

研究課題名 :

**農学・工学分野における機能数値解析支援ツール
(ソリューションサービス)の設計・開発**

○濱田 浩幸¹(研究代表者)・花井 泰三¹(研究分担者)・
原口 智和²(研究分担者)・山上 健³(研究分担者)

1 生物機能科学部門 ・ 2 生産環境科学部門 ・ 3 遺伝子資源工学部門

はじめに :

本研究は、生化学反応、プロセス工学、流体・構造力学現象などポテンシャルまたはエネルギーが時空間的に変化する現象の数値シミュレーションおよび数値解析を煩雑な数式の導出および高度な計算機技術を必要とすることなく、ユーザーが簡便に実施できるコンピュータソフトウェアの設計および開発を目指す。

方法 :

線形および非線形の数理モデルの解析が可能な汎用性の高い数値計算エンジンを設計および開発する。さらに、大容量計算を要する時空間の数値シミュレーションを高速化するため、数理モデルの数値解法を分割し、数値計算を並列化する。そして、グラフィカル・ユーザー・インタフェースを用いて、数理モデルの構築、数値シミュレーションの経時変化および数値解析結果を視覚的に評価できる可視化ツールを開発する。

結果および考察 :

1. 数値計算エンジンの開発

多次元の非線形連立偏微分方程式の数値解を算出するため、有限差分近似解法を導入した汎用性の高い数値計算エンジンを開発した。この数値計算エンジンは、エンジンの一部である解析対象の微分方程式の反応項を適宜設定することにより、全ての支配方程式の数値計算に普遍的に適用できる。そして、Time Discrete Techniqueを用いて支配方程式を時間的に離散化し、近似的に線形独立させた方程式系の計算を複数の計算機を用いて並列化し、計算処理を高速化した。また、計算終了時の数値計算結果を可視化できるようにした。

2. 数値計算エンジンの評価

(1) 葉形態形成モデルの構築

開発した数値計算エンジンの妥当性を評価するため、単葉の形態形成の数値シミュレーションを実施した。葉脈層、形態形成因子を伝播するシグナル層および葉肉層から構成される非線形連立偏微分方程式系の数理モデルを構築し、葉の成長を考慮した形態形成の数値計算を行った。

葉脈層:

$$\frac{\partial U_v}{\partial t} = D_{U_v} \nabla^2 U_v + f_v(U_v, V_v) \quad (1)$$

$$\frac{\partial V_v}{\partial t} = D_{V_v} \nabla^2 V_v + g_v(U_v, V_v) \quad (2)$$

$$f_v(U_v, V_v) = U_v (U_v - \alpha_v) (1 - U_v) / 0.005 \quad (3)$$

$$g_v(U_v, V_v) = U_v - V_v \quad (4)$$

$$\alpha_v = (V_v + 0.01) / 2.0 \quad (5)$$

シグナル層:

$$\frac{\partial U_s}{\partial t} = D_{U_s} \nabla^2 U_s + f_s(U_s, V_s) \quad (6)$$

$$\frac{\partial V_s}{\partial t} = D_{V_s} \nabla^2 V_s + g_s(U_s, V_s) \quad (7)$$

$$f_s(U_s, V_s) = U_s (U_s - \alpha_s) (1 - U_s) / 0.005 \quad (8)$$

$$g_s(U_s, V_s) = U_s - V_s \quad (9)$$

$$\alpha_s = (V_s + 0.01) / 2.0 \quad (10)$$

葉肉層(セルサイクル):

$$\frac{\partial U_e}{\partial t} = D_{U_e} \nabla^2 U_e + f_e(U_e, V_e) \quad (11)$$

$$\frac{\partial V_e}{\partial t} = D_{V_e} \nabla^2 V_e + g_e(U_e, V_e) \quad (12)$$

$$f_e(U_e, V_e) = -U_e^3 + U_e + V_e \quad (13)$$

$$g_e(U_e, V_e) = V_e \quad (14)$$

葉肉層(葉片形成):

$$\frac{\partial U_b}{\partial t} = D_{U_b} \nabla^2 U_b + f_b(U_b, V_b) \quad (15)$$

$$\frac{\partial V_b}{\partial t} = D_{V_b} \nabla^2 V_b + g_b(U_b, V_b) \quad (16)$$

$$f_b(U_b, V_b) = 0.005 \cdot U_e \cdot U_b \quad (17)$$

$$g_b(U_b, V_b) = 0.005 \cdot V_e \cdot V_b \quad (18)$$

ここで、添え字 v, s, e および b は、それぞれ、葉脈層、シグナル層、葉肉層のセルサイクルおよび葉肉層の葉片形成である。 D_{U_x} および D_{V_x} は伝播係数 ($x : v, s, e$ および b)、 ∇^2 は2次のラプラシアン(偏微分項)である。 $f_x(U_x, V_x)$ および $g_x(U_x, V_x)$ は非線形反応項であり、各層の任意点における非線形進行波およびセルサイクルを形成する。したがって、適用した支配方程式は、偏微分方程式ごとに反応項の次数が異なり、多様な非線形性を示す。特に、葉脈層およびシグナル層は、非線形進行波が伝播する数値シミュレーションであるため、高精度の数値計算法が要求される。

(2) 葉形態形成モデルの数値シミュレーション

開発した数値計算エンジンを用いて、葉脈層およびシグナル層における非線形進行波の伝播と葉肉層が形成される数値シミュレーションを実施し、数値計算法の妥当性を評価した(図1~4)。なお、初期値はいずれの層においても $U_x = V_x = 0$ 、境界条件は自由端とした。葉脈層には、シミュレーション開始時に、シグナル層には、400time step(繰り返し計算回数)ごとに摂動を与えた。また、葉肉層は葉脈からディリクレ型条件で葉肉形成ポテンシャルを受け入れた。葉脈は経時的に伸張し(図1 aおよびb)、シグナルは葉脈上を伝播した(図2 aおよびb)。セルサイクルは葉肉層を局所的に伝播し(図3 aおよびb)、単葉の形態を形成した(図4 aおよびb)。数値シミュレーションによって描画された単葉(図4)は、図5に示す竜胆(りんどう)科などにみられる単葉の形態とよく似た特徴を示した。支配方程式に含まれる伝播係数、非線形反応項の係数を調整すれば葉幅および葉長が変化し、セルサイクルと葉脈の形成を調整すれば葉片の形状に特異性を持たせることが可能である。

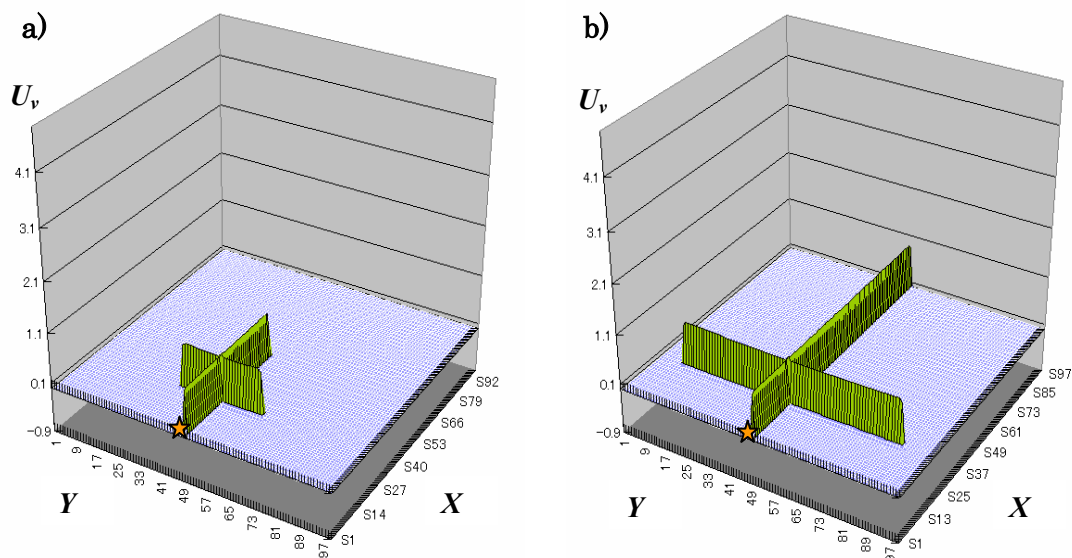


図1 葉脈層伸張の数値シミュレーション a) 400 time step b) 800 time step

★は葉脈の基部であり、数値計算における摂動点である。摂動をうけた数理モデルは、葉脈に想定した非線形進行波を経時的に伸張した。パラメータセットの調整により、より複雑な葉脈網を形成できる可能性がある。

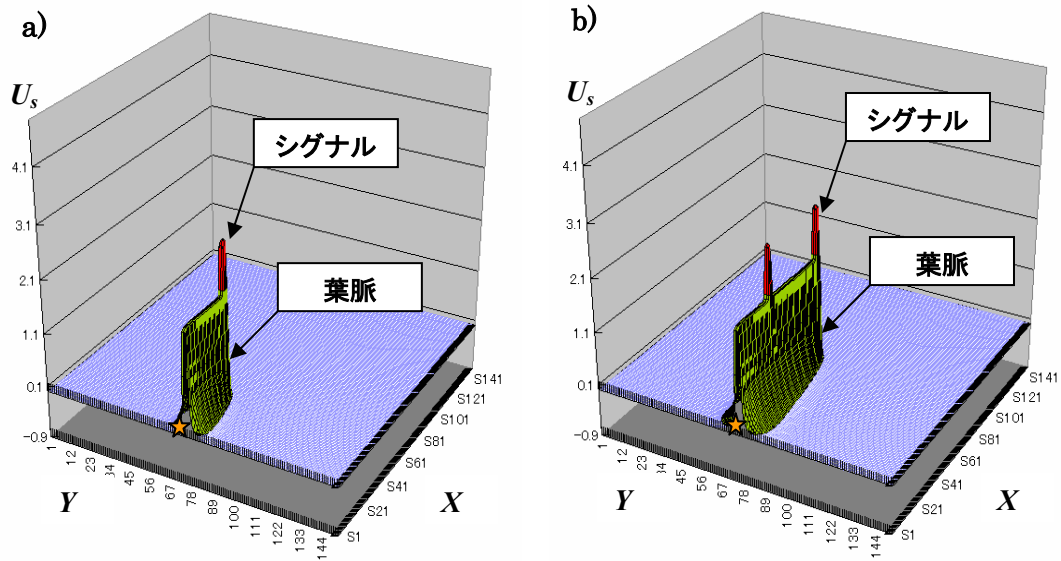


図2 シグナル層の数値シミュレーション a) 400 time step b) 800 time step

★は葉脈の基部であり、シグナルの発振(摂動)点である。任意の周期で発振したシグナル(非線形進行波)は葉脈上を伝播した。シグナルは発振点から進行し、葉脈の端点に達した後、消滅する。シグナル伝達は形態形成因子(モルフォゲン)の伝播機構を想定しており、セルサイクルの調律、葉脈の分枝、葉片形成などのトリガーとして機能する可能性がある。

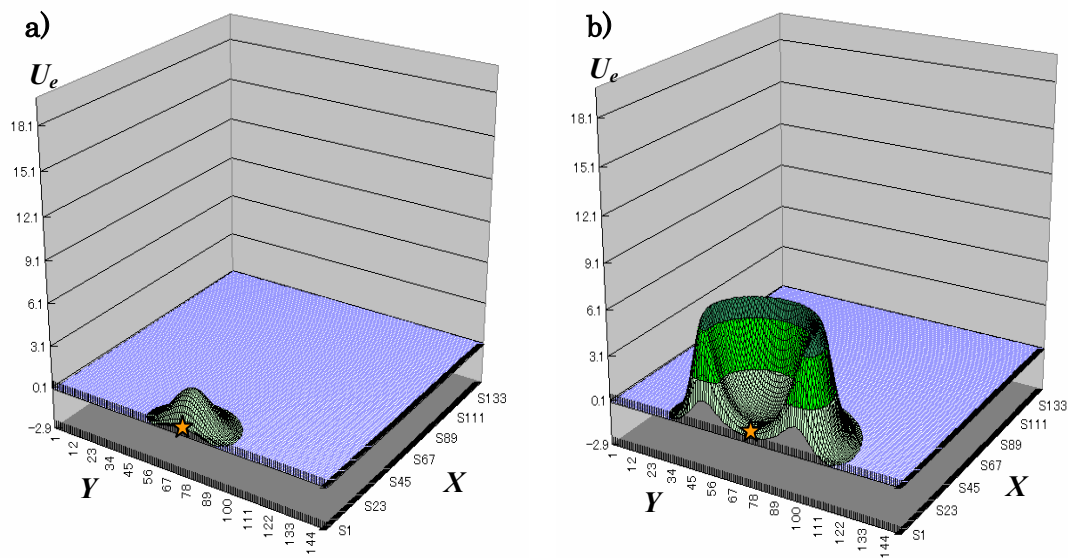


図3 葉肉層(セルサイクル)の数値シミュレーション a) 400 time step b) 800 time step

★は葉脈の基部であり、葉肉を形成する細胞のセルサイクルの自励発振点である。セルサイクルの波は基部から発振し、葉肉層を伝播して葉肉層の端点に達した後、消滅する。葉肉層の形成に、セルサイクルを考慮することで、葉肉層の伸張の個体差を表現でき、さらに、葉片の伸張と形成に特異性を持たせることが可能である。

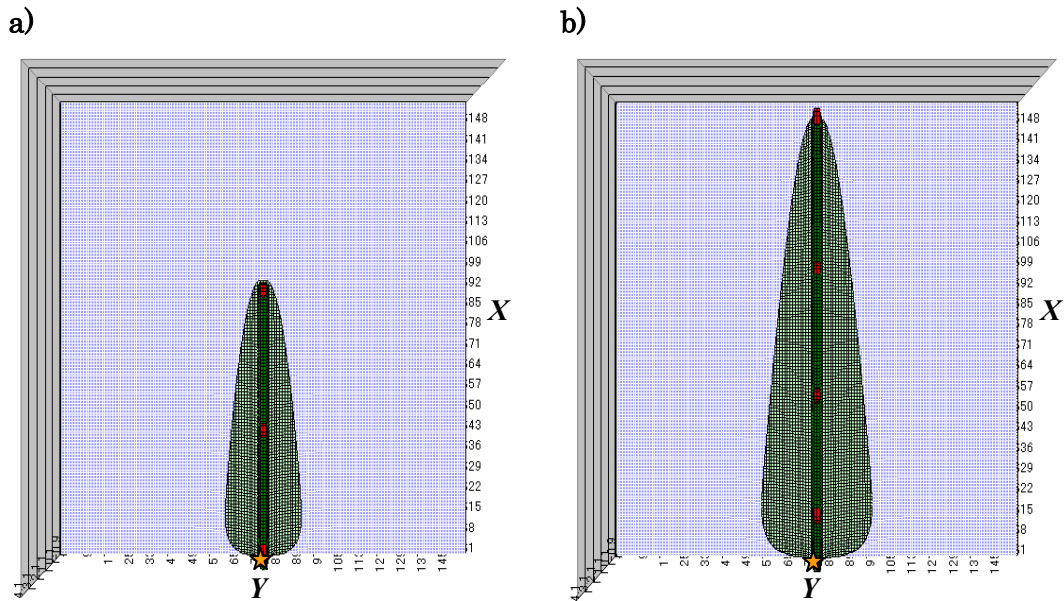


図4 葉肉層(葉片形成)の数値シミュレーション a) 400 time step b) 800 time step

★は葉脈の基部であり、葉脈、シグナルおよび葉肉のセルサイクルの発振点である。セルサイクルを考慮した葉肉層は、葉脈の伸張とともに基部から伸張し、単葉の葉片を形成した。葉肉層のセルサイクルと伝播係数にシグナル伝達を考慮すれば、葉片の形態形成に多様性を持たせることが期待される。

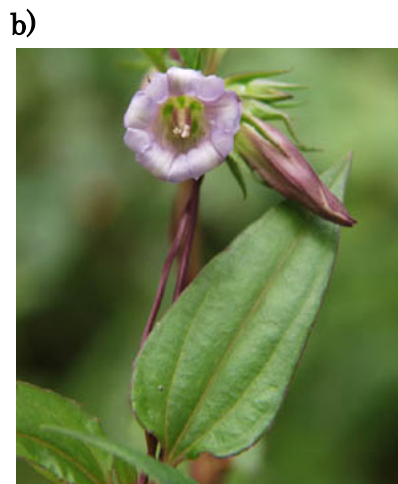
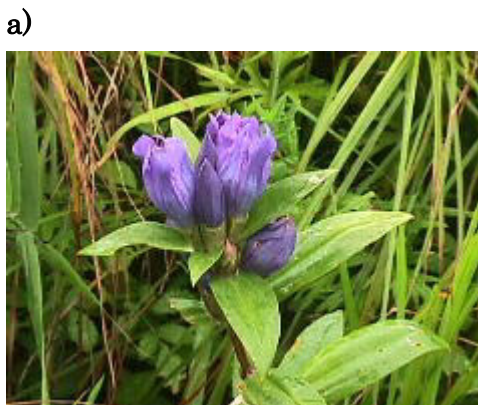


図5 竜胆(りんどう) a) 竜胆 <http://www.hana300.com/rindou.html>「季節の花 300」
b) 蔓竜胆 <http://aoki2.si.gunma-u.ac.jp/BotanicalGarden/HTMLs/turu-rindou.html>

まとめ :

農学および工学分野における機能数値解析支援ツールの数値計算エンジンと解析結果の可視化ツールを開発した。開発した数値計算エンジンを用いて、単葉の形態形成の数値シミュレーションを行い、数値解法の難度が高い非線形進行波の伝播を模倣することができた。計算精度が良好でない数値解法では、計算誤差の累積が非線形進行波の伝播を阻止するため、非線形進行波の伝播の数値シミュレーションが不可能である。また、開発した数値計算エンジンは、長い繰り返し計算を要する葉肉層

の形態形成の数値シミュレーションも行い、定量的および定性的に優れた数値解法であることが示唆された。今後は、さらなる数理モデルにおける数値計算エンジンの妥当性を検討し、任意の数理モデルをコンピュータのポインティング・デバイスにより設計できるグラフィカル・ユーザー・インターフェースを構築し、数値シミュレーションおよび解析結果の経時変化をアニメーションにより表現する可視化ツールを実装する予定である。

謝辞 :

本研究は、平成14年度農学研究院教育研究特別経費の資金を得て行ったものである。

論文 :

Hiroyuki Hamada, Masahiro Okamoto, *et al.* : Computers in Biology and Medicine, Submitting.

学会発表 :

Hiroyuki Hamada, Masahiro Okamoto, *et al.* : International Conference on Mathematical Biology 2003 (Scotland), 2003/08.