H25 計算機実験 2

奈良女子大学・理学部・情報科学科
担当 高須

2013 年 4 月 26 日（金）

1　2 種系の反応拡散方程式

2 種系の反応拡散方程式を考える。2 種系とは、2 種類の粒子（化学物質など）がある規則に従って反応しつつ、それぞれの濃度が相互依存して変化する系を指す。まず最初に 1 次元空間上の拡散に注目する。

物質 1 の濃度を $u(t,x)$、物質 2 の濃度を $v(t,x)$ とすると、1 次元 2 種系の反応拡散方程式は一般的に以下の連立偏微分方程式で表される。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,v) \tag{1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u,v) \tag{2}$$

定数 D_u, D_v はそれぞれ物質 1 と 2 の拡散係数、関数 $f(u,v), g(u,v)$ は両物質の反応による濃度変化を表す反応項である。

2　空間一様解

この節では空間的に一様な解に注目する。物質濃度は空間位置 x とは無関係であるから $u(t,x) = U(t), v(t,x) = V(t)$ と表現できる。したがって、上式の拡散項（x の 2 回偏微分）はゼロとなり、上式は次の連立常微分方程式に帰着する。

$$\frac{dU}{dt} = f(U,V) \tag{3}$$

$$\frac{dV}{dt} = g(U,V) \tag{4}$$

関数 $f(u,v), g(u,v)$ を具体的に与えれば、初期条件 $U(0), V(0)$ の下、空間一様解 U, V の振る舞い（時間変化）が決まる。

具体例として関数 $f(u,v), g(u,v)$ を以下の関数で与える。Schnakenberg kinetics と呼ばれる化学反応である。

$$f(u,v) = k_1 - k_2 u + k_3 u^2 v \tag{5}$$

$$g(u,v) = k_4 - k_3 u^2 v \tag{6}$$

ここでパラメータ k_1, k_2, k_3, k_4 は正の定数である。

式 (5) と (6) を用いた系を適当なパラメータ値のもとで数値的に解いた結果を図 1 に示す。

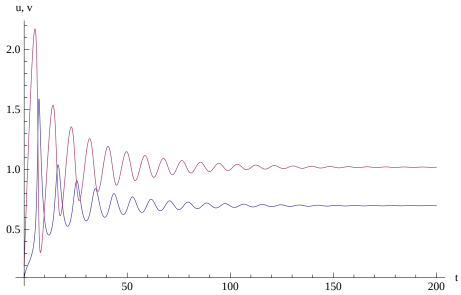

Figure 1: 空間一様解 $u(t), v(t)$ のダイナミクス。$k_1 = 0.2, k_2 = 1, k_3 = 1, k_4 = 0.5$。初期値 $u(0) = 0.1, v(0) = 0.2$

3 拡散の効果

上節では、空間的に一様な解（拡散項がゼロ）の振る舞いを見た。本節では、拡散を考慮したモデルに注目する。陽的差分法により、一次元空間 $0 \leq x \leq 1$ を空間刻み Δx、時間を時間刻み Δt で差分化する。空間位置 $x = \Delta(i-1)$（$i = 1, 2, \cdots, SIZE$）であることを用いると、

$$u_i' = u_i + C_u \left(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}\right) + f(u_i, v_i)\Delta t \tag{7}$$

$$v_i' = v_i + C_v \left(v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}\right) + g(u_i, v_i)\Delta t \tag{8}$$

を得る。ただし、$'$ は時刻 $t + \Delta t$ の状態を表し、$C_u = D_u \Delta t/(\Delta x)^2$、$C_v = D_v \Delta t/(\Delta x)^2$ である。また、境界条件として反射壁を設定し、常に

$$u_0 = u_1, u_{SIZE+1} = u_{SIZE}, v_0 = v_1, v_{SIZE+1} = v_{SIZE}$$

としておく（$i = 0, SIZE+1$ は境界条件用のダミーの要素であることを思い出せ）。

1 次元上の動態例を図 2 に示す。適当なパラメータ（拡散不安定性が起こる条件を満たすパラーメータ）を用いると、空間的に不均一なパターンが生じることがわかる。

以下の課題に取り組むこと。

- 2 種系 1 次元反応拡散方程式を陽的差分法で数値的に解くプログラムを完成させよ。反応項としては Schnakenberg kinetics を用いること。
- 計算結果を実験中に指示した様式にしたがってファイルに書き出し、Mathematica を用いて視覚化せよ。パラメータとしては図 2 の値を用いること。
- 空間領域の大きさを変化させるとどうなるか調べよ（たとえば領域を大きくする、小さくするなど）。また、パラメータ D_u, D_v と解の振る舞いについて調べよ。

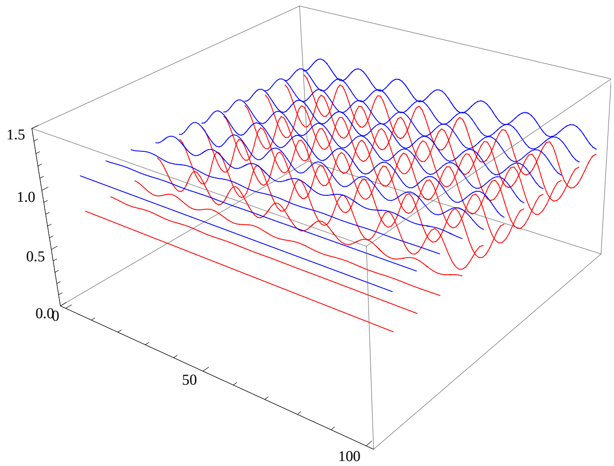

Figure 2: $u(t), v(t)$ のダイナミクス。青が $u(t,x)$、赤が $v(t,x)$。空間領域は $0 \leq x \leq 100$。$k_1 = 0.2, k_2 = 1, k_3 = 1, k_4 = 0.5, D_u = 1.0, D_v = 14.0$。初期条件は左端に少量の密度を導入。