

反応拡散方程式による形態生成の数値シミュレーション -有限要素法による解析を目指して-

信川 創 (指導教員:細谷 将彦)

1 反応拡散方程式の数値シミュレーション

反応拡散方程式は 1952 年 Turing によって生体の形態生成のモデルに用いられた物質の化学反応と拡散現象を記述する微分方程式である。本研究で 1975 年 H.Meinhardt によって示された葉脈などの生体の網目構造を生成する反応拡散方程式:

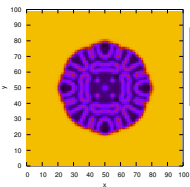
$$\frac{\partial a}{\partial t} = ca^2s - \mu a + D_a \Delta a \quad (1-1)$$

$$\frac{\partial s}{\partial t} = c_0 - ca^2s - \gamma s - \varepsilon y + D_s \Delta s \quad (1-2)$$

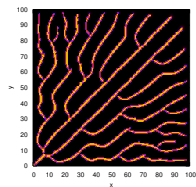
$$\frac{\partial y}{\partial t} = da - ey + \frac{y^2}{1 + fy^2} \quad (1-3)$$

a	activator の分布
s	substrate の分布
y	differentiation の分布
D_a, D_s	拡散係数
c	自触媒係数
$\gamma, c_0, \varepsilon, e, d, f$	補助パラメータ

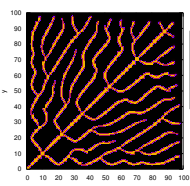
を時間を前進差分によって離散化した線の方法で解析し、次のような 4 種類の differentiation のパターンを得た。(1) は時間とともに拡散するが (2)(3)(4) は安定したパターンを残す。



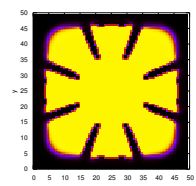
(1)



(2)



(3)



(4)

2 より解析に適したアルゴリズム

生体のような複雑な形状の領域で反応拡散方程式を解こうとした時、空間の離散化は有限要素法が適当である。また、時間方向の離散化は前進差分を用いた場合、陽的な差分であるため解の安定性の面で問題がある。これは陰的な差分を用いることで改善できる。そこで、空間を有限要素法で離散化し、時間を陰解法の一つであるクランク=ニコルソン法による差分で離散化する結合解法が反応拡散方程式を解析するアルゴリズムとして最も適していると考えた。反応拡散方程式は連立非線形の微分方程式であり、解析が困難であるので、まずは非定常拡散方程式を結合解法で解析することにした。正方形領域 Ω で 2 次元の非定常拡散方程式:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u \quad (2-1)$$

をディリクレ境界と適当な初期条件のもとで解く。まず、(2-1) に対し残差 R を近似関数 \tilde{u} を用いて

$$R = \Delta \tilde{u} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} \quad (2-2)$$

と定義し、重み関数 u^* を用いて

$$\int_{\Omega} Ru^* d\Omega = 0 \quad (2-3)$$

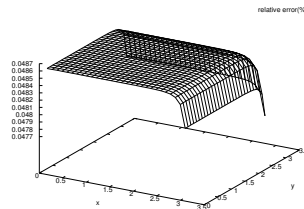
を計算する。次に Ω を三角形要素に分割し、要素ごとに内挿関数を設定して (2-3) を計算すると次のような連立常微分方程式が表れる。

$$K\mathbf{u} + M \frac{d\mathbf{u}}{dt} = 0 \quad (2-4)$$

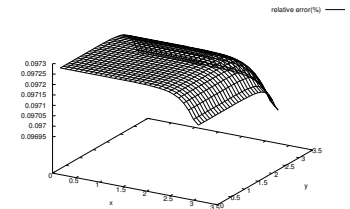
K は剛性マトリクス、 M は質量マトリクス、 \mathbf{u} は節点値ベクトルである。(2-4) をクランク=ニコルソン法を用いて差分方程式に書き換えると次のようになる。(u の右肩の添字は時間ステップを表している。)

$$\left(\frac{1}{2}K + \frac{1}{\Delta t}M\right)\mathbf{u}^{(t+1)} = \left(\frac{1}{\Delta t}M - \frac{1}{2}K\right)\mathbf{u}^{(t)} \quad (2-5)$$

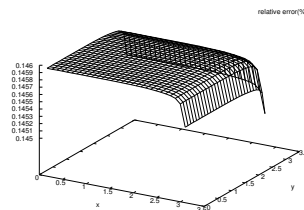
この結合解法による (2-1) を正方形の 1 辺を 30 分割して解析した結果は以下のようになった。(厳密解からの相対誤差)



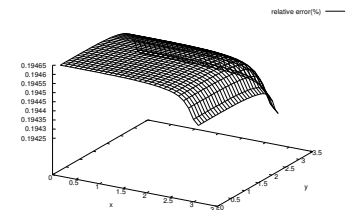
$t = 0.1$



$t = 0.2$



$t = 0.3$



$t = 0.4$

$t = 0.4$ (時間ステップは 10 ステップ目) で相対誤差が 0.2% 以内に収まっている。より精度を上げるには時間、空間の分割を上げれば良いが、解かなければならない連立 1 次方程式の元数が高くなるので丸め誤差を減らす工夫が必要となる。いくつか方法を挙げる。直接法を用いる場合は反復改良法を用いて解の残差を小さくする。もしくは、直接法を用いるのではなく、反復法を用いれば丸め誤差の影響を受けないのでよいが、この場合係数行列によっては解に収束しない場合があるので注意が必要である。今回は学ぶことが出来なかったが、この分野では連立 1 次方程式のアルゴリズムとして解への収束が保証され、直接法よりも速く解ける共役勾配法の一つである ICCG 法が使われているのでこの方法を試してみても良いだろう。

3 今後の課題

この結合解法を反応拡散方程式に適用する場合、有限要素法における非線形項の扱いについて、複雑な形状の領域で解析するために要素分割のアルゴリズムについて、学ぶ必要がある。