

反応拡散系のパルスダイナミクス

広島大学大学院理学研究科 太田隆夫 (Takao Ohta)

この数年、計算機シミュレーションによって非平衡開放系の波やパルスはそれまで予想していなかった多彩なダイナミクスを発現することが発見されてきた。それらを紹介するとともに、理論的な解明が進んでいる衝突におけるパルスの弾性的反射の機構について述べる。

1. はじめに

非平衡開放系で自己組織的に生じる波としてはペローソフ・ジャボチンスキー反応のらせん波が古くから知られている。らせん波はペローソフ・ジャボチンスキー反応の数理モデルが作られたのとはほぼ同じ頃に発見され、蔵本らの先駆的な研究の後、1980年代にはらせん波に対する実験的、理論的研究が盛んに行なわれた。しかしながら、それらの研究ではらせん波は衝突において、干渉も反射もせず、単に対消滅するのみとして取り扱われた。これは現実の化学反応で実際に対消滅が起こるのであるから当然のことではあった。

しかし、1990年代になってから様相はがらりと変化した。いくつかの反応拡散系において波やパルスが衝突によって奇妙な振る舞いをする例が計算機シミュレーションによって見つかり始めた[1-7]。図1はグレイ・スコット (Gray-Scott) モデルとよばれる次の反応拡散方程式の1次元シミュレーションである[2]。

$$\frac{\partial u(\vec{r})}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + a(1 - u) \quad (1)$$

$$\frac{\partial v(\vec{r})}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - bv \quad (2)$$

二つのパルスが近付いてきて一旦停止し向きを変えて離れ去っていく。パラメータは $D_u = 2D_v = 2 \times 10^{-5}$ 、 $a = 0.025$ 、 $b = 0.055$ である。 $a = 0.02$ 、 $b = 0.079$ では図2のようにパルスが伝搬しながら二つに分裂していき、パルスの密度が大きくなると伝搬も分裂もしなくなり、ほぼ等間隔を保って周期構造をとる。

似た現象は次の反応拡散方程式でも起こる[8, 9]。

$$\tau \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + f(u) - v \quad (3)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + u \quad (4)$$

$D_u = 1$ として非線形関数 $f(u)$ は

$$f(u) = \frac{1}{2} \left[\tanh\left(\frac{u-a}{\delta}\right) + \tanh\left(\frac{a}{\delta}\right) \right] - u \quad (5)$$

の形に選ぶ ($\delta = 0.05$)。衝突においてパルスが安定な例を図3に示してある。この例ではパルスは衝突において、一旦、消滅したかのようにふるまい、その後回復して左右に離れ去っていく。これをパルスの保存とよぶ。パルスがいつまでも伝搬し続けることはできないパラメータではパルスの自己複製が起こる。図4は $D_v = 10$ 、 $\tau = 0.34$ 、 $a = 0.1$ でのシミュレーションである。時間とともに形を変えていき、同時に速度が遅くなり、いったん、

消滅したかに振る舞った後、二つのパルスに分裂し、互いに逆方向に伝搬する。しかも、分裂によって生まれたパルスはある時間伝搬した後、さらに、自己複製を繰り返す。

これらの例で重要なことは、パルスの保存はある限られたパラメータの範囲でのみ起こり、それ以外では対消滅することである。さらに、同じ(鏡映)形、と速度をもつパルスは保存するが対称でないパルスは対消滅することもある。ならば、「対消滅」、「保存」、「分裂」の3つが共存できるパラメータでは何が起こるのであろうか。図5はそのときのパルスの時間発展の様子である[8-10]。 $u = 0.2$ の等高線を描いてある。パルスの自己複製、衝突による対消滅と保存の不思議な繰り返しが見られ、しかも、それが規則正しい自己相似パターンになっている。隣り合うパルスの形と速度が非対称になったときは対消滅し、二つのパルスの対称性がよいときのみ保存が可能である。そのため3世代毎に対称性のよいパルス以外の絶滅が起こる。このパターンは、例えば、 $D_v = 10$ と固定したとき $0.338 < \tau < 0.342$ の範囲で観察される。

なお、パルスの分裂は1次元系にかぎったことではない。グレイ・スコットモデル(1)、(2)の2次元シミュレーションでドメインの自己複製が得られており、さらに、現実の化学反応で類似の分裂が観察されている[11, 12]。

2. 興奮性反応拡散方程式

パルスの保存と分裂に対する理論は始まったばかりである。分裂については西浦、上山が理論を展開しつつある[13]。以下では保存の中でも、おそらくもっともシンプルな弾性的反射に対する理論的試みを紹介する。

(3)と(4)と本質的に同じ形をした

$$\tau \epsilon \frac{\partial u}{\partial t} = \epsilon^2 \nabla^2 u + f(u) - v \quad (6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \nabla^2 v + u - \gamma v \quad (7)$$

を考える[3, 4]。関数 $f(u)$ は

$$f(u) = -u + \theta(u - b) \quad (8)$$

$\theta(x) = 1, x > 0, \theta(x) = 0, x < 0$ である。 b は定数ではなく

$$b = a + \sigma \left[\int (u + v) d\vec{r} - S_0 \right] \quad (9)$$

とする。 $a (< 1/2)$ と仮定し、 S_0 はある定数である。

上の方程式で $\sigma = 0$ とおいたものはペロソフ・ジャボチンスキー反応のもっとも単純化したモデルである。また、(5)で $\delta \rightarrow 0$ では(3)と(4)は(6)と(7)と同等である。安定な一様解として平衡解 $u = v = 0$ しかないときこれらの方程式は興奮性をもつ。すなわち、平衡解からのずれが小さいとき、ただちに平衡解に戻るのに対し、ずれがある範囲を超えたなら、一旦、平衡解から大きく離れ、そのあと、平衡解に回帰する。

方程式(6)と(7)では τ の値が大きいとき、孤立した動かないパルスが安定である。パラメータ τ の値を小さくしていくと、左右対称な変形に対する不安定化(脈動)が起こることが知られている。伝播するパルスを得るにはこの脈動を禁止しなければならない。そのため(9)で $\sigma \rightarrow \infty$ の極限をとり、系全体での $u+v$ の値が時間変化しないように制限を加える。以下では $\epsilon \rightarrow 0$ の極限、すなわち、パルスの境界(界面)の厚さが無限小の極限を考える。

3. パルス方程式

方程式 (6) と (7) からパルス対の運動方程式を導出し弾性的反射を考察することは 1 次元では文献 [14] で行なっている。ここでは、2 次元以上のドメイン（これもパルスとよぶことにする）に適用できるよう理論を拡張しよう [15]。理論の詳細は省き、本質的ないくつかのステップのみを以下では述べる。

まず、2 次元で 1 個の半径 R の円形パルスを考え、動かないパルスから伝播するパルスへの分岐を調べよう。 $S_0 = \pi R^2$ の関係がある。重心の座標を $\vec{\rho}$ とおきその時間発展方程式を (6) と (7) から導出する。 $\epsilon \rightarrow 0$ では (6) は

$$-u + \theta(u - a) - v = 0 \quad (10)$$

となる。パルスの境界を $u = a$ で定義すると、(10) から

$$u = \theta(R - |\vec{r} - \vec{\rho}|) - v \quad (11)$$

となり、これを (7) に代入して

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \theta(R - |\vec{r} - \vec{\rho}|) - \beta v \quad (12)$$

を得る。 $\beta = 1 + \gamma$ である。分岐点の近傍ではパルスの速度は十分小さいので、 v はただちに u の変化に追随する。すなわち、(12) の左辺を摂動としてよい。それゆえ、

$$v = v_0 + v_1 \quad (13)$$

$$v_0 = G\theta \quad (14)$$

$$v_1 = -G^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} + G^3 \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - G^4 \frac{\partial^3 \theta}{\partial t^3} + \dots \quad (15)$$

の展開を得る。 G は

$$(-D\nabla^2 + \beta)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (16)$$

で定義され、かつ、 $GA = \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') A(\vec{r}')$ と略記してある。

一方、 $u = \bar{u}(\vec{r} - \vec{\rho})$ とおくと (6) は

$$-\tau\epsilon\dot{\rho}^\alpha\nabla^\alpha\bar{u} = \epsilon^2\nabla^2\bar{u} - u + \theta(\bar{u} - a) - v \quad (17)$$

ここでは $\epsilon \ll 1$ のスケールに注目しているため v の空間変化は非常に緩やかであることに注意されたい。(17) の平衡解を $\bar{u}_0$ とし、 $\vec{\rho} \neq 0$ による補正を $\bar{u}_1$ とおくと、

$$u = u_0 + u_1 \quad (18)$$

$$\nabla^\alpha\bar{u}_0 = M\theta(R - |\vec{r} - \vec{\rho}|) \quad (19)$$

$$\bar{u}_1 = \tau\epsilon\dot{\rho}^\alpha M\nabla^\alpha\bar{u}_0 + (\tau\epsilon)^2\dot{\rho}^\alpha\dot{\rho}^\beta M^2\nabla^\alpha\nabla^\beta\bar{u}_0 + \dots \quad (20)$$

となる。 M は

$$(-\epsilon^2\nabla^2 + 1)M(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (21)$$

の解である。

以上の準備をした後、 $u = \bar{u}(\vec{r} - \vec{\rho}) + \delta u$ を (6) に代入し、その可解条件から

$$\begin{aligned} & \ddot{\rho}^\beta (\nabla^\alpha \theta, G^3 \nabla^\beta \theta) + [\tau \epsilon (\nabla^\alpha \bar{u}_0, \nabla^\beta \bar{u}_0) - (\nabla^\alpha \theta, G^2 \nabla^\beta \theta)] \dot{\rho}^\beta \\ & + [(\nabla^\alpha \nabla^\delta \theta, G^4 \nabla^\beta \nabla^\gamma \theta) - (\tau \epsilon)^3 (\nabla^\alpha \nabla^\delta \bar{u}_0, M^2 \nabla^\beta \nabla^\gamma \bar{u}_0)] \dot{\rho}^\beta \dot{\rho}^\gamma \dot{\rho}^\delta = 0 \end{aligned} \quad (22)$$

を得る。ドットは時間微分、 $(A, B) = \int d\vec{r} A(\vec{r}) B(\vec{r})$ 、くり返された添字は和をとる。また、 ρ に対する 3 階以上の微分は無視してある。(15) で $\partial \theta / \partial t = -\dot{\rho} \vec{\nabla} \theta$ 等を使った。

同じ半径をもつパルスが 2 個あるときの相互作用は以下のようにして取り入れられる。各々の重心の位置を $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$ として、 $|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2| \gg R$ を仮定すると

$$u = \bar{u}_0^{(1)} + \bar{u}_0^{(2)} \quad (23)$$

が近似的に成立する。 $\bar{u}_0^{(i)} = \bar{u}_0(\vec{r} - \vec{\rho}_i)$, $i = 1, 2$ である。1 番目のパルス近傍では $\bar{u}_0^{(2)}$ の絶対値は十分小さいからそれを摂動として取り扱ってよい。 $\bar{u}_0^{(i)}$ が (17) の平衡解であることを考慮すると

$$\tau \epsilon (\nabla^\alpha \bar{u}_0, \nabla^\beta \bar{u}_0) \dot{\rho}_1^\beta = C_d \nabla_1^\beta \bar{u}_0 (|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|) \quad (24)$$

C_d は d 次元球の体積である。ただし、(24) の左辺の $\bar{u}_0$ は (19) で与えられ、右辺の $\bar{u}_0$ は (14) と (17) から $\bar{u}_0 = -G\theta$ である。

(24) と (22) を比べると相互作用項は (22) の右辺に付け加わることがただちにわかる。 $\bar{u}_0$ が重心のまわりで等方的であることに注意すると、パルス方程式は最終的に次の形をとる。

$$m \ddot{\vec{\rho}}_1 + c(\tau - \tau_c) \dot{\vec{\rho}}_1 + g \vec{\rho}_1^3 = C_d \vec{\nabla}_1 \bar{u}_0 (|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|) \quad (25)$$

正係数 m, c, τ_c, g は (22) から具体的に計算することができる。実際、1 次元では以前に別のもっと体系的な方法で導出した結果 [14] と厳密に一致することを確かめてある。

4. 弾性的衝突

さて、方程式 (25) の性質を検討しよう。まず、 $|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2| \rightarrow \infty$ の極限を考える。このときパルスは速度一定のはずであるから、左辺第 1 項と右辺を無視することができる。その結果、 $\tau > \tau_c$ では $\dot{\vec{\rho}} = 0$ が解であり、 $\tau < \tau_c$ では $\dot{\vec{\rho}} \neq 0$ が安定な解となる。すなわち、 $\tau = \tau_c$ で動かないパルスから動くパルスへの分岐が起こる。

パルス間距離が有限のときは相互作用が働く。 $\bar{u}_0$ は遠くで負の値をとりながらゼロに近づく、距離の増加関数である。それゆえ、 $\vec{\nabla} \bar{u}_0 > 0$ 、すなわち、相互作用は斥力である。

2 個のパルスが衝突する場合を想定しよう。十分遠く離れたところでは (25) の左辺第 2、3 項によってパルスの速度が決まる。分岐点直下ではこの速度は任意に小さいことに注意されたい。すなわち、パルスの「運動エネルギー」は分岐点近傍ではいくらでも小さな値がとれる。一方、斥力相互作用の大きさは τ に依存しない。したがって、「運動エネルギー」が斥力ポテンシャルエネルギーよりも小さいときは慣性 (左辺第 1 項) のため、パルスはあるところまでちかづいた後、反射することになる。分岐点からはなれると速度は増加するからポテンシャルエネルギーの山を超えてパルスは接触することができ、保存束縛条件 $\int (u + v) d\vec{r} = S_0$ のため、その後、パルスは合体してしまうはずである。

以上の考察からパルスの弾性的反射の背後には動かないパルスが動き出す分岐が潜っており、これがそのメカニズムの本質であることがわかる。上の議論は保存力学系の言葉を使っており、少々荒っぽいのが、その正当性は (25) の数値計算によって確認してある。また、次のことも強調しておこう。すなわち、パルス方程式 (25) は特別な反応拡散系 (6) と

(7) から得たものであるが、その構造は出発した方程式の詳細に依存しない一般的なものである。なぜなら、

- (1) 上にのべたように、左辺第 2、3 項は分岐点近傍での標準形である、
- (2) 相互作用項はパルスの子の空間微分で与えられる、そして、
- (3) 慣性項はパルスの運動が他の変数 v に時間遅れで影響を与えることに起因している。

5. おわりに

反応拡散方程式は非線形散逸系のモデル方程式として長い研究の歴史がある。しかし、パルスの衝突における保存、自己複製などは散逸という言葉からはイメージされないものである。この意味で興奮性反応拡散方程式は非平衡開放系を記述するものであるということ強調しておく必要がある。物やエネルギーが定常的に系を貫くとき、パルスが崩壊しなくても、また、増殖してもそれほど不思議ではない。

保存のうち、弾性的反射は理論的にはほぼ理解されていることを 3、4 節で紹介した。しかし、保存可積分系のソリトンのように、衝突においていったん形を乱し、その後元に回復するような場合の理論は手付かずである。同様に、自己複製についてもいくつかの種類があり、その全貌を解明するにはほど遠いのが現状である。

保存、対消滅、分裂の 3 要素が織り成すことによって規則正しい時空間自己相似パターンが現れることは非常に興味深い。現在、実験的にはその存在が確認されてはいないようであるが、非平衡開放系の数理としては発展性のある問題を提起している。パルスの運動という切り口から眺めると非線形偏微分発展方程式と散逸離散力学系とが繋がりをいうことを示唆するものである。

参考文献

- [1] H. Sevcikova and M. Marek, in *Bifurcation and Chaos*, eds. R. Seydel et. al. (Birkhauser Verlag, Basel, 1991).
- [2] V. Petrov, S. K. Scott and K. Showalter, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **347**, 631 (1994).
- [3] K. Krisher and A. Mikhailov, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3165 (1994).
- [4] S. Kawaguchi and M. Mimura, *SIAM J. Appl. Math.* **59**, 920 (1999).
- [5] J. E. Pearson, *Science* **261**, 189 (1993).
- [6] W. N. Reynolds, J. E. Pearson and S. Ponce-Dawson, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2797 (1994).
- [7] W. N. Reynolds, S. Ponce-Dawson and J. E. Pearson, *Phys. Rev.* **E56**, 185 (1997).
- [8] Y. Hayase, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 2584 (1997).
- [9] Y. Hayase and T. Ohta, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1726 (1998).
- [10] Y. Hayase, in the proceedings of the International Conference on Statistical Physics, Tohwa University, 1999.
- [11] K. J. Lee, W. D. McCormick, J. E. Pearson and H. L. Swinney, *Nature* **369**, 215 (1994).
- [12] K. J. Lee and H. L. Swinney, *Phys. Rev.* **E51**, 1899 (1995).
- [13] Y. Nishiura and D. Ueyama, *Physica D* **130**, 73 (1999).
- [14] T. Ohta, J. Kiyose and M. Mimura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 1155 (1997).
- [15] T. Ohta and T. Ito, unpublished.

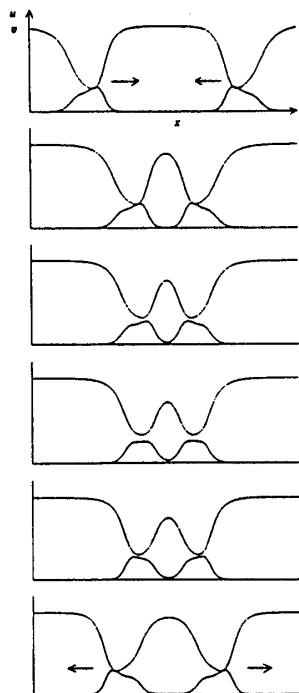


図 1 : パルスの弾性的反射。上から垂れ下がっているのが u 、盛り上がっているのが v 。

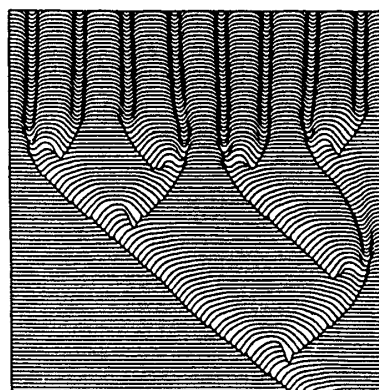


図 2 : パルスの分裂。

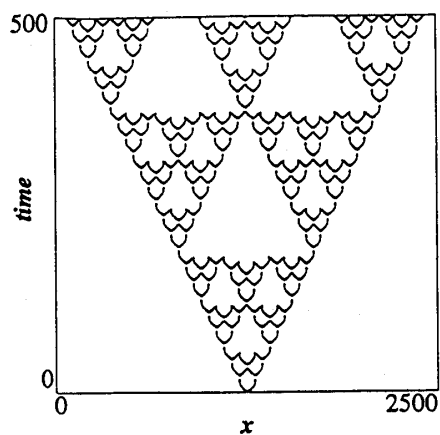


図 5 : 自己相似時空間パターン。

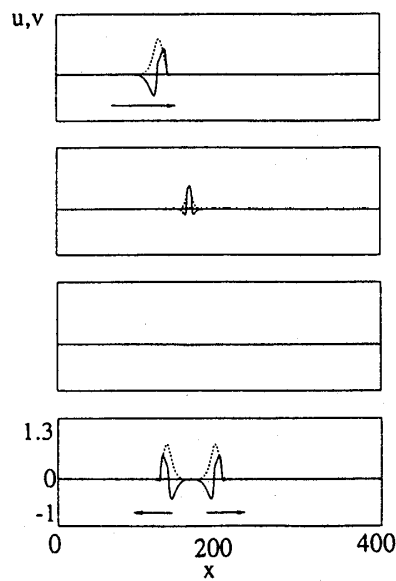
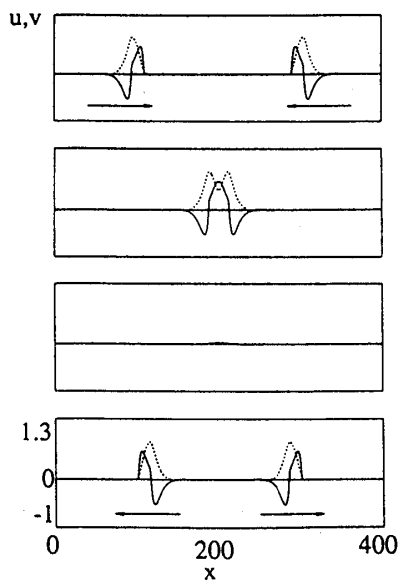


図 3 : パルスの保存 (実線 u 、点線 v)。図 4 : パルスの分裂 (実線 u 、点線 v)。