物理学报 Acta Physica Sinica

Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

反应扩散模型在图灵斑图中的应用及数值模拟

张荣培 王震 王语 韩子健

Application of reaction diffusion model in Turing pattern and numerical simulation

Zhang Rong-Pei Wang Zhen Wang Yu Han Zi-Jian

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 67, 050503 (2018) DOI: 10.7498/aps.20171791
在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.20171791
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I5

反应扩散模型在图灵斑图中的应用及数值模拟*

张荣培[1)†] 王震[2)] 王语[1)] 韩子健[1)]

1) (沈阳师范大学数学与系统科学学院, 沈阳 110034)

2) (山东科技大学数学与系统科学学院, 青岛 266590)

(2017 年 8 月 6 日收到; 2017 年 11 月 6 日收到修改稿)

反应扩散方程模型常被用于描述生物学中斑图的形成. 从反应扩散模型出发, 理论推导得到Gierer-Meinhardt 模型的斑图形成机理, 解释了非线性常微分方程系统的稳定常数平衡态在加入扩散项后会发生失稳并产生图灵斑图的过程. 通过计算该模型, 得到图灵斑图产生的参数条件. 数值方法中采用一类有效的高精度数值格式, 即在空间离散条件下采用 Chebyshev 谱配置方法, 在时间离散条件下采用紧致隐积分因子方法. 该方法结合了谱方法和紧致隐积分因子方法的优点, 具有精度高、稳定性好、存储量小等优点. 数值模拟表明, 在其他条件一定的情况下, 系统控制参数 κ 取不同值对于斑图的产生具有重要的影响, 数值结果验证了理论结果.

关键词: 反应扩散方程, Gierer-Meinhardt 模型, 图灵斑图, Chebyshev 谱方法

PACS: 05.45.–a, 05.65.+b, 82.40.Ck, 02.70.Hm **DOI:** 10.7498/aps.67.20171791

1 引 言

斑图是在空间或时间上具有某种规律性的非均匀宏观结构, 普遍存在于自然界. 1952 年, 著名的英国数学家图灵把他的目光转向生物学领域, 用一个反应扩散系统成功地说明了某些生物体表面图纹产生的原理[1]. 图灵从数学角度表明, 在反应扩散系统中, 稳定状态会在某些条件下失稳, 并自发产生空间定态图纹, 此斑图通常称为图灵斑图.

经过多年的研究, 各界学者利用反应扩散系统预测得到了更多的图灵斑图, 在理论和实验方面取得了许多重要成果. 他们证实了化学系统中图灵斑图的形成[2], 讨论自催化反应中的动力学行为, 探讨此类耦合反应扩散体系中影响图灵斑图的因素[3]. 给出 Gray-Scott 模型、Brusselator 模型等系统扩散引起不稳定的数学机理[4], 并描述了 Gierer-Meinhardt, Lengyel-Epstein 等模型的某些动力学行为 (性质)[5,6]. 最近几年, 图灵斑图在实验方面取得一系列最新的进展, Copie 等[7] 运用实验在一个双稳态被动非线性共振器中探讨了图灵调制和法拉第参数不稳定性的相互作用; Tompkins 等[8] 利用微流体化学室证实图灵理论体系, 并观测到第七种时空模式; Lacitignola[9] 研究了图灵不稳定现象的发生条件, 论述了具体形态的电化学反应扩散模型在一个球面上的图案形成的特性; Gaskins 等[10] 在二氧化氯碘丙二酸反应实验中, 通过添加卤化钠盐溶液得到新的图灵斑图.

在这些系统中存在两种化学反应物质, 它们不仅能相互作用, 而且还能进行独自扩散. 事实上, 图灵斑图的产生对应的是一个非线性反应动力学过程与一种特殊扩散过程的耦合. 这个特殊的扩散过程由于两种因子的扩散速度不同会发生失稳, 这就是图灵斑图产生的机理. 在数学上, 图灵斑图可以用无量纲化的反应扩散方程组描述[11], 即

* 国家自然科学基金 (批准号: 61573008, 61703290)、国防科技重点实验室基金 (批准号: 6142A050202) 和辽宁省教育厅基金 (批准号: L201604) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: rongpeizhang@163.com

 http://wulixb.iphy.ac.cn

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = c\Delta u + f(u,v), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} = d\Delta u + g(u,v), \end{cases} \tag{1}$$

式中u和v是系统变量, 分别代表参与化学反应的两种物质的浓度; c和d是扩散系数, t是时间变量, $f(u,v)$和$g(u,v)$表示反应项. 设$\varOmega$为$\mathbb{R}^N$中带有光滑边界的有界区域, $\varOmega=[0,a]\times[0,b]$, 边界为$\partial\varOmega$, 边界条件为齐次Neumann边界条件, 即$\left.\dfrac{\partial u}{\partial n}\right|_{\partial\varOmega}=\left.\dfrac{\partial v}{\partial n}\right|_{\partial\varOmega}=0$, 其中$n$表示边界上单位外法向.

由于(1)式为耦合的非线性反应扩散方程, 很难得到其精确解. 近年来, 许多学者用有限差分方法、有限元方法、谱方法等[12–14]多种数值方法求解(1)式, 这些方法各有特点. 相比于有限元方法和有限差分方法的低阶精度, 谱方法[14]仅用少量的节点, 采用Legendre, Chebyshev等适合的正交多项式离散即可达到指数阶收敛的谱精度. 图灵斑图在空间上的结构具有一定的规律, 且解比较光滑, 因此采用谱方法离散是可行的. 常用的谱配置方法主要有Fourier配置法[15], Chebyshev配置法[16], Hermite配置法等[17]. 由于本文考虑的(1)式边界条件为齐次Neumann边界条件, 因此采用Chebyshev配置方法求解(1)式.

对(1)式进行空间离散后, 得到的是刚性的非线性常微分方程组(ODEs). 显式时间离散方法虽可以用迭代的方法求解, 但其对时间步长有严格的约束; 隐式方法虽然可以允许大的时间步长, 但是对于阶数非常大的非线性方程组的求解问题十分复杂, 这对于全隐式方法来说是一个巨大的挑战. 由于谱配置法所得到的谱微分矩阵是满的, 显然利用追赶法等代数线性方程组的快速解法是不合适的, 因此交替方向隐式方法在这里并不适用. 本文采用紧致隐积分因子(compact implicit integration factor, cIIF) 方法求解ODEs. 2006年Nie等[18]以隐积分因子(IIF)方法为基础发展了cIIF方法. 传统的隐积分因子方法在求解高维问题时, 离散矩阵的指数运算的存储量和运算量非常大, 导致运算速度缓慢. 紧致隐积分因子方法[19]通过引入离散矩阵的紧致表达式并在各个方向进行矩阵的指数运算, 使得中央处理器(CPU) 的存储大大降低, 计算速度也得到了显著提高.

本文内容安排如下: 第2节对反应扩散方程组进行线性分析, 通过特征值解释图灵斑图的数学机理, 然后以Gierer-Meinhardt模型为例分析系统处于稳定状态和不稳定状态时各参数需要满足的条件, 进而探索斑图形成需要满足的条件; 第3节研究数值方法, 在空间离散条件下采用Chebyshev谱方法, 时间离散条件下采用紧致隐积分因子方法, 用MATLAB进行编程求解; 第4节给出大量数值实验并对理论分析结果进行验证.

2 图灵斑图的形成

2.1 斑图形成的数学机理

首先考虑(1)式没有扩散项, 假设存在惟一的均匀定态解(u_0,v_0), 即常数u_0,v_0满足

$$\begin{cases} f(u_0,v_0)=0, \\ g(u_0,v_0)=0. \end{cases} \tag{2}$$

令$U=u-u_0$, $V=v-v_0$, 并在(u_0,v_0)处线性化后得到如下系统:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U \\ V \end{bmatrix}, \tag{3}$$

式中$c_{11}=f_u(u_0,v_0)$, $c_{12}=f_v(u_0,v_0)$, $c_{21}=g_u(u_0,v_0)$, $c_{22}=g_v(u_0,v_0)$. 均匀定态解(u_0,v_0)在没有扩散时是稳定的, 这等价于相应的特征值问题的矩阵$\begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix}$的特征值实部是负数.

考虑加入扩散项后的反应扩散方程组((1)式). 如果此时产生斑图, 即(u_0,v_0)是不稳定的, 要求特征值有正实部. 所谓不稳定, 体现为两种反应物的扩散速度不同, 从而引起失稳. 对(1)式作线性化处理, 研究特征值正实部引起的线性不稳定性, 进而推导出原方程的不稳定性. 对均匀定态解(u_0,v_0)作一个微扰, 可得线性微扰方程为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial U}{\partial t} = c\Delta U + c_{11}U + c_{12}V, \\ \dfrac{\partial V}{\partial t} = d\Delta V + c_{21}U + c_{22}V. \end{cases} \tag{4}$$

求解如下方程可得相应的特征值:

$$\begin{cases} c\Delta U + c_{11}U + c_{12}V = \lambda U, \\ d\Delta U + c_{21}U + c_{22}V = \lambda V, \end{cases} \tag{5}$$

式中λ为特征值. 只要(5)式中的特征值有正实部, 则(u_0,v_0)对于(1)式是不稳定的. 考虑到齐次

Neumann 边界条件, 得到 (5) 式所对应的特征值为

$$\lambda=\frac{1}{2}\bigg\{-d\mu-c\mu+c_{11}+c_{22}\pm\Big[\left(d\mu+c\mu-c_{11}-c_{22}\right)^2-4\left(d\mu^2+d\mu c_{11}-c_{12}c_{21}-c\mu c_{22}+c_{11}c_{22}\right)\Big]^{\frac{1}{2}}\bigg\}. \tag{6}$$

具体推导过程见附录 A.

2.2　Gierer-Meinhardt 模型

生物的发育过程是复杂的, 其中重要的是形态形成阶段, 与之对应的是生物体内器官的形成. 由于该阶段的重要性, 渐渐形成一个新的领域——形态学, 主要研究导致细胞分化和定位因素的浓度对组织器官的影响. Gierer-Meinhardt 模型是由 Gierer 和 Meinhardt 在研究激活物和抑制剂两种不同物质的产生和扩散时建立的[20], 之后 Gierer 和 Meinhardt 利用数值方法导出一维和二维空间区域中上述系统产生多样斑图的条件. Gierer-Meinhardt 模型被广泛应用于形态形成过程中一些基本现象的研究, 最近的一些工作可以参见文献 [21—23].

以 Gierer-Meinhardt 模型为例, 结合上述理论分析, 计算产生斑图时需要满足的条件. 取 (1) 式中

$$c=\varepsilon^2,\quad d=\frac{\kappa}{\eta},\quad f(u,v)=\frac{u^2}{v}-u,$$
$$g(u,v)=\frac{u^2}{\varepsilon\eta}-\frac{v}{\eta},$$

其中系数 κ,η,ε 为系统的控制参数, 固定 $\eta=0.1$, $\varepsilon=0.04$. 由此得到线性化系统 (3) 式中的系数为

$$c_{11}=f_u=\frac{2u}{v}-1=1,$$
$$c_{12}=f_v=-\frac{u^2}{v^2}=-1,$$
$$c_{21}=g_u=\frac{2u}{\varepsilon\mu}=20,$$
$$c_{22}=g_v=-\frac{1}{\mu}=-10.$$

易得该系统的特征值为 $\lambda_1=-1.2984$, $\lambda_2=-7.7016$, 此时系统是稳定的.

加入扩散项后, 原方程组对应的特征问题为

$$\begin{cases}\varepsilon^2\Delta U+U-V=\lambda U,\\ 10\kappa\Delta V+20U-10V=\lambda V.\end{cases} \tag{7}$$

相应的特征方程为

$$\lambda^2-\left(-\varepsilon^2\eta+1-10\kappa\eta-10\right)\lambda+\left(\varepsilon^2\eta-1\right)\left(10\kappa\eta+10\right)+20=0. \tag{8}$$

为使 (8) 式含有正实部的特征值, 需要考虑两种情况.

第一种情况是两个特征值异号, 则应满足

$$\begin{aligned}\lambda_1\lambda_2=&\left(\varepsilon^2\mu-1\right)\left(10\kappa\mu+10\right)+20\\=&\,10\left[\kappa\varepsilon^2\mu^2+\left(\varepsilon^2-\kappa\right)\mu-1\right]+20\\<&\,0.\end{aligned} \tag{9}$$

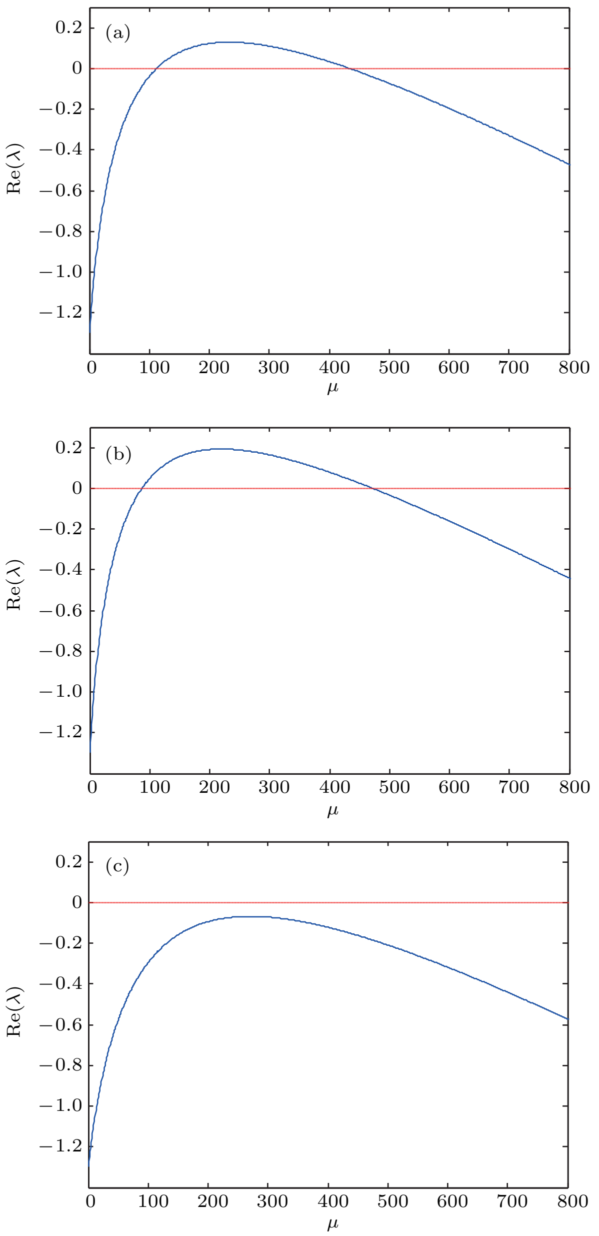

图 1　特征值的实部 Re(λ) 随参数的变化　(a) $\kappa=0.0128$; (b) $\kappa=0.0152$; (c) $\kappa=0.008$

Fig. 1. Real part Re(λ) of eigenvalues varying with parameters: (a) $\kappa=0.0128$; (b) $\kappa=0.0152$; (c) $\kappa=0.008$.

经过化简可以得到 $k\varepsilon^2\mu^2+\left(\varepsilon^2-k\right)\mu-1<0$, 此时应满足 $\left(\varepsilon^2-k\right)^2-4k\varepsilon^2>0$, 得 $k>3\varepsilon^2+2\sqrt{2}\varepsilon^2=0.0093248$.

第二种情况是两个特征值都是正的, 应满足

$$\begin{cases}\left(\varepsilon^2\eta-1\right)\left(10\kappa\eta+10\right)+20>0,\\ \dfrac{1}{2}\left(-\varepsilon^2\eta+1-10\kappa\eta-10\right)>0,\end{cases} \tag{10}$$

此时 κ 无解.

由于反应扩散方程组联系于解析半群, 所以线性化后的正实部特征值引起的不稳定性可以推导出原方程组的不稳定性. 故当 $\kappa>\kappa_0=0.0093248$ 时, 系统处于不稳定状态, 因而系统能够产生斑图. 特征值的实部 $\mathrm{Re}(\lambda)$ 在参数 κ 取不同值时的变化如图 1 所示.

从图 1 可以看出, 当 $\kappa=0.0128>\kappa_0$ 和 $\kappa=0.0152>\kappa_0$ 时, 特征值的实部会出现正值, 此时系统不稳定; 当 $\kappa=0.008<\kappa_0$ 时, 特征值的实部始终为负, 系统最后会达到稳定状态. 第 3 节将用数值算例验证该结论.

3 数值方法

3.1 Chebyshev 谱配置法

将求解区域 $[-1,1]^2$ 离散为 Gauss-Lobatto 网格, 即

$$T_{\mathrm{h}}=\Big\{\left(x_i,y_j\right)=\left(\cos\frac{\pi i}{N_x},\cos\frac{\pi j}{N_y}\right),\\ i=0,1,\cdots,N_x,\quad j=0,1,\cdots,N_y\Big\},$$

其中 N_x 和 N_y 是正整数. 对于一般的求解区域 $\varOmega=[a,b]\times[c,d]$, 可以采用公式

$$X=\frac{2x-(a+b)}{b-a},\quad Y=\frac{2y-(c+d)}{d-c}$$

将区域转化为 $[-1,1]^2$. 在网格 T_{h} 中将 $u\left(x,y\right)$ 数值解定义为矩阵形式, $\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{(N_x-1)\times(N_y-1)}$,

$$\boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}u_{1,1} & u_{1,2} & \cdots & u_{1,N_y-1}\\ u_{2,1} & u_{2,2} & \cdots & u_{2,N_y-1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ u_{N_x-1,1} & u_{N_x-1,2} & \cdots & u_{N_x-1,N_y-1}\end{pmatrix}, \tag{11}$$

式中 $u_{i,j}$ 表示 u 在网格点 (x_i,x_j) 的数值解. 引入 Chebyshev 一阶微分矩阵 $\boldsymbol{D}^{(1)}=\left(d_{i,j}^{(1)}\right)$ 和二阶微分矩阵 $\boldsymbol{D}^{(2)}=\left(d_{i,j}^{(2)}\right)$ (具体推导过程见附录B). 则 $u\left(x,y\right)$ 关于 x 的二阶偏导数在配置点的值, 可以用矩阵乘积的形式近似为 $\left(\dfrac{\partial^2u}{\partial x^2}\Big|_{i,j}\right)=\boldsymbol{A}_x\boldsymbol{U}$. 矩阵 $\boldsymbol{A}_x$ 是在 Chebyshev 二阶微分矩阵基础上考虑 Neumann 边界条件得到的,

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{A}_x=\left[a_{i,j}\right],i,j=1,2,\cdots,N_x-1,\\ &a_{i,j}=d_{i,j}^{(2)}+\frac{1}{e}\left(b_{0,j}d_{i,0}^{(2)}+b_{N_x,j}d_{i,N_x}^{(2)}\right),\\ &i,j=1,2,\cdots,N_x-1,\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}e&=d_{N_x,N_x}^{(1)}d_{0,0}^{(1)}-d_{0,N_x}^{(1)}d_{N_x,0}^{(1)},\\ b_{0,j}&=-d_{N_x,N_x}^{(1)}d_{0,j}^{(1)}+d_{0,N_x}^{(1)}d_{N_x,j}^{(1)},\\ b_{N_x,j}&=-d_{0,0}^{(1)}d_{N_x,j}^{(1)}+d_{N_x,0}^{(1)}d_{0,j}^{(1)},\\ &j=1,2,\cdots,N_x-1.\end{aligned}$$

同样地, 对于 y 的二阶偏导数, 有 $\left(\dfrac{\partial^2u}{\partial y^2}\Big|_{j,k}\right)=\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}_y$, 其中矩阵 $\boldsymbol{A}_y$ 定义同 $\boldsymbol{A}_x$. 借助谱微分矩阵, 可将方程中的 Laplace 算子离散成矩阵乘积的形式, 即 $\left((\Delta u)_{i,j}\right)=\boldsymbol{A}_x\boldsymbol{U}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}_y$. 将 Chebyshev 谱配置方法应用于反应扩散方程, 得到其半离散形式为

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{U}}{\mathrm{d}t}=c\left(\boldsymbol{A}_x\boldsymbol{U}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}_y\right)+\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{U}\right),\\ \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{V}}{\mathrm{d}t}=d\left(\boldsymbol{A}_x\boldsymbol{V}+\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}_y\right)+\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{V}\right),\end{cases} \tag{12}$$

式中 $\left(\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{U}\right)\right)_{i,j}=f\left(u_{i,j}\right),\left(\boldsymbol{G}\left(\boldsymbol{V}\right)\right)_{i,j}=g\left(v_{i,j}\right)$.

3.2 紧致隐积分因子法

将对空间离散后得到的非线性常微分方程组 ((12) 式) 采用紧致隐积分因子方法进行时间离散. 定义时间步长为 $\tau=\Delta t$, 第 n 层时间步为 $t_n=n\tau,n=0,1,2,\cdots$. 在 (12) 式两端同时左乘指数矩阵 e^{-A_xt}, 右乘指数矩阵 e^{-A_yt}. 为描述方便, 取 (10) 式 $c=1$, $d=1$, 可将 (12) 式中第一个等式写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathrm{e}^{-A_xt}\boldsymbol{U}\,\mathrm{e}^{-A_yt}\right)=\mathrm{e}^{-A_xt}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{U}\right)\mathrm{e}^{-A_yt}. \tag{13}$$

将时间离散为 $0=t_0<t_1<\cdots$, 将 (13) 式在一个时间步长内关于时间积分, 并用梯形公式近似可得二阶紧致隐积分因子格式为

$$\mathrm{e}^{-A_xt_{n+1}}\boldsymbol{U}_{n+1}\,\mathrm{e}^{-A_yt_{n+1}}-\mathrm{e}^{-A_xt_n}\boldsymbol{U}_n\,\mathrm{e}^{-A_yt_n}\\ =\frac{\Delta t}{2}\Big[\mathrm{e}^{-A_xt_{n+1}}\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{U}_{n+1}\right)\mathrm{e}^{-A_yt_{n+1}}$$

$$+\, \mathrm{e}^{-A_x t_n} \boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_n)\, \mathrm{e}^{-A_y t_n}\Big], \tag{14}$$

进一步化简得

$$\boldsymbol{U}_{n+1} = \mathrm{e}^{A_x \Delta t}\left[\boldsymbol{U}_n + \frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_n)\right]\mathrm{e}^{A_y \Delta t} + \frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_{n+1}). \tag{15}$$

在非线性方程组(13)式中, 右端第一项可以通过矩阵乘积得到, 右端第二项采用Picard迭代方法求解:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{U}_{n+1,k+1} \\ &= \mathrm{e}^{A_x \Delta t}\left[\boldsymbol{U}_n + \frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_n)\right]\mathrm{e}^{A_y \Delta t} \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{U}_{n+1,k}), \quad k = 0, 1, \cdots. \end{aligned} \tag{16}$$

同理处理(12)式中第二个等式可得

$$\boldsymbol{V}_{n+1} = \mathrm{e}^{A_x \Delta t}\left[\boldsymbol{V}_n + \frac{\Delta t}{2}G(\boldsymbol{V}_n)\right]\mathrm{e}^{A_y \Delta t} + \frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{G}(\boldsymbol{V}_{n+1}).$$

该方法中矩阵 $\mathrm{e}^{A_x \Delta t}$ 和 $\mathrm{e}^{A_y \Delta t}$ 的阶数分别为 $N_x \times N_x$ 和 $N_y \times N_y$. 在空间网格剖分量很大时, 该方法可以降低存储量和运算量, 使计算速度更快.

4 数值算例

对于前述Gierer - Meinhardt模型, 取 $\Omega = (-1,1)\times(-1,1)$, $\eta = 0.1$, $c = 0.04$, κ 是不固定的参数. 设

$$\begin{pmatrix} u(x,y,0) \\ v(x,y,0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1^0(x,y) \\ g_2^0(x,y) \end{pmatrix},$$

其中

$$g_1^0 = \frac{1}{2}\left[1 + 0.01\sum_{k=1}^{20}\cos\left(\frac{k\pi y}{2}\right)\right] \times \operatorname{sech}^2\left(\frac{\sqrt{x^2+y^2}}{2c}\right),$$

$$g_2^0 = \frac{\cosh\left(1-\sqrt{x^2+y^2}\right)}{3\cosh 1}.$$

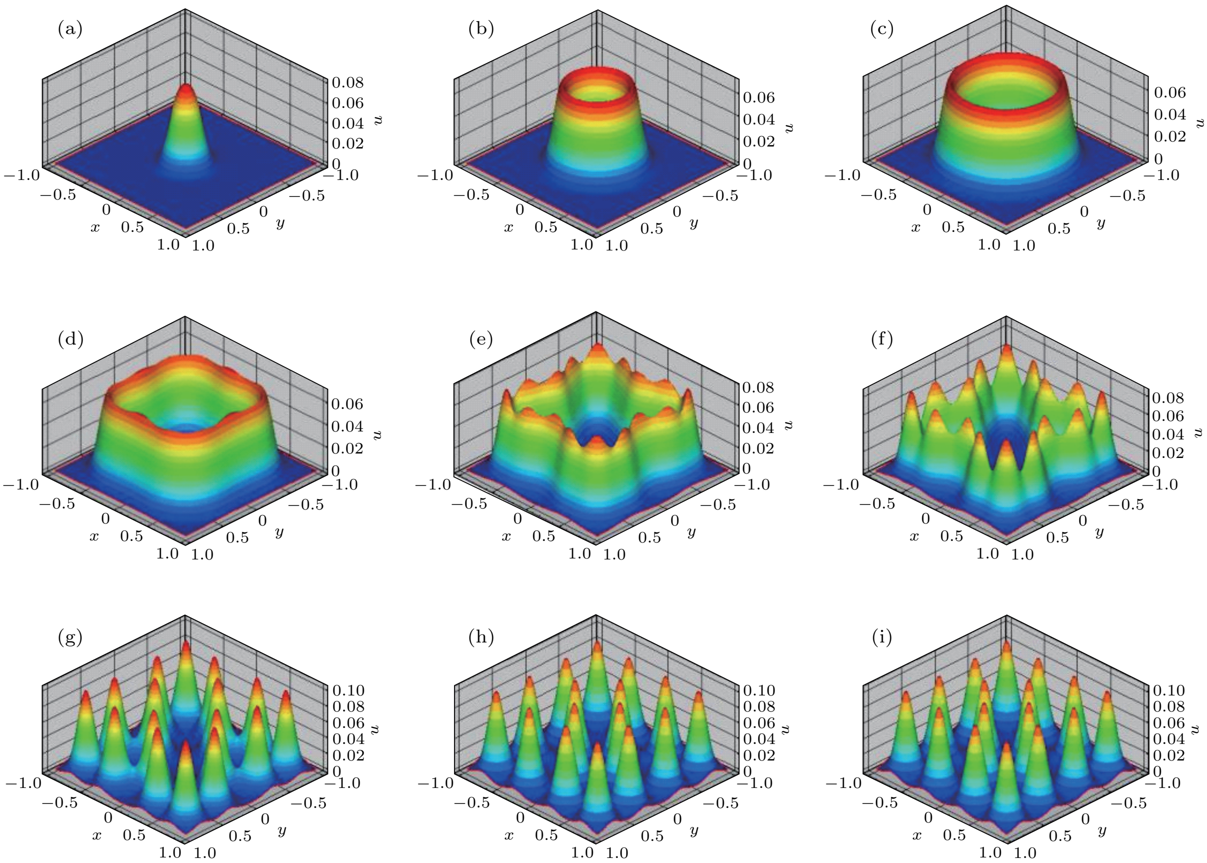

图2　取 $\kappa = 0.0128$ 时Gierer-Meinhardt模型形成的斑图　(a) $t = 20$; (b) $t = 80$; (c) $t = 170$; (d) $t = 270$; (e) $t = 320$; (f) $t = 340$; (g) $t = 500$; (h) $t = 600$; (i) $t = 900$

Fig. 2. Turing patterns in Gierer-Meinhardt model when $\kappa = 0.0128$: (a) $t = 20$; (b) $t = 80$; (c) $t = 170$; (d) $t = 270$; (e) $t = 320$; (f) $t = 340$; (g) $t = 500$; (h) $t = 600$; (i) $t = 900$.

4.1 数值算例I

取$\kappa = 0.0128$, $N = 100$, $h = 2/100 = 0.02$, $\tau = 0.1h$, t取图2所示各值时, 得到对应的图像. 由图2可知, 随着时间的推移, 初始扰动不断增强扩大, 最终形成清晰的斑图.

4.2 数值算例II

取$\kappa = 0.0152$, t取图3所示各值, 其他参数与算例I相同, 可得到t取不同值时对应的图像. 由图3可知, 随着时间的推移, 初始扰动不断增强扩大, 最终形成清晰的斑图.

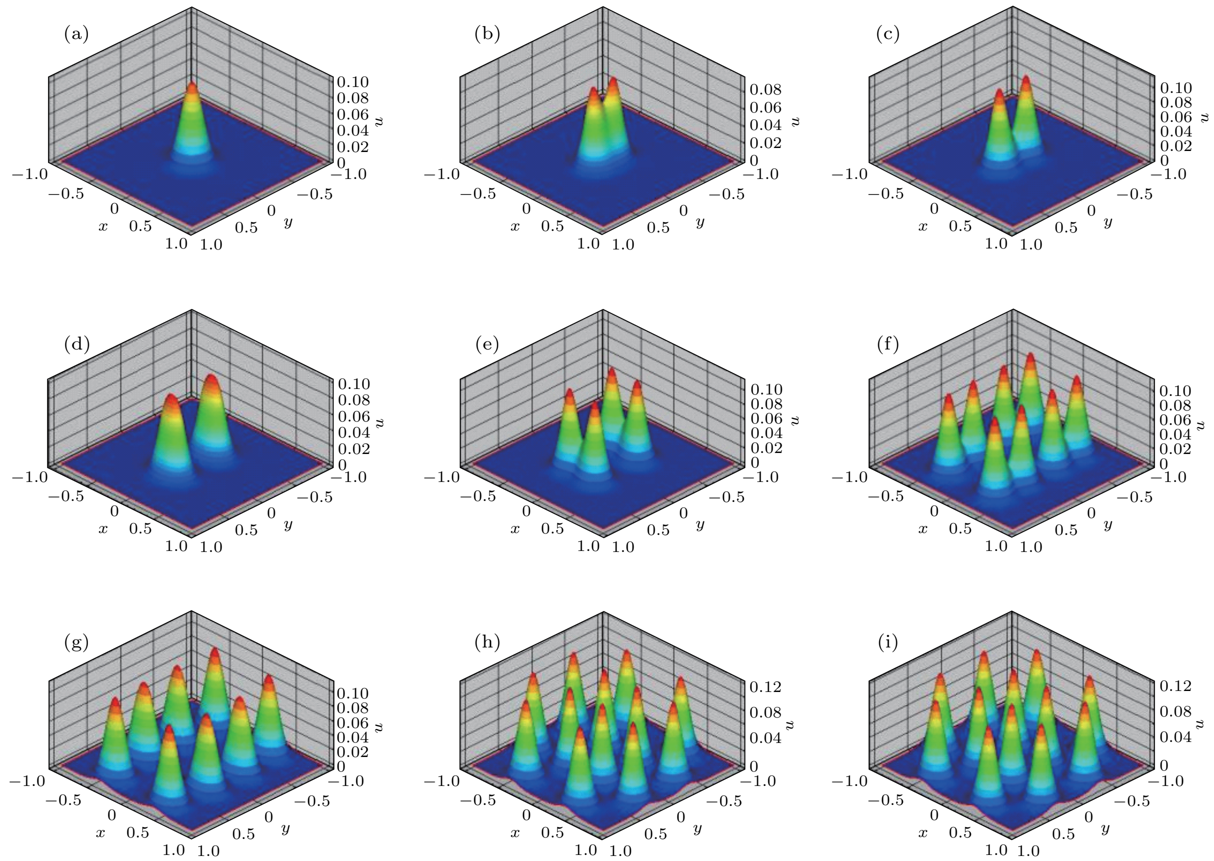

图3　取$\kappa = 0.0152$时Gierer-Meinhardt模型形成的斑图　(a) $t = 30$; (b) $t = 80$; (c) $t = 90$; (d) $t = 140$; (e) $t = 160$; (f) $t = 290$; (g) $t = 520$; (h) $t = 620$; (i) $t = 990$

Fig. 3. Turing patterns in Gierer-Meinhardt model when $\kappa = 0.0152$: (a) $t = 30$; (b) $t = 80$; (c) $t = 90$; (d) $t = 140$; (e) $t = 160$; (f) $t = 290$; (g) $t = 520$; (h) $t = 620$; (i) $t = 990$.

4.3 数值算例III

取$\kappa = 0.008$, 其他取值与算例II相同, t取不同值时对应的图像如图4所示. 由图4可知, 随着时间的推移, 系统达到稳定状态, 反应扩散模型不能形成斑图.

由数值模拟结果来看, 其他条件一定的情况下, κ取不同值对于产生斑图有重要的影响. 数值模拟结果与理论结果一致.

此外, 我们也对周期性边界条件的Gierer-Meinhardt模型采用Fourier谱方法进行数值求解, 结果显示周期边界条件对斑图的形状几乎没有影响.

5 结　论

介绍了图灵斑图形成的数学机理, 并结合Gierer-Meinhardt模型, 分析系统不稳定状态的各系数需要满足的条件, 即产生斑图的条件. 运用紧致隐积分因子方法大大减少了存储和CPU运算时间, 该方法对于大时间数值模拟是一个高效、高精度的数值方法. 数值算例模拟了斑图形成的过程, 验证了理论分析结果. 这些结论还可应用于求解带有分数阶的反应扩散方程组.

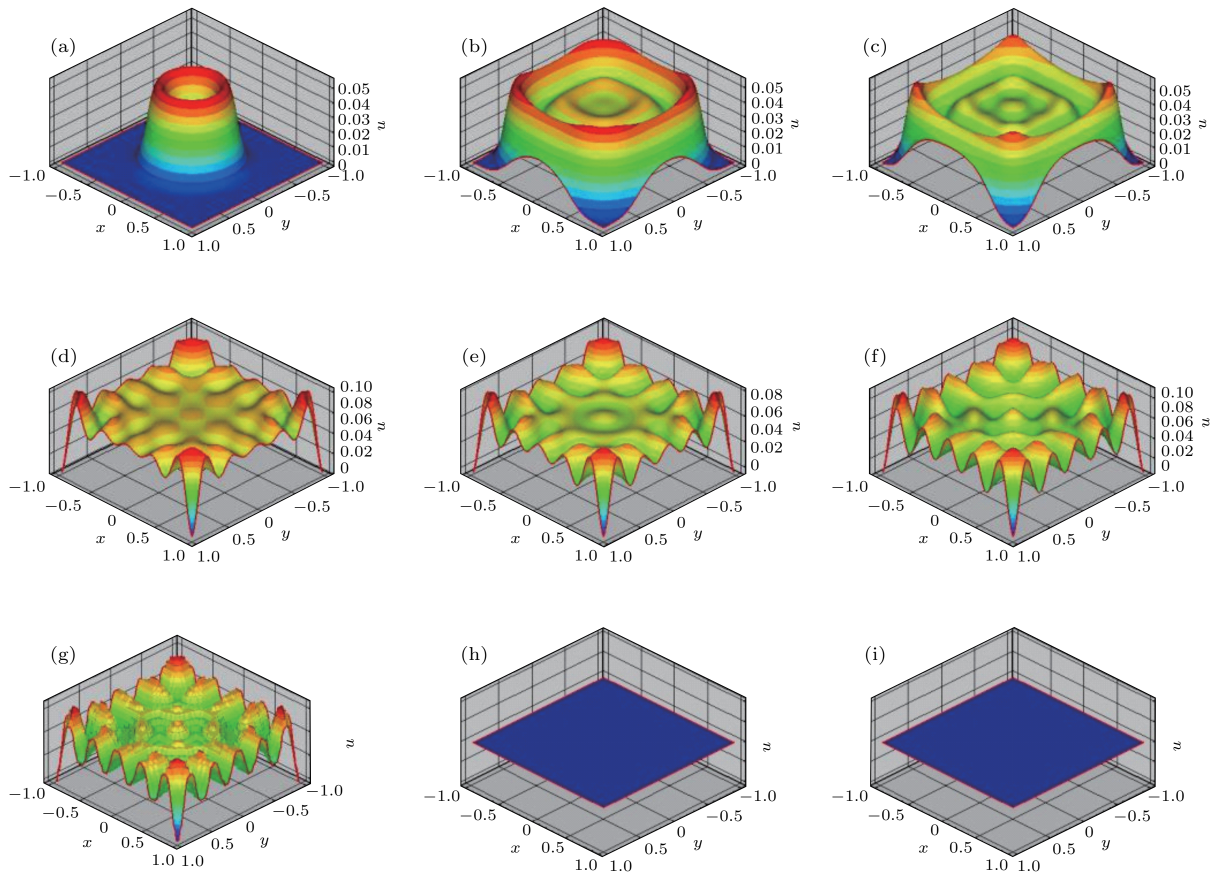

图4　取 $\kappa = 0.008$ 时 Gierer-Meinhardt 模型形成的斑图　(a) $t = 30$; (b) $t = 80$; (c) $t = 90$; (d) $t = 140$; (e) $t = 160$; (f) $t = 220$; (g) $t = 290$; (h) $t = 270$; (i) $t = 990$

Fig. 4. Turing patterns in Gierer-Meinhardt model when $\kappa = 0.008$: (a) $t = 30$; (b) $t = 80$; (c) $t = 90$; (d) $t = 140$; (e) $t = 160$; (f) $t = 220$; (g) $t = 290$; (h) $t = 270$; (i) $t = 990$.

附录A　图灵斑图的形成机理

首先在区域 $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ $(N = 1, 2)$ 内考虑带有齐次 Neumann 边界条件的 Laplace 算子的特征值问题. 一维情况下, 特征值问题为

$$\begin{cases} u'' = \lambda u, \quad 0 < x < a, \\ u'(0) = u'(a) = 0, \end{cases} \tag{A1}$$

式中 $a \in \mathbb{R}^+$. 特征值问题可表示为 $\mu^2 - \lambda = 0$, 解得 $\mu = \pm\sqrt{\lambda}\mathrm{i}$. 只有 $\lambda < 0$ 时可解得特征值 $\lambda_k = -(k\pi/a)^2$, 且特征值所对应的特征函数为 $\varphi_k = \cos\dfrac{k\pi}{a}x$ $(k \in \mathbb{Z})$.

在二维情况下, 特征值问题为

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u, \Omega = [0, a] \times [0, b], \\ \left.\dfrac{\partial u}{\partial n}\right|_{\partial\Omega} = 0, \end{cases} \tag{A2}$$

式中 $a, b \in \mathbb{R}^+$, 应采用分离变量法求解特征值. 设 $u = X(x)Y(y)$, 代入方程得 $-\left(\dfrac{X''}{X} - \dfrac{Y''}{Y}\right) = \lambda$. 设 $X'' = \lambda_1 X, Y'' = \lambda_2 Y$, 且 $-(\lambda_1 + \lambda_2) = \lambda$, 解得 $\lambda_{1k} = -\left(\dfrac{k\pi}{a}\right)^2$, $\lambda_{2l} = -\left(\dfrac{l\pi}{b}\right)^2$. 故特征值为 $\lambda_{k,l} = -(\lambda_1 + \lambda_2) = \left(\dfrac{k\pi}{a}\right)^2 + \left(\dfrac{l\pi}{b}\right)^2$, 且特征值所对应的特征函数为 $u_{k,l}(x, y) = \cos\dfrac{k\pi}{a}x\cos\dfrac{l\pi}{b}y$ $(l \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Z})$.

考虑方程组的特征值问题, 令

$$U = \sum_{k,l} a_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y,$$
$$V = \sum_{k,l} b_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y,$$

代入原方程组可得

$$\begin{aligned} &-\sum_{k,l} a_{k,l}\left[\left(\frac{k\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{l\pi}{b}\right)^2\right] \\ &\times \cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y \\ &+ c_{11}\sum_{k,l} a_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y \\ &+ c_{12}\sum_{k,l} b_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y \\ = {}&\lambda\sum_{k,l} a_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&-\sum_{k,l} db_{k,l}\left[\left(\frac{k\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{l\pi}{b}\right)^2\right]\\&\times\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y\\&+c_{21}\sum_{k,l}a_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y\\&+c_{22}\sum_{k,l}b_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y\\=\ &\lambda\sum_{k,l}b_{k,l}\cos\frac{k\pi}{a}x\cos\frac{l\pi}{b}y.\end{aligned}\tag{A3}$$

设 $\mu=\left(\frac{k\pi}{a}\right)^2+\left(\frac{l\pi}{b}\right)^2$, 则方程组可化为

$$\begin{cases}(-c\mu+c_{11}-\lambda)\,a_{k,l}+c_{12}b_{k,l}=0,\\c_{21}a_{k,l}+(-d\mu+c_{22}-\lambda)\,b_{k,l}=0.\end{cases}\tag{A4}$$

当方程组(A3)有非零解, 满足

$$\begin{vmatrix}-c\mu+c_{11}-\lambda & c_{12}\\ c_{21} & -d\mu+c_{22}-\lambda\end{vmatrix}=0,\tag{A5}$$

此时方程组所对应的特征值为

$$\begin{aligned}\lambda=\frac{1}{2}\Big\{&-d\mu-c\mu+c_{11}+c_{22}\\&\pm\Big[(d\mu+c\mu-c_{11}-c_{22})^2\\&-4\Big(d\mu^2+d\mu c_{11}-c_{12}c_{21}\\&-c\mu c_{22}+c_{11}c_{22}\Big)\Big]^{\frac{1}{2}}\Big\}.\end{aligned}\tag{A6}$$

附录B 谱微分矩阵

定义在 $[-1,1]$ 上的标准 k 阶 Chebyshev 多项式 $T_k(x)$ 为 $T_k(x)=\cos(k\arccos x)$, $k=0,1,2,\cdots$. 令 $x=\cos z$, 则有 $T_k=\cos kz$, 满足如下递推关系:

$$\begin{cases}T_{k+1}(x)-2xT_k(x)+T_{k-1}(x)=0, & k\geqslant 1,\\T_0(x)=1,\quad T_1(x)=x.\end{cases}\tag{B1}$$

$T_k(x)$ 在 $[-1,1]$ 上的 $N+1$ 个 Gauss-Lobatto 点值为零:

$$x_i=\cos\frac{\pi j}{N},\quad j=0,1,\cdots,N.\tag{B2}$$

设 N 阶多项式 $u_N(x)\in P_N$ 在上述配置点 x_j 满足 $u_N(x_j)=u(x_j)$, 则有

$$u_N(x_j)=\sum_{j=0}^{N}h_j(x_j)u(x_j),\tag{B3}$$

式中 $h_j(x)$ 为 N 阶 Lagrange 基函数. 用配置法求解未知量在网格点处的值, 需要表示配置点处的导数值. 对(B3)式求 p 阶导数, 得

$$u_N^{(p)}(x_i)=\sum_{j=0}^{N}d_{i,j}^{(p)}u(x_j),\quad j=0,1,\cdots,N,\tag{B4}$$

式中系数 $d_{i,j}^{(p)}=h_j^{(p)}(x_j)$. 从而可得一阶谱微分矩阵 $\boldsymbol{D}^{(1)}=\left(d_{i,j}^{(1)}\right)$, 其中

$$\begin{cases}d_{i,j}^{(1)}=\dfrac{\bar{c}_i(-1)^{i+j}}{\bar{c}_j(x_i-x_j)}, & 0\leqslant i,j\leqslant N, i\neq j,\\[2mm] d_{i,i}^{(1)}=-\dfrac{x_i}{2(1-x_i^2)}, & 1\leqslant i\leqslant N-1,\\[2mm] d_{0,0}^{(1)}=-d_{N,N}^{(1)}=\dfrac{2N^2+1}{6}.\end{cases}\tag{B5}$$

这里 $\bar{c}_0=\bar{c}_N=2$, $\bar{c}_j=1$, $j=1,2,\cdots,N-1$. 二阶谱微分矩阵可以由一阶谱微分矩阵平方得到, 即 $\boldsymbol{D}^{(2)}=\left(\boldsymbol{D}^{(1)}\right)^2$.

参考文献

[1] Turing A M 1952 *Philos. Trans. R. Soc. Lond. B* **2** 37

[2] Li X Z, Bai Z G, Li Y, Zhao K, He Y F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 220503 (in Chinese) [李新政, 白占国, 李燕, 赵昆, 贺亚峰 2013 物理学报 **62** 220503]

[3] Zhang L, Liu S Y 2007 *Appl. Math. Mec.* **28** 1102 (in Chinese) [张丽, 刘三阳 2007 应用数学和力学 **28** 1102]

[4] Li B, Wang M X 2008 *Appl. Math. Mec.* **29** 749 (in Chinese) [李波, 王明新 2008 应用数学和力学 **29** 749]

[5] Hu W Y, Shao Y Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 238202 (in Chinese) [胡文勇, 邵元智 2014 物理学报 **63** 238202]

[6] Peng R Wang M 2007 *Sci. China A* **50** 377

[7] Copie F, Conforti M, Kudlinski A, Mussot A, Trillo S 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 143901

[8] Tompkins N, Li N, Girabawe C, Heymann M, Ermentrout G B, Epstein I R, Fraden S 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 4397

[9] Lacitignola D, Bozzini B, Frittelli M, Sgura I 2017 *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* **48** 484

[10] Gaskins D K, Pruc E E, Epstein I R, Dolnik M 2016 *Phys. Rev. Lett.* **117** 056001

[11] Zhang R P, Yu X J, Zhu J, Loula A 2014 *Appl. Math. Model.* **38** 1612

[12] Zhang R P, Zhu J, Loula A, Yu X J 2016 *J. Comput. Appl. Math.* **302** 312

[13] Bai Z G, Dong L F, Li Y H, Fan W L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 118201 (in Chinese) [白占国, 董丽芳, 李永辉, 范伟丽 2011 物理学报 **60** 118201]

[14] Zhang R, Zhu J, Yu X, Li M, Loula A F D 2017 *Appl. Math. Comput.* **310** 194

[15] Lv Z Q, Zhang L M, Wang Y S 2014 *Chin. Phys. B* **23** 120203

[16] Wang H 2010 *Comput. Phys. Commun.* **181** 325

[17] Hoz F D L, Vadillo F 2013 *Commun. Comput. Phys.* **14** 1001

[18] Nie Q, Zhang Y T, Zhao R 2006 *J. Comput. Phys.* **214** 521

[19] Nie Q, Wan F Y M, Zhang Y T, Liu X F 2008 *J. Comput. Phys.* **227** 5238

[20] Gierer A, Meinhardt H 1972 *Kybernetik* **12** 30

[21] Ward M J, Wei J 2003 *J. Nonlinear Sci.* **13** 209

[22] Wei J, Winter M 2004 *J. Math. Pures Appl.* **83** 433

[23] Li H X 2015 *J. Northeast Normal University* **3** 26 (in Chinese) [李海侠 2015 东北师大学报 **3** 26]

Application of reaction diffusion model in Turing pattern and numerical simulation*

Zhang Rong-Pei[1)†] Wang Zhen[2)] Wang Yu[1)] Han Zi-Jian[1)]

1) (*College of Mathematics and Systems Science, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China*)

2) (*College of Mathematics and Systems Science, Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266590, China*)

(Received 6 August 2017; revised manuscript received 6 November 2017)

Abstract

Turing proposed a model for the development of patterns found in nature in 1952. Turing instability is known as diffusion-driven instability, which states that a stable spatially homogeneous equilibrium may lose its stability due to the unequal spatial diffusion coefficients. The Gierer–Mainhardt model is an activator and inhibitor system to model the generating mechanism of biological patterns. The reaction-diffusion system is often used to describe the pattern formation model arising in biology. In this paper, the mechanism of the pattern formation of the Gierer-Meinhardt model is deduced from the reactive diffusion model. It is explained that the steady equilibrium state of the nonlinear ordinary differential equation system will be unstable after adding of the diffusion term and produce the Turing pattern. The parameters of the Turing pattern are obtained by calculating the model. There are a variety of numerical methods including finite difference method and finite element method. Compared with the finite difference method and finite element method, which have low order precision, the spectral method can achieve the convergence of the exponential order with only a small number of nodes and the discretization of the suitable orthogonal polynomials. In the present work, an efficient high-precision numerical scheme is used in the numerical simulation of the reaction-diffusion equations. In spatial discretization, we construct Chebyshev differentiation matrices based on the Chebyshev points and use these matrices to differentiate the second derivative in the reaction-diffusion equation. After the spatial discretization, we obtain the nonlinear ordinary differential equations. Since the spectral differential matrix obtained by the spectral collocation method is full and cannot use the fast solution of algebraic linear equations, we choose the compact implicit integration factor method to solve the nonlinear ordinary differential equations. By introducing a compact representation for the spectral differential matrix, the compact implicit integration factor method uses matrix exponential operations sequentially in every spatial direction. As a result, exponential matrices which are calculated and stored have small sizes, as those in the one-dimensional problem. This method decouples the exact evaluation of the linear part from the implicit treatment of the nonlinear reaction terms. We only solve a local nonlinear system at each spatial grid point. This method combines with the advantages of the spectral method and the compact implicit integration factor method, i.e., high precision, good stability, and small storage and so on. Numerical simulations show that it can have a great influence on the generation of patterns that the system control parameters take different values under otherwise identical conditions. The numerical results verify the theoretical results.

Keywords: reaction-diffusion equation, Gierer-Meinhardt model, Turing pattern, Chebyshev spectral method

PACS: 05.45.–a, 05.65.+b, 82.40.Ck, 02.70.Hm **DOI:** 10.7498/aps.67.20171791

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61573008, 61703290), the Key Laboratory Fund of National Defense Science and Technology, China (Grant No. 6142A050202), and the Liaoning Provincial Department of Education Fund, China (Grant No. L201604).

† Corresponding author. E-mail: rongpeizhang@163.com