反応拡散モデルに現れる波の制御とその機構について

大崎　浩一*　秋丸　晃一**

Analysis of feedback controlled wave patterns in a reaction-diffusion system

Koichi OSAKI*, Koichi AKIMARU**

Abstract: Feedback control mechanism of self-organized wave patterns in a reaction-diffusion system is analyzed. A new simple system of ordinary differential equations which approximates the reaction-diffusion system is proposed, and by investigating the bifurcation phenomenon of stationary solutions the mechanism can be understood.

Key words: Feedback control, Self-organized pattern, Reaction-diffusion system, Bifurcation, Dynamical system

1．はじめに

自然界には，様々なリズムやパターンが存在する[1,2,4,7]．一見，複雑に見えるこれらの現象には，ある種の普遍性や法則性があることがこれまでの研究によって示されており，この仕組みを研究し解明することによって，社会システムに現れる発展的な現象の解明へとその対象を広げていくことが，現在考えられつつある[3,5,6]．様々な生命現象をよく再現する化学モデルとしてしばしば用いられる BZ(Belousov-Zhabotinsky)反応と呼ばれる化学モデルの１種に，光の強さに応じて反応速度が変化する光感受性 BZ 反応というものがある．近年，そこに現れる化学反応波を制御することに多くの研究者が注目している．実際，化学反応波を制御することは，偏頭痛が起きる直前にみられる網膜上のらせん波の除去や不整脈が起きる直前にみられる心臓表面上のらせん波の除去などへの実用上の応用が考えられ，極めて重要であると思われる．光感受性 BZ 反応に現れる化学反応波の制御は，光の強弱をフィードバックによって制御することで行えることが，ショワルター(K.Showalter)等のこれまでの一連の研究結果で示されている[8,12]．しかしながら，いかにしてその制御が行えているのかという制御機構については完全には解明されていない．

本研究では，オレゴネータをさらに単純化した数理モデルを提案し，それを解析することで，光感受性 BZ 反応に現れる化学反応波の制御機構解明に１つの理論的傍証を与えることを目的とする．

(2006 年 11 月 24 日受理)

* 宇部工業高等専門学校・経営情報学科

** 宇部工業高等専門学校・経営情報工学専攻２年

2．オレゴネータモデル

1972 年に，フィールド(R.J.Field)，ケレス(E.Koros)，ノイエス(R.M.Noyes)によって BZ 反応の機構が報告された[10]．これは FKN メカニズムと呼ばれ，10 個の反応過程で構成される．この FKN メカニズムを基に，省くことのできない 5 つの反応過程を抽出し，それぞれの反応方程式を書き下したものがオレゴネータ(Oregonator)と呼ばれる 3 変数の数理モデルである．オレゴネータは，タイソン(J.J.Tyson)らによってさらに 2 変数モデルにまで簡素化された[11]．簡素化されたオレゴネータは次式で表される:

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

各式の第 1 項は分子の拡散を表し，残りの項は化学反応を表す．ここで，関数 u と v はそれぞれ活性因子 $HBrO_2$ と抑制因子 Br^- の濃度を表す未知関数で，係数 D_u，D_v，ε，f，および q は正定数である．この簡素化モデルのおかげで，BZ 反応の大局的な振る舞いが分かるようになり，このことで BZ 反応自身も，様々なリズムやパターンを形成する生命現象の化学モデルとして頻繁に用いられるようになった．以下，タイソンらによって簡素化されたオレゴネータモデルを使用し，これを単にオレゴネータと呼ぶことにする．

3．モデルの提案

光による化学反応速度の変化が組み込まれたオレゴネータは次式で与えられる:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u + \dfrac{1}{\varepsilon}\left\{ u(1-u) - (fv+\phi)\dfrac{u-q}{u+q} \right\} & in \quad \Omega \times (0,\infty), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + u - v & in \quad \Omega \times (0,\infty), \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = \dfrac{\partial v}{\partial n} = 0 & on \quad \partial\Omega \times (0,\infty), \\ u(x,0) = u_0(x), v(x,0) = v_0(x) & in \quad \Omega. \end{cases}$$

このモデルは，BZ 反応の研究で著名なショワルター(K.Showalter)等の研究グループによって提案された[8]．ここで，関数 u と v はそれぞれ活性因子 $HBrO_2$ と抑制因子 Ru(bpy) の濃度を表す未知関数で，ϕ が光の強さを表す．係数 $D_u, D_v, \varepsilon, f,$ および q は正定数．領域 Ω は滑らかな境界をもつ有界領域である．BZ 反応の実験を考えるならば，領域 Ω はシャーレに対応する．方程式の第 3 式は反射壁の条件を表しており，領域 Ω の外，つまりシャーレの外に BZ 溶液が流れ出ないことを意味している．第 4 式は初期条件である．

フィードバックは，ϕ を以下の式で定義することで導入される:

$$\phi = a\int_{\Omega} u(x,t)dx + b,$$

ただし，a は正定数，b はオフセットを表す定数とする．このフィードバックは，波の大きさ(u の Ω 上の積分)のみによって与えられ，波が大きければ光を強めて反応速度を遅らせ，波が小さければ光を弱めて反応速度を速めるといったものになっている．このフィードバックの効果により，光感受性 BZ 反応で見られたような化学反応波が，このオレゴネータにも現れることが示されている．しかしながら，その制御機構は完全には分かっていない．

解析を行う単純化モデルを導出する．オレゴネータモデルを領域Ωで積分することで，以下の式を得る：

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_\Omega u dx = \dfrac{1}{\varepsilon}\left\{\int_\Omega u dx - \int_\Omega u^2 dx - \int_\Omega (fv+\phi)\dfrac{u-q}{u+q}dx\right\}, & t>0, \\ \dfrac{d}{dt}\displaystyle\int_\Omega v dx = \int_\Omega u dx - \int_\Omega v dx, & t>0, \\ \displaystyle\int_\Omega u(x,0)dx = \int_\Omega u_0(x)dx, \quad \int_\Omega v(x,0)dx = \int_\Omega v_0(x)dx. & \end{cases}$$

この方程式は，このままでは厳密な解析が困難であるため，

$$u(x,t) \approx \begin{cases} M & on \quad \{x\in\Omega;\quad u(x,t)\geq 2q\}, \\ q & on \quad \{x\in\Omega;\quad q\leq u(x,t)\leq 2q\} \end{cases}$$

とおき，解の形状を直方体で近似することで各項の近似式を得ることにする(図１参照).
ここで，定数qは非常に小さな値であることに注意しておく．

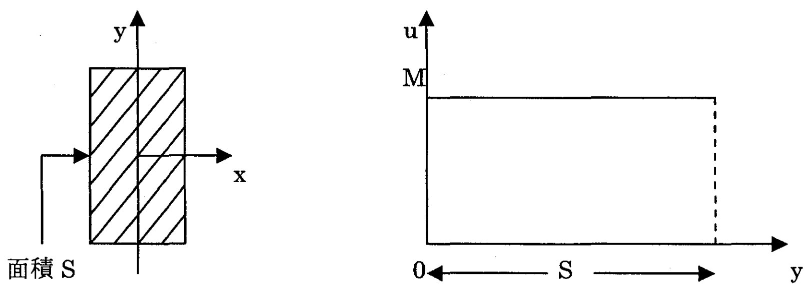

図１：解の形状の近似

さらに，Sを領域Ωの中で$u\geq 2q$となる部分の面積とすることで，各項は以下の形で近似できる：

$$\int_\Omega u dx \approx M\times S,$$

$$\int_\Omega u^2 dx \approx M^2\times S \approx M\int_\Omega u dx,$$

$$\int_{u\geq 2q} dx = S \approx \frac{1}{M}\int_\Omega u dx.$$

また，γをvの有界領域内の値を制限する積分比率とすると，

$$\int_{u\geq 2q} v dx = \gamma\int_\Omega v dx, \quad 0<\gamma<1,$$

となる．係数qの値は微小なので，

$$\int_\Omega (fv+\phi)\frac{u-q}{u+q}dx = \left(\int_{u\geq 2q} + \int_{q\leq u\leq 2q}\right)(fv+\phi)\frac{u-q}{u+q}dx$$

$$\approx \int_{u\geq 2q}(fv+\phi)dx = f\int_{u\geq 2q} v dx + \phi\int_{u\geq 2q} dx$$

という近似を得ることができ，さらに，ϕ の定義式に注意すると，最後の式は，

$$f\int_{u\ge 2q} v dx+\left(a\int_\Omega u dx+b\right)\int_{u\ge 2q} dx \approx f\gamma\int_\Omega v dx+\frac{a}{M}\left(\int_\Omega u dx\right)^2+\frac{b}{M}\int_\Omega u dx$$

となる．以上のことから，次の単純化モデルが導出される:

$$\text{(ODE)}\qquad \begin{cases} \varepsilon\dfrac{d\varphi}{dt}=-a'\varphi^2-b'\varphi-F\psi, \\ \dfrac{d\psi}{dt}=\varphi-\psi, \\ \varphi(0)=\displaystyle\int_\Omega u_0(x)dx, \quad \psi(0)=\int_\Omega v_0(x)dx. \end{cases}$$

ただし，$\varphi(t)=\int_\Omega u dx$，$\psi(t)=\int_\Omega v dx$，$a'=\dfrac{a}{M}$，$b'=\dfrac{b}{M}+M-1$，$F=f\gamma$ である．

この単純化モデルは，オレゴネータを領域 Ω 上で積分して得ているため，化学反応が起こっている部分の大きさを未知関数としたモデルとなっており，波の具体的な形状についての情報はかなり失われる．しかしながら，従来の研究によって BZ 反応における波形は安定であり，その大きさが重要な変数であるということが分かってきているため[8,12]，このモデルはそれを追跡することのできる新しいモデルであると思われる．

4．解析結果

前節で得られた単純化モデルを解析することで，化学反応波の大きさが制御によって安定することを見る．

まず，式(ODE)の定常解を求める．時間微分について，$\dfrac{d\varphi}{dt}=\dfrac{d\psi}{dt}=0$ とすると，

$$\text{(1)}\qquad \varphi=\psi=\frac{-(-b'-F)\pm\sqrt{(-b'-F)^2}}{-2a'}$$

という 2 組の解を得る．式(1)における複号の＋を考えた場合，

$$\varphi=\psi=\frac{-(-b'-F)+\sqrt{(-b'-F)^2}}{-2a'}=0$$

となり，一方，－を考えた場合，

$$\varphi=\psi=\frac{-(-b'-F)-\sqrt{(-b'-F)^2}}{-2a'}=\frac{2b'+2F}{-2a'}=-\frac{1}{a'}(b'+F)$$

となる．したがって自明でない定常解を $\overline{\varphi}$ と $\overline{\psi}$ とすると，

$$(\overline{\varphi},\overline{\psi})=\left(-\frac{1}{a'}(b'+F),\ -\frac{1}{a'}(b'+F)\right)$$

と表すことができる．ここで，図 2 は式(ODE)の定常解 $(0,0)$ と $(\overline{\varphi},\overline{\psi})$ を $\varphi\psi$ 平面上に表したものである．

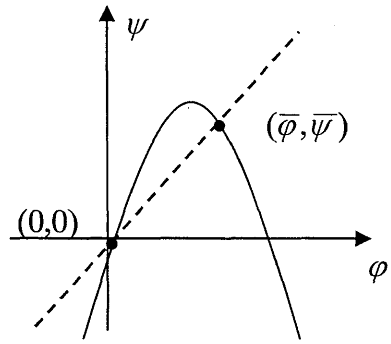

図２：式(ODE)の定常解

定常解$(\overline{\varphi},\overline{\psi})$に現れる$b'+F$が負であれば，$\overline{\varphi}$と$\overline{\psi}$が正値になるため，これは必要な条件である．したがって，本論文を通じて条件

$$b'+F<0$$

を課すことにする．

上記のように，非自明な定常解が存在すること，すなわち化学反応波に対応する解が(ODE)にも存在することは分かった．しかし，この定常解が安定であるかどうかは分からない．そこで以下，線形化解析によって解の安定性を調べる．式(ODE)を以下のようにおく：

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\varphi\\ \psi\end{pmatrix}=F(\varphi,\psi)=\begin{pmatrix}f(\varphi,\psi)\\ g(\varphi,\psi)\end{pmatrix}.$$

このとき，$F(\varphi,\psi)$のヤコビ行列は次のようになる：

$$F'(\varphi,\psi)=\begin{pmatrix}\dfrac{\partial f}{\partial\varphi} & \dfrac{\partial f}{\partial\psi}\\ \dfrac{\partial g}{\partial\varphi} & \dfrac{\partial g}{\partial\psi}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dfrac{-2a'\varphi-b'}{\varepsilon} & -\dfrac{F}{\varepsilon}\\ 1 & -1\end{pmatrix}.$$

いま，$(\overline{\varphi},\overline{\psi})=\left(-\dfrac{1}{a'}(b'+F),\ -\dfrac{1}{a'}(b'+F)\right)$であるから，

$$F'(\overline{\varphi},\overline{\psi})=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{\varepsilon}\left[-2a'\cdot\left\{-\dfrac{1}{a'}(b'+F)\right\}-b'\right] & -\dfrac{F}{\varepsilon}\\ 1 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{\varepsilon}(b'+2F) & -\dfrac{F}{\varepsilon}\\ 1 & -1\end{pmatrix}$$

となる．ここで，定常解$(\overline{\varphi},\overline{\psi})$まわりの摂動を$(\xi,\eta)$で表す，すなわち，

$$\begin{pmatrix}\varphi-\overline{\varphi}\\ \psi-\overline{\psi}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$$

とおくと，定常解$(\overline{\varphi},\overline{\psi})$まわりにおける式(ODE)の線形化方程式は以下のようになる：

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}=F'(\overline{\varphi},\overline{\psi})\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dfrac{1}{\varepsilon}(b'+2F) & -\dfrac{F}{\varepsilon}\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}.$$

したがって，定常解の安定性を調べるには線形化行列：

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon}(b'+2F) & -\frac{F}{\varepsilon} \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

の固有値を調べればよい．

線形化行列の固有方程式は，

$$\begin{vmatrix} \lambda-\frac{1}{\varepsilon}(b'+2F) & \frac{F}{\varepsilon} \\ -1 & \lambda+1 \end{vmatrix} = \left(\lambda-\frac{b'}{\varepsilon}-\frac{2F}{\varepsilon}\right)(\lambda+1)-\frac{F}{\varepsilon}\cdot(-1)=0$$

となるから，λ に関する次の 2 次方程式を得る:

$$\varepsilon\lambda^2-(b'+2F-\varepsilon)\lambda-(b'+F)=0.$$

これを 2 次方程式の解の公式によって解くと，

$$\lambda=\frac{-\{-(b'+2F-\varepsilon)\}\pm\sqrt{\{-(b'+2F-\varepsilon)\}^2-4\varepsilon\{-(b'+F)\}}}{2\varepsilon}$$

$$=\frac{b'+2F-\varepsilon\pm\sqrt{(b'+2F-\varepsilon)^2+4\varepsilon(b'+F)}}{2\varepsilon},$$

すなわち，

(2) $$2\varepsilon\lambda=b'+2F-\varepsilon\pm\sqrt{(b'+2F-\varepsilon)^2+4\varepsilon(b'+F)}$$

という 2 つの固有値を得ることができる(符号に注目しやすいよう両辺に 2ε をかけた)．

固有値 λ の符号が，b' をパラメータとしてどのように変化するかを,場合分けすることで調べる．これはフィードバックの強弱で化学反応波がどう安定するかを示すことに対応する．式(2)の根号内が，

$$(b'+2F-\varepsilon)^2+4\varepsilon(b'+F)<0$$

となるような b' の範囲を調べると，以下のようになる:

$$b'^2+2Fb'-\varepsilon b'+2Fb'+4F^2-2F\varepsilon-\varepsilon b'-2F\varepsilon+\varepsilon^2+4\varepsilon b'+4F\varepsilon<0$$

$$b'^2+4Fb'+2\varepsilon b'+4F^2+\varepsilon^2<0$$

$$b'^2+2(\varepsilon+2F)b'+(\varepsilon+2F)^2-4F\varepsilon<0$$

$$\{b'+(\varepsilon+2F)\}^2-4F\varepsilon<0$$

$$\left\{b'+(\varepsilon+2F)+2\sqrt{\varepsilon F}\right\}\cdot\left\{b'+(\varepsilon+2F)-2\sqrt{\varepsilon F}\right\}<0$$

$$-(\varepsilon+2F)-2\sqrt{\varepsilon F}<b'<-(\varepsilon+2F)+2\sqrt{\varepsilon F}.$$

この逆向きの不等号の範囲は，根号内が 0 以上になる b' の範囲である．他の重要な b' の閾値として，条件 $b'+F<0$ から得られる $b'=-F$ と，根号内が負のとき，実部の正負を分ける $b'+2F-\varepsilon=0$，つまり，$b'=\varepsilon-2F$ がある．したがって，パラメータ b' の変化に応じた固有値の符号変化を調べるには 4 つの閾値 $-F,\varepsilon-2F,-(\varepsilon+2F)\pm2\sqrt{\varepsilon F}$，の大小関係を調べなければならない．場合分けをする．

（・）$F > \varepsilon$ の場合．$-(\varepsilon + 2F) + 2\sqrt{\varepsilon F}$ と $\varepsilon - 2F$ については，これらの差を考えると，

$$-\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F} - (\varepsilon - 2F) = 2\sqrt{\varepsilon F} - 2\varepsilon = 2\sqrt{\varepsilon}(\sqrt{F} - \sqrt{\varepsilon}) > 0$$

より，

$$-\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F} > \varepsilon - 2F$$

となる．さらに，$-F$ と $-(\varepsilon + 2F) + 2\sqrt{\varepsilon F}$ については，

$$-F - (-\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F}) = F + \varepsilon - 2\sqrt{\varepsilon F} = (\sqrt{F} - \sqrt{\varepsilon})^2 > 0$$

となることから，

$$-F > -\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F}$$

となり，最後に $\varepsilon - 2F$ と $-(\varepsilon + 2F) - 2\sqrt{\varepsilon F}$ については，

$$\varepsilon - 2F - (-\varepsilon - 2F - 2\sqrt{\varepsilon F}) = 2\varepsilon + 2\sqrt{\varepsilon F} > 0$$

より，

$$\varepsilon - 2F > -\varepsilon - 2F - 2\sqrt{\varepsilon F}$$

となる．したがって，まとめると

$$-\varepsilon - 2F - 2\sqrt{\varepsilon F} < \varepsilon - 2F < -\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F} < -F$$

という大小関係を得ることができる．

（・）$F < \varepsilon$ の場合．これは先ほどと同様に考えて，$-F$ と $\varepsilon - 2F$ については，

$$-F - (\varepsilon - 2F) = F - \varepsilon < 0$$

より，

$$-F < \varepsilon - 2F$$

となり，さらに，$-F$ と $-(\varepsilon + 2F) + 2\sqrt{\varepsilon F}$ については，

$$-F - (-\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F}) = F + \varepsilon - 2\sqrt{\varepsilon F} = (\sqrt{F} - \sqrt{\varepsilon})^2 > 0$$

となる．したがって，まとめると

$$-\varepsilon - 2F - 2\sqrt{\varepsilon F} < -\varepsilon - 2F + 2\sqrt{\varepsilon F} < -F < \varepsilon - 2F$$

という大小関係を得ることができる．

以上のことを整理し，λ の正負および実部の正負について調べた結果を図３と４にまとめる．

$-\varepsilon-2F-2\sqrt{\varepsilon F}$　　$\varepsilon-2F$　　$-\varepsilon-2F+2\sqrt{\varepsilon F}$　　$-F$　　b'

<table>
<tr><td>根号内>0</td><td colspan="2">根号内<0</td><td>根号内>0</td></tr>
<tr><td colspan="2">$b'+2F-\varepsilon<0$</td><td colspan="2">$b'+2F-\varepsilon>0$</td></tr>
<tr><td>2つの負の数
(安定)</td><td>実部<0の
共役複素数
(安定)</td><td>実部>0の
共役複素数
(不安定)</td><td>2つの正の数
(不安定)</td></tr>
</table>

図3：安定条件($F>\varepsilon$)

$-\varepsilon-2F-2\sqrt{\varepsilon F}$　　$-\varepsilon-2F+2\sqrt{\varepsilon F}$　　$-F$　　b'

<table>
<tr><td>根号内>0</td><td>根号内<0</td><td>根号内>0</td></tr>
<tr><td></td><td>$b'+2F-\varepsilon<0$</td><td></td></tr>
<tr><td>2つの負の数
(安定)</td><td>実部<0の共役複素数
(安定)</td><td>2つの負の数
(安定)</td></tr>
</table>

図4：安定条件($F<\varepsilon$)

したがって，$F>\varepsilon$のとき，$b'<\varepsilon-2F$という範囲，すなわち，

$$b<(\varepsilon-2F-M+1)M\,,\quad F>\varepsilon\,,$$

という範囲のbをとれば，化学反応波が制御によって安定することが分かる．一方，$F<\varepsilon$のときは，$b'<-F$という範囲，すなわち，

$$b<(1-F-M)M\,,\quad F<\varepsilon\,,$$

という範囲のbをとれば，化学反応波が安定することが分かる．もちろん，フィードバックがない，つまり，$a=b=0$であれば，式(ODE)の第1式におけるφ^2の項がなくなるため，解の安定化は起こらないことは明らかである．

以上のことより，フィードバック効果による化学反応波の安定化機構の一端が解析的に示された．

5．結言

本研究では，光感受性 BZ 反応に対するオレゴネータの単純化モデル(ODE)を提案し，さらにその解析を行った．解析した結果，論文[8]や[12]に見られるような化学反応波に対応する定常解が存在することが示され，さらにその定常解は，フィードバックに関するオフセットの大きさをある閾値より小さくとることで，安定するということが示された．フィードバック制御がなければ，これらの話は成立しない．したがって，この解析によって，化学反応波の光フィードバック制御による安定化機構の解明に１つの理論的傍証を与えることができたと思われる．

オレゴネータから単純化モデル(ODE)を導出する際，化学反応波を直方体で近似し，また定数 q が微小であることなどを用いて積分量の近似を行った．このとき生じてくる誤差を評価することが必要であるが，これは今後の課題である．

単純化モデル(ODE)は，化学反応波の形に着目するのではなく，その大きさに着目した数理モデルである．波の大きさが重要な変数であることを述べた結果がこれまで得られているものの，波の形状に対する解析も本来必要であると思われる．これには，波の曲率に関する数理モデルが提案されており[9]，このモデルを用いた解析を行っていくことも今後の課題として挙げられる．

参考文献

[1] 三池秀敏，森義仁，山口智彦，非平衡系の科学Ⅲ　反応・拡散系のダイナミクス，講談社，1997.

[2] 吉川研一，中田聡，福永勝則，金田義亮，ダイナミックな現象を科学する　―身近に見るリズムやパターンに潜む非線形性を考える―，産業図書，1996.

[3] ヘルマン・ハーケン，自然の造形と社会の秩序，高木隆司訳，東海大学出版会，1985.

[4] 吉川研一，非線形科学　―分子集合体のリズムとかたち―，学会出版センター，1992.

[5] 高安秀樹，高安美佐子，経済・情報・生命の臨界ゆらぎ　複雑系科学で近未来を読む，ダイヤモンド社，2000.

[6] 井庭崇，福原義久，複雑系入門　知のフロンティアへの冒険，NTT 出版，1998.

[7] 武田暁，形の科学　複雑系―物理・生物から経済まで，裳華房，1997.

[8] E. Mihaliuk, T. Sakurai, F. Chirila and K. Showalter, Feedback stabilization of unstable propagating waves, Physical Review E 65, 065602:1-4, 2002.

[9] A. S. Mikhailov, V.A. Davydov and V.S. Zykov, Complex dynamics of spiral waves and motion of curves, Physica D 70, 1-39, 1994.

[10] R. J. Field and R. M. Noyes, Oscillations in chemical systems.Ⅳ.Limit cycle behavior in a model of a real chemical reaction, J. Chem. Phys 60, 1877-1884, 1973.

[11] J. J. Tyson and P. C. Fife, Target patterns of a realistic model of Belousov-Zhabotinsky reaction, J. Chem. Phys, 73, 2224-2237, 1980.

[12] T. Sakurai, E. Mihaliuk, F. Chirila and K. Showalter, Design and control of wave propagation patterns in excitable media, Science 296, 2009-2012, 2002.