

Gray-Scott 型反応拡散系の定常問題について

早稲田大学・基幹理工学部 佐藤 典弘 (Norihito Sato)
School of Fundamental Science and Technology,
Waseda University

1 序

本講演では、開放系の自己触媒化学反応モデルとして提唱されている次の反応拡散系

$$(P) \quad \begin{cases} u_t = \Delta u - uv^p + \lambda(1 - u) & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ \tau v_t = \gamma \Delta v + uv^p - v^q & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x), v(x, 0) = v_0(x) & \text{in } \Omega \end{cases}$$

を考察する. ここで, Ω は $\mathbb{R}^N$ ($N \geq 1$) 内の滑らかな境界 $\partial\Omega$ に囲まれた有界領域とし, パラメータ λ, γ, τ と指数 p, q は正定数とする. また, ν は境界 $\partial\Omega$ 上の外向き単位法線方向ベクトルであり, u_0 と v_0 は Ω 上の非負値関数とする. この方程式の解 $u = u(x, t)$, $v = v(x, t)$ は, それぞれ化学物質 U, V の濃度分布の推移を表わし, 対応する化学反応は下記の通りである.

$$\begin{cases} U + pV \rightarrow (p+1)V, \\ V \rightarrow qP. \end{cases}$$

このモデルは, $p = 2$ かつ $q = 1$ の場合に相当する Gray-Scott モデル [1] を一般化した形で, Hale-Peletier-Troy[2] や Leach-Wei[5] により提案された. Gray-Scott 反応拡散系では, Pearson の数値実験 [9] に代表されるように, 一見単純なシステムでも複雑な時空間ダイナミクスが現れる. 例えば, 定常パルス解が時間発展するに従い自己複製的に分裂する現象や進行パルス解の対衝突・消滅現象などが知られている. それらの遷移ダイナミクスを理解する際に, 定常解構造の解析が重要であることが数値実験を援用した理論で確かめられている.

さて, 方程式 (P) に関する定常問題は, 以下の楕円型方程式系として記述される.

$$(SP) \quad \begin{cases} \Delta u - uv^p + \lambda(1 - u) = 0 & \text{in } \Omega, \\ \gamma \Delta v + uv^p - v^q = 0 & \text{in } \Omega, \\ u, v \geq 0 & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = \frac{\partial v}{\partial \nu} = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases}$$

この定常問題の解は, 大まかに分けると, 図 1-2 のように定数解と非定数解に分類される. 化学現象との対応関係を述べると, 定数解は濃度分布が一樣なので場所ごとの色の違いは現れない. しかし, 非定数解は濃度分布が非一樣なため場所により色の違いが生じ, その結果としてパターン (模様) が形成される.

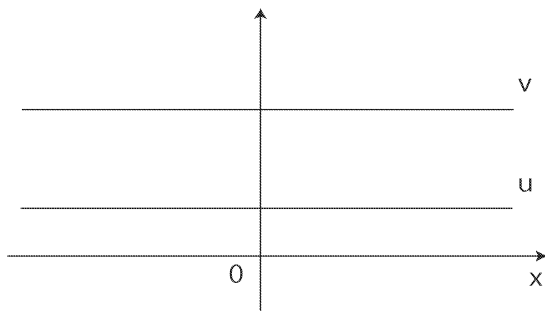


図 1: 定数解

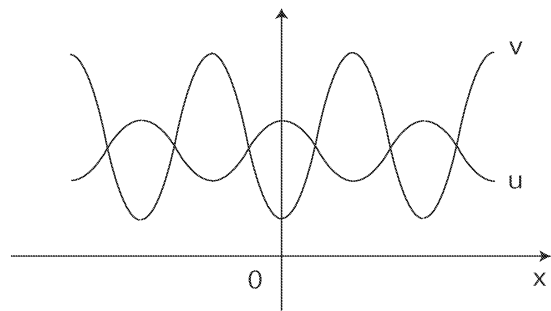


図 2: 非定数解

ここで、定常問題 (SP) の定数解は、代数方程式の問題に帰着でき次が成立する。すなわち、 $p < q$ ならば、 $(u, v) = (1, 0)$, (u_*, v_*) の 2 つの定常解が存在する。一方、 $p = q$ ならば、定数解は $(u, v) = (1, 0)$ のみである。また、 $p > q$ ならば、ある正定数 $\lambda_* = \lambda_*(p, q)$ が存在して、 $\lambda < \lambda_*$ のときには定数解は $(u, v) = (1, 0)$ だけであり、 $\lambda = \lambda_*$ のとき定数解は $(u, v) = (1, 0)$, (u_0, v_0) の 2 つである。更に、 $\lambda > \lambda_*$ となると、定数解は $(u, v) = (1, 0)$, (u_1, v_1) , (u_2, v_2) の 3 つになる。ただし、 (u_*, v_*) と $(u_i, v_i) (i = 0, 1, 2)$ は、それぞれ λ, p, q から定まる正值定数解である。

したがって、定常問題 (SP) に関して、数学的にも化学現象としても興味の対象となるのは下記の問題である。

(i) 非定数解の存在・非存在問題 (ii) 非定数解の個数・形状・安定性の問題

これらの問題について、現在まで得られた成果について次節以降で解説する。

2 主結果

定常問題 (SP) に対しては、 $p = 2, q = 1$ の場合には分岐理論、写像度理論、特異摂動法等を用いて多くの解析がなされている。([3, 7, 10, 11, 14] 参照。) しかし、一般の p と q に対しては、ほとんど結果が知られていないのが現状である。本講演では、空間次元 $N \geq 1$ とし、指数 p と q の大小関係に注意して議論を進める。

2.1 $p \leq q$ の場合

最初の定理は、 $p \leq q$ の場合の非定数解の非存在結果に関するものである。

定理 1 ([13]). $1 \leq p \leq q$ とする。そのとき、ある正定数 $\bar{\lambda} = \bar{\lambda}(p, q)$ と $\bar{\gamma} = \bar{\gamma}(\lambda, p, q, \Omega, N)$ が存在して、 $\lambda \geq \bar{\lambda}$ あるいは $\gamma > \bar{\gamma}$ が成り立てば (SP) の非定数解は存在しない。

注意 2. $p = q$ のときは、任意の $\lambda, \gamma, p, q, N, \Omega$ に対して (SP) の非定数解は存在しないことが示せる。

定理 1 の証明には、以下の解のアプリオリ評価を必要とする。

補題 3 ([13]). $1 \leq p \leq q$ とし, (u, v) を $(1, 0)$ 以外の (SP) の解とする. そのとき次の不等式が成り立つ;

$$\frac{\lambda}{\lambda+1} \leq u \leq 1, \quad \left(\frac{\lambda}{\lambda+1} \right)^{\frac{1}{q-p}} \leq v \leq 1 \quad \text{in } \bar{\Omega}.$$

定理 1 の証明の概略.

$$\bar{u} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u dx, \quad \bar{v} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} v dx$$

とおく. (SP) の第 1 式と第 2 式にそれぞれ $u - \bar{u}$ と $v - \bar{v}$ をかけて Ω 上で積分すると, 補題 3 と Cauchy の不等式から

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx \leq (\epsilon_1 - \lambda) \int_{\Omega} (u - \bar{u})^2 dx + \frac{p}{4\epsilon_1} \int_{\Omega} (v - \bar{v})^2 dx \quad (1)$$

と

$$\gamma \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx \leq \epsilon_2 \int_{\Omega} (u - \bar{u})^2 dx + \left\{ \frac{1}{4\epsilon_2} + p - q \left(\frac{\lambda}{\lambda+1} \right)^{\frac{q-1}{q-p}} \right\} \int_{\Omega} (v - \bar{v})^2 dx \quad (2)$$

を導くことができる. ここで ϵ_1 と ϵ_2 は任意に正定数として取ることができる.

ここで

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = \frac{\lambda}{2}$$

とおき, (1)+(2) から

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx + \gamma \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx \leq \tilde{D} \int_{\Omega} (v - \bar{v})^2 dx \quad (3)$$

が成立する. ただし,

$$\tilde{D} = \frac{p+1}{2\lambda} + p - q \left(\frac{\lambda}{\lambda+1} \right)^{\frac{q-1}{q-p}}. \quad (4)$$

ここで, λ が十分大きいときには, (4) の右辺は 0 以下になることに注意する.

(3) にポアンカレの不等式を適用すれば,

$$\gamma \mu_1 \int_{\Omega} (v - \bar{v})^2 dx \leq \tilde{D} \int_{\Omega} (v - \bar{v})^2 dx. \quad (5)$$

したがって, $\gamma \mu_1 > \tilde{D}$ ならば, (3) と (5) より

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx = \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx = 0.$$

ゆえに, u と v は定数関数でなければならない. □

2.2 $p > q$ の場合

次に, $p > q$ の場合の解構造について調べる. そのとき, 以下の非存在結果が成り立つ.

定理 4 ([13]). $p > q \geq 1$ とする. そのとき, ある正定数 $C = C(p, q)$ が存在して, $\lambda \leq C$ かつ $\gamma \geq C^{-1}$ ならば (SP) の非定数解は存在しない.

注意 5. この定理は, [10, Theorem 3.1(i)] を改良したものである. $q = 1$ ならば定数 $C = C(p)$ は, p に関して単調に減少し $\lim_{p \rightarrow +1} C(p) = +\infty$ かつ $\lim_{p \rightarrow +\infty} C(p) = 1$ が成立するように取ることができる. (図 3 参照.)

定理 4 の証明の概略. $q = 1$ で $\lambda\gamma \leq 1$ の場合のみ証明する. その他の場合は, [12] や [13] を参照されたい. このとき, (u, v) を (SP) の解とすると, $w := u + \gamma v - 1$ は

$$\Delta w - \lambda w = (1 - \lambda\gamma)v \geq 0 \quad \text{in } \Omega, \quad \frac{\partial w}{\partial \nu} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega$$

を満たす. したがって, 線形楕円型方程式の最大値原理 [4, Proposition 2.2] から $\max_{x \in \bar{\Omega}} w(x) \leq 0$, すなわち

$$u + \gamma v - 1 \leq 0 \quad \text{in } \bar{\Omega}$$

が成立する. この不等式と (SP) の第 2 式より

$$\gamma \Delta v = v(1 - uv^{p-1}) \geq v(\gamma v^p - v^{p-1} + 1) \quad \text{in } \bar{\Omega} \quad (6)$$

となる. ここで, γ が次の不等式

$$\gamma \geq C^{-1} \quad \text{with} \quad C = \frac{p^{\frac{p}{p-1}}}{p-1}$$

を満たせば, (6) の右辺は非負になることに注意する. そのとき, (6) に v をかけて Ω 上で積分すると,

$$\gamma \int_{\Omega} |\nabla v|^2 dx \leq 0.$$

ゆえに, v は定数関数でなければならない. また, (SP) の第 1 式から u も定数関数となる. □

γ が十分大きい場合には, 下記の非存在定理が成り立つ.

定理 6 ([13]). $p > q \geq 1$ とする. そのとき, ある正定数 $\tilde{\gamma} = \tilde{\gamma}(\lambda, p, q, \Omega, N)$ が存在して, $\gamma > \tilde{\gamma}$ ならば (SP) の非定数解は存在しない.

証明には, 以下の解のアプリオリ評価を必要とする.

補題 7 ([13]). $p > q \geq 1$ とし, (u, v) を $(u, v) = (1, 0)$ 以外の (SP) の解とする. そのとき, 正定数 $C_1 = C_1(\lambda, \gamma, p, q)$ と $C_2 = C_2(\lambda, \gamma, p, q, N, \Omega)$ が存在して

$$C_1 \leq u \leq 1, \quad C_2 \leq v \leq \lambda^{\frac{1}{q}} + \frac{1}{\gamma} \quad \text{in } \bar{\Omega}$$

が成立する.

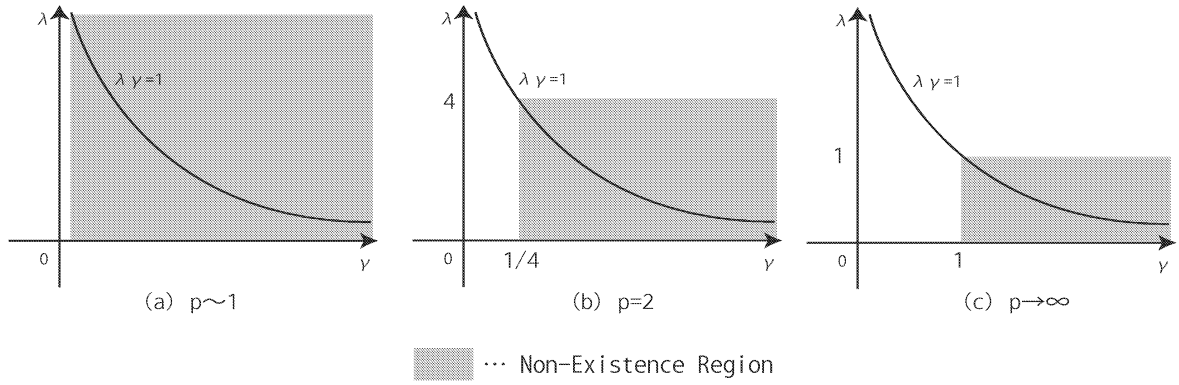


図 3: 定理 4 の非存在領域 ($q = 1$ の場合)

注意 8. 補題 7 における定数 C_1 と C_2 は, γ に関して単調に増加する定数として取ることができる.

補題 7 の証明の概略. v の上界の評価のみを証明する. その他の評価については, [12] や [13] を参照されたい.

$w = u + \gamma v$ とおくと, w は

$$-\Delta w = \lambda(1 - u) - v^q \quad \text{in } \Omega$$

を満たす. ここで, $w(\tilde{x}) = \max_{x \in \bar{\Omega}} w(x)$ とおくと, 線形楕円型方程式の最大値原理から

$$\lambda(1 - u(\tilde{x})) - v^q(\tilde{x}) \geq 0$$

が成立する. したがって,

$$v(\tilde{x}) \leq \lambda^{\frac{1}{q}}$$

となる. ゆえに

$$\gamma v(x) \leq w(x) \leq w(\tilde{x}) = u(\tilde{x}) + \gamma v(\tilde{x}) \leq 1 + \lambda^{\frac{1}{q}} \gamma \quad \text{for } x \in \bar{\Omega}.$$

これより

$$v(x) \leq \lambda^{\frac{1}{q}} + \frac{1}{\gamma} \quad \text{for } x \in \bar{\Omega}$$

が成り立つ. □

定理 6 の証明の方針は, 定理 1 と同様に補題 7 の非定数解のアプリオリ評価とエネルギー法を組み合わせるが, 詳細に関してはここでは省略する. したがって, これらの非存在結果から, (SP) が非定数解を持つためには γ がある程度小さいことが必要条件になる.

これ以降では, λ, p, q に条件

$$\lambda > \frac{p^{\frac{p}{p-q}}}{(p-q)q^{\frac{q}{p-q}}}, \quad p > q \geq 1 \quad (7)$$

を課す. そのとき, 定常問題 (SP) の正値定数解は

$$(u, v) = (u_i, v_i), \quad u_i v_i^{p-q} = 1 \quad \text{for } i = 1, 2 \quad (8)$$

となる. ただし, v_1 と v_2 ($v_1 < v_2$) は次の方程式

$$v^p - \lambda v^{p-q} + \lambda = 0$$

の正の実数解である. また, $\{\mu_l\}_{l \geq 0}$ をノイマン境界条件下のラプラシアン $-\Delta$ の固有値とし,

$$0 = \mu_0 < \mu_1 < \mu_2 < \cdots$$

と定める. 更に, 以下を定義する.

定義 9. 各 $i = 1, 2$ に対して, 関数 $h_i(\mu)$ を

$$h_i(\mu) = \frac{(p-q)v_i^{q-1}\mu + \lambda(pv_i^{q-1} - qv_i^{p-1})}{\mu(\mu + v_i^p + \lambda)}$$

と置き, $n_i(\gamma)$ を $\gamma < h_i(\mu_l)$ となる固有値 μ_l (重複度を数える) の総数とする.

注意 10. 定義 9 の関数 $h_1(\mu)$ は, 区間 $(0, \infty)$ において単調に減少する. 一方, 関数 $h_2(\mu)$ は, 区間 $(0, \mu_*)$ では単調に増加するが, 区間 $(\mu_*, +\infty)$ では単調に減少する. ただし, μ_* は, λ, p, q により定まる正定数である. $q = 1$ のとき, $h_1(\mu)$ と $h_2(\mu)$ は全く交わらないが, $q > 1$ のときは, それらの交点は 1 つ存在する. (図 4 参照.)

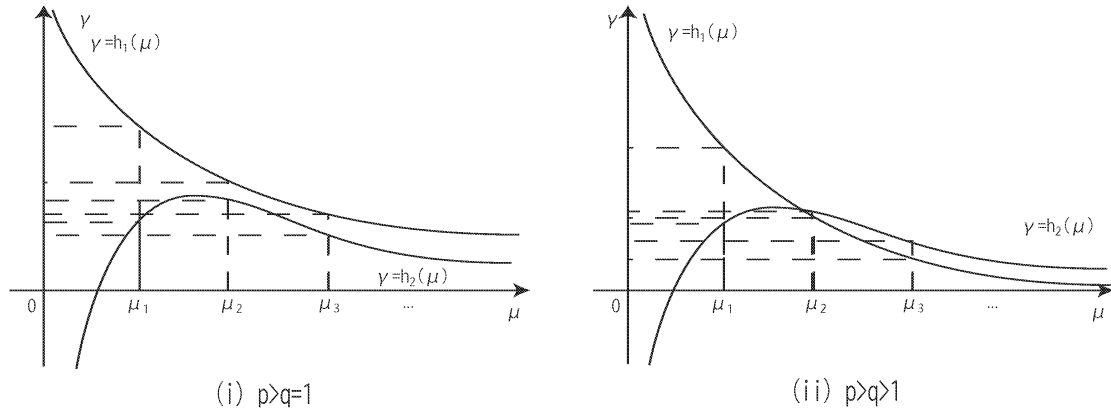


図 4: 関数 $h_i(\mu)$ ($i = 1, 2$) のグラフの概形

そのとき, 次の存在定理が成立する.

定理 11 ([13]). λ, p, q が (7) を満たし, 各 $i = 1, 2$ と全ての $l \in \mathbb{N}$ に対して $\gamma \neq h_i(\mu_l)$ が成り立つとする. そのとき, $n_1(\gamma) + n_2(\gamma)$ が奇数ならば, 定常問題 (SP) の非定数解が少なくとも 1 つは存在する.

この定理から, $-\Delta$ の固有値 μ_l の重複度が全て奇数ならば (特に μ_l が全て単純の場合には) 以下の系が成り立つことが分かる.

系 12 ([13]). λ, p, q が (7) を満たすとする. また, 固有値 μ_l の重複度が全て奇数であるとし, $h_i(\mu_l) \neq h_j(\mu_m)$ が全ての $i, j = 1, 2$ と $l, m \in \mathbb{N}$ に対して成り立つとする. そのとき, $\gamma_n, \Gamma_n \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) となる区間列 $\{(\gamma_n, \Gamma_n)\}_{n=1}^{\infty}$ が存在し, ある $n \in \mathbb{N}$ に対し $\gamma \in (\gamma_n, \Gamma_n)$ ならば (SP) の非定数解は少なくとも 1 つは存在する.

定理 11 の証明の概略. 証明の方針は, 写像度理論 [8] を利用して, 背理法により非定数解の存在を示す. 写像度やインデックスの定義については, [6] などを参照されたい.

まず, 次の補助パラメータを導入する;

$$\gamma_s := s\gamma + (1-s)M \quad \text{for } 0 \leq s \leq 1.$$

ただし, M は後で定める十分大きい正定数である. また, 関数空間 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{X}^+$ を

$$\mathbf{X} = C(\bar{\Omega}) \times C(\bar{\Omega}), \quad \mathbf{X}^+ = \{\mathbf{w} = (u, v) \in \mathbf{X} \mid u, v > 0 \text{ in } \bar{\Omega}\} \quad (9)$$

と定義する. 更に,

$$\mathbf{F}_s(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} -uv^p + \lambda(1-u) \\ \frac{1}{\gamma_s}(uv^p - v^q) \end{pmatrix} \quad \text{with } \mathbf{w} = (u, v)$$

とおくと, $\gamma = \gamma_s$ のとき, (SP) は下記の方程式と同値になる;

$$\Delta \mathbf{w} + \mathbf{F}_s(\mathbf{w}) = 0 \quad \text{in } \Omega, \quad \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \nu} = 0 \quad \text{on } \partial\Omega.$$

したがって, $\mathbf{w}$ が (SP) の正值解であることは, w が次の方程式

$$\mathbf{G}_s(\mathbf{w}) \equiv \mathbf{w} - (\mathbf{I} - \Delta)^{-1}(\mathbf{F}_s + \mathbf{I})(\mathbf{w}) = 0 \quad (10)$$

を満たすことと必要かつ十分となる. ここで, $(\mathbf{I} - \Delta)^{-1}$ はノイマン境界条件下の $\mathbf{I} - \Delta$ の逆作用素を意味する. したがって, 楕円型正則性理論とソボレフの埋め込み定理から, $\mathbf{G}_s(\mathbf{w}) : \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}$ はコンパクト写像に恒等写像を摂動した形的作用素となる.

さて, γ_* を任意に正定数として固定して, γ が $\gamma > \gamma_*$ を満たす範囲で問題を考える. ここで, 関数空間 $\mathbf{S}$ を

$$\mathbf{S} = \{\mathbf{w} = (u, v) \in \mathbf{X}^+ \mid D^{-1} < u, v < D \text{ in } \bar{\Omega}\}$$

と定める. ただし, $\mathbf{X}^+$ は (9) で定義した関数空間である. $C_i (i = 1, 2)$ を補題 7 で与えられた定数として, $\bar{C}_i (i = 1, 2)$ と定数 D を

$$\bar{C}_1 = C_1(\lambda, \gamma_*, p, q), \quad \bar{C}_2 = C_2(\lambda, \gamma_*, p, q, N, \Omega)$$

かつ

$$D = 2 \max \left\{ 1, \lambda^{\frac{1}{q}} + \frac{1}{\gamma_*}, \bar{C}_1^{-1}, \bar{C}_2^{-1} \right\}$$

とおくと, 補題 7 から方程式 (10) は境界 $\partial\mathbf{S}$ で解を持たないので, $\deg(\mathbf{G}_s, \mathbf{S}, 0) (0 \leq s \leq 1)$ が定義できる. そのとき, 写像度のホモトピー不変性から

$$\deg(\mathbf{G}_0, \mathbf{S}, 0) = \deg(\mathbf{G}_1, \mathbf{S}, 0). \quad (11)$$

ここで, 定数 M を

$$M = 2 \max \{h_1(\mu_1), \tilde{\gamma}\}$$

と取る. ただし, $h_1(\mu)$ は定義 9 で定めた関数であり, $\tilde{\gamma} = \tilde{\gamma}(\lambda, p, q, \Omega, N)$ は定理 6 で与えられた定数である. そのとき, 定理 6 より方程式 (10) は $s = 0$ のとき非定数解を持たない. したがって, 写像度の可算性とインデックスの性質 [8, Theorem 2.8.1] を利用すれば

$$\deg(\mathbf{G}_0, \mathbf{S}, 0) = \text{Index}(\mathbf{G}_0, \mathbf{w}_1) + \text{Index}(\mathbf{G}_1, \mathbf{w}_2) = 0 \quad (12)$$

を導くことができる. ただし, 各 $i = 1, 2$ に対して, $\mathbf{w}_i := (u_i, v_i)$ は (8) で与えられた正值定数解を意味する. さて, 方程式 (10) が $s = 1$ のとき非定数解を持たないとする. そのとき, 仮定から

$$\begin{aligned} \deg(\mathbf{G}_1, \mathbf{S}, 0) &= \text{Index}(\mathbf{G}_1, \mathbf{w}_1) + \text{Index}(\mathbf{G}_1, \mathbf{w}_2) \\ &= (-1)^{n_1(\gamma)+1} + (-1)^{n_2(\gamma)} \\ &= \pm 2 \end{aligned}$$

となるが, (11) と (12) より矛盾が成立する. □

3 まとめと今後の課題

本講演で得た結果を整理すると, λ が大きい時には, 指数 p と q の大小関係が定常問題 (SP) の解構造に影響を与えることが分かった. 具体的には, γ を分岐パラメータと見たときに, $p \leq q$ のときにはどのような γ に対しても非定数解が存在しないが, $p > q$ のときには γ にある条件を与えれば非定数解が存在することを示した. また, 定理 4 で得た非存在結果は, オリジナルの Gray-Scott モデルの場合 ($p = 2, q = 1$) においても新しい結果であることに注意したい.

今後の課題としては, 定理 11 で得られた非定数解の個数, 形状, 安定性に関する問題が挙げられる. これらの問題に対しては, [3] や [14] で用いられている特異摂動法が有効であると思われる. また, λ と γ が両方とも小さい場合の解構造に関する結果は得られず, これから解決すべき問題として残されている.

参考文献

- [1] P. Gray, S. K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor*, Chem. Engg. Sci. **38**(1983), no.1, 29-43.
- [2] J. K. Hale, L. A. Peletier, W. C. Troy, *Exact homoclinic and heteroclinic solutions of the Gray-Scott model for autocatalysis*, SIAM J. Appl. Math. **61**(2000), no.1, 102-130.

- [3] T. Kolokolnikov, M. J. Ward, J. Wei, *The existence and stability of spike equilibria in the one-dimensional Gray-Scott model on a finite domain*, Appl. Math. Lett. **18**(2005), no.8, 951–956.
- [4] Y. Lou, W. M. Ni, *Diffusion, self-diffusion and cross-diffusion*, J. Differential Equations **131**(1996), no.1, 79-131.
- [5] J. A. Leach, J. C. Wei, *Pattern formation in a simple chemical system with general orders of autocatalysis and decay. I. Stability analysis*, Phys. D **180**(2003), no.3-4, 185-209.
- [6] 増田久弥, 非線形数学 (新数学講座 15), 朝倉書店, 1985.
- [7] J. S. McGough, K. Riley, *Pattern formation in the Gray-Scott model*, Nonlinear Anal. Real World Appl. **5**(2004), no.1, 105-121.
- [8] L. Nirenberg, *Topics in nonlinear functional analysis*, American Mathematical Society, Providence, RI, 2001.
- [9] J. E. Pearson, *Complex patterns in a simple system*, Science **261**(1993), no.5118, 189-192.
- [10] R. Peng, M. X. Wang, *On pattern formation of the Gray-Scott model*, Sci. China Ser. A **50**(2007), no.3, 377-386.
- [11] R. Peng, M. X. Wang, *Some nonexistence results for nonconstant stationary solutions to the Gray-Scott model in a bounded domain*, Appl. Math. Lett. **22**(2009), no.4, 569-573.
- [12] N. Sato, *Qualitative analysis of a stationary problem for some autocatalysis system*, preprint.
- [13] N. Sato, *Stationary solutions to a chemical system with general orders of autocatalysis and decay*, preprint.
- [14] J. Wei, M. Winter, *Existence and stability of multiple-spot solutions for the Gray-Scott model in R^2* , Phys. D **176**(2003), no. 3-4, 147-180.