数理モデリングチュートリアル

非線形現象の数理モデリング入門

長山 雅晴
北海道大学 電子科学研究所
附属社会創造数学研究センター 人間数理研究分野
JST CREST

RIES Hokkaido University Research Institute for Electronic Science

科研費 KAKENHI

JST MATH CREST since 2010 Nagayama

CREST

2

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
    1. 力学系の基礎
    2. 数値計算の基礎
    3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
    1. 化学反応モデル（BZ反応等）
    2. 燃焼合成反応
    3. ロウソク振動子
    4. 自走粒子運動の数理モデル
    5. 樟脳酸–リン酸系モデル
    6. 集団運動
    7. 表皮細胞モデル
    8. Proneural wave（反応拡散系の応用）

3

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
    1. 力学系の基礎
    2. 数値計算の基礎
    3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
    1. 化学反応モデル（BZ反応等）
    2. 燃焼合成反応
    3. ロウソク振動子
    4. 自走粒子運動の数理モデル
    5. 樟脳酸–リン酸系モデル
    6. 集団運動
    7. 表皮細胞モデル
    8. Proneural wave（反応拡散系の応用）

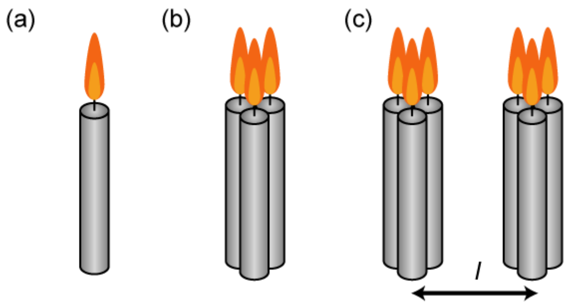
4

実験室で見られるリズム現象

5

ロウソク振動子

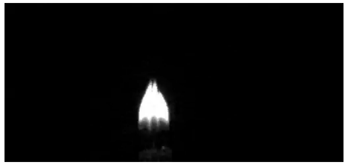
実験室でなくても見られます．



6

ロウソク振動子

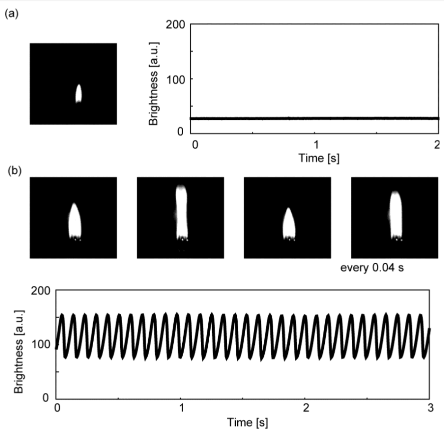
１本のロウソクは
定常燃焼



３本のロウソクを
近づけると振動燃焼

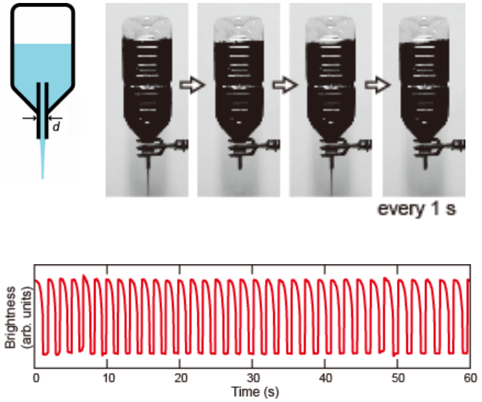
7

実験結果

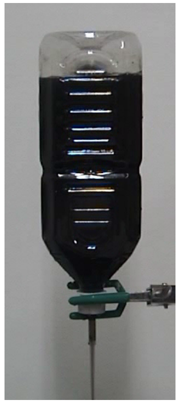


8

ペットボトル振動子



(北畑裕之氏（千葉大学））

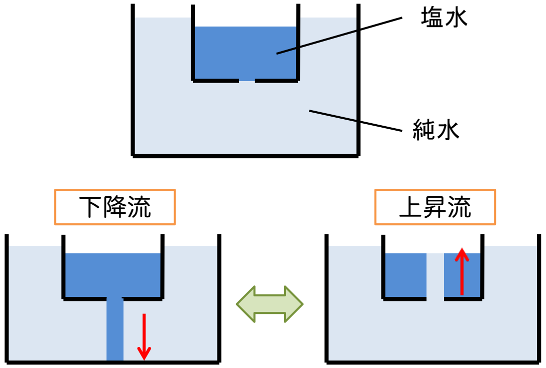


Real time

9

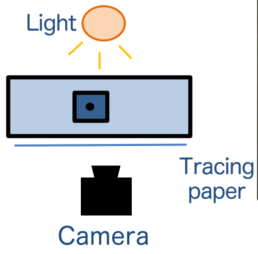
塩水振動子（密度差振動子）

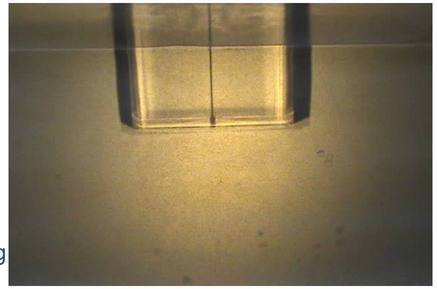
塩水の下降流と純水の上昇流が交互に現れる
流体の非線形振動現象



10

塩水振動子（密度差振動子）





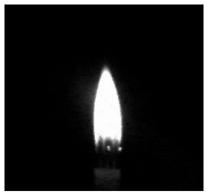
5倍速

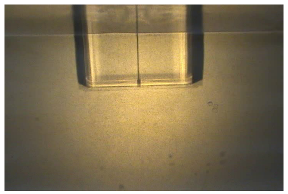
（堀江正信氏（千葉大学））

11

これらの振動子にみられる特徴

- 初期状態によらず，最終的に振幅や周期が一定になる
- 振動が止まることはない（ある一定時間）
- 非平衡系となっている（エネルギーの流入・流出）



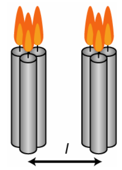


12

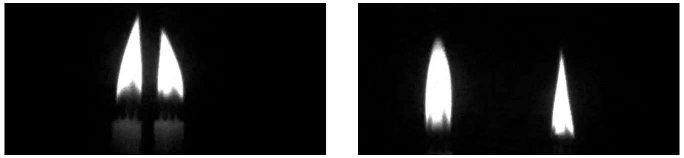
同期現象

13

ロウソク振動子の同期現象



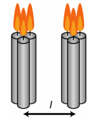
l = 20mm　　l = 40mm

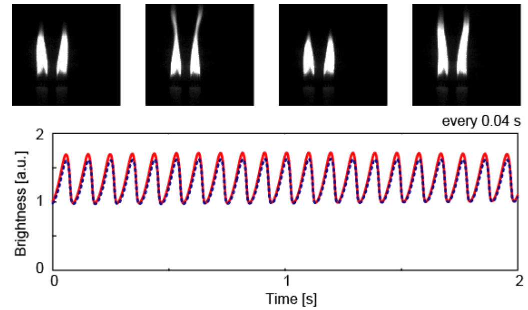


14

ロウソク振動子間の距離が近いとき

l = 20 mm

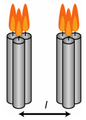


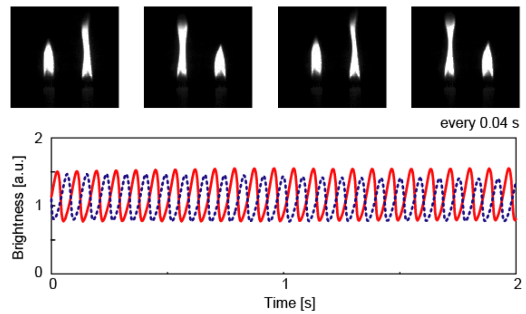


15

ロウソク振動子間の距離が遠いとき

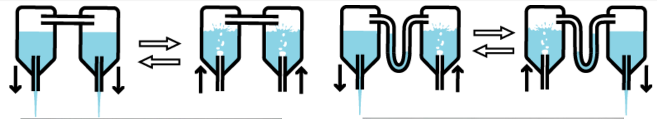
l = 40 mm





16

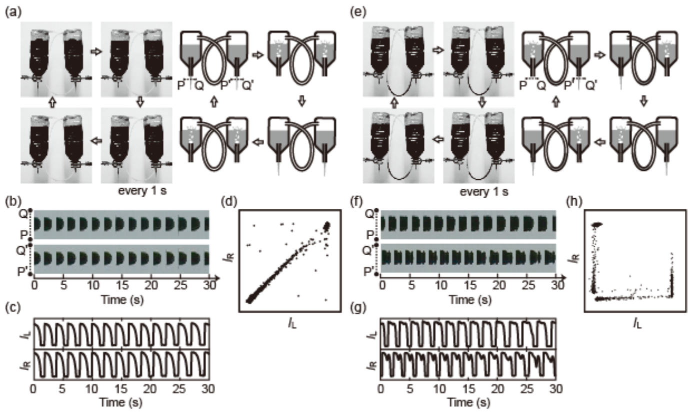
ペットボトル振動子の同期現象



（北畑裕之氏（千葉大学））

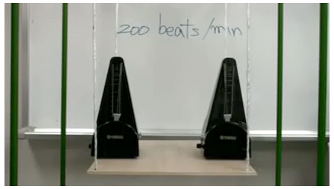
17

ペットボトル振動子の同期現象



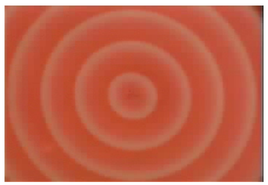
18

メトロノーム振動子の同期現象



19

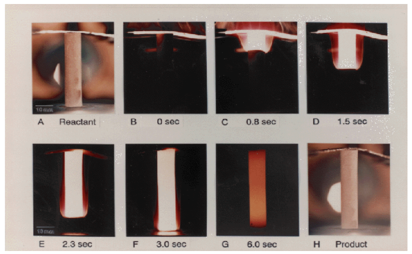
Belousov-Zhabotinsky反応



（北畑裕之氏（千葉大学））

20

燃焼合成反応

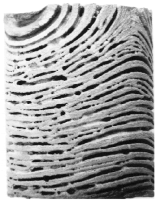


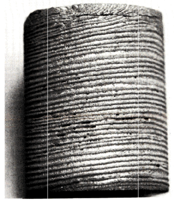
定常燃焼波
Combustion wave

(in laboratory)
大柳満之氏（龍谷大学）

21

螺旋燃焼波の痕跡





大柳満之氏（龍谷大学）　(in laboratory)

Signature of helical combustion wave

22

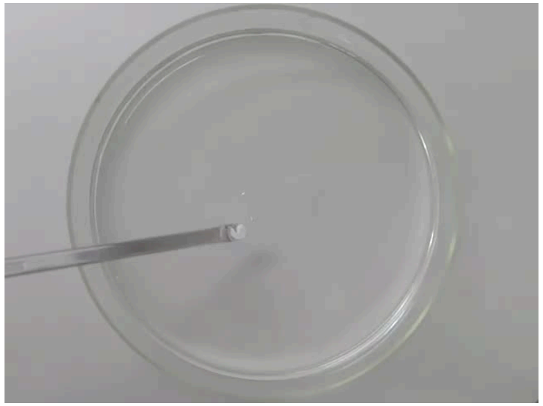
自走粒子系の運動
（自己駆動系）

23

水面上での界面活性（樟脳）粒子の運動

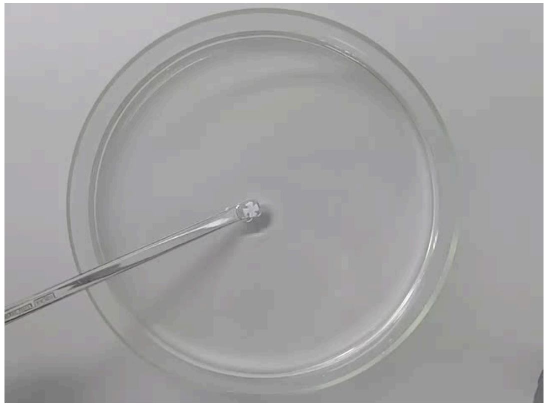
24

水面上での界面活性（樟脳）粒子の運動



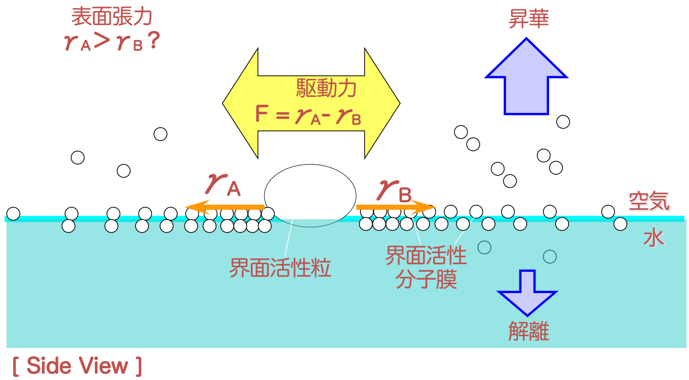
25

水面上での界面活性（樟脳）粒子の運動



26

界面活性剤粒子運動の模式図



27

直線状水路での界面活性粒子運動

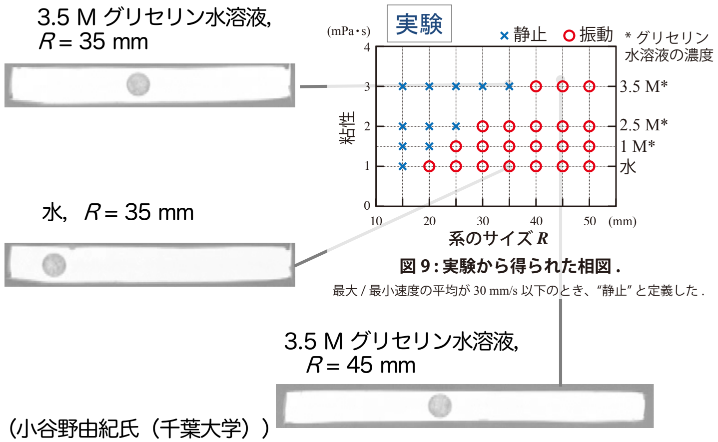


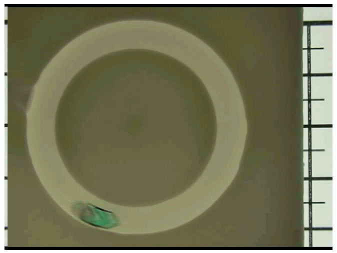
図 9：実験から得られた相図．

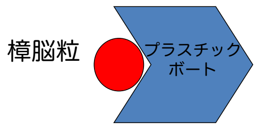
最大 / 最小速度の平均が 30 mm/s 以下のとき、"静止" と定義した．

（小谷野由紀氏（千葉大学））

28

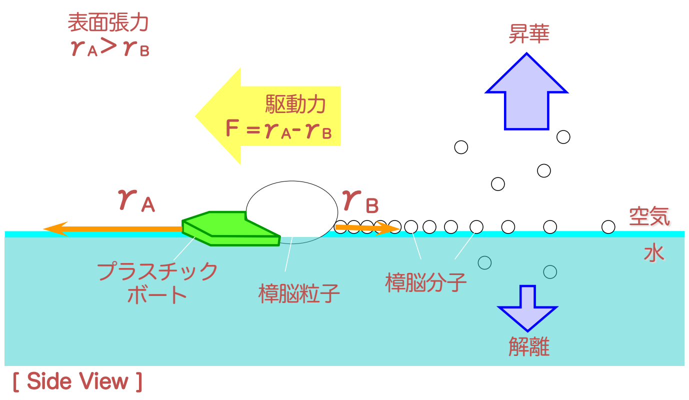
樟脳船運動の実験





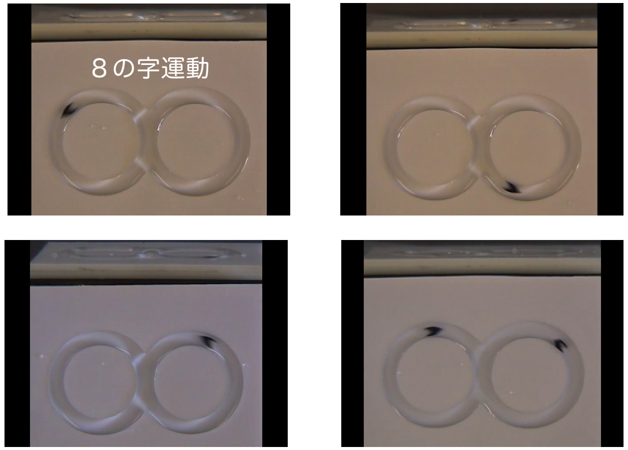
29

樟脳船運動の模式図



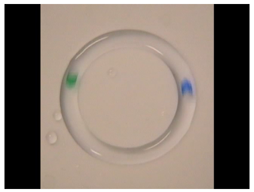
30

樟脳運動の実験例（樟脳舟）

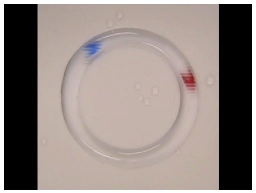


31

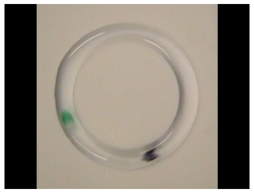
樟脳船の相互作用



１８０度で固定



９０度で固定

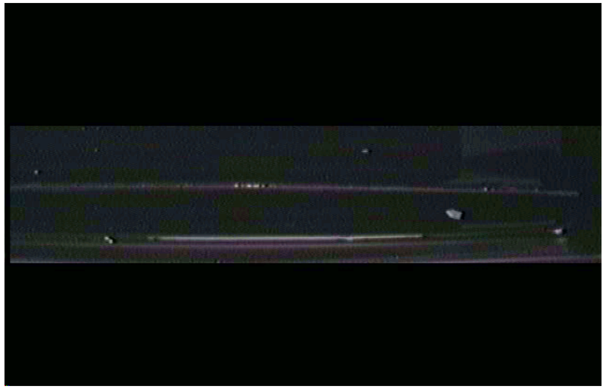


先頭が入れ替わる振動

先頭が入れ替わらない振動

32

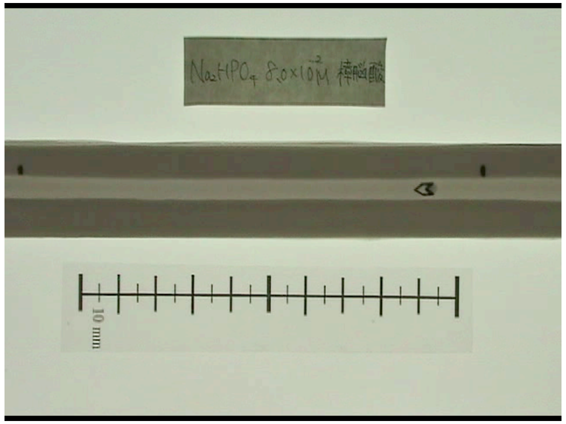
樟脳酸船の振動運動



リン酸緩衝水溶液上での樟脳酸船の運動

33

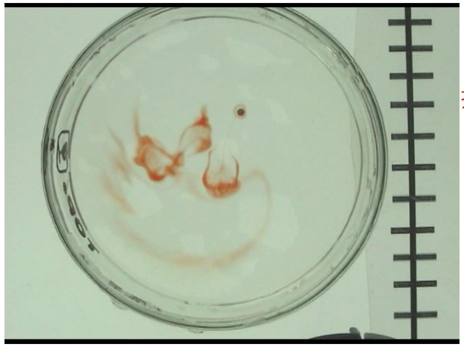
中和反応系船



34

錯体反応系

硫酸第一鉄水溶液 5 m mol/l



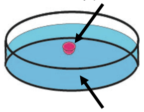
茶褐色：フェロイン

振動運動　樟脳酸粒子の間欠運動と同じ

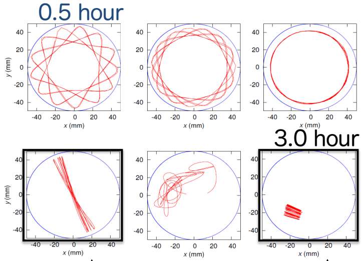
35

液滴の自励運動

サリチル酸ブチル（BS）



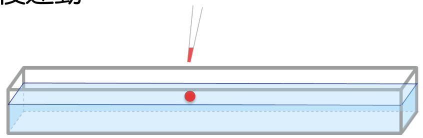
ドデシル硫酸ナトリウム水溶液（SDS）



→振幅の異なる往復運動

SDS濃度が異なる？

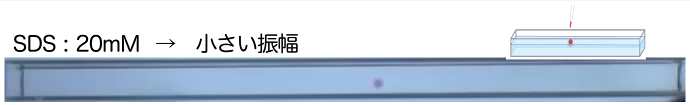
状況を簡単にするために
細長い水槽で実験



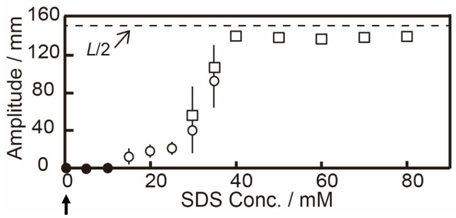
36

自励往復運動

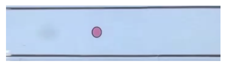
SDS：20mM　→　小さい振幅



SDS：60mM　→　大きい振幅



SDS：5mM 停止

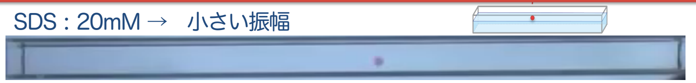


BS液滴が形状を保たない

37

自励往復運動

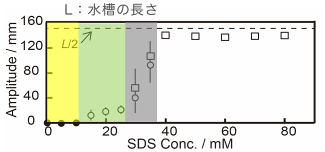
SDS：20mM → 小さい振幅



・水槽の長さを変えても振幅に目立った変化は見られない。
・円環の水槽を用いても同じ振幅の運動をする。 → 壁が影響しない

SDS：60mM → 大きい振幅

・水槽の長さに対応して振幅の大きさが変化する。
・円環の水槽を用いると一方向にのみ進む。 → 壁が影響する



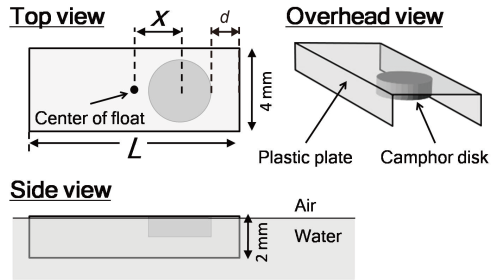
停止
往復運動（壁なし）
往復運動（壁あり）

38/25

38

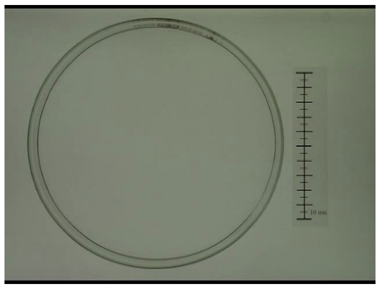
ＯＨＰ樟脳舟の運動

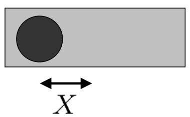
図のようなプラスティックプレート(OHPシートを使用)に樟脳粒子を固定し水面に浮かべ運動の様子を観察する.



39

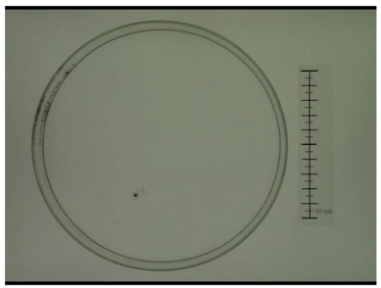
Xが長いと・・

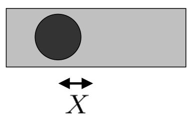




40

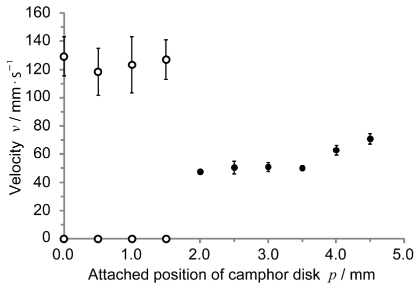
Xが短いと・・





41

距離 Xと運動速度の関係



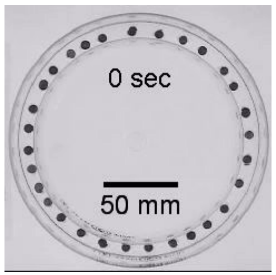
42

自走粒子の集団運動

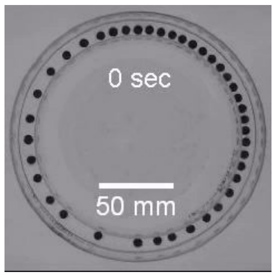
43

樟脳船の渋滞現象

N = 30



N = 40

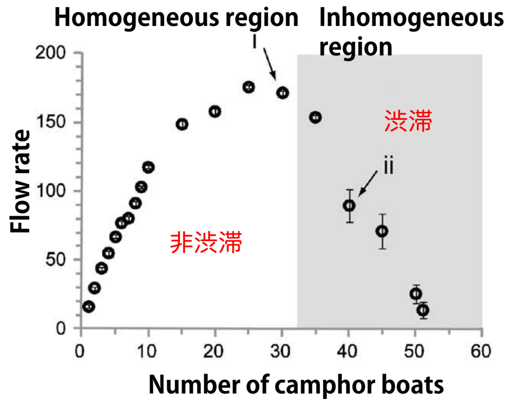


N.J.Suematsu et al. Physical Review E (2010)

Density = N(Number of camphor boat)/L

44

樟脳船の基本図



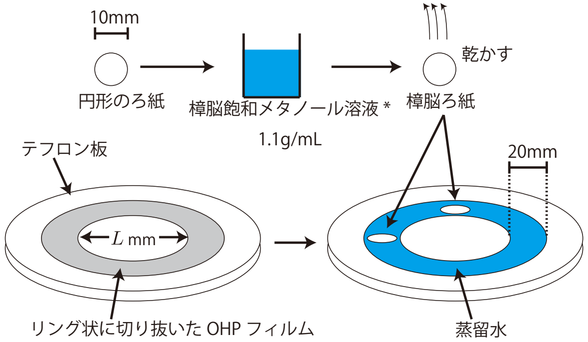
Flow rate : the number of camphor boats/ time

N.J.Suematsu et al. Physical Review E (2010)

45

樟脳円板の集団運動

円形のろ紙を樟脳飽和メタノール溶液に浸し，乾かした樟脳ろ紙を下図の
ようなリング上の水路に浮かべる．テフロンは強い疎水性であるため，
水がOHPリング上に集まって水路を形成する．

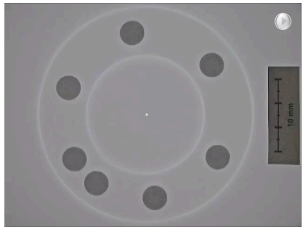


Yumihiko S. Ikura, Eric Heisler, Akinori Awazu, Hiraku Nishimori, and Satoshi Nakata, Phys. Rev. E 88, 012911 (2013)

*S. Soh, M.Branicki, and B. A. Grzybowski, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2011, **2**, 770-774.

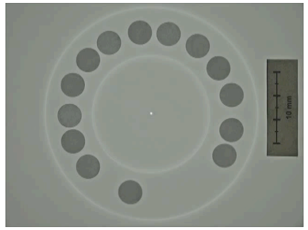
46

実験結果



樟脳ろ紙7個の場合

後ろの樟脳ろ紙に押されて動き出し，
前の樟脳ろ紙とぶつかって停止する
（玉突き）．



樟脳ろ紙14個の場合

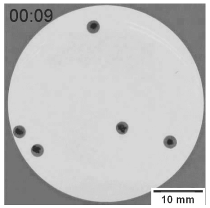
前方にスペースができると樟脳ろ紙が
動き出し，前方にある樟脳ろ紙に追いつく
と停止する（渋滞）．

47

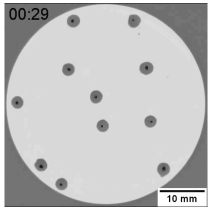
自走系集団運動の例1

2次元円盤領域における集団運動

個数が少ないとき



個数が11個：振動運動が見られる



末松 J. 信彦(明治大学), 2015

個数が40個：クラスター化がみられる

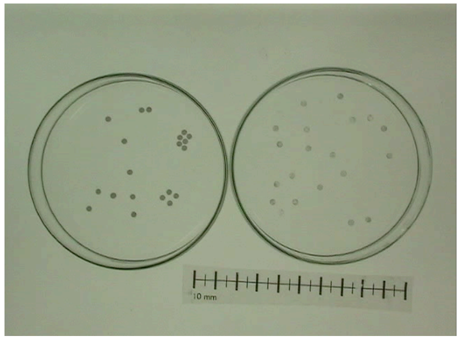
松田唯(広島大学), 2015

48

集団運動の例２

樟脳ゲル
20個

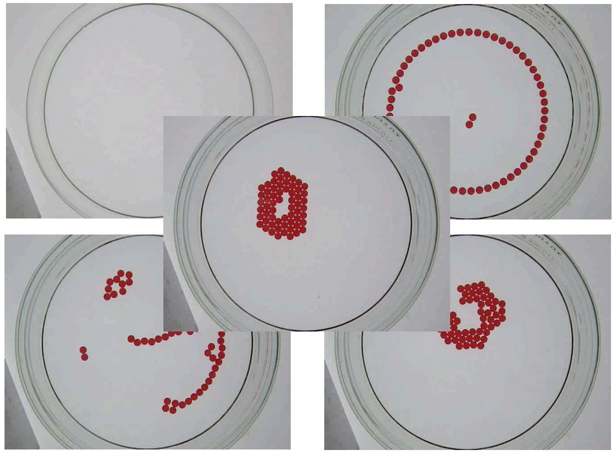
樟脳円板
20個



松田唯(広島大学), 2015

49

液滴の集団運動

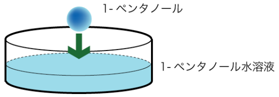


50

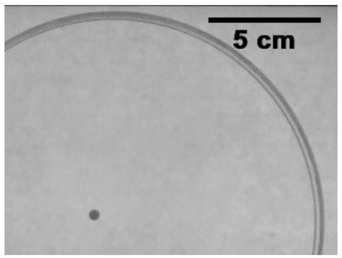
液滴運動

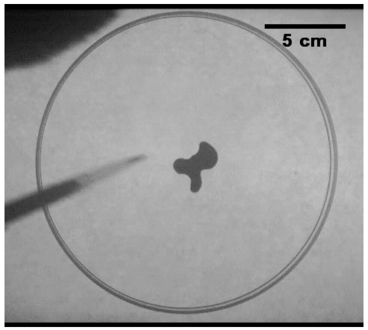
51

ペンタノール液滴運動



実験：永井 健氏（北陸先端大学）

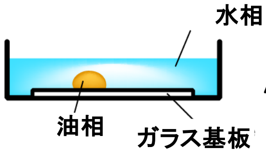




52

油滴運動

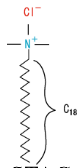
油水系



・水相・1 mM Stearyl Trymethyl Ammonium Chloride (STAC) 溶液

・油相・KI飽和5 mMヨウ素ニトロベンゼン溶液

・ガラス基板

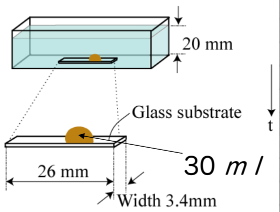


STAC

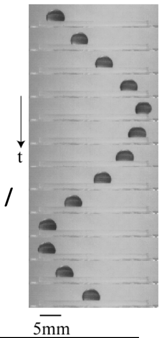
実験：住野 豊氏（東京理科大学）

53

ガラス基板上での往復運動



1/6 sec per frame



条件を平面1次元状のガラス基板に変更すると、油滴は、1次元的な往復運動を示す。

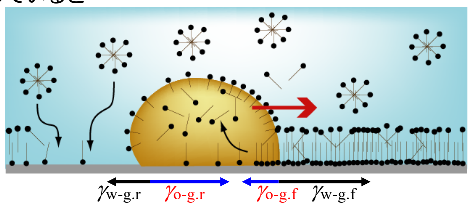
油滴はガラス基板の上が好き！！

この運動は30秒程続く

実時間の1/2

表面エネルギーによる駆動

表面の界面活性剤濃度の差により、前後の水、油ーガラス界面張力に違いが生じていると



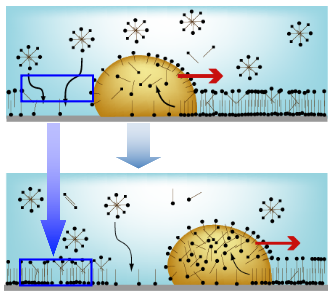
奥行きをwとし変形を無視すると、1次元の時には

$$F_{sur}=w\Delta\gamma=w\{(\gamma_{w\text{-}g.f}-\gamma_{o\text{-}g.f})-(\gamma_{w\text{-}g.r}-\gamma_{o\text{-}g.r})\}$$

となり、 F_{sur}の値が正の時、運動方向に駆動力が発生し運動が持続する

Reactive Droplet c.f. Brochard, F. *Langmuir* **5**, 432 (1989).

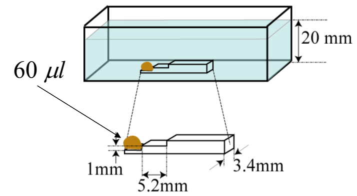
運動メカニズム

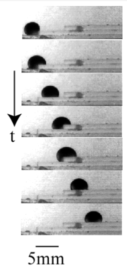


油水系においては、他の反応性液滴の系と異なり水相中にSTA+が含まれているためガラス界面が、素早く（msec 程度で）回復する

→ リズミックで反復的な動きが可能となる

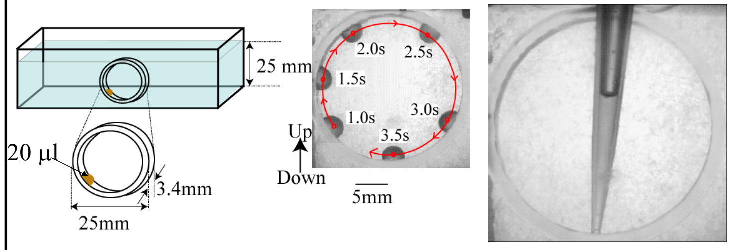
階段を登る油滴





油滴を階段型の基板上にセットすると、油滴は階段を自発的に駆け上ることが解った。また、油滴の運動方向が階段を上る向きのみに制限できることも示された。

宙返りする油滴

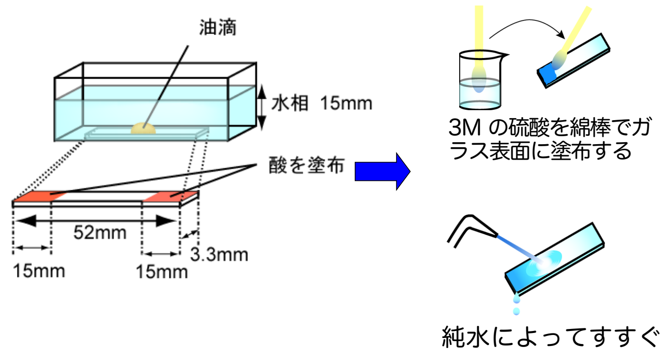


実時間の1/2

油滴を環状の基板の中にセットすると環内を周回し宙返りする回転モードが現れる．この宙返りは最高で3周したのが観察された．

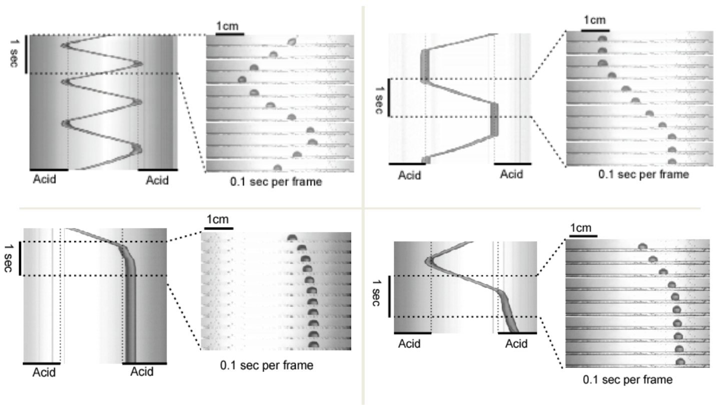
58

化学的表面処理境界での油滴の動き



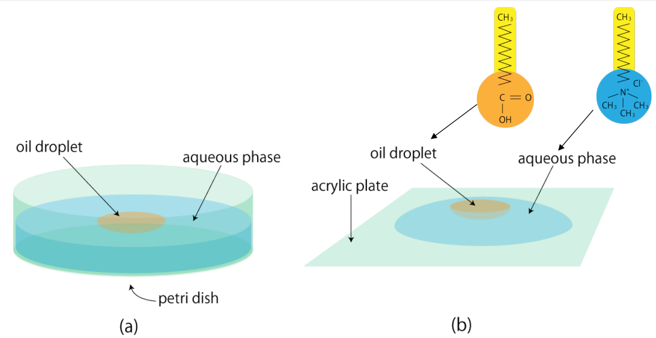
59

化学処理境界での油滴の振る舞い



60

液滴のブレミング運動



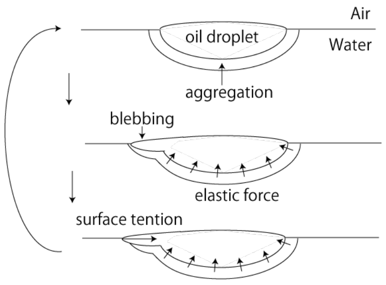
液滴：パルミチン酸テトラデカン(濃度Cp = 1〜20 mM)
水相：塩化ステアリルトリメチルアンモニウム(STAC)水溶液(濃度Cs = 1 〜 100 mM)

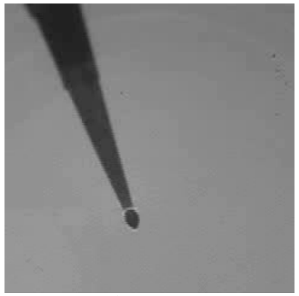
パルミチン酸は水に溶けず，STACは油滴に溶けない．
パルミチン酸とSTACは油水界面においてゲル状会合体を形成する．

61

液滴のブレビング運動

3倍速





Sumino et al., 2009.

自らが生成した会合体に圧迫され変形が起きる.
会合体は液滴の界面張力を下げる界面活性剤である.
会合体がなくなると液滴の界面張力の増加により変形が収縮する.

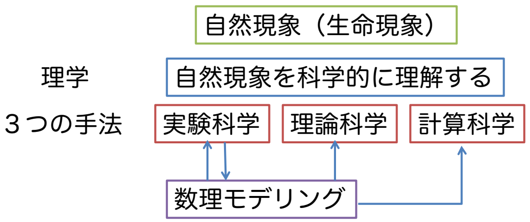
62

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
   1. 力学系の基礎
   2. 数値計算の基礎
   3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
   1. 化学反応モデル（BZ反応等）
   2. 燃焼合成反応
   3. ロウソク振動子
   4. 自走粒子運動の数理モデル
   5. 樟脳酸–リン酸系モデル
   6. 集団運動
   7. 表皮細胞モデル
   8. Proneural wave（反応拡散系の応用）

63

数理モデリングとは何か？

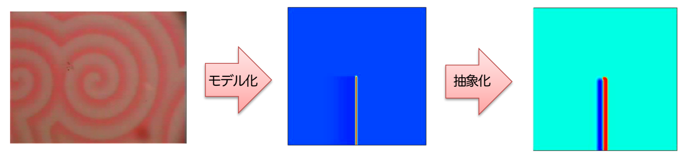


数理モデリングは理論的な理解を与えるための道具である.
現象の定性的な再現は必要条件である.
理論的方法によって未知の部分が理解できなければ意味がない.
数理モデルに正解はない（40点~80点程度）
理解できれば，実験に対する予測ができる.
よい数理モデルができれば，数学の問題へと定式化ができる.

64

数理モデルとは何か？

数理モデルとは現象の数式による模倣と抽象化である.
抽象化し現象を模倣することによって，「現象の法則」を明らかにする道具

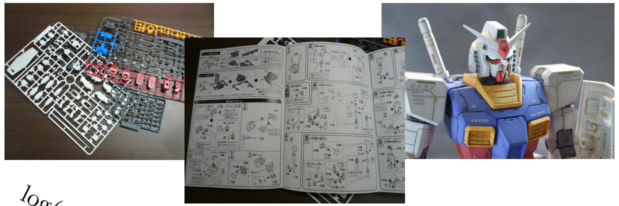


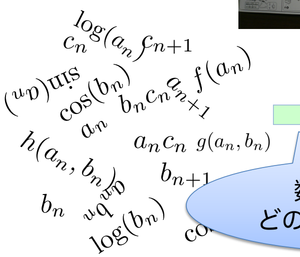
BZ反応（現象）　モデルから得られた結果 法則の発見　抽象化したモデル

どのようなモデルを考えればよいか？（立場によるが）
現象の定性的性質を保持してる程度まで抽象化した数理モデルを考えたい.
そのような数理モデルは現象の法則を記述してハズ（信念！）
数理モデルは現象を数学で取り扱えるようにする道具ともいえる.

65

数理モデルはどのように作るか？





数理モデル（漸化式，微分方程式）

$$\begin{cases} a_{n+1} - a_n = f(a_n, b_n), \\ \quad\ \ - b_n = g(a_n, b_n). \end{cases}$$

$= 0, 1, 2, \cdots$

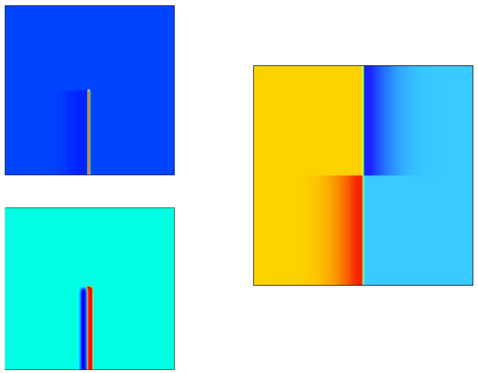
数理モデルは
どのように作るの？

数理モデリングの心得

数理モデルは現象を理論的に理解する道具である
現象を再現するだけでは意味がない（似て非なるものを作る可能性）
数理モデルはそれだけで単独の研究とはなり得ない
現象に潜む普遍性を取り出す道具となるべきである
　→モデリング過程で見えてくる
現象の予言とその実験検証を繰り返すことで，よりよいモデルとなる
　→実験系との連携は不可欠
よい数学モデルは数学として解析することに意味が出てくる
　→数式に潜む普遍性を数学によって取り出す

数理モデルには100点もなければ0点もない．せいぜい80点〜40点．
要するに正解もなければ不正解もない
真面目過ぎる人には無理かも…

似て非なるもの



私とっての数理モデルを作る基本原理

重要

単位時間当たりの（量，もの）の変化量
＝　流入量 ー 流出量
＝　入ってくる（もの）ー　出て行く（もの）
＝　生成されるもの ー 消費されるもの

(もの) ＝ 化学物質濃度，密度，温度，力　etc.

数理モデルはこの基本原理によって記述されていると思ってよい．
「流入するもの」と「流出するもの」をいかにして見つけるのかが重要！
いいかえると
「“ルール”をいかにして見つけ出すか」がポイント

数理モデリングに必要な道具

力学系の基礎知識
　常微分方程式系の平衡解の線形化安定性解析
　相図
　簡単な分岐現象

数値計算法の基礎
　常微分方程式の数値計算法
　熱方程式の数値計算法
　（できれば）反応拡散系の数値計算

70

数理モデルの構成

・知りたい現象（実験結果）
⇓
・自然科学言語を用いて現象の説明をする
⇓
・数式で表現（微分方程式，漸化式など）
⇓
・無次元化［変数，定数の持つ単位を「1」にする］
⇓
・数値計算による現象再現の評価（数理モデルの評価は？）
No
⇓ Yes
・数理モデルを用いた実験の予測
⇓
・実験系の提案

現象再現しただけでは数理モデルを評価したことにならない．

71

数式を作るための道具

・物理法則（力学，電磁気学，熱力学，統計力学，連続体力学）
・化学反応速度論
・質量作用の法則 ← 今日の話はここだけわかればできる？！
・質量保存則（正確には正しくない）

→

化学反応系モデル（BZ反応モデル等）
物理現象モデル（自走粒子系モデル）
生態学系モデル
生理学系モデル
生命科学系モデル（Proneural Wave，INMモデル）

72

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
    1. 力学系の基礎
    2. 数値計算の基礎
    3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
    1. 化学反応モデル（BZ反応等）
    2. 燃焼合成反応
    3. ロウソク振動子
    4. 自走粒子運動の数理モデル
    5. 樟脳酸–リン酸系モデル
    6. 集団運動
    7. 表皮細胞モデル
    8. Proneural wave（反応拡散系の応用）

88

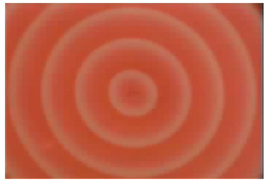
化学反応の数理モデル

最終目標
BZ反応の数理モデルをつくる

89

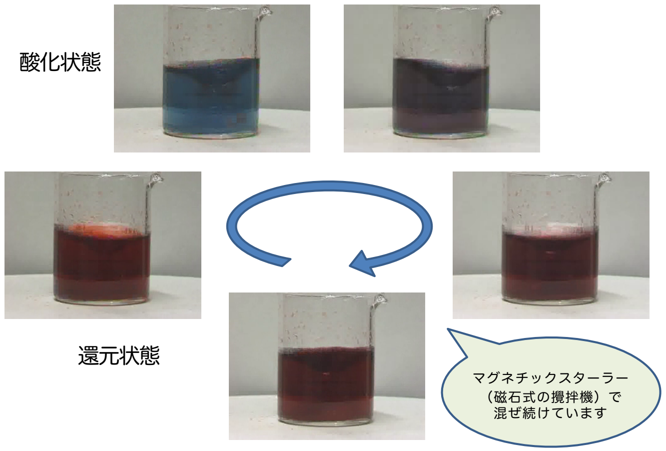
Belousov-Zhabotinsky反応

（北畑裕之氏（千葉大学））



90

振動現象（リズムの発現）



91

化学反応素過程のモデリング

$$a\mathrm{A} + b\mathrm{B} \xrightarrow{k} p\mathrm{P} + q\mathrm{Q}$$

a, b, p, q ：化学量論係数 Constant of stoichiometry

k ：反応速度 Reaction rate constant

化学量論比が保たれて反応する.

$$\frac{1}{a}\frac{d[A]}{dt} = \frac{1}{b}\frac{d[B]}{dt} = \underline{-k[A]^{n_a}[B]^{n_b}}$$

平衡状態から十分離れているときはo.k.

$n = n_a + n_b$ ：反応次数（整数とは限らない）
Reaction order

92

反応素過程の数理モデル

1 次反応 $\mathrm{A} \xrightarrow{k} \mathrm{P}$

ただし[･]は濃度を表す

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -k[A], \quad \frac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k[A]$$

2次反応 $\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k} \mathrm{P}$

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -k[A][B], \quad \frac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{dt}} = -k[A][B], \quad \frac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k[A][B]$$

93

反応素過程の数理モデル

3次反応 $2\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k} \mathrm{P}$

$$\frac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -2k[A]^2[B], \quad \frac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{dt}} = -k[A]^2[B], \quad \frac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k[A]^2[B]$$

94

Autocatalytic reaction 自己触媒反応

$$\mathrm{X} + \mathrm{Y} \xrightarrow{k} 2\mathrm{X}$$

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{X}]}{\mathrm{dt}} = -k[X][Y]$$
$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{X}]}{\mathrm{dt}} = 2k[X][Y]$$
$$\Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}[\mathrm{X}]}{\mathrm{dt}} = k[X][Y]$$

95

3 次の自己触媒反応モデル

$$2\mathrm{X} + \mathrm{Y} \xrightarrow{k} 3\mathrm{X}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d[X]}{dt} = k[X]^2[Y]$$
$$\frac{d[Y]}{dt} = -k[X]^2[Y]$$

96

単純反応と複合反応

同じ化学反応式

2A + B → P

であっても中間生成物質を考える逐次反応（複合反応）

A + B → C
A + C → P

と単純反応

2A + B → P

ではモデル方程式が異なることに注意する.

97

Simple reaction process 単純反応過程の場合

$$2\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k_1} \mathrm{P}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -2k_1[A]^2[B], \\ \dfrac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{dt}} = -k_1[A]^2[B], \\ \dfrac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k_1[A]^2[B]. \end{cases}$$

98

Sequential reaction process 逐次反応過程の場合

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k_1} \mathrm{C}$$

$$\mathrm{A} + \mathrm{C} \xrightarrow{k_2} \mathrm{P}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -k_1[A][B] - k_2[A][C], \\ \dfrac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{dt}} = -k_1[A][B], \\ \dfrac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{dt}} = k_1[A][B] - k_2[A][C], \\ \dfrac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k_2[A][C]. \end{cases}$$

99

Sequential reaction process 2 逐次反応過程の場合 2

もし，反応過程で中間生成物質の濃度が一定（準平衡状態仮説）となっているならば

$$k_1[A][B] - k_2[A][C] = 0$$

$$\rightarrow$$

$$[C] = \frac{k_1}{k_2}[B]$$

従って

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[A]}{\mathrm{dt}} = -2k_1[A][B], \\ \dfrac{\mathrm{d}[B]}{\mathrm{dt}} = -k_1[A][B], \\ \dfrac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k_1[A][B]. \end{cases}$$

2次反応となる.

100

問題1

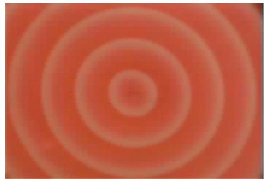
次の素過程を記述する微分方程式を記述してください

$$A + B \xrightarrow{k_1} 2A$$

$$A + C \underset{k_-}{\overset{k_+}{\rightleftarrows}} P$$

101

Belousov-Zhabotinsky反応



（北畑裕之氏（千葉大学））

103

Belousov-Zhabotinsky反応のモデル化

R.J.Field（フィールド）
E.Körös（ケレス）
R.M.Noyes（ノイエス）

Ce^{4+} / BrO_3^- / $CH_2(COOH)_2$ / H_2SO_4

セリウム　臭素酸　マロン酸　硫酸

104

FKNメカニズム

(R1) $Br^- + HOBr + H^+ \overset{k_{1\pm}}{\rightleftharpoons} Br_2 + H_2O$

(R2) $Br^- + HBrO_2 + H^+ \overset{k_{2\pm}}{\rightleftharpoons} 2HOBr$

(R3) $Br^- + BrO_3^- + 2H^+ \overset{k_{3\pm}}{\rightleftharpoons} HOBr + HBrO_2$

(R4) $2HBrO_2 \overset{k_{4\pm}}{\rightleftharpoons} HOBr + BrO_3^- + H^+$

(R5) $HBrO_2 + BrO_3^- + H^+ \overset{k_{5\pm}}{\rightleftharpoons} 2BrO_2\cdot + H_2O$

(R6) $BrO_2\cdot + Ce_3^+ + H^+ \overset{k_{6\pm}}{\rightleftharpoons} HBrO_2 + Ce^{4+}$

(R7) $BrO_2\cdot + Ce^{4+} + H_2O \overset{k_{7\pm}}{\rightleftharpoons} BrO_3^- + Ce^{3+} + 2H^+$

(R8) $Br_2 + CH_2(COOH)_2 \overset{k_8}{\rightarrow} BrCH(COOH)_2 + Br^- + H^+$

(R9) $6Ce^{4+} + CH_2(COOH)_2 + 2H_2O$
$\overset{k_9}{\rightarrow} 6Ce^{3+} + HCOOH + 2CO_2 + 6H^+$

(R10) $4Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O$
$\overset{k_{10}}{\rightarrow} 4Ce^{3+} + HCOOH + Br^- + 2CO_2 + 5H^+$

(R11) $Br_2 + HCOOH \overset{k_{11}}{\rightarrow} 2Br^- + CO_2 + 2H^+$

105

Simplify of Elementary Process
素過程の簡略化

Field, Noyse

(R3) $BrO_3^- + Br^- + 2H^+ \rightarrow HBrO_2 + HOBr$

(R2) $HBrO_2 + Br^- + H^+ \rightarrow 2HOBr$

(R5)+2×(R6)

$2Ce^{3+}\ BrO_3^- + HBrO_2 + 3H^+ \rightarrow 2Ce^{4+}\ 2HBrO_2 + H_2O$

(R4) $2HBrO_2 \rightarrow BrO_3^- + HOBr + H^+$

(R10)

$4Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O$
$\rightarrow 4Ce^{3+} + Br^- + HCOOH + 2CO_2 + 5H^+$

106

Belousov-Zhabotinsky反応の素過程

$$\begin{cases} A + Z \xrightarrow{k_1} X + P \\ X + Z \xrightarrow{k_2} 2P \\ A + \boxed{X \xrightarrow{k_3} 2X} + 2Y \\ 2X \xrightarrow{k_4} A + P \\ B + Y \xrightarrow{k_5} hZ \end{cases}$$

自己触媒反応

$A = |BrO_3^-|$

$B = |BrCH(COOH)_2|$

$P = |HOBr|$ ← 生成物質

$$\begin{cases} X = |HBrO_2| \\ Y = |Ce^{4+}| \\ Z = |Br^-| \end{cases}$$

107

BZ反応の３変数モデル

A, *B* は時間変化しないと仮定する（実験から）

$$\begin{cases} \dot{X} = k_1AZ - k_2XZ - k_3AX + 2k_3AX - k_4X^2, \\ \dot{Y} = 2k_3AX - k_5BY, \\ \dot{Z} = -k_1AZ - k_2XZ + hk_5BY. \end{cases}$$

以下の無次元化を行う：

$$\begin{cases} X = \dfrac{k_3A}{k_4}u, \quad Y = \dfrac{2(k_3A)^2}{k_4k_5B}v, \quad Z = \dfrac{k_3A}{k_2}w, \\ \tau = k_5Bt, \quad \varepsilon = \dfrac{k_5B}{k_3A}, \quad \varepsilon' = \dfrac{k_4k_5B}{k_2k_3A}, \\ a = \dfrac{k_1k_4}{k_2k_3}, \quad f = 2h \end{cases}$$

108

無次元化された数理モデル

$$\begin{cases} \varepsilon\dfrac{du}{d\tau} = aw - uw + u(1-u), \\ \dfrac{dv}{d\tau} = u - v, \\ \varepsilon'\dfrac{dw}{d\tau} = -aw - uw + fv. \end{cases}$$

ただし，$\varepsilon' \ll \varepsilon \ll 1, \quad a \ll 1,\ f \simeq 1.$

109

３変数モデルに対する断熱消去 (特異摂動法)

$$\begin{cases} \varepsilon u_\tau = aw - uw + u(1-u), \\ v_\tau = u - v, \\ \varepsilon' w_\tau = -aw - uw + fv. \end{cases}$$

$\varepsilon' \ll \varepsilon \ll 1, \quad a \ll 1, \ f \simeq 1.$

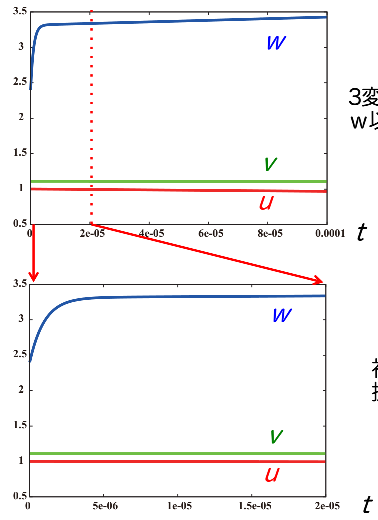
$\varepsilon' \downarrow 0$ とすると第3式から

$w = \dfrac{fv}{u+a}$ となるので，第1式と第2式に代入すると

$$\begin{cases} \varepsilon u_\tau = u(1-u) - fv\dfrac{u-a}{u+a}, \\ v_\tau = u - v. \end{cases}$$

正しいのか？

110



3変数モデルを数値計算してみると w以外はほとんど変化していない

初期値からの変化を拡大してみる

111

時間スケール変換

$T = \dfrac{\tau}{\varepsilon'}$ とすると

$$\begin{cases} \varepsilon u_T = \varepsilon'(aw - uw + u(1-u)(a-b)), \\ v_T = \varepsilon'(u-v), \\ w_T = -aw - uw + fv \end{cases}$$

$$\varepsilon' \downarrow 0 \quad \begin{cases} \varepsilon u_T = 0, \\ v_T = 0, \\ w_T = -aw - uw + fv \end{cases}$$

112

スケール変換後のモデルについて

初期値：$(u, v, w)(t) = (u_0, v_0, w_0)$ とすると

$$u(T) = u_0, \quad v(T) = v_0$$

から

$$w(T) = \frac{fv_0}{a + u_0}$$ は平衡点

$T = \dfrac{\tau}{\varepsilon'}$ より $\varepsilon' \downarrow 0$ から $T \to \infty$

平衡点の漸近安定性が重要：（漸近安定）

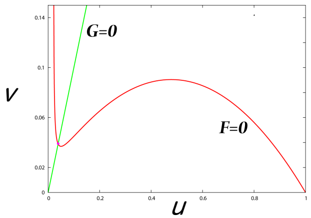
$$\lim_{T\to\infty} w(T) = \frac{fv_0}{a+u_0}$$

このモデルでは $w = \dfrac{fv}{a+u}$ としてよい

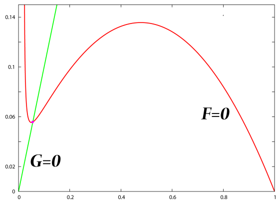
113

２変数Belouzov-Zhabotinsky反応モデル

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = \dfrac{1}{\varepsilon}\left(fv\dfrac{a-u}{a+u} + u(1-u)\right) & \equiv \dfrac{1}{\varepsilon}F(u,v), \\ \dfrac{dv}{dt} = u - v & \equiv G(u,v). \end{cases}$$



$f = 3.0,\quad a = 0.02,\quad \varepsilon = 0.01$



$f = 2.0,\quad a = 0.02,\quad \varepsilon = 0.01$

114

BZ反応モデルを用いた振動現象の再現

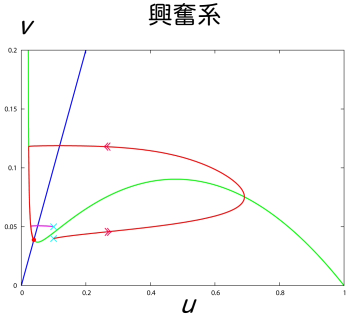
オレゴネーターモデル

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = \dfrac{1}{\varepsilon}\left(fv\dfrac{a-u}{a+u} + u(1-u)\right) & \equiv \dfrac{1}{\varepsilon}F(u,v), \\ \dfrac{dv}{dt} = u - v & \equiv G(u,v). \end{cases}$$

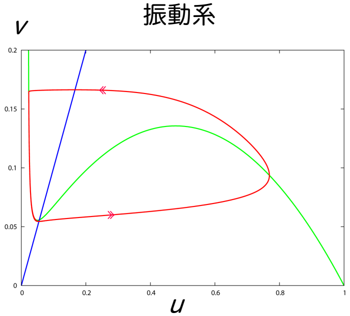
振動性

115

モデル方程式の性質



$f = 3.0,\quad a = 0.02,\quad \varepsilon = 0.01$

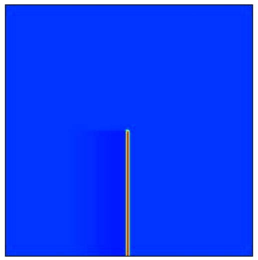


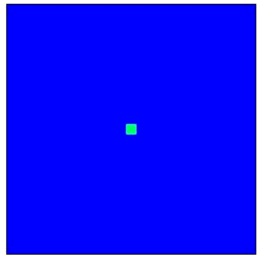
$f = 2.0,\quad a = 0.02,\quad \varepsilon = 0.01$

116

シャーレ上でのBZ反応モデル

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u + \dfrac{1}{\varepsilon}\left(fv\dfrac{a-u}{a+u} + u(1-u)\right), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + u - v. \end{cases}$$



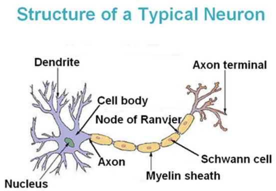


117

FHN type equation

$$\begin{cases} \varepsilon\tau\dfrac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^2 d_u \Delta u + f(u,v), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = d_v \Delta v + g(u,v). \end{cases}$$

$$0 < \varepsilon \ll 1$$



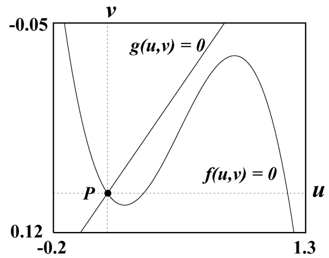
FitzHugh-Nagumo nonliearlity

$f(u,v) = u(1-u)(u-a) - v \quad (0 < a < 1/2),$

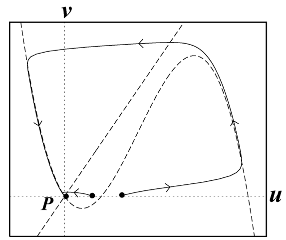
$g(u,v) = u - \gamma v.$

118

単安定興奮系



Parameter : a = 0.2, γ = 0.5

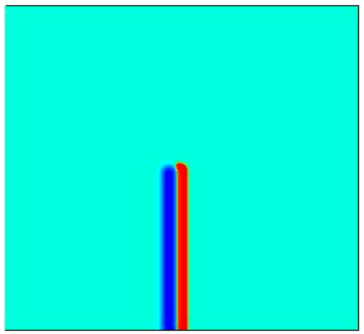


$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = \dfrac{1}{\varepsilon} f(u,v), \\ \dfrac{dv}{dt} = g(u,v). \end{cases}$$

$$\varepsilon = 0.003$$

119

2次元スパイラルパターン



120

化学反応数理モデル構成のポイント

化学反応の素過程を知ること
単純反応，逐次反応

質量作用の法則によって素過程から微分方程式を構成
反応次数は化学量論定数と同じにする

反応次数が化学量論定数と異なると判断したら実験家と相談する

→

数値シミュレーション等で現象の再現
次のステップへ

121

発熱反応のモデル化

$$\mathrm{X} + \mathrm{Y} \xrightarrow{k(T)} \mathrm{P} + \boxed{\mathrm{Heat}}$$

温度上昇

温度依存の反応速度

$$k(T) = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad : \quad \text{Arrhenius reaction rate}$$

E	：活性化エネルギー	Activation energy
R	：気体定数	Gas constant
k_0	：前指数定数	Pre-exponential constant
T	：温度 [k]	Absolute temperature

122

発熱反応のモデル化

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[X]}{\mathrm{dt}} = -k(T)[X][Y], \\ \dfrac{\mathrm{d}[Y]}{\mathrm{dt}} = -k(T)[X][Y]. \end{cases}$$

熱の発生による温度上昇

$$C_p\rho\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{dt}} = \omega k(T)[X][Y].$$

C_p ：比熱,，ρ ： 密度，ω ： 熱の温度変換率

123

数理モデルの基本原理

化学反応に対する数理モデルの構成行ったが，これ以降考える数理モデルの構成方法は次の基本原理によって構成されている．決定論かつ現象論から作られた数理モデルはこの基本原理に基づいている．

重要

単位時間当たりの（量，もの）の変化量
＝　流入量 ー 流出量
＝　入ってくる（もの）ー　出て行く（もの）
＝　生成されるもの ー 消費されるもの

(もの) ＝ 化学物質濃度，密度，温度，力　etc.

124

化学反応系によく出てくる項

供給項：$(u_0 - u)$

放熱効果（対流による）：$(T_0 - T)$

放熱効果（輻射による）：$(T_0^4 - T^4)$

125

参考文献

参考文献

[1] 「数理生理学 (上) 細胞生理学」，中垣俊之監訳，日本評論社

[2] 「アトキンス物理化学 (上)」，千原秀昭，中村亘男訳，東京化学同人

[3] 「はじめての化学反応論」，土屋荘次著，岩波書店

[4] 「非平衡系の科学 (III)」，三池秀敏 · 森義仁 · 山口智彦著，講談社

126

酵素反応系

$$\mathrm{S} + \mathrm{E} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} \mathrm{C} \xrightarrow{k_2} \mathrm{P} + \mathrm{E}$$

S：基質，E：酵素，C：複合体，P：生成物

127

酵素反応系モデル1

$$\mathrm{S} + \mathrm{E} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} \mathrm{C} \xrightarrow{k_2} \mathrm{P} + \mathrm{E}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}[S]}{\mathrm{dt}} = -k_1[S][E] + k_{-1}[C], \\ \dfrac{\mathrm{d}[E]}{\mathrm{dt}} = -k_1[S][E] + k_{-1}[C] + k_2[C], \\ \dfrac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{dt}} = k_1[S][E] - k_{-1}[C] - k_2[C], \\ \dfrac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k_2[C]. \end{cases}$$

128

酵素反応系モデル2

$$\mathrm{S} + \mathrm{E} \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftarrows}} \mathrm{C} \xrightarrow{k_2} \mathrm{P} + \mathrm{E}$$

$$\frac{\mathrm{d}[E]}{\mathrm{dt}} + \frac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{dt}} = 0 \quad \rightarrow [E](t) + [C](t) = E_0$$

Cは準平衡状態にある $\rightarrow \dfrac{\mathrm{d}[C]}{\mathrm{dt}} = 0$

$$[C] = \frac{k_1 E_0}{k_1[S] + (k_{-1} + k_2)}[S]$$

129

Michaelis-Menten 則

$$
\begin{cases}
\dfrac{\mathrm{d}[S]}{\mathrm{dt}} = -k_1[S][E] + k_{-1}\dfrac{E_0}{[S]+K_m}[S], \\
\dfrac{\mathrm{d}[E]}{\mathrm{dt}} = -k_1[S][E] + K_m\dfrac{E_0}{[S]+K_m}[S], \\
\dfrac{\mathrm{d}[P]}{\mathrm{dt}} = k_2\dfrac{E_0}{[S]+K_m}[S].
\end{cases}
$$

$$K_m = \frac{(k_{-1}+k_2)}{k_1}$$

130

知ってれば得する知識

$$mA + B \xrightarrow{k} (m+1)A$$

Positive feedback

$$A + O \xrightarrow{k(T)} P + \boxed{\text{Heat}}$$

どちらも似たようなパターンが出ると予測される
→
m≧2の場合は正しい

131

3次自己触媒反応系 (Gray-Scott model)

Supply
↓
2U + V → 3U : 3次の自己触媒反応

U → P : 1次反応

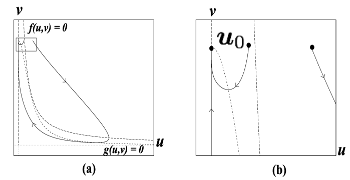
$$
\begin{cases}
\dfrac{du}{dt} = -au + u^2v \equiv f(u,v), \\
\dfrac{dv}{dt} = h(1-v) - u^2v \equiv g(u,v).
\end{cases}
$$

132

Gray-Scottモデルのダイナミクス

$$
\begin{cases}
\dfrac{du}{dt} = \dfrac{1}{\varepsilon}\left(-au + vu^2\right), \\
\dfrac{dv}{dt} = h(1-v) - vu^2
\end{cases}
$$

$$\boldsymbol{u}_0 = (0,1)$$



Parameter : $a = 0.07, h = 0.018, \varepsilon = 1.0$

単安定興奮系

133

反応拡散系モデル (Gray-Scott model)

Supply

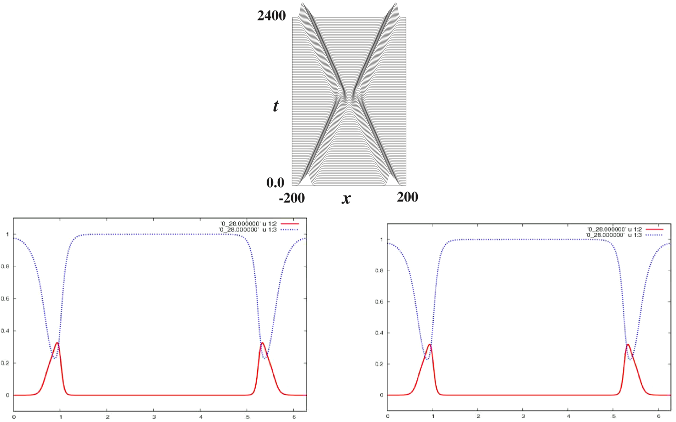
2U + V → 3U : Cubic autocatalytic reaction

U → P : First order reaction

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} - d_u \Delta u = -au + vu^2 \equiv f(u,v), \\
\dfrac{\partial v}{\partial t} - d_v \Delta v = h(1-v) - vu^2 \equiv g(u,v).
\end{cases}
$$

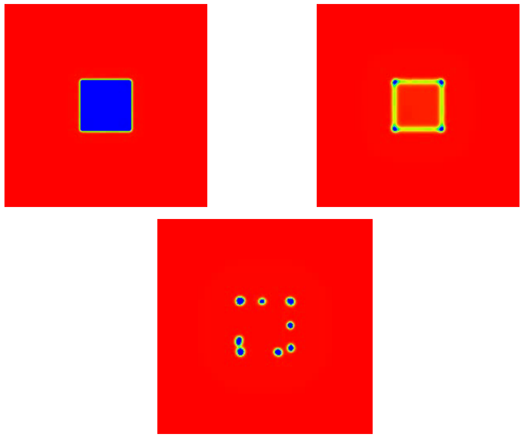
134

パルス進行波ダイナミクス



135

2D Pattern formation



136

Second order autocatalytic reaction-diffusion system

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u - au + uv, \\
\dfrac{\partial v}{\partial t} = d_v \Delta v + h(1-v) - uv.
\end{cases}
$$

空間一様解が安定になる…

137

発熱反応拡散系

供給

$$\mathrm{A} + \mathrm{O} \xrightarrow{k(T)} \mathrm{P} + \mathrm{Heat}$$

対流による放熱

$k(T) = \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$: Arrhenius reaction rate

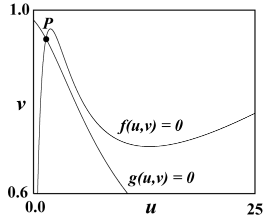
$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - u_{xx} = \dfrac{1}{\varepsilon}\left(-au + v\exp\left(\dfrac{u}{1+u/c}\right)\right) \equiv \dfrac{1}{\varepsilon}f(u,v) \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} - dv_{xx} = h(1-v) - v\exp\left(\dfrac{u}{1+u/c}\right) \equiv g(u,v) \end{cases}$$

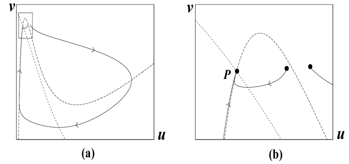
138

138

発熱反応モデルのダイナミクス

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt} = \dfrac{1}{\varepsilon}f(u,v) \\ \dfrac{dv}{dt} = g(u,v) \end{cases}$$





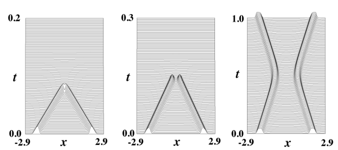
$\boldsymbol{u}_0 (= P) = (u_0, v_0)$

Parameter : a=2.0, c=5.0, h=45.0, ε =0.001

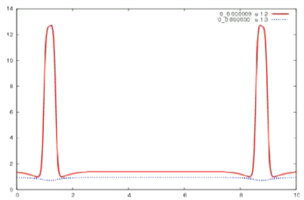
Mono-stable excitable system

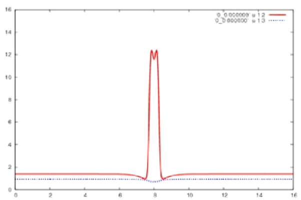
139

パルス波ダイナミクス



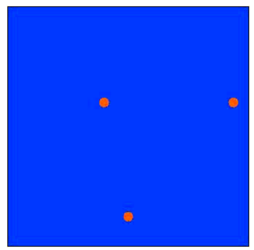
d=2.0 d=3.1 d=4.5

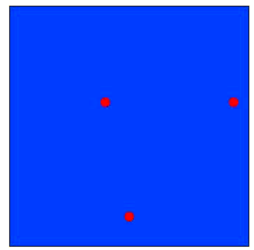




140

2次元パターンダイナミクス





141

講義の予定

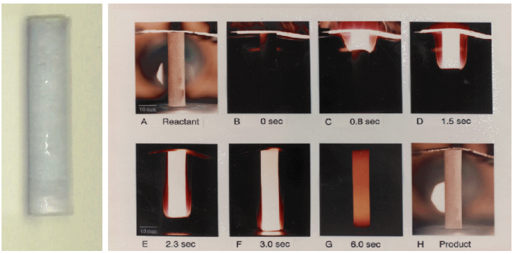
1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
   1. 力学系の基礎
   2. 数値計算の基礎
   3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
   1. 化学反応モデル（BZ反応等）
   2. 燃焼合成反応
   3. ロウソク振動子
   4. 自走粒子運動の数理モデル
   5. 樟脳酸–リン酸系モデル
   6. 集団運動
   7. 表皮細胞モデル
   8. Proneural wave（反応拡散系の応用）

143

材料科学への応用
燃焼合成反応

144

定常燃焼波
Combustion wave



(in laboratory)

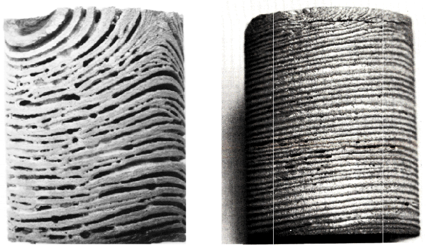
145

Experiments

Ti + Ni → TiNi

146

らせん燃焼波の痕跡



(in laboratory)

Signature of helical combustion wave

147

燃焼反応のモデル方程式

$$\mathrm{X} + \mathrm{Y} \xrightarrow{k(T)} \mathrm{P} + \boxed{\mathrm{Heat}}$$

温度上昇

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + v^N f(u; E_{\mathrm{app}}), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = -v^N f(u; E_{\mathrm{app}}). \end{cases}$$

u ：温度

v ：固形燃料密度

$$f(u; E_{\mathrm{app}}) = \begin{cases} 0, & u < u_{ig}, \\ \exp\left(-\dfrac{E_{\mathrm{app}}}{u_0 + u}\right), & u \geq u_{ig}. \end{cases}$$

148

数理モデルの導出１

$$m\mathrm{A} + n\mathrm{B} \xrightarrow{k(T)} \mathrm{P} + \mathrm{Heat}$$

基本数理モデル

$$\begin{cases} a_t = -mk(T)a^m b^n, \\ b_t = -nk(T)a^m b^n, \\ C_p \rho T_t = \omega k(T) a^m b^n. \end{cases}$$

$$k(T) = \begin{cases} k_0 \exp\left(-\dfrac{E_{\mathrm{app}}}{RT}\right), & T \geq T_{\mathrm{ig}}, \\ 0, & T < T_{\mathrm{ig}}. \end{cases}$$

149

数理モデルの導出２

モデル方程式から

$$na_t - mb_t = 0$$

$$\int_0^t \left(n\frac{d}{dt}a - m\frac{d}{dt}b\right)dt = 0$$

$$na(t) - mb(t) = na(0) - mb(0)$$

燃焼合成が終わったとき，
すべての材料が生成物質に変化しなければならない

$$\boxed{\lim_{t\to\infty}(na(t) - mb(t)) = 0}$$

150

数理モデルの導出３

従って

$$a(0) : b(0) = m : n$$
$$na(t) = mb(t)$$

第一式に代入すると

$$\frac{d}{dt}a = -mk(T)a^m(\frac{n}{m})^n a^n$$

従って，基本モデルは次のようになる

$$\begin{cases} a_t = -mk(T)\left(\frac{n}{m}\right)^n a^{m+n}, \\ C_p\rho T_t = d_T\Delta T + \omega k(T)\left(\frac{n}{m}\right)^n a^{m+n} \end{cases}$$

151

数理モデル

燃焼反応時間においては固体拡散は無視することができるので
熱拡散のみを考慮する

$$\begin{cases} a_t = -mk(T)\left(\frac{n}{m}\right)^n a^{m+n}, \\ C_p\rho T_t = d_T\Delta T + \omega k(T)\left(\frac{n}{m}\right)^n a^{m+n} \end{cases}$$

$$k(T) = \begin{cases} k_0 \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{app}}}{RT}\right), & T \geq T_{\mathrm{ig}}, \\ 0, & T < T_{\mathrm{ig}}. \end{cases}$$

152

数理モデル

$$\mathrm{Ti} + \mathrm{C} \xrightarrow{k(T)} \mathrm{TiC} + \mathrm{Heat}$$

に対する数理モデルは以下のようになる：

$$\begin{cases} a_t = -k(T)a^2, \\ C_p\rho T_t = d_T\Delta T + \omega k(T)a^2 \end{cases}$$

$$k(T) = \begin{cases} k_0 \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{app}}}{RT}\right), & T \geq T_{\mathrm{ig}}, \\ 0, & T < T_{\mathrm{ig}}. \end{cases}$$

153

無次元化された燃焼合成モデル

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d\Delta u + \omega v^2 f(u; E_{\mathrm{app}}), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -v^2 f(u; E_{\mathrm{app}}), \end{cases}$$

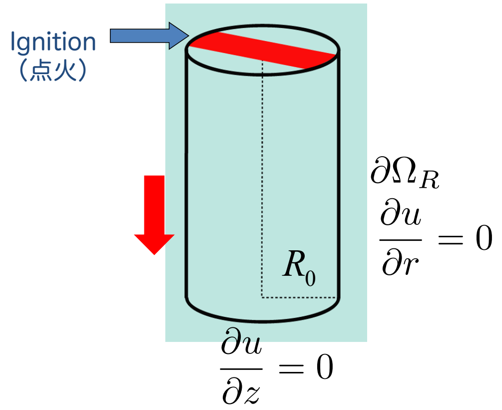
$$f(u; E_{\mathrm{app}}) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{E_{\mathrm{app}}}{u+u_0}\right), & u \geq u_{\mathrm{ig}}, \\ 0, & u < u_{\mathrm{ig}}. \end{cases}$$

u：Temperature（温度）

v：Density of solid fuel（固体反応物質密度）

154

3次元円柱領域



155

E_{app} : Small

定常燃焼波は安定である

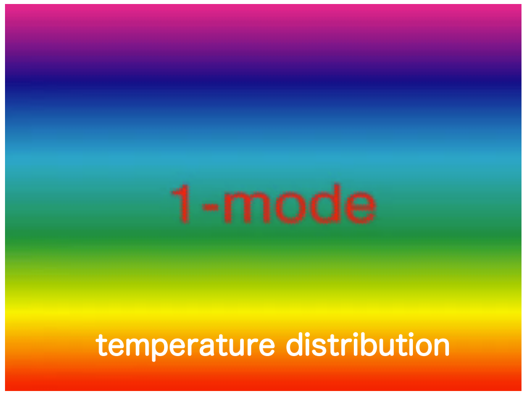
156

E_{app} : Large

R_0 が小さいとき，脈動進行波が出現する

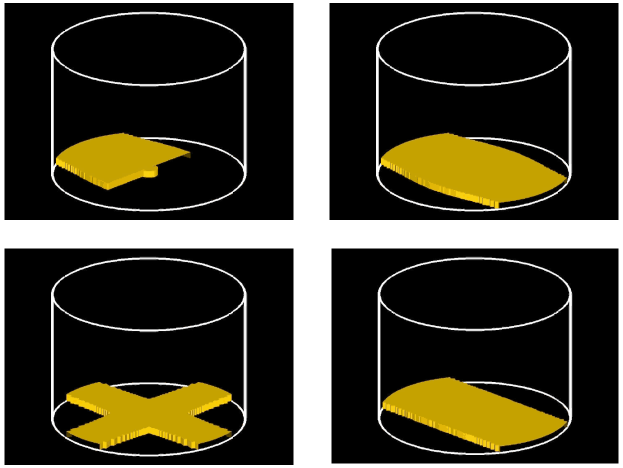
157

らせん燃焼波の出現



158

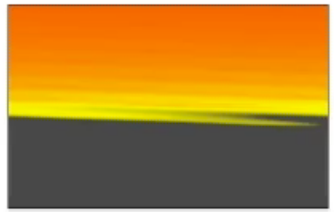
等温面表示



159

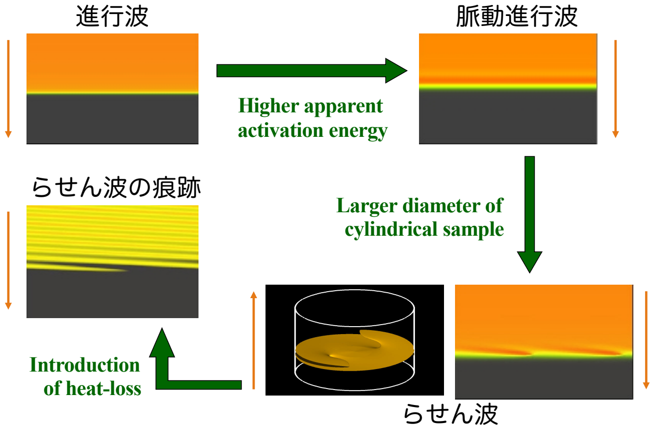
らせん燃焼波の痕跡

放熱効果の導入 $\dfrac{\partial u}{\partial r} = -\lambda u$



160

らせん燃焼波(1998)



161

数理モデルから数学モデルへ

進行波から脈動（周期振動）進行波への分岐現象を起こすことが3次元でのらせん進行波を生み出すのか？

燃焼合成反応モデル以外にもそのような例はあるか？

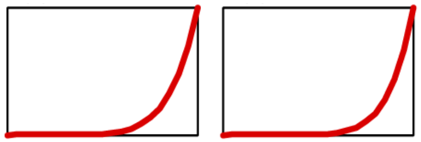
162

自己触媒反応系（Metcalf et al.1994）

$$m\mathrm{U} + \mathrm{V} \longrightarrow (m+1)\mathrm{U}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = d\Delta u + v f(u), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = -v f(u). \end{cases} \qquad f(u) = u^m$$

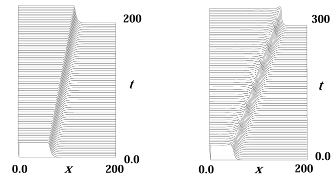
m=7 m=8



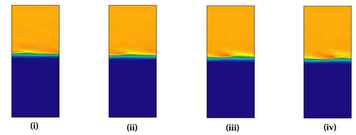
163

らせん波の出現

進行波 脈動進行波

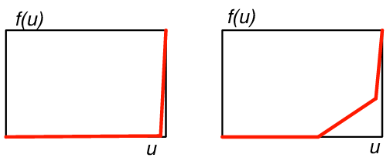


Appearance of helical waves



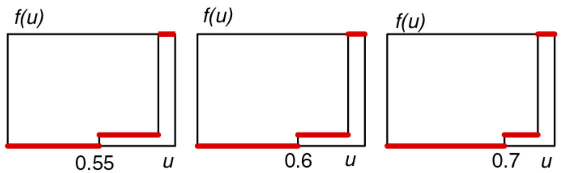
164

もっと簡単な非線形項



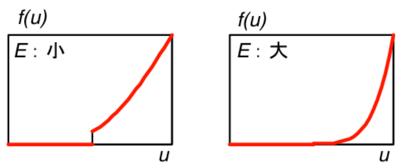
piecewise linear

piecewise constant



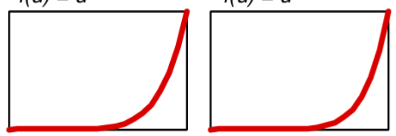
165

数値計算結果 (1)



planer traveling wave **helical wave**

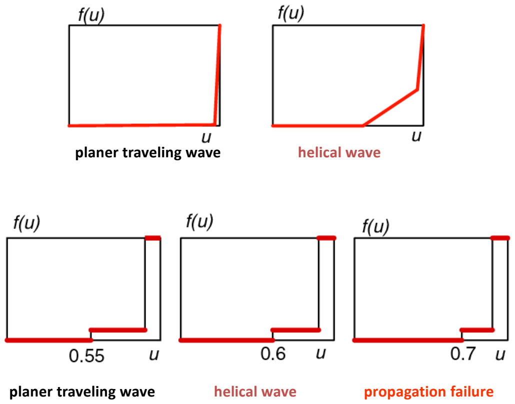
$f(u) = u^7$ $f(u) = u^8$



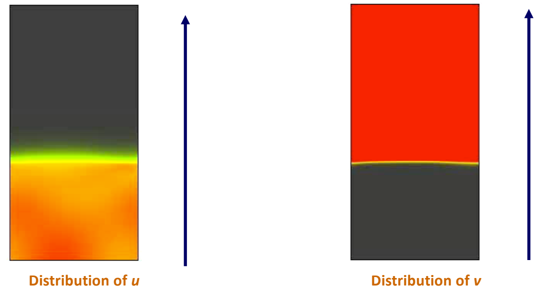
planer traveling wave **helical wave**

166

数値計算結果 (2)



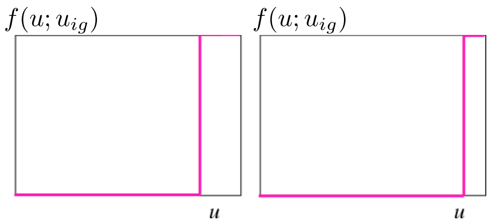
螺旋進行波の出現する新しい非線形項



$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + vf(u), \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -vf(u) \qquad f(u) = \frac{1}{2}(1 + \tanh\frac{u - u_0}{\delta})$$

Extremely simple case (1-step function)

$$f(u; u_{ig}) = \begin{cases} F, & u \geq u_{ig}, \\ 0, & u < u_{ig}. \end{cases} \qquad (F\text{: positive constant})$$



平面進行波　　らせん波の出現

Traveling wave for 1-step function

進行波解の構成

$$u(t,x) = U(x - st), \ v(t,x) = V(x - st)$$

$$u(t,-\infty) = 1, \ v(t,-\infty) = 0, \ u(t,\infty) = 0, \ v(t,\infty) = 1$$

$$s = (F/u_{ig} - F)^{1/2}$$

$$U(z) = 1 - \frac{s^2}{s^2 + F} e^{Fz/s}, \ V(z) = e^{Fz/s} \quad (z < 0)$$

$$U(z) = u_{ig} e^{-sz}, \ V(z) = 1 \quad (z > 0)$$

Eigenvalue problem in the 2D band shaped domain

(periodic B. C. for the y-direction)

$$\begin{cases}\varphi_{xx}+\varphi_{yy}+s\varphi_x+F\psi=\lambda\varphi \\ s\psi_x-F\psi=\lambda\psi\end{cases} \quad (x<0,\, 0<y<L)$$

$$\begin{cases}\varphi_{xx}+\varphi_{yy}+s\varphi_x=\lambda\varphi \\ s\psi_x=\lambda\psi\end{cases} \quad (x>0,\, 0<y<L)$$

$$\begin{cases}\varphi_x(+0,y)-\varphi_x(-0,y)=\omega\varphi(0,y) \\ s(\psi(+0,y)-\psi(-0,y))=-\omega\varphi(0,y)\end{cases} \quad (0<y<L)$$

$$\omega=-F/(su_{ig})$$

171

For the 2D band shaped domain

Since $0<y<L$ and the periodic boundary condition for the y-direction, we put

$$\varphi(x,y)=e^{iky}\tilde{\varphi}(x), \quad \psi(x,y)=e^{iky}\tilde{\psi}(x)$$

$$\boxed{\varphi\Rightarrow\tilde{\varphi}, \quad \psi\Rightarrow\tilde{\psi}} \qquad k=\frac{2\pi n}{L} \quad (n=0,1,2,\ldots)$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\varphi''-k^2\varphi+s\varphi'+F\psi=\lambda\varphi, \quad s\psi'-F\psi=\lambda\psi \quad (x<0)\\ &\varphi''-k^2\varphi+s\varphi'=\lambda\varphi, \quad s\psi'=\lambda\psi \quad (x>0)\\ &\varphi'(+0)-\varphi'(-0)=\omega\varphi(0), \quad s(\psi(+0)-\psi(-0))=-\omega\varphi(0)\end{aligned}}$$

172

For the 3D cylindrical domain

3D cylindrical domain $\{(x,r,\theta): x\in\mathbf{R}, 0\le r<R, 0\le\theta<2\pi\}$

j_{nm}: m-th root of $\dfrac{dJ_n}{dr}=0$ $\quad$ ($J_n(r)$: 1st kind Bessel function)

$$\varphi(x,r,\theta)=e^{in\theta}J_n\left(\frac{j_{nm}}{R}r\right)\tilde{\varphi}(x), \quad \psi(x,r,\theta)=e^{in\theta}J_n\left(\frac{j_{nm}}{R}r\right)\tilde{\psi}(x)$$

$$\boxed{\varphi\Rightarrow\tilde{\varphi}, \quad \psi\Rightarrow\tilde{\psi}} \qquad k=\frac{j_{nm}}{R} \quad (n=0,1,\cdots;m=1,2,\cdots)$$

$$\boxed{\begin{aligned}&\varphi''-k^2\varphi+s\varphi'+F\psi=\lambda\varphi, \quad s\psi'-F\psi=\lambda\psi \quad (x<0)\\ &\varphi''-k^2\varphi+s\varphi'=\lambda\varphi, \quad s\psi'=\lambda\psi \quad (x>0)\\ &\varphi'(+0)-\varphi'(-0)=\omega\varphi(0), \quad s(\psi(+0)-\psi(-0))=-\omega\varphi(0)\end{aligned}}$$

173

Critical eigenvalues

If $\lambda=0$ **then** $k=0, \ \varphi=U', \ \psi=V'$

There are three critical eigenvalues including the above one, and they are determined by

$$\lambda=\kappa(\kappa-1)s^2-k^2$$

where κ **is a solution of**

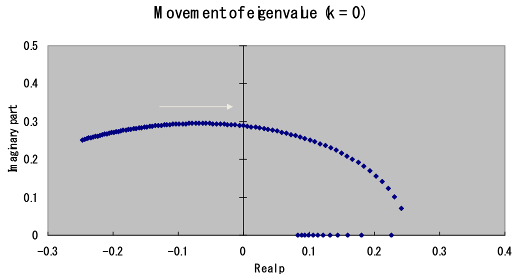
$$\{(1-u_{ig})\kappa^2+u_{ig}(1-k^2/F)\}\{2-u_{ig}-2(1-u_{ig})\kappa\}-u_{ig}=0$$

174

Critical eigenvalues

The eigenvalue corresponding to $\lambda = 0$ for $k = 0$ has a negative real part.
The others are compex conjugate, and behave as follow:

$\mathrm{Re}\,\lambda < 0$ if u_{ig} is small, $\mathrm{Re}\,\lambda$ increases with u_{ig},
λ acrosses the imaginary axis at $u_{ig}^* = u_{ig}(k)$

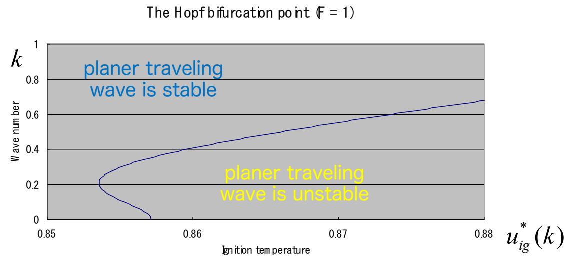


175

Hopf 分岐曲線

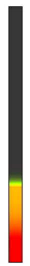
The problem is that the function $u_{ig}^*(k)$ is monotone increasing,
or it has a minimum value at some $k > 0$.

$k = \dfrac{2\pi n}{L} \quad (n = 0,1,2,\ldots)$ n: number of reaction spots

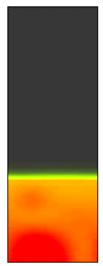


176

数値的にチェック



Distribution of *u*



Distribution of *u*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + vf(u), \quad \frac{\partial v}{\partial t} = -vf(u) \qquad f(u) = \frac{1}{2}\left(1 + \tanh\frac{u - u_0}{\delta}\right)$$

177

まとめ

数理モデル（燃焼合成反応モデル）

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = d\Delta u + v^2 f(u; E_{\mathrm{app}}), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = -v^2 f(u; E_{\mathrm{app}}), \end{cases} \qquad f(u; E_{\mathrm{app}}) = \begin{cases} \exp\left(-\dfrac{E_{\mathrm{app}}}{u + u_0}\right), & u \geq u_{\mathrm{ig}}, \\ 0, & u < u_{\mathrm{ig}}. \end{cases}$$

進行波→脈動進行波→らせん波

数学モデル

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = d\Delta u + vf(u), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = -vf(u). \end{cases}$$

$$f(u) = u^m$$

$$f(u) = \frac{1}{2}\left(1 + \tanh\frac{u - u_0}{\delta}\right)$$

$$f(u; u_{ig}) = \begin{cases} F, & u \geq u_{ig}, \\ 0, & u < u_{ig}. \end{cases}$$

分岐解析：波数に依存したHopf分岐
（Wave 分岐）

178

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
   1. 力学系の基礎
   2. 数値計算の基礎
   3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
   1. 化学反応モデル（BZ反応等）
   2. 燃焼合成反応
   3. ロウソク振動子
   4. 自走粒子運動の数理モデル
   5. 樟脳酸–リン酸系モデル
   6. 集団運動
   7. 表皮細胞モデル
   8. Proneural wave（反応拡散系の応用）細胞サイズの有限性重要

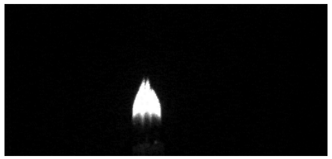
179

ロウソク振動子の数理モデル

180

ロウソク振動子の作り方

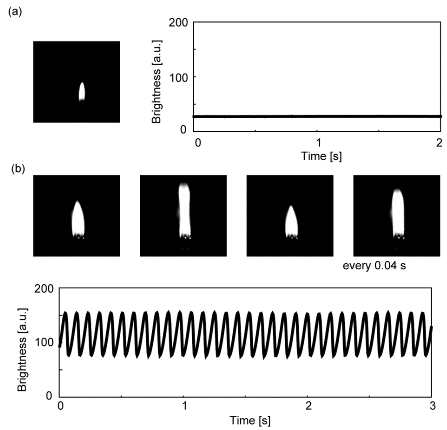
１本のロウソクは
定常燃焼



３本のロウソクを
近づけると振動燃焼

181

実験結果

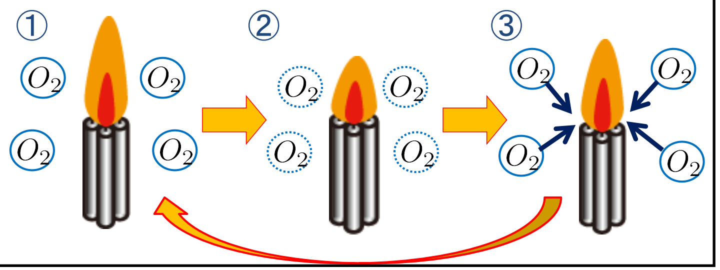


182

なぜ振動するのか？

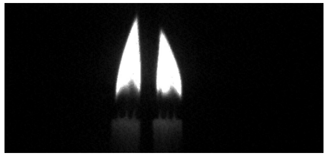
ロウソクの振動燃焼現象は，
次のように起こると考えられている．

①ロウの供給が過剰により，反応促進
②酸素不足により反応抑制
③酸素不足が解消

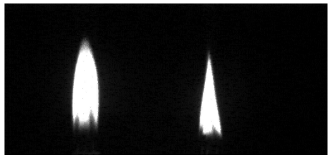


183

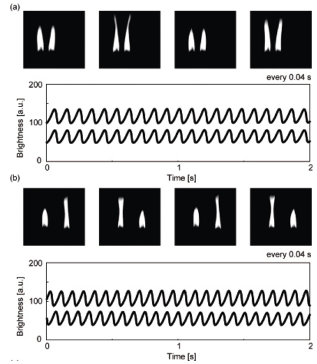
ロウソク振動子の引き込み現象



2cm



5cm



184

ロウソク振動子の数理モデル

1組のロウソク振動子は，次のような数理モデルで再現できる．

$$
\begin{cases}
C\dfrac{dT}{dt} = \underbrace{\boxed{\omega_1 h_1 (T_0 - T)}}_{\text{熱輸送}} + \underbrace{\boxed{\omega_1 ban \exp\left(-\dfrac{E}{RT}\right)}}_{\text{燃焼による熱生成}} - \underbrace{\boxed{\sigma_0 T^4}}_{\text{放射熱}}, \\[2ex]
\dfrac{dn}{dt} = \underbrace{\boxed{\omega_2 h_2 (n_0 - n)}}_{\text{酸素供給}} - \underbrace{\boxed{\omega_2 an \exp\left(-\dfrac{E}{RT}\right)}}_{\text{燃焼による損失項}},
\end{cases}
$$

T: 温度	a :ロウの供給率	C: 比熱	$\omega_1 \gg \omega_2 > 0$
T_0: 外部温度	h_1:放熱率	R: 気体定数	
n: 酸素濃度	h_2:酸素供給率	σ: ステファン・ボルツマン定数	
n_0: 外部酸素濃度	E :活性化エネルギー	b: ロウの単位変化当たりの熱変換率	

185

ロウソク振動子の数理モデル

先ほどの 1 組のロウソク振動子を 2 組考える．

放射の相互作用が働くと考えた場合，以下の方程式となる．

$for\ i,\ j = 1,\ 2.\ \ i \neq j$

放射による相互作用

$$
\begin{cases}
C\dfrac{dT_i}{dt} = \omega_1 h_1 (T_0 - T_i) + \omega_1 ban_i \exp\left(-\dfrac{E}{RT_i}\right) - \sigma_0 T_i^4 + \mu\sigma_0 T_j^4, \\[2ex]
\dfrac{dn_i}{dt} = \omega_2 h_2 (n_0 - n_i) - \omega_2 an_i \exp\left(-\dfrac{E}{RT_i}\right),
\end{cases}
$$

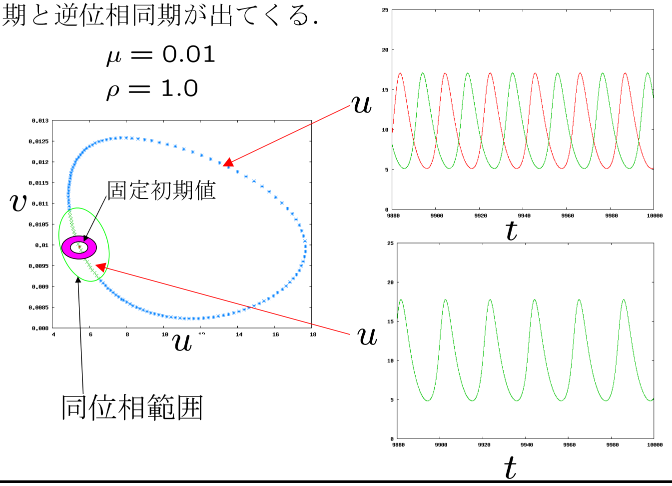
熱吸収率 $\mu = \dfrac{\mu_0}{L^2}\ (0 < \mu < 1)$

距離が離れる程，小さくなる．

186

μを小さくすると初期値の組み合わせによって同位相同期と逆位相同期が出てくる．

$\mu = 0.01$
$\rho = 1.0$



187

今回は物語

ロウソク振動子の同期振動現象に対する数理モデルの構成について話します．

特に，数理モデルを構成した思考過程を話します！
その思考過程が同期振動現象の数理的理解を与えることになるだろうと期待！

数理モデルの構成が“現象の本質探し”になるハズ！！

188

ロウソク引き込み現象の機構は何か？

- 燃焼（発熱）反応
  固体ロウ → 液体ロウ → 気化ロウ ＋ 酸素 → 熱生成
- 拡散現象（熱拡散，酸素拡散）
- 流体現象 （熱輸送と酸素輸送，対流現象）
- その他の作用（熱放射）

流れのない微小重力下においてもロウソクは燃焼するが
実験条件が非常に厳しい（すぐ消えてしまう）
実験的検証から同期現象を解明するのは困難！
→
数理モデルを作りながら要因の切り分けを行っていけば
逆位相同期現象の機構がわかるのではないか？

189

反応項の数理モデル化

- 燃焼（発熱）反応
  固体ロウ → 液体ロウ → 気化ロウ ＋ 酸素 → 熱生成
- 拡散現象（**熱拡散，酸素拡散**）
- 流体現象 （**熱輸送と酸素輸送，対流現象**）
- その他の作用（**熱放射**）

ロウの液化→毛管現象→気化→芯の部分で反応を省略する

190

数理モデル化

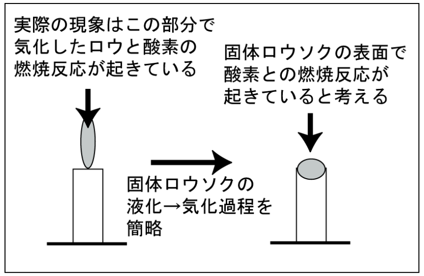


図２

T：温度
n：酸素濃度
a：ロウの供給率
$\boldsymbol{x}_1$：反応領域の中心
r：反応領域の半径
E：活性化エネルギー
R：気体定数

$$\Phi_1(T,n) = \begin{cases} an\exp(-\frac{E}{RT}), & |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_1| \le r, \\ 0, & |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_1| > r \end{cases}$$

ある領域内だけで燃焼反応が起きると仮定する

191

拡散現象の数理モデル化

- 燃焼（発熱）反応
  固体ロウ → 液体ロウ → 気化ロウ ＋ 酸素 → 熱生成
- 拡散現象**（熱拡散，酸素拡散）**
- 流体現象 **（熱輸送と酸素輸送，対流現象）**
- その他の作用**（熱放射）**

流れ効果を無視してモデルを作る
反応拡散系モデルの極意
（最小限の要素だけで現象の再現を目指す）

注意：再現されたとしても現象の本質を
記述してるとは限らない！

192

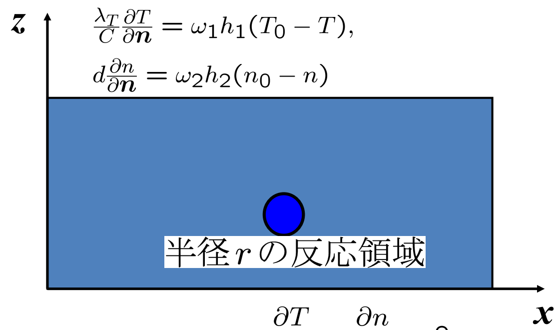
反応拡散系モデル

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T \Delta T + \omega_1 \beta \Phi_1(T,n)$$
$$\frac{\partial n}{\partial t} = d\Delta n - \omega_2 \Phi_1(T,n)$$
$$\Phi_1(T,n) = \begin{cases} an\exp(-\frac{E}{RT}), & |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_1| \le r, \\ 0, & |\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_1| > r \end{cases}$$

ただしわずかな反応によって生成される熱量は非常に多いと仮定して $\omega_1 >> \omega_2$ とする

193

境界条件



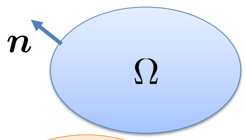
$$\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{n}} = \frac{\partial n}{\partial \boldsymbol{n}} = 0$$

栄－三村の結果から
パラメータを適切に選ぶことで振動現象を再現することが
可能だろう！

194

栄・三村の結果

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T \Delta T + \omega_1 \beta n \exp(-\frac{E}{RT})$$
$$\frac{\partial n}{\partial t} = d\Delta n - \omega_2 n \exp(-\frac{E}{RT})$$

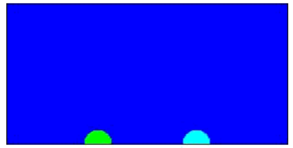


$$T = 0,$$
$$d\frac{\partial n}{\partial \boldsymbol{n}} = \omega_2 h_2 (n_0 - n)$$

低温定常解 ⟷ 振動解 ⟷ 高温定常解

195

大きな反応領域を２つ置く



196

２本のロウソク振動子モデル（ＰＤＥ）拡散相互作用のみ

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T \Delta T + \omega_1 \beta \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i)$$
$$\frac{\partial n}{\partial t} = d\Delta n - \omega_2 \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i)$$
$$\Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} an\exp(-\frac{E}{RT}), & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| \le r, \\ 0, & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| > r. \end{cases}$$

ただし,$||\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j|| > 2r, i = 1, 2.$

197

数値シミュレーション

まず検証すべきこと

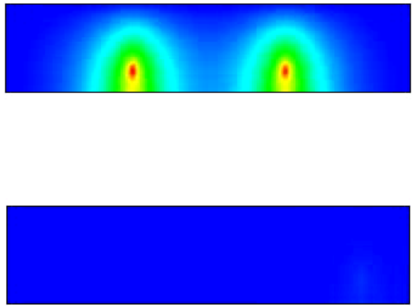
実験：１本のロウソクは定常燃焼する
→
モデル：反応半径が小さいときは定常解あるいは
２つの反応領域の距離が遠いと定常解

実験：２本のロウソクを近づけると振動燃焼
→
モデル：２つの反応領域を近くすると振動解

以降の数値計算はすべて無次元化した方程式を用いている

198

２つの反応領域の距離に依存した現象



199

距離に依存して逆位相同期現象が再現されるか？

いくら計算しても
同位相同期現象しか再現されませんでした
逆位相同期現象が見つからない！

200

拡散＋放射の数理モデル化

- 燃焼（発熱）反応

  固体ロウ → 液体ロウ → 気化ロウ ＋ 酸素 → 熱生成
- 拡散現象（熱拡散，酸素拡散）
- 流体現象 （熱輸送と酸素輸送，対流現象）
- その他の作用（熱放射）

拡散相互作用だけでは無理なら放射を入れる！
あくまでも流れ効果を無視してモデルを作る（無視したい）
（最小限の要素だけで現象の再現を目指す）

201

放射相互の入った ロウソク振動子モデル（ＰＤＥ）

$$C\frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_T \Delta T + \omega_1 \beta \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i) + \Phi_2(T; \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) + \Phi_2(T; \boldsymbol{x}_j, \boldsymbol{x}_i)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = d\Delta n - \omega_2 \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i)$$

$$\Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i) = \begin{cases} an\exp(-\frac{E}{RT}), & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| \le r, \\ 0, & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| > r. \end{cases}$$

$$\Phi_2(T; \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \begin{cases} \sigma\left(\frac{\delta}{L^2} T(t, \boldsymbol{x}_j)^4 - T(t, \boldsymbol{x})^4\right), & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| \le r, \\ 0, & |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i| > r. \end{cases}$$

ただし，σ はステファン－ボルツマン定数.

202

なんと…

もならない！
どうしても同位相同期現象しか出ません．
何故だろう…

203

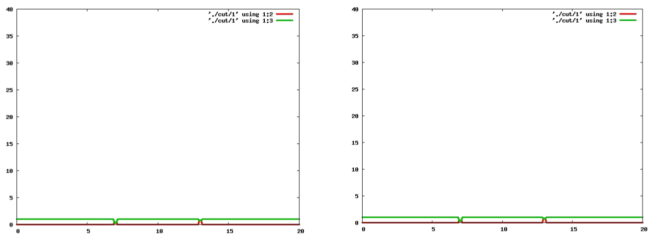
強引に縮約化したPDEモデル

z方向に一様だと仮定して（細長い， z 方向の拡散が十分大）
変数 z に対して平均を取る

$$
\begin{aligned}
C\frac{\partial T}{\partial t} &= \lambda_T T_{xx} + \omega_1 h_1 (T_0 - T) \\
&\quad + \omega_1 \beta \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i) + \Phi_2(T; \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) + \Phi_2(T; \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_1), \\
\frac{\partial n}{\partial t} &= d n_{xx} + \omega_2 h_2 (n_0 - n) - \omega_2 \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T, n; \boldsymbol{x}_i)
\end{aligned}
$$

204

逆位相同期が出現！



初期値を適当に選べばほとんど逆位相同期に収束する
ようにパラメータを選ぶことができる

205

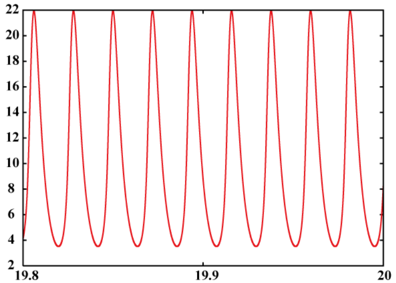
放射と拡散相互作用のある ODEモデル

$$
\begin{aligned}
C\frac{dT_i}{dt} &= \omega_1 h_1 (T_0 - T_i) + \omega_1 \beta a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i}) \\
&\quad + d_T (T_j - T_i) + \sigma \left(\frac{\delta}{L^2} T_j^4 - T_i^4 \right) \\
\frac{dn_i}{dt} &= \omega_2 h_2 (n_0 - n_i) - \omega_2 a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i}) \\
&\quad + d_n (n_j - n_i)
\end{aligned}
$$

ただし，$L = ||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2||, \quad i, j = 1, 2$

206

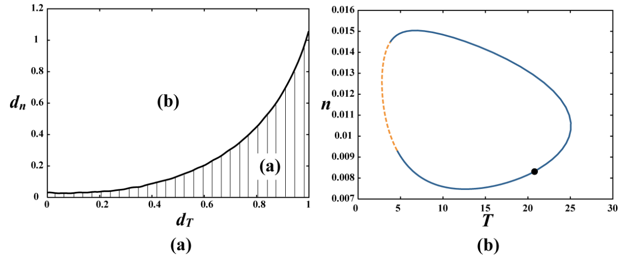
適当に拡散相互作用があると ほとんどの初期値に対して同位相同期



非常にうまく初期値を選べば逆位相同期現象が見られる
→ 物理現象としてほとんど観測されないハズ！

207

Autoによる分岐解析



すべての領域で同位相同期解は安定である
領域(a)で逆位相同期解と同位相同期解が共に安定となっている

208

放射相互作用だけのODEモデル

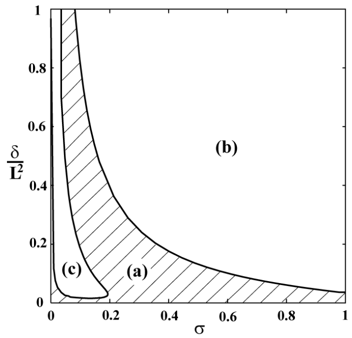
$$
\begin{aligned}
C\frac{dT_i}{dt} &= \omega_1 h_1(T_0 - T_i) + \omega_1 \beta a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i}) \\
&\quad + \sigma\left(\frac{\delta}{L^2}T_j^4 - T_i^4\right)
\end{aligned}
$$

$$
\frac{dn_i}{dt} = \omega_2 h_2(n_0 - n_i) - \omega_2 a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i})
$$

ただし，$L = ||\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2||, \quad i, j = 1, 2$

209

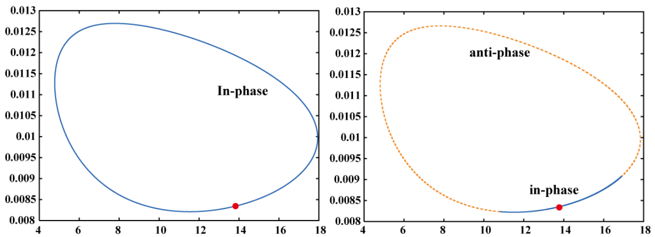
Autoによる分岐解析



すべての領域で同位相同期解は安定である
領域(a)で逆位相同期解と同位相同期解が共に安定となっている

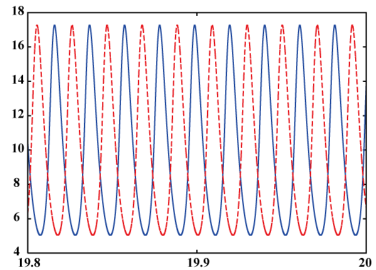
210

初期値の位相差による同期の違い



211

逆位相同期が再現される



適当にパラメータを選べば,
ほとんどの初期値に対して逆位相同期に収束する
→
物理現象として再現される可能性が高い！

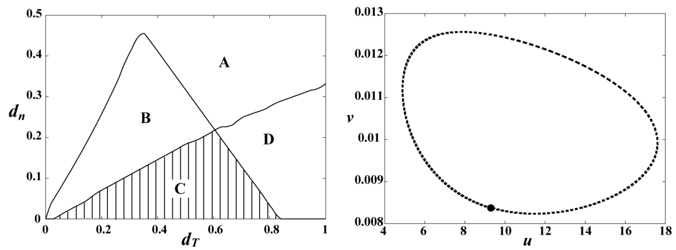
212

拡散相互作用とわずかな熱放射

$$
\begin{aligned}
C\frac{dT_i}{dt} &= \omega_1 h_1(T_0 - T_i) + \omega_1 \beta a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i}) \\
&\quad + d_T(T_j - T_i) - \sigma T_i^4 \\
\frac{dn_i}{dt} &= \omega_2 h_2(n_0 - n_i) - \omega_2 a n_i \exp(-\frac{E}{RT_i}) \\
&\quad + d_n(n_j - n_i)
\end{aligned}
$$

213

逆位相同期解だけが安定な領域の出現



214

何故だろう…

- 縮約PDEでは逆位相同期を起こす初期値を見つけることができた
  - 拡散相互作用はないように見える
- 放射相互作用ODEモデルでは逆位相同期に漸近する初期値の範囲が広くとれる
  - ただし，同位相同期解は常に安定
- 放射項が入った拡散相互作用ODEモデルでは逆位相同期だけが安定な場合がある
  - ただし、拡散相互作用係数は小さい
- ２次元PDEモデルでは逆位相同期を起こす初期値の発見が困難

拡散相互作用が逆位相同期現象を不安定化させている？

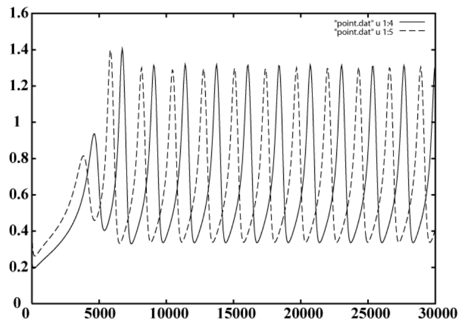
215

仮説検証 その１

- ｘ軸方向の拡散係数を非常に小さくした数値計算を行えば，逆位相同期は出るはず！
- 非常に離れた２本のロウソクを仮定することになっているので現実の系では起こりえないが…

216

数値計算結果



217

流れ効果の導入（するしかない）

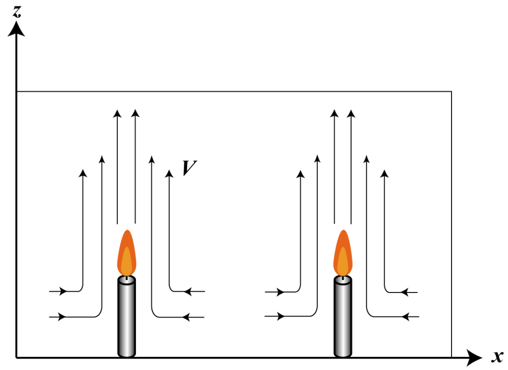
移流効果を導入することで熱輸送や酸素輸送を大きくして、ｘ軸方向の拡散相互作用を弱くする

$$
\begin{aligned}
C\frac{\partial T}{\partial t} &= \lambda_T \Delta T + \omega_1 \beta \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T,n;\boldsymbol{x}_i) \\
&\quad + \Phi_2(T;\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2) + \Phi_2(T;\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_1) - \boldsymbol{V}\cdot\nabla T \\
\frac{\partial n}{\partial t} &= d\Delta n - \omega_2 \sum_{i=1}^{2} \Phi_1(T,n;\boldsymbol{x}_i) - \boldsymbol{V}\cdot\nabla n
\end{aligned}
$$

ただし，$\boldsymbol{V} = (v_x, v_y)$

218

流速Vを図のように与える



219

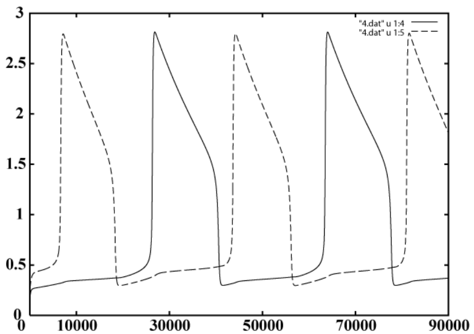
仮説検証 その２

- 移流効果により熱をｚ軸方向に輸送する
- また，ｘ軸方向は各ロウソク向けて冷たい空気と酸素を輸送する

熱対流方程式を結合する前段階のモデルに対応してるはず

220

数値計算結果



221

まとめ（状況証拠の積み重ね）数値実験を信じると

- 流れの効果

  ロウソク間の熱拡散や酸素濃度の拡散相互作用を弱くする

- 逆位相同期の機構

  放射による相互作用＋流れの効果

  弱い拡散相互作用＋放射＋流れの効果

- 実験的検証の課題

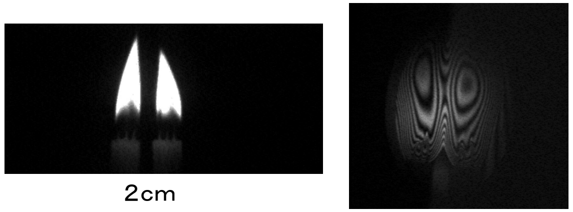
  放射相互作用をなくしても逆位相同期が起こるか？

- 数理モデルによる検証課題

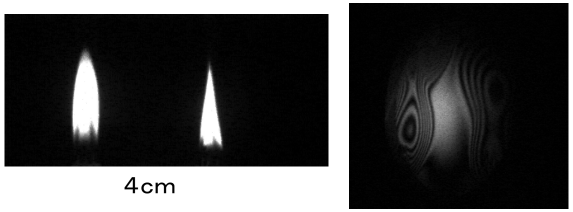
  熱対流と結合したモデルでも逆位相同期が再現できるのか？

222

ロウソク振動子の引き込み現象



2cm



4cm

223

ロウソク振動子の数理モデル

1組のロウソク振動子は，次のような数理モデルで再現できる．

$$
\begin{cases}
C\dfrac{dT}{dt} = \underbrace{\boxed{\omega_1 h_1 (T_0 - T)}}_{\text{熱輸送}} + \underbrace{\boxed{\omega_1 ban \exp\left(-\dfrac{E}{RT}\right)}}_{\text{燃焼による熱生成}} - \underbrace{\boxed{\sigma_0 T^4}}_{\text{放射熱}}, \\[2ex]
\dfrac{dn}{dt} = \underbrace{\boxed{\omega_2 h_2 (n_0 - n)}}_{\text{酸素供給}} - \underbrace{\boxed{\omega_2 an \exp\left(-\dfrac{E}{RT}\right)}}_{\text{燃焼による損失項}},
\end{cases}
$$

T: 温度　a :ロウの供給率　C: 比熱　$\omega_1 \gg \omega_2 > 0$

T_0: 外部温度　h_1:放熱率　R: 気体定数

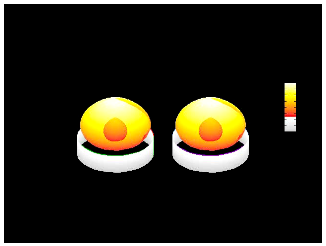
n: 酸素濃度　h_2:酸素供給率　σ: ステファン・ボルツマン定数

n_0: 外部酸素濃度　E :活性化エネルギー　b: ロウの単位変化当たりの熱変換率

227

数理モデルによるの同期現象の再現

輻射相互作用を仮定した場合



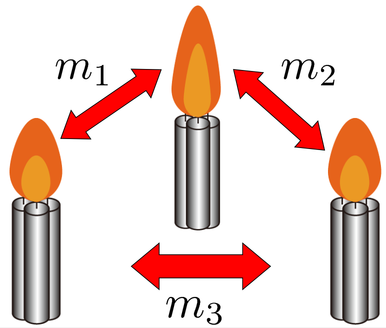
距離が近い場合
同位相同期解

距離が離れている場合
逆位相同期解

228

三組のロウソク振動子の相互作用

熱吸収率を $m_1 = m_2 = m_3$ として考え，
それぞれの距離を等距離，
つまり正三角形となるように考えて計算する．

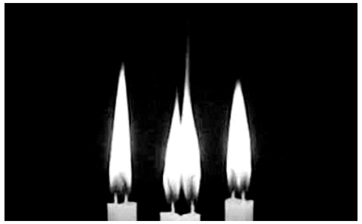


229

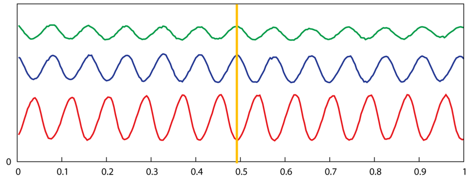
ロウソク振動子の同期現象

・実験動画

振動子間距離 $5cm$



$200[fps]$

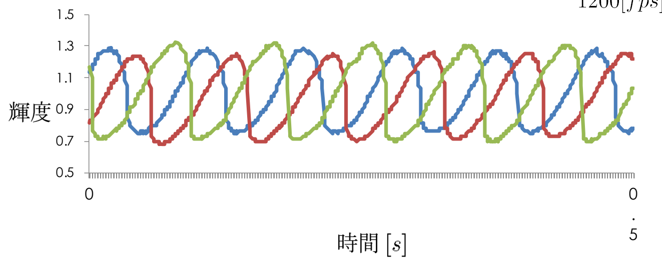


230

ロウソク振動子の同期現象

・実験動画　振動子間距離 $6.5cm$

$1200[fps]$



231

3組のロウソク振動子モデル

$for\ i, j, k = 1, 2, 3\ (i \neq j, i \neq k, j \neq k)$

$$\begin{cases} \dfrac{dT_i}{dt} = -T_i + J\exp\left(\dfrac{T_i}{1+\frac{T_i}{c_1}}\right) a_i n_i - \rho\left(1+\dfrac{T_i}{c_1}\right)^4 + \rho\mu\left(1+\dfrac{T_j}{c_1}\right)^4 + \rho\mu\left(1+\dfrac{T_k}{c_1}\right)^4 \\ \dfrac{dn_i}{dt} = H(1-n_i) - I\exp\left(\dfrac{T_i}{1+\frac{T_i}{c_1}}\right) a_i n_i \\ \dfrac{da_i}{dt} = F\exp\left(\dfrac{T_i}{E+\frac{T_i}{c_0}}\right)(1-a_i) - G\exp\left(\dfrac{T_i}{1+\frac{T_i}{c_1}}\right) a_i n_i. \end{cases}$$

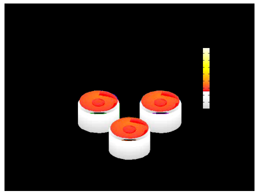
放射による相互作用

μ: 熱吸収率 $(0 < \mu < 1)$

距離が離れる程，小さくなる．

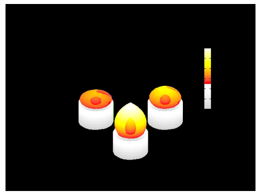
232

数理モデルから得られた結果



相互作用が強い場合

相互作用が弱い場合



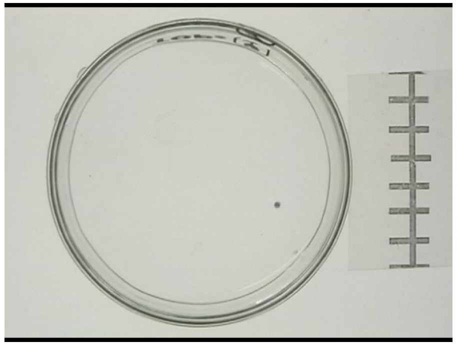
相互作用が
非常に弱い場合

233

自己駆動粒子の数理モデル

234

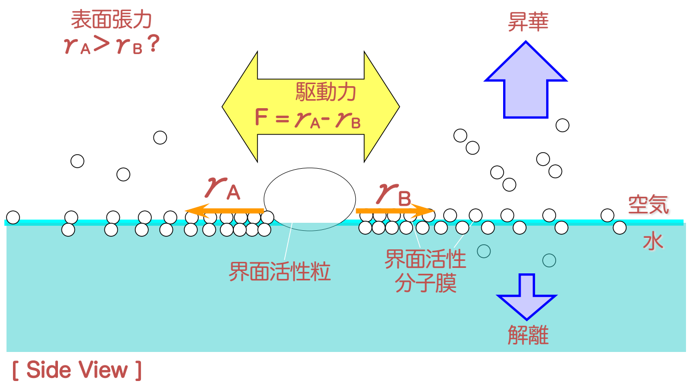
水面上での界面活性粒子の運動



等速運動

235

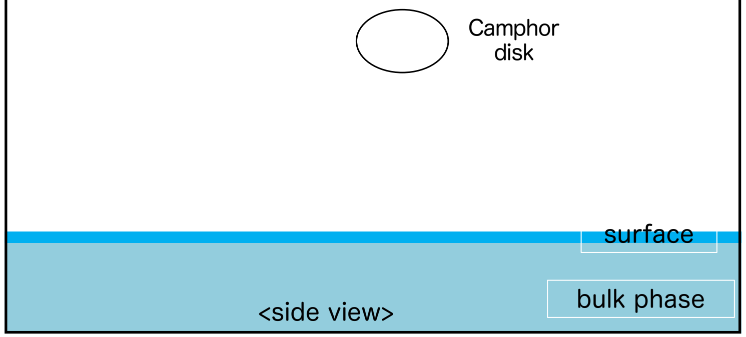
界面活性剤粒子運動の模式図



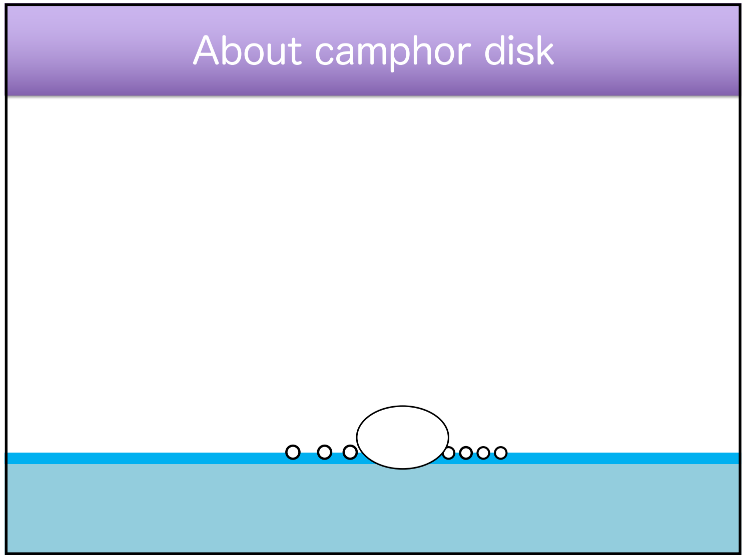
236

About camphor disk

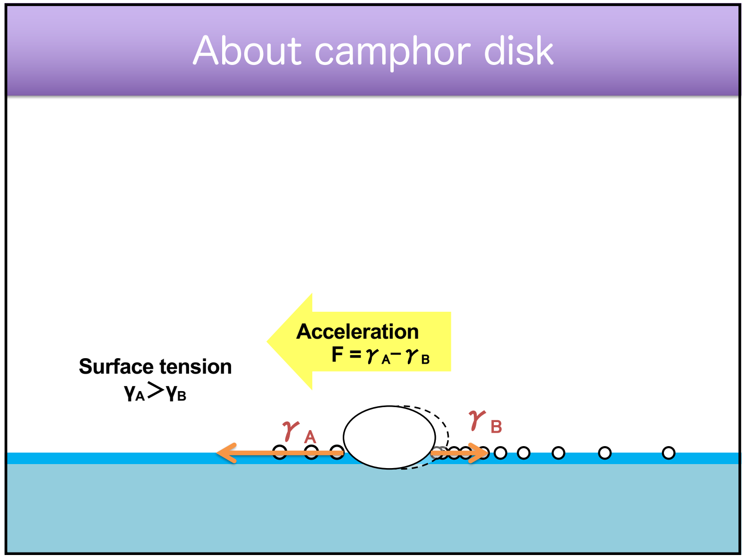
The basic mechanisms of the camphor disk motion:



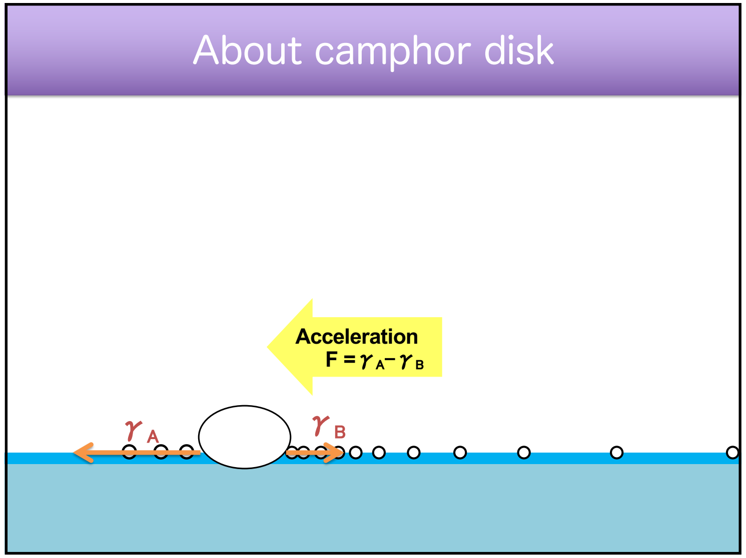
237



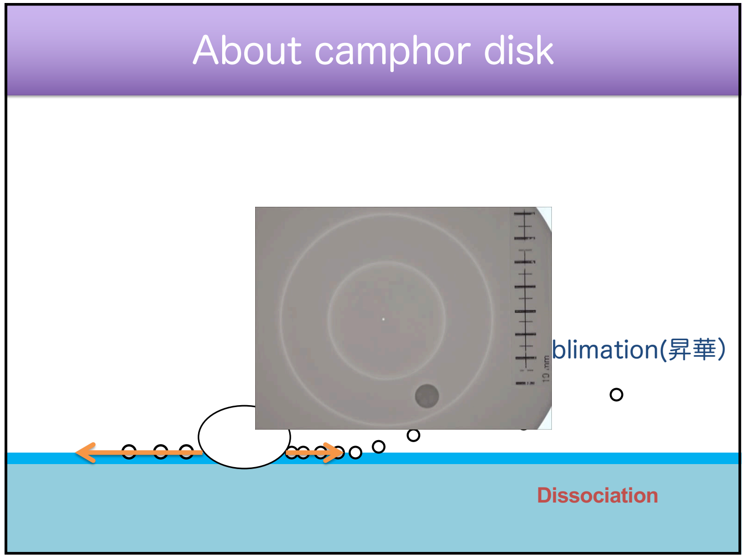
238



239

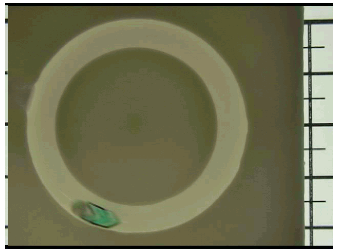


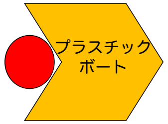
240



241

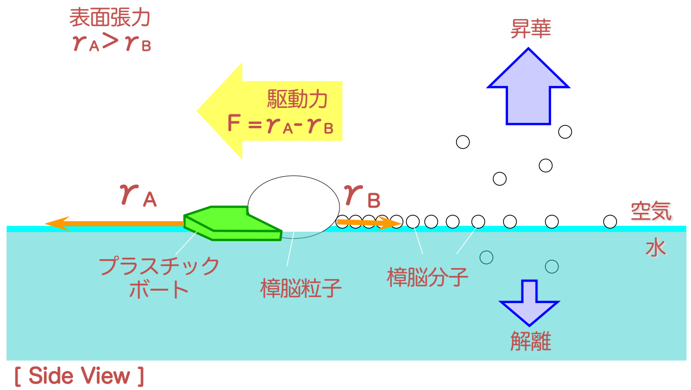
樟脳船運動の実験





242

樟脳船運動の模式図



243

重要な変数

説明

樟脳粒子から樟脳膜が展開される.
樟脳膜の密度ゆらぎによって表面張力が
樟脳円板周囲で異なる.
円板周囲で膜密度の最も低いところが
表面張力は強いので，その方向に樟脳円板は動く
⇒

$\boldsymbol{x}_c(t)$：樟脳円板の位置

$u(t, \boldsymbol{x})$：樟脳膜密度

表面張力 γ は樟脳膜密度の関数 $\gamma(u)$

244

粒子運動モデルの1例

245

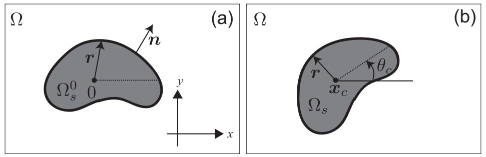
固体樟脳モデル化

$$\Omega_s(t) = \Omega_s(\boldsymbol{x}_c(t), \theta_c) = \{\boldsymbol{x} | R(-\theta_c)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c(t)) \in \Omega_s^0\}$$

$$M\frac{d^2\boldsymbol{x}_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)\boldsymbol{n}ds - \mu^{(t)}\frac{d\boldsymbol{x}_c}{dt}$$

$$I\frac{d^2\theta_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}'))ds - \mu^{(r)}\frac{d\theta_c}{dt}$$

M :質量, γ :表面張力, $\mu^{(t)}$: 粘性抵抗, u :樟脳膜密度



246

樟脳膜モデル

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\Delta u - ku + F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_c(t), \Omega_s(t)), \quad \boldsymbol{x} \in \Omega, t > 0.$$

昇華

界面活性膜（粒子）の拡散

界面活性剤からの供給

$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_c(t); \Omega_s) = \begin{cases} s_0 u_0, & \boldsymbol{x} \in \Omega_s(\boldsymbol{x}_c, \theta_c), \\ 0, & \boldsymbol{x} \notin \Omega_s(\boldsymbol{x}_c, \theta_c), \end{cases}$$

247

自己駆動粒子モデル

$$M\frac{d^2\boldsymbol{x}_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)\boldsymbol{n}ds - \mu^{(t)}\frac{d\boldsymbol{x}_c}{dt}$$

$$I\frac{d^2\theta_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}'))ds - \mu^{(r)}\frac{d\theta_c}{dt}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\Delta u - ku + F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_c(t), \Omega_s(t)), \quad \boldsymbol{x} \in \Omega, t > 0.$$

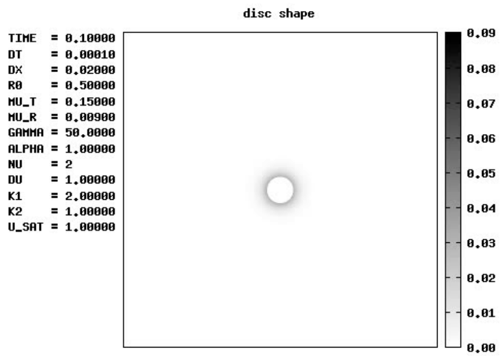
$$F(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_c(t); \Omega_s) = \begin{cases} s_0 u_0, & \boldsymbol{x} \in \Omega_s(\boldsymbol{x}_c, \theta_c), \\ 0, & \boldsymbol{x} \notin \Omega_s(\boldsymbol{x}_c, \theta_c), \end{cases}$$

$$\Omega_s(t) = \Omega_s(\boldsymbol{x}_c(t), \theta_c) = \{\boldsymbol{x} | R(-\theta_c)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_c(t)) \in \Omega_s^0\}$$

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1. \quad u(\cdot, t) \in C^1$$

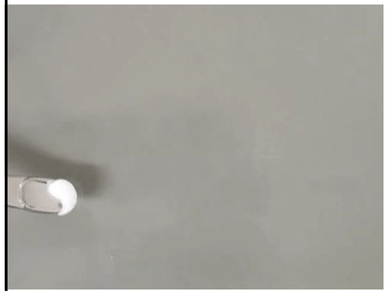
248

形状依存の運動



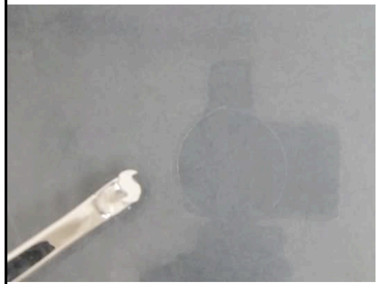
249

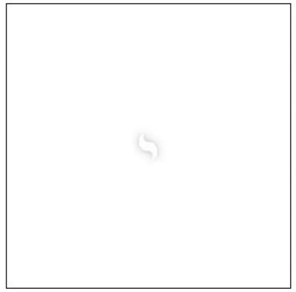
形状依存運動２



250

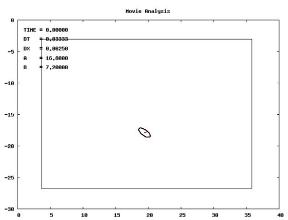
形状依存運動３

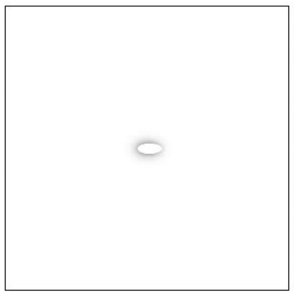




251

形状依存運動４





252

自己駆動粒子モデル

$$M\frac{d^2\boldsymbol{x}_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)\boldsymbol{n}ds - \mu^{(t)}\frac{d\boldsymbol{x}_c}{dt}$$

$$I\frac{d^2\theta_c}{dt^2} = \int_{\partial\Omega_s(t)} \gamma(u)(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}'))ds - \mu^{(r)}\frac{d\theta_c}{dt}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\Delta u - ku + F(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_c(t),\Omega_s(t)), \quad \boldsymbol{x}\in\Omega, t>0.$$

$$F(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_c(t);\Omega_s) = \begin{cases} s_0u_0, & \boldsymbol{x}\in\Omega_s(\boldsymbol{x}_c,\theta_c), \\ 0, & \boldsymbol{x}\notin\Omega_s(\boldsymbol{x}_c,\theta_c), \end{cases}$$

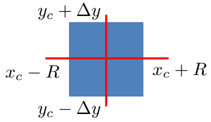
$$\Omega_s(t) = \Omega_s(\boldsymbol{x}_c(t),\theta_c) = \{\boldsymbol{x}|R(-\theta_c)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_c(t))\in\Omega_s^0\}$$

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0-\gamma_1)a^m}{a^m+u^m} + \gamma_1.$$

253

１次元運動モデルの導出

$$\Omega_s(t) = (x_c(t) - R, x_c(t) + R) \times (y_c(t) - \Delta y, y_c(t) + \Delta y)$$



$$M\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \int_{y_c(t)-\Delta y}^{y_c(t)+\Delta y} \gamma(u(x_c(t)+R, y, t))dy - \int_{y_c(t)-\Delta y}^{y_c(t)+\Delta y} \gamma(u(x_c(t)-R, y, t))dy - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}.$$

$$M\frac{d^2 x_c}{dt^2} = 2\Delta y \left(\gamma(u(x_c(t) + R, y_c(t), t)) - \gamma(u(x_c(t) - R, y_c(t), t))\right) - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}$$

$$M = 2R \times 2\Delta y \rho \qquad \mu^{(t)} = 2R \times 2\Delta y \times \mu_0^{(t)}$$

$$\rho\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_c(t) + R, t)) - \gamma(u(x_c(t) - R, t))}{2R} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1.$$

255

１次元樟脳円板の数理モデル

樟脳円盤の運動方程式　＋　樟脳濃度の拡散方程式

$$\rho\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_c(t) + R, t)) - \gamma(u(x_c(t) - R, t))}{2R} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + F(x, x_c; R), \quad x \in I, t > 0 \quad u(t, \cdot) \in C^1$$

$$F(x, x_c(t); R) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - x_c| \le R \\ 0, & |x - x_c| > R \end{cases}$$

$x_c(t)$：樟脳円盤の中心,　$2R$：樟脳円盤の直径,

$\gamma(u)$　：樟脳濃度uに依存した水の表面張力,　ρ：樟脳円盤の密度,

μ　：水の粘性係数,

$u(x, t)$　：樟脳粒から供給される樟脳膜の表面濃度,　d_u　：樟脳の拡散係数,

F　：樟脳粒子の供給,　k　：樟脳の昇華率と溶解率の和.

256

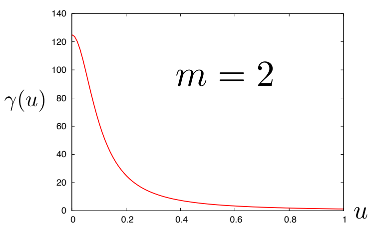
樟脳濃度に依存した表面張力について

$$\rho\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \frac{\boxed{\gamma(u(x_c(t) + R, t))} - \boxed{\gamma(u(x_c(t) - R, t))}}{2R} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + F(x, x_c; R), \quad x \in I, t > 0$$

樟脳濃度に依存した表面張力には次の様な単調減少関数を用いる：

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1.$$



γ_0　：純水の表面張力,

γ_1　：樟脳飽和時の水の表面張力,

a　：任意の正定数.

257

樟脳の供給について

$$\rho\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_c(t) + R, t)) - \gamma(u(x_c(t) - R, t))}{2R} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

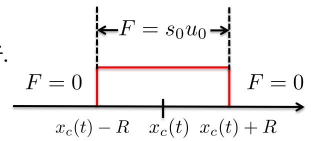
$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + \boxed{F(x, x_c; R),} \quad x \in I, t > 0$$

樟脳の供給について，次のように樟脳粒から一定の供給があると仮定する：

$$F(x, x_c(t); R) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - x_c| \le R \\ 0, & |x - x_c| > R \end{cases}$$

s_0　：樟脳の供給率,

u_0　：樟脳粒から供給される一定量の樟脳分子.



258

数理モデルの無次元化

先ほどのモデルに対して，無次元化を行うために次のような
無次元化変数を導入する：

$$\tau = kt, X = \sqrt{\frac{k}{D}}x, U(\tau X) = \frac{ku(t,x)}{s_0 u_0}, X_c(\tau) = \sqrt{\frac{k}{D}}x_c(t).$$

モデル方程式は

$$\bar{\rho}\frac{d^2 X_c(t)}{d\tau^2} = \bar{\gamma}(U(\tau, X_c(\tau)+\bar{r})) - \bar{\gamma}(U(\tau, X_c(\tau)-\bar{r})) - \bar{\mu}\frac{dX_c(\tau)}{d\tau},\ \tau > 0$$

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} - U + F(X, X_c(t); \bar{r}),\ \tau > 0, X \in \bar{\boldsymbol{I}}.$$

となる.

259

数理モデルの無次元化２

ここで

$$\bar{\gamma}(U) = \frac{\bar{a}^m}{\bar{a}^m + U^m} + \frac{\gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1},$$

$$F(X, X_c(t); r) = \begin{cases} 0, & |X - X_c(t)| > r, \\ s_0 u_0, & |X - X_c(t)| \le r. \end{cases}$$

であり

$$\bar{\rho} = \frac{2r\rho k^2}{\gamma_0 - \gamma_1}\sqrt{\frac{D}{k}}, \quad \bar{\mu} = \frac{2r\mu k}{\gamma_0 - \gamma_1}\sqrt{\frac{D}{k}},$$

$$\bar{a} = \frac{2r\rho k^2}{\gamma_0 - \gamma_1}\sqrt{\frac{D}{k}}, \bar{r} = \sqrt{\frac{k}{D}}r, \bar{\boldsymbol{I}} = \sqrt{\frac{k}{D}}\boldsymbol{I}.$$

である.

260

１次元樟脳円板の無次元化モデル

τ, U, X, その他のパラメータをそれぞれ元の変数，パラメータに置き直すと，
次の様な１次元樟脳円盤の無次元化モデルが得られる.

$$\rho\frac{d^2 x_c}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_c(t)+R,t)) - \gamma(u(x_c(t)-R,t))}{2R} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + F(x, x_c; R), \quad x \in I, t > 0$$

$$\gamma(u) = \frac{\alpha_0^m(\Gamma_0 - \Gamma_1)}{\alpha_0^m + u^m} + \Gamma_1,$$

$$F(x, x_c(t); R) = \begin{cases} S_0, & |x - x_c| \le R, \\ 0, & |x - x_c| > R, \end{cases}$$

$$u(\cdot, t) \in C^1$$

261

定常解の構成

１次元樟脳円盤モデルを動座標系に変換

$$\boxed{z = x - ct, \quad z_c(t) = x_c(t) - ct}$$

$$\boxed{\begin{cases} \dfrac{dz_c}{dt} = \gamma(U(z_c + R, t)) - \gamma(U(z_c - R, t)) - \mu c, \\ \dfrac{\partial U}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + F(z, z_2; R), \end{cases}}$$

動座標系発展方程式の次の定常問題を考える

$$\boxed{\begin{cases} 0 = \gamma(U(z_c + R)) - \gamma(U(z_c - R)) - \mu c, \\ 0 = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + F(z, z_2; R), \end{cases}}$$

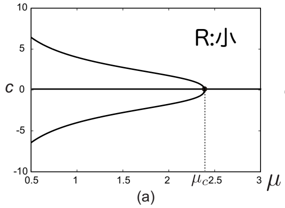
262

等速運動解の存在

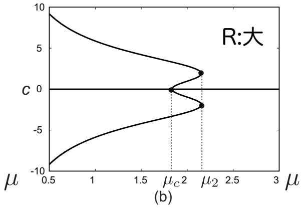
$$0 = G(\mu; c) = \frac{\gamma(U(z_c + R)) - \gamma(U(z_c - R))}{2R} - \mu c$$

$$u(z_c{+}R) = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_+ L})} \left(e^{2\lambda_+ R} - e^{2\lambda_+ L}\right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_- L})} \left(e^{2\lambda_- L} - e^{2\lambda_- R}\right) + 1 \right) S_0$$

$$u(z_c{-}R) = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_+ L})} \left(1 - e^{2\lambda_+ (L-R)}\right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_- L})} \left(e^{2\lambda_- (L-R)} - 1\right) + 1 \right) S_0.$$



(a)



(b)

263

等速運動解の存在定理
（岡本，後藤田，N）

速度 $c \neq 0$ に対して，パラメータ R, L, c を一組定めるごとに

$$0 = G(\mu; c) = \frac{\gamma(U(z_c + R)) - \gamma(U(z_c - R))}{2R} - \mu c$$

を満たすただ一つの $\mu > 0$ が存在する．

264

定常解の安定性解析

次の定常問題の線形化固有値問題を考える．

$$\boxed{\begin{cases} 0 = \gamma(U(z_c + R)) - \gamma(U(z_c - R)) - \mu c, \\[2mm] 0 = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + F(z, z_2; R), \end{cases}}$$

265

線形化固有値問題

線形化固有値問題は次のようになる：

$$\begin{aligned} \lambda\phi &= A\left(U_z(z_0 + R; c)\phi + \alpha(z_0 + R)\right) \\ &\quad + B\left(U_z(z_0 - R; c)\phi + \alpha(z_0 - R)\right), \\ \lambda\alpha &= \alpha_{zz} + c\alpha_z - \alpha, \end{aligned}$$

with jump condition:

$$\alpha_z(z_0 - R + 0) - \alpha_z(z_0 - R - 0) = \phi,$$

$$\alpha_z(z_0 + R + 0) - \alpha_z(z_0 + R - 0) = -\phi,$$

266

樟脳濃度の拡散方程式の線形化

・樟脳濃度の拡散方程式の線形化

→ が不連続なので，弱形式を与え，jump conditionを導く．

得られる線形化方程式は次のようになる：

$$\lambda\alpha = \alpha_{zz} + c\alpha_z - \alpha$$

with jump condition:

$$\alpha_z(z_0 - R + 0) - \alpha_z(z_0 - R - 0) = \phi,$$

$$\alpha_z(z_0 + R + 0) - \alpha_z(z_0 + R - 0) = -\phi,$$

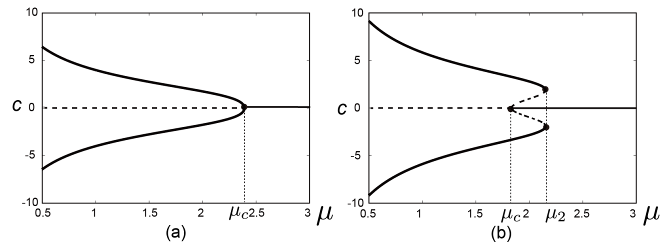
267

線形化固有値問題

次の複素変数　λ に対する非線形問題の解をすべて求めればよい

$$\lambda\phi = \beta(\lambda)\phi$$

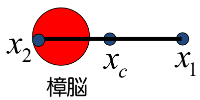
複素Newton法によって求める



268

樟脳船の数理モデル

$$x_1(t) = x_c(t) + l, \quad x_2(t) = x_c(t) - l$$



$$\rho\frac{d^2x_c}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_1(t),t)) - \gamma(u(x_2(t),t))}{2l} - \mu^{(t)}\frac{dx_c}{dt}, t > 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + F(x, x_2; R), \quad x \in I, t > 0$$

$$\gamma(u) = \frac{\alpha_0^m(\Gamma_0 - \Gamma_1)}{\alpha_0^m + u^m} + \Gamma_1,$$

$$F(x, x_2(t); R) = \begin{cases} S_0, & |x - (x_2 + R)| \le R, \\ 0, & |x - (x_2 + R)| > R, \end{cases}$$

$$u(\cdot, t) \in C^1$$

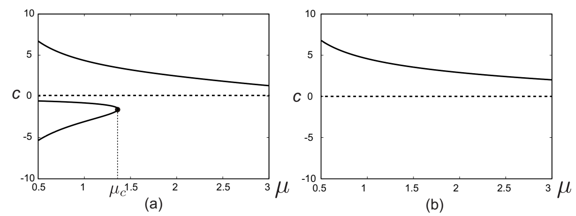
269

樟脳船モデルの分岐現象

$$0 = G(\mu; c) = \frac{\gamma(U(z_c + l)) - \gamma(U(z_c - l))}{2l} - \mu c$$

$$u(z_c+l) = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_+ L})}\left(e^{2\lambda_+ l} - e^{2\lambda_+(L+l-R)}\right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_- L})}\left(e^{2\lambda_-(L+l-R)} - e^{2\lambda_- l}\right) + 1\right) S_0$$

$$u(z_c-l) = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_+ L})}\left(1 - e^{2\lambda_+(L-R)}\right) + \frac{\lambda_+}{\lambda_0(1 - e^{2\lambda_- L})}\left(e^{2\lambda_-(L-R)} - 1\right) + 1\right) S_0.$$



270

等速運動解の存在定理（岡本，後藤田，N）

速度 $c>0$ に対して，パラメータ R, l, L, c を一組定めるごとに

$$0 = G(\mu; c) = \frac{\gamma(U(z_c + l)) - \gamma(U(z_c - l))}{2l} - \mu c$$

を満たすただ一つの $\mu>0$ が存在する．
速度0の解は $R=l$ の時のみ存在する．

271

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
   1. 力学系の基礎
   2. 数値計算の基礎
   3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
   1. 化学反応モデル（BZ反応等）
   2. 燃焼合成反応
   3. ロウソク振動子
   4. 自走粒子運動の数理モデル
   5. 樟脳酸–リン酸系モデル
   6. 集団運動
   7. 表皮細胞モデル
   8. Proneural wave（反応拡散系の応用）細胞サイズの有限性重要

283

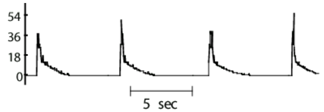
振動運動の数理モデル

中和反応を伴う自己駆動系

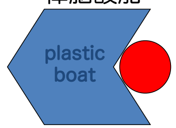
284

樟脳酸船の振動運動

The velocity profile of camphoric acid boat



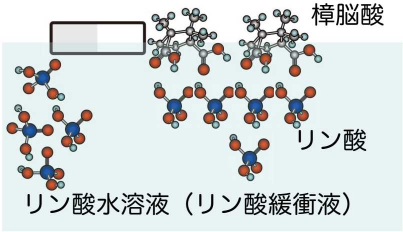
樟脳酸船



樟脳酸

285

振動運動のメカニズム



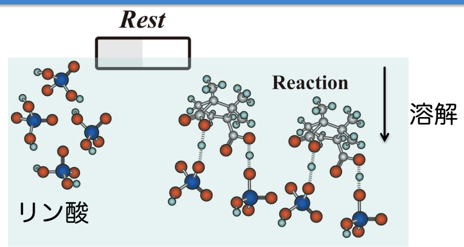
樟脳酸　リン酸

$$C_8H_{14}(COOH)_2 + 2HPO_4^{2-} \xrightarrow{k_2} C_8H_{14}(COO^-)_2 + 2H_2PO_4^-$$

中和反応

286

振動運動のメカニズム

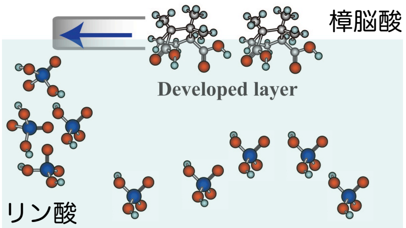


樟脳酸　リン酸

$$C_8H_{14}(COOH)_2 + 2HPO_4^{2-} \xrightarrow{k_2} C_8H_{14}(COO^-)_2 + 2H_2PO_4^-$$

287

振動運動のメカニズム

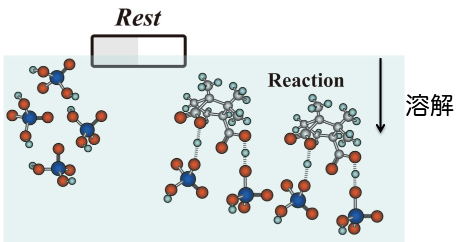


樟脳酸　リン酸

$$C_8H_{14}(COOH)_2 + 2HPO_4^{2-} \xrightarrow{k_2} C_8H_{14}(COO^-)_2 + 2H_2PO_4^-$$

288

振動運動のメカニズム



樟脳酸　リン酸

$$C_8H_{14}(COOH)_2 + 2HPO_4^{2-} \xrightarrow{k_2} C_8H_{14}(COO^-)_2 + 2H_2PO_4^-$$

289

目的

数理科学的視点から振動運動メカニズムに対する必要かつ十分条件を見つけたい.
(すくなくとも十分条件)

そのために中和反応を伴う樟脳酸船の数理モデルを作る.

290

実験事実

水中の分子拡散は水面分子の拡散より非常に遅い.
→ 水中からのリン酸の供給はない！？

反応が生じるのは気水界面近傍だけである.

わずかな界面活性粒子密度では表面張力は変化しない.

291

中和反応を伴う樟脳酸船の数理モデル

$$\boxed{\mathrm{C_8H_{14}(COOH)_2} + 2\mathrm{HPO_4^{2-}} \xrightarrow{k_2} \mathrm{C_8H_{14}(COO^-)_2} + 2\mathrm{H_2PO_4^-}}$$

$u(t,x)$：水面上の樟脳酸膜濃度
$v(t,x)$：水面近傍のリン酸濃度
$x_c(t)$： 樟脳酸船の中心点

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + F(x, x_2(t); r) - k_2 uv^2, t > 0, 0 < x < L,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - 2k_2 uv^2, \quad F(x, x_2(t); r) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - (x_2 + r)| \le r, \\ 0, & |x - (x_2 + r)| > r, \end{cases}$$

$$\rho \ddot{x}_c = \frac{\gamma(u(t,x_1)) - \gamma(u(t,x_2))}{2l} - \mu \dot{x}_c$$

$$u(\cdot, t) \in C^1$$

293

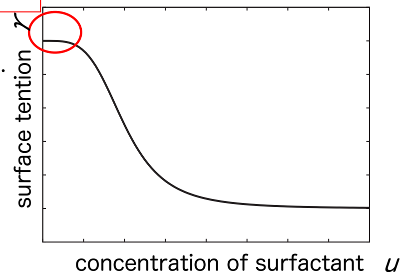
界面活性剤濃度と表面張力の関係

わずかな界面活性剤濃度では
表面張力は変化しない

Langmuir (1917)

$$\gamma(u) = \frac{\gamma_0 a^n}{a^n + u^n} + \gamma_1.$$

$$\gamma'(0) = 0 \text{ for } n \ge 2$$



294

初期条件と境界条件

初期条件

$$u(0,x)=0, v(0,x)=v_0, \quad 0 \le x \le L,$$

$$x_c(0)=x_0, \dot{x}_c(0)=0.$$

v_0：リン酸初期濃度

境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)=\frac{\partial v}{\partial x}(t,x)=0, \quad t>0, x=0,L.$$

295

仮定

Assumption : $0 < d_v \ll d_u$

296

中和反応を伴う樟脳酸船の数理モデル

$$\frac{\partial u}{\partial t}=d_u\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-ku+F(x,x_2(t);r)-k_2uv^2, t>0, 0<x<L,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t}=d_v\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}-2k_2uv^2, \quad F(x,x_2(t);r)=\begin{cases} s_0u_0, & |x-(x_2+r)|\le r,\\ 0, & |x-(x_2+r)|>r,\end{cases}$$

$$\rho\ddot{x}_c=\frac{\gamma(u(t,x_1))-\gamma(u(t,x_2))}{2l}-\mu\dot{x}_c \qquad u(t,\cdot)\in C^1$$

$$u(0,x)=0, v(0,x)=v_0, \quad 0\le x\le L, \quad \gamma(u)=\frac{\gamma_0a^n}{a^n+u^n}+\gamma_1.$$

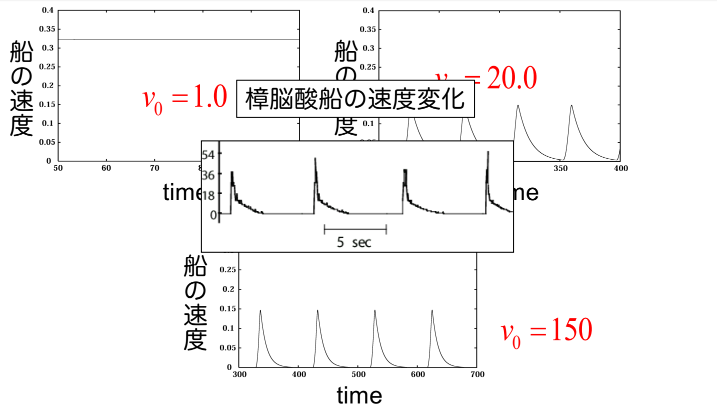
$$x_c(0)=x_0, \dot{x}_c(0)=0. \qquad 0<d_v\ll d_u$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)=\frac{\partial v}{\partial x}(t,x)=0, \quad t>0, x=0,L.$$

リン酸の初期濃度v_0に依存して樟脳酸舟の運動がどのように変化するか数値計算によって調べる.

297

数値計算結果



v_0 : Initial value of the concentration of the phosphoric acid

298

振動運動について

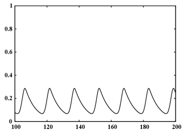
中和反応によって振動運動することは正しいだろう.

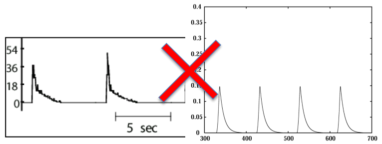
仮定 $0 < d_v << d_u$ は必要条件

もし d_v / d_u が 1 に近ければ，振動運動は起きなくなる.

表面張力関数 γ(u)に対して γ'(0)=0 は停止と運動を繰り返す現象を再現するには重要な性質である.

もし γ'(0) が 0 でないならば，振動現象は起こるが，実験で見られるような停止と運動を繰り返す運動は現れなくなる.





299

疑問

反応次数が異なっていても,
振動現象は現れるのだろうか？
→ 自然に思いつくと思いますか！！

実験：difficult
(樟脳酸–リン酸系以外の反応系を見つける必要がある．)

数理モデリング：easy
(数理モデルの反応次数を変更するだけである．)

300

反応次数を一般化した数理モデル

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + F(x, x_2(t); r) - m_1 k_2 u^{m_1} v^{m_2}, \quad t > 0, 0 < x < L,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - m_2 k_2 u^{m_1} v^{m_2},$$

$$F(x, x_2(t); r) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - (x_2 + r)| \le r, \\ 0, & |x - (x_2 + r)| > r, \end{cases}$$

$$\rho \ddot{x}_c = \frac{\gamma(u(t, x_1)) - \gamma(u(t, x_2))}{2l} - \mu \dot{x}_c, t > 0.$$

$$\gamma(u) = \frac{\gamma_0 a^n}{a^n + u^n} + \gamma_1. \qquad u(t, \cdot) \in C^1$$

301

数値計算

$$u(0, x) = 0, v(0, x) = 100, \quad 0 \le x \le L,$$

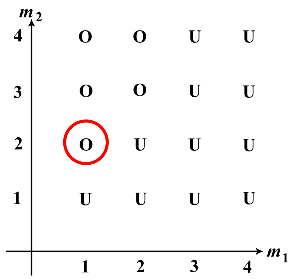
$$x_c(0) = x_0, \dot{x}_c(0) = 0.$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x) = \frac{\partial v}{\partial x}(t, x) = 0, \quad t > 0, x = 0, L.$$

フリーパラメター：m_1, m_2

302

反応次数をパラメータとした数値計算結果



U：等速運動
O：振動運動

樟脳酸–リン酸系に対応

数値計算からの示唆：
数理モデルが中和反応を伴う振動現象を定性的に
再現しているならば，中和反応系であったとしても
反応次数によって振動しない実験系があるはず．

303

数理モデルからの示唆

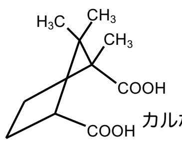
数理モデルが中和反応を伴う振動現象を定性的に
再現しているならば，中和反応系であったとしても
反応次数によって振動しない実験系があるはず．

304

2次反応をともなう中和反応系（カンファン酸船）

Camphoric acid – phosphoric acid reaction

$m_1 = 1, m_2 = 2$

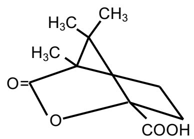


カルボキシシル基が２個

低濃度：一定速度
高濃度：振動速度

Campharic acid – phosphoric acid reaction

$m_1 = 1, m_2 = 1$

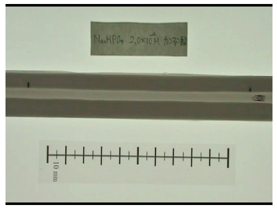


カルボキシシル基が1個

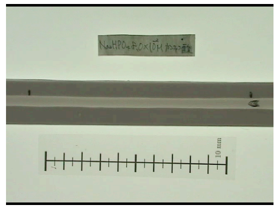
振動運動は起こるだろうか？

305

実験結果



The motion of boat in the low concentration



The motion of boat in the high concentration

リン酸濃度を徐々に高くすると，
カンファン酸船の速度は徐々に遅くなる

振動現象は決して起きない

306

結果

数値計算結果を支持する実験結果を得ることができた.

↓

我々の提案した数理モデルは中和反応を伴う自己駆動系の実験を定性的によく再現していると考えられる

307

まとめ

中和反応を伴う樟脳酸船の数理モデルを提案し，
振動運動が生じる機構を示唆した.

仮定 $0 < d_v \ll d_u$ は必要条件.

表面張力関数 $\gamma(u)$に対して $\gamma'(0)=0$ は停止と運動を繰り返す現象を再現するには重要な性質である.

それに加え，反応次数も振動現象にとって必要条件である.

308

講義の予定

1. 実験系の紹介
2. 数理モデリングとは
3. 必要な道具
   1. 力学系の基礎
   2. 数値計算の基礎
   3. （必要に応じて）物理学，化学，生物学の基礎知識
4. 数理モデリングの例
   1. 化学反応モデル（BZ反応等）
   2. 燃焼合成反応
   3. ロウソク振動子
   4. 自走粒子運動の数理モデル
   5. 樟脳酸–リン酸系モデル
   6. 集団運動
   7. 表皮細胞モデル
   8. Proneural wave（反応拡散系の応用）細胞サイズの有限性重要

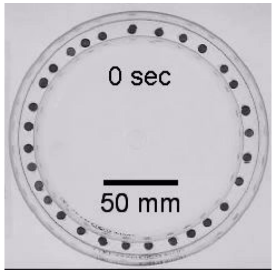
309

樟脳船渋滞現象の数理解析

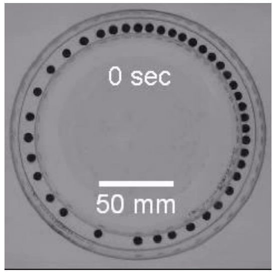
310

樟脳船の渋滞現象

N = 30



N = 40

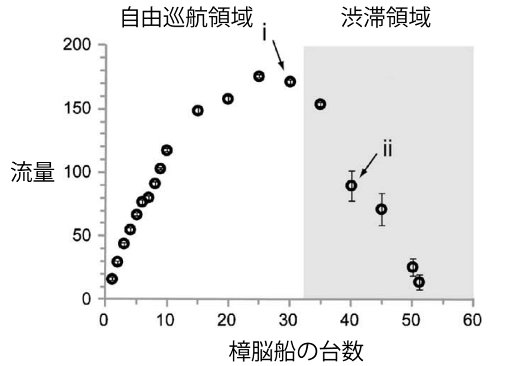


N.J.Suematsu et al. Physical Review E (2010)

Density = N(Number of camphor boat)/L

311

樟脳船渋滞における基本図

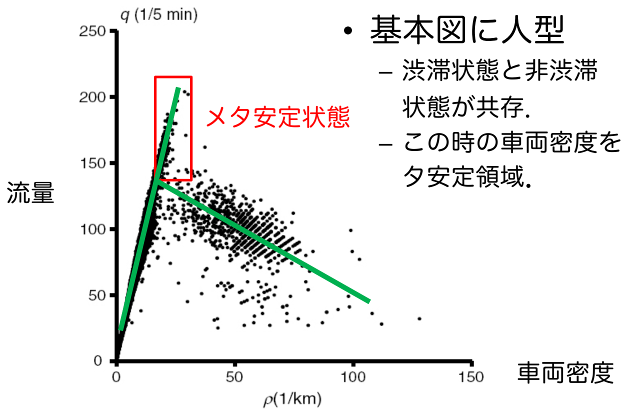


流量：単位時間当たりにある点を通る樟脳船の数

Suematsu et al. Physical Review E (2010)

312

車両渋滞における基本図



- 基本図に人型
  - 渋滞状態と非渋滞状態が共存.
  - この時の車両密度をメタ安定領域.

Y.Sugiyama et al. NewJournal of Physics (2008)

313

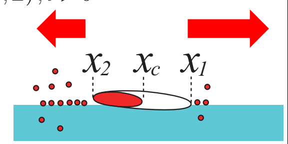
樟脳船の1次元集団運動モデル

$$\rho\ddot{x}_c^i = \frac{\gamma(u(x_1^i,t)) - \gamma(u(x_2^i,t))}{2l} - \mu\dot{x}_c^i, \qquad t > 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u u_{xx} - ku + \sum_{i=1}^{N} F(x, x_2^i; R), \quad x \in [-L, L)\,, t > 0$$

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1. \qquad u(\cdot, t) \in C^1[-L, L),$$

$$F(x, x_2^i(t); R) = \begin{cases} S_0, & |x - (x_2^i + R)| \leq R, \\ 0, & |x - (x_2^i + R)| > R, \end{cases}$$



N：樟脳船の数　L：区間長　l：樟脳船の全長　ρ：樟脳船の密度　μ：水の粘性抵抗

x_c^i :i　番目の樟脳船の慣性中心　$x_1^i(= x_c^i + l)$:i　番目の樟脳船の船首

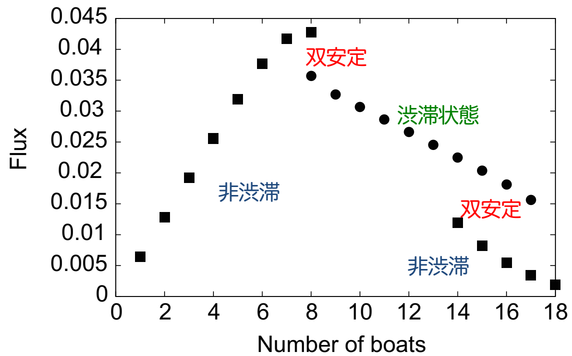
$x_2^i = (x_c^i - l)$:i　番目の樟脳船の船尾　α：定数係数　$\gamma_0 + \gamma_1$：水の表面張力

γ_1：樟脳飽和時の表面張力　d_u：樟脳粒子の拡散係数　k：昇華と分解係数

R：樟脳粒の半径　s_0：樟脳の供給係数　u_0：樟脳の供給率

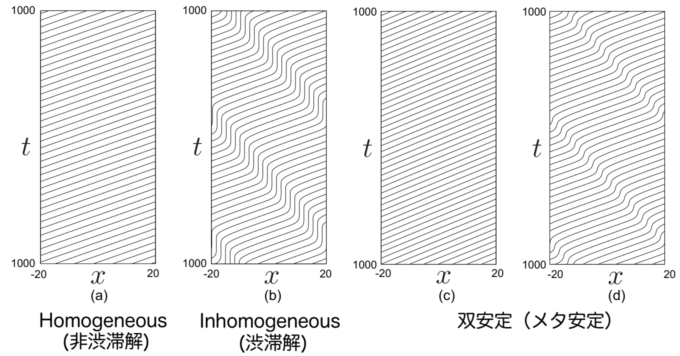
314

樟脳船モデルに見られる基本図



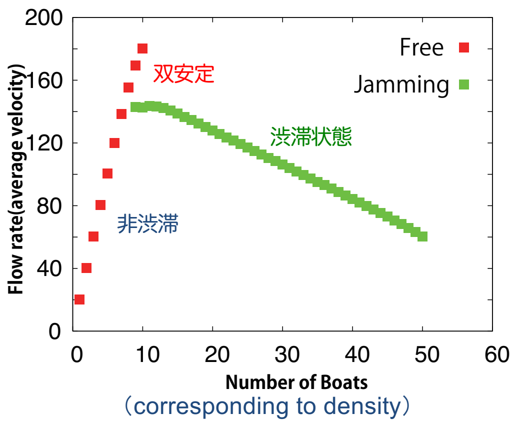
315

数値計算結果（時空間プロット）



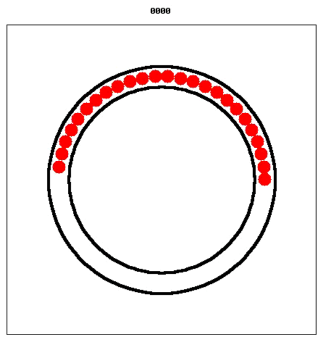
316

樟脳船モデルにみられる基本図



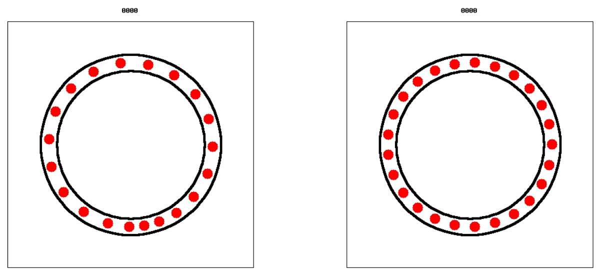
317

渋滞の動画



318

双安定性のチェック

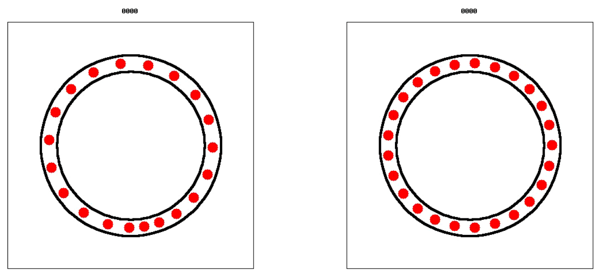


319

自動車による実験（西成研究室）

320

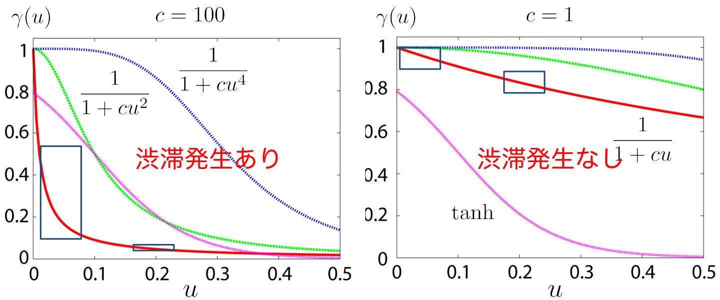
双安定性のチェック



実際の自動車による試験もで起こりうることがわかった

321

なぜ渋滞が起こるのか？



水面の樟脳密度が低いと
船の前後で表面張力差が大きい
→　速度速くなる.
水面の樟脳密度が高くなると
船の前後で表面張力差が小さい
→　速度遅くなる.

水面の樟脳密度に関係なく
船の前後での表面張力差はほぼ同じ
→　速度ほとんど変化しない.

322

この数理モデルでは

$$\rho \ddot{x}_c^i = \frac{\gamma(u(x_1^i,t)) - \gamma(u(x_2^i,t))}{2l} - \mu \dot{x}_c^i, \qquad t > 0,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_u u_{xx} - ku + \sum_{i=1}^{N} F(x, x_2^i; R), \quad x \in [-L, L), t > 0$$

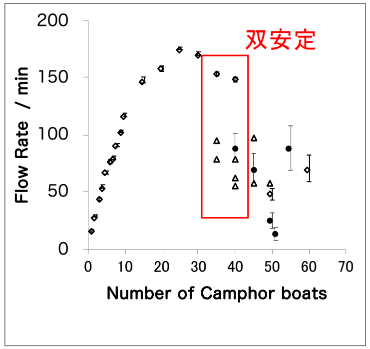
$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1. \qquad u(\cdot, t) \in C^1[-L, L),$$

$$F(x, x_2^i(t); R) = \begin{cases} S_0, & |x - (x_2^i + R)| \le R, \\ 0, & |x - (x_2^i + R)| > R, \end{cases}$$

表面張力関数γ(u)の関数形が本質的要因である.
でも… 双安定性って本当に実験で見ることができるのか？

323

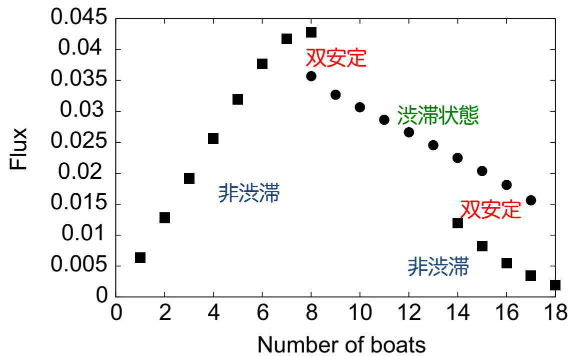
最近の実験データ



N.J.Suematsu (2012)

324

樟脳船モデルに見られる基本図



325

非渋滞解の定義

定義：非渋滞解（Homogenous solution）
⇔
1) すべての船は同じ一定速度で動く
2) 隣り合う船間距離はすべて等しい

327

非渋滞解の解を求める

動座標系（c は速度） $z = x - ct,\ z_c(t) = x_c(t) - ct$

$$\ddot{z}_c^i = \gamma(u(t, z_1^i) - \gamma(u(t, z_2^i)) - \mu(\dot{z}_c^i + c),\ (i = 1, 2, \cdots, N)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + c\frac{\partial u}{\partial z} - u + \sum_{i=1}^{N} F(z, z_c^i; R). \quad u(t, \cdot) \in C^1$$

with periodic boundary condition

定常問題

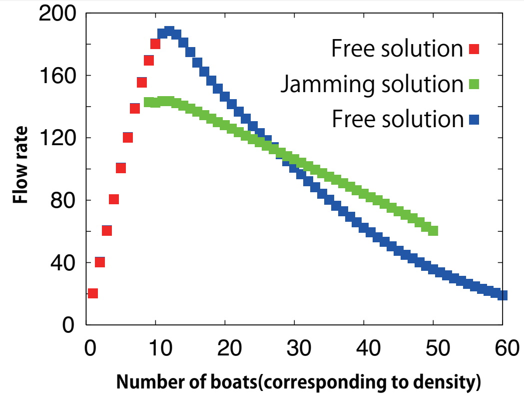
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + c\frac{\partial u}{\partial z} - u + \sum_{i=1}^{N} F(z, z_c^i; R). \quad u(\cdot) \in C^1$$

$$0 = \gamma(u(t, z_1^i) - \gamma(u(t, z_2^i)) - \mu c,\ (i = 1, 2, \cdots, N)$$

with periodic boundary condition

328

非渋滞解の存在



非渋滞解が存在 ➡ 安定性を調べる

329

フリーパラメーターの変更 船数 *N* から区間長 *L*

Fundamental diagram → **Fundamental diagram**

N (L : Fix) **L (N : Fix)**

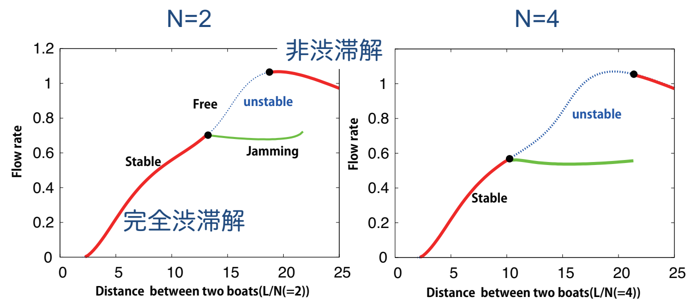
船の個数 *N* : 固定

区間長 *L* : フリーパラメータ

→ 流量の連続変化を見ることができる

330

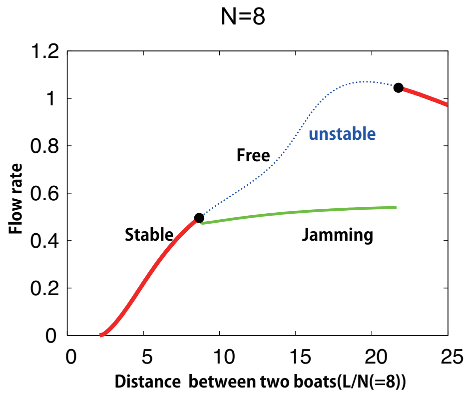
数値計算結果1



= 1/density

331

数値計算結果2



332

非渋滞解の安定性解析

N =2, 4, 8に対して，区間長に依存した定常解が存在し，
分岐点を２つ持つ基本図が得られる．

少なくとも，任意の船数に対して
基本図は2つの分岐点を持つだろう！！

N=2に対して安定性解析を行う．

333

定常解の構成

$$\begin{cases} 0 = \gamma(U(z_2^i + l)) - \gamma(U(z_2^i - l)) - \mu c, \\ 0 = z_0^i, \qquad\qquad (i = 1, 2) \\ 0 = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + \displaystyle\sum_{i=1}^{2} F(z, z_2^i; R), \end{cases}$$

with periodic boundary condition

$$F(z, z_2^i(t); R) = \begin{cases} S_0, & |z - (z_2^i(t) + R)| \leq R, \\ 0, & |z - (z_2^i(t) + R)| > R, \end{cases}$$

から定常解を構成する．
最終的にNewton法を使って速度cを求める．

334

線形化安定性解析

$$u(t, z) = u_0(z; c) + \epsilon\alpha(t, z),$$
$$z_c^i = z_0^i + \epsilon\phi^i(t),$$
$$y_c^i = \epsilon\psi^i(t), \quad i = 1, 2$$

u_0, z_0^i は次の定常問題の解

$$\begin{cases} 0 = \gamma(U(z_2^i + l)) - \gamma(U(z_2^i - i)) - \mu c, \\ 0 = z_0^i, \\ 0 = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + \displaystyle\sum_{i=1}^{2} F(z, z_2^i; R), \end{cases}$$

$$F(z, z_2^i(t); R) = \begin{cases} S_0, & |z - (z_2^i(t) + R)| \leq R, \\ 0, & |z - (z_2^i(t) + R)| > R, \end{cases}$$

335

固有値問題の定式化1

$$\lambda\alpha = \alpha_{zz} + c\alpha_z - \alpha,$$

$$\lambda\phi_i = \psi_i,$$

$$\lambda\psi_i = -\frac{2\gamma_0 a^2 (u_0(z_0^i+2))}{\left(a^2 + (u_0(z_0^i+2))^2\right)^2}\left(u_{0z}(z_0^i+2)\phi_i + \alpha(z_0^i+2)\right) + \frac{2\gamma_0 a^2 (u_0(z_0^i))}{\left(a^2 + (u_0(z_0^i))^2\right)^2}\left(u_{0z}(z_0^i)\phi_i + \alpha(z_0^i)\right) - \mu\psi_i.$$

336

樟脳膜モデルの線形化問題

$$\lambda\alpha = \alpha_{zz} + c\alpha_z - \alpha,$$

Periodic boundary condition

$$\alpha(-L) = \alpha(L), \quad \alpha_z(-L) = \alpha_z(L)$$

Continuity condition

$$\alpha(-L + r_{0-}) = \alpha(-L + r_{0+}), \quad \alpha(-r_{0-}) = \alpha(-r_{0+})$$

$$\alpha(r_{0-}) = \alpha(r_{0+}), \quad \alpha(L - r_{0-}) = \alpha(L - r_{0+})$$

Jump condition

$$\alpha_z(-L + r_{0+}) - \alpha_z(-L + r_{0-}) = -\phi_1, \quad \alpha_z(-r_{0+}) - \alpha_z(-r_{0-}) = \phi_2$$

$$\alpha_z(r_{0+}) - \alpha_z(r_{0-}) = -\phi_2, \quad \alpha_z(L - r_{0+}) - \alpha_z(L - r_{0-}) = \phi_1$$

337

固有値問題の定式化2

$$\begin{aligned}\lambda\phi_1 &= \psi_1,\\ \lambda\psi_1 &= \beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2 - \mu\psi_1,\\ \lambda\phi_2 &= \psi_2,\\ \lambda\psi_2 &= \beta_2\phi_1 + \beta_1\phi_2 - \mu\psi_2.\end{aligned}$$

where

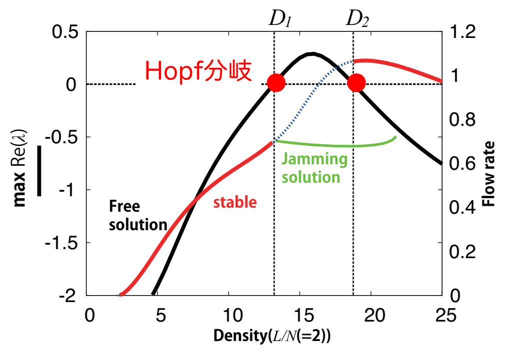
$$\beta_1 = 2\gamma_0 a^2 \left\{ -\frac{u_0\left(-\frac{L}{2}+2\right)}{\left(a^2 + \left(u_0\left(-\frac{L}{2}+2\right)\right)^2\right)^2}\left(u_{0z}\left(-\frac{L}{2}+2\right) + \xi_2\right) + \frac{u_0\left(-\frac{L}{2}\right)}{\left(a^2 + \left(u_0\left(-\frac{L}{2}\right)\right)^2\right)^2}\left(u_{0z}\left(-\frac{L}{2}+2\right) + \xi_1\right)\right\},$$

$$\beta_2 = 2\gamma_0 a^2 \left\{ -\frac{u_0(2)}{\left(a^2 + (u_0(2))^2\right)^2}\xi_4 + \frac{u_0(0)}{\left(a^2 + (u_0(0))^2\right)^2}\xi_3 \right\}.$$

338

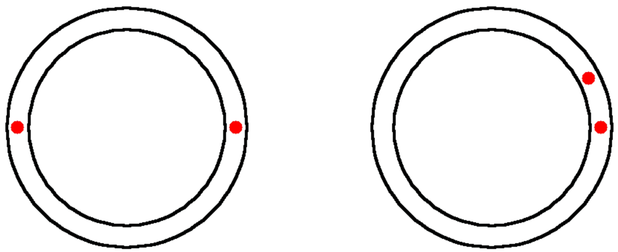
非渋滞解の安定解析結果

$$\left(\lambda(\lambda+\mu) - \beta_1(\lambda) + \beta_2(\lambda)\right)\left(\lambda(\lambda+\mu) - \beta_1(\lambda) - \beta_2(\lambda)\right) = 0$$



340

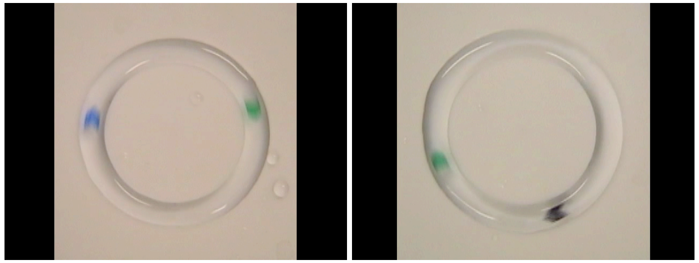
2艘の渋滞現象



非渋滞解　　　　渋滞解

341

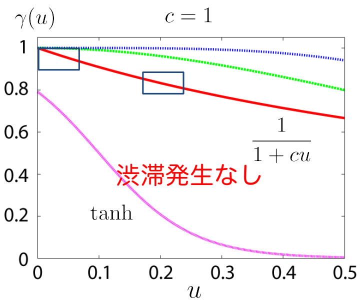
2001年(小平-中田-N.)



10年も昔(2001年)に異なる数理モデルを作って現象を再現した．
（流体効果を考えたつもりのモデル）
この現象も渋滞と考えられる．
→　渋滞現象モデルが2つ存在する…，マズイ！！
→　共通点は何か？

342

2001年の数理モデル



水面の樟脳密度に関係なく
船の前後での表面張力差はほぼ同じ
→　速度ほとんど変化しない　→　渋滞は起こらない
→　表面張力に依存した流速変化が影響している？！

344

まとめと課題

まとめ

樟脳船渋滞の基本図にも双安定性がある．
　→　実験でも確認
非渋滞解は常に存在する．
1次元樟脳船モデルおける非渋滞解はある密度領域で
Hopf分岐を起こし不安定化する．

課題

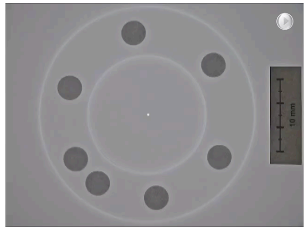
渋滞解の存在とその安定性
渋滞波が前進する現象の再現とその機構の理解
完全渋滞時に流量が増加する現象の再現と理解

345

自走粒子の集団運動解析

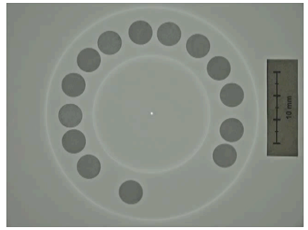
346

集団運動の実験



樟脳ろ紙7個の場合

後ろの樟脳ろ紙に押されて動き出し，
前の樟脳ろ紙とぶつかって停止する
（玉突き）



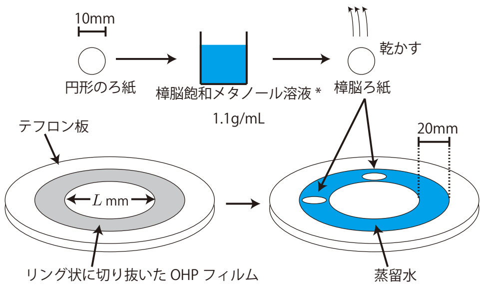
樟脳ろ紙14個の場合

前方にスペースができると樟脳ろ紙が
動き出し，前方にある樟脳ろ紙に追いつく
と停止する（渋滞）

347

実験系の紹介

円形のろ紙を樟脳飽和メタノール溶液に浸し，乾かした樟脳ろ紙を下図の
ようなリング上の水路に浮かべる．テフロンは強い疎水性であるため，
水がOHPリング上に集まって水路を形成する．

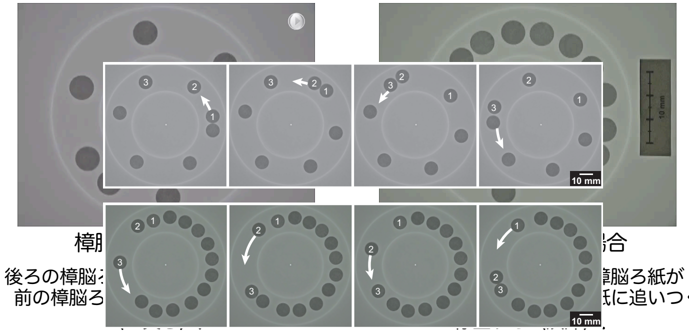


Yumihiko S. Ikura, Eric Heisler, Akinori Awazu, Hiraku Nishimori, and Satoshi Nakata, Phys. Rev. E 88, 012911 (2013)

*S. Soh, M.Branicki, and B. A. Grzybowski, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2011, **2**, 770-774.

348

実験結果

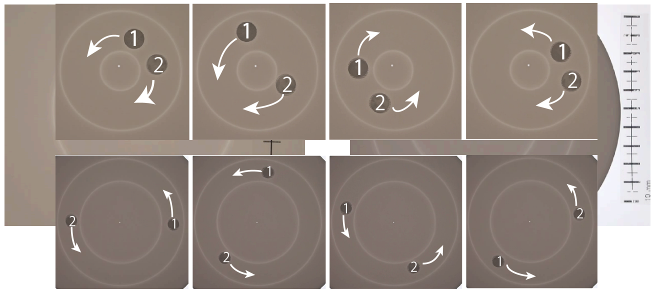


何故このような集団運動が見られるのだろうか？

→ 集団運動の発生機構が知りたい！！

349

実験 (2つの樟脳円板)



Channel length : 短い ➡ 振動的運動

Channel length : 長い ➡ 回転運動

水路長によって異なる運動が見られる！

350

1次元樟脳円版モデル

樟脳ろ紙の運動方程式 + 樟脳濃度の拡散方程式

$$\begin{cases} \rho \dfrac{d^2 x_c^i(t)}{dt^2} = \dfrac{\gamma(u(x_c^i(t)+r,t)) - \gamma(u(x_c^i(t)-r,t))}{2r} - \mu \dfrac{dx_c^i(t)}{dt}, & t>0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + \displaystyle\sum_{i=1}^{N} F(x, x_c^i(t); r), & x \in (-L, L),\quad t>0. \end{cases}$$

$x_c^i(t)$ ：i 番目の樟脳ろ紙の中心，　$2r$ ：樟脳ろ紙の直径，

$\gamma(u)$ ：樟脳濃度uに依存した水の表面張力，　ρ ：樟脳ろ紙の密度，

μ ：水の粘性係数，

$u(x,t)$ ：樟脳粒から供給される樟脳膜の表面濃度，　D ：樟脳の拡散係数，

F ：樟脳粒子の供給，　k ：樟脳の昇華率と溶解率の和.

351

樟脳濃度に依存した表面張力について

$$\begin{cases} \rho \dfrac{d^2 x_c^i(t)}{dt^2} = \dfrac{\boxed{\gamma(u(x_c^i(t)+r,t))} - \boxed{\gamma(u(x_c^i(t)-r,t))}}{2r} - \mu \dfrac{dx_c^i(t)}{dt}, & t>0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + \displaystyle\sum_{i=1}^{N} F(x, x_c^i(t); r), & x \in (-L, L),\quad t>0. \end{cases}$$

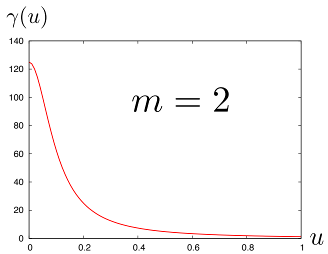
樟脳濃度に依存した表面張力には次の様な単調減少関数を用いる：

$$\gamma(u) = \frac{(\gamma_0 - \gamma_1)a^m}{a^m + u^m} + \gamma_1.$$

γ_0 ：純水の表面張力，

γ_1 ：樟脳飽和時の水の表面張力，

a ：任意の正定数.



352

樟脳の供給について

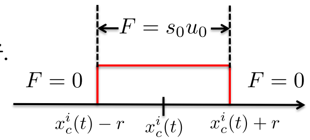
$$\begin{cases} \rho \dfrac{d^2 x_c^i(t)}{dt^2} = \dfrac{\gamma(u(x_c^i(t)+r,t)) - \gamma(u(x_c^i(t)-r,t))}{2r} - \mu \dfrac{dx_c^i(t)}{dt}, & t>0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + \displaystyle\sum_{i=1}^{N} \boxed{F(x, x_c^i(t); r)} & x \in (-L, L),\quad t>0. \end{cases}$$

樟脳の供給について，次のように樟脳粒から一定の供給があると仮定する：

$$F(x, x_c^i(t); r) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - x_c^i(t)| \le r, \\ 0, & |x - x_c^i(t)| > r. \end{cases}$$

s_0 ：樟脳の供給率，

u_0 ：樟脳粒から供給される一定量の樟脳分子.



353

数理モデルの無次元化

モデルに対して，無次元化を行うために次のような無次元化変数を導入する：

$$\tau = at,\ X = \sqrt{\frac{k}{D}}x,\ U(X,\tau) = \frac{u}{u_0}(x,t),\ X_c^i(\tau) = \sqrt{\frac{k}{D}}x_c^i(t).$$

そして，変数変換を行うと

$$\begin{cases} \bar{\rho}\dfrac{d^2X_c^i}{d\tau^2} = \bar{\gamma}(U(X_c^i+\bar{r},\tau)) - \bar{\gamma}(U(X_c^i-\bar{r},\tau)) - \bar{\mu}\dfrac{dX_c^i}{d\tau}, \quad \tau > 0, \\ \dfrac{\partial}{\partial\tau}U(X,\tau) = \dfrac{\partial^2}{\partial X^2}U(X,\tau) - U(X,\tau) + \displaystyle\sum_{i=1}^{N}\bar{F}(X,X_c^i;\bar{r}),\ \tau > 0, X \in (-\bar{L},\bar{L}). \end{cases}$$

となる.

無次元パラメータ

ここで

$$\bar{\gamma}(U) = \frac{\bar{a}^m}{\bar{a}^m + U^m} + \frac{\gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1},$$

$$\bar{F}(X,X_c^i;\bar{r}) = \begin{cases} 1, & |X - X_c^i| \le \bar{r}, \\ 0, & |X - X_c^i| > \bar{r}. \end{cases}$$

であり

$$\bar{\rho} = \frac{2r\rho k^2}{\gamma_0 - \gamma_1}\sqrt{\frac{D}{k}},\quad \bar{\mu} = \frac{2r\mu k}{\gamma_0 - \gamma_1}\sqrt{\frac{D}{k}},$$

$$\bar{a} = \frac{k}{s_0u_0}a,\ \bar{r} = \sqrt{\frac{k}{D}}\ r,\ \bar{L} = \sqrt{\frac{k}{D}}\ L$$

である.

1次元樟脳円版の無次元化モデル

τ, U, X ，その他のパラメータをそれぞれ元の変数，パラメータに置き直すと，次の様な1次元樟脳円版の無次元化モデルが得られる.

$$\begin{cases} \rho\dfrac{d^2x_c^i(t)}{dt^2} = \gamma(u(x_c^i(t)+r,t)) - \gamma(u(x_c^i(t)-r,t)) - \mu\dfrac{dx_c^i(t)}{dt}, \quad t > 0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + \displaystyle\sum_{i=1}^{N}F(x,x_c^i(t);r), \quad x \in (-L,L), \quad t > 0. \end{cases}$$

$$\gamma(u) = \frac{a^m}{a^m + u^m} + \frac{\gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1},$$

$$F(x,x_c^i(t);r) = \begin{cases} 1, & |x - x_c^i(t)| \le r, \\ 0, & |x - x_c^i(t)| > r. \end{cases}$$

慣性項を無視したモデル

$$\begin{cases} \mu\dfrac{dx_c^i(t)}{dt} = \gamma(u(x_c^i(t)+r,t)) - \gamma(u(x_c^i(t)-r,t)), \quad t > 0, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + \displaystyle\sum_{i=1}^{N}F(x,x_c^i(t);r), \quad x \in (-L,L), \quad t > 0. \end{cases}$$

$$\gamma(u) = \frac{a^m}{a^m + u^m} + \frac{\gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1},$$

$$F(x,x_c^i(t);r) = \begin{cases} 1, & |x - x_c^i(t)| \le r, \\ 0, & |x - x_c^i(t)| > r. \end{cases}$$

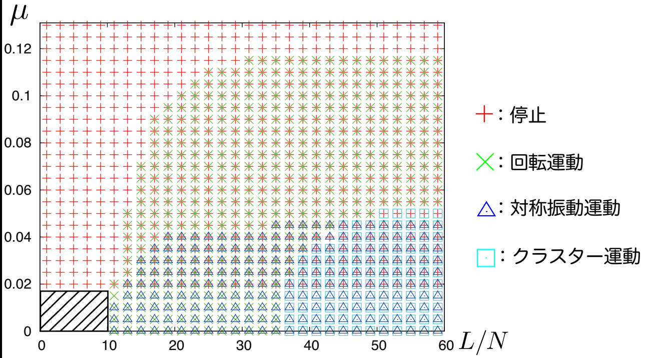
初期条件： $u(x,0) \equiv u_0(x), \quad -L \le x < L, \qquad x_c^i(0) = x_0^i$

境界条件： $u(-L,t) = u(L,t), \quad u_x(-L,t) = u_x(L,t)$

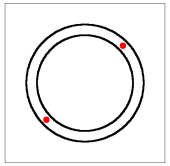
正則条件： $u(\cdot,t) \in C^1([-L,L))$

数値計算結果（相図）

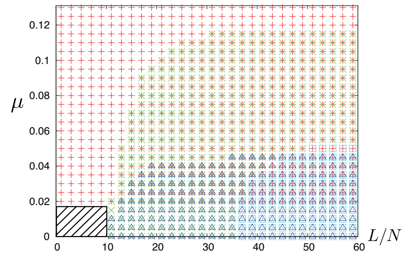
数値計算により得られる相図．縦軸は水の粘性係数，横軸は1つの樟脳円版が占有する領域．パラメータは $N=2,\ r=0.5, \gamma_0=528.0, \gamma_1=0.0,\ a=0.05$．

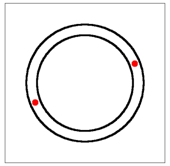


359

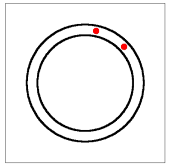


2つの樟脳ろ紙が動かずに止まった状態．

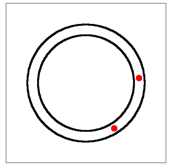




2つの樟脳ろ紙が等速度等間隔で回転する．



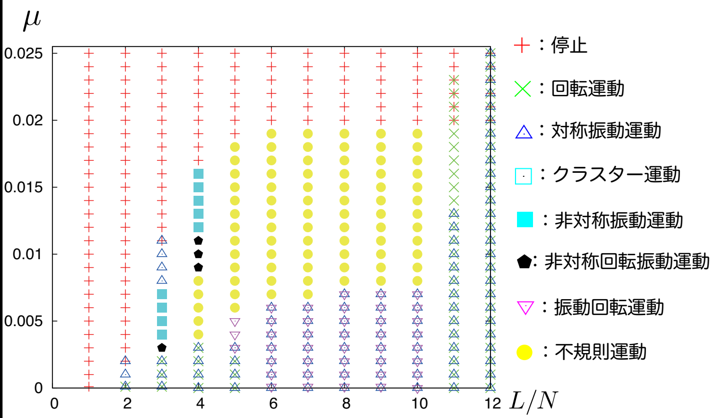
2つの樟脳ろ紙の振幅は等しく，重心は移動しない．



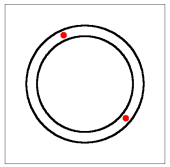
2つの樟脳ろ紙が等速度で回転するが，等間隔にはならない

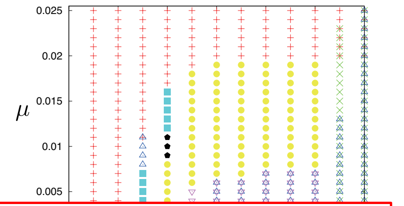
360

数値計算結果（相図２）



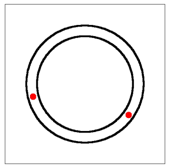
361



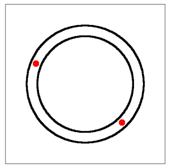


２つの樟脳ろ紙の運動ですら非常に複雑な運動がみられる．
これらの運動を理解するためにはどうしたらよいのか？

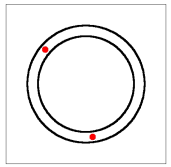
⬟：非対称回転振動運動　■：非対称振動運動　●：不規則運動



2つの樟脳ろ紙が振動しながら移動していく．



2つの樟脳ろ紙の重心は移動しないが，振幅が異なる．



2つの樟脳ろ紙が不規則な運動をする．

362

定常解の構成と安定性解析

数値計算から得られた相図を理解するために動座標系における定常解の構成と解の安定性解析を行う．具体的に以下の手順を踏む．

・１次元樟脳円盤モデルを動座標系に変換

$$\boxed{z = x - ct, \quad z_c^i(t) = x_c^i(t) - ct}$$

・定常問題から定常解を構成し，速度 c に関する方程式の導出．Newton法を用いて速度 c を求める．

$$\boxed{\begin{cases} 0 = \gamma(U(z_c + r, t)) - \gamma(U(z_c - r, t)) - \mu c, \\ 0 = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + \displaystyle\sum_{i=1}^{2} F(z, z_c^i; r). \end{cases}}$$

・構成した定常解の安定性を調べるために，動座標系に変換したモデルに対して線形化固有値問題を構築する．

$$\boxed{\det \begin{pmatrix} \beta_{1,1}(\lambda, \mu) - \lambda & \beta_{1,2}(\lambda) \\ \beta_{2,1}(\lambda) & \beta_{2,2}(\lambda, \mu) - \lambda \end{pmatrix} = 0.}$$

363

クラスター解の存在・非存在定理（岡本，後藤田，N）

周期境界条件

速度0のクラスター解は存在しない．
表面張力関数γが線形単調減少関、あるいは下に凸の単調減少関数ならばクラスター解は存在しない．
表面張力関数γが上に凸の単調減少関数で，RとCがある条件を満たすならば，ただ一つのμに対してクラスター解が存在する．

全空間の場合

速度0のクラスター解は存在しない．
表面張力関数γが線形単調減少関数，あるは下に凸の単調減少関数ならばクラスター解は存在しない．
表面張力関数γが上に凸の単調減少関数で，RとCがある条件を満たすならば，ただ一つのμに対してクラスター解が存在する．

364

線形化固有値問題1

動座標系における定常解の安定性を調べる

$$(*) \begin{cases} \mu \dfrac{dz_c^i}{dt} = \gamma(U(z_c + r, t)) - \gamma(U(z_c - r, t)) - \mu c, \\ \dfrac{\partial U}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 U}{\partial z^2} + c\dfrac{\partial U}{\partial z} - U + \displaystyle\sum_{i=1}^{N} F(z, z_c^i; r). \end{cases}$$

(*)に対して線形化固有値問題を構築する．

$$(**) \begin{cases} z_c^i(t) = z_0^i + \varepsilon \phi_i(t), \quad (i = 1, \ldots, N) \\ u(z, t) = U_0(z; c) + \varepsilon \alpha(z, t). \end{cases}$$

とする．ここで ε は十分小さい正の実数, $z_0^i, U_0(z;c)$ は定常問題より求まる定常解である．次に

・樟脳濃度の拡散方程式の線形化

・樟脳ろ紙の運動方程式の線形化

をそれぞれ行う．

370

線形化固有値問題２

更に整理すると

$$\begin{pmatrix} \beta_{1,1}(\lambda) - \lambda & \beta_{1,2}(\lambda) & \cdots & \beta_{1,N}(\lambda) \\ \beta_{2,1}(\lambda) & \beta_{2,2}(\lambda) - \lambda & \cdots & \beta_{2,N}(\lambda) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{N,1}(\lambda) & \beta_{N,2}(\lambda) & \cdots & \beta_{N,N}(\lambda) - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

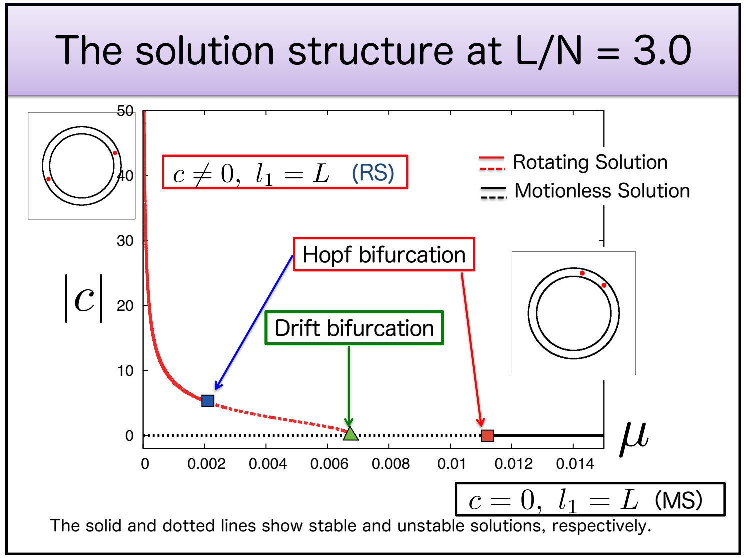
従って，固有値λ が満たすべき方程式は次のようになる：

$$\det \begin{pmatrix} \beta_{1,1}(\lambda) - \lambda & \beta_{1,2}(\lambda) & \cdots & \beta_{1,N}(\lambda) \\ \beta_{2,1}(\lambda) & \beta_{2,2}(\lambda) - \lambda & \cdots & \beta_{2,N}(\lambda) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{N,1}(\lambda) & \beta_{N,2}(\lambda) & \cdots & \beta_{N,N}(\lambda) - \lambda \end{pmatrix} = 0.$$

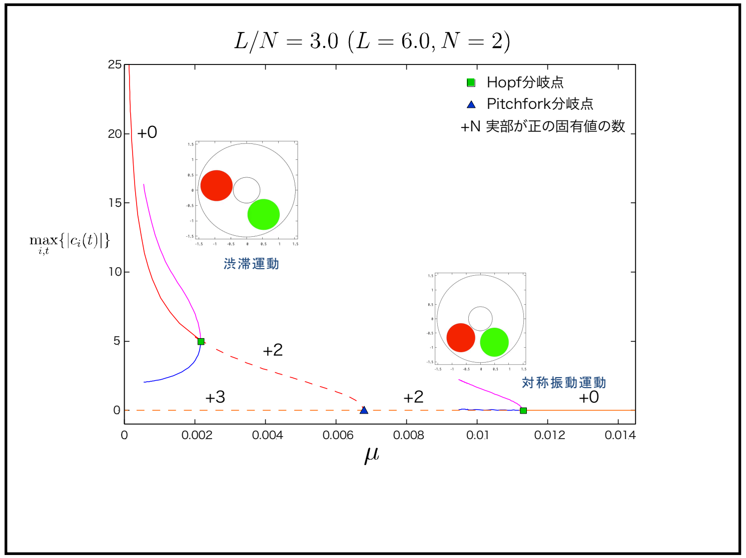
Newton法を用いて$N = 2$における上記の方程式を解き，定常解の安定性を数値的に調べる．

$$\boxed{\det \begin{pmatrix} \beta_{1,1}(\lambda, \mu) - \lambda & \beta_{1,2}(\lambda) \\ \beta_{2,1}(\lambda) & \beta_{2,2}(\lambda, \mu) - \lambda \end{pmatrix} = 0.}$$

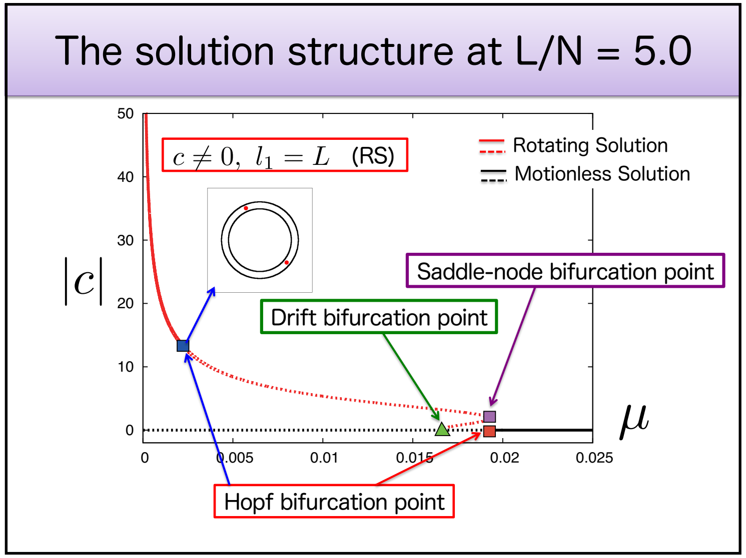
371



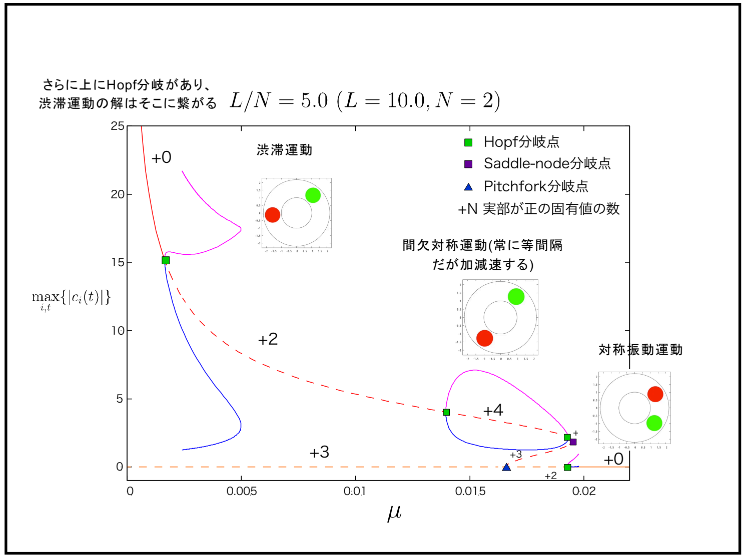
372



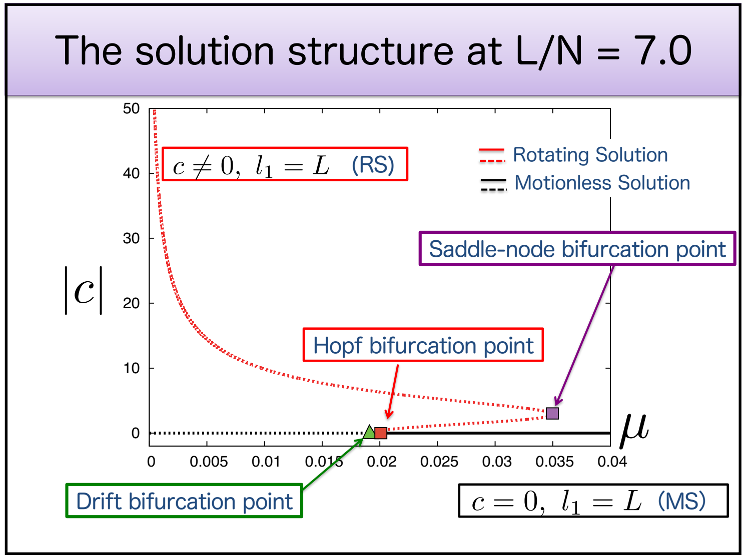
373



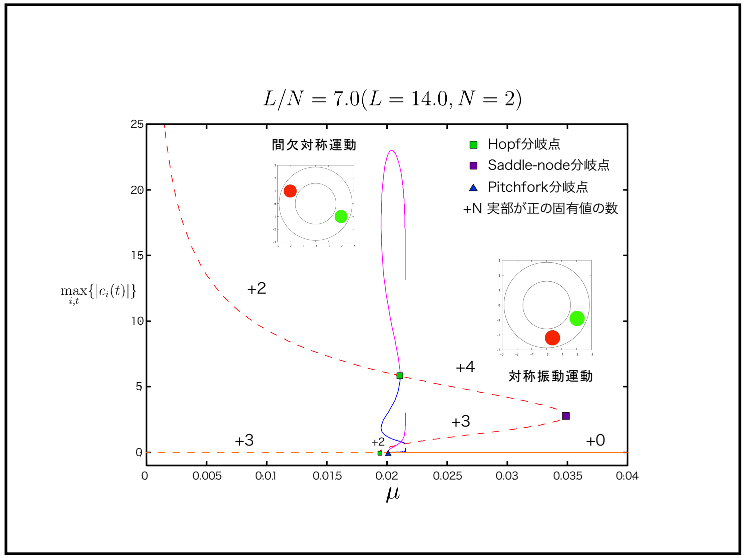
374



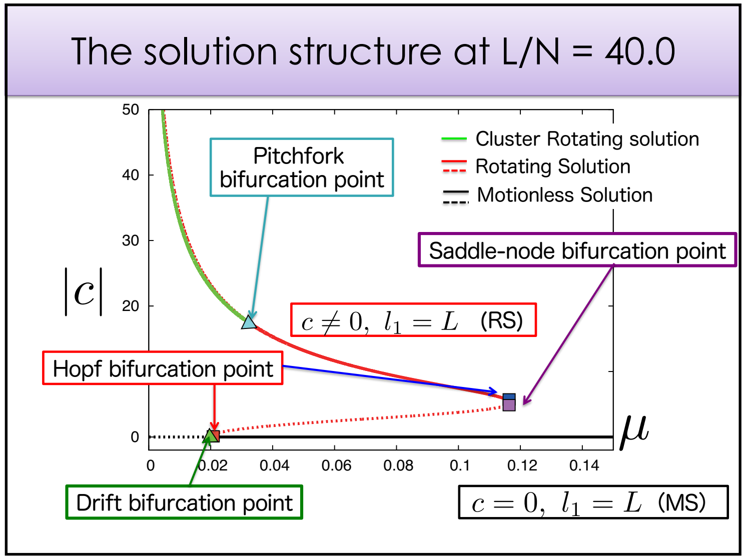
375



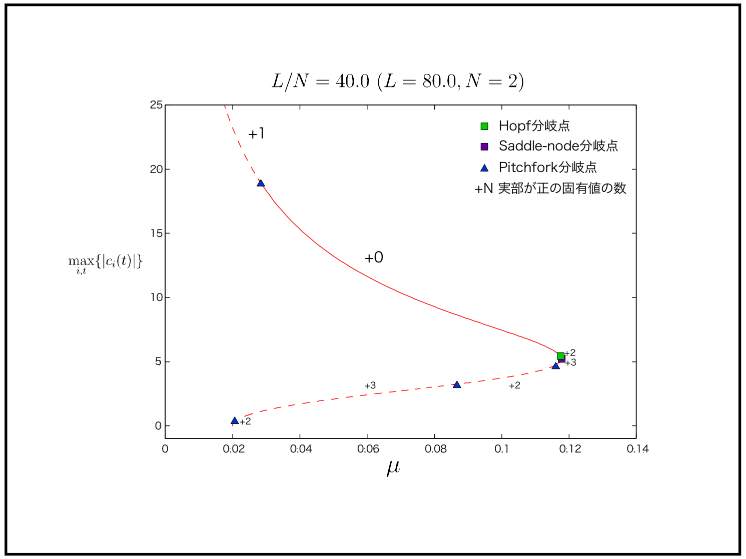
376



377

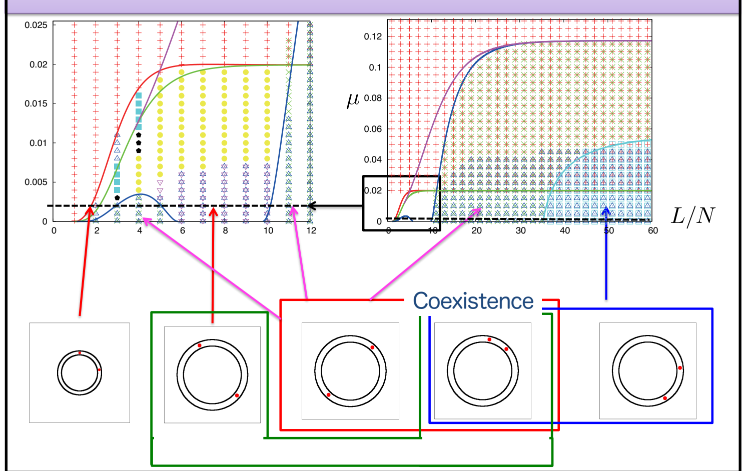


378



379

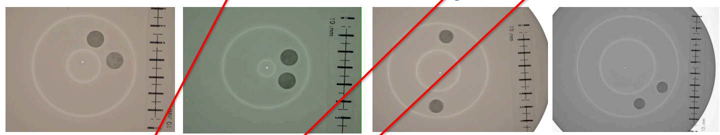
区間長に依存した２つの棒脳円盤運動

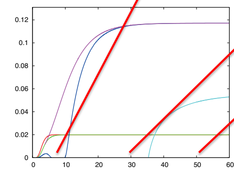


380

MotionID (mm)	10	20	30	40	50	60	70	80
I	3	5	4	6	4	6	4	6
II	7	5	5	3	3	0	2	0
III	0	0	1	1	1	2	0	0
IV	0	0	0	0	2	2	4	4

like oscillatory motion　Oscillatory rotating motion　Rotating motion　Cluster rotating motion





Rotation motion と cluster motion の区別を実験的に区別することは非常に難しい．

実験による理論の検証は非常に困難であるが，一部は理論の結果をサポートしてくれる．

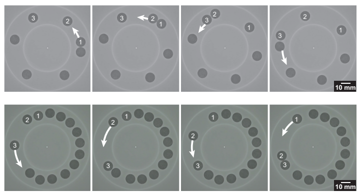
381

ここまで

数理モデルを用いて2個の樟脳円盤の運動について数理解析を行った．

区間長の違いによって回転運動や振動運動が起こる現象のメカニズムは数理モデルの分岐解析によって理解できた．

玉突き運動や渋滞運動の再現はできるが，
残念ながら，その出現機構については未解決

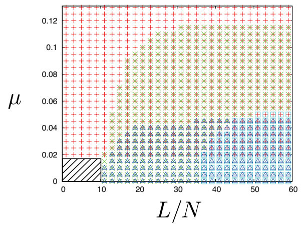


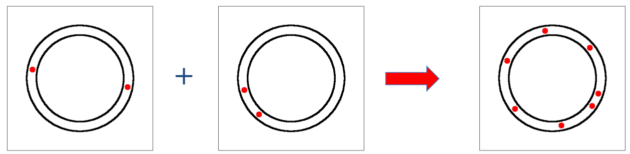
382

樟脳円版7個における玉突き

7個の樟脳円盤が等速度で回転しているときに1つだけ逆向きの速度にすると玉突きが発生する．また，対称振動が出ないパラメータ領域では玉突きが発生しなかった．

回転と振動が共存することが重要だろう





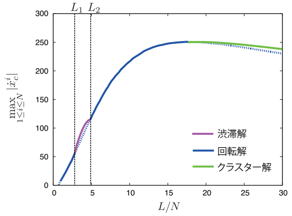
×：回転運動　△：対称振動運動　樟脳円盤7個における玉突き

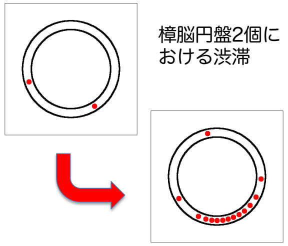
383

樟脳円版14個における渋滞

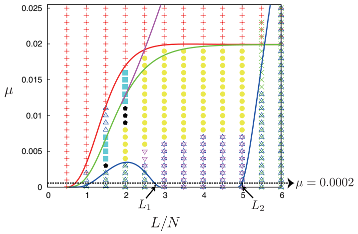
樟脳円盤2個において一様流が不安定化し
渋滞が発生する

L/Nが等しくなるようにパラメータを選べば樟脳円盤14個においても同様に渋滞が発生するだろう．



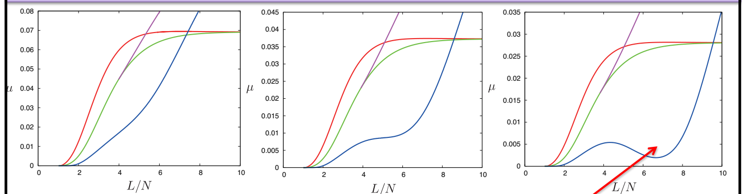


樟脳円盤14個における渋滞



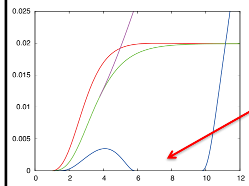
384

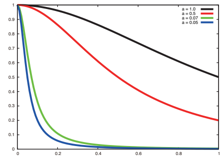
分岐構造のγ依存性



$$\gamma(u) = \frac{a^2}{a^2+u^2} + \Gamma$$

渋滞発生





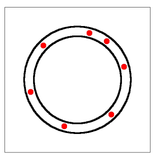
385

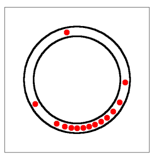
疑問

樟脳円盤（樟脳円盤）はパルス波のようなもの
→
我々の理解が正しければ，反応拡散系のパルス波でも

玉突き運動 → 進行パルス波の反射
渋滞運動 → 進行パルス列のHopf分岐

が出現するのではないか？

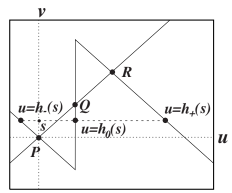


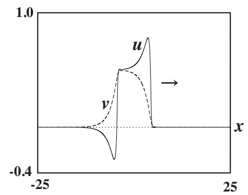


386

Reaction-Diffusion system

$$\begin{cases} \varepsilon\tau \dfrac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,v), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u,v) \end{cases}$$



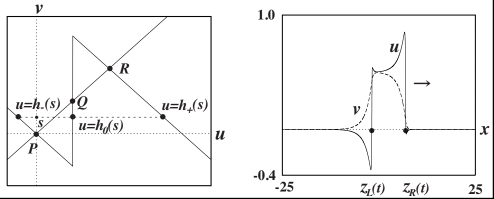


387

Singular limit equations

$$\varepsilon \downarrow 0 \quad \begin{cases} \tau \dot{z}_L = -\lambda(v(t, z_L(t))), \\ \tau \dot{z}_R = \lambda(v(t, z_R(t))) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v, & t > 0,\ x \notin (z_L(t), z_R(t)), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v + 1, & t > 0,\ x \in (z_L(t), z_R(t)). \end{cases}$$



388

Assumption: パルス幅一定と仮定

$z_R(t) - z_L(t) = 2r$: assumption

$\dot{z}_L(t) = \dot{z}_R(t) \qquad z_c(t) = \dfrac{z_L(t) + z_R(t)}{2}$

$$\begin{cases} \tau \dot{z}_L = -\lambda(v(t, z_L(t))), \\ \tau \dot{z}_R = \lambda(v(t, z_R(t))) \end{cases}$$

$$\tau \dot{z}_0 = \frac{\lambda(v(t, z_R(t))) - \lambda(v(t, z_L(t)))}{2}$$

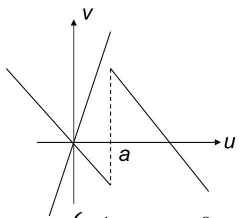
$$\tau \dot{z}_c = \frac{\lambda(v(t, z_c(t) + r)) - \lambda(v(t, z_c(t) - r))}{2}$$

390

仮定を満たす反応拡散系

Krischer and Mikhailov (1994)

$$\begin{cases} \varepsilon\tau \dfrac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^2 \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + (H(u-a) - u - v), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \gamma u - v, \\ a = a_0 + \alpha \left(\displaystyle\int_R (u+v)dx - s_0 \right). \end{cases}$$



$$H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0 \end{cases}$$

$\alpha \uparrow \infty \quad \rightarrow \displaystyle\int_R (u+v)dx = s_0$ ：積分量の保存条件

この条件から特異極限方程式では進行パルス波の幅が s_0 となる

391

Singular limit equations

$$\tau \dot{z}_c = \frac{\lambda(v(t, z_c(t) + r)) - \lambda(v(t, z_c(t) - r))}{2}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v, & t > 0,\ |x - z_c(t)| > r, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v + 1, & t > 0,\ |z - z_c(t)| \leq r. \end{cases}$$

$$\frac{\tau \dot{z}_R(t)}{\sqrt{(\tau \dot{z}_R(t))^2 + 4}} = 1 - 2a - 2v(t, z_R(t)),$$

$$\frac{\tau \dot{z}_L(t)}{\sqrt{(\tau \dot{z}_L(t))^2 + 4}} = -1 + 2a + 2v(t, z_L(t)) \quad \text{より}$$

392

Singular limit equations

$$\tau \dot{z}_c = \frac{2(v(t,z_c(t)-r)-v(t,z_c(t)+r))}{\sqrt{1-(v(t,z_c(t)-r))-v(t,z_c(t)+r))^2}}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v, & t>0,\ |x-z_c(t)|>r, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v + 1, & t>0,\ |z-z_c(t)|\le r. \end{cases}$$

393

Singular limit equations

$$\tau \dot{z}_c = \frac{\lambda(v(t,z_c(t)+r))-\lambda(v(t,z_c(t)-r))}{2},\ t>0$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v, & t>0,\ |x-z_c(t)|>r, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v + 1, & t>0,\ |z-z_c(t)|\le r. \end{cases}$$

394

特異極限方程式と樟脳運動モデル

$$\tau \dot{z}_c = \frac{\lambda(v(t,z_c(t)+r))-\lambda(v(t,z_c(t)-r))}{2},\ t>0$$

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v, & t>0,\ |x-z_c(t)|>r, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 v}{\partial x^2} - (1+\gamma)v + 1, & t>0,\ |z-z_c(t)|\le r. \end{cases}$$

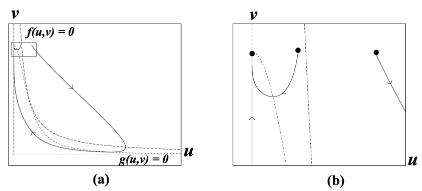
$$\mu \frac{dx_c(t)}{dt} = \gamma(u(t,x_c(t)+r))-\gamma(u(t,x_c(t)-r)),\ t>0$$

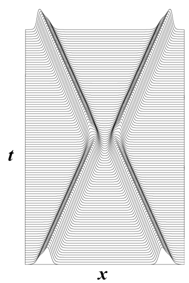
$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u, & t>0,\ |x-x_c(t)|>r, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - u + 1, & t>0,\ |x-x_c(t)|\le r. \end{cases}$$

395

Gray-Scott model

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \dfrac{1}{\varepsilon}\left(-au+vu^2\right), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = d\Delta v + h(1-u) - vu^2. \end{cases}$$

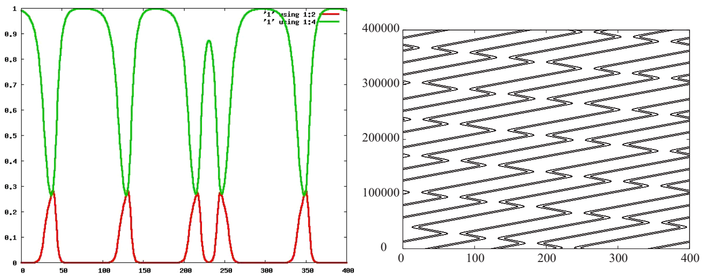




Reflection of
two travelling pulses

396

Gray-Scott modelの玉突き現象



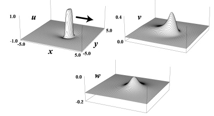
397

3変数反応拡散系

Purwins et al. (97, '00), Mimura (97)

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u + \dfrac{1}{\varepsilon}\left(ru - u^3 - k_1 v - k_2 w\right), & \text{activator} \\
\dfrac{\partial v}{\partial t} = \Delta v + u - \gamma_1 v + h_1, & \text{inhibitor 1} \\
\dfrac{\partial w}{\partial t} = d_w \Delta w + \dfrac{1}{\omega}\left(u - \gamma_2 w + h_2\right). & \text{inhibitor 2}
\end{cases}
$$

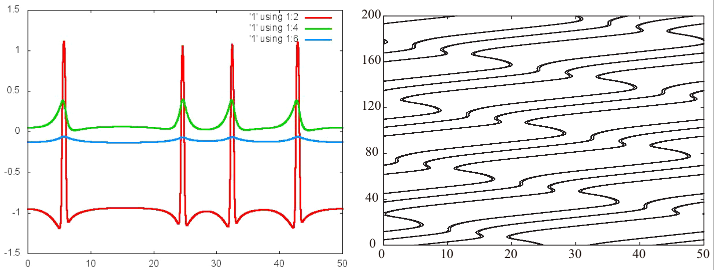
where $d_u, d_w, r, k_1, k_2, h_1, h_2, \gamma_1, \gamma_2, \varepsilon, \omega$ are positive constants



398

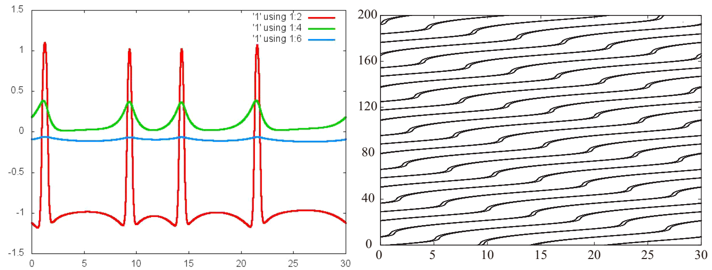
398

3変数反応拡散系の玉突き現象



399

3変数反応拡散系の渋滞現象



400

まとめと今後の課題

実験で見られた樟脳円盤7個や14個の集団運動を理解するために樟脳円盤2個で数理モデルを用いて数値計算，また定常解の安定性解析を行った．その結果から，渋滞は一様流の不安定化から発生し，玉突きは回転と振動の共存が本質であるということがわかった．
その理解を確認するために反応拡散系で数値計算を行った．

樟脳円盤2個における大域的解構造を調べる．
反応拡散系での渋滞現象の出現機構を調べる．
流体との相互作用を取り入れることで
実験で観察される渋滞現象が再現できるか調べていく．

401

問題1

次の素過程を記述する微分方程式を記述してください

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} \xrightarrow{k_1} 2\mathrm{A}$$

$$\mathrm{A} + \mathrm{C} \underset{k_-}{\overset{k_+}{\rightleftarrows}} \mathrm{P}$$

413

問題2

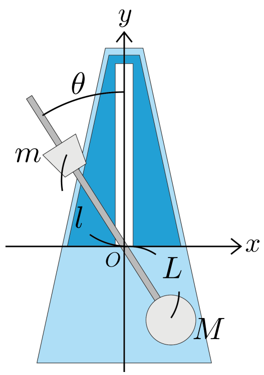
つぎの微分方程式を無次元化しなさい．

$$\begin{cases} \dot{X} = k_1 AZ - k_2 XZ - k_3 AX + 2k_3 AX - k_4 X^2, \\ \dot{Y} = 2k_3 AX - k_5 BY, \\ \dot{Z} = -k_1 AZ - k_2 XZ + hk_5 BY. \end{cases}$$

414

問題3

メトロノーム運動の数理モデルを作りなさい．
ただし，ゼンマイの力N_sと摩擦力N_fを加えること．



θ: 固定錘の振れ角
m: 遊錘の質量　M: 固定錘の質量
l: 軸から遊錘までの長さ
L: 軸から固定錘までの長さ
（ただし，$ML - ml > 0$ ）

遊錘の位置
$$\begin{cases} x_m = -l \sin\theta \\ y_m = l\cos\theta \end{cases}$$

固定錘の位置
$$\begin{cases} x_M = L\sin\theta \\ y_M = -L\cos\theta \end{cases}$$

と表し，ラグランジュの運動方程式を用いて重力のみを考慮した運動方程式を導出する．

415

問題3（ゼンマイの力と摩擦力）

ゼンマイの関数

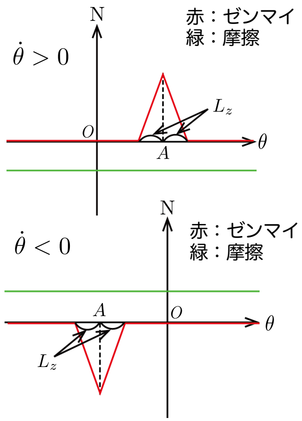
$$N_s = \begin{cases} f(\theta - A)\tanh\left(\dfrac{\dot\theta}{\alpha}\right) & (\dot\theta \geq 0) \\ f(\theta + A)\tanh\left(\dfrac{\dot\theta}{\alpha}\right) & (\dot\theta < 0) \end{cases}$$

$$f(\theta) = \begin{cases} f_0\left(1 - \dfrac{|\theta|}{L_z}\right) & (|\theta| \leq L_z) \\ 0 & (|\theta| > L_z) \end{cases}$$

摩擦の関数

$$N_f = -c\tanh\left(\frac{\dot\theta}{\alpha}\right)$$

ただし，A，α，f_0，L_z，c は正の定数とする．



416

問題4

講義の感想を書いてください．

417