

異方的拡散を含むチューリングパターン

～ うろこ模様を出すための反応拡散アルゴリズム ～

A Reaction-Diffusion Algorithm Obtaining *Uroko* Patterns in Image Analysis

岩本凌¹, 昌子浩登^{2*}

関西学院大学大学院理工学研究科¹, 関西学院大学理工学部²

Ryo Iwamoto¹, Hiroto Shoji^{2*}

Graduate School of Science and Technology, Kwansai Gakuin University¹

School of Science and Technology, Kwansai Gakuin University²

2020年2月25日

1 はじめに

1952年英国の数学者アラン・チューリング [1] は、通常空間を一様にする空間拡散 (拡散項) と要素の相互作用 (反応項) がカップルされた反応拡散 (Reaction-Diffusion: RD) 方程式において、ある条件下では非一様な周期解が自発的に形成され、形成された周期パターンが安定に存在することを数学的に示した。このメカニズムで自己組織的に形成されるパターンをチューリングパターンと呼ばれている。これまでチューリングパターンは、生体の自己組織化 [2] など自然界で見られる周期的パターンの形成形成メカニズムの説明に使われてきた。実際、化学反応系では、このメカニズムが働いて固有波長の周期的パターンが形成されること [3] に対応づけられてきている。

一方で、画像情報処理 [4, 5] や医療画像情報処理 [6] の分野においても、チューリングの自発的パターン生成メカニズムを積極的に活用されてきている。システムの内在する周期のパターンが自発的に形成されることをアルゴリズムの一部として用いて画像補完、画像処理の一部として活用されている。有名な例としては、指紋復元のためのアルゴリズム活用 [4] が挙げられる。また我々は、3次元周期画像である肝臓マイクロ血管構造の画像処理だけでなく、疾患の進行度合いを、画像処理に用いた RD モデル内のパラメータを用いて定量化すべく RD アルゴリズムを開発してきた [6]。

数理科学的な研究から、2次元空間に形成されるチューリングパターンの典型例はスポットパターンやストライプパターンが知られている [2]。また、これらの2種のパターンだけでなく、要素の数を増やし、それぞれの反応項に様々な生体に見られるようなパターンを構成する研究も多数展開されてきた [7]。これらの RD モデル式を用いてストライプ模様やスポットパターンに類似した模様を持つ生体の定量化はそれぞれ可能になるだろう。しかし一方で、内耳のらせん管表皮に形成される聴毛の配列パターン [8] のように、正三角形が敷き詰められたうろこ模様とよばれる周期パターンが自発的に形成されるモデルが知られていない。本報告ではうろこ模様と呼ばれるパターンが自発的に形成される生体パターンを定量できるような反応拡散アルゴリズムを作成し、そのパターン形成メカニズムを解析することを目的とする。

* shoji@kwansai.ac.jp

2 数理モデル

チューリング (1952) は次のような 2 つの拡散速度の異なる拡散性化学物質 U, V (それぞれの濃度 u, v とする) がローカルに化学反応することで空間的な一様な分布から、周期的なパターンが自発的に形成されることを数学的に示した。つまり U, V それぞれの反応項と拡散項のカップルした反応拡散方程式

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

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + g(u, v) \quad (2)$$

において D_u と D_v の比が大きくなると、空間一様解が不安定になり周期パターンが安定になる場合があることを示した [1]。本研究では、反応項についてそのヌルクリンの形状から、そのシステムの振る舞いが比較的わかりやすい FitzHugh-南雲方程式 [9] を主に用いる。三角形同士が秩序立って配列したうろこ模様が主な画像に対する画像解析に適用する反応拡散モデルを構築し、構築したモデルの数理メカニズムの探求を行う。

この反応項を適応した RD モデルでは基本的にストライプ模様やスポット模様ができていくことが知られている [2]。ここで、拡散項の効果としてうろこパターンと呼ばれる模様を自発的に形成させるべく、本研究では、Kobayashi [10], Shoji *et al.* [11] で取り組んできた拡散異方性を拡張させたモデルを考えた。具体的には物質 U の流れの増減に方向性があるような拡散異方性を導入したモデルで、通常の拡散、異方性がない場合は、図 1(a) のように流れの大きさは全ての方向で同じだけの係数 1 がかけられる。それに対して、流れの異方性があれば、図 1(g) や (m) のように、 ψ_u と $\psi_u + 2\pi/3$ と $\psi_u + 4\pi/3$ の方向には流れが増幅され、それ以外の方向では流れが減少させられるような異方性を考える。そして、図 1(g) や (m) のように異方性の強さ δ_u ($0 \leq \delta_u < 1.00$) を大きくすればするほど、方向による流れの増幅度がより強くなるようなモデルを考える。数式で表すと、

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \nabla \cdot (D_u(\theta_u) \nabla u) + u - u^3 - v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_v \nabla^2 v + \gamma(u - \alpha v - \beta), \end{cases} \quad (3)$$

$$D_u(\theta_u) = \frac{1}{\sqrt{1 - \delta_u \cos(3(\theta_u - \psi_u))}}, \quad \theta_u = \arctan\left(\frac{\partial u}{\partial y} / \frac{\partial u}{\partial x}\right), \quad (4)$$

となる。 $d_u = 1.00 \times 10^{-4}$, $d_v = 1.00 \times 10^{-2}$, $\alpha = 0.50$, $\gamma = 26.0$, $\beta = 0.00$ と設定し、拡散異方性の強さ δ_u の強さを変化させた時の数値計算の結果を図 1 に示す。

数値計算スキームについて述べると、分割幅 Δx のグリッドサイズ $N_x \times N_y$ に分割した 2 次元空間で空間サイズ $(L_x, L_y) = (N_x \times \Delta x, N_y \times \Delta x)$ の正方格子で数値計算を行う。拡散項による発散が起きないように設定した時間分割幅 Δt を用いて (具体的には $\Delta x = 1.00 \times 10^{-2}$, $\Delta t = 1.00 \times 10^{-4}$ とし、 $(L_x, L_y) = (1.28, 1.28)$)、オイラー法による時間発展方程式を用いて、式 (3), (4) を離散化したものを解いた。拡散のグリッドによる異方性が出ないかどうか調べるため拡散スキームに近似 5 点だけでなく 9 点、16 点も使い、以下で述べる性質には差異はなかったので、掲載する結果は近似 5 点で得たものである。境界は周期境界条件を課し、初期分布は反応項の平衡点 $(\bar{u}, \bar{v}) = (0.00, 0.00)$ に微小摂動を加えたものを与え数値計算を行なった。本モデルで得られる分布は u, v 同位相の周期パターンが得られることが知られている [12] ので、数値計算の結果は、図 1, 2 のように 2 次元密度プロットで u の分布のみを表している。注意として、選んだパラメータセットでは、拡散異方性がない ($\delta_u = 0.00$) 場合には、図 1(b)-(d) のように特定の時間 (本研究では $t = 4000 (= \Delta t \times 4 \times 10^8 \text{ steps})$) 内では方向性の定まらないストライプ模様が形成されるパラメータを選んでいる。

まず、(図 1 では三段目に示すが) $\delta_u = 0.90$ とすると、図 1(n) - (p) が得られた。初期段階で三角形形状が地と文様とがジグザグに入れ替わり構成された配置のモードが各所に現れてきた。そして、時間が経つに従っ

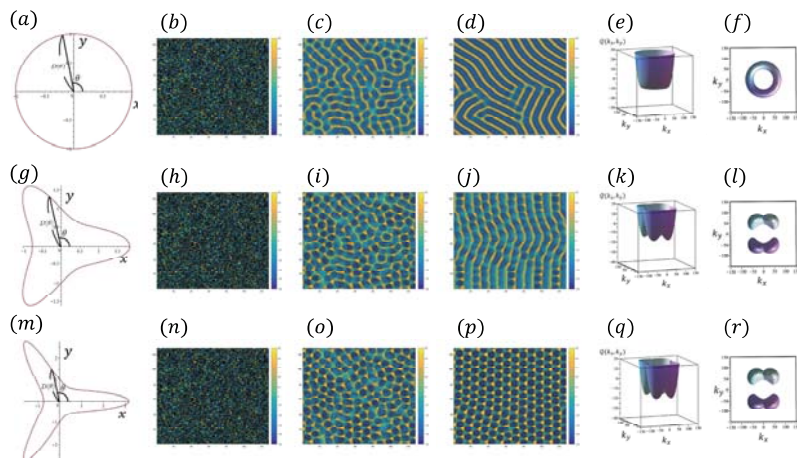


図1 数値計算と線形解析のまとめ図。拡散異方性がない場合 ($\delta_u = 0.00$):(a)-(f) と異方性を導入した場合の結果 (g)-(r) (ただし, (g)-(l) : $\delta_u = 0.70$ (m)-(r) : $\delta_u = 0.90$ のとき) を示す。(a), (g), (m) は流れの方向により強調される度合いをしめす概念図。異方性がない場合 ($\delta_u = 0.00$) のとき, (a) のように流れは全ての方向に対して等倍される。対して, 異方性を導入した場合 ($\delta_u = 0.70$ or 0.90) のとき, (g), (m) のように流れは特定の方向 (ψ_u と $\psi_u + 2\pi/3$ と $\psi_u + 4\pi/3$) に対してより強調され, その他の弱められる。また (g), (m) を見比べると δ_u の値が大きくなると, その増減がより強調されることがわかる。(b), (h), (n) のように初期分布を与えた時の時間パターン発展を (c, d), (i, j), と (o, p) にそれぞれの u の空間分布を濃度プロットで示す。(e, f), (k, l), (q, r) は線形解析で得られる不安定モードの方向の分布を示す。

て各三角形同士が次第に配列を秩序立った配列（うろこ模様 [13] と呼ばれる）に並び変えてきて, これ以上動かないパターン図 1(p) が形成される。

次に, (図 1 では二段目に示すが) $\delta_u = 0.70$ とすると, 図 1(h)–(j) が得られた。このときは, まずは図 1(o) のように, うろこ模様のタネになりそうなパターンが各所で形成される (図 1(i))。しかし, 時間が経過するにしたがって図 1(j) のように垂直方向の縞模様が形成されるように変化していった。

このように, 数値計算の結果から, 式 (4) のような異方性を導入すると数値計算初期ではうろこ模様のタネになりそうなパターンが各所で形成される。しかしその後, 異方性 δ_u の強さによって遷移過程が異なることがわかった。

3 パターン形成の数理メカニズム解析

前節で見られた数値計算をもとに, モデル方程式の線形解析や分布の解析からどのようにうろこ模様が形成されているのかそのメカニズムについて数理的に見てみる。

図 1(h)-(j) 並びに 図 1(n)-(p) のパターンのでき方を見ると時間初期の頃からうろこ模様のモードが線形的に立ち上がっているのが見られる。このことから, パターンのでき方としてうろこ模様のモードが線形解析から見いだすことができるのではと考えた。そこで次のようなモード解を与えて, その最も不安定な方向のモードを探ることから, どのような分布になっているかを解析してみた。

法線ベクトル (k_x, k_y) 方向の解の分布 u と v を

$$\begin{cases} u = \bar{u} + A \cos(k_x x + k_y y) e^{\lambda t}, \\ v = \bar{v} + B \cos(k_x x + k_y y) e^{\lambda t}, \end{cases} \quad (5)$$

を想定し, 平衡点 (\bar{u}, \bar{v}) の周りで線形化したモデル式に代入した。そして, 最も不安定な解の方向 (k_x, k_y) を計

測した. 具体的には, 固有方程式

$$\lambda^2 + P(k_x, k_y)\lambda + Q(k_x, k_y) = 0, \quad (6)$$

についての評価を行って行く. $P(k_x, k_y), Q(k_x, k_y)$ の具体的な形式は紙面の制約上省くが, ここでは定数項である $Q(k_x, k_y)$ の値が最も小さい値をとる (k_x, k_y) をとるパターン, つまり最も不安定なモードがパターンを形成すると考えた. 具体的には, $Q(k_x, k_y)$ の図 1(e), (k), (q) のような 3Dplot とその (k_x, k_y) の平面の負の部分の濃度プロット図 1(f), (l), (r) から推定した.

図 1(l) と (r) から, モデル式のような異方性を導入した場合 ($\delta = 0.70$ と $\delta = 0.90$ の両方) で最も不安定な解の法線ベクトル (k_x, k_y) は $\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}$ の方向のモードであることがわかる. このことから, 上で書いた仮定のもとでは, 2つの \cos 関数の重ね合わせで描かれるパターンが初期に線形的に成長してパターンを構成していくことが予想される. 実際にこのモードを足し合わせたものを見てみると図 2(d) のようなうろこ模様になる. これらの三角関数を組み合わせた解の u の値の頻度分布を図 2(f) に示した.

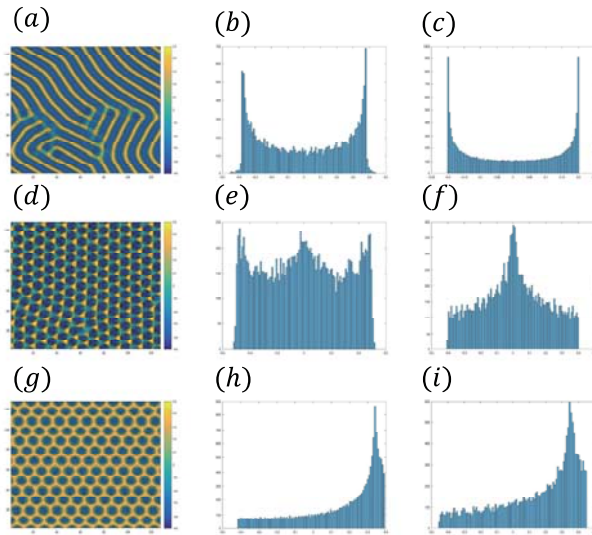


図 2 得られたパターンとその頻度分布: (a)-(c): チューリング縞模様 (a) とその頻度分布 (b) の例. そして理想解 (5) の頻度分布 (c). (d)-(f): うろこ模様 (d) とその頻度分布 (e), そしてその理想解の頻度分布 (f). (g)-(i): スポット模様 (g) とその頻度分布 (h) の例. そして理想解の頻度分布 (i).

次に, $\delta = 0.90$ の場合, 初期に形成されたうろこ模様が維持され, 配置を整えてパターンが形成されたのに対して, $\delta = 0.70$ の場合ではうろこ模様が維持できず, ストライプ模様に変化したことについて, そのメカニズムを類推してみる.

まず, 数値計算で得られた図 2(d) のうろこ模様の u の分布の値に対するその頻度分布を書いてみると図 2(e) のようになった. 一方で, 異方性の導入しない (等方的拡散の) 2次元チューリングパターンの数値計算で得られるストライプパターン図 2(a) やスポットパターン (図 2(g)) の u の値に対するその頻度分布を書いてみるとそれぞれ図 2(b), (h) となった.

図 2(b), (h) について考えてみると, チューリングの条件である反応項の安定解がピッチフォーク分岐で反応項の非線型により形成される u の取りうる値の上限と下限に安定な点が分岐していき, 固定パターンが形成される [14]. それに対して, うろこ模様では図 2(e) のように平衡点の安定な解とピッチフォーク分岐で分岐した

安定解の3カ所で値の頻度が高くなってきていることがわかる。つまり、うろこ模様ではこの分布の3つの山が何かしらのバランスで持って釣り合いをなして安定に存在できているのではないかと類推する。

実際に、 $\delta_u = 0.00$ のとき、 $D_u(\theta_u)(= 1.0)$ はチューリング不安定性が起こる範囲 ($D_u(\theta_u) \leq 1.320$) を常に満たしている。ここで、 $\delta_u = 0.90$ のときの $D_u(\theta_u)$ の範囲は $0.725 < D_u(\theta_u) < 3.162$ であり、 $D_u(\theta_u)$ がチューリング不安定性が起こる範囲 ($0.725 < D_u(\theta_u) \leq 1.320$) と起こらない範囲 ($1.320 < D_u(\theta_u) < 3.162$) が共に存在する。このような機構で、平衡点の安定性と不安定性が領域的にバランスが取れて、うろこ模様が形成されているのではと推察される。

一方で、 $\delta_u = 0.70$ のときは、 $\delta_u = 0.90$ のときと同様に初期ではうろこ模様のモードがパターンを形成された。 $D_u(\theta_u)$ の範囲を計算してみると、 $0.766 < D_u(\theta_u) < 1.825$ であり、 $D_u(\theta_u)$ がチューリング不安定性が起こる範囲 ($0.766 < D_u(\theta_u) \leq 1.320$) と起こらない範囲 ($1.320 < D_u(\theta_u) < 1.825$) がこちらも共に存在する。しかし、 $\delta_u = 0.70$ の場合は、うろこ模様を保持しておくための拡散係数と空間的なバランスが十分ではなく、ピッチフォーク分岐で別れた方の解に収束していき、時間がたつと図 1(j) のようにストライプパターンに変化していくのではと類推している。

4 まとめと議論

本研究では、三角形形状の地と文様とがジグザグに入れ替わり構成された配置の周期構造をとるうろこ模様について RD モデルを用いて作成した。拡散項について流れの強さを方向によって変化させる拡散異方性を用いることでうろこ模様を作成できた。このモデルについて、線形解析と u の分布の頻度分布を用いた直感的な考察を行うと、初期モードでうろこモードが出るだけでなく、拡散の影響の微妙なバランスが成り立っていないと、うろこ模様が持続できないことがわかった。現段階ではもちろん直感的な説明で踏み込んだ数理解析が必要であるが、画像解析に有用なうろこ模様を自発的に形成する RD モデルを作成でき、その解析の何かしらの方向性は示せたと考えている。

本研究では反応項を FitzHugh-南雲方程式を用いて計算した結果をメインに紹介した。我々は、他の反応項モデル (Brusselator: $f(u, v) = a - (b+1)u + u^2v$, $g(u, v) = bu - u^2v$, a, b : パラメータ) や Schnackenberg モデル: $f(u, v) = \alpha - u + u^2v$, $g(u, v) = \beta - u^2v$, α, β : パラメータ) [2] を用いても同様の結果が得られることを確かめている。

謝辞

広島大学、三村昌康教並びに授関西学院大学、大崎浩一教授は本研究に対する多数のコメントアドバイスをいただき深謝いたします。本稿で示した研究は JSPS, KAKENHI(17H05302) の支援を受け実施している。

参考文献

- [1] A. M. Turing, *Philos. Trans. R. Soc. London B*, **237**, 37 (1952).
- [2] J. D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer (2003).
- [3] V. Castets, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 2953 (1990).
- [4] K. Ito, T. Aoki, T. Higuchi, *IEICE TRANS. FUNDAMENTALS*, **E84**, 1909-1918 (2001).
- [5] A. Nomura M. Ichikawa, H. Miike, *RIMS kokyuroku*, **1522**, 101-110 (2006).
- [6] H. Shoji, *J. Bio. Med.*, **6**, 22-32 (2018).
- [7] M. Mimura, H. Sakaguchi, M. Matsushita, *Physica A*, **282**, 283-303 (2000).
- [8] A. Mescher *Junqueira's Basic Histology Text and Atlas*, McGraw-Hill com. (2013).
- [9] R. FitzHugh, *Biol. Physical J.* **1**, 445-466 (1961); J. Nagumo, S. Arimoto, S. Yoshizawa, *Proc. IRE*, **50**, 2061 (1962).
- [10] R. Kobayashi, *Physica D*, **63**, 410-423 (1993).
- [11] H. Shoji *et. al.* *J. Theor. Biol.* **214**, 549-561, (2002).
- [12] H. Shoji, K. Yamada, D. Ueyama and T. Ohta, *Phys. Rev. E*, **75**, 46212 (2007).
- [13] E. Tokunaga ed. *Encyclopedia of Science of Form* (Japanese), Asakura Syoten (2005).
- [14] M. Kuwamura, *Pattern Formation and Bifurcation Theories* (Japanese), Kyoritu Syuppan (2011).