Edge of Folding Points
- 自己複製パターンに見る遷移ダイナミクス -

情報数理研究分野　西浦 廉政, 上山大信

「うつろひゆくもの」は古代から人々の心を捉え、詩歌の題材にもなり、我々の存在のはかなさのたとえとしてもしばしば用いられてきた。一方でそれはとらえどころのないもの、うたかたのものとして最近まで科学の対象としては最も縁遠い感があったのは否めない。実際力学系的観点から遷移ダイナミクスをどのように捉えるかという問題はその重要性と面白味にも拘らず、様々な漸近的手法の発展に比べると大きく立ち後れている。それを記述する数理的枠組みが整備されていないということもあるが、遷移過程そのものがあまり俎上にのぼることがなかったことも大きな原因である。近年、非平衡・非線形の一つの典型的現象として、自己複製パターンが注目を集めているが、これが遷移ダイナミクスの一つの雛形を与えていることを示す。大域分岐理論の立場からいうと、このダイナミクスは Edge of folding points という構造の結果として現れる、必然的な（たまたまそのようになるのではなく）ものであることを明らかにしたい。

1　漸近的見方が見落としていたもの

漸近的な振舞は系の最終状態を決定するものとして、極めて重要であり、かつ系の詳細によらないという特徴をもつ。すなわち過渡的なダイナミクスは初期境界条件や非線形項の微細な違いに依存するかもしれないが、十分時間が経てばそれらは消失し、より本質的な構造のみが生き残るというものである。これにより、残り得るダイナミクスは限定され、従って分類が可能となり、かつそれらは普遍性をもつことになる。これは我々の認識能力からいっても自然なことであり、ある限定された範囲で考えなければすぐに溢れ、混乱するだけである。しかし一方でこの見方によって失うものも大きいように思われる。例えば漸近状態のみが我々にとって、もっとも意味があるものかどうかは定かではない。実際、双安定型反応拡散方程式や Cahn-Hilliard 方程式で知られている粗視化過程における超微速運動 (Very slow motion) は我々が通常の時間スケールで見るものは過渡状態でしかないことを示唆している（文献［1］)。すなわち過渡状態と見るかそうでないかは観察者の時空のスケールに応じて決まる相対的なものと考えるべきである。近年の計算機の発達は、より複雑な時空パターンやこれまで遷移過程として記述が難しいと思われていた現象に対し、理解の範囲を広げることを可能にしつつある。無限次元の探索に計算機の有効利用は不可欠であり、興味ある遷移ダイナミクスの数理的枠組もその中から抽出されると期待される。本稿ではその典型例としての自己複製ダイナミクスを取り扱う。

2　遷移ダイナミクスと自己複製パターン

2.1　自己複製パターンとは？

遷移ダイナミクスとは一つの状態から別の状態へと次々と遷移していくさまをいう。有限次元の例としては鞍点遍歴がある（図1参照）。図の軌道は各鞍点の十分近くまで接近し、そこで長く滞在するが最終的には離れて、安定平衡点に漸近して行く。前節で述べた粗視化過程に現れる超微速運動は偏微分方程式に現れる鞍点遍歴の具体例となっている。鞍点から別の鞍点への運動が Very slow motion となる。別の例は1次元空間で状態Aから状態Bへ変る場合であろう。双安定型反応拡散方程式がこの2状態を安定な平衡解としてもつとき、その遷移過程は進行波の形で表現される（図2）。

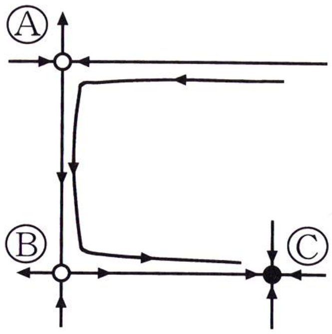


図1

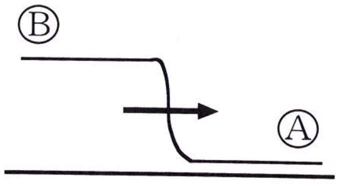


図2

従って動座標系で見ればこれは定常解となり、Heteroclinic orbit として特徴付けられる。この進行波解はより一般的に界面ダイナミクスの運動を決定する際に重要な役割を果たすことが知られている。高次元になると A から B への遷移も上の進行波による駆動力に加え、界面張力の効果が出てくる。この効果は進行波による駆動力がない場合（A と B がポテンシャルで見て同じレベルのとき）に適当な特異極限の下で、平均曲率流という形で特徴付けられる。しかし、これは別の観点からみると単純な例ともいえる。それは平均曲率流は界面の面積を減らそうとするダイナミクスであり、基本的には（３次元以上では界面のトポロジーが変ることもあるが）複雑な形状から単純なものへの変化である。例えば凸な初期値から出発すれば、しだいに丸くなり、やがて1点に収縮して消える。しかし、以上の例は遷移過程とはいえその記述はそれほど困難ではない。なぜなら遷移ダイナミクスをガイドする不変多様体の枠が存在するか（鞍点遍歴）、あるいはある種の単調性（平均曲率流）がわかっているからである。このような範疇に入らない極めて興味ある遷移過程がある。

自己複製（あるいは自己分裂）パターンと呼ばれている現象である。元々は化学反応系において発見された現象であり、ほぼ同時にモデル方程式のシミュレーションによっても確かめられた（例えば[1]、[2]、[3]）。図3は[4]で提案されたモデル方程式(1)の空間2次元でのシミュレーションである。

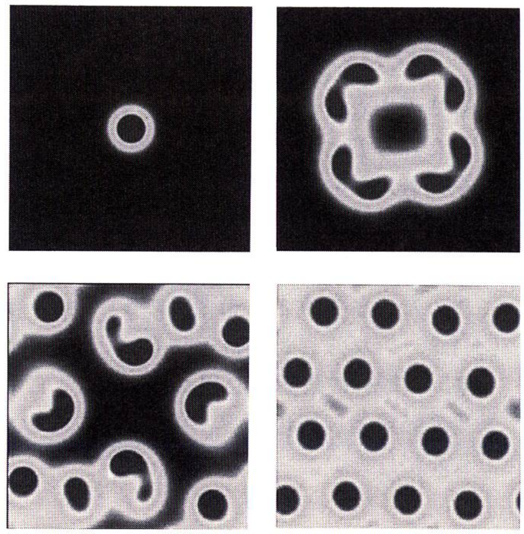


図3

初期パターンが次々と横に伸び、くびれ、分裂する様子がわかる。新しく生まれた部分は元と同じ形、大きさとなる。領域をほぼ埋め尽くすと全体として周期構造をとろうとするため、その欠陥を補正しようと、非常にゆっくりとしたダイナミクスとなる。同じモデルで空間1次元の場合は図4のような振舞となる。

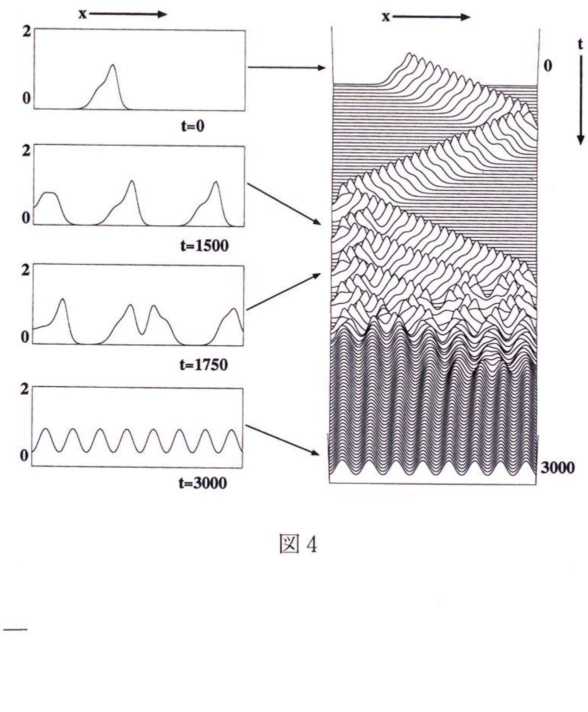


図4

最初1山の初期値を与えると、しばらく単独パルスのように進むが、その後2つに分裂し、再び2パルスの周期解の如く振る舞うが、やがてまた分裂し、領域をほぼ埋め尽くす個数までそれを繰り返し、最終的にはいわゆるチューリングパターンと呼ばれる定常解に落ち着く。これとは異なる自己複製パターンが次節で述べる Gray-Scott モデル（2）において見つかっている。[2],[3] 実際、1次元において $F = 0.04, k = 0.06075$ というパラーメータ値で1山の初期値から出発すると図5のようになる。

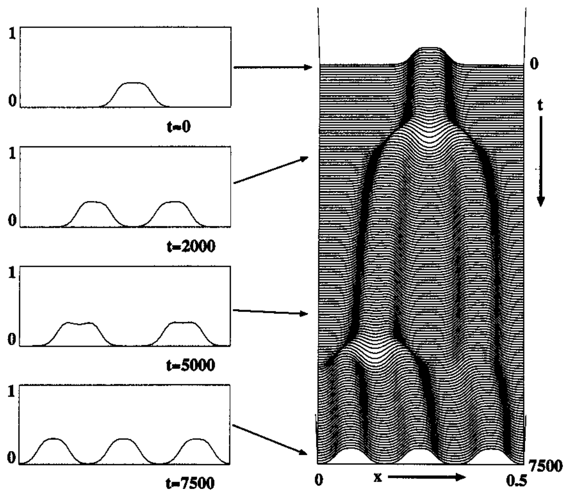


図5

今度はパルスのように進むのではなく、しばらく定在波のように動かず、しばらくして2つに分裂し、2山の定在波のようになり、最終的には領域の大きさに応じた個数のところで再びチューリングパターンとなる。これらの例からわかるように着目している自己複製というダイナミクスはそれを駆動する不変多様体が相空間に存在しない（これは後に明らかになる）という意味で真の過渡現象であり、さらに単純な構造から複雑なものへの移行過程に現れる遷移ダイナミクスでもある。ここでの目的は力学系的観点とりわけ、大域分岐理論の立場からこの自己複製という遷移現象を明らかにすることである。しかし注意すべきは自己複製をもつ解軌道をなんらかの分岐解に直接対応させるわけではない。むしろ、逆で、ある大域構造が崩壊した（消え去った）後の、余韻(aftereffect)として遷移過程を捉えようという立場である。

2.2　2つのモデル方程式

次のような2種類のモデル方程式を考えよう。

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + u(u - v^2 - \alpha) \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + ku - v, \end{cases} \qquad (1)$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u) \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v. \end{cases} \qquad (2)$$

これら2つのモデルに共通する点は

1. Bogdanov-Takens 特異点（余次元2）をもつ。
2. Turing 不安定性を起こす。
3. 自明な安定平衡点をもつ。

最後の自明な平衡点は Bogdanov-Takens 特異点のサドル・ノード分岐で現れる2つの平衡点とは異なる、従ってパラメータによらない安定平衡点である。最初の2つから ODEダイナミクスに含まれる2つのパラメータ及び拡散比、計3つのパラメータが関与することになる。

2.3　Edge of Folding Points（極限点の端）

この節ではどのような機構が自己複製パターンを産み出しているかをやや天下り的ではあるが与えることにする。実際そのようなメカニズムがモデル方程式に内包されているかどうかについては次節で議論する。今、ある不変集合、例えば周期解の極限点が図6のように存在したとしよう。

黒抜き（白抜き）の丸は安定（不安定）な周期解をあらわすとする。極限点$\alpha = \alpha_c$ではサドル・ノード分岐が起っている。不安定解は極限点を通過することにより、安定性を回復するとする。従って不安定Floquet 乗数は唯一であり、不安定解は微小摂動により不安定多様体の一つの方向に沿っ

ては常に安定周期解へつながる。ここで重要なことは、極限点 α_c を左にわずかにはずれた $\alpha = \alpha_1$ で見られるダイナミクスである。そこでは不変集合はなにもなく、相空間は通常点ばかりである。しかし図6のようにしばらくは周期解の如く振舞い、その後そこからはずれていく。これはサドル・ノード分岐という現象は突然起こり、従って不変集合の周期解は急に消えてしまうが、ベクトル場は連続的にしか変化しないからである。この周期解もどきの振舞いを**極限点の余韻** (aftereffect of the folding point) と呼ぶことにする。

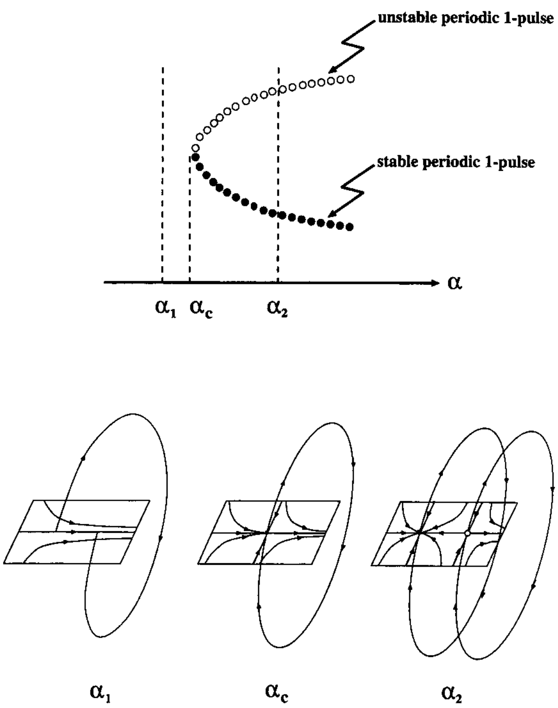


図6

上のような極限点が図7のように同じパラメータの値で複数個並んだとする。各極限点での安定性の変化は上と同じようにすべて安定性を回復するとする。さらに下の段のサドル・ノード分岐の不安定解は適当な摂動の下で、上の段の安定解につながるとする。すなわちその不安定多様体は、一つは同じ段の安定解に、もう一つは上の段の安定解にそれぞれつながっているとする。図7はそのようなつながりが階層的に連なった様子を表しているとする。このような構造を**極限点の整列階層構造**と呼ぶ。

さてこのとき、パラメータが極限点の端からわずかには外れたとき、どのような事が起こるだろうか? 初期値を P_1 の極限点の近くにとった軌道は、各極限点の余韻を感じながら階層構造を下から上にたどっていくであろう。これは不安定多様体のつながりを前述のように仮定したので、極限点の端では丁度各極限点を下から上につなぐ軌道が存在することになり、パラメータが極限点の端から外れたとき、その「余韻」をこの軌道は感じて各極限点を遷移していくこととなる。今、P_n に対応するのが n-山のパルス型周期解とするならば、この遷移は最初に述べた数値実験図4に対応するものとなる。このように自己複製ダイナクスは **Edge of folding points** と言う大域的分岐構造の余韻として、生み出されていることがわかる。

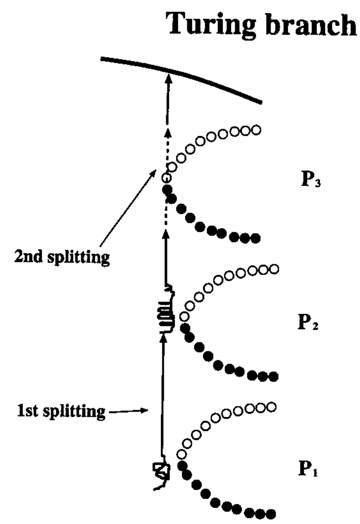


図7

2.4 逐次チューリング分岐と安定性回復原理

前節で述べた極限点の階層構造が具体的なモデル方程式において実際に存在することを確かめよう。むろん現実の研究過程においては、この節の試行錯誤を伴う分岐解の大域構造の探索が最も大変であり、その跡付けをすることが深い理解をもたらすが、ここでは最終的な結果のみを掲げることにする。図8はモデル (1) に対する $d = 0.175$ における分岐ダイアグラムである。

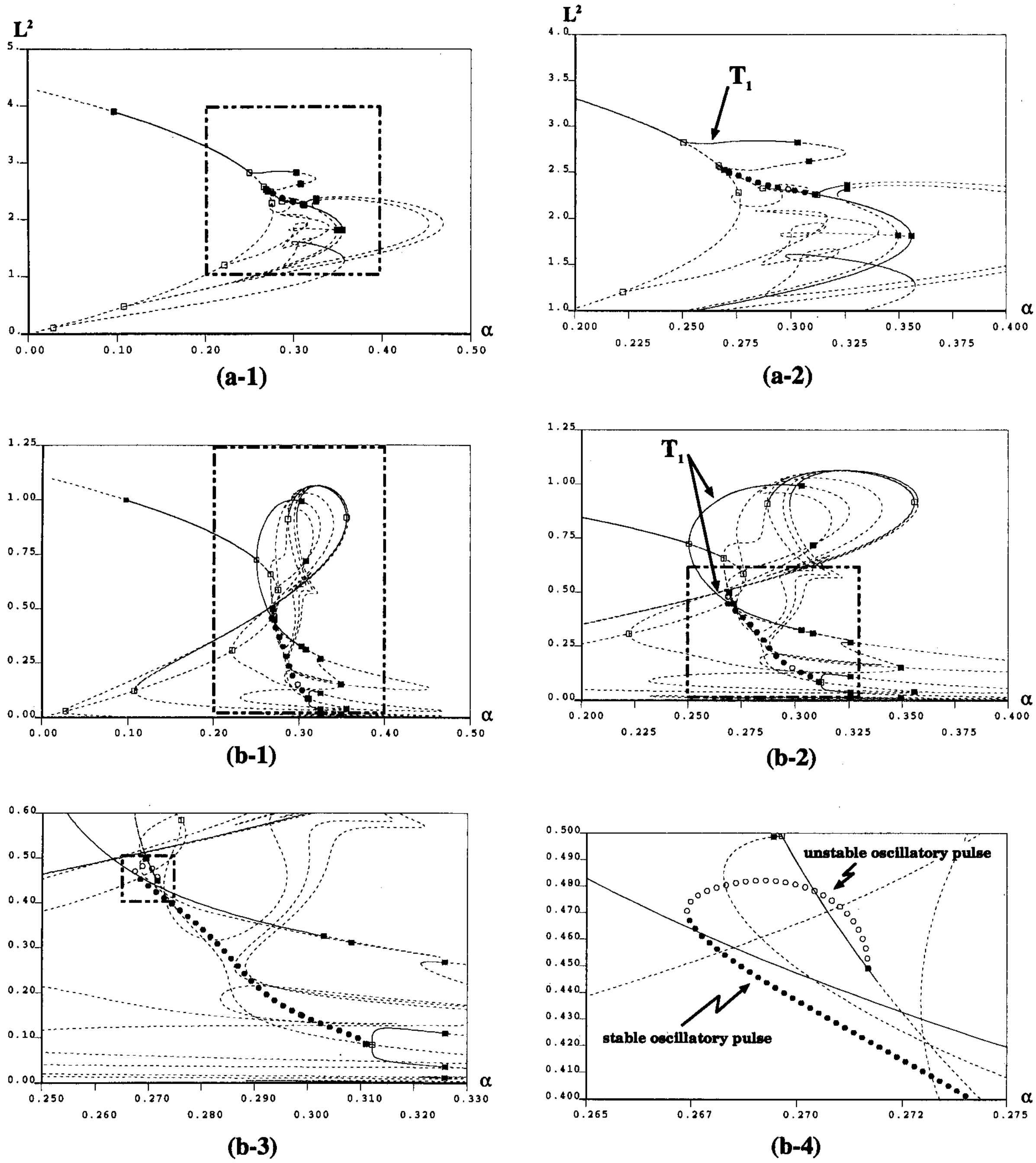

L²
α
(a-1)
(a-2)
T₁
(b-1)
(b-2)
(b-3)
(b-4)
unstable oscillatory pulse
stable oscillatory pulse

図8

横軸はパラメータ α であり、縦軸は定常解あるいは周期解をそのノルムで表している。それぞれ下の図は上の図の１点鎖線の部分の拡大したものである。図８(b-4)で１山周期解の極限点の存在がわかる。実際この極限点の近くにパラメータをとり、初期値として、１山をとれば、図９のようになる。最初しばらくは１山周期解の如く振舞うが、やがて極限点の近くからはずれ、受け皿であるチューリングパターン（図８の T_1）に収束する。受け皿の T_1 のモード数が初期値より多いことが我々にとっては自己複製（あるいは分裂）と見えるわけである。

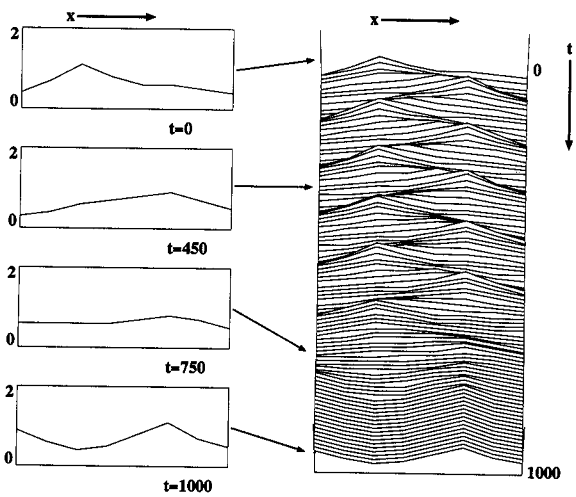


図９

この周期解の極限点が階層的に積み重なることが、前節で述べたように自己複製ダイナミクスを生み出すわけであるが、この階層性も数値的に検証可能である（詳しくは文献［４］を参照）。注目すべきはこれらの周期解がすべて定常分岐解（チューリングパターン）からの２次分岐として最初現れ、それが大変形を伴いつつ、subcritical bifurcation となり、同時に極限点で必ず安定性を回復することである。この階層構造の余韻として現れる図４のような遷移ダイナミクスは伝搬型**自己複製パターン**と呼ばれる。

全く同様なことが Gray-Scott モデルに対しても起こる。今度は周期解ではなく、定常解の枝の階層構造が得られる。図10はパラメータ $D_u = 0.00001, D_v = 0.00002, F = 0.04$ のときの(2)に対する分岐ダイヤグラムである。上から順にモード数が増える方向で各定常解の極限点がきれいに１列に並び、しかも下側の枝は安定である。この場合に現れる図５のようなダイナミクスは**定常型自己複製パターン**と呼ばれる。さらにこの一致する極限点の値はもとのカイネティクスでは自明な平衡点のみ存在する領域、すなわち mono-stable の領域に属していることに注意しよう。もし bi-stable 領域にあると、安定なフロント解が存在し、これがダイナミクスを変えてしまい、一般に自己複製パターンは現れない。

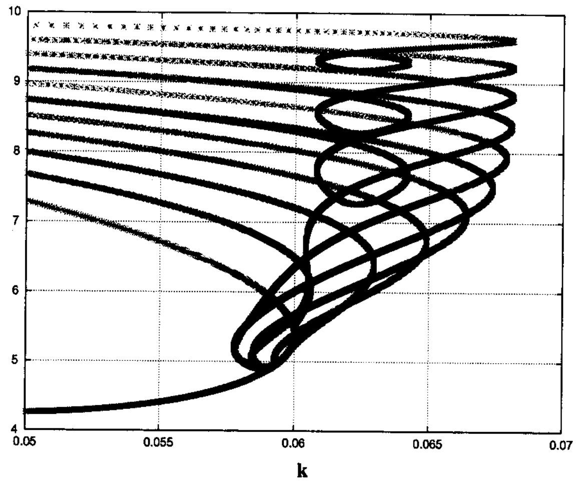
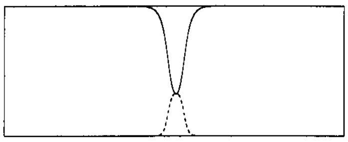


図10

これらの構造を現在のところ理論的に証明することには成功していない。それは真に非平衡な領域での大域的構造であり、退化特異点の局所的 unfolding で捉えられるかどうかが自明でないからである。

2.5　どうして並ぶのか？

前節で述べた整列階層構造の出自に関わる数理的機構の解明はチャレンジングなこれからの課題である。Bogdanov-Takens-Turing 特異点が重要な鍵であることは確実であるが、退化度が高い為、その解析は容易ではない。ここでは直観的な次のような議論が可能であることを示すにとどめる。定常型自己複製パターンについて説明するが伝搬型のときも同様にできる。


(a)

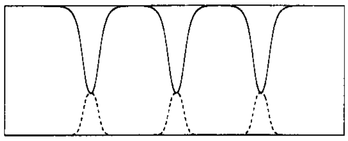

(b)

図11

今、1山の定在波があるパラメータ領域で存在し、かつ安定であるとする（図11(a)）。このとき定在波の裾野は（PDE の意味で）安定な (1,0) 平衡解にすぐ入っていることに注意しよう。ある程度領域が広ければ、裾野が十分安定平衡解に落ちた領域を間に挟んで、複数の1山定在波を周期的に置くことができる（図11(b)）。そしてそれに十分近い定在波の存在も仮定してよいだろう。このときこの定在波は局所安定であると考えられる。なぜなら微少な摂動を与えたとき、1山定在波の安定性及び山と山の間は安定平衡点に十分近いことより、その摂動は減衰すると考えられるからである。また、1山定在波が何らかの理由で不安定化したり、あるいは存在できなくなれば、複数山定在波も同様な運命をたどるだろう。すなわち1山と複数山定在波の存在領域及び安定性はほぼ合致することになる。領域の大きさ（区間の長さ）に応じて、並べることのできる山の個数には限度がある。ある個数を越えれば、裾野が安定平衡解に十分近くなる前に、次の山がくるので、その存在や安定性は上の議論のようにはいかない。実際、数値的にも図10のように山の個数が増えると、その枝は Edge of Folding Points から大きくずれてくる。予想としては区間が十分長い極限では漸近的に極限点の位置は縦に1列に並ぶと考えられる。

3 まとめと遷移ダイナミクスの今後

自己複製パターンを「極限点の整列階層構造の余韻」として特徴付けた。そして大域的分岐構造という立場から遷移ダイナミクスを調べることは極めて有用であることが本研究により明らかにされた。不安定な鞍点を次々に経巡るという遷移軌道の場合にはそれを駆動する枠として鞍点をつなぐ不変多様体が存在するが、自己複製パターンの場合には相空間にそのような不変多様体は存在しない。しかし分岐パラメータを含めた拡張された相空間 (extended phase space) で見れば、自己複製パターンを生み出す整列階層構造が背景に浮かび上がってくる。2.2節で述べた3つの条件がこの構造を作り出す重要な要素であることは確かと思われるが、必要あるいは十分条件としての要件を備えているかどうかは今後の課題である。捕らえ難いうつりゆく過渡現象がある確固とした整列階層構造の反映として捉えられることはある意味で意外でもあるが、自然は我々が正しい見方をすれば裏にひそむ美しい数理構造を開示してくれるという1つの好例を与えていると見るべきなのかも知れない。

［参考文献］

[1] P. De Kepper, J. J. Perraud, B. Rudovics and E. Dulos., *Experimental study of stationary turing patterns and their interaction with traveling waves in a chemical system*, International Journal of Bifurcation and Chaos, Vol.4, No.5 (1994) 1215-1231.

[2] J. E. Pearson., *Complex patterns in a simple system*, Science Vol.216 (1993), 189-192.

[3] W. N. Reynolds, J. E. Pearson and S. Ponce-Dawson., *Dynamics of self-replicating patterns in reaction diffusion systems*, Physical Review Letters. Vol.72, No.17 (1994), 1120-1123.

[4] Y. Nishiura and D. Ueyama., *A Skeleton Structure of Self-replicating Dynamics*, Hokkaido University preprint series in mathematics. No.396, 1997.