

Gray-Scott モデルの概要 (Short overview of the Gray-Scott model)

明治大学先端数理科学インスティテュート 上山大信 (Daishin Ueyama)
(Meiji Institute for Advanced Study of Mathematical Sciences, Meiji University)

一般に, Gray-Scott モデルとよばれる方程式系は, 以下のような反応拡散型の方程式系である.

$$\begin{cases} u_t = D_u \Delta u + u^2 v - (F + k)u, \\ v_t = D_v \Delta v - u^2 v + F(1 - v). \end{cases} \quad (1)$$

P.Gray と S.K.Scott は論文 [1, 2] において, CSTR 系 (外部から原料となる化学物質が攪拌反応容器内に連続的に導入され, 生成物質が外部に連続的に排出される実験系) における比較的簡単な自己触媒過程 $A + 2B \rightarrow 3B, B \rightarrow C$ のモデルとその解析を行った. CSTR 内の反応を考慮することから, それらモデルは (1) の拡散項を取り除いた常微分 (ODE) モデルである. その後, J.E. Pearson はこの簡単な反応拡散型の方程式の空間 2 次元モデルの時間発展シミュレーションを様々なパラメーターにおいて実施し, 比較的簡単なモデル方程式において, 自己複製パターンを含む様々な複雑時空間パターンが得られる事を発見した [3]. また, 同時に K.J. Lee 等による FIS 反応の実験の論文が掲載され [4], これらの論文は相互に参照しており, パターンの類似性が指摘されている. しかしながら, Gray-Scott モデルが FIS 反応の直接のモデルではないことは明らかであり, パターンの形状と時間発展が似ているという視点からの議論であった. しかし, 複雑な素過程を含む化学反応系である FIS 反応が示す複雑な時空間パターンが, このような簡単な非線形性を持つ反応拡散方程式で再現されることは驚きである. 得られるパターンは, 定性的には酷似しており, 何らかの関連性はあると考えられるが, そういった観点からの研究はあまり無いように思われる.

多種多様なパターンの時間発展は, 上記方程式の空間 2 次元または空間 1 次元時間発展シミュレーションにて得られるが, 現在は R. Munafò 氏によるすばらしいウェブページ [5] にて空間 2 次元シミュレーションの結果を動画像で手軽に楽しむことができる. まずは, Munafò 氏のウェブページを訪れて頂きたい.

これらのパターンの第一の特徴は, よく知られた Turing パターンにおいてシステムが持つ**不安定な空間一様解**に対して**微小摂動**を与える事から安定な空間非一様解が生じるのに対して, Gray-Scott モデルにおいては**安定な空間一様解**に対して**大きな振幅の局在化した摂動**を与える事から, 複雑時空間パターンが生じる点にある. 例えば, この方程式を適切なパラメーターにおいて時間発展シミュレーションを行うと, 図 1 に見られるような自己複製スポットパターンを見ることができるのであるが, 初期状態 (a) において, スポット形状を持つ初期状態を置くことから, スポットの分裂が励起され, 結果として空間全体がスポットで埋め尽くされる (d). (a) におけるスポット状の初期値の代わりにスポットの大きさに近い四角領域において有限振幅の摂動を加えても同様にパターンが見られるが (実際 [3] においてはそのような初期値が使われている), 空間一様解が安定であるため,

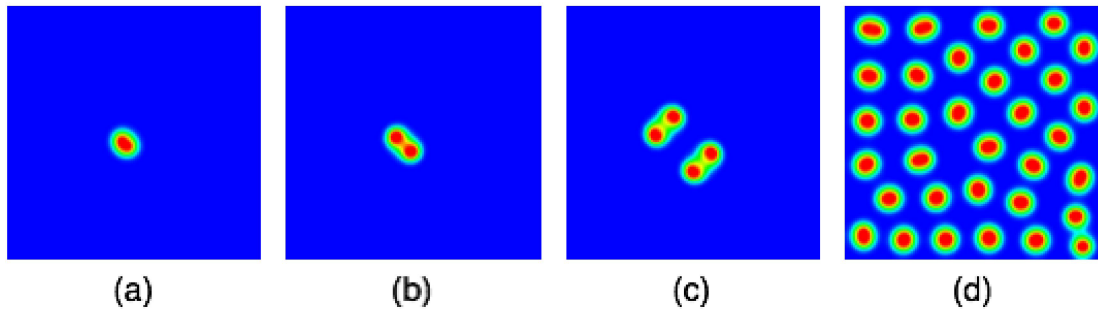


図 1: 空間 2 次元 Gray-Scott モデルに見られる自己複製スポットパターン.

空間一様解に対する微小摂動からは何も生じない. この, 有限摂動からのパターンの生成という特徴は, 先の Lee 等による FIS 反応も同様である. Gray-Scott モデルにおけるパターンは, このように有限摂動から生じるが, その後時間が十分たった後のパターンについては, パラメータによって定常パターンに至る場合 (例えば, スポットが空間全体に広がり, 定常となる等) と, 定常には至らず時空カオスとなる場合もある (例えば, スポットが空間全体に広がるのであるが, 部分的にスポットの消滅が起こり, 消滅部分において再びスポットの分裂が見られる等) [7]. また, 空間 1 次元においても様々な時空パターンを示す. パターンとパラメーターの関係を調べた相図 (図 2) から, 空間 1 次元においても様々な複雑なパターン形成が見られることがわかるだろう.

動画像をご覧になった方はお気づきだろうが, これらのパターンに対する興味は所謂 Turing パターンに対する興味とは大きく異なる. 所謂 Turing パターンにおいては, 空間非一様な状態が空間全体に広がった定常状態が基本的な興味の対象であるのに対し (定常パターンに至る初期段階におこる波数選択の問題はもちろん興味深く, 近年, 桑村氏によって興味深い結果が得られている [9]), Gray-Scott モデルにおいて特徴的なパターンは, 最終状態に至る途中の**遷移パターン**である点にある. このような, **遷移パターン**に対する数理的なアプローチの難しさと面白さが Gray-Scott モデルにはある.

筆者等は, 空間 1 次元 Gray-Scott モデルに見られる自己複製パルスや, 時空カオスに対して, 数値的に大域的な定常解の解構造を得ることからアプローチを行い, 一定の理解を得ることに成功した. 生き生きとした時間発展を示す自己複製パルス解の理解が定常解の大域構造から理解できるということは大変意外なことであった. 詳しくは文献 [6-8] を参照頂きたい. 特に文献 [8] においては, Gray-Scott モデルを, 資源-消費者系の一種と見ることから燃焼モデルと並列した形で構成されている. さらに, 栄氏によるパルスダイナミクス入門的な内容もあり, これから Gray-Scott モデルやそれに似通ったモデルの解析に興味を持つ方には大いに参考になるであろう.

Gray-Scott モデルに対する研究は, 特にパターン形成という立場からは, やはり Pearson による論文の影響が大きい. その後, シミュレーションをベースとした研究, 解析的なアプローチによる研究, Gray-Scott モデルが示す自己複製という性質を用いた応用研究まで様々な発展をみた. 本講究録にも様々な研究が紹介され, その一端を知ることができるだろう. 今後, Gray-Scott モデルという特定のモデルに対する研究がどのように発展するかはよくわからないが, Gray-Scott モデルの研究を通して得られた手法は, 今後様々なより複雑なモデルの解析に利用され, 発展し続けるものと考えている.

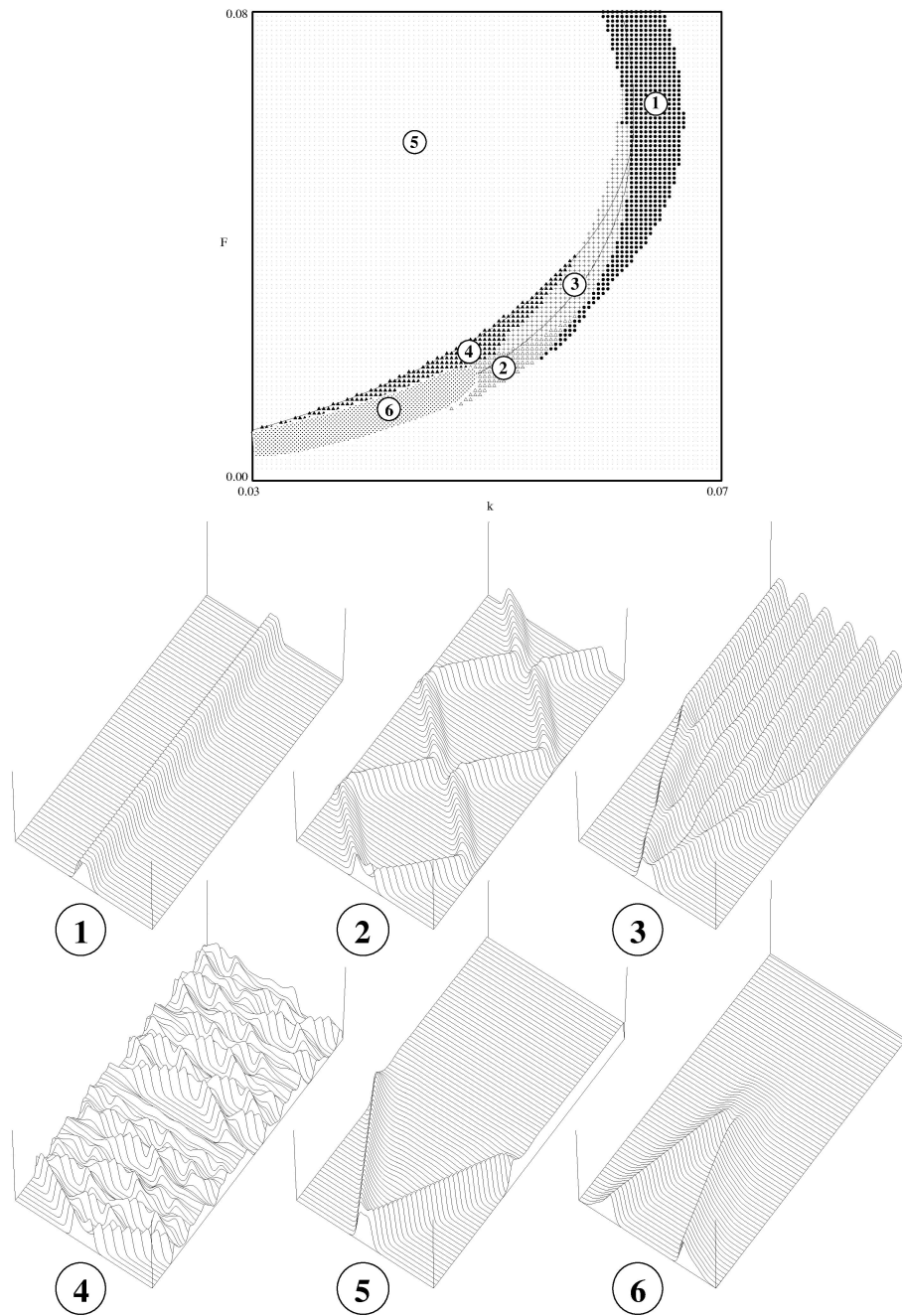


図 2: 1次元 Gray-Scott モデルにあらわれる時空パターンの相図および $v(x, t)$ の鳥瞰図表示. $D_u = 10^{-5}, D_v = 2 \times 10^{-5}, L = 0.5$ とし, 階段型の初期値を用い, 様々なパラメータの組み合わせ (k, F) についてシミュレーションを行った結果により得られた. 自己複製パターンは, 3 の領域で観察される.

参考文献

- [1] P. Gray and S.K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: Isolates and other forms of multistability*, Chem. Eng. Sci. Vol.38 (1983), 29-43.
- [2] P. Gray and S.K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: oscillations and instabilities in the system $A + 2B \rightarrow 3B$, $B \rightarrow C$* , Chem. Eng. Sci. Vol.39 (1984), 1087-1097.
- [3] J.E. Pearson, *Complex patterns in a simple system*, Science Vol.261 (1993),189-192.
- [4] K.J. Lee et al., *Pattern Formation by Interacting Chemical Fronts*, Science Vol.261 (1993),192-194.
- [5] R. Munafo, *Reaction-Diffusion by the Gray-Scott Model: Pearson's parameterization*, <http://mrob.com/pub/comp/xmorphism/index.html>
- [6] Y. Nishiura and D. Ueyama, *A skeleton structure of self-replicating dynamics*, Physica D, 130 (1999), 73-104.
- [7] Y. Nishiura and D. Ueyama, *Spatio-temporal chaos for the Gray-Scott model*, Physica D, 150 (2001), 137-162.
- [8] 三村昌泰監修, パターン形成とダイナミクス, 非線形・非平衡現象の数理 4, 東大出版会 (2006)
- [9] M. Kuwamura, *Deviation from the predicted wavenumber in a mode selection problem for the Turing patterns*, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol. 25, pp.281-303 (2008)