

# 反応拡散系を用いたパターン形成の相互作用

島田 勇介 定森 誠司  
法政大学大学院工学研究科システム工学専攻

笹野 睦雄  
法政大学工学部システム制御工学科

本研究は反応拡散系においてパターン形成の数値モデルである S-System モデルを用い、パターン形成の相互作用メカニズムを解析するものである。従来の反応拡散系の研究は 2 つの反応物質の相互作用による系の研究が多く行われてきたが、本研究ではさらに多数の反応物質の相互作用が複雑になった場合のパターン形成についての研究を行った。反応物質の数が増えても、パラメータ行列の拡大で対応できる手法を考案した。そして、オイラー法を用いた反応拡散方程式のシミュレーションを行い、まだ十分なパターン形成のメカニズムの解明には至っていないがいくつかのパターン形成の結果を得た。

## 1. はじめに

1950 年に数学者アラン・チューリングは論文「生物の形態形成の化学的基礎」[1]で「一定条件を満たす 2 つの物質が化学反応を起こしながら周囲に広がる拡散過程で、2 つの物質の濃度にむらが生じ、そのむらは様々な模様になる」と述べている。そしてチューリングはこの論文の中で、反応拡散方程式を用いてこの現象を理論的に証明している。

我々は反応拡散系における数値モデルであるその相互作用が複雑になった場合の計算手法を考案して、それを使ったパターン形成の結果を得た。

## 2. 反応拡散系パターン形成の原理

ここでは反応拡散系において、どのような原理でパターンが形成されるのかを述べる。

図 1 に示すように、 $X_1$ ,  $X_2$  の 2 種類の物質の相互作用の関係で構成される反応拡散系を考える。

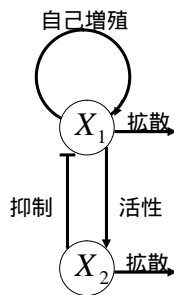


図 1.  $X_1$ ,  $X_2$  の相互作用の関係

$X_1$  は自身を自己増殖させる自己増殖反応であり、さらに  $X_1$  は  $X_2$  の生産を促進する。また、 $X_2$  は  $X_1$  の生産を抑制する。

ここで  $X_2$  の拡散速度  $D_2$  が  $X_1$  の拡散速度  $D_1$  よりも速いという場合を考える。このような条件のもとでは次のようなメカニズムで濃度の不均一性が起きる。

### (1) 初期状態

$X_1$  の初期濃度が場の中心付近で少し高くなっている。

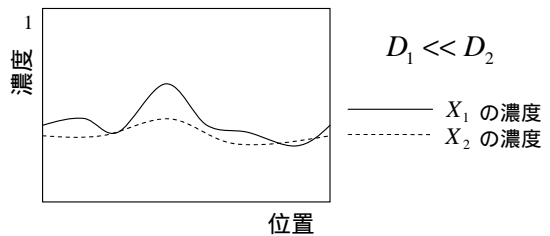


図 2. 初期状態

### (2) 過渡状態

$X_1$  の自己増殖により、その場の  $X_1$  の濃度が上昇すると、同時に  $X_2$  も活性され  $X_2$  の濃度も上昇する。しかし、 $X_2$  は拡散が早いので勾配はなだらかとなり、周囲の部分は  $X_2$  の濃度の方が高くなる。

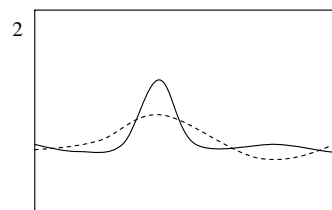


図 3. 過渡状態

### (3) 定常状態

そのために周囲では  $X_1$  の生成が抑制され、 $X_1$  の濃度が下がるという現象が起こる。時間が経つと、図 4 のように  $X_1$ ,  $X_2$  のバランスが取れ定常状態に落ち着く。

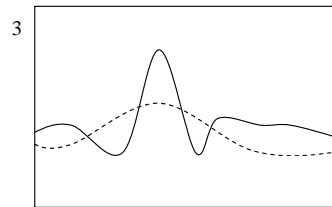


図 4. 定常状態

そして、図5のように時間経過とともにパターンが変化していくと考えられる。



図5. 反応拡散系におけるパターン形成

### 3. 反応拡散方程式

位置  $(x, y)$  における濃度  $u$  の時間変化を  $\partial u / \partial t$  とすると反応拡散方程式は(1)式で表される。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(u) - g(u) + D_u \nabla^2 u \quad (1)$$

ここに、 $f(u)$  は合成項といいモデルとする化学反応の相互作用を表す式になり化学反応の種類によって異なる。そして、 $g(u)$  は分解項といい化学物質の分解を表す式になる。また、 $D_u \nabla^2 u$  は拡散項といい、水面にインクを垂らすとそのインクはやがて水と完全にまざりあって濃度が一樣になるような拡散現象を表す式となっている。 $D_u$  は拡散する速度を決める定数になっている。

現在、様々な反応拡散方程式があるが、その中の一つである Gray-Scott モデルを例に挙げる。その化学反応式は(2)式で表される。



この化学反応式をもとに質量作用則を用い、 $u_1, u_2$  の2つの種類の反応物質の濃度変化を表す反応拡散方程式が(3)式となっている。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_1}{\partial t} &= -u_1 u_2^2 + F(1 - u_1) + D_1 \nabla^2 u_1 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= u_1 u_2^2 - (F + K)u_2 + D_2 \nabla^2 u_2 \end{aligned} \quad (3)$$

ただし、  
 $u_1, u_2$  : 反応物質の濃度  
 $F, K$  : パラメータ  
 $D_1, D_2$  : 拡散速度  
 $t$  : 時間

である。

Gray-Scott モデルの反応拡散方程式の右辺第1項は(2)式の化学反応式をモデルとした合成項になっている。また、右辺第2項は  $u_1, u_2$  の分解速度を表した分解項になっている。そして、右辺第3項は  $u_1, u_2$  の拡散を表す拡散項になっている。

この反応拡散方程式のパラメータ  $K, F$  の値を変えてシミュレーションすると様々な模様が出現する。その例を図6に示す。

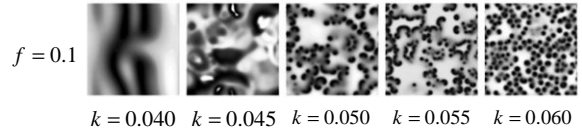


図6. Gray-Scott モデルのシミュレーション結果

### 4. 使用したモデル

本研究では、S-System[2]を用いた反応拡散方程式を提案する。前述の Gray-Scott モデルは化学反応式を元に反応拡散方程式を導いている。つまり、反応拡散方程式は反応物質の相互作用を記述した反応物質の伝播を伴う数理モデルとなっている。本研究ではこの点に着目し、反応物質の数を増やしたとき、すべての相互作用パターンを記述できるようなモデルの構築を模索した。従来の化学反応式から相互作用を記述する方法では、反応物質の数を増やしたときの相互作用の記述が難しい。

S-System は代謝系などの生化学反応系を表現するために考案されたもので質量作用則による近似式になっている(4)式で表される。

$$\frac{du_i}{dt} = a_i \prod_{j=1}^n u_j^{g_{ij}} - b_i \prod_{j=1}^n u_j^{h_{ij}} \quad (4)$$

$(i=1, 2, \dots, n)$

ここに、 $u_i$  は物質の濃度、 $n$  は反応物質の数、 $g_{ij}, h_{ij}$  は相互作用を表すパラメータ、 $a_i, b_i$  は速度定数である。

(4)式の右辺の第1項は合成を表す項で、第2項は分解を表す項になっている。そして、(4)式に拡散項を加えると(5)式の反応拡散方程式が導かれる。

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = a_i \prod_{j=1}^n u_j^{g_{ij}} - b_i \prod_{j=1}^n u_j^{h_{ij}} + D_i \nabla^2 u_i \quad (5)$$

$(i=1, 2, \dots, n)$

この式より以下のパラメータ行列が導かれ、反応物質の個数が1,2,3、 $n$  と増えた場合も、それに従いパラメータ行列を拡張するだけで、すべてのパターンの相互作用を記述できる。

パラメータ行列

$$\begin{bmatrix} a_1 & g_{1,1} & g_{1,2} & b_1 & h_{1,1} & h_{1,2} & D_1 \\ a_n & g_{n,1} & g_{n,2} & b_n & h_{n,1} & h_{n,2} & D_n \end{bmatrix}$$

パラメータの総数は、モデルとなる反応物質の個数を  $n$  とすると  $2n(n+1)+1$  となり、そのオーダーは  $O(n^2)$  である。

たとえば5種類の反応物質で図7の例1のようなパラメータ行列が構成されたときその相互作用はその下図のようになる。

### 例 1 . パラメータ行列

$$\begin{bmatrix} a_1 & g_{1,1} & g_{1,2} & g_{1,3} & 0.0 & 0.0 & b_1 & h_{1,1} & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ a_2 & -g_{2,1} & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & b_2 & 0.0 & h_{2,2} & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ a_3 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & b_3 & 0.0 & 0.0 & h_{3,3} & 0.0 & 0.0 \\ a_4 & g_{4,1} & 0.0 & 0.0 & 0.0 & g_{4,5} & b_4 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & h_{4,4} & 0.0 \\ a_5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & b_5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & h_{5,5} \end{bmatrix}$$

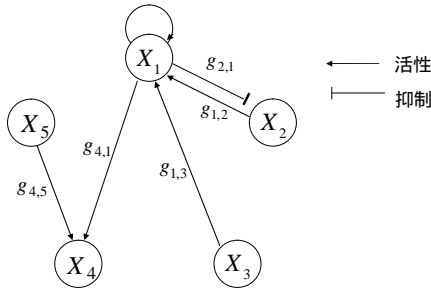


図 7 . 例 1 の相互作用

## 5 . シミュレーションの方法

### 5.1 数値解法

一般的に反応拡散方程式は連立偏微分方程式となっていて現在のところ厳密解はない。したがってオイラー法を用いて数値解法によるシミュレーションを行った。

オイラー法による反応拡散方程式を(6)式に示す。

$$u_i(x, y, t + \Delta t) = u_i + (f(u_i) - g(u_i))\Delta t + D_i \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \{u_i(x + \Delta x, y, t) + u_i(x - \Delta x, y, t) + u_i(x, y + \Delta y, t) + u_i(x, y - \Delta y, t) - 4u_i(x, y, t)\} \quad (6)$$

ここに、 $x, y$  は位置、 $t$  は時間である。そして、オイラー法による誤差は  $O(\Delta t)$  である。

### 5.2 境界条件

境界条件は次に示すノイマン境界条件とした。

$$\frac{\partial u_n}{\partial x}(0, t) = 0, \quad \frac{\partial u_n}{\partial y}(0, t) = 0$$

### 5.3 パラメータ範囲

パラメータの範囲は経験に基づき次のようにした

$$0 < a, b < 20 \\ -4.0 < g, h < 4.0$$

### 5.4 スケールフリーネットワーク[3]

スケールフリーネットワークとは、リンクを  $k$  本持つ反応物質の数を  $P(k)$  としたとき  $P(k) = Ak^{-\beta}$   $A$ : 定数となるようなネットワークである。

生化学反応系を視野に入れて、体内ネットワークがスケールフリー性を持つ[4]ことが示唆されていることを考慮した。

### 5.5 画像判定の方法

上記の条件のもとシミュレーションを行ったところ、はっきりしたパターンに見えるような画像は少なかった。原因は濃度に濃淡がほとんどなくパターンには見えない画像が出力結果の大部分を占めていた。ここで、どのようにして以下の二つの画像の違いを判定するのが課題となった。これに対して本研究がとった方法は、画像の各ピクセルと隣接するピクセルとの濃淡の差を取り、その差の累積  $S$  により画像を判別するといった手法である。

各ピクセルに対して同様の計算を行った。この方法により複雑なパターンほど  $S$  の数値が高くなり、画像判断に関して一つの評価ができるようになり、パターンに見えるような画像の判定を自動的に行えるようになった。

## 6 . 結果および考察

シミュレーションの結果を表 1 に示す。

当然のことながら、同じ数の反応物質の場合もそれらの相互作用の違いによって、パターン形成が異なっていくことが分かる。しかし、まだパターンの表示が不鮮明な場合が多く、この対策の必要がある。また、物質の数が増えた場合はカラー表示ができるような対応も必要である。

## 7 . 結論

結論として次のことが言える。

反応拡散系において反応物質の数が多くなった場合、それらの相互作用に対応できるパラメータ行列の利用を考察した。

また、濃度の違いをパターン化する手法を考察して、ある程度の有効性を確認した。

しかし、まだ現段階では各パラメータとそれによってできるパターン形成との関係が究明されていない。今後はこれらの関係を探求して生物の体表面の模様などの発生のメカニズムの解明に結び付けたい。

### 参考文献

- [1] Turing, A.M.: Phil. Trans. R. Soc., B237, 37-72, 1952
- [2] Savageau, M.A.: Biochemical system analysis, Assison-Wesley, 1976
- [3] Albert, R. and Barabasi, A.L.: Power law distribution of the World Wide web, science, Vol 287, 2001
- [4] Podani, J., Oltavi, Z., eong, H., B. Tombor, Barabasi, A.-L. and Szathmary, E.: Comparable system-level organization of Archaea and Eukaryotes, Nature Genetics, Vol. 29, pp54-56. 2001

表1. シミュレーションの結果

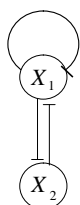
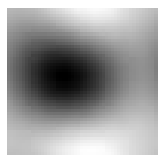
パラメータの探索範囲

$$0 < a, b < 20$$

$$-4.0 < g, h < 4.0$$

反応物質の数  $n = 2$

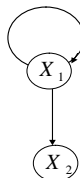
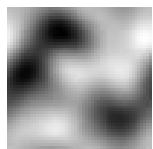
シミュレーション結果 1.1



$S = 99$

$$\begin{bmatrix} 18.91 & -2.88 & -3.77 & 5.86 & 0.00 & 0.00 & 0.44 \\ 8.69 & -2.88 & 0.00 & 19.32 & 0.00 & 0.00 & 0.93 \end{bmatrix}$$

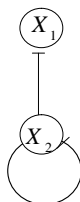
シミュレータ結果 1.2



$S = 137$

$$\begin{bmatrix} 18.7 & 0.76 & 0.33 & 15.7 & 0.00 & 1.48 & 0.04 \\ 2.61 & 0.00 & 0.00 & 4.59 & 0.00 & 0.00 & 0.81 \end{bmatrix}$$

シミュレータ結果 1.3

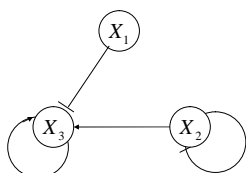
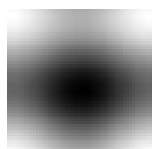


$S = 192$

$$\begin{bmatrix} 18.01 & 0.00 & 0.00 & 15.7 & 0.00 & 0.00 & 8.76 \\ 5.29 & 2.78 & -0.27 & 4.59 & -0.25 & 2.79 & 8.88 \end{bmatrix}$$

反応物質の数  $n = 3$

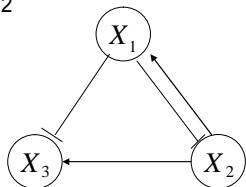
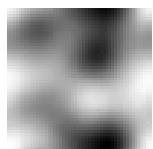
シミュレータ結果 2.1



$S = 100$

$$\begin{bmatrix} 2.41 & 0.00 & 0.00 & -2.01 & 10.16 & 2.30 & 1.33 & 1.41 & 0.85 \\ 19.00 & 0.00 & -1.70 & 1.62 & 2.84 & 0.00 & 0.61 & 0.00 & 0.90 \\ 7.80 & 0.00 & 0.00 & 3.70 & 15.93 & 0.00 & 0.00 & 1.32 & 0.18 \end{bmatrix}$$

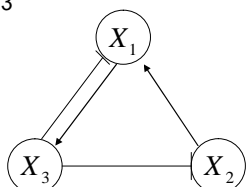
シミュレータ結果 2.2



$S = 123$

$$\begin{bmatrix} 2.61 & 0.00 & -3.89 & -0.45 & 3.39 & 0.00 & 0.00 & 0.36 & 0.91 \\ 9.44 & 2.26 & 0.0 & 0.0 & 18.33 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.08 \\ 1.16 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.91 & 1.80 & 0.00 & 0.00 & 0.07 \end{bmatrix}$$

シミュレータ結果 2.3



$S = 164$

$$\begin{bmatrix} 19.99 & 0.00 & 0.00 & 1.34 & 4.69 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 \\ 9.91 & 0.96 & 0.00 & 0.00 & 5.48 & 0.00 & 0.56 & 0.00 & 0.19 \\ 2.02 & -3.47 & -2.64 & 0.00 & 4.82 & -2.34 & 0.00 & -3.95 & 0.69 \end{bmatrix}$$

## **キーワード.**

反応拡散系, パターン形成, S-System

-----

## **Summary.**

### **Relative operators of Pattern Formation that uses Reaction-Diffusion System**

Yusuke Shimada Seiji Sadamori  
Graduate School of of Engineering, Hosei University

Mutuo Sasano  
Department of systems and Control of Engineering, Hosei University

Reaction-diffusion systems are not so well known tool for a study of the formation of many patterns. Both static and dynamic patterns found in biology can be imitated very realistically by reaction-diffusion systems. In this paper, we use the S-system which is reaction-diffusion model of the pattern formation to analyze the interaction mechanism. As the research of a past reaction-diffusion systems has been researched in the interaction of two reactive materials, then, we will analyze the pattern formation of complex interaction in the case of increasing the number of reactive materials.

## **Key word.**

pattern formation, Reaction-diffusion systems, S-System