The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	反応拡散方程式のシミュレーションに現れる不安定振動パターン
Author(s)	中口, 悦史
Citation	数理解析研究所講究録. 2007, 1597, p. 10-14
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/90763
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

数理解析研究所講究録
第 1597 巻 2008 年 10-14

反応拡散方程式のシミュレーションに現れる不安定振動パターン
(Oscillating patterns appearing in finite difference calculation of reaction-diffusion equations)

大阪大学・大学院情報科学研究科　中口 悦史　(Etsushi Nakaguchi)
(Graduate School of Information Sci&Tech, Osaka University)

1. はじめに

本稿は反応拡散方程式の定数定常解から Turing 分岐によって起こる非自明な定常解，いわゆる Turing パターン解を，陽的差分スキームによる数値シミュレーションで求めようとした時に起こりうる，数値的現象の解明を目的とする。Turing パターンなどのパターン形成過程は，Turing [2] や Kondo and Asai [3] を始め数多くの研究で見られるように，数理生物学や関連する分野で重要な位置を占めている。しかし，その具体的なパターンの研究の多くは，実験や数学理論よりもむしろ数値シミュレーションによって進められることが多いようである。

ここで一つの疑問が湧いてくる。シミュレーションによって得られたパターンは期待通りのものであろうか。確かに多くの数値計算関連の文献に見られるように，時間刻みを「十分小さく」取れば，数値的に安定なスキームによって十分に精度の良いパターン解が得られるはずである。では時間刻みをどれくらい小さく取れば「十分小さい」と言えるのだろうか。また「十分小さい」と言えない大きさの時間刻みを取ったとき，どのようなパターン解が現れるだろうか。

本稿ではこれらの点について，反応拡散方程式の陽的差分近似に関するスキームの安定性と Turing 不安定化の条件の両立性の観点から考察を行う。

2. 反応拡散方程式の定数定常解の TURING 不安定化条件

反応拡散方程式

$$\text{(E)}\qquad \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = f(u,v) + \Delta u, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = g(u,v) + D\Delta v \qquad \text{in } \Omega \times (0,\infty), \end{cases}$$

の定数定常解の Turing 不安定化について復習する [1, 4]。ここで未知関数 $u = u(x,t)$ を活性因子，$v = v(x,t)$ を抑制因子と想定している。領域 Ω は $\mathbb{R}^1$ の有界区間または $\mathbb{R}^2$ の有界凸領域とし，Dirichlet, Neumann あるいは周期境界条件を課す。係数 $D > 1$ は拡散係数比を表す定数である。関数 f と g は区分的に滑らかな関数とし，すべての $(u,v) \in \mathbb{R}^2$ について

$$\text{(2.1)}\quad 0 \le f(u,v) + au \le M, \quad 0 \le g(u,v) + bv \le N$$

を満たす正定数 a, b, M, N があると仮定する。このとき反応項は有限速度の生成項と線形減衰項から成ることを想定している。この仮定の下では方程式 (E) は不変集合

$$\mathfrak{R} = \left\{(u,v) \in \mathcal{C}(\overline{\Omega}) \times \mathcal{C}(\overline{\Omega});\ 0 \le u(x) \le M/a,\ 0 \le v(x) \le N/b \text{ for all } x \in \overline{\Omega}\right\}$$

を持つことが知られている。Turing パターン解はこの集合の中に含まれると考えてよい。

方程式 (E) は $f(u_e, v_e) = g(u_e, v_e) = 0$ を満たす組 (u_e, v_e) があるとき，定数定常解 $u(x,t) = u_e$, $v(x,t) = v_e$ を持つ。これが Turing 不安定化するための条件は，

A. 定常解 (u_e, v_e) が空間均一な擾乱に対して安定だが，
B. 空間不均一な擾乱に対しては不安定である，

であり，(u_e, v_e) のまわりの線形化方程式の固有多項式

$$p_\mu(\lambda) = (\lambda + \mu - \alpha)(\lambda + D\mu - \delta) - \beta\gamma$$

によって判定することができる。ここで

$$\alpha = f_u(u_e, v_e),\ \beta = f_v(u_e, v_e),\ \gamma = g_u(u_e, v_e),\ \delta = g_v(u_e, v_e)$$

とおいた。Routh-Hurwitz の安定判別法より，定数定常解 (u_e, v_e) が Turing 不安定化する条件，いわゆる Turing 条件は

(2.2) $T_1 = -\alpha - \delta > 0$ かつ $T_2 = \alpha\delta - \beta\gamma > 0$

(2.3) かつ $T_3 = D\alpha + \delta > 2\sqrt{DT_2}$

で与えられることが分かる。この条件の下で，

$$\mu_- < \mu < \mu_+, \qquad \text{ただし } \mu_\pm = \mu_0 \pm \frac{\sqrt{T_3^2 - 4DT_2}}{2D}, \quad \mu_0 = \frac{T_3}{2D},$$

の範囲にある固有値 μ に対応する $-\triangle$ の固有モードを含む解が (u_e, v_e) から分岐する。

3. 差分化された反応拡散方程式と安定性条件

方程式 (E) に対する陽的差分スキームは次のように書くことができる：

$$\text{(D)} \quad \begin{cases} \hat{u}(\cdot, \ell+1) = \hat{u}(\cdot, \ell) + \tau f(\hat{u}(\cdot, \ell), \hat{v}(\cdot, \ell)) + \tau\widehat{\triangle}\hat{u}(\cdot, \ell), \\ \hat{v}(\cdot, \ell+1) = \hat{v}(\cdot, \ell) + \tau g(\hat{u}(\cdot, \ell), \hat{v}(\cdot, \ell)) + \tau D\widehat{\triangle}\hat{v}(\cdot, \ell) \qquad \text{in } \Lambda \quad \text{for } \ell \in \mathbb{Z}^+. \end{cases}$$

ここで $\Lambda = \{j\}$ はメッシュ点の添字集合，$\mathbb{Z}^+ = \{0, 1, 2, \ldots\}$ は非負整数の全体，$\tau > 0$ は時間刻みパラメータ，$\widehat{\triangle}$ は境界条件を含む差分化ラプラス作用素を表す。未知関数 $\hat{u} = \hat{u}(j, \ell)$, $\hat{v} = \hat{v}(j, \ell)$ は $\Lambda \times \mathbb{Z}^+$ 上で定義され，$\#\Lambda$-次元ベクトルの列として表現される。また $-\widehat{\triangle}$ の固有値の上界を $\bar{\mu}$ と書く。空間メッシュサイズパラメータを $h > 0$ とすると $h \to 0$ のとき $\bar{\mu} = O(h^{-2})$ である。

仮定 (2.1) の下では陽的差分スキームに対する線形化安定性条件（Courant 条件）は

$$\text{(3.1)} \quad 0 < \tau < \bar{\tau} = \frac{2}{\max\{\bar{\mu} + a,\ D\bar{\mu} + b\}}$$

で与えられる。さらに

$$\text{(3.2)} \quad 0 < \tau < \tau_p = \frac{2}{\max\{\bar{\mu} + 2a,\ D\bar{\mu} + 2b\}} (< \bar{\tau})$$

のとき，方程式 (D) は不変集合

$$\hat{\mathfrak{R}} = \left\{(\hat{u}, \hat{v}) \in \mathbb{R}^{\#\Lambda} \times \mathbb{R}^{\#\Lambda};\ 0 \le \hat{u}(j) \le M/a,\ 0 \le \hat{v}(j) \le N/b \text{ for all } j \in \Lambda\right\}$$

を持つことが分かる。Turing パターン解はこの集合の中に含まれる。以下，条件 (3.2) を有界性条件と呼ぶ。

4. 差分方程式の定常解の TURING 条件

差分方程式 (D) も元の微分方程式 (E) と全く同じ定数定常解 $\hat{u}(j, \ell) = u_e$, $\hat{v}(j, \ell) = v_e$ を持つ。これが Turing 不安定化するための条件は，やはり

A'. 定常解 (u_e, v_e) が空間均一な擾乱に対して安定だが，
B'. 空間不均一な擾乱に対しては不安定である，

であり，(u_e, v_e) のまわりの線形化方程式の固有多項式

$$q_\mu(\chi) = (\chi - 1 + \tau\mu - \tau\alpha)(\chi - 1 + \tau D\mu - \tau\delta) - \tau^2\beta\gamma = \tau^2 p_\mu\left(\frac{\chi - 1}{\tau}\right)$$

によって判定できる。記号 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は前節と同じ。Schur-Cohn-Jury の安定判別法より，

A'. $\Leftrightarrow$ $q_0(+1) > 0$ かつ $q_0(-1) > 0$ かつ $2|q_0(0)|/|q_0''(0)| < 1$ が成立する；
B'. $\Leftrightarrow$ ある $0 < \mu \le \bar{\mu}$ に対して，
B'-i: $q_\mu(+1) < 0$ または B'-ii: $q_\mu(-1) < 0$ または
B'-iii: $2q_\mu(0)/q_\mu''(0) > 1$ のいずれかが成立する。

条件 (2.2) に対応する条件として A' より，

$$(4.1) \quad 0 < \tau^2 T_2 < \tau T_1 < \frac{\tau^2}{2} T_2 + 2$$

が導かれる。これは (2.2) かつ (2.3) かつ $0 < \tau < \frac{T_1 - \sqrt{\min\{0, T_1^2 - 4T_2\}}}{T_2}$ と同値である。

条件 B'-i については，前出の条件 B と同様で，(2.3) の下で $q_\mu(+1) = 0$ は実数解 $\mu_\pm$ を持ち，$\mu_- < \mu < \mu_+$ の範囲で $q_\mu(+1) < 0$ となるから，この範囲が $0 < \mu \le \bar{\mu}$ と共通部分を持てば良い。よって B'-i は

$$(4.2) \quad T_3 > 2\sqrt{DT_2} \quad \text{かつ} \quad \bar{\mu} > \mu_-$$

と同値である。$\mu_- < \mu < \mu_+$ かつ $\mu \le \bar{\mu}$ の範囲にある固有モードを含む解が分岐する。

条件 B'-ii が成立するには，μ の二次方程式 $q_\mu(-1) = 0$ が正の実数解を持つ必要があるが，$\tilde{T}_2 = T_2 - \frac{2}{\tau}T_1 + \frac{4}{\tau^2}$, $\tilde{T}_3 = T_3 + \frac{2}{\tau}(D+1)$ として，$\tilde{T}_3 > 2\sqrt{D\tilde{T}_2}$ のとき実数解

$$\tilde{\mu}_\pm = \tilde{\mu}_0 \pm \frac{\sqrt{\tilde{T}_3^2 - 4D\tilde{T}_2}}{2D}, \quad \tilde{\mu}_0 = \frac{\tilde{T}_3}{2D},$$

を持ち，$\tilde{\mu}_- < \mu < \tilde{\mu}_+$ の範囲で $q_\mu(-1) < 0$ となるから，この範囲が $0 < \mu \le \bar{\mu}$ と共通部分を持てば良い。よって B'-ii は

$$(4.3) \quad \tilde{T}_3 > 2\sqrt{D\tilde{T}_2} \quad \text{かつ} \quad \bar{\mu} > \tilde{\mu}_-$$

と同値である。$\tilde{\mu}_- < \mu < \tilde{\mu}_+$ かつ $\mu \le \bar{\mu}$ の範囲にある固有モードを含む解が分岐する。ここで $0 < \tilde{\mu}_- < \tilde{\mu}_0 < \tilde{\mu}_+$ であり，いずれも $\tau \to 0$ のとき $O(\tau^{-1})$ で ∞ へ向かう。

条件 B'-iii については，μ が十分大きいところでは二次関数 $q_\mu(0)$ は必ず $q_\mu''(0)/2 = 1$ を超えるので，$\bar{\mu}$ が十分大きければ必ず成立する。より詳しくは，(4.1) より $q_0(0) < 1$ だから，μ の二次方程式 $q_\mu(0) = 1$ は常に正と負の実数解を持ち，そのうち正値のものは

$$\tilde{\mu}_\# = \frac{\tau(D+1) + \tau^2 T_3 + \sqrt{(\tau(D+1) + \tau^2 T_3)^2 - 4\tau^2 D(\tau^2 T_2 - \tau T_1)}}{2\tau^2 D}$$

である。$\mu > \tilde{\mu}_\#$ の範囲で $q_\mu(0) > 1$ となるから，この範囲が $0 < \mu \le \bar{\mu}$ と共通部分を持てば良い。よって B'-iii は

$$(4.4) \quad \tilde{\mu}_\# < \bar{\mu} \quad \text{すなわち} \quad \frac{q_{\bar{\mu}}(0) - 1}{\tau^2} = D\bar{\mu}^2 - \left\{T_3 + \frac{D+1}{\tau}\right\}\bar{\mu} + T_2 - \frac{T_1}{\tau} > 0$$

と同値である。$\tilde{\mu}_\# < \mu \le \bar{\mu}$ のとき対応する固有モードを含む解が分岐する。

5. 差分方程式の線形化安定性条件と TURING 条件の両立性

前節で差分方程式 (D) の定数定常解 (u_e, v_e) からパターンが分岐する条件として，(4.1) かつ { (4.2) または (4.3) または (4.4) } を得た。実際に微分方程式の Turing 条件 (2.2) かつ (2.3) と，Courant 条件 (3.1) あるいは有界性条件 (3.2) の仮定の下で，これらの条件が成立しうるかどうかを本節で検討する。

まず条件 (4.1) は，$\bar{\mu}$ が $\bar{\mu} > \max\left\{\frac{a-b}{D-1}, \frac{T_1}{D}, \frac{2T_2}{DT_1}\right\}$ を満たすとき，(2.2) かつ (2.3) かつ (3.1) の下で成立する。条件 (4.2) は (2.3) かつ $\bar{\mu} > \mu_-$ と同一であるので，(3.1) の下で常に成り立つ。次に (4.3) は，新たに条件

(5.1) $\quad b + \delta < 0$

を付加すると，

$$(5.2) \quad \bar{\mu} > \tilde{\mu}_* = \max\left\{\frac{(b+\alpha)(b+\delta) - \beta\gamma}{-(D-1)(b+\delta)}, \frac{a-b}{D-1}, \frac{T_1}{D}, \frac{2T_2}{DT_1}, \mu_+\right\}$$

かつ

$$(5.3) \quad \tau > \tilde{\tau}_+ = \frac{(D+1)\bar{\mu} + T_1 - \sqrt{\{(D+1)\bar{\mu} + T_1\}^2 - 4(D\bar{\mu}^2 - T_3\bar{\mu} + T_2)}}{D\bar{\mu}^2 - T_3\bar{\mu} + T_2}$$

のときに成立する。$\bar{\tau} > \tilde{\tau}_+$ であるので (3.1) とも矛盾しない。一方 $\bar{\mu} > \tilde{\mu}_*$ のとき，条件 (4.4) を満たす τ の範囲は

$$\tau > \frac{(D+1)\bar{\mu} + T_1}{D\bar{\mu}^2 - T_3\bar{\mu} + T_2} > \bar{\tau}$$

となり，(3.1) と矛盾するので，(4.4) は成立しえない。

以上の考察をまとめると，(2.2), (2.3), (5.1), (5.2) の仮定の下で，次のような現象が観られることが分かる。

(a) $0 < \tau < \tau_p$，つまり τ が有界性条件 (3.2) を満たす場合，(4.1) かつ (4.2) が成立する。このときは (E) の場合と同様に $\mu_- < \mu < \mu_+$ の範囲の固有モードを含む解が分岐する。これは Turing 分岐のようである。分岐解は有界で，(D) の不変集合 $\hat{\mathfrak{A}}$ に含まれ，$\tau \to 0, h \to 0$ で (E) の Turing パターン解に収束すると期待される。

(b) $\tau_p < \tau < \tilde{\tau}_+$，つまり τ が Courant 条件 (3.1) を満たすが (3.2) も (5.3) も満たさない場合，やはり (4.1) かつ (4.2) が成立し，同様の分岐が起こる。ただし分岐解の有界性は不明である。

(c) $\tilde{\tau}_+ < \tau < \bar{\tau}$，つまり τ が (3.1) と (5.3) を満たす場合，(4.1) かつ (4.2) かつ (4.3) が成立する。このとき上述の分岐と同時に，$\bar{\mu}$ に対応する固有モードを含む解が分岐する。後者は周期陪化分岐，つまり数値的不安定化のように周期 2 で振動する解が分岐すると予想される。

(d) 条件 (4.4) は (3.1) の下では成立しない。

これらの現象が実際にどのようにして起こるかを，次節で数値例を用いて考察する。

6. 数値計算例の概要

この節では 2 次元正方形領域上の反応拡散方程式

$$(6.1) \quad \begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \max\{0, \min\{2u - 2v + 1, 4\}\} - u + \Delta u, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = \max\{0, \min\{3u - v - 3, 6\}\} - 2v + 21\Delta v \\ \qquad\qquad\qquad \text{for } 0 < x < 100,\ 0 < y < 100,\ t > 0, \end{cases}$$

の差分計算の結果を元に前節の考察に関する検討を行う。境界条件はNeumann型とする。方程式(6.1)はただ一つの定数定常解 $(u_e, v_e) = (3, 2)$ を持ち，

$$a = 1, \quad b = 2, \quad \alpha = 1, \quad \beta = -2, \quad \gamma = 3, \quad \delta = -3,$$

$$T_1 = 2 > 0, \quad T_2 = 3 > 0, \quad T_3 = 18 > 6\sqrt{7} = 2\sqrt{DT_2}$$

より，(u_e, v_e) はTuring条件(2.2), (2.3)を満たす。さらに $b + \delta = -1 < 0$ より(5.1)も成立する。また式(5.2)の $\tilde{\mu}_* = \frac{3+\sqrt{2}}{7} < 1$ である。

この方程式(6.1)に対して陽的差分スキームを適用する。空間メッシュサイズ $h = 1$ とすると(5.2)が成立する。この状況で時間刻み τ を変化させて数値計算を行った。結果は紙面の都合上割愛するが，以下のような数値的現象が観られた。

(a) $0 < \tau < \tau_p = \frac{1}{86} \fallingdotseq 0.0116279$ のとき，定常パターンへ収束する傾向が観られた。

(b) $\tau_p < \tau < \tilde{\tau}_+ = \frac{178-\sqrt{26872}}{1203} \fallingdotseq 0.0116984$ のとき，過渡的にかつ局所的に周期2で振動するパターンが観られることもあったが，それらはやがて落ち着き，定常パターンへ収束する傾向が観られた。

(c) $\tilde{\tau}_+ < \tau < \bar{\tau} = \frac{1}{85} \fallingdotseq 0.0117647$ のとき，初期パターンに依って，周期2で振動を続けるパターン解や，定常パターンへ収束する傾向を示す解が観られた。この τ の範囲では振動パターンと定常パターンの競合が起こっていると思われる。

(d) $\tau > \bar{\tau}$ のとき，周期2で振動を続けるパターン解が観られ，収束する傾向は見られなかった。数値的不安定化現象が現れていると思われる。

いずれの場合も前節の考察と符合することが分かる。

7. おわりに

本稿で見たように非線形問題の解析には数値計算においてもやはり線形化解析だけでは通用しない。例えば本稿で扱ったような解の有界性あるいは有界な不変集合の存在が知られる場合は，それらを継承する計算スキームの適用が重要なようである。なお，本稿では生成速度有限な反応項を仮定したが，生成速度が非有界でも有界な不変集合を持つ場合は，同様の議論を展開できると考えられる。

また一方で，本稿の議論は計算スキームに大いに依存することにも注意が必要である。陰的スキーム，例えば後退差分法やCrank-Nicolson法などの場合には，詳細な解析は省略するだが，周期陪化分岐は起こらず，Turing分岐によるパターンのみが生起する。

差分解の詳細な分岐解析については別の機会に改めて議論する予定である。

References

[1] J. D. Murray, *Mathematical Biology vol.I&II*, 3rd ed., Springer, New York, 2002–2003.

[2] A. M. Turing, On the chemical basis of morphogenesis (1953), *Bull. Math. Biol.* **52** (1990), 153–197.

[3] S. Kondo and R. Asai, A reaction-diffusion wave on the skin of the marine angelfish *Pomacanthus*, *Nature* **376** (1995), 765–768.

[4] H. Shoji and Y. Iwasa, "Labyrinthine versus straight-striped patterns generated by two-dimensional Turing systems", J.Theor.Biol. vol.237, 2005, pp.104–116.