HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Gray-Scottモデルにおける時空カオスの幾何的解釈
Author(s)	西浦, 廉政
Citation	数理解析研究所講究録, 1249, 52-60
Issue Date	2002
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/35228
Type	journal article
File Information	nishiura-43.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

数理解析研究所講究録 1249 巻 2002 年 52-60

Gray-Scottモデルにおける時空カオスの幾何的解釈

西浦 廉政 (Yasumasa Nishiura)

北海道大学電子科学研究所・情報数理研究分野
(Research Institute for Electronic Science, Hokkaido University)
E-mail: nishiura@aurora.es.hokudai.ac.jp
http://aurora.es.hokudai.ac.jp/~nishiura

1 はじめに

うつろひゆくもの、遷移的なものはいずれ消え去るものとして、これまであまり重要視されなかった。一方、漸近的な考え方は様々な数学の分野で発展し、その有用性もあまねく知られている。物事は極端な状況では極めて普遍的に振舞うことが示唆され、それは詳細によらない普遍的なものを探求するという数学の姿勢とも合致した。しかし我々にとって生き生きとして最も興味深いものは、最終的にどうなるかより、そこにどのように至ったかという途中のダイナミクスである場合も多い。そのような遷移的なダイナミクスは多くの場合強い非線形相互作用の下でおこるため、どのように理解すればよいのか一般的にはわかっていない。ここでは散逸系に現われるいくつかの興味あるダイナミクスをとり上げながら、一つの見方を紹介したいと思う。ここで述べる内容は主に上山大信氏（広島大）との共同研究 ([4] および [6]) に基づく。

図 1 は後で述べる Gray-Scott モデルを数値的に解いたものであるが、そのグレー濃淡の模様からわかるように、一定の時間ある状態をとるが、しばらくして別の状態にうつり、それを次々と繰り返し、留まることがないような動きである（2 次元の場合の複雑パターンについては例えば [1] をみよ）。

これはランダムな動きとは異なる。短い時間スケールでみるならば、それは（仮ではあるが）ほぼ一定の状態に留まっていることが観察される。これは時空カオスの特別な場合となっている。しかしこれを理解するのに、様々な統計量を持ち出してカオスの証拠を並べるというやり方はここではとらない（むろんそれらは重要な情報を与えるが）。軌道がどのような空間パターンをへめぐり、なぜそのように振舞うのかを、より幾何学的な「見方」から理解できないだろうかというのがここで考えたい内容である。次のような手順で考えて行こう。

1. 自分と同じものを作り出すダイナミクス
2. 自分を壊すダイナミクス

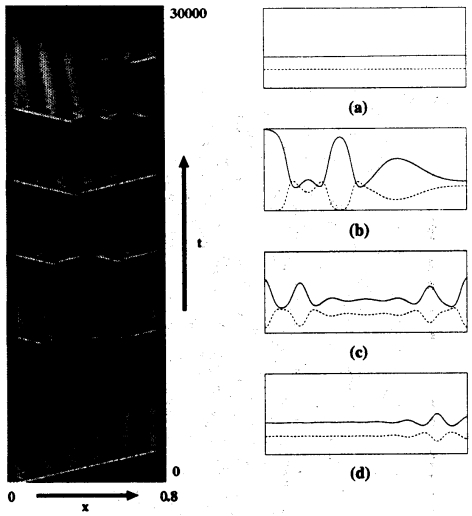

図 1: Gray-Scott モデル (1) における時空カオス ($D_u = 2\times10^{-5}, D_v = 10^{-5}, F = 0.035, k = 0.05632$ およびシステムサイズ $L = 0.8$). 右のスナップショットは解がほぼ定数状態 P から出発し、次にいくつかの部分区間で $(u, v) = (1, 0)$ に落ち、そこへまわりから自己複製波が進み、定常パターンがしばらく現れ、そしてそれが自己崩壊して、再び P に戻る一つのサイクルを示している。

3. 上 2 つをうまく合成して、作っては壊すダイナミクスを構成する。

2 自分と同じものを作り出すダイナミクス

9 0年代の始めに FIS あるいは CIMA という化学反応系において発見された自己複製パターンは多くの注目を浴びた。それは一定の大きさと形をほぼ保ちつつ、同時にそれを壊してまた同じものを作っていくという細胞分裂に似た振舞いをする遷移ダイナミクスの恰好の例を与えるからである。実際、空間 1 次元の場合の数値例を図 2 に挙げた。1 山の初期値から出発し、次々と自分と同じコピーを作り出し、最後には領域全体を埋め尽くす様子がわかる。
図 2 の数値シミュレーションはこの化学反応系の定性的な数理モデルとして作られた Gray-Scott モデルとよばれる次の反応拡散系を解いたものである ([2] 参照)。

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

ここで u, v はそれぞれある化学物質 A, B の濃度を表し、右辺はそれらが拡散しつつ反応していることを表現している。F は A の供給、$F + k$ は B の除去率に対応するパラメータである。3 次の非線形項は $A + 2B \to 3B$ という物質 B の自己触媒的反応からきている。注意深い読者はこれは 3 分子衝突して反応がおこるということを意味し、それは 2 分

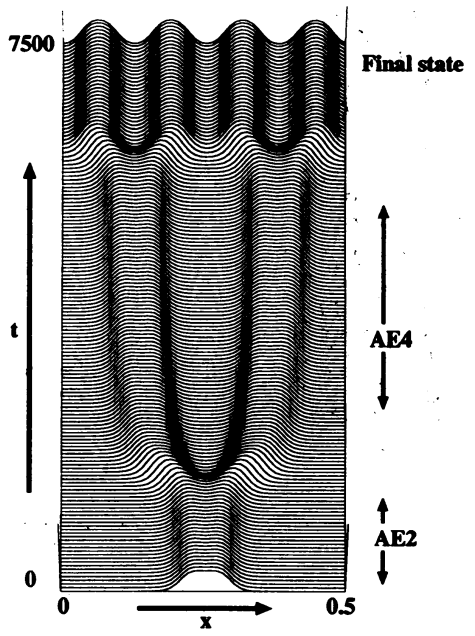

図 2: Gray-Scott モデルにおける 1 次元自己複製パターン ($F = 0.04, k = 0.06075, L = 0.5, N = 500$). ここで L は区間長、N は分点数。図では v のみの時空間変化を描いている.

子衝突に比べてめったにおこることではないので、非現実的なモデルであると思うかもしれない。しかし上の式は 1 連の複雑な反応過程を大幅に縮約して得られたものであり、もとの素過程は実はすべて 1 次、2 次反応である。上では縮約の結果として一見 3 次反応に見えているにすぎない。さて一般に (1) のように拡散項がある場合、それが次々と山を生み出していくというプロセスは一見、直観に反する。熱方程式 $u_t = u_{xx}$ を考えればわかるように、最初多くの凸凹があっても、時間とともに平滑化され、最後は定数となる。図 2 はそれとは全く逆に、山の数がどんどん増え、ある構造が作られる。この「拡散が非一様性を増長する」という一見パラドキシカルな不安定性は Turing 不安定化とよばれるもので、今から５０年近くもまえに Turing が (線形解析の範囲ではあるが) 最初に示したことである。その種明かしは「2 つ以上」の拡散する物質を考えるということと、それらの「拡散の速さに差がある」ということである (例えば [7] 第 4 章参照)。 そして非線形項がその不安定化による発散を防ぐので有限な山が形作られるのである。しかしここで問題にしたいのは最終的に安定なパターンがどうして保持されるのかということではなく、そこにいたる分裂のダイナミクスである。すなわち途中の**遷移ダイナミクス**に興味がある。たとえ最終状態は同じ形でもそこに至る過程は全く異なる場合がしばしばある。4 山ができる場合でも一様な状態から 4 山モードが選択的に増大し、それが非線形性により、飽和してある定常状態に落ち着く場合と、上のように次々と分裂して 4 山に行く場合がある。この違いを明らかにするためには、分裂し、同じものを複製するというダイナミクスとは何かを調べなければならない。しかしこれは解の大変形を伴うために容易ではない。そこで次のような発想の転換を行おう。すなわち「解の変形の詳細を追うのではなく、その軌道の経路がどのような幾何的構造により駆動されて図 1 あるいは図 2 のようなダイナミ

クスを生み出しているのかを考えよう」
最初に何をてがかりにすればよいのであろうか？ 図2をよく見れば、有限時間ではあるが1山パルス、2山パルス型定常解に近い形を軌道は通過しているようにみえる。従ってそれらの定常解はアトラクターではないがなんらかの役割を果たしている考えられる。すぐに思いつくのは、サドルコネクション、すなわち軌道は不安定多様体でつながった鞍点(これがn-山解に相当する)を経巡るというものである。もしこれが正しいのであれば、(無限次元)相空間の中に不安定ではあるが途中のすべてのn-山解が存在することになる。しかし自己複製が生じるとき、最後の受け皿の漸近解を除けば、途中の解は少なくとも数値的にはみつからないのである。

この疑問に答えるためにまず次の簡単なおもちゃモデルを考えよう。

$$\frac{du}{dt} = -(u+1)(u^2-\alpha)(u^2-2u+1-\alpha), |\alpha| < \frac{1}{4}. \tag{2}$$

この平衡点のαに関する依存性を調べると2つの放物線の平衡点の枝が得られ、各々上の部分の平衡点は安定であり、下は不安定な鞍点からなる。それらは共に$\alpha = 0$で合体消滅する。平衡点の個数が変わる放物線の頂点$\alpha = 0$はサドル・ノード分岐点とよばれる。サドル・ノード分岐点の位置が上と下とで一致していることにより、$\alpha < 0$であるが十分零に近くαをとれば、その振舞いは次のようになる。ある一定の時間、2つのサドル・ノード点の平衡解の値に近い値をとり続け、次にジャンプして最終的には安定な平衡点$u = -1$に行く。これは平衡解はそこで消えているとはいえ、ベクトル場は連続的に変化するので、αが十分零に近いと、軌道は極めてゆっくり変化し、プラトー状態が長く続くからである。
ここでもし2つの放物線で表された解が、各々1山解、2山解であるとし、漸近安定な$u = -1$は4山解に対応し、さらにそれらが不安定多様体によってつながっていると想像しよう。このとき上の軌道に対応するダイナミクスは図2でみたものになるのではないかと期待される。さてこの可能性としてのシナリオは本当に方程式の解構造に内包されているのであろうか？ 答えは Yes である。実際 Gray-Scott model において、図2に対応する分岐ダイアグラムが図3である。
モード数（1山＝2モード）が大きいところでは領域の大きさが有限である影響が出て、サドル・ノード分岐点の位置がそろっていないが、5モードあたりまではほぼ同じ位置にある。初期値を対称にとったので、1山 → 2山 → 4山という経路を軌道はとる。図3ではkを固定したときの相空間の次元が無限次元のようには描けないので、上から順番に不安定多様体がつながっているように錯覚するが、実はそのつながり具合は空間1次元でも相当複雑である。実際、区間を広くとったとき、4山まで分裂したあと、8山になるわけではないのである。さらにサドル・ノード分岐点が整列階層構造を成すこともより精密に議論できるがここでは触れない（[4],[5] 参照）。

3 自分を壊すダイナミクス

通常パターン形成という場合その名が示すとおり、一様な状態からゆらぎを経て自発的に空間非一様なパターンが作られてゆくのかが主なテーマであった。しかし作られたもの

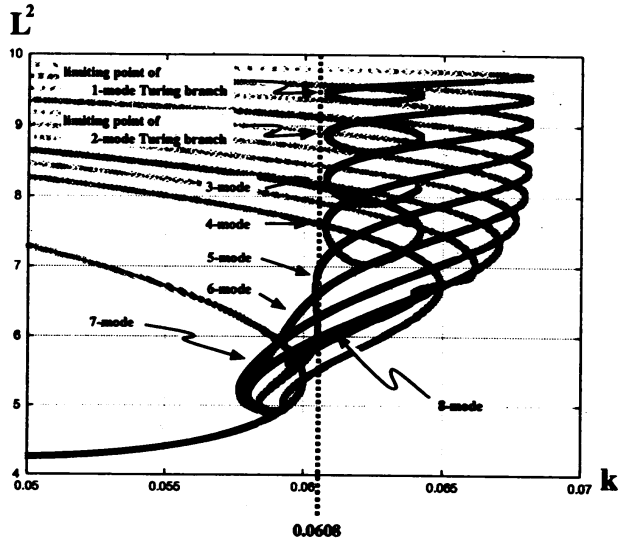

図 3: $F = 0.04, L = 0.5, N = 100$ における分岐ダイアグラム。濃い実線は安定な、薄いグレーの実線は不安定な定常解を表す。4 モードまでのサドル・ノード分岐点の位置は $k = 0.0608$ 付近に 1 直線に並ぶ。

が壊される過程がないと物事は次々とは変化して行かない。それでは散逸構造が自己崩壊するとはどのようなことなのであろうか？それには 2 つの場合が考えられる。一つは他との相互作用なくして自分自身で自発的に壊れてしまう場合であり（これを**自己崩壊**とよぶ)、もう一つは相手（しかし多くの場合自分のコピー）との強い相互作用で壊れる場合である。後者の典型例は神経パルスの伝搬を記述する FitHugh-Nagumo 方程式の進行波パルスが衝突するときの対消滅である。ここでは前者の自己崩壊に焦点をあてる。
意外に思われるかもしれないが、自己崩壊の原理は自己複製と同じである。ただ不安定多様体の行き先が安定な定数解となるので山の数が増えるのではなく、逆に自明な状態に落ち込むことになる。さて Gray-Scott モデルにおける自己崩壊をみよう。唐突ではあるが後との関係から 6 山の定常解の自己崩壊を考えよう。分岐追跡ソフトウエアーの AUTO ([3] 参照) でこの解を追跡すると図 4 のような分岐ダイアグラムが得られる。この場合もサドル・ノード分岐が存在し、定数解（P 印の枝）からの subcritical 分岐として生まれた 6 山定常解（１２モード）の枝が反転してサドル・ノード構造を作っているのがわかる。分岐直後は この枝と P が不安定多様体でつながっており、それがサドル・ノード分岐点 $k = k_{min}$ まで延長されているのである。定数解 P の枝は $k = k_{Hopf}$ で安定性を回復することに注意しよう。6 山定常解の枝は P が不安定なところから出ているので、分岐直後は不安定であるが、$k = k_{min}$ で反転するときには安定性を回復し、自己複製を経てきた軌道の受け皿解の役割を果たす。パラメータ k を k_{min} より少し小さくとり、初期値を 6 山の *cosine* 関数を採用すると、図 5 のようになる。一旦 *cosine* 関数から 6 山定常解に直ちに整形し、しばらくその状態に留まり、やがて一様状態へと崩壊する。この場合の不安定解 U の不安定次元は 1 であり、それは定数解 P へとつながっている。*cosine* 形を多少乱した初期値から出発しても一旦１２モードに整形することは確認されており、サドル・ノード分岐点の解は遷移パターンとしての吸引領域は広い。

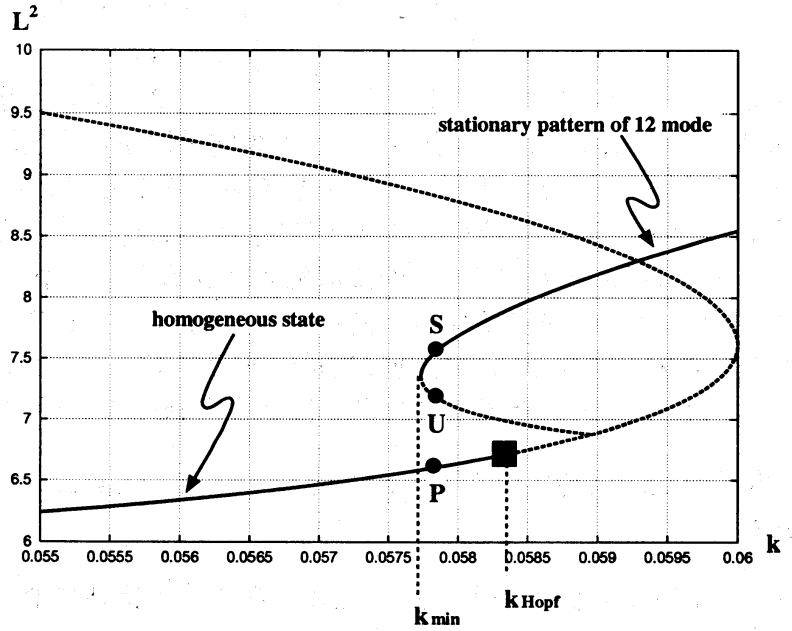

図 4: 定数解 P から分岐した１２モードの枝がなすサドル・ノード分岐。k を $k_{min} = 0.05773408$ より少し小さく取れば、１２モード解の P への自己崩壊が起こる。図 5 を見よ。

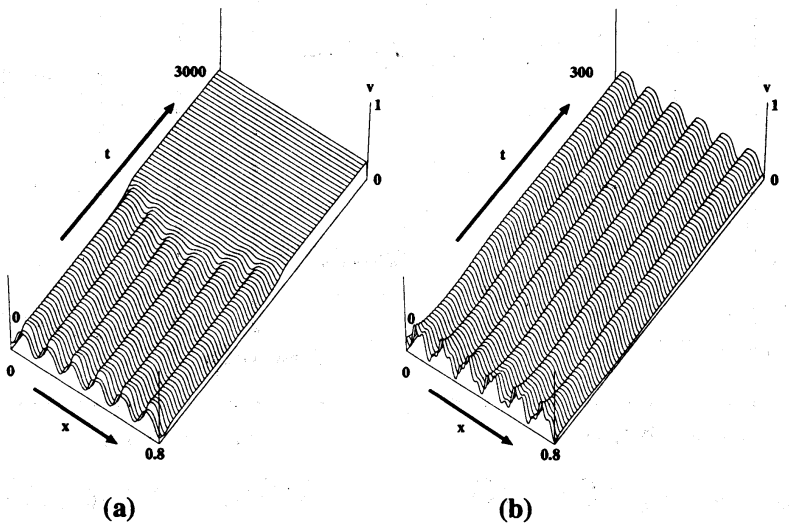

図 5: (a) 初期値を cosine １２モード に取ったときの図 4 のサドル・ノード分岐点および P へとつながる不安定多様体の余韻。cosine 波形が一旦 6 山解に整形してから P へと崩壊する。(b) かなり変形した初期値から出発しても、一旦は 6 山解に整形し、その後 (a) と同様に定数解に崩壊する。(a), (b) ともにパラメータの値は F=0.040, k=0.05772, L=0.8

4 作っては壊すループを作る

さていよいよ自分と同じパターンを次々と生み出す自己複製過程と作られたパターンが壊れる自己崩壊ダイナミクスをうまく組み合わせて、作っては壊し、そしてまた作るというダイナミクスを構成できないかということを考えよう。図2では自己複製の後、安定な4山定常解に落ち着き、それ以後変化しない。もしこの定常解が自己崩壊の節で述べたようなサドル・ノード分岐をもつならばパラメータを調節することでこれを定数状態Pへと崩壊させることはできる。しかしそのときPが安定ならばそこで止まり、経めぐることにはならない。従って時間発展が続くためには例えばPが不安定化し、サドル構造をもち、自己崩壊するときはその安定多様体に沿ってPに近づき、その後、今度は不安定多様体に沿って再び空間パターンを作る方向に軌道が離脱していくようになっていないといけない。以上より求めたいダイナミクスを得るには次を調べる必要がある。

1. 自己複製と自己崩壊が同時におこり、かつそれらを繰り返すようなパラメータは存在するのか？
2. Pの安定および不安定多様体が上に述べたようなサドル構造になっているのか？

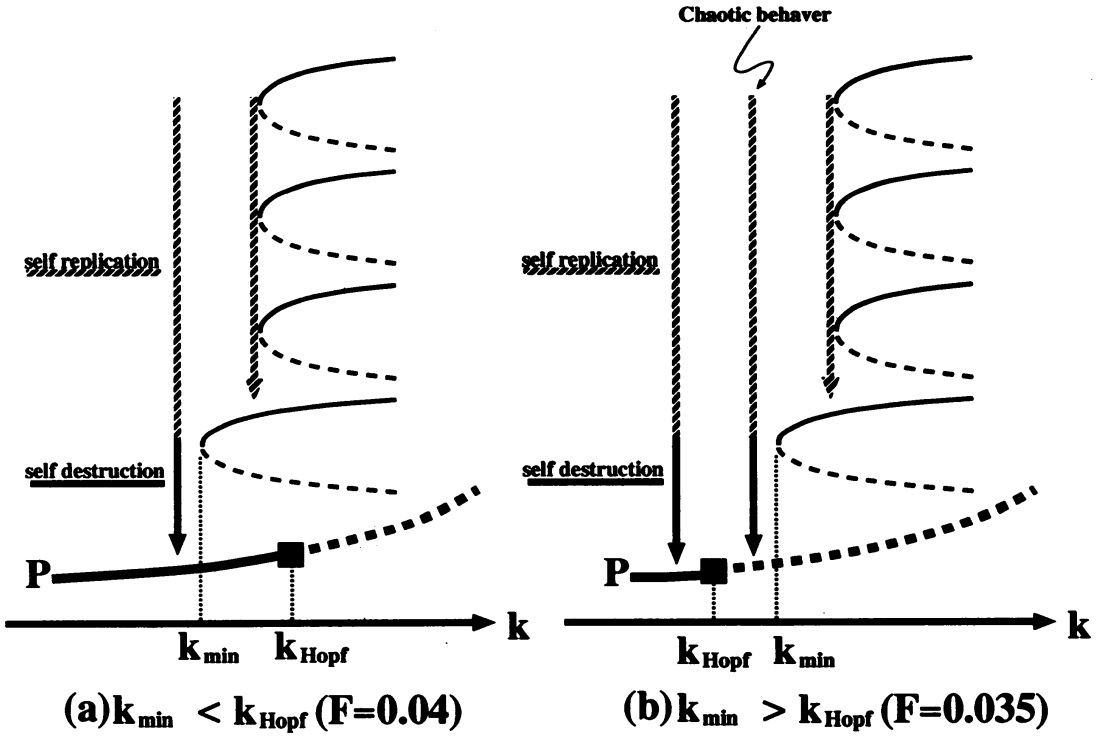

図 6: (a)$F = 0.04$. $k_{min} < k_{Hopf}$ なので自己複製および自己崩壊はおこるが、Pは安定なので、その後の時間発展はない。(b)$F = 0.035$. $k_{min} > k_{Hopf}$ が成り立ち、自己崩壊の後、Pが不安定となるパラメータkをとることができる。そこでは時空カオスが存在する。

これらの問題に対しても分岐解の大域的な配置と安定性の変化は決定的役割を果たす。実際$F = 0.04$と$F = 0.035$における定常解および定数解Pのパラメータkに関する分岐ダ

イアグラムは図6のようになる(ここではわかりやすいように模式図でかいた。より詳しくは[6]を参照)。一見この2つは同じように見えるが大きな違いはk_{min}とk_{Hopf}の位置関係にある。図からわかるようにk_{min}は定常解の枝のサドル・ノード分岐点の中で最小に位置するもので自己崩壊が起こるかどうかの分水嶺となる。k_{Hopf}は定数解PのHopf分岐点であり、ここでPは安定性を回復する。どちらの場合も図6の矢印の破線部分では自己複製パターンを、太線部分では自己崩壊ダイナミクスが観察される。しかし(a)では自己崩壊がおこる$k < k_{min}$にkをとると崩壊後のPは安定であり、軌道はPで止まってしまう。一方(b)では$k_{min} > k_{Hopf}$なので$k_{min} > k > k_{Hopf}$とkをとれば、そこではPは不安定なので自己崩壊した後も軌道はそこで止まらず次々と経めぐると考えられる。実際, $k = 0.05632$という値をとれば、解は図1のように振舞う。すなわち時空カオスが出るかどうかは、$k_{min} = k_{Hopf}$が臨界値となる。

図1をみれば秩序構造が現れたり消えたりする様子がよくわかる。この空間秩序の変遷の種はどこからきているのであろうか? 実は$k = k_{min}$では形式的ではあるが図7に示したような$\mathbf{R}$上の**ヘテロクリニックサイクル**が形成されていることがわかる。最初に述べた「時空カオスの軌道はどの空間パターンを経巡っているのか?」という問に対する答えがこれになっている。このヘテロクリニックサイクルを種として、少しパラメータをずらすと時空カオスが得られる。これは有限次元のカオス理論におけるシルニコフ分岐あるいはhomoclinic tanglingを思い起こさせる。

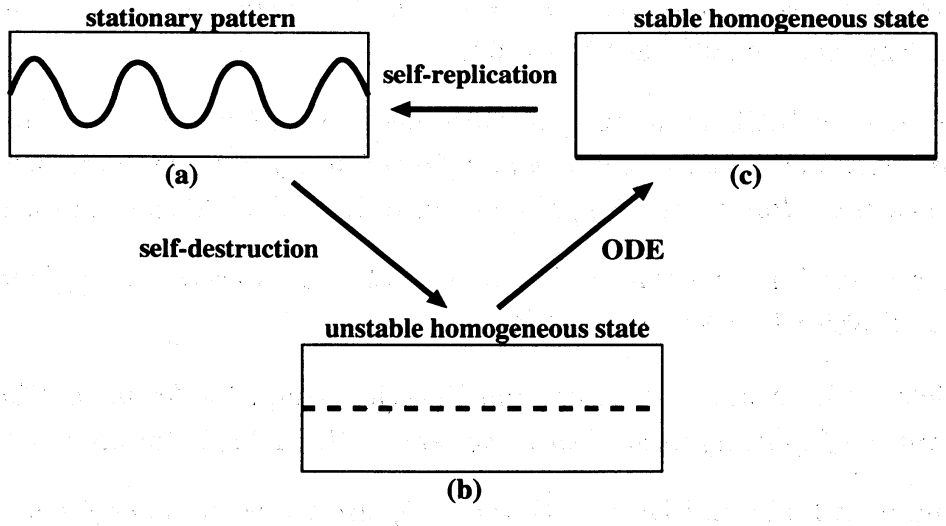

図7: $k = k_{min}$では$\mathbf{R}$上で形式的に定常解、不安定定数解P、安定定数解$(u, v) = (1, 0)$をめぐるヘテロクリニックサイクルを構成できる。実際の有限区間で観察される時空カオスではPから$(1, 0)$へ移るとき、区間全体で一様に行くのではなく(真に$(1, 0)$へ落ちればそこから軌道は出れない)、必ず自己複製波が生み出される$(1, 0)$以外の部分が残っている。実際、上のサイクルはある部分区間に着目すれば観察できる。図1を見よ。

以上の考察よりここで述べた時空カオスはその出現点(onset)付近において低次元常微分方程式系のカオスに縮約されるというものではなく、大域的な解構造を踏まえてはじめて特徴付け可能なものである。

5 おわりに

散逸系のダイナミクスにおいて次々と複雑に遷移していくパターンがどのような数学的機構で駆動されているのかいくつかの例をみながら考えて来た。もともとは無限次元空間の中のダイナミクスであるから軌道がどのように動いていくかを他の解との関係で詳しく知るのはかなり無謀な試みではあるのだが、計算機能力の発達は、ある程度まで可能にしてくれる。ベースキャンプの位置あるいは骨格構造は散逸系のような偏微分方程式系に対してはかなりわかるようになってきた。多分、最も重要なことはそれから得られる情報が数学の理論の枠組を作る大きなヒントを与えてくれることである。ここではほとんど述べなかったけれども、これまで述べてきたことの一部分はすでに厳密に証明が可能であり、そのプロセスから何が本質的かも導き出せるのである。いわばひとつのモデルの現象が一挙に普遍性をもつことになる。そしてそのときの「仮定」の枠組は計算機の想像力が大いに助けになっている。

参考文献

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

[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] E.J.Doedel, A.R.Champneys, T.F.Fairgrieve, Y.A.Kuznetsov, B.Sandstede and X.Wang, *AUTO97:Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations (with HomCont)*, ftp://ftp.cs.concordia.ca/pub/doedel/auto,(1997).

[4] Yasumasa Nishiura and Daishin Ueyama, *A skeleton structure of self-replicating dynamics*, Physica D, 130(1999)73-104.

[5] Shin-Ichiro Ei, Yasumasa Nishiura and Kei-ichi Ueda, 2^n*-splitting and Edge-splitting -A Manner of splitting in dissipative systems*, JJIAM 11(2) (in press).

[6] Yasumasa Nishiura and Daishin Ueyama, *Spatio-temporal chaos for the Gray-Scott model*, Physica D, 150(2001)137-162.

[7] 西浦 廉政, 非線形問題 I - パターン形成の数理 - , 岩波講座・現代数学の展開 7, 岩波書店 (1999).