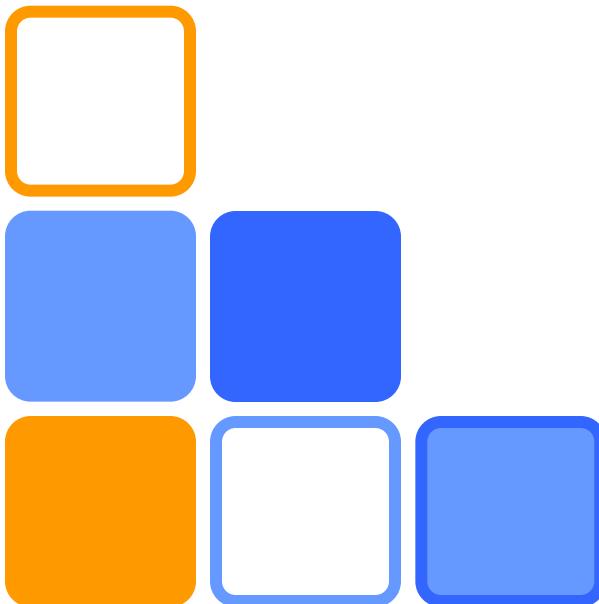
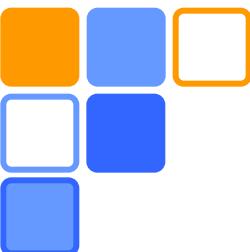


## 薬学情報処理演習 第7回

# 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



奥園 透  
コロイド・高分子物性学

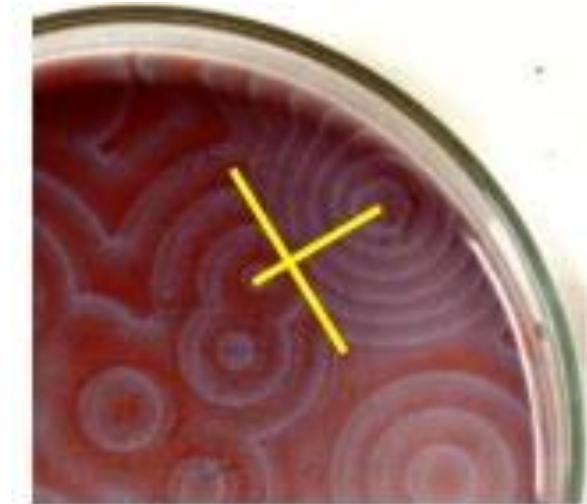


# 反応拡散方程式による数理モデル

## □ 反応拡散方程式(拡散+反応)

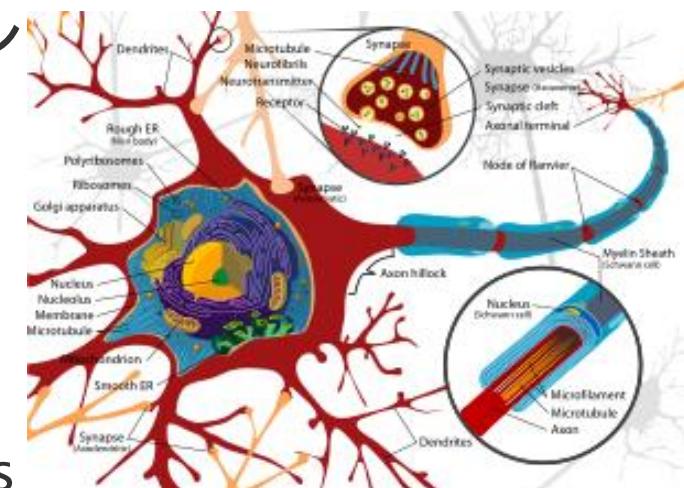
$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + f(u, v)$$

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

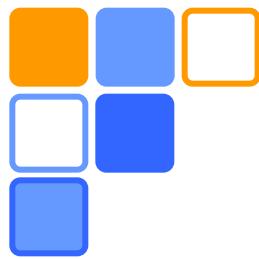


## □ パターン形成

- 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、 $\epsilon, b, c$  : 定数



# 数値計算法(陽的解法)

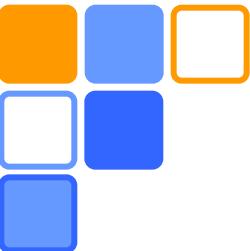
## □ 方程式の離散化

- 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

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \frac{D_u \Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1}^n + u_{i-1}^n - 2u_i^n)$$

$$+ \frac{\Delta t}{\epsilon} \left[ u_i^n (1 - u_i^n) - \frac{b v_i^n (u_i^n - c)}{u_i^n + c} \right]$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{D_v \Delta t}{(\Delta x)^2} (v_{i+1}^n + v_{i-1}^n - 2v_i^n) + \Delta t (u_i^n - v_i^n)$$



# 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:  $t = 0$  :  $u_i^0, v_i^0$

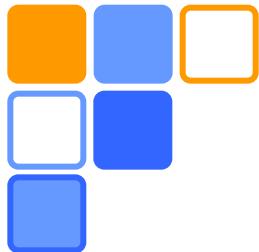
2.  $t = n\Delta t$  :

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

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

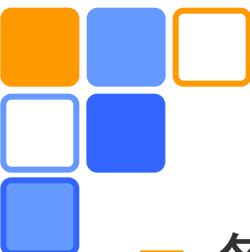
最大反復回数:50  
変化の最大値:0

## □ 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！

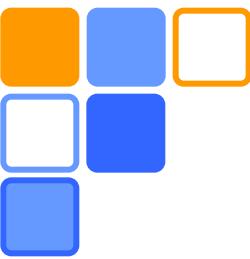
- 各セルで計算した値をそのセル自身に上書きする。セルの値は時間と共に変化していく。

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
...				
10	Go !	0		
11	t =	=IF(\$B\$10=0, 0, B11+\$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(\$B\$10=0, ini!B14, old!B14+...)

(3) =B212 (境界条件)

初期条件

シートold:

(1) =new!B13

(2) =new!B14

(3) =new!B213

} new のコピー

シートini:

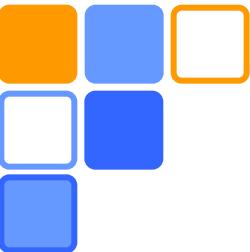
(1) =0

(2) =0

(3) =0

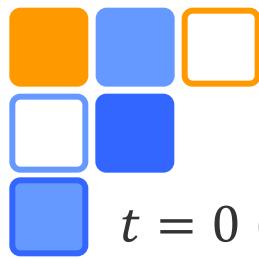
} 初期条件

差分式



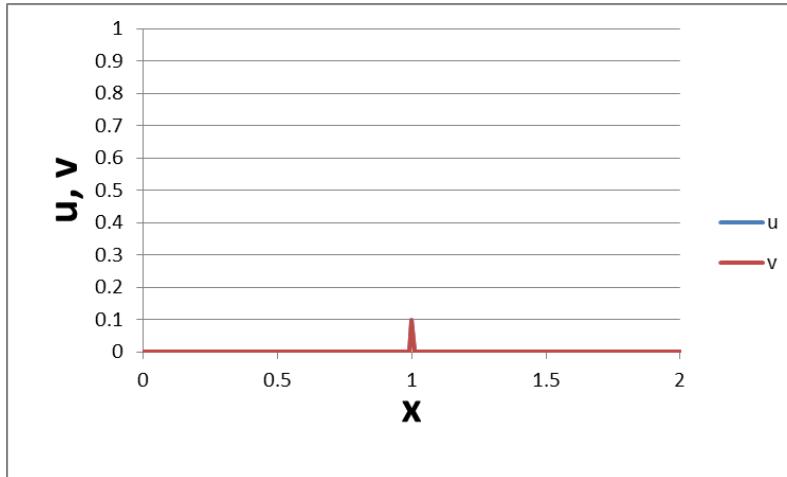
## 演習課題

- 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  $(0, 0)$

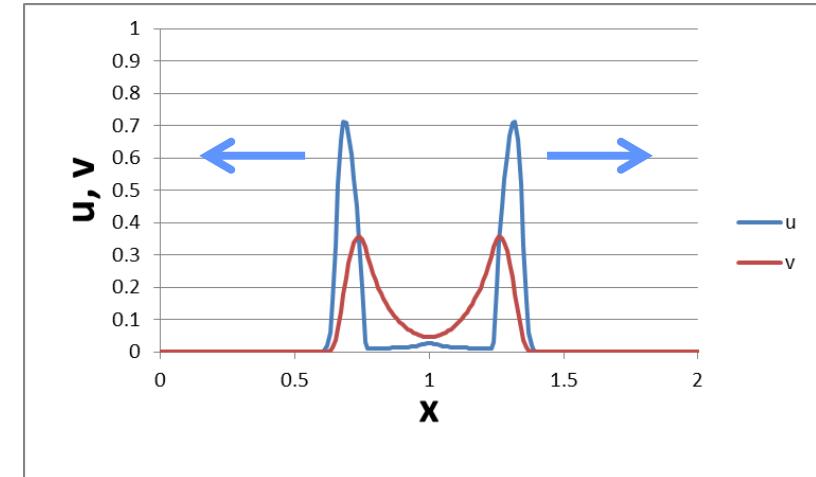


# $u, v$ の時間変化(参考)

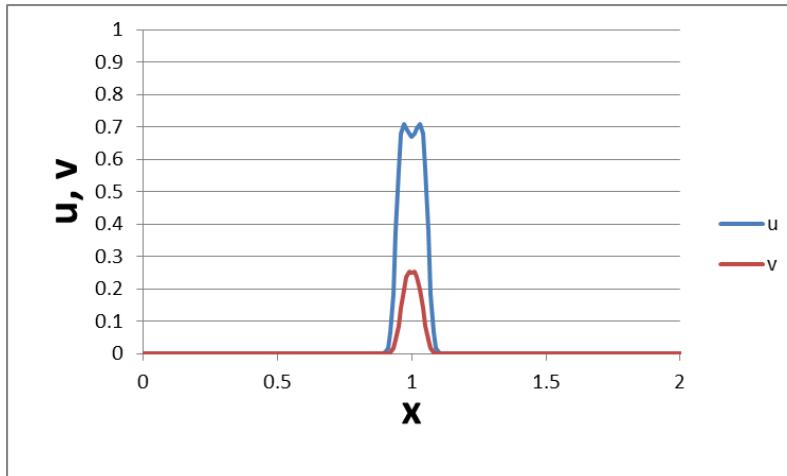
$t = 0$  (初期値)



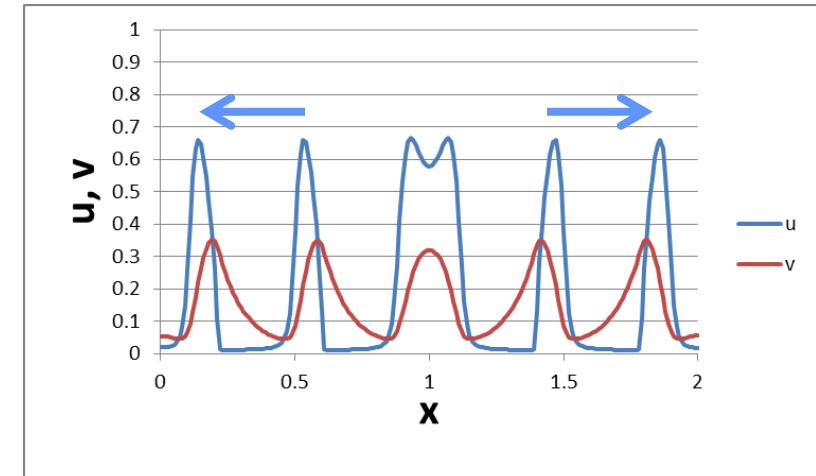
$t = 4$



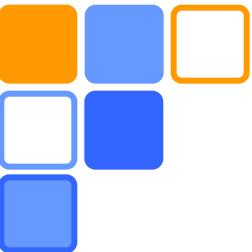
$t = 1$



$t = 13.5$



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



## 参考図書

- 三池秀敏, 森義仁, 山口智彦「非平衡系の科学Ⅲ 反応拡散系のダイナミクス」(講談社, 1997)
- 松本 元「神経興奮の現象と実体」(丸善, 1981)
- 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)