

H18 計算機実験 2

理学部情報科学科
担当 城・鴨・他
高須 (ネタ提供)

2006 年 4 月 21 日 (金)

反応拡散方程式

3次元データを生成する1つの例として、3次元空間中の物質(多数の粒子)が、ブラウン運動のようなランダム移動を繰り返しつつ(拡散)、同時に自身の濃度に依存して増減(反応)する過程を考える。時刻 t 、場所 (x, y, z) における物質濃度を $n(t, x, y, z)$ と書くこととすると、物質濃度の時間変化を記述するものとして次の偏微分方程式が得られる。これを一般に反応拡散方程式と呼ぶ。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} \right) + f(n) \quad (1)$$

定数 D を拡散係数、関数 $f(n)$ を反応項と呼ぶ。今回の実験では、反応項としてロジスティック型の成長 $f(n) = (1 - n)n$ を考える。

まず最初にロジスティック成長について簡単に説明しておく。ロジスティック成長は生物集団のダイナミクスを表すモデルとして知られ、個体密度 N が時間の経過とともに次の微分方程式に従って変化する時、 N はロジスティック成長(もしくは増殖)すると言う。

$$\frac{dN}{dt} = r \left(1 - \frac{N}{K} \right) N \quad (2)$$

パラメータ r を内的自然増加率、 K を環境収容量と呼ぶ。この式は、一個体あたりの個体密度増加率 $\frac{1}{N} \frac{dN}{dt}$ が個体密度 N に比例して減少し、 $N = K$ となる時ゼロとなる状況を表している。

上記の微分方程式は、 $N/K \rightarrow n, rt \rightarrow \tau$ とスケール変換することにより、

$$\frac{dn}{d\tau} = (1 - n)n$$

と変形できる。つまりパラメータ r, K はダイナミクスに定性的な違いをもたらさない。この微分方程式は変数分離により容易に解くことができる(各自やってみよ)。初期集団密度 $n(0)$ が生物学的に意味を持つ限り($n(0) > 0$)、 $n(t)$ は十分時間が経過すると1に収束する。様々な初期値から始まるダイナミクスを Figure 1 に示す。

$$\lim_{t \rightarrow \infty} n(t) = 1$$

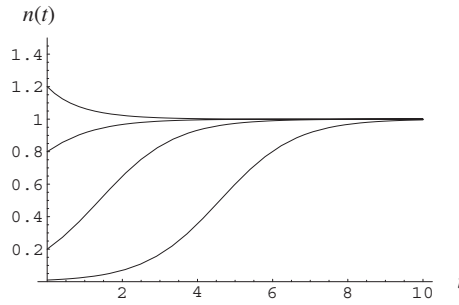


Figure 1: ロジスティック成長の例。異なる初期値から始まるダイナミクス。 $r = K = 1$

反応拡散方程式の解は、時刻 $t = 0$ における初期分布 $n(0, x, z, y)$ と境界条件が与えられると一意に決まる。教会条件とは、注目する空間領域の境界 Ω での振る舞い、 $n(t, x, y, z)$ for $(x, y, z) \in \Omega$ 、の事である。ここでは、空間領域は立方体 $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ であると考え、境界条件としては、境界上で物質（生物個体）の行き来がない反射壁条件 (Reflecting boundary) を採用する。壁にぶつかった個体が跳ね返って領域内に戻る、という条件である。数学的には以下の Neumann 条件、即ち境界上での密度勾配がゼロ、によって与えられる。

$$\frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0$$

y, z 方向に対しても同様である。

反応拡散方程式の導出については Google 等の検索エンジンを用いて各自調べておくこと。本実験では深く立ち入らない。簡略な紹介として、UP Biology「侵入と伝播の数理生物学」重定南奈子著・東京大学出版会、がある。

反応拡散方程式の数値解法

反応拡散方程式 1 を数値的に解く方法の一つとして、陽的差分法がある。これはルンゲ・クッタ法等の微分方程式の数値解法と同様に、連続量である時間 t 、空間軸 x, y, z を、それぞれ微小時間 Δt 、微小区間 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ で格子状に区切り、偏微分方程式 (1) を時刻と空間に関する陽的差分式に置き直すものである。

時間に関する偏微分（上式左辺）は次のように差分化できる。微分の定義を思い出そう。

$$\frac{\partial n}{\partial t} \rightarrow \frac{n(t + \Delta t) - n(t)}{\Delta t}$$

また空間軸 x に関する 2 回偏微分は次のように差分化できる。微分の微分である。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} &\rightarrow \frac{\frac{n(x+\Delta x) - n(x)}{\Delta x} - \frac{n(x) - n(x-\Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{n(x + \Delta x) - 2n(x) + n(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

空間軸 y, z についても同様に差分化すると、偏微分方程式 (1) の差分式として次式を得る。

$$\frac{n(t + \Delta t, x, y, z) - n(t, x, y, z)}{\Delta t} = D \left\{ \frac{n(t, x + \Delta x, y, z) - 2n(t, x, y, z) + n(t, x - \Delta x, y, z)}{\Delta x^2} + \frac{n(t, x, y + \Delta y, z) - 2n(t, x, y, z) + n(t, x, y - \Delta y, z)}{\Delta y^2} + \frac{n(t, x, y, z + \Delta z) - 2n(t, x, y, z) + n(t, x, y, z - \Delta z)}{\Delta z^2} \right\} + f(n)$$

式は少々込み入っているが、やっていることは時刻 t の状態を元にして時刻 $t + \Delta t$ の状態を計算しているに過ぎない。上式を整理すると次式を得る ($\Delta x = \Delta y = \Delta z$)。

$$\begin{aligned} n(t + \Delta t, x, y, z) &= n(t, x, y, z) + \\ &D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \{ n(t, x + \Delta x, y, z) + n(t, x - \Delta x, y, z) + \\ &n(t, x, y + \Delta y, z) + n(t, x, y - \Delta y, z) + \\ &n(t, x, y, z + \Delta z) + n(t, x, y, z - \Delta z) - 6n(t, x, y, z) \} + f(n)\Delta t \end{aligned}$$

つまり、場所 x, y, z における微小時刻 Δt 後の濃度 $n(t + \Delta t, x, y, z)$ は、時刻 t の濃度 $n(t, x, y, z)$ に、隣接する 6 つ (x, y, z 軸の隣接する要素) の要素の合計から自身の濃度の 6 倍を引いて定数 $D\Delta t/\Delta x^2$ をかけたものを足したもので与えられる。時刻 t の情報を用いて時刻 $t + \Delta t$ の状態をあらわに計算することからこうした差分の方法は陽的差分と呼ばれる。

連続量 x, y, z を差分化したものを i, j, k と書くことにすると、 $x = i\Delta x, y = j\Delta x, z = k\Delta x$ 。ここで $i, j, k = 0, 1, 2, 3, \dots, SIZE$ は非負の整数である。今考えている領域は $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1$ なので、 $SIZE\Delta x = 1$ という関係にある。陽的差分法とは

$$\begin{aligned} n(t + \Delta t, i, j, k) &= n(t, i, j, k) + \\ &D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \{ n(t, i + 1, j, k) + n(t, i - 1, j, k) + \\ &n(t, i, j + 1, k) + n(t, i, j - 1, k) + \\ &n(t, i, j, k + 1) + n(t, i, j, k - 1) - 6n(t, i, j, k) \} + f(n(t, i, j, k))\Delta t \end{aligned}$$

を解くことにほかならない。陽的差分は直感的な理解に易いが、時間刻みと空間刻みは次の条件を満たさなくてはならないという制約がある (3次元拡散の場合)。

$$D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{6}$$

つまり空間刻み Δx を細かくとって精度を上げようとする、時間刻み Δt は Δx の二乗以上に小さくしないとけない。時間刻みが小さくなれば時刻はなかなか進まないので計算時間が膨大になってしまう。実際問題、陽的差分法はその計算量の多さから余り用いられず、多くの場合より効率的な陰的差分法を用いることが多い。しかし本実験では、並列化のためあえて陽的差分法を用いることにする。

境界条件の差分表現

上で導いた差分式は、空間の領域の内部に対してのみ適用可能である。例えば、境界 $x = 0$ 上 ($i = 0$) で $n(t + \Delta t, 0, j, k)$ を求めるには $n(t, -1, j, k)$ が必要になる。しかし $n(t, -1, j, k)$ は領域 $0 \leq x \leq 1$ をはみ出しているため定義されていない。では $n(t, -1, j, k)$ の値はどうやって決めるのか？

これは境界条件を用いることで決定できる。境界条件としてよく用いられるものに、境界上で物質の行き来がない自由端条件（境界上で濃度勾配がゼロ）が良く用いられる。また、熱の伝導問題の場合、境界上で濃度（温度）が一定という固定端条件が用いられることがある。本実験では濃度勾配がゼロ、つまり、境界上で粒子の行き来がない自由端境界条件を考える。

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$$

濃度勾配（微分）がゼロという条件は、差分表現では次のようになる。

$$\begin{aligned} n(t, -1, j, k) &= n(t, 0, j, k) \\ n(t, SIZE + 1, j, k) &= n(t, SIZE, j, k) \end{aligned}$$

要するに、実際には存在しない空間領域外の場所 ($i = -1, i = SIZE + 1$) のダミーの変数を用意し、常に境界の端の値と一致させることで自由端境界条件を実現するのである。

軸 y, z についても同様であり、 $j = -1, j = SIZE + 1, k = -1, k = SIZE + 1$ における濃度を保持するダミー変数を用意する。

陽的差分法のアルゴリズム

陽的差分法のアルゴリズムをまとめてみる。1) 3次元配列 n を用意する。ただし 0 番目と最後の要素は境界条件用のダミーである。次に 2) 初期分布を設定する（すべての配列要素に適切な初期値を代入）。たとえば、原点 $(x, y, z) = (0, 0, 0)$ に微量の物質が存在し、他の領域では物質が存在しない初期状態が考えられる ($n[1][1][1] = 0.1$ 、それ以外では $n[i][j][k] = 0$ とする状態 $i, j, k > 1$)。その後は 3) 陽的差分スキームを繰り返す。即ち、領域内部については上に導いた陽的差分式、境界上で境界条件を用いて境界条件用のダミー配列要素を更新する。これにより時刻が dt だけ進む。この手順を好きなだけ（目的とする最終時間まで）繰り返せばよい。C プログラムの骨格は以下になるだろう。（添え字に過ちがあるかもしれないので、そのまま書き写さないこと！）

```
#define dx 0.01
#define dt 0.0001
#define SIZE 101 /* 領域 0 ~ 1 を差分化 */

/* 境界条件用のダミーを 2 つ追加 */
double n[SIZE+2][SIZE+2][SIZE+2], nd[SIZE+2][SIZE+2][SIZE+2];
```

```

c = D*dt/dx/dx;

/* 初期条件の設定 */

/* 時刻を dt 進めるループ */
for( 好きなだけ ){

    /* 領域内部 */
    for(i=1; i<SIZE+1; i++)
        for(j=1; j<SIZE+1; j++)
            for(k=1; k<SIZE+1; k++)
                nd[i][j][k] = n[i][j][k] + c*(n[i+1][j][k] + n[i-1][j][k] +
                    n[i][j+1][k] + n[i][j-1][k] + n[i][j][k+1] + n[i][j][k-1]-6*n[i][j][k] ) +
                    f( n[i][j][k] )*dt;

    /* 境界上 x = 0, x = 1 */
    for(j=1; j<SIZE+1; j++){
        for(k=1; k<SIZE+1; k++){
            nd[0][j][k] = nd[1][j][k];
            nd[SIZE+1][j][k] = nd[SIZE][j][k];
        }
    }

    /* 境界上 y = 0, y = 1 */
    for(i=1; i<SIZE+1; i++){
        for(k=1; k<SIZE+1; k++){
            nd[i][0][k] = nd[i][1][k];
            nd[i][SIZE+1][k] = nd[i][SIZE][k];
        }
    }

    /* 境界上 z = 0, z = 1 */
    for(i=1; i<SIZE+1; i++){
        for(j=1; j<SIZE+1; j++){
            nd[i][j][0] = nd[i][j][1];
            nd[i][j][SIZE+1] = nd[i][j][SIZE];
        }
    }

    /* ダミー配列の入れ替え */
    for(i=0; i<SIZE+2; i++)
        for(j=0; j<SIZE+2; j++)
            for(k=0; k<SIZE+2; k++)
                n[i][j][k] = nd[i][j][k];
}

```

1次元空間の反応拡散方程式

上に紹介した3次元空間中の反応拡散方程式を数値的に解く事が本実験の目的であるが、まず最初に1次元空間の反応拡散方程式を解いてみるのが良いだろう。

時刻 t 、場所 x における粒子密度を $n(t, x)$ とすると、 $n(t, x)$ は次式に従う。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + n(1 - n) \quad (3)$$

ただし、初期条件として $n(0, x)$ 、境界条件として反射壁

$$\left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial n}{\partial x} \right|_{x=1} = 0$$

を考える。

これを陽的差分によって時刻 t 及び x について差分化すると次式を得る

$$n(t + \Delta t, x) = n(t, x) + D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \{n(t, x + \Delta x) + n(t, x - \Delta x) - 2n(t, x)\} + n(1 - n)\Delta t \quad (4)$$

1次元の場合、時間刻みと空間刻みは次の条件を満たさなければならない。

$$D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

Cプログラムでは1次元配列を用意し、次の手順に従って計算すれば良い。

```
#define dx 0.01
#define dt 0.0001
#define SIZE 101 /* 領域 0 ~ 1 を差分化 */

/* 境界条件用のダミーを2つ追加 */
double n[SIZE+2], nd[SIZE+2];

c = D*dt/dx/dx;

/* 初期条件の設定 */
for(i=0; i<SIZE+2; i++)
    n[i] = 0.0; /* 配列要素をゼロに初期化 */
n[0] = n[1] = 0.01; /* 領域左端に微量を配置 */

/* 時刻を dt 進めるループ */
for(好きなだけ){

    /* 領域内部 */
    for(i=1; i<SIZE+1; i++)
        nd[i] = n[i] + c*(n[i+1] + n[i-1] - 2*n[i]) + f(n[i])*dt;

    /* 境界上 x = 0, x = 1 */
    nd[0] = nd[1];
    nd[SIZE+1] = nd[SIZE];

    /* ダミー配列の入れ替え */
    for(i=0; i<SIZE+2; i++)
```

```

n[i] = nd[i];
}

```

数値計算の結果をグラフに描くと下図のようになる。一定時刻毎の分布 $n(t, x)$ を重ねて表示してある。横軸は空間 x (ステップ数)、縦軸がその場所における粒子密度 $n(t, x)$ である。時間の経過とともに左端に配置した微少量の粒子が拡散するとともにロジスティック増殖を行い、一定速度で進む進行波を形成し、最終的には至る所密度 1 (環境収容量 $K = 1$) へ収束する。

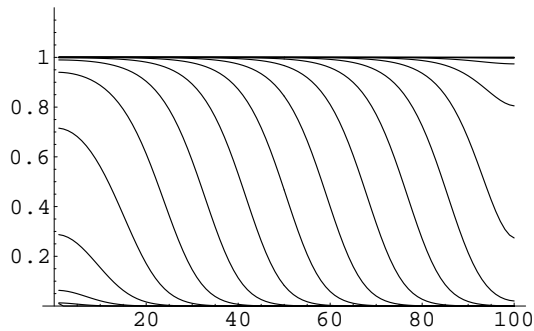


Figure 2: 1次元空間上の拡散方程式の解の一例

パラメータ D の値が大きすぎると (粒子はより素早く拡散する) 分布はすぐに右端 $x = 1$ に到達してしまい、上記のグラフのような進行波は現れない。 D の値を適当にとって数値計算する。

ダイナミクスの性質

今回注目する反応拡散方程式は、1) 粒子が3次元空間内をランダムに移動することによる拡散、2) 各点において粒子がロジスティック成長、を組み合わせたダイナミクスである。一般に拡散は粒子が至る所に拡がる過程であり、直感的には空間内の非均一性を均す働きがある。一方、ロジスティック成長は十分時間が経った後環境収容量 K (この場合は $K = 1$) に収束する性質を持つ。この課題で注目する空間は閉じた空間であり、外部からの粒子の移入は起こらない (反射壁条件) ため、十分時間が経った後は、至る所粒子密度が1となる状態に系は収束するはずである。正しく数値計算が出来ているかの指針とすると良いだろう。

もし反応項がない場合 ($f(n) = 0$)、新たな粒子は生じず、粒子は拡散のみによって空間内に拡がるだけである。従って、全粒子濃度 (すべての粒子を合計したもの) は不変である。つまり初期条件として原点のみに微少量を設定した場合 ($n(0, 0, 0) = 0.1$)、濃度の合計は時間の経過に関わらず 0.1 に保たれるはずである。陽的差分が正しくプログラムされているかのチェックとするとよいだろう。

具体例

今回我々が想定する空間領域は、 $0 \leq x, y, z \leq 1$ の立方体であり、3次元空間中の反応拡散方程式を解くことが目的である。しかし、初期分布を適当に取る事により、3次元のダイナミクスを1次元ダイナミクスに落とす事が可能である。つまり、初期分布として、 $n(0, 0, y, z) = const > 0$ for $0 \leq y, z \leq 1$ 、 $n(0, x, y, z) = 0$ for

$0 < x \leq 1, 0 \leq y, z \leq 1$ とすると、 x 軸方向だけの 1 次元ダイナミクスとなる。正しく計算できていれば、1 次元の反応拡散方程式の解のように進行波が得られるはずである。