

1次元時空パターン形成に対する連続及び離散モデルの解析

Analysis of continuous and discrete models for
one-dimensional spatio-temporal pattern formation

2023年6月

多賀 圭理
Keisuke TAGA

1次元時空パターン形成に対する連続及び離散モデルの解析

Analysis of continuous and discrete models for
one-dimensional spatio-temporal pattern formation

2023年6月

早稲田大学大学院 先進理工学研究科
物理学及応用物理学専攻 非平衡系物理学研究

多賀 圭理
Keisuke TAGA

緒言

数理モデルとパターン形成

私たちの身のまわりで起こる種々の現象は多様な要素が複雑に結びついて生じるために、それ自身を直接考察することは容易ではない。そこで人類は現象に強く関わる一部の性質だけに着目したり、あるいは理想的な状況を考えたりすることで現実を切り取り、単純化したものを考察することで現象を理解する手がかりとしてきた。

このように現実を切り取って構成されたモデルのうち、とくに数学の言葉を用いて記述された数理モデルは、現象に対する数理科学的な視点をもたらす。数学の言葉に抽象化された視点から現象を考察し解析することは、複雑な現象の背景にある個別具体的な性質を超えて、そのさらなる背後に横たわる普遍的な数理構造をつまびらかにする一步となる。つまり数理モデルの考察から、私たちは現象の背景にある本質的な性質を見出したり、あるいは現象間に共通する普遍的な性質を見出したりすることができる。

とくに時間発展する現象の数理モデルは、しばしば以下のような力学系とよばれる差分方程式系や微分方程式系;

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (2)$$

として導入されてきた。例えば式 (1) のような差分系としては生物の個体数モデルとしてのロジスティック写像 [1]、式 (2) のような微分方程式系としては古典力学の Newton の運動方程式*1や神経発火のモデルである FitzHugh-Nagumo モデル [2,3] などがその一例である。

*1 質量 M の物体についての典型的な Newton の運動方程式は以下のような 2 階常微分方程式;

$$M \frac{d^2 x}{dt^2} = F\left(x, \frac{dx}{dt}\right) \quad (3)$$

で表されるが、ここに運動量 $p = M \frac{dx}{dt}$ という時間発展変数を導入し $\tilde{F}(x, p) = F\left(x, \frac{p}{M}\right)$ と置きなおすと、式 (3) は

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \frac{p}{M} \\ \frac{dp}{dt} = \tilde{F}(x, p) \end{cases} \quad (4)$$

という等価な 1 階常部分方程式系へ帰着することができる。

本学位論文では空間パターンを形成する時間発展系を扱う。式 (1) と (2) の状態変数 x は時間のみ依存しているが、時空間パターン形成の数理モデルではさらに空間変数にも依存した偏微分方程式などによって数理モデルが定式化される。

空間パターンが形成される自然界の現象としては、キリンや熱帯魚などの動物の体表面の模様 [4]、蕁麻疹 [5]、乾燥破壊 [6]、テープの剥がし跡 [7]、貝の模様 [8]、BZ 反応などの化学反応系 [9,10] などがある。その性質の研究においては、例えば動物の体表面模様や BZ 反応などのパターン形成に対しては反応拡散方程式とよばれる、以下のような非線形項 (化学反応項) とラプラシアンによる線形な局所相互作用項 (物質の拡散項) を組み合わせた偏微分方程式;

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{F}(\mathbf{u}) + \Delta \mathbf{u} \quad (5)$$

を用いてモデル化がなされている。反応拡散方程式は時空カオスや自己相似パターンなど多様なパターン [11-13] を形成することが知られており、本論文の第 I 部でも反応拡散的な系としてテープの剥がし跡のパターン形成モデルを定式化し、その性質を解析する。

パターン形成モデルの定式化

空間パターンは、連続空間の対称性が破れたマクロな構造として現れる。このような空間的にマクロな構造が現れる系の数理モデル化においては、偏微分方程式のような連続空間の系としてモデル化するか、系やパターンの特徴的なスケールを単位構造とした空間差分系として、さらに時間変数や状態変数までも離散化した超離散系 (本論文では超離散系を主に離散系とよぶ) としてモデル化するなどの方向が考えられる。

離散系としてのモデル化では現象をそのまま描写することで直感的に行いうるという利点がある。例えば、エレメンタリーセルオートマトン (**Elementary Cellular Automaton; ECA**)^{*2}を用いて導入されたテープの剥がし跡の離散モデル^{*3}はその一例である。テープを適当な条件下で剥がすと、その剥がし跡に図 1 のようなシェルピンスキーガasketに似た自己相似パターンが現れることが知られている。Yamazaki et al. [14] はこの剥がし跡を再現する空間離散の 2 状態セルオートマトン (CA) モデルを提案した。この CA モデルでは、「剥がし跡において黒い領域は白い領域中を広がっていくが、その逆は起こっていないように見える」という観察を直接、「白い状態にあるセルの近傍に黒い状態のセルが存在するとき 1 ステップ後のセルの状態は常に黒に遷移する」という時間発展則^{*4}として導入している。

このように離散系としてのモデル化は、起きている現象をそのままモデルへ落とし込み、現象

*2 第 5 章 2 節を参照。

*3 第 1 章 3 節でも紹介する。

*4 この時間発展則は ECA254 というルールの ECA に相当する。ECA254 はほぼすべての初期条件から系全体が黒い終状態へと時間発展するため、これだけでは剥がし跡のパターンを再現できない。そこで提案された CA モデルには、ランダムに黒い状態が白い状態に遷移するという確率的な過程も導入されている。CA モデルが再現するパターンは実際の剥がし跡と似ており、定量的にも自己相似的な時空間パターンに関連したいくつかの統計量が実験と近いスケールリングを示すことが確認されている [14, 15]。

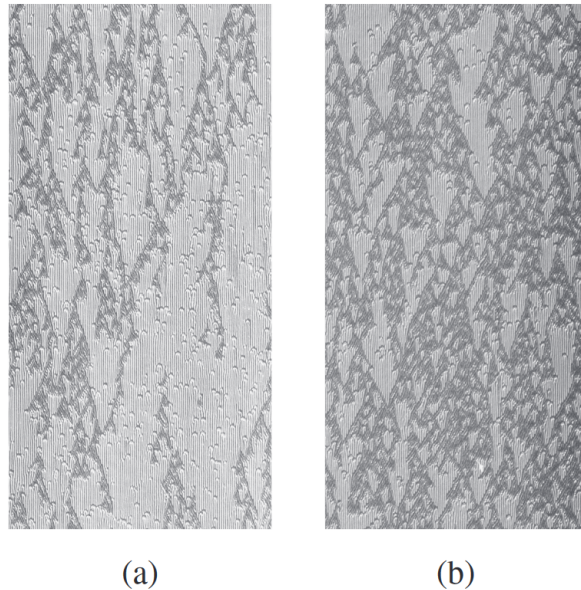


図1 テープの剥がし跡に現れる自己相似パターン。画像サイズは $15 \times 30\text{mm}^2$ 。
(a) 剥離速度 $V = 0.45\text{mm/min}$ 、(b) 剥離速度 $V = 0.48\text{mm/min}$ 。[著者と日本物理学会の許諾のもと、[14] より転載。© (2012) 日本物理学会.]

を描写することができるが、一方でこれは単に現象を描写したものにすぎないともいえる。そのため、「黒い状態にあるセルの近傍の白い状態のセルは黒い状態へ遷移する」という時間発展則がテープの剥がし跡において、どのような仕組みで実現されているかまでは議論できない。そのような詳細な機構は連続系のモデルから議論されうが、前述の確率的 CA モデルで行われたような「実際の現象におけるダイナミクスの見た目をそのままモデルへ導入するような定式化」を、連続系としての定式化においても実行できるとは限らない。

例えば連続空間中の各点が局所的にしか相互作用しない系であれば、大域的に現れる大規模な構造同士の相互作用と局所的な相互作用の機構には隔たりが生じうる。そのため、連続系としてのモデル化においては現象にどのような機構が本質的な役割を果たしているかを考察し、適切に取り入れることで数理モデルを定式化することが求められる。

離散と連続

数理モデルの定式化にあたっては離散系と連続系という 2 つの方向があることを述べたが、その 2 つをどのように結びつけるかは興味深い問題^{*5}である。例えば Hayase [11] は空間 1 次元の Bonhoffer-van der Pol 型の反応拡散方程式の孤立波が、シェルピンスキーガスケツトパターンを形成することを発見した(図 2)。シェルピンスキーガスケツトパターンは ECA90 などの離散系のダイナミクスから現れることが知られており、反応拡散方程式という偏微分方程式からシェルピンス

^{*5} Wolfram の 9 番目の問題ともよばれる [16]。

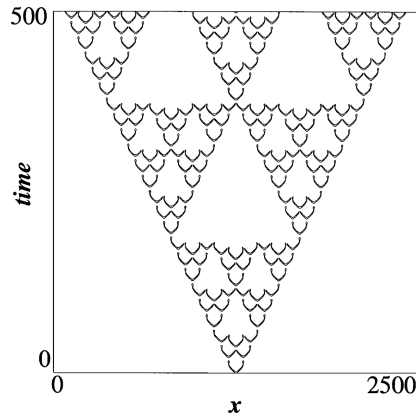


図2 Bonhoffer-van der Pol 型反応拡散方程式が形成するシェルピンスキーガスケッtpターン。
[著者と米国物理学会の許諾のもと、[17]より転載。© (1998) The American Physical Society.]

キーガスケッtpターンが得られることは、連続系であっても離散系で現れるパターン形成を実現可能であることを示している。Hayase and Ohta [17] は、自然界の現象の観察を通して離散モデルを構成するように、この Bonhoffer-van der Pol 型反応拡散方程式の示す孤立波のダイナミクスを観察することで、孤立波が自己複製、対生成、保存という特異な挙動をすることを確認した。そして、この観察をもとに CA モデルを定式化し、孤立波によってシェルピンスキーガスケッtpターンが形成されるメカニズムに一定の理解を与えた。

この CA モデルの定式化は具体的な系のダイナミクスの観察によっているが、より系統的に連続系から離散系を抽出する手法として超離散化の方法*6がよく知られている。偏微分方程式の離散化では通常、時間微分項、空間微分項を単純な差分に置き換えることなどにより離散化されるが、超離散化の方法では状態変数をも離散化することで連続系を離散系(超離散系)に落とし込む [18]。超離散化の方法によって導出された超離散系は、元の連続系の保存量やソリトンの性質を引き継ぐことがいくつかの具体例 [18] に対して知られており、複雑な連続系をシンプルな離散系に落とし込むことができる強力な手法として興味を惹いている。例えば交通流のモデルとしても扱われる Burgers 方程式という偏微分方程式の超離散化から導出される ECA184 は、これもまた交通流のモデルとして扱われている [20]。

*6 超離散化の方法は大まかに以下の手順で実行される。まず元の系の状態変数 X, Y に対して

$$X = \exp(A/\varepsilon), Y = \exp(B/\varepsilon)$$

という Cole-Hopf 変換を行い、新たな変数 A, B を導入する。次に

$$A + B = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log(XY)$$

$$\text{Max}\{A, B\} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log(X + Y)$$

という公式 [18] を適用することで、元の状態変数での $(+, \times)$ を $(\text{Max}, +)$ の演算に置き換える。これにより、状態変数も離散化された超離散系を定式化することができる。なお、この公式は状態変数が負の値をとる場合や差の演算 $(-)$ に対応していないといった問題点があるが、その場合の対応としてはトロピカル差分 [19] などが提案されている。

一方、連続系から離散系を抽出する際とは違い、離散系を出発点としてその性質を保持したまま連続系を定式化する試みにおいては、「離散系で定義されていない領域のダイナミクス」という未知の情報を適切に追加し補完する必要がある。実際、単純に超離散化の方法を逆にたどるだけでは離散系のダイナミクスを再現する連続値をとる系を構成することは、一般的にできない。例えば振動的な挙動を示す離散系から導出された連続値の系が、系全体の状態変数が 0 の一様状態に緩和するダイナミクスを示すなど、導出された系が一般的に元の系の性質を保持しない [21]。

改善案として、フィルター関数を導入することで 0 へ緩和しかけたダイナミクスを引っ張り上げる過程を追加する方法 [21] や、セルオートマトンのルール同士の重ね合わせを利用する方法 [22] が検討されている。ここからさらに Taylor 展開による近似や、時間遅れ微分方程式としての定式化によって時間連続化や空間連続化を行うことで ECA のダイナミクスを再現する偏微分方程式が定式化されている [21, 22] が、系統的な手法としては確立していない。

他に離散系に対応する連続系として、超離散系をナイーブに連続値をとる系へ拡張したファジーセルオートマトン (**Fuzzy cellular automaton; FCA**) [23, 24] というものも提案されている。例えば ECA の場合、各セルは $\{0, 1\}$ の 2 値しかとらないが、これに対するファジーエレメンタリーセルオートマトン (FECA) は、

- 全セルの値が 0 か 1 のいずれかをとるとき、系は ECA と同じダイナミクスを示す。
- 全セルの値が $[0, 1]$ に含まれているとき、各セルのダイナミクスは $[0, 1]$ の範囲に収まる。

という性質をもった力学系である。FECA は無数に構成されうるが、例えば真理値表からの構成などの系統的な手法 [25] や交通渋滞を記述する離散モデルという具体例を出発点とした FECA の構成 [26] などが議論されてきている。

論文の構成

本学位論文では時空パターン形成現象について、とくに空間 1 次元、時間 1 次元系とみなされる $(1+1)$ 次元の時空パターン形成現象を考察する。緒言では時空パターン形成現象のモデル化には離散系としてのモデル化の方向と連続系としてのモデル化の方向があることを述べてきたが、とくに第 I 部では連続系について議論し、第 II 部では離散系についての議論を行う。各部は次のような章立てで構成される。

第 I 部ではテープの剥がし跡という、粘着剤の連続体ダイナミクスから現れる自己相似的な構造をもった時空パターン形成現象について議論する。第 1 章では背景として、テープ剥がしに関する先行研究において報告された実験結果や、関連して提案されている数理モデルを紹介する。第 2 章では先行モデルとは異なる視点から、テープの剥がし跡を再現する力学的なモデルを新しく提案する。また提案したモデルの数値計算を行い、その結果を実験と比較する。第 3 章では提案したモデルの数理的な性質を解析し、モデルの分岐構造や剥がし跡に自己相似パターンが生成される機構についての考察を行う。さらに先行モデルとの比較を行う。第 4 章で第 I 部のまとめと今後の展望を述べる。

第 II 部では離散系である ECA に対して、その観測量の時間発展を追う枠組みである Koopman 作用素を導入する。そして、その枠組みのもとで ECA の性質を議論する。とくに、その Koopman スペクトル解析の結果から系の保存量などの物理的性質を議論できることを述べる。第 5 章で Koopman 作用素と ECA についての導入を行う。第 6 章で ECA に対して Koopman 作用素を導入し、その行列表現を構成する。さらに ECA の Koopman 固有関数を陽に構成する。また、13 セルの ECA の、すべての独立なルールに対して Koopman 固有解析を数值的に実行した結果を述べる。第 7 章で第 II 部のまとめと今後の展望を述べる。

最後に、第 8 章で第 I 部、第 II 部を通してのまとめと、連続と離散という視点からの展望を述べる。

目次

緒言		i
第 I 部	連続系に現れる自己相似構造	1
第 1 章	背景	2
1.1	イントロダクション	2
1.2	テープ剥離先端のダイナミクス	3
1.3	テープ剥離先端の空間構造と剥がし跡	6
第 2 章	モデルの定式化と物理的性質	13
2.1	硬い系の運動方程式モデル	13
2.2	やわらかい系の運動方程式モデル	18
第 3 章	モデルの数理的性質	23
3.1	モデルの相空間と分岐構造	23
3.2	ノイズとカオス	25
3.3	MB モデルとの比較	27
第 4 章	まとめと展望	28
第 II 部	離散系の観測量の解析	30
第 5 章	背景	31
5.1	イントロダクション	31
5.2	エレメンタリーセルオートマトン	32
第 6 章	ECA の Koopman 固有解析	35
6.1	ECA の Koopman 作用素	35
6.2	Koopman 作用素の行列表現	36
6.3	具体例: 3 セルの ECA120	38

6.4	Koopman 固有関数の陽な構成	41
6.5	13 セルの ECA に対する Koopman スペクトル解析	47
6.6	考察	52
第 7 章	まとめと展望	54
第 8 章	全体の総括	55
付録		57
	付録 A 一般の観測関数を基底とした ECA の Koopman 作用素	57
	付録 B Perron-Frobenius 作用素	62
	付録 C 位相縮約	64
謝辞		66
参考文献		67
研究業績		73

図目次

1	テープの剥がし跡に現れる自己相似パターン	iii
2	反応拡散方程式が形成するシェルピンスキーガスケットパターン	iv
1.1	Maugis and Barquins の実験の概略図	3
1.2	Maugis and Barquins によって測定された G と v の関係	4
1.3	MB モデルの相空間	5
1.4	Yamazaki and Toda の実験の概略図	6
1.5	Yamazaki and Toda によって測定された、ばねを引っ張る力と速度の関係	7
1.6	さまざまな引っ張り速度で見られるテープの剥がし跡	7
1.7	実験的に得られたパターンについての相図	8
1.8	ばねの引っ張りにかかる力と剥がし跡の白い領域の割合の関係	9
1.9	剥離先端における 2 種類の状態の境界部分	10
1.10	フェーズフィールドモデルが示す典型的なパターンと相図	11
1.11	確率的 CA モデルが示す典型的なパターン	12
2.1	相空間ダイナミクスのイメージ図	14
2.2	反応拡散モデルの示す典型的なパターン (硬い系)	16
2.3	黒い領域の割合 ρ と V の関係	18
2.4	反応拡散モデルの示す典型的なパターン (やわらかい系)	20
2.5	反応拡散モデルの相図	21
2.6	反応拡散モデルにおける、ばねを引っ張る速度と力の関係	22
3.1	反応拡散モデルのヌルクラインと不変多様体	24
3.2	反応拡散モデルの分岐図	25
3.3	ノイズのない反応拡散モデルが示すパターン	26
5.1	ECA120 のルール	32
5.2	周期境界条件を課した 3 セルの ECA120 の状態遷移ネットワーク	34
6.1	ECA120 の Koopman 行列 K と、それをブロック対角化した行列 \tilde{K}	39
6.2	周期境界条件を課した 3 セルの ECA120 の Koopman 固有値分布	39
6.3	ECA の 4 つの Class に対応する典型的な状態遷移ネットワーク	48
6.4	周期境界条件を課した 13 セルの ECA 全 256 種類に対する Koopman 固有値分布	49
6.5	Class I のルールのダイナミクスと Koopman 固有値分布	50
6.6	Class II のルールのダイナミクスと Koopman 固有値分布	51
6.7	Class III と IV のルールのダイナミクスと Koopman 固有値分布	52

表目次

2.1	自己相似パターンに関するスケーリング指数	17
-----	--------------------------------	----

第 I 部

連続系に現れる自己相似構造

第 1 章

背景

第 I 部では、自然界において連続系に自己相似構造が現れる例として私たちの日常生活でも身近なテープの剥がし跡を考察する。これを通じて先行研究の議論ではテープの剥がし跡の形成に本質的であるとされていた①双安定性、②相互作用の非対称性、③大域的相互作用、④ノイズという 4 つの性質 [27] のうち、双安定性とノイズ以外の性質はテープの剥がし跡の再現にあたって必ずしも必要ではないことが示される。以下が第 I 部の構成である。

第 1 章ではテープを剥がす際に実験的に確認されている性質や先行研究における数理モデルを紹介する。第 2 章では剥離先端のダイナミクスを記述する運動方程式として、先行研究とは異なるメカニズムでテープの剥がし跡を再現するモデルを、双安定な van der Pol 型の常微分方程式を反応項にもった反応拡散的な系として提案する。また、スケーリングなどの実験的に確認されている諸性質を提案モデルがよく再現することを示す。さらにテープの剥がし跡が非平衡相転移の Directed Percolation 普遍クラスに属することを示唆する。第 3 章では提案モデルの数理的性質を議論するとともに、剥がし跡に自己相似パターンが現れるメカニズムを、提案モデルと関連する離散系から考察する。第 4 章で第 I 部のまとめと展望を述べる。

1.1 イントロダクション

セロハンテープやゴムテープなどの粘着テープを貼って剥がすという行為は、私たちにとって日常的なものである。この粘着という、わずかに圧をかけることで 2 つの物体を簡単に接着できる性質は、その有用性から日常生活のみならず工業的にも社会的に幅広く応用され、長く研究されてきている [28–31]。

粘着テープはまさに、この粘着現象を応用したとくに身近な例である。粘着テープとは紙やフィルムなどの基材の片面または両面に粘着剤の層をもたせたものであるが、これを用いて私たちはさまざまなものを簡単に接着し、さらにその状態を長時間にわたって保持することができる。この粘着テープの「接着力」・「タック性 (貼り付けるとすぐに実用に耐える接着性を示す性質)」・「保持力」という 3 つの機能は、粘着 3 要素ともよばれている [32]。実用的には、さらに「耐反発性」・「シール性」・「再剥離性」などの性質が求められる場合もある [32]。これらの性質の発現には粘着

剤のバルク物性や界面物性などが関わるが、本研究では粘着テープの設計や高分子物性などの具体的詳細には触れない。

本研究ではテープの剥がし跡の形成メカニズムについて考察する。この剥がし跡の形成には、テープを剥がすときの剥離先端 (テープが基板から今まさに剥がれようとしている部分) の構造やダイナミクスが影響することが知られている [33] が、本研究では新たなメカニズムのもとで剥離先端ダイナミクスの現象論的な力学モデルの提案を行う。本章ではその前に、研究背景としてテープ剥がしに関わる先行研究の実験やモデルを紹介する。

1.2 テープ剥離先端のダイナミクス

テープを剥がす際にビリビリと振動することは非常に身近な現象であるが、これは剥離先端における断続的な振動に由来する。この振動現象は地震 [34] やゴムの引き裂き [35] などの破壊の物理で観測される **slip-stick** 振動である [36]。実験的にはテープを剥がす際の引っ張りにかかる力のダイナミクスに、定常的な振動や、カオス的な振動などが現れることが報告されている [36]。

剥離先端のダイナミクスについては長く研究されてきているが [29,30,36]、ここでは Maugis and Barquins [36] による剥離先端の振動に関する研究を簡単に紹介する。彼らは図 1.1 に示すような、ロール状に巻かれたテープを引っ張り剥がすという実験を行った。実験においてはテープを引っ張る際に必要な力などが計測されている。

実験の結果、一部の速度領域においてテープの引っ張りにかかる力 P に振動的な挙動が現れることが確認された。さらに図 1.2 に示すようにテープの引っ張りにかかる力 P に比例した量であるエネルギー解放率 $G = P/b$ と剥離先端が剥がれる速度 $v = R\Omega$ の関係において、一部の剥離速

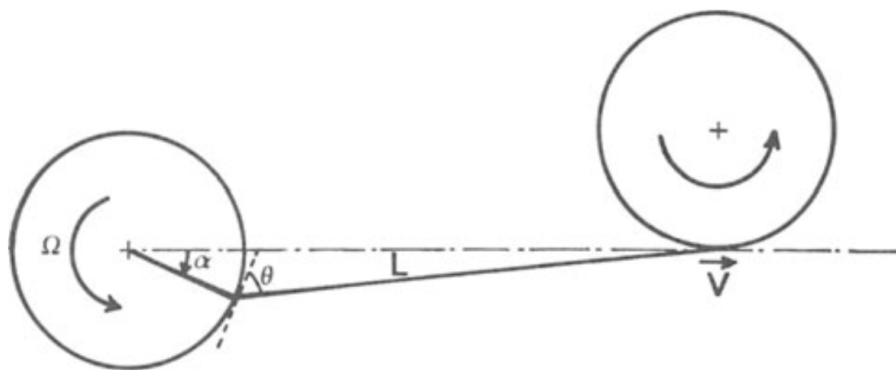


図 1.1 Maugis and Barquins [36] によって行われた実験の概略図。

左側のロール状になっている粘着テープを右側のロールで引っ張ることで剥離する。 V はテープを引っ張る速度、 L は剥離テープの長さ、 Ω は粘着テープのロールの角速度、 α はテープの剥離先端の位置の基準位置とのずれの角度である。[Springer Nature の許諾のもと、[36] より転載。© (1988) Springer Nature.]

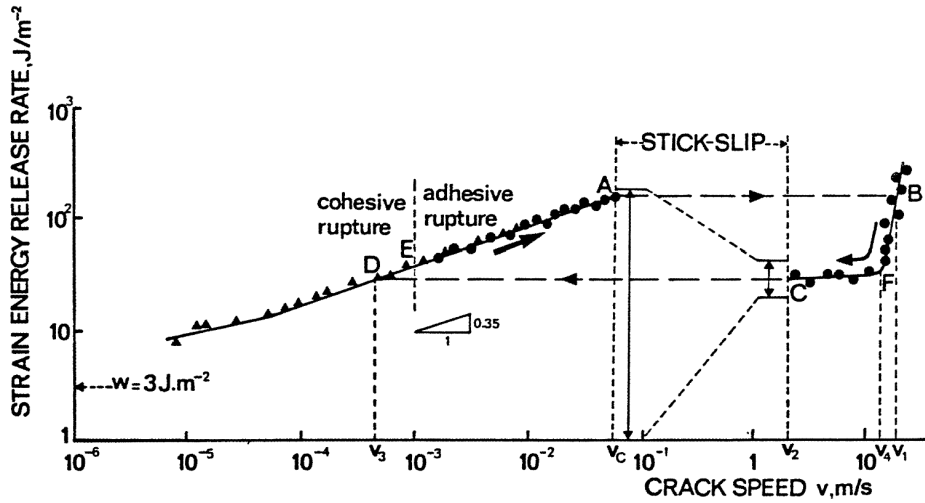


図 1.2 実験的に測定された G と v の関係。
 一部の速度領域で v の増大とともに G が減衰している。[Springer Nature の許諾のもと、[36]より転載。© (1988) Springer Nature.]

度領域では G が減衰する様子が確認された。ここで b はテープの幅、 R はテープのロールの半径、 Ω はテープのロールの角速度である。

Maugis and Barquins [36] は、この剥離先端のダイナミクスを記述する現象論的な常微分方程式モデルを提案している。そのモデルでは、テープを引っ張る速さ V をコントロールパラメタとして剥離速度 v とエネルギー解放率 G の 2 変数の時間発展を考察している。詳細な導出は省略するが、最終的に以下の 2 変数モデル (以降では **MB** モデルとよぶ) が定式化されている。

$$\begin{cases} \frac{dv}{dt} = b(G - \Phi(v))/m \\ \frac{dG}{dt} = -k(v - V)/b. \end{cases} \quad (1.1)$$

ここで $\Phi = \Phi(v)$ は定常的な速度でテープが剥がれる場合のエネルギー解放率であるが、これは slip-stick 振動の起きている領域では直接計測されない。そのため、モデルの上で Φ は剥離速度に応じて単調増加する 2 つの速度領域に、単調減少する速度領域が挟まれたような N 字型の関数で導入される。 b と k 、 m は正の定数である。数値計算を実行すると、このモデルは図 1.3 に示すように相空間において周期的なダイナミクス (振動的挙動) を示す。とくにモデルにおける G についてのヌルクラインから、図 1.2 の N 字型の関数も再現されている。

MB モデルを v についてのダイナミクスにまとめると、以下の 2 階常微分方程式;

$$\frac{d^2v}{dt^2} + \mu\omega \frac{d\Phi}{dv} \frac{dv}{dt} + \omega^2(v - V) = 0 \quad (1.2)$$

へ帰着される。ここで新たな定数、 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ 、 $\mu = \frac{b}{\sqrt{km}}$ を導入した。さらに $x = v - V$ 、

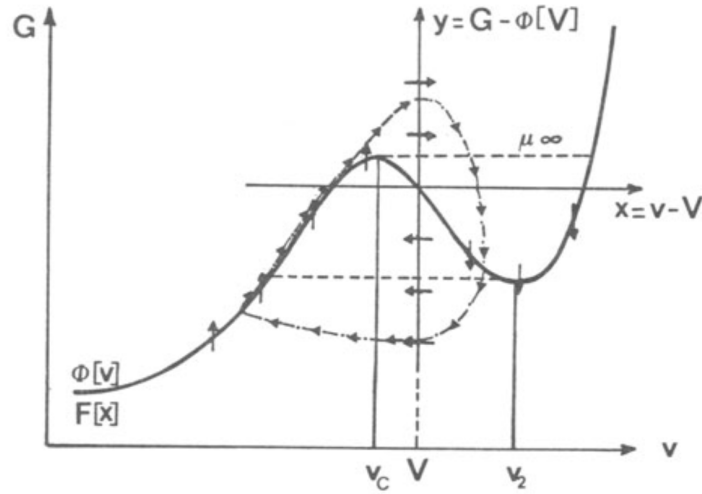


図 1.3 MB モデルの相空間。[Springer Nature の許諾のもと、[36] より転載。© (1988) Springer Nature.]

$F(x) = \Phi(v) - \Phi(V)$ 、 $f(x) = dF/dx = d\Phi/dv$ という変数変換を行うことで、MB モデルは

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \mu\omega f(x) \frac{dx}{dt} + \omega^2 x = 0 \quad (1.3)$$

へと書き換えられる。これは **Liénard** 方程式とよばれるタイプの常微分方程式になっており、さらに新たに $y = G - \Phi(v)$ という変数を導入することで、以下の **Liénard** 系とよばれる常微分方程式系へ帰着できる*1。

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \mu\omega[y - F(x)] \\ \frac{dy}{dt} = -\frac{\omega}{\mu}x \end{cases} \quad (1.4)$$

とくにこの F が適当な条件を満たす場合、Liénard の定理 [37] から系がリミットサイクル解を有することが示される。このように、MB モデルはテープ剥離における slip-stick 振動を再現するモデルとなっている。

MB モデルは 2 変数のダイナミクスであるためカオスの挙動を示さない [37] が、その後の研究では Hong and Yue [38] により、テープ剥離の実験におけるカオス振動やノコギリ波を再現する 3 変数の決定論的なモデルが提案されている。また、Hong らのモデルでは剥離進展時の剥離速度を人工的に導入しているが、De et al. [39] によって、慣性項を考慮することでこれを記述できる力学的なモデルも提案されている。より現象に忠実な数値計算として、テープの剥離を有限要素法でシ

*1 とくに f が $(1-x^2)$ のような関数のとき、式 (1.3) は van der Pol 方程式とよばれる。van der Pol 方程式を Liénard 系に帰着したものは Bonhoffer-van der Pol 方程式とよばれる。神経発火モデルとして有名な FitzHugh-Nagumo 方程式は Bonhoffer-van der Pol 方程式をベースとして定式化されている。式 (1.4) の F は 3 次関数とは限らないため Bonhoffer van der Pol 方程式そのものとは限らないが、N 字型の関数形をしていることから Bonhoffer-van der Pol 型の方程式とみなせる。

ミュレーションする研究も行われている [40,41]。例えば Ayami et al [41] では剥離先端を横から見た 2 次元系に単純化し、2 層フィルムの剥離をシミュレーションしており、引っ張り速度と引っ張りに必要な力の関係についての実験結果が再現されている。

1.3 テープ剥離先端の空間構造と剥がし跡

第 1 章 2 節では「テープを引っ張る際に必要な力」というマクロな性質に着目したが、テープの剥がし跡の形成には剥離先端の微小な空間構造が関わってくる。Urahama [42] は剥離先端の観察を通じて、剥離速度やテープを引っ張る力に応じて剥離先端に 2 種類の構造が現れることを確認した。1 つ目は遅い剥離で見られる構造で、粘着剤に空気が侵入することで形成されるトンネル状の構造*2である。そしてもう 1 つは比較的速い剥離において現れる、糸を引くような構造である。また Maugis and Barquins [36] などによっても確認されていたように、剥離速度を大きくすると途中でテープを引っ張る力が小さくなる領域が存在するが、この領域がちょうど剥離先端の構造が切り替わる剥離速度の速度領域に対応していることが確認されている。

この剥離先端の構造と剥がし跡の関連について、ここでは Yamazaki and Toda [7,33,44] による実験を紹介する。この実験では図 1.4 に示すような系が用いられた。テープの基材の弾性によるダイナミクスへの影響を調べるために、テープはばねを介して引き剥がされている。この実験を通してさまざまな速度やばね定数における引っ張りに必要な力や剥離先端の構造、剥がし跡の性質が調べられた。

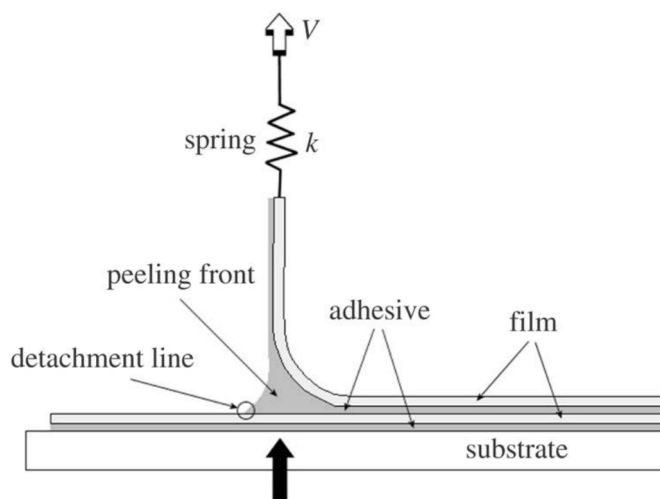


図 1.4 Yamazaki and Toda [7,33,44] によって行われた実験の概略図。

基材の弾性的な性質の影響を調べるために、テープはばねを介して定速で引っ張られ、剥がされる。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

*2 トンネル構造はフィンガリング不安定性によって形成される [43]。

まずテープを引っ張る際の力と速度の関係については、図 1.5 に示すように N 字型の関数となることが確認された。とくにばねがやわらかい場合には、ばねを引っ張る力に slip-stick 的な振動が現れることで、引っ張る力の取る値がある程度の幅をもつ速度領域が存在することが確認された。

ここで剥離先端の構造に注目すると、図 1.6 (a) の左下部に示すように遅い引っ張りにおいて剥離界面の粘着剤に空気が侵入し、トンネル的な構造が形成される。そして速い引っ張りでは図 1.6 (b) の左下部に示すようにトンネル構造は崩壊する。つまり、テープを引っ張る速度の大小により剥離先端には「トンネルあり」と「トンネルなし」の 2 種類の構造が現れる。そして、この 2 種類の構造に応じて図 1.6 に示すような剥がし跡が確認された。図 1.6 (a) と (b) は上方から下方にテープを剥がしたときの剥がし跡であり、(a) が低速領域のトンネル構造がある剥離界面によって形成され

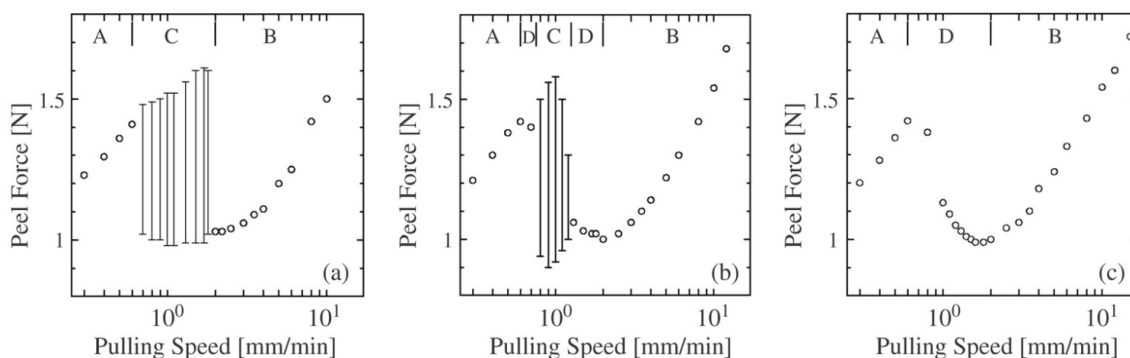


図 1.5 実験的に測定された、ばねを引っ張る力と速度の関係。

各図はそれぞれテープを引っ張るばねのばね定数 $k =$ (a) $2.9 \times 10^2 \text{N/m}$ 、(b) $1.7 \times 10^3 \text{N/m}$ 、(c) $2.4 \times 10^4 \text{N/m}$ 。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

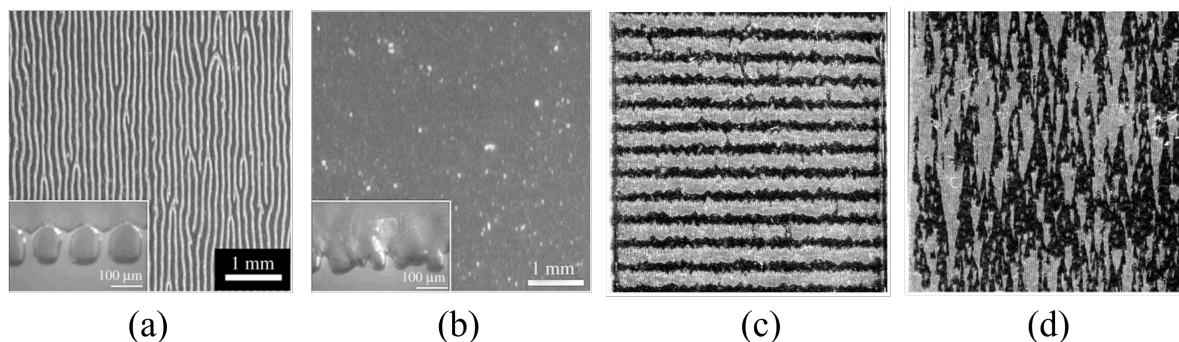


図 1.6 さまざまな引っ張り速度で見られるテープの剥がし跡。

剥離は画像上方から下方へ進展する。左下の図は剥離先端の拡大画像。トンネル構造があると粘着剤に空気が侵入し、白っぽい剥がし跡となる。つまり、白と黒の領域はそれぞれトンネルありの状態となしの状態に対応する。(a) トンネル構造がある場合。(b) トンネルがない場合。(c) 剥離先端が同期振動している場合。実サイズは $25 \text{mm} \times 25 \text{mm}$ 。(d) 剥離先端に両方の状態が混在している状態。実サイズは $25 \text{mm} \times 25 \text{mm}$ 。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

た剥がし跡、(b)が高速領域のトンネル構造が崩壊した剥離界面に対応する剥がし跡である。

さらに、ばねを引っ張る力が引っ張る速度に対して単調減少するような中間的な速度領域において、2種類の先端構造が切り替わることで剥がし跡に2つの状態が入り混じった特徴的な時空パターンが現れる。図 1.6 (c) と (d) はそれぞれ中間的な速度領域において上方から下方にテープを剥がしたときの剥がし跡である。図 1.6 (c) は、系がやわらかい(ばねのばね定数が小さい)ときに現れる振動的なパターンである。これは剥離界面全体の構造が同期した振動をみせることで出現する。対して図 1.6 (d) は、系が硬い(ばねのばね定数が大きい)ときに現れるシェルピンスキーガasketに似た自己相似パターンである。これは剥離先端の2種類の構造がカオティックに切り替わることによって出現する。図 1.7 は、引っ張る速度 V とばね定数 k を変えたときに得られたパターンについての相図である。

また、剥離先端の構造によってテープを引っ張る力が変化する [42] が、剥がし跡の白い領域の割合と引っ張りに必要な力の間に図 1.8 に示すような比例関係があることが確認されている [7]。

さて、剥がし跡の形状が引っ張り速度に応じて変化したり、自己相似的なパターンが形成されたりする現象のメカニズムを明らかにするために、いくつかのモデルが考案されている [7,14,15,27,44]。剥離先端の構造は粘弾性流体である粘着剤によって形成される3次元構造であるため、これを忠実に再現するには3次元の連続体のダイナミクスを考察する必要がある。しかしテープの剥がし跡は剥離先端の空間1次元のダイナミクスによって形成されており、その定性的性質は1次元空間のモデルから明らかにできることが期待される。実際、先行研究のモデルはいずれもシンプルな空間1

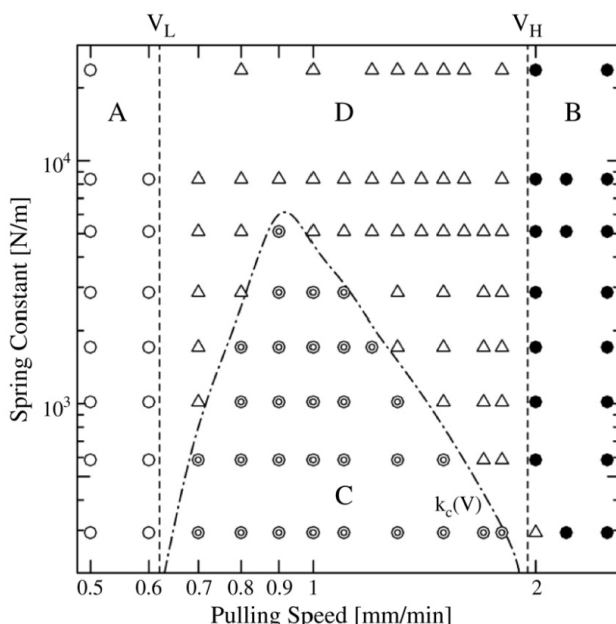


図 1.7 ばねの強さ k と引っ張り速度 V を変えて実験的に得られたパターンについての $(k-V)$ 平面上の相図。剥がし跡のパターンと各領域は、図 1.6 (a) が領域 A、図 1.6 (b) が領域 B、図 1.6 (c) が領域 C、図 1.6 (d) が領域 D に対応する。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

次元のモデルとして定式化されている。

最初に提案されたモデルは、剥離先端の状態 ϕ の状態ダイナミクスを記述するフェーズフィールドモデルとして定式化された連続モデルである。これまでに提案されたフェーズフィールドモデルは数種類ある*3が、ここでは Yamazaki and Toda [7] において導入された以下のモデル (以降、本モ

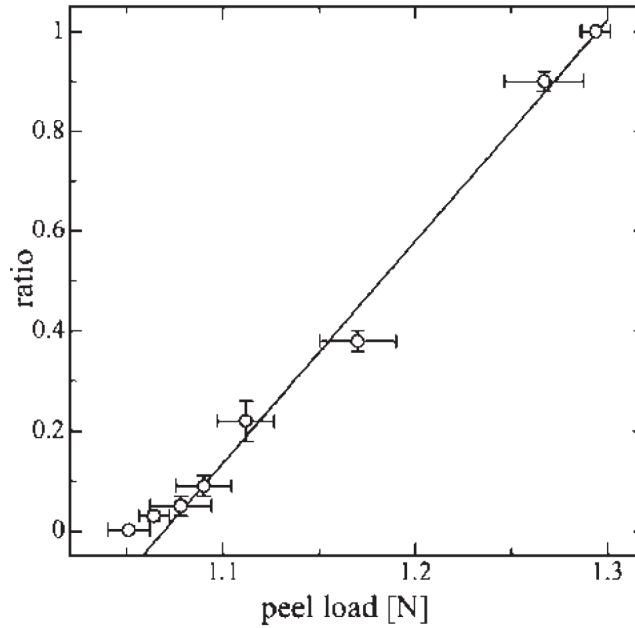


図 1.8 領域 D においてばねの引っ張りにかかる力と剥がし跡の白い領域の割合の関係。直線はアイガイドである。[著者と Elsevier の許諾のもと [7] より転載。© (2006) Elsevier.]

*3 物理的意味合いが見た目にわかりやすく、さらに MB モデルと近い性質があることから Yamazaki [27] によって導入された以下のフェーズフィールドモデルも簡単に紹介する。

$$\begin{cases} \frac{d\phi_i}{dt} = -a\phi_i(\phi_i - 0.5)(\phi_i - 1) + D\{\theta(\phi_{i+1} - \phi_i) + \theta(\phi_{i-1} - \phi_i)\} - v + \xi_i, & i = 1, \dots, N \\ \tau \frac{dv}{dt} = (\bar{\phi} - V) - v, \quad \tau = \frac{N}{k}, \quad \bar{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i \end{cases} \quad (1.5)$$

$-a\phi_i(\phi_i - 0.5)(\phi_i - 1)$ が二重井戸型のポテンシャルになっており、井戸の底にあたる $\phi_i = 0, 1$ のそれぞれが剥離先端にトンネル構造のある状態とない状態に対応している。つまり、このあと導入される状態 A と B に対しては、 $\phi_i = 0$ が状態 A、 $\phi_i = 1$ が状態 B に対応する。各変数の意味合いは式 (1.7) と同様である。このモデルは、系全体が同期的な振動挙動をしている (つまり、 $D\{\theta(\phi_{i+1} - \phi_i) + \theta(\phi_{i-1} - \phi_i)\} = 0$) と仮定し、さらにノイズも無視すると、 $\bar{\phi}$ についての以下のモデルへ書き換えられる。

$$\begin{cases} \frac{d\bar{\phi}}{dt} = -a\bar{\phi}(\bar{\phi} - 0.5)(\bar{\phi} - 1) - v \\ \tau \frac{dv}{dt} = (\bar{u} - V) - v \end{cases} \quad (1.6)$$

このモデルは第 2 式右辺 3 項の $-v$ という項を除いて MB モデルに表式が概ね一致する。この $-v$ という項がダイナミクスに無視できない影響を与える可能性はあるが、Yamazaki [27] において示された相空間は MB モデルと似たものとなっており、数理的に近い性質を示している。

デルのことをフェーズフィールドモデルとよぶ)を紹介する。

$$\begin{cases} \frac{d\phi_j}{dt} = -f_{int}(\phi_i) - D\{\theta(\phi_i - \phi_{i+1}) + \theta(\phi_i - \phi_{i-1})\} + \bar{\phi}v^* - v + \xi_i, & i = 1, \dots, N \\ \tau \frac{dv}{dt} = V - \frac{v}{\bar{\phi}}, \quad \tau = \frac{N}{k}, \quad \bar{\phi} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi_i \end{cases} \quad (1.7)$$

このモデルはトンネル構造の離散的な構造を単位構造とした、空間について離散的なモデルとして構成されており、 ϕ_i が i 番目の単位構造の状態を表している。 $-f_{int}$ は二重井戸型のポテンシャル項になっており、N 字型の区分線形関数で与えられている。井戸の底がそれぞれ剥離先端にトンネル構造のある状態とない状態に対応させられている。以降では、トンネル構造のある状態とない状態をそれぞれ状態 A、状態 B とよぶことにする。数値計算においては $\phi_i = 1, 2$ が井戸の底に設定されており、 $\phi_i = 2$ がトンネル構造のある状態 (状態 A)、 $\phi_i = 1$ がトンネル構造のない状態 (状態 B) にそれぞれ対応している。

このモデルのとくに特徴的な点は、以下のランプ関数を用いて導入された非対称な相互作用である。

$$\theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, \\ x & x \geq 0. \end{cases} \quad (1.8)$$

この隣接構造間の相互作用 θ は、実験において図 1.9 に示されるように状態 A と状態 B の間に先端位置のギャップがあることから、隣接する単位構造の状態変数の差を引数とした関数となっている。さらに θ の非対称性は、実験の観察において「状態 B の近傍にある状態 A」は状態 B に遷移しやすい一方で、「状態 A の近傍にある状態 B」が状態 A に遷移する様子が見られないことから、この現象を状態 B が状態 A を引っ張る作用は存在するがその逆はないという非対称性によるものと解釈し、それを表現したものとして導入されている。

D は空間相互作用の強さであり、 ξ_i は粘着剤の不均一性や粘着剤と基板の間に入り込む気泡によるノイズを表す項である。さらにモデルにはばねの効果が v のダイナミクスとして導入されてお

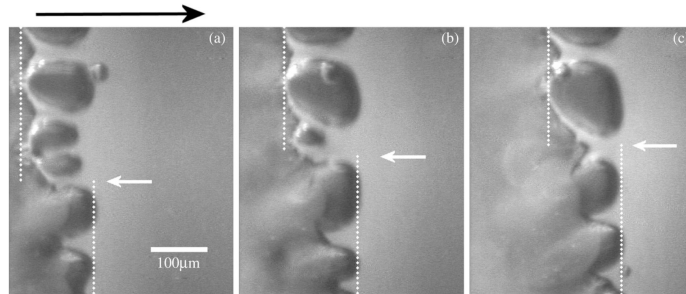


図 1.9 剥離先端における 2 種類の状態の境界部分。

白矢印が 2 状態の境界を示している。上側の領域がトンネル構造のある状態で、下側がトンネル構造の崩壊した状態である。各図は左から順に 3 秒ごとのスナップショットで、剥離は左から右へ進展している。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

り、 $\bar{\phi}$ という ϕ_i の平均値を介して系全体が相互作用する大域的な空間相互作用項も導入されている。ここで v はばねが状態 ϕ_i に及ぼす単位構造あたりの力の大きさ、 V はばねを引っ張る速度、 k が引っ張りに使うばねのばね定数、 N が剥離先端にある単位構造の数を表している。 v^* は定数である。図 1.10 (a) と (b) はそれぞれフェーズフィールドモデルを数値計算して得られたダイナミクスと相図であり、実験結果を再現していることが確認できる。

その他に提案されている数理モデルは、いずれも確率的セルオートマトン (CA) モデルである。最初の確率的 CA モデル (モデル A) [14] は、「黒い状態の近傍にある白い状態が黒い状態に遷移する様子が剥がし跡にみられるが、その逆は見られない」という実験的に確認された 2 状態間の非対称性を反映した「あるセルの隣接セルに黒い状態が存在するとき、次時刻のセルの状態は黒に遷移する」という決定論的ダイナミクスを用いて定式化されている。この時間発展則は ECA254 という ECA のルールに対応する。ECA254 はほとんどの初期条件から黒の一様状態に時間発展してしまうため、系の状態に依存して変化する確率で各セルの状態が黒から白に遷移するという、確率的ダイナミクスを組み合わせることでモデル A は定性的に構成されている。

Ohmori and Yamazaki [15,45] によって構成された他 2 種類の確率的 CA モデル (モデル B、モデル C とよぶ) は Yamazaki [27] のフェーズフィールドモデル (本節脚注*3 の式 (1.5)) の超離散極限から構成されている。いずれのモデルも図 1.11 に示すように実際の剥離と似たパターンを形成する。

さらに確率的 CA モデルは、スケーリングの観点からも実験結果を再現することが確認されている。実験と確率的 CA モデルは、いずれも (1+1) 次元パターン中の黒い領域 (状態 B) に囲まれ

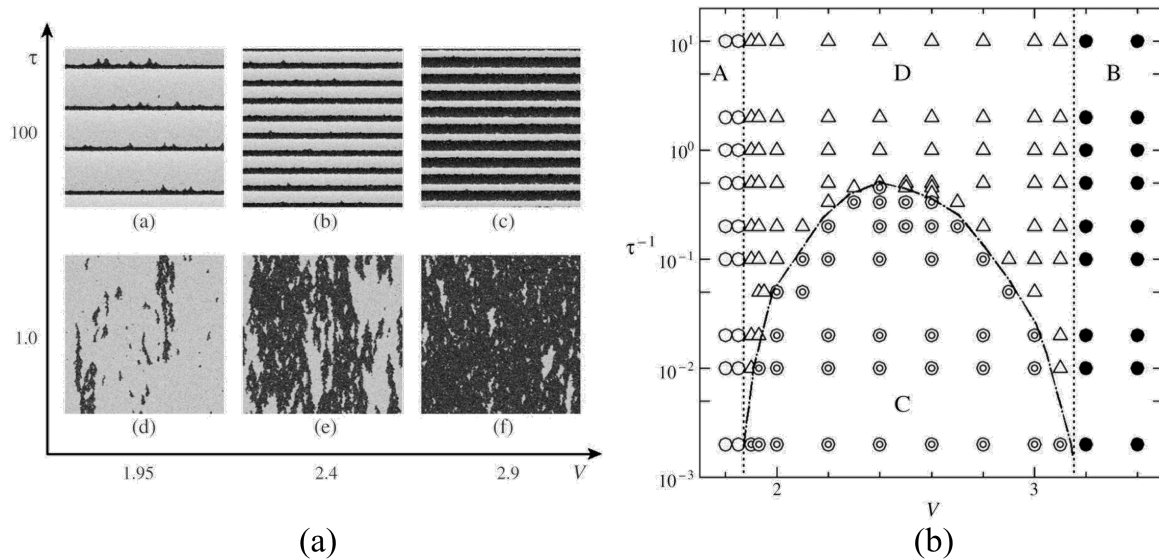


図 1.10 (a) モデルが示す典型的なパターン。(b) ばねの強さ k と引っ張り速度 V を変えてフェーズフィールドモデルから得られたパターンの $(k - V)$ 平面上の相図。[著者と Elsevier の許諾のもと、[7] より転載。© (2006) Elsevier.]

た白いクラスター (状態 A) の各サイズ s についての s の累積分布 $F(\geq s)$ 、各クラスターの時間方向の長さの標準偏差 $h(s)$ 、空間方向の長さの標準偏差 $w(s)$ が、 $F(\geq s) \sim s^{-\xi}$ 、 $h(s) \sim s^{\nu_{\parallel}}$ 、 $w(s) \sim s^{\nu_{\perp}}$ という冪的な性質を満たす。そして、これらのスケーリングとフラクタル次元 D の比較において、第 2 章 2 節の表 2.1 に示すように確率的 CA モデルは実験に近い値を再現している [14, 15]。

さて、ここまでテープを剥がすことに関する先行モデルを紹介してきたが、とくに剥がし跡の再現においては非対称な相互作用が特徴的な効果として導入されていた。実際、フェーズフィールドモデルの空間相互作用項をラプラシアン的な対称な相互作用に置き換えてみると、自己相似パターンが再現されないことが確認されている [7, 27]。つまり、先行モデルを出発点とした議論では非対称な相互作用がテープの剥がし跡の再現に本質的な役割を果たしていることになる。

しかし、この非対称な相互作用は粘着剤という連続体の局所的な相互作用として考えると作用反作用の法則に反する。つまり、フェーズフィールドモデルは剥離先端の力学的なダイナミクスの議論には適しておらず、あくまでも状態ダイナミクスを記述したモデルとみなされる*4。

その一方で、剥離先端の構造に応じて剥離先端の変位が異なることが実験的に確認されており (図 1.9)、剥離先端の力学的なダイナミクスからパターン形成を議論できる可能性は十分に期待される。力学的なモデルを用いてテープの剥がし跡のパターン形成を考えるためには、剥離先端の各点が空間対称な相互作用のもとで時間発展する、新たな機構のモデルを考える必要がある。

第 2 章では、空間対称な相互作用をもちながらテープの剥がし跡に現れる時空パターンを再現できる、剥離先端の力学的ダイナミクスを記述するシンプルなミニマルモデルを新たに提案する。

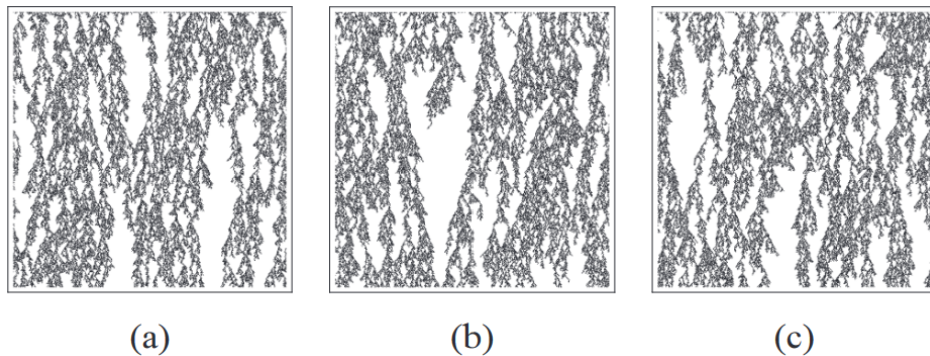


図 1.11 確率的 CA モデルが示す典型的なパターン。

図のサイズは空間方向 (横軸) $N = 512$ 、時間方向 (縦軸) 512 ステップ。(a) モデル A。(b) モデル B。(c) モデル C。[著者と日本物理学会の許諾のもと、[15] より転載。© (2019) 日本物理学会.]

*4 緒言でも触れたように大域的に現れる単位構造同士の相互作用と局所的な相互作用の関連は明らかではない。そのため、系の 3 次元的な空間構造と剥離先端の離散性のために状態 A が状態 B に遷移する際に力学的な相互作用とは別の、剥離先端位置のずれに起因する何らかの機構によって非対称な相互作用が実現されている可能性はここでは否定されない。ただし第 2 章のモデル化では、作用反作用の法則をみたと対称な相互作用でも剥がし跡のパターンを再現できることが示される。

第 2 章

モデルの定式化と物理的性質

2.1 硬い系の運動方程式モデル

本節では Newton の運動方程式をベースにしたシンプルなモデル [46] を提案し、さらにその数値計算結果を簡単に紹介する。まずは Yamazaki and Toda [7] の実験における系が硬い場合、つまりばねを引っ張る速度 V がテープの剥離速度そのものになる場合を考える。系がやわらかい場合については第 2 章 2 節で検討する。

2.1.1 モデルの定式化

第 1 章 3 節でも述べたようにテープの剥がし跡と剥離先端の構造には対応があり、トンネル構造に対応する剥離先端の位置はトンネルのない構造より伸びている様子が実験的に確認されている (図 1.9)。そこで今回は、剥離先端の 1 次元空間における単位構造の番号 i と時刻 t における粘着剤の変位幅 u 、 $u_i(t)$ のダイナミクスに着目したモデル化を行う。

これにより $u_i(t)$ はフェーズフィールドモデルの時間発展変数 ϕ_i と同様に、2 つの剥離界面の状態を表す状態変数とみなすこともできる。つまり、大きい u と小さい u をそれぞれ状態 A と状態 B に対応しているとみなすこととする。モデルの定式化においては、この剥離先端の力学的ダイナミクスを Newton の運動方程式の形で定式化することとした。

新しくモデルを定式化するにあたって、モデルの各点ダイナミクスには図 2.1 のようなイメージの相空間が実現されていると推測した。まず低速領域と高速領域では、図 2.1 (a) と (b) に示すように系はそれぞれ状態 A と B に対応する固定点のみを安定固定点として有している。次に中間的な速度領域においては、図 2.1 (c) に示すように状態 A は摂動によって状態 B へ遷移しやすい性質*1があると推測した。

このような相図を実現する剥離先端の力学的ダイナミクスの各点モデルとして、以下の Newton

*1 つまり状態 B に隣接する状態 A は相互作用によって不安定化し、状態 B に遷移しやすくなっている。

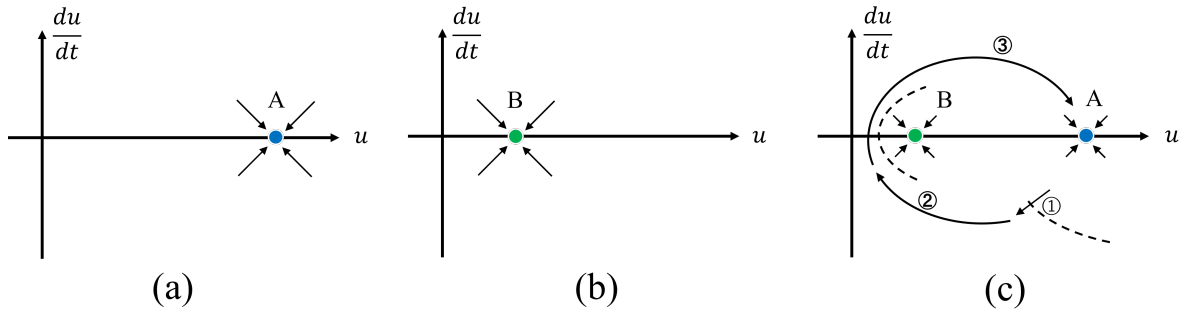


図 2.1 相空間ダイナミクスのイメージ図

(a) 小さな V 。系は状態 A に対応する安定固定点を 1 つだけもつ。(b) 大きな V 。系は状態 B に対応する安定固定点を 1 つだけもつ。(c) 中間的な V 。系は状態 A と B に対応する 2 つの安定固定点をもつ。① 状態 A にある系のトンネル構造が外乱によって壊れると、② 系の状態は状態 B へ遷移する。しばらくして、系の状態は状態 A へと戻る (③)。

の運動方程式を現象論的に考案した。

$$\frac{d^2s}{dt^2} = -\frac{dU(u)}{du} - b\frac{ds}{dt} + f\left(u, \frac{du}{dt}\right) \quad (2.1)$$

$s(t)$ は $s = 0$ を剥離開始点としたときのテープが剥離した長さを表しており、変位 u とは $s = u + Vt$ という関係にある。系は状態 A と B の 2 種類の状態をとることから、 U は二重井戸型のポテンシャル項として導入する。つまり、 U の 2 つの井戸の底が状態 A と状態 B に対応する。 $b > 0$ は粘着剤の粘性の大きさ、 V が引っ張り速度 (つまり、剥離速度) に対応する。

遅い剥離速度において状態 B はポテンシャルの井戸の底であったとしても、状態 A に比べて外乱に対して不安定化しやすいと考えられる。 f はこのような効果を与えるための非線形項として、現象論的に導入した。 f の具体的な表式は粘着剤の粘弾性的な性質や剥離界面の 3 次元ダイナミクスについての考察から導入できることが期待されるが、今回は以下の考察をもとにその近似的な表式を推測した。

まず変位 u が二重井戸のポテンシャルの底で静止しているときは、仮にその状態が不安定であっても定常状態となっていることが期待される。つまり f は $\frac{du}{dt}$ の関数である。そして f の符号は $\frac{du}{dt}$ の符号に応じて変化することが期待される。このような関数を最低次で近似すると、 f は $\frac{du}{dt}$ の 1 次関数となる。次に、 f は状態 B の近傍で強く作用するような単峰関数であることが期待される。このような関数は u についての 2 次関数で与えることができる。以上の考察から f の最低次近似は、 $f \sim (a - c(u - d)^2) \frac{du}{dt}$ となる。ここで a は不安定化の強さ、 c は不安定化が効く領域の大きさ、 d は状態 B の位置に対応する定数である。

ところが、このような関数で f を導入した数値計算では V を変化させたときのパターンの変化の仕方を上手く再現できなかった。そこでさらなる物理的要請として、 f は十分遠方で 0 となる ($\lim_{|u| \rightarrow \infty} f = 0$) という条件も考慮し、 u については Lorentz 型の関数を用いることとした。以上から $f = \frac{a}{1+c(u-d)^2} \frac{du}{dt}$ という関数で、不安定化をもたらず非線形項を負の粘性項として現象論的

に導入した。ここで a 、 c と d は定数であり、上述のものと同じ意味合いを有している。

このとき、式 (2.1) を s の代わりに $u = s - Vt$ のダイナミクスへ書き換えることで

$$\frac{d^2u}{dt^2} = -\frac{dU}{du} - b\left(V + \frac{du}{dt}\right) + \frac{a}{1+c(u-d)^2} \frac{du}{dt} \quad (2.2)$$

という各点ダイナミクスについてのモデルが得られる*2。式 (2.2) の右辺における $-\frac{dU}{du} - bV$ が弾性的な項であり、 $\left(-b + \frac{a}{1+c(u-d)^2}\right) \frac{du}{dt}$ が散逸的な項になっている。

さらにモデルには、以下のような空間相互作用項を導入する。

$$D_1(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + D_2\left(\frac{du_{i+1}}{dt} + \frac{du_{i-1}}{dt} - 2\frac{du_i}{dt}\right) \quad (2.3)$$

ここで D_1 と D_2 は正の相互作用係数である。この相互作用項は粘着剤の粘弾性的な性質に対応しており、 $D_1(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$ は弾性的な効果、 $D_2\left(\frac{du_{i+1}}{dt} + \frac{du_{i-1}}{dt} - 2\frac{du_i}{dt}\right)$ は粘性的な効果として導入される。

以上をまとめると、以下のモデルが定式化される。

$$\begin{aligned} \frac{d^2u_i}{dt^2} = & -\frac{dU}{du}\Big|_{u=u_i} - b\left(V + \frac{du_i}{dt}\right) + \frac{a}{1+c(u_i-d)^2} \frac{du_i}{dt} \\ & + D_1(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + D_2\left(\frac{du_{i+1}}{dt} + \frac{du_{i-1}}{dt} - 2\frac{du_i}{dt}\right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

以降、このモデルを反応拡散モデルとよび、式 (2.2) を反応項、式 (2.3) を拡散項とよぶこととする。

2.1.2 モデルのダイナミクスと実験の比較

数値計算

式 (2.4) に基づいた以下の方程式の数値計算を行った。

$$\begin{aligned} \frac{d^2u_i}{dt^2} = & -3(u_i - 1)^2(u_i - 2) - \left(V + \frac{du_i}{dt}\right) + \frac{2}{1+20(u_i-1)^2} \frac{du_i}{dt} \\ & + (u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + 0.1\left(\frac{du_{i+1}}{dt} + \frac{du_{i-1}}{dt} - 2\frac{du_i}{dt}\right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

状態 A と B はそれぞれ $u = 2$ と 1 に対応している。式 (2.5) には明記されていないが、実験において基板と粘着剤の間に入り込む気泡の効果を再現するために、各点に対して $p dt = 0.001dt$ という確率で系の状態が $u_i(t) = 0$ へ遷移するというランダム性を導入して数値計算を行った。

初期条件は $u_i(t=0) = 0$ 、 $\frac{du_i}{dt}\Big|_{t=0} = 0$ とした。これは剥離先端が剥離開始時に変形していないことを表している。境界条件には周期境界条件を採用した。そして、時間発展の計算スキーム

*2 第3章3節でも触れるが、このモデルは二重井戸型のポテンシャルをもった van der Pol 型の常微分方程式となっている。

は $dt = 0.01$ として 4 次の Runge-Kutta 法を用い、空間方向に並んだ単位構造の数は $N = 10^3$ とした。

図 2.2 に、このモデルから得られた典型的な時空パターンを示す。白と黒の領域がそれぞれ状態 A、B に対応している。この 5 つの異なる剥離速度 V におけるパターンから、 V の増大に伴って白の領域 (状態 A) が減少する代わりに黒の領域 (状態 B) が増大していく様子を確認できた。そして、それに伴って白と黒それぞれのクラスターの連結性が入れ替わる様子を確認できた。この性質は先行研究における実験結果 [7, 33] とも整合している。

時空パターンのスケーリング

先行研究では剥がし跡の自己相似的なパターンが、白い領域のクラスターサイズ s に関する累積サイズ分布 $F(\geq s)$ 、クラスターの時間方向の長さの標準偏差 $h(s)$ と空間方向の幅の標準偏差 $w(s)$ が、 $F(\geq s) \sim s^{-\xi}$ 、 $h(s) \sim s^{\nu_{\parallel}}$ 、 $w(s) \sim s^{\nu_{\perp}}$ という冪的な性質をもつことが確認されている。そして、それらとフラクタル次元 D を含めたスケーリング的性質が実験と確率的 CA モデルの間でよい対応を示すことが確認されている [14, 15]。表 2.1 に今回の反応拡散モデルの数値計算によって得られた ξ 、 ν_{\parallel} 、 ν_{\perp} 、そして D を示す。比較のために表には先行研究で報告された値 [14, 15] と、先行研究では計測されていなかったフェーズフィールドモデルに対する値も新たに計測して記載した。

表の実験値は黒い領域が長時間生存できるようになり始める引っ張り速度付近の剥がし跡を用いて計測されたものであり、反応拡散モデルについても黒い領域が長時間生存できるようになり始める剥離速度 ($V = 0.309$) の数値計算結果を用いた。これにより、反応拡散モデルのパターンは実験結果に対応するスケーリングを再現できていることが確認された。

黒い領域の割合

小さい剥離速度 V においては剥がし跡の黒い領域は生成しても速やかに死滅するが、 V が増大するとともに黒い領域の生存時間が長くなり、パターン中の黒い領域の割合が増大する。そして、

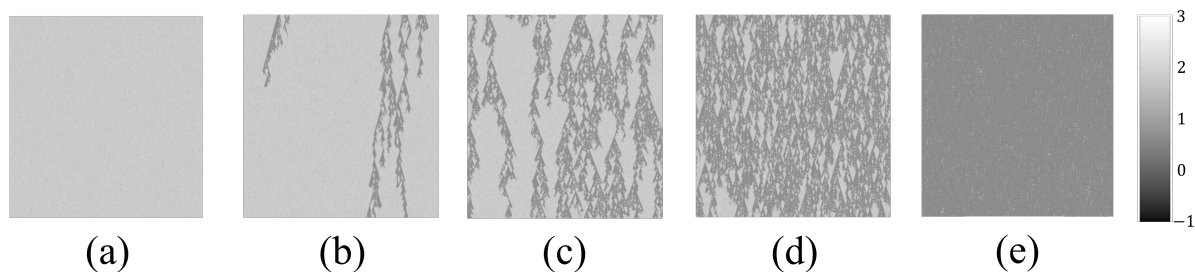


図 2.2 式 (2.5) の数値計算で得られた典型的なパターン。

画像上方から下方へ時間発展する。空間方向 (横軸) は $N = 10^3$ 、時間方向 (縦軸) の幅は $t = 500 \sim 1200$ である。右端にカラーバーも表示した。(a) $V = 0.2$ 。(b) $V = 0.30$ 。(c) $V = 0.309$ 。(d) $V = 0.32$ 。(e) $V = 0.5$ 。

表 2.1 自己相似パターンに関するスケーリング指数

	ξ	ν_{\parallel}	ν_{\perp}	D
反応拡散モデル (式 (2.5)) at $V = 0.309$	0.78	0.45	0.63	1.82
フェーズフィールドモデル [7] at $V = 2.2, \tau = 1$	0.91	0.31	0.61	1.78
model A at $r = 0.275$ [14]	0.85	0.41	0.58	1.70
model B at $r = 0.181$ [15]	0.84(± 0.04)	0.41(± 0.03)	0.58(± 0.02)	1.61(± 0.01)
model C at $r = 0.037$ [15]	0.81(± 0.05)	0.41(± 0.03)	0.58(± 0.03)	1.62(± 0.01)
peeling at $V = 0.48\text{mm}$ [14]	0.85	0.45	0.59	1.70

最終的には剥がし跡全体が黒い領域で埋め尽くされる。黒い部分が剥がし跡全体に占める割合と引っ張り速度 V の関係は実験的に調べられている [7]。この結果と比較するために $u_i(t)$ の代わりにモデルの状態を表す変数 $\varepsilon(u)$ を以下のように導入する。

$$\varepsilon(u) = \begin{cases} 1 & u < 1, \\ 0 & u \geq 1. \end{cases} \quad (2.6)$$

ここで $\varepsilon(u)$ は状態 A で 0 をとり、状態 B で 1 をとる量とみなされる。このとき、剥がし跡を占める黒い状態の割合 ρ は

$$\rho = \frac{1}{NT} \int_0^T \sum_{i=1}^N \varepsilon(u_i(t)) \quad (2.7)$$

で定まる。図 2.3 (a) に剥離速度 V と ρ の関係を示す。黒丸が式 (2.5) の数値計算結果であり、連続的な転移が生じている様子を確認できる。 ρ が 0 から立ち上がり始める臨界的な V の値は $V_c = 0.309$ と推定した。

Yamazaki and Toda [7] によって計測された実験結果は青星でプロットした。なお、結果の比較のために青星は実験における引っ張り速度を適当に変換したうえでプロットした。さらに ρ の臨界指数を調べるために、 ρ を $V - V_c$ の関数として両対数グラフにプロットしたのも図 2.3 (b) に示す。

これらの図 2.3 (a) と (b) に示されたように、実験結果と数値計算結果はよくあっている。とくに臨界点近傍で秩序変数が $\rho \approx (V - V_c)^\beta$ という冪的な性質を示しており、その傾きは $\beta \approx 0.276$ となった。

以上のように、対称な空間相互作用のもとで考案された今回の反応拡散モデルは、テープの剥がし跡の見た目や統計的性質をよく再現している。

注釈 1. 今回推定した臨界指数 β はテープの剥がし跡と有向パーコレーション (**Directed Percolation; DP**) 普遍クラスの関連を示唆している。DP 普遍クラスは非平衡相転移の普遍クラス [47, 48] である。実験的には液晶乱流 [49] や層流乱流相転移 [50, 51] が DP 普遍クラスに属することが確認されている。

DP 普遍クラスに含まれる系は臨界的なスケーリングにおいて近い指数を示す。 β については平均場の理論から $\beta \approx 0.276486$ 程度になることが計算されており、これは今回計測された値と近いものとなっている。実際、テープの剥がし跡に見られるような黒い領域が浸透拡散していく時空間パターンは Domany-Kinzel モデルなど [47, 48, 52] の DP 普遍クラスに属するモデルで現れるパターンによく似ている。

DP 普遍クラスのスケーリング的な性質は他にもいくつかあるが、それらに関連した物理量はこれまでのテープの剥がし跡に関する実験で計測されてきていない。そのため、テープの剥がし跡のパターン形成が DP 普遍クラスに属するかどうかの検証は今後の課題である。

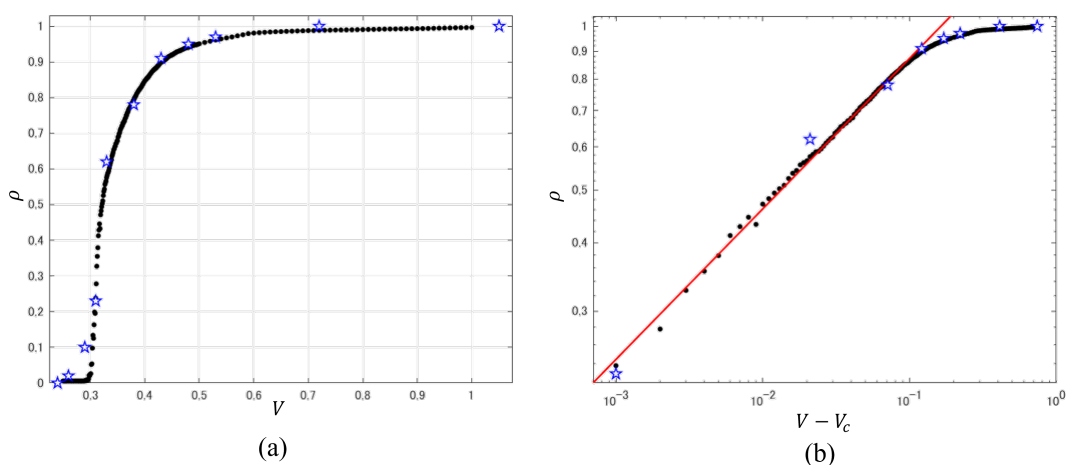


図 2.3 (a) 黒い領域の割合 ρ と V の関係。青星が実験結果 [山崎義弘氏より提供] であり、実際の剥離速度 v は $V = v \times 0.48 - 0.146$ として V に変換されている。黒丸はモデルの数値計算結果である。なお、数値計算においては $N = 10^4$ とした。

(b) ρ と $V - V_c$ のスケーリング的關係。ここでは $V_c = 0.309$ とした。赤い直線は傾き 0.276486 のアイガイドである。

2.2 やわらかい系の運動方程式モデル

第 2 章 1 節では硬い系、すなわちばねを引っ張る速度 V とテープの剥離速度が同じになる場合を考えた。本節では粘着テープの弾性を考慮するためにばねを介してテープを引っ張った Yamazaki and Toda [7, 33] の実験と同様な系を考えることで、やわらかい系についても考察する。やわらかい系においては、一般的にテープの剥離速度がばねを引っ張る速度と一致せず、剥がし跡には新たに同期的な振動パターンが現れる。

2.2.1 ばねの導入

やわらかい系のモデルを定式化するにあたり、剥離先端の時間発展は式 (2.5) で与えられるとする。そして式中の V をばねによってテープが剥がされる速度と置き換えることで、モデルにばね

のダイナミクスを導入する。

まず、テープを引っ張るばねは Yamazaki and Toda [44] の実験や、先行モデル [7, 38, 44] の仮定と同様に線形ばねを仮定する。ばねは一方の端が機械によって一定の速度 V で引っ張られ、もう一方の端はテープによって引っ張られているとする。ばねがテープを引っ張る端の位置を L とし、剥離開始時点の位置を $L(t=0) = 0$ とする。実験で確認されているように剥離先端の構造によってテープを剥がす力が変化するが、その変化の仕方は図 1.8 に示したように剥離先端の白い部分の割合に対してほぼ線形である [7]。このことからテープを剥がすときに必要な力は、 u_i の平均値 $\bar{u} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i$ に比例する量で与えることにした。

このとき、ばねの先端位置の時間発展は

$$\frac{d^2 L}{dt^2} = -k(L - Vt) - b' \frac{dL}{dt} - K\bar{u} \quad (2.8)$$

という Newton の運動方程式で定式化できる。 k はばね定数、 b' は粘性の大きさ、 K はテープを剥がすために必要な力に対する \bar{u} の比例係数である。 L の時間変化量 $\frac{dL}{dt}$ がテープを剥がす速度となる。とくに、 $b' > k \gg 1$ という状況が硬い系に対応する。

L の代わりに $l = L - Vt$ というばねの伸びを表す変数を新たにおくと、式 (2.8) は

$$\frac{d^2 l}{dt^2} = -kl - b' \left(\frac{dl}{dt} + V \right) - K\bar{u} \quad (2.9)$$

へ帰着される。この場合、テープを剥がす速度は $\frac{dL}{dt} = \frac{dl}{dt} + V$ となる。また、テープを引っ張る際に必要な力は $F = kl$ となる。

以上の l のダイナミクス (式 (2.9)) と、第 2 章 1 節で提案したテープ剥離モデル (式 (2.5)) を組み合わせた以下の微分方程式系を、やわらかい系に対するテープ剥がしモデルとして数値計算を行った。

$$\begin{cases} \frac{d^2 l}{dt^2} = -kl - 20 \left(\frac{dl}{dt} + V \right) - 10\bar{u}, \\ \frac{d^2 u_i}{dt^2} = -3(u_i - 1)^2(u_i - 2) - \left(\frac{dl}{dt} + V + \frac{du_i}{dt} \right) + \frac{2}{1 + 20(u_i - 1)^2} \frac{du_i}{dt} \\ \quad + D_1(u_{i-1} + u_{i+1} - 2u_i) + D_2 \left(\frac{du_{i-1}}{dt} + \frac{du_{i+1}}{dt} - 2\frac{du_i}{dt} \right). \end{cases} \quad (2.10)$$

ばねの伸び l の初期条件は $l(t=0)$ 、 $\frac{dl}{dt}|_{t=0} = 0$ 、 u_i の時間発展は第 2 章 1 節と同様の設定で、 $dt = 0.01$ の 4 次の Runge-Kutta 法を用いて数値計算を行った。

2.2.2 モデルのダイナミクスと実験の比較

時空パターンと相図

式 (2.10) の数値計算において得られた時空パターンの一例を図 2.4 に示す。図 2.4 (a)、(b) と (d) は硬い系でも見られたパターンであるが、ばねを導入したことで図 2.4 (c) に示すような剥離先端が同期して振動するパターンを新たに得た。

Yamazaki and Toda [7,44] ではパターンのお見だ目をもとにして相図が描かれていたが、今回は以下の定量的な指標を導入しパターンを分類した。

- A (白い一様状態): 黒い領域の割合 ρ が 0.05 以下。
- B (黒い一様状態): 黒い領域の割合 ρ が 0.94 以上。
- C (同期振動状態): A,B 以外の場合について、秩序変数の時間平均 $\langle \psi_T \rangle$ と時空パターンの秩序変数 ψ に対して、 $\langle \psi_T \rangle \geq 1.5\psi$ を満たす。
- D (時空カオス状態): その他。

ここで新たに導入した時空パターンの秩序変数 ψ と秩序変数の時間平均 $\langle \psi_T \rangle$ は、各点の状態を表す以下の変数 ε' を用いて定義する。

$$\varepsilon'(u) = \begin{cases} 1 & u \leq 1, \\ -1 & u > 1. \end{cases} \quad (2.11)$$

ε' は第 2 章 1 節で導入した ε とは異なり、状態 A に対しては -1 、状態 B に対しては 1 をとる量とみなされる。まず、時空パターンの秩序変数 ψ は

$$\psi = \frac{1}{NT} \left| \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \varepsilon'(u_i(t)) dt \right| \quad (2.12)$$

で定義する。硬い系の議論で導入した ρ (式 (2.7)) は黒い領域の割合が大きいほど 1 に近い値をとったが、時空パターンの秩序変数 ψ はパターンが白または黒の一様状態に近いほど 1 に近い値をとり、逆に白と黒の状態が同じ割合で混ざりあっている場合、 0 に近い値をとる*³。

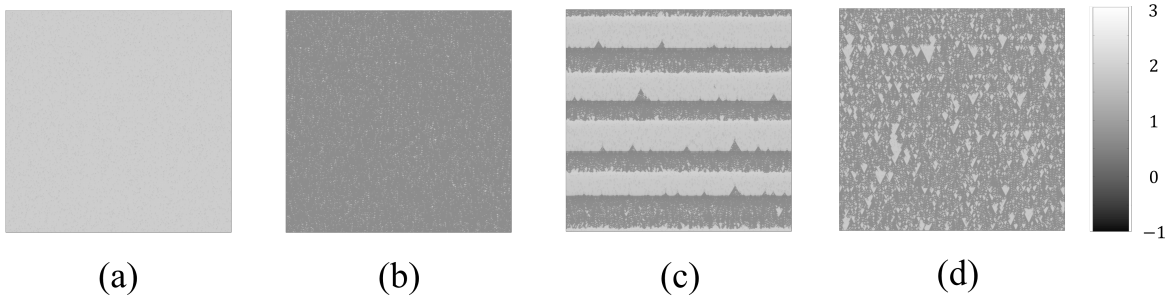


図 2.4 式 (2.10) の数値計算で得られた典型的なパターン。

画像上方から下方へ時間発展する。空間方向 (横軸) は $N = 10^3$ 、時間方向 (縦軸) の幅は $t = 500 \sim 1200$ である。右端にカラーバーも表示した。(a) $k = 1.5$ 、 $V = 0.25$ (領域 A)。(b) $k = 1.5$ 、 $V = 0.46$ (領域 B)。(c) $k = 1.5$ 、 $V = 0.38$ (領域 C)。(d) $k = 8$ 、 $V = 0.34$ (領域 D)。

*³ イジングモデルの秩序変数と同じような定義となっている。

次に時刻ごとの秩序変数 ψ_T は

$$\psi_T(t) = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \varepsilon'(u_i(t)) \right| \quad (2.13)$$

で定義する。 ψ_T の時間平均 $\langle \psi_T \rangle$ は

$$\langle \psi_T \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \psi_T(t) \quad (2.14)$$

となる。 ψ_T は各時刻における剥離先端の状態に対する秩序変数であることから、剥離先端が一樣状態に近ければ 1 に近い値をとる。この ψ と $\langle \psi_T \rangle$ を比較すると、時空パターン中に白と黒の状態がそれぞれ同程度の割合で存在する場合 ψ は小さい値となるが、領域 C のような同期的な挙動をしていると、 $\langle \psi_T \rangle$ は比較的大きな値をとる。そして領域 D のような両方の状態が乱雑に混ざりあっていると $\langle \psi_T \rangle$ は ψ に近い値となる。つまり、この 2 つの量を比較することで領域 C と D を分類できる*4。

図 2.5 は、上記の指標で分類したパターンの相図である。これは実験的に得られた相図 (図 1.7) をよく再現しており、とくにフェーズフィールドモデルに比べて境界が直線的になっている点で実験により近い結果を与えている。理論的な境界線の導出は今後の課題である。

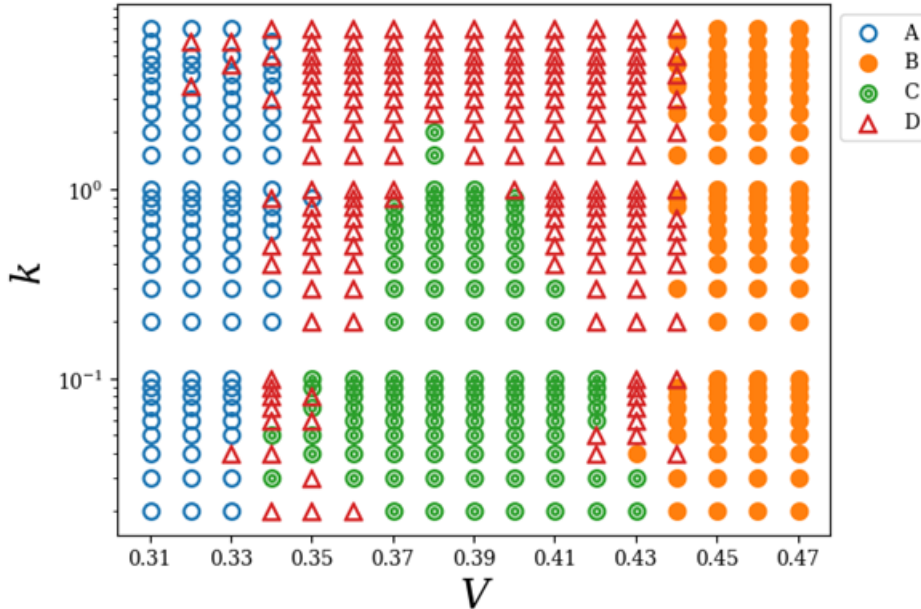


図 2.5 式 (2.10) で得られたパターンについての $(k - V)$ 平面上の相図。
 $N = 500$, $t = 5 \times 10^3 \sim 1 \times 10^4$ の場合に得られたパターンを用いた。

*4 $\langle \psi_T \rangle$ のみで分類しない理由は、領域 D に含まれる時空パターンのなかでもとくに黒または白の状態がわずかにしか含まれていない場合、 $\langle \psi_T \rangle$ が比較的大きな値をとってしまうために同期的な振動状態 (領域 C) と区別できないためである。

引っ張りに必要な力

次に、テープを引っ張る際に必要な力 $F = kl$ と引っ張り速度 V やばね定数 k の関係を調べた結果を図 2.6 に示す。いずれの場合も低速領域や高速領域では引っ張り速度の増大に伴い引っ張りに必要な力が増大し、中間的な領域で引っ張りに必要な力が減衰することが確認できた。とくに図 2.6 (a) と (b) のようなばね定数が小さなやわらかい系では中間的な速度領域で、slip-stick 的な振動が再現された。そして、図 2.6 (c) のようにばね定数が大きな硬い系では振動が起りづらくなり、引っ張りに必要な力のとる値の幅が小さくなった。これは図 1.5 に示された実験結果 [7] をよく再現している。

以上のように、今回提案した反応拡散モデルはやわらかい系に対しても、テープの剥離先端のダイナミクスをよく再現できるモデルとなっている。

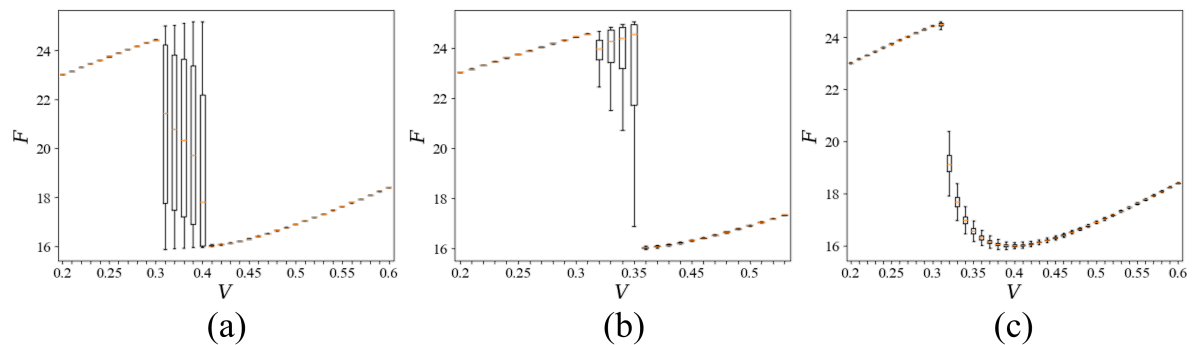


図 2.6 ばね定数 k と引っ張り速度 V を変えた際の、ばねを引っ張る力 $F = kl$ の箱ひげ図。
 $N = 10^4$ 、 $t = 5 \times 10^3 \sim 1 \times 10^4$ のデータを用いた。(a) $k = 0.05$ 。(b) $k = 0.5$ 。(c) $k = 8$ 。

第 3 章

モデルの数理的性質

本章では再び硬い系に議論を限定し、反応拡散モデルの分岐構造などの数理的な性質を調べる。そして、パターン形成の背後にある数理的な機構について考察する。また、先行モデルとの比較を行う。

3.1 モデルの相空間と分岐構造

図 3.1 に反応拡散モデル (式 (2.5)) から相互作用項を除いた力学系の、相空間におけるヌルクラインと (サドル点の) 不変多様体を示す。図 3.1 (a) と (b) に示すように、低速領域と高速領域において系は唯一の安定固定点を状態 A に対応する大きな $u \approx 2$ か、状態 B に対応する小さな $u \approx 1$ に有している。そして中間的な速度領域では図 3.1 (c) に示すように、① 状態 A から外乱によって系の状態が安定多様体を越えると、② 系の状態は状態 B へ遷移し、③ しばらくして状態 A に戻る、という図 2.1 で推測したダイナミクスが実現される。

このようにコントロールパラメタを変化させることで系のダイナミクスに定性的な変化が起きる現象を、分岐現象 [37] とよぶ。提案した反応拡散モデルは複雑な分岐を示すが、とくに式 (2.4) から拡散項を除いたモデルにおける分岐は、 V を大きくするにつれて次のような順で生じる。図 3.2 に分岐図も示す。

1. まず $V = 0$ のとき、相空間は図 3.1 (a) のようになっており系の安定固定点は $u = 2$ にしか存在せず、この点が唯一の安定固定点となっている。
2. ここで V をやや大きくすると、状態 B に対応する $u = 1$ においてサドルノード分岐が生じ、不安定固定点とサドル点が生成する (図 3.2 ①)。
3. V を大きくしていくと、亜臨界 Hopf 分岐により不安定リミットサイクルが生じる (図 3.2 ②)。相空間は図 3.1 (c) のようになる。これにより状態 A に対応する固定点に、ある程度の大きさの摂動が加わると状態 B 側へ大きく迂回して、その後状態 A に戻ってくるという閾値発火的なダイナミクスが現れる。これにより、状態 A が状態 B に引っ張られて状態を遷移するというダイナミクスが実現されている。

4. さらに V を大きくすると、図 3.1 (d) に示すように状態 A と B それぞれの近傍では状態 B の吸引領域が状態 A に比べて大きくなる。これにより状態 A に摂動が加わると状態 B 側へ大きく迂回して状態 A に戻ることになるうえ、その迂回の途中で状態 B での滞在時間は長くなりやすくなる。このように状態 B が安定になるにつれ、中間的な速度領域で見られる自己相似的な時空パターンが出現するようになる。
5. その後、ホモクリニック分岐により安定リミットサイクルが生じる (図 3.2 ③) が、すぐに周期軌道のサドルノード分岐によって消滅する (図 3.2 ④)。また、このとき状態 A に対応する安定固定点がサドル点と対消滅 (サドルノード分岐) する (図 3.2 ④)。これにより、相空間は図 3.1 (b) に示すようになり、系の安定固定点は $u < 1$ の一つだけとなる。

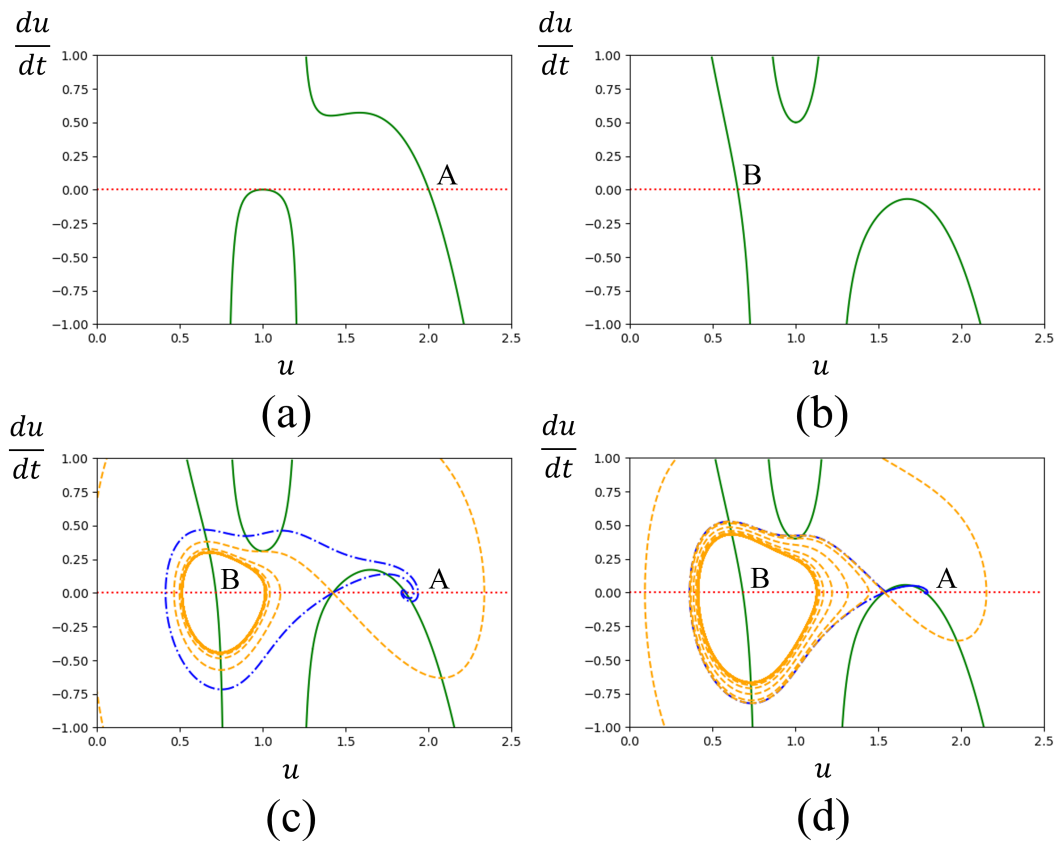


図 3.1 式 (2.5) の反応項のヌルクラインと (サドル点の) 不変多様体。
赤い点線が $\frac{du}{dt} = 0$ 、緑の実線が $\frac{d^2u}{dt^2} = 0$ に対応するヌルクライン、橙の破線が安定多様体、青の一点鎖線が不安定多様体に対応する。(a) $V = 0$ 。(b) $V = 0.5$ 。(c) $V = 0.309$ 。(d) $V = 0.4$ 。

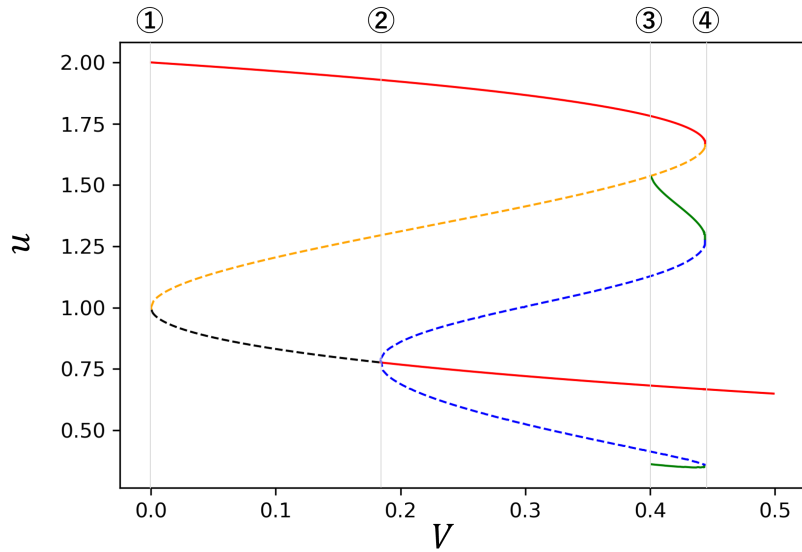


図 3.2 V の変化に伴う反応拡散モデル (式 (2.5)) の反応項の分岐図。
赤い実線が安定固定点、黒い点線が不安定固定点、オレンジの点線がサドル点、青い点線が不安
定リミットサイクル、緑の実線が安定リミットサイクルを表している。

3.2 ノイズとカオス

フェーズフィールドモデルが剥がし跡の乱雑さを伴った時空間パターンを再現するためには、ノイズが非対称な相互作用と並んで必要な効果であった [14]。しかし、今回の反応拡散モデルでは時空間パターンの形成に必ずしもノイズを必要としない*1。図 3.3 は式 (2.4) が示すパターンの一例である。このパターン形成の数値計算には、初期条件を除いてランダム性は含まれていない (つまり、 $p dt = 0$)。これは、テープの剥がし跡の乱雑な時空間パターンが確率的なノイズではなく決定論的なカオス性に由来することを示唆している。

図 2.2 (d) の自己相似パターンはシェルピンスキーガasketに似ているが、このような自己相似パターンは Bonhoffer-van der Pol 型反応拡散方程式や Gray-Scott モデルなどの反応拡散方程式を用いて形成できることが知られている [11-13, 17]。これらの方程式と今回提案した反応拡散モデルの関連は、式 (2.4) を 2 成分の Liénard 系に変換することで見出される。式 (2.4) は MB モデルと同様に Liénard 方程式とよばれるタイプの微分方程式になっており、新たに $w_i \equiv \frac{du_i}{dt} + bu_i - a' \arctan(c'(u_i - d)) - D_2(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$ という変数を導入することで

*1 第 2 章の数値計算では状態 B の安定性を増すためにノイズを導入している。また、黒い領域の割合 ρ の V 依存性などの実験結果の再現にはノイズが必要である。ほかにもノイズによって、領域 C の同期的な振動が生じやすくなっている。

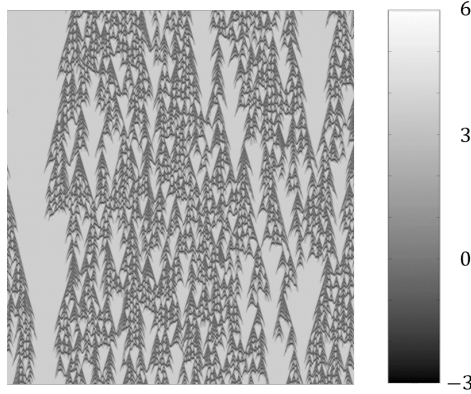


図 3.3 式 (2.2) へ式 (2.3) の相互作用項を導入したモデルから得られた時空パターン。画像上方から下方へ時間発展する。空間方向 (横軸) は $N = 10^3$ 、時間方向 (縦軸) の幅は $t = 500 \sim 1200$ である。カラーバーも表示した。 $\frac{dU}{du} = 0.2(u + 0.5)(u - 1.5)(u - 4)$ 、 $V = 0.66$ 、 $b = 1$ 、 $a = 1$ 、 $c = 2$ 、 $d = 0$ 、 $D_1 = 1$ 、 $D_2 = 0.1$ 、そして $p dt = 0$ である。初期値は $u_i(t = 0)$ と $\left. \frac{du_i}{dt} \right|_{t=0}$ のいずれも -2 と 2 の間の一様乱数で与えた。

Liénard 系として、以下のアクティビター・インヒビター系に帰着できる。

$$\begin{cases} \frac{du_i}{dt} = -w_i - bu_i + a' \arctan(c'(u_i - d)) + D_2(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i), \\ \frac{dw_i}{dt} = \left. \frac{dU}{du} \right|_{u=u_i} + bV - D_1(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i). \end{cases} \quad (3.1)$$

新しく導入された定数 a' 、 c' は、式 (2.2) の定数 a 、 c と $a' = a/\sqrt{c}$ 、 $c' = \sqrt{c}$ という関係にある。ここで、もし式 (3.1) 第 2 式右辺の $\frac{dU}{du} + bV$ という項を u に置き換える、つまり二重井戸型のポテンシャルを単井戸型のポテンシャルに置き換えると、式 (2.4) の反応項は自己相似パターンを示すことが知られている Bonhoffer-van der Pol 型反応拡散方程式 [11] の反応項と概ね同じ表式へ帰着される*2。

反応拡散方程式に自己相似パターンが現れるメカニズムについては、Bonhoffer-van der Pol 型方程式から CA モデル的な理解が与えられている [11]。Bonhoffer-van der Pol 型方程式のダイナミクスを観察すると、生成した孤立波が自己複製、対消滅、保存という 3 種類の特異的なダイナミクスを示すことが確認される。そして、そのダイナミクスには以下の性質が確認されている [17, 53]。

1. 孤立波は一定の時間 T 及び距離 X だけ進むと停止し、2 つに分裂する。孤立波の速度は生成から停止するまで単調減少する。
2. 2 つの孤立波が同じ速度で衝突すると距離 l まで近づき、いったん消滅したのち回復する。つまり、孤立波が保存する。
3. 異なる速度で衝突すると距離 l まで近づき、対消滅する。

*2 正確には式 (3.1) 第 1 式右辺に含まれるアークタンジェントに相当する部分を、Hayase [11] はハイパボリックタンジェントにしているが、関数形はいずれも十分遠方で定数となるシグモイド型の関数である。

4. 孤立波の速度は、分裂で生まれた孤立波か保存による孤立波かによって変わらない。

これをもとに、孤立波のダイナミクスの時間発展を孤立波が1次元離散空間の各格子で起こす事象(自己複製、対消滅、保存)についての現象とみなすと、以下のCAモデルが定式化される。

$$a_i^{t+1} = a_{i-1}^t + a_{i+1}^t \pmod{3} \quad (3.2)$$

このCAモデル^{*3}はシェルピンスキーガスケッtpパターンを形成する[17]。実験的にはノイズが生じるために剥離先端のダイナミクスに対して同様の実験的観察とモデル化を行うことは難しいと予想されるが、実際の剥がし跡のパターン形成でもこれと似たようなメカニズムで自己相似パターンが形成されていると推測される。つまりテープの剥離先端で状態Bが状態A内を伝播し、自己複製、対消滅、保存というダイナミクスをすることで、剥がし跡に自己相似パターンが形成されていると考えられる。

3.3 MBモデルとの比較

最後にMBモデルと今回提案した反応拡散モデルを比較する。まず、MBモデルはLiénard方程式である。式(1.1)の Φ がN字型の3次関数の場合、このモデルはBonhoffer-van der Pol方程式となる。Maugis and Barquins [36]はN字型の関数であることを仮定しているため、MBモデルはBonhoffer-van der Pol型の常微分方程式となっている。そして式(1.4)に帰着されたMBモデルはvan der Pol型の常微分方程式となっている。

今回提案した反応拡散モデルの反応項は、負の粘性項 $f = (a - c(u - d)^2) \frac{du}{dt}$ に含まれる u のLorentz型の関数を u の2次関数に置き換えると、van der Pol方程式の非線形項に対応する。さらに二重井戸型ポテンシャルを単井戸型のポテンシャルに置き換えると、これはvan der Pol方程式そのものとなることから、反応拡散モデルの反応項は二重井戸型のポテンシャルをもったvan der Pol型の常微分方程式とみなせる。つまり、今回提案したモデルは数理的にはMBモデルを双安定(二重井戸型)にし、空間相互作用を与えたモデルともみなせる^{*4}。

また、第1章2節の脚注^{*3}でも触れたように、Yamazaki [27]の提案したフェーズフィールドモデルもMBモデルとの対応が見られる。すなわち、今回提案した反応拡散モデルとフェーズフィールドモデルの間にも、相互作用の入り方などに差異があるものの一定の対応が見られる。このように独立な機構のもとで提案されたモデル同士が、その背景にvan der Pol型の微分方程式という数理構造を共有している点は興味深い。

^{*3} $\pmod{3}$ を $\pmod{2}$ に置き換えると、このCAモデルはECA90に相当する。ECA90もシェルピンスキーガスケッtpパターンを示す。

^{*4} ただし、同じ数理的意味合いをもった各変数の物理的意味合いが異なることには注意したい。式(1.4)に帰着されたMBモデルのダイナミクスはテープが剥がれる速度 v の時間発展を記述しているが、反応拡散モデルはテープ剥離先端の変位 u の時間発展を記述している。

第 4 章

まとめと展望

第 I 部では粘着剤という連続体が、ECA90 などの離散系に現れるシェルピンスキーガasket に似た自己相似パターンを形成する現象について、モデル化とその解析を行った。このパターン形成を再現する先行モデルはいくつか提案されてきているが、今回のモデル化では空間相互作用を対称なものとした新たなメカニズムを提案し、テープの剥離先端のダイナミクスを記述する現象論的な力学モデルを定式化した。

定式化した反応拡散モデルが示すパターンの統計的性質を調べることで、このモデルは実験結果をよく再現することが確認された。とくに剥がし跡に現れる黒い領域の割合 ρ と V の関係から、テープの剥がし跡の形成が DP 普遍クラスに属する可能性が示唆された。より詳細な議論や実験的な検証は今後の課題である。

さらに、テープがばねを介して引き剥がすような状況を考えるために、モデルにばねの効果を導入した。これによりテープの剥がし跡に現れる系全体が同期したような振動パターンが再現された。とくにテープの剥がし跡に現れる 4 通りのパターンに対して定量的な分類を考案し、この分類をもとにしてばね定数 k とばねを引っ張る速度 V を変えて得られた反応拡散モデルのパターンについての相図を描いた。この相図は実験結果から得られた相図をよく再現している。相図の境界線の理論的導出は今後の課題である。さらにばねの引っ張りに必要な力は引っ張り速度 V に対して N 字型の関数形となることが実験的に確認されていたが、これも反応拡散モデルで再現された。このように今回提案した反応拡散モデルは、テープの剥離先端のダイナミクスに関わる実験結果をよく再現できるモデルとなっている。

とくにフェーズフィールドモデルをベースにした議論では、テープの剥がし跡の再現には

1. 双安定性
2. 相互作用の非対称性
3. 大域的相互作用
4. ノイズ

という 4 つの性質が本質的であるとされていた [27]。しかし、本研究で提案した硬い系に対する反応拡散モデルには「相互作用の非対称性」と「大域的相互作用」が含まれておらず、これらの効果

がなくても剥がし跡の自己相似パターンは再現できることが示された*1。また今回の数値計算ではノイズの効果も導入したが、適当なパラメタで反応拡散モデルを数値計算すると、ノイズがなくても剥がし跡に似たパターンを再現できる。これは、剥がし跡の乱雑さはカオス性によることを示唆している。

また、反応拡散モデルを Liénard 系に帰着することで、シェルピンスキーガasketパターンを形成する反応拡散方程式との関連を示した。とくに関連づけられた Bonhoffer-van der Pol 型の反応拡散方程式が自己相似パターンを形成するメカニズムから、剥離跡の自己相似パターンの形成には黒い領域が伝播する際に自己複製・対消滅・保存という性質が関わる可能性が示唆された。

さらにモデル同士の比較により、反応拡散モデルと MB モデル、フェーズフィールドモデルはいずれも van der Pol 型の微分方程式という近い性質があることを確認した。モデル同士の各時間発展変数の数理的意味合いと物理的意味合いは必ずしも対応しないが、それでも同様なモデルが独立した考えのもとで定式化されており、テープの剥離先端のダイナミクスの数理的背景に van der Pol 型の微分方程式の性質があることが示唆される。

今回提案した反応拡散モデルの性質からは、以下の性質がテープの剥がし跡の再現に本質的であると考えられる。

1. 黒い領域の伝播と散逸
2. 閾値発火的な性質
3. 2つの安定状態の存在とその非対称性

この推測はあくまでも現象論的なモデルをベースとしたものであり、実際にモデルに取り入れた機構が剥離界面で生じているかどうかについては実験、または現象に一層忠実なモデルの数値計算や解析によって明らかとなることが期待される。

また、現象の背景にある数理構造を探るためには縮約したモデルを考察することが有効である。提案したモデルは振動的な挙動を示すことから、位相縮約などの手法で縮約されたモデルの定式化が期待される。これにより、現象の背景にあるいっそう普遍的な数理構造を明らかにできることが期待されるが、これは今後の課題である。

*1 シェルピンスキーガasketに似た自己相似パターンを形成するという点に限れば、Bonhoffer-van der Pol 型反応拡散方程式が自己相似パターンを示すように、二重井戸型ポテンシャルの代わりに単井戸型ポテンシャルにしたり、ノイズを除いて決定論的にしたりしても自己相似パターンは形成できる。ただし、今回提案した反応拡散モデルからテープの剥がし跡に現れる諸性質を再現するためには双安定性とノイズは必要な効果である。

第 II 部

離散系の観測量の解析

第 5 章

背景

第 II 部では 1 次元空間パターンを形成する離散系である ECA の性質を、その観測量の時間発展の性質を考える Koopman 作用素論の枠組みから議論する。以下が第 II 部の構成である。第 5 章では背景として Koopman 作用素と ECA を導入する。第 6 章では ECA に対する Koopman 作用素の行列表現を構成し、具体例を用いてその性質を調べる。そして一般の ECA に対して Koopman 固有関数を陽に構成する。さらに、13 セルの ECA に対して網羅的に Koopman 固有解析を数値的に行う。第 7 章がまとめである。なお、付録 B では Koopman 作用素の随伴作用素である Perron-Frobenius 作用素についても議論する。

5.1 イントロダクション

近年、非線形力学系を系の状態の時間発展の代わりに観測量の時間発展から考察する **Koopman 作用素** [54–61] についての研究が盛んに行われている。Koopman 作用素は Koopman [54] と von Neumann [55] によって同時期に考案された、Hamilton 力学系 (Hamilton 系) の時間発展を量子力学と同様にヒルベルト空間中のダイナミクスとして扱おうとする試みに始まる。

Hamilton 系は、系の N 組の共役な変数が Hamilton の正準方程式;

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (5.1)$$

を満たすような力学系であり、例えば散逸のない Newton の運動方程式は Hamilton 系に含まれる。Koopman 作用素 K は、そのような Hamilton 系の状態を観測した量 (観測量) $A = A(\{p_i, q_i\}_{i=1, \dots, N})$ の時間発展作用素として導入される。ここで $A = A(\{p_i, q_i\}_{i=1, \dots, N})$ は、スカラー値の関数である。 K は線形であることから、そのスペクトル解析の結果と系の物理的性質の関連が議論されてきた [54, 61]。この議論が約 20 年前、Mezić [56] により散逸的な系や確率系へと拡張された。このような系に対しても Koopman 作用素の固有関数には保存量や漸近位相 (付録 C) といった、系の解析において重要な物理量が現れる。

Koopman 作用素を用いると非線形力学系を線形系として解析することができるが、Koopman 作用素は一般的に関数空間に作用する無限次元作用素となるため、厳密に固有解析を行える例は一部

の可積分系にとどまる。とくに時空パターン形成現象とも関連する時空発展系として 1 次元偏微分方程式に対しても Koopman 解析は応用されているが、解析的な結果は可積分系に対してのみ得られている [62–67]。そのため、流体系のような複雑な系のダイナミクスの解析においては動的モード分解 (**Dynamic Mode Decomposition; DMD**) のようなデータ科学的手法による解析が行われている。DMD は Schmid [68] の提案した、大規模力学系に対してその時系列データから系の特徴的な時空構造を抽出するデータ解析手法である。DMD によって抽出された時空構造と Koopman 作用素の関連が示されたこと [69] で、現在では機械学習的な解析手法とも絡み、新たな力学系の解析手法としてさまざまな系に応用した研究が盛んに行われている [61]。

このような研究の流れのなかで、逆にシンプルな系である状態数が有限な系に対して Koopman 解析を適用した研究論文は、パターン形成系や交通流のモデルとしても扱われるエレメンタリーセルオートマトン (**Elementary Cellular Automaton; ECA**) に対する筆者らの議論 [70] が最初である。

有限状態系とは状態数が有限な系であり、たとえばセル数が有限な ECA は有限状態系である。このような場合、Koopman 作用素は有限次元の行列として陽に表現される。これにより、ECA のダイナミクスの性質と Koopman 作用素のスペクトル的な性質の基礎的な関係を厳密に導くことができる。また系の大きさがあまり大きくない ECA であれば Koopman 作用素のスペクトルをすべて数値的に得ることができる。

とくに ECA の時間発展ルールは非常にシンプルである一方で、並進解などの短周期解やカオスを含む豊かなダイナミクスを示すことから、ECA に対する Koopman 解析の結果は空間的広がりのある力学系の時系列データを用いた DMD と、そのさまざまな拡張手法 [58, 59, 68, 69, 71–76] のよいテストベッドになることが期待される。

5.2 エレメンタリーセルオートマトン

5.2.1 Wolfram の分類

セルオートマトン (CA) は時間変数、空間変数、状態変数、すべてが離散化された力学系であるが、とくに ECA は 1 次元格子上の CA としては最も簡単な例の 1 つである [77]。ECA の各セルは 0 か 1 のいずれかの値をとり、3 近傍の状態に応じて決定論的な離散時間発展をする。例として ECA120 のルールを図 5.1 に示す。ここで 0 は白、1 は黒でそれぞれ表現されている。

次時刻の各セルの状態は 2 値 3 近傍のありうる状態の組み合わせに対応する 8 通りから決まるため、ECA には全体で $2^3 = 2^8 = 256$ 通りのルールが存在する。とくに、図 5.1 のルールはその

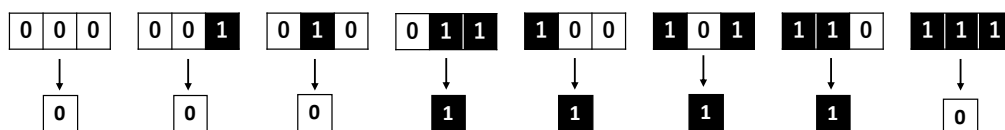


図 5.1 ECA120 のルール

8桁を2進数として解釈したときの10進数が120となるため、ECA120とよばれる。一部のルールは鏡映変換などの単純な変換によって等価となるため、相互に独立なルールに限ると全部で88種類となる [78]。

Wolfram はこれらのルールを十分に大きな系の典型的なダイナミクスの見た目から、以下の4つの Class に分類した [77]。

- Class I: 系は一様な定常状態へ収束する。
- Class II: 系は非一様な定常状態、または短周期解に収束する。
- Class III: 系はカオスの挙動^{*1}を示す。
- Class IV: 系は Class II の秩序だった挙動と、Class III のカオス的な挙動の混ざった複雑な挙動を示す。

セル数が有限な ECA の状態空間の元の数には有限なため、すべての軌道はいずれ周期的な軌道に行きつく。もちろん Class III や Class IV のカオス的なダイナミクスも周期軌道の一部となるが、その周期は非常に長いものとなる。

Wolfram の分類は ECA の主だった性質をとらえているが、それでも本質的にその分類は時空パターンの見た目という定性的なものに過ぎない。そのため、他にも定量的な ECA の分類基準がいくつか提案されている [81,82]。本研究では ECA の Koopman 作用素のスペクトル的な性質を調べるが、とくに Wolfram の分類との関連についても検討する。

5.2.2 ECA の状態空間

ECA は以下のような離散力学系とみなすことができる。

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) \quad (5.2)$$

ここで $\mathbf{x}_n \in M$ は離散時刻 n における系の状態であり、写像 $\mathbf{F} : M \rightarrow M$ が系のダイナミクスを表す。系の大きさが N セルの場合、状態空間 M は N 次元バイナリ値ベクトルの集合、つまり $M = \{\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N) \mid x_1, \dots, x_N \in \{0, 1\}\}$ となる。このとき、ありうるすべての状態の数は $|M| = 2^N$ である。

各状態 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N) \in M$ に対して番号 $q \in \{1, \dots, 2^N\}$ は

$$q = \sum_{j=1}^N 2^{j-1} x_j + 1 \quad (5.3)$$

のように割り振ることにする。例えば3セルの ECA の状態 $\mathbf{x} = (0, 1, 0)$ の番号は $q = 3$ である。この番号を用いることで、系の状態を $\{1, \dots, 2^N\}$ という 2^N 個の整数で表すことができる。以下の議論では M における q 番目の状態を、 $\mathbf{x}^{(q)}$ と記載する。

^{*1} カオス的な性質は2つの近い状態にある系の状態の(状態間に定義された)距離が指数的に離れていくという意味でも特徴づけられる [79,80] が、ここでカオスや複雑という言葉が意味するものは、あくまでもダイナミクスの見た目である。

系の状態間の遷移は、図 5.2 に示すような向きづけられたネットワークである状態遷移ネットワーク [77] で表現することができる。ここでは、3 セルの格子上に周期境界条件 (左端と右端のセルが隣接するとき) を課した ECA120 の状態遷移ネットワークを示した。ネットワークのノードは系の状態と対応しており、向きづけられたリンクが系の時間発展における状態遷移を表している。

$x = (1, 1, 0)$ 、 $(1, 0, 1)$ 、 $(0, 1, 1)$ は他のいかなる状態からも遷移してこない状態であり、エデンの園状態 [81, 83] とよばれる (これはセルフープを除く湧出点に相当する)。エデンの園状態がない ECA は可逆となることが知られている [81]。つまり写像 F は全単射となり、すべての状態 $x \in M$ に対して $x = F^{-1}(F(x)) = F(F^{-1}(x))$ を満たすような F^{-1} というルールが存在する。

図 5.2 に例を示すように、ECA の状態遷移ネットワークはいくつかの弱連結成分に分けられる。各連結成分には周期軌道 (周期 1 の定常状態を含む) が 1 つだけ含まれる。そして、周期軌道に含まれない状態は部分ネットワークの木構造に属しており、その根が周期軌道上の状態となる。そして部分ネットワークの葉 (端のノード) がエデンの園状態に対応する。例えば図 5.2 には 2 つの連結成分 A と B が存在する。それぞれには (A) 周期 3 または、(B) 周期 1 の周期軌道が 1 つだけ含まれており、B の成分には周期 1 の軌道の他に木構造とエデンの園状態が含まれている。2 つ以上の周期軌道が 1 つの連結成分に含まれないのは、ECA のルールが決定論的であり、かつ各状態から外に出るリンクが 1 つしかないためである。

周期軌道に含まれない状態は、同じ連結成分に含まれる周期軌道に有限ステップで収束する。なぜなら、系が仮に周期軌道をもっていないと仮定しても 2^N ステップより長い時系列を用意すると、鳩ノ巣原理から必ずその時系列には重複した状態が存在するためである。つまり周期軌道はアトラクターであり、ネットワークの連結成分はアトラクターの吸引領域となっている。

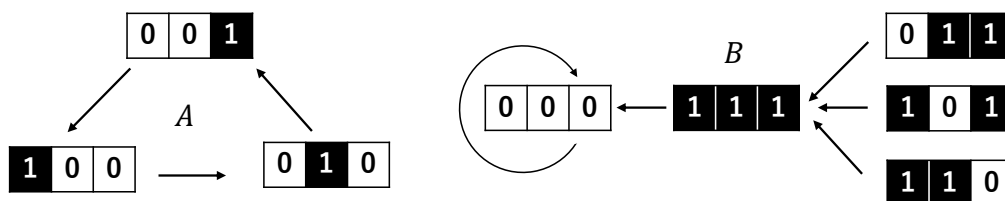


図 5.2 周期境界条件を課した 3 セルの ECA120 の状態遷移ネットワーク。2 つの連結した部分ネットワーク A と B から構成される。状態 $(0, 1, 1)$ 、 $(1, 0, 1)$ 、 $(1, 1, 0)$ がエデンの園状態である。

第 6 章

ECA の Koopman 固有解析

本章では ECA に対して Koopman 作用素を導入し、その性質について議論を行う。第 6 章 1 節では ECA に対して Koopman 作用素を導入する。第 6 章 2 節では状態遷移ネットワークの隣接行列から Koopman 作用素の行列表現を構成し、第 6 章 3 節では具体例として ECA120 の解析を行う。第 6 章 4 節で一般の ECA に対する Koopman 固有関数についての議論を行い、第 6 章 5 節では 13 セルの ECA の独立なすべてのルールに対して Koopman 固有解析を数値的に行う。第 6 章 6 節で考察を述べる。

6.1 ECA の Koopman 作用素

それでは ECA に対して Koopman 作用素を導入する。観測関数 $G : M \rightarrow \mathbb{C}$ は、系の状態 $\mathbf{x} \in M$ を観測量 $G(\mathbf{x}) \in \mathbb{C}$ に写す関数である。Koopman 作用素 \hat{K} は観測関数 G の時間発展を与えるもので、次のように定義される。

$$(\hat{K}G)(\mathbf{x}) = G \circ \mathbf{F}(\mathbf{x}) = G(\mathbf{F}(\mathbf{x})) \quad (6.1)$$

ここで \mathbf{x} は M の元であり、 \circ は関数の合成を表す。式 (6.1) は $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{x})$ という系の時間発展を、状態 \mathbf{x} の代わりに観測関数 G を用いて $G(\mathbf{x}) \rightarrow G(\mathbf{F}(\mathbf{x}))$ のように観測した結果を表している。これにより、系のある状態 \mathbf{x} は固定されているとして、代わりに G が $G(\mathbf{x}) \rightarrow (\hat{K}G)(\mathbf{x})$ という時間発展をしているともみなすことができる。

連続値の系では観測関数の空間は無次元となりえた。しかし N セルの ECA では全状態数が 2^N である。つまり第 6 章 2 節で示すように、Koopman 作用素は有限次元の $2^N \times 2^N$ 行列で表現することができる。

Koopman 作用素の線形性は定義から容易に示される。実際、

$$\begin{aligned} \{\hat{K}(aG + bH)\}(\mathbf{x}) &= aG(\mathbf{F}(\mathbf{x})) + bH(\mathbf{F}(\mathbf{x})) \\ &= a(\hat{K}G)(\mathbf{x}) + b(\hat{K}H)(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (6.2)$$

は任意の観測関数 G と H 、そして任意の複素数 a と b に対して成立する。したがって \mathbf{F} というダ

イナミクスが非線形であっても対応する観測関数の時間発展は線形であり、系のダイナミクスの特徴の解析に線形系に対するスペクトル解析を用いることができる。

とくに \hat{K} (離散スペクトルしかもたないとする。有限な N の ECA はこの場合に相当する) の固有値方程式

$$(\hat{K}\Phi)(\mathbf{x}) = \lambda\Phi(\mathbf{x}) \quad (6.3)$$

を解くことで固有値とそれに対応する固有関数の集合 $\{\lambda_\alpha, \Phi^{(\alpha)}\}_{\alpha=1, \dots, 2^N}$ を得ることができる。あとで説明するように系は一般に 2^N 個の独立な固有関数をもたない。そのため、私たちはさらに $(\hat{K} - \lambda\hat{I})^{m+1}\Phi(\mathbf{x}) = 0$ と $(\hat{K} - \lambda\hat{I})^m\Phi(\mathbf{x}) \neq 0$ を満たすような高次の一般化固有関数を考える必要がある。ここで $m+1 \geq 2$ は次数であり、 \hat{I} は単位作用素である。

Koopman 固有関数は非線形力学系の Koopman スペクトル解析において本質的に重要な役割をもっており、保存量といった系の物理的な情報を表している [56–60, 64]。たとえば、固有値 1 に対応する Koopman 固有関数 $\Phi(\mathbf{x})$ は

$$(\hat{K}\Phi)(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = \Phi(\mathbf{x}) \quad (6.4)$$

を満たすことから、任意の $n \geq 0$ に対して $\Phi(\mathbf{x}_n) = (\hat{K}^n\Phi)(\mathbf{x}_0) = \Phi(\mathbf{x}_0) = \text{const.}$ という式を満たす。つまり、系の保存量 (不変量)*1 に対応している。

6.2 Koopman 作用素の行列表現

以下では Budišić, Mohr and Mezić [57] によってなされた巡回群に対する議論を応用する。まず、 2^N 個の指示関数 $b_q : M \rightarrow \{0, 1\}$;

$$b_q(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} = \mathbf{x}^{(q)}, \\ 0 & \mathbf{x} \neq \mathbf{x}^{(q)}. \end{cases} \quad (6.5)$$

を導入する。ここで $q = 1, \dots, 2^N$ は系の状態の番号である。これは系の状態の、いわゆる one-hot 表現を与えている。すなわち、状態 \mathbf{x} が q 番目の状態 $\mathbf{x}^{(q)}$ であるとき、 $\{b_1(\mathbf{x}), \dots, b_{2^N}(\mathbf{x})\}$ のなかで $b_q(\mathbf{x})$ だけが 1 という値をとり、 $r \neq q$ である他のすべての指示関数 $b_r(\mathbf{x})$ は 0 となる。

これらの指示関数もまた系の観測関数であり、その時間発展は

$$(\hat{K}b_q)(\mathbf{x}) = b_q(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = \sum_{r=1}^{2^N} A_{qr}b_r(\mathbf{x}), \quad q = 1, \dots, 2^N. \quad (6.6)$$

という形で記述できる。ここで \hat{K} は Koopman 作用素であり、系の状態に対する隣接行列 $A \in \{0, 1\}^{2^N \times 2^N}$ が導入された。 A の各要素は $q, r = 1, \dots, 2^N$ に対して

$$A_{qr} = \begin{cases} 1 & \text{系の状態が } r \text{ から } q \text{ に時間発展するとき,} \\ 0 & \text{その他.} \end{cases} \quad (6.7)$$

*1 ここで考えている保存量とは一般的な保存量であり、ECA の統計力学的アプローチにおける加法的保存量 [84, 85] に限らない。

のように決定される。この隣接行列 A は図 5.2 で示した系の状態遷移ネットワークを表している。

例えば系の状態 \mathbf{x}_n が時刻 n に p 番目の状態にあるとき、つまり $\mathbf{x}_n = \mathbf{x}^{(p)}$ であり $b_p(\mathbf{x}_n) = 1$ 、 $r \neq p$ に対して $b_r(\mathbf{x}_n) = 0$ となっているとき、時刻 $n+1$ に系の状態が q 番目の状態に遷移すると仮定しよう。つまり、 $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n = \mathbf{x}^{(p)}) = \mathbf{x}^{(q)}$ であり、 $A_{qp} = 1$ となるときを考える。このとき $b_q(\mathbf{x}_{n+1}) = 1$ 、そして $r \neq q$ に対して $b_r(\mathbf{x}_{n+1}) = 0$ となる。ここで A の各列が 1 つの成分にしか 1 をもたず他の成分が 0 であるのは、ECA が決定論的なためである。

可逆な系の時間逆向きのダイナミクスは、状態遷移ネットワークのリンクの向きをすべて逆にすることで実現できる。これは写像 \mathbf{F} が全単射となることから可能である。したがって A の逆は、その転置行列として得られる。つまり、 \mathbb{T} で行列の転置を表すと $A^{-1} = A^{\mathbb{T}}$ となることから、

$$(AA^{\mathbb{T}})_{qs} = \sum_{r=1}^{2^N} A_{qr}A_{rs}^{\mathbb{T}} = \sum_{r=1}^{2^N} A_{qr}A_{rs}^{-1} = \delta_{qs} \quad (6.8)$$

となる。 A は実行列であるので、* でエルミート随伴を表すことにすると $A_{rs}^{\mathbb{T}} = A_{rs}^*$ も成立する。したがって、可逆な系の A はユニタリー行列となる。

指示関数は観測関数の空間の基底を張るため [57]、一般の観測関数 $G(\mathbf{x})$ は指示関数を用いて

$$G(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} g_q b_q(\mathbf{x}) \quad (6.9)$$

のように分解できる。ここで係数 $g_q \in \mathbb{C}$ は、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(q)}$ ($q = 1, \dots, 2^N$) であるときに観測される量を表している。観測関数 G の時間発展は指示関数を用いて以下のように表現できる。

$$\begin{aligned} (\hat{K}G)(\mathbf{x}) &= \sum_{q=1}^{2^N} g_q (\hat{K}b_q)(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} g_q \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{qr} b_r(\mathbf{x}) \right) \\ &= \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{qr}^{\mathbb{T}} g_r \right) b_q(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (6.10)$$

したがって、観測関数 G の時間発展の行列表現は以下ようになる。

$$K \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_{2^N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{1,1} & \cdots & A_{2^N,1} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{1,2^N} & \cdots & A_{2^N,2^N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_{2^N} \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

ここで K は、観測関数 G の係数ベクトル $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_{2^N})^{\mathbb{T}}$ の時間発展を与えている。つまり、隣接行列 A の転置行列 $A^{\mathbb{T}}$ が Koopman 作用素 \hat{K} の行列表現 K を与えている。今後の議論においては K を **Koopman 行列** とよぶこととする。

Koopman 固有値 λ に対応する **Koopman 固有関数** $\Phi(\mathbf{x})$ を

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \phi_q b_q(\mathbf{x}) \quad (6.12)$$

と置いて固有値方程式 (6.3) に代入すると、行列 K に対する固有値方程式が以下のように得られる。

$$K \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{2N} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_{2N} \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

上述の方程式を解くことで、Koopman 固有値と **Koopman** 固有ベクトルの集合を $\{\lambda_\alpha, \phi^{(\alpha)} = (\phi_1^{(\alpha)}, \dots, \phi_{2N}^{(\alpha)})^T\}$ のように求められる。そして Koopman 固有関数 $\Phi^{(\alpha)}$ を、求めた Koopman 固有ベクトル $\phi^{(\alpha)}$ から構成できる。系が可逆なとき、Koopman 行列 $K = A^T$ は式 (6.8) に示したようにユニタリーとなるため、 K のすべての固有値は、複素平面の単位円周上に現れる。

さて、一般的に行列 K は対角化できず、式 (6.13) を満たすような 2^N 個の独立な固有ベクトルを得ることはできない。このようなとき、基底として 2^N 個の線形独立なベクトルの集合を得るには、 $(K - \lambda_\alpha I)^{m+1} \phi^{(\alpha, m+1)} = 0$ と $(K - \lambda_\alpha I)^m \phi^{(\alpha, m)} \neq 0$ を満たす $m+1 \geq 2$ 次の一般化固有ベクトルも考える必要がある。このような場合には固有値 λ_α は縮退する。なお、 I は単位行列である。 \hat{K} の一般化 Koopman 固有関数も前述したように $(\hat{K} - \lambda \hat{I})^{m+1} \Phi^{(\alpha, m+1)}(\mathbf{x}) = 0$ を満たし、対応する一般化 Koopman 固有ベクトルを用いて $\Phi^{(\alpha, m+1)}(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \phi_q^{(\alpha, m+1)} b_q(\mathbf{x})$ のように構成することができる。

以上で Koopman 作用素と、観測関数の行列表現が導出された。ここで系の状態空間は N 次元 2 値ベクトルの集合から、one-hot 表現の導入によって 2^N 個の整数で番号づけられた 2^N 次元空間にリフトされたということを述べておく。これにより、系のダイナミクスの線形表現は式 (6.7) の隣接行列 A で特徴づけられ、観測関数の線形な時間発展は式 (6.11) の Koopman 行列 K で表現されたことになる。

6.3 具体例: 3 セルの ECA120

簡単な例として、図 5.2 に示した 3 セル周期境界条件の ECA120 を解析する。図 6.1 の行列 K は、図 5.2 に示した ECA120 の状態遷移ネットワークから得られた ECA120 の Koopman 行列 $K = A^T$ である。この図では行列の零成分は空白にして、1 の成分だけ表示した。 K は行と列を図 6.1 に示すように並び替えることで、以下のようにブロック対角化することができる。

$$\tilde{K} = \begin{pmatrix} K_A & 0 \\ 0 & K_B \end{pmatrix} \quad (6.14)$$

K_A 、 K_B はそれぞれ $K_A \in \{0, 1\}^{3 \times 3}$ 、 $K_B \in \{0, 1\}^{5 \times 5}$ の行列である。これは図 5.2 に示すように状態遷移ネットワークが 2 つの独立な連結成分、つまり状態 $\{2, 3, 5\}$ に対応する部分ネットワーク A と状態 $\{1, 4, 6, 7, 8\}$ に対応する部分ネットワーク B に分割されており、異なる連結成分 (部分ネットワーク) に属する状態の時間発展が独立なためである。つまり、私たちはそれぞれの部分ネットワークを別々に解析することができる。

として構成できる。これら3つのベクトルの集合 $\{\phi_A^{(1)}, \phi_A^{(2)}, \phi_A^{(3)}\}$ は図 5.2 の3周期軌道に対応している。図 5.2 に示すように、この部分ネットワークにはエデンの園状態は含まれていない。

6.3.2 部分ネットワーク B

図 5.2 の部分ネットワーク B については対応する Koopman 部分行列 K_B を対角化できない。そのため、図 6.2 (b) に示すように5つの Koopman 固有値が $\lambda_4 = 1$ 、 $\lambda_{5,6,7,8} = 0$ (代数的重複度 4) の形で得られる。各固有値に対応する K_B の1次の固有ベクトルは以下のように4つ構成できる。

$$\begin{aligned}\phi_B^{(4)} &= (\phi_1^{(4)}, \phi_4^{(4)}, \phi_6^{(4)}, \phi_7^{(4)}, \phi_8^{(4)})^T = (1, 1, 1, 1, 1)^T \\ \phi_B^{(5)} &= (\phi_1^{(5)}, \phi_4^{(5)}, \phi_6^{(5)}, \phi_7^{(5)}, \phi_8^{(5)})^T = (0, 1, 0, 0, 0)^T \\ \phi_B^{(6)} &= (\phi_1^{(6)}, \phi_4^{(6)}, \phi_6^{(6)}, \phi_7^{(6)}, \phi_8^{(6)})^T = (0, 0, 1, 0, 0)^T \\ \phi_B^{(7)} &= (\phi_1^{(7)}, \phi_4^{(7)}, \phi_6^{(7)}, \phi_7^{(7)}, \phi_8^{(7)})^T = (0, 0, 0, 1, 0)^T\end{aligned}\tag{6.17}$$

加えて2次の一般化固有ベクトルも以下のように構成できる。

$$\phi_B^{(8)} = (\phi_1^{(8)}, \phi_4^{(8)}, \phi_6^{(8)}, \phi_7^{(8)}, \phi_8^{(8)})^T = (0, 0, 0, 0, 1)^T\tag{6.18}$$

固有値 $\lambda_4 = 1$ に対応する1次の固有ベクトル $\phi_B^{(4)}$ は $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$ ($q = 1$) という定常状態に対応している。そして他のすべての状態 $\mathbf{x} = (1, 1, 0)$ 、 $(1, 0, 1)$ 、 $(0, 1, 1)$ と $(1, 1, 1)$ ($q = 4, 6, 7, 8$) は定常状態の吸引領域に含まれている。つまり、固有値1の固有ベクトルは $\mathbf{x} = (0, 0, 0)$ を含む連結成分 $q \in \{1, 4, 6, 7, 8\}$ に対応する成分に1という値をとるベクトルとなっている。

3つの1次固有ベクトル $\{\phi_B^{(5)}, \phi_B^{(6)}, \phi_B^{(7)}\}$ は固有値 $\lambda_{5,6,7} = 0$ に対応している。これらはそれぞれ $\mathbf{x} = (1, 1, 0)$ 、 $(1, 0, 1)$ 、 $(0, 1, 1)$ ($q = 4, 6, 7$) という3つのエデンの園状態に対応しており、その状態に対応する成分に1という値が入っている。残る1つの2次の一般化固有ベクトル $\phi_B^{(8)}$ は、エデンの園状態と定常状態を結びつける木構造の部分の状態 $\mathbf{x} = (1, 1, 1)$ に対応している。

6.3.3 全系のネットワーク

部分ネットワーク A と B の解析から、系全体の Koopman 行列 K は8個の固有値 $\lambda_{1,4} = 1$ (重複度 2)、 $\lambda_2 = e^{2\pi i/3}$ 、 $\lambda_3 = e^{4\pi i/3}$ 、 $\lambda_{5,6,7,8} = 0$ (重複度 4) を有しており、対応する固有ベクトル

ルは7つの1次の固有ベクトル

$$\begin{aligned}
\phi^{(1)} &= (0, \phi_{A,1}^{(1)}, \phi_{A,2}^{(1)}, 0, \phi_{A,3}^{(1)}, 0, 0, 0)^T = (0, 1, 1, 0, 1, 0, 0, 0)^T \\
\phi^{(2)} &= (0, \phi_{A,1}^{(2)}, \phi_{A,2}^{(2)}, 0, \phi_{A,3}^{(2)}, 0, 0, 0)^T = (0, e^{\frac{2i\pi}{3}}, e^{\frac{4i\pi}{3}}, 0, 1, 0, 0, 0)^T \\
\phi^{(3)} &= (0, \phi_{A,1}^{(3)}, \phi_{A,2}^{(3)}, 0, \phi_{A,3}^{(3)}, 0, 0, 0)^T = (0, e^{\frac{4i\pi}{3}}, e^{\frac{2i\pi}{3}}, 0, 1, 0, 0, 0)^T \\
\phi^{(4)} &= (\phi_{B,1}^{(4)}, 0, 0, \phi_{B,2}^{(4)}, 0, \phi_{B,3}^{(4)}, \phi_{B,4}^{(4)}, \phi_{B,5}^{(4)})^T = (1, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 1)^T \\
\phi^{(5)} &= (\phi_{B,1}^{(5)}, 0, 0, \phi_{B,2}^{(5)}, 0, \phi_{B,3}^{(5)}, \phi_{B,4}^{(5)}, \phi_{B,5}^{(5)})^T = (0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0)^T \\
\phi^{(6)} &= (\phi_{B,1}^{(6)}, 0, 0, \phi_{B,2}^{(6)}, 0, \phi_{B,3}^{(6)}, \phi_{B,4}^{(6)}, \phi_{B,5}^{(6)})^T = (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0)^T \\
\phi^{(7)} &= (\phi_{B,1}^{(7)}, 0, 0, \phi_{B,2}^{(7)}, 0, \phi_{B,3}^{(7)}, \phi_{B,4}^{(7)}, \phi_{B,5}^{(7)})^T = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0)^T
\end{aligned} \tag{6.19}$$

と、それに加えて1つの2次固有ベクトル

$$\phi^{(8)} = (\phi_{B,1}^{(8)}, 0, 0, \phi_{B,2}^{(8)}, 0, \phi_{B,3}^{(8)}, \phi_{B,4}^{(8)}, \phi_{B,5}^{(8)})^T = (0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1)^T \tag{6.20}$$

となっている。

$\lambda_1 = 1$ と $\lambda_4 = 1$ という2つの Koopman 固有ベクトルから式 (6.12) のように構成される Koopman 固有関数は、系の2つの保存量に対応する。さらに、固有値1に対応する各 Koopman 固有ベクトルの1の成分は、図 5.2 の状態遷移ネットワークにおける連結成分を表している。

さて、ここまでの議論における発見は以下のようにまとめられる。

1. 固有値1の固有ベクトルは状態遷移ネットワークの連結成分を表す。そして、固有値1の重複度がネットワークの連結成分の数を表す。
2. 固有値は各連結成分中の周期軌道の周期を反映する。
3. 固有値0の重複度は周期的あるいは定常的な状態ではない状態の数に対応する。
4. もし系が固有値0を一切もたないならば、系はエデンの園状態をもたず可逆である。

第6章4節では、Koopman 固有ベクトルを陽に構成することで、この観察を正当化する。

6.4 Koopman 固有関数の陽な構成

6.4.1 Koopman 固有値と固有ベクトル

第6章2節で説明したように可逆な ECA の Koopman 行列はユニタリーとなり、すべての Koopman 固有値は複素平面の単位円周上に現れる。一方で第6章3節で具体例として議論した ECA120 のような不可逆な ECA では単位円の内側に Koopman 固有値0が現れる。

より一般には、以下の補題がいえる。

補題 1. 有限サイズの ECA の Koopman 固有値は、複素平面の単位円周上 (1 を含む) か 0 となる。

Proof. 固有値 λ に対応する観測関数 Φ は、 $(K^n \Phi)(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{F}^n(\mathbf{x})) = \lambda^n \Phi(\mathbf{x})$ という時間発展に従う。つまり、もしも単位円の内側に0ではない固有値 λ 、 $0 < |\lambda| < 1$ が存在した場合、対応す

る観測関数 Φ は周期軌道や定常状態における値に収束するまで無限回のステップを必要とすることになる。そして、もしも単位円の外側に $|\lambda| > 1$ となる固有値 λ が存在する場合、対応する固有関数 Φ は発散してしまう。

しかし有限サイズの ECA は有限ステップで周期軌道や定常状態に収束することから、いずれのダイナミクスも許されない。つまり、ありうる Koopman 固有値は複素平面の単位円周上 (1 を含む) か 0 のいずれかである。□

本節ではこれらの Koopman 固有値に対する Koopman 固有関数を陽に構成し、可逆性や系の保存量の数との関連を議論する。

6.4.2 固有値 0

エデンの園状態に対応する指示関数に対して、以下の補題がいえる。

補題 2. 系の $u \in \{1, \dots, 2^N\}$ 番目の状態 $\mathbf{x}^{(u)} \in M$ がエデンの園状態であったとする。このとき、指示関数 $b_u(\mathbf{x})$ は固有値 0 の Koopman 固有関数である。つまり、

$$(\hat{K}b_u)(\mathbf{x}) = b_u(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0 \quad (6.21)$$

を満たす。

Proof. $\mathbf{x}^{(u)}$ はエデンの園状態であるため、どの状態 \mathbf{x} から $\mathbf{x}^{(u)}$ へ遷移することはできない。つまり、任意の $\mathbf{x} \in M$ に対して $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{x}^{(u)}$ である。これより、任意の $\mathbf{x} \in M$ に対して $b_u(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0$ となることが示された。□

対応する K の固有ベクトルは $\phi = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$ となる。このベクトルは u 番目の成分でのみ 1 という値をとり、他のすべての成分は 0 である。これは状態遷移ネットワークの隣接行列 A の性質からも確認できる。すなわちどのリンクも u へは向かないので、 A の u 行目 ($K = A^\top$ の u 列目) の成分はすべて 0 である。つまり、上記の ϕ は K を作用することで $K\phi = 0$ となり、零ベクトルとなる。

もしも系が k 個の異なるエデンの園状態をもっているとき、系は少なくとも k 個の Koopman 固有値 0 をもつ。そして、もし系が 0 固有値を 1 つももたないならば、系はエデンの園状態をもたない。つまり、系は可逆となる。

上記の補題 2 は以下のように一般化できる。

補題 3. 系の $q \in \{1, \dots, 2^N\}$ 番目の状態 $\mathbf{x}^{(q)} \in M$ が、どの周期軌道 (定常状態を含む) にも含まれていないとする。このとき、指示関数 $b_q(\mathbf{x})$ は固有値 0 の $m+1$ 次一般化 Koopman 固有関数である。つまり、

$$(\hat{K}^{m+1}b_q)(\mathbf{x}) = b_q(\mathbf{F}^{m+1}(\mathbf{x})) = 0 \quad (6.22)$$

を満たす。ここで $m \geq 0$ は、 $\mathbf{x}^{(q)}$ の存在する木構造に含まれるエデンの園状態までの $\mathbf{x}^{(q)}$ からの距離のうち、最大の値である。 $\mathbf{x}^{(q)}$ がエデンの園状態ならば $m = 0$ である。

Proof. 状態 $\mathbf{x}^{(q)}$ の属する木構造の根は周期軌道に含まれ、葉はエデンの園状態である (第 5 章 2 節)。つまり、もしも $\mathbf{x}^{(q)}$ と同じ木構造に含まれるエデンの園状態のうち $\mathbf{x}^{(q)}$ から最も遠いものまでの距離を m とすると任意の $\mathbf{x} \in M$ に対して $\mathbf{F}^{m+1}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{x}^{(q)}$ である。すなわち $\mathbf{x} \in M$ に対して $b_q(\mathbf{F}^{m+1}(\mathbf{x})) = 0$ である。□

q 番目の成分のみ 1 という値をとるベクトル $\boldsymbol{\phi} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$ は K の 0 固有値に対応する $m+1$ 次的一般化固有ベクトルであり、 $K^{m+1}\boldsymbol{\phi} = 0$ を満たす。系のすべての一般化 Koopman 固有関数の次数のうちで最大のものは、系のある状態が同じ連結成分中の周期軌道に収束するまでにかかるステップ数のうち、最大のものと与えられる。

6.4.3 固有値 1

孤立した定常状態に対応する指示関数について、以下の補題がいえる。

補題 4. $s \in \{1, \dots, 2^N\}$ 番目の状態 $\mathbf{x}^{(s)} \in M$ が系の孤立した定常状態であったとする。つまり $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(s)}) = \mathbf{x}^{(s)}$ かつ任意の $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^{(s)}$ について $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \neq \mathbf{x}^{(s)}$ であるとする。このとき指示関数 $b_s(\mathbf{x})$ は以下の固有値方程式を満たしており、固有値 1 の Koopman 固有関数である。

$$(\hat{K}b_s)(\mathbf{x}) = b_s(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = b_s(\mathbf{x}) \quad (6.23)$$

Proof. もし $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^{(s)}$ ならば、 $b_s(\mathbf{x}) = b_s(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0$ であり、また $b_s(\mathbf{x}^{(s)}) = b_s(\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(s)})) = 1$ となる。したがって、式 (6.23) の固有値方程式は任意の $\mathbf{x} \in M$ に対して成立する。□

対応する Koopman 固有ベクトルは $\boldsymbol{\phi} = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^\top$ である。ここで、このベクトルは s 番目の成分にのみ 1 という値をとり、他の成分は 0 である。

上記の補題 4 は状態遷移ネットワークの連結成分 (部分ネットワーク) へ一般化できる。

補題 5. $S \subseteq M$ を状態遷移ネットワークのある連結成分に含まれる状態の集合とし、 $Q_S \subseteq \{1, \dots, 2^N\}$ を S に含まれる状態の番号の集合とする。このとき、観測関数 $c(\mathbf{x})$;

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q \in Q_S} b_q(\mathbf{x}) \quad (6.24)$$

は以下の固有値方程式を満たしており、固有値 1 に対応する Koopman 固有関数である。

$$(\hat{K}c)(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = c(\mathbf{x}) \quad (6.25)$$

Proof. もし $\mathbf{x} \in S$ ならば、 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \in S$ と $c(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 1$ がいえる。もし $\mathbf{x} \notin S$ ならば、 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \notin S$ と $c(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0$ がいえる。よって式 (6.25) の固有値方程式は、任意の $\mathbf{x} \in M$ で成立する。□

対応する固有ベクトル $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_{2N})^\top$ の各成分は、 $q \in Q_S$ 番目の成分については $\phi_q = 1$ 、 $q \notin Q_S$ 番目の成分については $\phi_q = 0$ となっている。

6.4.4 複素単位円周上の固有値

さらに、孤立した周期軌道に対して、複素平面の単位円周上の固有値に対応する固有関数も構成することができる。仮に系が $\mathbf{x}^{(P_0)} \rightarrow \mathbf{x}^{(P_1)} \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{x}^{(P_{T-1})} \rightarrow \mathbf{x}^{(P_T)} = \mathbf{x}^{(P_0)}$ という周期 T の孤立した軌道を有していたとする。ここで $P_0, \dots, P_{T-1}, P_T = P_0$ は周期軌道に沿った状態の番号である。この状態の集合を χ とする。 χ に含まれない状態は決して χ にはたどり着けない。つまり $\mathbf{x} \notin \chi$ ならば、 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \notin \chi$ である。

ここで以下のような観測関数を考えてみる。

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} c_q b_{P_q}(\mathbf{x}) \quad (6.26)$$

この観測関数に対して c_0, \dots, c_{T-1} は非零な係数、 $c(\mathbf{x})$ を固有値 λ の固有関数であると仮定する。つまり以下の固有値方程式の成立を仮定する。

$$\hat{K}c(\mathbf{x}) = \lambda c(\mathbf{x}) \quad (6.27)$$

まず、もし $\mathbf{x} \notin \chi$ ならば $\hat{K}c(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0$ と $c(\mathbf{x}) = 0$ であることから、式 (6.27) の固有値方程式は λ によらずに成立する。次に $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(P_j)} \in \chi$ ($j = 0, \dots, T-1$) という状態について

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} c_q b_{P_q}(\mathbf{x}) = c_j \quad (6.28)$$

そして

$$\hat{K}c(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = \sum_{q=0}^{T-1} c_q b_{P_q}(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = c_{j+1} \quad (6.29)$$

が成立する。ここで $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(P_j)}) = \mathbf{x}^{(P_{j+1})}$ を用い、 $j+1$ は T の剰余をとるとした。

これより c が式 (6.27) の固有値方程式を満たすためには $c_{j+1} = \lambda c_j$ 、つまり $c_j = \lambda^j c_0$ が必要である。ここで $c_j = \lambda^j c_0$ 、 $c_{j+T} = c_j$ であることから、固有値 λ は $\lambda^T = 1$ を満たさなければならない。

以上の議論において一般性を失わずに $c_0 = 1$ と仮定できることから、以下の補題を得る。

補題 6. $b_{P_0}(\mathbf{x}), \dots, b_{P_{T-1}}(\mathbf{x})$ を孤立した周期軌道 $\mathbf{x}^{(P_0)} \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{x}^{(P_{T-1})} (\rightarrow \mathbf{x}^{(P_0)})$ に関する指示関数とする。このとき、以下の観測関数は固有値 $\lambda = \exp(2\pi i k/T)$ ($k = 0, 1, \dots, T-1$) に対応する Koopman 固有関数である。

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^q b_{P_q}(\mathbf{x}) \quad (6.30)$$

したがって、 T 周期軌道に対して T 個の独立な固有関数を構成することができた。とくに $k = 0$ のとき、 $\lambda = 1$ と $c_0 = c_1 = \dots = c_{T-1} = 1$ を得るが、これは補題 4 で議論した固有値 1 の固有関数に相当する。

以上の議論は孤立していない周期軌道へ拡張できる。前に導入したとおり、 $\chi = \{\mathbf{x}^{(P_0)}, \mathbf{x}^{(P_1)}, \dots, \mathbf{x}^{(P_{T-1})}\}$ を T 周期軌道に含まれる状態の集合とし、さらに状態遷移ネットワーク中の χ を含む連結成分を $S = \{\mathbf{x}^{(P_0)}, \mathbf{x}^{(P_1)}, \dots, \mathbf{x}^{(P_{T-1})}, \mathbf{x}^{(t_1)}, \mathbf{x}^{(t_2)}, \dots, \mathbf{x}^{(t_s)}\}$ とする。ここで t_1, \dots, t_s は、 S に含まれるが χ に含まれない状態の番号である。

補題 7. 状態遷移ネットワーク中の χ を含む連結成分を $S \subseteq M$ とし、 $Q_S = \{P_0, P_1, \dots, P_{T-1}, t_1, t_2, \dots, t_s\} \subseteq \{1, \dots, 2^N\}$ を S に含まれる状態に対応する番号の集合とする。ここで $\{t_1, t_2, \dots, t_s\}$ は χ に含まれない状態の番号である。このとき以下の観測関数は、 $\lambda = \exp(2\pi ik/T)$ ($k = 0, 1, \dots, T-1$) という固有値の Koopman 固有関数である。

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q \in Q_S} \lambda^{-D_q} b_q(\mathbf{x}) \quad (6.31)$$

ここで D_q は状態遷移ネットワークにおいて $\mathbf{x}^{(q)}$ から $\mathbf{x}^{(P_0)} \in \chi$ への向きづけられた経路の距離である。

Proof. もし $\mathbf{x} \notin S$ ならば、 $\mathbf{F}(\mathbf{x}) \notin S$ であり、 $c(\mathbf{x}) = c(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = 0$ となる。したがって式 (6.27) の固有値方程式は成立する。もし $\mathbf{x} \in S$ であれば、 D を \mathbf{x} から $\mathbf{x}^{(P_0)}$ への距離として

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q \in Q_S} \lambda^{-D_q} b_q(\mathbf{x}) = \lambda^{-D} \quad (6.32)$$

が成立し、

$$\hat{K}c(\mathbf{x}) = \sum_{q \in Q_S} \lambda^{-D_q} b_q(\mathbf{F}(\mathbf{x})) = \lambda^{-D+1} \quad (6.33)$$

となる。これは $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ という状態が \mathbf{x} という状態よりも 1 ステップ分だけ $\mathbf{x}^{(P_0)}$ に近い、つまり $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ から $\mathbf{x}^{(P_0)}$ への距離が $D-1$ となるためである。よって、この場合も式 (6.27) の固有値方程式は成立する。

ここで \mathbf{x} が χ に含まれた状態であるとし、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(P_0)}$ を仮定すると T 周期性から $c(\mathbf{x}^{(P_0)}) = 1 = c(\mathbf{x}^{(P_T)}) = \lambda^{-T}$ が成立する必要がある。つまり固有値 λ は $\lambda = \exp(2\pi ik/T)$ ($k = 0, 1, \dots, T-1$) を満たす必要がある。□

孤立した周期軌道の場合と同様に、連結成分が T 周期軌道を有しているならば T 個の独立した固有関数を構成できる。なお、固有ベクトルの非零成分には周期軌道上に存在しない状態も含まれる。補題 6 の結果は補題 7 で軌道が孤立した周期軌道になっている場合、すなわち $\chi = S$ のときに再現される。また $k = 0$ の場合が、補題 5 で議論した状態遷移ネットワークの連結成分に対応する固有値 1 の固有関数に相当する。

6.4.5 独立な固有関数の数

それではここまで構成してきた固有関数のうち独立なもの数を考えていく。まず、状態遷移ネットワークに含まれる連結成分として、 T 周期軌道 (T 個の状態) と周期軌道に含まれない状態 (U 個の状態) で構成された、大きさ $T + U$ の連結成分を考える。第 5 章 2 節で述べたように、1 つの連結成分には 1 つしか周期軌道が含まれないので、どの連結成分もこのような構成の連結成分となっている。

固有値 0 について、周期軌道に含まれない状態 $b_q(\mathbf{x})$ の指示関数 $b_q(\mathbf{x})$ は (一般化) 固有関数であった。つまり系は U 個の独立な固有関数を有している。そして周期軌道に対応する複素平面の単位円周上の T 個の固有値 (1 を含む) に対しても、相互に独立な T 個の固有関数を得た。つまり $T + U$ 個の独立な固有関数がネットワークサイズ $T + U$ の連結成分に対して得られた。以上により、考えている連結成分に対する観測関数の空間を張ることができる固有関数の完全系を構成できた。とくに式 (6.24) を満たす固有値 1 に対応する固有関数が、連結成分ごとに 1 つ得られる、この議論は他のすべての連結成分に対しても適用できるので、全状態遷移ネットワークに対する観測関数の空間を張る固有関数の完全系を得られたことになる。

以上の結果から、次の定理が得られる。

定理 1. 固有値 0 の代数的重複度は、どの周期軌道にも含まれない状態の数に対応している。とくに固有値 0 をもたない系は可逆な系となる。

定理 2. どの連結成分に対しても固有値 1 の固有関数が 1 つだけ構成される。つまり固有値 1 の重複度は、状態遷移ネットワーク全体に含まれる連結成分の数 (そして、独立な保存量の数) に対応する。

注釈 2. 第 5 章 2 節で述べたように固有値 1 の固有関数 $c(\mathbf{x})$ は系の保存量となっており、系のダイナミクスを特徴づける重要な役割をもつ。もし 2 つ以上の固有値 1 の固有関数が存在するなら、それらの固有関数の線形結合もまた、保存量となる。たとえば ECA184 は黒いセルの数を保存することが知られているが、これに対応する Koopman 固有関数 $c_{black}(\mathbf{x})$ は、

$$c_{black}(\mathbf{x}) = \sum_{s=1}^{N'} N_s c_s(\mathbf{x}) \quad (6.34)$$

のように表現することができる。ここで N' は状態遷移ネットワーク中の連結成分の数であり、すなわち固有値 1 に対する $\{c_1, c_2, \dots, c_{N'}\}$ という独立な固有関数の数である。そして N_s は、 c_s という固有関数に対応する連結成分に含まれる状態に共通する、黒いセルの数である。

CA の保存量を系統的に求める方法は課題とされている [81] が、Koopman 作用素から固有関数として保存量を構成する方法は一つの解決策になりうる。ただし、式 (6.34) のような保存量を構成するためには ECA184 のように黒いセル数が保存するというを事前情報としてもっていない限り難しい。物理的意味のわかりやすい保存量の構成については付録 A で議論する。

注釈 3. Koopman 固有値 $\lambda = \exp(2\pi i/T)$ に対応する式 (6.31) で表された Koopman 固有関数 $c(\mathbf{x})$ を用いることで、連続力学系に対してよく知られている漸近位相 (付録 C) という概念を ECA に導入することができる。連結成分中の $\mathbf{x}^{(P_0)} \in \chi$ までの経路長が D_q である状態 $\mathbf{x}^{(q)} \in S$ の漸近位相は、固有関数 $c(\mathbf{x})$ を用いて次のように表現される。

$$\theta(\mathbf{x}^{(q)}) = i \log(c(\mathbf{x}^{(q)})) = i \log \lambda^{-D_q} = i \log(\exp(-2\pi i D_q/T)) \in [0, 2\pi) \quad (6.35)$$

ここで対数は主値をとることで、 θ は $[0, 2\pi)$ の範囲に値をとる。すると、任意の $\mathbf{x}^{(q)} \in S$ に対して $\theta(\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(q)})) - \theta(\mathbf{x}^{(q)}) = 2\pi/T$ という性質を得られる。つまり系の時間発展における各時間ステップにおいて、漸近位相は常に一定の周波数 $2\pi/T$ だけ増大する。

注釈 4. Perron-Frobenius 作用素 \hat{P} についても、 \hat{K} と同様にスペクトルの性質を議論することができる。詳細には付録 B で議論する。

6.5 13 セルの ECA に対する Koopman スペクトル解析

6.5.1 セットアップ

それでは、周期境界条件下で 13 セルの格子上で時間発展する ECA の Koopman 作用素を全ルールに対して数値的に解析する。Wolfram の分類は大規模系に対するものであるから、数値解析においてもセル数の大きな系を用いることが望ましい。しかし系の状態数 2^N はセル数 N に対して指数的に増大するため、Koopman 行列の数値的解析はすぐに困難になる。本節では、周期境界条件を課した 13 セルの系を用いる。 $N = 13$ は、 $2^N \times 2^N$ 行列の固有解析を 16 GB のメモリのコンピュータで実行することのできた N のうち、最大の素数である*2。この場合に独立な 88 種類の ECA に対する状態遷移ネットワークから Koopman 行列を構成し、その Koopman 行列のすべての Koopman 固有値を数値的に解析する。

6.5.2 Koopman 固有値に対して期待される性質

図 6.3 は Wolfram の 4 つの Class に含まれるルールの典型的な状態遷移ネットワークとして、ECA8 (Class I)、ECA25 (Class II)、ECA30 (Class III) と ECA54 (Class IV) を図示した。ネットワークのトポロジーからも各 Class の特徴的な性質をみてとることができる。ただし $N = 13$ の状態遷移ネットワークは可視化するにはノードが多すぎるため、この図は $N = 10$ の場合である。この先のスペクトルの数値解析は $N = 13$ の場合を実行した。

各 Class の漸近的な挙動の性質から、Koopman 固有値には以下のような性質が期待される (ただし固有値 0 は可逆な ECA には現れない)。

- Class I: 系は一様定常状態に収束するので、Koopman 固有値は非常に大きな重複度をもった

*2 ECA のサイズに依存した特異的なダイナミクスをなるべく避けるため N は素数となるようにした

固有値 0 か、小さい重複度の固有値 1 となる。

- **Class II:** 系は短周期の周期軌道に収束するため、周期 T に対応した $\exp(2\pi ik/T)$ という T 個の Koopman 固有値が単位円周上にあらわれる。ここで、 $k = 0, 1, \dots, T - 1$ である。実際には異なる周期の軌道がいくつも存在しうするため、単位円周上の固有値は必ずしも均等な間隔で分布しない。大きな重複度をもった固有値 0 も現れうる。
- **Class III と IV:** 系はカオスや複雑な挙動を示す。その軌道は周期軌道ではあるが、その周期は Class II に比較すると典型的に遥かに長くなる。そのため大量の Koopman 固有値が単位円周上に現れる。一般的に異なる周期の軌道が存在するため、その分布は均等にはならない。固有値 0 も大きな重複度のもとで現れる。

図 6.4 は全 256 種類 (実際には独立な 88 種類) の ECA に対して 13 セル周期境界条件のもとで数値的に求めた Koopman 固有値を複素平面上に図示したものである。ECA のルール {15, 85}、51、204、{154, 166, 180, 210}、{170, 240}、{45, 75, 89, 101}、105、150 は、固有値 0 をもたないため可逆である。これは de Bruijn グラフによる任意のサイズの系に対する可逆性の議論 [86] で示された結果のうち、13 セルの場合に整合している。

Koopman 固有値の分布には例外はあるものの、期待された固有値の性質をある程度確認できる。一部の例外は Koopman 行列が系の非典型的なダイナミクスを含むダイナミクス全体の情報を有している一方で、Wolfram の分類が系の典型的なダイナミクスを対象にしていること、それから数値解析における系が小規模であることに由来する。それでは次に各 Class に対して、その典型的なダイナミクスと固有値分布の定性的な性質について述べていく。

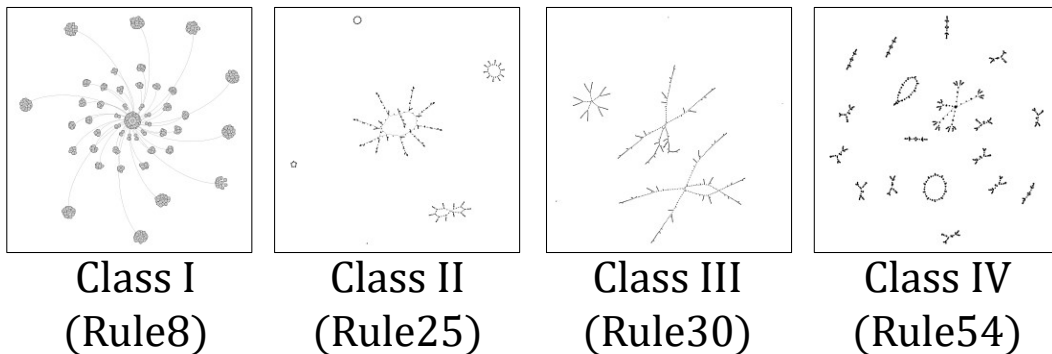


図 6.3 ECA の 4 つの Class に対応する典型的な状態遷移ネットワーク。

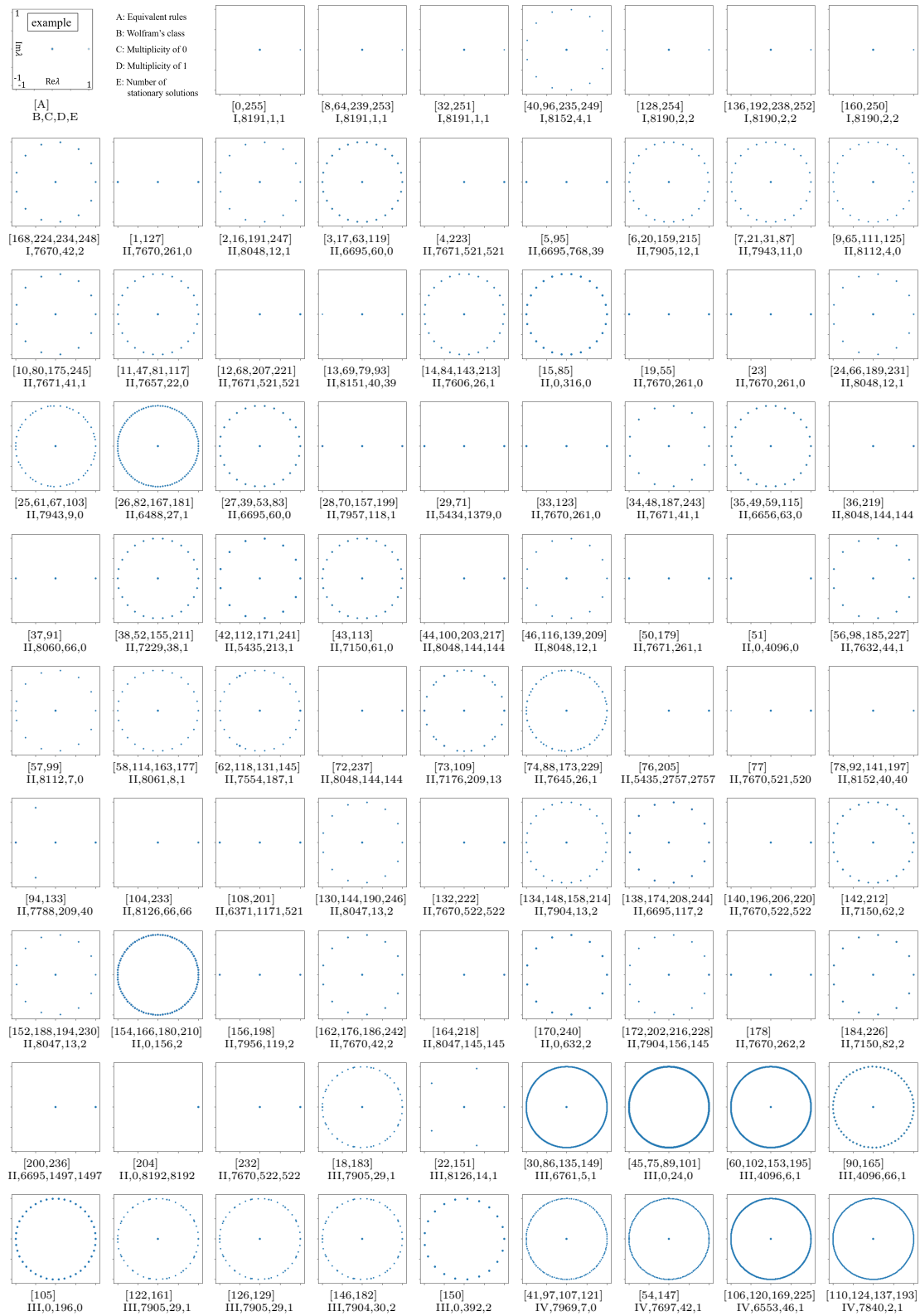


図 6.4 周期境界条件を課した 13 セルの ECA 全 256 種類に対する Koopman 固有値分布。
各図の下のキャプションはそれぞれ、等価なルール、Class、固有値 1 と 0 の重複度。

6.5.3 Class I

図 6.4 に示すように多くのルールにおいて、Koopman 固有値は期待された通り、重複度 1 か 2 の固有値 1 と、大きな重複度の固有値 0 のいずれかとなっている。一方で ECA40、168 (とそれぞれに等価なルール) については 0 に加えて、13 通りの値 (1 を含む) が Koopman 固有値として単位円周上に均等な間隔で現れている。実際、これらのルールは典型的な一様状態に加えて非典型的な並進解 (周期軌道) を有している。図 6.5 には Class I から ECA8 と ECA168 のダイナミクスの一例と固有値分布を示した。ECA168 については非典型的な並進解も図示した。

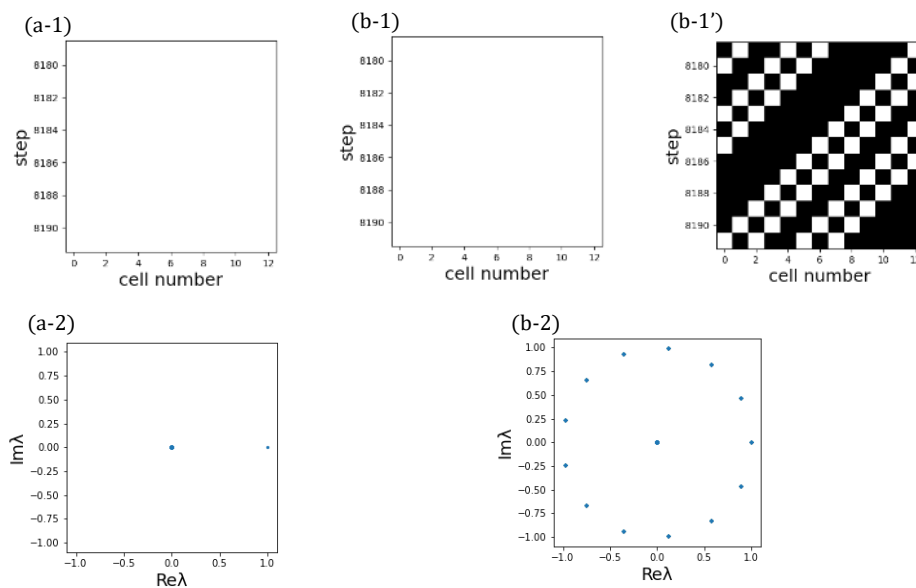


図 6.5 Class I のルールのダイナミクス (上段) と Koopman 固有値分布 (下段)。
(a) ECA8。(b) ECA168。典型的な一様状態に加えて、非典型的な並進解も示した。

6.5.4 Class II

図 6.4 に示すように、多くのルールにおいて 0 または単位円周上に Koopman 固有値 (1 を含む) が均等な間隔で現れている。Class I に比べて、固有値 1 の重複度は比較的大きい。単位円周上の固有値の数は 13 個以下のものが多く、最大でも 104 個であった。図 6.6 に Class II の 4 つのルールに対して得られた典型的なダイナミクスと固有値分布を示す。それぞれについて以下、簡単に述べる。なお、可逆な系については固有値 0 は現れない。

- a) 定常状態: 系の状態は ECA4 に対する図 6.6 (a) のような空間的に非一様な定常状態に収束し、Koopman 固有値は 0 か 1 である。系はさまざまな定常状態 (周期 1 の周期軌道) をもつために、固有値 1 の重複度は比較的大きい。
- b) 振動状態: 系の状態は ECA5 に対する図 6.6 (b) のように短い周期的な挙動を示し、

Koopman 固有値は 0 と単位円周上に分布する。系が異なる周期軌道 (定常状態を含む) を有するために、固有値 1 の重複度は比較的大きい。

c) 並進状態: 図 6.6 (c) に示すように系のパターンが左右どちらかの向きへ、その見た目を変化させずに並進する。これは 13 周期状態に対応し、Koopman 固有値は 0 の他、13 個の固有値が単位円周上に現れる。

d) 振動-並進状態: 系の状態は ECA26 に対する図 6.6 (d) のように並進する挙動と、短周期の振動的な挙動という 2 つのタイプの挙動が混ざったダイナミクスを示す。周期は 26 から 104 の間となり、比較的多くの固有値 (ECA26、154 とその等価なルールの場合に最大値 104 個の異なる Koopman 固有値) が単位円周上に現れる。

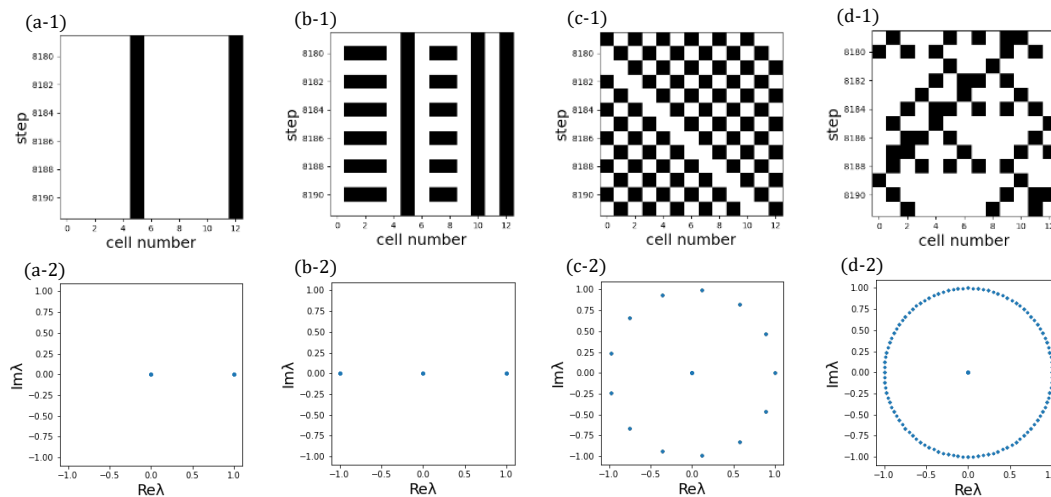


図 6.6 Class II のルールのダイナミクス (上段) と Koopman 固有値分布 (下段)。

(a) ECA4。 (b) ECA5。 (c) ECA184。 (d) ECA26。

6.5.5 Class III と IV

図 6.4 に示すように多くのルールにおいて 13 個以上の固有値が単位円周上に現れた。多くのルールでは、周期の異なる比較的大きな周期の周期軌道が混在することで多くの数の固有値が単位円周上に分布する。Class III であるにも関わらずいくつかのルールでは少ない数 (例えば ECA22 では 5 個) の固有値しか単位円周上に現れていないが、これは系が小さいために短周期の振動状態しか現れないためである。大規模系ではこれらのルールもカオス的な挙動を示す。

図 6.7 に、Class III から ECA30 と Class IV から ECA54 のダイナミクスの一例と Koopman 固有値を示す。これらのルールでは (周期的だが、非常に長い周期の) 複雑なパターンを系が示す。そのため、非常に多くの固有値が単位円周上に現れる。

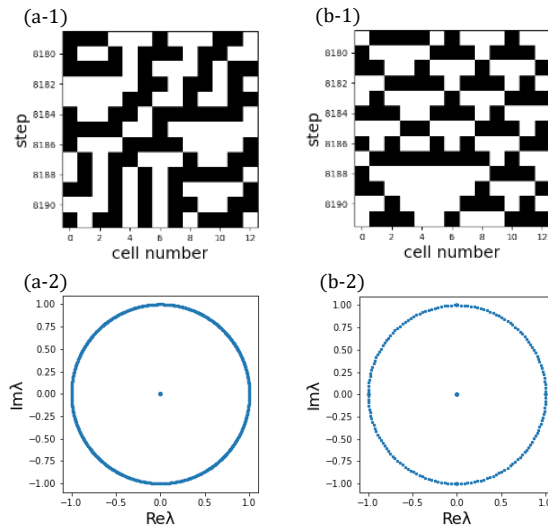


図 6.7 Class III と IV のルールのダイナミクス (上段) と Koopman 固有値分布 (下段)。
 (a) ECA30、Class III。 (b) ECA54、Class IV。

6.6 考察

6.6.1 独立な固有値の数と周期軌道の長さ

第 6 章 5 節では 13 セルの ECA のすべての独立なルールに対して Koopman 固有値を数値的に求めた。この数値解析を異なるシステムサイズの系に対して適用した結果、得られた独立な Koopman 固有値の数とセル数 N の関係は以下のものであった。(i) Class I と Class II のルールでは、収束先の状態が一様状態または非一様定常状態や、短周期の振動状態となるとき、異なる固有値は 1 個から高々数個しか得られない。そして並進解のような周期解があるとき、固有値の数は N に対しておよそ線形に増大する。つまり、系のダイナミクスの周期は最大でも $O(N)$ 程度である。(ii) Class III や Class IV のようなカオス挙動が見られる系では、独立な固有値の数は N に対して指数的に増大しうる。周期の最大値も速い増大を見せる。

この観察から $N \rightarrow \infty$ の極限において、異なる固有値の集合 σ は Class I や II に対しては $\text{card}(\sigma) = \aleph_0$ 、Class III や IV に対しては $\text{card}(\sigma) = \aleph_1$ となることを予想している。また $N \rightarrow \infty$ の極限で Class III や IV のカオスや複雑なダイナミクスの周期は発散し、単位円周上に稠密に分布した固有値として系が示す非周期的なカオス挙動を特徴づけられると予想している。 N と独立な固有値の数のスケール的な関係性からルールごとのダイナミクスの性質の違いを定量的に特徴づけられれば、これをもとに ECA のルールを分類できることが期待される。

6.6.2 動的モード分解 (Dynamic Mode Decomposition; DMD)

本研究では ECA の状態遷移ネットワークと等価な Koopman 作用素の行列表現を構成し、そのスペクトル的な性質を議論してきた。とくに第 6 章 4 節では、この行列表現を参考にして任意のサイズの系における ECA のダイナミクスと Koopman 作用素のスペクトル的な性質の関係についての厳密な結果を得た。しかし Koopman 行列の大きさは $2^N \times 2^N$ となることから、スペクトル的な性質の数値解析も N の増大とともにすぐさま実用的ではなくなる。本研究では $N = 13$ の場合を数値的に解析できたが、これは N が大きくなると困難となる。

動的モード分解 (DMD) とその拡張的手法は、時系列データから Koopman 固有値を推定する標準的かつ、よく知られた手法である。この手法は流体系などの空間的広がりのある系に対して活発に適用されてきている [68, 69]。DMD の手法は ECA の Koopman 固有値の推定にも用いることができる。最も簡単に DMD を ECA に適用する場合、これを ECA に適用した議論は $O(N) \times O(N)$ の行列という比較的小さな行列を時系列データから構成し、解析することで Koopman 固有値を推定できる。つまりこの手法は、より大きな系に対しても適用することができる。

第 6 章 5 節で行った数値解析と同じ 13 セルの ECA に対する動的モード分解においては、とくに周期が N 以下のシンプルな ECA の時間発展に対して DMD が Koopman 解析の結果を比較的良好に再現することを確認しており [87]、DMD の手法は Koopman 行列を直接扱わずに Koopman 固有値を推定できる手法となっている。系の最大周期が N よりも非常に長い場合は、代わりに時間遅れの時系列データを用いた Hankel DMD [75] などの拡張的な DMD の手法を適用することで正しい Koopman 固有値を推定できる [87]。一方で、Hankel DMD でも軌道に関する Koopman 固有値をすべて再現することはできないため、その場合は Extended DMD [72] などの別の手法を適用することが必要となる [87]。より大きな系の ECA に対する動的モード分解については、今後の論文で報告する。

さらに DMD に加えて、状態遷移行列や Koopman 行列のスパース性を利用できれば大きな系の Koopman 作用素を数値的に解析するための効率的な手法の開発が期待される。このようなアプローチは ECA の Koopman 作用素のいっそう詳細なスペクトル的な性質の解析に役立つと考えられる。

第 7 章

まとめと展望

第 II 部では ECA に対する Koopman 解析についての議論を行った。まず ECA に対して Koopman 作用素を導入した。とくに指示関数を用いて状態の one-hot 表現を導入することで、Koopman 作用素の行列表現を構成した。さらに固有値が 0、または単位円周上 (1 を含む) にのみ分布することを示し、対応する Koopman 固有関数を陽に構成した。さらに全 88 種類の独立な ECA のルールに対して、周期境界条件を課した 13 セルの場合についての Koopman 固有値を数値的に求めた。

Koopman 固有値や、その重複度は状態遷移ネットワークのトポロジーを反映しており、複素平面の単位円周上の固有値は各連結成分に存在する周期軌道の周期を反映している。固有値 0 の重複度は系のいかなる周期軌道にも存在しない状態の数に対応しており、固有値 0 が存在するか否かによって各ルールの可逆性を判別できる。固有値 1 に対する Koopman 固有関数は状態遷移ネットワークの各連結成分にそれぞれ対応しており、固有値 1 の重複度は状態遷移ネットワークにおける連結成分の数に対応する。そしてその数は、系の独立な保存量の数にも対応する。また、単位円周上の固有値に対応する固有関数によって、はじめて有限状態系に漸近位相を定義した。漸近位相による位相縮約は連続系に対して議論されてきたものであり、CA を位相縮約した系の解析については今後の課題である。さらに、ECA の独立なルールすべてに対して Koopman スペクトルを数値的に解析した。その結果 ECA の Koopman 固有値の分布は、一部の例外はあるものの Wolfram の分類にも概ね対応していることを確認した。

本研究では ECA の全状態に対する状態遷移ネットワークから構成された Koopman 行列の数値解析を行ったが、数値計算においてはセル数 N に対して Koopman 行列が $2^N \times 2^N$ 行列となるため、 N の増大とともにたちまち実行できなくなる。しかし、流体系のような空間的広がりをもった大規模系に対して応用されている DMD や、その拡張的手法 [68, 69, 72, 75] を ECA に適用する場合は $O(N) \times O(N)$ の行列から実行することができる [87]。DMD などのデータ科学的手法を用いた、より詳細な ECA の解析は今後の課題である。

第 8 章

全体の総括

本学位論文では 1 次元時空パターン形成現象をテーマとして第 I 部で連続系、第 II 部で離散系を対象とした議論を行った。

第 I 部では自己相似構造がパターン形成されるテープの剥がし跡の連続モデルを定式化し、その性質を議論した。先行研究で提案されていた剥がし跡パターンを再現する数理モデルとは違い、今回はテープの剥離先端の力学的なダイナミクスを記述するモデルとしての定式化を行った。このモデルは、数理的には Maugis and Barquins [36] によって提案された剥離先端のダイナミクスを記述する van der Pol 型の常微分方程式に対して二重井戸型ポテンシャルと拡散項を付与する形で定式化された双安定の van der Pol 型の反応拡散系とみなせるモデルである。

さらに定式化したモデルを Bonhoffer-van der Pol 型の反応拡散方程式に帰着することで、テープの剥がし跡に自己相似的パターンが現れるメカニズムについて考察を行い、CA モデル的に理解されるテープの剥がし跡メカニズムを提示した。

第 II 部ではそのようなパターン形成の定性的理解に適している離散系のパターン形成モデルとして、ECA を題材に Koopman 作用素を用いた解析を行った。とくに現在非常に盛んに研究が行われている Koopman 作用素による解析手法を、はじめて ECA という有限状態系に適用した。この議論では ECA の Koopman 作用素の行列表現を構成し、ダイナミクスに特徴的な物理量が Koopman 作用素の固有関数として導くことができることを示した。また、各固有値に対する固有関数を陽に構成した。さらに 88 種類の独立なルールに対する Koopman スペクトルを数値的に求めることで、そのダイナミクスの性質が固有値分布に現れることを確認した。

最後に連続と離散の関わりという点で、本学位論文では第 I 部において連続モデルに近い挙動を示す CA モデルから現象を理解することを試みたが、一方でテープの剥がし跡に対しては既に確率的 CA モデルとしての現象論的なモデル化が行われている [14]。この確率的 CA モデルと反応拡散モデルとの関連も興味を持たれる。1 つの方法は今回提示した CA モデルとの比較に限らず、反応拡散モデルに超離散化の方法を適用することで導出される CA モデルとの比較が考えられる。また逆に、CA モデルから出発して反応拡散モデルに近い機構の連続モデルを定式化できるかどうか興味深い問題である。連続モデルを定式化できた場合、それを足がかりに現象へのさらなる深い理解を得られることが期待される。

第 II 部では ECA を Koopman 作用素を用いて解析したが、ここでは保存量などの系のダイナミクスにとって重要な物理量を Koopman 作用素の固有関数として、系統的に構成できることを述べた。パターン形成現象をモデル化した CA モデルに対してこの解析手法を適用し、そこから得られた保存量や漸近位相などの情報は、連続モデルを構成する際のヒントとなることが期待される。また、CA モデルのファジー化などによって現象を忠実に描写できる微分方程式モデルを構成することができれば、一般のパターン形成現象に対してもよりいっそう直感的な手順で微分方程式モデルを作れるようになることが期待されるが、これは今後の課題である。

付録

付録 A 一般の観測関数を基底とした ECA の Koopman 作用素

付録 A.1 基底の変更

第 6 章 4 節では指示関数を用いて Koopman 作用素の固有関数を陽に構成した。一方で指示関数の値は状態の番号によって決まるため、ECA の各セルの状態と構成された Koopman 固有関数の対応がわかりにくい。ここでは一般の観測関数の基底をもとにした議論を行うことで、各セルの状態との対応がわかりやすい Koopman 固有関数の構成を議論する。

指示関数を基底とした場合、Koopman 行列は状態遷移行列 A の転置行列 $K = A^T$ であったため、その構成はわかりやすかった。しかし、一般の基底ではそのような構成ができない。そこで、基底の変換行列を用いて K を一般の基底のものに変換する。まず、 $\Psi = \{\psi_1(\mathbf{x}), \dots, \psi_{2^N}(\mathbf{x})\}$ という関数系を ECA の観測関数の空間を張る新たな基底とする。指示関数 $b_r(\mathbf{x})$ はこの基底関数を用いて

$$b_r(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \beta_r^{(q)} \psi_q(\mathbf{x}) \quad (\text{A.1})$$

のように展開できる。ここで $(\beta_r^{(1)}, \dots, \beta_r^{(2^N)})$ は係数ベクトルであり、 $\beta_r^{(s)}$ は基底の変換行列 U の U_{rs} 成分である。もちろん $\psi_q(\mathbf{x})$ も指示関数を用いて

$$\psi_q(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} \psi_q^{(r)} b_r(\mathbf{x}) \quad (\text{A.2})$$

のように展開できる。 $(\psi_r^{(1)}, \dots, \psi_r^{(2^N)})$ は係数ベクトルであり、 $\psi_r^{(s)}$ は、 U の逆行列 U^{-1} の U_{rs}^{-1} 成分である。指示関数の Koopman 作用素は状態遷移ネットワークの隣接行列から

$$(\hat{K}b_q)(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} A_{qr} b_r(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} \sum_{s=1}^{2^N} A_{qr} \beta_r^{(s)} \psi_s(\mathbf{x}), \quad q = 1, \dots, 2^N \quad (\text{A.3})$$

で与えられる。つまり、 ψ_q の時間発展を考えると

$$\begin{aligned} (\hat{K}\psi_q)(\mathbf{x}) &= \sum_{r=1}^{2^N} \psi_q^{(r)} \hat{K}b_r(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} \sum_{s=1}^{2^N} \psi_q^{(r)} A_{rs} b_s(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{r=1}^{2^N} \sum_{s=1}^{2^N} \sum_{t=1}^{2^N} \psi_q^{(r)} A_{rs} \beta_s^{(t)} \psi_t(\mathbf{x}), \quad q = 1, \dots, 2^N \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

となることから、隣接行列 A を変換行列 U で相似変換した行列 $\bar{A} = U^{-1}AU$ が、新たな基底に対する Koopman 行列である。

一般の観測関数 $G : M \rightarrow \mathbb{C}$ は新たな関数系 Ψ を用いて

$$G(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} g'_q \psi_q(\mathbf{x}) \quad (\text{A.5})$$

のように展開される。ここで (g'_1, \dots, g'_{2^N}) は係数ベクトルである。一般の観測関数 G の時間発展は、 Ψ という基底のもとでは

$$(\hat{K}G)(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} \bar{A}_{qr}^T g'_r \right) \psi_q(\mathbf{x}) \quad (\text{A.6})$$

となる。また、 G は指示関数による展開の係数ベクトル (g_1, \dots, g_{2^N}) を用いて

$$G(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \sum_{r=1}^{2^N} g'_q \psi_q(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \sum_{r=1}^{2^N} g_q b_q^T \psi_r(\mathbf{x}) \quad (\text{A.7})$$

$$= \sum_{q=1}^{2^N} \sum_{r=1}^{2^N} g_q U_{qr} \psi_r(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \sum_{r=1}^{2^N} (U_{qr}^T g_r) \psi_q(\mathbf{x}) \quad (\text{A.8})$$

とも展開できる。これより (g'_1, \dots, g'_{2^N}) と (g_1, \dots, g_{2^N}) は

$$g'_q = \sum_{r=1}^{2^N} U_{qr}^T g_r \quad (\text{A.9})$$

という関係にある。これより、第 6 章 4 節で構成した Koopman 固有関数は

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} U_{qr}^T c_r \psi_r(\mathbf{x}) \quad (\text{A.10})$$

のように新たな基底へ展開される。 $\{\psi_r(\mathbf{x})\}_{r=1, \dots, 2^N}$ という関数系を適切に選択できれば、固有関数を物理的意味合いがわかりやすい形で表現することができる。

具体例:Walsh 関数系

ここではセルの状態を反映した観測関数の具体例として、Walsh 関数系 [88] と関連する観測関数系を基底とした Koopman 作用素の固有解析を議論する。ECA の状態は各セルの状態に対するバイナリ値ベクトルで特徴づけられる。そのベクトルの成分には一般的に 0 と 1 が用いられるが、ここでは白セルに -1 、黒セルに 1 を割り当てることにする。つまり状態空間は $M = \{\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N) \mid x_1, \dots, x_N \in \{-1, 1\}\}$ となる。

ここでは基底となる観測関数に、各状態におけるセルの値、つまり $X_i(\mathbf{x}) = x_i$ をもとにした以下の関数系を用いることとする。

$$W_q(\mathbf{x}) = \prod_{j=1}^N X_j^{\alpha_j^{(q)}}(\mathbf{x}), \quad q = 0, \dots, 2^N - 1 \quad (\text{A.11})$$

ここで $\alpha_j^{(q)}$ は 0 か 1 のどちらかの値をとり、 q というインデックスは $q = \sum_{j=1}^N 2^j \alpha_j^{(q)}$ を満たす。つまり、 $(\alpha_1^{(q)}, \dots, \alpha_N^{(q)})$ は q の 2 進展開である。この関数系は Walsh 関数系という完全正規直交系に関連している。

Walsh 関数系は、Rademacher 関数系から構成することができる [88]。Rademacher 関数系 $\{r_n\}_{n=1,2,\dots}$ は完全系ではない正規直交系で、 $[0, 1)$ 上で以下のように定義される。

$$r_0(t) = 1 \quad (\text{A.12})$$

$$r_1(t) = \begin{cases} 1, & t \in [0, 0.5), \\ -1, & t \in [0.5, 1). \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

$$r_n(t) = r_1(t/2^{n-1}) \quad (n > 1) \quad (\text{A.14})$$

ここで $r_n(t)$ は、 $r_1(t)$ の定義域を $t > 1$ に周期拡張したものとして定義される。これを用いて Walsh 関数系は

$$w_q(\mathbf{x}) = \prod_{j=1}^N r_j^{\alpha_j^{(q)}} \quad (\text{A.15})$$

で定義される。 $\alpha_j^{(q)}$ は上で定義したものと同様である。Rademacher 関数と $X_k(\mathbf{x})$ は $X_k(\mathbf{x}) = r_k(\frac{u(\mathbf{x})}{2^N})$ という関係にある。ここで各状態 \mathbf{x} に対するインデックス u を以下のように導入した。

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N 2^{j-1} \frac{x_j + 1}{2} \quad (\text{A.16})$$

このインデックスを用いて非線形関数 $W_k(\mathbf{x})$ は、Walsh 関数を用いて $W_k(\mathbf{x}) = w_k(\frac{u(\mathbf{x})}{2^N})$ のように表すことができる。この $\{W_k\}_{k=1,\dots,2^N}$ という関数系は各状態におけるセルの状態を反映した関数系であり、完全系となっているため観測関数の空間全体を張る基底として採用することができる。

たとえば3セルの系の場合、指示関数の基底から $\{W_k\}_{k=1,\dots,2^N}$ という基底への変換行列 U は

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.17})$$

となる。この逆行列は $U^{-1} = \frac{1}{2^3} U^\top = \frac{1}{2^3} U$ である。

これを第6章3節で扱った ECA120 (3セル、周期境界条件) に適用してみよう。式 (6.19) と式 (6.20) で構成された固有ベクトルは $\bar{\phi} = U\phi$ として

$$\begin{aligned} \bar{\phi}^{(1)} &= \frac{1}{8}(3, 1, 1, -1, 1, -1, -1, -3)^\top \\ \bar{\phi}^{(2)} &= \frac{1}{4}(0, -1, e^{\frac{i\pi}{3}}, e^{\frac{2i\pi}{3}}, e^{\frac{5i\pi}{3}}, e^{\frac{4i\pi}{3}}, 1, 0)^\top \\ \bar{\phi}^{(3)} &= \frac{1}{4}(0, -1, e^{\frac{5i\pi}{3}}, e^{\frac{4i\pi}{3}}, e^{\frac{i\pi}{3}}, e^{\frac{2i\pi}{3}}, 1, 0)^\top \\ \bar{\phi}^{(4)} &= \frac{1}{8}(5, -1, -1, 1, -1, 1, 1, 3)^\top \\ \bar{\phi}^{(5)} &= \frac{1}{8}(1, -1, -1, 1, 1, 1, 1, 1)^\top \\ \bar{\phi}^{(6)} &= \frac{1}{8}(1, 1, -1, 1, -1, 1, 1, 1)^\top \\ \bar{\phi}^{(7)} &= \frac{1}{8}(1, -1, -1, 1, -1, 1, 1, -1)^\top \\ \bar{\phi}^{(8)} &= \frac{1}{8}(1, -1, -1, -1, -1, -1, -1, 1)^\top \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

へと変換される。とくに保存量に対応する固有値1の2つ固有ベクトル $\bar{\phi}^{(1)}$ と $\bar{\phi}^{(4)}$ について式 (A.10) にならって Koopman 固有関数を作ると

$$\begin{aligned} c_1 &= 3W_0 + W_1 + W_2 - W_3 + W_4 - W_5 - W_6 - 3W_7 \\ c_4 &= 5W_0 - W_1 - W_2 + W_3 - W_4 + W_5 + W_6 + 3W_7 \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

という2つの独立な保存量が構成される。ここで右辺はわかりやすいよう8倍した。これを整理すると

$$\begin{aligned} c'_1 &= W_0 \\ c'_2 &= W_1 + W_2 - W_3 + W_4 - W_5 - W_6 - 3W_7 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

となり、自明な保存量である定数関数 $c'_1 = W_0 = 1$ と非自明な保存量 c'_2 が構成される。とくに c'_2 の右辺の W_k を各セルの値に対応した表式に置き換えて整理すると

$$c'_2 = X_1 + X_2 + X_3 - X_1X_2 - X_2X_3 - X_3X_1 - 3X_1X_2X_3, \quad (\text{A.21})$$

となる。これは新たな基底のもとで表現された保存量である。

ECA120 の非自明な保存量 c_2' はセルの状態に対応しているものの物理的意味合いはわかりづらい。そこで、第 6 章 4 節の注釈 2 で触れた ECA184 に対しても同様に保存量を求めてみる。ECA184 に対して固有値 1 に対応する固有関数を求め、適当に整理すると以下の 4 つの独立な保存量を構成できる。

$$\begin{aligned} c_1'' &= W_0 = 1 \\ c_2'' &= W_1 + W_2 + W_4 = X_1 + X_2 + X_3 \\ c_3'' &= W_3 + W_5 + W_6 = X_1X_2 + X_1X_3 + X_2X_3 \\ c_4'' &= W_7 = X_1X_2X_3 \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

これらのうち、 c_2'' は第 6 章 4 節の注釈 2 で述べた黒セル (または白セル) の数という保存量である。さらに c_3'' は 2 次保存量とよばれる保存量に対応しており黒セルと白セルの境界の数が保存することを表している。このように新しい関数系を採用することで、ECA の (非自明な) 保存量を物理的意味合いがわかりやすい形で構成することができた。

付録 A.2 ファジーエレメンタリーセルオートマトン

Koopman 行列を用いて ECA の連続値への拡張モデルを構成できることを述べる。式 (A.4) で導入された $\psi_q(\mathbf{x})$ の時間発展方程式を見ると、これは系の状態 \mathbf{x} の時間発展にともなう ψ_q という観測量の時間発展を、 Ψ という関数系の基底の線形和で定義しているともみなせる。つまり、 ψ_q の定義域を $\{0, 1\}$ から $[0, 1] \in \mathbb{R}$ へ拡張し、ECA の状態を表すベクトルを $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in [0, 1]^N$ へと拡張できるならば

$$\psi_q(\mathbf{x}_{n+1}) = \sum_{r=1}^{2^N} \bar{A}_{qr} \psi_r(\mathbf{x}_n), \quad q = 1, \dots, 2^N \quad (\text{A.23})$$

は、ECA を連続値のダイナミクスとしてとらえなおしたものとみることができる。とくに、ある N 個の番号 $\{P_{(1)}, \dots, P_{(N)}\} \subset \{1, \dots, 2^N\}$ に対応する観測関数の基底関数 ψ_s が、 $\psi_{P(s)} = X_s(\mathbf{x})$ という s 番目のセルの状態を表す量に対応しているならば

$$X_q(\mathbf{x}_{n+1}) = \sum_{r=1}^{2^N} \bar{A}_{qr} \psi_r(\mathbf{x}_n), \quad q = 1, \dots, 2^N \quad (\text{A.24})$$

という力学系は FECA の少なくとも 1 つ目の定義^{*1}を満たした力学系となる。

例えば ECA184 に対して $\{W_q\}_{q=1, \dots, N}$ を観測関数の基底として採用すると各セルの時間発展は

$$X_i^{n+1} = 0.5X_{i-1}^n + 0.5X_{i+1}^n - 0.5X_{i-1}^n X_i^n + 0.5X_i^n X_{i+1}^n \quad (\text{A.25})$$

*1 緒言: 離散と連続を参照。

のように定義できる。ここで X_i^n は時刻 n において観測関数 X_i がとる値、つまり時刻 n における i 番目のセルの値である。実のところ ECA184 から作った式 (A.25) は真理値表から構成された FECA184 [25] の各セルの値を $2X_i - 1 \rightarrow X_i$ と変換したものに相当するが、 $\{W_q\}_{q=1,\dots,N}$ 以外に観測関数の基底をさまざまにとることで、この方法は容易に ECA の連続値拡張を構成できる 1 つの手法となっている。

付録 B Perron-Frobenius 作用素

Koopman 作用素の随伴作用素である Perron-Frobenius 作用素 [89] について考察する。ECA の Perron-Frobenius 作用素 \hat{P} は、

$$(\hat{P}g)(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x})} g(\mathbf{y}) \quad (\text{B.1})$$

のように定義される。ここで関数 g は $g: M \rightarrow \mathbb{C}$ であり、 $\mathbf{y} \in \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x})$ は $\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \mathbf{x}$ を満たす状態の集合 $\{\mathbf{y}\}$ である。指示関数 $b_q(\mathbf{x})$ ($q = 1, \dots, 2^N$) に対して \hat{P} を作用する場合は、 $\mathbf{x}^{(p)}$ を ECA の p 番目 ($p = 1, \dots, 2^N$) の状態とすると以下ようになる。

$$(\hat{P}b_q)(\mathbf{x}^{(p)}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{x}^{(p)})} b_q(\mathbf{y}) = \sum_{r=1}^{2^N} b_q(\mathbf{x}^{(r)}) A_{pr} = A_{pq} = \sum_{r=1}^{2^N} A_{rq} b_r(\mathbf{x}^{(p)}) \quad (\text{B.2})$$

ここで A は状態遷移行列 (もし $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(r)}) = \mathbf{x}^{(p)}$ ならば $A_{pr} = 1$ 、その他の場合は $A_{pr} = 0$) であり、 $b_q(\mathbf{x}^{(r)}) = \delta_{q,r}$ (δ は Kronecker デルタ) である。これが任意の $q, r \in \{1, \dots, 2^N\}$ に対していえるので、

$$(\hat{P}b_q)(\mathbf{x}) = \sum_{r=1}^{2^N} A_{rq} b_r(\mathbf{x}) = b_s(\mathbf{x}) \quad (\text{B.3})$$

が成立する。ここで、 s は $\mathbf{x}^{(q)}$ の時間発展した先の状態の番号である。一般の観測関数 g は以下のように表される。

$$g(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} g_q b_q(\mathbf{x}) \quad (\text{B.4})$$

ここで、 $g_q \in \mathbb{C}$ は展開係数 ($q = 1, \dots, 2^N$) であり、 g に \hat{P} が作用する場合は次のように表される。

$$(\hat{P}g)(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} g_q (\hat{P}b_q)(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{rq} g_q \right) b_r(\mathbf{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{qr} g_r \right) b_q(\mathbf{x}) \quad (\text{B.5})$$

したがって \hat{P} の行列表示は単純に状態遷移行列 A であり、これは Koopman 行列 K の転置行列 K^T である。

Perron-Frobenius 作用素 \hat{P} と Koopman 作用素 \hat{K} は、2つの関数 $f, g : M \rightarrow \mathbb{C}$ に対して定義される以下の内積

$$\langle f, g \rangle = \sum_{q=1}^{2^N} f_q^* g_q \quad (\text{B.6})$$

に対して、それぞれがお互いの随伴となっている。つまり、

$$\langle \hat{K}f, g \rangle = \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} K_{qr} f_r^* \right) g_q = \sum_{r=1}^{2^N} f_r^* \left(\sum_{q=1}^{2^N} A_{qr}^\top g_q \right) = \sum_{q=1}^{2^N} f_q^* \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{qr} g_r \right) = \langle f, \hat{P}g \rangle. \quad (\text{B.7})$$

となっている。 \hat{K} と \hat{P} は有限次元作用素でありお互いに随伴であることから、同じ固有値をもつ。しかし、対応する固有関数は異なる。

以下の補題は、Perron-Frobenius 作用素 \hat{P} の固有関数が指示関数 $b_q(\mathbf{x})$ を用いて表すことができることを示す。最初の補題は固有値 0 に対するものである。

補題 B.1. 系がいかなる周期軌道（定常状態を含む）にも含まれていない $q \in \{1, \dots, 2^N\}$ という番号の状態 $\mathbf{x}^{(q)} \in M$ を有しているとする。このとき $m > 0$ を状態 $\mathbf{x}^{(q)}$ から、その状態が吸引される周期軌道までの距離とする。そして、最初に到達する周期軌道上の点を $\mathbf{x}^{(s)} = \mathbf{F}^m(\mathbf{x}^{(q)})$ とする。ここで、 $\mathbf{x}^{(r)}$ を同じ周期軌道上の状態のうち $\mathbf{x}^{(s)}$ に m ステップで到達できる状態、つまり $\mathbf{x}^{(s)} = \mathbf{F}^m(\mathbf{x}^{(r)})$ であるとする。このとき、関数

$$c(\mathbf{x}) = b_q(\mathbf{x}) - b_r(\mathbf{x}) \quad (\text{B.8})$$

は固有値 0 の m 次の一般化 Perron-Frobenius 固有関数となっている。つまり、以下が成立する。

$$(\hat{P}^m c)(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{B.9})$$

Proof. 状態 $\mathbf{x}^{(q)}$ と状態 $\mathbf{x}^{(r)}$ はいずれも $\mathbf{x}^{(s)}$ へ m ステップで到達するので、式 (B.3) より

$$(\hat{P}^m c)(\mathbf{x}) = (\hat{P}^m b_q)(\mathbf{x}) - (\hat{P}^m b_r)(\mathbf{x}) = b_s(\mathbf{x}) - b_s(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{B.10})$$

□

2つ目の補題は単位円周上の固有値に対するものである。

補題 B.2. 系が T 周期軌道 $\chi = \{\mathbf{x}^{(P_0)}, \mathbf{x}^{(P_1)}, \dots, \mathbf{x}^{(P_{T-1})}\} \subseteq M$ を有していたとする。ここで、 $\mathbf{x}^{(P_T)} = \mathbf{x}^{(P_0)}$ である。このとき、関数

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^{-q} b_{P_q}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.11})$$

は固有値 $\lambda = \exp(2\pi i k/T)$ ($k = 0, 1, \dots, T-1$) の Perron-Frobenius 固有関数である。つまり、以下の固有値方程式が成立する。

$$(\hat{P}c)(\mathbf{x}) = \lambda c(\mathbf{x}) \quad (\text{B.12})$$

とくに、固有値 1 の固有関数は単に以下で与えられる。

$$c(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} b_{P_q}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.13})$$

Proof. $q = 0, \dots, T-1$ について、番号 $\{P_0, \dots, P_{T-1}\}$ に対応する状態は T 周期軌道 χ に含まれることから、 $r = 0, \dots, T-2$ に対しては $A_{P_q P_r} = \delta_{q, r+1}$ 、 $r = T-1$ に対しては $A_{P_q P_r} = \delta_{q, 0}$ である。さらに、 χ 内の状態は χ から出られないため、 $q \notin \{P_0, \dots, P_{T-1}\}$ と $r = 0, \dots, T-1$ に対して $A_{q P_r} = 0$ となっている。これらの A の性質と \hat{P} の定義から、 $c(\mathbf{x})$ が固有値方程式 (B.12) を満たすことを以下のように確認できる。

$$\begin{aligned} \hat{P}c(\mathbf{x}) &= \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^{-q} (\hat{P}b_{P_q})(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^{-q} \sum_{r=0}^{T-1} A_{P_r P_q} b_{P_r}(\mathbf{x}) = \sum_{q=0}^{T-1} \left(\sum_{r=0}^{T-1} A_{P_q P_r} \lambda^{-r} \right) b_{P_q}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^{-(q-1)} b_{P_q}(\mathbf{x}) = \lambda \sum_{q=0}^{T-1} \lambda^{-q} b_{P_q}(\mathbf{x}) = \lambda c(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

ここで、 $\lambda^T = 1$ を使った。 □

上記の 2 つの補題により、Koopman 固有関数と同様に Perron-Frobenius 作用素のすべての独立な固有関数を構成することができた。

付録 C 位相縮約

位相縮約 [90] と Koopman 固有関数の関係 [91] を簡単に述べる。位相縮約では、安定なリミットサイクル軌道（散逸的な周期軌道）周りで系の時間発展を位相 θ だけの 1 次元的な時間発展に落とし込み、さらに外部摂動に対する振動子の応答も位相ダイナミクスだけで議論できる形に系を縮約する。まず、以下の力学系がリミットサイクル軌道を有しているとする。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (\text{C.1})$$

位相縮約においては、最初にリミットサイクル軌道へ位相を導入する。リミットサイクルが T 周期だったとすると、リミットサイクル軌道上の位相は、ある基準点 \mathbf{x}_0 の位相を $\theta = 0$ としてその点から時刻 t だけ時間発展した点の位相を $\theta = 2\pi t/T$ とおく。このようにすると周期軌道上の点におけるダイナミクスは

$$\frac{d\theta(\mathbf{x})}{dt} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \nabla\theta = \omega \quad (\text{C.2})$$

という非常に簡単な 1 次元常微分方程式へ帰着される。ここで $\omega = 2\pi/T$ である。

次に、リミットサイクル軌道上に定義された位相をリミットサイクルの吸引領域へ拡張する。吸引領域に存在する点 \mathbf{y} は十分時間経過後にリミットサイクル軌道に収束するので、 \mathbf{y} を初期値とした式 (C.1) の時間発展がリミットサイクル軌道上の点 \mathbf{x} を初期値とした解軌道へ収束するとき、

$\theta(\mathbf{y}) = \theta(\mathbf{x})$ のように位相の定義域を拡張する。こうすることでリミットサイクルとその吸引領域を含む領域全体に式 (C.2) を満たす位相場 $\theta(\mathbf{x})$ が導入された。この位相は、漸近位相とよばれる。

ここで、系へ外部からのインパルス的な入力 I によって、リミットサイクル上のある点 \mathbf{x}_1 が $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} + I$ へとはじかれたとしよう。このとき、位相は $\theta(\mathbf{x}_1)$ から $\theta(\mathbf{x}_2)$ へと遷移する。この差、 $g(\theta, I) = \theta(\mathbf{x}_2) - \theta(\mathbf{x}_1)$ を位相応答関数とよぶ。とくに I が微小なときに $g(\theta, I)$ を線形近似すると、

$$g(\theta, I) \nabla \theta|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1(\theta)} \cdot I = \mathbf{Z}(\theta) \cdot I \quad (\text{C.3})$$

のように近似される。ここで導入された $\mathbf{Z}(\theta)$ を位相感受関数とよぶ。これを用いることで振動子の外部制御や振動子間の相互作用を位相ダイナミクスに縮約したモデルによって議論することができる。

さて、これが位相縮約の概略であるが、途中で導入した漸近位相がまさに Koopman 作用素の固有関数と関連づけられる。実際、漸近位相 θ を用いて $\exp(i\theta)$ という観測量を考えると

$$\frac{d}{dt} \exp(i\theta) = i\omega \exp(i\theta) \quad (\text{C.4})$$

となることから、

$$K[\exp(i\theta)](t) = \exp(i\theta(t + \tau)) = \exp(i\omega\tau) \exp(i\theta(t)) \quad (\text{C.5})$$

という性質を確認できる。つまり、 $\exp(i\theta)$ は Koopman 固有関数である。

このように Koopman 作用素と位相縮約が関連づけられたことも相まって、近年では Koopman 作用素の振幅方向の固有関数も考慮した、振動子系の位相-振幅縮約も議論されている [92]。

謝辞

山崎義弘教授には学部4年生から約6年間、指導教員として暖かいまなざしのもとでご指導、ご鞭撻をいただき、また興味の赴くままに研究を進める後押しをいただきました。深く感謝申し上げます。また、中尾裕也教授には博士課程の3年間において、多くの議論や相談をさせていただき、さらに研究の幅を深める好機をいただきました。深く感謝申し上げます。

副査の原山卓久教授、湯浅一哉教授、望月維人教授には本学位論文の審査にあたり多くの貴重なご意見をいただきました。厚く御礼申し上げます。また、在学中には河原吉伸教授、郡宏教授、山口哲生教授、西森拓教授、白石允梓特任准教授にもさまざまな機会に議論や相談をさせていただきました。厚く御礼申し上げます。

大森祥輔博士、山田雄平博士をはじめとする山崎研究室関係者の皆さまには研究に限らず、さまざまな面で大変お世話になりました。また、加藤讓准教授、朱金杰博士、秘書の久保田洋子氏をはじめとする中尾研究室関係者の皆さまにも大変お世話になりました。感謝申し上げます。

博士課程においてはその大半がコロナ禍にあったために、他者との交流が困難な期間が続きまし。そのような期間においてもオンライン上での交流や研究会活動を続けることができたことは、私にとって大きな心の支えとなりました。そのような研究会活動を一緒に行った皆さま、そして公私にわたる交流の機会があった尾崎壮駿氏、香川溪一郎氏、越原健太氏、田村健佑氏、日高裕一朗氏、丸山雄司氏、他にも多くの方々に感謝申し上げます。

最後となりますが、さまざまな面で気を配ってくれ、私の思うようにものごとに取り組む後押しをしてくれた両親に心から感謝します。

参考文献

- [1] R. M. May, “Simple Mathematical Models with Very Complicated Dynamics”, *Nature* **261**, 459-467 (1976). doi:10.1038/261459a0.
- [2] R. FitzHugh, “Impulses and Physiological States in Theoretical Models of Nerve Membrane”, *Biophys. J.* **1**(6), 445-466 (1961). doi:10.1016/S0006-3495(61)86902-6.
- [3] J. Nagumo, S. Arimoto, and S. Yoshizawa, “An Active Pulse Transmission Line Simulating Nerve Axon”, *Proceedings of the IRE* **50**(10), 2061-2070 (1962). doi:10.1109/JRPROC.1962.288235.
- [4] S. Kondo, “The reaction-diffusion system: a mechanism for autonomous pattern formation in the animal skin: Pattern formation in the animal skin”, *Genes to Cells* **7**(6), 535-541 (2002). doi:10.1046/j.1365-2443.2002.00543.x.
- [5] S. Seirin-Lee, Y. Yanase, S. Takahagi, and M. Hide, “A single reaction-diffusion equation for the multifarious eruptions of urticaria”, *PLoS Comput. Biol.* **16**(1), e1007590 (2020). doi:10.1371/journal.pcbi.1007590.
- [6] A. Nakahara, T. Hiraoka, R. Hayashi, Y. Matsuo, and S. Kitsunezaki, “Mechanism of memory effect of paste which dominates desiccation crack patterns”, *Phil. Trans. R. Soc. A.* **377**, 20170395 (2018). doi:10.1098/rsta.2017.0395.
- [7] Y. Yamazaki and A. Toda, “Pattern Formation and Spatiotemporal Behavior of Adhesive in Peeling”, *Physica D* **214**(2), 120-131 (2006). doi:10.1016/j.physd.2005.12.009.
- [8] S. Coombes, “The Geometry and Pigmentation of Seashells”, Nottingham: Department of Mathematical Sciences, University of Nottingham (2004).
- [9] A. M. Zhabotinsky, “Belousov-Zhabotinsky reaction”, *Scholarpedia* **2**(9) 1435 (2007). doi:10.4249/scholarpedia.1435.
- [10] Y. Kuramoto : Chemical oscillations, waves, and turbulence (Springer, 1984). doi:10.1007/978-3-642-69689-3.
- [11] Y. Hayase, “Collision and Self-Replication of Pulses in a Reaction Diffusion System”, *J. Phys. Soc. Jpn* **66**(9), 2584-2587 (1997). doi:10.1143/JPSJ.66.2584.
- [12] H. Chaté, A. Pikovsky, and O. Rudzick, “Forcing Oscillatory Media: Phase Kinks vs. Synchronization”, *Physica D* **131**, 17-30 (1999). doi:10.1016/S0167-2789(98)00215-2.
- [13] Y. Hayase and T. Ohta, “Self-Replicating Pulses and Sierpinski Gaskets in Excitable Media”,

- Phys. Rev. E **62**(5), 5998-6003 (2000). doi:10.1103/PhysRevE.62.5998.
- [14] Y. Yamazaki, K. Yamamoto, D. Kadono, and A. Toda, “Spatiotemporal Patterns Formed by the Dynamics of Bistable Units with Global and Asymmetric Local Interactions”, J. Phys. Soc. Jpn. **81**(4), 043002 (2012). doi:10.1143/JPSJ.81.043002.
- [15] S. Ohmori and Y. Yamazaki, “Comments on Statistical Properties for Cellular Automaton Models with Probabilistic Global and Asymmetric Local Rules”, J. Phys. Soc. Jpn. **88**(10), 105001 (2019). doi:10.7566/JPSJ.88.105001.
- [16] S. Wolfram, “Twenty Problems in the Theory of Cellular Automata”, Phys. Scr. **T9**, 170-183 (1985). doi:10.1088/0031-8949/1985/T9/029.
- [17] Y. Hayase and T. Ohta, “Sierpinski Gasket in a Reaction-Diffusion System”, Phys. Rev. Lett. **81**(81), 1726-1729 (1998). doi:10.1103/PhysRevLett.81.1726.
- [18] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira, and J. Satsuma, “From Soliton Equations to Integrable Cellular Automata through a Limiting Procedure”, Phys. Rev. Lett. **76**(18), 3247-3250. doi:10.1103/PhysRevLett.76.3247.
- [19] M. Murata, “Tropical Discretization: Ultradiscrete Fisher–KPP Equation and Ultradiscrete Allen–Cahn Equation”, J. Differ. Equ. Appl. **19**(6), 1-14 (2013). doi:10.1080/10236198.2012.705834.
- [20] K. Nishinari and D. Takahashi, “Analytical Properties of Ultradiscrete Burgers Equation and Rule-184 Cellular Automaton”, J. Phys. A Math. Theor. **31**(24), 5439-5450 (1998). doi:10.1088/0305-4470/31/24/006.
- [21] W. Kunishima, A. Nishiyama, H. Tanaka, and T. Tokihiro, “Differential Equations for Creating Complex Cellular Automaton Patterns”, J. Phys. Soc. Jpn. **73**(8), 2033-2036 (2004). doi:10.1143/JPSJ.73.2033.
- [22] 吉井理比古, 星野隆行, 満渕邦彦, “セルオートマトンの逆超離散化における重ね合わせ原理とその応用”, 応用力学研究所研究集会報告 **26AO-S2**, 73-79 (2015). doi:10.15017/1807496.
- [23] G. Cattaneo, P. Flocchini, G. Mauri, C. Vogliotti, and N. Santoro, “Cellular Automata in Fuzzy Backgrounds”, Physica D **105**, 105-120 (1997). doi:10.1016/S0167-2789(96)00233-3.
- [24] M. Mraz, N. Zimic, I. Lapanja, and I. Bajec, “Fuzzy cellular automata: from theory to applications”, Proceedings 12th IEEE Internationals Conference on Tools with Artificial Intelligence. ICTAI, 320-323 (2000). doi:10.1109/TAI.2000.889889.
- [25] A. B. Mingarelli, “A Classification Scheme for Fuzzy Cellular Automata with Applications to ECA”, J. Cell. Autom. **5**(6), 445-467 (2010). doi:10553/76211.
- [26] K. Higashi, J. Satsuma, and T. Tokihiro, “Rule 184 Fuzzy Cellular Automaton as a Mathematical Model for Traffic Flow”, Jpn. J. Ind. Appl. Math. **38**(2), 579-609 (2021). doi:10.1007/s13160-021-00461-3.
- [27] Y. Yamazaki, “Collective Behavior of Bistable Units with Global and Asymmetric Local Interactions”, Prog. Theor. Phys. **125**(4), 641-652 (2011). doi:10.1143/PTP.125.641.

- [28] W. F. Busse, J. M. Lambert, and R. B. Verdery, “Tackiness of GR-S and Other Elastomers”, *J. Appl. Phys.* **17**(5), 376–385 (1946). doi:10.1063/1.1707726.
- [29] J. J. Bikerman, “Theory of Peeling through a Hookean Solid”, *J. Appl. Phys.* **28**(12), 1484-1485 (1957). doi:10.1063/1.1722682.
- [30] D. Kaelble, “Theory and Analysis of Peel Adhesion: Rate-temperature Dependence of Viscoelastic Interlayers”, *J. Colloid Sci.* **19**(5), 413-424 (1964). doi:10.1016/0095-8522(64)90041-8.
- [31] A. N. Gent and R. P. Petrich, “Adhesion of Viscoelastic Materials to Rigid Substrates”, *Proc. Math. Phys. Eng. Sci.* **310**, 433-448 (1969). doi:10.1098/rspa.1969.0085.
- [32] 浦濱圭彬, “粘着剤の高機能化”, *高分子* **54**(6), 406-409 (2005). doi:10.1295/kobunshi.54.406.
- [33] Y. Yamazaki and A. Toda, “Dynamical-Morphological Property of Adhesive Tape in Peeling”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**(7), 1618-1621 (2002). doi:10.1143/JPSJ.71.1618.
- [34] R. Burridge and L. Knopoff, “Model and Theoretical Seismicity”, *Bulletin of the Seismological Society of America* **57**(3), 341-371 (1967). doi:10.1785/BSSA0570030341.
- [35] H. W. Greensmith and A. G. Thomas, “Rupture of Rubber. III. Determination of Tear Properties”, *J. Polym. Sci.* **18**, 189 (1955). doi:10.1002/pol.1955.120188803.
- [36] D. Maugis and M. Barquins, “Stick-Slip and Peeling of Adhesive Tapes”, In K. W. Allen (ed.): *Adhesion 12*, 205–222 (Springer Nature, 1988). doi:10.1007/978-94-009-1349-3.
- [37] S. H. Strogatz: *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering* (CRC Press, 1994). doi:10.1201/9780429492563.
- [38] D. C. Hong and S. Yue, “Deterministic Chaos in Failure Dynamics: Dynamics of Peeling of Adhesive Tape”, *Phys. Rev. Lett.* **74**(2), 254-257 (1995). doi:10.1103/PhysRevLett.74.254.
- [39] R. De, A. Maybhatte, and G. Ananthakrishna, “Dynamics of Stick-Slip in Peeling of an Adhesive Tape”, *Phys. Rev. E* **70**(4), 046223 (2004). doi:10.1103/PhysRevE.70.046223.
- [40] I. K. Mohammed, M. N. Charalambides, and A. J. Kinloch, “Modelling the Interfacial Peeling of Pressure-Sensitive Adhesives”, *J. Nonnewton Fluid. Mech.* **222**, 141-150 (2015). doi:10.1016/j.jnnfm.2014.10.005.
- [41] Y. Ayami, Y. Onishi, K. Amaya, M. Tsujii, M. Yanaka and I. Yonekura, “Elucidation of the Mechanism of Sharp Drop Phenomenon of Peel Force on Peel Tests of Multilayer Films using Finite Element Analysis”, *日本計算工学会論文集* **2018**, 20180011 (2018). doi:10.11421/jscs.2018.20180011.
- [42] Y. Urahama, “Effect of Peel Load on Stringiness Phenomena and Peel Speed of Pressure-Sensitive Adhesive Tape”, *J. Adhesion* **31**(1), 47-58 (1989). doi:10.1080/00218468908048213.
- [43] A. Ghatak, M. K. Chaudhury, V. Shenoy, and A. Sharma, “Meniscus Instability in a Thin Elastic Film”, *Phys. Rev. Lett.* **85**(20), 4329-4332 (2000). doi:10.1103/PhysRevLett.85.4329.
- [44] Y. Yamazaki and A. Toda, “Stability of Tunnel Structure and Relationship between Peel Load and Spatiotemporal Pattern by Deformed Adhesive during Peeling”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**(8), 2342-2346 (2004). doi:10.1143/JPSJ.73.2342.

- [45] S. Ohmori and Y. Yamazaki, “Derivation of a Stochastic Cellular Automaton Model for the Dynamics of Bistable Units with Global and Asymmetric Local Interactions”, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2014**(8), 83A01 (2014). doi:10.1093/ptep/ptu106.
- [46] K. Taga and Y. Yamazaki, “A Tape-Peeling Model for Spatiotemporal Pattern Formation by Deformed Adhesives”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **92**(4), 043001 (2023). doi:10.7566/JPSJ.92.043001.
- [47] S. R. Broadbent and J. M. Hammersley, “Percolation Processes: I. Crystals and Mazes”, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* **53**(3), 629-641 (1957). doi:10.1017/S0305004100032680.
- [48] H. Hinrichsen, “Non-Equilibrium Critical Phenomena and Phase Transitions into Absorbing States”, *Adv. Phys.* **49**(7), 815-958 (2000). doi:10.1080/00018730050198152.
- [49] K. A. Takeuchi, M. Kuroda, H. Chaté, and M. Sano, “Directed Percolation Criticality in Turbulent Liquid Crystals”, *Phys. Rev. Lett.* **99**(23), 234503 (2007). doi:10.1103/PhysRevLett.99.234503.
- [50] G. Lemoult, L. Shi, K. Avila, S. V. Jalikop, M. Avila, and B. Hof, “Directed Percolation Phase Transition to Sustained Turbulence in Couette Flow”, *Nat. Phys.* **12**(3), 254-248 (2016). doi:10.1038/nphys3675.
- [51] M. Sano and K. Tamai, “A universal transition to turbulence in channel flow”, *Nat. Phys.* **12**(3), 249-253 (2016). doi:10.1038/nphys3659.
- [52] E. Domany and W. Kinzel, “Directed Percolation in Two Dimensions: Numerical Analysis and an Exact Solution”, *Phys. Rev. Lett.* **47**(1), 5-8 (1981). doi:10.1103/PhysRevLett.47.5.
- [53] 太田隆夫: 非平衡系の物理学 (裳華房, 2000).
- [54] B. O. Koopman, “Hamiltonian Systems and Transformation in Hilbert Space”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **17**(5), 315-318 (1931). doi:10.1073/pnas.17.5.315.
- [55] J. v. Neumann, “Zur Operatorenmethode In Der Klassischen Mechanik”, *Ann. Math.* **33**(3), 587-642 (1932). doi:10.2307/1968537.
- [56] I. Mezić, “Spectral Properties of Dynamical Systems, Model Reduction and Decompositions”, *Nonlinear Dyn.* **41**, 309-325 (2005). doi:10.1007/s11071-005-2824-x.
- [57] M. Budišić, R. Mohr, and I. Mezić, “Applied Koopmanism”, *Chaos* **22**(4), 047510 (2012). doi:10.1063/1.4772195.
- [58] A. Mauroy, I. Mezic, and Y. Susuki: The Koopman Operator in Systems and Control Concepts, Methodologies, and Applications: Concepts, Methodologies, and Applications (Springer Nature, 2020). doi:10.1007/978-3-030-35713-9.
- [59] J. N. Kutz, S. L. Brunton, B. W. Brunton, and J. L. Proctor: Dynamic Mode Decomposition (SIAM, 2016). doi:10.1137/1.9781611974508.
- [60] E. M. Bollt, Q. Li, F. Dietrich, and I. Kevrekidis, “On Matching, and Even Rectifying, Dynamical Systems through Koopman Operator Eigenfunctions”, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **17**(2), 1925-1960 (2018). doi:10.1137/17M116207X.
- [61] S. L. Brunton, M. Budišić, E. Kaiser, and J. N. Kutz, “Modern Koopman Theory for Dynamical Systems”, *SIAM Rev.* **64**(2), 229-340 (2022). doi:10.1137/21M1401243.

- [62] J. N. Kutz, J. L. Proctor, and S. L. Brunton, “Applied Koopman Theory for Partial Differential Equations and Data-Driven Modeling of Spatio-Temporal Systems”, *Complexity* **2018**, e6010634 (2018). doi:10.1155/2018/6010634.
- [63] J. Page and R. R. Kerswell, “Koopman Analysis of Burgers Equation”, *Phys. Rev. Fluid* **3**(7), 071901 (2018). doi:10.1103/PhysRevFluids.3.071901.
- [64] H. Nakao and I. Mezić, “Spectral Analysis of the Koopman Operator for Partial Differential Equations”, *Chaos* **30**(11), 113131 (2020). doi:10.1063/5.0011470.
- [65] J. P. Parker and J. Page, “Koopman Analysis of Isolated Fronts and Solitons”, *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.* **19**(4), 2803–2828 (2020). doi:10.1137/19M1305033.
- [66] J. P. Parker and J. Page, “Koopman analysis of isolated fronts and solitons”, *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.* **19**(4), 2803–2828 (2020). doi:10.1137/19M130503.
- [67] J. P. Parker and C. Valva, “Koopman analysis of the periodic Korteweg-de Vries equation”, *Chaos* **33**(4), 043102 (2023). doi:10.1063/5.0137088.
- [68] P. J. Schmid, “Dynamic Mode Decomposition of Numerical and Experimental Data”, *J. Fluid Mech.* **656**, 5–28 (2010). doi:10.1017/S0022112010001217.
- [69] C. W. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, and D. S. Henningson, “Spectral Analysis of Nonlinear Flows”, *J. Fluid Mech.* **641**, 115–127 (2009). doi:10.1017/S0022112009992059.
- [70] K. Taga, Y. Kato, Y. Kawahara, Y. Yamazaki, and H. Nakao, “Koopman Spectral Analysis of Elementary Cellular Automata”, *Chaos* **31**(10), 103121 (2021). doi:10.1063/5.0059202.
- [71] J. H. Tu, C. W. Rowley, D. M. Luchtenburg, S. L. Brunton, J. N. Kutz, “On Dynamic Mode Decomposition: Theory and Applications”, *J. Comput. Dyn.* **1**(2), 391–421 (2014). doi:10.3934/jcd.2014.1.391.
- [72] M. O. Williams, M. S. Hemati, S. T. M. Dawson, I. G. Kevrekidis and C. W. Rowley, “A Data-Driven Approximation of the Koopman Operator: Extending Dynamic Mode Decomposition”, *J. Nonlinear Sci.* **25**, 1307–1346 (2015). doi:10.1007/s00332-015-9258-5.
- [73] Y. Kawahara, “Dynamic Mode Decomposition with Reproducing Kernels for Koopman Spectral Analysis”, *NIPS’16: Proceedings of the 30th International Conference on Neural Information Processing Systems*, **29**, 919–927 (2016). doi:10.5555/3157096.3157199.
- [74] N. Takeishi, Y. Kawahara, and T. Yairi, “Learning Koopman Invariant Subspaces for Dynamic Mode Decomposition”, *NIPS’17: Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems*, **30**, 1130–1140 (2017). doi:10.5555/3294771.3294879.
- [75] H. Arbabi and I. Mezić, “Ergodic Theory, Dynamic Mode Decomposition, and Computation of Spectral Properties of the Koopman Operator”, *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.* **16**(4), 2096–2126 (2017). doi:10.1137/17M1125236.
- [76] M. Korda, M. Putinar, and I. Mezić, “Data-Driven Spectral Analysis of the Koopman Operator”, *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **48**(2), 599–629 (2020). doi:10.1016/j.acha.2018.08.002.
- [77] S. Wolfram: *A New Kind of Science* (Wolfram Media, Champaign, IL, 2002), Vol. 5.

- [78] W. Li and N. Packard, “The Structure of the Elementary Cellular Automata Rule Space”, *Complex Sys.* **4**, 281-297 (1990).
- [79] P. Grassberger, “Long-Range Effects in an Elementary Cellular Automaton”, *J. Stat. Phys.* **45**, 27-39 (1986). doi:10.1007/BF01033074.
- [80] F. Bagnoli, R. Rechtman, and S. Ruffo, “Damage Spreading and Lyapunov Exponents in Cellular Automata”, *Phys. Lett. A* **172**(1), 34-38 (1992). doi:10.1016/0375-9601(92)90185-O.
- [81] J. Kari, “Theory of Cellular Automata: A Survey”, *Theor. Comput. Sci.* **334**, 3-33 (2005). doi:10.1016/j.tcs.2004.11.021.
- [82] G. J. Martínez, “A Note on Elementary Cellular Automata Classification”, *J. Cell. Autom.* **8**, 233-259 (2013).
- [83] E. F. Moore, “Machine Models of Self-Reproduction”, *Proc. Am. Math. Soc.* **14**, 17-33 (1962). doi:10.1090/psapm/014/9961.
- [84] S. Takesue, “Reversible Cellular Automata and Statistical Mechanics”, *Phys. Rev. Lett.* **59**(22), 2499-2502 (1987). doi:10.1103/PhysRevLett.59.2499.
- [85] T. Hattori and S. Takesue, “Additive Conserved Quantities in Discrete-Time Lattice Dynamical Systems”, *Physica D* **49**(3), 295-322 (1991). doi:10.1016/0167-2789(91)90150-8.
- [86] A. Nobe and F. Yura, “On Reversibility of Cellular Automata with Periodic Boundary Conditions”, *J. Phys. A* **37**(22), 5789-5804 (2004). doi:10.1088/0305-4470/37/22/006.
- [87] K. Taga and H. Nakao, “Dynamic Mode Decomposition for Elementary Cellular Automata”, *Proceedings of the 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022)*, 117-120 (2022). doi:10.34385/proc.71.A4L-B-04.
- [88] R. E. A. C. Paley, “A Remarkable Series of Orthogonal Functions (I)”, *Proc. London Math. Soc.* **s2-34**(1), 241-264 (1932). doi:10.1112/plms/s2-34.1.241.
- [89] A. Lasota and M. C. Mackey: Probabilistic Properties of Deterministic Systems (Cambridge University Press, 2008). doi:10.1017/CBO9780511897474.
- [90] 郡宏, 森田善久: 生物リズムと力学系 (共立出版, 2010).
- [91] A. Mauroy, I. Mezić, and J. Moehlis, “Isostables, Isochrons, and Koopman Spectrum for the Action–Angle Representation of Stable Fixed Point Dynamics”, *Physica D* **261**, 19-30 (2013). doi:10.1016/j.physd.2013.06.004.
- [92] S. Shirasaka, W. Kurebayashi, and H. Nakao, “Phase-Amplitude Reduction of Transient Dynamics Far from Attractors for Limit-Cycling Systems”, *Chaos* **27**(2), 023119 (2017). doi:10.1063/1.4977195.

研究業績

論文

原著論文 (査読あり)

1. K. Taga and Y. Yamazaki, “A tape-peeling model for spatiotemporal pattern formation by deformed adhesives”, J. Phys. Soc. Jpn. **92**(4) 043001 (2023). doi:10.7566/JPSJ.92.043001.
2. K. Taga, Y. Kato, Y. Kawahara, Y. Yamazaki and H. Nakao, “Koopman spectral analysis of elementary cellular automata”, Chaos **31**(10) 103121 (2021). doi:10.1063/5.0059202.

プロシーディング (査読あり)

1. K. Taga and H. Nakao, “Dynamic Mode Decomposition for Elementary Cellular Automata”, Proceedings of the 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022), 117-120 (2022). doi:10.34385/proc.71.A4L-B-04.

国際会議

口頭発表 (査読あり)

1. K. Taga and H. Nakao, “Dynamic Mode Decomposition for Elementary Cellular Automata”, 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022), A4L-B-04, (online), 2022.
2. K. Taga and Y. Yamazaki, “Peeling tape as a reaction-diffusion system”, APS March Meeting, S11, (online), 2022/3/17.
3. K. Taga and H. Nakao, “Koopman Spectral Analysis of Elementary Cellular Automata”, SIAM Conference on Applications of Dynamical Systems (DS2021), MS164, (online), 2021/5/25.

ポスター

1. K. Taga, “Nonlinear dynamics of the tape peeling trace”, Stat&QuantPhys Autumn School 2022 (SQP2022), B7, (online), 2022/09/26.
2. K. Taga, H. Nakao and Y. Yamazaki, ”Nonlinear dynamics of the tape peeling trace”, Dynamic Days Europe 2022 (DDEU2022), PS53, (Univ. of Aberdeen), UK, 2022/08/22-26.

国内会議

口頭発表

1. 多賀圭理, “反応拡散系としての粘着テープ剥離ダイナミクス”, 非平衡・多階層・複雑系研究会, 21, (秋田・オンライン), 2022/9/17.
2. 多賀圭理, 加藤譲, 河原吉伸, 山崎義弘, 中尾裕也, “エレメンタリーセルオートマトンのKoopman スペクトル解析”, 日本物理学会第 77 回年次大会, 17aB20-13 , (オンライン), 2022/3/17.
3. 多賀圭理, 加藤譲, 河原吉伸, 山崎義弘, 中尾裕也, “エレメンタリーセルオートマトンのKoopman スペクトル解析”, 日本応用数理学会 2021 年度年会, F1-1-1 [正会員主催 OS] 応用力学系 (1), (オンライン), 2021/9/7.
4. 多賀圭理, 山崎義弘, “反応拡散系としての粘着テープ剥離ダイナミクス”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 9aM1-2, (オンライン), 2020/9/9.

ポスター

1. 多賀圭理, 山崎義弘, “反応拡散系としての粘着テープ剥離ダイナミクス”, 非平衡オンライン若手の会 2020, (オンライン), 2020/8/18.