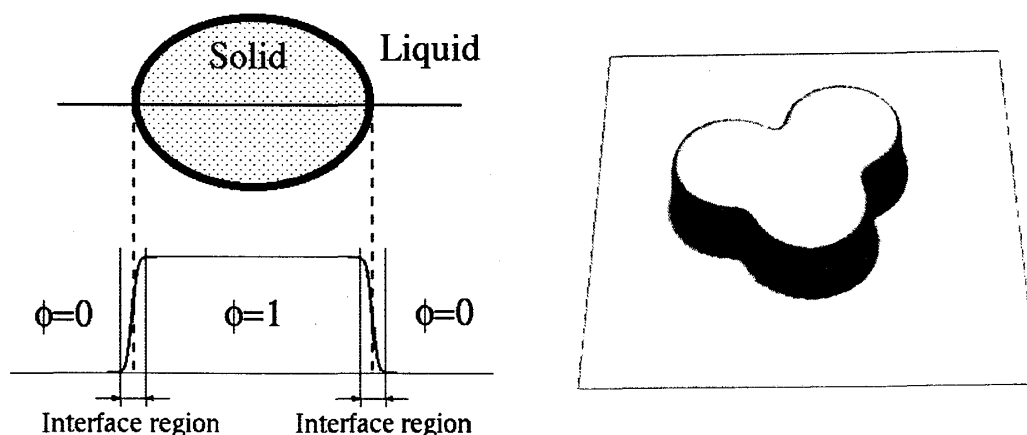


図 9: 空間 2 次元のフェーズフィールド。右は鳥瞰図。

4.2 エネルギー形式

次に、このような $\phi(r, t)$ の形をどのように実現し、かつ適切に界面 (内部遷移層) を駆動するかということが問題である。基本的なアイデアは、双安定な反応拡散方程式におけるフロント解を用いてこれを実現するというにある。そのためにまず次のような 2 重井戸型のポテンシャル関数 $f(\phi)$ を考える。

$$f(\phi) = \frac{a^2}{2}g(\phi) + f_S h(\phi) + f_L(1 - h(\phi)) \quad (59)$$

ただし $g(\phi)$ としては対称な 2 重井戸型ポテンシャル、例えば

$$g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^2 \quad (60)$$

をとる。また、関数 $h(\phi)$ としては次の 2 通りが通常用いられる。

$$h(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2) \quad (61)$$

または

$$h(\phi) = \phi^2(3 - 2\phi) \quad (62)$$

2 つの定数 f_S と f_L はそれぞれ固体相と液体相における自由エネルギー密度を表している。これらは温度 T の関数であるが、現時点では適当に温度 T を固定しておくことにしよう。もちろん、 $T = T_e$ (T_e は平衡温度) ならば $f_S = f_L$ であり、 $T < T_e$ ならば $f_S < f_L$ 、 $T > T_e$ ならば $f_S > f_L$ である。

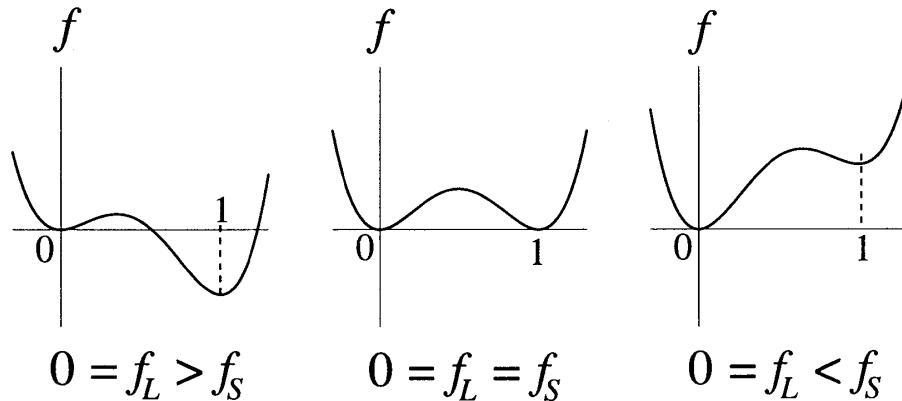


図 10: $f_L = 0$ としたときの $f(\phi)$ のグラフの概形。左からそれぞれ $T < T_e$, $T = T_e$, $T > T_e$ に対応している。

この $f(\phi)$ と微小な正値パラメータ ϵ を使って次のような Ginzburg-Landau 型のエネルギー形式を考える。

$$F[\phi] = \int_{\Omega} \left[\frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + f(\phi) \right] dV \quad (63)$$

ここで、このエネルギー形式をもとにして系の時間発展を記述する方程式を導きたい。もちろんエネルギー形式自体には時間は含まれていないので、ある種の仮定が必要である。それは、系は常に系のエネルギーを最も速く減らす方向に進み、またその進む速さはエネルギーの勾配に比例するというものである。数学的にいうとエネルギー $F[\phi]$ の勾配系

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \phi} \quad (64)$$

を考えるとということである⁴。ここで汎関数微分 $\frac{\delta F}{\delta \phi}$ がエネルギーの勾配にあたるものである。以下で、勾配系の簡単な説明をしておく。

4.3 汎関数微分と勾配系

まずはベクトル解析のおさらいから始めることにしよう。 $F(x)$ が平面 R^2 上の関数であるとする。点 x を通りベクトル v の向きを持つ直線 $x + sv$ (s : 実数) を考えると、その直線上での F の値 $F(x + sv)$ は s の関数とみることができる。この関数の $s = 0$ での変化率を計算すると微分の chain rule より

$$\frac{d}{ds} F(x + sv)_{s=0} = \nabla F(x) \cdot v$$

特に v が単位ベクトルのとき、この変化率は x における v 方向への方向微分と呼ばれる。この $\nabla F = \text{grad} F$ を関数 F を**勾配**という。このベクトル場は各点で関数 F の最大増加方向と最大増加率を与えている。また、

$$\frac{d}{ds} F(x + sv)_{s=0} = a \cdot v$$

を任意のベクトル v に対して成り立たせるようなベクトル a を点 x における勾配 $\nabla F(x)$ と定義してもよい(こちらの定義を汎関数微分では用いる)。

次に、この $F(x)$ に対する勾配系を考える。それは次のような時間 t を独立変数として持つ常微分方程式系で定義される。

$$\tau \frac{dx}{dt} = -\nabla F(x) \quad (\text{ただし } \tau \text{ は正の定数})$$

これは $z = F(x)$ のグラフを常にフォールラインの方向に勾配の絶対値に比例した速さで降りていくダイナミクスを表現している。

ここまでは平面(2次元空間)で定義された関数についての話であったが、次に関数空間(無限次元空間)で定義された「関数」に対して同様の議論をしてみよう。例えば(63)で定義された $F[\phi]$ のように、関数 ϕ に対して実数値 $F[\phi]$ を対応させる「関数」を考えるのであるが、このような「関数」のことを汎関数と呼ぶ。 $F[\phi]$ が汎関数のとき、ベクトル解析でいう勾配にあたるものが汎関数微分である。それは以下のように、有限次元空間上の関数の場合と同様な方法で定義され

⁴(63), (64) に含まれているパラメータ ϵ, τ, a 等の物理的意味は今しばらくは考えずに数学的な議論をすすめることにする。

る。まず、関数 ϕ と関数 ψ を任意に (ただし考えている関数空間の中から) とったときに、上と同様 s の関数 $F[\phi + s\psi]$ を考えることができる。対応 $s \rightarrow F[\phi + s\psi]$ は通常関数 (実数に実数を対応させる) であるから、この関数の微分を考えることができる。この ϕ と ψ に対し

$$\frac{d}{ds}F[\phi + s\psi]_{s=0} = \langle A, \psi \rangle$$

を満たすような関数 A を汎関数 $F[\phi]$ の ϕ における汎関数微分といい $\frac{\delta F}{\delta \phi}$ で表す。すなわち

$$\frac{d}{ds}F[\phi + s\psi]_{s=0} = \left\langle \frac{\delta F}{\delta \phi}, \psi \right\rangle$$

である。ただし、ここでは内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ として通常の L^2 -内積 $\langle f, g \rangle = \int_{\Omega} f(r)g(r) dr$ を考える。 $F[\phi]$ が汎関数のときの勾配系も、有限次元空間上の勾配系と同様に

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \phi}$$

によって定義される。

4.4 Allen-Cahn 方程式

さて汎関数微分の計算の仕方がわかったので本論にもどろう。上の Exercise により、勾配系 $\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta \phi}$ は次のようになる。

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 \phi - f'(\phi) \quad (65)$$

$h(\phi)$ の 2通りの形について方程式の具体的な形を書くと、まず (61) の $h(\phi)$ に対しては

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 \phi + 2a^2 \phi(1 - \phi) \left\{ \phi - \frac{1}{2} + \frac{15(f_L - f_S)}{a^2} \phi(1 - \phi) \right\} \quad (66)$$

一方 (62) の $h(\phi)$ に対しては

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 \phi + 2a^2 \phi(1 - \phi) \left\{ \phi - \frac{1}{2} + \frac{3(f_L - f_S)}{a^2} \right\} \quad (67)$$

である。

これらの方程式は双安定 ($\phi = 0$ と $\phi = 1$) な反応拡散方程式であるが、物質科学の分野では Allen-Cahn 方程式と呼ばれている。この方程式は非常にシンプルなものであるが、さまざまなモデルの土台となる重要な方程式である。

次に、これらの方程式の解がどのような形をしているかを図 11 を見ながら考えてみよう。ここで $\epsilon \ll a$ を仮定する。そうすると (66) や (67) の右辺第 1 項は第 2 項に比べて微小なので、 ϕ の変化が激しくないところでは無視してもよい。そうすると $\phi = 0$ と $\phi = 1$ が安定平衡点であるから ($f(\phi)$ のグラフの形を思い出そう)、ほとんどの点で $\phi = 0$ または $\phi = 1$ になるだろう。

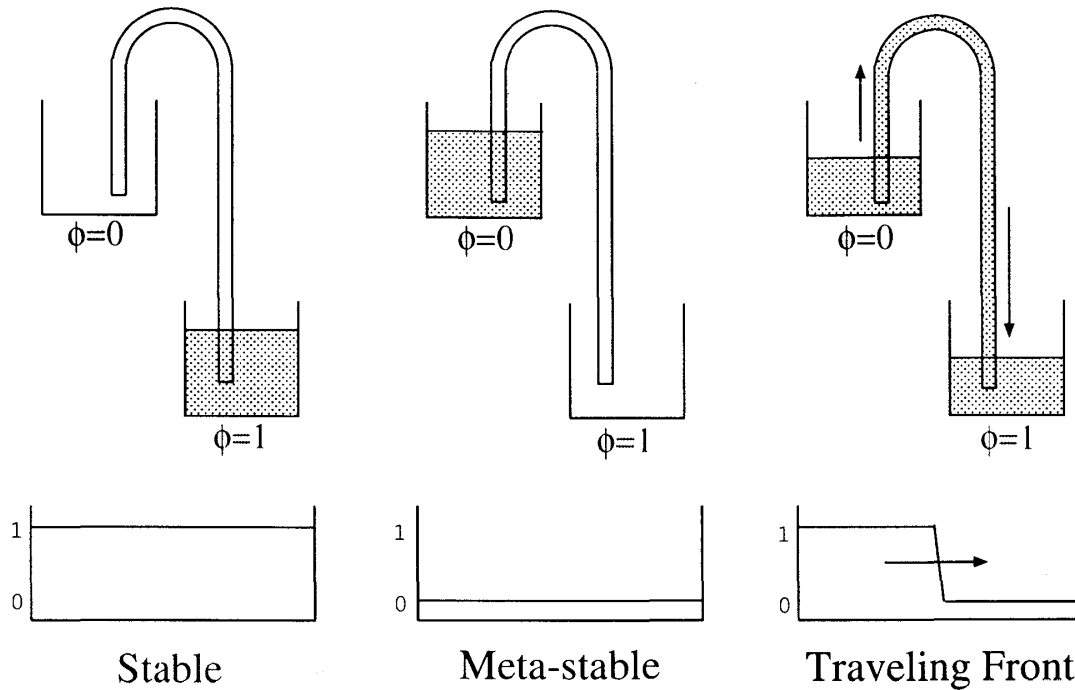


図 11: $f_L > f_S$ の場合の (a) 安定解, (b) 準安定解, (c) 進行波解

もし、すべての点で $\phi = 1$ (または $\phi = 0$) であるならば、それは全領域が安定相か準安定相で満たされている状態を表現しているわけである。しかし、もし $\phi = 0$ の領域 (液体相) と $\phi = 1$ の領域 (固体相) が共存しているならば、必然的に 2 領域の境界が生じてくる。そしてそれらの境界ではもはや右辺第 1 項は無視できなくなる。実際、右辺第 1 項と第 2 項のバランスによって、二つの領域の境界において ϕ はなめらかに接続され、薄い内部遷移層を形成するのである (以下、この内部遷移相のことをフロントと呼ぶ)。さらに、我々は勾配系を考えているのであるから、二つの領域がこのような薄いフロントによって接しているとき、パラメータ f_L と f_S の大小関係に依存して、エネルギーの低い方の領域が高い方の領域を浸食するようにこのフロントは移動するだろう。これによって $f_L > f_S$ のときには凝固が、 $f_L < f_S$ のときには融解が表現できるわけである。

空間 1 次元で方程式 (67) を考えたときには、以上に述べたことを端的に表している特殊解が存在するので書き下しておこう。

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{a(x - Vt)}{2\epsilon} \right) \quad (68)$$

この解は図 12 のような進行フロント解を表している。ただし、この進行フロントの進行速度 V は

$$V = \frac{6\epsilon(f_L - f_S)}{a\tau} \quad (69)$$

で与えられる。(68) の形から、この解のフロントの幅は ϵ/a のオーダーである。もう少し正確にいうと、 $0.05 < \phi < 0.95$ の範囲を界面領域とみなすことにすれば、この界面の幅はほぼ $6\epsilon/a$ に

なる。また、方程式 (67) を考えている限りでは、界面の速度にかかわらず進行フロント解のプロファイルは同一である。

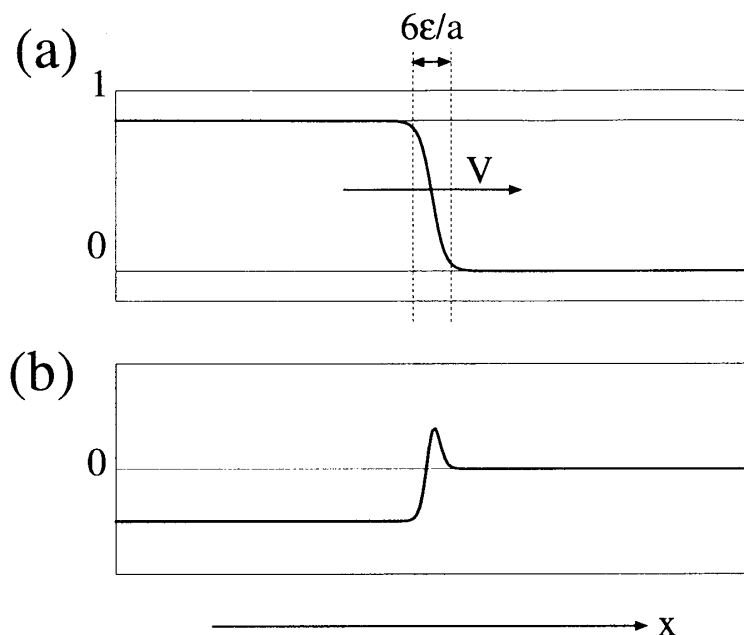


図 12: (a) 進行フロント解のプロファイル (b) 対応するエネルギー密度 $\frac{\epsilon^2}{2}|\nabla\phi|^2 + f(\phi)$ のプロファイルエネルギー密度の低い固体相 ($\phi = 1$ の領域) が増大する方向にフロントが動く。

次に $f_L = f_S$ の場合について考えてみよう。この場合には (69) より界面は静止している。実際、図 13 を見ればわかるように、バルクでのエネルギー密度は固体相・液体相いずれも 0 であり、界面がどちらに動いてもエネルギーは減少しない。エネルギー密度が 0 でないのは界面の近傍においてのみであり、これを界面エネルギーの表現と考えてよい⁵。ここで、この静止フロント解

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \frac{ax}{2\epsilon} \right) \quad (70)$$

に対して、エネルギー $F[\phi_0]$ を求めてみよう。

$$\epsilon^2 \frac{d^2\phi_0}{dx^2} - f'(\phi_0) = 0$$

であるから両辺に $\frac{d\phi_0}{dx}$ をかけて積分すると

$$\frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{d\phi_0}{dx} \right)^2 - f(\phi_0) = C$$

ただし、 C は積分定数。ここで $|x| \rightarrow \infty$ を考えると $C = 0$ であることがわかる。ゆえに

$$\frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{d\phi_0}{dx} \right)^2 = f(\phi_0)$$

⁵ $f_L \neq f_S$ の場合の界面エネルギーの解釈に関しては多少議論が必要である。

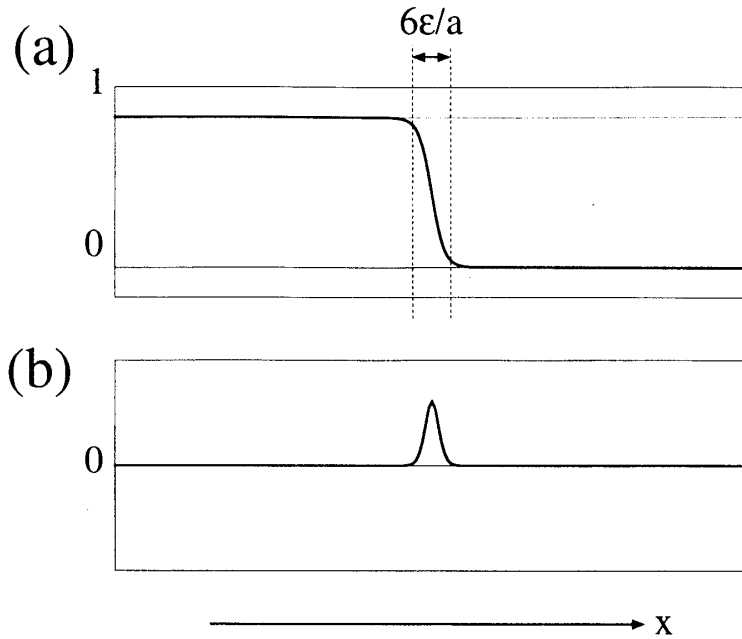


図 13: (a) 静止フロント解のプロファイル (b) 対応するエネルギー密度 $\frac{\epsilon^2}{2}|\nabla\phi|^2 + f(\phi)$ のプロファイルエネルギー密度は界面近傍に局在している。

で図 13 のような場合には $\frac{d\phi_0}{dx} < 0$ なので

$$\frac{d\phi_0}{dx} = -\frac{\sqrt{2f(\phi_0)}}{\epsilon}$$

である。これを用いて $F[\phi_0]$ を計算すると

$$\begin{aligned} F[\phi_0] &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{d\phi_0}{dx} \right)^2 + f(\phi_0) \right] dx = \int_{-\infty}^{\infty} 2f(\phi_0) dx \\ &= \int_1^0 2f(\phi_0) \frac{dx}{d\phi_0} d\phi_0 = \int_1^0 2f(\phi_0) \left(\frac{d\phi_0}{dx} \right)^{-1} d\phi_0 = \epsilon \int_0^1 \sqrt{2f(\phi_0)} d\phi_0 \end{aligned}$$

ここで $\sqrt{2f(\phi_0)} = \sqrt{a^2\phi_0^2(1-\phi_0)^2} = a\phi_0(1-\phi_0)$ であるから、

$$F[\phi_0] = a\epsilon \int_0^1 \phi_0(1-\phi_0) d\phi_0 = \frac{a\epsilon}{6} \quad (71)$$

となる。これで静止フロント解 $\phi_0(x)$ に対して、エネルギー $F[\phi_0]$ が求まったわけであるが、前に述べたように固体相・液体相のバルクではエネルギーは 0 なのであるから、この値 $\frac{a\epsilon}{6}$ は界面エネルギー密度であると考えてよい。

4.5 空間 2 次元・3 次元の場合

ここではまず $f_L > f_S$ の場合を考えてみよう。勾配系である以上は 1 次元の場合と同様、図 14 のように固体領域 $\phi = 1$ が増える方向に界面は動こうとするはずである (凝固)。逆に $f_L < f_S$ で

あるならば、液体領域 $\phi = 0$ が増える方向に界面は動くだろう (融解)。これらの場合は、バルクにおけるエネルギーの差が界面の駆動力になっているわけである。

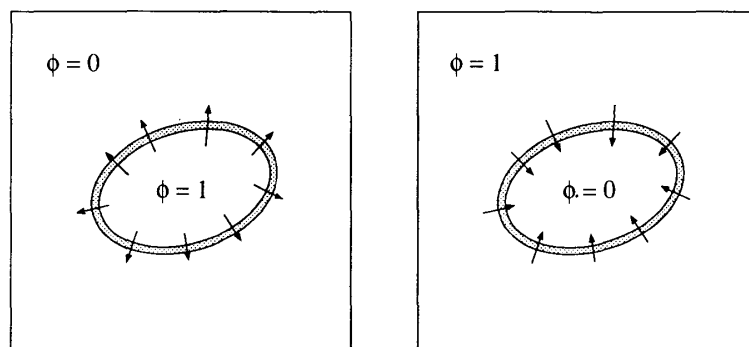


図 14: 界面の運動 ($f_L > f_S$ の場合)

ただし 2 次元 (または 3 次元) の場合には、界面に働いているのはこのバルク由来の駆動力だけではない。このことを明確にみるために $f_L = f_S$ の場合を考えてみよう (すなわちバルク由来の駆動力がゼロ)。図 15 のような界面があったとする。このときエネルギー密度 $\frac{\epsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + f(\phi)$ は、前節の 1 次元の場合の議論と同様に、固体領域 $\phi = 1$ でも液体領域 $\phi = 0$ でもべったりと 0 である。エネルギー密度が 0 でないのは界面領域 (図中の灰色部分) だけであり、やはりこれを界面エネルギーと考えることができる。当然、勾配系である Allen-Cahn 方程式はこの界面領域を小さくしようとする (表面張力の効果)。

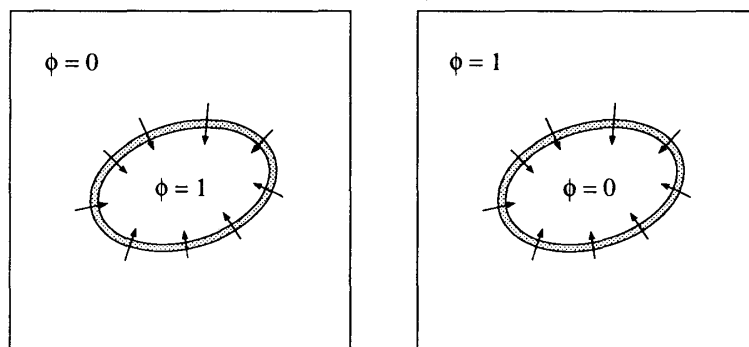


図 15: 界面の運動 ($f_L = f_S$ の場合)

それゆえ、エネルギーを減らすために図 15 の矢印の方向に界面を動かそうとする。結果として左図では固体領域 $\phi = 1$ が、右図では液体領域 $\phi = 0$ が縮んでいき最後には消滅する。

もちろん $f_L \neq f_S$ の場合には、界面にはバルク由来の駆動力と、上で述べた界面由来の駆動力が同時に働いているわけである。

4.6 シミュレーション

ここでは過冷却凝固によるデンドライト状の結晶成長のシミュレーションの例をいくつか示しておこう。このモデルは図 16 や図 17 のように、デンドライトの複雑な形状を簡単に再現することができる、ただし、このモデルは実はこのままでは座標系の回転に対する普遍性がない。それはこのモデルが、結晶を構成する分子の向きに関する情報をもっていないことに起因している。それゆえここでは、単結晶の分子の向きに座標軸をあわせ、界面の角度はその座標系から測るようにしている。このことから、このモデルはこのままでは単結晶のシミュレーションしかできないことは明らかであろう。この欠点を克服し、多結晶の形成や粒界運動を記述することのできるフェーズフィールドモデルが現在開発されている [20]–[22]。本テキストを書くにあたり、講演時間の制約とともに、初歩から詳しくフェーズフィールドモデルを解説したものがないという事情を考えて、最もベーシックなタイプのモデルに話を限り、丁寧に解説することにした。実際的により興味をもたれるであろう 2 相合金系 [14]–[16] や多相系 [17]–[19]、さらに多成分系 [23] については以下の文献を参考にしていただきたい。またごく最近、すぐれたレビューペーパーが出たので [24]、御一読をお奨めする。

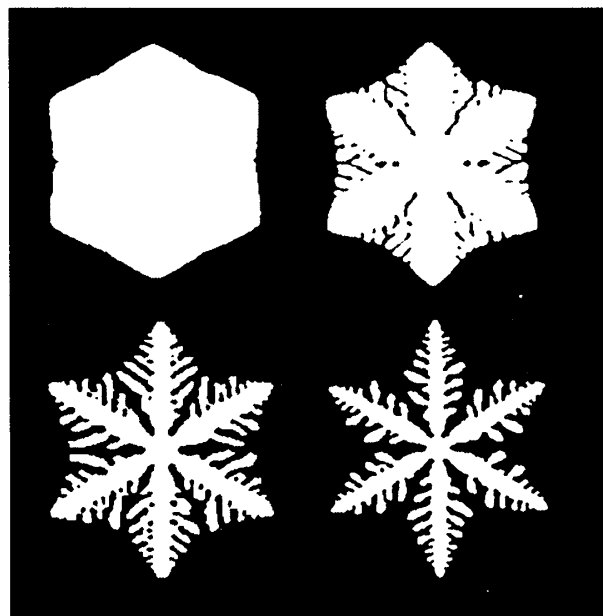


図 16: 断熱条件下での過冷却凝固の 2 次元シミュレーション

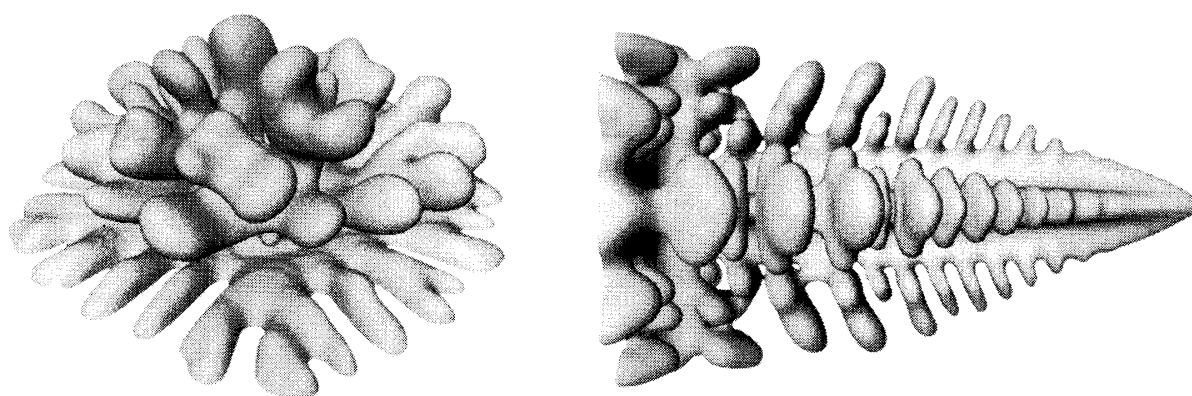


図 17: 断熱条件下での過冷却凝固の 3 次元シミュレーション

5 フィボナッチ数列と黄金比と葉序 -三題噺-

今回お話しする話題は、フィボナッチ数列、黄金比、松ぼっくりの 3 つである。これらは相互に関係している。

5.1 フィボナッチ数列

まずは、フィボナッチ数列から述べる。フィボナッチ数列は Leonardo Fibonacci(1175-1250) が考えた数列である。定義は

$$\begin{aligned} f_1 &= 1, f_2 = 1 \\ f_{n+1} &= f_n + f_{n-1} \end{aligned} \quad (72)$$

である。⁶

5.2 黄金比

次に三題噺の 2 番目の黄金比について述べる。黄金比とは図 18 にあるように線分の分割の場合は「長い方と短い方の長さの比が全体と長い方の比に等しい」、長方形の場合は「正方形を取り除いた残りの長方形が元の長方形と相似」という比である。この比を線分の場合で求めると

$$\begin{aligned} x : 1 &= (x + 1) : x \\ x^2 &= x + 1 \\ x &= \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2} \end{aligned} \quad (73)$$

この x を黄金比 ϕ と呼ぶ。この黄金比 ϕ はアート（芸術）とも関係がある。講義では、パルテノン神殿、ミロのビーナス、ダビンチの人体構成図、美しい眉毛を例として紹介した。では、フィ

⁶フィボナッチ数列は非常に有名で「ダ・ヴィンチ・コード」という推理小説の中では導入部に使われている。この小説は後で述べる黄金比とフィボナッチ数列の関係も書いてあって中々おもしろい本である。

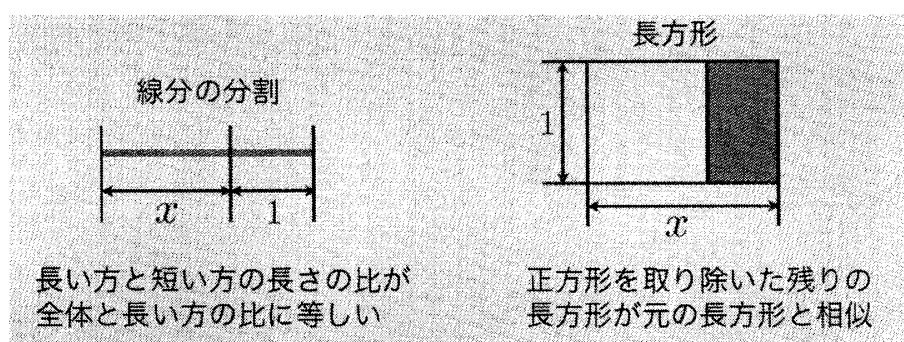


図 18: 黄金比

ボナッチ数列と黄金比との関係を述べる。図 19 は、フィボナッチ数列の隣接 2 項の比を n を大きくしながら描いたものである。

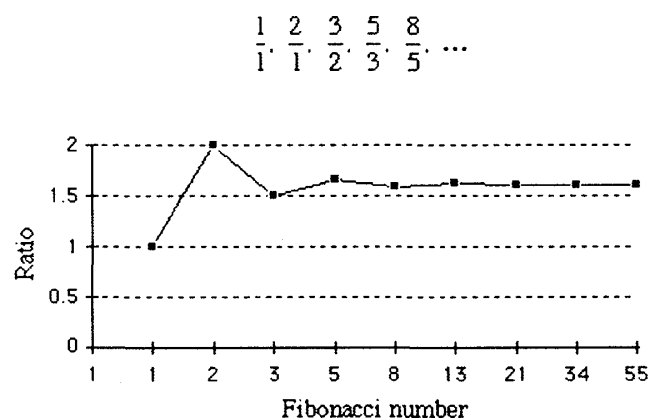


図 19: 黄金比とフィボナッチ数列の近接 2 項の比

隣接 2 項の比とは

$$\frac{f_n}{f_{n-1}}$$

である。図を見るとある値に近づいていることがわかる。このある値が実は黄金比である。ではそのことを証明する。

$$f_{n+1} = f_n + f_{n-1}$$

の両辺を f_n で割れば

$$\begin{aligned} \frac{f_{n+1}}{f_n} &= 1 + \frac{f_{n-1}}{f_n} \\ r_n &= \frac{f_{n+1}}{f_n} \end{aligned}$$

と置くと

$$r_n = 1 + \frac{1}{r_{n-1}}$$

となって、黄金比 ϕ は $\phi = 1 + \frac{1}{\phi}$ を満たすので

$$\begin{aligned} r_n - \phi &= \frac{1}{r_{n-1}} - \frac{1}{\phi} \\ &= -\frac{1}{\phi r_n} (r_{n-1} - \phi) \end{aligned}$$

$r_{n-1} > 1$ だから

$$|r_n - \phi| \geq \frac{1}{\phi} |r_{n-1} - \phi| \geq \cdots \geq \phi^{-n} (r_0 - \phi) \rightarrow 0$$

しかも振動的に収束する。これは黄金比 ϕ からすれば、 ϕ を振動的に近似する有理数列である。しかし、 ϕ を近似する有理数列はいくらでもあるが、このフィボナッチ数列の隣接2項の比はもっとも近似のよい数列となっている。

5.3 松ぼっくり

松ぼっくりの斜列線の数数を数えてみる。斜列線とは図 20 にあるような右巻き、左巻きの 2 つが

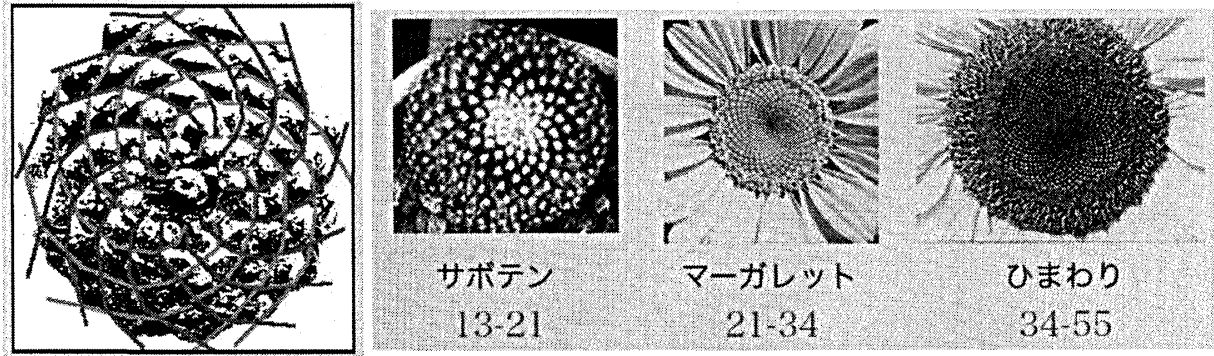


図 20: 松ぼっくりの斜列線

図 21: その他の植物

ある。その数は松ぼっくりでは 8 と 13 である。その他にも図 21 にあるように、サボテン (13,21)、マーガレット (21,34)、ひまわり (34,55) である。このように、斜列線の数数はフィボナッチ数列の隣接 2 項になっている。これが松ぼっくりとフィボナッチ数列の関係である。これは単なる偶然とは思えない、そこで少し植物一般の葉の成長様式を考察してみる。まず、図 22 は葉が成長する先端の部分の写真である。これを模式的に書いたのが図 23 である。先端の細胞分裂組織から細胞

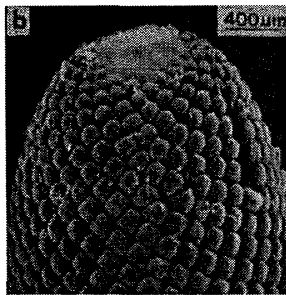


図 22: 植物一般の葉の成長様式:先端部分の写真 (R.Rutishauser)

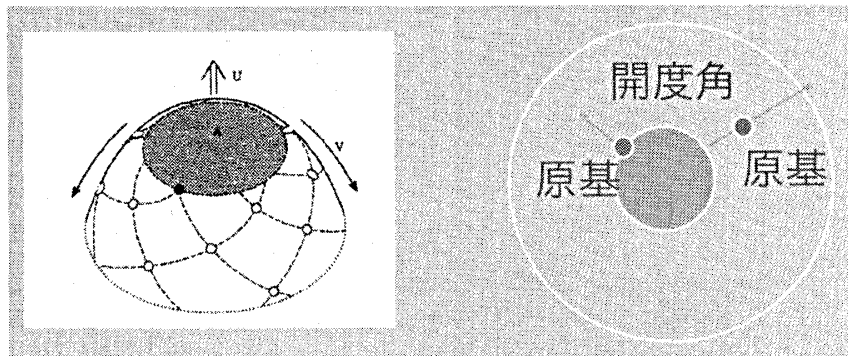


図 23: 植物一般の葉の成長様式:先端部分の模式図

が出来て、パターンを形成するのがわかる。ちょうどパターン形成を制御しているのは先端の何もない所(カップのお皿みたいな場所)である。このお皿の所で細胞の元となる源基が何らかのメカニズムで細胞のパターンを制御している。そこで、この植物の生長様式を模倣したうまい物理モデル(図 24)があるのでそちらの話する。このモデルは S. Dauady and Y. Couder (1991) により、考案されたもので、とても素晴らしい実験である。磁場をかけた回転する円盤に磁性液滴を中心に垂らすというものである。

この磁性液滴はお互いに斥力相互作用をしている。この実験で松ぼっくりなどにみられるのと同様に斜列線の数数はフィボナッチ数列の隣接 2 項になつて (図 25)。そこでこの物理モデルの簡

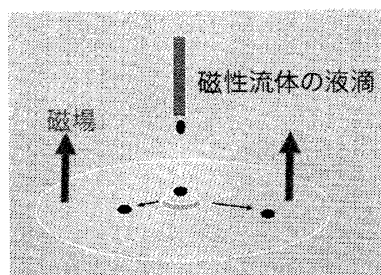


図 24: 物理モデル：磁性液滴を磁場をかけた円盤上に一定の時間間隔で落下させる

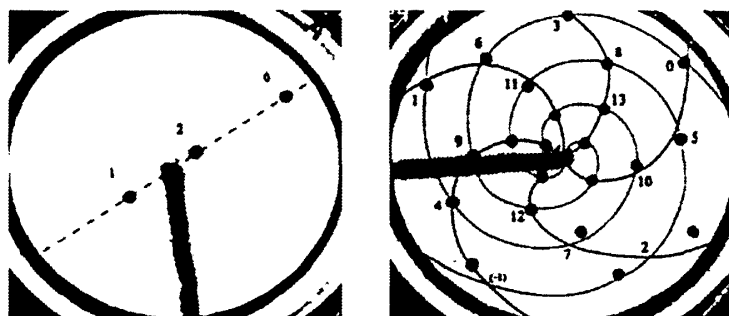


図 25: 物理モデル：実際の実験結果、松ぼっくりなどと同じような斜列線を見ることができる。S. Dauady and Y. Couder (1991)

単な数理モデルを考える。磁性体の落ちる中心部を植物のとのアナロジーで細胞分裂組織と呼ぶ。その細胞分裂組織から粒子は一定周期で発生して、動経方向に一定速度で運動し、相互作用は弱い斥力を考える。

故に、この数理モデル (図 26) に現れる重要なパラメータは粒子の速度 V_0 、粒子が生じる周期 T 、細胞分裂組織の半径 R_0 である。これらの量から無次元量 G を次で定義する。

$$G = \frac{V_0 T}{R_0} \quad (74)$$

数値シミュレーションはこの G を変えながら行う。シミュレーションの結果は図 27～図 30 のようにパラメータ G を小さくしていくと開度角 $137.51 \dots$ 度に近づいていく、実はこの角度が黄金比になっている。360 度を黄金分割すると $137.51 \dots$ 度になることが示せる。これを今後、黄金角と呼ぶ。実はこの黄金角で粒子を打ち出したパターンはパッキングが非常に良い。そこで試しに有理角で打ち出してみる。有理角で打ち出した、図 31 はパッキングが悪いことがわかる。有理角の付近 (図 32) では付近にある有理角の分母だけ螺旋が見えるものの以前パッキングは悪い。黄金角 ϕ では、 G の値によらず、2 本の螺旋が見える。しかも、斜列線の数に常にフィボナッチ数になっている。 G によらないで、全体を一樣にパッキングする。

これが松ぼっくり、フィボナッチ数列と黄金比の関係である。

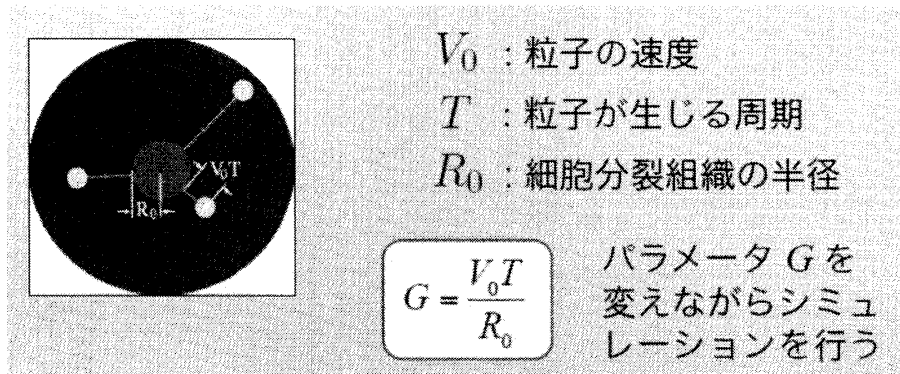


図 26: 簡単な数理モデル

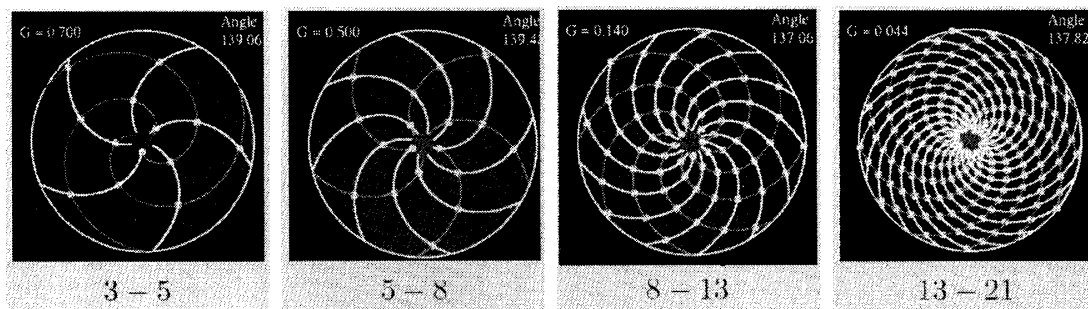


図 27: $G=0.700$

図 28: $G=0.500$

図 29: $G=0.140$

図 30: $G=0.044$

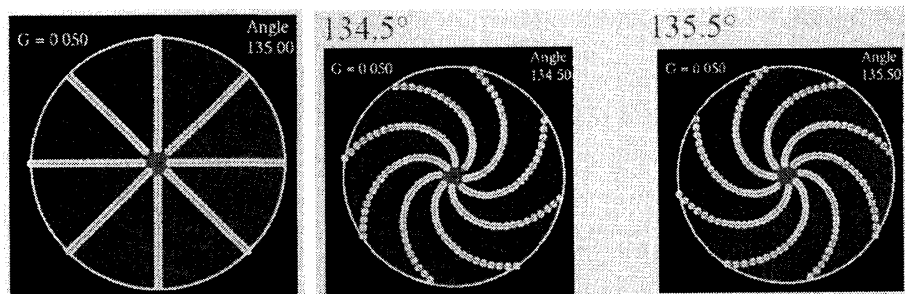


図 31: 有理角、135 度

図 32: 134.5 度と 135.5 度

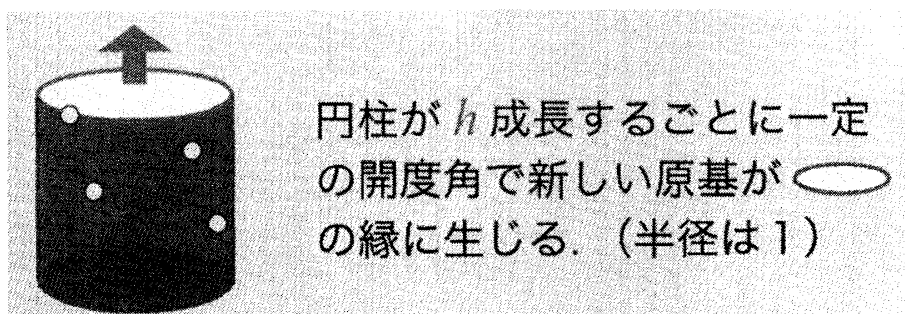


図 33: 斜列線

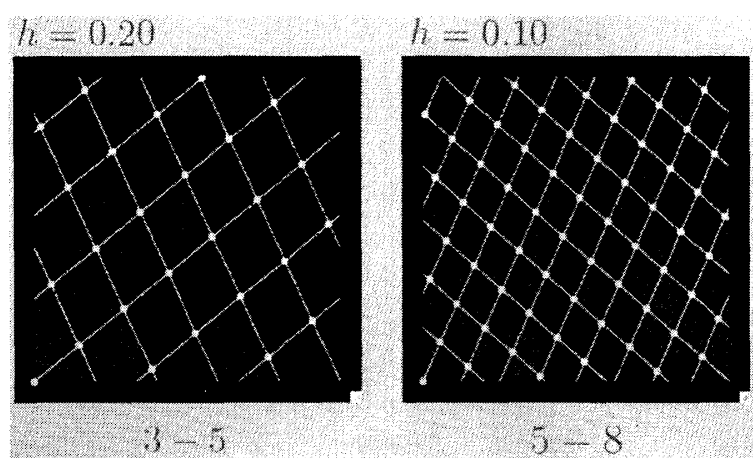


図 34: 黄金角の斜列線

6 無理数の連分数展開

ここでは、上で述べた黄金角とフィボナッチ数列、そして斜列線をもう少し詳しく考察してみる。

6.1 斜列線

回転角が黄金角に近いと、角の比率 $\frac{1}{1+\phi} = 2-\phi$ に近い分数の分母の数だけ斜列線が見えるはずである。さらに $2-\phi$ の近くにはフィボナッチ数を分母とする有理数が両側にある。しかし、なぜ $2-\phi$ を近似する他の有理数は斜列線として現れないのであろうか。斜列線の現れ方を整理してみる。図 33 のような状況を考える。円柱が G 成長することにより原基が円柱の端に発生する。このような状況ではどのような斜列線が見えるのか。図 34 は黄金角の場合である。パラメータ G を小さくしていくと斜列線は隣のフィボナッチ数に遷移する。それを図 35 に示した。

このことから結論から言うと開度角の比率 $a = 2-\phi$ を近似する有理数のうち、分母が大きくなるものが重要である。なぜなら、斜列線は近くの点を脳が結ぶことによって見える。 G の値にもよるが、あまり離れた番号の点は、遠すぎて斜列線を構成できない。開度角の比率 a を近似する分数の分母が大きすぎると、その分母に対応する斜列線は見えないからである。このような、無

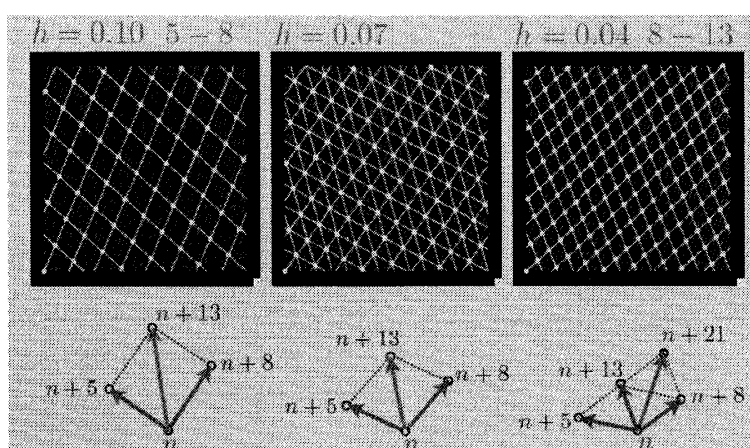


図 35: 斜列線の遷移

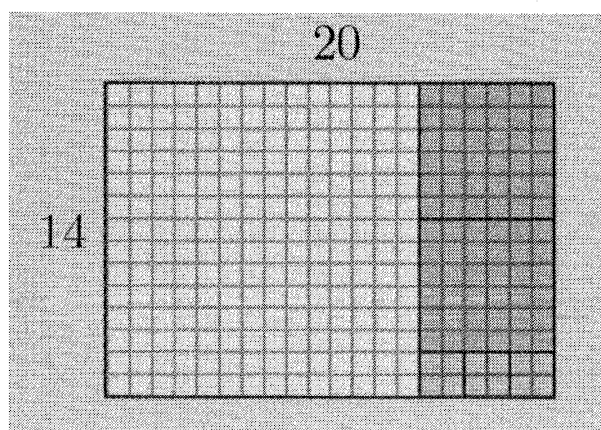


図 36: ユークリッドの互除法

理数の有理数による近似は連分数展開により扱うことができる。

6.2 有理数の連分数展開

連分数展開を述べる前にユークリッドの互除法について話をする。図 36 にあるように 20×14 の長方形を一樣な大きさの正方形で分割する問題を考える。この問題はユークリッドの互除法を使えば簡単に解ける。それは、短い方の辺で正方形分割していけばよい。これを記号で表すと、

$$\begin{aligned}
 \gcd(20, 14) \\
 &= \gcd(14, 6) \\
 &= \gcd(6, 2) \\
 &= \gcd(2, 0)
 \end{aligned}$$

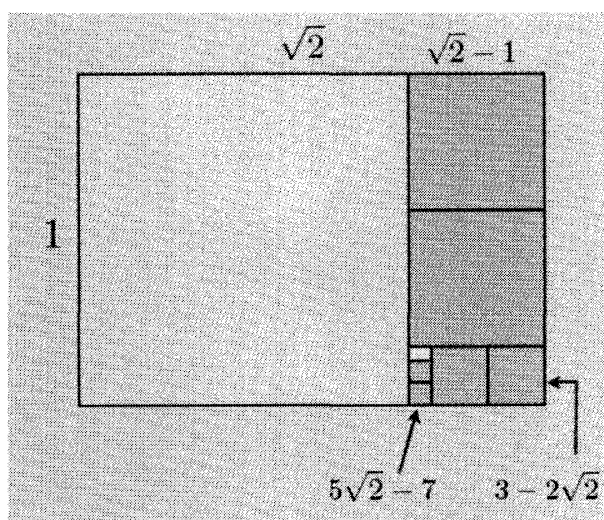


図 37: ユークリッドの互除法無理数版

となって、 2×2 のタイルで埋め尽くすことが出来る。このユークリッドの互除法と同じ手続きで連分数展開はすることができる。

$$\frac{20}{14} = 1 + \frac{6}{14} = 1 + \frac{1}{\frac{14}{6}} = 1 + \frac{1}{2 + \frac{2}{6}} = 1 + \frac{1}{2 + \frac{1}{\frac{6}{2}}} = 1 + \frac{1}{2 + \frac{1}{3}} \quad (75)$$

これを

$$\frac{20}{14} = \langle 1, 2, 3 \rangle \quad (76)$$

と表して連分数展開と呼ぶ。有理数の連分数展開は有限で終わる。

$$\langle a_0, a_1, \dots, a_n \rangle = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots \frac{1}{a_{n-1} + \frac{1}{a_n}}}}} \quad (77)$$

逆に有限連分数で表されるものは当然有理数である。

6.3 無理数の連分数展開

今度は、無理数のユークリッド互除法を考える。例として図 37 に $\sqrt{2} \times 1$ を示している。無理数の場合も前節と同じことをすると、

$$\begin{aligned} & (\sqrt{2}, 1) \\ \rightarrow & (1, \sqrt{2} - 1) \\ \rightarrow & (\sqrt{2} - 1, 3 - 2\sqrt{2}) \\ \rightarrow & (3 - 2\sqrt{2}, 5\sqrt{2} - 7) \end{aligned}$$

となる。無理数なので有限回数操作では終わらない。連分数展開する無理数を ω とする。

$$\omega = a_0 + b_1, a_0 = [\omega], 0 < b_1 < 1 \rightarrow \omega_1 = \frac{1}{b_1}$$

ここで a_0 は ω に整数でもっとも近いものである。故に残りの b_1 は無理数である。同じ操作を ω_1 について行くと

$$\omega_1 = a_1 + b_2, a_1 = [\omega_1], 0 < b_2 < 1 \rightarrow \omega_2 = \frac{1}{b_2}$$

...

$$\omega_k = a_k + b_{k+1}, a_k = [\omega_k], 0 < b_{k+1} < 1 \rightarrow \omega_{k+1} = \frac{1}{b_{k+1}}$$

このようにすれば無理数の連分数を求めることが出来る。故に

$$\langle a_0, a_1, \dots, a_k, \omega_{k+1} \rangle = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots \frac{1}{a_k + \omega_{k+1}}}}} \quad (78)$$

無理数 ω 対してこの展開は有限では終わらない。無限長の連分数展開が得られる。

$$\omega = \langle a_0, a_1, \dots, a_k, \dots \rangle \quad (79)$$

6.4 メビウス変換

メビウス変換を使うと系統的に連分数展開を扱うことが可能である。

2×2 の実係数行列 A に対し、リーマン球面上の変換 T_A を

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

$$T_A z = \frac{az + b}{cz + d}$$

で定義する。メビウス変換 T_A は次の性質を満たす。

$$T_A B = T_A T_B$$

$$T_I = id$$

$$T_{A^{-1}} = T_A^{-1}$$

以下では、簡単のため

$$T_A z = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} z$$

と書くことにする。

このメビウス変換を使って連分数展開を表わすと

$$\begin{aligned}\omega &= a_0 + \frac{1}{\omega_1} = \frac{a_0\omega_1 + 1}{\omega_1} = \begin{pmatrix} a_0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_1 &= a_1 + \frac{1}{\omega_2} = \frac{a_1\omega_2 + 1}{\omega_2} = \begin{pmatrix} a_1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \omega_2 \\ &\dots\end{aligned}$$

$$\omega_k = a_k + \frac{1}{\omega_{k+1}} = \frac{a_k\omega_{k+1} + 1}{\omega_{k+1}} = \begin{pmatrix} a_k & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \omega_{k+1}$$

となる。故に無理数 ω は

$$\begin{aligned}\omega &= \begin{pmatrix} a_0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} a_k & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \omega_{k+1} \\ &= \begin{pmatrix} p_k & p_{k-1} \\ q_k & q_{k-1} \end{pmatrix} \omega_{k+1}\end{aligned}$$

p_k と q_k に関する漸化式と初期条件は

$$\begin{aligned}p_k &= p_{k-1} + p_{k-2} & p_0 &= 1, p_{-1} = 1 \\ q_k &= q_{k-1} + q_{k-2} & q_0 &= 1, q_{-1} = 0\end{aligned}$$

である。さて、無理数 ω_k を a_k で置き換えた $\langle a_0, a_1, \dots, a_k, a_{k+1} \rangle$ を ω の k 次近似分数と呼ぶ。

$$\begin{aligned}\langle a_0, a_1, \dots, a_k \rangle &= \begin{pmatrix} a_0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} a_{k-1} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} a_k \\ &= \begin{pmatrix} p_{k-1} & p_{k-2} \\ q_{k-1} & q_{k-2} \end{pmatrix} a_k = \frac{p_{k-1}a_k + p_{k-2}}{q_{k-1}a_k + q_{k-2}} = \frac{p_k}{q_k}\end{aligned}$$

無理数 ω の連分数展開 $\langle a_0, a_1, \dots, a_k, \dots \rangle$ の k 次近似分数 $\frac{p_k}{q_k} = \langle a_0, a_1, \dots, a_k \rangle$ は次を満たすことが数学的に示されている。

$$\frac{p_0}{q_0} < \frac{p_2}{q_2} < \dots < \omega < \dots < \frac{p_3}{q_3} < \frac{p_1}{q_1} \quad (80)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{p_k}{q_k} = \omega \quad (81)$$

$$\left| \omega - \frac{p_k}{q_k} \right| < \frac{1}{q_k^2} \quad (82)$$

また、連分数近似の最適性を示す次の2つの命題が成立する。

- ω を無理数とする。このとき $\left| \omega - \frac{p_k}{q_k} \right| < \frac{1}{q_k^2}$ を満たす有理数 $\frac{p}{q}$ が無限に存在し、それらはすべて ω の連分数展開における近似分数である。

- $\frac{p}{q}$ を ω の連分数展開における近似分数とする。このとき、 $Q < q$ であるような任意の分数 $\frac{P}{Q}$ に対し $\left| \omega - \frac{p}{q} \right| < \left| \omega - \frac{P}{Q} \right|$ 成り立つ。

ここでいう、近似の良さとは有理数の分母の大きさ (の逆数) に対する近似誤差の小ささを意味している。そこで、この連分数で黄金比 ϕ を近似すると (再帰的に代入する)

$$\phi = 1 + \frac{1}{\phi} = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{\phi}} = 1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{\phi}}} = \dots$$

となって

$$\phi = \langle 1, 1, 1, \dots \rangle$$

となる。これはもっとも収束の遅い連分数近似である。 k 次近似分数 $\frac{p_k}{q_k}$ は式 (80) であった、これはフィボナッチ数列である。このようにフィボナッチ数列は黄金比を近似するもっとも良い (分母が小さい割に近似が良いという意味で) 有理数である。

黄金比の周りには連分数近似によって得られた (フィボナッチ数列の隣接 2 項の比がえられる) あまり分母の大きくない有理数がぎっしりつまっている。G の値に応じて最も斜列線として見えやすい分母の値が決まり、それがフィボナッチ数列の隣接 2 項になっている。しかも、対応する 2 つの有理数は黄金比を挟んで位置しているので、見えている 2 本の斜列線の傾きは (松ぼっくりの場合は巻き方向) は逆になっていつのである。

参考文献

- [1] T. R. Malthus "人口論" (1978)
- [2] J. D. Murray "Mathematical Biology" (1989)
- [3] A. M. Turing (1952) Phil.Trans. R. Soc. B **237** 37
- [4] S. Kondo and R. Asai, Nature(1995) **376** 765
- [5] N. Suzuki, M. Hirata and S. Kondo, Proc. Nat. Acad. Sci. (2003) **100** 9680
- [6] R. Fitz-Hugh Biophys. J. (1961) **1** 445 J. Nagumo S. Arimoto, S. Yoshizawa Proc. IRE **50** 2061
- [7] J.S.Langer, *Directions in Condensed Matter Physics*, eds. G.Grinstein and G.Mazenko, World Sci. Publ. (1986), 165.
- [8] G. Caginalp, Phys. Rev. **A39** (1989), 5887-5896.

- [9] O.Penrose and P.C.Fife, *Physica* **D43** (1990), 44.
- [10] R. Kobayashi, *Bull. Jpn. Soc.Ind. Appl. Math.*, Vol.1 (1991), 22.
- [11] R. Kobayashi, *J. Jpn. Assoc. Cryst. Growth*, Vol.18 (1991), 209.
- [12] R.Kobayashi, "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth", *Physica* **D63** (1993), 410.
- [13] S. -L. Wang, R. F. Sekerka, A. A. Wheeler, B. T. Murray, S. R. Coriell, R. J. Braun, and G. B. McFadden, *Physica* **D69** (1993), 189.
- [14] A. A. Wheeler, W. J. Boettinger and G. B. McFadden, *Phys. Rev.* **A45** (1992), 7424.
- [15] J.A. Warren and W.J. Boettinger, *Acta Metall. Mater.*, Vol.42 (1995), 689.
- [16] S.G. Kim, W.T. Kim, and T. Suzuki, *Phys. Rev.* **E60** (1999), 7186.
- [17] I. Steinbach, F. Pezzolla, B. Nestler, M. BeeBelber, R. Prieler, G.J.Schmitz, and J.L.L. Rezende, *Physica* **D94** (1996), 135.
- [18] B. Nestler and A.A. Wheeler, *Physica* **D138** (2000), 114.
- [19] M. Seeselberg, J. Tiaden, G.J. Schmitz and I. Steinbach, *Proc. the 4th Decennial Int. Conf. on Solidification Processing*, Univ. of Sheffield, Sheffield (1997), 440.
- [20] R. Kobayashi, J. A. Warren, and W. C. Carter, *Physica* **D119** (1998), 415.
- [21] R. Kobayashi, J. A. Warren, and W. C. Carter, *Physica* **D140** (2000), 141.
- [22] R. Kobayashi, *Proc. of Free Boundary Problem, Kyoto 2000*, eds. Y. Giga et al., 数理解析研究所講究録 1210 (2001), 68.
- [23] M. Ode, J.S. Lee, S.G. Kim, W.T. Kim and T. Suzuki, *ISIJ Int.*, Vol.40 (2000), 870.
- [24] M. Ode, S.G.Kim and T. Suzuki, *ISIJ Int.* Vol.41 (2001),1076.
- [25] *Phyllotaxis, A Systemic Study in Plant Morphogenesis* (Cambridge Studies in Mathematical Biology)