反應擴散偏微分方程簡介

羅主斌

反應擴散方程 (Reaction Diffusion Partial Differential Equation) 是非常重要且應用廣泛的一類偏微分方程式，它描述了生態學中物種數量的遷徙變化，人體或動物等複雜的組織的發育形成過程，人體的生理學中種種的現象以及許多有趣的化學反應。

(一)

首先我們藉著生態學的例子來導出此類方程的一般形式：令 $u_j(x,t)$ 代表某一個空間區域 $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 中的第 j 種物種在位置 x，時刻 t 的數量的密度，其中$j = 1,\ldots,N$，純量 $Q_j(x,t)$代表第j物種在位置 x，時刻 t 的單位區域的出生率減死亡率。向量 $\overrightarrow{J_j}(x,t)$ 代表第 j 物種在位置 x，時刻 t 的單位區域的流動率 (flux density)。則在一個固定的區域 Ω 中，第 j 物種數量的變化必導因於出生，死亡的因素 Q_j，以及第 j 物種從 Ω 遷出或從 Ω 外遷入的因素 $\overrightarrow{J_j}$ 的影響。寫成數學式子如下：

$$\begin{aligned}&\frac{d}{dt}\int_\Omega u_j(x,t)dx \qquad (1)\\ =&-\int_{\partial\Omega}\overrightarrow{J_j}(x,t)\cdot\overrightarrow{n}(x)dS(x)\\ &+\int_\Omega Q_j(x,t)dx\end{aligned}$$

其中$j = 1,\ldots,N$，向量 $\overrightarrow{n}(x)$ 代表在 Ω 邊界上的某個位置 x 的向外單位法向量，$\overrightarrow{J_j}(x,t)\cdot\overrightarrow{n}(x)$ 代表在邊界點 x 上每單位邊界區域 j 物種的流出率。

我們利用數學上所謂的 divergence theorem，得到

$$\begin{aligned}&\int_{\partial\Omega}\overrightarrow{J_j}(x,t)\cdot\overrightarrow{n}(x)dS(x)\\ =&\int_\Omega\sum_{i=1}^n\frac{\partial J_{ji}}{\partial x_i}(x,t)dx,\end{aligned}$$

其中 $\overrightarrow{J_j}\equiv(J_{j_1},J_{j_2},\ldots,J_{j_n})$ 因此 (1) 變成：

$$\int_\Omega\Big(\frac{\partial}{\partial t}u_j(x,t)+\sum_{i=1}^n\frac{\partial J_{ji}}{\partial x_i}(x,t)-Q_j(x,t)\Big)dx=0$$

因爲 Ω 是任意的，所以有：

$$\frac{\partial u_j(x,t)}{\partial t}+\sum_{i=1}^n\frac{\partial J_{ji}}{\partial x_i}(x,t)-Q_j(x,t)=0 \qquad (2)$$

關於 flux density $\overrightarrow{J_j}(x,t)$ 的形式，Fick's Law 說，$\overrightarrow{J_j}(x,t)$ 比例於數量梯度

$$\nabla u_j(x,t)\equiv(\frac{\partial u_j}{\partial x_1},\frac{\partial u_j}{\partial x_2},\ldots\frac{\partial u_j}{\partial x_n})(x,t),$$

亦即：

$$\overrightarrow{J_j}(x,t)=-d_j(x)\nabla u_j(x,t), \qquad (3)$$

其中 $j = 1,\ldots,N$，且 $d_j(x)\geq 0$ 稱爲擴散係數 (diffusion coefficient)。

上式直觀上很容易理解, 因爲物種的移動總是由擁擠的地方往數量少的地方移動。將 (3) 代入 (2) 得到:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_j(x,t)}{\partial t} = &\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \left(d_j(x) \frac{\partial u_j}{\partial x_i}(x,t) \right)}{\partial x_i} \\ &+ Q_j(x,t), \qquad (4) \\ &j = 1, \dots, N, \quad x \in \Omega, t \geq 0.\end{aligned}$$

而一般來說, j 物種的出生或死亡除了自然原因外, 也有可能是因爲其他物種的捕食或合作共生或同一物種數量增多後, 食物的缺乏所導致的。故 Q_j 比較正確的說, 應爲 $x, t, u_1, u_2, \dots, u_N$ 的函數才對。亦即 $Q = Q(x, t, u_1, u_2, \dots, u_N)$ 。因此所謂的反應擴散 (Reaction Diffusion) 方程即爲:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_j}{\partial t}(x,t) = &\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \left(d_j(x) \frac{\partial u_j}{\partial x_i}(x,t) \right)}{\partial x_i} \\ &+ Q_j(x, t, u_1, u_2, \dots, u_N) \quad (5)\end{aligned}$$

其中 $j = 1, \dots, N, x \in \Omega, t \geq 0$, 右邊第一項爲擴散項 (diffusion term), 右邊第二項爲反應項 (reaction term)。當 $d_j(x)$ 爲常數時

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \left(d_j(x) \frac{\partial u_j}{\partial x_i}(x,t) \right)}{\partial x_i} \\ &= d_j \left(\frac{\partial^2 u_j}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_n^2} \right) \\ &\equiv d_j \Delta u_j(x,t)。\end{aligned}$$

通常除了上述的方程式 (5) 之外, 還會給定適當的邊界條件, 例如在一個封閉的區域 (如海島) 時, 物種不會流進流出區域 Ω, 所以 $\frac{\partial u}{\partial n} \equiv \nabla u \cdot \overrightarrow{n}$ 在邊界爲零。此條件數學上稱爲Neumann boundary condition。當然在其他情況下, 還有其他的邊界條件。$Q_j(x, t, u_1, \dots, u_N)$ 的具體形式會因爲不同的問題或現象而不同。例如考慮如下的形式: $N = 2$,

$$\begin{aligned}Q_1 &= Q_1(u_1, u_2) \\ &\equiv \alpha_1 u_1 (b_1 - d_{11} u_1 - d_{12} u_2) \quad (6) \\ Q_2 &= Q_2(u_1, u_2) \\ &\equiv \alpha_2 u_2 (b_2 - d_{21} u_1 - d_{22} u_2)\end{aligned}$$

其中係數 $\alpha_1, \alpha_2, b_1, b_2, d_{11}, d_{22}$ 是正的常數。

而依係數 d_{12} 與 d_{21} 的情況, 可區分爲下列三種:

- 合作系統 (Cooperative system):
  $d_{12} < 0, \quad d_{21} < 0$
- 競爭系統 (Competitive system):
  $d_{12} > 0, \quad d_{21} > 0$
- 捕食-被捕食系統(predator-prey system): $d_{12} d_{21} < 0$

在 (6) 中 $b_1 \alpha_1 u_1$ 與 $b_2 \alpha_2 u_2$ 代表物種自然的出生減掉死亡的因素, $-\alpha_1 d_{11} u_1^2$ 與 $-\alpha_2 d_{22} u_2^2$ 代表物種各自因爲數量的增加, 食物不夠等原因而導致的死亡。而 $-\alpha_1 d_{12} u_1 u_2$, $-\alpha_2 d_{21} u_1 u_2$ 代表2個物種間的交互作用。在合作系統中一個物種增加, 另一個亦增加, 競爭系統相反, 而 predator-prey 系統中, prey 的數量增加, predator 就增加, 而 predator 增加, prey 數量就減少。

(二)

在人類或動物的發育過程中, 如何由一個受精卵長成一個形態複雜的成熟個體呢? 這過程的指令或許在基因之中, 但基因中的指令如何被細胞來執行這仍然是個謎, 在人類基因草圖完成的今日, 這個課題是科學家下一個要面對的挑戰。但反應擴散方程的方法, 或許是個途徑, 這理論是由 A. Turing 在1952年提出的。之後 A. Gierer 與 H. Meinhardt 寫下了具體的反應擴散方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_1\Delta u + \rho_1\left(\frac{u^2}{(1+ku^2)v}\right) - \mu_1 u + \sigma_1 \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_2\Delta v + \rho_2 u^2 - \mu_2 v + \sigma_2 \end{cases} \tag{7}$$

其中 d_i, ρ_i, μ_i 皆爲大於0的常數, k, σ_i 是非負常數,

$$\Delta u(x,t) \equiv \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}(x,t),$$
$$\Delta v(x,t) \equiv \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2 v}{\partial x_i^2}(x,t)。$$

(7) 中的 u, v 分別代表2種不同類型的化學物質, activator 與 inhibitor。activator 有自我催化的作用, v 有抑制 u 的作用。

我們想藉 (7) 的例子來說明形態生成 (pattern formation) 的概念。一個圖案或形態之所以能被我們辨識出來, 乃是因爲它跟周圍不一樣之故, 有黑的顏色, 我們才知道什麼是白, 另外這圖案或形態能被我們觀察到, 代表它是不會隨時間而變化並且是穩定的, 不會因爲周圍環境稍微的變動, 就使得這圖案消失了。而我們人體的細胞或動物的細胞的分化或許是因爲諸如 (7) 中的化學物質 (通稱爲 morphogens) 濃度在各處分佈的不同, 而在一處長成某器官, 在另外一處長成另一種器官, 這理論被稱爲 morphogenesis。因此我們在數學上感興趣的問題就是尋找 (7) 中不隨時間變化, 穩定的非常數的解。用專用的術語講就是找 (7) 的“stable and nonconstant equilibrium solution” A. Turing 等人的想法是說在一個反應擴散方程之中, 若一個解的擴散係數比另一個大很多, 則會有上述我們希望的解存在。這想法很直觀, 打個比喻, 今有一大片的乾燥草原起火了, u 代表起火的草原的數量或面積, 若在這片草原周圍灑水並令 v 代表水量的多寡, 水會擴散到這片著火的草原區域, 當然, 著火的草原也會一直擴散出去, 並且隨著著火面積的增加, 溫度上升的更高, 因此著火草原面積增加的速率又更快

了, 此即爲一種自我催化作用。

此處的 v 有抑制 u 的作用, 若 v 的擴散速率比 u 小, 則火會一直漫延開來, 最後整片草原都燒掉了, 黑黑的一片看不到任何圖案, 但若v的擴散速率比u大很多, 則火就不會漫延開來, 因此草原上形成一片綠, 一片黑的圖案。以上就是 Turing 等人所提出的形成 pattern 的機制, 稱爲"Turing instability"mechanism, 在數學上的嚴格論證是用所謂的分叉理論 (bifurcation theory) 來證明其存在的。分叉理論是一個很重要的數學工具, 在一個諸如 (7) 的微分方程之中常會有一些參數, 例如 d_1, d_2。我們令此參數連續的變化, 會發覺當到達一個臨界值之時, 方程式的解會發生本質的變化。打個比方, 將一片柔軟的鋼片在兩頭用力擠壓, 本來在同一高度的扁平鋼片, 隨著力道的增加, 當到達某一關鍵值之時, 鋼片會被我們擠得突然往上或下彎曲, 因此鋼片的高度就不是常數了 (常數高度狀態不穩定)。用這套工具, 確實的, 當 (7) 中的 d_2 與 μ_2 比 d_1, μ_1 大很多時, 會有 pattern 出現。附帶一提的, 這分叉理論可用所謂的對稱破缺的框架來陳述 (Symmetry breaking), 如前所述一張白紙上任一點跟另外一點沒有什麼不同, 故到處對稱, 但若是在此張紙上畫一個圓, 此圓上之任何一點對圓心來說仍是對稱的, 故彼此沒有任何分別。但在圓外一點與圓上一點與圓心的距離就不同了, 故不對稱了, 就因爲此對稱破缺的緣故, 我們才得以辨識出此圓 pattern 。

目前市面上有一本科普讀物 [1]就是以此觀點來探討 pattern formation 的。在附圖 1, 2, 3 中就是以 A. Turing 的精神發展出的各樣模型, 經電腦模擬後所得的圖案, 是不是與一些動物花紋很相像呢?

附圖 1, 2, 3. 電腦模擬動物表面的花紋。來源: Greg Turk, Computer Graphics, Vol. 25, No. 4, July, 1991 (G. Turk 同意刊登)