

北海道大学 数理モデリング・シミュレーション修行 まとめ

京都大学大学院理学研究科 分子発生学研究室
修士1年 荻田豪士

はじめに

4月に6月6日～10日までの5日間、4回生の向井友規さんと北海道大学の電子科学研究所の秋山正和先生の研究室にお邪魔して、数理モデリングおよびシミュレーションの勉強をしてきた。このまとめでは、一日ずつ習った内容や感想を日を追って自分なりに整理してみたいと思う。

1日目

1日目は今回の修行の目標のすり合わせをした。その結果、

1. プログラミングの基礎および数値シミュレーションの可視化
2. 常微分方程式
3. 偏微分方程式
4. 反応拡散方程式

という4つのステップを一日ずつ習っていくことになった。また、知識の定着を図るためにその日に習った内容から課題をもらって、その課題を翌日にセミナーという形で発表することになった。2日目の課題は、事前課題として指定していただいたC言語の教科書から問題を出すというものだった。また、C言語の環境を整えるために、自分達のノートパソコンにlinuxをインストールした。

2日目

今日のセミナー中に出された問題は、主にfor文やif文に関するものだった。それなりに事前課題の本を勉強していたので、なんとか答えることができたと思う。秋山先生の講義は、微分方程式の解法についてだった。以下に内容をまとめる。

微分方程式

微分方程式:関数を解に持つ、微分を含んだ方程式のこと。変数の数によって2つに分けることができる。

常微分方程式:変数を一つしか持たない微分方程式

偏微分方程式:変数を複数持つ微分方程式

また、線形性の有無により、2つに分けることができる。

線形微分方程式:定常解を代入して解ける

非線形微分方程式:一般には解けない。数値計算によって解く

感想:2回生まではなんちゃって物理志望だったので、微分方程式ををよくわからずに説いていたが今日の講義で曖昧さが少し減ってよかった。

3日目

今日のセミナー発表の課題は、オイラー法およびルンゲクッタ法を用いて微分方程式を数値計算し可視化すること、および厳密解との誤差を計算することだった。これも事前課題で一応やっていたので、クリアすることができた。いろいろな機能もつけてみた。秋山先生の講義は、数値計算の誤差についてと、偏微分方程式についてだった。以下に内容をまとめる。

数値計算の誤差と数値計算の妥当性

微分方程式の数値計算は、微分方程式を微分の定義を元に離散化している。この際、微分の定義では0の極限を取るところを、十分に小さい値(0.01とか)として計算しているためどうしても誤差が出てくる。たとえばルンゲクッタ法では、この誤差は数値解に4乗で出てくる。数値シミュレーションのプログラムを書いた時には既知の関数を計算してみて、この誤差が正しく出ているかチェックすることで正しくプログラムが組めているか確認することができる。また、離散化の値を小さくすればするほど誤差は小さくなるが、計算が遅くなってしまいうので、計算したグラフの形が変化しない程度に小さく離散化の値を取ることが大切である。

拡散方程式

拡散方程式は、2個の金属をつなげた系(2 box system)の熱交換の考え方を拡張し、N個の金属をつなげた系(N box system)を考えることから導かれる。また、拡散方程式の境界条件は、
ディレクレ境界条件:系の両端に恒温槽が付いているような状態
ノイマン境界条件:系の両端が閉じていて、外との熱のやり取りが無いような状態
周期境界条件:周期的に現象が起こる場合
が存在する。

感想:離散化の値と誤差の関係式を求めるときに、ホワイトボードの前でフリーズしてしまい非常に恥ずかしかった…

4日目

今日の課題は拡散方程式の数値計算のプログラミングおよび可視化だったが、発表はなかった(一応ちゃんと出来た)。秋山先生の講義では、3日目に習った拡散方程式の右辺に反応項を加えた、反応拡散方程式を習った。以下に内容をまとめる。

勾配系

変位 x が、系のエネルギー E を用いて、

$$\dot{x}(t) = -\frac{dE}{dt}$$

のように書ける系のこと。この式を解けば x の時間変化がわかるので、系のエネルギーさえわかれば x の運動はわかったことになる。

反応拡散方程式

拡散方程式に反応項を加えると出来る。適切にパラメーター設定を行うと、パターンが形成されたりする。

感想:勾配系も反応拡散方程式も感覚的にはわかったが、まだまだきっちり説明できるほどは定着していない。京都に帰ってより深く勉強をする必要がある。

5日目

今日の課題はチューリングの問題だったが、うまく動かなかった。初期条件の与え方が悪かったのかもしれない。秋山先生の講義は、フェーズフィールドモデルだった。また、カイメンシミュレーションモデルの今後の課題とやるべきことについてディスカッションしたが、その部分はプレゼンテーションを作ったのでそちらで書くことにする。

フェイズフィールドモデル

結晶やアメーバ運動のモデルでよく用いられるモデル。
細胞や結晶がいる状態を1、いない状態を0として、扱う。パラメータの条件により、1になりやすかったり2になりやすかったりする。また、なるべく状態がガタガタにならないように、曲線をスムーズにつなぐ項も含まれており、これによって緩やかに状態が変化していく。

感想:卒研では細胞性粘菌をやっており、フェイズフィールドモデルはよく耳にしていたが、そこで出てくるエネルギーとはなんぞやと思っていたが、やっとおぼろげに理解できた。

5日間を通して

4回生の時から、数理学や物理学をスイスイ使える実験生物学者になりたいと思っていたので、今回の修行はその第一歩として非常にありがたかった。自分ではそれなりに勉強をしている気になっていたが実際の研究室に飛び込んでみると全く勉強が足りていないことに気づいた。今回習った数学や数値計算に関する内容は、京都に持ち帰ってしっかり咀嚼し、次に発展させていこうと思う。

また、カイメンシミュレーションについては、これからカイメンの形態形成を実験側の人間としてしっかり観察して、自分なりにモデルを立てたりして、今のモデルを更に発展させていこうと思う。

さいごに

秋山先生と学生の皆さんには、忙しい中時間を作ってくださいありがとうございました。また、今回出張にあたってサポートしてくださった近藤滋先生と新学術領域計画班の方々々に感謝いたします。