

平成 30 年 6 月 13 日現在

機関番号：32680

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400213

研究課題名(和文) 反応拡散系パターンの自己組織化機構を用いたメッシュ生成法の発展

研究課題名(英文) Development of a mesh-generator using a reaction-diffusion mechanism

研究代表者

上山 大信 (UEYAMA, Daishin)

武蔵野大学・工学部・教授

研究者番号：20304389

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：コンピュータシミュレーションの発展は、コンピュータの性能向上と共に、様々な分野に拡がりつつある。その中で、空間の離散化はシミュレーションにおいては必須であり、その善し悪しがシミュレーションの精度に直接関係する。本研究では、反応拡散系におけるパターン形成が持つ自己組織化機構の直接の応用として、複雑な領域における反応拡散系のシミュレーション結果であるパターンからメッシュを生成するという新たな方法を提案するものである。2次元領域におけるメッシュ生成の性能の高さを実証し、この方法は原理的には3次元にも拡張可能であるが、その為には3次元反応拡散パターンの理論的な研究の発展が必要となる事が鮮明となった。

研究成果の概要(英文)：When it comes to development of computer simulation, along with improvement of computer performance, it is expanding into various fields. Under such circumstances, space discretization is essential for the simulation and its quality directly associates with accuracy of the simulation. In this study, a new method is proposed, and that is to generate mesh from the pattern which is a result of reaction diffusion system simulation in complicated domain, as direct application of self-organizing mechanism which pattern formation in reaction diffusion system has. It verified high performance of mesh generation in 2-dimensional domain, and this can be expanded into 3-dimensional, however, in order to do so, it is clear that development of theoretical study in 3-dimensional reaction diffusion pattern will be required.

研究分野：応用数学

キーワード：反応拡散系 自己組織化 メッシュ生成 シミュレーション パターン形成

1. 研究開始当初の背景

(1) 反応拡散系に現れる多様なパターン形成は、自然界における形作りの基盤として働くメカニズムであるという認識から、様々な分野を横断した研究が続けられている。反応拡散系におけるパターン形成は、自己組織化現象の一つの例であり、自己組織化メカニズムの解明に向けた数理的な研究の大きな柱の一つである。また、反応拡散系に限らず、自己組織化は様々な分野においてその応用が期待されており、その基本的なメカニズムを明らかにする為の研究が数多く成されている。

(2) 一方で、コンピュータの高速化高度化によって、これまで難しいとされていた大規模でかつ複雑なシミュレーションが製造業等においても積極的に活用されるようになった。その中で重要となるのは、空間離散化に伴う高品質なメッシュ生成の技術であり、特に空間3次元自由領域においては、現在においても職人芸的な側面が残っている。複雑な領域形状、さらには領域形状が時間的に変化するような問題に対して、自動的に最適なメッシュを生成できる技術の発展が求められている。

2. 研究の目的

(1) 本研究の目的は、主に反応拡散系のパターン形成に見られる自己組織化機構を、シミュレーションにおいて用いられるメッシュ生成に応用し、自動的なメッシュ生成を実現することにある。2次元自由形状領域におけるメッシュ生成に関しては、技術的にはほぼ完成されているが、3次元自由形状領域におけるメッシュ生成には未だ様々な困難が存在している。反応拡散系におけるパターン形成を利用した2次元領域におけるメッシュ生成は一定の成果が上がっており、それを3次元に拡張する事が主な目的である。

(2) 空間1次元および2次元の反応拡散パターンに関する研究は数理解析、シミュレーションの両面から一定の成果が上がっている。一方で、3次元パターンについてはあまり多くの成果があるとは言えない状況にある。本研究では、反応拡散系における3次元パターンを活用するため、その性質等を知る必要があり、特に Gray-Scott モデルにおける3次元パターンに関する知見を得ることを目的とする。

(3) 自己組織化機構は反応拡散系にのみ存在するものではなく、様々な現象においてみられる。事実、生物においては様々な自己組織化機構を組み合わせる事で安定的な形作りを行っていると考えられる。そこで、特に化学系の実験家と共に実験的、理論的な応用事例を研究することから、自己組織化応用の新たな地平を求める事を目的とする。

3. 研究の方法

(1) 本研究は、反応拡散系のパターンにみられる自己組織化機構(領域形状への適応性、整列性等)を、2次元自由領域における三角形メッシュ生成に応用した自己組織化メッシュ生成法の3次元空間への拡張を目標とする。特に、Gray-Scott モデル(GS)と呼ばれる反応拡散方程式の一種に見られる自己複製スポットパターン(図1)は、領域形状をうまく捉えた整列性の高いパターンを自動的に創り上げる。

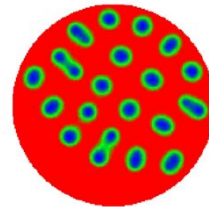


図1：自己複製スポットパターン

また、比較的粗い正方メッシュを用いたシミュレーションにおいても、自己複製や整列性といったメッシュ生成に必要な性質を保持することも確認されている。GSのシミュレーションによって得られるスポットパターンの各スポットの位置をノードとして三角形メッシュを生成する事が本手法の概要であり、また空間非一様な拡散係数を与える事で、自由にメッシュの粗密をコントロールでき、シミュレーション応用に適したメッシュを作成できる(図2)。

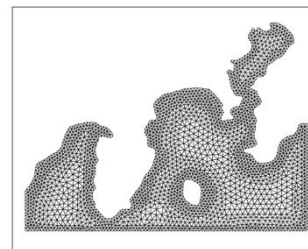


図2：自己組織化メッシュの例

本手法は、反応拡散系のパターン形成機構のロバストネスから、外部からの制御無しにメッシュが生成できる画期的な手法であり、反応拡散系を用いた自動メッシュ生成という新たな応用分野を切り開いた。一方、本手法で利用する反応拡散系に見られるパターンは、初期値によらずパラメータによって決定される系の最終パターンに至ることはよく知られた性質であり、初期値の違いによって最終パターンの詳細は異なるが、例えばスポットパターンの場合、その間隔やスポット間の位置関係などは自己組織的調整機能によ

って自動的に調整される．自己組織的な調整メカニズムは，生物のロバストな形作りの基礎となっているとも考えられ，生物分野を含む様々な分野で研究が進められている．また，数値シミュレーションは様々な分野で主要な役割を果たしている．しかしながら，問題がますます複雑化し，コンピューター性能の向上に伴い，複雑な形状を持つ領域内でのシミュレーションも行われるようになってきてはいるが，特に3次元複雑形状領域において必要となる，数値計算のためのメッシュの生成は多大なコストと職人芸的な技能が必要とされている．このような状況において，時間的に変化しない2次元複雑形状領域において，その有効性が確認されている自己組織化メッシュ生成法を，応用上重要でありかつ現在までに決定的な手法が確立されていない3次元メッシュ生成問題へと拡張する．

(2) 反応拡散系パターンを用いてメッシュ生成をする際の問題点は，境界の扱いにある．境界条件としてどのような条件を課せば，境界にスポットが配列するかは自明ではない．実際，GS においては，反射壁境界条件，固定境界条件において，境界にスポットが生じない．先行研究においては，スポット状に固定条件を課すことでスポットを配置したが，自動的なメッシュ生成を目指すには，境界上にも自動的にスポットが配置することが望ましい．境界条件と境界上のスポットの振る舞いに関して，シミュレーションからアプローチする．

4. 研究成果

(1) 空間3次元 GS におけるパターン形成について，パラメータとの関連性を3パラメータ空間において検討した．空間1次元および2次元においては，様々なパラメータにおいて，どのようなパターンが生ずるかが網羅的に調べられているが，空間3次元についてはほぼ情報が無い．一方で，コンピュータが高速化したとはいえ，空間3次元シミュレーションは未だに時間がかかるため，網羅的な探索は難しい．ここでは，空間2次元の結果との比較から，空間3次元における GS パターンの特徴を推測することにした．図3は GS モデルにおけるパラメータ F, k に関する相図の空間2次元および3次元の比較である．

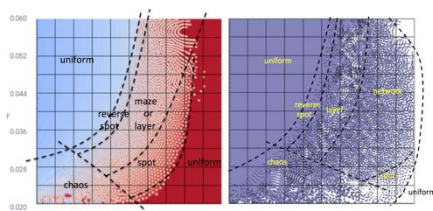


図3：GSモデルの相図の比較

3次元空間においては，スポットパターンよ

りもネットワークパターンが広い範囲で生じ，スポットパターンについては，振動的な不安定性を持つことがわかった．これらの結果をまとめた論文を準備中である．

The GS mesh in 3D space

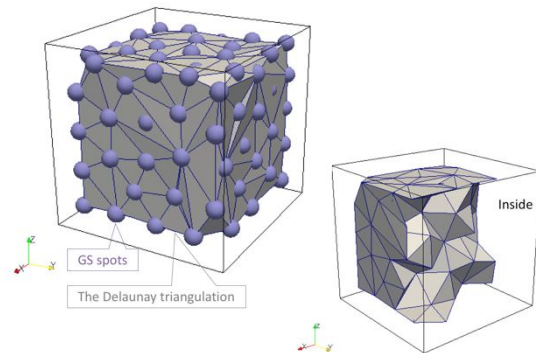


図4：3次元自己組織化メッシュ

(2) 3次元メッシュにおいて，6面体メッシュの需要が高い．一方で，反応拡散系におけるパターンについては，最密充填となる配置となる場合が多く，4面体メッシュとなる．その為，何らかの外的摂動を加えることで，パターンの配置をコントロールする試みを行った．具体的には，反応拡散方程式の拡散係数に対して異方性を導入することで（図5），配置の制御を試みた．結果としては，異方性導入による配置の変化は微小であり，一方でパターンの安定性を大きく変えてしまうということがわかった．メッシュ形状の制御は応用上重要である為，引き続き研究が必要である．



図5：異方的拡散のイメージ

(3) 境界におけるスポットの生成と配置の制御に関して，境界条件を工夫することで境界上に安定してスポットを生成する必要がある．先行研究においては，人工的に固定境界条件をスポットを配置したい場所に設定する事で，境界上の制御を行っていたが，移動境界問題や，より複雑な領域形状の問題においては，自動的なスポット配置が好ましい．単純な反射壁境界条件では，スポットが境界上に乗らないため，時間的に変化する境界条件を含めて様々な境界条件を与えた．境界条件を反射壁境界条件（ゼロ流量境界条件）とせず，一定の流量を残す境界条件とした場合に，スポットが境界に乗ることが明らかになった．但し，安定した結果が得られるにはいたっておらず，境界条件に関わるパラメータの設定にトライアンドエラーの様相が残った．

(4) 自己組織化現象は反応拡散系のみならず，様々な現象で見られる．生物においても，

様々な階層で自己組織化現象を活用しており、単一の現象に頼らないロバストなシステムを形成している。ここでは特に、生物の群れシステムに見られる自己組織化現象と化学システムに見られる自己組織化システムに注目し、自己組織化メッシュ生成の発展を試みた。本研究における、メッシュ生成では、パラメータの自動調整が必要であると示唆されたが、生物の群れシステムにおけるパラメータの自動調整（例えば比率調整）が活用できると考えた。そのような考察から、群れシステムに関する基礎的な研究を行い、群れシステムが比率調整を行う基本的なメカニズムを明らかにした。メッシュ生成におけるノードを群れシステムの個体と考える事で、群れシステムがもつ調整機構をメッシュ生成にも導入ができる可能性から、メッシュ生成に成果を取り込む為の継続的な研究を行う予定である。また、化学反応系における物質濃度等の勾配生成現象の応用として、複雑な形状における最短経路問題や、領域分割問題についても実験的、理論的な研究を行い、その有効性を示した。これらの成果は、特にメッシュ生成における境界の扱いについて有用な示唆を与えた。また、現状単純な反応拡散系を用いているが、生成されたパターンによる新たな勾配形成といった組み合わせから、パターンのより積極的な制御（但し外的では無く、自律的な制御）が可能となると考えられる。異方的拡散では大きな成果は得られなかったが、パターン自らが作り出す移流による制御が考えられる。現在、作り上げられたパターンに機能を与え、それによって高次の機能が生み出される、ハイブリッドなシステムの構築に向けた基礎的な枠組みに関して一定の成果が得られつつあり、論文を準備中である。

5. 主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕(計 12 件)

Basis of Self-organized Proportion Regulation Resulting from Local Contacts, Mayuko Iwamoto, Daishin Ueyama, Journal of Theoretical Biology 440(2018), pp. 112-120. (査読有)
DOI:10.1016/j.jtbi.2017.12.028

Numerical Simulation of Maze Solving Using Chemotactic Particles, Ádám Leelössy, Gábor Holló, Kohta Suzuno, Daishin Ueyama and István Lagzi, International Journal of Unconventional Computing, 12 (5-6)(2016) 439-452. (査読有)
<http://www.oldcitypublishing.co>

m/journals/ijuc-home/ijuc-issue
-contents/ijuc-volume-12-number
-5-6-2016/ijuc-12-5-6-p-439-452
/

Marangoni Flow Driven Maze Solving, Kohta Suzuno, Daishin Ueyama, Michal Branicki, Rita Tóth, Artur Braun, István Lagzi, Advances in Unconventional Computing (23)(2017), pp. 237-243. (査読有)
DOI:10.1007/978-3-319-33921-4_10

Self-assembly of like-charged nanoparticles into Voronoi diagrams, Dániel Zámbo, Kohta Suzuno, Szilárd Pothorszky, Dóra Bárdfalvy, Gábor Holló, Hideyuki Nakanishi, Dawei Wang, Daishin Ueyama, András Deák, István Lagzi, Phys. Chem. Chem. Phys. 18(2016), pp. 25735-25740. (査読有)
DOI:10.1039/C6CP04297

非一様興奮場における伝播波の統計的特徴, 木下修一, 立石恵大, 上山大信, 武蔵野大学数理工学センター紀要 1(2016), pp.19-26. (査読有)
https://mu.repo.nii.ac.jp/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=251&item_no=1&page_id=13&block_id=21

Chemical-based Maze Solving Techniques, Kohta Suzuno, Daishin Ueyama, István Lagzi, Current Physical Chemistry 5 (1)(2015), pp. 29-36. (査読有)
<http://www.ingentaconnect.com/content/ben/cpc/2015/00000005/00000001/art00006#expand/collapse>

Maze solving using temperature-induced Marangoni flow, Petra Lovass, Michal Branicki, Rita Toth, Artur Braun, Kohta Suzuno, Daishin Ueyama, and Istvan Lagzi, RSC Advances 5(2015), pp.48563-48568. (査読有)
DOI:10.1039/C5RA08207B

Spontaneous Formation of Unidirectional Path, Mayuko Iwamoto, Nobuhiko J Suematsu, and Daishin Ueyama, Chemical Physics

Letters 616- 617(25)(2014), pp. 248-253. (査 読 有) DOI:10.1016/j.cplett.2014.10.010

Dynamic Structure in Pedestrian Evacuation: Image Processing Approach, Kohta Suzuno, Akiyasu Tomoeda, Mayuko Iwamoto, and Daishin Ueyama, Traffic and Granular Flow '13, Springer(2014). (査 読 有) DOI: 10.1007/978-3-319-10629-8_23

Effects of an Obstacle Position for Pedestrian Evacuation: SF model Approach, Takashi Matsuoka, Akiyasu Tomoeda, Mayuko Iwamoto, Kohta Suzuno, and Daishin Ueyama, Traffic and Granular Flow '13, Springer(2014). (査 読 有) DOI: 10.1007/978-3-319-10629-8_19

Maze Solving using Fatty Acid Chemistry, Kohta Suzuno, Daishin Ueyama, Michal Branicki, Rita Toth, Artur Braun, and Istvan Lagzi, Langmuir 30 (31)(2014), pp. 9251-9255. (査 読 有) DOI:10.1021/la5018467

The Advantage of Mucus for Adhesive Locomotion in Gastropods, Mayuko Iwamoto, Daishin Ueyama, and Ryo Kobayashi, Journal of Theoretical Biology 353(21)(2014), pp. 133-141. (査 読 有) DOI:10.1016/j.jtbi.2014.02.024

〔学会発表〕(計7件)

生物個体群における比率調整機構の数理的考察, 上山大信, 2018.3.10-11, 明治大学

Attempts towards the application of the self-organization in the reaction-diffusion systems, Daishin Ueyama, 2017.12.11-13, ICMMA2017, Meiji University

Self-organized Regulation Resulting from Local Contacts, Daishin Ueyama, 2017.5.24-27, MaCKiE2017, Mercure Budapest Buda, Budapest Hungary
比率調整を考える, 上山大信, 2016.12.10, 第26回非線形反応と協同現象研究会, 明治大学

Mechanism of spontaneous spiral

formation on heterogeneous discretized excitable media, Daishin Ueyama, 2016.3.10, GDR1 ReaDiNet Stochastic PDE's, Large Scale Interacting Systems and Applications to Biology, University Paris-Sud and ENSTA.

Waves and Functions, Daishin Ueyama, 2014.7.13 - 7.18, Oscillation and Dynamic Instabilities in Chemical Systems, Gordon Research Conference, Melia Golf Vichy Catalan Business and Convention Center Girona, Spain.

A self-organized mesh generator using pattern formation in a reaction-diffusion system, Daishin Ueyama, 2014.6.6, Miniworkshop on mathematical biology, Université de Paris-Sud, Bât. 425 (salle 113-115).

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕
ホームページ等

6. 研究組織
(1) 研究代表者
上山大信 (UEYAMA, Daishin)
武蔵野大学・工学部・教授
研究者番号: 20304389

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3)連携研究者
()

研究者番号：

(4)研究協力者
()