薬学情報処理演習　第7回

化学振動によって形成される時空間パターン

1次元反応拡散方程式

奥薗　透

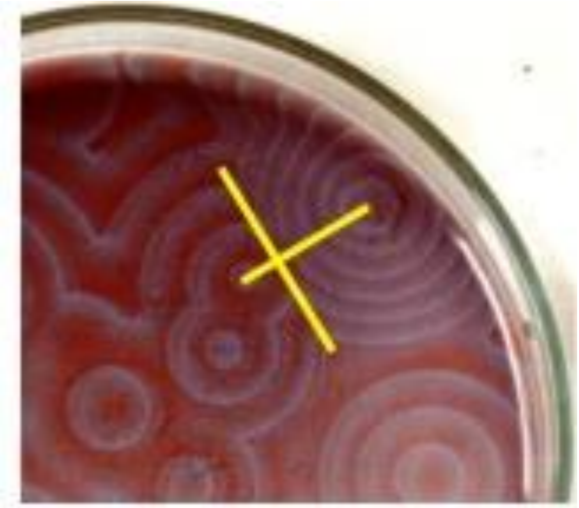
コロイド・高分子物性学

反応拡散方程式による数理モデル

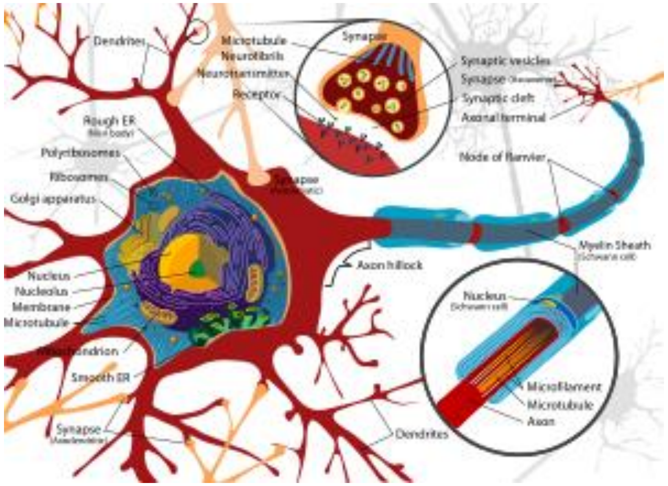
- 反応拡散方程式（拡散＋反応）

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

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



- 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



from Wiki

BZ反応のモデル

- 1次元2変数のモデル方程式（第5回演習参照）

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{\epsilon}\left[u(1-u) - \frac{bv(u-c)}{u+c}\right]$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + u - v$$

u, v：濃度に対応する変数で、時間 t と空間 x の関数

D_u, D_v：拡散係数、ϵ, b, c：定数

数値計算法(陽的解法)

- 方程式の離散化
  - 時刻 $t = n\Delta t$ 位置 $x = i\Delta x$ での u の値を u_i^n とする
  - 時間微分 $\frac{\partial u}{\partial t}$ を差分 $\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t}$ で置き換える
  - 空間微分(2階微分) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ を $\frac{u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n}{(\Delta x)^2}$ で置き換える

$$
\begin{aligned}
u_i^{n+1} &= u_i^n + \frac{D_u \Delta t}{(\Delta x)^2}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n) \\
&\quad + \frac{\Delta t}{\epsilon}\left[u_i^n(1 - u_i^n) - \frac{bv_i^n(u_i^n - c)}{u_i^n + c}\right] \\
v_i^{n+1} &= v_i^n + \frac{D_v \Delta t}{(\Delta x)^2}(v_{i+1}^n + v_{i-1}^n - 2v_i^n) + \Delta t(u_i^n - v_i^n)
\end{aligned}
$$

数値計算のながれ

- パラメータの設定

  $\Delta t = 0.005,\ \Delta x = 0.01,\ N = 200$（参考）

- 時間発展:

  1. 初期条件の設定: $t = 0$： u_i^0, v_i^0
  2. $t = n\Delta t$：

     $u_0^n = u_1^n,\ u_N^n = u_{N-1}^n$ ノイマン境界条件（v も同様）

     $u_i^{n+1} = u_i^n + \cdots$ uの更新

     $v_i^{n+1} = v_i^n + \cdots$ 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
…				
10	Go !	0		
11	t =	=IF(B10=0, 0, B11+D2)		
…				

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がセルに入力される。

シートのレイアウト

	A	B	C
…			
10	Go !	0	
11	t =	0	
12	x	u	v
13	0	(1)	
14	0.01	(2)	
15	0.02		
…			
212	1.99		
213	2	(3)	

シートnew:
(1) =B14 （境界条件）
(2) =IF(B10=0, ini!B14, old!B14+…)
(3) =B212 （境界条件）

初期条件

差分式

シートold:
(1) =new!B13
(2) =new!B14
(3) =new!B213

new のコピー

シートini:
(1) =0
(2) =0
(3) =0

初期条件

演習課題

- 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定性的に異なる2つの時空間パターンを見出し、それぞれ、いくつかの時刻でu, vをxに対してプロットする。
- パラメータ(参考)

$$D_u = 2 \times 10^{-4},\ D_v = 1 \times 10^{-4}$$

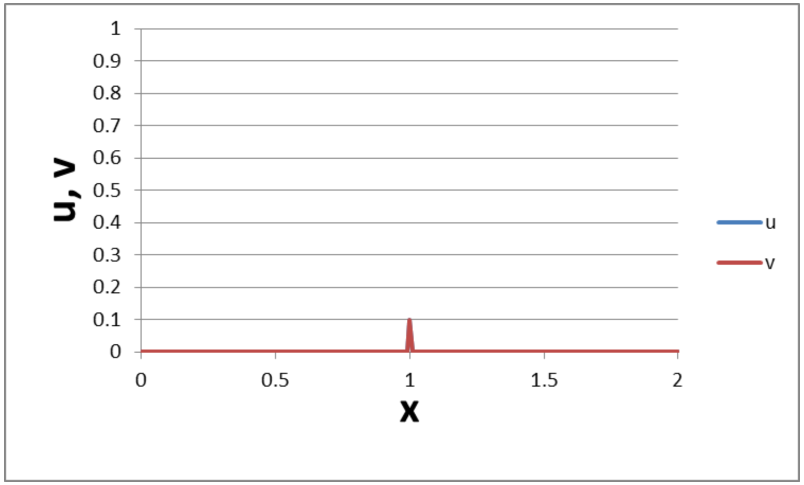
$$\epsilon = 0.1,\ b = 1,\ c = 0.01$$

- 初期条件:

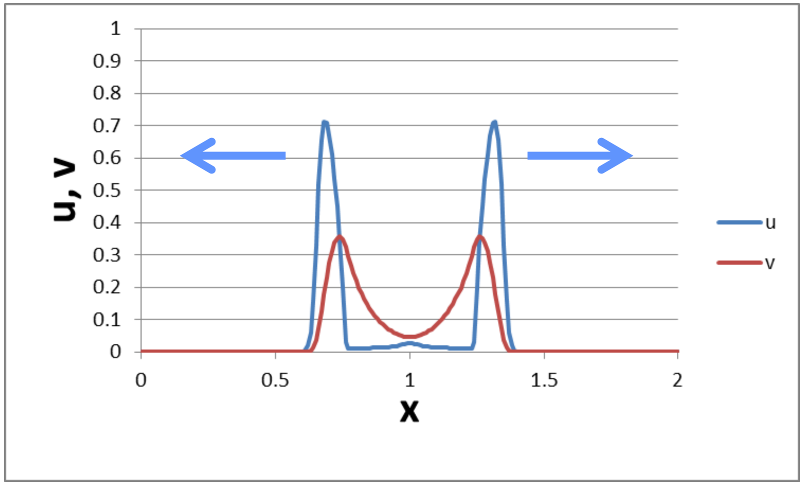
(例)中央の1点で$(u, v) = (0.1, 0.1)$、それ以外$(0, 0)$

u, v の時間変化(参考)

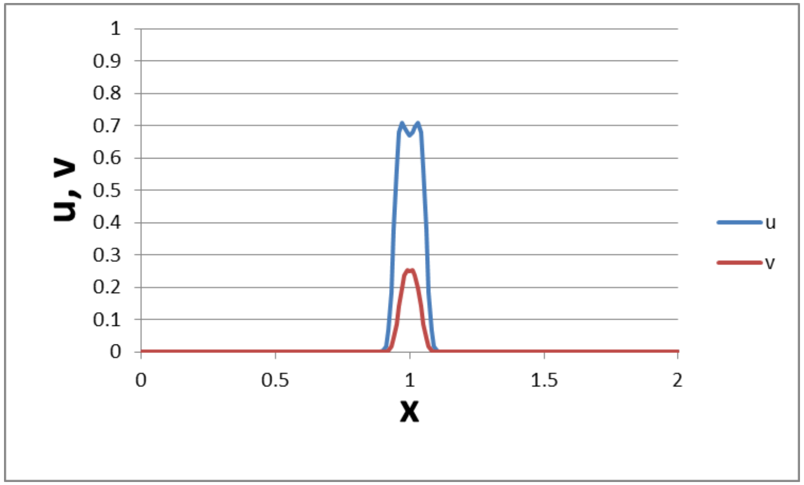
$t = 0$ (初期値)



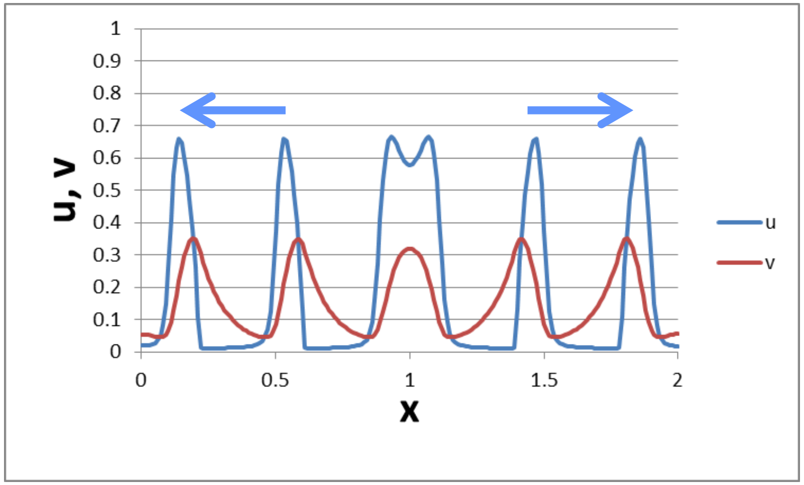
$t = 4$



$t = 1$



$t = 13.5$



$D_u = 2 \times 10^{-4}, D_v = 1 \times 10^{-4}, \epsilon = 0.1, b = 1, c = 0.01, \Delta t = 0.005, \Delta x = 0.01$