

5U-4

反応拡散系における ボリュームビジュアライゼーションを用いた 動的特性の可視化

早瀬 友美乃, 太田 隆夫, 藤枝 修子, 佐藤 浩史, 藤代 一成
お茶の水女子大学理学部

1 はじめに

計測やシミュレーションなどによって得られる二次元現象のパラメータ依存性や時間発展に伴う動的特性の可視化を考える。その手法の一つとして、パラメータ軸や時間軸を空間軸に変換し、三次元のボリュームデータを作成しボリュームビジュアライゼーション(VV)の問題に帰着させる手法が考えられる[1]。本稿ではこの手法を、さまざまな時空間パターンを形成する「反応拡散系」の現象である「Belousov-Zhabotinsky反応」、および「Bonhoffer-van der Pol方程式」の動的特性の可視化に適用し、その効果を確認する。可視化にはTITAN3000上のAVS4を用いる。

2 BZ反応

2.1 BZ反応の実験

均質な水溶液であるのも関わらず、リズムやパターンが自発的に作り出される化学反応がある。これは1951年にB.P.Belousovが発見し、A.M.Zhabotinskyがより明瞭な形で実験を確立したので、二人の名前をとって「Belousov-Zhabotinsky(BZ)反応」と呼ばれる[2, 3, 4, 5]。BZ反応は、反応液をシャーレの中で静置しておく、自然に縞模様が出現し、それが時間とともに広がっていくという反応である。

2.2 VVの適用

二次元の実験データを時間軸を、空間の第三軸として層状に積み重ねる。入力データは30秒間隔でリアルタイムに取り込んだBZ反応の16枚の画像を用いた。こ

の方法により、断面ごとに反応が時間変化しているようなボリュームデータ、すなわち「仮想シャーレ」を得ることができる。

それを使って表1に示すような三種類の方法で可視化を行なった。その一例を図1に示す。

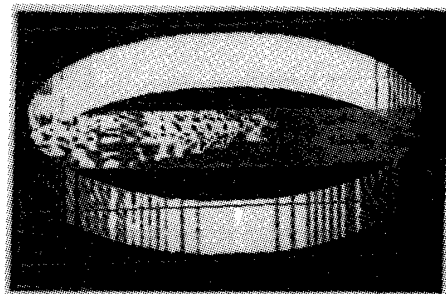


図1 arbitrary slicer

以上の結果から、時間軸を空間軸に直したVVによって、アニメーションでは解かりにくかった二次元現象の動的特性の一つ、反応速度が幾何学的に理解できるようになったと考えられる。

3 Bonhoffer-van der Pol(BvP)方程式

3.1 モデル方程式

反応拡散系のモデル方程式の一つとして、BvP方程式をとり上げる。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \nabla^2 u + f(u) - v \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \nabla^2 v + u \quad (2)$$

$$f(u) = \frac{1}{2} \left(\tanh \frac{u-a}{\delta} + \tanh \frac{a}{\delta} \right) - u \quad (3)$$

この方程式は開放系における興奮性を示す現象のメカニズムを可能な限り単純化したもので、さまざまな系を調べる際の基礎モデルになっている[6]。例えば、これはBZ反応を非常に単純化したモデルとしても有効であり、

Volume visualizing dynamical properties of reaction-diffusion systems

Hayase, Y., Ohta, T., Fujieda, S., Sato, H. and Fujishiro, I.
Ochanomizu University

表1: レンダリングの違いとその効果

	BZ 反応 (二次元)		BvP 方程式 (一次元)
目的	特定の時刻での濃度の様子を見る	反応速度など動的特性を見る	
データの種類	フィールドデータ	ポリウムデータ	
手法	height-field(濃度を高さ方向と色で表す)	仮想シャーレを任意断面で切り、そこでの濃度を色で示す	特定の濃度で等値面をはり、時間毎に色を付ける
効果	特定の時刻での濃度分布が同心円状に明瞭に見える	濃度の波が下から上へと伝わり、その速度が勾配として幾何学的に理解できる	波の伝わり方のパラメータ依存性がわかる

また $D_2 = 0$ とすると FitzHugh-Nagumo 方程式と呼ばれる神経膜興奮を単純化したモデルにもなる。

3.2 VV の適用

一次元のシミュレーションデータを使って、二つのパラメータ軸を空間軸に変換してポリウムデータを作成する。

これを表1の方法で可視化した。その例を図2に示す。

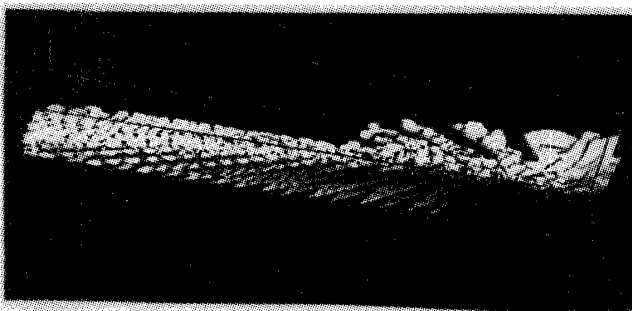


図2 isosurface

これにより個々のシミュレーションでは分からなかった一次元現象の二つのパラメータに対する依存性が幾何学的に分かるようになったと考えられる。

4 まとめと今後の課題

今回は反応拡散系のパターン形成の例として、BZ 反応と、BvP 方程式をとり上げ、パラメータ依存性や動的特性を VV によって可視化し、直感的に現象を解析する可視化環境を実現した。その手法のポイントは、時間軸やパラメータ軸を空間軸に変換することにより、特性を幾何的に理解できるようにすることにある。

今後の課題としては、以下のような四点があげられる。

1. BZ 反応に関しては、今回等濃度面がわかりにくかつ

たことを反省し、測定データの等値面を使った可視化においては以下の二点を注意したい。

- (a) 測定誤差を画像処理によって取り除く。
- (b) 等値面の値に区間をもたせる

2. BvP 方程式に関しては、相図のよりわかりやすい可視化の方法を考えていきたい。
3. 今回の可視化手法以外にも、モーシオンブラー等による動的特性の可視化手法 [7] の適応等を試みたい。
4. 今回は測定データとシミュレーションデータの個別の可視化を行なったが、今後は実験データと理論データとの比較や、逆に実験データから理論式へのフィードバックを行ない、理論と実験との相互の補完を図りたい。

参考文献

- [1] Kaufman, A.: "Introduction to volume visualization," in *Volume Visualization*, A. Kaufman (Ed.), IEEE Computer Science Press, Ch.1, 1991
- [2] 蔵本由紀 他: 「パターン形成」, 朝倉書店, 1991
- [3] 吉川研一: 「非線形科学」, 学会出版センター, 1992
- [4] 池本 勲: 「いろいろな振動反応」, 現代科学 243, 1991
- [5] Tyson, J.J.: "Target patterns in a realistic model of the Belousov-Zhabotinskii reaction," *J. Chem. Phys.* 73, 1980.
- [6] 太田隆夫: 「興奮性を示す反応拡散系のパターンダイナミクス」, 日本物理学学会誌, 48(10), 1993
- [7] 藤代一成, 池辺八洲彦, 新井 敦: 「モーシオンブラーによる二次元スカラーフィールドの動的特性の可視化」, 情報処理学会グラフィクスと CAD 研究会報 57-2, 1992
- [8] 早瀬友美乃, 藤代一成, 藤枝修子: 「2次元 Belousov-Zhabotinsky 反応の動的特性の可視化」, AVS カンファレンスプロシーディングス, 1993