

Gray-Scott モデルにおける定常問題について

早稲田大学大学院理工学研究科 佐藤 典弘 (Norihiro Sato)
Department of mathematical sciences, Waseda university

1 Gray-Scott モデル

本講演では, 化学反応を記述する Gray-Scott モデルを考える.

$$\begin{cases} a_t = D_A \Delta a - k_1 ab^2 + k_f(a_0 - a), \\ b_t = D_B \Delta b + k_1 ab^2 - k_2 b. \end{cases}$$

ただし, 未知関数 $a(x, t)$ と $b(x, t)$ は, 場所 x かつ時刻 t における化学物質 A と B のそれぞれの濃度を記述する. また, D_A と D_B は化学物質 A と B の各々の拡散係数を現し, k_1 と k_2 は以下の化学反応式 (1) と (2) に対応する反応速度定数である. 更に, k_f と a_0 は正定数であり, 化学反応系が開放系であることを意味する.



このモデルは, Gray と Scott [4-6] により拡散項がない常微分方程式系として提出された. その後, 1993 年に Pearson [10] が拡散項を加えた上記の反応拡散モデルの数値シミュレーションを行ったところ, 様々な時空間ダイナミクスが現れることがわかり注目を集めるようになった. 例えば, 自己複製パターンと呼ばれるパルスが時間発展するに従い分裂していく現象や, パルスの相互作用に関する興味深い現象が現れることも分かっている.

そのような背景を踏まえ, これまで定在パルスの存在や安定性に関して様々な研究がなされている. [2,3,8,9,11,12] しかし, Wei [12] の結果を除いては, いずれの結果も 1 次元空間での結果である. 本講演では, 多次元空間における定在パルスの存在・非存在及び安定性の問題を扱い, 今回得られた結果を紹介する.

定在パルスの存在問題は, 次の定常問題 (SP) の非自明な非負値解が存在するか否かという問題に帰着される.

$$(SP) \quad \begin{cases} \Delta u - uv^2 + \lambda(1 - u) = 0, & x \in \mathbb{R}^N, \\ \gamma \Delta v + uv^2 - v = 0, & x \in \mathbb{R}^N, \\ \lim_{x \rightarrow \pm \infty} (u, v) = (1, 0). \end{cases}$$

ただし, $\mathbb{R}^N (N \geq 2)$ は全空間を表す. また, λ と γ は元の方程式のパラメータと以下の関係式を満たすことに注意する.

$$\lambda = \frac{k_1 k_f a_0^2}{k_2^2}, \quad \gamma = \frac{k_2 D_B}{k_1 a_0^2 D_A}. \quad (3)$$

強最大値原理から (SP) の任意の非自明な解 (符号変化する場合も含む) は, 正値解である. したがって, (SP) の正値解があるかどうかに着眼して議論を進めればよい. 次節では, 非自明な正値解の存在定理と安定性に関する結果を取り上げ, 3 節では, 大域的な非存在定理とモデルの考察に関して言及する.

2 存在と安定性に関する結果

定常問題 (SP) の非自明な正値解の存在と安定性に関して考察する. パラメータ λ と γ について次の条件をおく:

$$\lambda\gamma = 1. \quad (4)$$

Theorem 1. λ と γ が (4) を満たすと仮定する. そのとき,

(a) $0 < \gamma < \frac{2}{9}$ ならば, (SP) は以下の性質を満たす非自明な正値解 $(u(x), v(x))$ を持つ.

(i) $u(x) = u(|x|)$, $v(x) = v(|x|)$, $u(x) = 1 - \gamma v(x)$ for $x \in \mathbb{R}^N$,

(ii) $u'(r) > 0$ and $v'(r) < 0$ for $r = |x| > 0$,

(iii) $\lim_{r \rightarrow +\infty} (u(r), u'(r), v(r), v'(r)) = (1, 0, 0, 0)$.

(b) $\gamma \geq \frac{2}{9}$ ならば, (SP) の非自明な正値解は存在しない.

Remark 1. この定理は, 1次元空間における Hale-Peletier-Troy [9] によって得られた存在定理の拡張となっている.

Proof. 補助関数 $p(x) = u(x) + \gamma v(x) - 1$ を導入すると, $p(x)$ が満たす方程式は

$$\Delta p = \frac{1}{\gamma} p, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} p = 0,$$

となる. したがって, 最大値原理より $p(x)$ は恒等的に 0 となる. $u(x) = 1 - \gamma v(x)$ を (SP) の二番目の式に代入すると,

$$\Delta v + f(v, \gamma) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^N, \quad (5)$$

となる. ただし,

$$f(v, \gamma) = -\frac{1}{\gamma} v(\gamma v^2 - v + 1).$$

$v(x)$ の境界条件

$$v(x) \rightarrow 0 \quad \text{as } |x| \rightarrow +\infty, \quad (6)$$

より, (5)-(6) を満たす正値解は球対称解となる. (Gidas-Ni-Nirenberg [7] 参照). したがって, (5)-(6) を満たす正値解 $v(x) = v(r)$ ($r = |x|$) は以下の方程式の解である.

$$v'' + \frac{N-1}{r} v' + f(v, \gamma) = 0, \quad v(r) > 0, \quad \lim_{r \rightarrow +\infty} v'(r) = 0. \quad (7)$$

ここで,

$$F(\xi) := \int_0^\xi f(v, \gamma) dv,$$

とおき, 反応項 $f(v, \gamma)$ に関する条件 (J) を以下のように定義する;

(J) $F(\xi) > 0$ を満たす $\xi > 0$ が存在する.

(a) $0 < \gamma < \frac{2}{9}$ ならば, 反応項 $f(v, \gamma)$ は条件 (J) を満たすので, Berestycki-Lions-Peletier [1] の結果から (7) は $v'(r) < 0$ を満たす解 $v = v(r)$ を持つ.

一方, (b) $\gamma \geq \frac{2}{9}$ ならば, 反応項 $f(v, \gamma)$ は条件 (J) を満たさないもので, (7) は解を持たないことが分かる. $\square$

もとの非定常問題を変数変換したシステムは、以下のようなになる。

$$\begin{cases} u_t = \Delta u - uv^2 + \lambda(1-u), & (x, t) \in \mathbb{R}^N \times (0, \infty), \\ \frac{\gamma}{d}v_t = \gamma\Delta v + uv^2 - v, & (x, t) \in \mathbb{R}^N \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), & x \in \mathbb{R}^N, \end{cases}$$

ただし、初期関数 $u_0(x)$ と $v_0(x)$ は $\mathbb{R}^N$ 上で有界な連続関数とする。また、パラメータ λ と γ は (3) で定義したものであり、

$$d = \frac{D_A}{D_B},$$

である。更に、関数空間 X を

$$X = L^2(\mathbb{R}^N) \times L^2(\mathbb{R}^N),$$

とおく。そのとき、以下の安定性に関する定理が成り立つ。

Theorem 2. $d = 1$ ならば、Theorem 1(a) で得られた球対称解は関数空間 X において線形化不安定である。

Proof. Theorem 1(a) で得られた球対称解を (ϕ, ψ) とおくと、

$$\phi(x) + \gamma\psi(x) - 1 = 0 \quad \text{for } x \in \mathbb{R}^N, \quad (8)$$

を満たし、対応する線形化固有値問題 ($d = 1$ かつ $\lambda\gamma = 1$) は次のようになる；

$$\begin{cases} \Delta u - (\psi^2 + \frac{1}{\gamma})u - 2\phi\psi v = \mu u, \\ \Delta v + \frac{\psi^2}{\gamma}u + \frac{1}{\gamma}(2\phi\psi - 1)v = \mu v. \end{cases} \quad (9)$$

ここで、関数空間 X_0 を

$$X_0 = \{(u, v) \in X : u(x) + \gamma v(x) = 0 \text{ for any } x \in \mathbb{R}^N\},$$

と定義する。 $(u, v) \in X_0$ とすると、(8) と (9) から (u, v) が満たす方程式系は、 $u + \gamma v = 0$ かつ

$$\Delta v + \frac{1}{\gamma}\{-3\gamma\psi^2 + 2\psi - 1\}v = \mu v, \quad (10)$$

である。Berestycki-Lions-Peletier([1], Proposition IV) の結果より、 $v(x)$ に関する単独の固有値問題 (10) は正の実固有値と対応する固有関数 $v(x) \in L^2(\mathbb{R}^N)$ を持つ。したがって、不安定な固有値が少なくとも一つあることが分かった。 $\square$

3 非存在結果とモデルの考察

前節では、定常問題 (SP) の非自明な正值解を構成したが、本節では非自明な解が存在しないための λ と γ の十分条件を考察する。非存在に関する大域的な結果は、空間次元の場合は Sato [11] に記されているが、空間次元が 2 以上の問題に関してはほとんど分かっていないのが現状である。[11] で開発された最大値原理に基づく証明方法を (SP) に適用すれば、以下の結果が成り立つことが分かる。

Theorem 3. $X = \lambda\gamma < 1$ とする. そのとき, λ と γ が次の条件のうち一つでも満たすならば, (SP) の非自明解は存在しない.

- (i) $\gamma \geq \frac{1}{4}$,
- (ii) $4 - 16\gamma \leq X \leq 4\gamma$ with $\frac{1}{5} \leq \gamma < \frac{1}{4}$,
- (iii) $X \leq \frac{4}{5}$, $\gamma < \frac{1}{4}$ with

$$\begin{cases} X \geq \frac{4(1-4\gamma)}{(1+4\gamma-16\gamma^2)^2} & \text{if } X \leq X^*(\gamma), \\ X \leq 4\gamma & \text{if } X > X^*(\gamma), \end{cases}$$

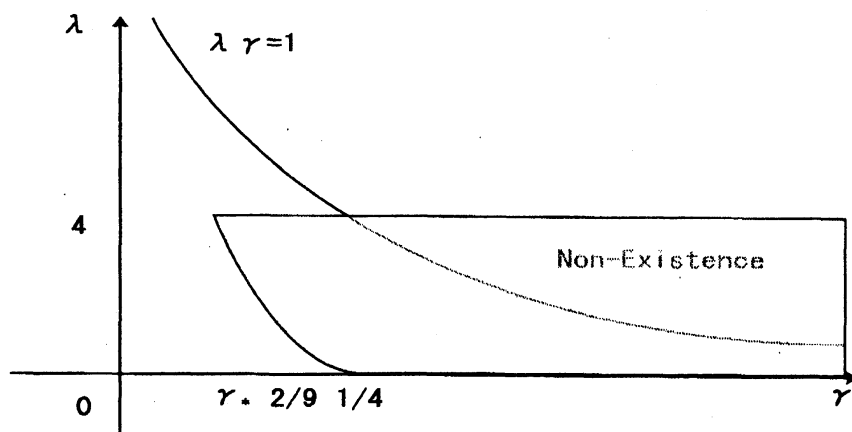
ただし, $X^*(\gamma)$ は γ に関し単調減少な関数であり, 以下を満たす.

$$X^*(\gamma) \rightarrow \frac{4}{5} \text{ as } \gamma \rightarrow 0 \text{ and } X^*(\gamma) \rightarrow \tilde{X} \text{ as } \gamma \rightarrow \frac{1}{4}.$$

ここで, $\tilde{X} \in (0, 1)$ は $\tilde{X} = (1 - \tilde{X}) \left(1 + \sqrt{1 - \tilde{X}}\right)^2$ を満たす唯一の解である.

Theorem 4. $\lambda\gamma > 1$ とする. そのとき, $\lambda \leq 4$ ならば, (SP) の解は自明解 $(u, v) = (1, 0)$ のみである.

Theorems 3-4 の条件を満たす λ と γ を λ - γ 平面で表すと, 下図のようになる.



λ, γ とともに方程式のパラメータとの対応関係を記す (3) を見ると, λ と γ の両方に含まれる本来のパラメータは, k_1, k_2 と a_0 であることに注意する. 本節の非存在結果により, λ が小さくかつ γ が大きいときには (SP) の非自明解が存在しないので, 以下の場合には定常パルスが形成されることが分かる.

(I) k_1 が小さい or (II) k_2 が大きい or (III) a_0 が小さい.

(I) と (II) から, (1) の非線形反応の速度が (2) の線形反応の速度に比べ小さいほど, 空間非一様なパターンが現れにくく, 逆に非線形反応の速度が大きくなれば, 空間非一様なパターンが出現する傾向が見て取れる. この事実は反応拡散系のパターン形成問題でよく現れることであり, 直感に合ったことである. (III) に関しては, この開放系の自己触媒化学反応特有のものではないかと考えられる. すなわち, 自己触媒としての化学物質 A が外部から供給されやすい環境であるほど, 空間非一様なパターンが生じやすい傾向がある. また, Wei [12] の結果は拡散係数の比に注目した研究結果であるが, 本研究では反応項の各係数に着目した研究でありその点が [12] と異なった観点である.

参考文献

- [1] H. Berestycki, P. L. Lions, L. A. Peletier, *An ODE approach to the existence of positive solution for semilinear problems*, Indiana Univ. Math. J. **30**(1981), no.1, 141-157.
- [2] A. Doelman, R. A. Gardner, T. Kopper, *Stability analysis of singular patterns in the 1-D Gray-Scott model I: A Matched Asymptotic Approach*, Phys. D, **122**(1998), no.1-4, 1-36.
- [3] A. Doelman, T. Kopper, P. A. Zegeling, *Pattern formation in the one-dimensional Gray-Scott model*, Nonlinearity **10**(1997), no.2, 523-563.
- [4] P. Gray, S. K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor*, Chem. Engrg. Sci. **38**(1983), 29-43.
- [5] P. Gray, S. K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: Oscillations and instabilities in the system $A+2B \rightarrow 3B$, $B \rightarrow C$* , Chem. Engrg. Sci. **39**(1984), 1087-1097.
- [6] P. Gray, S. K. Scott, *Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions*, J. Phys. Chem. **89**(1985), 22-32.
- [7] B. Gidas, W. M. Ni, L. Nirenberg, *Symmetry of positive solutions of nonlinear elliptic equations in R^n* , Mathematical analysis and applications, Part A, pp. 369-402, Adv. in Math. Suppl. Stud., 7a, Academic Press, New York-London, 1981.
- [8] J. K. Hale, L. A. Peletier and W. C. Troy, *Stability and instability in the Gray-Scott model: the case of equal diffusivities*, Appl. Math. Lett. **12**(1999), no.4, 59-65.
- [9] J. K. Hale, L. A. Peletier and 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.
- [10] J. E. Pearson, *Complex patterns in a simple system*, Science **261**(1993), 189-192.
- [11] N. Sato, *Some nonexistence results of stationary solution for the Gray-Scott model*, Nonlinear Anal. **65**(2006), no.8, 1644-1653.
- [12] J. Wei, *Pattern formation in two-dimensional Gray-Scott model: existence of single-spot solutions and their stability*, Phys. D **148**(2001), no.1-2, 20-48.