

自然現象を数理的に理解する —自己組織化現象の数理解析—

上田 肇一

1 はじめに

自然界には,砂丘の風紋,雪の結晶,魚の模様など様々な美しい模様が存在し,そのような模様には規則的に見える幾何学的なパターンが存在します.そのようなパターンは,あらかじめ設計図が与えられているのではなく,粒子や分子などの個々の要素が,基本的な物理法則に従って運動することで模様を作ることから,自己組織化パターンと呼ばれています.自己組織化パターンはどのような仕組みによって形成されるのでしょうか?この問いに答えるためには数学的な手法が重要な役割を果たしました.本講義では,いくつかの自己組織化現象を例に,その数学的手法を紹介したいと思います.

2 分岐理論

自己組織化現象の仕組みを理解する際に分岐理論は重要な役割を果たす.ここでは,分岐理論について簡単に説明する.

次の方程式を考える.

$$\frac{du}{dt} = u^2 - \mu. \quad (1)$$

この方程式の平衡点は $\mu > 0$ のとき,

$$u = \pm\sqrt{\mu}$$

となる.安定性は $\partial_u(u^2 - \mu)|_{u=\pm\sqrt{\mu}} \gtrless 0$ から $u = -\sqrt{\mu}$ が(漸近)安定, $u = +\sqrt{\mu}$ が不安定となることがわかる.ここで,横軸を μ ,縦軸を平衡点の値とすると図 1(a) のような図が得られる.このような図を分岐図という.分岐図から,式 (1) の平衡点は $\mu = 0$ で一致し,安定性が変化することがわかる.このような分岐を「サドル・ノード分岐」という.

次の方程式を考える.

$$\frac{du}{dt} = u(\mu - u^2). \quad (2)$$

この方程式の平衡点は $u = 0$ と $u = \pm\sqrt{\mu}$ ($\mu > 0$) となる.平衡点 $u = 0$ の安定性は $\partial_u(u(\mu - u^2))|_{u=0} = \mu$ から $\mu < 0$ のときには安定, $\mu > 0$ のときには不

安定となることがわかる. 平衡点 $u = \pm\sqrt{\mu}$ に関しては $\partial_u(u(\mu-u^2))|_{u=\pm\sqrt{\mu}} = -\mu$ となり, $\mu > 0$ から安定であることがわかる. 分岐図を作成すると図 1(b) のようになる. このような枝分かれをする分岐を「ピッチフォーク分岐」という.

次の 2 変数の常微分方程式を考える.

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= \alpha u - v - u(u^2 + v^2), \\ \frac{dv}{dt} &= u + \alpha v - v(u^2 + v^2).\end{aligned}\tag{3}$$

この方程式の解の振る舞いは, 次の極座標変換をすることによって見通しが良くなる.

$$u(t) = r(t) \cos \varphi(t), \quad v(t) = r(t) \sin \varphi(t), \quad r(t) \geq 0.$$

これを式 (3) に代入すると, 次の方程式が得られる.

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dt} &= \alpha r - r^3, \\ \frac{d\varphi}{dt} &= 1.\end{aligned}\tag{4}$$

第 1 式と第 2 式が独立しているため, 式 (3) の解の振る舞いは各方程式の性質を調べることで理解することができる. α をパラメータとしたときの第 1 式の方岐図を調べる. 式 (4) の第 1 式は式 (2) と同じ形をしているので $\alpha = 0$ でピッチフォーク分岐が起き, 安定な解 ($r = \pm\sqrt{\alpha}$) が分岐することがわかる. 式 (4) の第 2 式から φ は一定速度で増加することがわかる. つまり, 式 (3) の解は $u-v$ 平面内を一定速度で回転することがわかる. これらの結果から $u-v$ 平面に解軌道を描くと図 1(c) のようになる. つまり, $\alpha < 0$ では解は $r = 0$ の解に収束し, $\alpha > 0$ のときには半径 $\sqrt{\alpha}$ の周期解に収束することがわかる. このような分岐を「Hopf 分岐」という.

3 進行パルス・スパイラルパターン

1951 年, Belousov は生体内でみられる代謝回路を模倣した化学反応について実験をしている際, 化学物質の濃度が時間的に振動することを発見した. しかし, その現象が発見された当時は, 多くの科学者が化学反応は時間が経つとある平衡状態に落ち着くものと考えられていたため, その現象は広く知られることはなかった. しかし, その後, Zhabotinsky が他の化学反応でも周期的な濃度変化が見られることを発見し, その現象が多くの科学者に知られるようになった. さらに, Zhabotinsky は同心円状のパターンが現れることを実験的に示した. 彼らの名前をとってこの化学反応は Belousov-Zhabotinsky 反応 (BZ 反応) と呼ばれる.

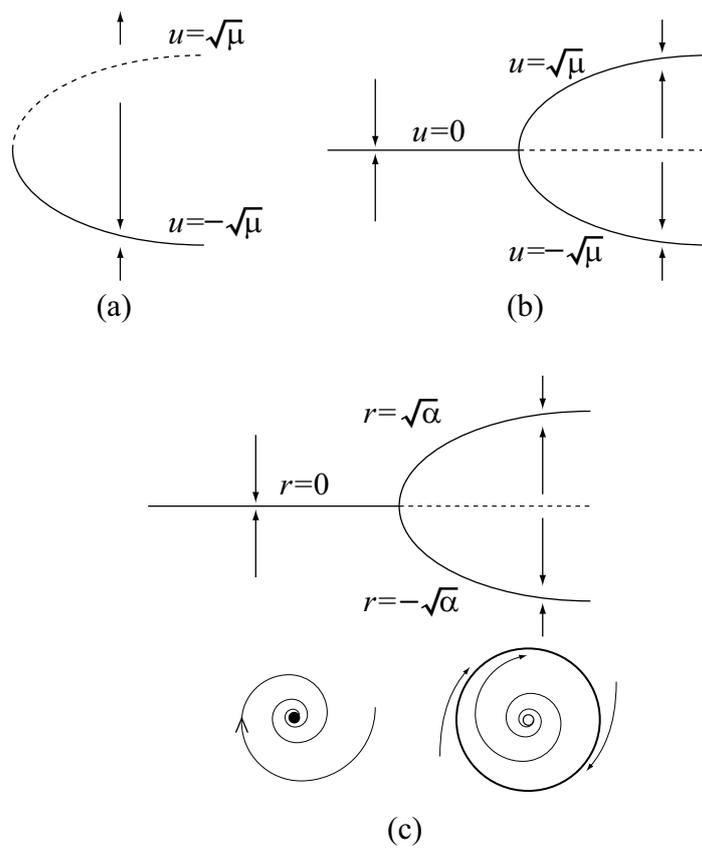


図 1: 分岐図. 実線は安定解, 破線は不安定解. (a) 式 (1). (b) 式 (2). (c) 式 (3).

BZ 反応についての研究は現在も盛んに行われており, BZ 反応で典型的に見られるスパイラルパターンやターゲットパターンの性質が詳細に調べられている. また, そのような時空間パターンは細胞性粘菌や白金板上の分子吸着など, 様々な現象で確認されており, その発生機構が数理モデルを用いた研究によって明らかにされている.

スパイラルパターンを再現する数理モデルとして BZ 反応をモデル化した Brusselator モデルや Rovinsky-Zhabotinsky モデルなど多くのモデルが提案されているが, ここでは式の形が単純であるという理由から BZ 反応とは直接関係ない FitzHugh-Nagumo(FHN) 方程式と呼ばれる次の方程式を用いてスパイラルパターンの発生機構について考察する.

$$\begin{aligned}\frac{du}{dt} &= u(1-u)(u-a) - v, \\ \frac{dv}{dt} &= \varepsilon(u - \gamma v)\end{aligned}\tag{5}$$

ここで, a, ε, γ は正定数である. この方程式は神経細胞に見られる活動電位を現象論的に記述した Hodgkin-Huxley 方程式を単純化したもので, u は細胞膜電位に関する変数である.

ここで, スパイラルパターンの発生において重要な閾値の概念について説明する. 今, パラメータは $a = 0.06, \varepsilon = 0.015, \gamma = 3$ とする. ヌルクライン ($f = 0, g = 0$ 満たす線) は図 2 のようになり, 平衡点 $(u, v) = (0, 0)$ が存在することがわかる. 線形安定性解析をするとわかるように $(u, v) = (0, 0)$ は安定な平衡点である. したがって, 初期値を原点に十分近い値 (例えば $(u(0), v(0)) = (0.1, 0)$) にとった場合, 解はすぐに安定平衡点 $(u, v) = (0, 0)$ に収束する (図 2 の青色の線). しかし, $u(0)$ をもう少し大きくなった場合 (例えば $(u(0), v(0)) = (0.2, 0)$), 解の振る舞いが先ほどと定性的に異なることがわかる. u はすぐに定常安定解に収束するのではなく, 一旦大きい値をとった後, ゆっくりと平衡点に収束する様子がみられる (図 2 の紫色の線). このように, FHN 方程式の解は初期値がある値 u^* (今回のパラメータでは $u^* \approx 0.14$) を越えた場合に定性的に異なることがわかる. そのような u^* を閾値と呼ぶ. また, u が一旦大きくなった状態をここでは「興奮状態」と呼ぶことにする.

次に u の拡散の効果を考慮に入れた次の方程式を考える.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u)(u-a) - v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \varepsilon(u - \gamma v)\end{aligned}\tag{6}$$

初期値は u に局所的な摂動を加えたものを採用する. 具体的には次のようにとる.

$$\begin{aligned}u(x, 0) &= u_0, v(x, 0) = 0, & \text{for } x \in [0, 7.5 \times 10^{-3}], \\ u(x, 0) &= 0, v(x, 0) = 0, & \text{otherwise.}\end{aligned}$$

空間的な拡散の効果が入った場合でもある閾値が存在し, 初期値が閾値を越えた場合と越えない場合で解の振る舞いが定性的に変化する. 実際, $u_0 = 0.5$ のときには特に興味深い現象がみられず, 解は定数定常解 ($u \equiv 0, v \equiv 0$) に収束する様子が見られる (図 3(a)). 一方, $u_0 = 0.6$ のときには左端の u の値が一旦興奮状態になり, その後, 興奮状態が右側に一定速度で伝播する様子が見られる (図 3(b)).

興奮状態が空間的に伝播する機構において拡散は重要な役割を果たしている. 空間をセルで分割して現象を考えてみる. 初期状態として 1 番目 (左端) のセルが興奮状態になるようにとる. すると, 拡散の効果によって 2 番目 (1 番目のセルの右隣) のセルの u の値も閾値を越え, 興奮状態になる. これが 3 番目, 4 番目と次々に連鎖することによって興奮状態が右方向に伝播し, 進行パルスが形成される. 数学的には, そのような一定速度で伝播するパルスの存在が明らかになっている.

定理 3.1 十分小さな ε に対して, 式 (6) は速度 $c(\varepsilon)$ をもつパルス解をもつ.

次に空間 2 次元の場合を考える. つまり,

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \Delta u + u(1-u)(u-a) - v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \varepsilon(u - \gamma v),\end{aligned}\tag{7}$$

ここで $\Delta := \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$. 空間 1 次元の場合と同様に空間 2 次元の場合でも初期値に対してある閾値が存在し, 初期値 u が閾値より大きい場合に非自明な空間パターンがみられる. 適当な初期値を与えると, 図 4 のようなスパイラルパターンが現れる.

このように数値シミュレーション結果から, スパイラルパターンの発生において f と g が興奮性を示すように設定されることが重要であることが予想される. 実際, 興奮性を示す非線形性を持つ多くの方程式 (BZ 反応を再現する方程式を含む) においてスパイラルパターンが現れることが数値的に確かめられている.

空間 2 次元の場合は初期値やパラメータを変化させることによって同心円状に広がるパターン (ターゲットパターン) がみられるが, その発生機構については講義中に説明する.

4 チューリングパターン

3 章では進行パルス解が現れる仕組みを説明したが, シマウマや魚に見られるような等間隔で, しかも時間が経ってもほとんど変化することのない模様はどのような仕組みによって作られるのだろうか? 1952 年に英国の数学者 Turing はこの問題に対する極めて重要な結果を示した. この章では Turing によって得られた結果を紹介する.

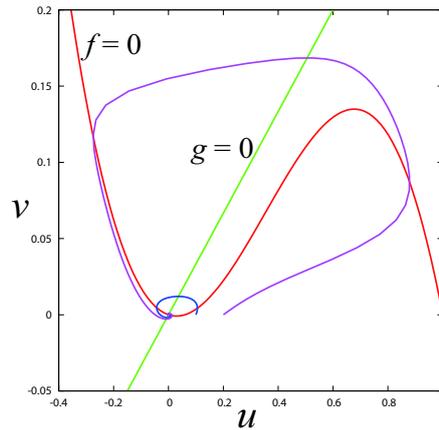


図 2: 式 (5) のヌルクライン . 赤線 : $f = 0$. 緑線 : $g = 0$. 青線 : $u_0 = 0.1$ のときの解軌道 . 紫線 : $u_0 = 0.2$ のときの解軌道 .

今, 動物でみられるパターンが細胞内のある化学物質の濃度によって決定し, さらに細胞内では 2 つの化学物質 U と V が化学反応を起こすと仮定する . ある細胞内の時刻 t における化学物質 U 及び V の濃度をそれぞれ $u(t)$ と $v(t)$ とし, それらの時間変化は次の方程式に従うと仮定する .

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= f(u, v), \\ \frac{dv}{dt} &= g(u, v), \end{aligned}$$

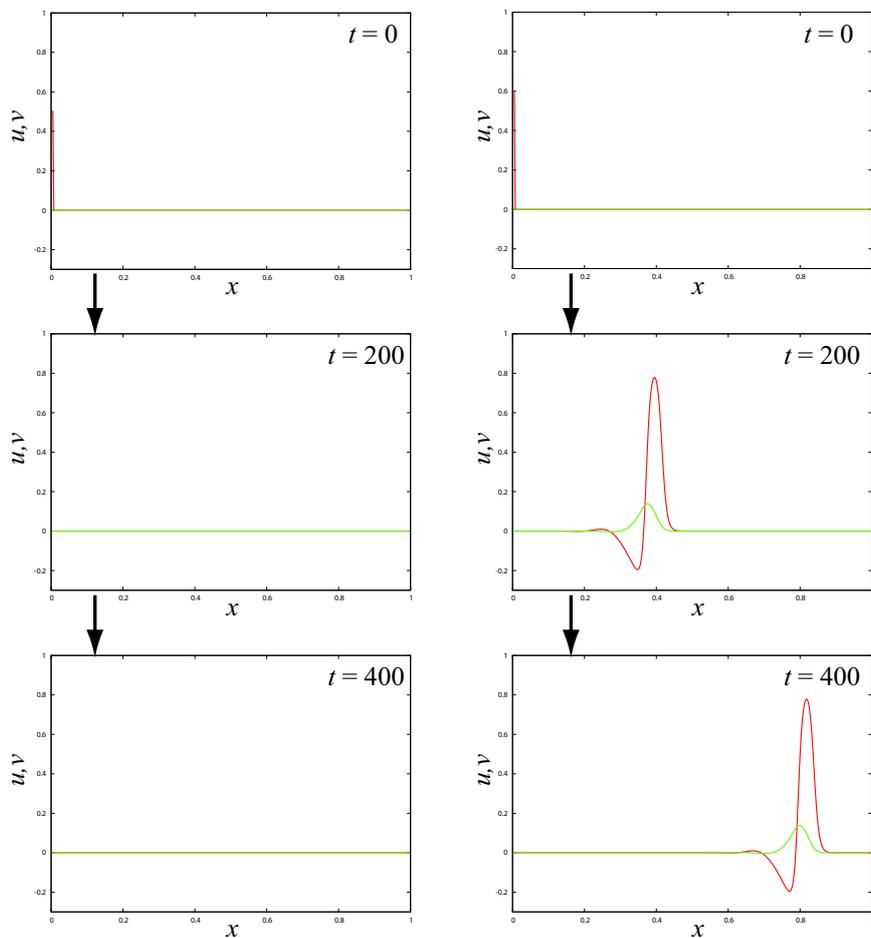
今, 各細胞内の化学物質はある定常状態 $(u, v) = (u_0, v_0)$ が存在し, それらが漸近安定であると仮定する . つまり, $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = (0, 0)$ かつ $(u, v) = (u_0, v_0)$ で

$$f_u + g_v < 0, \quad f_u g_v - f_v g_u > 0 \tag{8}$$

が成り立つと仮定する . ここで, $f_u := \partial f / \partial u$ であり, f_v, g_u, g_v も同様に定義する .

次に, 細胞が空間 1 次元的に配置し, 化学物質は隣接する細胞に拡散すると仮定する . さらに, 位置 x にある細胞内の時刻 t における U と V の濃度をそれぞれ $u(x, t), v(x, t)$ とし, 条件 (8) を満たすと仮定する . 細胞のサイズが十分小さく, その数も十分大きいと仮定し, それらの連続極限をとると u と v は次の方程式に従う .

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v) \end{aligned} \tag{9}$$



(a) 閾値より小さい場合

(b) 閾値より大きい場合

図 3: 式 (6) の時間発展 . 赤線 : u . 緑線 : v .

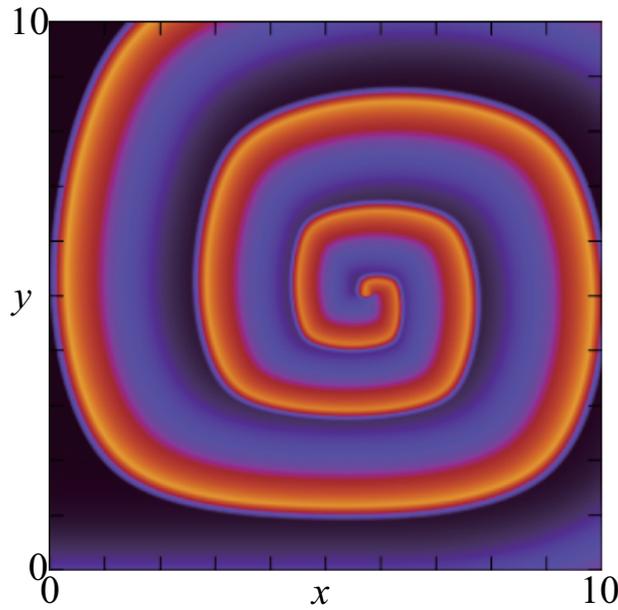


図 4: 式 (7) のスナップショット .

ここで, $D_u, D_v > 0$. この設定のもと, 空間非一様なパターンが現れる仕組みを調べる . 次の形の解を求めれば十分である .

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} + \Phi_k \exp(\lambda_k t + i k x)$$

ここで $\text{Re}\lambda_k > 0$ であれば波数 $k \in \mathbb{R}$ は不安定であることを意味する . これを式 (9) に代入すると, 次の方程式が得られる .

$$\lambda_k^2 - T_1(k^2)\lambda_k + T_2(k^2) = 0 \quad (10)$$

ここで, $h = k^2 > 0$ とすると,

$$\begin{aligned} T_1(h) &= f_u + g_v - h(D_u + D_v), \\ T_2(h) &= f_u g_v - f_v g_u - (D_v f_u + D_u g_v)h + D_u D_v h^2 \end{aligned} \quad (11)$$

となる . 方程式 (10) から,

$$\lambda_k = \frac{T_1(h) \pm \sqrt{T_1^2(h) - 4T_2(h)}}{2}$$

となる . ある波数 k が不安定化するためには $\text{Re}\lambda_k = 0$ を満たす正の h が存在する必要がある . $f_u + g_v < 0$ (式 (8)) かつ $D_u, D_v > 0$ からは常に $T_1 < 0$ であることから不安定化は $\text{Re}(\lambda_k) = 0$, すなわち $T_2 = 0$ のときにしか起こ

らない. $T_2 = 0$ が正の h で成り立つには (11) より

$$D_v f_u + D_u g_v > 0$$

が必要条件となる. さらに重解条件から

$$(D_v f_u + D_u g_v)^2 - 4D_u D_v (f_u g_v - f_v g_u) = 0$$

が必要条件である.

具体例として次の方程式の安定性解析を行う.

$$\begin{aligned} u_t &= u_{xx} + u(1-u)(1+u) - v, \\ v_t &= v_{xx} + 3\left(u - \frac{2}{3}v\right). \end{aligned} \tag{12}$$

この方程式の反応項の部分だけを考える. つまり,

$$\begin{aligned} u_t &= u(1-u)(1+u) - v, \\ v_t &= 3\left(u - \frac{2}{3}v\right). \end{aligned}$$

この方程式は $(0, 0)$ を平衡点として持ち, 条件 (8) を満たすため, $(0, 0)$ は安定平衡解であることがわかる. また, $(u, v) = (0, 0)$ において

$$\begin{aligned} D_v f_u + D_u g_v &= D_v - 2D_u, \\ (D_v f_u + D_u g_v)^2 - 4D_u D_v (f_u g_v - f_v g_u) &= (D_v - 2D_u)^2 - 4D_u D_v \end{aligned}$$

となるため, D_v を D_u より十分大きくとると $\text{Re}(\lambda_k) > 0$ となる λ_k が存在することがわかる. 実際, $D_u = 1.0 \times 10^{-3}$, $D_v = 1.0 \times 10^{-2}$ とし, 初期値として定常解に小さいノイズを加えた場合, ある波数成分が不安定化することが数値シミュレーションによって確かめることができる (図 5).

2変数以上の反応拡散系においては常微分方程式としては安定な平衡点であったとしても, 拡散項が加わることによって空間一様な定常解が不安定化することがあり得ることがチューリングの理論によって明らかになった. この結果を直感的に理解するのは難しくないでしょうか? 各セルの中では U と V の濃度はある一定の値に収束しようとし, 拡散項は濃度を空間一様にする働きをします. この2つの効果が合わさると, 解の状態は不安定化するのではなく, むしろ一様な状態に向かうように感じないでしょうか? この現象を (直感的に) 理解するためには, 拡散係数 D_u, D_v の比に注目する必要があります. この説明は講義中に行う予定です.

5 パルスダイナミクスと分岐現象

この章では, 定常パルス解の分岐によって現れるパターンダイナミクスについて考察する. ここでは後に説明する自己複製パターンを再現するモデル

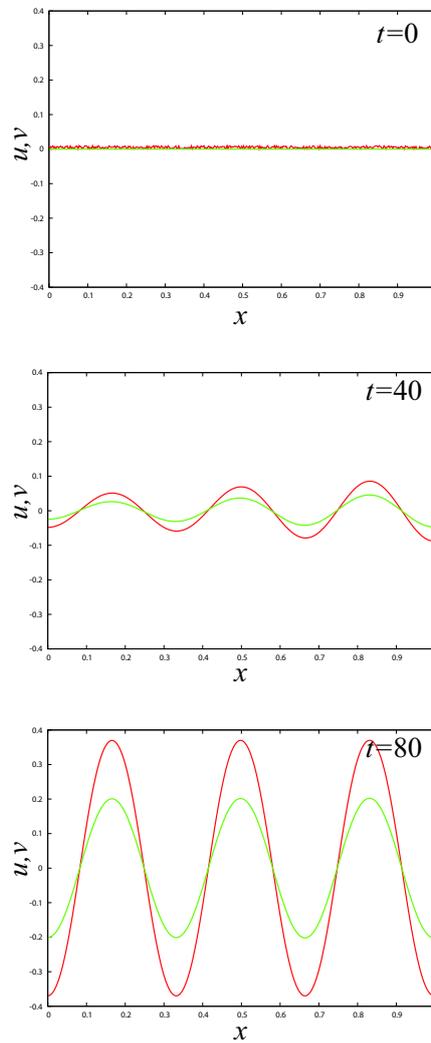
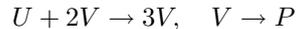


図 5: 式 (12) の時間発展 . 赤線 : u , 緑線 : v .

として知られる次の Gray-Scott モデルを用いる .

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \Delta u - uv^2 + F(1 - u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \Delta v + uv^2 - (F + k)v,\end{aligned}\tag{13}$$

この式は化学反応



をモデル化したものである . ここで, U と V はある化学物質, P は生成物である . また, U は一定の割合で外部から供給され, U と V の濃度はその濃度に比例した割合で減衰すると仮定する . この方程式はパラメータ k と F を変化させることによって, 様々なパターンがみられるが, ここでは進行パルス解と自己複製パターンに注目する .

まず, 計算機シミュレーションを行い, 進行パルス解が発生する様子を調べる . $F = 0.02$ に固定して k を変化させると, $k = 0.0540$ では解は定常パルス解に収束する様子が見られる (図 6(a)) . 徐々に k を小さくとり $k = 0.0535$ とすると 3 章でみたような進行パルス解が現れる (図 6(b)) . したがって, $F = 0.02$ のときは $k = 0.0535$ と 0.0540 の間において定常パルス解が不安定化し, 安定な進行パルス解が現れることがわかる . 図 6 では左側に伝播するパルスのみを表示したが, 方程式の空間対称性から右側に伝播するパルスも同様に存在する .

パルスが伝播を始めるパラメータでは何が起きているのであろうか? この現象を理解するためには 2 章で説明した分岐図を調べることが有効である . 計算機実験によって, 進行パルス解が現れるパラメータ付近の分岐図を調べると図 7(a) のようになることがわかる . 図 1(b) と見比べてみるとわかるように $k = k_c$ で定常パルス解がピッチフォーク分岐をしていることが予想される .

次に, $F = 0.04$ とし, k を 0.061 から 0.060 に減少させる . $k = 0.061$ では安定定常パルス解が存在し, 解軌道は安定定常パルス解に近づく様子が見られる (図 6(c)) . $k = 0.060$ としたとき, 解の振る舞いが劇的に変化し, パルスが次々に分裂する様子が見られる (図 6(d)) . このようなパルスが次々に分裂するパターンを自己複製パターンと呼ぶ .

自己複製パターンが発生する仕組みを調べるために, 計算機実験によって定常パルス解の分岐図を調べる . 図 7(b) は $F = 0.04$ における分岐図である . 図 1(a) と比較してわかるように定常パルス解は $k = 0.06$ 付近でサドル・ノード分岐を起こすことが予想される .

次節では数値的に得られた予想について詳しい解析を行う .

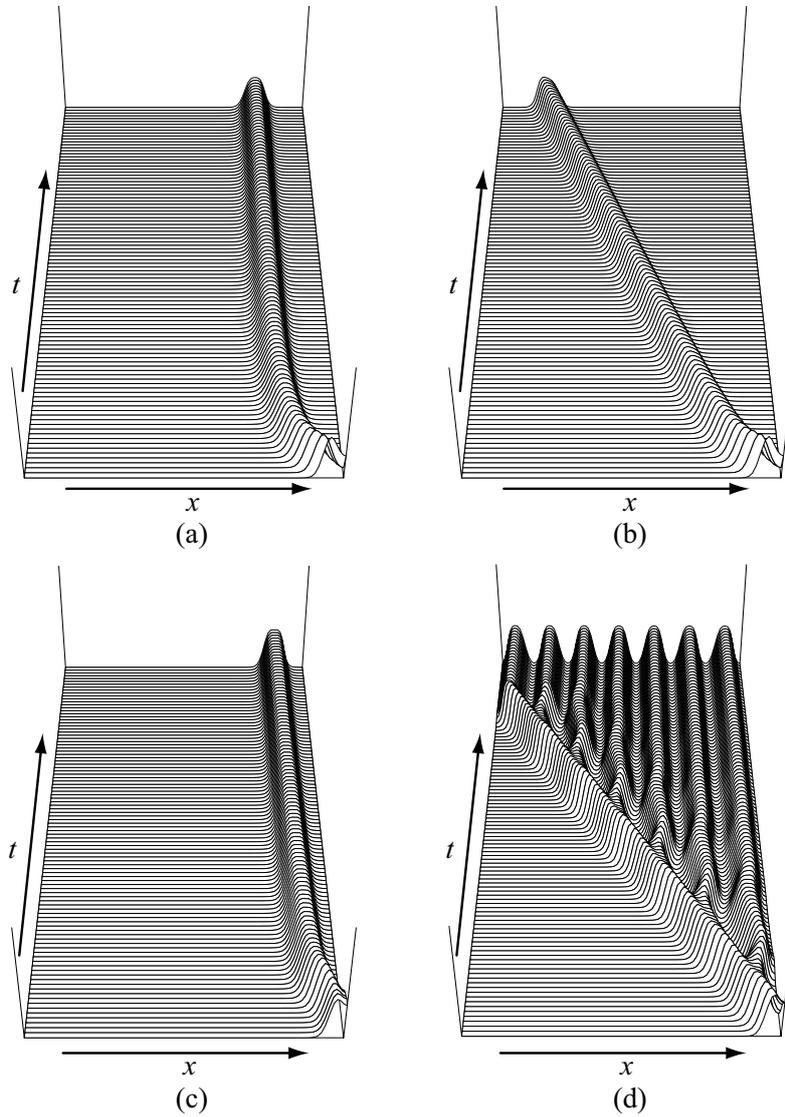


図 6: Gray-Scott モデルの解の振る舞い (v の値のみ表示) . (a) $(F, k) = (0.02, 0.0540)$. (b) $(F, k) = (0.02, 0.0535)$. (c) $(F, k) = (0.04, 0.061)$. (d) $(F, k) = (0.04, 0.060)$.

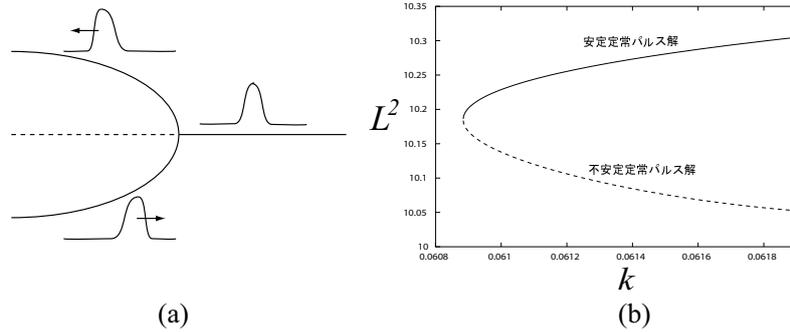


図 7: 実線は安定解, 破線は不安定解. (a) 進行パルス解が現れるパラメータ近傍における分岐図 (模式図). (b) 自己複製パターンが現れるパラメータ近傍における分岐図.

5.1 縮約理論

ここでは, 縮約理論を用いて単独パルス及びパルス間相互作用によって見られるダイナミクスの解析を行う.

Gray-Scott モデル (13) を次のように表す.

$$U_t = \mathcal{L}(U) := D\Delta U + F(U) \quad (14)$$

ここで, $U = {}^t(u, v)$, $D = \text{diag}(D_u, D_v)$, $F(U) = {}^t(-uv^2 + F(1-u), uv^2 - (F+k)v)$. 今, 定常パルス解 $S(x)$ が存在すると $S(x)$ は次の式を満たす.

$$0 = DS_{xx} + F(S)$$

次に, 微分作用素 L を次のように定義する.

$$LU := DU_{xx} + F'(S)U$$

L は線形化作用素という. ここで $F'(S)$ は S における写像 $F: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ の微分である.

$S(x)$ および L に対して次の仮定をする.

仮定 1 $k = k_c$ において空間対称な形をした定常パルス解 $S(x)$ が存在し, ある正定数 α が存在し $|x| \rightarrow \infty$ で $|S(x)| \leq O(e^{-\alpha|x|})$ を満たす.

仮定 2 L の 0 以外のスペクトル集合を σ とする. ある正定数 γ_0 が存在して $\sigma \subset \{\lambda \in \mathbb{C}; \text{Re}(\lambda) < -\gamma_0\}$ を満たす.

5.2 進行パルス解の分岐と相互作用

線形化作用素 L に関して次の仮定をする.

仮定 3 S_x と 1 次独立な関数 $\psi(x)$ が存在し, $E = \text{span}\{S_x, \psi\}$ を満たす. ただし, $E := \bigcup_{n=1}^{\infty} \text{Ker} L^n$.

仮定 4 ある k_c が存在し, $k = k_c$ のとき $L\psi = -S_x$ を満たす関数 $\psi(x)$ が存在する (後にこの k_c がピッチフォーク分岐点に対応することがわかる)

ここで, $\mathcal{L}(S) = 0$ から $LS_x = 0$ が成り立つことに注意する.

L^* を L の共役作用素, すなわち $L^*U = DU_{xx} + {}^tF'(S)U$ とする. このとき, 次の式を満たす関数 ϕ^*, ψ^* が存在する.

$$L^*\phi^* = 0, \quad L^*\psi^* = -\phi^*.$$

仮定 1 から仮定 4 の下, パラメータ k を k_c 近傍にとったときのパルスダイナミクスを記述する方程式を導出する. ここでは, 計算の概略だけを述べる. 解 U を次のように表す.

$$U(x, t) = S(x - l(t)) + q(t)\psi(x - l(t)) + \Pi(q; k) \quad (15)$$

ここで, $l(t)$ は時刻 t におけるパルスの位置, $\Pi(q; k) \in E^\perp$ である. 式 (15) を式 (14) に代入し, 両辺を ϕ^* および ψ^* で内積 (L^2 内積) を取ると, 次の方程式が得られる.

$$\begin{aligned} \dot{l} &= q, \\ \dot{q} &= -M_1q^3 + M_2\eta q \end{aligned} \quad (16)$$

ただし, ここでは話を簡単にするために高次項を除いた主要部のみを示す. ここで, l はパルスの位置であるため q はパルスの速度に対応する. また, $\eta := k - k_c$, M_1 と M_2 は正定数である. $M_1, M_2 > 0$ のときには, 式 (16) の第 2 式は 2 章で示したように, $q = 0$ の平衡点は $\eta = 0$ でピッチフォーク分岐点ができ, 安定な平衡点 $q = \pm\sqrt{M_2\eta/M_1}$ が現れる. つまり, 安定な進行パルス解が分岐する.

次にパルス間の相互作用について考える. 今, 2 つのパルスが存在し, それらの位置がそれぞれ l_1, l_2 とする. さらに $h = l_2 - l_1 > 0$ が十分大きいと仮定する. 式 (15) と同様に解 U を次のように表す.

$$U(x, t) = S(x - l_1) + q_1\psi(x - l_1) + S(x - h - l_1) + q_2\psi(x - h - l_1) + \tilde{\Pi}(x, t) \quad (17)$$

詳細は省略するが, 式 (17) を式 (14) に代入し, 式 (16) を導出したときと同様の計算を行うと次の方程式が得られる (詳細は¹を参照).

$$\begin{aligned} \dot{l}_1 &= q_1 - M_0^*e^{-\alpha h}, \\ \dot{h} &= q_2 - q_1 + 2M_0^*e^{-\alpha h}, \\ \dot{q}_1 &= -M_1q_1^3 + M_2\eta q_1 - M_0e^{-\alpha h}, \\ \dot{q}_2 &= -M_1q_2^3 + M_2\eta q_2 + M_0e^{-\alpha h} \end{aligned} \quad (18)$$

¹S.-I. Ei et al. Physica D 165 (2002) 176-198.

ここで, M_0, M_0^* は定数である.

方程式 (18) を解析すると, パルスの衝突によって反射が起こり, パルスの伝播方向が変化する様子が観察される. このような現象は Gray-Scott モデルの数値シミュレーションによっても観察され, 方程式 (18) が定性的に Gray-Scott モデルの解軌道を再現していることが確認できる.

5.3 自己複製パターンの分裂過程

次に自己複製パターンの発生機構について考える. 先ほど用いた仮定 4 の代わりに次の仮定をする.

仮定 4' ある k_c が存在し, $k = k_c$ のとき $L\xi = 0$ を満たす関数 $\xi(x)$ が存在する (後にこの k_c がサドル・ノード分岐点に対応することがわかる)

単独のパルスダイナミクスを記述する方程式を導出するために式 (15) と同様に解を

$$U(x, t) = S(x - l(t)) + r(t)\xi(x - l(t)) + \Pi(r; k) \quad (19)$$

と表す. ここで, $\Pi(r; k) \in E^\perp$. 式 (19) を式 (14) に代入し, 両辺を ϕ^* および ξ^* (ξ^* は $L^*\xi^* = 0$ を満たす関数) で内積を取ると, 次の方程式が得られる.

$$\begin{aligned} \dot{l} &= 0, \\ \dot{r} &= r^2 - M\eta \end{aligned} \quad (20)$$

ただし, $\eta = k - k_c$, M は正定数である. ここでは話を簡単にするために高次項を除いた主要部のみを示している. 式 (20) の第 1 式より, パルスの位置は変化しないことがわかる. 第 2 式を見ると, 式 (1) と同じ形をしていることがわかる. つまり, $\eta > 0$ のとき $-\sqrt{M\eta}$ は安定な平衡点, $+\sqrt{M\eta}$ は不安定な平衡点であり, それらの解はサドル・ノード分岐点 $\eta = 0$ にて一致する.

次にパラメータをサドル・ノード分岐点近傍にとったときの 2 つのパルスの相互作用を考える. 式 (17) と同様に解を

$$U(x, t) = S(x - l_1) + r_1\xi(x - l_1) + S(x - h - l_1) + r_2\xi(x - h - l_1) + \tilde{\Pi}(x, t)$$

とおき, 計算を行うと高次の項を省略した次の方程式が得られる.

$$\begin{aligned} \dot{l} &= -M_0e^{-\alpha h}, \\ \dot{h} &= 2M_0e^{-\alpha h}, \\ \dot{r}_1 &= r_1^2 - M_2\eta - M_0^*e^{-\alpha h}, \\ \dot{r}_2 &= r_2^2 - M_2\eta - M_0^*e^{-\alpha h}, \end{aligned} \quad (21)$$

ただし, M_0, M_0^*, M_2 は正定数である. この式の導出においてはいくつか追加の仮定を必要とするが, ここではそれらの説明は省略する (詳細は²⁾を参照).

²⁾S.-I. Ei et al. Japan J. Ind. Appl. Math. 18(2) (2001) 181-205.

式 (21) の第 2 式からパルス間距離は単調に増加することがわかる。また, $\eta > 0$ のとき, 第 3 式及び第 4 式から h が $\ell = -\log(-M_2\eta/M_0^*)/\alpha$ より大きくなったときに $r_j (j = 1, 2)$ の値は $t \rightarrow +\infty$ で発散する。これは, パルスの分裂が起きることに対応している。このように, 常微分方程式の解析を通して分裂が開始するためにはパルス間距離がある一定距離まで離れることが必要であることがわかった。

1 次元空間上に $N + 1$ 個のパルスが存在したときのパルスダイナミクスも同様の手法によって常微分方程式として記述することができる。さらに, その常微分方程式を解析することによって次の結果が成り立つことがわかる。

定理 5.1 各パルス間距離 $h_j := x_j - x_{j-1}$ (x_{j-1} は左から j 番目のパルスの位置 ($j = 1, 2, \dots, N$)) に対して $h_j(0) < \ell$ が成り立つとする。このとき有限時間後に h_1 または h_N が最初に ℓ に到達する。

この定理から, 分裂するのは両端に位置するパルスだけであることがわかる。