

〔特集〕 数理物理からの流体研究

# 複雑ネットワーク上の反応拡散系における Turing不安定性とパターン形成

\*東京工業大学 大学院情報理工学研究所  
マックスプランク協会 フリッツハーバー研究所

中尾 裕也†  
秦 重史

## Turing instability and pattern formation in network-organized reaction-diffusion systems

Hiroya NAKAO, Graduate School of Information Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology

Shigefumi HATA, Fritz Haber Institute of the Max Planck Society

### 1 はじめに

#### 1.1 Turing不安定性とパターン形成

イギリスの数学者 Alan Turing(1912-1954) は, Turing マシンの概念の提案とその万能性や停止問題に関する考察によりコンピュータ科学の基礎を作ったことや, 第2次世界大戦中にはドイツ軍の暗号を解読したことなどで有名である. Turing の生誕 100 周年であった 2012 年には, 彼の名を冠した様々な研究会が開催され, 多くの学術誌において特集が組まれたことは記憶に新しい.

Turing は非平衡散逸系におけるパターン形成の研究においても重要な役割を果たしており, 死去する直前の 1952 年の論文で, 生物の形態形成の抽象的な数理モデルを考察している. Turing はこの論文で複数の化学因子(モルフォゲン)からなる反応拡散モデルを提案し, 化学因子間の拡散速度の差により系の空間一様状態が自発的に不安定化して時空パターンの自己組織化に至る可能性があることを示した<sup>1)</sup>. これは非平衡パターン形成のパラダイムとなった記念碑的な研究である.

その後, Gierer と Meinhardt により, 生物の形態形成の典型モデルとして, 自発的に増加する活性因子(activator)とそれを抑える抑制因子(inhibitor)の反応拡散系という現在では標準的となった枠組みが提案され, 抑制因子の速い拡散による長距離の側抑制が重要であり, これが Turing による不安定性の議論と同等であることなどが示された<sup>2,3)</sup>. 1990 年台には化学反応実験による Turing

パターン形成が実現されており<sup>4,5)</sup>, 最近では, 実際の生物の形態形成過程において, Turing が理論的に仮定したモルフォゲンの役割を果たすタンパク質や遺伝子が特定されつつある<sup>6,7)</sup>.

Turing 不安定性は, 生態系における様々な空間パターン形成の原因であるとも考えられている. 活性-抑制因子系を, 自発的に増加する草食動物と, それを捕食する肉食動物からなる被食者-捕食者系と読み替えれば, それらの移動拡散速度の違いによる Turing 不安定性が生じる可能性があることは, 多くの数理モデルの研究において指摘されており<sup>3,8)</sup>, 生物種の空間分布の不均一性の原因のひとつと考えられている. また, 乾燥した地域で良く観察される大規模な縞状の植生パターンが Turing 不安定性によって生じているとの報告もある<sup>9)</sup>.

#### 1.2 複雑ネットワーク上のダイナミクス

話は変わり, 今世紀の初頭から, いわゆる複雑ネットワークという概念が, 物理学や応用数学の枠を超えて, 工学, 生命科学, 経済学, 社会学に至る広範な分野に多大な影響を与えてきている<sup>10-13)</sup>. Strogatz<sup>10)</sup> や Barabási<sup>11)</sup> によって強調されたスモールワールド性やスケールフリー性に代表される簡潔な法則が, 細胞内酵素反応, 脳神経回路, インターネット, 航空路線, 企業間取引などの様々なネットワークに共通して成立することが多数の研究で明らかにされており, 今や複雑ネットワークは実世界の普遍的な基本構造のひとつであると考えられている. そのようなネットワーク構造の機能的意義については今も様々な議論が行われているが, そ

\*〒 152-0011 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W8-16

†E-mail: nakao@mei.titech.ac.jp

の解明には、静的なネットワーク構造の特性だけでなく、その上でのダイナミクスについて知る必要がある。

複雑ネットワーク上の動的過程として早い時期から研究されてきたのは感染症のモデルである。Pastor-Satorras と Vespignani<sup>13,14)</sup> は、スケールフリーネットワーク上の感染症の数理モデルを平均場近似を用いて解析し、伝染病が蔓延し始める臨界感染確率が、系の大きさが無限大の極限でゼロとなることを予想した。これは従来の連続空間上の感染症モデルとは全く異なる予想であり、非常に大きなインパクトを与えた。実際の航空路線ネットワークの情報を取り入れた感染症モデルも解析されており<sup>15,16)</sup>、2003年の SARS(重症急性呼吸器症候群)流行時の患者数データとの比較などが行われている。

ネットワーク上の動的過程としては、非線形振動子系も詳しく調べられてきている<sup>10,12,13)</sup>。これは、スモールワールドネットワークの簡潔なモデルの提唱者である Strogatz が、当初からその重要性を主張していたことによる。特に、ネットワークの各ノード上に位相変数のみによって記述される自律振動子を置いた Kuramoto 型のモデル<sup>10)</sup>について多数の研究が行われており、振動子の集団同期現象に対するネットワークの結合トポロジーの影響が議論されている<sup>17,18)</sup>。また、ネットワークの各ノードにカオス素子が置かれたモデルも数理的興味から盛んに解析されている<sup>12,13,19)</sup>。ネットワーク結合振動子系の重要な実例としては電力系統が挙げられる。交流電力系統においては、送電網につながる全ての発電機は同期稼働している必要があり、同期の破れ(脱調)は発電機の停止およびカスケード的な大規模停電につながる可能性がある。実際、送電網の一部の不具合から大規模な停電に至った事例がしばしば報告されている<sup>20)</sup>。

### 1.3 ネットワーク上の Turing 不安定性とパターン形成

前節でネットワーク上の動的過程に関する代表的な研究の例を挙げたが、複雑ネットワーク構造の意義を理解するためには、その上に生じ得る非一様なダイナミクスをさらに探求する必要がある。そのような試みのひとつとして、著者らは複雑ネットワーク上の活性-抑制因子の反応拡散系を解析し、Turing 不安定性によって非一様なパターンが自発的に形成されることを示した<sup>21)</sup>。また、3種の因子が存在する場合には、振動的 Turing 不安定性によって非一様な振動パターンが生じ得ることを示した<sup>22,23)</sup>。本稿ではネットワーク上の反応拡散系における Turing 不安定性とパターン形成に関する著者らの最近の研究について概説する。

ネットワーク反応拡散系の自然界における明確な実例は挙げにくいだが、例えば生態系においては、生物種は空間的に一様に分布しているとは限らず、細い経路でつな

がった森林や河川、湖沼のような分断された生息環境に分布していることも多い。そのような生物群集の群はメタポピュレーションと呼ばれ<sup>24)</sup>、その持続可能性について多くの議論がなされている。生物群集の生息環境のネットワーク構造については多くの研究があり<sup>25,26)</sup>、そこに被食者-捕食者系が存在すれば、ネットワーク反応拡散系によるモデル化が妥当だと考えられる。

また、単純なモデル生物である線虫の発生過程については、卵からどのような順序で細胞が分裂し、細胞間の接触ネットワークが形成されるかが明らかにされており<sup>27)</sup>、そのような細胞間の接触ネットワークにおける化学物質のやりとりを通じて、初期には一様な細胞群が分化して形態が形成されると考えられている。これは元々 Turing 自身が考えた問題でもあり、ネットワーク反応拡散系の解析によって示唆が得られる可能性がある。

## 2 ネットワーク上の反応拡散系

### 2.1 ネットワーク上の拡散

$N$  個のノード(頂点)からなるネットワーク(グラフ)を考え、各ノードの番号を  $i = 1, \dots, N$  で表そう。ネットワークは連結で無向、つまり、任意のふたつのノード間を結ぶ経路が存在し、また、ノード間のリンク(辺)に方向性はないとする。ネットワークの結合トポロジーは隣接行列  $A_{ij}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) で表され、ノード  $i$  と  $j$  ( $i \neq j$ ) の間に結合があれば  $A_{ij} = 1$ 、なければ  $A_{ij} = 0$  とする。ノード  $i$  から  $i$  自身への結合は考えない ( $A_{ii} = 0$ )。ノード  $i$  の持つ次数  $k_i$ 、すなわちリンクの数は、隣接行列  $A_{ij}$  を用いて  $k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij}$  と表される。

ネットワークの各ノード上に何らかの化学物質(あるいは生物種)が存在するとして、その濃度(個体数)を  $x_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) で表す。この化学物質がノード間のリンクを通じて拡散する状況を考えよう。拡散は通常の Fick の法則に従うとする(図 1(a))。つまり、単位時間にノード  $j$  からノード  $i$  に流入する化学物質は、ノード間の濃度差に比例し、拡散定数を  $D$  として  $D(x_j - x_i)$  で与えられる。従って、ネットワーク上の拡散方程式は

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = D \sum_{j=1}^N A_{ij} \{x_j(t) - x_i(t)\} \quad (1)$$

となる。ここで Laplacian 行列を

$$L_{ij} = A_{ij} - k_i \delta_{ij} \quad (2)$$

と定義すれば(標準的な定義とは符号が異なる)、式(1)を

$$\frac{dx_i(t)}{dt} = D \sum_{j=1}^N L_{ij} x_j(t) \quad (3)$$

と簡潔に表すことができる。

例えば 1 次元格子を考えて  $A_{ij} = 1$  ( $j = i \pm 1$ ), 0 (それ以外) とすると,  $\sum_j L_{ij}x_j = x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}$  となり, 通常の連続系における Laplace 作用素を差分化したものとなる. 同様に, 全結合のネットワークを考えて  $A_{ij} = 1$  ( $j \neq i$ ), 0 ( $j = i$ ) とすると,  $\sum_j L_{ij}x_j = N(\bar{x} - x_i)$  という平均場型の結合となる. ここで  $\bar{x} = \sum_j x_j/N$  は  $x_i$  の平均場を表す.

## 2.2 ネットワーク上の反応拡散系

ネットワークの各ノード上に  $M$  種類の化学物質があるとして, ノード  $i$  上の化学物質の濃度の組をベクトル  $\mathbf{x}_i = (x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(M)})^T$  で表そう. ここで上付き文字  $m = 1, \dots, M$  は化学種の番号を示し,  $T$  は転置を表す. どのノード上でも同じ化学反応が起きており, ノードが孤立している時には, その反応ダイナミクスが

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \quad (4)$$

で表されるとする. ノード間のリンクを通じた化学物質の拡散を考えると, ネットワーク上の反応拡散方程式は

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_i(t)) + \mathbf{D} \sum_{j=1}^N L_{ij}\mathbf{x}_j(t) \quad (5)$$

となる. ここで, 化学物質  $m$  の拡散定数を  $D_m$  として, 拡散定数行列を  $\mathbf{D} = \text{diag}(D_1, \dots, D_M)$  と定義した.

Laplacian 行列の性質

$$\sum_{j=1}^N L_{ij} = \left( \sum_{j=1}^N A_{ij} \right) - k_i = 0 \quad (6)$$

より, 全ての化学種の濃度がネットワーク上で一様で

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_0(t) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (7)$$

ならば, これは反応拡散方程式 (5) の解である. ここで  $\mathbf{x}_0(t)$  は式 (4) の解で  $d\mathbf{x}_0(t)/dt = \mathbf{F}(\mathbf{x}_0(t))$  を満たす. このネットワーク上の一様解は, 拡散がないときには線形安定であったとしても, 拡散の導入によって不安定化する可能性がある. これは拡散誘起不安定性と呼ばれ, Turing 不安定性はその代表例である.

## 2.3 線形安定性解析

ネットワーク上の Turing 不安定性については, 既に 1971 年に Othmer と Scriven によって一般的に解析されているが<sup>28)</sup>, 扱われたネットワークの例は三角格子やハニカム格子, 多面体などの規則的なものであった. その後, Horsthemke らにより, 小規模なランダムネットワーク上の Turing 不安定性が解析された<sup>29)</sup>.

式 (7) で表されるネットワーク上の一様状態が定常で時間依存せず,  $\mathbf{x}_0$  が  $\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = 0$  を満たす式 (4) の安定

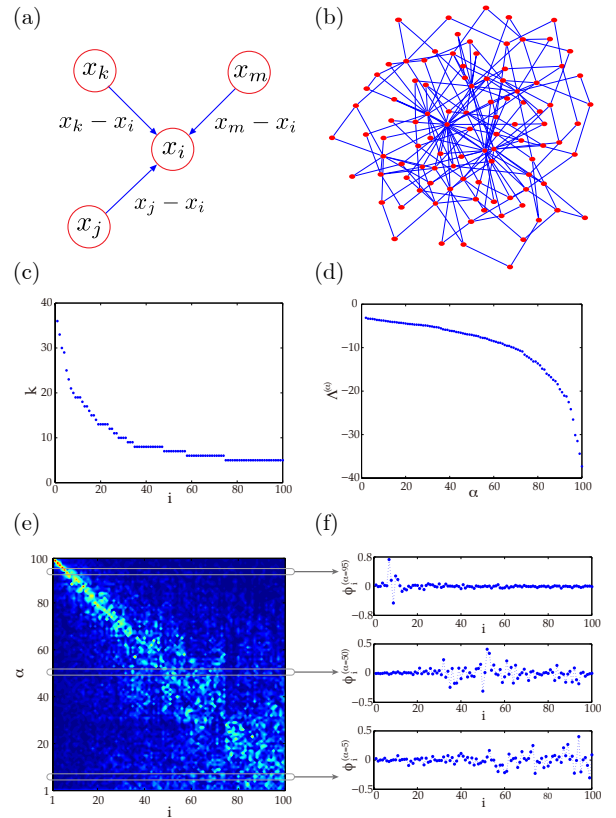


図 1 (a) ネットワーク上の拡散, (b) スケールフリーネットワークの例 ( $N = 100$ ,  $\langle k \rangle = 2$ ). (c-f) スケールフリーネットワーク ( $N = 100$ ,  $\langle k \rangle = 10$ ) の (c) 次数  $k_i$ , (d) Laplacian 固有値  $\Lambda^{(\alpha)}$ , (e) 全ての Laplacian 固有ベクトル (絶対値  $|\phi_i^{(\alpha)}|$  の濃淡プロット, 縦軸がモード番号  $\alpha$ , 横軸がノード番号  $i$ ), (f) いくつかの典型的な Laplacian 固有ベクトル (ノード番号  $i$  に対してプロット).

な固定点であるとしよう. この一様定常解  $\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_0$  に, ノード毎に異なる微小摂動  $\mathbf{y}_i(t)$  が加わったとして,

$$\mathbf{x}_i(t) = \mathbf{x}_0 + \mathbf{y}_i(t) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (8)$$

と表す. これを式 (5) に代入して線形化すると

$$\frac{d}{dt}\mathbf{y}_i(t) = \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)\mathbf{y}_i(t) + \mathbf{D} \sum_{j=1}^N L_{ij}\mathbf{y}_j(t) \quad (9)$$

となる. ここで  $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$  はベクトル場  $\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$  の点  $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_0$  における Jacobi 行列で, その成分は  $J_{ij}(\mathbf{x}_0) = \partial F_i(\mathbf{x})/\partial x_j|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}$  ( $i, j = 1, \dots, N$ ) で与えられる.

線形化方程式 (9) を解析するために, Laplacian 行列  $L_{ij}$  の固有値  $\Lambda^{(\alpha)}$  と対応する固有ベクトル  $(\phi_1^{(\alpha)}, \dots, \phi_N^{(\alpha)})$  を導入しよう. ノード数が  $N$  なので, 固有値と固有ベクトルのペアも  $N$  組あり, それらを固有モード番号  $\alpha = 1, \dots, N$  で表す. これらは固有値方程式

$$\sum_{j=1}^N L_{ij}\phi_j^{(\alpha)} = \Lambda^{(\alpha)}\phi_i^{(\alpha)} \quad (10)$$

により決定される。\$L\_{ij}\$ は実対称行列なので固有値は全て実であり、対応する固有ベクトルは \$\sum\_{i=1}^N \phi\_i^{(\alpha)} \phi\_i^{(\beta)} = \delta\_{\alpha,\beta}\$ と正規直交化できる。また、連結なネットワークの Laplacian 行列は、ゼロ固有値をひとつだけ持ち、それ以外は全て負であることが知られている<sup>13)</sup>。以下、固有値が \$0 = \Lambda^{(1)} > \Lambda^{(2)} \geq \dots \geq \Lambda^{(N)}\$ という順に並ぶようにモード番号 \$\alpha\$ を与える。

Laplacian 固有ベクトルを用いて、摂動 \$\mathbf{y}\_i(t)\$ を

$$\mathbf{y}_i(t) = \sum_{\alpha=1}^N \mathbf{c}^{(\alpha)} \exp[\lambda^{(\alpha)} t] \phi_i^{(\alpha)} \quad (11)$$

と展開する。ここで \$\mathbf{c}^{(\alpha)} = (c\_1^{(\alpha)}, \dots, c\_M^{(\alpha)})^T\$ は \$\alpha\$ 番目の Laplacian 固有モードの展開係数ベクトル、\$\lambda^{(\alpha)}\$ はその線形成長率である。これを線形化方程式 (9) に代入して、\$\mathbf{c}^{(\alpha)}\$ が非自明な解を持つとすると、特性方程式

$$\det |J(\mathbf{x}_0) + D\Lambda^{(\alpha)} - \lambda^{(\alpha)} I| = 0 \quad (12)$$

が得られる。ここで \$I\$ は単位行列を表す。この方程式から、各 \$\alpha = 1, \dots, N\$ に対して、線形成長率 \$\lambda^{(\alpha)}\$ の \$M\$ 個の値が Laplacian 固有値 \$\Lambda^{(\alpha)}\$ の関数として決定される。

系の一様解が線形安定であるためには、全ての固有モード \$\alpha\$ について、その \$M\$ 個の成長率の実部が負でなくてはならない。系のパラメータを変化させたときに、ある固有モードの成長率のうち、最大の実部を持つものの実部がゼロを超えると、この固有モードは成長を始め、一様解は線形不安定となる。この最初に不安定化する固有モードを臨界固有モードという。ここで成長率が実数ならば通常の Turing 不安定性が生じる。一方、成長率が複素数の場合は振動的な不安定性が生じる。振動的な不安定性の可能性についても Turing の原論文中で指摘されているため<sup>1)</sup>、これを振動的 Turing 不安定性と呼ぶことにする（連続媒質においては、そのような不安定性によって定在波や進行波が生じるため、wave 不安定性とも呼ばれる）。そこで Turing が指摘したように、振動的な不安定性が生じるためには \$M \geq 3\$ である必要がある<sup>1,22,30)</sup>。これは連続媒質上に限らず、無向ネットワーク上においても同様である<sup>22,23)</sup>。

## 2.4 スケールフリーネットワーク

ネットワークの結合トポロジーとして、良く知られた Barabási-Albert の preferential attachment アルゴリズムによって生成したスケールフリーネットワークを考えよう<sup>11)</sup>。先に述べたように、実世界の様々なネットワークがスケールフリー性を持つこと、つまり次数分布が特徴的なスケールのないべき則に従うことが示されているが、現実の被食者-捕食者系の生息環境や、発生時の細胞間の接触ネットワークの例としては、必ずし

も適切ではない可能性がある。しかし、スケールフリーネットワークは以下に述べる単純な性質を持つため、理論的に見通しが良く、ダイナミクスの一般的な性質を調べる上で有用である。

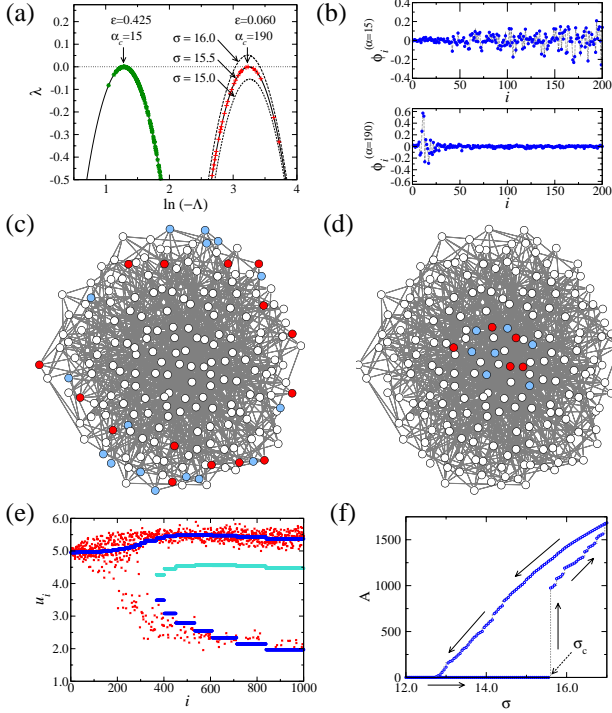
Barabási-Albert アルゴリズムによって生成したランダムなスケールフリーネットワークの例を図 1(b) に示す。スケールフリー性を反映して、多数のリンクを持つ少数のハブ的なノードと、少数のリンクしか持たない多数の周辺ノードが存在することがわかる。図 1(c) に各ノード \$i\$ の次数 \$k\_i\$ を示す。ノード番号 \$i\$ は次数が \$k\_1 \geq k\_2 \geq \dots \geq k\_N\$ となるように定める。後で述べるように、これはスケールフリーネットワーク上のパターンを表示する簡便な手法を与える。図より、ノードの最大次数と最小次数の間には大きな隔りがあることがわかる。図 1(d) には同じネットワークの Laplacian 固有値 \$\Lambda^{(\alpha)}\$ を示す。既に述べたように、固有値が大きな順に並ぶように固有モードの番号 \$\alpha\$ を定めており、固有値の最大値と最小値にも大きな隔りがあることがわかる。

図 1(e) に、このスケールフリーネットワークの全 Laplacian 固有ベクトル \$\{\phi\_i^{(\alpha)}\}\$ を示す。ここで横軸はノード番号 \$i\$、縦軸はモード番号 \$\alpha\$ である。明確な対角線状の構造が見て取れるが、これは各固有ベクトルの大きく変動する成分が、それぞれ特定の値に近い次数を持つノード上に局在しているためである。図 1(f) に示すように、例えば、大きな負の値の Laplacian 固有値 (\$\alpha = 95\$) に対応する固有ベクトルは、大きな次数のハブ的なノードにのみ成分を持ち、逆に、ゼロに近い固有値 (\$\alpha = 5\$) を持つ固有ベクトルは、小さな次数の周辺ノードに成分を持つ。このように、スケールフリーネットワークの次数と固有値・固有ベクトルの間には明確な対応関係がある<sup>21,31)</sup>。これは、スケールフリーネットワークでは次数が特に重要な意味を持つことを示しており、実際、次数で整理することにより、その上で生じる Turing 不安定性を解釈できる。なお、ここで示した固有ベクトルの局在性については、固有値方程式 (10) の平均場近似と摂動解析により、定性的に説明できる<sup>32)</sup>。

## 3 定常 Turing 不安定性とパターン形成

### 3.1 Mimura-Murray の被食者-捕食者モデル

具体的な反応拡散系のダイナミクスとして、まず Mimura と Murray によって考察された被食者-捕食者の 2 種が相互作用するモデルを考えよう<sup>8)</sup>。連続媒質上の Mimura-Murray モデルは Turing 不安定性によって空間周期パターンを生じることが示されており、これをネットワーク上に一般化する。ネットワークの各ノードは個々の生息領域を表し、被食者数 \$u\$ と捕食者数 \$v\$ のふたつの変数を持つ。ノード \$i\$ の変数を \$\mathbf{x}\_i = (u\_i, v\_i)^T\$ と



**図 2** (a)  $N = 200$ ,  $\langle k \rangle = 10$  のスケールフリーネットワークにおける各 Laplacian 固有モードの線形成長率,  $\epsilon = 0.425$  (緑の\*印),  $0.060$  (赤い+印) について表示. (b) (a) に示したふたつの臨界固有モードのノード番号  $i$  に対するプロット. (c-d) (b) に示したふたつの臨界固有モードをネットワーク上に表示. 固有モードの局在性に対応して (c) ネットワークの周辺部 ( $\alpha = 15$ ) あるいは (d) ハブ部 ( $\alpha = 190$ ) に局在した分化が起こる. (e) 十分に緩和した後の定常 Turing パターン ( $N = 1000$ ,  $\langle k \rangle = 20$ ,  $\sigma = 15.6$ ,  $\epsilon = 0.12$ ). ノード番号  $i$  に対してプロット. 曲線は平均場近似の結果. (f) ヒステリシス.  $\sigma$  を増減させて測定した定常 Turing パターンの振幅  $A$  を表示. 矢印は  $\sigma$  を変化させた方向を表す.

表す. 両種はネットワークを介して異なる生息領域間を拡散する. 各ノードにおける被食者-捕食者の相互作用を表すダイナミクス  $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (F_u(u, v), F_v(u, v))^T$  は,

$$\begin{aligned} F_u(u, v) &= \{(a + bu - u^2)/c - v\}u, \\ F_v(u, v) &= \{u - (1 + dv)\}v \end{aligned} \quad (13)$$

で与えられる<sup>8)</sup>. パラメータは  $a = 35$ ,  $b = 16$ ,  $c = 9$ ,  $d = 2/5$  で, 固定点は  $\mathbf{x}_0 = (u_0, v_0)^T = (5, 10)^T$  となる. また, 被食者と捕食者の拡散定数をそれぞれ  $D_u = \epsilon$ ,  $D_v = \sigma\epsilon$  と表す. ここで  $\epsilon$  は全体的な拡散定数を,  $\sigma$  は被食者に対する捕食者の拡散定数の比を表す.

### 3.2 線形安定性と臨界固有モード

図 2(a) に, スケールフリーネットワーク上の Mimura-Murray モデルの一樣定常解に与えた摂動の各固有モードの線形成長率を, 大小ふたつの  $\epsilon$  の値について示す.

グラフの横軸は Laplacian 固有値  $\Lambda^{(\alpha)}$  を, 縦軸は対応する固有モードの成長率の最大値  $\lambda^{(\alpha)}$  を表す. 被食者に対する捕食者の拡散定数の比  $\sigma$  がある臨界値  $\sigma_c$  (図 2 の状況では 15.5 程度) を超えると, ある臨界固有モード  $\alpha_c$  の最大の線形成長率  $\lambda^{(\alpha_c)}$  がゼロを超え, 一樣定常解は不安定化することがわかる. 臨界固有モードは拡散定数  $\epsilon$  の値に依存して変化する.

図 2(a) に対応する臨界固有モード ( $\alpha_c = 15, 190$ ) を図 2(b) に示す. 図 1(e) に示したように, 各固有モードの揺らぎの大きい成分は, 特定の次数を持つノード群に局在している. 図 2(c),(d) は, 臨界固有モード ( $\alpha_c = 15, 190$ ) をネットワーク上に示したものである. ここで, リンク数の多いハブ的なノードは中央に, リンク数の少ない周辺的なノードは外縁部に配置されている. 各固有モードの次数に対する局在性を反映して, 図 2(c) では周辺部のノードが分化しており, 一方, 図 2(d) では中央のハブ的なノードが分化していることがわかる. Turing 不安定性が起きた直後には, このようなパターンがネットワーク上に生じる.

### 3.3 定常 Turing パターンと平均場近似による解釈

数値シミュレーションによると, この Turing 不安定性に対応する分岐は亜臨界であり, 微小摂動の発展は弱い非線形領域には留まらず, 強い非線形緩和を経て定常状態に達する. そのため, 図 2(e) に示すように, 最終的に得られる定常 Turing パターンは臨界固有モードとは大きく異なる. また, パラメータ  $\sigma$  を増減させて定常パターンの振幅  $A = \left( \sum_{j=1}^N [(u_j - u_0)^2 + (v_j - v_0)^2] \right)^{1/2}$  をプロットすると, 図 2(f) に示すようなヒステリシスが観察される.

さて, 図 2(e) はネットワーク上の定常 Turing パターンを次数  $k_i$  の大きい順にソートしたノード番号  $i$  に対してプロットしたものであり, 揺らぎはあるものの, 何らかの明確に規則性のある分布パターンが見て取れる. これを解釈するために, スケールフリーネットワークの解析において良く使われる平均場近似<sup>14)</sup>を適用しよう. この近似では, ネットワークの詳細な結合トポロジーを一切無視し, 各ノードは単にその次数に応じてネットワーク全体の大域的な平均場の影響を受けていると考える. このとき, 反応拡散系 (5) の拡散項は

$$\sum_{j=1}^N L_{ij} \mathbf{x}_j = \left( \sum_{j=1}^N A_{ij} \mathbf{x}_j \right) - k_i \mathbf{x}_i \simeq k_i (\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{x}_i) \quad (14)$$

と近似できる. ここで  $\bar{\mathbf{x}}$  は次数の重みを考慮したネットワーク全体にわたる  $\mathbf{x}_i$  の平均場であり,

$$\bar{\mathbf{x}} = \sum_{j=1}^N \frac{k_j}{k_{\text{total}}} \mathbf{x}_j, \quad k_{\text{total}} = \sum_{j=1}^N k_j \quad (15)$$

と定義される. この近似の下では, 反応拡散系 (5) は各ノード毎に独立した方程式に分離され,

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x}_i(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_i(t)) + k_i D \{\bar{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}_i(t)\} \quad (16)$$

という形に書くことができる. 従って, この近似の下では, 同じ次数を持つノードは全て同じ式 (16) に従い, 行列  $k_i D$  の各要素がその分岐パラメータとなる. 今の場合,  $k_i D = k_i \text{diag}(\epsilon, \sigma\epsilon)$  なので,  $\sigma$  を固定すれば  $\epsilon k_i$  が分岐パラメータとなり, 各ノードのダイナミクスはその次数によって決まることがわかる.

図 2(e) の曲線は, 平均場近似下の式 (16) の固定点における  $u_i$  の値を各  $i$  に対してプロットしたものである. 次数  $k_i$  の変化に対応して不完全ピッチフォーク分岐が生じており, 各ノードは安定固定点を 1 個持つか, あるいは 2 個の安定固定点と 1 個の不安定固定点を持つかのいずれかである. ここで平均場  $\bar{x}$  の値は直接数値計算で得た最終的な定常パターンから求めたものを用いている (近似的な自己無撞着方程式を数値的に解くことにより理論的にもある程度は決定できる). 直接数値計算によって得られた定常 Turing パターンは, これらの安定固定点の周辺に分布していることがわかる.

このように, スケールフリーネットワーク上に生じる Turing パターンの形状については, 平均場近似によって解釈できる. すなわち, スケールフリーネットワークにおいては, 次数に依存した強度で平均場からの影響を受ける各ノードのダイナミクスの分岐ダイアグラムが, 定常 Turing パターンとして観察されているものと解釈できる. これはスケールフリーネットワークにおける次数の重要性を直接反映する結果である. もちろん, 平均場近似は詳細なノード間の結合を一切無視した近似であり, そのまわりのパターンのばらつきは, 実際のネットワーク結合の不均一性などによって決まる. これを再現するために, さらに式 (16) にランダム性を導入する事も可能ではあるが, 本質的な部分は平均場近似によって捉えられていると考えられる.

## 4 振動的 Turing 不安定性とパターンダイナミクス

### 4.1 3 種の食物連鎖モデル

次に, ネットワーク構造を持つ生息環境において, 頂点捕食者-中間捕食者-被食者の 3 種が相互作用するメタポピュレーションモデルを考えよう (図 3(a)). このモデルでは, 通常の Turing 不安定性と振動的 Turing 不安定性の両者が生じるが, ここでは後者に注目する.

被食者数を  $u$ , 中間捕食者数を  $v$ , 頂点捕食者数を  $w$  で表し, ノード  $i$  の変数を  $\mathbf{x}_i = (u_i, v_i, w_i)^T$  とする. 捕食-被食相互作用の記述に Holling タイプ II 型の応答関数<sup>3)</sup>を仮定すると, 各ノードにおける種間の相互作用

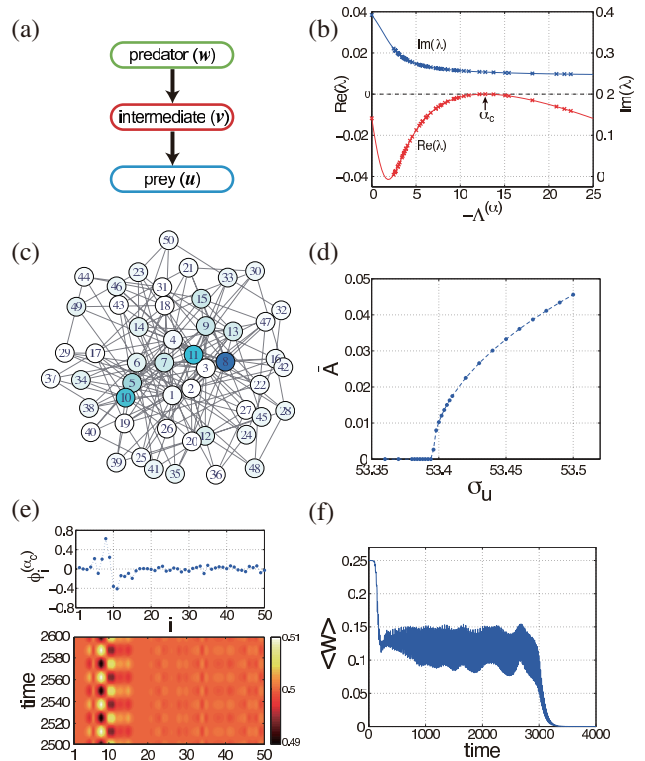


図 3 (a) 頂点捕食者-中間捕食者-被食者からなる生態系モデル. (b) 摂動の各固有モードの最大線形成長率の実部と虚部.  $\epsilon = 0.0022$ ,  $\sigma_u = 53.42$ ,  $\sigma_v = \sigma_w = 1$ . (c) ネットワーク上の局在振動. (d) 振幅の分岐パラメータ  $\sigma_u$  依存性. (e) 局在振動パターンの時間発展 (下) と臨界固有モード (上). (f) 拡散誘起振動に起因する絶滅.  $\langle w \rangle = \sum_{j=1}^N w_j / N$  は頂点捕食者の個体数  $w_i$  の平均.  $\epsilon = 0.001$ ,  $\sigma_u = 675$ ,  $\sigma_v = \sigma_w = 1$ .

ダイナミクス  $\mathbf{F} = (F_u, F_v, F_w)^T$  は

$$\begin{aligned} F_u(u, v, w) &= \left[ a_u - b_u u - c_u \frac{v}{u + \mu} \right] u, \\ F_v(u, v, w) &= \left[ -a_v + c_v \frac{u}{u + \mu} - d_v \frac{w}{v + \nu} \right] v, \\ F_w(u, v, w) &= \left[ -a_w + d_w \frac{v}{v + \nu} \right] w \end{aligned} \quad (17)$$

となる. ここでパラメータは  $a_u = 1$ ,  $b_u = 1$ ,  $c_u = 1$ ,  $a_v = 1/4$ ,  $c_v = 1$ ,  $d_v = 1$ ,  $a_w = 1/2$ ,  $d_w = 1$ ,  $\mu = \nu = 1/2$  とする. 固定点は  $\mathbf{x}_0 = (u_0, v_0, w_0)^T = (1/2, 1/2, 1/4)^T$  となる. 拡散定数行列は,  $\epsilon$  を全体的な拡散定数,  $\sigma_{u,v,w}$  を各々の種の拡散定数の比として  $D = \text{diag}(D_u, D_v, D_w) = \text{diag}(\epsilon\sigma_u, \epsilon\sigma_v, \epsilon\sigma_w)$  と表す.

一様定常解の線形安定性解析は, 先の Mimura-Murray モデルの場合と同様である. 図 3(b) に  $N = 50$ ,  $\langle k \rangle = 8$  のスケールフリーネットワーク上で振動的な Turing 不安定性が生じた状況における各固有モードの成長率の実部と虚部を示す. ある固有モードの実部がゼロを超え,

一様定常解が不安定化している。このとき成長率の虚部はゼロではないので、この不安定性は振動的である。

#### 4.2 臨界固有モードと振動的 Turing パターン

Mimura-Murray モデルの場合と同様に、一様解の不安定化によってネットワーク上に局在したパターンが生成されるが、このパターンは時間的に振動を続ける。直接数値計算によると、この振動的 Turing 不安定性によって、特定の次数のノード近傍に局在した振動が生じる。この不安定化は超臨界 Hopf 分岐に対応し、生じたパターンは弱い非線形性によって抑えられる。その結果、特定の次数のノード近傍に局在した振動が観察される(図 3(c,e))。分岐パラメータ  $\sigma_u$  を変化させると、パターンの振幅  $A$  の時間平均は分岐点からの距離の平方根でスケールし(図 3(d))、ヒステリシスは生じない。臨界固有モードと、振動的 Turing パターンの時間発展をノード番号に対してプロットしたものを、図 3(e) に示す。分岐が超臨界であるため、分岐点近傍でのパターンは臨界固有モードとほぼ対応がつく。系は全体として定常なりミットサイクル振動を示している。

#### 4.3 振動による種の絶滅

このモデルで見出された興味深い現象として、分岐点から遠く離れたところでは、振動的 Turing 不安定性によって生じる個体数の変動が定常なりミットサイクル振動には収束せず、長い時間振動を続けた後、最終的にはいくつかの種が絶滅してしまうというものがある(図 3(f))。これは、ネットワーク上のメタポピュレーションにおいて、生物種の拡散の効果によって生態系が不安定となる状況を示している。もちろんこれは単純な数理モデルの一挙動に過ぎないが、通常、生物種の拡散は生態系の安定性を高めるものと考えられおり、その正反対の状況が生じる可能性を示唆するものとして興味深い。

### 5 まとめ

複雑ネットワーク上の反応拡散系における非一様な Turing パターンについて概説した。2成分の活性-抑制因子(被食者-捕食者)系では、通常の連続媒質の場合と同様に、拡散定数の比が臨界値を超えると系の一様解が不安定化した。スケールフリーネットワーク上の Mimura-Murray モデルでは、この Turing 不安定性は重臨界分岐に対応し、系に強いヒステリシスが観察された。最終的な Turing パターンは臨界固有モードとは大きく異なるが、平均場近似によりその骨格を理解できた。3成分の食物連鎖モデルにおいては、振動的な Turing 不安定性が観察された。これは超臨界分岐に対応し、最終的な振動的 Turing パターンは臨界固有ベクトルを用いてほぼ説明

できた。また、分岐点から遠方では、拡散の効果によっていくつかの種が絶滅に至る可能性が示唆された。

実世界の生態系に対しては制御された実験を行うことが難しいため、そこで観察される空間パターンが実際に Turing 不安定性によるものであるかどうかを検証することは難しい。しかし、近年では遺伝子操作によって実効的に被食者や捕食者のように振る舞う細菌をデザインして相互作用させることが可能となっている<sup>33)</sup>。また、マイクロフルイディクスの発展により、ネットワーク構造をなすマイクロな反応槽を作る事も可能となっている<sup>34)</sup>。そのような実験手法の発展により、いずれはマイクロな人工生態系においてネットワーク Turing パターンが実現されることを期待してもよいだろう。

最後になったが、本誌は「ながれ」であるにもかかわらず、本稿では「拡散」についてしか議論しなかった。通常の連続媒質の場合には、活性-抑制因子の反応移流系においても、空間一様解が不安定化して非一様なパターンが形成されることが示されている<sup>35)</sup>。同様に、ネットワーク上においても、拡散ではなく流れに誘起されるパターン形成が生じ得るものと考えられる。これに関して、著者らは最近の研究でネットワーク上の保存的な流れに移流されるパッシブスカラーの問題を考察した<sup>36)</sup>。この解析をネットワーク上の活性-抑制因子の反応移流系に拡張することにより、拡散による Turing 不安定性とは定性的に異なる、流れによるパターン形成がネットワーク上においても生じることが分かりつつある。

#### 謝辞

共同研究者である独 Max Planck 協会 Fritz Haber 研究所の Alexander S. Mikhailov 教授と、本稿を書く機会を与えて下さいました京都大学の横山直人博士に感謝します。本研究は科研費と日本学術振興会海外特別研究員制度の援助を受けています。

#### 引用文献

- 1) Turing, A. M. The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B* **237** (1952) 37–72.
- 2) Gierer, A. & Meinhardt, H. A theory of biological pattern formation. *Kybernetik* **12** 30-39 (1972).
- 3) Murray, J. D. *Mathematical Biology* (Springer, 2003).
- 4) Castets, V., Dulos, E., Boissonade, J. & De Kepper, P. Experimental evidence for a sustained standing Turing-type nonequilibrium chemical pattern. *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990), 2953–2956.
- 5) Ouyang, Q. & Swinney, H. L. Transition from a uniform state to hexagonal and striped Turing patterns. *Nature* **352** (1991), 610–612.

- 6) Maini, P. K., Baker, R. E. & Chuong, C. M. The Turing model comes of molecular age. *Science* **314** (2006), 1397–1398.
- 7) Kondo, S., & Miura, T. Reaction-diffusion model as a framework for understanding biological pattern formation. *Science* **329** (2010), 1616–1620.
- 8) Mimura, M. & Murray, J. D. On a diffusive prey-predator model which exhibits patchiness. *J. Theoret. Biol.* **75** (1978) 249–262.
- 9) Rietkerk, M. & van de Koppel, J. Regular pattern formation in real ecosystems. *Trends Ecol. Evol.* **23** (2008) 169–175.
- 10) Strogatz, S. H. Exploring complex networks. *Nature* **410** (2001), 268–276.
- 11) Albert, R. & Barabási, A. L. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.* **74** (2002) 47–97.
- 12) Boccaletti, S., Latora, V., Moreno, Y., Chavez, M. & Hwang, D-U. Complex networks: Structure and dynamics. *Phys. Rep.* **424** (2006), 175–308.
- 13) Barrat, A., Barthélemy, M. & Vespignani, A. *Dynamical Processes on Complex Networks* (Cambridge Univ. Press, 2008).
- 14) Pastor-Satorras, R. & Vespignani, A. Epidemic spreading in scale-free networks. *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), 3200–3203.
- 15) Hufnagel, L., Brockmann, D. & Geisel, T. Forecast and control of epidemics in a globalized world. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** (2004), 15124–15129.
- 16) Colizza, V., Barrat, A., Barthélemy, M. & Vespignani, A. The role of the airline transportation network in the prediction and predictability of global epidemics. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **103** (2006), 2015–2020.
- 17) Hong, H., Choi, M. Y., & Kim, B. J. Synchronization on small-world networks. *Phys. Rev. E* **65** (2002), 026139.
- 18) Ichinomiya, T. Frequency synchronization in a random oscillator network. *Phys. Rev. E* **70** (2004), 026116.
- 19) Pecora, L. M. & Carroll, T. L. Master stability functions for synchronized coupled systems. *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998), 2109–2112.
- 20) Hines, P., Balasubramanian K., & Sanchez, E. C. Cascading failures in power grids. *Potentials, IEEE* **28** (2009), 24–30.
- 21) Nakao, H. & Mikhailov, A. S. Turing patterns in network-organized activator-inhibitor systems. *Nature Physics* **6** (2010), 544–550.
- 22) Hata, S., Nakao, H. & Mikhailov, A. S. Sufficient conditions for wave instability in three-component reaction-diffusion systems. *Progr. Theor. Exp. Phys.* (2014) 013A01 doi:10.1093/ptep/ptt102.
- 23) Hata, S., Nakao, H. & Mikhailov, A. S. Dispersal-induced destabilization of metapopulations and oscillatory Turing patterns in ecological networks. *Sci. Rep.* **4** (2014), 3585.
- 24) Hanski, I. Metapopulation dynamics. *Nature* **396** (1998), 41–49.
- 25) Urban, D. & Keitt, T. Landscape connectivity: A graph-theoretic perspective. *Ecology* **82** (2001), 1205–1218.
- 26) Fortuna, M. A., Gómez-Rodríguez, C. & Bascompte, J. Spatial network structure and amphibian persistence in stochastic environments. *Proc. R. Soc. B* **273** (2006), 1429–1434.
- 27) Bignone, F. A. Structural complexity of early embryos: A study on the nematode *Caenorhabditis elegans*. *J. Biol. Phys.* **27** (2001), 257–283.
- 28) Othmer, H. G. & Scriven, L. E. Instability and dynamic pattern in cellular networks. *J. Theor. Biol.* **32** (1971), 507–537.
- 29) Horsthemke, W., Lam, K. & Moore, P. K. Network topology and Turing instability in small arrays of diffusively coupled reactors. *Phys. Lett. A* **328** (2004), 444–451.
- 30) Anma, A., Sakamoto, K. & Yoneda, T. Unstable subsystems cause Turing instability. *Kodai Mathematical Journal* **35** (2012) 215–247.
- 31) McGraw, P. N. & Menzinger, M. Laplacian spectra as a diagnostic tool for network structure and dynamics. *Phys. Rev. E* **77** (2008), 031102.
- 32) Hata, S. & Nakao, H. Localization of Laplacian eigenvectors on complex networks, in preparation.
- 33) Balagaddé, F. K., Song, H., Ozaki, J., Collins, C. H., Barnet, M., Arnold, F. H., Quake, S. R. & You, L. A synthetic *Escherichia coli* predator-prey ecosystem. *Mol. Syst. Biol.* **4** (2008), 1–8.
- 34) Weibel, D. B., & Whitesides, G. M. Applications of microfluidics in chemical biology. *Current Opinion in Chemical Biology* **10** (2006), 584–591.
- 35) Rovinsky, A. B. & Menzinger, M. Chemical instability induced by a differential flow. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1193.
- 36) Hata, S., Nakao, H., & Mikhailov, A. S. Advection of passive particles over flow networks, submitted. arXiv:1312.4849