反応拡散方程式の概説および FitzHugh-Nagumo 方程式に関する補足資料

芝浦工業大学　数理科学研究会

～芝浦祭研究発表～

平成 27 年 11 月 6 日

※何か不明な点や計算ミス等がありましたら加筆修正しますので指摘をお願いします

制作: BV14045 長瀬准平

まえがき

一般的な偏微分の記号や理解, u_t や $\frac{\partial}{\partial t}$, Δ(ラプラシアン) を前提としますが, 予備知識が無くてもできるだけ読めるよう努めました. 偏微分については予習していただけると幸いです. また, 偏微分方程式の知識があるとより理解が深まると思われますが, 偏微分方程式の知識は前提しなくても読めるような構成としました. 本文で説明していない単語や記号は脚注で補足していますが, 数学徒向けの補足をしている場合は最初に*と表記しておくので読み流していただいて構いません. 説明不足や証明の省略が多く, 理解できない部分が多々あると思いますので, 質問やメール等受け付けます. 興味のある方には参考文献もお見せ致しますのでお声がけください. それではよろしくお願いします.

目 次

1 反応拡散方程式とは

偏微分方程式[1] の中でも放物型非線形偏微分方程式[2]の一種で, **反応項**と**拡散項**から成る. 拡散は解を滑らかにし, 一様化あるいは平均化する働きをもち, 解を自明な方向へ向かわせる. それに対し反応項は解が自明な状態から引き離して空間的な非一様性をもたらすような働きをもつ. 拡散と反応のこのような効果により, 反応拡散方程式はなめらかな空間パターンを安定に形成するメカニズムを持つ.

成分が u 一つであり, この u が時間変数 t と空間変数 x で表される変数だとすると, 最も単純な反応拡散方程式である**単独反応拡散方程式**

$$u_t = \Delta u + f(u) \tag{1}$$

を考えることができる. Δu が拡散項であり, $f(u)$ が反応項である. これはとても単純な形であるが数学的に豊富な構造を持っている. さらに, 反応と拡散という二つの現象によって説明できる現象は数多く存在する. 例えば化学反応とそれによる物質の濃度は, 物質の生成と消費が反応, 分子のブラウン運動が拡散. 発熱反応と温度であれば, 反応が熱の発生と流出を表し, 熱伝導により拡散する. このような理由から反応拡散方程式の研究は近年盛んに行われている.

反応拡散方程式のような現実の現象を記述するモデルで解を求める場合は, どのような初期条件[3]と境界条件[4]を与えるかが重要である. 初期条件が与えられた微分方程式を初期値問題と呼ぶ. 考えている領域に特に与えたい条件がなく, 十分に広い空間だと仮定して良い場合は $\mathbb{R}^N$ の領域[5] で考えることも多い.

(1) は成分が一つだけの簡単な形であるが, 二つ以上成分を含んだ形やそれぞれの反応や拡散の速さを表現できる形に拡張することも自然に考えられる. しかしそのような方程式は当然複雑になり, それらの性質を考察することは困難である. また今回のテーマは単独反応拡散方程式と FitzHugh-Nagumo 方程式の性質の理解であることから, ここでは 2 成分反応拡散方程式の基本形を紹介するだけにとどめる. 一般化された反応拡散方程式については参考文献および今後の資料を参照されたし.

$$\begin{aligned} u_t =& \quad d_1 \Delta u + f(u,v) \\ v_t =& \quad d_2 \Delta v + g(u,v) \end{aligned} \tag{2}$$

d_1, d_2 は拡散係数といい, 拡散する速さを表す. 2 つの成分が同じ速さで拡散しているならば単独反応拡散方程式で表現できてしまうので拡散係数を導入している.

1.1 反応拡散方程式の種々の解

偏微分方程式の解はさまざまな挙動を示すものが存在し, それぞれに研究が成されている. 反応拡散方程式にも様々な解が存在するが, 今回は発表で扱ったテーマに関するものを中心に紹介する. また特に断りがない限りこの節では単独反応拡散方程式 (1) について考えるが, 多成分反応方程式についても同様の議論ができる.

1.1.1 空間的に一様な解

現象を考えている空間のどのようなところでも方程式の解となる, **空間的に一様な解**が存在することがある. これは拡散の効果が消えた解であり, $u_t = f(u)$ の常微分方程式[6] で記述できる. この方程式は時間

[1] 方程式の解が多変数関数となるような偏微分を含む方程式である.
[2] $*Au_{xx} + 2Bu_{xy} + C_{yy} + Du_x + Eu_y + F = 0$ という形で偏微分方程式を表したとき, $B^2 - AC = 0$ になるもの
[3] x と t の値がある値のときに u がどのような値になるかの条件
[4] その現象を考えている領域の境界で成分がどうなるか (外に吸収される, 外への出入りがないなど) の条件
[5] N 次元ユークリッド空間と呼ばれる. $\mathbb{R}$ は実数全体の集合である. 日常的に使われる二次元, 三次元という概念を更に広く捉えたものだと思っておけば, この資料の概観を掴むのには特に問題ない.
[6] 偏微分ではない微分だけで記述される方程式. 比較的楽に解ける.

変数 t を含まない形であり, **力学系**と呼ばれる．また $f(a)=0$ となるような a を力学系の**平衡点**といい, $u=a$ は時間に依存しない解である.

単独反応拡散方程式の力学系 $u_t=f(u)$ の性質は単調減少, 単調増加, 定数のいずれかであるため f の挙動を解析することで完全に定まる．2 成分の (3) の場合では, $f(0,0)=0, g(0,0)=0$ で表される曲線 (**ヌルクライン**) を用いて考える．ヌルクラインの交点がこの力学系の平衡点になるなど, ヌルクラインは 2 成分反応拡散方程式の力学系の性質をよく表している．一方 3 成分以上の力学系を考えることは数学的には困難であり, 特別な仮定を置くなどして解析する必要がある．力学系理論は反応拡散方程式の解の挙動を解析するために欠かせないものとなっている他, 現代の力学に大きな影響を与えている.

1.1.2 定常解

t に依存しない解を**定常解**, 平衡解という．前節で述べた空間的に一様な解も定常解である.

定常解を $u=\varphi(x)$ とすると φ は

$$\Delta+f(\varphi)=0$$

を満たす．空間的に一様でない定常解が空間遠方で自明解[7] に近づく場合[8], この解は**局在パターン**, これをずらして重ね合わせたような解[9] は**スポットパターン**と呼ばれる．スポットパターンは牛などの表皮に見られる斑点模様の形成現象を表現することができる.

α というある定数に対して,

$$\varphi(x+\alpha)\equiv\varphi(x)$$

を満たす定常解を**周期パターン**といい, 中でも平面上の周期パターンは**ストライプパターン**と呼ばれる．これは文字通り縞模様の様相を表し, シマウマなどの表皮に見られる縞模様の発生を説明できる.

1.1.3 進行波解

波の伝播現象の中には反応と拡散の相互作用で説明できる波が存在する．例えば生物が棲息域を拡大する過程などは各個体が反応し拡散していく現象と考えることができる．このような進行波を反応拡散系では**進行波解**という形で扱うことができる.

$z=x-ct$(c は速度を表す定数) という新しい空間変数を定義して, 座標が動いていくような状態を考える．これを**動座標系**と呼ぶ．このとき $u(x,t)$ を $v(z,t)$ という形に置き換えると,

$$v_{zz}=u_{xx},\ -cv_z+v_t=u_t$$

が得られる. これを 1 に代入して整理すると, v は

$$v_t=u_{zz}+cv_z+f(v) \tag{3}$$

を満たしている.

u を動座標系で観測すると v のように止まって見えるということを考えると, u は動座標系 (3) の定常解となっているといえる．そこで $u=\varphi(x-ct)$ とおけば,

$$\varphi_{zz}+c\varphi_z+f(\varphi)=0 \tag{4}$$

を満たす. なお進行波解の性質として, $\varphi(z)$ が進行波解であるとき, 任意の定数 α について進行波解を空間的に動かした関数 $\varphi(z-\alpha)$ もまた解となる．このような進行波解の位置に関する自由度を**位相**[10] と呼ぶ.

[7] $u\equiv0$ となる解のこと. 多成分でも同様にすべての成分が恒等的に 0 となる解は自明解と呼ばれる.
[8] *この条件はユークリッドノルム $||x||$ を用いて $||x||\to\infty$ のとき $\varphi\to0$ と表せる.
[9] *反応項は非線形性をもつため単純に足し合わせたものは解ではないが, それに近いものを想定している.
[10] *topology とは別のものである.

進行波解はその波形によっていくつかのタイプに分類される. ある a, b に対し

$$\varphi(-\infty) = a,\ \varphi(\infty) = b,\ a \neq b \tag{5}$$

を満たす進行波解は**フロント型**と呼ばれる. また $\varphi(-\infty) = a,\ \varphi(\infty) = b$ という条件は, 解が無限遠方で空間的に一様な解 $u = a, b$ に近づくことを意味しているため, 空間的に一様な解の性質から $f(a) = f(b) = 0$ である必要がある. フロントとは前線という意味で, この進行波解は天気予報などに出てくる寒冷前線などと同じ形をしている. 具体的には前線が通過すると冷たい空気が流れ込み気温が急激に変わるということであり, 進行波の通過後に空間が別の状態に推移するような現象を表す.

一方で

$$\varphi(-\infty) = a,\ \varphi(\infty) = b,\ a = b = 0 \tag{6}$$

を満たす解は**パルス型**という. フロント型とは異なり, 進行波の通過後に元の状態に戻るような形である. 心電図などが例に挙げられる. このパルス型進行波解 (単にパルス解とも呼ぶ) をいくつか重ね合わせたものを特に**多重パルス解**, 重ね合わせる前の一つ一つのパルス解を**孤立パルス解**と呼ぶ. また, 波が空間的に周期性を持つ場合は**周期型**と呼ばれるが, 周期型を孤立パルス解の無限回の重ね合わせとして捉えられることもある.

1.1.4 その他の解

今までに述べた解は基本的な解であるが, 反応拡散方程式には複雑な解や独特な挙動を示す解も存在する. その中の一部を紹介する

- (時間) 全域解
  すべての時間, つまり $t \in \mathbb{R}$ で定義される解のことである. 本来は不適切である時間を $-$ 方向に動かすという操作をしても方程式を満たさなければならない解であり, 強い制限がかかっている. 定常解や進行波解は全域解であるが, これ以外に全域解が存在するかどうかは反応拡散方程式全体のふるまいにかかわる重要な問題である.

- (時間) 大域解
  全域ではなく大域的な時間, つまり $t > 0$ で定義される解である. 詳しくは次節で扱う.

- 連結解
  定常解ではない全域解の一つであり, 2 つの特徴的な解 (定常解, 進行波解, 時間周期解など) を結ぶような解である. 具体的には $t \to \pm 0$ としたときに 2 つの定常解に収束するような解で, 2 つの異なる定常解に収束する場合を**ヘテロクリニック解**, 同じ定常解に収束する場合を**ホモクリニック解**と呼ぶ.

- 爆発解
  反応項によっては有限の時間で解が無限大に発散することがある. このような現象を解の**爆発**という. 反応項の効果が拡散の効果を上回り加速的に働いたとき, 解が爆発することがある. 爆発した後に解は存在しないが, 爆発は特異性の発現の一種であり, どのような条件でどのように爆発が起こるかを理解するのは方程式の特異性を理解するために効果的である.

1.2 初期値問題

偏微分方程式を解くためには初期値問題の解の存在と一意性, そして滑らかさ[11] などを調べることが基本的な問題である. 一般に偏微分方程式では時間局所的な解[12] の存在すら自明ではない. しかし, 反応拡

[11] 微分可能性のことである. つまりどれだけ微分することができるか.
[12] 時間大域的でない解, つまりある時刻での解.

散方程式は放物型偏微分方程式の理論を応用することで他の偏微分方程式に比べると比較的容易に時間局所解の存在を示すことができる.

標準的な反応拡散方程式では解が有界[13]である限り解が存在する. そのため解の有界性を示すことができればその解は大域的に存在する. つまり, 時間大域解の存在がいえる. 逆に初期値問題の解が時間大域解でないことが分かれば, ある時刻で解は無限大に発散し, 解が爆発してしまうということがわかる.

1.3 解の安定性

安定性は定常解に小さな外乱を加えたときの挙動に関する性質である.

定常解を $u = \varphi(x)$ とする. 初期値が $u(x,0) = \varphi(x) + v_0(x)$ で与えられたとき, **初期外乱**を $v_0(x)$ と定義する. すなわち初期値から定常解までの距離である. このとき初期外乱が小さければすべての時間で方程式の解が定常解の近くに存在する場合, 安定しているという. 数式で表すと以下のように定義される[14]

定義 1.1 (安定性) 定常解 $u = \varphi(x)$ が**安定**であるとは, 任意の $\varepsilon > 0$ に対しある $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ が存在し, 初期外乱 $v(x)$ が

$$|v(x)| < \delta$$

を満たすならば解 $u(x,t)$ がすべての $t > 0$ に対して

$$|u(x,t) - \varphi(x)| < \varepsilon$$

を満たすことである.

逆に解が安定でないとき**不安定**という. また $t \to \infty$ のときに定常解に収束する, すなわち

$$|u(x,t) - \varphi(x)| < \varepsilon$$

を満たすならば**漸近安定**という. 漸近安定であり, ある定数 $C > 0$ と $\lambda > 0$ を用いて

$$|u(x,t) - \varphi(x)| < C\mathrm{e}^{-\lambda t}$$

を満たすとき**指数安定**という. 一方, 安定であるが漸近安定でないときは**中立安定**といい, この場合は時間経過と共に解が定常解に戻るとは限らない. 常解の安定性は局所的な性質であるが, 十分大きい範囲の初期値で解が定常解に収束する場合は**大域安定**であると呼べる.

また, 進行波解についても安定性を考えることができる. 進行波解は初期条件 $u(x,0) = \varphi(x)$ を見たし, 速度 c で動くことから, 初期外乱が小さいときに解が $\varphi(x - ct)$ の近くに留まれば進行波解は安定であるといえる. しかし進行波解には位相による自由度があったため波形が元の形に戻っても位相が戻るとはいえない. その点に注意し進行波解に関する安定性を定義する.

定義 1.2 (波形安定性) 進行波解 $u = \varphi(x)$ が**波形安定**であるとは, 任意の $\varepsilon > 0$ に対しある $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ が存在し, 初期値 $u(x,0)$ が

$$\sup_{x\in\mathbb{R}} |u(x,0) - \varphi(x)| < \delta$$

を満たすならば, がすべての $t > 0$ とある α[15]に対して

$$\sup_{x\in\mathbb{R}} |u(x,t) - \varphi(x - ct - \alpha)| < \varepsilon$$

を満たすことである.

[13] どんなに解が大きく (小さく) なってもある値より大きく (小さく) なることはないということ
[14] *ただし更に厳密には距離 $|x|$ としている部分をノルム (例えば一様ノルムなど) $||\cdot||$ で置き換えて書き直す必要がある
[15] 実際には $\alpha \in (0, \infty)$ すなわち無限に大きくはないという条件がある

1.4　線形化固有値問題

解の挙動についてのくわしい情報を得るための一つの方法で**固有値解析**と呼ばれる. 挙動を考えたい偏微分方程式の解やヤコビ行列を用いて, 他の解が表わせたと仮定すると線形化方程式と呼ばれる形に近似できる. この線形化方程式の解 $v(x,t) = \mathrm{e}^{\lambda t}\phi(x)$ を考えることを線形化固有値問題という. 線形化固有値問題が非自明解 ϕ をもつとき, そのときの λ の実部が正になることがあればそのような解は不安定であることがわかる. 単独反応拡散方程式の場合はすべての λ が負であれば解は安定し, 多成分反応拡散方程式に関しても解が局所安定するための必要条件となる.

2　FitzHugh-Nagumo 方程式

ポスターで発表した FitzHugh-Nagumo 方程式についての補足説明をする. まずは FitzHugh-Nagumo 方程式の元となった Hodgkin-Huxley 方程式について述べた後に FitzHugh-Nagumo 方程式について述べる.

2.1　Hodgkin-Huxley 方程式

神経生理学者であるホジキンとハックスレーは, ヤリイカの軸索に電極を突き刺し神経繊維上を伝わる電気信号の伝播課程を調べた. そしてその結果を 4 成分の偏微分方程式で記述した.

$$\begin{cases} u_t = & u_{xx} + f(u,v), \\ v_t = & g(u,v) \end{cases}$$

t	:	時間
x	:	神経に沿っての距離
u	:	神経の電位を表すスカラー関数
v	:	神経膜の状態を表す 3 次元ベクトル
f	:	$\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ の神経膜の働きを表す非線形関数
g	:	$\mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ の神経膜の働きを表す非線形関数

のような形で表される.

この方程式により A.L.Hodgkin と A.F.Huxley は神経興奮に関する基礎理論を立ち上げた. 実際に Hodgkin-Huxley 理論は認められ, 1963 年にノーベル生理学医学賞を受賞している. 一方で, 多くの非線形項を含む複雑な形をしているため数学的には扱いづらく解析が難しいという欠点があった.

2.2　FitzHugh-Nagumo 方程式とは

R.FitzHugh と J.Nagumo により,Hodgkin-Huxley 方程式の本質が損なわれないように一般化されたモデルである.

$$\begin{cases} u_t = & u_{xx} + h(u) - v, \\ v_t = & \varepsilon(u - \gamma v) \end{cases}$$

$\varepsilon > 0$ と $\gamma \geq 0$ は定数であり, h は普通

$$h(u) = u(1-u)(u-a) \quad \left(0 < a < \frac{1}{2}\right)$$

で与えられるが, 一般には h は u の滑らかな関数として,

$$\begin{aligned} h(0) = h(a) = h(1) = 0, \\ h'(0) < 0,\ h'(a) > 0,\ h'(1) < 0, \\ h(u) > 0 \quad (u \in (-\infty, 0) \cup (a, 1)), \\ h(u) < 0 \quad (u \in (0, a) \cup (1, \infty)), \\ \int_0^1 h(u)du > 0 \end{aligned}$$

を満たしていると仮定してもよい.

FitzHugh-Nagumo 方程式は実際の神経にみられる多くの現象を定性的に再現することができ, 数学的な解析も (Hodgkin-Huxley 方程式に比べると) 容易であることから多くの研究がなされてきた. それについて以降で説明する.

2.3　FitzHugh-Nagumo 方程式の自明解

普通の FitzHugh-Nagumo 方程式に対する反応方程式

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}u &= u(u-a)(u-1)-v, \\ \frac{d}{dt}v &= \varepsilon(u-\gamma v) \end{cases} \tag{7}$$

のヌルクラインを考える.

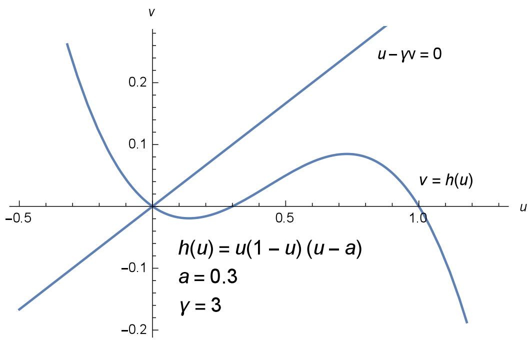

図 1: 反応方程式のヌルクライン

ヌルクラインから $t \to \infty$ のときすべての解は原点に収束することがわかる. また, 原点が平衡点であるので原点を神経の静止状態と仮定する.

初期値が原点近傍であれば軌道はその近くでとどまり原点に収束するのに対し, $(a, 0)$ の右側では外側に大きな軌道を描いた後に原点に収束する. この結果は, 実際の神経においては, 小さな刺激には反応せず, 閾値と呼ばれる臨界値より大きい刺激によって神経が興奮するという特徴をモデル化している. 一方, 興奮した後には閾値が高まるという実験結果があり, これを神経科学では不応期という. 神経が興奮した後には抑制因子が増加することで不応期が起きるのだが, 反応拡散方程式では 2 成分の相互作用ということで上手く不応期を表現している.

また, FitzHugh-Nagumo 方程式の自明解は**拡散誘導不安定性**[16] を生じない[17]ので自明解は線形安定[18]である. さらに γ が大きい[19]ならば, $t \to \infty$ で $(0, 0)$ に縮退する正不変[20]な縮小長方形[21]を構成でき, その縮小長方形は $(0, 0)$ の一点へと収束することから, 自明解は指数安定である.

2.4　FitzHugh-Nagumo 方程式の進行波解

FitzHugh-Nagumo 方程式はいくつかのタイプの解をもつ. まずその一つとしてパルス進行波解について述べる.

(7) の進行波解 $(u, v) = (\varphi(z), \psi(z)), z = x - ct$ は

$$\begin{cases} \varphi_{zz} + c\varphi_z + h(\varphi) - \psi &= 0, \\ c\psi + \varepsilon(\varphi - \gamma\psi) &= 0 \end{cases} \quad (z \in \mathbb{R})$$

[16] 多成分反応拡散方程式特有の性質で, 通常は安定で平衡状態となる空間的に一様な定常解が, 多成分の拡散項の影響によって不安定化し, 空間的に非一様な解へ推移すること.

[17] 線形化固有値問題について具体的に計算することでわかる

[18] 線形化固有値問題の固有値の実部がすべて負であること

[19] *$\gamma > -\frac{1}{h'(0)}$

[20] *相空間 (各時刻の解が属する関数空間) の部分閉集合に初期値が属するとき, すべての t¿0 においてその部分閉集合に解が属すること

[21] 部分的な形の正不変集合を組み合わせて作られた正不変長方形の内, 時間とともに縮小するもの

を満たす孤立パルス進行波解である.

2.4.1 孤立パルス進行波解の存在

孤立パルス進行波解の存在を示すには 3 次元力学系 $\frac{d}{dz}\boldsymbol{w} = F(\boldsymbol{w}; c)$ について調べればよい. ただし

$$\boldsymbol{w} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \varphi_z \\ \psi \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 \quad F = \begin{pmatrix} \varphi_z \\ -c\varphi_z - h(\varphi+\psi) \\ -\dfrac{\varepsilon}{c}(\varphi - \gamma\psi) \end{pmatrix} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$$

である. $h(0) = 0$ と仮定するとすべての c に対し$\boldsymbol{w}$=0 はこの力学系の平衡点である. フィッツフュー南雲方程式がパルス解をもつことと $\frac{d}{dz}\boldsymbol{w} = F(\boldsymbol{w}; c)$ が $z \to \pm\infty$ で $\boldsymbol{w}(z) \to 0$ を満たす非自明解をもつことは同値である. これを言い換えると原点と原点を結ぶホモクリニック軌道が存在することを示せばよい.

一般の 2 成分反応拡散方程式の進行波解を調べるためには 4 次元の力学系を考える必要があるが, FitzHugh-Nagumo 方程式は 3 次元の力学系を考えれば良いため, 軌道の追跡が若干容易である.

2.4.2 孤立パルス進行波解の安定性

この 3 次元力学系の解 $\boldsymbol{w}$ が平衡点 $\boldsymbol{0}$ の近傍にあるとき,$\boldsymbol{w}$ の挙動は線形化方程式

$$\frac{d}{dz}\boldsymbol{w} = J(c)\boldsymbol{w}$$

で近似される. ただし, J は $\boldsymbol{F}$ の $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$ におけるヤコビ行列[22]である.

シューティング法を用いて中間値の定理などを用いることでホモクリニック軌道の存在がいえる. その結果を図示すると, 解の進行する速度が速く安定しているパルス解と遅く不安定なパルス解の二つが存在することがわかる. この二つのパルス解を**特異摂動法**, **エバンス関数**と呼ばれる手法で分析すると, 速いパルス解は安定であることがわかる. 安定なパルス解が存在するがそれが大域的でないということは, 自明解に小さな外乱を加えても解は自明解に戻るが, 大きな外乱を加えると孤立パルス解に収束することを示している. 小さな刺激で電気信号は発生しないが, 大きな刺激によって一度発生した電気信号は情報を安定して他の神経細胞に伝播・伝達できるということが明らかになる. つまり小さな刺激では電気信号の情報が失われないということであり, 神経繊維が理想的な信号伝送回路となっていることを数学的に保証している.

2.4.3 その他の解について

多重パルス解や周期パルス解の存在も**分岐理論**[23]を用いることで示すことができる. 多重パルス解の性質からは複数のパルス信号間に斥力と引力といった相互作用が働くことがわかる.

3 参考文献

[1] 柳田英二, 反応拡散方程式, 東京大学出版会, 2015 年.

[22] $J(c) := \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{0}; c)$

[23] 定常解や進行波解の挙動がパラメータの値に滑らかに依存するとき, その変化に伴って解が枝分かれすることがある. この分岐後の解について考える理論である.