

平成21年 6月16日現在

研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18740054
 研究課題名（和文） マスター・スレーブ型反応拡散系におけるパターン形成に関する数理的な研究
 研究課題名（英文） Mathematical study of pattern formation in master-slave type reaction-diffusion systems
 研究代表者
 上山 大信（UEYAMA DAISHIN）
 明治大学・理工学部・准教授
 研究者番号：20304389

研究成果の概要：

反応拡散系におけるパターン形成メカニズムは、生物の形作りにおいて基本的な役割を果たしていると考えられている。本研究では、マスター・スレーブ型反応拡散系におけるパターン形成に関して、特に化学反応沈殿系を念頭に、モデリングおよびシミュレーションから、ノイズと形成パターンに関する新しい知見を得た。また実験家との共同研究に発展し、今後理論と実験との両アプローチからの発展が見込まれる。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,700,000	0	1,700,000
2007年度	900,000	0	900,000
2008年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	270,000	3,770,000

研究分野：応用数学

科研費の分科・細目：数学一般(含確率論・統計数学)

キーワード：パターン形成、反応拡散系、計算機支援数学、化学反応系、数値シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

反応拡散系におけるパターン形成問題は、長年興味を持たれ多くの研究がなされてきた。特に生物がその多種多様な形状を作り上げるときに、反応拡散系に見られるパターン形成機構が基本的な役割を果たしていると考えられており、化学・生物・数学・物理といった多面的な研究がなされている。反応拡散系におけるパターン形成問題に対する数理的研究の先駆けは、チューリングやホジキン・ハクスレー等によるものであるが、伝統的に系全体が非平衡状態にあって、外部から

エネルギーが無限に供給され続ける状況下におけるパターン、すなわち散逸構造が興味の対象となってきた。その場合の数理的な興味の対象は、(空間非一様)定常解や伝搬解または系全体が乱れた状態となる。しかしながら、生物が行う形作りでは部分的に非平衡状態を作り、その領域が移動し、パターンを積み重ねる事で全体を作り上げる場合が多い。特に生物の形作りを考える場合には、系の一部におけるパターン形成が全体のパターンをどのように決めうるのかを知る事は大変重要であるが、これまで十分研究されて

きておらず、殆ど何もわかっていない状況にあった。

2. 研究の目的

生物の形作りの基本となっていると思われるメカニズムに関して我々は全くと言ってよいほど情報を得ていない。本研究の目的は、そのような基本的な情報を集め、今後の数理的な研究の元となる情報を得る事にある。ある程度情報が得られた後には数学的な解析が力を発揮するが、これまでの反応拡散系における研究がそうであったように、第一段階として計算機によるシミュレーションが与える情報は重要である。本研究の目的は、計算機シミュレーションを効果的に用いる事によって、エネルギー（原材料）の供給速度および供給帯の移動速度を支配するマスター方程式の性質によって、スレーブ方程式が生成するパターンがどのように変化を受けるのか、さらには系が内包するノイズによってパターンがどのように変化するかを理解する事にある。具体的には、申請者等によりリーゼガング沈殿に関するフェーズフィールドモデルを既に構築しており、この方程式の計算機シミュレーションを行う事により、問題の本質的な部分をとらえる。また、他の研究者との協力によって解析的な結果を得る方向性を探る。

3. 研究の方法

該当する現象において、数理的な理解はほとんど進んでおらず、現象の大枠をつかむ為にも数多くのシミュレーションが必要となる。特に、外部から局所的にエネルギー（パターン形成の元となる物質等）が与えられ、その供給部位が一定速度で移動する場合をまずは考えるが、その際、系を特徴づけるパラメータは、物質の単位時間あたりの供給量と移動速度であって、2パラメータの問題である。もちろん、その他にも系に含まれるパラメータが存在し、全体像をつかむ為に必要となる計算量は膨大である。既に多くの研究がなされており、パラメータの設定に関して情報が豊富な問題であれば、このようなアプローチは非生産的であるが、我々が取り組もうとしている問題については、有用な情報は殆どないため、ある程度計算パワーに頼ったパラメータサーチが必要である。それらの結果は、その後の数理的、解析的な研究の土台として大変有用なものとなる。

第二段階として、我々が既に提唱しているマスター・スレーブ型反応拡散系の一つのひな形である、リーゼガング現象を記述するフェーズフィールド型モデルについて、まずは空間二次元問題を考え、実際にはマスターとなる現象である化学反応系が自発的に決定し、その化学反応によって供給される原料に

より結晶成長が引き起こされるのであるが、その供給速度および速度を人為的にコントロールすることによって、パターン形成がどのように変化するかを観察する。これは既にある程度準備的な情報を得ており、移動速度と生成パターンの中に明確な関係がある事が分かっている。まずはより高精度なシミュレーションによってそれらを再確認し、外力の与え方とパターンとの関係を明らかにする。また、供給部分は帯状であるが、その幅が大変小さくなる極限において解析的な結果が得られる可能性について計算機シミュレーションから考察する。

4. 研究成果

マスター・スレーブ型反応拡散方程式に関して、基礎的な情報を集める為の数値シミュレーションを行った。特に、リーゼガング型沈殿現象のモデル方程式として提案した、フェーズフィールド型のマスター・スレーブ型反応拡散方程式について、それを縮約した簡易モデルが生成する空間二次元パターンのパラメータ依存性を調べた。パラメータとしては、実際の実験ではコントロールすることが難しい、反応面の移動速度と、パターン形成の元物質である物質の初期濃度の二つをとった。また、実験では、ゼラチン濃度を変えることによってパターンが大きく変化するが、ゼラチン濃度と核生成頻度との関係が実験から知られており、それをモデルにノイズの強さとして反映させた。結果として、ノイズと反応面の移動速度との間には実験のそれに対応した関係がシミュレーションでも得られ、モデルの正当性に関して一定の結果を得た。また、実際の現象は空間三次元での現象であり、空間三次元特有のパターン、例えばヘリカル状のパターンなども得られている。これに対応するため、空間三次元における数値シミュレーションを行うことにした。空間三次元のシミュレーションは、計算量が膨大であるため、既存の計算機クラスタを用いた、並列計算により対応した。この手法は他の空間三次元問題にも適応され、空間三次元におけるパターン形成問題に関して一定の成果を与えるものである。

実験家との共同研究により、実際の実験においてもノイズとパターンとの関係が明らかになってきた。これまで、反応波面の移動と速度の関係を特に注目してきたが、ノイズ強度との関係に関して数多くの数値シミュレーションを実施し、そこから得られた予想を元に実験を行った。また、空間三次元シミュレーションを並列クラスタ環境で行い、実験に見られる3次元ヘリカルパターンの再現に成功した。

数理的な立場から、空間1次元問題に関して、解析的なアプローチを模索した。海外の

共同研究者と連絡を取りつつ解析に向けた方向性を探ったが、ノイズが本質的な系であり現状では難しい。ノイズを取り除いた理想的な系における解析について、いくつかのアイデアがあり現在研究進行中である。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 3 件)

(査読有)

- ① Pattern transition between periodic Liesegang pattern and crystal growth regime in reaction-diffusion systems, I. Lagzi and D. Ueyama, Chemical Physics Letters 468 (2009), pp. 188-192.

(査読無)

- ② リーゼガング型沈殿パターンに関するシミュレーション解析、上山大信、三村昌泰、数理解析研究所講究録 No. 1522(2006) 136-143
- ③ リーゼガング型沈殿を記述するフェーズフィールドモデルに関するシミュレーション解析、上山大信、三村昌泰、応用数学合同研究集会報告集(2005) 239-244

[学会発表] (計 15 件)

- ① Modeling and Simulation - Pattern formation of Liesegang type precipitation -, 明治大学グローバル COE プログラム「現象数理学の形成と発展」～現象数理学の新しい展開を求めて～、2009. 3. 6 - 3. 7、明治大学紫紺館
- ② あるゲル内沈殿系におけるパターン遷移 - シミュレーション解析と実験からのアプローチ -, 小研究集会 in 富山「反応拡散系における諸問題 2008」、2009. 1. 30、富山大学理学部数学科
- ③ A simulation study of pattern transition in a precipitation system, PDE approximations in Fast reaction - Slow diffusion scenarios, from 10 Nov 2008 through 14 Nov 2008, Lorentz Center, Netherlands
- ④ A simulation study of pattern transition in a precipitation system, The Japan-France International Laboratory (LIA-197) ReaDiLab "Mathematical Understanding of Complex Systems arising in Biology and Medicine", 2008. 10. 27-29、明治大学駿河台キャンパス紫紺館 (link)
- ⑤ Numerical study of pattern transition in Liesegang type precipitation system, Workshop on Pattern

Formation in Reaction-Diffusion Systems, 2008. 3. 12, Eötvös University, Hungary

- ⑥ Numerical study of pattern transition in Liesegang type precipitation system, Fizikai Kémiai Szeminárium, 2008. 3. 6, Eötvös University, Hungary
- ⑦ Numerical study of pattern formation in precipitation systems, Singularities arising in Nonlinear Problems 2007 (SNP2007), 2007. 11. 27, 関西セミナーハウス
- ⑧ Numerical study of pattern transition in Liesegang type precipitation systems, Mathematical Modeling and Analysis in Biological and Chemical Systems, 2007. 9. 3-5, Université Paris-Sud XI, France
- ⑨ リーゼガング型沈殿現象に対する数理的アプローチ, 応用数理研究会, 2007. 8. 22-24, 金沢大学サテライト・プラザ
- ⑩ Numerical study of pattern transition in Liesegang type precipitation systems, Workshop on Experimental and Theoretical Studies of Precipitation Patterns, 2007. 6. 27-29, Meiji University
- ⑪ ある化学反応沈殿系におけるパターン形成: モデリングおよびシミュレーション, 2006. 11. 17-11. 18, 偏微分方程式と現象: PDEs and Phenomena in Miyazaki 2006 (略称: PPM2006), 宮崎大学工学部総合研究棟 2 階プレゼンテーション室 (D204)
- ⑫ Pattern transition in Liesegang-like precipitation: model and simulations, 2006. 10. 9, Reaction-Diffusion Equations and Biomathematical Models, Cergy-Pontoise University, France
- ⑬ Numerical study of the pattern formation on a heterogeneous environment, 2006. 10. 3-10. 5, ReaDiLab Conference "Reaction-Diffusion Processes in Biological and Biomimetic Systems: from Experiments to Mathematical Modeling and Analysis", Domaine University Bordeaux I, France
- ⑭ Liesegang-precipitation patterns: model and simulations, 2006. 7. 30 - 8. 4, Oscillation and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, Gordon Research Conference, Oxford UK
- ⑮ Simulation analysis for

Liesegang-like precipitation
patterns、2006.6.25 - 6.28、AIMS'
Sixth International Conference on
Dynamical Systems、Poitiers France

[その他]

研究会開催：

Workshop on Experimental and Theoretical
Studies of Precipitation Pattern、2007年
6月27日(水)～29日(金)、明治大学秋葉
原サテライトキャンパス (JR 秋葉原駅前・
秋葉原ダイビル6F)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

上山 大信 (UEYAMA DAISHIN)

明治大学・理工学部・准教授

研究者番号：20304389

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし