

時空間パターンの分岐解析

大阪大学・大学院基礎工学研究科 小川知之 (Toshiyuki Ogawa)
Graduate School of Engineering Science
Osaka University

よく知られているように、自発的なパターン形成は生物学の問題のみならず熱対流や化学反応など様々な問題に現れる。個々のパターンの発生機構は異なっても、一見似たような振る舞いをすることが多い。これは系の持つ対称性に起因して分岐解の構造が決まるからで、その観点で分岐理論による分類が有用である。しかしながら、仮に解の局所的な分岐構造を知るだけでもパターンの構造分類だけでは不十分で、個々の系での分岐解析が不可欠であることも多い。これは系のもつ対称性だけで可能な分岐構造が絞り込めないことがあるからである。空間 2 次元以上の問題や 1 次元でも振動パターンの発生時には分岐解析がパターンの理解・制御に必要である。例えば空間 2 次元ではストライプパターンが生じるのかそれともドットパターンが生じるのか、円周上の振動パターンの場合には回転波が生じるのか定在波が生じるのかといった問題がそれにあたる。

さて、空間的に一様な状態から何らかのパターンが生じるという場合、まずそれが定常分岐なのかそれとも非定常分岐なのかを区別すると理解が一步深まる。そのためには一様定常解のまわりで線形化解析を行えばいい。パターンが生じるからにはいくつかの固有値が分岐点で実部負から正に転ずる。その固有値が実数のときに定常分岐で、複素共役な複素固有値のペアのときに非定常分岐（ホップ分岐）である。またそのような臨界を迎える固有値に対応する固有関数を臨界モードと呼びその関数が出現するパターンのオンセットを決定する。

パターンの定常分岐を与える機構の最たるものが、反応拡散系のチューリング不安定化や熱対流のレーリー不安定化である。これらに関してはここで詳しく述べる必要はないであろう。[1][3]などを参照してもらいたい。本稿では、パターンの非定常分岐として最近盛んに研究されつつあるウェーブ分岐についてその不安定化の機構と分岐解析を紹介しよう。なお、もちろんパターンダイナミクスの全貌を知るには、特異摂動論的なアプローチや数値シミュレーションなど総合的な知見も必要であるが、これらには触れない。

1 ウェーブ分岐

生態学の捕食者被捕食者系や BZ 反応などの化学反応で振動現象が現れることはよく知られている。こうした時間的に振動するメカニズムを内在するダイナミクスを空間的に結合すると、一般に複雑な時空間パターンが現れる。そこでまずは振動場の反応拡散系でどのような挙動が現れるかを理解したい。振動解の分岐は Hopf 分岐としてとらえられるが、時空間周期振動の場合には、次の 2 つを区別しなければならない。ひとつは空間波数 0 の、すなわち空間一様な時間振動解への Hopf 分岐である。これは実質常微分方程式系の Hopf 分岐である。もうひとつは空間的に非零波数をもつモードへの Hopf 分岐である。系のもつパラメーターが変化するとこれらの Hopf 分岐が一般に異なるパラメーター値で起こる。もし波数 0 の Hopf 分岐が先に生じてそれによる周期軌道が漸近安定であれば、空間非一様な時間振動が安定に観測されることは（少なくとも局所的には）ない。逆に非零波数の Hopf 分岐が波数 0 の Hopf 分岐よりも先に起これば空間非一様な時間振動が観測されることになる。これを、前者と区別するためにウェーブ分岐と呼ぶ。ウェーブ分岐が起きるときには常に $\pm k$ という 2 つのモードが重複して臨界になることに注意する。2 種の反応拡散系ではウェーブ分岐が第 1 番目の不安定化としては起きないことは、あとで簡単に説明するが、そのようなわけで応用数学者がウェーブ分岐という現象を意識することは少なかったかもしれない。化学反応系では 1980 年代にはすでに対応する現象が見つかったが、ウェーブ分岐と Hopf 分岐を混同して説明しているケースもあるので注意されたい。ウェーブ分岐とい

う言葉は 1990 年代に理論物理学方面で使われだしたようである。生態学の分野では [5] などで捕食者被
捕食者系でウェーブ分岐が示唆されている。

まず漸近安定な周期軌道をもつ最も次元の低い簡単なダイナミクスを考えよう。

$$\begin{aligned}\dot{u} &= f(u, v) := p(u - v - u^3) \\ \dot{v} &= g(u, v) := qu - v\end{aligned}$$

平衡点のまわりの線形化行列を調べれば定数 $q > 1$ のとき、 $p = 1$ が Hopf 分岐点で $p > 1$ でリミット
サイクルが出現することがわかる。さて、これに対応する反応拡散系は

$$\begin{aligned}u_t &= D_1 \Delta u + f(u, v) \\ v_t &= D_2 \Delta v + g(u, v)\end{aligned}$$

である。この 2 成分反応拡散系の自明な空間一様定常解のまわりの波数 k の線形化安定性は、 $(u, v) =$
 $(C_u, C_v)e^{ikx+\lambda t}$ を代入して得られる次の行列の固有値の挙動による。

$$A_k = \begin{pmatrix} p - D_1 k^2 & -p \\ q & -1 - D_2 k^2 \end{pmatrix}$$

$\text{Trace} A_k = p - 1 - (D_1 + D_2)k^2$ であるので

$$C_H := \{(p, k); \text{Trace} A_k = 0\} = \{p = 1 + (D_1 + D_2)k^2\}$$

が（固有値の虚部が非零であれば）Hopf 分岐の臨界集合である。従って $k = 0$ のモードが最も早く
 $p = 1$ で Hopf 分岐を起こし、それ以外の空間的に非一様なモードは（仮に Hopf になるとしても）後発
で Hopf 分岐を起こすので、空間非一様な時間振動解が観測されることはない。

さて、この 2 種の振動系に負のフィードバック効果をもつ別の種を加え、次のような 3 種反応拡散系
を考えよう。

$$\begin{aligned}u_t &= D_1 \Delta u + f(u, v) - sw \\ v_t &= D_2 \Delta v + g(u, v) \\ \tau w_t &= D_3 \Delta w + u - w\end{aligned} \tag{1.1}$$

ここで種 w の反応時定数 τ が小さいとすると、適当にフィードバック効果の定数 s と拡散係数をとれ
ばウェーブ分岐が起こることがわかる。直感的には、 $\tau = 0$ として、形式的に

$$D_3 \Delta w + u - w = 0$$

から w を解き、

$$w = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|x-\eta|/\sqrt{D_3}} u(\eta) d\eta.$$

したがって次の大域結合した 2 種の反応拡散系に帰着される。

$$\begin{aligned}u_t &= D_1 \Delta u + f(u, v) - s \int e^{-\frac{|x-\eta|}{\sqrt{D_3}}} u(\eta) d\eta \\ v_t &= D_2 \Delta v + g(u, v)\end{aligned} \tag{1.2}$$

この系の自明な空間一様定常解のまわりの線形化行列は

$$\tilde{A}_k = \begin{pmatrix} p - D_1 k^2 - \frac{s}{1 + D_3 k^2} & -p \\ q & -1 - D_2 k^2 \end{pmatrix}$$

となり、上と同様、

$$\tilde{C}_H := \{(p, k); \text{Trace} \tilde{A}_k = 0\} = \left\{ p = 1 + (D_1 + D_2)k^2 + \frac{s}{1 + D_3 k^2} \right\}$$

が Hopf 分岐の臨界集合である。ここで

$$\begin{aligned} p &= 1 + (D_1 + D_2)k^2 + \frac{s}{1 + D_3 k^2} \\ &= \frac{D_1 + D_2}{D_3} (1 + D_3 k^2) + \frac{s}{1 + D_3 k^2} + 1 - \frac{D_1 + D_2}{D_3} \\ &\geq 2\sqrt{s \frac{D_1 + D_2}{D_3}} + 1 - \frac{D_1 + D_2}{D_3} \end{aligned}$$

であり等号成立は

$$(1 + D_3 k^2)^2 = \frac{s D_3}{D_1 + D_2}$$

のときである。この最小値を達成する波数 k が非零であれば、すなわち

$$\frac{s D_3}{D_1 + D_2} > 1 \quad (1.3)$$

であることがウェーブ分岐の必要条件であることがわかる。図 1 に $\tilde{C}_H$ を図示する。

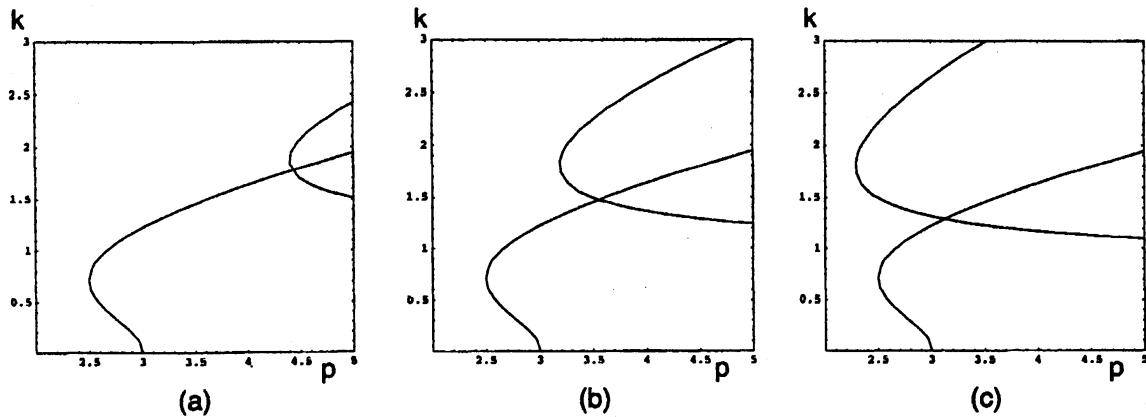


図 1: Hopf の中立安定曲線 $\tilde{C}_H$ と $\det \tilde{A}_k = 0$ の曲線を描く。 $q = 1.5, D_3 = 2.0, s = 2.0$ として (a)(b)(c) それぞれ $(D_1, D_2) = (0.5, 0.5), (0.4, 0.6), (0.3, 0.7)$ とした。 (a)(b)(c) で不変の曲線が $\tilde{C}_H$ でウェーブ不安定性が波数 0.7 付近で生じているのがわかる。また $\det \tilde{A}_k = 0$ を横切るところではチューリング不安定化が生じる。

なお、実際に Hopf 分岐になるためには固有値の虚部が非零にならなければならないが、これには次のような条件が必要である。すなわち $\text{Trace} \tilde{A}_k = 0$ となるところで、 $\det \tilde{A}_k > 0$ であればよい。図 1 で $\det \tilde{A}_k = 0$ の曲線の左側の領域が $\det \tilde{A}_k > 0$ と対応する。詳細は省くが一般に D_1 が D_2 や k_0 に比べて大きければよい。また τ が小さい正数であるとき元の 3 種系では、波数 k に対応する固有値は三つあり、そのうちの二つが $\tilde{A}_k$ の固有値で近似され、もう一つは絶対値の大きい負の数である。

ウェーブ分岐が生じるための必要条件 (1.3) は D_1 と D_2 の和のみによるので、(1.3) を満足したまま同時にチューリング不安定化を生じさせるようにもできる (図 1(c) の $p = 2.5$ 付近)。その際にはウェーブ不安定化とチューリング不安定化のそれぞれの臨界モードの相互作用が問題になる。

2 ウェーブ分岐の分岐解析

ここでは、大域結合した2種の反応拡散系(1.2)を長さ $L > 0$ の円周上で考え、そこでの分岐解析の概略を紹介する。すなわち空間変数 $x \in \mathbb{R}$ とし周期境界条件: $u(t, x+L) = u(t, x), v(t, x+L) = v(t, x)$ を与えよう。ただし前節で与えた非線形項よりも一般的に次のような f, g で考える。

$$\begin{aligned} f(u, v) &= p(u-v) + a_1 u^2 + 2b_1 uv + c_1 v^2 - du^3 \\ g(u, v) &= qu - v + a_2 u^2 + 2b_2 uv + c_2 v^2 \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで、 $a_1, b_1, c_1, a_2, b_2, c_2, d$ は実定数である。もちろんこれらの定数により、常微分方程式系の Hopf 分岐が亜臨界になったりすることもあるが、それも含めて分岐解析で明らかになる。なお、ここで紹介する定式化はウェーブ分岐の典型的なもので3種系(1.1)でも基本的には同様である。

さて、周期境界条件を課したことから方程式をフーリエモードに分解しよう。すなわち基本波数 $k_0 = 2\pi/L$ を用いて $u(t, x) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \alpha_m(t) e^{imk_0 x}, v(t, x) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \beta_m(t) e^{imk_0 x}$ とフーリエ展開してこれを方程式系(1.2)に代入することにより次のようなフーリエ係数に関する方程式系が得られる。

$$\begin{pmatrix} \dot{\alpha}_m \\ \dot{\beta}_m \end{pmatrix} = A_m \begin{pmatrix} \alpha_m \\ \beta_m \end{pmatrix} + (h.o.t), \quad m \in \mathbb{Z} \quad (2.2)$$

ここで各モードの線形化行列 A_m は前節の $\tilde{A}_k$ を用いて $A_m = \tilde{A}_{mk_0}$ と表せる。したがって(2.2)の固有値は行列 A_m の固有値から成る離散的な集合である。また $\tilde{C}_k$ 上の $k = mk_0, m \in \mathbb{Z}$ であるような点を、パラメータ p が横切る毎に行列 A_m のトレースが0になり、($\det A_m > 0$ という付加的な条件の下で) Hopf 分岐が起こる。したがってウェーブ分岐が起きる際には、図2のように3つのケースがあることがわかる。すなわち、(a) ある n という非零のモードがまず最初に Hopf 分岐を起こす、(b) ある $n, n+1$ という二つの非零のモードがまず最初にしかも同時に Hopf 分岐を起こす、(c) 0, 1 モードがまず最初にしかも同時に Hopf 分岐を起こす、のいずれかがある。実際には非零の m と $-m$ モードは同じ行列 A_m を持つので、(a) では $\{n, -n\}$ が、(b) では $\{n, -n, n+1, -(n+1)\}$ が、(c) では $\{0, 1, -1\}$ が、それぞれ臨界モードとなる。当然(b)(c)のケースは複雑なので簡単のため以下(a)の場合に限って考えることにする。なお、 $u, v \in \mathbb{R}$ なのでフーリエ係数はエルミート対称性: $\alpha_m = \overline{\alpha_{-m}}, \beta_m = \overline{\beta_{-m}}$ を持つことに注意しよう。

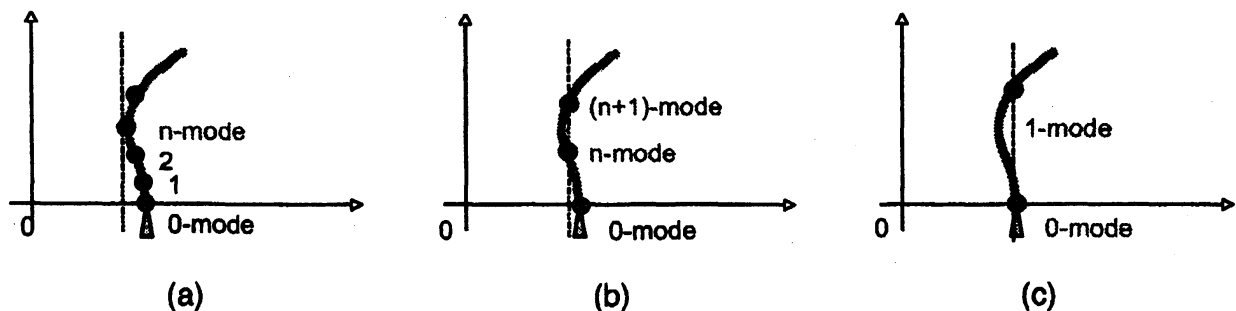


図 2: 中立安定曲線上と各モードの挙動。

周期境界条件下では次のようなことがいえる。すなわち(a)の $\pm n$ -モードが臨界の場合、一様定常解

のまわりの解のダイナミクスは次の複素 2 次元のダイナミクスと同等である。

$$\begin{cases} \dot{z}_1 = \mu_1 z_1 - z_1(g_{11}|z_1|^2 + g_{12}|z_{-1}|^2) + O(\|(z_1, \bar{z}_1, z_{-1}, \bar{z}_{-1})\|^4) \\ \dot{z}_{-1} = \mu_1 z_{-1} - z_{-1}(g_{12}|z_1|^2 + g_{11}|z_{-1}|^2) + O(\|(z_1, \bar{z}_1, z_{-1}, \bar{z}_{-1})\|^4) \end{cases} \quad (2.3)$$

ここで, g_{11}, g_{12} は系のもつ非線形項とモード数 n から決まる複素数である。またこの方程式系の変数 (臨界モード) $z_n \in \mathbb{C}, n = \pm 1$ は本質的には n -モードの複素フーリエ係数 $\tilde{\alpha}_n + i\tilde{\beta}_n$ である。さらに $(\tilde{\alpha}_n, \tilde{\beta}_n)$ はもとのフーリエ係数 (α_n, β_n) の適当な 1 次変換である。この標準形 (2.3) は周期境界条件からくる $SO(2)$ 対称性からも導くことができるが、実際には g_{11}, g_{12} を求めないとダイナミクスの特性が明らかにならない。次に述べる係数計算法に従えば、同時に (2.3) も導出される。

さて, (a) の場合, 臨界モードの線形化行列 $A_n = A_{-n}$ は $\mu = \nu \pm i\omega$ という複素数固有値をもち特に分岐点では $\nu = 0, \omega \neq 0$ である。まずは

$$T_1 A_1 T_1^{-1} = \begin{pmatrix} \nu_1 & -\omega_1 \\ \omega_1 & \nu_1 \end{pmatrix}.$$

を満たすように T_1 を適当にとり線形化行列 A_n を実標準形に変換する。すなわち座標変換:

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{\pm 1} \\ \tilde{\beta}_{\pm 1} \end{pmatrix} = T_1 \begin{pmatrix} \alpha_{\pm 1} \\ \beta_{\pm 1} \end{pmatrix}.$$

を施す。さらに $z_{\pm n} = \tilde{\alpha}_{\pm n} + i\tilde{\beta}_{\pm n}$ により臨界モードのフーリエ係数だけ複素数座標にすれば次のような形の方程式で臨界モードのダイナミクスが記述される。

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= \mu_1 z_1 + Q(z_1, z_{-1}, \bar{z}_1, \bar{z}_{-1}, \hat{\alpha}, \hat{\beta}) \\ \dot{z}_{-1} &= \mu_1 z_{-1} + Q(z_{-1}, z_1, \bar{z}_{-1}, \bar{z}_1, \hat{\alpha}, \hat{\beta}) \end{aligned}$$

ここで Q は 2 次以上の項で $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ は $\{(\alpha_m, \beta_m); |m| \neq n\}$ を表す。中心多様体理論に基づいて臨界モードが $|z_{\pm 1}| = O(\delta)$ に留まる限り隷属モード $|\alpha_m| = O(\delta^2)$ であることが言える。これにより上の式の $O(\delta^3)$ までの項は臨界モードとその隣のモード $\alpha_0, \beta_0, \alpha_{\pm(n\pm 1)}, \beta_{\pm(n\pm 1)}$ のみで表される。さらに、適当な近恒等変換 (標準形変換) を施すことにより、すべての 2 次の項と、次に 3 次でも上に述べた標準形 (2.3) に現れる項以外は消去できることがわかる。こうした計算を明示的に行うことにより、(2.3) が得られる。以上の標準形計算の詳細は [8] を参照してもらいたい。

標準形の中に現れる 3 次の係数の実部が解の挙動の解析に重要な意味をもつ。実際、仮に $\Re g_{11}, \Re g_{12}$ が共に正で $\Re g_{11} < \Re g_{12}$ であれば単一モード解が安定である。逆に $\Re g_{11} > \Re g_{12}$ であれば複合モード解が安定になる。単一モード解は、右回りか左回りかの波数 n の回転波になり、複合モード解は波数 n の定在波になることがただちにわかる。

3 ウェーブ分岐で見られる現象

前節で見たように (a) の場合, $\pm n$ のモードが不安定化するので、回転波か定在波が非線形性に応じて選択的に漸近安定になる (図 3 参照)。 (b) の場合は n モードと $n+1$ モードのそれぞれ速度の異なる回転波どうしの相互作用が観測される。この場合も単一モードの複合モードのいずれが安定になるかは非線形項による。 (c) の場合も同様に 0 モードと ± 1 モードの競合でダイナミクスが定まる。これらの詳細に関しても [8] を参照してほしい。

また、図 1 の (c) のようにウェーブ不安定化とチューリング不安定化が同時に起こるような状況では、これも非線形項によるが、これらが共存する図 3(a) のような時空間パターンも得られる。逆に共存せずチューリングモードが最終的に支配するような状況でも過渡期で現れたウェーブモードとの競合の履歴を残す (図 3(b)) ことがある。このようにチューリングパターンの制御にウェーブ不安定化を用いるというアイデアは実用的な意味でも期待されている。

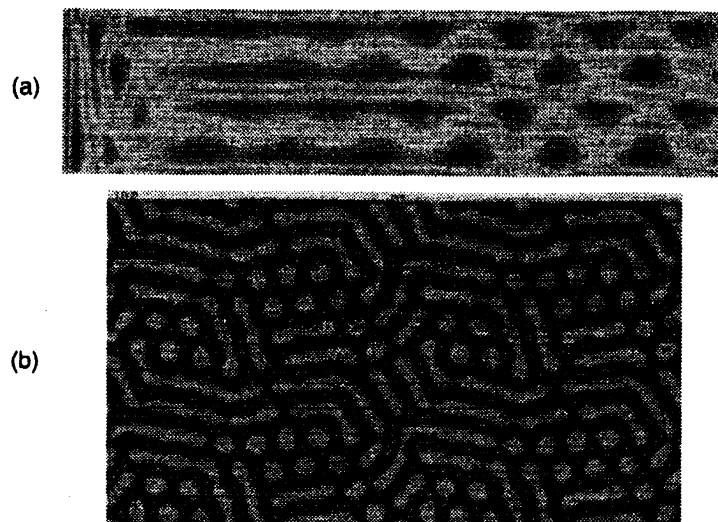


図 3: 3 種系 (1.1) の数値シミュレーション. ウェーブ不安定化 (波数 2) とチューリング不安定化 (波数 4) の競合が見られる. (a) 空間 1 次元. 縦軸: 空間方向 (周期境界), 横軸: 時間. (b) 空間 2 次元で, 周期境界条件を与え, ウェーブモードが沈静化した直後.

参考文献

- [1] 西浦 廉政, 非線形問題 1 - パターン形成の数理, 岩波講座・現代数学の展開 5, 岩波書店 (1999).
- [2] J. CHRISTOPH AND M. EISWIRTH, *Theory of electrochemical pattern formation*, Chaos (AIP), 12(1), 2002, 215-230.
- [3] M. CROSS AND P. HOHENBERG, *Pattern formation outside of equilibrium*, Reviews of Modern Physics, 65(3), 1993.
- [4] A. M. ZHABOTINSKY, M. DOLNIK AND I. E. EPSTEIN, *Pattern formation arising from wave instability in a simple reaction-diffusion system*, J. Chem. Phys. 103(23), 1995.
- [5] S. GOURLEY AND N. BRITTON, J. Math. Biol. 34, 1996
- [6] S. K. KRISHER, N. MAZOUZ AND G. FLATGEN, *Pattern formation in globally coupled electrochemical systems with an S-shaped current-potential curve*, J. Phys. Chem. 104, 2000.
- [7] E. M. NICOLA, M. BAR AND HARALD ENGEL, *Wave instabilities induced by nonlocal spatial coupling in a model of the light-sensitive Belousov-Zhabotinsky reaction*, PRE73, 2006.
- [8] T. OGAWA, *Degenerate Hopf instability in oscillatory reaction-diffusion equations*, DCDS Supplements, Special vol., 784-793, 2007
- [9] F. PLENGE, Y.-J. LI AND K. KRISCHER, *Spatial bifurcations in the generic N-NDR electrochemical oscillator with negative global coupling: Theory and surface plasmon experiments*, J. Phys. Chem. B, 108(38), 2004.
- [10] L. YANG, M. DOLNIK, A. M. ZHABOTINSKY AND I. E. EPSTEIN, *Pattern formation arising from interactions between Turing and wave instabilities*, J. Chem. Phys. 117(15), 2002.