

流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/redを用いた反応拡散解析 -チューリングパターンと機械学習-

大西 陽一*

Reaction-Diffusion Analysis using Advance/FrontFlow/red -Turing patterns and machine learning-

Yoichi Ohnishi*

Advance/FrontFlow/red の反応拡散機能を用いて、チューリングパターン再現を試みる。また機械学習との組み合わせで所望のパターン再現の可能性、特に半導体回路パターンに関する可能性について言及する。

<https://doi.org/10.69290/j.001171-vol32>

Keywords: Advance/FrontFlow/red、チューリングパターン、反応拡散機構

1. キリンの斑論争

キリンの斑模様はなぜあのような形をしているのか。1933年、物理学者・平田森三は「その模様は、乾燥した田んぼのひび割れと同様に、皮膚が成長の過程で割れることで生じる」との仮説を科学雑誌に投稿した(図 1)。これに対し、生物学者・丘英通は「模様は色素分布によるもので、物理構造とは無関係」と反論し、さらに「生物学の実地研究をせず、机上で勝手に語るのはけしからん」と厳しく批判した。論争は1年にわたり続いたが、最終的には平田の師・寺田寅彦が介入し、収束したという逸話がある[1]

この論争は一見ローカルな意見の対立に見えるが、後年、“人工知能の父”といわれる英国の数学者・計算機科学者 アラン・チューリングによっ

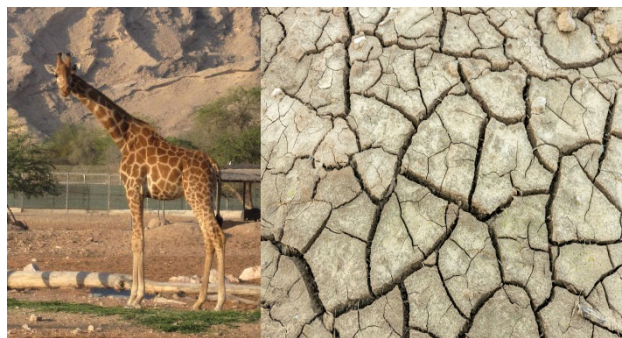


図 1 キリンと田んぼのひび割れ:Wikipedia より

*アドバンスソフト株式会社 第3事業部

3rd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

て全く新しい視点が提示される。チューリングは、生物の模様形成を説明するため“反応拡散系”と呼ばれる数理モデルを提案した[2]。2つの物質が特定の条件下で反応しながら拡散することで、空間的な濃淡パターン——いわゆる“チューリングパターン”——が自発的に生じるという現象である。

この仮説はその後、日本の近藤滋氏らによって魚類の体表模様(例:タテジマキンチャクダイ)で実験的に裏付けられ、物理学・計算科学の立場からも模様形成メカニズムとして広く受け入れられるに至った[3]。

本稿では、当社汎用流体解析ソフト Advance/FrontFlow/red(以下 AFFr) [4]の反応拡散計算機能を活用し、チューリングパターンの数値再現を試みる。また、近年進展の著しい機械学習技術と組み合わせることで、従来は試行錯誤的だったパターン設計において、所望の模様を自動生成するアプローチの可能性を探る。特に、半導体回路設計への応用可能性にも言及する。

2. チューリングパターン

チューリングパターンの出発点は、2つの変数(たとえば u, v) の拡散と反応を組み合わせた偏微分方程式である。代表的な形式は次の通りである。

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= f(u, v) + D_u \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= g(u, v) + D_v \nabla^2 v\end{aligned}\quad (1)$$

ここで u, v は、それぞれ化学種の濃度や状態変数をあらわし、 $f(u, v), g(u, v)$ は局所的な反応をあらわす関数、 ∇^2 はラプラシアン(拡散項)である。通常、拡散は濃度のムラをならして安定化させる方向に働く。しかしチューリングが示したのは、むしろ拡散が系を不安定にし、空間的な構造(パターン)を引き起こすという逆説的な現象である。このような不安定性が成立するには、2つの成分の拡散係数 D_u, D_v に大きな差があり、反応項が特定の関係を満たす必要がある。

安定化・不安定化条件を以下に導出する。まず空間的に一様な平衡解(u_0, v_0)に対して、微小な摂動を考える。

$$\begin{aligned}u(x, t) &= u_0 + \tilde{u}(x, t), \\ v(x, t) &= v_0 + \tilde{v}(x, t)\end{aligned}\quad (2)$$

$f(u, v), g(u, v)$ を平衡点(u_0, v_0)まわりで1次のテイラー展開をすると

$$\begin{aligned}f(u_0 + \tilde{u}, v_0 + \tilde{v}) &\approx f(u_0, v_0) + f_u \tilde{u} + f_v \tilde{v}, \\ g(u_0 + \tilde{u}, v_0 + \tilde{v}) &\approx g(u_0, v_0) + g_u \tilde{u} + g_v \tilde{v},\end{aligned}\quad (3)$$

ここで偏微分項は以下の通りである。

$$\begin{aligned}f_u &= \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{u_0, v_0}, f_v = \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{u_0, v_0} \\ g_u &= \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{u_0, v_0}, g_v = \left. \frac{\partial g}{\partial v} \right|_{u_0, v_0}\end{aligned}\quad (4)$$

摂動に対する方程式は

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} &= D_u \nabla^2 \tilde{u} + f_u \tilde{u} + f_v \tilde{v}, \\ \frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} &= D_v \nabla^2 \tilde{v} + g_u \tilde{u} + g_v \tilde{v}\end{aligned}\quad (5)$$

となる。摂動解を以下のように平面波を用いて表す。

$$\tilde{u}(x, t) = \hat{u} e^{ikx + \lambda t}, \tilde{v}(x, t) = \hat{v} e^{ikx + \lambda t}\quad (6)$$

ここで k は波数、 λ は成長率である。これを摂動の式に代入し行列形式でまとめると

$$\lambda \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u - D_u k^2 & f_v \\ g_u & g_v - D_v k^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{pmatrix}\quad (7)$$

チューリング不安定とは、拡散のない場合つまり反応だけの場合は安定(成長率 λ の実部が負)だが、拡散がある場合不安定化する(成長率 λ の実部が正)というものである。これは拡散を除いたヤコビアン J として

$$J = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}\quad (8)$$

を用いて以下の4つの条件をすべて満たした時に実現される。

表1 チューリングパターン出現条件

No.	条件	意味
1	$Tr(J) = f_u + g_v < 0$	反応系単体で安定
2	$det(J) = f_u g_v - f_v g_u < 0$	
3	$D_u f_v g_u + D_v f_u g_v - D_u D_v \cdot Tr(J) \cdot k^2 > 0$	拡散ありで不安定
4	$\frac{D_v}{D_u} \gg 1$	

3. AFFrを用いたチューリングパターンの再現

AFFrの反応拡散計算機能を用いて、いくつかのチューリングパターンを再現計算した。いずれも 128×128 の2次元格子を用いて計算した。また拡散項は中心差分、時間積分はオイラー陰解法を用いた。周囲の境界はいずれも勾配0のノイマン条件である。

3.1. Keller-Segelモデル(キリンの斑模様)

Keller-Segelモデルは以下の式で表現される。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + \nabla \cdot \left[-\frac{cu}{1+u^2} \nabla v \right] - u(1-u)\quad (9)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + u - av$$

このモデルにおける不安定化条件は

$$2\sqrt{aD} < \frac{c}{2} - D - a\quad (10)$$

計算では $D_u = 1.0, D_v = 1.0, a = 0.01, c = 4$ を用いた。初期条件は $u|_{t_0} = 0.01 \cdot rand$ で擾乱を与えた。

$dt = 0.1$ である。結果を図 2 に示す。

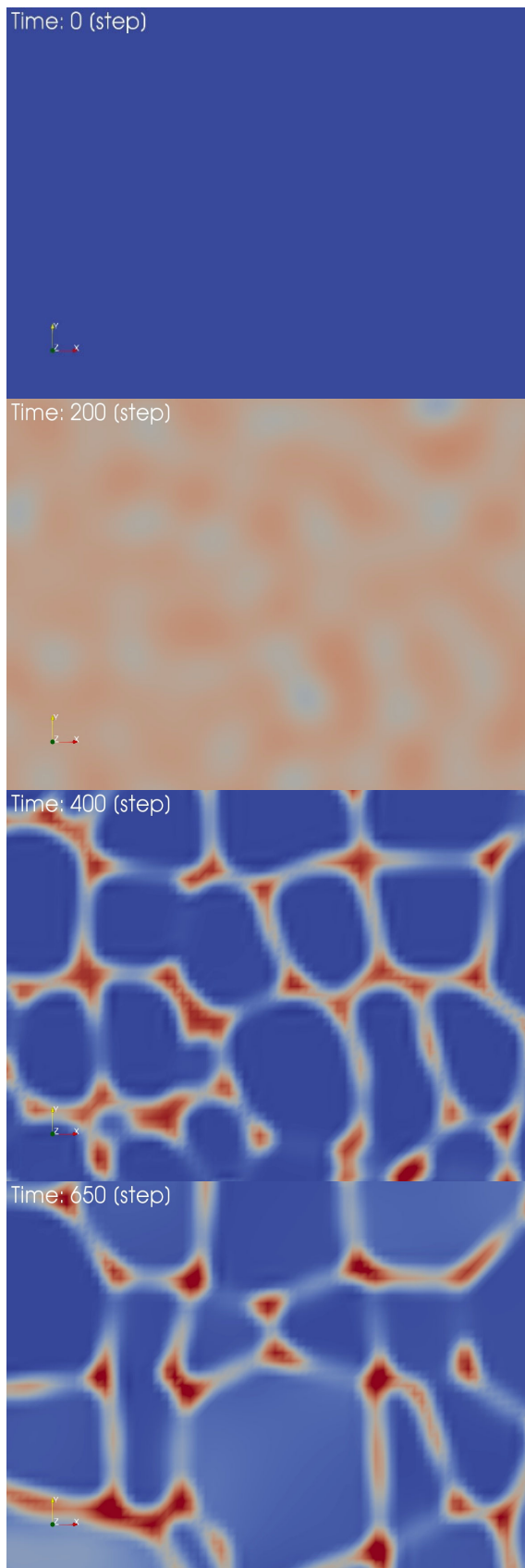


図 2 AFFr を用いて計算した Keller-Segel モデル分布図

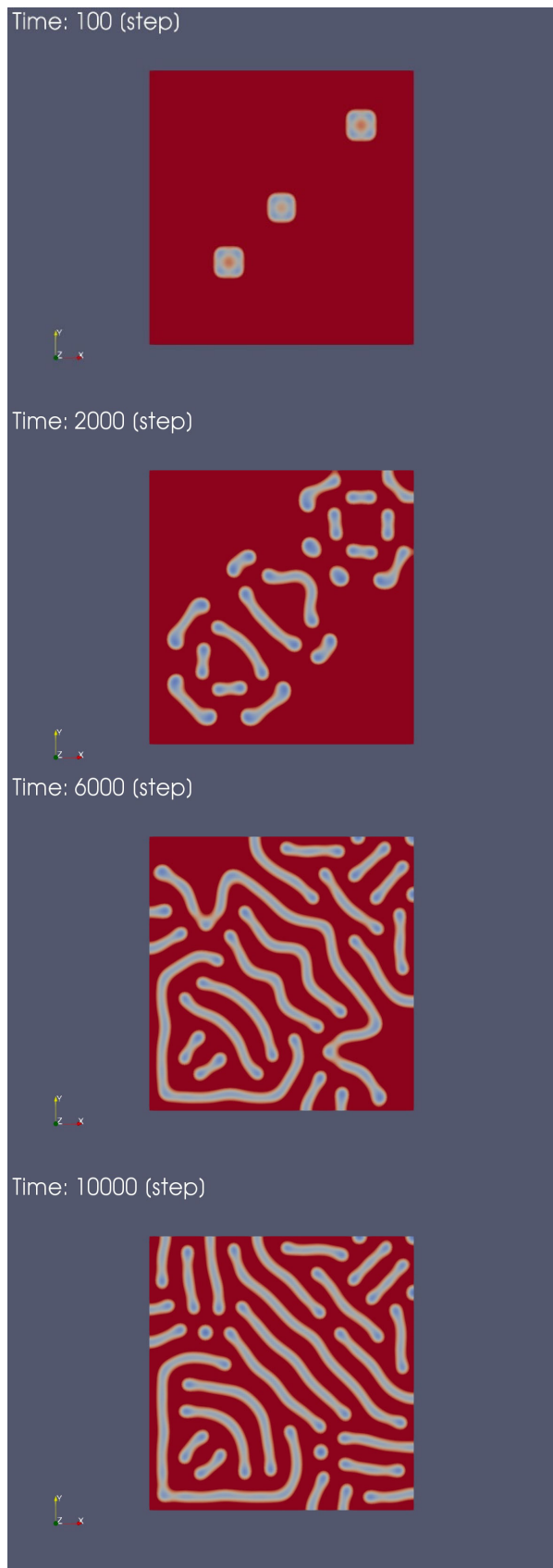


図 3 AFFr を用いて計算した Gray-Scott モデル分布図

3.2. Gray-Scott モデル (タテジマキンチャクダイ)

Gray-Scott モデルは以下の式で表現される。

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1 - u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F + k)v\end{aligned}\quad (11)$$

計算では $D_u = 0.2, D_v = 0.1, F = 0.04, k = 0.063$ を用いた。初期条件は $u|_{t_0} = 1, v|_{t_0} = 0$ で領域内 3 か所に擾乱を与えた。 $dt = 0.1$ である。結果を図 3 に示す。

4. 機械学習を用いたパターン再現

前章 3 で示したキリンの斑模様や縦じまキンチャクダイ模様は、いずれもパラメータを変更しながら複数回の計算を実行することで得られたものである。どのような模様が生み出されるかは、実際に反応拡散方程式のパラメータを変えて計算してみないとわからない。

近年では、特定の模様を得たい場合に、機械学習を用いて反応拡散系のパラメータ探索を自動化する手法が提案されている[5]。

これまで試行錯誤に頼っていたパラメータ調整を機械学習と組み合わせることで自動化できれば、所望のパターンを効率的に生成することが可能となり、応用の幅が広がると期待されている。

5. 半導体回路パターン

2023 年、湯浅らはグラファイト基板上に塩化ルテニウム（半導体）のナノ量子細線を作成する手法を発見した[6]。この量子線は約 1 ナノメートル（原子数個分）と極めて細いにもかかわらず、長さが 1 マイクロメートルを超える。これは従来の製造技術では困難とされていた 1 ナノメートルサイズの半導体・金属量子細線の作成を可能にする革新的な技術として期待されている。

特に注目すべきは、これらの構造が原子スケールにおけるチューリングパターンによって形成されている可能性がある点である。原子スケールでは量子力学的効果が支配的になるため、古典的

なチューリング方程式のみでこの現象を説明できるかは慎重な検討が必要である。しかし、反応拡散系がナノスケールでも機能する可能性は極めて示唆的であり、非常に興味深い。さらに、機械学習によるパラメータ自動最適化と組み合わせることで、シミュレーションによるナノスケール回路設計に新たな道が開けることが期待できる。

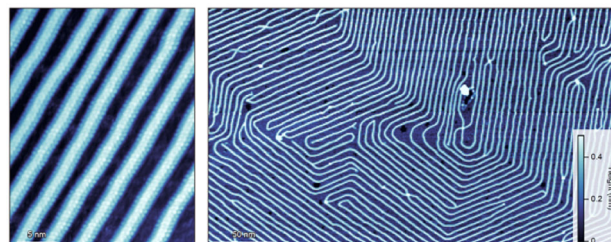


図 4 [6]より。グラファイト基板表面に整列した原子パターンの STM 像

6. まとめ

私は日頃、流体解析ソフトの開発を通じて、国内の製造設計分野への貢献を目指している。近年、流体解析技術は一定の成熟を迎え、次なる関心は機械学習の導入による設計支援の効率化に向かっている。しかし、その流れに対してどこか食傷気味であったのも事実である。

そうした中、約 100 年前の「キリンの斑模様」を巡る論争——物理学者による大胆な仮説と、生物学者との激しい応酬——は、分野を超えて自然現象を説明しようとする知的挑戦として、100 年後の自分にとっても非常に刺激的で新鮮に映った。

本稿で述べたように、反応拡散モデルによる模様形成の研究は、近年の数値解析や機械学習の進展と組み合わせることで、実用的な設計手法としての可能性を持ちつつある。特に、国家的な重点分野である半導体設計への応用については、専門外の立場からの素朴な提案に過ぎないかもしれないが、今後の議論の一助となれば幸いである。

参考文献

- [1] 岩波科学ライブラリー220「キリンの斑論争と寺田寅彦」
- [2] A. M. Turing, *The Chemical Basis of*

Morphogenesis, Philosophical Transactions of the Royal Society, 1952

- [3] S. Kondo & R. Asai, *A reaction-diffusion wave on the skin of the marine angel fish Pomacanthus*, Nature, 1995
- [4] 汎用流体解析ソフト Advance/FrontFlow/red の製品ページ
- [5] Differentiable Programming of Reaction-Diffusion Patterns Alexander Mordvintsev , Ettore Randazzo1 and Eyvind Niklasson Google, July 199
- [6] Growth of self-integrated atomic quantum wires and junctions of a Mott semiconductor. Tomoya Asaba, Lang Peng, Takahiro Ono, Satoru Akutagawa, Ibuki Tanaka, Hinako Murayama, Shota Suetsugu, Aleksandar Razpopov, Yuichi Kasahara, Takahito Terashima, Yuhki Kohsaka, Takasada Shibauchi, Masatoshi Ichikawa, Roser Valenti, Shin-ichi Sasa, and Yuji Matsuda *Science Advances*

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、それぞれの文献タイトルの下に記載した DOI から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。また、本雑誌に記載された文献は、発行後に、JDREAMIII（日本最大級の科学技術文献情報データベース）に登録されます。