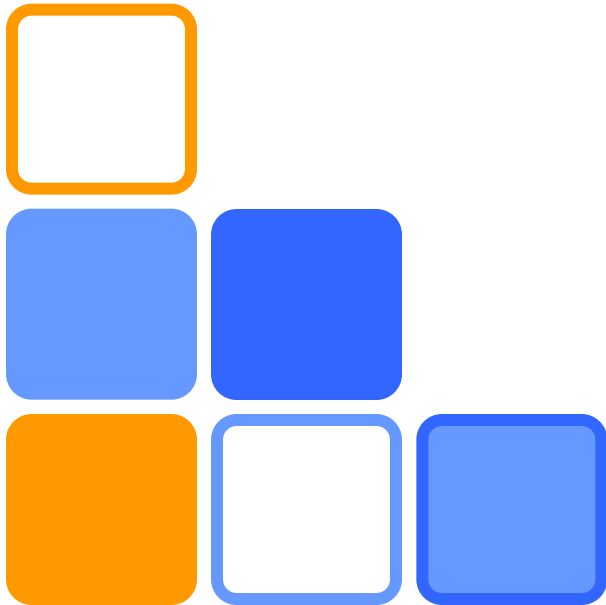


薬学情報処理演習 第7回

パルス生成のモデル 2次元反応拡散方程式



奥菌 透

コロイド・高分子物性学

反応拡散方程式による数理モデル

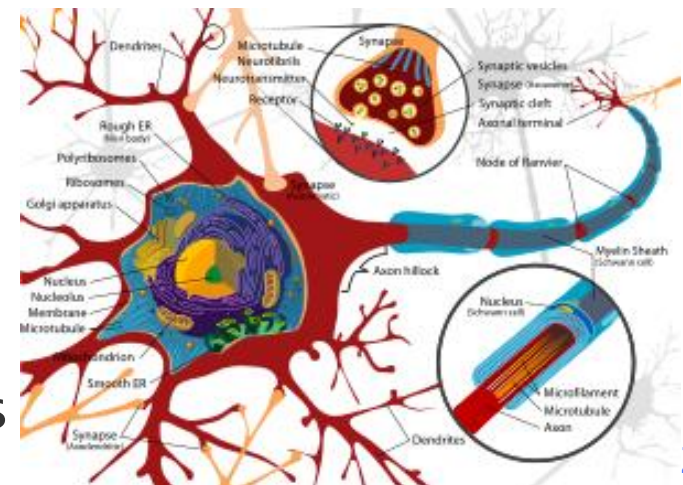
□ 反応拡散方程式(拡散＋反応)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + f(u, v)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + g(u, v)$$

□ パターン形成

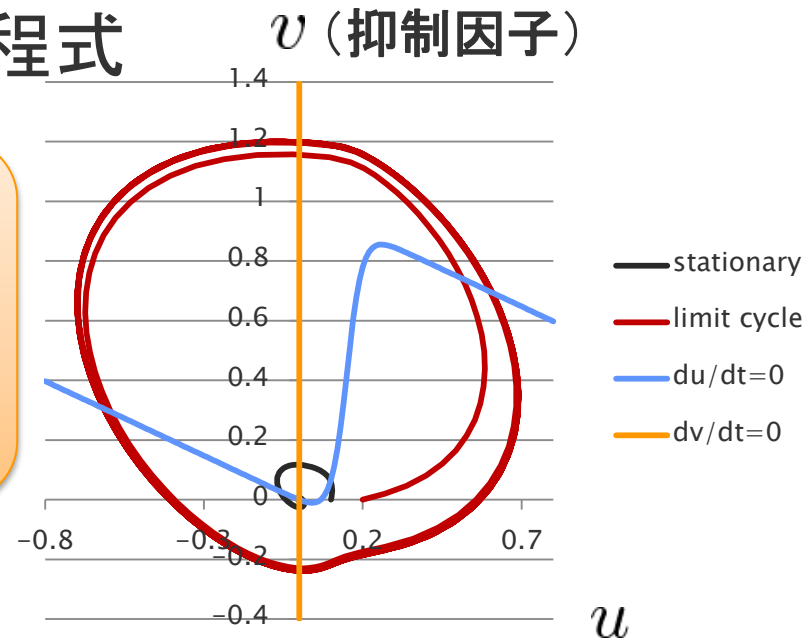
- BZ反応における同心円パターン
- 粘菌細胞の集合体
- 貝殻のパターン
- 神経軸索上のパルス伝搬
 - Hodgkin-Huxley equations
 - FitzHugh-Nagumo equations



パルス伝搬のモデル方程式(2次元)

□ FitzHugh–Nagumo型の方程式

$$\tau \frac{\partial u}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(u) - v$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = u - \gamma v$$



- BZ反応の定性的なモデル
- 関数 $f(u)$: 静止状態と振動状態の二様解がある (活性因子)

$$f(u) = \frac{1}{2} \left[\tanh \left(\frac{u-a}{\delta} \right) + \tanh \left(\frac{a}{\delta} \right) \right] - u$$

- パラメータ: $\tau, D, \gamma, a, \delta$



数値スキーム

□ ラプラシアン($\nabla^2 u$)の差分化

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \rightarrow \frac{u_{i-1,j}^n + u_{i+1,j}^n + u_{i,j-1}^n + u_{i,j+1}^n - 4u_{i,j}^n}{(\Delta x)^2}$$

□ 方程式の差分式

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{\tau} [D(\nabla^2 u)_{i,j}^n + f(u_{i,j}^n) - v_{i,j}^n]$$

$$v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^n + \Delta t(u_{i,j}^n - \gamma v_{i,j}^n)$$

□ 境界条件:ノイマン型

$$u_{0,j}^n = u_{1,j}^n, \quad u_{N,j}^n = u_{N-1,j}^n$$

$$u_{i,0}^n = u_{i,1}^n, \quad u_{i,N}^n = u_{i,N-1}^n$$

□ パラメータ(参考):

$$D = 1, \quad \tau = 0.5, \quad \gamma = 0, \quad a = 0.12, \quad \delta = 0.05$$

$$\Delta t = 0.01, \quad \Delta x = 1$$



Excel で解く

最大反復回数
10

□ 循環参照を使えるようにする

- Excelのオプション/数式/☑反復計算を行う
- 循環参照: セルの参照先が自分自身(参照元)を含む

□ シートを3枚使う

$(N \times N) \times 2$, $N=60$ くらい

- それぞれのシートに u , v のデータ領域をつくる
- Sheet1: 時刻 $n+1$ のデータ(Sheet2の値から生成)
- Sheet2: 時刻 n のデータ(Sheet1の値をコピー)
- Sheet3: 初期値($n=0$ のデータ)を入力

F9キーで再計算

□ “スイッチ”をつくる

- セル(A1)の値が0で初期化、1で実行(反復計算)

条件文: $=IF(\text{条件}, \text{値1}, \text{値2})$: 条件が真のとき値1が、
偽のとき値2が入力される。

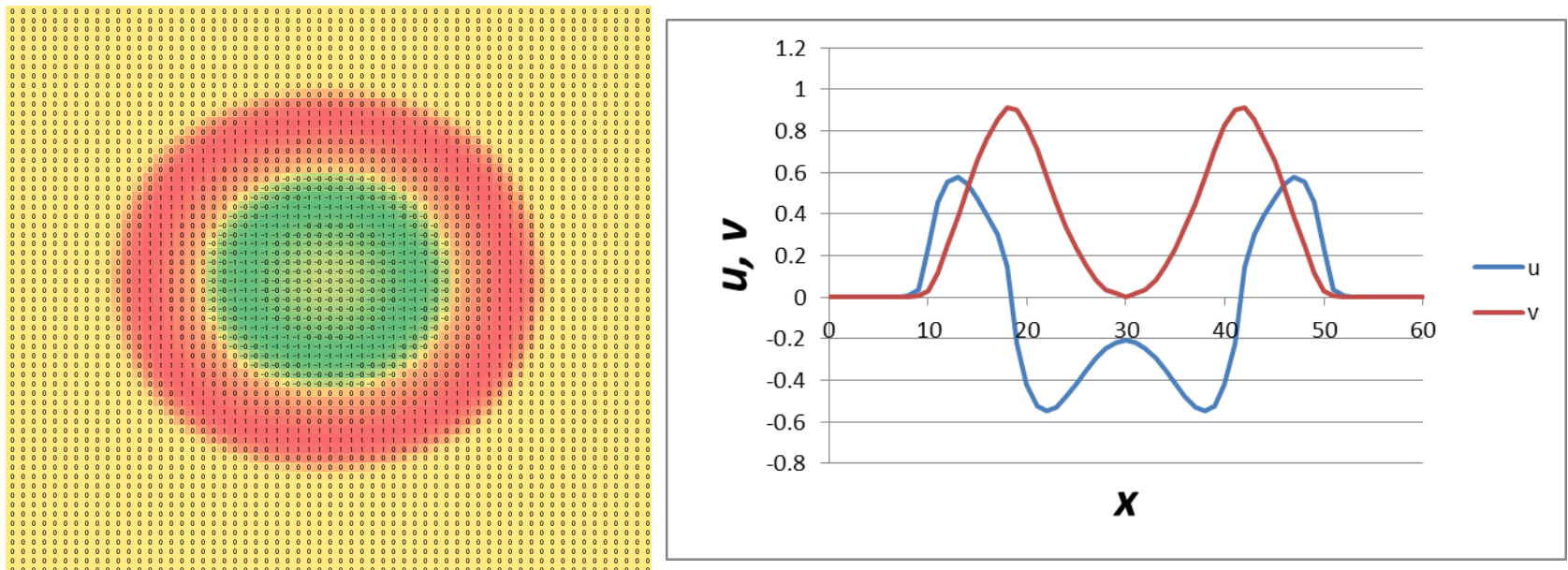
例: (セルD10) $=IF(\$A\$1=0, \text{Sheet3!D10}, \text{Sheet2!D10}+.....)$

演習課題

- 以下の範囲でモデル方程式を解き、パターンの時間変化を観察する(パラメータ等を変える)。

$$0 < x < 60, 0 < y < 60, 0 < t < 10$$

- いくつかの時刻で u, v を x に対してプロットする。



(参考) パラメータの設定など

*** Pulse Generator ***

switch

parameters

D = 1

tau = 0.5

gamma = 0

a = 0.12

delta = 0.05

dt = 0.01

dx = 1

dt/tau = 0.02

D/dx^2 = 1

t =

この値を0にすると初期値に戻る。
1 (0以外) にすると計算がスタートする。

B3

B10

F9キーで再計算

=IF(B3=0, 0, B15+\$B\$10)

「セルB3の値が0ならば0を代入、
そうでなければB15の値にB10の
値を足した値を代入する。」

B15

(参考) 計算領域、境界条件の設定

Sheet1

x の値

u-field	0	1	2	3
0	0	0	0	0
1	0	(D19)		
2	0			
3	0			
4	0			
5	0			
6	0			
7	0			
8	0			
9	0			
10	0			

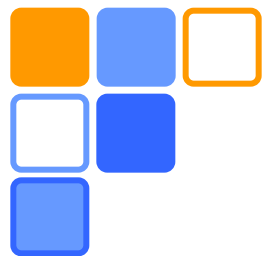
y の値

=D19

=D19

v-field	0	1	2	3
0	0	0	0	0
1	0			
2	0			
3	0			
4	0			
5	0			
6	0			
7	0			
8	0			
9	0			
10	0			

上記の内容をSheet2とSheet3にコピーする。



(参考) 各シートでの入力

□ Sheet1

- u-field

=IF(\$B\$3=0, Sheet3!D19, Sheet2!D19+.....)

- v-field

=IF(\$B\$3=0, Sheet3!BP19, Sheet2!BP19+.....)

□ Sheet2

=Sheet1!D19

□ Sheet3

- 初期のu, vの値を入力する。