数理解析研究所講究録
第1937巻 2015年 142-148

可視化技術としての反応拡散系

明治大学大学院先端数理科学研究科　鈴野浩大
Kohta SUZUNO
Graduate School of Advanced mathematical Sciences,
Meiji University

反応拡散系は非平衡科学の対象としてのみならず，その時間発展をある種の演算処理として応用するケミカルコンピューティング（反応拡散コンピューティング）のモデルとしても近年注目されている．本論文では，反応拡散系を可視化技術として用いるという観点からこれまでの応用研究を概観するレビューを与える．特に，場の可視化，および最短経路探索という具体的問題について，これまでの研究の位置づけや意義について議論する．

1. イントロダクション

反応拡散系は不可思議な時空間パターンを自律的に示すことから研究分野を超えて広く興味を集めている．反応拡散系は力学系として，非平衡ダイナミクスの例として，パターン形成を伴う化学反応として，また生物の形態や模様の形成メカニズムを考える道具として様々な意味を担っている．反応拡散系は応用研究も盛んに行われている．その一つとして，反応拡散系が生成する自発的パターン形成を，ある種の情報処理に用いるというケミカルコンピューティング（反応拡散コンピューティング）に関する研究が発展している．これは反応拡散系の自律分散性を最適化，計算幾何，制御などに利用しようとする試みである．

ケミカルコンピューティング研究におけるアプローチの一つは，化学的な興奮性媒質（BZ 溶液等）を用いた実験系を構成し，そこに現れる興奮波の伝播パターンを用いて演算及び結果の可視化を行うという実験的アプローチである．具体的には，化学反応を用いて画像処理[1]，ロジックゲート[2,3]，ケミカルダイオード[4]，方向センサ[5,6]，ボロノイ図生成[7,8]，経路探索[9]，等を実現する実験的研究が与えられている．また，反応拡散系の特性を模倣したシミュレーションや素子を用いて自己組織的な演算を実行する研究も盛んである．この方面では特に画像処理に関するものが発展しており，エッジ検出[10,11]，コントラスト調整[12]，スケルトン抽出[13]，群化[14]，フィルタ[15]，ステガノグラフィー(画像に別の画像を非明示的に埋め込む技術)[16,17]等が実現している．また同期素子やメモリの化学素子を構成する研究も行われている[18]．これらの研究は，自然法則をアルゴリズムとして解釈・利用し非従来的な計算概念の探求を行うナチュラルコンピューティング（自然計算）の一部としても位置づけることができる．

反応拡散系によるコンピューティングの意義は，それが自律分散的な情報処理のモデルを与えている点にある．その問題意識は様々であるが，例えば以下のものが挙げられるだろう：(i)生物の知性（神経回路上の情報伝播）や機能（視覚や認知）を理解する

モデルの構成[19,20] (ii)チューリングマシンに変わる新たな非従来型計算パラダイムの探求[21] (iii)化学生物系におけるナノテクノロジー的側面（ドラッグデリバリー[22]等の自律的物質輸送等）の追求 (iv)自律分散パターンの設計可能性についての検討 (v)自動的なデータ生成加工技術の確立等．これらの研究はまだ十分に体系化されているとは言えないが，反応拡散系は生物／無生物，デジタル／アナログのような異なる系・レベルの現象を結びつける結節点として様々な展開が可能である．

本稿では，反応拡散系のひとつの応用として可視化という観点を取り上げ，関連する研究についてのレビューを与える．近年の計算機の進化，シミュレーション技術の複雑化，ビッグデータの取り扱い等を背景として，情報の可視化は今後ますます重要な技術となる．情報科学的観点からは，効率的な可視化には複雑な情報を認知解釈可能なレベルまで縮約することが求められる．ただしその方法は一意ではなく，一般に試行錯誤を要求される．これをオートマチックに実行できたら便利であろう．一方で，数理科学サイドからは，反応拡散系の研究を通して，自律分散パターンはどのような機能を担いうるのか？機能を提供しているなら，その逆問題は可能か？自律分散性を何かに使えないか？という問題を提起できる．これらを背景として，本論文は反応拡散系の可視化への応用という観点を提案する．これまで反応拡散系はパターン形成がいかに複雑なパターンを生むかが問題とされてきたが，逆に単純化／本質的情報の抽出機構として用いることは可能だろうか．系の特徴を自律的に捕獲できる自己組織的可視化とでもいうようなパラダイムや方法は構成可能なのか．この観点から反応拡散系の応用研究を見直すことが本レビューの目的である．

2. 反応拡散系を用いた場の可視化

ここでは，反応拡散系の自律的パターン形成を直接的に利用したベクトル場やテンソル場をはじめとする場の可視化についての研究をレビューする．場の可視化が連続体現象一般の物理的理解や工学的検討に必要不可欠な技術であることは論を待たない．特に計算機科学においては，高度な計算技術の発達だけでなく，その結果得られる複雑な情報を効率的に可視化する方法も同時に求められる．効率的な可視化が必要な典型的な例はベクトル場である．その代表的な方法論は，場が局所的に持つ複数の自由度を視覚的に同時に表現できる記号（glyph）を空間的に分布させることである（例えば矢印）．そして効率的な可視化の為には，記号の分布密度や場と記号の対応関係を調整し，場の情報を縮約しつつもその全体像を把握可能にする視認性の確保が要求される．

この種の可視化を「反応拡散系が示す自発的パターンによって自律分散的に行う」というのがここで紹介する研究である．その基本的なアイデアは，グレイ・スコット方程式のようなスポットパターンを解に持つ反応拡散方程式を用い，その拡散係数に場の情報を反映させ，生成されるスポットの配置や形状によって場の分布を把握する，というものである．

この手法の起源は，1991 年に発表されたコンピュータグラフィックス（CG）の研究にさかのぼる．CG の技術的課題の一つにテクスチャ（CG モデルの表面に貼付ける模様）の自動生成があり，これを反応拡散系によって行おうというアイデアが提案された

[23,24]．反応拡散系が自律的に生成するチューリングパターンをテクスチャとして使おうというわけである．この方法はそれまでに無いいくつかの利点を有している．すなわち，生物の模様や結晶構造を思わせる新奇なパターンを生み出せる，図案をデザインする事無くシミュレーションベースでパターンを自律分散的に生成できる，出来合いの画像をCGモデルに貼付けることで生じがちな歪みや合わせ目が生じない，等が利点である．シミュレーションベースであることを生かした3次元への拡張も提案されている[25]．また近年では反応拡散系によるパターン形成をプロシージャル技術（再帰的処理によるコンテンツ自動生成技術）として位置づける視点も与えられている[26]．

テクスチャ生成研究[23,24]における別の重要な特徴は，より複雑な模様を生成する為に，反応拡散方程式の拡散係数に異方性／非一様性を導入していることである．この効果は生成されるパターンの形状と分布に直接影響を与える．Cabral らはこの性質を vector visualization として解釈した[27]．たとえばスポットパターンを考えると，拡散係数（行列）の異方性／非一様性は生成されるスポットの歪みと分布の疎密を生み出す．このスポットを場の情報を表示する記号（glyph）とみなし，その配向や大きさ，分布密度から場の強度，勾配，異方性を把握しようというわけである．このアイデアはその後，Kindlmann らがテンソル場の可視化方法として[28]，Sanderson らがベクトル場の可視化方法として[29]実証した．

反応拡散系を用いて場を可視化することの利点は，可視化が自律分散的に行われる事にある．通常のベクトル場可視化では，矢印を適当な方法で分布させ，人手によってその表示密度や大きさの調整を行うことが多い．これに対しここで紹介した方法では，反応拡散パターンの自己組織化を利用している為にスポットの分布や変形は自律的に行われる．場の全体像を把握するための視認性も確保できる．また，反応拡散系の局所性から各スポットの生成は並列的に行われるため，プロセスの一部に問題が生じたとしても他の部分には影響が生じない．さらに，この方法は単なる可視化ということ以上に，場の情報を自動的に縮約しているという意味を与えることもできる．複雑な情報の配列を反応拡散系の自律分散性によって少数自由度の視認可能な状態に還元したわけである．このことを一般化すると，反応拡散系をある種の情報圧縮技術と捉え，その方向での可能性を問うこともできるであろう．

自律的スポットパターン形成は可視化以外にも応用研究がある．その一つは反応拡散系を用いた自己組織的メッシュ（計算格子）生成である[30]．その基本的アイデアは，メッシュを生成したい2次元形状の外形線を境界として，その内部に反応拡散方程式によるスポットパターンを発生させ，敷き詰められたスポットの中心を結んで得るグラフを三角形非構造格子として利用するというものである．これは上の可視化の例と同じく自律的・並列的な性質を備えた自動メッシュ生成法である．メッシュの細かさは拡散係数の空間的分布によって調整可能である．さらにこの手法で生成されるメッシュは，拡散係数が一様等方な場合，そのアスペクト比が市販メッシャーよりも良好であることが示されている[30]．その理由はおそらく格子点の生成に計算幾何的な方法ではなく拡散の一様性を利用しているためであろう．任意形状に対してなるべく一様なメッシュを用意することは特に計算工学的実務においては依然として手間のかかる間接作業であり，高品質な自律分散的メッシュ生成は今後ますます重要な課題である．

3. 反応拡散系を用いた最短経路探索

反応拡散系による可視化の別の例として，最短経路探索を取り上げる．これは化学反応もしくはそれを模擬した反応拡散系の時間発展によって迷路等における最短経路を演算・可視化するものである．反応拡散系を用いた最短経路探索には大別するとふたつの方法論，すなわち濃度勾配を用いる方法と化学波伝播を用いる方法に分けられる．

化学物質の濃度勾配を用いた最短経路探索は，近年実験的な研究が盛んである．基本的なアイデアは，溶液で満たされた２次元迷路のスタート(S)またはゴール(G)地点にある種の化学物質を設置し，その反応拡散によって S-G 間に形成される濃度勾配分布を基に最短経路を見いだすというものである．適当なセットアップの下では S-G 間を結ぶ線上は迷路の他の部分よりも勾配が大きくなっており，その勾配分布を生じさせる反応拡散プロセスを最短経路演算として解するわけである．濃度勾配は化学走性と結びつくことから，これを利用して迷路を解くアイデアが数値的[31]および実験的に検討されている．特に実験系では，溶液で満たされた迷路中を液滴があたかも生き物のように動き最短経路を探索する系が考案されており，印象的な手法として注目を集めている[32,33,34]．また濃度勾配に起因する対流によって染料粒子を輸送させて最短経路を可視化する方法[35]，電流を用いた経路検出（この場合はポテンシャル勾配を利用）[36]も発表されている．また化学反応とは異なるが，粘菌を用いた経路探索[43]も有名であり，生物物理的な観点からも経路探索は興味深い題材である．

もう一つの方法論である化学波の伝播を用いた迷路解きの歴史はさらに古い．Steinbock らは，興奮性媒質で満たした迷路上シャーレの一点から化学波を伝播させ，その伝播様式の画像解析から最短経路を求めるというアイデアを実験的に提唱した[9]．これは化学波伝播の等方性，等速性を利用し，化学波の形状をある種の等高線として用いるものである．Agladze らはさらに，化学波を障害物がある場合のパス・プランニングに適用できる事を実験的に示した[37]．数値計算の方面からは，Adamatzky ら[38]，山口ら[39]はそれぞれ興奮性オートマトンを用いた数値的な手法で経路探索が可能であることを指摘している．また Rambidi らは化学波の伝播と迷路の連結性の関係に着目した画像処理援用経路探索を提案している[40]．これらはいずれも化学波の幾何的性質に着目したものであり，そのアイデアは特定の化学系における化学波に限らず等方的な興奮性媒質一般において有効なものである．ただしこれらの手法はいずれも結果の可視化に画像処理等のポストプロセスが必要とされる．この問題に対し，最短経路探索と可視化を同時に行う可能性についても近年検討が行われている[41]．これはいわば上で述べてきた勾配法と化学波を組み合わせたもので，化学波の物理的性質を利用して，迷路中を伝播する化学波に粒子を輸送させることで最短経路を可視化する，というアイデアを数値的に検討したものである．溶液中の BZ 反応における化学波はその濃度勾配によって表面張力勾配を生み，対流を誘起する．したがって移動する化学波は運動量輸送を伴っており，これを利用した物質輸送が可能である事が実験的に示されている[42]．この事実を元に，迷路中の化学波に多量の粒子を継続的に輸送させる事で，迷路内の袋小路等の「非最短経路」すべてに粒子が滞留し，最終的に最短経路を見いだす

ことができる．ただしこの手法は現段階では数値的な検討のみが与えられており，実験的検証は今後の課題である．発展的解釈としては，この手法は化学的なコンピューティングによって得た最短経路の情報を粒子分布によって物理的に実体化しているものと考える事ができる．この見方をより発展させれば，ケミカルコンピューティングに基づくフィジカルファブリケーションのような事も可能となるかもしれない．

4. まとめと展望

本稿では「反応拡散系を用いた可視化」をキーワードとして，ケミカルコンピューティングの最近の発展を概観した．反応拡散系を用いた可視化は，見た目にアトラクティブなだけでなく，自立性，適応性，分散性を利用した最適化のモデルケースとみなすことができる．またこれらは「計算」の意味を拡張する．ここで見た例はどれも，ある数理的法則に従って物理量の特徴的な分布を生成させ，その時間発展を「計算」と見なし，得られた分布を「機能」として解釈する．ケミカルコンピューティングのさらなる深化は，今までに無いメディアを用いて今までに無いアルゴリズムで必要な機能を実現する新たな「計算」を発展させる契機となる．

参考文献

[1] L. Kuhnert, K. I. Agladze and V. I. Krinsky, Nature 337, 244 (1989).

[2] Á. Tóth and K. Showalter, J. Chem. Phys. 103, 2058 (1995).

[3] O. Steinbock, P. Kettunen, and K. Showalter, J. Phys. Chem. 100, 18970 (1996).

[4] K. Agladze, R. R. Aliev, T. Yamaguchi, and K. Yoshikawa, J. Phys. Chem. 100, 13895 (1996).

[5] 一野天利，物性研究 83, 422 (2004).

[6] H. Nagahara, T. Ichino, and K. Yoshikawa, Phys. Rev E 70, 036221 (2004).

[7] D. Tolmachiev and A. Adamatzky, Advanced Materials for Optics and Electronics 6, 191 (1996).

[8] B. P. J. de Lacy Costello, I. Jahan, A. Adamatzky, and N. M. Ratcliffe, Int. J. Bifur. Chaos 19, 619 (2009).

[9] O. Steinbock, Á. Tóth, and K. Showalter, Science 267, 868 (1995).

[10] 野村厚志，一川誠，三池秀敏，電子情報通信学会技術研究報告 PRMU 101(713), 197 (2002).

[11] 海老原麻由美他，画像電子学会誌 32, 378 (2003)

[12] S. Morfu, Phys. Lett. A 373, 2438 (2009).

[13] A. Adamatzky and D. Tolmachiev, Advanced Materials for Optics and Electronics 7, 135 (1997).

[14] 野村厚志，一川誠，三池秀敏，情報処理学会研究報告 CVIM 2003(36), 141 (2003).

[15] 藤田渉，青木孝文，樋口龍雄，電子情報通信学会技術研究報告 NLP，非線形問題

98(406), 9 (1998).
[16] L. Saunoriene and M. Ragulskis,Phys. Rev. E 84, 056213 (2011).
[17] K. Ishimura et al., Nonlinear Theory and Its Applications 5, 456 (2014)
[18] 元池育子, システム/制御／情報 54, 3 (2010).
[19] 野村厚志, 一川誠, 三池秀敏, 電子情報通信学会技術研究報告 PRMU 101, 197 (2002)
[20] 元池育子, 物性研究 70, 413 (1998).
[21] 国武豊喜（監修）, 自己組織化ハンドブック, エヌ・ティー・エス (2009).
[22] I. Lagzi, Cent. Eur. J. Med. 8, 377 (2013).
[23] G. Turk, Computer Graphics 25, 289 (1991).
[24] A. Wltkin and M. Kasst, Computer Graphics 25, 299 (1991).
[25] P. Chambers and A. Rockwood, IEEE Computer Graphics and Applications 15, 7(1995).
[26] 宮田一乗, 映像情報メディア 63(8), 1107 (2009).
[27] B. Cabral and L. C. Leedom, in the Proceedings of SIGGRAPH '93, 263(1993).
[28] G. Kindlmann, D. Weinstein, and D. Hart, IEEE Trans. on Visualization and Computer Graphics 6(2), 124 (2000).
[29] A. R. Sanderson, C. R. Johnson, and R. M. Kirby, IEEE Visualization 2004, 115 (2004).
[30] H. Notsu, D. Ueyamab and M. Yamaguchi, Applied Mathematics Letters 26, 201 (2013).
[31] A. M. Reynolds, Phys. Rev E 81, 062901 (2010).
[32] I. Lagzi, S, Soh, P. J. Wesson, K. P. Browne, and B. A. Grzybowski, J. Am. Chem. Soc. 132, 1198 (2010).
[33] Y. Wang, X. Liu, X. Li, J. Wu, Y. Long, N. Zhao, and J. Xu, Langmuir 28, 11276 (2012).
[34] J. Cejkova, M. Novak, F. Stepanek, and M. M. Hanczyc, Langmuir 30, 11937 (2014).
[35] K. Suzuno, D. Ueyama, M. Branicki, R. To□th, A. Braun, and I. Lagzi, Langmuir 30, 9251 (2014).
[36] S. Ayrinhac, Physics Education 49, 443 (2014).
[37] K. Agladze, N. Magome, R. Aliev, T. Yamaguchi, and K. Yoshikawa, Physica D 106, 247 (1997).
[38] A. I. Adamatzky, Mathl. Comput. Modelling 23, 105 (1996).
[39] 山口剛, 青木孝文, 樋口龍雄, 電子情報通信学会技術研究報告 NLP 100(518), 27 (2000).
[40] N. G. Rambidi and D. Yakovenchuk, Phys Rev E 63, 026607 (2001)
[41] K. Suzuno and D. Ueyama, 第 19 回交通流のシミュレーションシンポジウム論文集, 85 (2013).
[42] T. Ichino, T. Asahi, H. Kitahata, N. Magome, K. Agladze, and K. Yoshikawa, J.

Phys. Chem. C 112, 3032 (2008).
[43] T. Nakagaki, H. Yamada, and Á. Tóth, Nature 407 470 (2000).