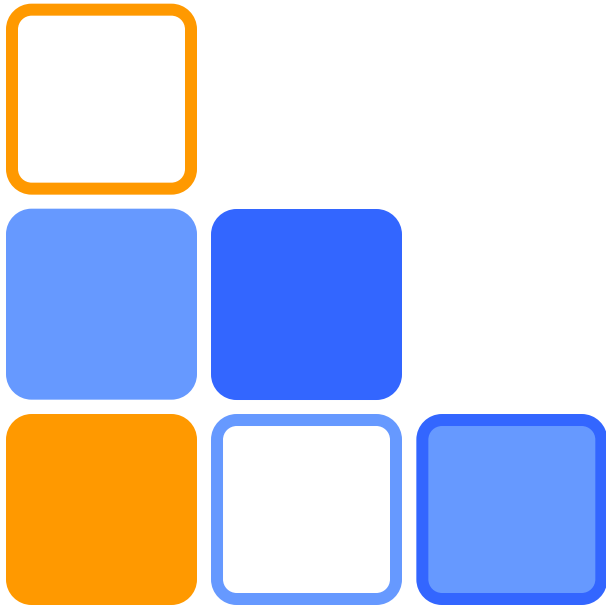


薬学情報処理演習 第7回

# 自己複製のパターンダイナミクス

## 1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

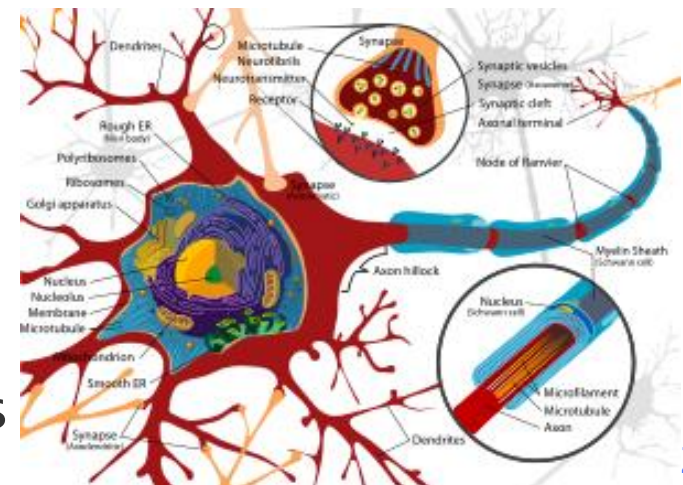
## □ 反応拡散方程式(拡散＋反応)

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

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

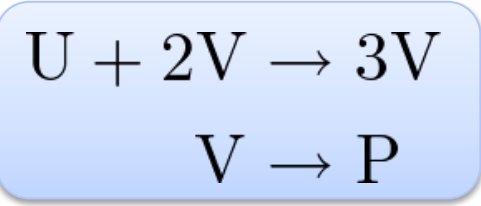
## □ パターン形成

- 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





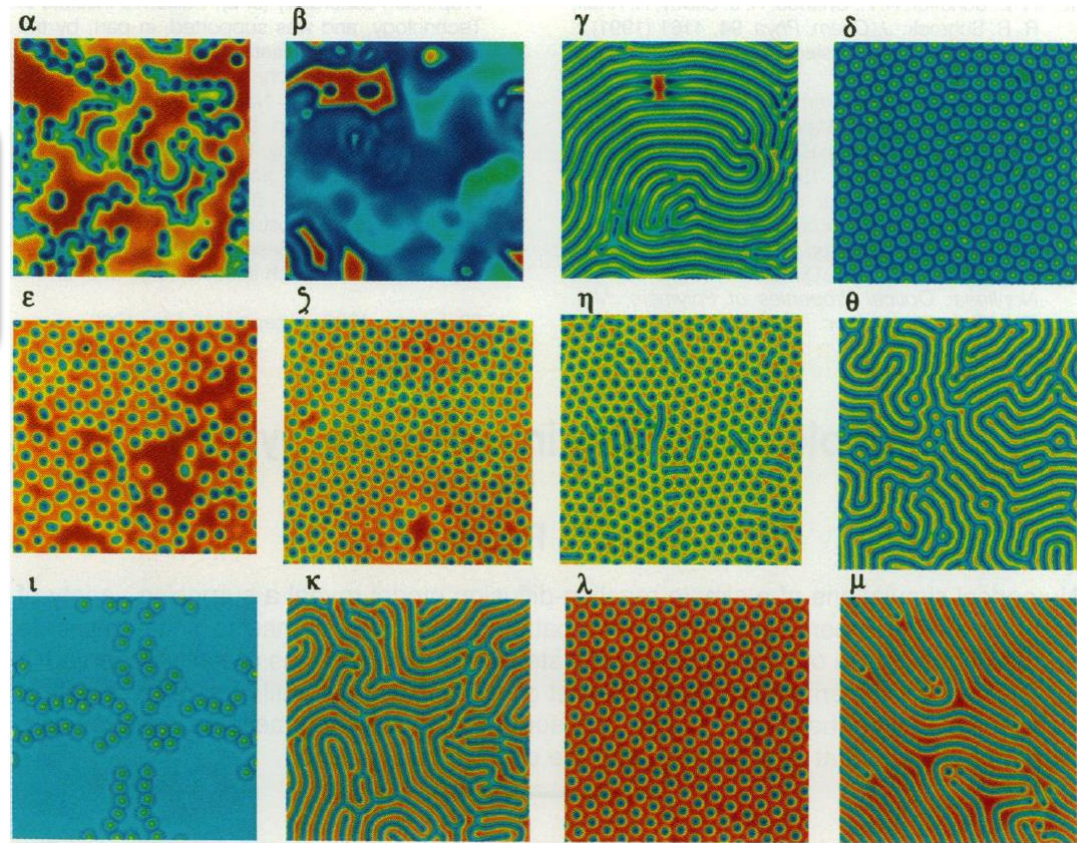
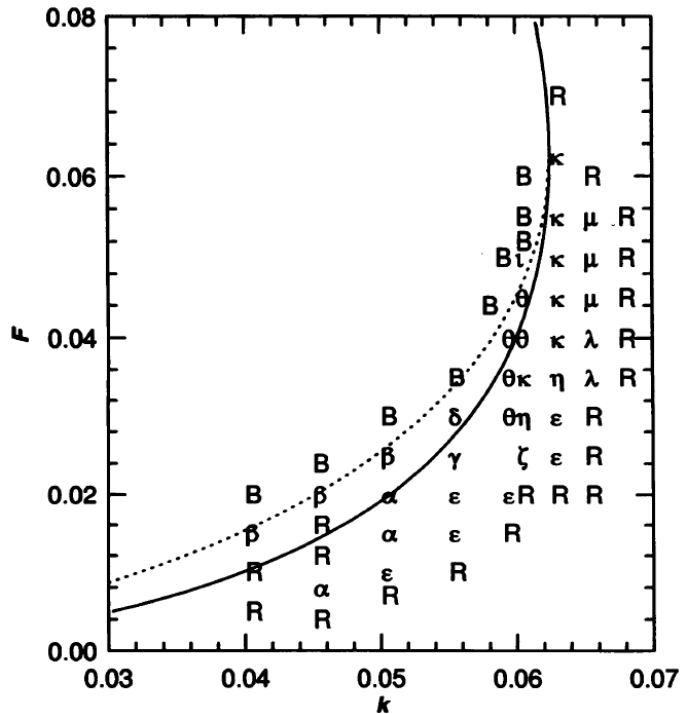
# 自己複製のモデル



## Gray-Scott model

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1 - u)$$

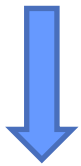
$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F + k)v$$



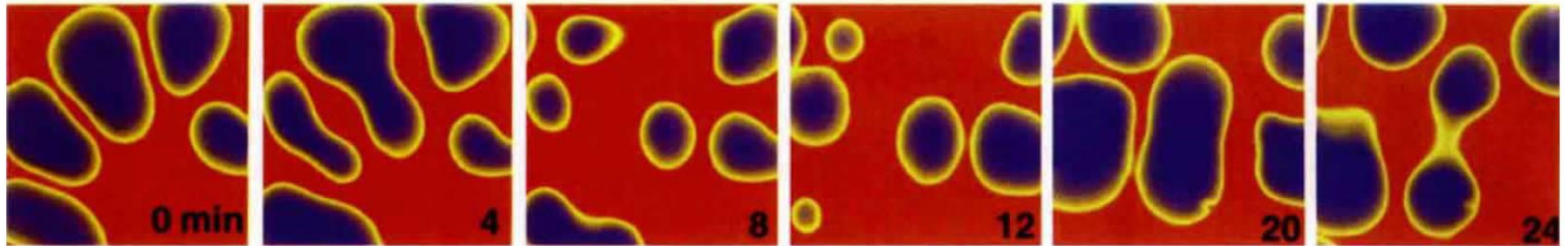
“Complex Patterns in a Simple System”  
 J. E. Pearson, Science 261, 189 (1993)

# 自己複製のダイナミクス

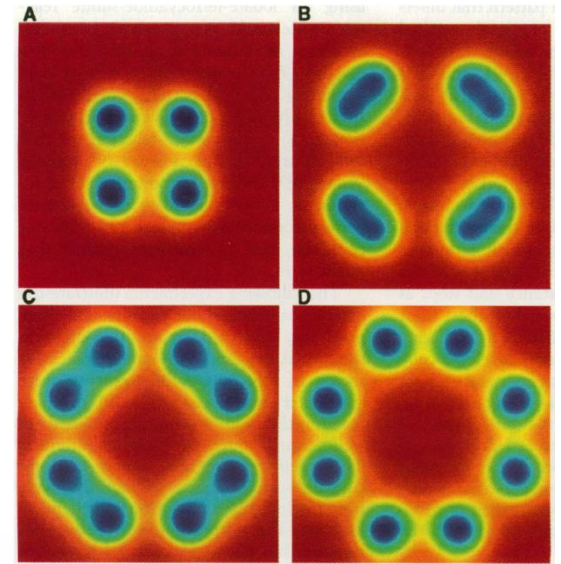
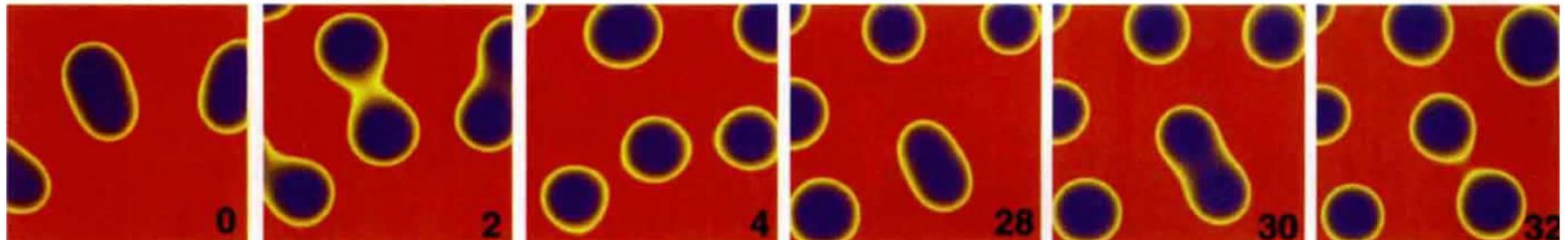
- 2次元シミュレーション →
- 実験との比較

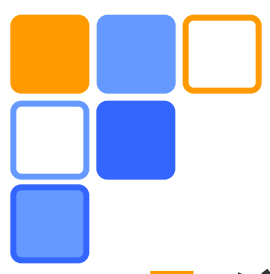


Laboratory experiment



Numerical simulation





# 数値計算(1次元)

## □ パラメータ(参考)

$$D_u = 2 \times 10^{-5}, D_v = 1 \times 10^{-5} \text{ (固定)}$$

$$F = 0.04, k = 0.06 \text{ (可変)}$$

## □ 初期条件:

(例)中央の3点で $(u, v) = (0.5, 0.25)$ 、それ以外 $(1, 0)$

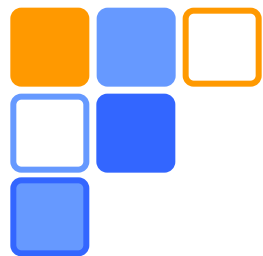
## □ 境界条件:ノイマン型

$$u_0^n = u_1^n, u_N^n = u_{N-1}^n, v_0^n = v_1^n, v_N^n = v_{N-1}^n$$

## □ 方程式の差分式

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left[ \frac{D_u}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n) - u_i^n (v_i^n)^2 + F(1 - u_i^n) \right]$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t \left[ \frac{D_v}{\Delta x^2} (v_{i+1}^n + v_{i-1}^n - 2v_i^n) + u_i^n (v_i^n)^2 - (F + k)v_i^n \right]$$



# 数値スキーム

## □ パラメータの設定

$$\Delta t = 1, \Delta x = 0.01, N = 200 \text{ (参考)}$$

## □ 時間発展:

1. 初期条件の設定:  $t = 0 : u_i^0, v_i^0$

2.  $t = n\Delta t :$

$$u_0^n = u_1^n, u_N^n = u_{N-1}^n$$

境界条件 ( $v$  も同様)

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \dots$$

$u$  の更新

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \dots$$

$v$  の更新

3.  $n \leftarrow n + 1$  として 2. へ

時間の更新



# Excel による計算(準備)

最大反復回数:50  
変化の最大値:0

- 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
  - 循環参照を含むセルは一度に一定の回数(最大反復回数)だけ繰り返し再計算が行われる(F9キーで再度反復計算を行うことができる)。
    - 循環参照:セルの参照先が自分自身(参照元)を(直接・間接的に)含むような参照
- シートを3枚(名前をnew, old, ini とする)使う
  - それぞれのシートに  $x, u, v$  のデータ領域をつくる
  - new: 時刻  $n + 1$  のデータ(oldの値から生成)
  - old: 時刻  $n$  のデータ(newの値をコピー)
  - ini: 初期値( $n = 0$  のデータ)を入力



# アニメーション(手動)を作ろう！

- 各セルで計算した値をそのセル自身に上書きする。セルの値は時間と共に変化していく。

F9キーで再計算

- 計算の開始、再開を制御する“スイッチ”を作る。

|     | A    | B                           | C    | D   |
|-----|------|-----------------------------|------|-----|
| ... |      |                             |      |     |
| 2   |      |                             | dt = | 1.0 |
| ... |      |                             |      |     |
| 7   | Go ! | 0                           |      |     |
| 8   | t =  | =IF(\$B\$7=0, 0, B8+\$D\$2) |      |     |
| ... |      |                             |      |     |

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

# シートのレイアウト

|     | A    | B   | C |
|-----|------|-----|---|
| ... |      |     |   |
| 7   | Go ! | 0   |   |
| 8   | t =  | 0   |   |
| 9   | x    | u   | v |
| 10  | 0    | (1) |   |
| 11  | 0.01 | (2) |   |
| 12  | 0.02 |     |   |
| ... |      |     |   |
| 209 | 1.99 |     |   |
| 210 | 2    | (3) |   |

シートnew:

(1) =B11 (境界条件)

(2) =IF(\$B\$7=0, ini!B10, old!B10+...)

(3) =B199 (境界条件)

初期条件

差分式

シートold:

(1) =new!B10

(2) =new!B11

(3) =new!B200

} new のコピー

シートini:

(1) =1

(2) =1

(3) =1

} 初期条件



## 演習課題

- Gray-Scottモデル方程式を解き、パターンの時間変化を観察する。
- パラメータを変えて性質の異なる2つのパターンの時間変化(自己複製過程、衝突過程など)について、いくつかの時刻で  $u, v$  を  $x$  に対してプロットする。

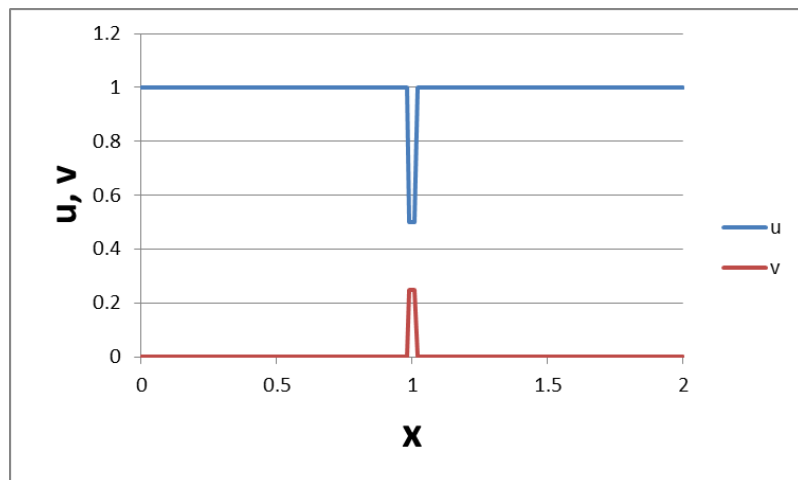
### 【参考文献】

西浦廉政 「自己複製と自己崩壊のパターンダイナミクス  
(岩波講座 物理の世界 物理と数理5)」(岩波書店, 2003)

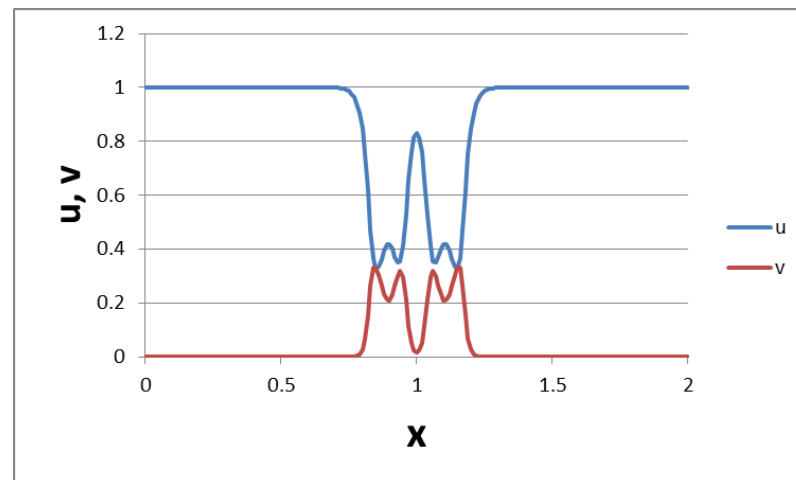
# 自己複製(参考)

$$D_u = 2 \times 10^{-5}, D_v = 1 \times 10^{-5}$$
$$F = 0.04, k = 0.06$$

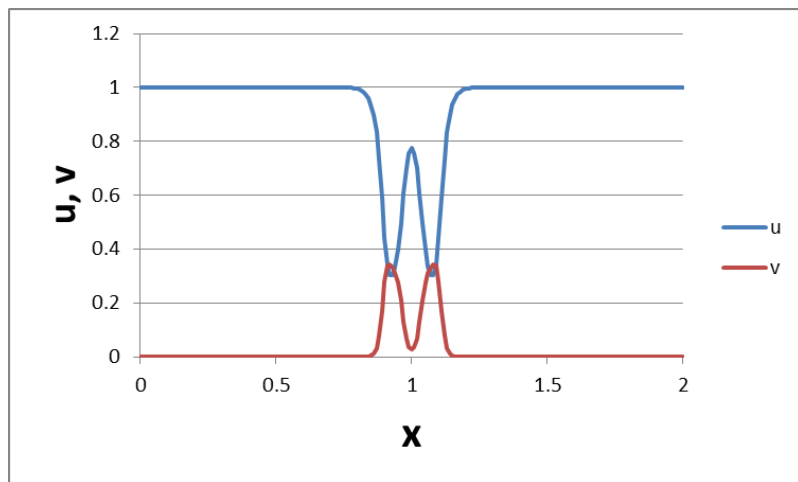
$t = 0$  (初期値)



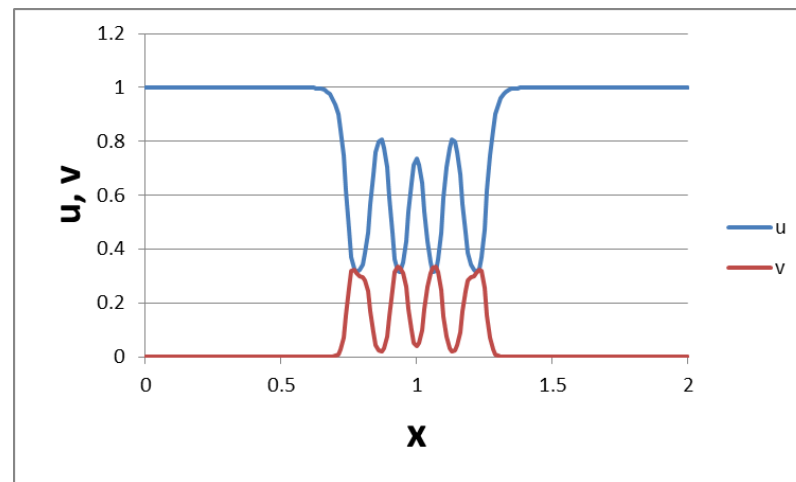
$t = 1000$



$t = 500$



$t = 1500$



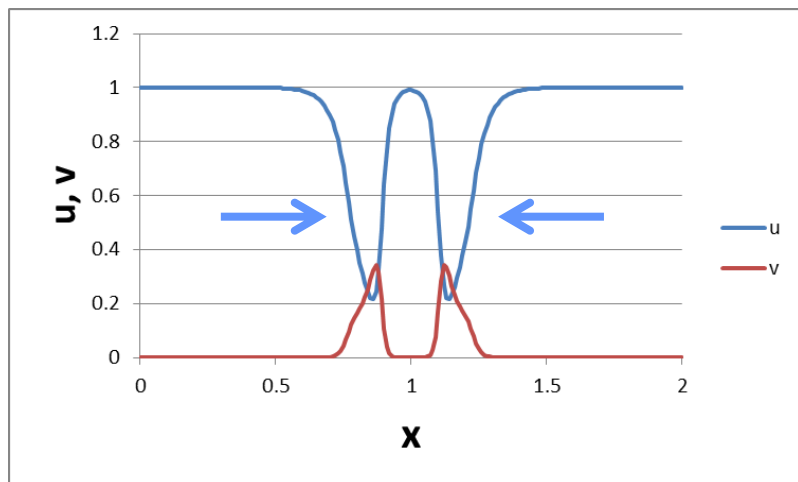
# 衝突(参考)

$$D_u = 2 \times 10^{-5}, D_v = 1 \times 10^{-5}$$

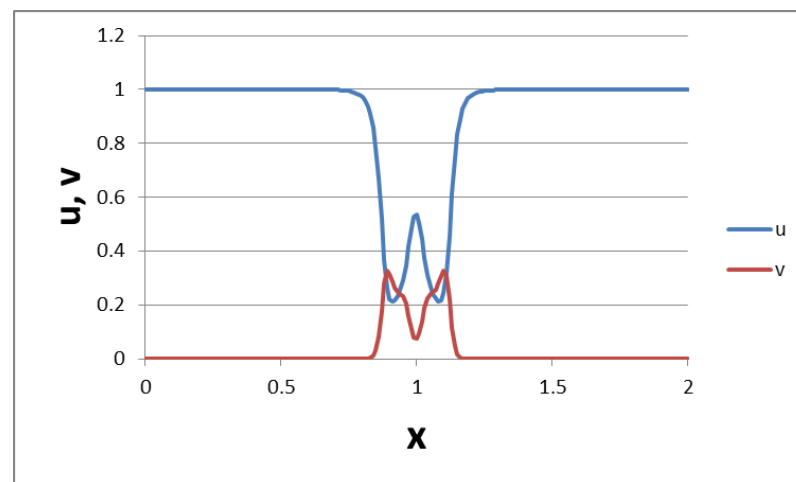
$$F = 0.02, k = 0.05$$

(初期値は前ページと同じ)

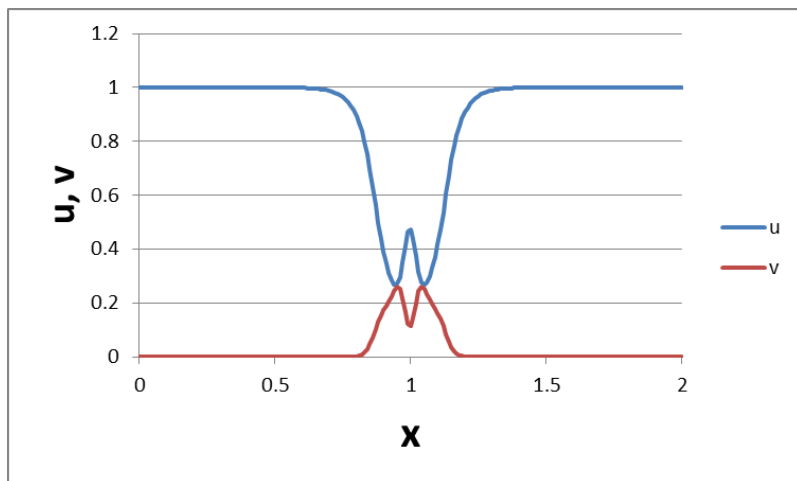
$t = 3700$



$t = 4100$



$t = 3900$



$t = 4300$

