Turing 反応

Shumpei, Mao

2019 年 10 月 25 日

目次

第 I 部
Intro

今回やりたいレシピは

- Turing 反応のシミュレーションを Julia でできるようにする
- 高速化
- 初期分布、パラメータ、モデルと一定ステップ後の分布をセットにしたデータセットを作る
- 適切な手法で学習させる
- 人間の発生段階でのパターン形成や、現実には取り扱いにくい物質と既存の物質のセットに関して拡散係数や反応経路を推測する

第 II 部
原理論

Turing 反応式の一般式

$$
\begin{aligned}
\frac{du}{dt} =& D_u \nabla^2 u + f(u,v) &(1)\\
\frac{dv}{dt} =& D_v \nabla^2 v + g(u,v) &(2)
\end{aligned}
$$

であり、f や g を変化させることによってモデルを区別する。

0.1 FitzHung-Nagumo

FitzHugn-南雲モデルでは

$$
\begin{aligned}
f(u,v) =& u - u^3 - v\\
g(u,v) =& \gamma(u - \alpha v - \beta)
\end{aligned}
$$

であり、解析を行うにはまず、線形近似を行う。非線形項 f, g に対して $f(\tilde{u},\tilde{v}) = 0, g(\tilde{u},\tilde{v}) = 0$ となる定数 $\tilde{u},\tilde{v}$ を考えると、その周りにおいて

$$
\begin{aligned}
u =& \tilde{u} + ae^{i(kr-\omega t)}\\
v =& \tilde{v} + be^{i(kr-\omega t)}
\end{aligned}
$$

と展開することができる。これを使うと、

$$
f(u,v) = f(\tilde{u},\tilde{v}) + f_u(\tilde{u},\tilde{v})ae^{i(kr-\omega t)} + f_v(\tilde{u},\tilde{v})be^{i(kx-\omega t)} + o(a,b) \tag{3}
$$

のようになるので、Turing 方程式は

$$
-i\omega \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -|\mathbf{k}|^2 D_u + f_u & f_v \\ g_u & -|\mathbf{k}|^2 D_v + g_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \tag{4}
$$

であり、解が存在するためには

$$
\begin{aligned}
0 =& \begin{vmatrix} i\omega - |\mathbf{k}|^2 D_u + f_u & f_v \\ g_u & i\omega - |\mathbf{k}|^2 D_v + g_v \end{vmatrix}\\
=& \left(i\omega - |\mathbf{k}|^2 D_u + f_u\right)\left(i\omega - |\mathbf{k}|^2 D_v + g_v\right) - f_v g_u\\
=& -\omega^2 + i\omega\left[-|\mathbf{k}|^2(D_u + D_v) + f_u + g_v\right] + |\mathbf{k}|^4 D_u D_v - |\mathbf{k}|^2(D_u g_v + D_v f_u) + f_u g_v - f_v g_u\\
=& -\omega^2 + i\omega A(u,v) + B(u,v)
\end{aligned}
$$

となる ω があればよく、2 次方程式の解の存在条件から

第 III 部

数値計算

Turing 反応式の一般式

$$\frac{du}{dt} = D_u \nabla^2 u + f(u,v) \tag{5}$$

$$\frac{dv}{dt} = D_v \nabla^2 v + g(u,v) \tag{6}$$

であり、f や g を変化させせることによってモデルを区別する。今回の計算では時間を dt、空間を dx に分割することにする。すると、対応する差分方程式は

$$\begin{aligned}\frac{u(t+dt,x,y)-u(t,x,y)}{dt} =& D_u \frac{u(t,x+dx,y)-2u(t,x,y)+u(t,x+dx,y)}{dx^2} \\ &+ D_u \frac{u(t,x,y+dx)-2u(t,x,y)+u(t,x,y-dx)}{dx^2} + f(u,v) \\ \frac{v(t+dt,x,y)-v(t,x,y)}{dt} =& D_v \frac{v(t,x+dx,y)-2v(t,x,y)+v(t,x+dx,y)}{dx^2} \\ &+ D_v \frac{v(t,x,y+dx)-2v(t,x,y)+v(t,x,y-dx)}{dx^2} + f(u,v)\end{aligned}$$

FitzHung-南雲モデル

今回のモデルでは

$$f(u,v) = u - u^3 - v \tag{7}$$

$$g(u,v) = \gamma \ (u - \alpha \ uv - \beta \ ) \tag{8}$$

であり、