

Computational studies of emergent autowave phenomena in capillary tubes

(毛細管中の進行波の創発現象に関する計算科学的研究)

学位論文内容の要旨

非線形興奮性媒体の特異的な性質のひとつに進行波がある。進行波は生物においては心臓や神経組織の活動電位の伝播などに特徴的に見られるもので、これらの特性はペロ-ソフ・ジャボチンスキー反応(BZ 反応、BZR)などの物理化学実験で定性的に再現することができる。進行波は様々な形態をとりうる: 2次元および擬2次元反応場では、進行波面は直線、曲線、あるいは円環状になり、3次元では滑らかで連続した様々な曲面を構成する。さらに、活性中心のまわりを回転する2次元ラセン波(スパイラル波)やスクロール波が2次元および3次元反応場に出現しうる。研究現場では、これらの渦状進行波の多様なダイナミクスや興味深いパターンに関心が寄せられるばかりではなく、心臓電気生理学の領域では現実的な重要課題となっている。すなわち、心筋の進行波が断片化し回転するようになると、心室細動が誘発され致命的な疾患となる。心臓のダイナミクスに関する研究では、心臓組織の特性を簡便に再現できる実験および理論モデル系としてBZ 反応がしばしば用いられてきた。

3次元波面の特殊なケースの一つに、ねじれたスクロール波がある。これは3次元ラセン波(ヘリックス波)とも呼ばれている。このような構造は、両端が開いたままのガラス毛細管に触媒を含むゲルを満たし、これをBZ 反応の反応液に浸漬した実験で見出された。幾何学的には空間対称的な実験条件下であるにもかかわらず、非対称的な3次元ラセン構造をもつ進行波が自発的に形成されるのである。

本論文では、このような複雑なパターンが外部からの擾乱のない条件のもとでどのように形成されるかを計算機実験の手法により検討する。前提として、ゲルと反応液が接する界面の粗さによってゆらぎが生じ、このゆらぎによって回転する渦状構造が誘発されるものと仮定する。この場合、2次元ラセンが毛細管の長軸に沿って位相がシフトしながら空間的に発達成長した構造として3次元ラセンを捉えることができる。

まず、渦状構造の核形成から検討をはじめめる。2次元反応場(=界面)を想定し、BZ 反応の2変数オレゴネータモデルに空間ごとの有効興奮性をあらわす現象論的変数を加えた数理モデルを用いる。反応系は当初は不活性であるが、非一様な界面から反応物が拡

散するにつれて徐々に活性が上がり、やがて活性は飽和する。本論文ではこの飽和過程を、無作為に与えられた座標点(開口点)からのみ反応物が浸潤し拡散するものとしてモデル化する。その結果、BZ 反応の興奮性を示すパラメータ(オレゴネータの f) の値と界面の開口点密度の値に依存して、振動的な反応キネティクスと反応物の浸潤拡散の協奏によりラセン波や位相波が成長することが示される。

引き続いて、このモデルを 3 次元に展開する。すなわち、直方体型の反応場を考え、ゲル界面の粗さは深さ方向の次元も加味し 2 次元から 3 次元に拡張する。その結果、コアを有する 2 次元ラセンのセグメントが自発的に 3 次元ラセンへと時間発展する可能性が計算によって示される。なお、本計算における 3 次元ラセンの発生は厳密に初期値問題に属するものであって、毛細管を用いた物理化学実験と同様に、3 次元ラセンが出現するのは確率的であることを強調しておきたい。

毛細管中の BZ 反応の進行波の時間発展のダイナミクスは、時空間平面上でさらに踏み込んだ検討が行われている。反応初期段階では毛細管開口端の近傍のみで反応活性が向上しているが、このとき興味深い時空間構造が出現する。すなわち、進行波のあるものは開口端からごく短い距離までしか反応場を伝播できないのに対し、あるものはそれよりはるかに遠くまで伝播するのである。例えば、伝達距離の“短い”波が 3 つ続いた後で、伝達距離の“長い”波が 1 つ出現する、という具合に、明確な伝達パターンが見出されている。かかる現象は、同実験と同様の初期条件および境界条件のもとで、5 変数のオレゴネータモデルと 1 次元座標系を用いて再現することができる。

以上をまとめよう。本研究により、均質なゲル反応場で幾何学的対称性の破れた 2 次元および 3 次元の進行波が自発的に誘起されるのは、反応物の界面からのしみ込み拡散が非一様に開始されるためである、という可能性が示された。反応拡散系としては、数理的な系を用いているが、参照した BZ 反応の‘ウエットな’実験結果と本計算結果が相互に対照可能なように配慮されている。それゆえ、本研究で得られた知見は本研究で扱った実験系に類縁の理論・実験研究の進展に少なからぬ貢献をするものと期待される。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 西 浦 廉 政

副 査 教 授 津 田 一 郎

副 査 教 授 中 村 玄

副 査 山 口 智 彦 (産業技術総合研究ナノ

テクノロジー研究部門)

副 査 助 教 授 坂 上 貴 之

学 位 論 文 題 名

Computational studies of emergent autowave phenomena in capillary tubes

(毛細管中の進行波の創発現象に関する計算科学的研究)

非線形・非平衡パターンダイナミクスにおいてペローソフ・ジャボチンスキー反応 (BZ反応) は、実験的にも、またその数理モデルを通して理論的にも最も影響力の大きな非線形化学反応である。BZ反応は化学反応にとどまらず、生物における心臓や神経組織の活動電位の伝播などに特徴的に見られ、非線形興奮性媒体の特徴的な性質でもある進行波を記述することができ、それを物理化学実験で定性的に再現することができる。

進行波は様々な形態をとりうる：2次元および擬2次元反応場では、進行波面は直線、曲線、あるいは円環状になり、3次元では滑らかで連続した様々な曲面を構成する。さらに、活性中心のまわりを回転する2次元ラセン波 (スパイラル波) やスクロール波が2次元および3次元反応場に出現する。1次元、2次元ではその形状や様々な数理的性質が研究されてきたが、3次元における研究はその重要性にも拘らず、理論的、計算論的困難のため、多くの問題が未解決である。ひとつの典型例としてねじれたスクロール波がある。これは3次元ラセン波 (ヘリックス波) とも呼ばれている。これは、両端が開いたままのガラス毛細管に触媒を含むゲルを満たし、これをBZ反応の反応液に浸漬した実験で見出された。幾何学的には空間対称的な実験条件下であるにもかかわらず、非対称的な3次元ラセン構造をもつ進行波が自発的に形成されるのである。

しかしなぜこのような波が自発的に形成されるのかについては、理論的決着はついていなかった。申請者はこの課題に対し、数理モデルを構築し、計算機実験の手法により、このような複雑なパターンが外部からの擾乱のない条件のもとでどのように形成されるかを明らかにした。具体的には、まず2次元渦状構造の核形成の検討を行い、それを3次元に拡張した。すなわち、直方体型の反応場を考え、ゲル界面の粗さは深さ方向の次元も加味し2次元から3次元に拡張する。その結果、コアを有する2次元ラセンのセグメントが自発的に3次元ラセンへと時間発展する可能性が計算によって示された。本計算における3次元ラセンの発生は厳密に初期値問題に属するものであって、3次元ラセンが出現するのは確率的であることが示された。これは毛細管を用いた物理化学実験とも一致する。

なお研究現場では、これらの渦状進行波の多様なダイナミクスや興味深いパターンに関心が寄せられるほか

りではなく、心臓電気生理学の領域では現実的な重要課題となっている。すなわち、心筋の進行波が断片化し回転するようになると、心室細動が誘発され致命的な疾患となる。心臓のダイナミクスに関する研究では、心臓組織の特性を簡便に再現できる実験および理論モデル系としてBZ反応がしばしば用いられていることにも注目すべきであり、申請者の結果はこの方面に対しても意味ある結果と考えられる。

以上の結果は、均質なゲル反応場で幾何学的対称性の破れた2次元および3次元の進行波が自発的に誘起されるのは、反応物の界面からのしみ込み拡散が非一様に開始されるためであるという理論的結果の最初のものであり、3次元におけるパターンダイナミクスの数理的基盤に対して貢献するところ大なるものがある。

よって著者は北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格あるものと認める。