

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

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ベローソフ・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。らせん波はベローソフ・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付き始めた[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[8-10]。

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

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

$D_u = 1$ 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。

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 $\sigma = 0$ とおいたものはベローソフ・ジャポ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）に適用できるように理論を拡張しよう [15]。理論の詳細は省き、本質的なくつかのステップのみを以下では述べる。

ドメイン境界の任意の変形に対する運動方程式を書き下し、それから連結していないドメインの重心に対する運動方程式を導出するのがもっとも一般的であいまいさがない。 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限では方程式 (6) の v を界面での値 v_I で置き換えてよい。その結果、界面方程式

$$\tau V = \epsilon K + \tau c(v_I) \quad (10)$$

を得る。 V は興奮領域を囲む界面での外向き法線速度、 K は内向きを正と定義した平均曲率であり、 c と v_I の関係は

$$\frac{c\tau}{\sqrt{(c\tau)^2 + 4}} = 1 - 2a - v_I \quad (11)$$

で与えられる。

未知定数 v_I は与えられた界面の配置に対して (7) を解くことによって決定できる。 $\epsilon \rightarrow 0$ では (6) は

$$-u + \theta(u - a) - v = 0 \quad (12)$$

であり、これを (7) に代入すると

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \theta(u - a) - \beta v \quad (13)$$

を得る。 $\beta = 1 + \gamma$ である。パルスの速度が v の緩和に十分比べて遅いとき左辺を摂動として取り扱って漸近解

$$v(\vec{r}, t) = G\theta + -G^2 \frac{\partial \theta}{\partial t} + G^3 \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} - G^4 \frac{\partial^3 \theta}{\partial t^3} + \dots \quad (14)$$

を得る。 G は

$$(-D\nabla^2 + \beta)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (15)$$

で定義され、かつ、 $GA = \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') A(\vec{r}')$ などと略記してある。(14) で \vec{r} を界面の位置 $u = a$ に選べば v_I が決まる。

特別な場合として同じ半径 R をもつ興奮ドメイン（パルス）が 2 個あるときを考えよう。パルスは球対称であると近似する。一方その周りに分布している抑制因子 v は伝播するパルスでは球対称からずれるがその効果は (14) の右辺の展開で取り入れられている。 $\epsilon \ll R$ では (10) の ϵK は無視してよい。また、以下では各々の重心の位置を \vec{p}_1 、 \vec{p}_2 として、 $|\vec{p}_1 - \vec{p}_2| \gg R$ を仮定する。

方程式 (10) と (11) より

$$\frac{\tau V}{2} - \frac{(\tau V)^3}{16} - 2v_I = 1 - 2a \quad (16)$$

となるがパルスの重心の速度が

$$\dot{\vec{p}} = \frac{1}{\Omega} \int d\omega V \vec{r}(\omega) \quad (17)$$

と表されることに注意すると (16) より重心に対する運動方程式を導出できる。(17) で Ω はパルスの体積、 $d\omega$ は微少表面積、 $\vec{r}(\omega)$ は表面の位置ベクトルである。

上の方法を 2 次元で実行すると

$$m\ddot{\vec{\rho}}_1 + c(\tau - \tau_c)\dot{\vec{\rho}}_1 + g\dot{\vec{\rho}}_1|\dot{\vec{\rho}}_1|^2 = C_d \vec{\nabla}_1 \bar{u}_0(|\vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2|) \quad (18)$$

を得る。 C_d はパルスの体積である。正定数 m 、 c 、 τ_c 、 g は具体的に計算することができるが省略する。1 次元では以前に別の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 (18) 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 $\dot{\vec{p}} = 0$ が解であり、 $\tau < \tau_c$ では $\dot{\vec{p}} \neq 0$ 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 (18) 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か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んでおり、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 (18) 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 (18) 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テイル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に抑制因子 v が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を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。

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 et al, *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 et al, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 2797 (1994).
- [7] W. N. Reynolds et al, *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 et al, *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, *Macromolecular Symposia* (in press). T. Ohta, unpublished.

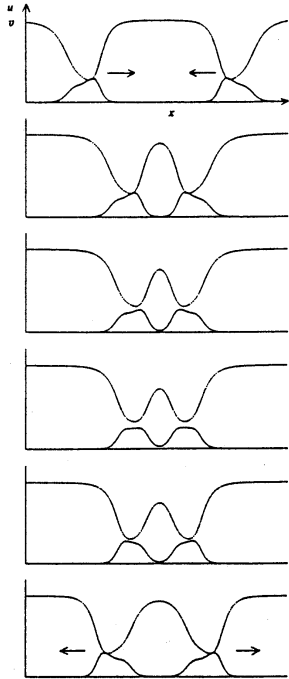


図1：パルスの弾性的反射。上から垂れ下がっているのが u 、盛り上がっているのが v 。

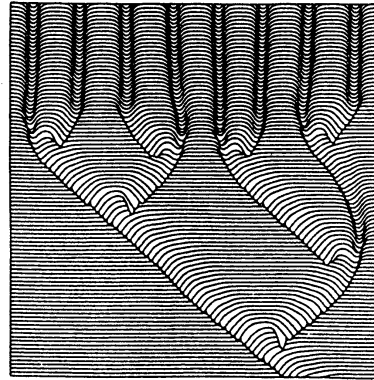


図2：パルスの分裂。

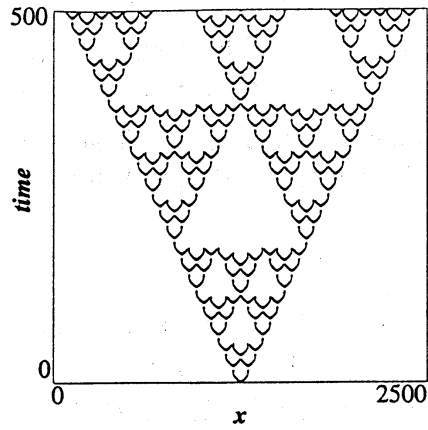


図5：自己相似時空間パターン。詳細は早瀬氏の報告を参照。

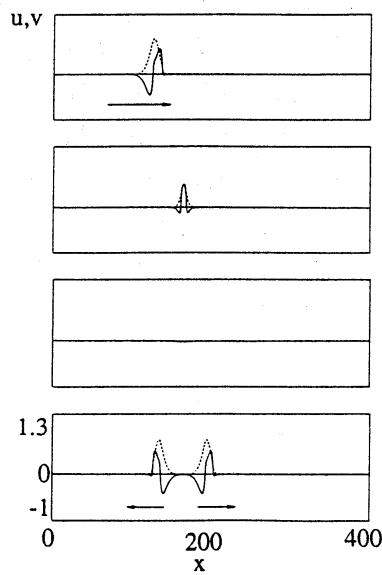
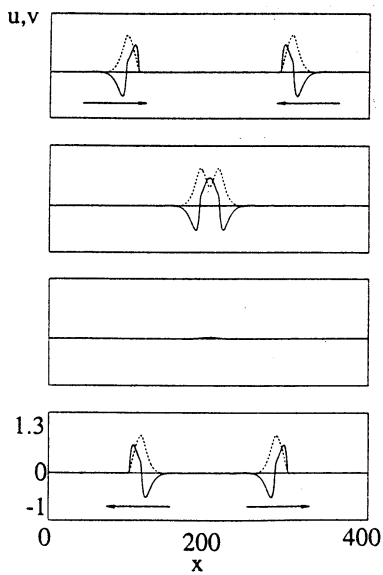


図3：パルスの保存（実線 u 、点線 v ）。 図4：パルスの分裂（実線 u 、点線 v ）。