Reaction-Diffusion System (Gierer-Meinhardt model) におけるパターン選択性について

樽見　和明　（群馬大・教養）

1。はじめに

非線形非平衡系で起きるパターン形成は、多くの研究者の注目を集め精力的に研究が行われておりますが、未解決の問題が山積しています。その中でも系が与えられた初期条件や境界条件に殆ど依存せず、ある wavenumber で特徴づけられる周期的な空間構造を自ら選ぶというパターン選択性の問題（以後ｗｓと記します）は、興味ある問題のひとつです。ここではまずどのような系でｗｓが観測されるかを例を挙げて説明し、次に代表的な理論的なアプローチについて簡単に解説します。

-- Rayleigh-Benard convection : 二つのプレートに挟まれた流体が下から熱される時生じる不安定性の問題です。上下の温度格差が小さい時は、熱の拡散によってエネルギーは運ばれますが、温度格差が大きくなると熱拡散によってのみではエネルギーの運搬を担うことは出来ず、マクロな対流を伴う周期的パターンが出現します。　ｗｓが観測される場合とは、例えばロールパターンの空間周期が再現性よく選ばれるときをいいます。

-- directional solidification : 結晶を一方向に成長させる時に、固相と液相を分ける界面が周期的な構造を保ちながら成長することがみられます[1]。理論的な解析も行われておりますが[2]、ｗｓの本質的な理解にはまだ程遠い段階です。

-- Liesegang ring : 1896年にLiesegangが、小量のニクロム酸カリウムを含むゼラチンのシート上に濃厚な硝酸銀溶液を落とすと、ニクロム酸銀の同心円状の周期的沈澱が生じることを発見したのが名前の由来で、以後同様な周期的な沈澱パターンが Liesegang ring と呼ばれています。

-- reduced surface model of protocell : 我々は生命体の原始的なモデルとしてprotocell model を提案しました[3]。一般には系を支配する方程式は複雑ですが、あるパラメーター領域では簡単化が可能で[4]、protocellを形づくる界

面のdynamics(surface model)に帰着することができます。その surface model がｗｓの性質を示すことが簡単な解析で分かりました[5]。

-- biological systems : すべての生物は本来外界の変動などから身を守り、その構造を保つメカニズムを有しており高度に進化した生物では複雑です。しかし、原始的な藻(Anabaena)のような生物では、その周期的な構造を支配するメカニズムは簡単なはずであり物理化学的な解析が可能であると考えられます。

以上の例のように、ｗｓは多岐に渡っており一見、統一的な観点から理解することは不可能の様に見えますが、fig.1に示しましたような 線形安定解析に基づく diagram に整理することが可能です。縦軸のパラメーターは例えば Rayleigh -Benard convection ではRayleigh number ですし、Protocell model では cell に外界から供給される nutrient の濃度と cellの界面の surface tension との比を意味します。 また本報告で例に取った Gierer-Meinhardt model のような Turing instability を示す系では拡散する化学物質の拡散係数の比になります。横軸はwavenumber を表しています。斜線で表された領域は系の持つ trivial な定常状態（空間的に一様なパターン形成無しの状態）が線形安定である事を示しています。 パラーメーターＰが P_cより小さければ、trivial steady state はすべての wavenumber をもつ disturbance に対して安定であることを意味します。ところが、$P > P_c$ の領域では k_1とk_2の間の wavenumber を持つ disturbance は、すべて不安定であり成長することになります。ｗｓが起きるということは、ある wavenumber k_s が境界条件、初期条件に殆ど依存せず再現性よく選択されることを意味しています。つまり線形解析では説明のつかない非線形性が重要な役割を演じていると考えられます。更にｗｓが様々な系において観測されるということは、ある非線形系が特殊に持つ性質ではなく、上記した非線形系が統一的にもつ性質がｗｓの物理的なメカニズムを理解するうえでの鍵を握っていると考えられます。

理論の方面から今までに多くの研究が成されておりますが、ｗｓのメカニズムを統一的に理解するにはいたっていません。ここでは代表的な四つの範疇に分けて簡単にその strategy を説明します。

-- asymptotic methods : 一般的な漸近的方法については本研究会報告の蔵本氏の稿を参照していただきたいと思います。 ｗｓに直接関連するところでは、Rayleigh-Benard convection についての歴史的な論文があります[6]、[7]。彼らはRayleigh Nr.が threshold から僅かに外れた領域では、系のパターンを記述する解が複雑な非線形dynamicsから、あるスケーリング仮説を利用して簡単に抜き出す事が出来ることを示しました。同様な手法はよく応用されています[5]、[8]、[9]。

-- potential functional approach : ｗｓが観測される系にもし potential fuctional が存在すれば、もしくは発見できれば系はその absolute minimum に落ち着くはずですから、ことは簡単ですが、ごく一部の系を除いて[8]、[9]、[10]、一般的には非線形非平衡散逸系には期待できません。

-- slowry varying parameters : 漸近的方法の一種ですが、系のパラメーターが空間的にゆっくりと変化する時そのパラメーターの空間微分を small parameter として、系の neutral solution の回りの関数空間に展開する手法です。例えば fig.1 において、$P = P_0$では $k = k_0$をもつ解(neutral sol.)しか実現しませんから、$P > P_0$の解を neutral solution の張る空間に射影すれば、k が k_0 からどれだけ変化するかが分かります。この操作を次々に繰り返せばk_sが原理的に計算できるはずです[11]、[12]、[13]。

-- marginal stability ansatz : Langer が最初に結晶成長の問題において提案した方法ですが[14]、その後いろんな問題に拡張応用されています[15]、[16]、[17]。我々は反応拡散系(large system)におけるｗｓをここでは報告します[18]。次の章で、ある反応拡散系(Gierer-Meinhardt model)を例にとりｗｓがどのような場合に起きるかを述べ、その次の章では marginal stability ansatz の応用について解説します。

2、Gierer-Meinhardt model における ｗｓ

反応拡散系は非平衡散逸系におけるパターン形成の一つの model system であり数多くの研究が成されています[19]、[20]。Turingは反応拡散系において空間的に一様な解が不安定化を起こし空間的に非一様な解に移行することを示し(Turing-instability)これが生物における形態形成を説明する一つの鍵になるのではない

か、と提案しました[21]。それ以後生物の形態形成の model system としての観点から多くの検討がされておりますが、Gierer と Meinhardt は morphogen と呼ばれる化学物質の反応拡散モデルを提案検討しています[22][23]。Gierer-Meinhardt model について Turing-instability のメカニズムの理論的解析も数多くされております[24]。Arcuri と Murray は更に一歩進んで Turing-instability がおこり、系が最終的に到達した空間的に構造をもつ解が系に与えられた境界条件と、初期条件にどの様に依存するかについて検討しています[25]。彼らは境界条件が no-flux condition の時、解は初期条件に依存すると報告しています[25]。つまりｗｓは観測されないと言うわけです。我々は彼らとは立場を変え、ｗｓが起こるかどうかに焦点をあて、流体力学系でよく行われる様に large aspect ratio（今の場合 large system）の条件下で検討を加えました。このモデルでｗｓが起きるということは生物の形態発生、形態形成が環境条件や実験条件によっては、それほど左右されないという事実を、モデルが反映していることを意味しています。

さて、我々は次の二つのモデルを取り上げることにします。

$$\text{(AIM)}\quad \begin{aligned} \partial_t a &= \partial_x^2 a + a^2/h - \beta a + \rho \\ \partial_t h &= D\,\partial_x^2 h + a^2 - h \end{aligned} \qquad (1)$$

$$\text{(ASM)}\quad \begin{aligned} \partial_t a &= \partial_x^2 a + a^2 s - a \\ \partial_t s &= D\,\partial_x^2 s - \alpha a^2 s - \beta s + 1 \end{aligned} \qquad (2)$$

$$\text{on } 0 < x < L \quad (L \gg 1)$$

但し、不用なパラメータはすべて適当な scaling によって消去してあります。ここで a,h,s はそれぞれ activator,inhibitor,substrate の濃度を表しています。モデルの詳細については文献(23)を参照して下さい。

この二つの系は次に示す空間的に一様な trivial な解を持ちます。

$$\text{(AIM)}\qquad a_0 = (1+\rho)/\beta \ , \quad h_0 = a_0^2 \qquad (3)$$

(ASM)　　$s_o = 1/2\beta(1-\sqrt{1-4\alpha\beta})$, $a_o = 1/s_o$　　(4)

これらの解の回りの線形解析の結果から fig.1 に相当する bifurcation diagrams fig.2,fig.3 を得ます。点で表された領域は(3),(4)の解が安定なことを表しています。

「　数値解析　」

(3),(4)で与えられた解が、線形不安定なパラメータ領域に付いて数値解析を行います。あるバンド幅を持った wavenumberの disturbance に対して(3),(4)は不安定ですが、初期に与えられた disturbance に殆ど依存せずにある wavenumber で特徴づけられる周期的な構造を系が自ら選択するかどうかが、知りたい訳です。そこで(3),(4)にさまざまな種類の局所的な initial disturbance を加え時間の経過に従い最終的に系がどの wavenumber を選択するかを、(1),(2)を時間で数値積分して求めました。その結果が fig.2,fig.3 に error bar を付けて示してあります。error の幅は初期に与えた disturbance の variation に依ります。なお境界条件として periodic boundary condition と no-flux condition をとりましたが、両者のｗｓに関する有意の違いは見られませんでした。

ある特定な wavenumber（ｋｓ）が選ばれるメカニズムは次の通りです。初期に局所的に与えられらた disturbance は成長しながら(3),(4)の空間的に一様な不安定な領域へと伝ぱんしていきます。初期の disturbance が十分に局所的でＬが十分に大きいという条件下では disturbance の影響が境界に及ぶ前に、ある wavenumber（ｋｍ）で特徴づけられる十分に発達した "wavepacket" が形成されるのが見られました。しかも ｋｍ は、ほとんど初期の disturbance に依らないことが分かりました。つまり初期の disturbance の違いは、"wave-packet" が 形成されるまでの過渡的な時間の経過の間に消滅してしまった、と考えられます。数値実験の結果から ｋｓ と ｋｍ は、せいぜい error bar の程度でしか異ならない事が分かりました。ｋｍ の "wavepacket" が境界に到達した時、その ｋｍ は境界条件から許される wavenumber の一つになっているとは限りません。従って ｋｍ は境界条件により修正されることになる訳ですが、

上記の数値実験の結果（ks≃km）は、その修正は error bar の程度でありwsへの影響は重要ではないことを意味しています。

初期の disturbance が局所的ではなく系全体に random に分布しているときはwsは見られず、最終的に選ばれる wavenumber は、ある特定なものではなく初期の disturbance に依存して変化することが分かりました。初期条件が局所的に与えられた上記の場合と、系全体に分布している場合の違いは次の通りです。後者の場合初期条件に依存して線形の範囲で、局所的に一番速く成長する wavenumber（それは一般に局所的に異なる）が優勢になると考えられます。そしてそれらが、十分に発達した "wavepacket"（km）に成長発展する前に、局所的に異なった wavenumber を持つ wavepacket どうしが複雑な相互作用をすることになります。

3、Marginal Stability Ansatz

我々は前章でwsが起きるための重要な要素は、初期の disturbance が成長し不安定な領域に伝ぱんしていく過渡的な時間の間に、初期の disturbance の違いには依存しない km で特徴付られる "wavepcket" が形成される事であることを見ました。しかも km と ks の違いは系のサイズ L が十分に大きければ error bar の範囲でしかない事も分かりました。この km を求めるのに以下に述べる様に marginal stability ansatz の手法を我々の系に応用します。先ず次の座標変換を導入します。

$$x' = x - ct \quad , \quad t' = t \tag{5}$$

ここで c は伝ぱん速度ですが、この段階では未知です。

そして系(1),(2)を空間的に一様な解(3),(4)の回りに線形化します。eigenvalue を λ とすると、

$$\lambda = \lambda(k, c) \tag{6}$$

の形のいわゆる dispersion relation を得ます。ここで k は(3),(4)の回りの perturbation を特徴づける wavenumber です。

さて(6)について marginal である point で、十分に発達した "wavepcket" の wavefront がスタートすると仮定しますと、

$$d\lambda/dk\Big|_{k=\bar{k}}=0,\quad \mathrm{Re}\,\lambda\Big|_{k=\bar{k}}=0 \tag{7}$$

(7)により c と $\bar{k}$ が決定されます。

もし wavefront で生成された node が新たに生成、消滅しなければ

"wavepcket" の km と 伝ぱん速度 c の間には次の簡単な関係が成立するはずです。

$$km = \mathrm{Im}(\lambda(\bar{k}, c))/c \tag{8}$$

(8)によって計算した km が fig.2,3 に実線で示されており、前章の数値計算の結果をよく説明することができます。

さて我々は、反応拡散系のモデルの一つである Gierer-Meinhardt model においてwsが観測されること、そして系が自ら選択する周期的な構造を特徴づけるwavenumber が marginal stability ansatz で予言されるものとよく一致することを見ました。これは生物学的には、Geirer-Meinhardt model が、生物の形態発生・形態形成が回りの環境変化や、実験条件の違いに殆ど依存しないという事実をよく説明できることを意味します。最後にどの様な条件下でwsがみられるかを、まとめます。

-- 初期の disturbance が局所的であること

-- system size L>>1。この二つ目の条件は scaling 後の形であり、もとのパラメータの表現にもどしてやると、化学物質の拡散長より系のサイズが十分に大きいことを表しています。

Literature

1. Simon,Bechhoefer & Libchaber.Phys.Rev.Lett.61(1988)2574
2. Kurtze.Phys.Rev.Lett.60(1988)1638
3. Schwegler,Tarumi & Gerstmann.J.Math.Biol.22(1985)335
4. Tarumi & Schwegler.Bull.Math.Biol.49(1987)307
5. Tarumi.Fachberichte Physik der Universitaet Bremen ISSN 0724-1941 (1987)no.38
6. Newell & Whitehead.J.Fluid.Mech.38(1969)279
7. Segel.J.Fluid.Mech.38(1969)203
8. Hohenberg & Swift.Phys.Rev.A15(1977)319
9. Pomeau & Manneville.J.Phy.Lett.(paris)40(1979)609
10. Mueller-Krumbhaaar et al.Phys.Rev.A33(1986)567
11. Kramer et al.Phys.Rev.Lett.49(1982)1891
12. Pomeau & Zaleski.J.Phy.Lett.(paris)44(1983)135
13. Kramer et al.Z.Phys.B59(1985)245 and Z.Phys.B63(1986)121
14. Langer.Rev.Mod.Phys.52(1980)1
15. Mueller-Krumbhaar & Langer.Phys.Rev.A27(1983)499
16. Ben-Jacob et al.Physica 14D(1985)348
17. Saarloos.Phys.Rev.Lett.58(1987)1638
18. Tarumi & Mueller.Bull.Math.Biol.51(1989)207
19. Fife(1971)Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems. Berlin:Springer
20. Segel(1984)Modelling dynamics phenomena on molecular and celluar biology.Cambridge
21. Turing.Phil.Trans.R.Soc.B237(1952)37
22. Gierer & Meinhardt.Kybernetik 12(1972)30
23. Meinhardt(1981)Models of Biological Pattern Formation.London:Academic press
24. for example,Berding & Haken.J.Math.Biol.14(1982)133
25. Arcuri & Murray.J.Math.Biol.24(1986)141

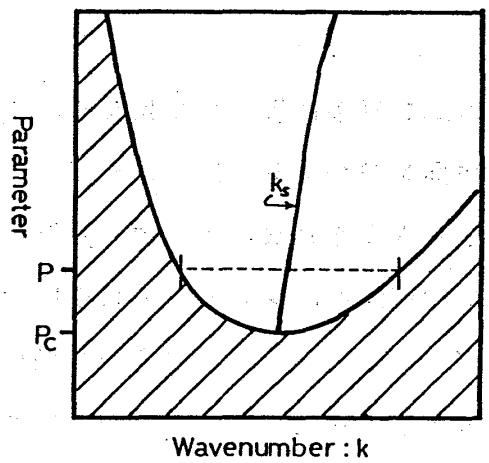

Fig.1 Bifurcation diagram

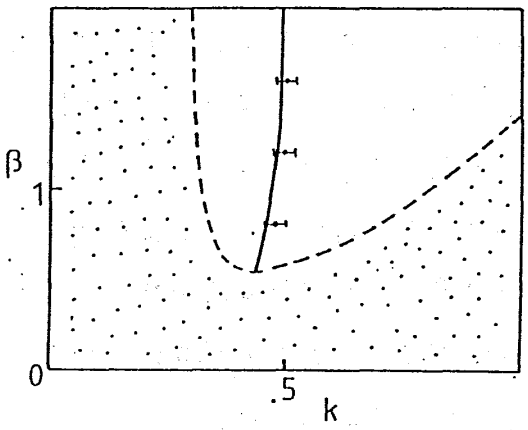

Fig.2

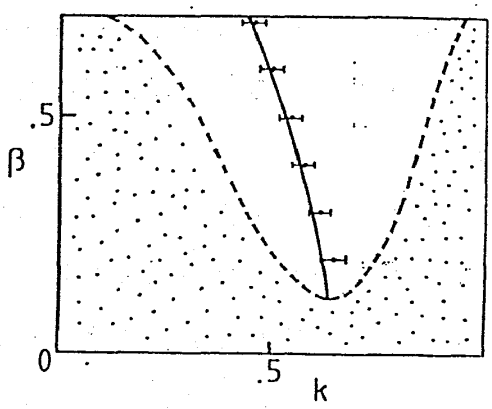

Fig.3

Wavenumber selection in the activator–inhibitor model (2) and in the activator–substrate model (3). The dashed lines separate the regions of stability (dotted region) and instability determined by the linear stability analysis. The single points with error bars represent the numerical results. The solid lines represent the theoretical results of the marginal stability hypothesis.

(2) AIM—$\rho=0.1$, $D=15$; (3) ASM—$\alpha=0.35$, $D=15$.