

非平衡系における時空間パターンの数理解析
ー反応拡散方程式の視点からー

三村 昌泰

(広島大学理学部数学科、東京大学大学院数理科学研究科)

始めに

自然界には、様々な非線形現象のもとで時間空間パターンが観察される。本講義では、その中で、非平衡系に焦点を当て、そこに現われるいくつかのパターンの解明に接近してみたい。

1952年、イギリスの数学者であり、チューリングマシンでもその名が知られているアラン・チューリングは「拡散は必ずしも空間一様化をするものではない」というパラドックスを拡散誘導不安定性原理に基づいて主張した。その動機は、生物学における細胞分化はすべて生物的機構で起こるのだろうか？そうではなくて、物理化学的機構が関与している場面があるのではないかという疑問を明らかにしたいということが目的であった。彼はこのパラドックスを簡単な数理モデルで示すことができたが、それはあくまでも机上の理論であったために、生物界ではなかなか受け入れられなかったのである。しかしながら、1990年、フランスのボルドーグループは化学反応系において拡散誘導不安定性原理に基づく時空間パターンを作り出すことに成功したのであった。それ以後現在まで、この原理に基づいて出現するパターンは生物の世界だけではなく、自然科学の様々な分野に出現することが実験及び理論両面からわかってきたのである。

本講義の目的は、反応拡散系で記述される非線形非平衡現象現象に焦点を絞り、そこに出現する時空間パターンの機構解明を拡散誘導不安定性原理の視点から接近することである。特に、これらの問題に対しては、解析的手法と同時にそれを相補する計算機シミュレーションが如何に有効であるかを強調したい。

講義では定性的に異なる時空間パターンを呈するの次の3つのトピックスを取り上げる：

A 発熱反応モデルに現われる火の玉パターン

(A-1) 興奮性発熱反応

(A-2) パルス進行波の衝突消滅・反射とプラナー不安定化（ビデオ）

(A-3) 双安定反応拡散方程式と特異摂動法

参考文献

[A1] 雑誌「数理科学」1998年4月号「燃烧パターンのダイナミクス」

[A2] M. Mimura and M. Nagayama; Chaos, 7 (4) 817-826 (1997)

[A3] T. Ohta, J. Kiyose and M. Mimura; J. Phys. Soc. Jpn, 66 1551-1558 (1997)

B バクテリアコロニーに現われるパターンの多様性

(2-1) 松下の実験紹介

(2-2) モデルの導出

(2-3) 計算機シミュレーション

参考文献

[B1] 三村、松下貢；雑誌「数理科学」1998年5月号「バクテリアコロニーのパターンの多様性」

[B2] M. Matsushita et al. Physica A, 249, 517-524 (1998)

C 走化性モデルに現われる動的蜂の巣パターン

(3-1) モデルの紹介と界面ダイナミクス法

(3-2) 軸対称平衡解の安定性

(3-3) 計算機シミュレーション

参考文献

[C1] 雑誌「数学セミナー」1994年8月号「数理モデルについて」

[C2] M. Mimura and T. Tsujikawa: Aggregating pattern dynamics in a chemotaxis model including growth, Physica A, 230, 499-543 (1996)

[C3] M. Mimura et al. Forma, 8, 179-186 (1993)

1 発熱反応モデルに現われる火の玉パターン

1.1 単安定興奮性とは

ここで述べる興奮性という言葉は神経軸での興奮伝導現象からきている。1843年、Du Bois-Reymond が神経に活動電流 (action current) が存在することを発見して以来、神経生理学の研究が始まったと言ってもよい。神経細胞は刺激が加えられると膜内外の電位が急激な変化を起こし、電位パルスが発生することを神経の興奮現象という。1850年 H. Helmholtz は伝播速度の測定に成功し、神経インパルス (nerve impulse) と呼ばれるようになった。神経インパルスがどのような機構下で発生し、それがどうして減衰せずに神経軸を伝わるのかの理論的説明は A. L. Hodgkin と A. F. Huxley の提唱したイオン説が突破口となった。1952年、彼等はこの説に基づいて神経軸伝播する興奮パルスのモデル方程式を導出したのである。この系は非線形性の強い4変数からなる拡散方程式系であったために、当時の解析手法では解くことができなかった。しかしながら、彼等にとって幸運だったことは、ちょうどその時期に大型高速計算機が開発されたために、彼等の提出したの計算機シミュレーションが可能となり、数値解と実験データを比較することが出来たことである。そこには、一定速度、一定波形で伝わるパルス進行波解が存在しており、その解は神経インパルスの様々な性質を備えていることが示されたのである。それから約10年経った後、生理学者 FitzHugh と数理工学者 J. Nagumo は独立に Hodgkin - Huxley 方程式の縮約化に成功したのである。この系は以後 FitzHugh-Nagumo 方程式と呼ばれる次の2変数反応拡散系である：

$$u_t - u_{xx} = \varepsilon^{-1} (u(1-u)(u-a) - v) = f(u,v) \quad (1-1)$$

$$v_t = u - bv = g(u,v).$$

u は (平衡電位からの) 膜電位差、 v は膜を通してイオンの出入りをコントロールするポンプに対応する補助変数である。 $0 < \varepsilon \ll 1$, $0 < a < 1/2$, b は $(u,v) = (0,0)$ のみが定数平衡解となるように小さい正定数とする。この平衡解は刺激が与えられていない静止状態である。(1-1) に対して、もしも初期電位差 (刺激) が小さければ、それは直ちに減衰してもとの静止状態に戻る。しかしながら、適当に大きい刺激が与えられれば、それは増幅され、左右に一定波形のパルス波が伝わる (つまり、興奮パルスの発生する) のである。このような性質をもつ非線形関数 (f, g) を単安定興奮性を持つという。パルス波の特徴は2つの波が衝突すると消滅することである。これは我々が身近にみる水面波の衝突は明らかに異なる性質である。

このような単安定興奮性を持つ他の反応拡散方程式系が化学の世界にも現われている。この系は Belousov-Zhabotinsky 反応と呼ばれる酸化還元反応である。そこには1次元パルス進行波の2次元拡張としてのリング波、標的波、スパイラル波などが現われる。これらの波は神経パルスと同じように衝突するとやはり消滅する。更に、発熱を伴う1次反応を記述するモデル方程式においても同じような現象が観察される。この章では発熱反応に現われる時空間パターンについて考察する。

(ii) 発熱反応

ここでは次の反応過程



を考える。ここでは酸素は反応にかかわらず一定であるとする。このときそれを記述するモデル方程式は

$$(1-3) \quad u_t = d_u \Delta u - k(T)u \quad t > 0, \quad x \in \Omega \quad \text{in } \mathbb{R}^n$$

となる。ここで、 d_u は拡散率、 Δ はラプラシアン、 $k(T)$ は温度 T に依存する反応率であり、アレニウスの経験則から

$$k(T) = k \exp (R/T)$$

と与えられる。ここで、反応率は温度に対して単調増大である、つまり反応は温度によって正のフィードバック であることに注意しておこう。(1-3) に対して境界条件を反射壁条件

$$(1-4) \quad u_n = 0 \quad t > 0, \quad x \in \partial\Omega$$

とする。ここで n は境界での外向き法線ベクトルである。初期条件を

$$(1-5) \quad u(0, x) = u_0(x) \geq 0 \quad x \in \Omega$$

とする。温度 T の方程式は

$$(1-6) \quad T_t = d_T \Delta T + w k(T) u \quad t > 0, x \in \Omega \text{ in } R^n$$

である。ここで、 d_T は熱拡散率、 w は熱変換率。境界、初期条件として

$$(1-7) \quad T_n = 0 \quad t > 0, x \in \partial\Omega$$

$$(1-8) \quad T(0, x) = T_0(x) \quad x \in \Omega$$

とする。こうして、反応物質濃度と温度の結合式 (1-3), (1-6) が導出される。

ここでは、反応物質が常に供給されているという開放系を考えることにする。この状況は無次元化を行うことによって次の初期一境界値問題が設定される：

$$(1-9) \quad u_t = d_u \Delta u + \epsilon [b(u^* - u) - f(T)u] \\ t > 0, x \in \Omega \text{ in } R^n$$

$$(1-10) \quad T_t = d_T \Delta T - aT + w f(T)u$$

$$(1-11) \quad u_n = 0 = T_n \quad t > 0, x \in \partial\Omega$$

$$(1-12) \quad (u, T)(0, x) = (u_0, T_0)(x) \quad x \in \Omega$$

ここで、 $f(u) = \exp(u/(1 + u/c))$ ($c > 0$)、 a は放熱率、 b は補給率、 u^* は外部の既知濃度、 ϵ は反応と温度変化の時定数であり、すべて正定数とする。反応項に含まれるパラメーター b, u^*, c, a, w の適当な値に対して (1-1) と同じような単安定興奮性の非線形性になる。この場合を単安定興奮性発熱反応と呼ぶ。この式は、対流効果を無視した燃焼過程の最も単純なモデルとも考えられる。このとき u は可燃性物質濃度である。もしも熱拡散が物質拡散より大きい場合（例えば、 $d_u = 0$ であれば、可燃性物質は固体を意味する）、一点着火をすれば、そこから燃焼は山火事のように外側に広がって行き、BZ 反応に紹介したようなリング波あるいはリング波の衝突消滅現象が見られる。それではその逆の状況、つまり、熱拡散が物質拡散より小さい場合はどのような燃焼パターンがみられるのだろうか。

これは通常の燃焼では不自然であるが、宇宙空間のように重力のない環境での燃焼過程である。このような状況では、燃焼波はリングのようにはならず、リングはちぎれ、火の玉のようなパターンになり、それがゆらゆらと動くことが観察されている。講義では、このような火の玉パターンはどのような機構で現われるかをチューリングの拡散誘導不安定性の原理から考察する。

2 バクテリアコロニーに現われるDLA パターン

2.1 枯草菌のコロニーパターン

培養下のバクテリア枯草菌は、栄養濃度、寒天の固さ2つの環境パラメーターに依存して、ディスク状、DBM、Eden、樹枝状、標的等本質的に5つのコロニーパターンを呈することが報告されている。我々の興味は、バクテリアと栄養の関係は「食う・食われる」、各々の空間移動は主に拡散という、単純な仕組みであるにもかかわらず、何故このように多様なパターンが出現するのかを知ることである。本講義ではその理論的考察のために、数理モデルを提出し、このパターンの多様性の理由を考察する。

最初にモデリングをする際の仮定を述べる。

仮定1：観察から、バクテリアセルはあたかも活動しているもの、何もせずにあたかも仮眠しているもの2種類に分けられるように見える。ここではこのことから、セルを始めから2種類に分け、活動セルは空間移動が活発であり、細胞分裂も頻繁に行うが、仮眠セルは空間移動も細胞分裂もすることないものとする。

仮定2：バクテリアは寒天の中に潜り込むことが出来ないことからコロニーパターンは2次元的である。

仮定3：栄養はペプトンであり、連続変数で記述出来るが、バクテリア1個体はそれに較べて非常に大きい。しかしながら、ここではそれらを1個1個とカウントせずに、単位面積当たりの質量と考え、やはり連続変数とする。すなわち、活動セル密度、栄養基濃度、仮眠セル密度をそれぞれ、時刻 t , 場所 x での $u(t,x)$, $v(t,x)$, $w(t,x)$ とする。

仮定4：活動セルが仮眠セルに転換することは実験観察において確認されている事実であるが、この転換が、どのような機構で起こるかについては明らかではない。我々は「転換する割合は活動セル密度、栄養基濃度に関して単調減少である」という仮説を立てる。

仮定5：活動セルの細胞分裂による増殖率は栄養基濃度に比例する。

仮定6：活動セル1個体の運動は直線的な動きと方向性のランダムな転換であるが、ここではそれをランダムウォークと近似し、活動セル、栄養基はともに拡散とする。

2-2 モデル方程式

仮定1—6のもとで、活動セル密度 $u(t,x)$, 栄養基濃度 $v(t,x)$, 仮眠セル密度 $w(t,x)$ に対して次の反応拡散方程式モデルを提出する：

$$\begin{aligned} (2-1) \quad u_t &= \nabla(d_u \nabla u) + sr(u,v)u - a(u,v,w)u + b(u,v,w)w \\ v_t &= d_v \Delta u - r(u,v)u \\ w_t &= a(u,v,w)u - b(u,v,w)w \end{aligned}$$

ここで d_u は活動セルの拡散率、 d_v は栄養基の拡散率、 $sr(u,v)$ は細胞分裂による増殖率、 s は摂取変換係数、 $a(u,v,w)$ は活動セルから仮眠セルへの転換率、 $b(u,v,w)$ はその逆の転換率とする。しかしながら、通常の実験では仮眠セルから活性セルへの転換は観察されないので、モデルにおいても同様に、 u から v へ非可逆的である、つまり $a(u,v,w) = a(u,v)$, $b(u,v) = 0$ を仮定する。このような単純化をすれば、(2-1) は本質的に次の2変数系になる。

$$\begin{aligned} (2-1) \quad u_t &= \nabla(d_u \nabla u) + sr(u,v)u - a(u,v)u \\ v_t &= d_v \Delta u - r(u,v)u \end{aligned}$$

そして w は (2-1) から求められた u, v より

$$(2-3) \quad w_t = a(u,v)u$$

を解くことから得られる。講義ではこの方程式に対してチューリングの拡散誘導不安定性の原理に基づいて如何なるパターンが出現するか論じる。

3 走化性モデルに現われる動的蜂の巣パターン

前章において、バクテリアのコロニー形成において多様なパターンが出現することを考察した。ここでは、ある種の大腸菌は与えられた豊富な栄養下で、分裂を繰り返しながら増殖するが、そのとき自らある化学物質を分泌すると同時に、他の仲間が出す同じ物質の濃度勾配を感知して（それを走化性という）、その他界方向に移動するという特性を持っていることが観察された。そして、分裂による増殖拡大、化学物質を感知する走化性集合という2つの相反する効果のもとで、複雑な形状をもつコロニーを形成することが報告された。ここでは、この現象に興味を持ち、「拡散」、「増殖」そして「走化性」の3つの効果のもとでどのようなコロニーパターンを形成するかを数理モデルから接近したい。特に、この場合ニモ、チューリングの拡散誘導不安定化が本質的な役割を果たす。

対象とする方程式は

$$u_t = d_u \Delta u - \nabla(u \nabla \chi(v)) + f(u) \quad (3-1)$$

$$v_t = d_v \Delta v + au - bv$$

である。ここで、 u, v はそれぞれ個体群密度、走化性物質濃度である。 d_u, d_v は拡散率、 $\chi(v)$ は走化性感度関数であり、 $\chi'(v) \geq 0$ を満たす。良く用いられている関数としては

$$\chi(v) = kv, \quad \chi(v) = k \log v$$

等がある。 $f(u)$ は分裂による増殖項であり、ここでは簡単のために $f(u) = (1-u)(u-a)u$ と3次関数とする。ただし a は小さい正定数とする。この仮定は栄養は豊富にあることを意味する。 a, b は各々分泌率、分解率であり、共に正定数である。実験から、拡散率 d_u, d_v の間には $d_u < d_v$ が成り立ち、更に、個体群の動きは拡散より走化性が主であることが報告されている。ここではそのことを念頭に置き、(2-1) を小さいパラメータ ε も持つ次のような系に書き換える：

$$u_t = \varepsilon^2 \Delta u - \varepsilon k \nabla(u \nabla \chi(v)) + f(u) \quad (3-2)$$

$$v_t = \Delta v + u - \beta v.$$

以下では(2-2) を全平面領域 $\mathbb{R}^2$ において考える。 $(0,0)$ は安定な平衡解であることに注意しておく。これは、個体群が全くいない定常状態を意味する。(3-2) の境界条件として

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} (u, v) = (0, 0) \quad (3-3)$$

とする。もしも走化性効果がない場合には (3-2) は単純に

$$u_t = \varepsilon^2 \Delta u + f(u) \quad x \in \mathbb{R}^2 \quad (3-4)$$

となる。もしも1点接種初期関数が小さければ、コロニーパターンは形成されず、個体群は死滅するが、適当に大きければ、拡大するコロニーが形成され、それは漸近的にディスク状になり、一定速度で拡がることから知られている。ころに一パターンの形状からみれば、それは非常に単純なのである。この結果を得るためには、数学では「特異極限法」、物理学では「界面ダイナミクス法」と呼ばれる手法である。

小さいパラメータ ε を零に近づけると、領域には界面が出現して、平面領域 R^2 はコロニーパターンである $u=1$ の領域と個体群のいない $u=0$ の領域の2つの領域に分けられる。この結果、コロニー領域の時間変化は界面の動きを記述する次の発展方程式で表わされる：

$$(3-5) \quad V = c - \varepsilon \kappa$$

ここで V は界面の法線方向速度、 c はあるスカラー定数。 κ は界面での曲率である。もしも曲率が半径 $r(t)$ の2次元円 で与えられるとすれば、(3-4) は

$$(3-6) \quad r' = c - \varepsilon/r$$

で与えられる。もしも $c=0$ ならば、(3-5) は曲率方程式と呼ばれ、非線形偏微分方程式や微分幾何の分野において詳しく考察されている。我々の興味は走化性効果をもつ方程式系 (2-2) である。走化性効果に依存してどのようなコロニーパターンが現われるのであろうか。計算機シミュレーションから、ディスク状、スポンジ状、ネットワーク状など多彩な時空間パターンが出現することが示される。その解析のためには、(3-5) を導出したのと同様のやり方で、コロニーパターンの境界を記述する界面方程式を導出し、その解析を通してこの問題の理解に接近する。

以上、ほんの動機のみしか話さなかったが、さらに詳しい情報が欲しい読者にご連絡いただきたい。アドレスは

mimura@ms.u-tokyo.ac.jp あるいは mimura@math.sci.hiroshima-u.ac.jp

です。