複雑系の数理とシミュレーション

Mathematical and simulation of complex systems

花山竜也 Tatsuya Hanayama

1. 背景

本プロジェクトの分野の現状として、自然界における様々な発生現象を取り上げて数理モデルを構築し、その解析により形態形成機構を解明し、数学的解析を行っている。生物の模様や細胞運動などによって発生するパターン形成を数理モデルとして解析することによって、その条件を決定することができる。例えば、ヒトが怪我した後に治癒される現象などは細胞集団の振る舞いが必要になる。細胞集団の振る舞いによって形成されるパターンの条件を理解し制御することができれば、病気の理解や新たな治療法の開発に役立つ知識を深めることも可能である。これからのパターン形成としては、人間の皮膚などのパターンを解析することを目指している。皮膚のパターン形成を理解することで、皮膚がんなどの疾患の早期発見や治療に繋がることが期待されている。現状では、パターン形成すること自体は可能が、数値計算するうえで、式が複雑になっていき解析を行うことがやや困難になったり、わかりにくくなったりしている。つまり、パターンが形成される詳細な条件を決定するのが難しい状況になっているのである。つまり、パターンを形成させる数理モデルに対する知識を深めてから、詳細に解析していくことが、パターン形成条件を決定するには大切である。そこで、状況によって、わかりやすい方法で数学的解析を行うことを重要視している。

2. 課題の設定と到達目標

プロジェクトが取り組む課題としては、専門的な用語の理解やメンバー間の反応拡散系への理解度の差を減らしつつ、反応拡散系についての数値計算とシミュレーションを行い解析することとした。生物の拡散や模様が数理モデルで表せることを示すために数値計算プログラムを作成し、前期では捕食者―被食者系について着目し、後期では Fitzhugh-Nagumo 方程式の解析に力を入れていった。各課題で様々なパラメータでシミュレーションを行い、動画を作成することが到達目標となる。

3. 課題解決のプロセスとその結果

まず、課題を取り組むにあたって専門的な用語の理解に努めた。参考文献の輪読をページごとに分担して行い、各自理解した部分に関してはグループメンバーに説明できるようにした。また理解できなかった部分に関してはメンバー間での意見の共有や担当教員に意見を求める等をして理解を深めていき課題を進めていく上での前段階として、時間をかけて取り組んでいった。

前期の課題としては、最初に、捕食者―被食者系に

拡散を加えた系の空間非依存的な系の解析を行った。まず、相平面解析をすることによって、この系には3つの定常状態があることが分かった。この3つの定常状態は、「捕食者、被食者が不在な状態」、「捕食者が不在で、被食者数が環境収容力に等しい状態」、「捕食者と被食者が共存する状態」で、この3つの状態の平衡点は、それぞれ(0,0)、(1,0)、(b,1-b) であった。そして、三つの平衡点の安定性を解析するために線形安定性解析を行った。その結果、(0,0)、(1,0) の場合に不安定状態、(b,1-b) の場合に安定状態であることが判別できた。また、安定状態の場合4a がb/1-b より大きい場合は安定渦状点、小さい場合は安定結節点に判別されることが分かった。次に、安定状態の場合の解の軌道がどのようになるかを解析するためにオイラー法を使って数値計算を行った。数値計算からグラフを出力することで、安定渦状点の場合は解が渦を巻くように収束しており、安定結節点の場合は解が直線的に収束していることが分かった。その後、平衡点の周りの流れ図を出力することで、a=4、b=0.7 の場合は、初期値から平衡点であるに渦を巻くように直線的に解が収束しており、平衡点周りのベクトの流れも渦を巻いていることがわかった。また、a=0.2、b=0.7 の場合は、初期値から平衡点に向かって直線的に解が収束しており、平衡点周りのベクトルの流れも直線的なものになるのがわかった。その後リアプノフ関数を用いることで平衡点の安定性を証明していった。平衡点(b,1-b) から離れるほどエネルギーが大きくなっていき、平衡点(b,1-b) ではエネルギーが0 になる。このことから平衡点(b,1-b) が安定であるということがわかった。

2つ目に、空間的な拡散が発生し、物質の反応がない系である拡散方程式を解析した。まず、数値計算を行うためにテイラー展開を利用して離散化を行った。数値計算プログラムは差分法を用いて、3次元グラフの出力と2次元グラフの時間発展での解の振る舞いを確認した。境界条件はノイマン境界条件とし、d=1, $\Delta x = 1, \Delta t = 0.001$ とパラメータを設定し、初期条件をt=0 で$u = e^{\frac{-(x-500)^2}{200}}$を与えた。初期条件によって与えられた形の山は時間発展とともに空間全体に広がっていき山の高さはどんどん低くなっていくのがわかった。前期全体を通しては、相平面解析によって定常点を求め、平衡点については線形安定性解析とリアプノフ関数を用いて安定性について考察をしていき、捕食者―被食者系の解と平衡点周りの流れ図を二つのパターンで出力した。これにより反応拡散系について理解が深まっていき、パターン形成へのアプローチができたと考える。拡散項を除いた状態では反応拡散系を解析したとは言えない。残された課題としては、拡散項を残した状態で捕食者―被食者系を解析することである。それによって真に反応拡散系を解析したということになり、生物学で見られるパターン形成を確認することにもつながると考えた。

後期の課題としては、最初に、双安定反応拡散方程式の解析を行った。拡散項を 0 とおき、f(u) = u(1 −

u)(u − a)の常微分方程式の形でヌルクラインを出力し解の流れを確認した。u < 0,0 < u < 0.5 の時はu=0に収束し、0.5 < u < 1,1 < u の時はu=1 に収束していることが分かる。二つの安定点に収束していることから双安定系である。その後、拡散項を加え偏微分方程式の形で解析を行った。差分法を用いて数値計算を行い、時間発展していくフロント波解をグラフ化した。a=0.5 のときは、フロント波解はその場から動かず界面だけ立っていくことから、u-0 とu=1 の安定性が等しい定常状態であることが確認でき、a=0.1 のときは、フロント波解は右に進行し、u=1 の状態が全体を覆いつくしていることから、u=1 のほうがより安定状態であることが確認でき、a=0.9 のときは、フロント波解は左に進行し、u=0 の状態が全体を覆いつくしていることから、u=0 のほうがより安定状態であることが確認できた。

2つ目に、一次元のFitzhugh-Nagumo方程式の数値計算プログラムを作成して、解の振る舞いを動画化することを目的とした。まず、$f(u, v) = u(u-\alpha)(\beta-u) - v$, $g(u, v) = u - \gamma v + \sigma$ とし、$f(u, v) = 0$, $g(u, v) = 0$ を解き、u , v 相平面で平衡点付近の流れをグラフ化した。流れ図を出力したことより、1つの安定点に向かって流れていくことがわかったため単安定系と判断した。その後、差分法を用いて数値計算を行っていった。境界条件は、周期的境界条件に設定して、パラメータを$\alpha = -\sqrt{3}, \beta = \sqrt{3}$ $\epsilon = 0.02$, $\gamma = 0.5$, $\sigma = 0.7$, $d = 1$, $\Delta t = 0.0025$, $\Delta x = 0.1875$ とした。初期値は空間一様にu=-1.41120000000000,v=-1.4224000238418 を与え、t=0 で刺激としてx=0 付近に$u = e^{\frac{-(x-1)^2}{0.5}}$とした。また、x の範囲を0 から150にし、t が0 から45 になるまで計算を続け、得られた解を動画化していった。刺激を受けた系はパルス解を形成し、その後、時間経過で徐々に進行していくことがわかった。その時、境界にぶつかっても周期的境界条件によって形を保ったまま進行していくだけであるということも確認することができた。

3つ目に、Fitzhugh-Nagumo 方程式を二次元系に拡張し、線上の刺激として一次元のFitzhugh-Nagumo方程式を数値計算したときに得られたパルス解をy 軸方向に一様に並べ、その後時間発展をさせた。ただし、パルス解を並べる範囲はy 軸方向の0 から半分までとし、半分からは初期値としてu=-1.41120000000000,v=-1.4224000238418 を与え、プロットしていった。この系は線上の刺激を与えると時間発展とともに端点が失速していき、そこから巻き込んでいくため徐々にスパイラルパターンを形成していくことがわかった。次にこの系の中心に点状の刺激を与え、時間発展させた結果をプロットした。中心に点状の刺激を与え時間発展をさせると徐々に広がっていくリング状のパターンが得られることがわかった。

後期全体を通しては、最初に拡散項のみの系での数値計算を行い、グラフ化することで解がどのように拡散されていくか理解することができた。次に、双安定反応拡散系の解析を行い、フロント進行波解をグラフ

化することで、反応拡散系の解き方や解の動きについて理解を深めることができた。次に、Fitzhugh-Nagumo 方程式を数値計算し、実際にパターン形成を行うことで自然界に発生するようなスパイラルパターンを形成することができた。このことから、自然界で生物などが形成するようなパターンは数理モデルによって表現できることがわかった。また全体を通すと数値計算能力やプログラム能力の向上につながったと考える。

4. 今後の課題

前期では反応拡散系における捕食者―被食者系の拡散項を0 と定義し、反応項だけの式として数値計算プログラムを作成した、その後シミュレーションを行い解析を進めていった。しかし拡散項を0 と定義すると捕食者―被食者系でも空間に依存しない時間的な変化しか見られず捕食者―被食者系を完全に解析できていないと言えるだろう。そのためにまず拡散方程式の解析を課題とし、後期では拡散方程式の数値計算プログラムを作成し、シミュレーションを行い、解の振る舞いを確認した。今後は拡散項を0と定義せず捕食者―被食者系の数値計算プログラムを作成しこの系の解析を進めていきたい。そうすることで捕食者―被食者系の解も空間に依存する形で得ることができ、反応拡散系の解析をさらに進めることができると考える。後期では双安定反応拡散方程式とFitzhugh-Nagumo 方程式の数値計算を行い、解の振る舞いをアニメーションにした。反応項と拡散項が入っている系を解析するために数値計算のアルゴリズムを勉強したが、実際にプログラムに適用できたアルゴリズムは少ししかなかったため、反応拡散系の効率的で安定的な解析をするために複雑な数値計算アルゴリズムを勉強し、プログラムに適用することが今後の課題になる。この課題を達成し、より効率的で安定的な数値計算プログラムを作成することで、双安定反応拡散方程式やFitzhugh-Nagumo 方程式以外の反応拡散系の解析を進めることができるので、生物の拡散や魚の縞模様のパターン形成をアニメーション化するなどのシミュレーションを通して確認していくことが今後必要な作業になると考える。

参考文献

[1] 三村昌泰総監修. マレー数理生物学応用編. 丸善出版, 2016.

[2] 藤本武文. 興奮系におけるパターンの制御. 九州大学大学院総合理工学府量子プロセス理工学専攻非線形物性学講座, 2003.