

化学反応のカオスと関連する問題*

京大・理 津 田 一 郎**

(1981年1月12日受理)

§1 はじめに

非平衡関数系に特徴的な分岐構造の一つとしてカオスの問題が注目を集めている。その中でも化学反応系に見られるカオスは、実験室でも再現性よく観測されており、現実的な模型による理論的研究は重要であると思われる。ここでは、ベルーソフ・ジャボチンスキー反応（以下 B-Z 反応と略す。）のカオス、酵素反応のカオス、並びに B-Z カオスとの関連で、神経模型、ファイゲンバウムの問題を簡単に論ずる。

§2 B-Z 反応系におけるカオスと神経興奮の問題

まず、B-Z 反応の簡単な説明を行なう。一言で言えば、セリウムイオン触媒下での、マロン酸の酸化反応であるが、図に示したように、かなり複雑である（図1）。

図の実線で示した経路をもとにして作ったのが、富田、伊藤、太田の提唱した模型¹⁾であるが、オレゴネーターが直接考慮しなかった、マロン酸の反応と



という実験的にも正しい点を考慮したところに、特徴がある。B-Z 反応は持続振動をおこすのに、最低3変数必要な系で、3つの物質として、 Br^- 、 Ce^{4+} と中間生成物の HBrO_2 が考えられる。持続振動についての明解な説明と、オレゴネーターを中心とした模型の詳しい解析はタイソン²⁾によって行なわれているので、そちらを参照してほしい。

現実的な化学反応系で、持続振動が、おこることで注目を集めた B-Z 反応に、カオスが存在することが最近分って来た。

* 本稿は1980年10月2日、日本物理学会（於、福井大）において行なわれたシンポジウム“非平衡系の相転移の動力学”で「化学反応系のカオス」と題して行なわれた講演にもとづく。（その後の発展も多少含む。）

** TSUDA Ichiro

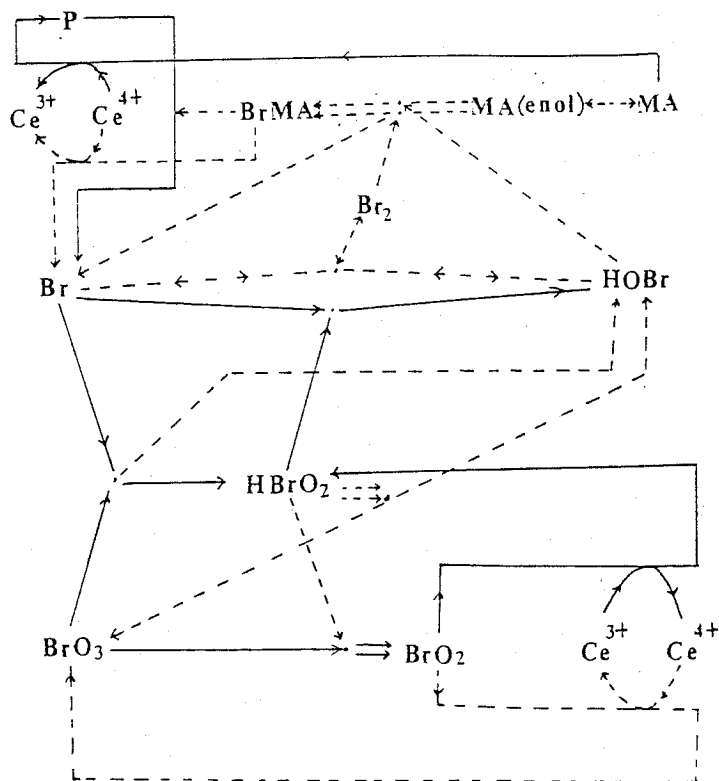


図1 ベルーソフ・ジャボチンスキー反応の反応回路³⁸⁾

Pは例えば $\text{CH}(\text{COOH})_2$ 。MAはマロン酸。

MA(enol) はエノール化されたマロン酸を表わす。

以下 B-Z 反応系のカオスについてみてみよう。

2-1 流動系でのカオスと分岐構造 I

流動系とは、初期物質を一定濃度で、反応容器に流し込み、反応に関与した全ての物質を流入速度と同じ一定速度で、とり出す系をいう。(文献3)参照) この系で、最初に実験的にカオスを発見したのは、シュミッツ、グラジアーニ、ハドソンである。³³⁾ そして、理論的にも(あるいは模型計算)いくつかの説明が試みられた。^{4), 5), 6)} (この辺の詳しい事情は文献3)を参照していただきたい。)

さらに精密な実験が、ハドソン、ハート、マリニコによって行なわれ、³⁷⁾ B-Z 反応系での流れの速度を分岐パラメーターとした時の分岐構造をみごとにとらえた。その結果は、図2と表1に示してある。

n 周期解 ($\pi(n)$) と $n+1$ 周期解 ($\pi(n+1)$) との中間のパラメータ領域で n 巻きと $n+1$ 巻きが結合した型のカオス ($\chi(n, n+1)$) が、出現することが特徴的である。ただし後でふれ

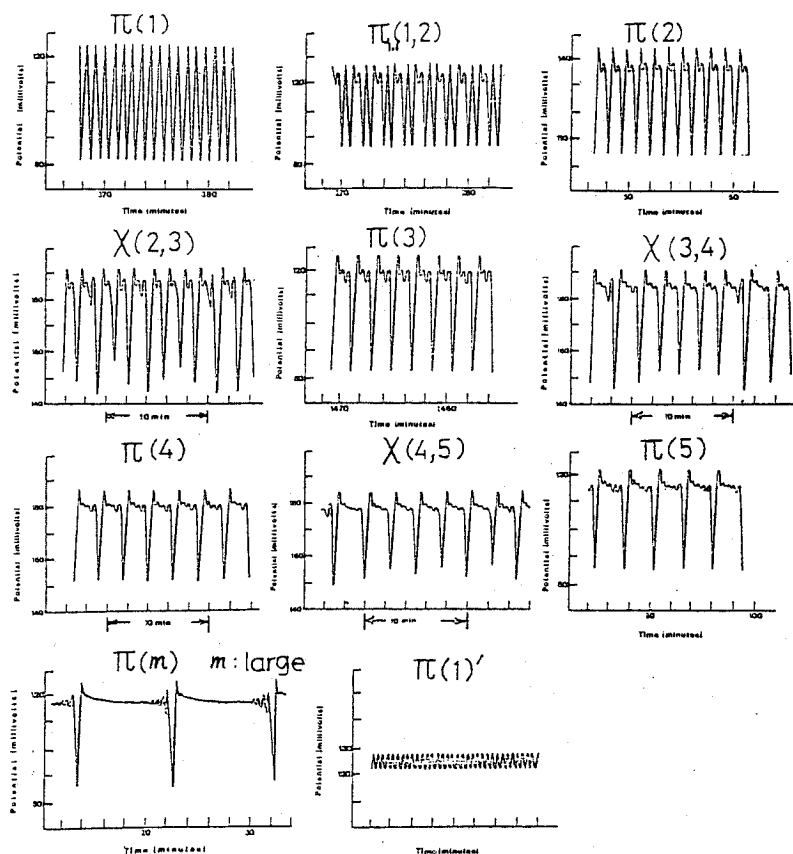


図2 ハドソンの実験結果³⁷⁾

表1 ハドソンの実験結果のまとめ(分岐構造に注意)

	Rate of flow	Mode	Description
(a)	2.91 ml/m	$\pi(1)$	1-peaked periodic mode
(b)	3.76	$\pi_{1,1}(1,2)$	periodic switching between 1- and 2-peak modes
(c)	4.06	$\pi(2)$	2-peaked periodic mode
(d)	4.31	$\chi(2,3)$	chaotic switching between 2- and 3-peak modes
(e)	4.34	$\pi(3)$	3-peaked periodic mode
(f)	4.51	$\chi(3,4)$	chaotic switching between 3- and 4-peak modes
(g)	4.62	$\pi(4)$	4-peaked periodic mode
(h)	4.76	$\chi(4,5)$	chaotic switching between 4- and 5-peak modes
(i)	4.81	$\pi(5)$	5-peaked periodic mode
(j)	5.37	$\pi(m)$	multi peaked periodic mode
(k)	5.42	$\pi^*(1)$	1-peaked periodic mode (* small amplitude, short period)
(l)	> 5.5	F	flow-induced steady state

るように $\pi(n)$ と $\chi(n, n+1)$ の間と $\chi(n, n+1)$ と $\pi(n+1)$ の間には $\pi_{l_n, l_{n+1}}(n, n+1)$ 型の複雑な周期解が出現する事が理論的に予測される。この型の周期解は、理論的にもパラメーター領域が狭い事が分るので、精度の問題で、実験室では観測されなかったのだと推論される。B-Z カオスの微分方程式模型をもっと広い領域でカオスが出現するように、かつハドソン達のみごとな実験を再現するように修正、あるいは新たに提出する事は極めて重要な問題であるが、それは大変難しく、完璧な微分方程式模型は、まだ与えられていない。それで、ここでは B-Z カオスの差分方程式近似に話を制限する。⁷⁾

今、我々の前にはハドソン達の実験の一変数の時系列だけしか与えられていない(図2)。この時系列の n 番目の極小値 x_n と $n+1$ 番目の極小値 x_{n+1} を次々にプロットすれば、図3に示したような写像 $x_{n+1} = f(x_n)$ が得られる。

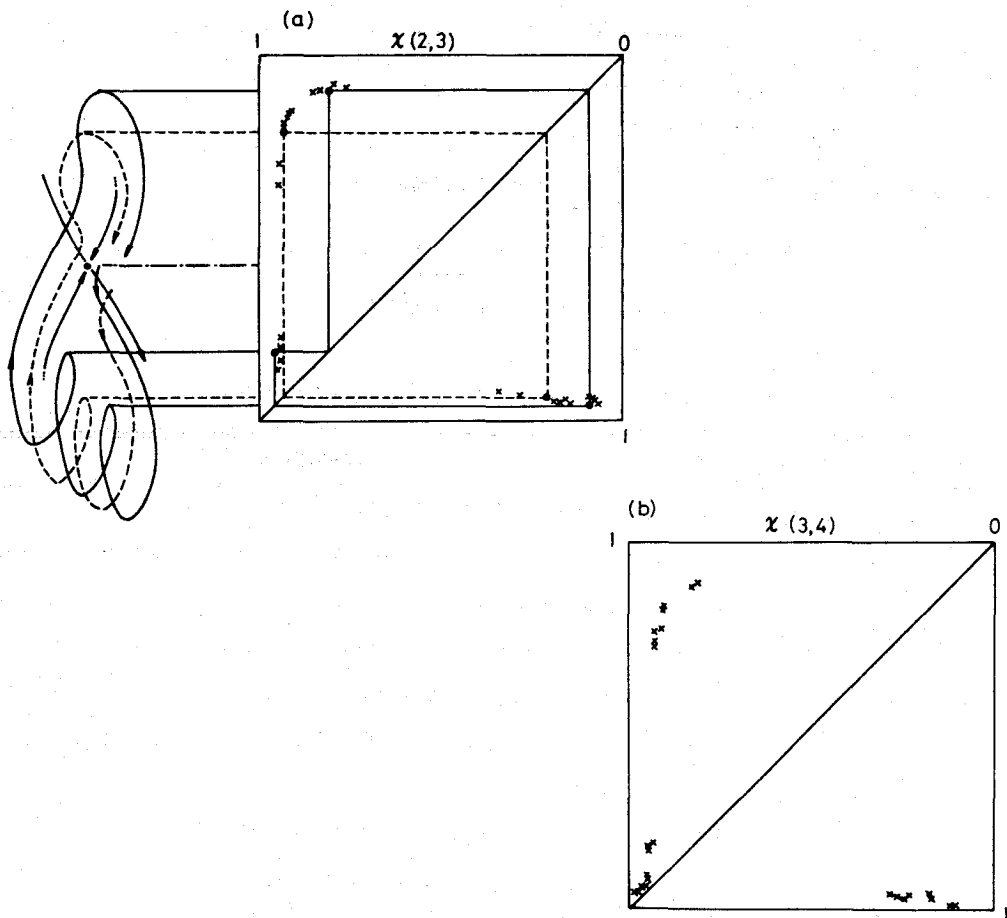


図3 B-Z カオスのローレンツ・プロット(振幅の極小値)⁷⁾

a) には、対応する3次元濃度空間内の軌道が、2次元への写影とし描かれている。

このプロットの仕方は拡張された一次元ポアンカレ写像で、ローレンツ・プロットとも呼ばれている。図3を見ると、驚く程よい一次元性を示している。この事実が、まさに、B-Zカオスが決定論的法則に従う内因性のカオスであり、熱雑音によってランダムな運動がおこる外因性のものではない事をはっきりと示している。また、写像が一価である事は、濃度空間内でのストレンジ・アトラクターの次元 d は $2 < d < 3$ であることを示している。

次に経験的に得られた一次元写像を、関数 $f(x)$ で近似する事を考える。

この関数に次の様な要求をする(図3と定性的に一致するように)

- 1) x のある一点 x_0 で f の微分が発散する。 $(f'(x_0)=\infty)$
- 2) $f(x)$ の頂点はまるい。 $(f'(x_n)=0)$
- 3) x の十分大きい所は指数関数的に減少する。

$$(f(x) \sim e^{-\alpha x} (x \rightarrow \infty))$$

この要求をみたす関数として、次のものが考えられる(図4)。

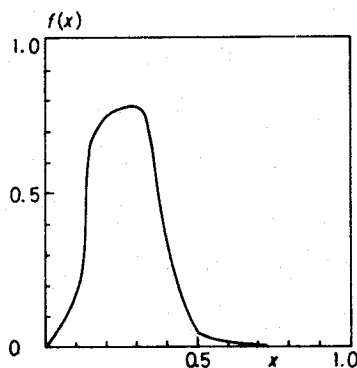


図4 図3を近似する関数

$$\begin{cases} f(x) = \{\pm(\pm x \mp \alpha)^{1/3} + \beta\} e^{-x} & (0 \leq x < 0.3) \\ f(x) = r \cdot \frac{10}{\Gamma(20)} (\delta \cdot x)^{19} e^{-\delta x} & (0.3 \leq x) \end{cases} \quad (1)$$

ただし、

$$\alpha = 0.125, \quad \beta = \frac{1}{3} \left(\frac{40}{7} \right)^{2/3} - \left(\frac{7}{40} \right)^{1/3*}$$

* この値は我々の論文7)とは多少異なっている。このように変更する事により、 $x = 0.3 \pm 0$ での $f(x)$ の微分が一致するようになる。この変更によるダイナミクスの違いは存在しない。パラメーターの領域が全体としてシフトするだけである。

$$\tau = \frac{B}{A}, \quad A = \frac{10}{\Gamma(20)} (19)^{19} e^{-19}$$

$$B = \frac{1}{3} \left(\frac{40}{7} \right)^{2/3} e^{-0.3*}$$

$$\delta = \frac{190}{3}$$

次にこの関数系に分岐パラメーター b を次のように導入する。

$$F(x) = f(x) + b \quad (2)$$

b を変化させて、得られた結果を表 2 にまとめた。このように、差分方程式

$$x_{n+1} = F(x_n; b)$$

は B-Z カオスとそれに到る分岐構造を完全に説明する。

加算的な (乗算的でない) 分岐パラメーターがこの場合本質的であり、流れ系での B-Z 反応は差分方程式 (1) で支配され、流れの速度を変化させることは、関数 f をそのままにして単に付加定数を加えるだけである ($x_{n+1} = F(x_n; b) = f(x_n) + b$) ことが明らかになった。

さらに我々の以前の模型から得られた B-Z カオスの 3 次元濃度空間でのふるまいを頭において別の角度からこの問題を考えることができる。詳しいことは文献 7), 8) を参照していただくとして結果として図 5 a) b) c) の区分的に線形な差分方程式を考察することになる。

(この写像は 3 次元濃度空間内の軌道に対して適当なポアンカレ写像を定義すれば、先程の写像と、ほぼ直交する面で得られる。別の言い方をすれば、先程の写像が、解の振幅に注目したのに対して、この写像は不動点 (3 つ存在する) の回りを一回りして戻った時の振動の位相のずれに注目していることになる。) ただし 2 つの分枝は n 巻き解, $n+1$ 巻き解に対応し傾きは 1 より小さい。図 5 a), b), c) は前と同様に関数系をそのままにして横にずらすだけで得られる。このずらしが分岐パラメーターである。

図 5 の示すことは、パラメーター (実験室の“流れの速度”に対応する。) の増加とともに安定 n 周期解, 安定な $l_n \cdot n + l_{n+1}(n+1)$ 周期解, 安定 $n+1$ 周期解が出現することである。 $\pi_{l_n, l_{n+1}}(n, n+1)$ は写像の不連続点近傍だけに、比較的大きな傾きを与えるよう写像を修正することによって容易に $\chi(n, n+2)$ になりうる。(この小さな修正の正当性は実験データ

* 前ページ注と同様。

表2 方程式(2)のシミュレーションの結果。
分岐構造は、ハドソンを完全に再現し、かつ、実験ではまだ得られていない解も存在することを示す。もっと細かく計算することにより、分岐のカントールの構造を、みい出すことができる。

b	the character of the asymptotic orbit
0.2	$\pi(2)$
0.12	$\pi_{3,0}(2, 3)$
0.115	$\pi_{1,3}(2, 3)$
0.1147	$\chi(2, 3)$
0.1146	$\pi_{1,4}(2, 3)$
0.0515	$\pi(3)$
0.0502	$\pi_{2,0}(3, 4)$
0.049	$\chi(3, 4)$
0.0488	$\pi_{2,3}(3, 4)$
0.04	$\pi(4)$
0.0265	$\pi_{2,0}(4, 5)$
0.0263	$\chi(5, 4)$
0.0261	$\pi_{2,2}(4, 5)$
0.026	$\chi(4, 5)$
0.02	$\pi(5)$
0.01	$\pi(13)$

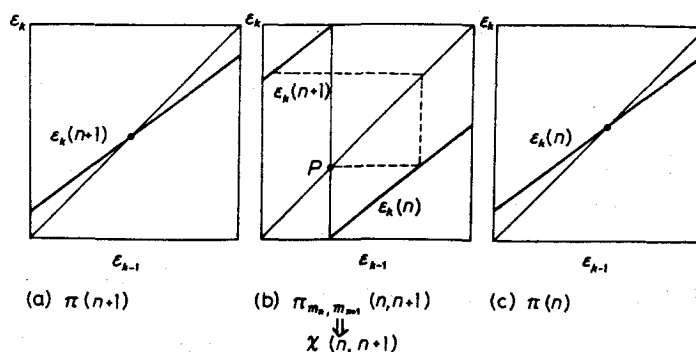


図5 理論的に予測されるローレンツ・プロット(位相差のプロット)

- a) $n+1$ 周期解
- b) n 巻きと $n+1$ 巻きが結合した周期解
- c) n 周期解

から得られる。) このようにして、

$$\pi(n) \rightarrow \chi(n, n+1) \rightarrow \pi(n+1) \rightarrow \chi(n+1, n+2) \rightarrow \pi(n+2) \rightarrow \dots$$

なる解の列を得る。

以上の2つの差分方程式は流れ系でのB-Zカオスの本質を理解するのに互いに相補的な役割を果たしている。ところで、図5(b)の差分方程式の周期解 $\pi_{l_n, l_{n+1}}(n, n+1)$ は、写像の不連続点の座標 a で完全に分類される。この関係は非常に興味深い法則に従っており $l_{n+1}/(l_n + l_{n+1})$ は a の関数としてカントール関数的になっている。さらに興味深いことは、この区分的に線形な差分方程式は、神経興奮の単純化したモデルと同じであり、そこでは、平均興奮率($F = l_{n+1}/(l_n + l_{n+1})$ に対応する。)が、外力の大きさ(a に対応する。)のカントール関数的になる。⁹⁾ このことは、南雲、佐藤によって、はじめて理論的に指摘された。⁹⁾ この神経興奮の問題が、B-Zカオスと関係があるので南雲、佐藤の問題を少し考えてみよう。

2-2 神経興奮の模型

神経の模型としてよく知られているものにホジキン・ハックスレー模型(実験式)、フィッヒューのBVP模型がある。これらは微分方程式で与えられる。一方、マッカロ・ピッツの神経模型は神経細胞が不応期を持つ、本質的に2値模型と考えられ、差分方程式で与えるのが便利である。ここで2値とは、静止状態と興奮状態であり、不応期の影響をどのようにとらえるかで、さまざまな模型が可能である。カイアネロ、デルーカはこの影響が指数関数的に減衰する模型を提出した。実際それは、次のようなものである。

$$x_{n+1} = 1 \left[A_n - \alpha \sum_{r=0}^n b^{-r} x_{n-r} - \theta \right] \quad (2)$$

ここで、 $1(X)$ はヘビサイド階段関数で、

$$1(X) = 1(X \geq 0)$$

$$0(X < 0)$$

で定義されている。

また x_n は離散時刻 n における神経細胞の状態を表わし、静止状態、興奮状態に対応してそれぞれ0, 1の値をとる。 A_n は離散時刻 n における入力刺激の大きさで簡単のため、ここでは $A_n = A = \text{一定}$ とする。 θ は閾値であり、 $\alpha > 0$, $b > 1$ とする。これが、カイアネロ方程式であり、実はB-Zカオスの区分的に線形な差分方程式と同等であることがわかる。このことを示す前に南雲、佐藤の問題意識にふれておこう。

ハーモンは神経模型としてトランジスタの単安定回路を提出し次のような実験を行なった。一定の大きさのパルス列を入力し、その応答として平均興奮率(外力の周波数 f_1 に対する発火の周波数 f_2 の比 f_2/f_1 、平均発火率と言ってもよい。)を測定すると図6のような一見複雑な階段状の応答がみられた。すなわち、外力の振幅を変えていくと、発火率に飛びが現われる。これは、いたるところ連続、いたるところ微分不可能な関数であるカントール関数を拡張したものになっている*。

この不思議な現象を南雲、佐藤が、理論的にはじめて明らかにした。

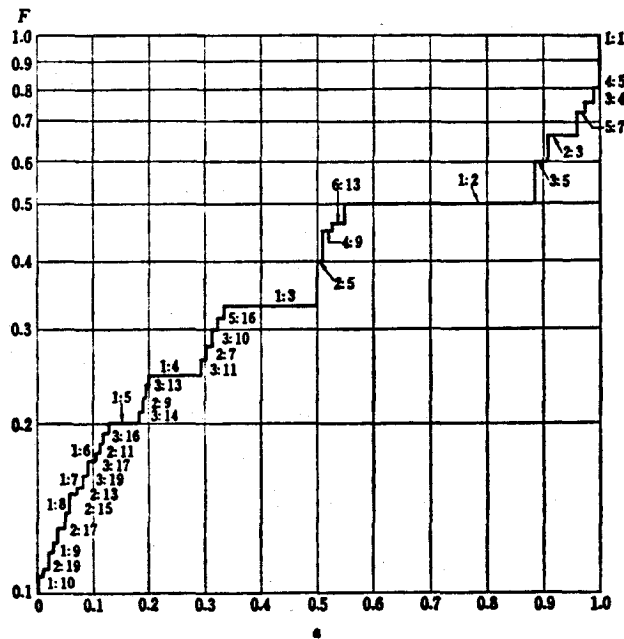


図6 ハーモンの実験結果。横軸は入力刺激の大きさ。縦軸は平均発火率。⁹⁾

(2) 式に戻る。

$$y_n = \alpha^{-1} (A_n - \theta) - \sum_{r=0}^n b^{-r} x_{n-r}$$

と変数変換する。すると(2)式は、

$$y_{n+1} = b^{-1} y_n + a_n - 1 [y_n] \quad (3)$$

* 最近、京大・数学教室の畑と山口によって、 $(0, 1)$ 区間から、 F を与える a の区間の和集合、をぬいた部分が、カントール集合になっていることが、証明された。

津田一郎

あるいは,

$$\begin{cases} y_{n+1} = b^{-1} y_n + a - 1 & (y_n \geq 0) \\ y_{n+1} = b^{-1} y_n + a & (y_n < 0) \end{cases} \quad (4)$$

ただし,

$$a_n = \frac{1}{\alpha} \left[\left(A_{n+1} - \frac{A_n}{b} \right) - \theta \left(1 - \frac{1}{b} \right) \right]$$

ここで,

$$x_{n+1} = I[\alpha y_n] = I[y_n]$$

を使って,

$$A_n = A \text{ (全ての } n \text{ に対して一定)}$$

と仮定すれば,

$$a_n = \frac{A - \theta}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{b} \right) = a \text{ (全ての } n \text{ に対して一定)}$$

故に a は入力刺激の大きさと思ってよい。(4) 式は図 7 に示す。

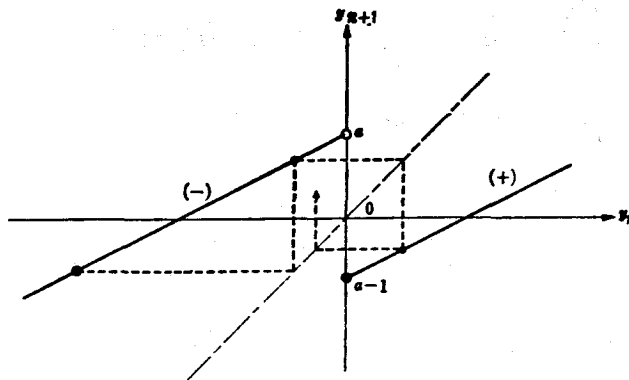


図 7 (4) 式⁹⁾

このように神経興奮の問題を区分的に線形な差分方程式で表現し得るわけで、各分枝の傾きは $b^{-1} < 1$ となり、先に示した B-Z カオスの差分方程式と等価になる。

次に平均発火率の概念を導入し、これを a の関数として表現する。

平均発火率とは、この差分方程式に、 $\{P_1, P_2, \dots, P_l\}$ という周期解の列が存在したとする時（ただし P_i は 0 または 1 をとる。）

$$F(a) = \frac{P_1 \sim P_l \text{ 中の } 1 \text{ の数}}{l}$$

で定義される。

もし $a > 1$ なら $y_{n+1} = f(y_n)$ に対する安定不動点 $y^*(\geq 0)$ が一個存在し、従って $F(a) = 1$ である。（B-Z 反応の場合、図 5 (a) に対応する。）

もし $a < 0$ なら、 $y_{n+1} = f(y_n)$ に対する安定不動点 $y^*(< 0)$ が一個存在し、 $F(a) = 0$ である。（B-Z 反応の場合、図 5 (c) に対応する。）

従って問題を $0 < a < 1$ に制限する。（B-Z 反応の場合、図 5 (b) に対応する。）

我々は B-Z カオスの研究において図 5 (b) のように、まず安定周期解 $\pi_{l_n, l_{n+1}}(n, n+1)$ の不連続点の位置による分類を行ない、次いで、不連続点近傍だけに傾きが 1 より大きくなるような修正をほどこすことにより、これらの周期解のカオス化を計った。その時の安定周期解の分類の計算は、南雲、佐藤の図 7 の $0 < a < 1$ の場合の安定周期解の分類の計算の仕方とは全く異なっているが、結果は、ほとんど同じである*。ほとんどというのは、 F なる量で見ると周期性に関する縮退が存在するという意味である。また表現の仕方が異なっており、南雲、佐藤の論文では次に問題にしたい、自己相似性を導出することは、やさしくないし、この概念に彼らは気がついていない。我々の計算結果に従うと B-Z 反応における自己相似性を容易に抽出できるのである。

2-3 B-Z 反応における自己相似性¹⁰⁾

B-Z 反応においても平均発火率に対応する量 F を考えることができる。すなわち F を

$$F = \frac{n+1 \text{ 巻き軌道の数}}{n \text{ 巻き軌道と } n+1 \text{ 巻き軌道の総数}}$$

と定義する。これは一つの与えられた周期解に対して $n+1$ 巻き軌道の重みを意味する。 n 巻きに比べ特に $n+1$ 巻きを選ぶ理由はない。よって、 $1-F$ を考察してもよい。

F と a の関係を求めるために、B-Z での我々の結果を以下に書いておく⁷⁾。これは、 $a \in [0, 1]$ で、それぞれのモードが安定に存在するための条件を与える。一般性を失なうことなく、 $a \in [0, \frac{1}{2}]$ としてよい。

* 我々は、最近まで、彼らの仕事に気づかなかった。京大の畑、山口の仕事によって初めて気がついた。

i) $\pi_{2m+1,2}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{(b-1)(b^{m+2}+1)}{b^{2m+3}-1} < a < \frac{b(b-1)(b^{n+1}+1)}{b^{2n+3}-1}$$

ii) $\pi_{3m+1,3}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{b(b-1)(b^{3m+3}-1) - (b-1)^2(b^{m+1}-1)}{(b^{m+1}-1)(b^{3m+4}-1)} < a < \frac{b(b-1)(b^{3m+3}-1)}{(b^{m+1}-1)(b^{3m+4}-1)}$$

iii) $\pi_{3m+2,3}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{(b-1)(b^{3m+6}-1)}{(b^{m+2}-1)(b^{3m+5}-1)} < a < \frac{(b-1)(b^{3m+6}-1) + (b-1)^2(b^{m+2}-1)}{(b^{n+2}-1)(b^{3m+5}-1)}$$

iv) $\pi_{4m+1,4}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{b(b-1)(b^{4m+4}-1)}{(b^{n+1}-1)(b^{4m+5}-1)} - \frac{(b-1)^2}{b^{4m+5}-1} < a < \frac{b(b-1)(b^{4m+4}-1)}{(b^{m+1}-1)(b^{4m+5}-1)}$$

v) $\pi_{4m+2,4}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{b(b-1)(b^{m+1}+1)}{b^{2m+3}-1} - \frac{(b-1)^2}{b^{4m+6}-1} < a < \frac{b(b-1)(b^{m+1}+1)}{b^{2m+3}-1}$$

$$\frac{(b-1)(b^{m+2}+1)(b^{2m+3}+1)}{b^{4m+6}-1} < a < \frac{(b-1)(b^{m+2}+1)(b^{2m+3}+1) + (b-1)^2}{b^{4m+6}-1}$$

vi) $\pi_{4m+3,4}(n, n+1)$ に対して

$$\frac{(b-1)(b^{4m+8}-1)}{(b^{m+2}-1)(b^{4m+7}-1)} < a < \frac{(b-1)(b^{4m+8}-1) + (b-1)^2(b^{m+2}-1)}{(b^{m+2}-1)(b^{4m+7}-1)}$$

etc. (以上の式の導出については文献 7) を参照)

平均発火率 F の計算に移る。

例えば i) に関しては, $F = \frac{2}{2m+3}$ である。

これと、 a に対する条件とから、 m を消去すると、 $F_l < F < F_u (a_l < a < a_u)$ として

$$F_u = \frac{1}{\log_b \frac{b(b-1) + \sqrt{b^2(b-1)^2 + 4ab(a+b-1)}}{2ab^2} + \frac{3}{2}} \quad (5)$$

$$F_l = \frac{1}{\log_b \frac{b(b-1) + \sqrt{b^2(b-1)^2 + 4ab(a+b(b-1))}}{2ab^2} + \frac{3}{2}} \quad (6)$$

図8に $m = 1, 2, 3$ として、概略図を示してある。

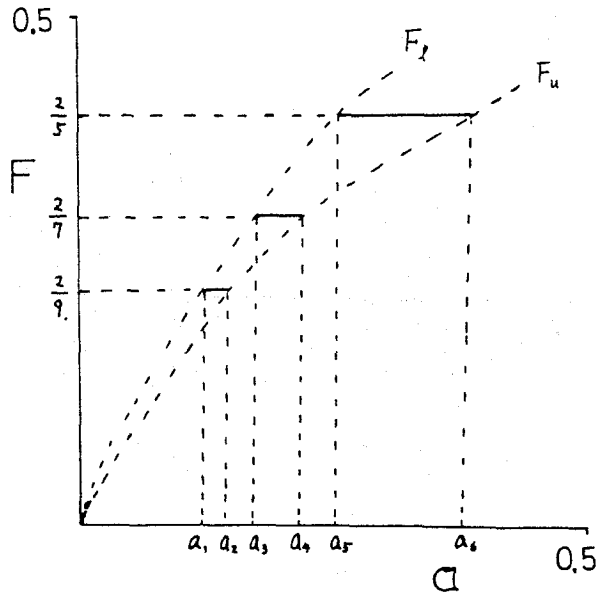


図8 $m = 1, 2, 3$ に対する $F = \frac{2}{2m+3}$ と a の関係。
 F_u, F_l は、それぞれ F の上限、下限の envelop.

ただし図8において、 $a_1 \sim a_6$ はそれぞれ次のような値である。

$$a_1 = \frac{b^5 + 1}{b^8 + b^7 + \dots + 1}, \quad a_2 = \frac{b^5 + b}{b^8 + b^7 + \dots + 1}$$

$$a_3 = \frac{b^4 + 1}{b^6 + b^5 + \dots + 1}, \quad a_4 = \frac{b^4 + b}{b^6 + b^5 + \dots + 1}$$

$$a_5 = \frac{b^3 + 1}{b^4 + b^3 + \dots + 1}, \quad a_6 = \frac{b^3 + b}{b^4 + b^3 + \dots + 1}$$

もっと一般的に議論することにより, B-Z 反応に自己相似性が存在することが分る¹⁰⁾ (図 9)。

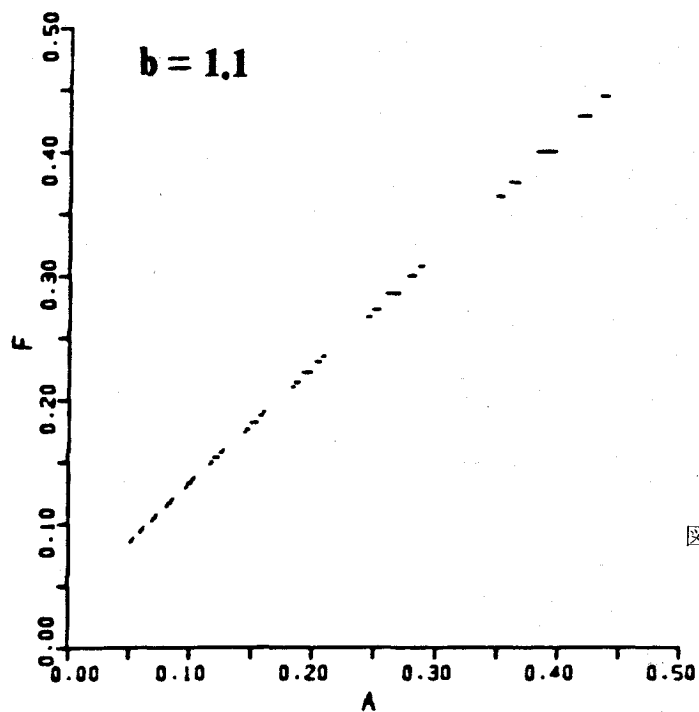


図 9-a)

B-Z 反応における自己相似性
本文 i) ~ vi) において, それ
ぞれ, $m=1, 2, \dots, 10$ とし
て描いた。

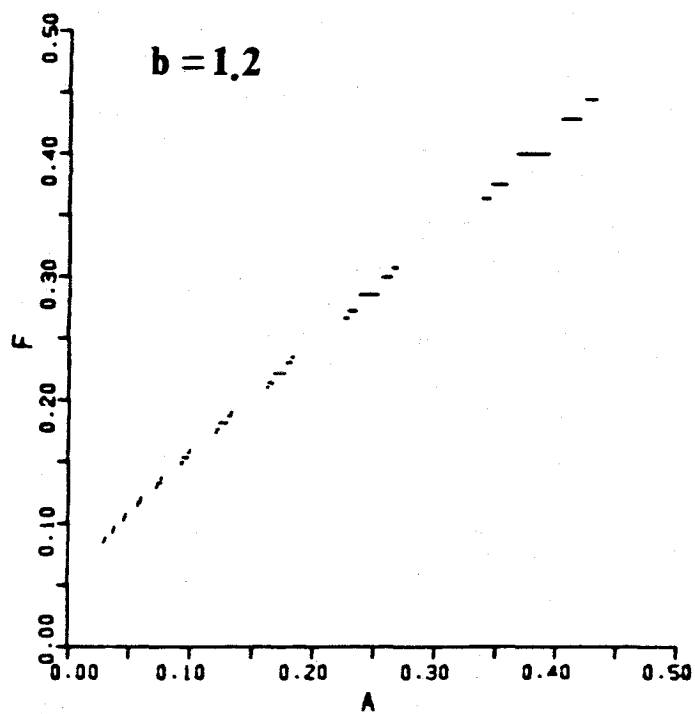


図 9-b)

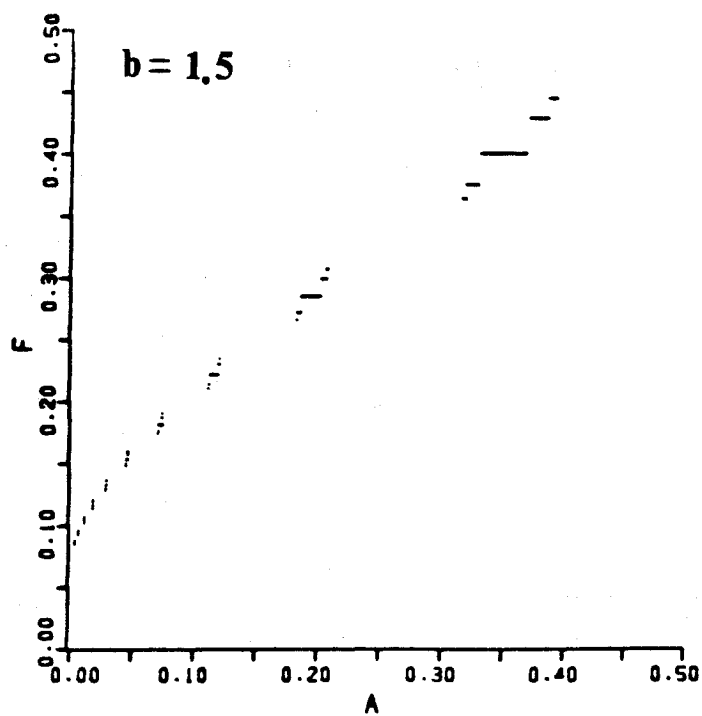


図 9 - c)

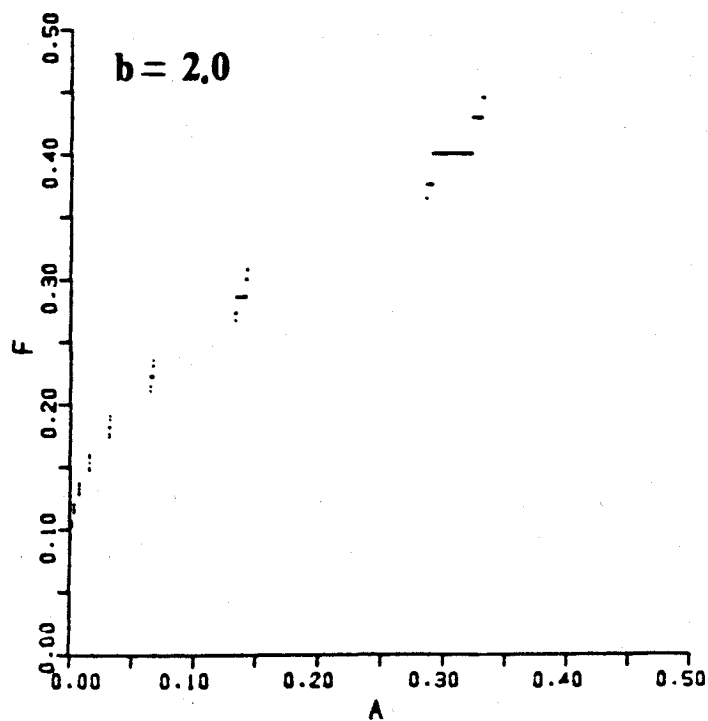


図 9 - d)

一般に

$$F = \frac{i}{i m + j} \quad (j = i+1, i+2, \dots, 2i-1) \quad (7)$$

の時

$$\begin{aligned} a_u - a_l &= \frac{b-1}{b^{i m + j - 1} + \dots + 1} \\ &= \frac{(b-1)^2}{b^{i m + j} - 1} \end{aligned} \quad (8)$$

$$a_u - a_l \equiv \Delta a$$

とくと

$$F = \frac{i}{\log_b \left(\frac{(b-1)^2}{\Delta a} + 1 \right)} \quad (9)$$

この式は m に陽に依存していない。 i 変化は一つのクラスター内の要素の変化に対応し、 m 変化は、一つのクラスターから別のクラスターへの変化に対応する (図 10 参照)。

故に、 $F(a)$ は m の変化に対し、自己相似的な構造をもっている。¹⁰⁾

別の表現をすれば、次のようになる。 $m \rightarrow m'$ の変化に対して、 $\Delta a \rightarrow \Delta a'$ 、 $F \rightarrow F'$ とすると、

$$\begin{cases} \frac{\frac{1}{\Delta a'} + \frac{1}{(b-1)^2}}{\frac{1}{\Delta a} + \frac{1}{(b-1)^2}} = b^{i(m'-m)} \\ \frac{1}{F'} - \frac{1}{F} = m' - m \end{cases} \quad (10)$$

を得る。さらに、 F 、 Δa の変化を、次のように、ある変換の後の変化と考える。すなわち F に対しては、逆数の変化、 Δa に対しては、逆数の対数の変化と考える。

$$\begin{cases} \frac{1}{F'} - \frac{1}{F} \equiv \delta \left(\frac{1}{F} \right) \\ \log_b \left(\frac{1}{\Delta a'} + \frac{1}{(b-1)^2} \right) - \log_b \left(\frac{1}{\Delta a} + \frac{1}{(b-1)^2} \right) \equiv \delta \left(\frac{1}{\Delta a} \right) \end{cases} \quad (11)$$

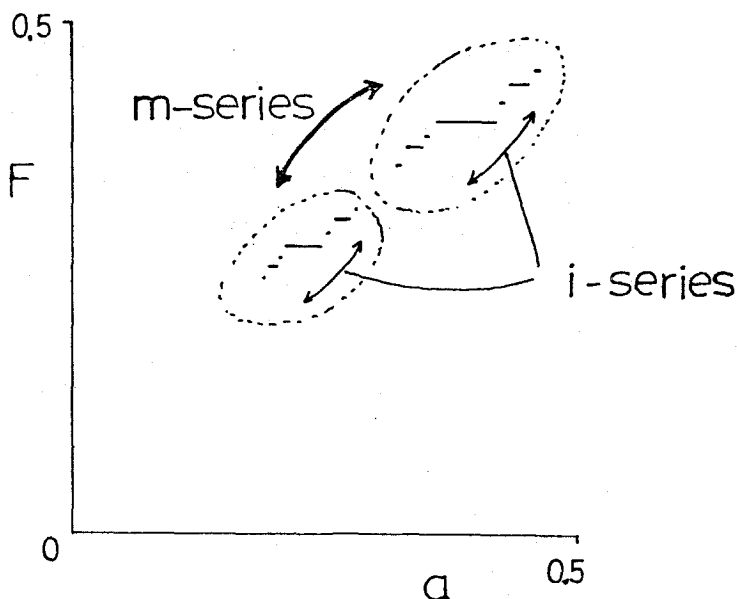


図10 B-Z反応の自己相似性を説明する概念図

(7), (8) 式における i 変化は, 一つのクラスターを構成する。

($i = 2, 3, 4, \dots$) m 変化により, 各クラスターは相似な他のクラスターへ変化する。

この相似則は, 無限に続く。($m = 1, 2, 3, \dots$; 自己相似性)

((11), (12) 式参照)

(10), (11) より

$$\delta\left(\frac{1}{F}\right) = \frac{1}{i} \delta\left(\frac{1}{\Delta a}\right) \quad (12)$$

を得る。

これは, m に変化を与えた時, $\frac{1}{F}$ の変化と, 上のような座標変換のもとでの Δa の変化が m に依らない比例係数をもつことを示しており, 自己相似性のはんえいである。¹⁰⁾

この B-Z 反応の場合の自己相似性の具体的なグラフが図 9 に示してある。

我々は B-Z カオスを区分的に線形な差分方程式の立場で説明する時, 写像の不連続点近傍だけ傾きが 1 より大きくなるよう修正し, これを摂動と考えた。この時, 適当な条件下で a のある領域で周期解は, カオス化するがそのカオスの特徴は, もとの周期性を保存しながら, スペクトルに連続的な部分が加わるといったものである。従ってカオス化した時も長時間平均の意味で, 平均興奮率 F を定義することができ, その様子は, 基本的に, 上の自己相似性を保存したものになるであろう。このことにより, 我々は, B-Z カオスの分岐構造

$$\pi(n) \rightarrow \chi(n, n+1) \rightarrow \pi(n+1) \text{ の } \pi(n) \text{ と } \chi(n, n+1), \chi(n, n+1) \text{ と } \pi(n+1)$$

の中間に存在する周期構造が a の変化に対し、自己相似性をもつカントール的な極めて複雑なものになることを知る。実際 B-Z 反応のこの分岐の複雑さは、方程式 (2) の計算機シミュレーションからも理解できる。すなわち、(2) を計算機で解くと、パラメーター b のごくわずかな変化に対し、全く異なった周期解へ移行することが、あるパラメーターの領域でおこるのである。

このように B-Z カオスへの分岐は、極めて複雑であるが、自己相似性というきれいな法則性をもっていることが分った。

ここで、次のことに注意することは興味深い。i) ~iv) の式で $b=1$ の場合には、各モードの出現するパラメーター領域の幅は一点に縮まる。⁷⁾ 特に $m=1$ の時、 $\pi_{p,q}(n, n+1)$ モードの出現するパラメーターの値は $\frac{q}{p+q}$ で与えられる。⁷⁾ (図 11)

これは平均発火率の特殊な場合に相当する。図 11 に見られる数列は、ファレー数列と呼ばれるものである。ここで縦の列は、2つのフィボナッチ数列から作った分数になっている。例えば、中央と、それから左側の列をみれば

$$\frac{2}{5}, \frac{3}{8}, \frac{5}{13}, \frac{8}{21}, \dots$$

であり、分母、分子の各々は、 $P_0=P_1=1$ とした時のフィボナッチ数列 $\{P_n\}$ である。

このように図 11 のファレー数列は、 P_0, P_1 を適当に選んだ時の“一般化された”フィボナッチ数列から全て再構成される。“一般化された”とは、 $P_0=P_1=1$ の時、

$$P_n = P_{n-1} + P_{n-2}$$

で構成される数列を普通フィボナッチ数列と呼んでいるが、(この時、一般項は

$$P_n = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2} \right)^{n+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2} \right)^{n+1} \right)$$

である。) それを一般化して初期値を適当に選べるようにした時の

$$P_n = P_{n-1} + P_{n-2}$$

から構成される数列を問題にするということである。この時一般化されたフィボナッチ数列の一般項は

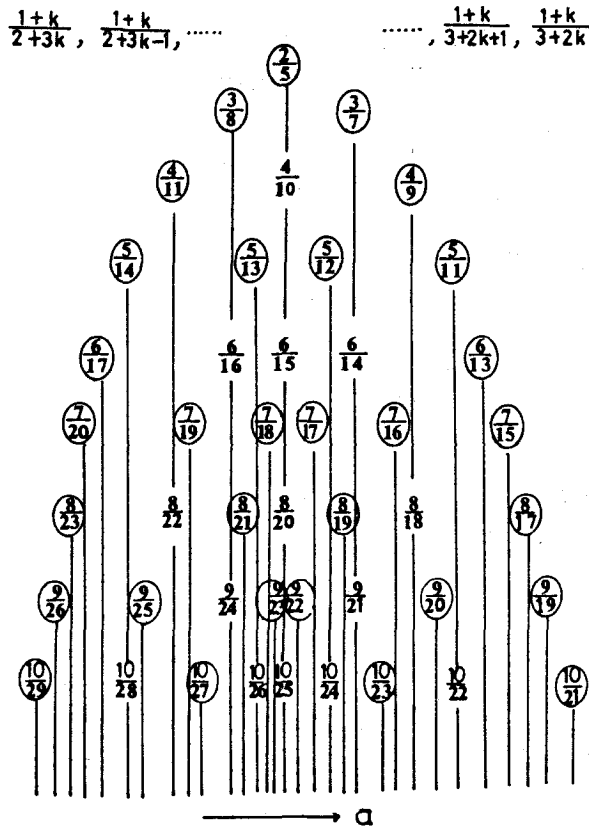


図11 $b=1$, $m=1$ とした時の周期解のパラメータ空間 a での分布。

$a = \frac{q}{p+q}$ の位置では、 $\pi_{p,q}(n, n+1)$ 型の周期解が、現われることを示している。この図に現われる分数列は、ファレー数列と呼ばれる。

$$P_n = \frac{\sqrt{5}-1}{4\sqrt{5}} ((\sqrt{5}-1)P_0 + 2P_1) \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1} - \frac{1}{2\sqrt{5}} ((3+\sqrt{5})P_0 - (1+\sqrt{5})P_1) \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1}$$

となる。(“一般化された” フィボナッチ数列が数学で議論されているかどうか知らない。だからこの名称はここだけの話である。)

次に、 $P_0 = P_1 = 1$ として

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{P_{n+2}}$$

を考えてみる。

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{P_{n+2}} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1}}{\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{n+3} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{n+3}} \\ &= \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{-2} \\ &= \frac{1}{\tau^2}\end{aligned}$$

ここで $\tau = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ は黄金比である。すなわち、先程の列、 $\frac{2}{5}, \frac{3}{8}, \frac{5}{13}, \frac{8}{21}, \dots$ の収束値は“黄金比の逆数の2乗”で与えられる。

さらに、“一般化された”フィボナッチ数列に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{P_{n+i}}$$

を計算すると (P_0, P_1 を有限として)

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{P_n}{P_{n+i}} = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{-i} = \frac{1}{\tau^i}$$

また、 n を固定して、 $P_1 \rightarrow \infty$ の極限を考えると、

$$\lim_{P_1 \rightarrow \infty} \frac{P_n}{P_{n+i}} = \frac{\tau^{n+1} + (-1)^{n+1} \tau^{-(n-1)}}{\tau^{n+i+1} + (-1)^{n+i+1} \tau^{-(n+i-1)}}$$

となる。

従って、B-Zカオスの分岐構造のうち、長周期（無限大の周期）をもつものは、パラメータ空間に

$$\frac{1}{\tau^i} \quad (i = 2, 3, \dots),$$

$$\frac{\tau^{n+1} + (-1)^{n+1} \tau^{-(n-1)}}{\tau^{n+i+1} + (-1)^{n+i+1} \tau^{-(n+i-1)}} \quad (n = 1, 2, \dots, i = 2, 3, \dots)$$

のように黄金比のべきの関数で、分布していることが分る。

さて、今までB-Zカオスのハドソン達の実験を説明する我々の理論と、それからの発展に

ついて述べてきた。同じ流動系の B-Z 反応の実験であるが、最近、ビダル達は、実験条件を少し変えて、ハドソン達とは異なる型のカオスと分岐構造を発見しているので次に、それについて少し検討する。

2-4 流動系でのカオスと分岐構造 II

ビダル、ルー、バシュラル、ロッシ¹¹⁾は、ハドソン達と同種の実験を行なった。実験条件の違いは、攪はん速度の違い（どちらも空間的一様性を十分保っている。）は別として温度と硫酸濃度だけである。ともに水素イオンは十分多量にあるとしてよいなら、問題になるのは温度の相違だけとなる。すなわち、ハドソン達は 25℃ で実験を行なったが、ビダル達は 39℃ で行なっている。測定方法は従来の Br^- に敏感な電極による電圧測定ではなく、 Ce^{4+} の光吸収 (3400 Å) で行なわれた。結果は図 12 に示す。明らかにハドソン達とは異なる分岐構造がみられる。分岐の様子をまとめれば、次のようになる。（流れの速度を増加させていくと）

- ① ピーク 1 コの単純リミット・サイクル (f_1)
- ② 徐々にカオティックになる。
- ③ 準周期解 (f_1, f_2 の 2 次元トーラス)
- ④ f_1, f_2 のロッキング ($f_1 = 3f_0, f_2 = 4f_0$)
- ⑤ 新しい周波数 f'_0 の出現。

2 種類のロッキング状態 ($6f'_0 = f_1, 8f'_0 = f_2$ あるいは, $5f'_0 = f_1, 7f'_0 = f_2$)

- ⑥ 徐々にカオティックになる。

この実験を説明する理論はまだ与えられていない。しかし次の事が予測される。

1. ②のように徐々にカオティックになるのは間欠性のはんえいだろう。
2. ④から⑤への移行は、 $6f'_0 = f_1, 8f'_0 = f_2$ のロッキング状態なら、 $f'_0 = \frac{f_0}{2}$ となり 2 倍周期の分岐である。そうすると⑥の“徐々に”は実験精度の問題で観測にかからなかっただけで、 2^n の分岐が集積してカオスに移行する、くまで分岐が起っているのかも知れない。

2 の予測が正しければ、①～⑥の分岐構造は流体（ベナールの実験¹²⁾）でも最近得られていることを考えると、B-Z 反応に限らない一般的なものである可能性がでてくる。そうすると、B-Z 反応の具体的な反応機構によらない一般的な抽象から逆に具体的な反応機構への制限が加えられ、まだ完全には理解されていない B-Z 反応の機構の理解に役立つかも知れない。このような意味でもビダル達の実験は注目に値する。さらにビダル達は、彼らの一変数の実験データ (x とする) から

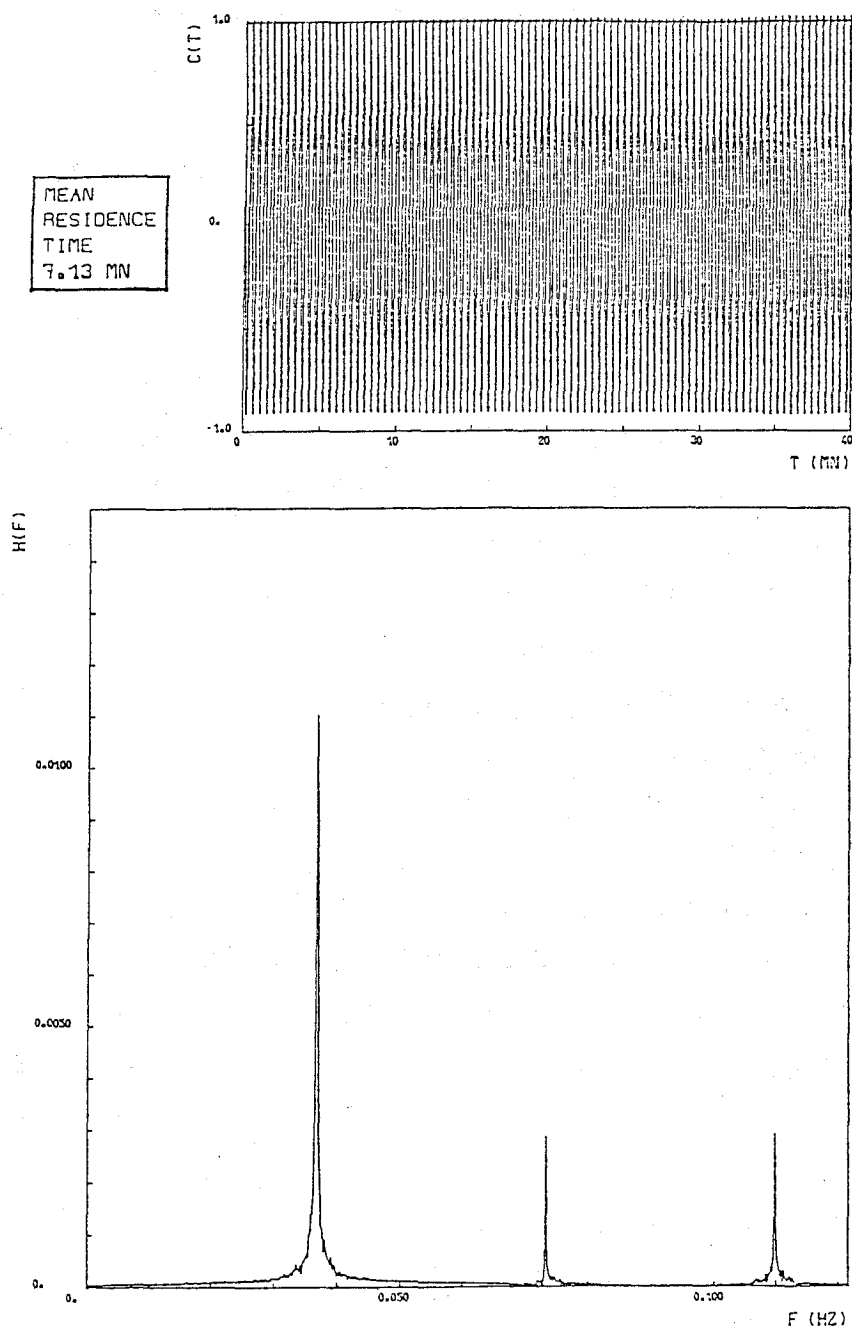


図12-1)

ビダルの実験結果。¹¹⁾

上は Ce^{4+} の自己相関関数、下は Ce^{4+} のパワースペクトル。

1) ~ 6) は、本文 ① ~ ⑥ に対応している。

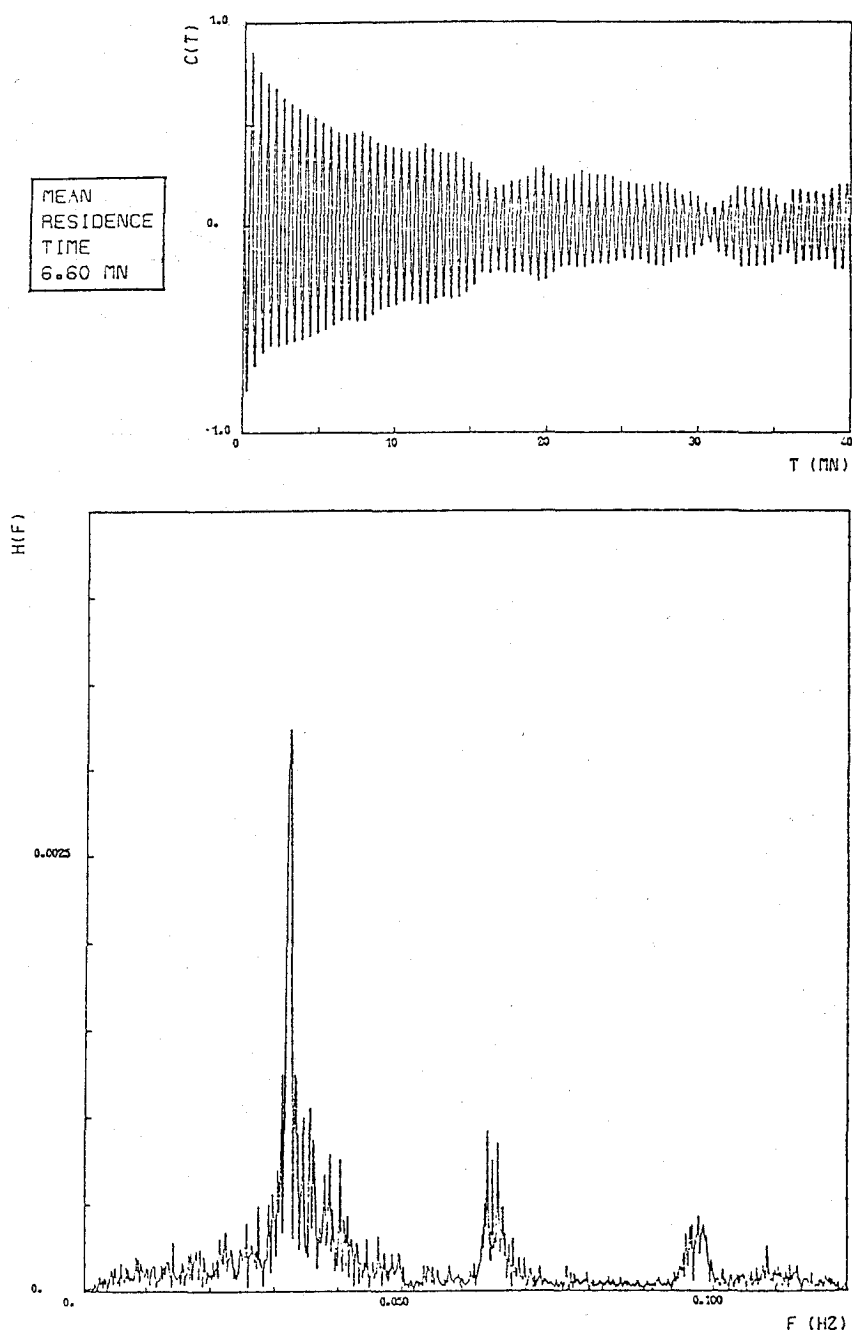


図 12-2)

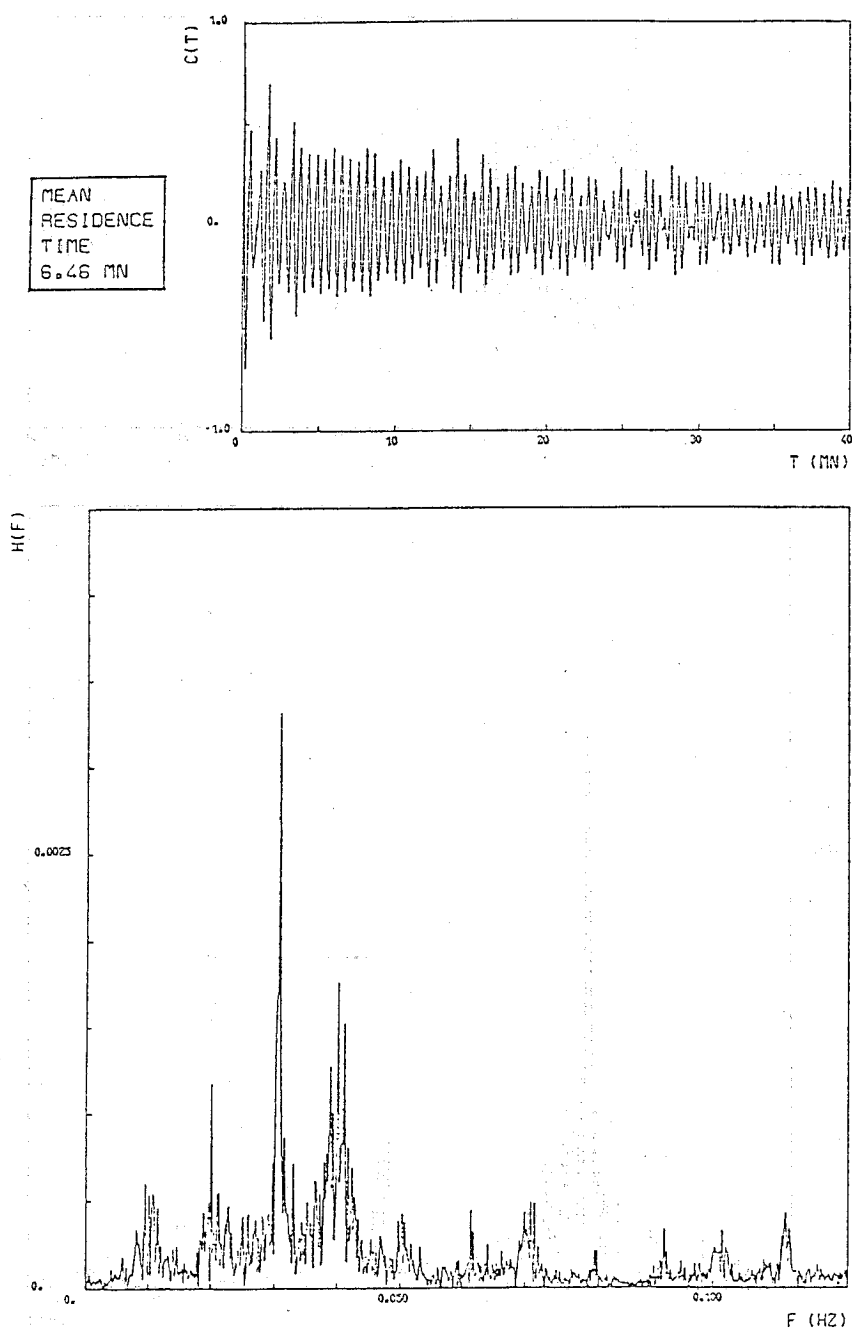


図 12-3)

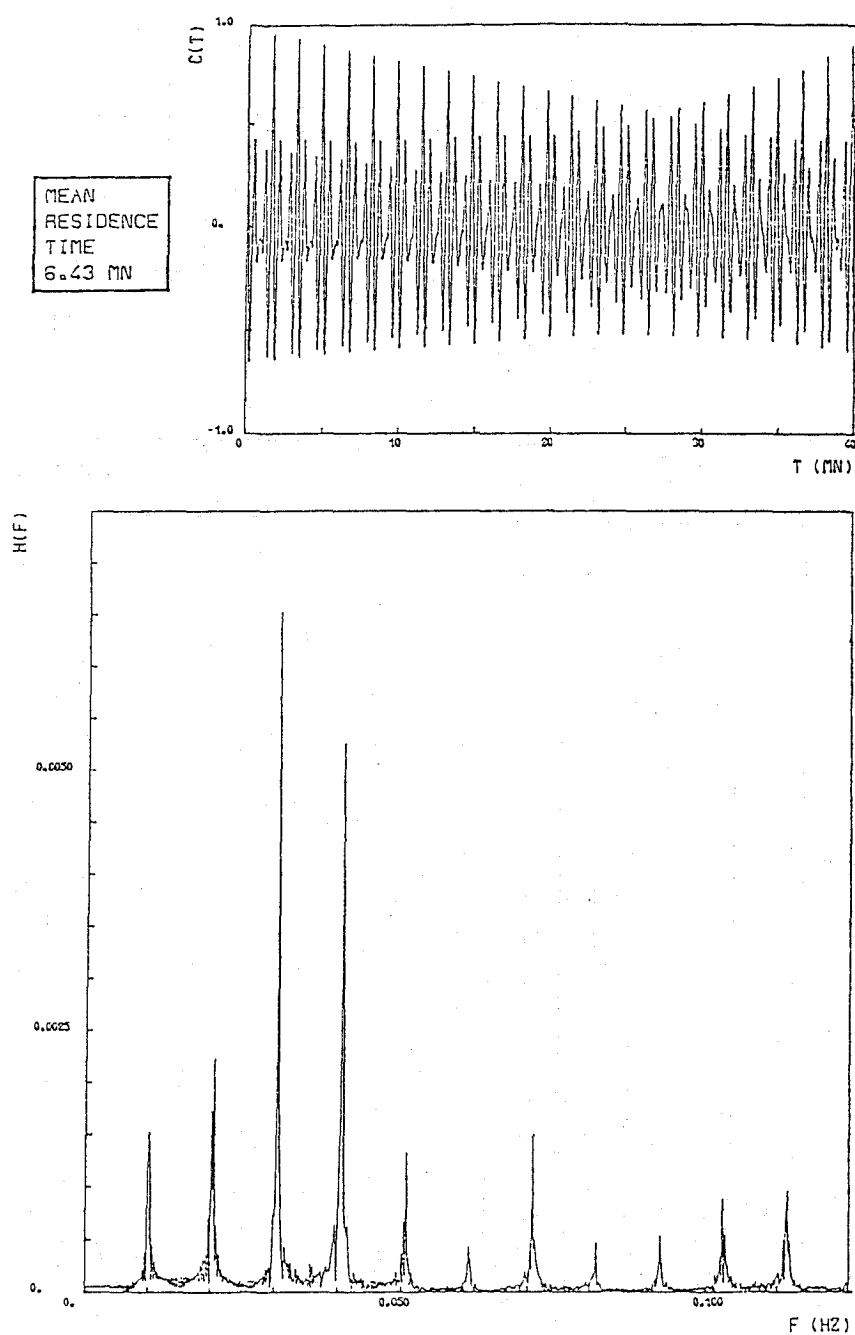


図 12-4)

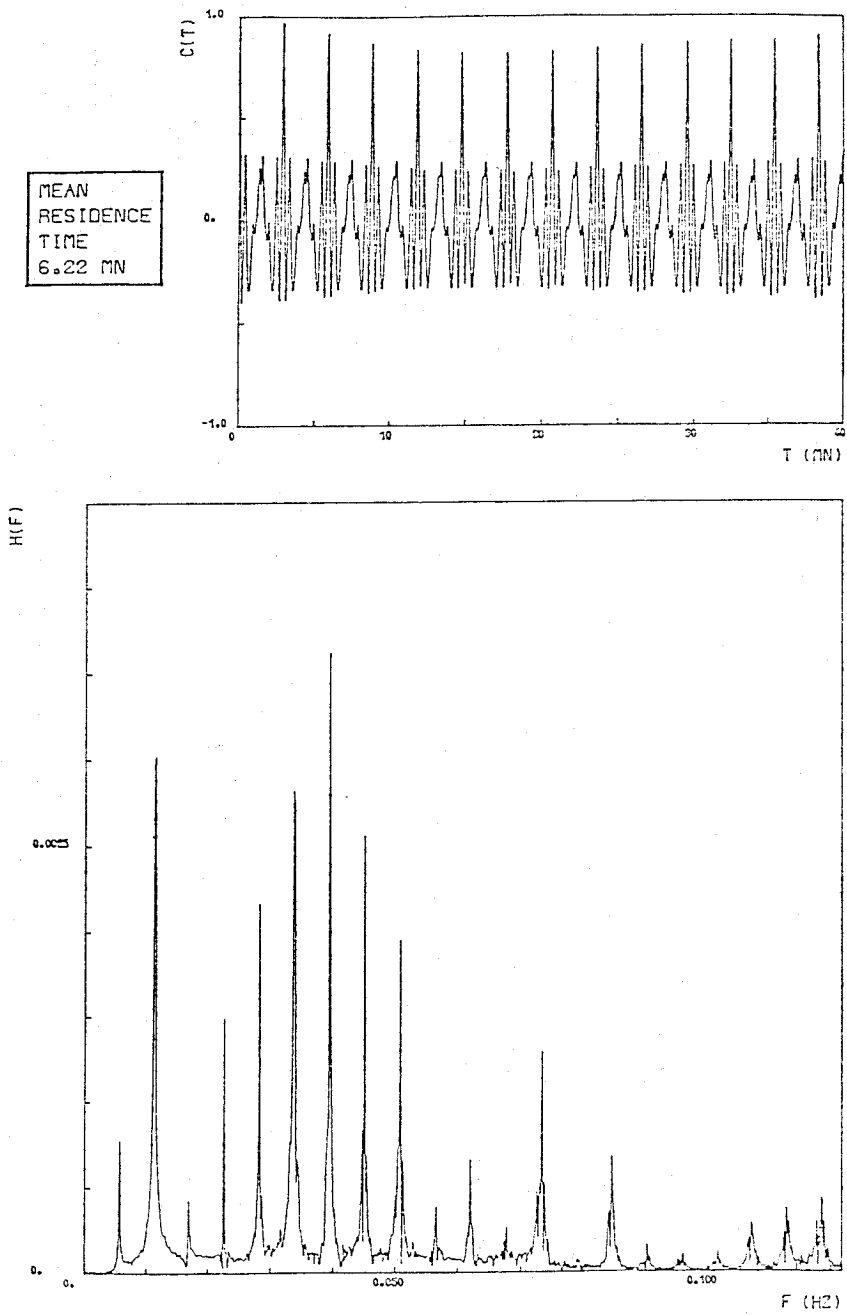


図 12-5)

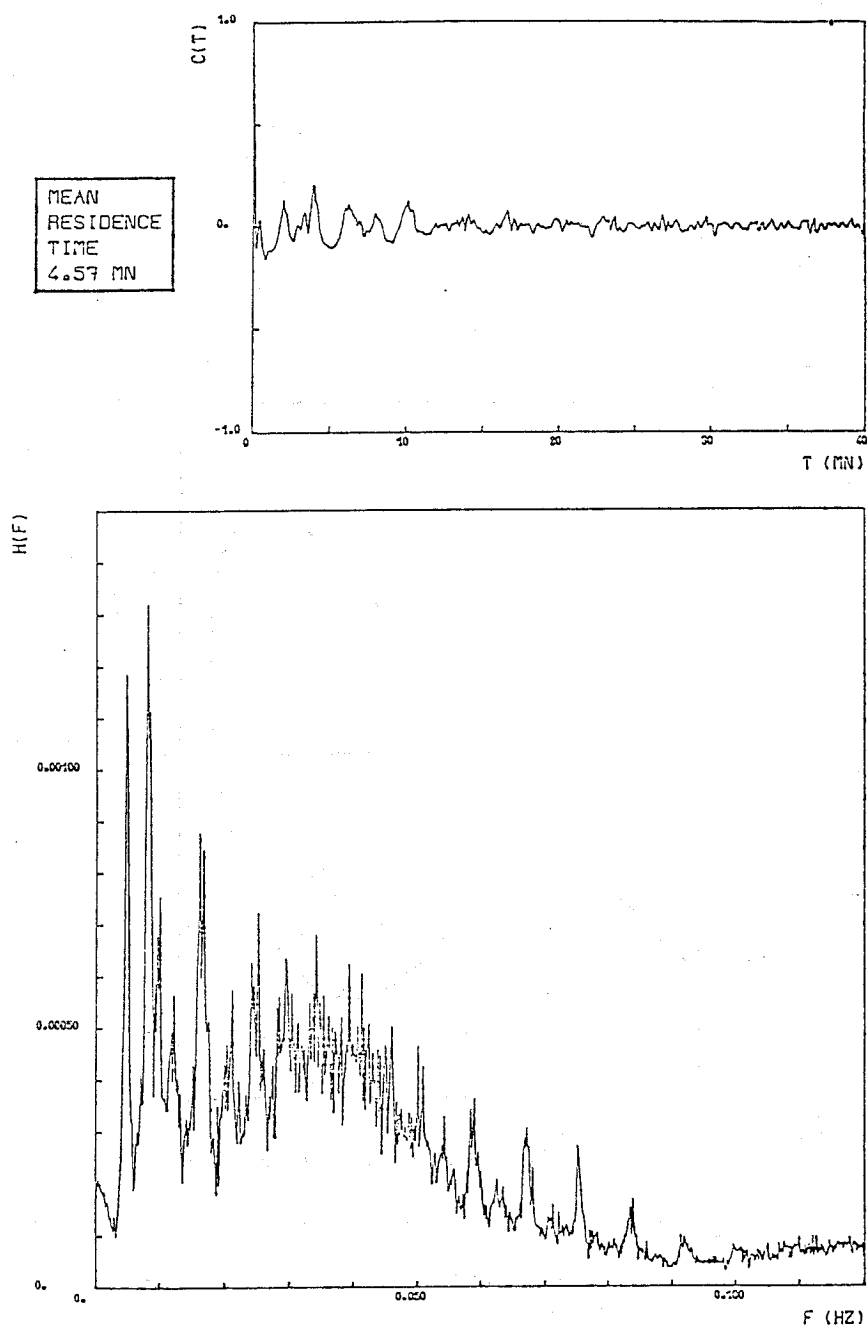


図 12-6)

$$\frac{dx}{dt}, \frac{d^2x}{dt^2}$$

を計算し

$$\left(x, \frac{dx}{dt}, \frac{d^2x}{dt^2}\right)$$

の3次元空間内での軌道の様子を示した。¹³⁾ ①～⑥の分岐構造を全て、絵でみせてくれると
もっと良かったのだが、残念ながら①のリミット・サイクルと⑥のカオスだけである。カオ
スの絵を図13に示す。

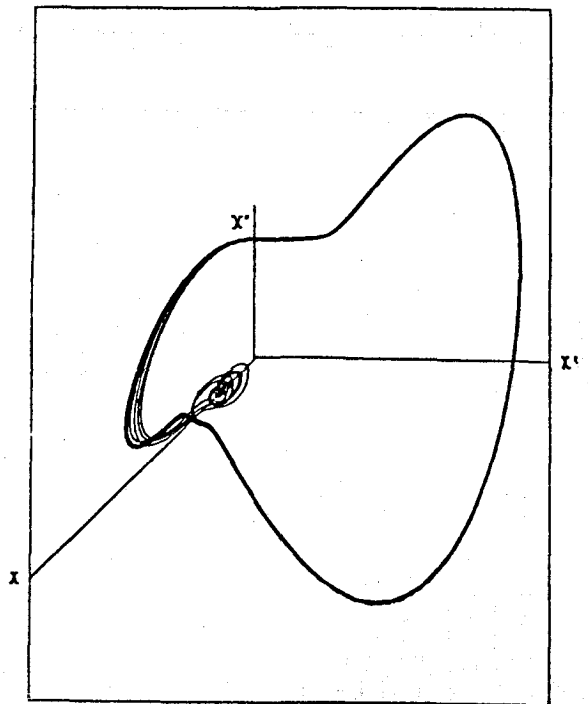


図13 図12のカオスに対して、 $(x, \dot{x}, \ddot{x})$ 空間の軌道図。¹³⁾

この絵をみて、分ることは、セパトリックスが、存在していることである。これは、サドルの存在を暗示し、我々が前から主張している^{6), 7)}3定常状態が正しいものであることを推察させる。

以上見てきたように流れ系でのカオスと、それに到る分岐の実験結果は、大変興味深いものであり、ハドソン達の結果に対しては、ほぼ理論的にも理解された。ただ完全な微分方程式模型はまだ模索の段階である。最近、テキサスのターナーが、ハドソンの結果を説明し得る4変数模型を提出したと聞が、¹⁴⁾ 詳しい事はまだ分らない。

2-5 閉じた系での B-Z カオス

従来、流動系においてのみカオスが実験にかかっていたが、最近、静岡の長島によって閉じた系においてもカオスが観測された。¹⁵⁾ これは、ある意味では驚きであった。流れ系の場合、流れを入れること自体が、新しい定常状態を生み出すのであり、あるパラメーターの領域で、この新しい状態と、もとの状態が、共存するなら、中間に存在する不安定な状態（サドル）を介し、2つの状態に伴う周期軌道に相互作用が働く。その結果、カオスが生み出される、というのが我々の考えであった。⁷⁾ 従って閉じた系で、本来一つの定常状態しかもたない B-Z 反応にカオスが存在するというのは、まさに驚きだったのである。

しかし、長島は、従来のセリウムイオンの他に鉄イオンも同時に加え、適当な条件下で、カオスを発見した。従って長島の実験においても、鉄イオンの導入により、多重定常状態が実現され、その領域で、カオスが発見されたとすれば、少なくとも我々には理解しやすい。以下、長島の実験結果を簡単にまとめる。（鉄イオン濃度を n で表わす。）

① $n = 3 \sim 20 \times 10^{-5} \text{ M}$ のとき

初めの 100 分…周期解

次の 300 分…カオス（図 14 b）

その後…周期解（初めのものと異なる。）

② $n < 3 \times 10^{-5} \text{ M}$ のとき

初め…周期解

その後…マルチ・ピークをもつ周期解（図 14 a）

③ $n > 2 \times 10^{-4} \text{ M}$ のとき

周期解のみ（図 14 c）

この場合のカオスの特徴は、2 ピークと 3 ピークの振動の組み合わせよりなり、ハドソン達と近いものをみているようである。このカオスのローレンツ・プロットは、図 15 のようになる。

この写像に関する研究は、現在長島によって行なわれている。さらに一つの驚きは、鉄イオン濃度ゼロの極限でマルチ・ピークの周期解が得られていることである。流れのない系で、触媒として、セリウムイオンだけの場合、従来、単純リミットサイクルしか実験的に得られていなかったし理論的にも知られていない。おそらく原因は BrO_3^- の濃度によるものと思われるが、閉じた系の模型で、マルチピークが出せれば、大変興味深い。閉じた系における実験は、現在もひきつづき長島によって行なわれているがカオスに関しても周期解に関しても今まで知られていなかった現象が、数多くとらえられており、今後ますます楽しみである。

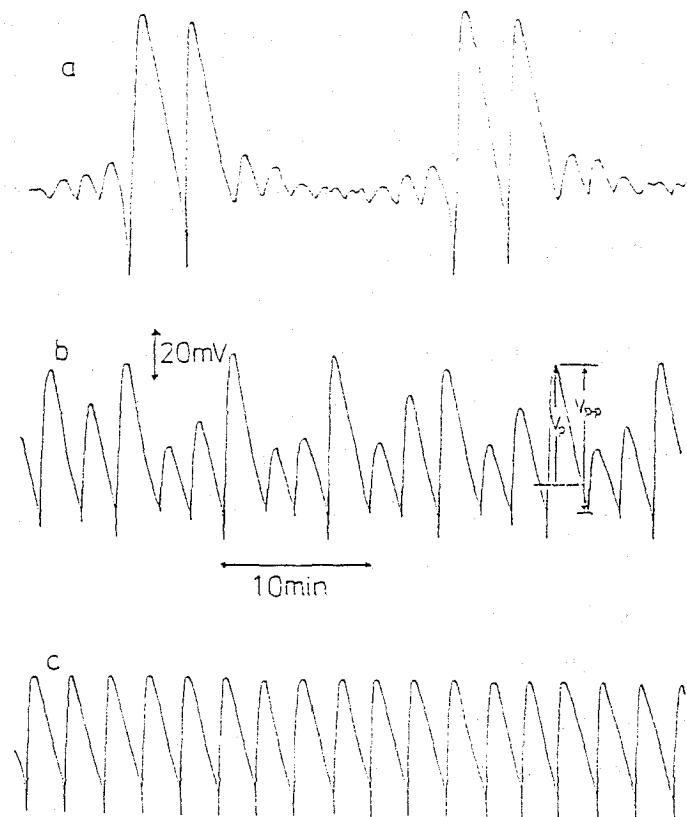


図14 長島の実験結果¹⁵⁾(説明は本文)。

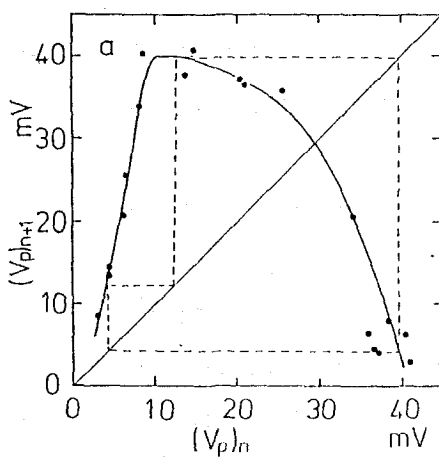
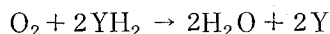


図15 図14のカオスに対するローレンツ・プロット¹⁵⁾(極大値)

§ 3 酵素反応のカオス

オルセンとダインは、ペルオキシダーゼの酵素触媒のもとでのNADHの酸化反応を、とりあつかった。^{16), 17)} ペルオキシダーゼ-オキシダーゼ反応と呼ばれるのは次のようなものである。



この反応では5つの異なる形をもつ酵素のうち、Compound IIIと呼ばれるものが重要となる。この反応で、特徴的なのは、2つの異なる自己触媒反応が存在することである。つまり、ある物質の高濃度と低濃度で、それぞれに働く自己触媒反応が異なっている。自己触媒に帰依する2つの分子X, Y(XとYの自己触媒の強さは異なる。)と酸素(O_2)とNADHの4変数からなる模型を作ることができて、オルセンとダインは、彼らが、実験室で、みつけた振動現象を説明することにほぼ成功している。ここでは詳しいことは、ふれないで(別の機会にゆずるとして)彼らの得た実験結果の絵を挙げておく(図16)。分岐パラメーターは、ペルオキシダーゼの濃度である。(図16 a)→c)に従い、低濃度になる。) 多重ピークの振動が得られているのが、特徴的である。

この酵素反応には、他に2つの重要なパラメーターが存在する。メチレンブルー(以下MBと略記)と2, 4-ジクロロフェノール(以下DCPと略記)である。MBは振動を安定化する役目を果たしDCPは、反応速度を高める役目をしており持続振動に必要な物質である。また、DCPの追加により、酸素による基質抑制が存在し得なくなり(forward inhibitionがなくなる。) bistability が消去される。

図16にもどる。

図16(d)は彼らが発見したカオスである。¹⁷⁾ 大きな振幅の振動の間に小さな振幅がランダムに入り込んでいる。これはB-Z反応のハドソンや長島のカオスに似た面をもっている。酵素反応の場合、このような特徴的な2つの振幅(あるいは、周期)が出現する主な原因は、quadratic branching が、反応機構に存在することによる。具体的には、先程述べたように2つの異なる自己触媒反応が関与しているということである。この事は、B-Zカオスの完全な微分方程式模型を考える時のヒントになるように思える。

図16(d)のカオスでは(a)~(c)の周期解の時と、いくつかのパラメーターが異なっている。MBとDCPは約半分の濃度になっており、ペルオキシダーゼは図16(a)の濃度より高い。従って(a)~(d)は1パラメーター族の関数の連続変換では得られない。(力学系の問題としては、理解しにくくなる。) オルセンとダインはこのカオスを再現する4変数の微分方程式模型を提出した。¹⁷⁾ 彼らは計算機によってカオスを出したがパラメーター領域が狭いし、かな

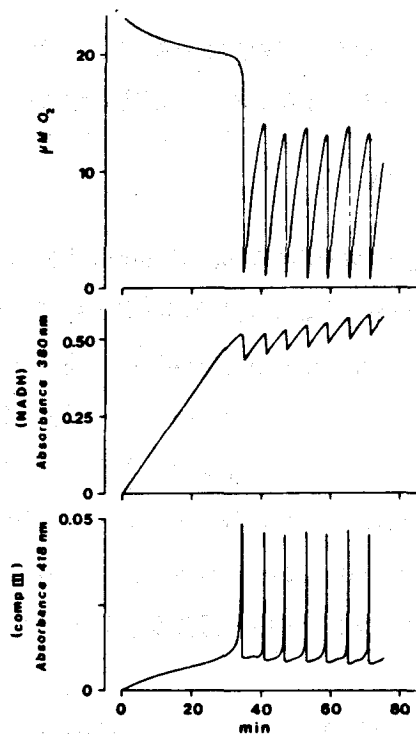


図16-a)

酵素反応にみられる周期解とカオス^{16), 17)}

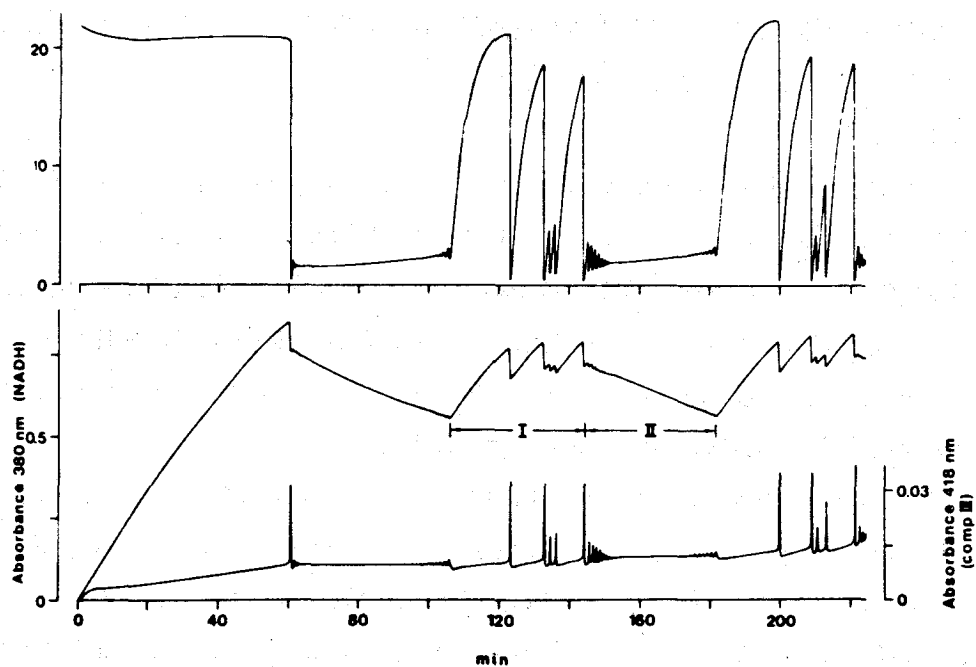


図16-b)

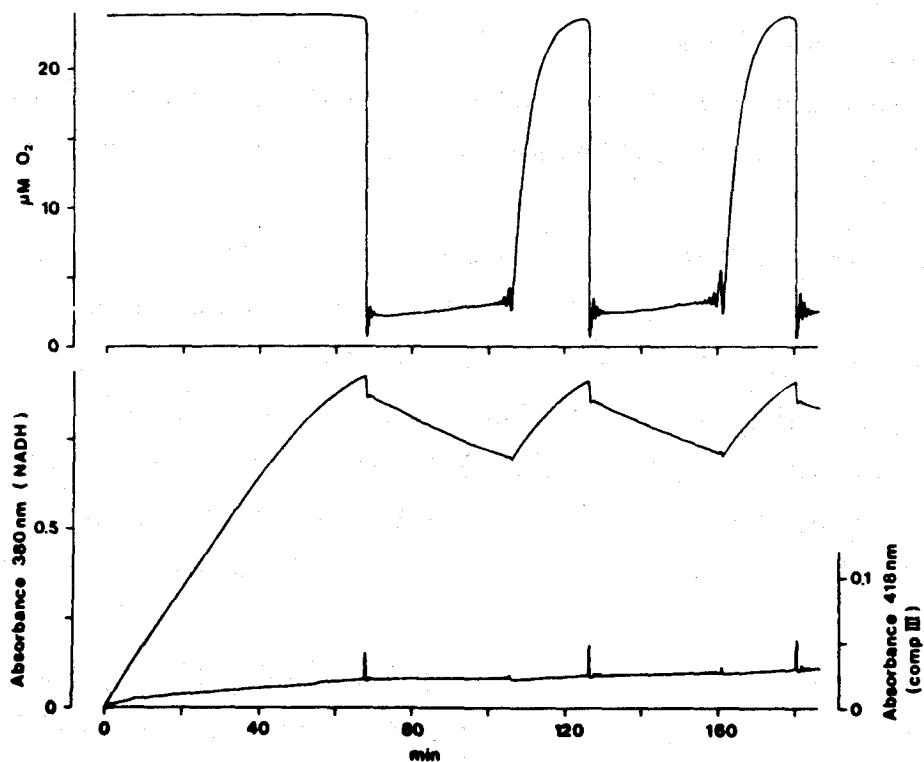


図 16-c)

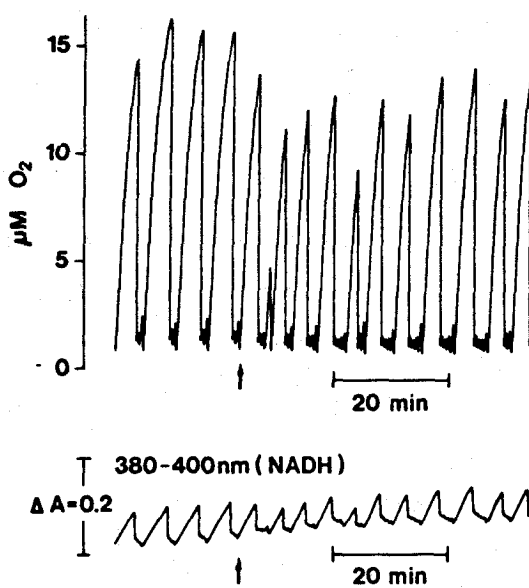


図 16-d)

らずしも現実のパラメーター変化に対応していない。しかもカオスの性質をぬき出す仕事はされておらず、まだ考える余地が、十分残されている。

歴史的には、この酵素反応は、最初、横田と山崎によって実験が行なわれた。¹⁸⁾ 彼らの業績をたたえて、オルセン・ダインは“Yamazaki-reaction”と呼んでいることをつけ加えておく。

さて、このような酵素反応を使って、“カオスの積極的役割”¹⁹⁾ といったことが言えないだろうか？ しっかりした事が言えるようになるまでには、まだ時間が少しかかると思うが、“効率”という概念を導入することにより、カオスが、実際“役に立つ”という事が、実証できれば、現実的な問題に対するカオスの意義が、認められることになる。カオスの意義としては、統計力学的な立場^{20), 21)} 乱流の素過程（流体乱流²²⁾ や光学系での乱流²³⁾）として、とらえる立場、生命現象に目を向ける立場²⁴⁾ 等があると思うが、ここでは、最後の立場で、カオスの意義をみい出せないか、ということである。“効率”の概念は最近、相沢によって、はじめて筋肉の模型で論じられている。²⁴⁾

生命とは、直接関係のない B-Z 反応のような化学反応でも反応効率ということを問題にしたいと思っているが、反応効率を定義することが、なかなか難しい。しかし、酵素反応の場合この効率という概念が、かなり、はっきりしてくるのである。すなわち、ターンオーバー数をとればよい（と思う）。ターンオーバー数とは、酵素 1 分子が、単位時間に、どれだけの量の生成物を生み出せるかという指標であり、この指標が、定常状態、周期振動状態、カオス状態で、どのような変化をみせるか調べることは興味深い（現在、研究中）。力学系の問題としては、カオスや分岐構造を特徴づける指標として、エントロピー的な量（位相論的エントロピー例えば 20) 参照）、リアプノフ数（例えば 25) 参照）が知られており、また最近では、フラクタル次元（アトラクターに関しては例えば 22）、時系列に関しては、例えば 26) 参照）を導入する動きもある。このような量は、カオスとそれに至る分岐構造をかなりよく特徴づけており、化学反応の効率（例えばターンオーバー数）から、せめてリアプノフ数程度の特徴が、引き出せば、大変おもしろいと思っている。

§ 4 ファイゲンバウムの問題³¹⁾

2^n の分岐（くまで分岐）がおこる時、 $n \rightarrow \infty$ で、ある種の普遍性が、とり出せる。最初この問題を論じたのはファイゲンバウム²⁷⁾ であるが、その後コレ、エックマン、ランフォード III 世、リュエルらの数学者や数理物理学者が、問題を精密化している。^{28), 29)} 一般性を失なうことなく変換 g を $I = [-1, 1]$ に制限できる。この時

- 1) g は I 上の C^3 級関数で $g(-1) = g(1)$ かつ上に凸 (単峰条件)
- 2) $g(x) = g(-x)$ (対称性)
- 3) $x=0$ の近傍で、べきが z

をみたす変換 g に対して、べき z を指定すればその範囲で、 g の具体的な形によらず、次のような、変換 g に普遍的な量が存在する。²⁷⁾

イ) 最も安定な 2^n 周期解を実現するパラメーターを λ_n とする。この時

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_n - \lambda_{n-1}}{\lambda_{n+1} - \lambda_n} = \delta$$

あるいは

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_n - \lambda_c| = \lim_{n \rightarrow \infty} c \delta^{-n}$$

ここで、 λ_c は 2^n の集積点での λ の値、 c は g に依存するパラメーターで、 δ は同一の z に対しては全て同じ値をとる普遍的な量であり、ファイゲンバウム定数と呼ばれている。例えば、

$z=2$ の時は、 $\delta = 4.669201609103 \dots$ である。

ロ) $\lambda = \lambda_n$ での $g^{(2^{n-1})}$ と $\lambda = \lambda_{n+1}$ での $g^{(2^n)}$ とは

$$g^{(2^n)} \rightarrow \alpha_n g^{(2^n)}(x/\alpha_n)$$

のスケール変換のもとに同型である。(ただし最も安定な点の近傍で) この時、スケール因子 α_n に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \alpha_n = \alpha = 2.5029078750957 \dots (z=2 \text{ の時})$$

ハ) さらに、 $n \rightarrow \infty$ で普遍的関数 $g^*(x)$ が存在する。この普遍的関数のみたす関数方程式は、

$$g^*(x) = -\alpha g^*(g^*(x/\alpha))$$

である。

さらに、デリダとポモー³⁰⁾によれば、 $\lambda = \lambda_n$ の時の周期を $T(\lambda_n)$ ($T(\lambda_n) = 2^n$) とすれば、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} T(\lambda_n) = \lim_{n \rightarrow \infty} |\lambda_c - \lambda_n|^{\nu_2}$$

$z=2$ の時 $\nu_2 = -0.449807 \dots$ が成り立つ。

すぐ分るように、この臨界指数 ν_2 は、イ) で定義された臨界指数 δ と

$$\nu_2 = -\frac{\ln 2}{\ln \delta}$$

のような関係がある。

ファイゲンバウムの重要な点は、カオスに至る分岐の中でも典型的な分岐である、くまで分岐の集積点近傍（カオス側の近傍は、この理論には含まれていない）の写像の構造は、臨界現象における臨界点近傍の様子と類似しているという事を最初に指摘した点にある。この観点から、ファイゲンバウムを一言で言えば、次のようになる。

適当な、なめらかさをもった関数（たぶん C^3 クラスで十分）を仮定した時、その関数の最大値近傍の関数形を指定すれば、他の定義域での関数の形が、先程の条件のみたす限り、いかに、ひねくれていても、多数回、写像するうちに、そのような、ひねくれた所は、洗い流され結局、最大値近傍の性質だけで決まるような普遍量が存在する。このように、ファイゲンバウムの仕事はカオス研究に一つの指針を与えた。

臨界現象のくりこみ群による発展を横目で見ながら一次元写像の研究を同様に行なう事はできるだろう。しかし、ここではそこまでは立ち入らず、ファイゲンバウムの問題を批判的に考えることにしたい。ここで筆者自身が、興味をもつのは、先に挙げた B-Z 反応のカオスとの関係においてである。

B-Z 反応で、ファイゲンバウムの問題を考えてはどうかと指摘してくれたのは、スウィニーであるが、当初我々が考えていたのとは、かなり異なる結果になった。最近得た結果³¹⁾を全て、ここで述べるわけにはいかないが、要点だけ指摘しておきたい。

最初にまず一つ二つ反省しておくことがある。フィゲンバウムの議論は、一般に $g(x; \lambda) = \lambda f(x)$ のように、分岐パラメーターを乗算的に取って行なわれている。これを加算的 $g(x; \lambda) = f(x) + \lambda$ にとると、どうなるか。この答えは、以下に見るように、最安定点で考えるのと分岐点で考えるのとで異なってくる。

ファイゲンバウムは、 2^n の分岐点 A_n と 2^{n+1} の分岐点 A_{n+1} の間にある 2^n 周期解が、最も安定になる点 λ_n で、問題を論じている。しかし、現実の系で、この問題を考える時、分岐点 A_n で、全ての量を計算せざるを得なくなる場合がある。³⁹⁾ この時、無反省に、ファイゲンバウムの理論を使ってよい。ファイゲンバウム自身、第2論文で、彼の理論が分岐点でも使えるという事を示しているが、論理に飛躍があり間違っている。彼は、オーダーの評価と、級数の収束性の問題とを混同している。従って問題は、まず、分岐点の列で、ファイゲンバウムが成り立つ時と成り立たない時を、明らかにすることからはじめなければならない。

実際、数学的には、収束する区間列 $\{I_n\}$ と、収束する数列 $\{|I_n|/|I_{n+1}|\}$ に対し、 $P_n \in I_n$ なる点から、新たに構成される区間列 $\{P_n, P_{n+1}\} = \{J_n\}$ の中で $\{|J_n|/|J_{n+1}|\}$ が収束しないものや、振動するものは容易に作れる。

例 1

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|I_n|}{|I_{n+1}|} = \delta \text{ とする。}$$

$I_n = [a_n, b_n]$ として、 P_n, P_{n+1} を

$$a_n P_n = \frac{1}{k} I_n, \quad a_{n+1} P_{n+1} = \frac{k-1}{k} I_{n+1}$$

となるように選べば、

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|J_n|}{|J_{n+1}|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\frac{k-1}{k} (|I_n| + |I_{n+1}|)}{\frac{1}{k} (|I_{n+1}| + |I_{n+2}|)} = (k-1) \frac{(\delta+1)}{1 + \frac{1}{\delta}} \\ &= (k-1) \delta \quad (n; \text{奇数}) \end{aligned}$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|J_n|}{|J_{n+1}|} = \frac{1}{k-1} \delta \quad (n; \text{偶数})$$

2 周期解を得る。(Periodic-Feigenbaum Constant と呼ぶことにする。) ただしこの新たな列 $\{J_n\}$ は、2 回おきに見れば、振動しないわけだから、収束列となる。この時、もとの列 $\{I_n\}$ と収束先は同じでなければならないから、上の 2 周期解を一般化したものに対し、次のような制限がつく。すなわち、新しい定数 δ_1, δ_2 に対し、

$$\sqrt{\delta_1 \delta_2} = \delta \text{ は常にみたされなければならない。}$$

一般に、上と同様の手続きで、 n 周期解をもつファイゲンバウム定数を作ることができるが、その場合も、それら $\delta_1, \dots, \delta_n$ の幾可平均が、もとのファイゲンバウム定数に等しくならなければならない。すなわち

$$\left(\prod_{i=1}^n \delta_i \right)^{1/n} = \delta$$

(この制限は上江洌(ウエズ)によって注意された)

例 2

点 P_n を例 1 のように構成しないで、でたらめに各区間 I_n に分布してゆく。すると、新しいファイゲンバウム定数もでたらめに分布し、極限值は存在しない。(Distributed-Feigenbaum Constant と呼ぶことにする。) この時は、もちろん、上のような制限はつかない。

これらは数学的な例であり実際、上の例のような写像が存在すること、ファイゲンバウムの g^* とどう関係するかをみなくてはならないが、ここでは次のことを述べるにとどめる。

“最安定点の列からは、ファイゲンバウム定数 δ が、求まるが、分岐点の列では、Distributed-Feigenbaum Constant になる例がある。この時、分岐パラメーターを乗算的 ($g(x; \lambda) = \lambda f(x)$) に選ぶと分岐点の列からでもきちんとファイゲンバウム定数 δ が求まるが、パラメーターを加算的 ($g(x; \lambda) = f(x) + \lambda$) に選ぶと分岐点の列からは、Distributed-Feigenbaum Constant になる。”

このように分岐点で δ が求まるかどうかは、分岐パラメーターの選び方に依っている。ある関数のクラスに対しては、適当な線形の座標変換で、 $g(x; \lambda) = f(x) + \lambda$ を $G(x; \lambda) = a(\lambda)F(x)$ にすることが出来る。この時、 $a(\lambda)$ に対してのファイゲンバウム定数は、 $a(\lambda)$ に一階微分可能性を要求すれば、やはり δ になることは次のように簡単に示せる。

パラメーター λ に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_n - \lambda_{n-1}}{\lambda_{n+1} - \lambda_n} = \delta$$

とする。他のパラメーター b があって、 λ の関数になっているとする。($b = b(\lambda)$)

$$\lambda_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n, \quad b_\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n$$

としておく。

十分大きな n に対して

$$b_n = b(\lambda_\infty + \Delta \lambda_n) \quad \text{ただし, } \Delta \lambda_n = \lambda_n - \lambda_\infty$$

$$b_n = b(\lambda_\infty) + b'(\lambda_\infty) \cdot \Delta \lambda_n + O(\Delta \lambda^2)$$

同様に

$$b_{n+1} = b(\lambda_\infty) + b'(\lambda_\infty) \cdot \Delta \lambda_{n+1} + O(\Delta \lambda^2)$$

$$\begin{aligned}
 & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n - b_{n-1}}{b_{n+1} - b_n} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b(\lambda_\infty) + b'(\lambda_\infty) \Delta \lambda_n - b(\lambda_\infty) - b'(\lambda_\infty) \Delta \lambda_{n-1}}{b(\lambda_\infty) + b'(\lambda_\infty) \Delta \lambda_{n+1} - b(\lambda_\infty) - b'(\lambda_\infty) \cdot \Delta \lambda_n} \\
 &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_n - \lambda_{n-1}}{\lambda_{n+1} - \lambda_n} \\
 &= \delta
 \end{aligned}$$

(村上によれば、一階微分可能性の条件は、もっと厳密にすることができるようであるが、あまりに数学的になるのでここでは述べない。上の条件を求める問題を最初に考えたのは村上である。)

簡単な例を一つ挙げておこう。

ロジスティック方程式(の差分系) $x_{n+1} = ax_n(1-x_n)$ で、 a を固定し、加算的なパラメーター λ を入れる。

$$x_{n+1} = ax_n(1-x_n) + \lambda$$

これは適当な座標変換で、

$$x_{n+1} = \alpha(\lambda) x_n (1 - x_n) \quad 0 < \alpha(\lambda) \leq 4$$

$$\alpha(\lambda) = 1 + \sqrt{(a-1)^2 + 4a\lambda}$$

とすることができる。(α は λ に対し、一階微分可能性は保証されている。)

この時、ずらし λ は

$$0 \leq \lambda \leq \frac{(a+2)(4-a)}{4a}$$

に制限される。簡単な計算より、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_n - \lambda_{n-1}}{\lambda_{n+1} - \lambda_n} = \delta$$

が示せる。また、 2^n の集積点は、

$$\lambda_\infty = \frac{1}{4a} [(\alpha_\infty - 1)^2 - (a-1)^2]$$

であることもすぐ分る。

$\alpha_\infty = 3.5699456 \cdots$ であるから、これより λ_∞ は、 a を決めれば次のような値になる。

$$a = 1 \rightarrow \lambda_\infty = 1.651155096 \cdots$$

$$a = 2 \rightarrow \lambda_\infty = 0.700577548 \cdots$$

$$a = 3 \rightarrow \lambda_\infty = 0.217051698 \cdots$$

$$a = 3.5699456 \cdots \rightarrow \lambda_\infty = 0$$

それでは、このような変換のできない場合については、どうだろうか。一般に分岐理論を応用すれば次の事が示せる。

分岐点が、もとの関数 f の変曲点の近傍に存在する時、分岐点近傍のリアプノフ数の変化は、そうでないノーマルな分岐の時より急激になる。

この結果は、ファイゲンバウム定数に異常を与える可能性を示す。一方、分岐点が変曲点近傍に存在するのは、加算的なパラメーターを選んだ方が、おこりやすいことが、言える。それでは、加算的なパラメーターの選択は、どの程度、現実的であろうか。一般論を述べるつもりはない。ただ §2 で述べたように、B-Z カオスと、それに至る分岐構造は加算的な、パラメーターによって支配されているのである。このようなパラメーターの選択が、化学反応でどのような意味をもつか厳密な事はまだ言えないが、少なくとも B-Z カオスでは、このパラメーターの選択は支配的であるということは確かな事実である。

このようにして残る問題は次の2つになる。

1. ノーマルな分岐の時、分岐点の集積するところで、ファイゲンバウムの g^* のような普遍な関数を取り出すことはできないか。
2. B-Z カオスの分岐構造に普遍な量は存在するか。(自己相似的な量はとり出せることは先に述べた。)

まず、1.の場合、逓減摂動法を差分系に適用することによって、reductive form

$$W_{s+1} = \alpha_n W_s - \beta_n W_s^3 \quad (1 < \alpha_n < 2, \beta_n > 0)$$

が導ける。実は、

$$\alpha_n \rightarrow \alpha, \beta_n \rightarrow \beta \quad (n \rightarrow \infty)$$

となり、係数まで含めて 2^n が十分集積した後の reductive form が全て同一になる。この係数 α, β は、 g^* の座標による微分と、パラメーターによる微分の固定点での値の関数になっている。

もちろん、ここでの g^* がファイゲンバウムの g^* と同一である保証はない。しかしノーマルな分岐の時は両者が一致するという事は、かなり確からしく思える。

次に 2 の場合だが、§ 2 で述べたように分岐構造は非常に複雑なものになる。(しかし、自己相似性という法則性をぬき出すことは出来た。) この場合、上の意味で、普遍的な量を解析的に抜き出すことは、まだできていないが、ファイゲンバウム(局所的である)とは違って大域的な n -不変な量が存在するという証拠をつかんでいる、ということだけ述べておく。

以上、まとめると次のようになる。

O : 1. 単峰条件がある。 2. 単峰条件がない。

A : 分岐パラメーターの選択

1. 乗算的 2. 加算的

B : どの点で問題を論ずるか。

1. 最安定点 2. 分岐点

C : (B 2 の場合) 分岐の仕方

1. ノーマル (パラメーターを分岐点から ε だけ変化させると振幅は $\sqrt{\varepsilon}$ が出る。)

2. アブノーマル (振幅は一般に $\varepsilon^{1/k}$ ($k > 2$) が出る。)

○シュワルツ条件* がみたされる時

$O1 \wedge A1 \wedge B1$ —— すでにファイゲンバウムや、他の学者によってなされている。

$(O1 \vee O2) \wedge (A1 \vee A2) \wedge B2 \wedge C1$ —— ファイゲンバウムと同じ結果になる。(証明はしていないが十分確からしい。)

そして、スケール不変な reductive form が得られる。

特に、 $O1 \wedge A1 \wedge B2 \wedge C1$ は、くりこみの手法が使える事が、ヘレマンによって示されている。⁴⁰⁾

$O1 \wedge A2 \wedge (B1 \vee (B2 \wedge C1))$ —— $O1 \wedge A1 \wedge B1$ に変換できる。

$O2 \wedge A2 \wedge B2 \wedge C2$ —— ファイゲンバウムと異なる結果を与えることがある。

* シュワルツ条件とは、 $(\frac{f''(x)}{2})^2 - f'(x) \cdot \frac{f'''(x)}{3!} > 0$ をいう。これが、みたされるなら、任意の n に対して $f^{(n)}(x)$ (f の n 回写像) の単調な区間に変曲点は高々一個しか存在しない。

distributed Feigenbaumになる例がある。理論的にもその可能性は示唆される。(理論的には、0.1であってもよい。)

○シュワルツ条件がみたされない時

B-Z カオスの我々の模型は、この例になっている。B-Z の場合は 2^n の分岐がおこっても 2^n としては、集積せず、有限で切れる、という新しい現象を含んでいる。これは $f^{(n)}$ の単調な区間に変曲点が、2つ以上存在することから説明できる。

このように B-Z 反応の場合は、そもそも、 2^n が集積しないわけだから、ファイゲンバウム定数は存在しない。しかし、§2 で示したような自己相似性は存在するし、また大局的な n -不変な量も存在しているようである。

§5 おわりに

以上、化学反応系のカオスと関連する問題の一部を述べてきた。化学反応系のカオスといっても、ここでは B-Z 反応と酵素反応に限ったが、もちろん他にも興味深い反応系は多く存在する。それらは、筆者自身まだ研究していないという理由によって、ここでは述べなかったが最近、解糖反応のゴールドベーター、ルフェバー模型を強制振動させてカオスを出した大同・富田の仕事³²⁾ など生物系へのカオスの役割を考える時、重要になるのではないかと考えている。その他、化学反応系を強制振動する仕事としては、富田・甲斐のブラッセレーターに関する仕事がある。³³⁾ さらにここでは空間的に一様な場合に話を限ったが、拡散の入った系にも、おもしろい現象が、現われる。最近、蔵本や、古賀・蔵本によってこの方面の理論が、おおいに進んでいる。³⁴⁾ これらは、生物系への応用としても興味深い現象を数多く含んでいる。

最後のファイゲンバウムの問題は、それ自身としては、今後どのような発展をするかは、よく分らないが、ここで述べた B-Z 反応の場合のように、現実的な問題と関連してくると、おもしろくなると思う。ここでは述べなかったが、ファイゲンバウム自身、パワースペクトルに彼の理論を応用しており³⁵⁾ 実験家に刺激を与えている。

謝 辞

原稿を批判的に読んで下さり、貴重な意見を与えて下さった富田和久先生に感謝する。本稿の執筆を促して下さった富田博之氏と、戸谷隆男氏に感謝する。

参 考 文 献

- 1) K. Tomita, A. Itō and T. Ohta, J. Theor. Biol. **68**, 459 (1977).
- 2) J.J. Tyson. *Belousov-Zhabotinsky reaction*, Lect. Note. Biomath. **10**, (1976) (ed. S. Levin) Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York.
- 3) 富田和久・津田一郎, 物性研究 **33**, 1 (1979)
- 4) K. Showalter, R.M. Noyes and K. Bar-Eli, J. Chem. Phys. **69**, 2514 (1978).
- 5) J.J. Tyson, J. Math. Biol. **5**, 351 (1978).
- 6) K. Tomita and I. Tsuda, Phys. Lett. **71A**, 489 (1979).
- 7) K. Tomita and I. Tsuda, Progr. Theor. Phys. **64**, 1138 (1980).
- 8) 富田和久, フィジクス, **2**, No 4, 286 (1980)
- 9) J. Nagumo and S. Sato, Kybernetik, **10**, 155 (1972).
- 10) I. Tsuda (in preparation).
- 11) C. Vidal, J.-C. Roux, S. Bachelart and A. Rossi (preprint).
- 12) J. Maurer and A. Libchaber (preprint).
- 13) J.C. Roux, A. Rossi, S. Bachelart and C. Vidal, Phys. Lett. **77A**, 391 (1980).
- 14) H.L. Swinney (private communication).
- 15) H. Nagashima (preprint).
- 16) L.F. Olsen and H. Degn, Biochim. Biophys. Acta, **523**, 321 (1978).
- 17) H. Degn, L.F. Olsen and J.W. Perram, Ann. N.Y. Acad. Sci., **316**, 623 (1979).
- 18) K. Yokota and I. Yamazaki, Biochim. Biophys. Acta, **105**, 301 (1965).
- 19) 富田和久 (私信)
- 20) T. Kai and K. Tomita, Progr. Theor. Phys. **64**, 1532 (1980).
- 21) I. Shimada, Progr. Theor. Phys. **62**, 61 (1979).
- 22) H. Mori and H. Fujisaka, Progr. Theor. Phys. **63**, 1931 (1980).
H. Mori, Progr. Theor. Phys. **63**, 1044 (1980).
- 23) K. Ikeda, H. Daido and O. Akimoto, Phys. Rev. Lett. **45**, 709 (1980).
- 24) Y. Aizawa (in preparation).
- 25) I. Shimada and T. Nagashima, Progr. Theor. Phys. **61**, 1605 (1979).
- 26) 相沢洋二, 数理科学 (カオスとエントロピー), **9**, 21 (1980)
- 27) M.J. Feigenbaum, J. Stat. Phys. **19**, 25 (1978).
M.J. Feigenbaum, J. Stat. Phys. **21**, 669 (1979).
- 28) P. Collet, J.-P. Eckmann and O.E. Lanford III, Commun. Math. Phys. **76**, 211 (1980).
- 29) M. Campanino, H. Epstein and D. Ruelle (preprint).

- 30) B. Derrida, A. Gervois and Y. Pomeau, J. Phys. A: Math. Gen. 12, 269 (1979).
- 31) I. Tsuda (in preparation).
- 32) K. Tomita and H. Daido, Phys. Lett., 79A, 133 (1980).
- 33) K. Tomita and T. Kai, Progr. Theor. Phys. Suppl. 64, 280 (1978).
- 34) Y. Kuramoto (preprint).
Y. Kuramoto (Stat. Phys. 14 における invited talk).
S. Koga and Y. Kuramoto (in preparation).
- 35) M.J. Feigenbaum, Phys. Lett. 74A, 375 (1979).
M.J. Feigenbaum, Commun. Math. Phys. 77, 65 (1980).
- 36) R.A. Schmitz, K.R. Graziani and J.L. Hudson, J. Chem. Phys. 67, 3040 (1977).
- 37) J.L. Hudson, M. Hart and D. Marinko, J. Chem. Phys. 71, 1601 (1979).
- 38) D. Edelson, R.J. Field and R.M. Noyes, Int. J. Chem. Kinet., VII, 417 (1975).
- 39) V. Franceschini and C. Tebaldi, J. Stat. Phys. 21, 707 (1979).
- 40) R.H.G. Helleman, *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, Vol. 5; ed. E.G.D Cohen, North Holland Publ., Amsterdam and N.Y. (1980), p. 165–233.