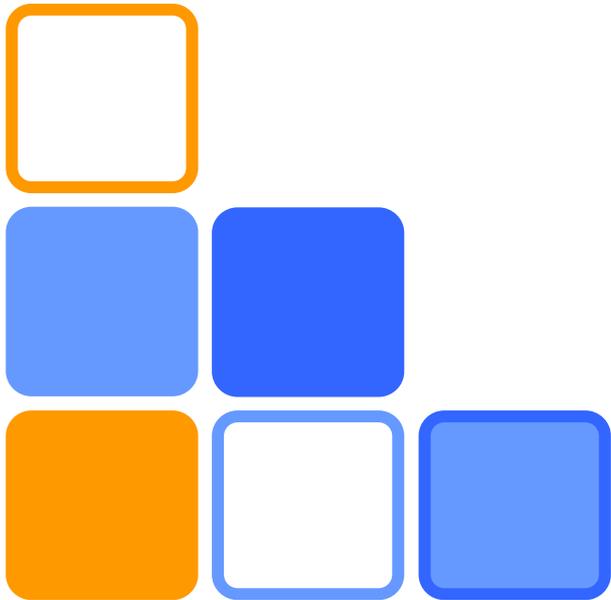


薬学情報処理演習 第7回

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

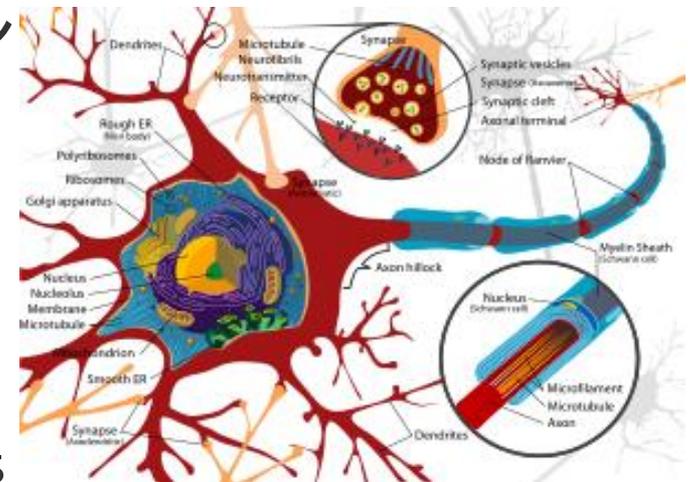
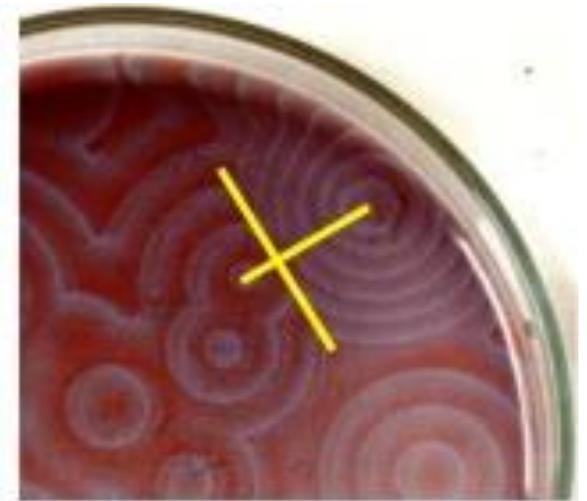
□ 反応拡散方程式 (拡散 + 反応)

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

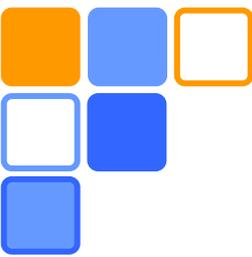
$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + g(u, v)$$

□ 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



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)

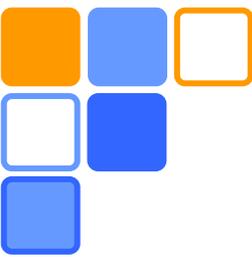
□ 方程式の離散化

- 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

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

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

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



数値計算のながれ

□ パラメータの設定

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

□ 時間発展:

1. 初期条件の設定: $t = 0 : u_i^0, v_i^0$

2. $t = n\Delta t :$

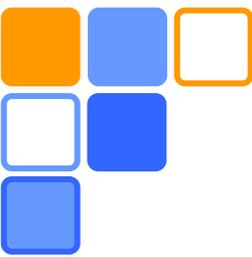
$$u_0^n = u_1^n, u_N^n = u_{N-1}^n \quad \text{ノイマン境界条件}$$

(v も同様)

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \dots \quad u \text{ の更新}$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \dots \quad v \text{ の更新}$$

3. $n \leftarrow n + 1$ として2. \rightarrow 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

差分式

シートold:

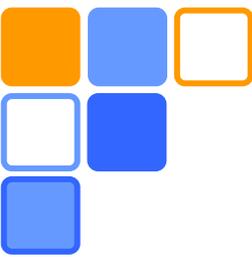
- (1) =new!B13
- (2) =new!B14
- (3) =new!B213

} new のコピー

シートini:

- (1) =0
- (2) =0
- (3) =0

} 初期条件

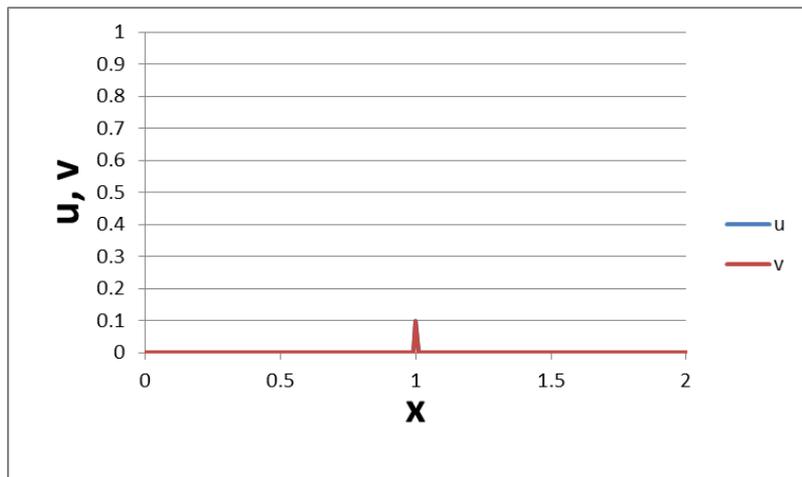


演習課題

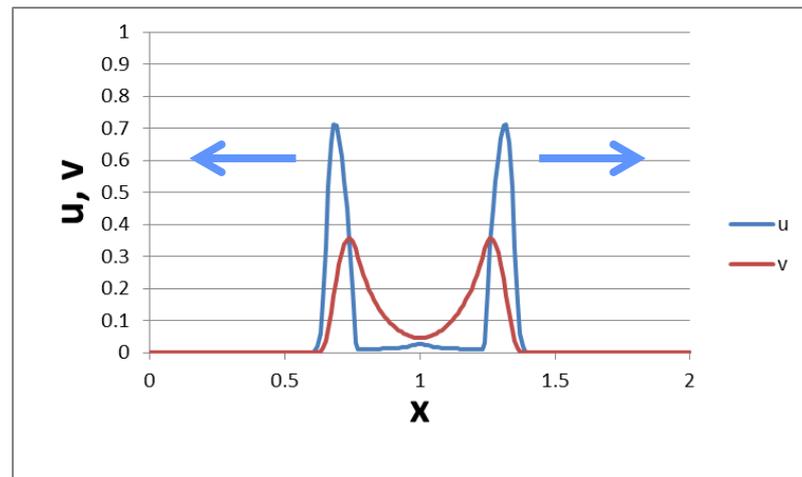
- モデル方程式を解き、パターンの時間変化を観察する。
- パラメータや初期条件、境界条件を変えて定性的に異なる2つの時空間パターンを見出し、それぞれ、いくつかの時刻で u, v を x に対してプロットする。
- パラメータ(参考)
 $D_u = 2 \times 10^{-4}, D_v = 1 \times 10^{-4}$
 $\epsilon = 0.1, b = 1, c = 0.01$
- 初期条件:
(例)中央の1点で $(u, v) = (0.1, 0.1)$ 、それ以外 $(0, 0)$
- 境界条件:ノイマン、ディリクレ、周期境界条件

u, v の時間変化 (参考)

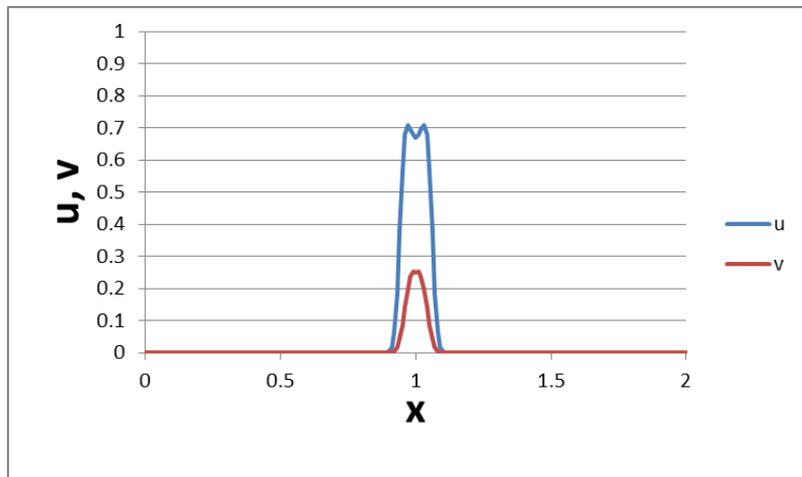
$t = 0$ (初期値)



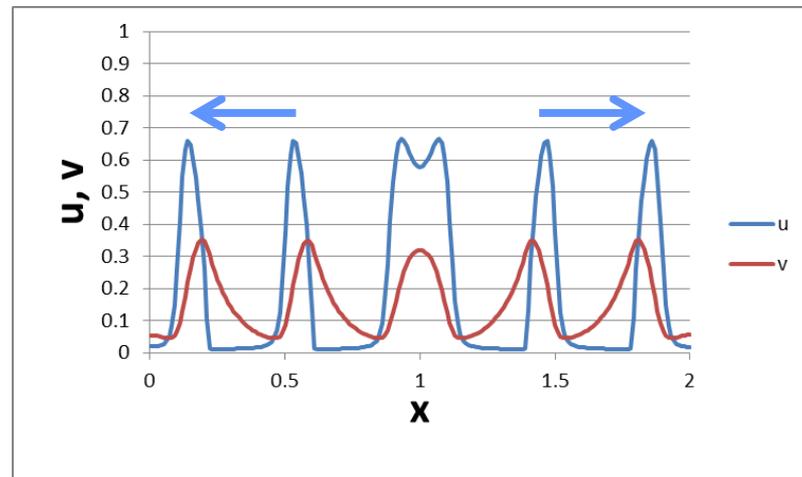
$t = 4$



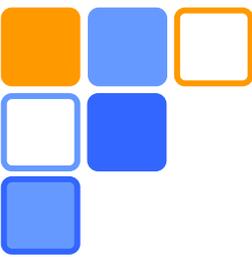
$t = 1$



$t = 13.5$



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



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)