※以下、変数の上のドットは時間に関する微分を表わしている（ex. $\dot{x}=\dfrac{dx}{dt}, \ddot{x}=\dfrac{d^2x}{dt^2}$）

付録 F　拡散

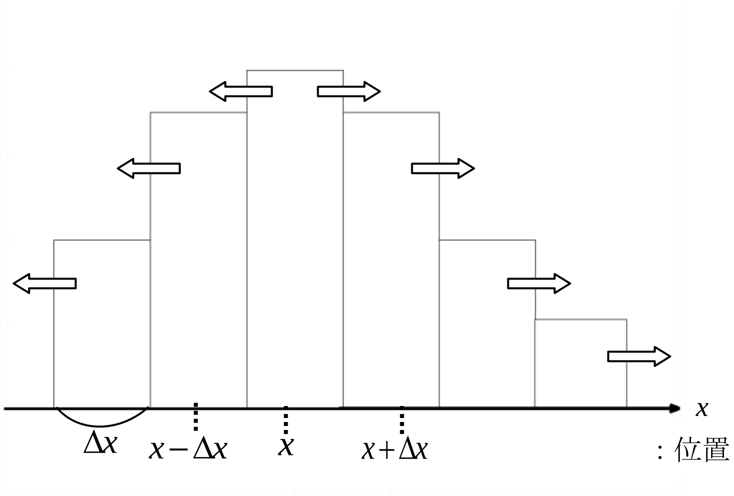
F-1）拡散方程式の導出

いきなりだが、コップに入れた水に、墨汁を滴下することを想像してみてほしい。垂らされた墨汁の液滴は、みるみるうちに広がってゆき、やがてコップの中の水は均一な黒色となるだろう。あるいは、煙草の煙が空気中に広がっていく様子は皆さんもよく見たことがあるかと思う。このように、物質が自発的に散らばり広がっていく現象は**拡散現象**と呼ばれる。拡散は、微視的に見れば物質中の分子や粒子が熱運動によって不規則な運動をしていることに起因しているのだが、巨視的に見れば、物質は濃度の高いほうから低いほうへと移動しており、その流れは物質の濃度勾配に比例する。

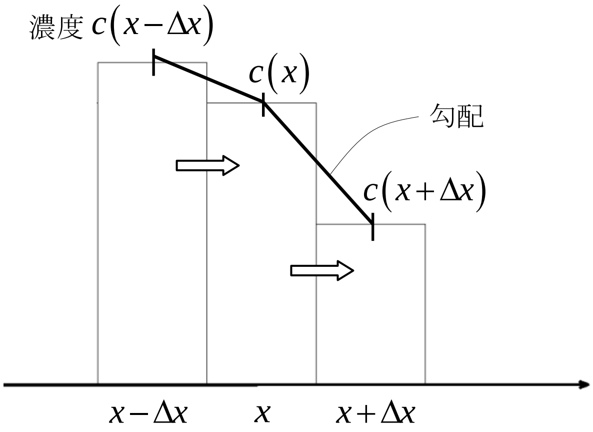
つまり、**拡散**とは、濃度勾配に依存する物質の流れであると考えることができ、その流れは以下の 2 つの法則に従う。

① 流れの速さ（時間に対する変化率）は勾配に比例
② 流れは濃度の高い方から低い方へ向う

ここでは、簡単のため、3 次元空間内で、x 軸方向だけに物質が拡散する場合を考える。物質の濃度を c，位置を x として、下図のように x 軸を微小区間Δx へと離散化し、濃度勾配による物質の流れを考えてみよう。



ある位置 x に注目して考えると



$(x-\Delta x)$ と x の濃度差は

$$c(x)-c(x-\Delta x)$$

x と $(x+\Delta x)$ の濃度差は

$$c(x+\Delta x)-c(x)$$

勾配=濃度差 / 距離なので勾配はそれぞれ

$$\frac{c(x)-c(x-\Delta x)}{\Delta x},\ \frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}$$

と求まる。

ここで、単位時間・単位面積あたりに流れる物質量を u とするとき、u を**流束(flux)**といい、

物質流束 u ＝−（勾配）×（拡散係数） (F.1)

の関係がある。**（※補足にて詳述）**

よって、拡散係数を D_u とすれば、$(x-\Delta x)$ から x へ流入する流束 u_{in} 、および x から $(x+\Delta x)$ へ流出する流束 u_{out} はそれぞれ

$$u_{in}=-D_u\frac{c(x)-c(x-\Delta x)}{\Delta x},\ u_{out}=-D_u\frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}$$

と表せる。

また、位置 x における断面積を A とすると、時間 Δt あたりに流れる物質量（流量）U は、

流量 U = (流束 u)×(断面積 A)×(時間 Δt)

で与えられるので、U_{in}, U_{out} を求めると

$$\underbrace{U_{in}=-D_u\frac{c(x)-c(x-\Delta x)}{\Delta x}\cdot A\cdot\Delta t}_{x\ \text{への流入量}},\ \underbrace{U_{out}=-D_u\frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}\cdot A\cdot\Delta t}_{x\ \text{からの流出量}} \tag{F.2}$$

となる。

したがって、ある場所 x において、時間 Δt の間に流入する物質量 ΔU (変化量)は

$$\begin{aligned}
\Delta U &= U_{in}-U_{out}\\
&=\left(-D_u\frac{c(x)-c(x-\Delta x)}{\Delta x}\cdot A\cdot\Delta t\right)-\left(-D_u\frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}\cdot A\cdot\Delta t\right)\\
&=D_u\frac{c(x-\Delta x)-c(x)}{\Delta x}A\Delta t+D_u\frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}A\Delta t\\
&=D_u\left(\frac{c(x-\Delta x)-c(x)}{\Delta x}+\frac{c(x+\Delta x)-c(x)}{\Delta x}\right)A\Delta t\\
&=D_u\frac{c(x+\Delta x)-2c(x)+c(x-\Delta x)}{\Delta x}A\Delta t
\end{aligned} \tag{F.3}$$

と表すことができる。

ここで、$c(x+\Delta x)$ および $c(x-\Delta x)$ を x のまわりでテイラー展開し、2 次近似を行うと

$$c(x+\Delta x) \approx c\left(x\right)+\frac{\partial c}{\partial x}\cdot\Delta x+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\cdot\left(\Delta x\right)^2 \tag{F.4}$$

$$c(x-\Delta x) \approx c\left(x\right)-\frac{\partial c}{\partial x}\cdot\Delta x+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\cdot\left(\Delta x\right)^2 \tag{F.5}$$

式(F.4), (F.5) を式(F.3) へ代入すれば

$$\Delta U = D_u\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\cdot\Delta x\right)\cdot A\cdot\Delta t$$

$$\therefore \frac{\Delta U}{\Delta t} = D_u\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\cdot A\cdot\Delta x \tag{F.6}$$

が得られる。

ここで、式(F.6) 中の $A\cdot\Delta x$ は位置 x における微小要素の体積に相当し、$\Delta U\ /(A\ \Delta x)$ は濃度変化 Δc に他ならない。したがって、時間 Δt あたりの物質の濃度変化は

$$\frac{\Delta c}{\Delta t} = D_u\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \tag{F.7}$$

と書ける。

$\Delta t \to 0$ とすれば、拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_u\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \tag{F.8}$$

が得られる。

式(F.8) をよく見ると、

拡散による濃度の時間変化率＝【係数】×【距離に対する濃度差の差（2 次微分）】

という形の式になっていることが分かる。

※ Fick の第 1 法則に関する補足

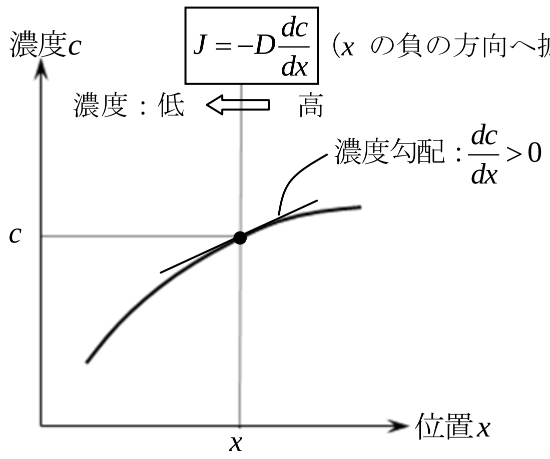
ある位置 x における流束（拡散束）J は濃度勾配に比例し、x における濃度を c とすると、

$$J = -D\frac{dc}{dx}$$

と表わされる。これを **Fick の第 1 法則**という。

ここで、定数 D を拡散係数という。

$\frac{dc}{dx} > 0$ のとき物質は負の方向へ拡散するため、マイナスの符号が付いている。



F-2) 反応拡散方程式と Turing pattern

　さて、いま

拡散がなければ 1 つの安定な状態をとるが　　…①

拡散により安定状態から不安定状態となる　　…②

ような系を考えよう。

これがいわゆる **Turing pattern** と呼ばれるものであり、本項ではこの Turing pattern について詳しく触れておく。

※但し、拡散のない条件下で不安定状態をとるものは、拡散が入っても 2 次元パターンを作る場合がある。

　いま、以下のような微分方程式で与えられる反応を考える。

$$\left.\begin{aligned}\dot{u} &= f\left(u,v\right)\\ \dot{v} &= g\left(u,v\right)\end{aligned}\right\} \tag{F.9}$$

時間に対して変化しない安定な解$\left(\bar{u},\bar{v}\right)$があるとすると、$\left(\bar{u},\bar{v}\right)$は

$$\dot{u} = f\left(\bar{u},\bar{v}\right) = 0$$
$$\dot{v} = g\left(\bar{u},\bar{v}\right) = 0$$

を満たす。

　このとき、平衡点からのずれ$\left(z,w\right)$を考えて、これが平衡解に向かうか離れるかで安定か不安定かが判定できる。

つまり

$$\left.\begin{aligned}u &= \bar{u} + z\\ v &= \bar{v} + w\end{aligned}\right\} \tag{F.10}$$

とおくと、式(F.9) は

$$\begin{pmatrix}\dot{z}\\ \dot{w}\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix}f_u & f_v\\ g_u & g_v\end{pmatrix}}_{J_1}\begin{pmatrix}z\\ w\end{pmatrix} \qquad \left(\text{但し、}f_u = \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{\bar{u},\bar{v}}\right) \tag{F.11}$$

と書ける。

ここで式(F.11) が安定な 1 点を持つための条件（①）は

$$\left.\begin{aligned}tr\, J_1 &= f_u + g_v < 0\\ \det J_1 &= f_u \cdot g_v - f_v \cdot g_u > 0\end{aligned}\right\} \tag{F.12}$$

と記述できる。

反応項のみのとき（つまり拡散がないとき）には、式(F.11) が条件(F.12) をみたせば安定な状態をとる（①）ことがわかる。

次に、式(F.11) に拡散項が加わった場合を考えよう。
このとき、以下の式で表すことができる。

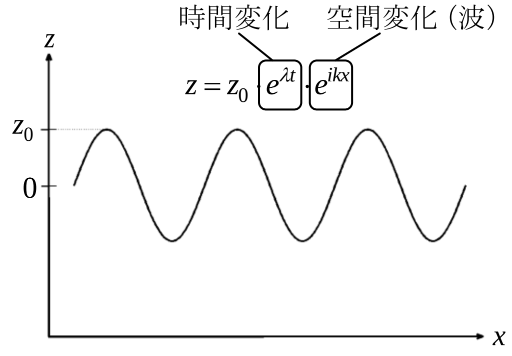
$$\begin{pmatrix}\dot z\\ \dot w\end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v\end{pmatrix}\begin{pmatrix} z\\ w\end{pmatrix}}_{\text{反応項}} + \underbrace{\begin{pmatrix} D_u \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ D_v \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2}\end{pmatrix}}_{\text{拡散項}} \tag{F.13}$$

式(F.11) に拡散項が入った場合、すなわち反応が式(F.13) で与えられるときに、不安定な状態（②）になりうる条件(Turing pattern) はどうなるのか考えてみよう。

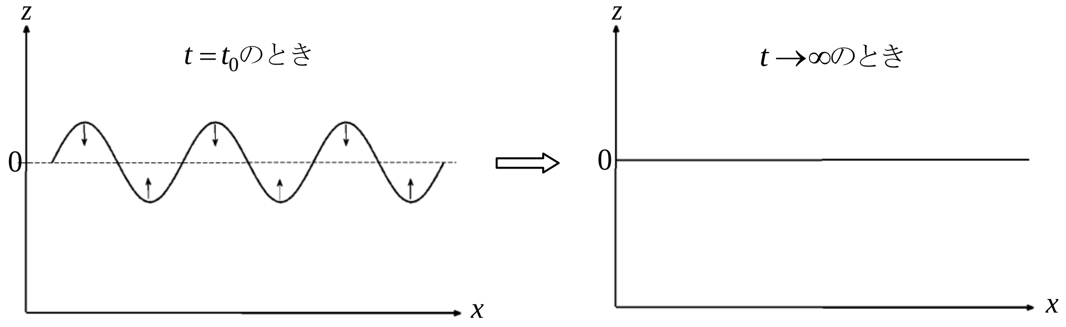
まず、$z,\ w$（平衡点からのずれ）が時間に対して不安定になればこの条件をみたすので、以下これを調べる。
ここで、z, w は何でもよいが、例えば解析のしやすさを考慮し、次式を与えることにする。

$$\left.\begin{aligned} z &= z_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \\ w &= w_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \end{aligned}\right\} \quad （但し\ \ k > 0\ ） \tag{F.14}$$

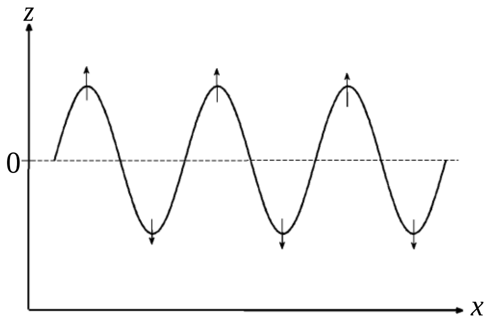
式(F.14) を概念的に説明すると以下のようになる。



(i) $\lambda < 0$ のとき　$t \to \infty$ で $e^{\lambda t} \to 0$ なので空間に対して安定



(ii) $\lambda > 0$ のとき　$t \to \infty$ で $e^{\lambda t} \to \infty$ なので空間に対して不安定



　したがって、式(F.14) のノイズを与えたときに、(ii) のような空間不安定な状態となるための条件を知るには、式(F.14) の λ が正($\lambda > 0$)となるような式(F.13) の条件を求めればよいことがわかる。

式(F.14) より

$$\begin{cases} z = z_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \\ w = w_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \end{cases}$$

両辺を t で微分すると

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial z}{\partial t} \\ \dfrac{\partial w}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dot{z} \\ \dot{w} \end{pmatrix} = \lambda \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \begin{pmatrix} z_0 \\ w_0 \end{pmatrix}$$

また、z を x で偏微分すると

$$\frac{\partial z}{\partial x} = ikz_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}$$

$$\therefore \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} = -k^2 z_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}$$

w に関しても同様に

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = -k^2 w_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}$$

以上を式(F.13) に代入すると

$$\lambda \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \begin{pmatrix} z_0 \\ w_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \\ w_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D_u(-k^2 z_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}) \\ D_v(-k^2 w_0 \cdot e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}) \end{pmatrix}$$

両辺を $e^{\lambda t} \cdot e^{ikx}$ で割ると

$$\begin{aligned} \lambda \begin{pmatrix} z_0 \\ w_0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_0 \\ w_0 \end{pmatrix} - k^2 \begin{pmatrix} D_u \cdot z_0 \\ D_v \cdot w_0 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\begin{pmatrix} f_u - k^2 D_u & f_v \\ g_u & g_v - k^2 D_v \end{pmatrix}}_{J_2} \begin{pmatrix} z_0 \\ w_0 \end{pmatrix} \end{aligned} \qquad \text{(F.15)}$$

つまり、λ はヤコビ行列 $J_2 = \begin{pmatrix} f_u - k^2 D_u & f_v \\ g_u & g_v - k^2 D_v \end{pmatrix}$ の固有値であるとわかる。

そこで J_2 の固有値について調べると、式(F.15) より

$$\begin{aligned} tr\, J_2 &= \lambda_1 + \lambda_2 \\ &= f_u - k^2 D_u + g_v - k^2 D_v \\ &= (f_u + g_v) - k^2 (D_u + D_v) \end{aligned}$$

式(F.12) より $f_u + g_v < 0$ なので

$$tr\, J_2 < 0 \qquad (\because k^2 > 0,\ D_u > 0,\ D_v > 0)$$

つまり、条件式(F.12) を満たす限り、λ のうち一方は必ず負になる。

したがって、$\lambda > 0$ をみたすためには、もう一方の固有値が正でなければならないので、$\lambda_1 \cdot \lambda_2 < 0$ つまり $\det J < 0$ が必要である。（<u>※必要条件であり十分条件ではない</u>）
よって

$$\begin{aligned} &(f_u - k^2 D_u) \cdot (g_v - k^2 D_v) - f_v \cdot g_u < 0 \\ &\therefore D_u D_v \cdot k^4 - (D_u g_v + D_v f_u) \cdot k^2 + f_u g_v - f_v g_u < 0 \end{aligned} \qquad \text{(F.16)}$$

ここで、$k^2 = \kappa\ (>0)$ とおくと、式(F.16) は

$$D_u D_v \cdot \kappa^2 - (D_u g_v + D_v f_u) \cdot \kappa + f_u g_v - f_v g_u < 0$$

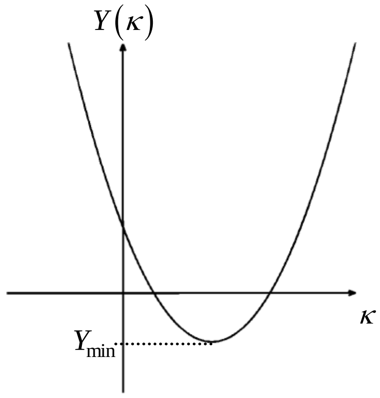
また、$Y(\kappa) = D_u D_v \cdot \kappa^2 - (D_u g_v + D_v f_u) \cdot \kappa + f_u g_v - f_v g_u$ とおくと

$$Y < 0 \qquad \text{(F.17)}$$

これより、$\kappa\ (=k^2)>0$ の領域で $Y_{\min}<0$ であれば(F.16)をみたす実数 k が存在する。
そこで Y を κ で微分すると

$$\frac{dY}{d\kappa}=2D_uD_v\cdot\kappa-\left(D_ug_v+D_vf_u\right)$$

$\dfrac{dY}{d\kappa}=0$ のとき、つまり $\kappa=\dfrac{D_ug_v+D_vf_u}{2D_uD_v}$ $\left(\equiv\kappa_1 とする\right)$ のとき Y は最小値 $Y\left(\kappa_1\right)$ をとる。



よって最小値 $Y(\kappa_1)$ は

$$Y\left(\kappa_1\right)=D_uD_v\left(\frac{D_ug_v+D_vf_u}{2D_uD_v}\right)^2-\frac{\left(D_ug_v+D_vf_u\right)^2}{2D_uD_v}+\left(f_ug_v-f_vg_u\right)$$
$$=-\frac{\left(D_ug_v+D_vf_u\right)^2}{4D_uD_v}+f_ug_v-f_vg_u$$

(F.17) の条件 $Y_{\min}=Y\left(\kappa_1\right)<0$ より

$$Y(\kappa_1)=-\frac{\left(D_ug_v+D_vf_u\right)^2}{4D_uD_v}+f_ug_v-f_vg_u<0$$

$$\therefore\left(D_ug_v+D_vf_u\right)^2-4D_uD_v\left(f_ug_v-f_vg_u\right)>0 \qquad \text{(F.18)}$$

また、条件 $\kappa>0$ より

$$\kappa_1=\frac{D_ug_v+D_vf_u}{2D_uD_v}>0$$

$$\therefore D_ug_v+D_vf_u>0 \qquad (\because D_uD_v>0) \qquad \text{(F.19)}$$

(F.18) (F.19) より、$\lambda>0$ つまり拡散により空間的に不安定になるための必要条件は

$$\begin{cases}\left(D_ug_v+D_vf_u\right)^2-4D_uD_v\left(f_ug_v-f_vg_u\right)>0\\ \qquad \text{かつ}\\ D_ug_v+D_vf_u>0\end{cases}$$

であるとわかる。

ここで、条件(F.12) より $f_u+g_v<0$ であり、また条件(F.19) より $D_ug_v+D_vf_u>0$ であることを考えると、f_u と g_v の符号は逆である必要がある。

つまり

$$f_u \cdot g_v < 0$$

例として、$f_u > 0, g_v < 0$ とすると、u と v はそれぞれ activator と inhibitor になる。

したがって、 $f_u \cdot g_v < 0$ という条件も併せて考えた場合、(F.19) の条件

$$f_u + \frac{D_u}{D_v} \cdot g_v > 0$$

をみたすためには、たとえば

$$\begin{cases} D_v \gg D_u: & \text{inhibitor の拡散係数が activator の拡散係数よりも十分大きい} \\ g_v \ll 1: & \text{inhibitor の反応速度が十分小さい} \end{cases}$$

のような場合が考えられ、このとき Turing pattern が表れることになる。

※<u>補足</u>

ここでは $tr\,J < 0$ のまま $\det J > 0$ から $\det J < 0$ となることによって、安定状態から不安定状態へと遷移した。つまり<u>固有値が両方負の状態から一方が正となった</u>ことを意味する。
⇒これを **Turing 分岐**という。

一方、今回の前提とは合わないが、$\det J > 0$ のまま $tr\,J > 0$ となって、不安定化する場合もある。このとき<u>固有値は複素数であり、実数部分が負から正へと移動</u>している。
⇒これを **Hopf 分岐**という。**（※詳しくは付録「 E-3）Hopf 分岐」参照）**