コラム：メイドインジャパン物理用語　物性編

蔵本-シバシンスキー方程式

Hiroshi Kori*

Depertment of Information Sciences, Ochanomizu Univeristy, Tokyo 112-8610, Japan

「物質の拡散は化学反応系の濃度場の時間的・空間的カオス（化学乱流）を引き起こすことがある」。これが蔵本由紀が化学反応系を表す偏微分方程式を用いた一連の理論研究から導き出された結論であった。このときに化学反応方程式から摂動論的に導出された方程式が次式で表される蔵本–シバシンスキー (Kuramoto–Sivashinsky, KS) 方程式である [1]。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \tag{1}$$

ここで $\phi(x,t) \in R$ は位置 x、時刻 t における振動の位相である。この方程式が時間的にも空間的にも乱れた構造を生成することが数値シミュレーションで確認できる（図）。この方程式によって位相乱流 (phase turbulence) と呼ばれる普遍的概念が確立した。

物質の拡散は、系を熱的な死に追いやり、非一様な空間パターンや継続する時間変化などの非自明な時空間構造はすべて消え去っていく—これが多くの人が共有する「常識」であった。これは物質的・エネルギー的に閉じた系では事実である。しかし、開放系では必ずしも正しくない。このことを初めて実証したのがチューリングだった。チューリングは物質の拡散が、濃度が空間的に一様な定常状態が、拡散によって不安定化する反直感的な現象を初めて数学的に示した (チューリング不安定性)。

蔵本の発見も拡散が引き起こす不安定性に関係する。ただしチューリングが時間的・空間的に定常な状態の安定性に注目したのに対し、蔵本は空間的に一様な振動状態の安定性に着目した。蔵本は、拡散によって一様振動解が不安定化する条件があると推測し、その実現性を仮想的な化学反応方程式の解析から見出した。次に、この不安定化が起こるパラメータの近傍で起こる現象を突き止めるために、化学反応方程式をより単純化することを試みた。そこで、空間変調の緩やかさを微小パラメータとした摂動論によって、振動の位相 $\phi(x,t)$ がしたがう簡潔な方程式を導出した。当然もとの化学反応方程式の拡散項は正の係数を持つのだが、位相変数に射影すると拡散項 $\partial^2\phi/\partial x^2$ の係数が負になり得る。固有振動数や拡散係数といったパラメータは変数変換によって消去され、システムサイズ L のみをパラメータとし

*連絡先: `kori.hiroshi@ocha.ac.jp`

て持つ (1) が得られる。なお、もう一人の導出者である Sivashinsky は、蔵本とはまったく独立に、また独立の現象（燃焼の界面の不安定性）に対してこの方程式を発見した [2]。

この方程式の構造は波数空間でみると大変わかりやすい。フーリエ級数 $\phi(x,t) = \sum_k \phi_k(t)e^{ikx}$ $(k = \frac{2\pi n}{L},\ n = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$ を (1) に代入すると、フーリエ成分 $\phi_k(t)$ の時間発展は

$$\frac{d\phi_k}{dt} = (k^2 - k^4)\phi_k + \sum_{k'} k'(k'-k)\phi_{k-k'}\phi_{k'} \tag{2}$$

によって記述されることがわかる。右辺第 1 項より、$|k| < 1$、つまり、ゆるやかな空間変調をもつモードは線形不安定で、$|k| > 1$ のモードは線形安定であることがただちにわかる。右辺の第 2 項は (1) の非線形項 $(\partial\phi/\partial x)^2$ に起因するモード間結合を表す。ほぼ一様な初期条件を課すと、まず、もっとも線形成長率の大きい $k = 1/\sqrt{2}$ の波数（つまり 10 程度の波長）を持つモードを中心に成長が進む。これらのモードがある程度成長すると、モード間結合が効果を持つ。システムサイズ L がある程度小さい時は時空間的に周期的な解が得られるが、サイズを大きくするにしたがって周期倍分岐とよばれる周期解の複雑化が次々と起こり、ある程度大きい L では位相乱流が得られることが知られている。KS 方程式についての数学的研究がこれまでに多数なされているが、まだわかっていないことも多い。

蔵本の化学反応系に関する一連の理論研究をまとめた著書 [3] は、物理や応用数学の研究者のみでなく、化学の実験研究者にも多大な影響を与えた。例えば、G. Ertl らは蔵本の予言する化学乱流を、触媒として重要なプラチナで起こる表面化学反応で発見しており [4]、これは G. Ertl の 2007 年のノーベル化学賞受賞につながる重要な成果として位置づけられている。

[1] Yoshiki Kuramoto and Toshio Tsuzuki. Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium. *Progress of theoretical physics*, Vol. 55, No. 2, pp. 356–369, 1976.

[2] GI Sivashinsky. Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames 審品. derivation of basic equations. *Acta Astronautica*, Vol. 4, No. 11, pp. 1177–1206, 1977.

[3] Y. Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*. Springer, New York, 1984.

[4] M. Kim, M. Bertram, M. Pollman, A. von Oertzen, A. S. Mikhailov, H .H. Rotermund, and G. Ertl. Controlling chemical turbulence by global delayed feedback: Pattern formation in catalytic co oxidation on pt(110). *Science*, Vol. 292, p. 1357, 2001.

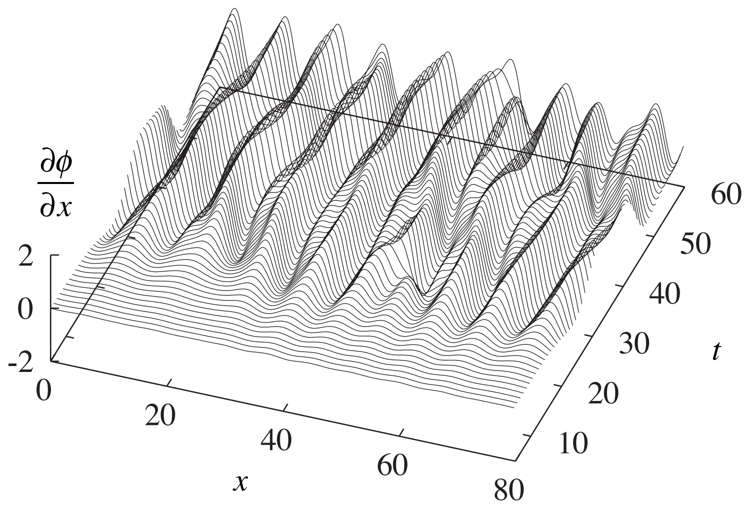

FIG. 1: KS 方程式 (1) の数値シミュレーションが示す位相乱流。1 次元の周期境界条件 ($L = 80$)。ほぼ一様な初期条件を課した。