

H27 計算機実験 2

奈良女子大学・理学部・情報科学科
担当 高須

2015年5月8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。

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。

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

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

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。

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

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

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。

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

$$g(u, v) = k_4 - k_3 u^2 v \quad (6)$$

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。

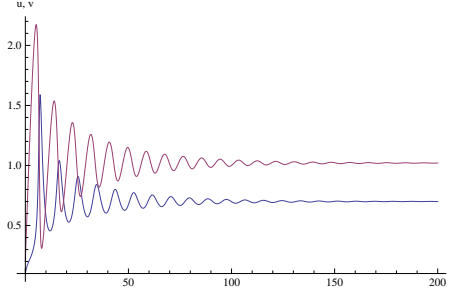


Figure 1: 空間一様解 $u(t), v(t)$ のダイナミクス。 $k_1 = 0.2, k_2 = 1, k_3 = 1, k_4 = 0.5$ 。初期値 $u(0) = 0.1, v(0) = 0.2$

3 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 $0 \leq x \leq L_1, 0 \leq y \leq L_2$ 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 $L_1 \neq L_2$ にも対応できるプログラムを作成する。空間位置 $x = \Delta x(i-1), y = \Delta x(j-1)$ ($i = 1, 2, \dots, SIZE_1, j = 1, 2, \dots, SIZE_2$) であることを用いると、以下の差分式

$$u'_{i,j} = u_{i,j} + C_u (u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}) + f(u_{i,j}, v_{i,j})\Delta t \quad (7)$$

$$v'_{i,j} = v_{i,j} + C_v (v_{i-1,j} + v_{i+1,j} + v_{i,j-1} + v_{i,j+1} - 4v_{i,j}) + g(u_{i,j}, v_{i,j})\Delta t \quad (8)$$

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

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_{1,j}, u_{SIZE_1+1,j} = u_{SIZE_1,j}, v_{0,j} = v_{1,j}, v_{SIZE_1+1,j} = v_{SIZE_1,j} \\ u_{i,0} &= u_{i,1}, u_{i,SIZE_2+1} = u_{i,SIZE_2}, v_{i,0} = v_{i,1}, v_{i,SIZE_2+1} = v_{i,SIZE_2} \end{aligned}$$

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

4 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。

5 レポート問題1

- 具体的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。

$$f(u, v) = k_1 - k_2 u + k_3 u^2 v \quad (9)$$

$$g(u, v) = k_4 - k_3 u^2 v \quad (10)$$

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 $0 \leq x \leq 200, 0 \leq y \leq 100$ の長方形領域、境界条件は反射壁とする。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）。

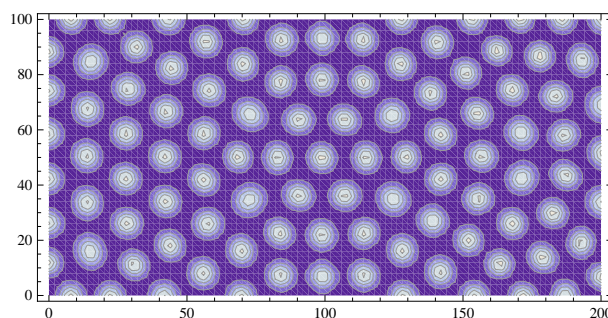


Figure 2: 十分時間が経過した後の $u(t, x, y)$ の空間分布。Schnakenberg kinetics + 拡散

6 レポート問題2

Schnakenberg kinetics 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。

$$f(u, v) = u - u^3 - v \quad (11)$$

$$g(u, v) = \epsilon(u - a_1 v - a_0) \quad (12)$$

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。

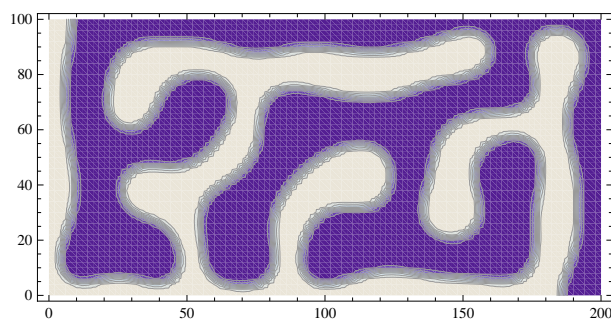


Figure 3: 十分時間が経過した後の $u(t, x, y)$ の空間分布。式 (7), (8) を用いた反応項 + 拡散