

生物と体表パターン形成

東京大学理学部物理学科 B4 生物物理班 上杉佑人

2022年6月20日

はじめに

本記事は Physics Lab. 2022 生物物理班の解説記事の一つです。生物物理班は他にも多くの記事を執筆しています。いろんなトピックを扱っているので、ぜひ覗いてみてください！（[Physics Lab. 2022 生物物理班ページ](#)）

本記事を読む上で前提となる知識を説明します。扱う数学は理系の学部1年生レベルで、簡単な線形代数（固有値がわかればOK）と微分積分（ベクトル解析）がわかれば十分です。Fourier 展開を用いて議論を進めますが、とても基本的なことが分かれば十分です。また、拡散方程式を知っていることを前提としています。

なお、本記事は主に *Mathematical Biology* [1] [2] を参考に執筆しています。より詳しいことを知りたい方はこの本を読むことをオススメします。また、数式が苦手だという方は Murray による *How the Leopard Gets Its Spots* [3] が数式を用いずに表現されていて分かりやすいと思います。この記事のタネ本のタネにもなっているものなので、興味があれば覗いてみてください。

それから、生物物理班では『細胞の理論生物学』（東大出版会）を使ってゼミをしていたという経緯があります。生物物理の力学系を中心とした重要なトピックがわかりやすくまとめられていると思うので、オススメです*1。

今後の記事の更新について

本記事に誤植などがあった際には、Google Drive を用いて新版を公開します。必要に応じて https://drive.google.com/file/d/1ZAwESM6EBmkfhxdZHhEC3_Gz2qtu8C6-/view?usp=sharing を参照してください。

*1 まだ誤植が多いですが、いずれ改善されると思います。

0	注意書き	3
0.1	図・写真について	3
0.2	偏微分の略記	3
0.3	\equiv や $:=$ の記号	3
0.4	ベクトル	3
1	パターン形成は誰が担っているのか？	4
1.1	モルフォゲン	4
1.2	色素と色素細胞	4
2	反応拡散方程式	6
2.1	反応の時間発展方程式	6
2.2	拡散方程式	6
2.3	反応拡散方程式	6
2.4	無次元化された反応拡散方程式	6
3	パターン生成	10
3.1	両端固定条件とシグモイド型関数	10
3.2	Turing 不安定性	11
3.3	拡散がない場合に一様定常状態が安定である条件	12
3.4	拡散によって一様定常状態が不安定化する条件	12
3.5	例：Schnackenberg の反応	15
4	体表パターン形成	16
4.1	1次元の線分領域におけるパターン形成	16
4.2	2次元の長方形領域におけるパターン形成	17
4.3	パターン形成のシミュレーション	18
4.4	パターンの γ 依存性	21
4.5	脚・尾における体表パターン	23
4.6	生物に見られる体表模様	25

0 注意書き

0.1 図・写真について

本記事では生物の体表パターンを取り扱っており、生き物の写真を多く使う。これらの写真は、以下の動物園や団体もしくは個人にご協力をいただいで使用しているものである。

- よこはま動物園ズーラシア：<https://www.hama-midorinokyokai.or.jp/zoo/zoorasia/>
- 旭川市旭山動物園：<https://www.city.asahikawa.hokkaido.jp/asahiyamazoo/>
- のらぎ一く：<https://www.youtube.com/channel/UckFh6b8KYx9knB33AU89QrQ>
- 友人の荒武さん

当然、これらの写真の二次利用を禁ずる。

また、その他の図・写真の著作権は私に帰する。これらについても、常識の範囲外での使用を控えてほしい（基本的には直接相談してほしい）。

0.2 偏微分の略記

多変数関数の偏微分について、紛らわしくない場合に、

$$f_x(x, y) := \frac{\partial f(x, y)}{\partial x}, \quad f_y(x, y) := \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \quad (0.1)$$

などと略記することがある。

0.3 \equiv や $:=$ の記号

記号 \equiv は、関数 $f(x), g(x)$ が x について恒に等しいときに用いて、

$$f(x) \equiv g(x) \quad (0.2)$$

などと書くことにする。

また、 A を用いて B を定義するときに、

$$B := A \quad (0.3)$$

または、

$$A =: B \quad (0.4)$$

などと書くことにする。

0.4 ベクトル

ベクトルは太字で表す。たとえば、

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad (0.5)$$

といった具合である。

1 パターン形成は誰が担っているのか？

1.1 モルフォゲン

地球上の生物は実に多様な模様を体表に有している。シマウマ、ヒョウ (図 1^{*2})、キリン、蝶、ゼブラフィッシュなど、様々な生物種がパターンを生存戦略として使っている。^{*3}では、彼ら彼女ら^{*4}はどのようにして体表パターンを実現しているのだろうか。

これに対する一つの答えは、ある化学物質を用いて、その化学物質濃度を空間的に変化させておき、濃度が高いところでは別の体色を発現するというものである。このように、場所によって濃度を変化させ、何かしらの形態形成を支配する化学物質のことを、モルフォゲン^{*5}と呼ぶ。

このような対応を考えると、モルフォゲン濃度と実際の体表パターン分布をほぼ等価に考えることができる。すなわち、「ここが縞になっている」というのは「ここにモルフォゲン濃度の高い縞ができています」と読み替えて、そのようなモルフォゲン分布を考えれば良いということになる。このようなことを前提に、以下では体表でのモルフォゲン濃度の分布を考察することにする。我々の最終的な目的は、いかにモルフォゲンが複雑な濃度分布を実現するのか、そのメカニズムにモデルを与えるということである。^{*6}



図 1: チーターさん。よこはま動物園ズーラシア様のご厚意による。

1.2 色素と色素細胞

モルフォゲン濃度の高いところで何らかの細胞が発現して、色を出していると考えられるが、実際にはどのような細胞がその役割を担っているのだろうか。一般に生物は、(生物)色素によって特定の色を呈し、この色素は色素細胞と呼ばれる細胞によって生成される。モルフォゲン濃度の高いところで色素細胞が発現し、色素細胞によって色素が生成され、その部分だけ特定の色を呈するというのである。人間でこのような様式が典型的に見られるのはホクロである。ホクロのあるところでは、モルフォゲン濃度が部分的に高くなり、メラノサイト (色素細胞) が多く発現することで、メラニン (色素) が多く生成されて黒く見えている。生き物の体表模様を考える際も一般には同様である。したがって、モルフォゲンの濃度分布を考えれば良いことになる。

^{*2} 本記事では、生き物たちに敬意を込めて、キャプションでは敬称をつけることにする。

^{*3} 環境のパターンと同じ模様を体表に映し出すことによって、捕食者から逃れる可能性が格段に上がることは言うまでもないだろう。

^{*4} 性別を持たない生物の存在を否定しているわけではない。

^{*5} 形態形成は英語で morphogenesis という。morphogen は「形態形成を担うもの」という意味になり、特定の物質を表すわけではないことに注意。

^{*6} ここでは、動物の体表パターンがどのような化学物質によって担われているといったことや、詳細な化学反応に立ち入らない。あくまで、パターンを再現しうる単純なモデルを導入し、考察するという立場をとる。私たちが興味をもっているのは生物や化学ではなく物理である。「いろんなものにあてはまる」ということ (「普遍性」という) が物理屋さんの好物であって、物理屋さん見習いの私の好物でもある。

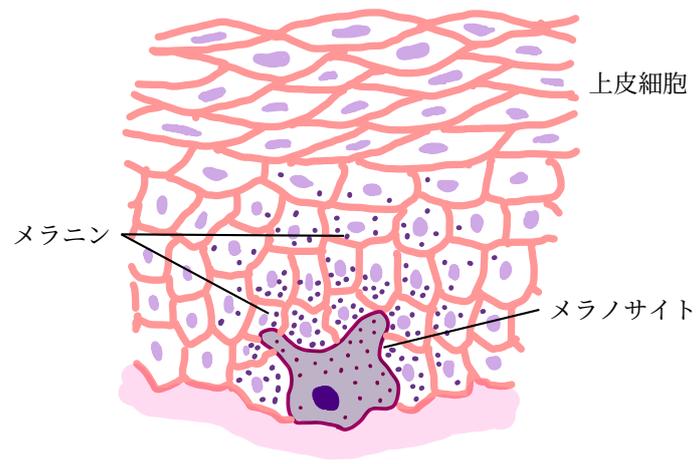


図2: メラノサイト (色素細胞) とメラニン (色素). 彼女が描いてくれた.

2 反応拡散方程式

2.1 反応の時間発展方程式

いま、ある化学反応を考える上で出てくる n 種類の物質 $i = 1, 2, \dots, n$ とその濃度 u_i を考える。これらの物質の反応速度を

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = f_i(u_1, u_2, \dots, u_n), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.6)$$

と関数 f_i ($i = 1, 2, \dots, n$) を用いて書くことにする。ベクトルを用いて簡略に書くと、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad (2.7)$$

とできる。たとえば、



のような化学反応系に対しては、適当に反応速度定数を定めて

$$\begin{cases} \frac{\partial u_A}{\partial t} = f_A(u_A, u_B, u_C) = k_{-1}u_C^2, \\ \frac{\partial u_B}{\partial t} = f_B(u_A, u_B, u_C) = k_{-1}u_C^2, \\ \frac{\partial u_C}{\partial t} = f_C(u_A, u_B, u_C) = k_1u_Au_B \end{cases} \quad (2.9)$$

と書くことができる。このように定式化しておけば、定常状態などの定量的な議論ができる。

2.2 拡散方程式

n 種類の物質の拡散方程式は

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 u_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.10)$$

と書ける。あるいは、ベクトルを用いてもっと簡潔に、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.11)$$

と書ける。ここで D は各物質の拡散係数を対角成分に持つ対角行列である：

$$D = \begin{bmatrix} D_1 & & & \\ & D_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & D_n \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

2.3 反応拡散方程式

反応を含む場合の拡散方程式は、

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{f}(\mathbf{u}) + D \nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.13)$$

と書ける。これを反応拡散方程式という。見た通り、第 1 項が反応を表す反応項、第 2 項が拡散を表す拡散項である。この反応拡散方程式を用いて、パターンが生じる条件や実際に生じるパターンについて考えることにする。

2.4 無次元化された反応拡散方程式

以下では 2 種の物質による反応系に着目して議論をする。2 種の物質と対応する条件を与えるだけでパターンが生じるためである。実際のパターン形成メカニズムが 2 種の物質のみで生じることを述べているわけではないことに注意されたい。

2 種物質 A, B それぞれの濃度を A, B とする. 反応拡散方程式は,

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = F(A, B) + D_A \nabla^2 A, \\ \frac{\partial B}{\partial t} = G(A, B) + D_B \nabla^2 B \end{cases} \quad (2.14)$$

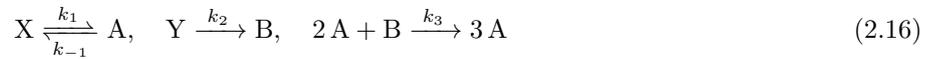
と書ける. ただし D_A, D_B はそれぞれ物質 A, B の拡散係数である. この反応拡散方程式は, それぞれの変数を適当に無次元化することで次のように書くことができる.

無次元化された反応拡散方程式 (2 種物質)

u, v の反応拡散方程式は,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v. \end{cases} \quad (2.15)$$

例えば, Schnackenberg の反応系 [4]



を考える. X, Y は常に一定であるとする. 反応拡散方程式は,

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = F(A, B) + D_A \nabla^2 A, \\ \frac{\partial B}{\partial t} = G(A, B) + D_B \nabla^2 B \end{cases}, \quad (2.17)$$

$$F(A, B) = k_1 X - k_{-1} A + k_3 A^2 B, \quad G(A, B) = k_2 Y - k_3 A^2 B \quad (2.18)$$

と書ける. X, Y が定数であることに注意されたい. この反応拡散方程式を無次元化したい.

まずは位置の変数 \mathbf{r} を無次元化するために, 系の典型的な長さのスケールを L として, $\boldsymbol{\xi} := \mathbf{r}/L$ としておく. このとき反応拡散方程式は

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = F(A, B) + \frac{D_A}{L^2} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 A, \\ \frac{\partial B}{\partial t} = G(A, B) + \frac{D_B}{L^2} \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 B \end{cases} \quad (2.19)$$

のように変更を受ける. $\boldsymbol{\xi}$ による微分を $\nabla_{\boldsymbol{\xi}}$ のように明示した. 簡単な式変形によって,

$$\begin{cases} \frac{L^2}{D_A} \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{L^2}{D_A} F(A, B) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 A, \\ \frac{L^2}{D_B} \frac{\partial B}{\partial t} = \frac{L^2}{D_B} G(A, B) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 B \end{cases} \quad (2.20)$$

とできて, 左辺と右辺第 2 項の次元を確認すれば, $L^2/D_A, L^2/D_B$ が時間の次元を持つことがわかる. この気づきから

$$\tau := \frac{D_A}{L^2} t, \quad d := \frac{D_B}{D_A} \quad (2.21)$$

と無次元化すれば, 反応拡散方程式は

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} F(A, B) + \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 A, \\ \frac{\partial B}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} G(A, B) + d \nabla_{\boldsymbol{\xi}}^2 B \end{cases} \quad (2.22)$$

と書ける．ここまではどのような反応拡散方程式でも適用できる．あとは F, G の部分を無次元化すれば良い． A, B の次元を抜き出して $A = A_0 u, B = B_0 v$ となるように A_0, B_0 を定めたい．これを用いて,

$$\begin{cases} A_0 \frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} (k_1 X - k_{-1} A_0 u + k_3 A_0^2 B_0 u^2 v) + A_0 \nabla_{\xi}^2 u, \\ B_0 \frac{\partial v}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} (k_2 Y - k_3 A_0^2 B_0 u^2 v) + d B_0 \nabla_{\xi}^2 v \end{cases} \quad (2.23)$$

とできて、全体をそれぞれ A_0, B_0 で割れば,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} \left(\frac{k_1 X}{A_0} - k_{-1} u + k_3 A_0 B_0 u^2 v \right) + \nabla_{\xi}^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} = \frac{L^2}{D_A} \left(\frac{k_2 Y}{B_0} - k_3 A_0^2 u^2 v \right) + d \nabla_{\xi}^2 v \end{cases} \quad (2.24)$$

となる．この時点で、各項が無次元量にならなくてはならない．第 1 式右辺の $k_{-1} u$ の項は A_0, B_0 を含まない u の 1 次式になっていて、これ以上何かを調節して無次元化するといったことはできないので,

$$\gamma := \frac{L^2 k_{-1}}{D_A} \quad (2.25)$$

という無次元量を使って,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau} = \gamma \left(\frac{k_1 X}{k_{-1} A_0} - u + \frac{k_3 A_0 B_0}{k_{-1}} u^2 v \right) + \nabla_{\xi}^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} = \gamma \left(\frac{k_2 Y}{k_{-1} B_0} - \frac{k_3 A_0^2}{k_{-1}} u^2 v \right) + d \nabla_{\xi}^2 v \end{cases} \quad (2.26)$$

と書き換えておく．第 2 式右辺の項 $u^2 v$ の係数は B_0 を含まず A_0 のみを含む形になっているので、これが係数 1 になるように

$$A_0 := \sqrt{\frac{k_{-1}}{k_3}} \quad (2.27)$$

と定める．さらに第 1 式右辺の項 $u^2 v$ の係数も 1 になるように B_0 を設定できて,

$$B_0 := \sqrt{\frac{k_{-1}}{k_3}} \quad (2.28)$$

と、 A_0 と同じになる．あとは第 1 式、第 2 式それぞれの定数項を $\gamma a, \gamma b$ と定めれば無次元化が完了する．結局,

$$\begin{aligned} \xi &:= \frac{r}{L}, \quad \tau := \frac{D_A}{L^2} t, \quad d := \frac{D_B}{D_A}, \quad \gamma := \frac{L^2 k_{-1}}{D_A} \\ u &:= \sqrt{\frac{k_3}{k_{-1}}} A, \quad v := \sqrt{\frac{k_3}{k_{-1}}} B, \quad a := \frac{k_2 Y}{k_{-1}} \sqrt{\frac{k_3}{k_{-1}}}, \quad b := \frac{k_1 X}{k_{-1}} \sqrt{\frac{k_3}{k_{-1}}} \end{aligned} \quad (2.29)$$

なる変数変換（無次元化）によって,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau} = \gamma (a - u + u^2 v) + \nabla_{\xi}^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial \tau} = \gamma (b - u^2 v) + d \nabla_{\xi}^2 v \end{cases} \quad (2.30)$$

と書き換えることができる．これ以降の議論ではこのような無次元化された反応拡散方程式を考えるが、簡単のために

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma (a - u + u^2 v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma (b - u^2 v) + d \nabla^2 v \end{cases} \quad (2.31)$$

と、 x, t が無次元化された量だと思って書くことにする。元の物理量とこれらの無次元量は定数倍の違いしかなく、これから考える議論においてそれらは式を煩雑に見せるだけで本質ではないので、このように本質を抜き出した反応拡散方程式を考える。

さて、反応拡散方程式 (2.31) で残ったパラメータ d, γ は重要で、パターンが生じる条件や生じるパターンの様相に大きく関係してくる。 d は拡散係数比で、2物質の拡散の速さを比として表現しているものである。したがって $d \gg 1$ であれば (B に対して) A の拡散が非常に速いことを意味し、逆に $d \ll 1$ であれば (A に対して) B の拡散が非常に速いことを意味する。

また、 γ は拡散と反応のどちらが優位であるかを示すパラメータだと解釈できる。 $\gamma \gg 1$ であれば (拡散項に対して) 反応項が主要で、 $\gamma \ll 1$ であれば (反応項) に対して拡散項が主要であることを意味する。さらに $\sqrt{\gamma}$ は系のサイズを表すパラメータであると解釈することもできる。「拡散が速い」ことは「系のサイズが小さい」とみなすこともできて (逆も然り)、対応がすぐにイメージできるはずである。

3 パターン生成

3.1 両端固定条件とシグモイド型関数

パターン生成の込み入った議論に入る前に、最も単純だと思われるパターン生成について考える。

1次元系 $(0, p)$ で、境界条件 $u(x=0, t) \equiv u_1, u(x=p, t) \equiv u_2$ を考える。現実的には、 $x=0, p$ に何かしら特別な細胞がいて、その細胞によって濃度 u が一定に保たれていると考えれば良い。このような状況で反応のない拡散方程式を考える：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u(x=0, t) \equiv u_1, \quad u(x=p, t) \equiv u_2. \quad (3.32)$$

定常状態 $u(x, t) \equiv u_0(x)$ を考えると、

$$\frac{d^2 u_0}{dx^2} = 0, \quad u(x=0, t) \equiv u_1, \quad u(x=p, t) \equiv u_2 \quad (3.33)$$

となり、この微分方程式の一般解は x についての1次式で与えられ、境界条件から

$$u_0(x) = -\frac{u_1 - u_2}{p}x + u_1 \quad (3.34)$$

と解ける。すなわち、両端固定の境界条件を課して拡散方程式を解くと線形な濃度勾配が得られる。

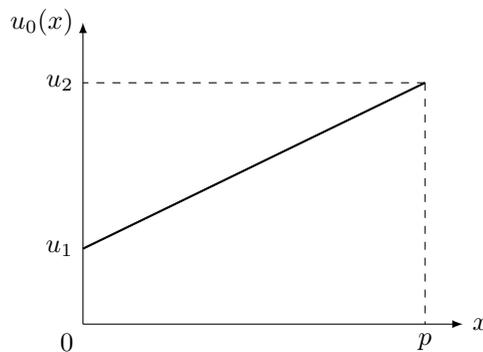


図 3: 線形な濃度勾配 $u_0(x)$.

このような線形な濃度勾配は、位置情報を与える意味で非常に重要な役割を果たす。たとえば、 $u_0(x) = x$ ($0 \leq x \leq 1$) といった濃度勾配があったときに、 $u_0(x) \geq 1/2$ をみたすときのみ発現する細胞があれば、 $x = 1/2$ を境目に発現領域と非発現領域を形成できる。個々の細胞は全体像を見ているわけではなく、「濃度が $1/2$ を超えたら黒を発現させるぞ」と準備しておくだけでパターンを形成することができるのである。

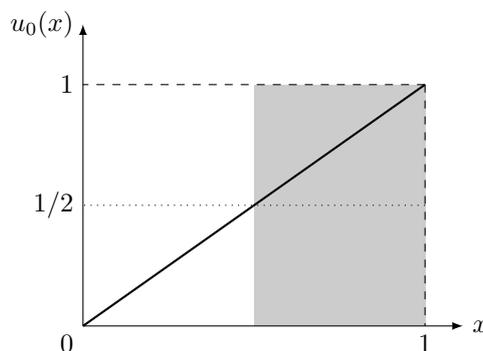


図 4: 線形な濃度勾配 $u_0(x) = x$ に対して、 $u_0(x) \geq 1/2$ をみたす領域でのみ発現したとき。

では、このような閾値的なオンオフはどのように実現されているのだろうか。実は、物質 X が物質 Y に複数個結合・解離するような化学反応系を考えると、Hill の式と呼ばれるシグモイド型の関数で濃度を与えるような状況を容易に考

えられる。シグモイド型の関数というのは閾值的に立ち上がりを見せる関数のことで、特にここでは次のような関数である：

$$\eta(\xi) = \frac{\xi^n}{a^n + \xi^n}, \quad n \in \mathbb{Z}_{\geq 1}. \quad (3.35)$$

このとき、 a は定数で、 $\xi = a$ で $\eta(\xi)$ が閾值的に立ち上がる。このような反応機構が備わっていれば、閾值的なモルフォゲンのオンオフは容易に可能である。

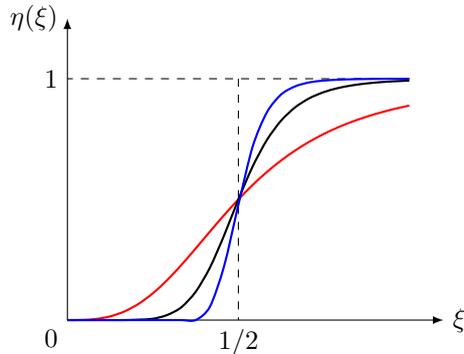


図 5: $a = 1/2$ のシグモイド型関数 $\eta(\xi)$. 赤が $n = 3$, 黒が $n = 7$, 青が $n = 12$ のシグモイド型曲線を表す. n が大きくなると急峻な関数となる.

このような閾值的なオンオフが備わっていることを前提に、以下ではある濃度値を境目に完全 2 値の発現・非発現^{*7}を考えることにする。

3.2 Turing 不安定性

ここでは、一般にどのような条件でパターンが生成されるのか議論する。拡散を考えない場合、濃度の時間発展方程式は $u_t = \gamma f(u, v)$ などと書けて、その定常解は空間に依存しない一様な解を与える。パターン生成が、拡散によって一様定常状態が不安定化した際に生じるものとする。これを **Turing 不安定性** という。この条件によって生成されるパターンを **Turing パターン** と呼ぶ。

Turing 不安定性 (拡散誘導不安定性)

拡散がなければ一様定常状態が安定であるような状況で、拡散が起きると一様定常状態が不安定になるという性質。

以下ではその条件を考えることにする。

次のような 2 種物質反応系の反応拡散方程式を考える：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v. \end{cases} \quad (3.36)$$

加えて、考えている系の領域 B において、次のようなゼロフラックス境界条件を課す：

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} = 0 \quad \text{for } \mathbf{r} \in \partial B, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

ただし、 ∂B は領域 B の境界、 \mathbf{n} は境界 ∂B の法線ベクトルである。この境界条件は「領域の端っこで物質の出入りがないですよ」ということを意味しており、閉じた系に対して妥当な境界条件になっている。

^{*7} これはパターン形成 (特に体表パターン) の文脈で妥当な仮定である。多くの生き物は、濃淡のあるパターンではなく、「ここは黒、ここは黄色」という感じにメリハリのあるパターンを有する。

3.3 拡散がない場合に一様定常状態が安定である条件

まずは、拡散がない場合の一様定常状態を与えることにする。一様定常状態 $u = u_0, v = v_0$ は定数なので、式 (3.36) の左辺や、右辺第 2 項は落ちて、次のような連立方程式を得ることになる：

$$\begin{cases} f(u, v) = 0, \\ g(u, v) = 0. \end{cases} \quad (3.38)$$

この連立方程式が解けているものとして、その解 u_0, v_0 が安定である条件を調べる。

微小摂動 $\mathbf{w} := \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$ に対して、反応拡散方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \gamma A \mathbf{w}, \quad A = \begin{bmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{bmatrix}_{(u_0, v_0)} \quad (3.39)$$

と書ける。A は Jacobian と呼ばれる行列である。この固有解を $\mathbf{w} = \mathbf{w}_0 e^{\lambda t}$ とすると、固有方程式は、

$$\begin{aligned} 0 &= |\gamma A - \lambda I| = \begin{vmatrix} \gamma f_u - \lambda & \gamma f_v \\ \gamma g_u & \gamma g_v - \lambda \end{vmatrix} \\ 0 &= \lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) \\ 0 &= \lambda^2 - \gamma(\text{tr } A)\lambda + \gamma^2|A| \\ \therefore \lambda_1, \lambda_2 &= \frac{\gamma}{2} \left(\text{tr } A \pm \sqrt{(\text{tr } A)^2 - 4|A|} \right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

いま考えている一様定常解 \mathbf{u}_0 が安定であるためには、 $\lambda_1, \lambda_2 < 0$ であることが必要である。したがって、

$$\begin{cases} \text{tr } A = f_u + g_v < 0, \\ |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

3.4 拡散によって一様定常状態が不安定化する条件

次に、条件式 (3.41) が成り立っているときについて、拡散を考えると一様定常解 \mathbf{u}_0 が不安定になる条件を考える。摂動 $\mathbf{w} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_0$ に対して、反応拡散方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \gamma A \mathbf{w} + D \nabla^2 \mathbf{w}, \quad A = \begin{bmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{bmatrix}_{(u_0, v_0)}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & \\ & d \end{bmatrix}. \quad (3.42)$$

と書ける。 $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t)$ を波数 k の固有関数 $\mathbf{W}_k(\mathbf{r})$ で Fourier 展開する：

$$\nabla^2 \mathbf{W}_k + k^2 \mathbf{W}_k = \mathbf{0}, \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{W}_k = \mathbf{0} \quad \text{for } \mathbf{r} \in \partial B. \quad (3.43)$$

ここで、固有関数 \mathbf{W}_k に、 \mathbf{w} がみたすべき境界条件をそのまま適用している。最終的に \mathbf{w} を \mathbf{W}_k の線形結合で書くためである。このような境界条件をみたす固有関数は、例えば 1 次元領域 $0 \leq x \leq a$ の場合には、

$$\mathbf{W}_k(x) = \mathbf{W}_0 \cos(kx), \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (3.44)$$

のように具体的に書ける。この関数が微分方程式と境界条件の式 (3.43) をみたしていることを確認してみると良いだろう。

さて、このように導入した固有関数 $\mathbf{W}_k(\mathbf{r})$ を用いて、 $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t)$ は

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k \mathbf{W}_k(\mathbf{r}) e^{\lambda t} \quad (3.45)$$

のように Fourier 展開できる。 c_k は展開係数である。これを反応拡散方程式 (3.42) に代入して λ を求めたい。代入すると、

$$\lambda \mathbf{W}_k = \gamma A \mathbf{W}_k - k^2 D \mathbf{W}_k. \quad (3.46)$$

したがって固有方程式は,

$$|\gamma A - k^2 D - \lambda I| = 0. \quad (3.47)$$

成分を使って λ の 2 次方程式にすると,

$$\begin{aligned} F(\lambda) &:= \lambda^2 + \{(1+d)k^2 - \gamma \operatorname{tr} A\}\lambda + h(k^2) = 0, \\ h(k^2) &:= dk^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2|A|. \end{aligned} \quad (3.48)$$

これを解いて $\lambda(k)$ を得る.

定常状態が不安定であるためには, ある波数 k に対して $\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$ であることが必要十分である. このような k が 1 つでもあれば $e^{\lambda t}$ が成長し, 摂動に対して安定でなくなる.

$\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$ の必要十分条件を考える. 式 (3.41) より $\operatorname{tr} A < 0$ であったので, $F(\lambda)$ の λ の係数は正だとわかる:

$$(1+d)k^2 - \gamma \operatorname{tr} A > 0. \quad (3.49)$$

あとは, λ が実数であるか実数でないかで分けて考えれば良い.

- (i) λ が実数である場合: $\lambda > 0$ であれば良いので, 「2 次関数が実数解を持ち, そのうち少なくとも 1 つが正である条件」を考えれば良く, $F(0) < 0$ と読み替えられる. すなわち, $h(k^2) < 0$ でなければならない.
- (ii) λ が実数でない場合: $\operatorname{Re} \lambda > 0$ であればよく, 解の公式を使えば,

$$\lambda = \frac{-\{(1+d)k^2 - \gamma \operatorname{tr} A\} \pm i\sqrt{-D}}{2h(k^2)} \quad (3.50)$$

となるので,

$$\operatorname{Re} \lambda = \frac{-\{(1+d)k^2 - \gamma \operatorname{tr} A\}}{2h(k^2)} > 0 \quad (3.51)$$

となり, こちらも $h(k^2) < 0$ が必要となる. したがってこちらの場合も実数解に帰着される.

結局, $\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$ の必要十分条件は,

$$h(k^2) = dk^4 - \gamma(df_u + g_v)k^2 + \gamma^2|A| < 0 \quad (3.52)$$

であるとわかった. ここで式 (3.41) から $|A| > 0$ であり, $h(k^2) < 0$ となりうるのは,

$$df_u + g_v > 0 \quad (3.53)$$

となるときのみである. 式 (3.41) とあわせると,

$$\begin{cases} \operatorname{tr} A = f_u + g_v < 0, \\ |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0, \\ df_u + g_v > 0. \end{cases} \quad (3.54)$$

となる. 第 1 式と第 3 式について, $d > 0$ であることから f_u, g_v が異符号でなければならないことがわかる:

$$f_u g_v < 0. \quad (3.55)$$

具体的に, $d > 1$ であれば $f_u > 0, g_v < 0$, $d < 1$ であれば $f_u < 0, g_v > 0$ である. 少しはじめに戻って, f, g の取り方, もっといえば物質 A と物質 B の順序には何の制約もつけなかったことを思い出して欲しい. ここで $d > 1$ であるようなものを選ぶことにする. すなわち $D_A < D_B$ で, 拡散の遅いものを A に, 拡散の速いものを B に選ぶことにする. こうすれば $d > 1, f_u > 0, g_v < 0$ と話を 1 通りにおさめることができ, スッキリする.

$df_u + g_v > 0$ の条件を課したもとの, 式 (3.52) の不等式 $h(k^2) < 0$ が成り立つ条件を考える. ある k に対して $\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$ であれば不安定になったのだということを思い出して欲しい. $h(k^2) < 0$ をみたら k が存在すれば良いので, $h(k^2)$ の最小値を考えれば十分である. $h(k^2)$ の最小値 h_{\min} は,

$$h_{\min} = h(k_m^2) = \gamma^2 \left[|A| - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right], \quad k_m^2 = \gamma \frac{df_u + g_v}{2d}. \quad (3.56)$$

したがって、 $h(k^2) < 0$ なる k が存在する条件は、

$$h(k_m^2) < 0 \iff |A| < \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}. \quad (3.57)$$

ちょうど $h_{\min} = 0$ となるとき、

$$|A| = \frac{(d_c f_u + g_v)^2}{4d_c} \quad (3.58)$$

となって、これを解いて得られる d_c に対して、 $d = d_c$ を境目にいま考えている定常状態が拡散によって不安定化するかどうか分かる。具体的には、 $d > 1$ の解 d_c に対して $1 < d < d_c$ であれば不安定化せず、 $d > d_c$ で不安定化する。

対応する臨界波数は、

$$k_c^2 = \gamma \frac{d_c f_u + g_v}{2d_c} = \gamma \sqrt{\frac{|A|}{d_c}}. \quad (3.59)$$

最後に、 $\text{Re } \lambda(k) > 0$ となる波数 k の範囲を考える。 $h(k^2) < 0$ であれば必ず $\lambda(k) > 0$ なる解が一つは存在する。 $h(k^2) = 0$ の解 $k = k_1, k_2$ ($0 < k_1 < k_2$) は、

$$k_1^2, k_2^2 = \frac{\gamma}{2d} \left[(df_u + g_v) \pm \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|} \right]. \quad (3.60)$$

したがって $\text{Re } \lambda(k) > 0$ となる k の範囲は、

$$k_1 < k < k_2. \quad (3.61)$$

境界条件を課した反応拡散方程式：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v. \end{cases} \quad (3.36)$$

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} = 0 \quad \text{for } \mathbf{r} \in \partial B, \quad \mathbf{u} = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

拡散がない場合に一様定常解 \mathbf{u}_0 が安定である条件：

$$\begin{cases} \text{tr } A = f_u + g_v < 0, \\ |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0. \end{cases} \quad (3.41)$$

拡散を考えると一様定常解 \mathbf{u}_0 が不安定化する条件：

$$\begin{cases} df_u + g_v > 0, \\ |A| < \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}. \end{cases} \quad (3.53), (3.57)$$

これらから、 f_u, g_v は異符号であることが要請される：

$$f_u g_v < 0. \quad (3.55)$$

式 (3.57) は臨界波数 d_c を使って次のように言い換えられる：

$$d > d_c > 1. \quad (3.62)$$

不安定化する波数 $k (> 0)$ の範囲：

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2, \quad (3.61)$$

$$k_1^2, k_2^2 = \frac{\gamma}{2d} \left[(df_u + g_v) \pm \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|} \right]. \quad (3.60)$$

3.5 例：Schnackenberg の反応

先ほど議論した Schnackenberg の反応 [4] を使って、いままで議論した Turing 不安定性が具体的にどのように適用できるのかを例示する。扱う反応拡散方程式は、

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v, \end{cases} \quad (3.63)$$

$$f(u, v) := a - u + u^2 v, \quad g(u, v) := b - uv^2. \quad (3.64)$$

ただし $\gamma > 0, d > 0, a, b > 0$ である。一様定常状態は、 $f(u, v) = 0, g(u, v) = 0$ を解くことによって、

$$u_0 = a + b > 0, \quad v_0 = \frac{b}{(a + b)^2} > 0. \quad (3.65)$$

$(u, v) = (u_0, v_0)$ における偏微分係数を計算する：

$$\begin{aligned} f_u &= \frac{b - a}{a + b}, & f_v &= (a + b)^2, \\ g_u &= \frac{-2b}{a + b}, & g_v &= -(a + b)^2. \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$|A| = f_u g_v - f_v g_u = (a + b)^2. \quad (3.67)$$

ここで、式 (3.55) すなわち f_u, g_v が異符号でなければならなかったため、 $b > a$ が必要である。Turing 不安定の条件

$$\begin{cases} \text{tr } A = f_u + g_v < 0, \\ |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0, \\ df_u + g_v > 0, \\ (df_u + g_v)^2 - 4d|A| > 0 \end{cases} \quad (3.68)$$

に計算した偏微分係数を代入して整理すると、

$$\begin{cases} b - a < (a + b)^3, \\ (a + b)^2 > 0, \\ d(b - a) > (a + b)^3, \\ \{d(b - a) - (a + b)^3\}^2 > 4d(a + b)^4. \end{cases} \quad (3.69)$$

(a, b, d) パラメータ空間上におけるこの領域をパターン形成領域という。

4 体表パターン形成

ここからは具体的にどのようなパターンが形成されるのかについて考える。すなわち、パターン形成領域にパラメータが入っている場合に、どのような不安定化が生じるのかを考える。

まず初めに、非常に単純な領域におけるパターン形成を考えてパターン形成全体の描像を掴み、その後に具体的な体表を想定しながら体表パターン形成を理解することにする。

4.1 1次元の線分領域におけるパターン形成

まず初めに、最も簡単な1次元系 $x \in (0, p)$ を考える：

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}, \end{cases} \quad (4.70)$$

波数 k による Fourier 展開から従う方程式は、

$$\frac{\partial^2 \mathbf{W}}{\partial x^2} + k^2 \mathbf{W} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad \text{for } x = 0, p \quad (4.71)$$

で、これをみたす固有関数は、

$$\mathbf{W}_n(x) = \mathbf{A}_n \cos\left(\frac{n\pi x}{p}\right), \quad k = \frac{n\pi}{p} \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.72)$$

この固有関数で摂動を展開したときに、不安定化する波数 k の条件は、式 (3.60) と式 (3.61) より、

$$\gamma L(a, b, d) = k_1^2 < k^2 = \left(\frac{n\pi}{p}\right)^2 < k_2^2 = \gamma M(a, b, d) \quad (4.73)$$

と書ける。 L, M は式 (3.60) の γ 依存性を除いた部分で、具体的な表式は省略してある。ここで重要なのは、 γ に対して波数 k の許される範囲が変化することである。 k は離散的なので、 γ が非常に小さいときにはこの条件をみたす k は生じず、パターンが生成されないことを意味する。この γ 依存性について後ほど議論する。

具体的に不安定化の様子を考える。1次元のとき、不等式 (4.73) をみたす波数が $n = 1$ に対応するもののみであった場合（すなわちそのような γ であった場合）、

$$\mathbf{w}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{w}_0 c_n \cos\left(\frac{n\pi x}{p}\right) e^{\lambda(n\pi/p)t} \quad (4.74)$$

において t が十分大きなきを考えると、 $n = 1$ の摂動のみが成長し、 u のみに着目して次のように書ける：

$$u(x, t) = u_0 + \epsilon_0 \cos\left(\frac{\pi x}{p}\right) e^{\lambda(\pi/p)t}. \quad (4.75)$$

図 6 に分布の様子を示す。領域を 2 分割するようなパターンを生じる。

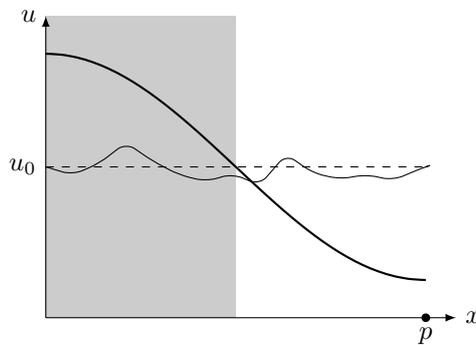


図 6: 1次元で波数 $k = \pi/p$ のみが不安定化するときのモルフォゲン分布 $u(x)$ 。ゆらぎの波数 π/p 成分が成長し、閾値 u_0 を境に発現領域（グレーで塗りつぶしてある）と非発現領域が生じる。

この設定で γ を 4 倍にするとどうなるだろうか. 不安定化する波数 k は, 先ほどは $n = 1$ に対応する波数が不安定化していたので, 式 (4.73) の辺々を 4 倍して

$$4\gamma L(a, b, d) = (2k_1)^2 < (2k)^2 = \left(\frac{2n\pi}{p}\right)^2 < (2k_2)^2 = 4\gamma M(a, b, d) \quad (4.76)$$

とすれば, 今度は $n = 2$ に対応する $k = 2\pi/p$ が不安定化することがわかる (図 7).^{*8}

$$u(x, t) = u_0 + \epsilon_0 e^{\lambda(2\pi/p)t} \cos\left(\frac{2\pi x}{p}\right). \quad (4.77)$$

γ をもっと大きくして, $k = 10\pi/p$ のみが不安定化している場合も同様である (図 8).

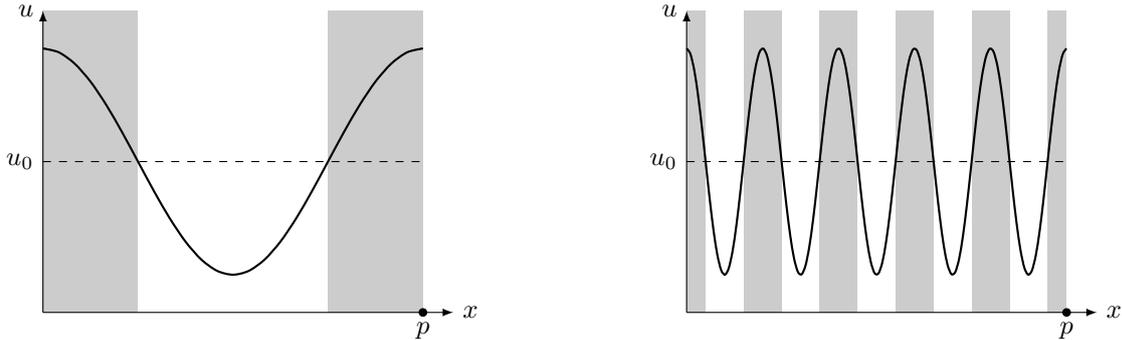


図 7: γ を 4 倍にして波数 $k = 2\pi/p$ のみが不安定化して 図 8: γ を 100 倍にして波数 $k = 10\pi/p$ のみが不安定化しているときのモルフォゲン分布 u .

4.2 2次元の長方形領域におけるパターン形成

2次元の場合も 1次元の場合と同様に考えて良い. 境界条件として最もシンプルな長方形領域 $(x, y) \in (0, p) \times (0, q)$ を考える. Fourier 展開ののちの方程式は,

$$\nabla^2 \mathbf{W} + k^2 \mathbf{W} = \mathbf{0}, \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{W} = \mathbf{0} \quad \text{for } \mathbf{r} \in \partial B. \quad (4.78)$$

これをみたく固有関数 \mathbf{W} は,

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{n,m}(x, y) &= \mathbf{A}_{n,m} \cos\left(\frac{n\pi x}{p}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{q}\right), \\ k^2 &= \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2}\right) \quad (n, m = 0, 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (4.79)$$

不安定化する波数領域は,

$$\gamma L(a, b, d) = k_1^2 < k^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{p^2} + \frac{m^2}{q^2}\right) < k_2^2 = \gamma M(a, b, d) \quad (4.80)$$

となり, 1次元系と似たような不等式を得る.

さて, 2次元の場合にはどのような不安定化が起きるだろうか. これは不等式 (4.80) をみたく波数が不安定化することを理解すれば容易い. たとえば, $(n, m) = (3, 2)$ に対応する波数が不安定化するときは,

$$u(x, y, t) = u_0 + \epsilon_0 \cos\left(\frac{3\pi x}{p}\right) \cos\left(\frac{2\pi y}{q}\right) e^{\lambda(k_{(3,2)})t} \quad (4.81)$$

となって, 図 9 のようなパターンが生じる.

^{*8} $k = 2\pi/p$ 以外の波数が安定であることを保証するものではない. ここではごく狭い範囲に波数 k がおさまっており, 1つの波数が不安定化するというある意味では特別な場合を考えていると思って欲しい. γ 依存性を容易に理解することが目的である.

ただし、例えば q がとても小さい場合などには、式 (4.80) において k^2 がとても大きくなり y 方向に不安定化する波数 $k_y = m\pi/q$ が生じず、 $m = 0$ すなわち 1 次元と同じパターンが生じるので注意が必要である (図 10)。

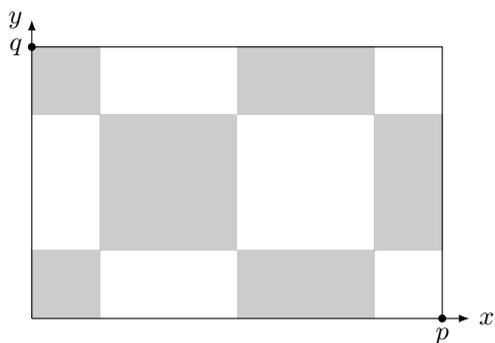


図 9: 2次元長方形領域で $(n, m) = (3, 2)$ に対応する波数が不安定化するとき生じるパターン。



図 10: 2次元長方形領域で $(n, m) = (3, 0)$ に対応する波数が不安定化するとき生じるパターン。

一般の 2 次元領域 B に対して、パターンを調べるためには方程式

$$\nabla^2 \psi + k^2 \psi = 0, \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla) \psi = 0 \quad \text{for } \mathbf{r} \in \partial B \quad (4.82)$$

を解く必要がある。単純な領域であればよく知られた解が存在するが、そうでない場合には一般に解析的に解くのが難しいので、数値的に解かなければならない。

4.3 パターン形成のシミュレーション

シミュレーションをするために、具体的な化学反応系を選ぶ必要がある。ここでは、Murray [7] にならって Thomas の系と呼ばれる化学反応系を用いることにする：

$$\begin{aligned} f(u, v) &= a - u - h(u, v), & g(u, v) &= \alpha(b - v) - h(u, v), \\ h(u, v) &:= \frac{\rho uv}{1 + u + Ku^2}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

本記事作成で紹介するシミュレーションはいずれも Python を用いたものである。シミュレーションの手順を以下に示す。系の時間発展方程式、すなわち反応拡散方程式は、

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v. \end{cases} \quad (4.84)$$

これを離散化して、格子上でシミュレーションをすれば良い。左辺の時間微分は、

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \simeq \frac{u(\mathbf{x}, t + \Delta t) - u(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} \quad (4.85)$$

と近似できる。ここで Δt は微小時間である。時刻は $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \dots$ と離散化されるので、これらの時刻における濃度分布を定義して考えることにする：

$$u^n(\mathbf{x}) := u(\mathbf{x}, n\Delta t), \quad n = 0, 1, \dots \quad (4.86)$$

離散時間における濃度分布を使って、時間微分は次のように近似的に書き直せる：

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} \Big|_{t=n\Delta t} \simeq \frac{u^{n+1}(\mathbf{x}) - u^n(\mathbf{x})}{\Delta t}. \quad (4.87)$$

次に、空間方向にも離散化したい。動物の体表を考える上では 2 次元を扱えば十分なので、 $u(x, y, t)$ と書く。このときの $\nabla^2 u(x, y, t)$ は、

$$\nabla^2 u(x, y, t) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u(x, y, t). \quad (4.88)$$

ここで、2階偏微分は微小長さ Δx を用いて次のように近似できる：

$$\frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial x^2} \simeq \frac{u(x + \Delta x, y, t) + u(x - \Delta x, y, t) - 2u(x, y, t)}{(\Delta x)^2}. \quad (4.89)$$

これを使って $\nabla^2 u(x, y, t)$ を近似すると、 $\Delta x = \Delta y$ とした上で、

$$\nabla^2 u(x, y) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \{u(x + \Delta x, y) + u(x, y + \Delta y) + u(x - \Delta x, y) + u(x, y - \Delta y) - 4u(x, y)\} \quad (4.90)$$

となる。ただし、式 (4.90) におけるすべての項について、時刻 t は同一なので省略した。時間について離散化したときと同様に、

$$u_{i,j}^n := u(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t) \quad (4.91)$$

と定義しておけば、空間2階微分は、

$$\nabla^2 u(x, y, t) \Big|_{x=i\Delta x, y=j\Delta y, t=n\Delta t} \simeq \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} \quad (4.92)$$

と書ける。これらを使って、反応拡散方程式を離散的に書き直したい。 u の反応拡散方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} &= \gamma f(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2} \\ u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n &= \Delta t \gamma f(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n) \\ \therefore u_{i,j}^{n+1} &= u_{i,j}^n + \Delta t \gamma f(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n) \end{aligned} \quad (4.93)$$

となる。同様にして v の反応拡散方程式も書き直すと、

$$v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^n + \Delta t \gamma g(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} d(v_{i+1,j}^n + v_{i,j+1}^n + v_{i-1,j}^n + v_{i,j-1}^n - 4v_{i,j}^n) \quad (4.94)$$

これらは n についての漸化式になっており、時刻 $t = n\Delta t$ における濃度分布がわかっているときに $t = (n+1)\Delta t$ での濃度分布を計算する処方箋を与えてくれている (図 11)。

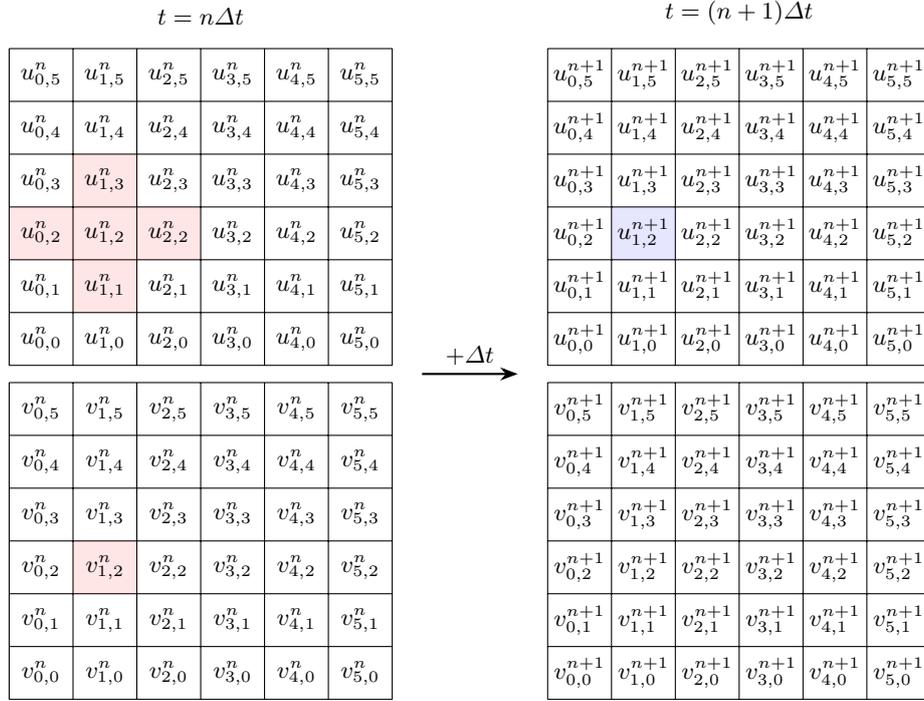


図 11: 時刻を Δt 進めたときのシミュレーションの様子時刻 $t = n\Delta t$ における赤で示した位置での数値を用いて、時刻 $t = (n+1)\Delta t$ における青で示した位置での数値を計算する。

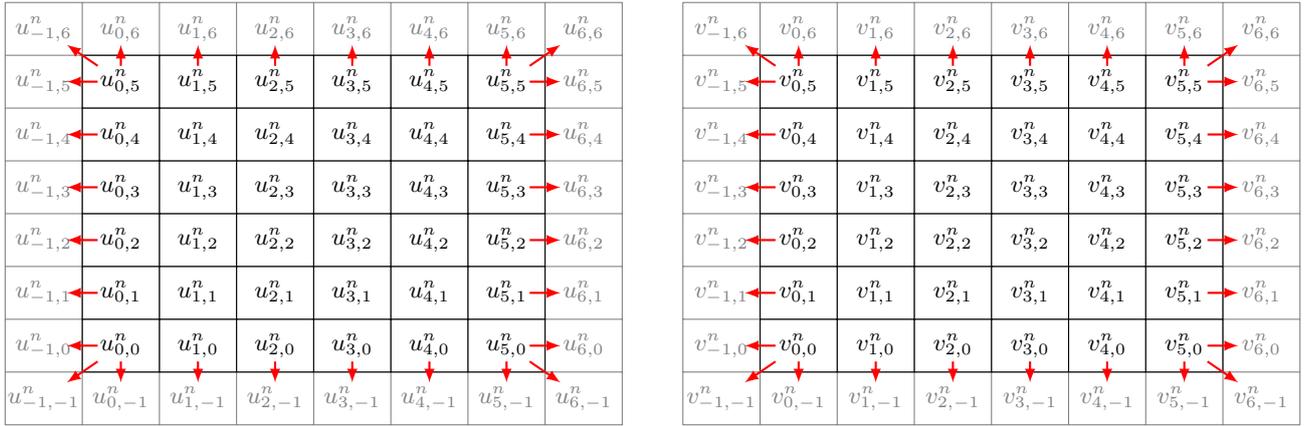


図 12: 境界条件を適用する様子. グレーで示したセルを周囲に擬似的に用意しておき、境界の値をコピーすることで境界条件をみたすような系をシミュレーションできる。

次に境界条件の適用を考える. ゼロフラックス条件 (境界で物質の出入りが無い条件) は次のように書けたのだった:

$$\nabla u \cdot \mathbf{n} = 0. \quad (4.95)$$

簡単のために、2次元の長方形領域に限定して考える. ここでの法線ベクトルは x, y 方向の単位ベクトルになり、扱いが容易になる. たとえば、 x 方向のインデックスが $i = 0, 1, \dots, N_x - 1$ を走り、 y 方向のインデックスが $j = 0, 1, \dots, N_y - 1$ を走るような状況では、新たに $i = -1, N_x$ と $j = -1, N_y$ の値を用意し、境界での値を $u_{-1,j}^n = u_{0,j}^n$ などとすれば良い (図 12). このようにすれば、シミュレーションしている系の値を変更することなく境界条件をみたすことができる。

後のために、周期境界条件についても言及しておく. 1次元領域における周期 L の周期境界条件は、

$$u(x+L, t) = u(x, t). \quad (4.96)$$

この境界条件をみたすためには、 $i = -1, N_x$ の値を用意し、 $u_{-1}^n = u_{N_x-1}^n, u_{N_x}^n = u_0^n$ と数値をコピーしておけば良い。

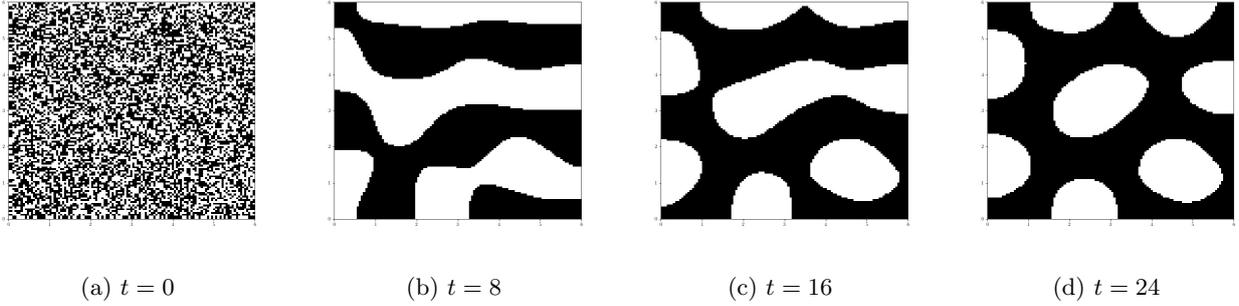


図 13: シミュレーションの様子. Murray [7] にならって $a = 92, b = 64, \alpha = 1.5\rho = 18.5, K = 0.1, d = 10$ を用いて, $\gamma = 9$ とした. また, $\Delta x = \Delta y = 5 \times 10^{-2}$ とし, 領域は $[0, 6] \times [0, 6]$ である. 時間発展の刻み幅は $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ である. 黒い領域は $u > u_0$ を, 白い領域は $u \leq u_0$ を表す. (a) は初期状態で, 一様定常状態まわりに一様乱数をもった状態にしてある. このシミュレーション結果のアニメーションは[ここ](#)にある.

実際にシミュレーションを行ったときの系の様子を図 13 に示しておく. 最初は乱雑だが, 時間の経過とともにパターンが自発形成される様子が見える.

パターン形成のシミュレーション

$u_{i,j}^n := \mathbf{u}(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t)$ ($i = 0, 1, \dots, N_x - 1, j = 0, 1, \dots, N_y - 1$) に対して, 離散化された (2次元の) 反応拡散方程式は,

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \Delta t \gamma f(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n), \quad (4.93)$$

$$v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^n + \Delta t \gamma g(u_{i,j}^n, v_{i,j}^n) + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} d (v_{i+1,j}^n + v_{i,j+1}^n + v_{i-1,j}^n + v_{i,j-1}^n - 4v_{i,j}^n). \quad (4.94)$$

x 方向について, ゼロフラックス境界条件は,

$$\mathbf{u}_{-1,j}^n := \mathbf{u}_{0,j}^n, \quad \mathbf{u}_{N_x,j}^n := \mathbf{u}_{N_x-1,j}^n. \quad (4.97)$$

周期境界条件は,

$$\mathbf{u}_{-1,j}^n := \mathbf{u}_{N_x-1,j}^n, \quad \mathbf{u}_{N_x,j}^n := \mathbf{u}_{0,j}^n. \quad (4.98)$$

4.4 パターンの γ 依存性

既に 4.1 節や 4.2 節で議論したように, γ を変化させるとパターンが変化する. 実際にシミュレーションをするとどのようになるだろうか.

いくつかの γ の値に対するシミュレーションの結果を図 14 に示す. 図 14 を見ると, γ を大きくするに従って斑点が増えていることわかる. これは, γ を大きくするに従って不安定化する波数が大きくなっていることの表れである.

このことを定義に立ち返って考えよう. 反応拡散方程式は,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v \end{cases} \quad (4.99)$$

と書けていた. ここで, $\gamma \rightarrow \gamma' := s\gamma$ なる変換を考えると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\gamma'}{s} f(u, v) + \nabla^2 u \\ s \frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma' f(u, v) + (\sqrt{s} \nabla)^2 u. \end{aligned} \quad (4.100)$$

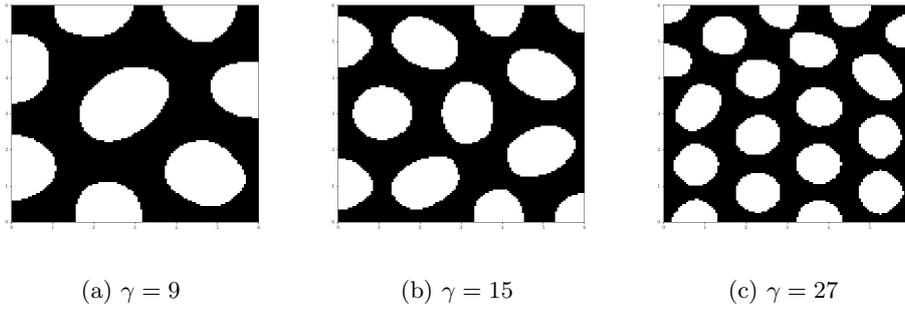


図 14: それぞれの γ の値に対して形成されるパターン. a, b, α, ρ, K, d の値や刻み幅 $\Delta x (= \Delta y), \Delta t$, 領域のサイズは図 13 で示したシミュレーションと同じである. また, 示している結果は状態が落ち着きほとんど変化しなくなった時点でのものである.

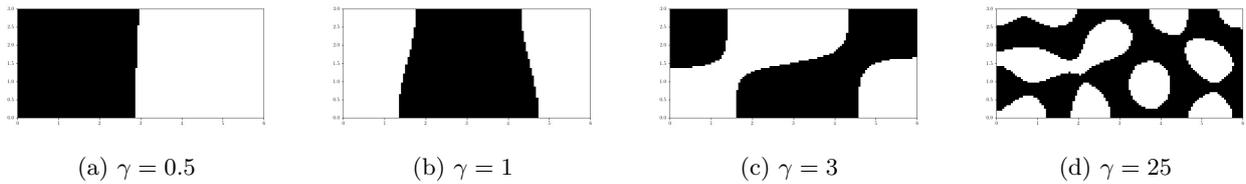


図 15: 長方形領域に対して, それぞれの γ の値に対して形成されるパターン. a, b, α, ρ, K, d の値や刻み幅 $\Delta x (= \Delta y), \Delta t$, 領域のサイズは図 13 で示したシミュレーションと同じ. また, 示している結果は状態が落ち着きほとんど変化しなくなった時点でのものである.

時間と空間を $t' := t/s, r' := r/\sqrt{s}$ と変数変換することで,

$$\frac{\partial u}{\partial t'} = \gamma' f(u, v) + \nabla'^2 u. \quad (4.101)$$

なる反応拡散方程式を得ることができる. v の場合にも同様である. 時間と空間の変数変換の意味するところを具体的に考えよう. 仮に $s = 4$ であったとすると, $t' := t/4$ であるから, 元々の時間 4 が 1 に短縮されるということを意味する. すなわち時間の進みが速くなる. また, $r' := r/2$ であるから, 距離 2 は 1 に縮小されることになる.

さて, これらの体表パターン形成での文脈を考えることにする. まず時間の進み具合の速い・遅いは, 体表パターンがどの程度速く形成されるかということの意味しており, 我々が興味を持っているのは最終的にどのようなパターンへ落ち着くかということなので, ほとんど意味を成さない. 次に, 空間の縮小・拡大であるが, これは非常に重要である. 特に動物の体表が有限であることに注意して, 有限領域を考えると, γ は領域の広い・狭いに直結し, 領域の広さによっては不安定化の様子が全く異なる.

これは, 反応方程式を直接眺めても直感的に理解できる. γ が大きいということは拡散項に比べて反応項が大きいことを意味し, 拡散よりも反応が重要であることを意味する. 拡散を軽く見ることができるというのは, 系のサイズが大きくて拡散がなかなか進行しないことを意味すると理解できる.

ついでに, 長方形領域において γ の値を極端に変えたときに見えるパターンの変化を, 図 15 から眺めてみよう. γ の小さいときには y 方向 (縦方向) の不安定化が起きずに縞模様が生じているが, γ を大きくするに従って y 方向の不安定化が生じ, 斑点模様へと切り替わる.

パターンの γ 依存性

反応拡散方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v \end{cases} \quad (4.102)$$

におけるパラメータ γ について、領域のサイズは $\sqrt{\gamma}$ に比例する。

4.5 脚・尾における体表パターン

動物の体表は単純ではない。ただし、部分部分を抜き出せば単純化が可能である。^{*9}ここでは生き物の脚や尾に着目し、その体表パターンについて考察する。

尾や脚を先細りの円柱だと思って、その表面（2次元）上での反応拡散を考える。円柱の軸方向に z 軸を取り、円柱は $0 \leq z \leq s$ であるとする。すなわち $s > 0$ は円柱の高さ（尾や脚の長さ）に対応する。位置 z における円柱断面の半径を $r(z)$ 、方位角を θ とする。ここでの境界条件は、 $z = 0, s$ に関するゼロフラックス境界条件と、 θ についての周期境界条件 $u_i(\theta + 2\pi) = u_i(\theta)$ を課す。このときの固有関数は、

$$W_{n,m} = A_{n,m} \cos(n\theta + \theta_0) \cos\left(\frac{m\pi z}{s}\right), \quad k^2 = \frac{n^2}{r^2} + \frac{m^2\pi^2}{s^2}. \quad (4.103)$$

不安定化の条件は、

$$\gamma L = k_1^2 < k^2 = \frac{n^2}{r^2} + \frac{m^2\pi^2}{s^2} < k_2^2 = \gamma M. \quad (4.104)$$

r は z に依存して、円柱が細いときには r が小さく、円柱が太いときには r が大きい。 r の太さによってどのようなパターンが生じるか考える。 r が十分小さい領域ではすべての $n \geq 1$ で安定化してしまう。すなわち $n = 0$ となって、円柱を一周する方向では不安定化しない。軸方向のみで不安定化し、縞上のパターンが生じる。 r がある程度大きい領域では $n = 1$ が許されるようになり、2次元の斑点パターンが生じるようになる。

実際に、チーターとワオキツネザルの尻尾を見てみよう（図 16）。チーターは広く体表に斑点模様をもつが、尻尾の先端付近では縞模様が生じていることがわかる（図 16a）。これは、尻尾の付け根側では軸方向と円周方向の両方で一様定常状態が不安定化しており、先端付近では円周方向が安定化していることを示唆している。一方で、ワオキツネザルは尻尾全体が縞模様を形成していることが確認できる（図 16b）。



(a)



(b)

図 16: (a) チーターさん。よこはま動物園ズーラシア様のご厚意による。(b) ワオキツネザルさんの尻尾。旭川市旭山動物園様のご厚意による。

^{*9} 小学校で「生き物は円柱」と仕込まれた成果。

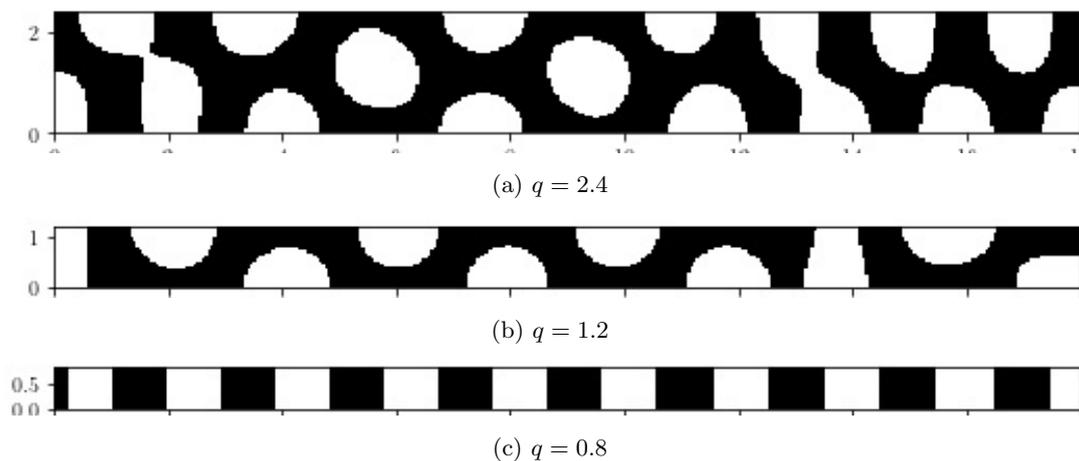


図 17: 細長い領域でゼロフラックス境界条件を課したときのシミュレーション. a, b, α, ρ, K, d の値や刻み幅は図 13 で示したシミュレーションのものと同じである. $\gamma = 15$ である. 領域は $[0, p] \times [0, q]$ で, 幅 q の値を変えてシミュレーションを行った.

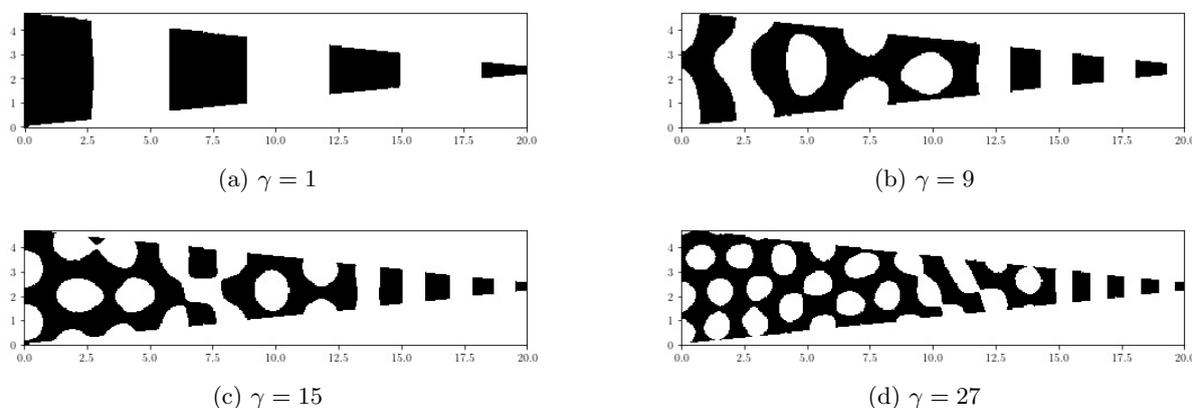


図 18: 細長い台形領域におけるシミュレーション. 先細りの円柱表面を細長い台形に近似した. a, b, α, ρ, K, d の値や刻み幅は図 13 で示したシミュレーションのものと同じである. $s = 20, r(z = 0) = 0.75, r(z = 20) = 0.05$ である. γ の値を変えてシミュレーションを行った.

ここで、「チーターの尻尾は先細ってないじゃないか」と思う人もいるだろう. 実は, チーターのような動物のパターン形成は胚の段階に行われる. 形成されたパターンは胚の段階で固定され, 成長に従ってパターンは更新されることなく固定される^{*10}. チーター尻尾の場合には, パターン形成時の胚の段階では尻尾が先細っており, 成長とともに尻尾の先細り失われていったものと考えられる.

さて, まずは細長い領域での反応拡散方程式をシミュレーションしてみよう. 結果を図 17 に示す. 図 17a, 図 17b のように領域の幅が十分な大きさ以上である場合には, 2 次元的な不安定が生じて斑点模様が見れる. 一方で図 17c のように幅が小さく細長い領域ではパターンは 1 次元的になり縞模様になる.

次に, 先細りの円柱表面における反応拡散方程式をシミュレーションする. 図 18a のように, γ の小さいときには軸に垂直な方向の不安定化は生じずに縞模様が出る. γ を大きくすると図 18b, 図 18c, 図 18d のように, 先端側へいくに従って斑点模様から縞模様への移り変わりが見てとれる.

*10 イノシシ (うり坊) やマレーバクのように, 成長に伴って体表パターンが大きく変化する動物もある. マレーバクについては後に取り上げる.

4.6 生物に見られる体表模様

体表パターン形成という文脈において、反応拡散系によるモデルの簡単な理解が進んだところで、いよいよいろんな生き物たちに登場してもらおう（チーターさんとワオキツネザルさんには既に尻尾をお借りしている）。

図 19 で登場してもらった皆さんは斑点模様をもつ。チーターの尻尾は縞模様になっている。（アムールヒョウの尻尾は見えないが）アムールヒョウとユキヒョウの尻尾は斑点模様になっているように見える。この、尻尾が縞模様になっているか斑点模様になっているかという違いの理由は、ここまでしっかり読んでくださった方には容易に理解できると思う。縞模様になっているのは、尻尾の円周方向に不安定化が起きておらず、斑点模様では円周方向の不安定化が起きている。

ユキヒョウの模様をよく見ると、単純な斑点ではなくランドルト環^{*11}のような形をしている（図 19c, 19d）。実は、このような形もある種の反応拡散系を考えて再現できる。 [8]

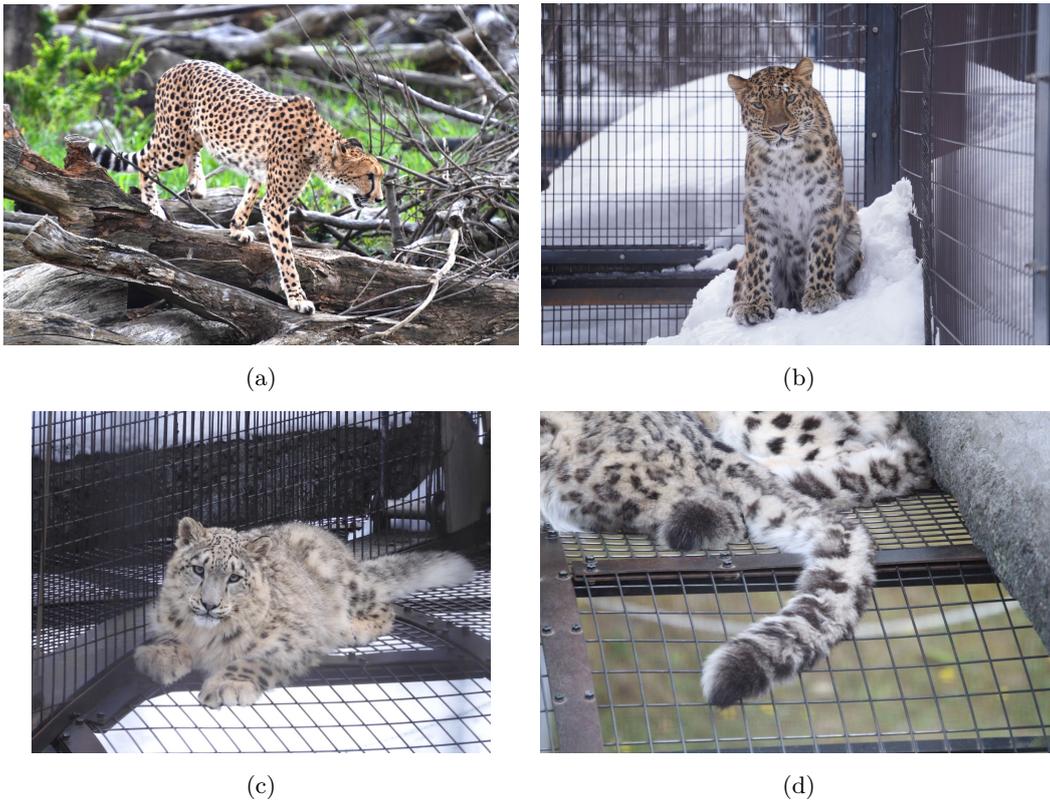


図 19: (a) チーターさん。よこはま動物園ズーラシア様のご厚意による。(b) アムールヒョウさん。(c)(d) ユキヒョウさんとその尻尾。(b)と(c)(d)は旭川市旭山動物園様のご厚意による。

*11 視力検査で見せられるシンボル。



(a)



(b)



(c)

図 20: (a) グラントシマウマさん. よこはま動物園ズーラシア様のご厚意による. (b) アムールトラさん. (c) ワオキツネザルさん. (b) と (c) は旭川市旭山動物園様のご厚意による.

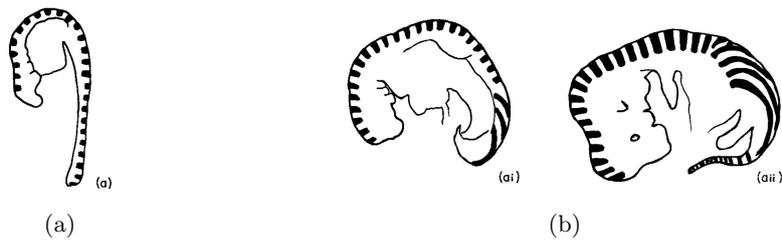


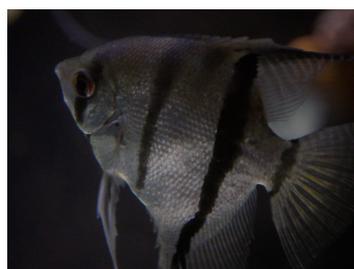
図 21: (a) *Equus grevyi* の 21 日目の胚のトレースに 0.4mm 間隔で縞模様を描いたもの. (b) *Equus grevyi* の 21 日目の胚から 3~4 日成長したときの様子を描いたもの (左) と, 3 週間成長したときの様子を描いたもの (右). Bard(1977) [9] より引用.

次に, 図 20 で縞模様をもつ皆さんに登場してもらおう (ワオキツネザルが縞模様を持つのは尻尾だけであるが). 尻尾だけでなく, 全身が縞模様になっているシマウマとアムールトラは, 胚形成時に縞模様になっていたことが想像できる (図 21).

もちろん, 哺乳類以外でも Turing パターンのようなものを観察することができる. その例を図 22 に示した. イシカワガエルはとてわかりやすく模様が出ており, 頭と背中では斑点模様が, 手脚では縞模様が出ている. エンゼルフイッシュは縞模様を持っている (図 22b).



(a)



(b)



(c)

図 22: (a) イシカワガエルさん. のらぎーく様のご厚意による. (b) エンゼルフイッシュさん. 友人の荒武さんに提供していただいた. (c) ニセゴイシウツボさんと (奥に少しだけ見える) ハナビラウツボさん. 私がいおワールドかごしま水族館様にて撮影した.



図 23: (a) マレーバクさん. (b) マレーバクの赤ちゃん. (c) マレーバクの赤ちゃん (生後約 2 ヶ月). よこはま動物園ズーラシア様のご厚意による.

魚が反応拡散系によるパターン形成の研究に用いられることは多い. 哺乳類のパターン形成が胚形成時に決まってしまうのに対し, 魚は常にパターン形成のダイナミクスが働いており, 観察がしやすいためである. 大阪大学の近藤滋先生は, 縞を持った魚が成長するに従って縞と縞の間に新たな縞を出現させること [10], 魚の縞模様を一部分だけ焼き消したのちのパターン形成の様子が反応拡散系と一致すること [11] を報告している. また, 縞模様を持った魚と斑点模様を持った魚を交配させることでラビリンス模様を持つ魚を得られることについても, 詳しい研究がある. [12]

ここで, 図 23 にマレーバクの例を示す. 図 23a のように大人のマレーバクは単純な白黒の模様をもつが, マレーバクの赤ちゃんは図 23b のように複雑な模様を体表にえがく*12. これは, 「拡散反応系に従うパターン形成が胚形成時に定まりその後パターンを残したまま成長する」という流れに反するものになっている. 赤ちゃんから大人へと成熟する際の模様の移り変わりは図 23c を見ると明らかで, もとの模様を上書きするようにして新たに模様が作られる. [14] それぞれの模様の形成が単純な反応拡散系に従っているのか私は知らないが, 大人のマレーバクの模様であれば単純な反応拡散系の結果として理解することもできる.

このように, 生き物の体表模様がすべて単純な反応拡散系によって理解できるわけではない. そもそも, 本当に反応拡散系で記述できるのか定かではない. ここまでの議論が, 生き物たちが実際に反応拡散系を使っているかどうか (さらに詳しくその化学反応) に論点をおいているのではなく, 単純な反応拡散系で理解しようと試みているのだということにことに注意されたい.

既に何度か述べている通り, 生物の体表パターン形成がすべて反応拡散系で記述されるわけではない. Delta-Notch 相互作用などは有名で, 興味がある方はぜひ調べてみてほしい (たくさん文献が出てくると思う). 同様に, 拡散ではなく色素細胞間の相互作用を考えた agent-based モデルについても多くの研究がある. [16] [17] [18]

さいごに

以上, 反応拡散系によるパターン形成を概観しました. 簡単な 2 次元の力学系を考えるだけで, 縞模様と斑点模様が結び付けられるという感動をぜひ味わってほしいです. ここまで読んでくださってありがとうございました. 協力をくださった皆様にも感謝申し上げます.

*12 マレーバクの赤ちゃんがこのようなウリ坊模様を示すのは, 草陰や岩陰などへの保護色効果を狙ったものだと考えられている. また, 大人のマレーバクが大きく 2 つにわかれた白黒の模様は, 体の輪郭を分かりづらくする効果があると考えられている. [14]

参考文献

- [1] James D. Murray. *Mathematical Biology I: Introduction*. Springer, 2002.
- [2] James D. Murray. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer, 2003.
- [3] James D. Murray. How the leopard gets its spots. *Scientific American*, Vol. 258, No. 3, pp. 80–87, 1988.
- [4] J. Schnakenberg. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 81, No. 3, pp. 389–400, 1979.
- [5] M. Akam. The molecular basis for metameric pattern in the *Drosophila* embryo. *Development*, Vol. 101, No. 1, pp. 1–22, 09 1987.
- [6] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Bulletin of Mathematical Biology*, Vol. 52, No. 1, pp. 153–197, Jan 1990.
- [7] James Dickson Murray, Sydney Brenner, J. D. Murray, and Lewis Wolpert. On pattern formation mechanisms for lepidopteran wing patterns and mammalian coat markings. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. B, Biological Sciences*, Vol. 295, No. 1078, pp. 473–496, 1981.
- [8] Shigeru Kondo and Takashi Miura. Reaction-diffusion model as a framework for understanding biological pattern formation. *Science*, Vol. 329, No. 5999, pp. 1616–1620, 2010.
- [9] B. L. Bard Jonathan. A unity underlying the different zebra striping patterns. *Journal of Zoology*, Vol. 183, No. 4, pp. 527–539, 1977.
- [10] Shigeru Kondo and Rihito Asai. A reaction–diffusion wave on the skin of the marine angelfish pomacanthus. *Nature*, Vol. 376, No. 6543, pp. 765–768, Aug 1995.
- [11] Motoomi Yamaguchi, Eiichi Yoshimoto, and Shigeru Kondo. Pattern regulation in the stripe of zebrafish suggests an underlying dynamic and autonomous mechanism. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 104, No. 12, pp. 4790–4793, 2007.
- [12] Seita Miyazawa. Pattern blending enriches the diversity of animal colorations. *Science Advances*, Vol. 6, No. 49, p. eabb9107, 2020.
- [13] Shigeru Kondo, Masakatsu Watanabe, and Seita Miyazawa. Studies of turing pattern formation in zebrafish skin. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 379, No. 2213, p. 20200274, 2021.
- [14] 金澤朋子. 飼育下マレーバクの成長に関する生理学および行動学的研究. PhD thesis, 日本大学大学院生物資源科学研究科生物環境科学専攻, 2013.
- [15] Masakatsu Watanabe and Shigeru Kondo. Changing clothes easily: connexin41.8 regulates skin pattern variation. *Pigment Cell & Melanoma Research*, Vol. 25, No. 3, pp. 326–330, 2012.
- [16] Alexandria Volkening and Björn Sandstede. Modelling stripe formation in zebrafish: an agent-based approach. *Journal of The Royal Society Interface*, Vol. 12, No. 112, p. 20150812, 2015.
- [17] D. Bullara and Y. De Decker. Pigment cell movement is not required for generation of turing patterns in zebrafish skin. *Nature Communications*, Vol. 6, No. 1, p. 6971, May 2015.
- [18] Alexandria Volkening and Björn Sandstede. Iridophores as a source of robustness in zebrafish stripes and variability in danio patterns. *Nature Communications*, Vol. 9, No. 1, p. 3231, Aug 2018.
- [19] Akiko Nakamasu, Go Takahashi, Akio Kanbe, and Shigeru Kondo. Interactions between zebrafish pigment cells responsible for the generation of turing patterns. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 106, No. 21, pp. 8429–8434, 2009.
- [20] N. E. Voicu, S. Harkema, and U. Steiner. Electric-field-induced pattern morphologies in thin liquid films. *Advanced Functional Materials*, Vol. 16, No. 7, pp. 926–934, 2006.