

グレイスコットモデルによるパターン形成の解析

Analysis of Pattern Formation in the Gray-Scott Model

石井つぼみ*, 村松鋭一*

Tsubomi Ishii*, Eiichi Muramatsu*

*山形大学

*Yamagata University

キーワード： 反応拡散方程式 (reaction-diffusion equation), パターン形成 (pattern formation), グレイスコットモデル (Gray-Scott model), 安定性解析 (stability analysis), 制御系設計 (control system design)

連絡先： 〒 992-8510 米沢市城南町 4-3-16 山形大学大学院応用生命システム工学専攻
村松鋭一, Tel.: (0238)26-3327, Fax.: (0238)26-3327, E-mail: muramatu@yz.yamagata-u.ac.jp

1. 研究の背景と目的

1.1 背景

容器内の物質の濃度分布, 部屋の中の温度分布, ある地域内での感染の分布などは, 個体とその周囲から影響をうけて状態がどう変化するかで決まる. 近年, ある空間内において多数の個体がどのような状態の分布を示しているかの様子を, 空間内の模様 (パターン) としてとらえ, パターンの形成のメカニズムを数理的に探ることが研究されている¹⁾. 自然科学の研究分野において, 上記で述べた分布の変化に関連する現象をより詳しく述べると次のようなものが挙げられる.

・化学反応：溶液中の化学反応において, 反応に関係する化学物質は溶液中を拡散するとともに, 化学反応によって生成あるいは消費される. 物質の濃度は時間の関数となり, 濃度変化は物質の拡散と化学反応が同時に進行するプロセスとして記述される.

・発熱反応：化学反応において, もし化学物質が十分にあって濃度の変化を無視できるとすると, 系の状態を定めるものは温度分布のみとなる. 温度分布は熱の拡散と, 化学反応による熱の発生, 外部との熱の出入りによって変化していく.

・生態系：ある領域に生息する生物個体群を考えると, 個体群の密度は場所と時間の連続関数とみなせる. 生物個体群の密度はランダムな移動による拡散と, 増殖, 死亡, 被捕食などによる個体密度に依存した増加あるいは減少によって時間的に変化していく.

・神経線維：動物体内における情報の伝達手段の1つである神経系は神経細胞の内部と外部イオン濃度の差によって生じる電位差を利用したのものである. この電位差は場所と時間に依存した関数となり, イオンのブラウン運動による拡散と, イオン密度に依存した膜のイオンポンプの働きによって膜の電位が変化する.

これらの現象はすべて, 拡散と反応が同時進

行するプロセスである．このような系は反応拡散系と呼ばれ，数理的な解析によって挙動を明らかにしようとする研究が進んでいる．このような解析は，自然現象の解明，私達の生活する場の環境の制御，あるいは社会における流行の蔓延や終息の予測に関連した意義を持つと考えられる．

1.2 目的

本研究では，空間における状態の分布をモデル化する式として反応拡散方程式と呼ばれる偏微分方程式を用い，これから生じるパターンについて調査，考察する．反応と拡散が組み合わさった非線形な微分方程式の解の挙動を数値的にまた理論的に調べることにより，さまざまなパターンが発生する条件や制御の方法を研究していく．本研究の対象はグレイスコットモデルと呼ばれる非線形偏微分方程式である．この方程式は解析的に解を求めることができず，解の安定性や，時間の経過によって生じる解の性質の変化の様子を明らかにすることが研究の目的となる．そのために非線形系の平衡点に着目し，その近傍での解の安定性を線形化方程式を用いて考察する．そして，固有値の解析から明らかとなる安定性と，解から生じるパターンの様相との関連および対応の有無を調べる．このような反応項の方程式の平衡点の解析をもとに拡散項を含めた平衡点の解析を進め，パターン形成の原因となる平衡点の不安定性を明らかにする．

本研究ではまた，グレイスコットモデルにおける2つの成分に対して制御を加えることを考える．制御入力を表す項をグレイスコットモデルに追加し，パターンに変化を生じさせることを試みる．

2. 反応拡散方程式

2.1 グレイスコットモデル

本研究で扱う反応拡散方程式はつぎに示すグレイスコットモデルと呼ばれる方程式である．

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \Delta u - uv^2 + a(1 - u) \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d_2 \Delta v + uv^2 - (a + k)v \quad (2)$$

ここで， d_1, d_2 は拡散係数， a, k は反応項の定数である． u と v は時間 t と空間の位置座標 x, y の関数であり， $u(t, x, y), v(t, x, y)$ と表され，値は実数とする．記号 Δ はラプラシアンで，空間の次元として二次元 (x 座標と y 座標) を考える場合には， $\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ を表す．また，グレイスコットモデルを u, v という2種類の物質の濃度変化を表すと考えると，右辺第1項は空間内での物質の拡散を，右辺第2, 3項は2つの物質の間に生じる化学反応が物質の濃度の時間的变化を生じさせていると解釈できる．グレイスコットモデルはゲル媒質中での自己触媒化学反応として



という反応を微分方程式でモデル化したものである．ここで， U は原材料となる化学物質， V は中間生成物であり，かつ自己触媒物質である． P は化学的に安定な最終生成物である． P は化学的に安定であるため， U や V と反応しない． U は外部から供給され，永続的な反応が可能となっている．拡散と反応が同時進行するとき，場所による濃度の違いと時間による濃度の推移が生じて，時間とともに変化する模様が発生する．

2.2 境界条件

本研究での境界条件はノイマン条件を採用している．

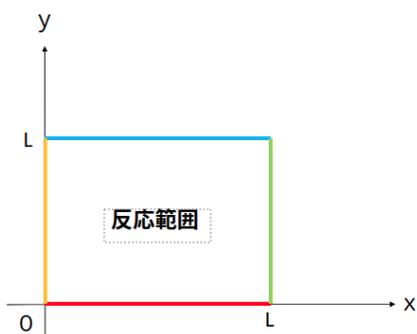


Fig. 1 反応観察範囲と境界条件

Fig.1 のように x, y 平面上の反応範囲を辺の長さ L の長方形とする。 $u(t, x, y)$ と $v(t, x, y)$ に対して、 $\frac{\partial u}{\partial x}$ を u_x , $\frac{\partial u}{\partial y}$ を u_y , $\frac{\partial v}{\partial x}$ を v_x , $\frac{\partial v}{\partial y}$ を v_y と表すとすると、ノイマン条件の式は次のようになる。

(黄色線) $u_x(0, 0, y) = 0, v_x(0, 0, y) = 0$

(青線) $u_y(0, x, L) = 0, v_y(0, x, L) = 0$

(緑線) $u_x(0, L, y) = 0, v_x(0, L, y) = 0$

(赤線) $u_y(0, x, 0) = 0, v_y(0, x, 0) = 0$ (4)

離散化することによって、 u, v を物質の濃度とするなら、初期値を与えることで時間 t の経過とともに変化するある点における濃度の変化を観察することができる。本研究のシミュレーションプログラムでは濃度の変化を次のように色を使い表現している。

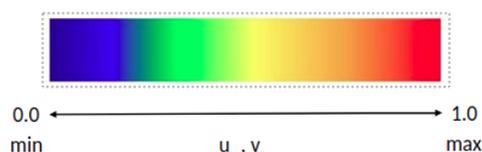


Fig. 2 濃度を色で表現

3. 反応項の微分方程式の安定性解析

本研究では、はじめにグレイスコットモデルの特徴である反応項の部分に着目した。反応項

の方程式から得られる平衡点は後の章の安定性解析と制御における基礎となる。

3.1 平衡点

まず、グレイスコットモデルの反応項から得られる平衡点を求めるため、反応項を常微分方程式で表す。すると以下の式になる。

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -uv^2 + a(1-u) \\ uv^2 - (a+k)v \end{bmatrix} \quad (5)$$

平衡点とは、(5) 式の右辺が 0 となる点であるため、次のような連立方程式の解が平衡点となる。

$$-uv^2 + a(1-u) = 0 \quad (6)$$

$$uv^2 - (a+k)v = 0 \quad (7)$$

(6),(7) 式は 3 次の方程式となっていることが分かるため、3 組の解、つまり 3 組の平衡点が存在することが分かる。(6), (7) 式の両辺を足し算すると、 $a(1-u) - (a+k)v = 0$ となる。これを u について解くと、

$$u = 1 - \frac{(a+k)}{a}v \quad (8)$$

となる。これを (6) 式に代入して u を消去し v の方程式を求めると

$$v \left\{ \left(1 - \frac{(a+k)}{a}v \right) v - (a+k) \right\} = 0 \quad (9)$$

となる。この v に関する 3 次方程式の解の 1 つは $v = 0$ である。このとき u は (8) 式より $u = 1$ となる。これで 1 組目の平衡点、

$$u_a = 1, v_a = 0 \quad (10)$$

が求められた。さらに残りの 2 組の平衡点を求めるために (9) 式に戻る。 $v \neq 0$ のとき (9) 式は

$$\left(1 - \frac{(a+k)}{a}v \right) v - (a+k) = 0 \quad (11)$$

となる。これは v の 2 次方程式である。2 次方程式の解の公式を使えば解 v を求められる。そ

れらを (8) 式に代入すると 2 つの u の値も得られる．それらをまとめると

$$\begin{aligned} u_b &= \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4(a+k)^2}{a}} \right) \\ v_b &= \frac{a}{2(a+k)} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4(a+k)^2}{a}} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

および

$$\begin{aligned} u_c &= \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4(a+k)^2}{a}} \right) \\ v_c &= \frac{a}{2(a+k)} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{4(a+k)^2}{a}} \right) \end{aligned} \quad (13)$$

となる．これで 3 種類の平衡点が求められた．

3.2 平衡点近傍の線形化

求めた平衡点の安定化解析を行うため，平衡点近傍で線形化を行う．まず，反応項の線形化方程式を

$$\frac{d}{dt} \mathbf{v} = \mathbf{A} \mathbf{v} \quad (14)$$

の形式で求める．ただし， $\mathbf{v} = {}^t [u, v]$ であり， \mathbf{A} は

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{bmatrix} \quad (15)$$

によって求められる．ただし， $f(u, v) = -uv^2 + a(1 - u)$ ， $g(u, v) = uv^2 - (a + k)v$ である．これを求めると

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -v^2 - a & -2uv \\ v^2 & 2uv - a - k \end{bmatrix} \quad (16)$$

となる．

3.3 3 つの平衡点の安定性

求めた 3 つの平衡点の安定性解析を行う．1 組目の平衡点に対して行う解析方法は，線形化の過程で求められた行列 \mathbf{A} の固有値を求め，固有値の実部が負ならば安定，それ以外は不安定と判別する解析である．2 組目と 3 組目の平衡点に対しては，行列の固有方程式を求め，その係数の正負を考える．

3.3.1 u_a, v_a の安定性解析

1 組目の平衡点である (10) 式の u_a, v_a を求めた行列 \mathbf{A} に代入する．代入した式は以下のとおりである．

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -a & 0 \\ 0 & -a - k \end{bmatrix} \quad (17)$$

(17) 式は対角行列となっているため，固有値は $-a, -a - k$ となる． a と k は本研究におけるパラメータであり，どちらも正の値をとる．よって，グレイスコットモデルの反応項における平衡点 $u_a = 1, v_a = 0$ においては安定であると言える．

3.3.2 u_b, v_b の安定性解析

次に (12) 式にある u_b, v_b について解析を行っていく．行う解析は (16) 式の行列 \mathbf{A} の固有方程式を求め，その係数の正負を調べることで安定性解析を行う．固有方程式は

$$|\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}| = 0 \quad (18)$$

であり， \mathbf{I} は単位行列である．(16) 式を用いて (18) 式の左辺を展開すると

$$(\lambda + v^2 + a)(\lambda - 2uv + a + k) - 2uv(-v^2) = 0 \quad (19)$$

となる．ここで，(19) 式に含まれている v^2, uv を先に計算する．このとき， u と v には (12) 式の u_b, v_b の値を代入し計算する． v^2 と uv は以下の通りになる．

$$v_b^2 = \frac{a^2}{4b^2} \left\{ 1 - 2\sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} + \left(1 - \frac{4b^2}{a} \right) \right\} \quad (20)$$

$$u_b v_b = a + k \quad (21)$$

ここで， b を

$$b = a + k \quad (22)$$

と定義する．これより

$$u_b v_b = b \quad (23)$$

となる。(21)式と(23)式を(19)式に代入し、 λ の2次方程式の形に整理すると

$$\lambda^2 + d_1\lambda + d_2 = 0 \quad (24)$$

となる。ただし、 d_1, d_2 は以下の通りである。

$$d_1 = -b + \frac{a^2}{2b^2} - \frac{a^2}{2b^2} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} \quad (25)$$

$$d_2 = \frac{a^2}{2b} - \frac{a^2}{2b} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} - 2ab \quad (26)$$

ここで、 d_1, d_2 の正負は a, b の値に関係するため、平衡点の安定性は「(1) a, b の値によらず安定」、「(2) a, b の値によらず不安定」、「(3) a, b によって、安定になる場合もあれば不安定になる場合もある」という3つの可能性がある。平衡点が不安定になる条件は、固有方程式の係数 d_1, d_2 の両方あるいはどちらかが負になる必要があるため、ここからは正負を調べていく。

まず、(26)式にある d_2 に着目する。前提の仮定として、 a, k は本研究におけるパラメータであり正の値を取るため、 $a > 0, b > 0, b > a$ が成り立つ。また、(26)式の根号の中 $1 - \frac{4b^2}{a}$ ($a - 4b^2$)は、平衡点 u_b, v_b は実数であることから $1 - \frac{4b^2}{a} > 0$ ($a - 4b^2 > 0$)が成り立つ。また、 $a > 0, b^2 > 0$ なので

$$1 - \frac{4b^2}{a} < 1 \quad (27)$$

も成り立つ。次に、(26)式の d_2 を式変形し、先に $\frac{a^2}{2b}$ をくくりだし、

$$X = \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} \quad (28)$$

とすると、 d_2 は以下のような X の2次関数になる。

$$d_2 = \frac{a^2}{2b}(X^2 - X) \quad (29)$$

ここで、 $f(X) = d_2 = 0$ としたときの X を求めると、 $X = 0, 1$ となる。以上をもとに $f(X)$ の正負を考えると、 $0 < X < 1$ のとき $f(X)$ は負、 $X > 1$ では正となることがわかる。(27)式

より、(28)式で定義した X は $0 < X < 1$ である。よって、 $d_2 < 0$ となる。これにより、 d_1 が正か負に関わらず、(12)式の第2の平衡点 u_b, v_b は不安定であることが明らかになった。

3.3.3 u_c, v_c の安定性解析

まず、(13)式の第3の平衡点の固有方程式 $\lambda^2 + e_1\lambda + e_2 = 0$ とすると e_1, e_2 は以下の通りになる。

$$\begin{aligned} e_1 &= -b + \frac{a^2}{2b^2} + \frac{a^2}{2b^2} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} \\ e_2 &= -2ab + \frac{a^2}{2b} + \frac{a^2}{2b} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} \end{aligned} \quad (30)$$

はじめに e_2 に着目し、第2の平衡点 u_b, v_b に行った解析を第3の平衡点 u_c, v_c にも行った。すると、 e_2 は前節と同様の解析により正であることが分かった。次に e_1 は次の例のように不定であることが分かる。.. e_1 の正負の一例を上げると、 $a = 0.021, k = 9.981$ のとき、 e_1 は負となり、 u_c, v_c は不安定となる。また、 $a = 0.961, k = 8.531$ のとき、 e_1 は正となり、 u_c, v_c は安定となる。よって、第3の平衡点 u_c, v_c は a, k の値により、安定にも不安定にもなり得ることが明らかになった。

3.4 パターンと安定性の関係

1次元におけるパラメータ a, k とパターンの関係性は参考文献3)に表されている。これを参考にパラメータ a, k と求めた平衡点の安定性との関係を表にまとめると以下のようにになった。

	a	k	パターン	平衡点		
				第1	第2	第3
①	0.06	0.065	定在パルス	安定	/	/
②	0.02	0.05125	進行パルス	安定	/	/
③	0.03	0.055	自己複製	安定	不安定	不安定
④	0.025	0.05	時空カオス	安定	不安定	不安定
⑤	0.06	0.04	フロント解	安定	不安定	安定
⑥	0.01	0.04	対消滅	安定	/	/

Fig. 3 パラメータと平衡点の関係

この表から比較的活発なパターンが現れる領域 3,4 のときに不安定な平衡点が現れていることがわかった。

4. 反応拡散方程式の安定性解析

ここまでグレイスコットモデルの反応項に着目して解析を進めてきたが、ここからは (1),(2) 式で表される拡散項も合わせた式について考えていく。まず、本研究で採用している境界条件はノイマン条件である。この境界条件を満たし、かつ $u_t = 0, v_t = 0$, すなわち時間的な変化を伴わない関数を平衡解または定常解という。すなわち、定常解を $S(x)$ とすると、 $\mathcal{L}(S(x)) = 0$ ($0 < x < L$) と $S_x(0) = S_x(L) = 0$ を満たすということになる。ただし、

$$\mathcal{L}(v) = D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v + F(v) \quad (31)$$

$$v = \begin{bmatrix} v \\ v \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} d_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{bmatrix}, F(v) = \begin{bmatrix} -uv^2 + a(1-v) \\ uv^2 - (a+k)v \end{bmatrix} \quad (32)$$

である。第 4.1 節で求めた 3 つの平衡点 P は上で述べた定常解になるのでこれを $S_0(x) = P$ とする。グレイスコットモデルの反応項の部分を F とすると、 $S_0(x)$ の線形化作用素を

$$A_0 = D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + F'(P) \quad (33)$$

となる。定常解が安定か不安定かということは定常解から微小にずれた値を u, v が持ったとき、 u, v が定常解に戻るか離れるかを意味する。線形システム $\frac{d}{dt}v(t) = Av(t)$ の安定性が A の固有値で決まると同様に、(33) 式の作用素 A_0 を用いて

$$\frac{\partial}{\partial t}v = A_0v \quad (34)$$

で表される線形化方程式における平衡点である定常解の安定性は、線形化作用素 A_0 の固有値

で決まる。そこで、固有値問題を

$$A_0v = \lambda v \quad (35)$$

について考察する。これは作用素 A_0 の定義を用いれば上式は次の式になる。

$$D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) v + F'(P)v = \lambda v \quad (36)$$

$F'(P)$ は定数行列であるから、これを

$$B = \begin{pmatrix} f_u(P) & f_v(P) \\ g_u(P) & g_v(P) \end{pmatrix} \quad (37)$$

とする。ここで、第 3.1 節で求めた第 2, 第 3 の平衡点を代入し、実際に行列 B を計算する。まず、(12) 式の第 2 の平衡点を代入し計算すると

$$B_2 = \begin{bmatrix} -\frac{a^2}{4b^2} \left(2 - 2\sqrt{1 - \frac{4b^2}{a} - \frac{4b^2}{a}} \right) - a & -2b \\ \frac{a^2}{4b^2} \left(2 - 2\sqrt{1 - \frac{4b^2}{a} - \frac{4b^2}{a}} \right) & b \end{bmatrix} \quad (38)$$

次に、(13) 式の第 3 の平衡点を代入し計算すると

$$B_3 = \begin{bmatrix} -\frac{a^2}{2b^2} - \frac{a^2}{2b^2} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} & -2b \\ -a + \frac{a^2}{2b^2} + \frac{a^2}{2b^2} \sqrt{1 - \frac{4b^2}{a}} & b \end{bmatrix} \quad (39)$$

となる。これらを次のような記号 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ を用いて置き換え、反応項のヤコビ行列として

$$B = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \quad (40)$$

とする。

偏微分を含む作用素の固有値を考えるにあたり、 v のフーリエ級数展開を用いることにより、作用素の固有値問題を行列の固有方程式に帰着することができる。その方法を次に述べる。まず、 v はノイマン形境界条件を満たす波の性質を持っている。このことから境界条件を考慮して $v = {}^t(u(x, y), v(x, y))$ の各成分を次のようにフーリエ余弦展開する。

$$v(x, y) = \begin{bmatrix} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_{mn} \psi_m(x) \psi_n(y) \\ \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} b_{mn} \psi_m(x) \psi_n(y) \end{bmatrix} \quad (41)$$

ただし、

$$\psi_m(x) = \cos \frac{m\pi}{L} x, \quad \psi_n(x) = \cos \frac{n\pi}{L} x \quad (42)$$

である・ここで、 $\begin{bmatrix} a_{mn} \\ b_{mn} \end{bmatrix} = \mathbf{a}_{mn}$ とまとめる
と、(41) 式は次のようになる。

$$\mathbf{v}(x, y) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{a}_{mn} \psi_m(x) \psi_n(y) \quad (43)$$

この (43) 式を線形化方程式 (36) 式に代入する。

$$\begin{aligned} D \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{a}_{mn} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_m(x) \psi_n(y) \\ + \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{B} \mathbf{a}_{mn} \psi_m(x) \psi_n(y) \\ = \lambda \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(y) \mathbf{a}_{mn} \quad (44) \end{aligned}$$

ここでの \mathbf{B} は $F'(P)$ を表す。(44) 式の最初の
第 1 項に着目しさらに計算すると、

$$\begin{aligned} D \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{a}_{mn} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_m(x) \psi_n(y) \right. \\ \left. + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_m(x) \psi_n(y) \right) \quad (45) \end{aligned}$$

となる。(45) 式の括弧内の第 1 項をまず計算す
る。まず、 $\psi_m(x) = \cos \frac{m\pi}{L} x$ より、 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ に従い、2
回偏微分を行うと、 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_m(x) = -\left(\frac{m\pi}{L}\right)^2 \cos \frac{m\pi}{L} x$
となる。ここで、

$$\left(\frac{m\pi}{L}\right)^2 = \sigma_m \quad (46)$$

とすると、(45) 式の第 1 項は次のようになる。

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_m(x) \psi_n(y) = -\sigma_m \psi_m(x) \psi_n(y) \quad (47)$$

同様の計算を (45) 式の括弧内の第 2 項にも行
うと、

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi_m(x) \psi_n(y) = -\sigma_n \psi_m(x) \psi_n(y) \quad (48)$$

となる。ただし、

$$\sigma_n = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \quad (49)$$

とする。よって、最終的に (44) 式の第 1 項は次
のようになる。

$$\begin{aligned} D \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{a}_{mn} (-\sigma_m \psi_m(x) \psi_n(y) \\ - \sigma_n \psi_m(x) \psi_n(y)) \quad (50) \end{aligned}$$

これにより、(44) 式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(y) (-D(\sigma_m + \sigma_n) \mathbf{a}_{mn} \\ + \mathbf{B} \mathbf{a}_{mn}) \\ = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \psi_m(x) \psi_n(y) \lambda \mathbf{a}_{mn} \quad (51) \end{aligned}$$

(51) 式の両辺は $m = 0, \dots, \quad , n = 0, \dots,$ に対
する無限級数である。級数の各項は $\psi_m(x) \psi_n(y)$
に係数が掛かった形式になっている。 $\psi_m(x) \psi_n(y)$
は 1 次独立な関数なので (51) 式の等式が成り立
つためには、 $\psi_m(x) \psi_n(y)$ に掛かっている係数
部分が等しくなければならない。係数部分を比
較することにより、各 m と n において

$$-(\sigma_m + \sigma_n) D \mathbf{a}_{mn} + \mathbf{B} \mathbf{a}_{mn} = \lambda \mathbf{a}_{mn} \quad (52)$$

を得ることができる。ここで、

$$\mathbf{B}_{mn} = -(\sigma_m + \sigma_n) D + \mathbf{B} \quad (53)$$

とすると、

$$\mathbf{B}_{mn} \mathbf{a}_{mn} = \lambda \mathbf{a}_{mn} \quad (54)$$

となる。(35),(36) 式で定義された作用素 A_0 の
固有値 λ は、上の (54) 式で行列 \mathbf{B}_{mn} の固有値と
して表される。このようにフーリエ余弦級数を用
いた解の形式を線形化された作用素の方程式
に代入することによって (36) 式で表される作用
素 $D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + F'(P)$ の固有値問題が (54)
式の行列 \mathbf{B}_{mn} の固有値問題に帰着された。

次に行列 $\mathbf{B}_m = -(\sigma_m + \sigma_n) D + \mathbf{B}$ の固有
方程式を考える。ここで

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} f_u(P) & f_n(P) \\ g_u(P) & g_v(P) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

より、行列 \mathbf{B}_{mn} を計算すると次のようになる。

$$\mathbf{B}_{mn} = \begin{pmatrix} -(\sigma_m + \sigma_n) D_1 + \alpha & \beta \\ \gamma & -(\sigma_m + \sigma_n) D_2 + \delta \end{pmatrix}$$

では、求めた行列 \mathbf{B}_{mn} の固有方程式から係数
の正負を求めるため、固有方程式

$$Q_{mn}(\lambda) = |\lambda \mathbf{I} - \mathbf{B}_{mn}| \quad (55)$$

を計算する必要がある．上式を計算すると

$$Q_{mn}(\lambda) = \lambda^2 - (\alpha + \delta - (\sigma_m + \sigma_n) D_1 - (\sigma_m + \sigma_n) D_2) \lambda + ((\sigma_m + \sigma_n) D_1 - \alpha) ((\sigma_m + \sigma_n) D_2 - \delta) - \beta\gamma \quad (56)$$

となる．上式を λ に関する 2 次式とみて，定数項に着目して計算すると，

$$(\sigma_m + \sigma_n)^2 D_1 D_2 - (\sigma_m + \sigma_n) (\alpha D_2 + \delta D_2) + \alpha\delta - \beta\gamma \quad (57)$$

となる．ここで， $D_2 = hD_1$ とすると，上式は

$$\left((\sigma_m + \sigma_n)^2 D_1^2 - (\sigma_m + \sigma_n) D_1 \alpha \right) h + \alpha\delta - \beta\gamma - (\sigma_m + \sigma_n) D_1 \delta \quad (58)$$

となる．まず， $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ のうち，(38),(39) 式の行列 B_2, B_3 に共通して

$$\alpha < 0, \beta < 0, \delta > 0 \quad (59)$$

であることがわかっている．ここで， $\sigma_m + \sigma_n = \left(\frac{m\pi}{L}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$ より， m と n が大きな値のとき，マイナスのかかっている (58) 式の第 4 項は，第 2，第 3 項が正であったとしても，その値を超える大きな負となることがわかる．そして，この大きな負に比較する h のかかった第 1 項は () 内の第 1 項は正，第 2 項もマイナスがかかっているが， α が負のため正となる．ここで， h を十分に小さくすると h のかかった第 1 項全体を小さな正とすることができる．よって，(58) 式は全体で負になることが証明できた．(58) 式はもともと (56) 式の λ の 2 次式の定数項であるため，固有方程式の係数の 1 つが負になることがわかった．よってグレイスコットモデルの第 2，第 3 の平衡点は不安定であることがわかった．

5. パターン形成の制御

5.1 制御系設計問題

本研究ではグレイスコットモデルにおける u と v の値をフィードバック制御によって変化さ

せることを考える．この制御は， u, v が化学物質の濃度と考えるならば， u の濃度の変化率に影響を与える w_u という物質を， v の濃度の変化率に影響を与える w_v という物質を加えることに相当する．これらの影響はグレイスコットモデルの右辺にそれぞれ w_u, w_v という項を加えることを意味する．ここで w_u, w_v としてどのような式を用いるかを考えることが制御系設計の問題となる．(Fig.4)

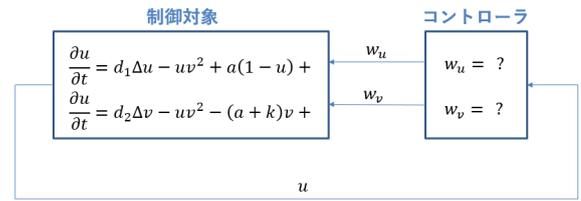


Fig. 4 制御系設計の問題

5.2 制御問題における仮定

制御の問題を考える上で次の仮定を置く．

- Fig.3 の各パターンを形成するような a, k の値は既知とする．
- Fig.3 にある第 1~3 の平衡点の値は a, k の値と第 3.1 節の計算式を用いて計算可能である．
- u の値は測定可能であり，フィードバック制御に用いることができる．
- v の値は測定できず，フィードバック制御に用いることができない．

5.3 制御入力 w_u, w_v に含める項の検討

5.3.1 u, v の値を一定値に近づける制御

制御入力 w_u, w_v にどのような項を含めるかは制御に目的によって様々な形が考えられる．例えば， u, v の値を定数 \bar{u}, \bar{v} にできるだけ近づけ

たいとすれば,

$$\begin{aligned} w_u &= k_u(\bar{u} - u) \\ w_v &= k_v(\bar{v} - \hat{v}) \end{aligned} \quad (60)$$

という形の制御入力を与えることが有効となる。ただし, \hat{v} は v の推定値である。このシミュレーションでは $\hat{v} = 1 - u$ とした。シミュレーションの結果では u と v の値が時間と場所によらず一定の値となる結果が得られた。

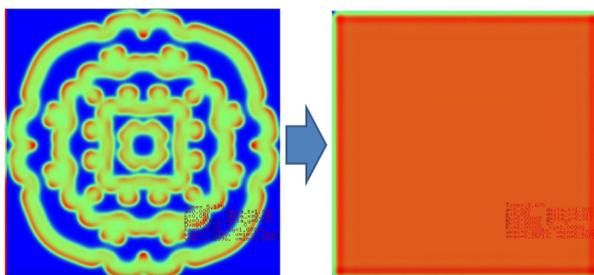


Fig. 5 一定値に近づける制御

5.3.2 パターンを変える制御

例えば Fig.3 上から 2 番目のパターンから 4 番目のパターンに変化させたい場合は

$$\begin{aligned} w_u &= -a_2(1 - u) + a_4(1 - u) \\ w_v &= (a_2 + k_2)\hat{v} - (a_4 + k_4)\hat{v} \end{aligned} \quad (61)$$

という制御入力と考えられる。ただし, a_2, k_2 はパターン 2 における a, k の値, a_4, k_4 はパターン 4 における a, k の値である。この制御入力はグレイスコットモデルにおける a, k に依存する項においてパターン 2 に関する項を打ち消し, パターン 4 の項に置き換える働きがある。

5.3.3 v を推定するオブザーバ

v の推定値 \hat{v} を計算するにはオブザーバを用いることが考えられる。それは

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} &= d_1 \Delta \hat{u} - \hat{u} \hat{v}^2 + a(1 - \hat{u}) + w_u \\ \frac{\partial \hat{v}}{\partial t} &= d_2 \Delta \hat{v} + \hat{u} \hat{v}^2 + w_v + k_h(u - \hat{u}) \end{aligned} \quad (62)$$

という構成法が考えられる。上式は \hat{u} と \hat{v} のモデルをもとにして計算するとともにセンサで測定した u の値とその推定値 \hat{u} の偏差を用いて $k_h(u - \hat{u})$ で \hat{v} を補正する考えに基づいている。

6. まとめ

グレイスコットモデルによるパターン形成に対して数理解析と制御方法の考察を行った。3 種類の平衡点を示し, その安定性を明らかにした。また, パターンを制御するための制御入力の式を考察した。今後はオブザーバの有効性の検証, 安定性解析で求められた平衡点の値を制御に活用することが考えられる。

参考文献

- 1) 栄 伸一郎: パターン形成の数理, 講談社 (2008)
- 2) 西浦 廉政: 数学と科学・生物学—自己複製と自己崩壊のダイナミクスをめぐって, 日本数学会出版 (2010)
- 3) 三村 昌泰: 非線形・非平衡現象の数理 4 パターン形成とダイナミクス, 財団法人 東京大学出版会, 38/fig.2.11(2006)