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 5 月 10 日（金）

1　2 次元空間上の 2 種系反応拡散方程式

2 次元空間上の 2 種系反応拡散方程式を考える。前回取り組んだ 1 次元空間を 2 次元空間へと拡張する。

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

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

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

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　数値計算

2 次元空間の反応拡散方程式を陽的差分法により計算する。空間 $0 \le x \le L_1, 0 \le y \le L_2$ を空間刻み $\Delta x = \Delta y$、時間を時間刻み Δt で差分化する。空間領域が正方形でない場合 $L_1 \ne L_2$ にも対応できるプログラムを作成する。空間位置 $x = \Delta x(i-1), y = \Delta x(j-1)$（$i = 1,2,\cdots,SIZE_1, j = 1,2,\cdots,SIZE_2$）であることを用いると、以下の差分式

$$u'_{i,j} = u_{i,j} + C_u\left(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}\right) + f(u_{i,j}, v_{i,j})\Delta t \tag{3}$$

$$v'_{i,j} = v_{i,j} + C_v\left(v_{i-1,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j-1} + v_{i,j+1} - 4v_{i,j}\right) + g(u_{i,j}, v_{i,j})\Delta t \tag{4}$$

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

$$u_{0,j} = u_{1,j}, u_{SIZE_1+1,j} = u_{SIZE_1,j}, v_{0,j} = v_{1,j}, v_{SIZE_1+1,j} = v_{SIZE_1,j}$$
$$u_{i,0} = u_{i,1}, u_{i,SIZE_2+1} = u_{i,SIZE_2}, v_{i,0} = v_{i,1}, v_{i,SIZE_2+1} = v_{i,SIZE_2}$$

としておく（$i = 1,2,\cdots,SIZE_1, j = 1,2,\cdots,SIZE_2$）。

3 Turing パターン

反応項を持たない場合（物質濃度が増えも減りもしない場合）、反応拡散方程式は次式で与えられる（下記式は 1 次元拡散の場合）。

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

拡散項は濃度の 2 回偏微分で与えられる。つまり、空間分布を見たとき、上に凸（2 回微分が負）である場所では拡散項は負、下に凸（2 回微分が正）である場所では拡散項は正、となる。これは上に凸の場所では物質濃度が時間とともに減少し（時間微分が負である）、下に凸の場所では物質濃度が増加する（時間微分が正）。つまり、拡散は、不均一な空間分布（いわゆるでこぼこ）を平らに均す働きがある。直感的にも明らかであろう。

しかし、適当な反応項の下で 2 種系の反応拡散方程式は、拡散そのものに起因する空間不均一なパターンを生じることがある。いわゆる Turing パターン（拡散不安定性）と呼ばれるものである。本来空間的なでこぼこをならす働きがある拡散によって空間的に不均一なパターンが生じうることを示した A. Turing にちなんで、こうした空間パターンを Turing パターンと呼ぶ。

拡散不安定性が生じるための条件は解析的に導出可能であるが、本実験では詳細は省略する。前回は 1 次元空間上の Turing パターンを生成したが、今回は 2 次元空間上で Turing パターンの生成を行う。

4 レポート問題 1

- 具体な反応項として前回同様、Schnakenberg kinetics を考える。関数 $f(u,v), g(u,v)$ が以下の関数で与えられる場合である。

$$f(u,v) = k_1 - k_2 u + k_3 u^2 v \tag{5}$$
$$g(u,v) = k_4 - k_3 u^2 v \tag{6}$$

ここで k_1, k_2, k_3, k_4 は適当な正の定数である。

2 次元空間上の Schnakenberg 反応項＋拡散を、パラメータ値 $k_1 = 0.2, k_2 = 1.0, k_3 = 1.0, k_4 = 0.5$、$D_u = 1.0, D_v = 14.0$ の下で数値的に解け。空間領域は $0 \le x \le 200, 0 \le y \le 100$ の長方形領域、境界条件は反射壁とする。初期分布 $u(0,x,y), v(0,x,y)$ は適当で良い（空間一様解をわずかに摂動した初期分布を与えること）。

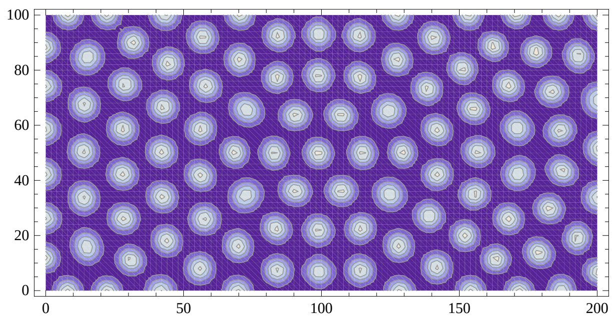

Figure 1: 十分時間が経過した後の $u(t,x,y)$ の空間分布。Schnakenberg kinetics + 拡散

5 レポート問題 2

Schnakenberg kinetcs 以外の反応項でも Turing パターンが生じることが知られている。たとえば、以下の反応項を考える。

$$f(u,v) = u - u^3 - v \tag{7}$$
$$g(u,v) = \epsilon(u - a_1 v - a_0) \tag{8}$$

ここで ϵ, a_0, a_1 は適当な定数である。ここでは、$a_0 = -0.1, a_1 = 2.0, \epsilon = 0.05$ とする。

- この反応項の振る舞い（空間一様解 u, v の時間変化）を調べよ。Runge Kutta 方をプログラムして数値的に解いたものを視覚化しても良いし、*Mathematica* などを用いて解いても良い。
- 2 次元空間上拡散を適当な拡散係数（ただし、$D_u < D_v$）を用いて数値的に解け。空間領域 $0 \leq x \leq 200, 0 \leq y \leq 100$ の長方形領域、境界条件は反射壁とする。

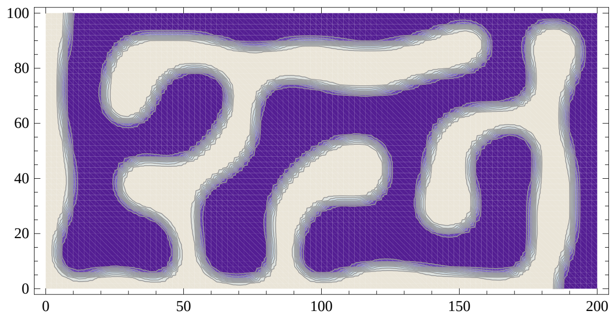

Figure 2: 十分時間が経過した後の $u(t,x,y)$ の空間分布。式 (7), (8) を用いた反応項 + 拡散