

Uniwersytet Warszawski
Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki

Karol Hajduk

Nr albumu: 277842

Niestabilność Turinga

Praca licencjacka
na kierunku MATEMATYKA
w zakresie ZASTOSOWAŃ MATEMATYKI

Praca wykonana pod kierunkiem
dr Joanny Renčławowicz
Instytut Matematyki

Lipiec 2012

Oświadczenie kierującego pracą

Potwierdzam, że niniejsza praca została przygotowana pod moim kierunkiem i kwalifikuje się do przedstawienia jej w postępowaniu o nadanie tytułu zawodowego.

Data

Podpis kierującego pracą

Oświadczenie autora (autorów) pracy

Świadom odpowiedzialności prawnej oświadczam, że niniejsza praca dyplomowa została napisana przeze mnie samodzielnie i nie zawiera treści uzyskanych w sposób niezgodny z obowiązującymi przepisami.

Oświadczam również, że przedstawiona praca nie była wcześniej przedmiotem procedur związanych z uzyskaniem tytułu zawodowego w wyższej uczelni.

Oświadczam ponadto, że niniejsza wersja pracy jest identyczna z załączoną wersją elektroniczną.

Data

Podpis autora (autorów) pracy

Streszczenie

W niniejszej pracy przedstawiono podstawowe idee dotyczące układów typu aktywator-inhibitor. Wyprowadzone zostało równanie reakcji-dyfuzji w obszarze ograniczonym. Wprowadzony został podstawowy aparat matematyczny, przydatny przy zajmowaniu się tego typu zagadnieniami. W szczególności sporo miejsca poświęcono metodzie Fouriera rozdzielenia zmiennych. Z użyciem tej metody zbadano stabilność stanu stacjonarnego układu dwóch równań reakcji-dyfuzji w przypadku jednowymiarowym. Podkreślono kluczowy wpływ dyfuzji prowadzącej do powstania tzw. efektu niestabilności Turinga. Ponadto pokazano proste mechanizmy tworzenia się wzorów przestrzennych występujących w przyrodzie. Celem pracy jest przedstawienie i wyjaśnienie niezwykle interesujących zjawisk biologiczno-chemicznych przy zastosowaniu stosunkowo elementarnych metod matematycznych.

Słowa kluczowe

równania reakcji-dyfuzji, układ aktywator-inhibitor, wzory przestrzenne, niestabilność stanu stacjonarnego, równania paraboliczne, metoda Fouriera

Dziedzina pracy (kody wg programu Socrates-Erasmus)

11.1 Matematyka

Klasyfikacja tematyczna

35K57 Reaction-diffusion equations

70K50 Bifurcations and instability

35Q92 PDEs in connection with biology and other natural sciences

92C15 Developmental biology, pattern formation

35B36 Pattern formation

Tytuł pracy w języku angielskim

Turing Instability

Spis treści

Wprowadzenie	7
1. Preliminaria matematyczne	9
1.1. Warunki początkowo-brzegowe	9
1.2. Całkowanie przez części	11
2. Podstawowe idee biologiczno-chemiczne	13
2.1. Motywacja - jak powstają wydmy?	13
2.2. Układy typu aktywator-inhibitor	15
2.3. Układy typu aktywator-ubywający substrat	17
2.4. Wyprowadzenie równania reakcji-dyfuzji	19
3. Metoda Fouriera rozdzielenia zmiennych	21
3.1. Teoria	22
3.1.1. Uwagi do przypadku jednowymiarowego	24
3.2. Praktyka	24
3.2.1. Równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji) z warunkami brzegowymi Neumanna	24
3.2.2. Niejednorodne równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji)	27
4. Analiza stabilności stanu stacjonarnego	29
4.1. Stan stacjonarny	29
4.2. Warunki na niestabilność Turinga	32
4.3. Interpretacja fizyczna	34
4.4. Model reakcji-dyfuzji: Brukselator	36
Bibliografia	39

Spis rysunków

2.1. Schemat układu aktywator-inhibitor	15
2.2. Schemat układu aktywator-ubywający substrat	18
4.1. Wykres najszybciej rosnących zaburzeń w modelu Brukselatora	37

Wprowadzenie

Otoczający nas świat pełen jest różnego rodzaju struktur i wzorów, które można próbować modelować matematycznie. Szczególnie interesującą klasę modeli stanowią układy reakcji-dyfuzji, które potrafią opisywać tworzenie się wzorów przestrzennych spotykanych w przyrodzie na każdym kroku. Układy tego typu są badane od połowy XX wieku, od czasu pionierskiej pracy Alana Turinga ([Turing]). Ich szerokie zastosowanie w różnych obszarach nauki sprawia, że dziedzina ta jest żywa i rozwija się dynamicznie. W niniejszym tekście ograniczymy się tylko do pojęć podstawowych.

W pracy zajmować się będziemy układem dwóch semiliniowych parabolicznych równań różniczkowych cząstkowych postaci

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t}(x, t) = D_1 \Delta_x u_1(x, t) + F_1(u_1, u_2), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t}(x, t) = D_2 \Delta_x u_2(x, t) + F_2(u_1, u_2), \end{cases} \quad (1)$$

który opisuje reakcje chemiczne dwóch substancji u_1 i u_2 z uwzględnieniem ich dyfuzji (D_1, D_2). Zakładając istnienie jednorodnego przestrzennie stanu stacjonarnego dla układu 1, zbadamy jego stabilność w przypadku braku dyfuzji, tzn. kiedy $D_1 = D_2 = 0$. Okazuje się, że stabilny w przypadku braku dyfuzji stan stacjonarny, może, po ponownym włączeniu dyfuzji do równań, stać się niestabilny. Ten zaskakujący efekt nazywa się *niestabilnością Turinga* lub niestabilnością dyfuzyjną. Celem niniejszej pracy jest podanie warunków dla układu 1, kiedy taka sytuacja może wystąpić.

Praca składa się z czterech rozdziałów. W rozdziale 1 przypomniano pewne podstawy matematyczne dotyczące równań różniczkowych cząstkowych, potrzebne dalej w pracy. Bardzo elementarne idee dotyczące układów reakcji-dyfuzji modelowanych równaniami typu 1 zestawiono w rozdziale 2. Ma on charakter głównie poglądowy. Rozdział 3 zawiera dość szczegółowy opis metody Fouriera rozdzielenia zmiennych, wykorzystanej dalej przy analizie stabilności stanu stacjonarnego układu 1. W ostatnim rozdziale wyprowadzono warunki skutkujące powstaniem niestabilności Turinga i zbadano pod tym kątem przykładowy model, zwany Brukselatorem.

Rozdział 1

Preliminaria matematyczne

W tym rozdziale wprowadzimy potrzebne nam później pojęcia i definicje matematyczne. Powiemy jakie są podstawowe warunki początkowo-brzegowe dla równań różniczkowych cząstkowych oraz wyprowadzimy użyteczny wzór Greena.

1.1. Warunki początkowo-brzegowe

W modelowaniu rzeczywistych procesów występujących w naturze ważna jest możliwość uzupełnienia danego modelu pewnymi dodatkowymi warunkami. Dla równań różniczkowych cząstkowych warunki te nazywa się *początkowo-brzegowymi*. Zobaczymy, na przykładzie, jak one mogą wyglądać w praktyce. Pozwoli to na wyrobienie sobie intuicji, jakiego typu warunków można się spodziewać w różnych problemach.

Zdefiniujemy jednak najpierw ważne pojęcia *gładkości brzegu* oraz *wektora normalnego do brzegu*.

Definicja 1.1.1 Niech $U \subset \mathbb{R}^n$ będzie zbiorem otwartym i ograniczonym, $k \in \{1, 2, \dots\}$. Powiemy, że brzeg ∂U jest

- (i) klasy C^k , jeśli dla każdego punktu $x \in \partial U$ istnieje liczba $r > 0$ oraz funkcja $\gamma : \mathbb{R}^{n-1} \rightarrow \mathbb{R}$ klasy C^k taka, że iloczyn

$$U \cap B(x, r) = \{x \in B(x, r) \mid x_n > \gamma(x_1, \dots, x_{n-1})\}$$

z dokładnością do numeracji i zmiany orientacji osi układu współrzędnych.

- (ii) klasy C^∞ (gładki), jeśli jest klasy C^k dla każdego k .

Definicja 1.1.2

- (i) Jeśli ∂U jest klasy C^1 , to na ∂U jest określone skierowane na zewnątrz pole jednostkowych wektorów normalnych

$$\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \dots, \nu_n).$$

Jednostkowym wektorem normalnym (zewnątrznym) w dowolnym punkcie $x \in \partial U$ jest

$$\boldsymbol{\nu}(x) = \boldsymbol{\nu} = (\nu_1(x), \dots, \nu_n(x)).$$

(ii) Niech $u \in C(\bar{U})$. Funkcję

$$\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}} := Du \cdot \boldsymbol{\nu} = \nabla u \cdot \boldsymbol{\nu}$$

nazywamy pochodną normalną (zewnętrzna) funkcji u ; „ \cdot ” oznacza standardowy iloczyn skalarny w \mathbb{R}^n .

Przykładowo dla górnej półpłaszczyzny w \mathbb{R}^2 : $\boldsymbol{\nu} = (0, -1)$, a $\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}} = -\frac{\partial u}{\partial y}$.

Do zilustrowania różnych typów warunków brzegowych posłużymy się klasycznym równaniem przewodnictwa cieplnego (dyfuzji) opisującego temperaturę (stężenie) jednorodnej, izotropowej substancji wypełniającej obszar $U \subseteq \mathbb{R}^n$ o gładkim brzegu ∂U

$$u_t(x, t) = \Delta_x u(x, t) \quad \text{dla } x \in U, t \in (0, \infty). \quad (1.1)$$

Zagadnienie 1.1 można uzupełniać dodatkowymi założeniami na różne sposoby. Oto lista kilku najczęściej spotykanych i najbardziej znanych warunków początkowych i brzegowych:

1. *Zagadnienie początkowe Cauchy’ego*

$$u(x, 0) = f(x) \quad \text{dla } x \in U.$$

Funkcja f opisuje początkowy (w chwili $t = 0$) rozkład temperatury (stężenia) w obszarze U .

2. *Warunek brzegowy Dirichleta*

$$u(x, t) = g(x) \quad \text{dla } x \in \partial U.$$

Funkcja g opisuje rozkład ciepła (stężenia) na brzegu obszaru U , np. $g \equiv 0$ oznacza stałą temperaturę (stężenie) substancji na brzegu ∂U .

3. *Warunek brzegowy Neumanna*

$$\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}}(x, t) = g(x) \quad \text{dla } x \in \partial U,$$

gdzie $\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}}$ to pochodna normalna względem zmiennej przestrzennej

$$\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}}(x, t) = \nabla_x u(x, t) \cdot \boldsymbol{\nu}.$$

Funkcja g opisuje przepływ ciepła (substancji) przez brzeg obszaru U , np. $g \equiv 0$ oznacza całkowity brak przepływu.

4. *Mieszany warunek brzegowy*

$$\begin{cases} u(x, t) = g(x) & \text{dla } x \in \Gamma_1, \\ \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}}(x, t) = h(x) & \text{dla } x \in \Gamma_2, \end{cases}$$

gdzie brzeg $\partial U = \Gamma_1 + \Gamma_2$ jest kawałkami gładki.

Na różnych częściach brzegu zadane są różne rodzaje warunków brzegowych. Tu na Γ_1 mamy warunek Dirichleta, a na Γ_2 warunek Neumanna.

1.2. Całkowanie przez części

W tym rozdziale poznamy ulubiony wzór studentów początkowego kursu równań różniczkowych cząstkowych - *wzór Greena*. Jest to niezwykle użyteczne narzędzie, które pozwala redukować rząd pochodnej pod całką. Zajmując się równaniami cząstkowymi nie sposób nie natknąć się na ten wzór. Stosuje się go bardzo często, chociażby w oszacowaniach energetycznych, czy w konstrukcji słabego sformułowania danego zagadnienia. Wykorzystamy go do wyprowadzenia równania reakcji-dyfuzji. Zacznijmy od wzoru na całkowanie przez części.

W przypadku jednowymiarowym podstawowy wzór wygląda następująco

$$\int_a^b f'(x) dx = f|_a^b = f(b) - f(a).$$

Stąd wynika bezpośrednio wzór na całkowanie przez części

$$\int_a^b (fg)' dx = \int_a^b f'g dx + \int_a^b fg' dx = fg|_a^b.$$

Wzór ten ma swoją wielowymiarową wersję, która wynika z następującego twierdzenia (zwanego czasem twierdzeniem o dywergencji).

Twierdzenie 1.2.1 (Gaussa-Greena-Ostrogradskiego) *Jeśli $U \subset \mathbb{R}^n$ jest obszarem otwartym i ograniczonym, z brzegiem ∂U klasy C^1 , funkcja $\mathbf{F} : \bar{U} \rightarrow \mathbb{R}^n$ jest klasy C^1 , to wówczas*

$$\int_U \operatorname{div} \mathbf{F} dx = \int_{\partial U} \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\nu} dS, \quad (1.2)$$

gdzie całka po prawej stronie jest całką powierzchniową.

Wniosek 1 (Wzór na całkowanie przez części) *Załóżmy, że $u, v \in C^1(\bar{U})$. Wówczas*

$$\forall_{i=1, \dots, n} \int_U u_{x_i} v dx + \int_U u v_{x_i} dx = \int_{\partial U} u v \nu_i dS. \quad (1.3)$$

Dowód. Stosujemy wzór 1.2 dla $\mathbf{F} = u v \mathbf{e}_i = (0, \dots, \underbrace{uv}_{i\text{-te miejsce}}, \dots, 0)$. □

Wniosek 2 (Wzory Greena) *Załóżmy, że $u, v \in C^2(\bar{U})$. Wówczas*

(i) *wstawiając do wzoru 1.2 $\mathbf{F} = \nabla u$ otrzymujemy*

$$\int_U \operatorname{div}(\nabla u) dx = \int_U \Delta u dx = \int_{\partial U} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}} dS.$$

(ii) *wstawiając do wzoru 1.3 v_{x_i} zamiast v i sumując po "i" otrzymujemy pierwszy wzór Greena*

$$\int_U \nabla u \cdot \nabla v dx + \int_U u \Delta v dx = \int_{\partial U} u \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{\nu}} dS.$$

Rozdział 2

Podstawowe idee biologiczno-chemiczne

Wszystkie modele są błędne, ale niektóre są użyteczne.

George Box

Przedstawimy w tym rozdziale ogólne uwagi na temat modeli matematycznych prowadzących do formowania się *wzorów przestrzennych*¹.

Na początek postawmy sobie ważne pytanie - dlaczego warto się tym zajmować? Przede wszystkim, modelowane za pomocą równań różniczkowych cząstkowych układy reakcji-dyfuzji oraz układy podobne, prowadzące do powstawania wzorów przestrzennych, mają szerokie zastosowania w biologii, chemii, fizyce, geologii, ekologii i wielu innych dziedzinach. Pozwolimy sobie wymienić kilka z nich: aktywacja genów, rozwój zarodka, kształt i różnorodne wzory na muszlach, skomplikowane sieciowe struktury jak np. unerwienie liści, rozwój prostych organizmów (np. polip Hydra), pigmentacja skóry i futer zwierząt (np. pasy zebry, cętki geparda), przewodzenie sygnałów nerwowych (równania FitzHugh–Nagumo), koagulacja krwi i wiele, wiele innych.

Bardzo ważną motywacją do zajmowania się takimi problemami jest chęć zrozumienia procesów odpowiedzialnych za rozwój i kształtowanie się organizmów, czyli tak zwanej *morfogenezy*². Składa się ona z ogromnej liczby nakładających się na siebie, współzawodniczących bądź współdziałających ze sobą skomplikowanych procesów i reakcji. Dlatego jedyną nadzieją na, choćby częściowe, zrozumienie tych procesów, jest poznanie mechanizmów, które leżą u podstaw pojedynczych, prostych reakcji tego typu.

Od czasu znalezienia rozwiązań oscylacyjnych w reakcji Biełusowa-Żabotyńskiego w latach 50. i 60. XX wieku, badania w tej dziedzinie cieszą się niegasnącym zainteresowaniem.

2.1. Motywacja - jak powstają wydmy?

W życiu codziennym stale mamy do czynienia z pewnymi procesami, które mają naturalną tendencję do zmiany swojego zachowania w czasie, jak chociażby pogoda, czy giełda. Często dramatyczne zmiany mają swój początek w relatywnie małych zaburzeniach 'normalnej' sytu-

¹Ang. 'pattern formation'.

²Gr. 'morphē' - kształt, postać; 'gēnesis' - pochodzenie. Termin oznacza biologiczne procesy rozwojowe, w wyniku których jest determinowany kształt zarodka w kolejnych stadiach rozwojowych i ostatecznie kształt dorosłego organizmu.

acji. Na rynkach finansowych nawet plotka może być wystarczającym powodem do sprzedaży akcji, spadku kursów i ogólnej paniki.

W tego typu dynamicznie zmieniających się układach kluczową rolę odgrywa tzw. *dodatnie sprzężenie zwrotne*, samonapędzające początkowe zaburzenie. Miasta rosną i rozwijają się, ponieważ przyciągają coraz więcej ludzi. Bakterie i wirusy rozmnażają się, po czym ich potomstwo robi to samo, gwałtownie zwiększając liczebność populacji.

Prędzej czy później jednak samonapędzający się proces, prowadzi do uruchomienia *antagonistycznej reakcji*. Rozprzestrzeniający się wirus powoduje odpowiedź immunologiczną, która go neutralizuje. Rosnące hałas, korki i przestępczość odstręczają ludzi od przenoszenia się do dużych miast, zaś aktualni mieszkańcy zaczynają zastanawiać się nad wyprowadzką w jakieś spokojniejsze miejsce.

W wyniku działania przeciwstawnych sił wytwarza się pewna równowaga. Jednakże, na los takich układów dynamicznych mają wpływ różne inne czynniki. Ważne są przede wszystkim proporcje pomiędzy czasem reakcji samowzmacniających się i antagonistycznych procesów.

Dla przykładu, rozwój grypy zajmuje średnio dwa dni, natomiast do wyleczenia potrzeba około tygodnia. Wydaje się więc, że nasz system odpornościowy reaguje zbyt wolno w porównaniu z szybkością wzrostu wirusa. Początkowo wirus rozprzestrzenia się lawinowo, powodując chorobę. Jednak, wyglądająca na nieporozumienie, strategia naszego organizmu okazuje się skuteczna. Wolniej reagujący układ odpornościowy kumuluje coraz więcej przeciwciał, dopóki wszystkie wirusy nie będą osaczone. W ten sposób organizm może całkowicie pozbyć się wirusa. Gdyby układ odpornościowy zareagował znacznie szybciej, wytworzyłaby się równowaga pomiędzy rozprzestrzeniającym się wirusem i usuwającymi go przeciwciałami. Organizm musiałby wtedy walczyć do końca życia z mnożącymi się bakteriami, ponieważ częściowe usunięcie zagrożenia spowodowałoby obniżenie reakcji odpornościowej, dając tym samym kolejną szansę wirusowi.

Innym ważnym parametrem w dynamicznie zmieniającym się układzie jest przestrzenne rozmieszczenie jego składników. W przykładzie z grypą, wirus może zostać przeniesiony na inną osobę, która, po pewnym czasie, również zachoruje i będzie mogła zarażać innych. Infekcja rozprzestrzeni się w ten sposób jak fala biegnąca. Rozprzestrzenianie infekcji jest możliwe, ponieważ samowzmacniający się czynnik, wirus (a nie antagonistyczny proces - reakcja immunologiczna), może być przenoszony na innych ludzi.

Przeanalizujmy, na przykładzie powstawania wydm, sytuację odwrotną, kiedy to proces antagonistyczny rozprzestrzenia się szybciej, co może prowadzić do tworzenia stabilnych wzorów przestrzennych.

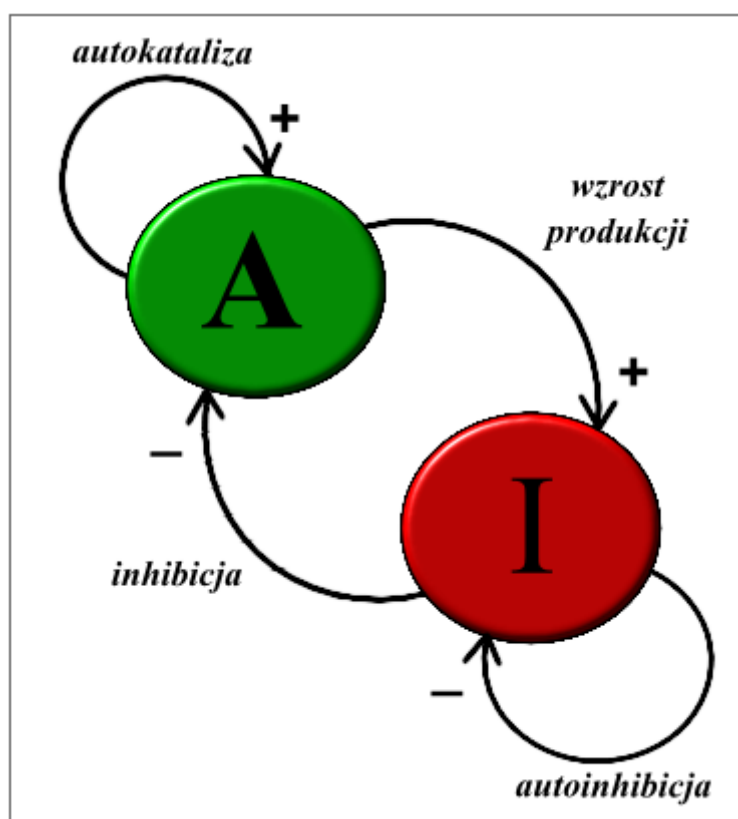
Wydmę tworzą się pomimo faktu, iż wiatr bardzo szybko przemieszcza ziarenka piasku po pustyni. Tworzenie wydm może być zainicjowane przez kamień lub inną przeszkodę, która tworzy osłonę przed wiatrem. Piasek gromadzi się za osłoną i wydma zaczyna rosnać. Znajdujący się w niej piasek nie może już brać udziału w tworzeniu wydm gdzieś indziej. Wzrost wydm zmniejsza lokalnie zawartość piasku w powietrzu. Ten ubytek powoduje powstanie reakcji antagonistycznej o dużym zasięgu. W ten sposób, prawdopodobieństwo zainicjowania nowych wydm, a także wzrostu wydm znajdujących się w pobliżu, jest zmniejszone. W przeciwieństwie do tego, akumulacja piasku za osłoną (samonapędzający się proces powodujący wzrost wydm) ma niewielki zasięg porównywalny z rozmiarami wydm.

Możemy na tej podstawie wnioskować, że podstawowe elementy wymagane do tworzenia stabilnych wzorów przestrzennych to: mały zasięg reakcji samowzmacniającej swoje działanie oraz duży zasięg reakcji antagonistycznej.

2.2. Układy typu aktywator-inhibitor

Jak już wspomnieliśmy wcześniej, wzory przestrzenne mogą powstawać startując z mniej lub bardziej jednorodnych układów, przy udziale lokalnego wzmacniającego się procesu oraz dalekozasięgowego procesu antagonistycznego. Wzory tworzą się, ponieważ małe zaburzenie jednorodnego stanu wytwarza silny efekt wzmacniający, który powoduje dalszy wzrost zaburzenia. Antagonistyczny proces o dalekim zasięgu ogranicza samowzmacniającą się reakcję i powoduje jej lokalizację w przestrzeni.

Ta ogólna zasada jest realizowana w układach biochemicznych typu *aktywator-inhibitor* - patrz rysunek 2.1.



Rysunek 2.1: Aktywator - A, katalizuje swoją produkcję (+), jak również produkcję antagonistycznego inhibitora - I. Inhibitor zaś hamuje (-) produkcję aktywatora oraz swoją własną.

Substancja o małym zasięgu działania, *aktywator*, promuje własną produkcję (*autokataliza*), podobnie jak produkcję drugiej substancji, szybko dyfundującego *inhibitora*. Stężenia obu substancji mogą być w stanie stabilnym. Globalne zwiększenie ilości aktywatora jest równoważone przez wzrost ilości inhibitora. Jednakże, taka równowaga jest stanem lokalnie niestabilnym, tzn. każdy *lokalny* wzrost stężenia aktywatora będzie rósł dalej wskutek autokatalizy, mimo że stężenie inhibitora również wzrośnie z tego powodu. Inhibitor jednak szybko zdyfunduje do otoczenia, powodując tam spowolnienie procesów autokatalitycznych, podczas gdy lokalny wzrost stężenia aktywatora będzie dalej postępował, do momentu osiągnięcia równowagi z otaczającą go chmurą inhibitora. Sytuację tę opisuje układ równań różniczkowych cząstkowych 2.1. W języku tych równań, kluczowe do powstawania wzorów przestrzennych

jest, aby dyfuzja inhibitora była znacznie szybsza niż dyfuzja aktywatora, tzn. $D_I \gg D_A$. Jak pokazał Granero³ (1977) inhibitor musi dyfundować ponad 7 razy szybciej niż aktywator.

Układ aktywator-inhibitor

Poniższe równania opisują interakcje pomiędzy autokatalitycznym aktywatorem $A(x)$ i jego przeciwnikiem, inhibitorem $I(x)$. Opisują one zmianę stężenia danej substancji w jednostce czasu, jako funkcję aktualnego stężenia.

$$\text{(aktywator)} \quad \frac{\partial A}{\partial t} = s \left(\frac{A^2}{I} + b_A \right) - r_A A + D_A \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad (2.1a)$$

$$\text{(inhibitor)} \quad \frac{\partial I}{\partial t} = sA^2 + b_I - r_I I + D_I \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}, \quad (2.1b)$$

gdzie x oznacza zmienną przestrzenną, t czas, D_A , D_I to współczynniki dyfuzji, zaś r_A i r_I określają tempo usuwania/niszczenia odpowiednich substancji.

Przyjrzyjmy się bardziej szczegółowo, co oznaczają poszczególne elementy powyższych równań:

- $s \left(\frac{A^2}{I} \right)$ - tempo produkcji aktywatora. Aktywator ma nieliniowy autokatalityczny charakter wzrostu. Produkcja jest spowalniana przez inhibitor I . Gęstość s opisuje zdolność cząstek do autokatalizy.
- $-r_A A$ - tempo usuwania aktywatora. Opisuje tempo w jakim molekuly znikają. Z zasady, jest proporcjonalne do aktualnej liczby molekuł w układzie (tak, jak np. liczba zgonów w mieście jest proporcjonalna do liczby mieszkańców).
- $D_A \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$ - wymiana aktywatora z otoczeniem pod wpływem dyfuzji. Jest proporcjonalna do drugiej pochodnej przestrzennej. Następną wymianą poprzez dyfuzję będzie zerowa, jeśli wszędzie jest takie samo stężenie substancji. Będzie również zerowa, jeśli istnieje stała różnica stężeń pomiędzy sąsiednimi obszarami, np. w sytuacji liniowego wzrostu gradientu stężeń. W tym przypadku, każdy obszar otrzymuje taką samą ilość substancji z sąsiedniego obszaru o wyższym stężeniu, jaką traci na rzecz swojego sąsiada o stężeniu niższym.
- b_A - podstawowa produkcja aktywatora. Niewielka produkcja, niezależna od aktualnego stężenia, może zainicjować (aktywować) układ o niskim stężeniu aktywatora. Jest wymagana do regeneracji wzorów przestrzennych, tworzenia nowych lokalnych maksimów stężenia aktywatora (wiele takich maksimów umożliwia np. wzrost włosów, czy też liści) lub do podtrzymania oscylacji.
- b_I - podstawowa produkcja inhibitora. Niewielka produkcja, niezależna od stężenia aktywatora, może prowadzić do powstania drugiego jednorodnego stanu stacjonarnego w układzie o niskim stężeniu aktywatora. Układ może być uśpiony do czasu wystąpienia zewnętrznego czynnika, np. napływu aktywatora z sąsiedniego aktywowanego obszaru. Składnik ten ma wpływ na powstawanie fal biegnących⁴.

W dotychczasowych rozważaniach jedyne ograniczenie autokatalizy było wynikiem działania antagonistycznej reakcji. Jednak możliwe są także inne czynniki ograniczające maksymalne tempo autokatalizy. Przykładowo, enzym wymagany do autokatalizy może być dostępny

³W pracy [Granero].

⁴Ang. 'travelling waves'.

tylko w ograniczonej ilości. Przy wysokich stężeniach aktywatora reakcja zwalnia, ponieważ wszystkie cząstki enzymu są aktualnie zajęte. Prowadzi to w konsekwencji do nasycenia autokatalizy, gdyż maksymalne stężenie aktywatora nie może przekroczyć pewnej górnej granicy. Tego typu nasycenie ma znaczący wpływ na końcowy kształt powstających wzorów przestrzennych.

Do równania 2.1a można wprowadzić nasycenie produkcji aktywatora w następujący sposób:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = s \left(\frac{A^2}{I(1 + s_A A^2)} + b_A \right) - r_A A + D_A \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}. \quad (2.2)$$

Przy niskim stężeniu A , składnik $s_A A^2$ jest pomijalny w porównaniu z 1 i autokataliza przebiega tak, jak opisano wcześniej. Natomiast przy podwyższonym stężeniu A , składnik $s_A A^2$ staje się dominujący. Autokataliza nie może dalej postępować, ponieważ oba efekty samowzmacniania i spowalniania w wyniku wysycenia stają się proporcjonalne do A^2 .

Jeśli produkcja aktywatora jest ograniczona w wyniku nasycenia autokatalizy, również produkcja inhibitora nie może przekroczyć pewnego poziomu. W związku z tym wpływ inhibitora na sąsiednie obszary jest również ograniczony. Aktywowany region powiększa się w czasie, dopóki wystarczająca ilość inhibitora nie zostanie wyprodukowana. W dużych aktywowanych obszarach akumulacja inhibitora w centrum wywołuje stan bliski niestabilności i tendencję do rozpadu na dwa mniejsze ośrodki podwyższonego stężenia aktywatora. Mogą one być stosunkowo rozległe, pomimo małego zasięgu aktywatora. Współczynnik dyfuzji aktywatora determinuje bowiem tylko minimalną szerokość aktywnego obszaru. Poszczególne ośrodki aktywacji mogą mieć różne wielkości.

W wyniku nasycenia proporcje pomiędzy aktywowanymi i nieaktywnymi regionami stają się niezależne od wielkości całego obszaru. Ponadto nasycenie autokatalizy umożliwia zmianę położenia obszaru o maksymalnym stężeniu aktywatora na bardziej korzystne. Jeśli pewna część danego obszaru jest z jakichś względów w niekorzystnym położeniu, na przykład z powodu bliskości innego aktywnego obszaru, może ona zostać dezaktywowana na korzyść pozostałej części, która nie podlega działaniu inhibitora napływającego z sąsiedniego ośrodka aktywacji.

Więcej informacji o tego typu mechanizmach, w kontekście wzorów zabarwienia na muszlach, znaleźć można w książce [Meinh], na podstawie której opracowano niniejszy rozdział.

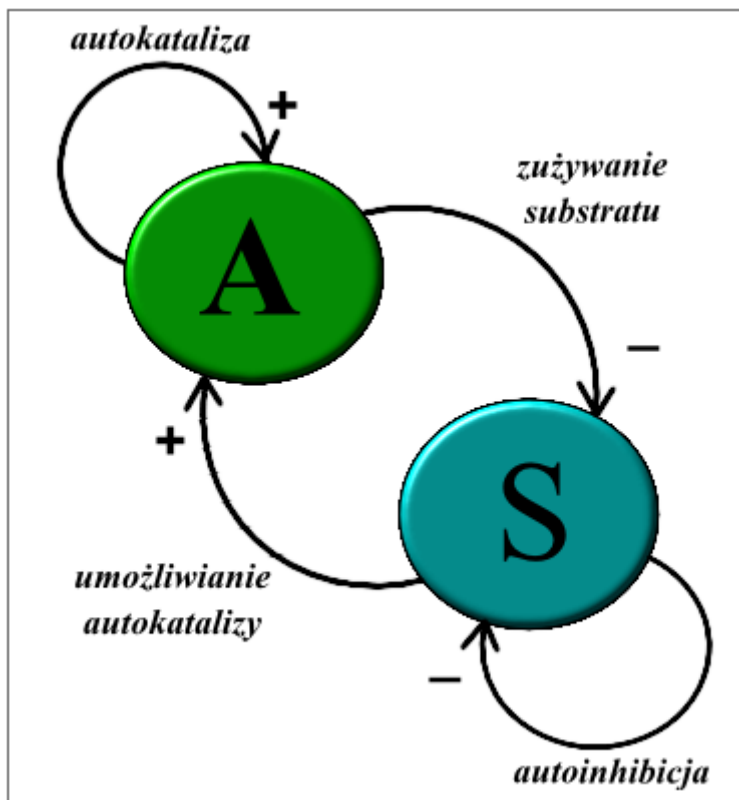
2.3. Układy typu aktywator-ubywający substrat

Jak wspomnieliśmy wcześniej w przykładzie o wydmach, antagonistyczny efekt może wynikać z wyczerpywania się substratu $I(x)$, który jest zużywany do katalitycznej produkcji aktywatora $A(x)$. W celu wytworzenia stabilnych wzorów przestrzennych, dostateczna ilość substratu musi być dostarczana, aby utrzymać stałą produkcję aktywatora (w szczególności $b_I > r_A$). Tak jak w układach typu reakcji-dyfuzji, dyfuzja substratu musi być szybsza od dyfuzji aktywatora $D_I \gg D_A$.

Powstanie lokalnego maksimum stężenia aktywatora powoduje znaczące obniżenie stężenia substratu w okolicy. W wyniku tego następny obszar maksymalnego stężenia aktywatora może powstać dopiero w pewnej odległości - tam, gdzie stężenie substratu jest wystarczająco wysokie do utrzymania autokatalizy aktywatora. Impuls aktywacji rozprzestrzenia się w ten sposób jak fala, prowadząc do powstania regularnych przestrzennie, okresowych wzorów. Obszar zajmowany przez ośrodek aktywacji ma ten sam rząd wielkości, co szerokość przestrzeni oddzielającej kolejne obszary maksymalnego stężenia aktywatora. W odróżnieniu od tego, w

układzie aktywator-inhibitor aktywowane regiony mogą zajmować tylko małą część całego obszaru.

Schemat modelu z wyczerpywanym substratem przedstawia rysunek 2.2. Interakcje pomiędzy substancjami w tym modelu mogą być opisane następującymi równaniami.



Rysunek 2.2: Aktywator - A potrzebuje do autokatalizy (+) substratu - S. Ilość substratu jest w ten sposób wyczerpywana (-) ograniczając produkcję aktywatora.

Układ aktywator-ubywający substrat⁵:

$$\text{(aktywator)} \quad \frac{\partial A}{\partial t} = sI\tilde{A}^2 - r_A A + D_A \frac{\partial^2 A}{\partial x^2}, \quad (2.3a)$$

$$\text{(ubywający substrat)} \quad \frac{\partial I}{\partial t} = -sI\tilde{A}^2 - r_I I + b_I(x) + D_I \frac{\partial^2 I}{\partial x^2}, \quad (2.3b)$$

gdzie

$$\tilde{A}^2 = \frac{A^2}{1 + s_A A^2} + b_A.$$

Zobaczmy co oznaczają poszczególne elementy w równaniach 2.3:

- s_A - współczynnik *saturacji* (nasylenia).
- $sI\tilde{A}^2$ - tempo produkcji aktywatora. Nieliniowa autokataliza jest proporcjonalna do stężenia substratu I . Prowadzi ona do zmniejszenia stężenia I o tę samą wielkość $-sI\tilde{A}^2$.

⁵Ang. 'activator-depleted substrate system' (mniej adekwatna nazwa historyczna - 'positive feedback system').

- b_A - podstawowa produkcja aktywatora. Niewielka produkcja, niezależna od aktualnej ilości aktywatora, może zainicjować układ o niskim stężeniu aktywatora. Jest wymagana do regeneracji wzorów przestrzennych lub do podtrzymania oscylacji.
- $b_I(x)$ - tempo produkcji substratu I . Zwykle jest takie samo w całym obszarze. Jednakże, dla niektórych wzorów przestrzennych kluczowe jest to, iż może przyjmować różne wartości, np. wzdłuż rosnącej krawędzi muszli.
- $-r_I I$ - składnik opisujący tempo niszczenia substratu niezależnie od zużywania go w wyniku autokatalizy aktywatora. Nie jest konieczny do tworzenia wzorów przestrzennych. Ogranicza maksymalne stężenie substratu w nieaktywowanych regionach. Ma podobny efekt działania, jak składnik b_I w równaniu 2.1b.
- $s_A A^2$ - składnik odpowiedzialny za nasycenie produkcji aktywatora. Ma podobny wpływ, jak w równaniu 2.2: za jego sprawą obszary maksymalnego stężenia aktywatora stają się większe.

Układ opisany równaniami 2.3 jest podobny do modelu Brukselatora⁶, zaproponowanego przez Prigogine'a i Lefever'a w 1968, który będziemy analizować w rozdziale 4.

2.4. Wyprowadzenie równania reakcji-dyfuzji

Przedstawimy teraz matematyczno-fizyczne uzasadnienie rozważanych w tej pracy równań reakcji-dyfuzji.

Na początek przyjmijmy dość naturalne założenie, że reakcja chemiczna zachodzi w ograniczonym obszarze $U \subset \mathbb{R}^n$ (z powodów fizycznych rozważa się zwykle $n = 1, 2$ lub 3). Niech $u(x, t)$ będzie stężeniem substancji w punkcie x w momencie t , a $V \subset U$ dowolnym obszarem zawierającym x , o brzegu ∂V . Na mocy *prawa Ficka*⁷ strumień dyfuzji jest proporcjonalny do gradientu stężeń

$$\mathbf{J}(x, t) = D \nabla_x u(x, t), \quad (2.4)$$

gdzie D jest współczynnikiem dyfuzji.

Ilość substancji przepływającej przez brzeg obszaru V w jednostce czasu jest równa

$$Q_1 = \int_{\partial V} \mathbf{J}(x, t) \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS. \quad (2.5)$$

Z twierdzenia 1.2 (Gaussa-Greena) wiemy, że równość 2.5 przyjmuje postać

$$\int_{\partial V} \mathbf{J}(x, t) \cdot \boldsymbol{\nu} \, dS = \int_V \operatorname{div} \mathbf{J} \, dx, \quad (2.6)$$

Funkcja $f(u(x, t))$ opisuje zmianę ilości substancji w wyniku reakcji chemicznych zachodzących w obszarze U . Substancja może być zarówno produkowana, jak i zużywana w trakcie tych reakcji. Możemy napisać, że sumaryczna zmiana stężenia w wyniku lokalnych reakcji w obszarze V wynosi

⁶Patrz rozdział 4.4.

⁷Adolf Eugen Fick (ur. 3 września 1829 w Kassel, zm. 21 sierpnia 1901 w Blankenberge) – niemiecki fizjolog, profesor na Uniwersytecie w Zurychu i Würzburgu. Przypisuje mu się wynalezienie soczewek kontaktowych. Sformułował prawa Ficka.

$$Q_2 = \int_V f(u) dx. \quad (2.7)$$

Zatem całkowita zmiana stężenia w jednostce czasu w obszarze V jest sumą wyrażeń z 2.5 i 2.7. Korzystając z równości 2.6, możemy powiedzieć, że ma ona postać

$$\int_V u_t(x, t) dx = Q_1 + Q_2 = \int_V \operatorname{div} \mathbf{J} + f(u) dx,$$

co oznacza, że

$$\int_V \operatorname{div} \mathbf{J} + f(u(x, t)) - u_t(x, t) dx = 0.$$

Z dowolności obszaru V wnioskujemy, że

$$\operatorname{div} \mathbf{J} + f(u) - u_t(x, t) = 0. \quad (2.8)$$

Podstawiając w równości 2.8 postać \mathbf{J} z 2.4 otrzymujemy ostatecznie *semi-liniowe paraboliczne*⁸ równanie różniczkowe cząstkowe postaci

$$u_t(x, t) = \operatorname{div} \mathbf{J} + f(u) = \operatorname{div} (D \nabla_x u) + f(u) = D \Delta_x u(x, t) + f(u). \quad (2.9)$$

Zakładamy tu milcząco, że funkcja u jest klasy $C^2(U)$, a brzeg ∂V jest co najmniej klasy C^1 .

W przypadku dwóch substancji reagujących ze sobą, postępując w analogiczny jak wyżej sposób, otrzymujemy układ równań *reakcji-dyfuzji*

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t}(x, t) = D_1 \Delta_x u_1(x, t) + F_1(u_1, u_2), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t}(x, t) = D_2 \Delta_x u_2(x, t) + F_2(u_1, u_2), \end{cases} \quad (2.10)$$

który można przepisać w postaci wektorowej w następujący sposób

$$\mathbf{u}_t(x, t) = \mathbf{D} \Delta_x \mathbf{u}(x, t) + \mathbf{F}(\mathbf{u}), \quad (2.11)$$

gdzie funkcja $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$ opisuje stężenia obu reagentów (funkcja $u_i(x, t)$ opisuje stężenie i -tej substancji w punkcie x w momencie t), \mathbf{D} jest diagonalną macierzą dyfuzji

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

natomiast funkcja wektorowa $\mathbf{F}(\mathbf{u}) = (F_1(\mathbf{u}), F_2(\mathbf{u}))$ określa zmiany ilości substancji w wyniku zachodzących między nimi reakcji chemicznych - $F_i(\mathbf{u})$ wyznacza zmianę stężenia i -tej substancji w danym punkcie czasoprzestrzeni w zależności od stężeń obu reagentów. Dodajmy jeszcze, że przez $\Delta_x \mathbf{u}(x, t)$ rozumiemy wektor $(\Delta_x u_1, \Delta_x u_2)$.

W najprostszym przypadku, równanie reakcji-dyfuzji opisuje stężenie jednej substancji w jednym wymiarze przestrzennym. Równanie to nosi nazwę równania KPP (Kolmogorov-Pietrowski-Piskunov). Nie prowadzi ono jednak do interesujących nas rozwiązań. Dopiero układ dwóch równań reakcji-dyfuzji może wytworzyć efekt *niestabilności Turinga*, nazywanej często niestabilnością dyfuzyjną.

Zajmiemy się dalej aparatem matematycznym umożliwiającym analizę tego typu zagadnień.

⁸Z ogólnie znanej klasyfikacji równań różniczkowych cząstkowych drugiego rzędu.

Rozdział 3

Metoda Fouriera rozdzielenia zmiennych

W tym rozdziale przedstawimy *metodę Fouriera rozdzielenia zmiennych*. Technika ta pozwala czasem znajdować jawne rozwiązania pewnych równań różniczkowych cząstkowych. Stosuje się ją głównie przy rozwiązywaniu równań hiperbolicznych i parabolicznych, ale również do równań eliptycznych. Poniżej przedstawimy ogólną teorię znajdowania rozwiązań metodą Fouriera dla równań ewolucyjnych drugiego rzędu.

Niech U będzie jak zwykle otwartym, ograniczonym podzbiorem \mathbb{R}^n . Oznaczmy przestrzeń zmiennych x i t przez $D = U \times \{t > 0\}$. Ogólne równanie ewolucyjne drugiego rzędu określone w obszarze D jest postaci

$$(L_x - L_t)u = \sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n B_i(x)u_{x_i} + C(x)u - \alpha(t)u_{tt} - \beta(t)u_t - \gamma(t)u = 0, \quad (3.1)$$

gdzie L_x i L_t są cząstkowymi operatorami różniczkowymi drugiego rzędu w postaci *niedywergencyjnej*.

Założmy, że forma kwadratowa $\sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)\lambda_i\lambda_j$ odpowiadająca równaniu 3.1 (tzw. *forma charakterystyczna*) jest dodatnio określona, natomiast współczynnik $\alpha(t)$ jest albo dodatni, albo tożsamościowo równy zero, przy czym w tym ostatnim przypadku współczynnik $\beta(t)$ jest dodatni. Równanie 3.1 jest wtedy odpowiednio albo hiperboliczne, albo paraboliczne. Zajmiemy się dalej tylko interesującym nas przypadkiem parabolicznym ($\alpha(t) \equiv 0$, $\beta(t) > 0$)

$$\sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)u_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n B_i(x)u_{x_i} + C(x)u - \beta(t)u_t - \gamma(t)u = 0. \quad (3.2)$$

Ogólne zagadnienie mieszane dla równania 3.1 polega na znalezieniu *regularnego* (odpowiedniej klasy gładkości) w obszarze D rozwiązania $u(x, t)$ spełniającego następujące warunki:

- *brzegowy*

$$\sum_{i=1}^n a_i(x)u_{x_i} + b(x)u = 0 \quad \text{dla } x \in \partial U, t \geq 0. \quad (3.3)$$

- *początkowy*

$$u(x, 0) = \varphi(x) \quad \text{dla } x \in U. \quad (3.4)$$

W celu zapewnienia ciągłości szukanego rozwiązania, powinny być spełnione pewne *warunki zgodności* dla warunków 3.3 i 3.4, tzn. wartości funkcji powinny się zgadzać na brzegu obszaru D .

3.1. Teoria

Główna idea metody rozdzielania zmiennych polega na szukaniu rozwiązania w postaci *iloczynu* dwóch funkcji, z których każda zależy od innych zmiennych

$$u(x, t) = X(x) \cdot T(t).$$

Wstawiając funkcję u takiej postaci do równania 3.1 i do warunku brzegowego 3.3, dostajemy odpowiednio

$$\begin{aligned} X(x) [\beta(t)T_t + \gamma(t)T(t)] &= \\ &= \left(\sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)X_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n B_i(x)X_{x_i} + C(x)X(x) \right) T(t) \end{aligned} \quad (3.5)$$

oraz

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i(x)X_{x_i} + b(x)X(x) \right) T(t) = 0. \quad (3.6)$$

Zauważmy, że po podzieleniu równości 3.5 stronami przez $X(x)T(t) \neq 0$ (interesują nas *nietrywialne* rozwiązania, tzn. takie, że funkcje $X(x)$ i $T(t)$ nie są tożsamościowo równe zeru) otrzymujemy po lewej stronie funkcję zależną tylko od zmiennej t , a po prawej stronie funkcję zależną tylko od zmiennej x . Równość ta może być spełniona tylko wtedy, gdy obie te funkcje są równe pewnej (*tej samej*) stałej. Nazwijmy ją tendencyjnie $-\lambda = \text{const}$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} [\beta(t)T_t + \gamma(t)T] &= -\lambda = \\ &= \frac{1}{X} \left(\sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)X_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n B_i(x)X_{x_i} + C(x)X \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Analogicznie, dzielimy równość 3.6 przez $T(t) \neq 0$. Stąd oraz z równości 3.7 otrzymujemy następujące równania

$$\beta(t)T_t + [\gamma(t) + \lambda]T(t) = 0 \quad \text{dla } t > 0, \quad (3.8a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i,j=1}^n A_{ij}(x)X_{x_i x_j} + \sum_{i=1}^n B_i(x)X_{x_i} + [C(x) + \lambda]X(x) = 0 \quad \text{dla } x \in U, \\ \sum_{i=1}^n a_i(x)X_{x_i} + b(x)X(x) = 0 \quad \text{dla } x \in \partial U. \end{array} \right. \quad (3.8b)$$

Wartość λ , dla której zagadnienie brzegowe 3.8b ma nietrywialne rozwiązanie $X(x)$, nazywa się *wartością własną*, a samą funkcję $X(x)$ - odpowiadającą jej *funkcją własną* operatora różniczkowego L_x

$$L_x X(x) = -\lambda X(x).$$

Zbiór wszystkich wartości własnych zagadnienia 3.8b nazywamy *widmem punktowym* operatora L_x . Zadanie znalezienia widma i odpowiadającego mu układu funkcji własnych w ogólności nie musi być łatwe. W wielu przypadkach jednak widmo operatora L_x jest przeliczalne, postaci

$$\{\lambda_k \mid \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_k < \dots\}, \quad \lim_{k \rightarrow +\infty} \lambda_k = +\infty,$$

a układ liniowo niezależnych funkcji własnych tworzy bazę ortogonalną przestrzeni funkcji całkownych z kwadratem w obszarze U - przestrzeń tę oznacza się zwykle przez $L^2(U)$.

$$\{X_1(x), X_2(x), \dots\}, \quad \forall_{i \neq j} \langle X_i(x), X_j(x) \rangle_{L^2(U)} = \int_U X_i(x) X_j(x) dx = 0,$$

gdzie $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(U)}$ oznacza iloczyn skalarny w $L^2(U)$.

W przykładach zobaczymy zagadnienia tego typu dla $n = 1$, w których zarówno wartości, jak i funkcje własne będą stosunkowo łatwe do wyznaczenia.

Została nam jeszcze do rozpatrzenia druga część zagadnienia 3.8. Równanie 3.8a jest równaniem różniczkowym *zwyczajnym* drugiego rzędu. Oznaczmy przez $T_k(t)$ jego rozwiązanie ogólne odpowiadające wartości własnej λ_k . Z teorii równań zwyczajnych wiemy, że jest ono postaci

$$T_k(t) = A_k T_{k_1}(t), \quad (3.9)$$

gdzie A_k jest dowolną stałą rzeczywistą, a $T_{k_1}(t)$ to rozwiązanie równania 3.8a spełniające warunek początkowy

$$T_{k_1}(0) = 1.$$

Funkcja $u(x, t)$ postaci

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{+\infty} X_k(x) T_k(t) \quad (3.10)$$

jest rozwiązaniem równania 3.2, spełniającym warunek brzegowy 3.3 (zauważmy, że każdy składnik szeregu 3.10, osobno, jest takim rozwiązaniem $u_k(x, t) = X_k(x) T_k(t)$), o ile szereg po prawej stronie równości oraz szeregi otrzymane z niego przez różniczkowanie wyraz po wyrazie potrzebną liczbę razy są zbieżne jednostajnie. Wstawiając funkcję $u(x, t)$ postaci 3.10 do warunku początkowego 3.4 otrzymujemy

$$\sum_{k=1}^{+\infty} A_k X_k(x) = \varphi(x). \quad (3.11)$$

Pozostają nam więc do wyznaczenia współczynniki A_k . Zakładając, że funkcja określająca warunek początkowy $\varphi(x)$ należy do $L^2(U)$, stałe w równości 3.11 są tak zwanymi *współczynnikami Fouriera* tej funkcji, wynoszącymi

$$N^2(X_k) A_k = \langle \varphi(x), X_k(x) \rangle = \int_U \varphi(x) X_k(x) dx, \quad (3.12)$$

gdzie $N(\cdot) = \|\cdot\|_{L^2(U)}$ oznacza *normę* elementu w L^2 pochodzącą od iloczynu skalarnego:

$$N(X_k(x)) = \|X_k(x)\|_{L^2(U)} = \sqrt{\langle X_k(x), X_k(x) \rangle} = \left(\int_U X_k^2(x) dx \right)^{1/2}.$$

Wstawiając znalezione w ten sposób współczynniki A_k z równości 3.12 do równania 3.9, otrzymujemy $\forall_{k=1,2,\dots}$ funkcje $T_k(t)$. Zatem ostatecznie *rozwiązanie klasyczne* zagadnienia 3.2, z warunkiem brzegowym 3.3 i warunkiem początkowym 3.4, w postaci szeregu nieskończonego ma postać

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{+\infty} X_k(x) A_k T_{k_1}(t).$$

3.1.1. Uwagi do przypadku jednowymiarowego

W przypadku $n = 1$ przedstawione powyżej rozważania nieco się upraszczają. Zbiór $U \subset \mathbb{R}$ staje się otwartym odcinkiem $(0, l)$, a obszar określoności równania 3.2 nieskończonym półpasem $D = U \times \{t > 0\}$

$$A(x)u_{xx} + B(x)u_x + C(x)u - \beta(t)u_t - \gamma(t)u = 0 \quad \text{dla } x \in (0, l), t > 0. \quad (3.13)$$

Pierwsze z równań zagadnienia 3.8b jest liniowym równaniem różniczkowym zwyczajnym

$$A(x)X''(x) + B(x)X'(x) + (C(x) + \lambda)X(x) = 0 \quad \text{dla } x \in (0, l), \quad (3.14)$$

z warunkiem brzegowym postaci

$$\begin{cases} a_1 X'(0) + b_1 X(0) = 0, \\ a_2 X'(l) + b_2 X(l) = 0, \end{cases} \quad (3.15)$$

gdzie $a_k, b_k, k = 1, 2$, są stałymi, ponieważ warunek brzegowy 3.3 przyjmuje w tym wypadku postać

$$\begin{cases} a_1(0)u_x(0, t) + b_1(0)u(0, t) = 0, \\ a_2(l)u_x(l, t) + b_2(l)u(l, t) = 0. \end{cases} \quad \text{dla } t \geq 0.$$

Zagadnienie spektralne polegające na znalezieniu wartości własnych i funkcji własnych dla 3.14, 3.15 nazywa się zagadnieniem *Sturma-Liouville'a* (w skrócie S-L). W ogólnym przypadku zadanie to jest kłopotliwe. Komplikuje się ono bardzo, jeśli współczynnik $A(x)$ przyjmuje w różnych punktach przedziału $(0, l)$ wartość zero. Do rozwiązania zagadnienia S-L konieczne jest wtedy wprowadzenie tak zwanych *funkcji specjalnych*, np. *funkcji Bessela*.

My zajmiemy się teraz przypadkiem prostszym, gdy w równaniu 3.13 współczynniki są stałe.

3.2. Praktyka

Szczegóły metody Fouriera omówimy na prostym przykładzie. Skupimy się tutaj na równaniu przewodnictwa cieplnego (dyfuzji) określonym na skończonym odcinku $(0, l) \subset \mathbb{R}$. Znajdziemy rozwiązanie tego równania dla interesujących nas warunków brzegowych.

3.2.1. Równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji) z warunkami brzegowymi Neumanna

Spójrzmy na równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji) na odcinku, z zerowymi warunkami brzegowymi Neumanna (brak przepływu przez brzeg obszaru)

$$\begin{cases} u_t - a^2 u_{xx} = 0 & \text{dla } x \in (0, l), t > 0, \\ u(x, 0) = \varphi(x) & \text{dla } x \in (0, l), \\ u_x(0, t) = u_x(l, t) = 0 & \text{dla } t \geq 0, \end{cases} \quad (3.16)$$

gdzie współczynnik $a \in \mathbb{R}$. Warunki zgodności: $\varphi(0) = \varphi(l) = 0$.

Szukając rozwiązania przy użyciu metody Fouriera $u(x, t) = X(x)T(t)$ otrzymujemy z zagadnienia 3.16 następujące równania

$$X''(x) + \lambda X(x) = 0, \quad (3.17a)$$

$$T'(t) + a^2 \lambda T(t) = 0, \quad (3.17b)$$

$$X(x)T(0) = \varphi(x), \quad (3.17c)$$

$$X'(0)T(t) = X'(l)T(t) = 0 \Rightarrow X'(0) = X'(l) = 0. \quad (3.17d)$$

Zajmijmy się najpierw zagadnieniem 3.17a, 3.17d

$$\begin{cases} X''(x) + \lambda X(x) = 0 & \text{dla } x \in (0, l), \\ X'(0) = X'(l) = 0, \end{cases} \quad (3.18)$$

które jest szczególnym przypadkiem zagadnienia S-L. Korzystając z wiedzy o równaniach różniczkowych zwyczajnych możemy powiedzieć, że jest to jednorodne, liniowe równanie różniczkowe zwyczajne drugiego rzędu. Szukamy jego rozwiązania w postaci $X(x) = e^{rx}$. Wstawiając taką postać do równania i mnożąc je stronami przez e^{-rx} otrzymujemy *równanie charakterystyczne* równania 3.17a

$$r^2 + \lambda = 0,$$

które jest w tym wypadku zwykłym wielomianem kwadratowym. Sięgając do nabytej w szkole wiedzy możemy zauważyć, że jego rozwiązania zależą od znaku tzw. *wyróżnika* $\Delta = -4\lambda$. Z kursu równań zwyczajnych wiemy, że w zależności od tego znaku rozwiązania równania są następującej postaci

- dla $\lambda = 0 \Rightarrow \Delta = 0 \Rightarrow r = 0$ (podwójny pierwiastek rzeczywisty)

$$X(x) = C_1 x + C_2, \quad (3.19)$$

- dla $\lambda < 0 \Rightarrow \Delta > 0 \Rightarrow r = \pm \frac{\sqrt{\Delta}}{2} = \pm \sqrt{-\lambda}$ (dwa różne pierwiastki rzeczywiste)

$$X(x) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda}x} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda}x}, \quad (3.20)$$

- dla $\lambda > 0 \Rightarrow \Delta < 0 \Rightarrow r = \pm \frac{\sqrt{\Delta}}{2} = \pm i\sqrt{\lambda}$ (sprzężone pierwiastki zespolone)

$$X(x) = C_1 \cos(\sqrt{\lambda}x) + C_2 \sin(\sqrt{\lambda}x), \quad (3.21)$$

gdzie C_1 i C_2 są dowolnymi stałymi rzeczywistymi.

Sprawdźmy, co uzyskamy wstawiając te równania do warunków brzegowych 3.17d:

- z równości 3.19 dostajemy

$$\begin{cases} X'(0) = C_1 = 0 \\ X'(l) = C_1 = 0, \end{cases} \Rightarrow C_2 - \text{dowolne.}$$

Wstawiając rozwiązanie $X(x) = C_2$ do równania 3.18 dostajemy

$$\lambda C_2 = 0 \Rightarrow C_2 = 0.$$

- z równości 3.20 dostajemy

$$\begin{cases} X'(0) = \sqrt{-\lambda} (C_1 e^{\sqrt{-\lambda} \cdot 0} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda} \cdot 0}) = 0, \\ X'(l) = \sqrt{-\lambda} (C_1 e^{\sqrt{-\lambda} l} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda} l}) = 0, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C_1 + C_2 = 0, \\ C_1 (e^{\sqrt{-\lambda} l} - e^{-\sqrt{-\lambda} l}) = 0. \end{cases}$$

Stąd $C_1 = C_2 = 0$.

- z równości 3.21 mamy

$$\begin{cases} X'(0) = -\sqrt{-\lambda}C_1 \underbrace{\sin(\sqrt{\lambda}0)}_{=0} + \sqrt{-\lambda}C_2 \underbrace{\cos(\sqrt{\lambda}0)}_{=1} = 0, \\ X'(l) = -\sqrt{-\lambda}C_1 \sin(\sqrt{\lambda}l) + \sqrt{-\lambda}C_2 \cos(\sqrt{\lambda}l) = 0, \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} C_2 = 0, \\ C_1 \sin(\sqrt{\lambda}l) = 0. \end{cases}$$

Nietrywialne rozwiązanie ($C_1 \neq 0$) otrzymujemy dla

$$\begin{aligned} \sin(\sqrt{\lambda}l) = 0 &\Leftrightarrow \sqrt{\lambda}l = k\pi, \quad k \in \mathbb{Z}, \\ \lambda := \lambda_k &= \left(\frac{k\pi}{l}\right)^2. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Zatem ostatecznie funkcje własne zagadnienia 3.18 odpowiadające wartościom własnym 3.22 mają postać

$$X_k(x) = C_k \cos\left(\frac{k\pi}{l}x\right), \quad k \in \{0, 1, 2, \dots\},$$

gdzie C_k są dowolnymi stałymi rzeczywistymi różnymi od zera.

Wobec tego, że funkcje $\cos(kx)$ i $\cos(-kx)$ są liniowo zależne, można ograniczyć się do rozpatrywania tylko nieujemnych wartości $k \in \{0, 1, 2, \dots\}$.

Dla każdego k znajdujemy w podobny sposób funkcje $T_k(t)$ spełniające równanie 3.17b dla λ_k . Otrzymujemy

$$T_k(t) = A_k e^{-\left(\frac{ak\pi}{l}\right)^2 t}.$$

Po ewentualnej zmianie oznaczeń współczynników ($A_k := A_k C_k$) rozwiązanie wygląda następująco

$$\begin{aligned} u(x, t) = X(x)T(t) &= \sum_{k=0}^{+\infty} X_k(x)T_k(t) = \sum_{k=0}^{+\infty} u_k(x, t) = \\ &= A_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} \cos\left(\frac{k\pi}{l}x\right) \left[A_k e^{-\left(\frac{ak\pi}{l}\right)^2 t} \right]. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Pozostaje więc wyliczyć stałe A_k w szeregu 3.23. Wykorzystamy do tego celu warunek początkowy 3.17c. Funkcja u musi spełniać warunek

$$\begin{aligned} u(x, 0) &= \sum_{k=0}^{+\infty} u_k(x, 0) = A_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} \cos\left(\frac{k\pi}{l}x\right) \left[A_k e^{-\left(\frac{ak\pi}{l}\right)^2 0} \right] = \\ &= A_0 + \sum_{k=1}^{+\infty} A_k \cos\left(\frac{k\pi}{l}x\right) = \varphi(x). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Wystarczy więc rozwinąć funkcję $\varphi(x)$ w *szereg Fouriera*. Możemy to zrobić zakładając, że funkcja $\varphi \in L^2(0, l)$ i przedłużając ją parzyście lub nieparzyście (w zależności od potrzeby) na cały przedział $(-l, l)$. Przyjmujemy ponadto, że otrzymana w ten sposób funkcja $\tilde{\varphi}(x)$ spełnia warunki zgodności $\tilde{\varphi}(-l) = \varphi(l)$, a następnie rozszerzamy ją okresowo na całą prostą rzeczywistą. Otrzymujemy w ten sposób funkcję $2l$ okresową, rozwijalną w szereg Fouriera, przy czym dla $x \in (0, l)$ szereg ten jest zgodny z szeregiem Fouriera oryginalnej funkcji.

W naszym przypadku przedłużamy funkcję $\varphi(x)$ w sposób parzysty dla $x < 0$

$$\tilde{\varphi}(x) = \begin{cases} \varphi(x) & \text{dla } x > 0, \\ \varphi(-x) & \text{dla } x < 0, \end{cases}$$

co pozwala na rozwinięcie jej w szereg cosinusów, czyli funkcji $\{X_k\}_{k=1,2,\dots}$. Zauważmy następujący fakt (korzystamy z tego, że iloczyn funkcji parzystych jest funkcją parzystą)

$$\int_{-l}^l \tilde{\varphi}(x) \cos(x) dx = 2 \int_0^l \tilde{\varphi}(x) \cos(x) dx = 2 \int_0^l \varphi(x) \cos(x) dx. \quad (3.25)$$

Z ogólnej wiedzy o całkowaniu, wiemy, że funkcje $X_k(x)$ tworzą *układ ortogonalny*. Przekonujemy się o tym całkując przez części. Otrzymujemy

$$\|X_k(x)\|^2 = \int_{-l}^l \cos^2\left(\frac{k\pi}{l}x\right) dx = l \quad \text{dla } k \neq 0$$

oraz

$$\langle X_m(x), X_n(x) \rangle = \int_{-l}^l \cos\left(\frac{m\pi}{l}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{l}x\right) dx = 0 \quad \text{dla } m \neq n.$$

Na podstawie równości 3.24, korzystając z powyższych rozważań o całkowaniu oraz z faktu 3.25, wnioskujemy, że współczynniki A_k mają następującą postać

$$\begin{cases} A_0 = \frac{1}{l} \int_0^l \varphi(x) dx, \\ A_k = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \cos\left(\frac{k\pi}{l}x\right) dx. \end{cases} \quad (3.26)$$

Zwróćmy uwagę, że przy założeniu $\varphi(x) \in L^2(0, l)$, współczynniki A_k postaci 3.26 są ograniczone niezależnie od k . Zatem, ponieważ w szeregu 3.23 występują szybko gasnące czynniki $e^{-a^2\lambda_k t}$, więc funkcja u jest *gładka* na zbiorze $(0, l) \times (0, +\infty)$. Regularność funkcji u w chwili $t = 0$ zależy od regularności warunku początkowego.

3.2.2. Niejednorodne równanie przewodnictwa cieplnego (dyfuzji)

Metoda Fouriera daje się również stosować w przypadku równań niejednorodnych. Przeanalizujemy przykład tego typu dla równania przewodnictwa cieplnego/dyfuzji (z warunkami brzegowymi Neumanna) następującej postaci

$$\begin{cases} u_t - a^2 u_{xx} = w(x, t) & \text{dla } x \in (0, l), t > 0, \\ u(x, 0) = \varphi(x) & \text{dla } x \in (0, l), \\ u_x(0, t) = u_x(l, t) = 0 & \text{dla } t \geq 0, \end{cases} \quad (3.27)$$

gdzie $w(x, t)$ pełni rolę zewnętrznego źródła ciepła, czy też źródła dyfundującej substancji. Załóżmy, że funkcja $w(x, t)$ daje się przedstawić w postaci szeregu funkcji własnych X_k zagadnienia S-L

$$X''(x) = -\lambda X(x), \quad (3.28a)$$

$$X'(0) = X(l) = 0, \quad (3.28b)$$

oraz spełnia warunek zgodności

$$w(0) = w(l) = 0.$$

Tak jak poprzednio, szukamy rozwiązania $u(x, t)$ zagadnienia 3.27 w postaci szeregu

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{+\infty} X_k(t)T_k(t), \quad (3.29)$$

gdzie $X_k(x)$ tworzą ortogonalny układ liniowo niezależnych funkcji własnych dla 3.28. Wiemy już (rozdział 3.2.1, zagadnienie 3.16), że

$$X_k(x) = C_k \cos\left(\sqrt{\lambda_k}x\right), \quad k \in \{0, 1, 2, \dots\},$$

przy czym

$$\lambda_k = \left(\frac{k\pi}{l}\right)^2.$$

Funkcje $T_k(t)$ wyznaczamy rozwijając funkcje $w(x, t)$ oraz $\varphi(x)$ w bazie funkcji własnych $X_k(x)$ (przy odpowiednich założeniach o tych funkcjach)

$$w(x, t) = \sum_{k=0}^{+\infty} W_k(t) \cos\left(\sqrt{\lambda_k}x\right),$$

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} A_k \cos\left(\sqrt{\lambda_k}x\right),$$

a następnie wstawiając $u(x, t)$ postaci 3.29 do pierwszego równania i warunków początkowych w 3.27. Otrzymujemy

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \left[T_k'(t)X_k(x) - a^2 T_k(t)X_k''(x) \right] = \sum_{k=0}^{+\infty} W_k(t)X_k(x), \quad (3.30)$$

$$\sum_{k=0}^{+\infty} T_k(0)X_k(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} A_k X_k(x).$$

Na podstawie równania 3.28a zapiszemy równość 3.30 w postaci

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \left[T_k'(t) + a^2 \lambda_k T_k(t) \right] X_k(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} W_k(t)X_k(x).$$

Stąd, aby $u(x, t)$ mogło być rozwiązaniem 3.27, funkcje $T_k(t)$ muszą spełniać równania różniczkowe zwyczajne

$$\begin{cases} T_k'(t) + a^2 \lambda_k T_k(t) = W_k(t), \\ T_k(0) = A_k, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Rozwiązując je dostajemy rozwiązanie problemu 3.27.

Rozdział 4

Analiza stabilności stanu stacjonarnego

Zajmiemy się teraz analizą stabilności stanu stacjonarnego układu równań reakcji-dyfuzji (na podstawie książki [Keshet]), która doprowadzi nas do warunków na współczynniki, przy których występuje efekt tzw. *niestabilności Turinga*.

Ogólna intuicja jest taka, że procesy *dyfuzji* prowadzą raczej do sytuacji jednorodnych przestrzennie, w pewnym sensie gładkich. Przykładowo, słodząc herbatę spodziewamy się, że (po odpowiednim czasie) cała objętość płynu będzie słodka, a nie tylko pewna jej część. Dlatego zaskakującym jest fakt, iż dyfuzja może wywoływać zupełnie przeciwne efekty, które prowadzą do powstawania pewnych niejednorodnych przestrzennie struktur, czy wzorów.

Pierwszy opisał to zjawisko młody matematyk brytyjski, Alan Turing, w pracy [Turing] z 1952 roku, którą uważa się za jeden z ważniejszych wkładów matematyki w dziedzinę biologii ewolucyjnej.

Idąc Jego śladem będziemy chcieli zbadać wpływ dyfuzji na tworzenie się wzorów przestrzennych w układzie dwóch reagujących ze sobą *morfogenów* opisanym równaniami 2.10.

Zbadamy najpierw stabilność jednorodnego przestrzennie stanu stacjonarnego w przypadku braku dyfuzji. Do tego celu wykorzystamy linearyzację rozwiązania startującego z zaburzonego stanu stacjonarnego. Postać zaburzenia znajdziemy posługując się rozważaniami na temat metody Fouriera z rozdziału 3.

Następnie zastanowimy się, kiedy znalezione w ten sposób warunki stabilności stanu stacjonarnego mogą zostać naruszone, po ponownym uwzględnieniu dyfuzji w układzie, powodując tym samym dyfuzyjną niestabilność (niestabilność Turinga) tegoż stanu stacjonarnego.

4.1. Stan stacjonarny

Dla uproszczenia zajmiemy się przypadkiem jednowymiarowym, tzn. $x \in U \subset \mathbb{R}$, gdzie $U = (0, L)$ jest otwartym odcinkiem

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t}(x, t) = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}(x, t) + F_1(u_1, u_2), \\ \frac{\partial u_2}{\partial t}(x, t) = D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}(x, t) + F_2(u_1, u_2), \end{cases} \quad x \in U, t > 0. \quad (4.1)$$

Stałe D_1, D_2 są dodatnimi współczynnikami dyfuzji. Przyjmijmy, że funkcja u_i opisuje stężenie i -tej substancji, którą nazywać będziemy morfogenem i dla $i = 1, 2$. Funkcje F_i opisują

zmiany ilości odpowiednich substancji pod wpływem zachodzących między nimi reakcji chemicznych. Załóżmy, że funkcje $F_i \in C^2$ (będziemy je rozwijać w szereg Taylora do wyrazów pierwszego rzędu).

Założmy, że układ 4.1 ma dodatni (zerowy jest mało interesujący, natomiast ujemne stężenia substancji nie mają sensu, o ile nie mówimy o ciemnej materii) *jednorodny przestrzennie stan stacjonarny* $\tilde{\mathbf{u}}(x, t) = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)$, to znaczy taki, który nie zmienia się zarówno w czasie, jak i w przestrzeni. Z definicji oznacza to, że dla $i = 1, 2$

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t}(x, t) = 0, \\ \frac{\partial^2 \tilde{u}_i}{\partial x^2}(x, t) = 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Wynika stąd natychmiast, że

$$\begin{cases} F_1(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2) = 0, \\ F_2(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2) = 0. \end{cases}$$

Aby zbadać stabilność stanu stacjonarnego, wprowadzimy teraz małe, *niejednorodne przestrzennie* zaburzenie tego stanu $\mathbf{u}^\varepsilon(x, t) = (u_1^\varepsilon, u_2^\varepsilon)$. Będą nas szczególnie interesować zaburzenia, które są wzmacniane i rosną w czasie pod wpływem połączonych efektów reakcji chemicznych oraz dyfuzji. Powoduje to destabilizację stanu stacjonarnego i prowadzi do nowych rozwiązań przestrzennych. Startujące blisko stanu stacjonarnego, stężenia naszych morfogenów są postaci

$$\begin{cases} u_1(x, t) = \tilde{u}_1 + u_1^\varepsilon(x, t), \\ u_2(x, t) = \tilde{u}_2 + u_2^\varepsilon(x, t). \end{cases} \quad (4.3)$$

Wstawiając je do równań 4.1 i korzystając z warunków 4.2 otrzymujemy

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1^\varepsilon}{\partial t}(x, t) = D_1 \frac{\partial^2 u_1^\varepsilon}{\partial x^2}(x, t) + F_1(\tilde{u}_1 + u_1^\varepsilon, \tilde{u}_2 + u_2^\varepsilon), \\ \frac{\partial u_2^\varepsilon}{\partial t}(x, t) = D_2 \frac{\partial^2 u_2^\varepsilon}{\partial x^2}(x, t) + F_2(\tilde{u}_1 + u_1^\varepsilon, \tilde{u}_2 + u_2^\varepsilon), \end{cases} \quad x \in U, t > 0.$$

Pod warunkiem, że zaburzenia 4.3 są dostatecznie małe, możemy zlinearyzować ten układ, rozwijając funkcje F_1 i F_2 w szeregi Taylora wokół stanu stacjonarnego $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)$

$$\begin{aligned} F_1(u_1, u_2) &= \overbrace{F_1(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)}^{=0} + a_{11}(u_1 - \tilde{u}_1) + a_{12}(u_2 - \tilde{u}_2) + r_1(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}}) \\ &= a_{11}u_1^\varepsilon + a_{12}u_2^\varepsilon + r_1(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}}), \\ F_2(u_1, u_2) &= \overbrace{F_2(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)}^{=0} + a_{21}(u_1 - \tilde{u}_1) + a_{22}(u_2 - \tilde{u}_2) + r_2(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}}) \\ &= a_{21}u_1^\varepsilon + a_{22}u_2^\varepsilon + r_2(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}}), \end{aligned}$$

gdzie dla $i = 1, 2$

$$r_i(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}}) = o([\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}]^2) = o(\mathbf{u}^{\varepsilon 2})$$

jest resztą wyższego rzędu, tzn.

$$\lim_{\|\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}}\| \rightarrow 0} \frac{\|r_i(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}})\|}{\|(\mathbf{u} - \tilde{\mathbf{u}})^2\|} = \lim_{\|\mathbf{u}^\varepsilon\| \rightarrow 0} \frac{\|r_i(\mathbf{u}, \tilde{\mathbf{u}})\|}{\|(\mathbf{u}^\varepsilon)^2\|} = 0.$$

Współczynniki a_{ij} , $i, j = 1, 2$ są wyrazami macierzy Jacobiego funkcji $\mathbf{F} = (F_1, F_2)$ ewaluowanej w punkcie $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)$

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = D\mathbf{F}(\mathbf{u})|_{(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} \end{pmatrix} \Big|_{(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)}. \quad (4.4)$$

Otrzymujemy więc układ dwóch parabolicznych liniowych równań różniczkowych cząstkowych

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1^\varepsilon}{\partial t}(x, t) = D_1 \frac{\partial^2 u_1^\varepsilon}{\partial x^2}(x, t) + a_{11}u_1^\varepsilon + a_{12}u_2^\varepsilon, \\ \frac{\partial u_2^\varepsilon}{\partial t}(x, t) = D_2 \frac{\partial^2 u_2^\varepsilon}{\partial x^2}(x, t) + a_{21}u_1^\varepsilon + a_{22}u_2^\varepsilon, \end{cases} \quad x \in U, t > 0. \quad (4.5)$$

Korzystając z powyższych oznaczeń możemy zapisać układ zlinearyzowany 4.5 dla stanu stacjonarnego w postaci macierzowej

$$\mathbf{U}_t = \mathbf{D}\mathbf{U}_{xx} + \mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (4.6)$$

gdzie

$$\mathbf{U} = (\mathbf{u}^\varepsilon)^T = \begin{pmatrix} u_1^\varepsilon \\ u_2^\varepsilon \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}.$$

Układ 4.6 możemy rozwiązać metodą rozdzielania zmiennych (zakładając taką samą zależność u_1 i u_2 zarówno od czasu, jak i przestrzeni), uzupełniając go zerowymi warunkami brzegowymi Neumanna (brak przepływu na brzegu obszaru). Z wcześniejszych rozważań wiemy, że otrzymane rozwiązanie ma postać szeregu trygonometrycznego, którego pojedynczy składnik to

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_1^\varepsilon \\ u_2^\varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \cos(qx)e^{\sigma t} \quad (4.7)$$

dla pewnych stałych A_1, A_2 (amplitudy zaburzeń w chwili $t = 0$) oraz q (tzw. liczba falowa) i σ (wartość własna określająca tempo wzrostu). Zauważmy, że od znaku σ zależy, czy zaburzenie się propaguje ($\sigma > 0$), powodując **niestabilność**, czy też zanika, powracając asymptotycznie do stanu stacjonarnego ($\sigma < 0$). Interesują nas algebraiczne warunki na wszystkie stałe, które prowadzą do pierwszego z tych przypadków.

Wstawiając postać zaburzenia z równania 4.7 do 4.6 otrzymujemy

$$\begin{aligned} A_1\sigma \cos(qx)e^{\sigma t} &= -D_1A_1q^2 \cos(qx)e^{\sigma t} + a_{11}A_1 \cos(qx)e^{\sigma t} + a_{12}A_2 \cos(qx)e^{\sigma t}, \\ A_2\sigma \cos(qx)e^{\sigma t} &= -D_2A_2q^2 \cos(qx)e^{\sigma t} + a_{21}A_1 \cos(qx)e^{\sigma t} + a_{22}A_2 \cos(qx)e^{\sigma t}. \end{aligned}$$

Po przemnożeniu równań stronami przez $\frac{e^{-\sigma t}}{\cos(qx)} \neq 0$ i przerzuceniu wszystkich wyrazów na jedną stronę otrzymujemy równania liniowe ze względu na A_1 i A_2

$$\begin{aligned} A_1(\sigma + D_1q^2 - a_{11}) + A_2(-a_{12}) &= 0, \\ A_1(-a_{21}) + A_2(\sigma + D_2q^2 - a_{22}) &= 0. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Jednym z rozwiązań 4.8 jest $(A_1, A_2) = (0, 0)$, które oznacza całkowity brak zaburzeń, co jest dla nas mało interesujące. Nietrywialne rozwiązanie może istnieć tylko wtedy, gdy wyznacznik macierzy współczynników dla równań 4.8 jest równy zero

$$\det \begin{pmatrix} \sigma + D_1q^2 - a_{11} & -a_{12} \\ -a_{21} & \sigma + D_2q^2 - a_{22} \end{pmatrix} = 0. \quad (4.9)$$

Zauważmy, że powyższa macierz jest równa $\sigma\mathbf{I} - \mathbf{A}$, gdzie $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{D}q^2$, natomiast wyznacznik

$$0 = \det(\sigma\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \det(\mathbf{A} - \sigma\mathbf{I}) = \sigma^2 - (\operatorname{tr} \mathbf{A})\sigma + \det \mathbf{A}.$$

W związku z tym możemy powiedzieć, że warunek 4.9 prowadzi do wielomianu charakterystycznego macierzy \mathbf{A} postaci

$$(\sigma + D_1q^2 - a_{11})(\sigma + D_2q^2 - a_{22}) - (a_{12}a_{21}) = 0,$$

który po rozwinięciu nawiasów wyraża się w następującej formie

$$\begin{aligned} \sigma^2 + \sigma([D_1 + D_2]q^2 - [a_{11} + a_{22}]) + (D_1D_2q^2 - [D_1a_{22} + D_2a_{11}])q^2 + \\ + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0. \end{aligned} \quad (4.10)$$

W następnym rozdziale naszym celem będzie sprawdzenie czy istnieją wartości parametru q , dla których wartość własna σ może mieć dodatnią część rzeczywistą. Czyli innymi słowy, będziemy chcieli zobaczyć, czy możliwe jest wystąpienie niestabilności typu dyfuzyjnego, a jeśli tak, to jakie warunki prowadzą do takiej sytuacji.

4.2. Warunki na niestabilność Turinga

Jak już powiedzieliśmy wcześniej, aby zaburzenie 4.7 rosło w czasie, spełniony musi być warunek $\operatorname{Re}(\sigma) > 0$. Zobaczymy teraz w jaki sposób dyfuzja przyczynia się do destabilizacji stanu stacjonarnego.

Załóżmy w tym celu, że *przy braku dyfuzji, mieszanina reakcyjna jest w stanie stabilnym*. Oznacza to (korzystamy z twierdzenia Grobmana-Hartmana), że jeśli w równaniach 4.5 położymy $D_1 = D_2 = 0$, to otrzymamy wartości własne wyłącznie z ujemnymi częściami rzeczywistymi (**lokalna** asymptotyczna stabilność układu zlinearyzowanego). Przy takim założeniu, równanie 4.10 przybiera postać

$$\sigma^2 - \underbrace{\sigma(a_{11} + a_{22})}_{=\beta} + \underbrace{(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}_{=\gamma} = 0.$$

Możemy zauważyć, że powyższe równanie kwadratowe jest takie samo, jak równanie charakterystyczne dla układu równań różniczkowych zwyczajnych otrzymanych z układu 4.1 poprzez pominięcie członów dyfuzyjnych. Wyznamy teraz warunki, dla których stan stacjonarny tego układu jest stabilny, tzn. $\operatorname{Re} \sigma < 0$. Wartości własne mają postać

$$\sigma_{1,2} = \frac{\beta \pm \sqrt{\Delta}}{2}, \quad (4.11)$$

gdzie $\Delta = \beta^2 - 4\gamma$ jest wyróżnikiem wielomianu kwadratowego. Od jego znaku zależy, czy σ jest zespolona, czy rzeczywista. Napiszmy warunki, dla których σ ma niezerową część urojoną

$$\sigma \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \Leftrightarrow \Delta < 0 \Leftrightarrow (a_{11} - a_{22})^2 < -4(a_{12}a_{21}) \Leftrightarrow -2\sqrt{|a_{12}a_{21}|} < (a_{11} - a_{22}) < 2\sqrt{|a_{12}a_{21}|},$$

co oznacza, że $a_{12}a_{21} < 0$, czyli a_{12} i a_{21} mają przeciwne znaki.

Na podstawie 4.11 wnioskujemy, że **warunki na stabilność przy braku dyfuzji** są następujące:

1. jeśli σ jest zespolona, tzn. $\Delta < 0$

$$\beta < 0 \Leftrightarrow a_{11} + a_{22} < 0, \quad (4.12a)$$

2. jeśli σ jest rzeczywista, tzn. $\Delta > 0$

$$\begin{cases} \beta < 0, \\ |\beta| > \sqrt{\beta^2 - 4\gamma} \Leftrightarrow \gamma > 0, \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a_{11} + a_{22} < 0, \\ a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0. \end{cases} \quad (4.12b)$$

Rozważmy teraz analogiczne warunki dla równania 4.10 przy założeniu $D_1, D_2 \neq 0$.

$$\text{tr } \mathbf{A} = (a_{11} + a_{22}) - (D_1 + D_2)q^2 < 0, \quad (4.13a)$$

$$\det \mathbf{A} = (D_1D_2q^2 - [D_1a_{22} + D_2a_{11}])q^2 + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) > 0. \quad (4.13b)$$

Odwroćenie któregokolwiek z tych warunków skutkuje powstaniem niestabilności.

Zauważmy, że warunek 4.13a jest zawsze prawdziwy, o ile spełniony jest warunek 4.12a, ponieważ stałe D_1, D_2 są dodatnie. W związku z tym naruszony może być tylko warunek 4.13b. Zapiszmy warunek niestabilności w postaci wielomianu kwadratowego nowej zmiennej $p = q^2$

$$w(p) := \underbrace{D_1D_2}_{>0} p^2 - (D_1a_{22} + D_2a_{11})p + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) < 0. \quad (4.14)$$

Wykres funkcji $w(p)$ to parabola skierowana ku górze. W prosty sposób możemy znaleźć minimum funkcji $w(p)$, które jest osiąganym dla

$$p_{\min} = q_{\min}^2 = \frac{D_1a_{22} + D_2a_{11}}{2D_1D_2} = \frac{1}{2} \left(\frac{a_{22}}{D_2} + \frac{a_{11}}{D_1} \right) \quad (4.15)$$

i wynosi

$$w(p_{\min}) = -\frac{1}{D_1D_2} \left(\frac{D_1a_{22} + D_2a_{11}}{2} \right)^2 + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}).$$

Minimalny warunek, żeby nierówność 4.14 była spełniona dla pewnych wartości p , to $w(p_{\min}) < 0$. Możemy ten warunek przepisać w innej formie

$$0 < 2\sqrt{D_1D_2(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} < D_1a_{22} + D_2a_{11}. \quad (4.16)$$

Jeśli warunek 4.16 jest spełniony, to $w(p_{\min}) = w(q_{\min}^2)$ jest ujemne. Oznacza to więc, że dla pewnych liczb bliskich q_{\min}^2 , współczynnik odpowiedzialny za wzrost zaburzenia σ staje się dodatni. Prowadzi to do niestabilności dyfuzyjnej małego zaburzenia stanu stacjonarnego postaci 4.7.

Podsumujmy otrzymane wyniki:

Stwierdzenie 4.2.1 *Warunki konieczne i dostateczne wystąpienia niestabilności dyfuzyjnej:*

1. $a_{11} + a_{22} < 0$,
2. $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0$,
3. $D_1a_{22} + D_2a_{11} > 2\sqrt{D_1D_2(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})} > 0$.

Przepiszmy ostatni warunek w postaci *bezwymiarowej*

$$\mathbf{3.} \quad \delta + \alpha > 2\delta^{1/2}(\alpha - \mu)^{1/2} > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \delta^{1/2} + \alpha\delta^{-1/2} > 2(\alpha - \mu)^{1/2} > 0, \quad (4.17)$$

gdzie

$$\delta = \frac{D_2}{D_1}, \quad \alpha = \frac{a_{22}}{a_{11}} \quad (a_{11} \neq 0), \quad \mu = \frac{a_{12}a_{21}}{a_{11}^2}.$$

Widzimy więc, że warunki na *niestabilność Turinga* zależą, nie od wielkości bezwzględnych stałych, ale od bezwymiarowych proporcji współczynników dyfuzji i składników opisujących kinetykę reakcji.

W dalszych rozważaniach postaramy się podać fizyczną interpretację równania 4.17, zaproponowaną przez Segela i Jacksona w 1972 roku¹.

4.3. Interpretacja fizyczna

W poprzednim rozdziale wyprowadziliśmy warunki konieczne i dostateczne do istnienia niestabilności dyfuzyjnej. Wyjaśnimy teraz co one oznaczają.

1. Z pierwszego równania w stwierdzeniu 4.2.1 wynika, że co najmniej jeden ze współczynników, a_{11} lub a_{22} , jest ujemny. Załóżmy, że $a_{22} < 0$. Oznacza to, że

$$a_{22} = \frac{\partial F_2}{\partial u_2} < 0.$$

Interpretacja: morfogen 2 hamuje, czy też ogranicza tempo swojej własnej produkcji. Nazwiemy tę substancję *inhibitorem*.

2. Z nierówności 4.16 wynika warunek: $a_{11}D_2 + a_{22}D_1 > 0$ (przypomnijmy, że $D_1, D_2 > 0$). Wnioskujemy stąd, że współczynniki a_{11} i a_{22} nie mogą być oba równe zero. Dlatego też a_{11} musi być dodatni (co więcej $|a_{11}| < |a_{22}|$), co oznacza, iż

$$a_{11} = \frac{\partial F_1}{\partial u_1} > 0.$$

Interpretacja: morfogen 1 katalizuje, czy też aktywuje swoją produkcję. Dlatego tę substancję nazwiemy *aktywatorem*.

3. Poprzednie dwa kroki implikują razem warunek

$$a_{11}a_{22} < 0.$$

4. Z kroku 3 wynika, że nierówność numer 2 ze stwierdzenia 4.2.1, ($a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} > 0$), może być spełniona tylko wtedy, gdy

$$a_{12}a_{21} < 0,$$

(co więcej $|a_{11}a_{22}| < |a_{12}a_{21}|$). Warunek ten oznacza, że jeden ze współczynników, a_{12} lub a_{21} , ale nie oba naraz, jest ujemny. Daje nam to dwie możliwości, z których każda skutkuje pewnym specyficznym wzorem znaków w macierzy Jacobiego \mathbf{M} (równanie 4.4):

¹W pracy [JackSeg].

i) Aktywator-inhibitor:

$$a_{12} < 0, \quad a_{21} > 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

ii) Aktywator-ubywający substrat (czy też dodatnie sprzężenie zwrotne):

$$a_{12} > 0, \quad a_{21} < 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} + & + \\ - & - \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Są to dokładnie dwa typy układów chemicznych opisanych w rozdziale 2. Wynika stąd, że układ, w którym może wystąpić niestabilność dyfuzyjna, należy do jednej z tych dwóch klas.

Przyjrzyjmy się dalszym wnioskom o naszych substancjach.

5. Dzieląc stronami nierówność 4.16 przez D_2 otrzymujemy

$$a_{11} + a_{22} \frac{D_1}{D_2} > 0.$$

Warunek ten jest spełniony tylko w przypadku, gdy $D_1 \neq D_2$, ponieważ w przeciwnym razie nierówność $a_{11} + a_{22} > 0$ jest sprzeczna z warunkiem 1 ze stwierdzenia 4.2.1.

Interpretacja: Aby niestabilność Turinga mogła wystąpić, współczynniki dyfuzji morfogonów 1 i 2 muszą się od siebie różnić.

6. Pamiętając, że w przypadku obu klas układów z kroku 4, znaki a_{11} i a_{22} są przeciwne, zdefiniujmy

$$\begin{cases} \tau_1 = |a_{11}|^{-1}, \\ \tau_2 = |a_{22}|^{-1}, \end{cases}$$

gdzie τ_1 i τ_2 są stałymi czasowymi (intuicyjnie: okres półtrwania danej substancji) związanymi odpowiednio z aktywacją i inhibicją. Z nierówności 4.16 wnioskujemy, że

$$|D_2 a_{11}| > |D_1 a_{22}| \quad \Leftrightarrow \quad D_2 \tau_2 > D_1 \tau_1 \quad \Leftrightarrow \quad l_2^2 > l_1^2 \quad \Leftrightarrow \quad l_2 > l_1, \quad (4.20)$$

gdzie stałe $l_1 = \sqrt{\frac{D_1}{a_{11}}}$ i $l_2 = \sqrt{\frac{D_2}{-a_{22}}}$ oznaczają odpowiednio *zasięg aktywatora* oraz *zasięg inhibitora* (intuicyjnie: droga przebyta przez cząstkę od momentu powstania do czasu jej usunięcia/zniszczenia). Nierówność 4.16 oznacza w tym języku

$$q_{\min}^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{l_1^2} - \frac{1}{l_2^2} \right) > \sqrt{\frac{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}}{D_1 D_2}} > 0. \quad (4.21)$$

Interpretacja: Nierówność 4.20 można wypowiedzieć następująco:

Zasięg inhibicji jest większy niż zasięg aktywacji.

Inaczej, możemy powiedzieć, że do powstania wzorów przestrzennych potrzebna jest **lokalna aktywacja i dalekozasięgowa inhibicja**.

Ponadto warunek $l_2^2 > l_1^2$, zapisany w formie

$$\frac{D_2}{D_1} > \underbrace{\frac{-a_{22}}{a_{11}}}_{\text{(z kroku 2)}} > 1 \quad \Rightarrow \quad D_2 > D_1, \quad (4.22)$$

częściowo tłumaczy, dlaczego nie udało się przez długi czas potwierdzić eksperymentalnie istnienia niestabilności Turinga. Współczynniki dyfuzji większości małych jonów w wodzie mają bardzo podobne wartości, rzędu $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, natomiast prawa strona nierówności 4.22 w realnych modelach może przekraczać wartość 10. Dlatego naukowcom trudno było zaprojektować eksperyment z tak różnymi od siebie współczynnikami dyfuzji.

Na podstawie powyższej analizy możemy opisać ogólny obraz tworzenia się niestabilności dyfuzyjnej (Turinga). Rozważmy przypadek układu typu aktywator-inhibitor. W wyniku małego zaburzenia jednorodnego stanu stacjonarnego, w pewnym miejscu powstaje mały wzrost stężenia aktywatora. Powoduje to zwiększoną lokalną produkcję inhibitora, która, gdyby nie było dyfuzji, zatrzymałaby i odwróciła proces, powracając do stanu stacjonarnego. Jednakże, inhibitor dyfunduje szybciej niż aktywator ($D_2 > D_1$), więc nie może kontrolować lokalnej produkcji aktywatora. W związku z tym stężenie aktywatora w tym miejscu rośnie. Obszar otaczający rosące zaburzenie zawiera teraz wystarczającą ilość inhibitora, aby powstrzymać tworzenie nowych ośrodków aktywacji w pobliżu i zbalansować wysokie stężenie aktywatora, zatrzymując w konsekwencji jego dalszy wzrost. Prowadzi to do tworzenia typowych obszarów maksimum (tzw. "pików") charakteryzowanych przez wyrażenie $D_2\tau_2$ w nierówności 4.20.

Należy pamiętać, że zachowanie układu zlinearyzowanego dobrze opisuje układ wyjściowy tylko do momentu, kiedy zaburzenie staje się odpowiednio duże. Dalsze zachowanie układu można badać metodami analizy nieliniowej lub metodami numerycznymi.

W następnym rozdziale zastosujemy wyprowadzone tu dość abstrakcyjne warunki na niestabilność stanu stacjonarnego do prostego modelu znanego jako Brukselator².

4.4. Model reakcji-dyfuzji: Brukselator

Brukselator modeluje ewolucję w czasie stężeń dwóch substancji $u_1(x, t)$ i $u_2(x, t)$. Równania modelu mają postać

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = a - (b+1)u_1 + u_1^2 u_2 + D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = bu_1 - u_1^2 u_2 + D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, \end{cases} \quad (4.23)$$

gdzie parametry a , b oraz D_1 , D_2 są dodatnimi stałymi. Brukselator jest modelem czysto teoretycznym (tzn. modeluje zachowanie ciągu wymyślonych reakcji chemicznych). Z kontekstu w jakim ten model powstał wynikają następujące wartości parametrów

$$a = 1.5, \quad D_1 = 2.8, \quad D_2 = 22.4,$$

natomiast parametr b jest parametrem bifurkacyjnym³, którym możemy manipulować.

Nieliniowe funkcje opisujące kinetykę reakcji są takiej postaci, że znalezienie jednorodnego przestrzennie stanu stacjonarnego układu 4.23, $\tilde{\mathbf{u}} = (\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)$, nie następuje większych problemów. Ma on postać

$$\tilde{u}_1 = a, \quad \tilde{u}_2 = \frac{b}{a}. \quad (4.24)$$

Macierz układu zlinearyzowanego wokół stanu stacjonarnego 4.24 wygląda następująco

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(b+1) + 2u_1 u_2 & u_1^2 \\ b - 2u_1 u_2 & -u_1^2 \end{pmatrix} \Big|_{(\tilde{u}_1, \tilde{u}_2)} = \begin{pmatrix} b-1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

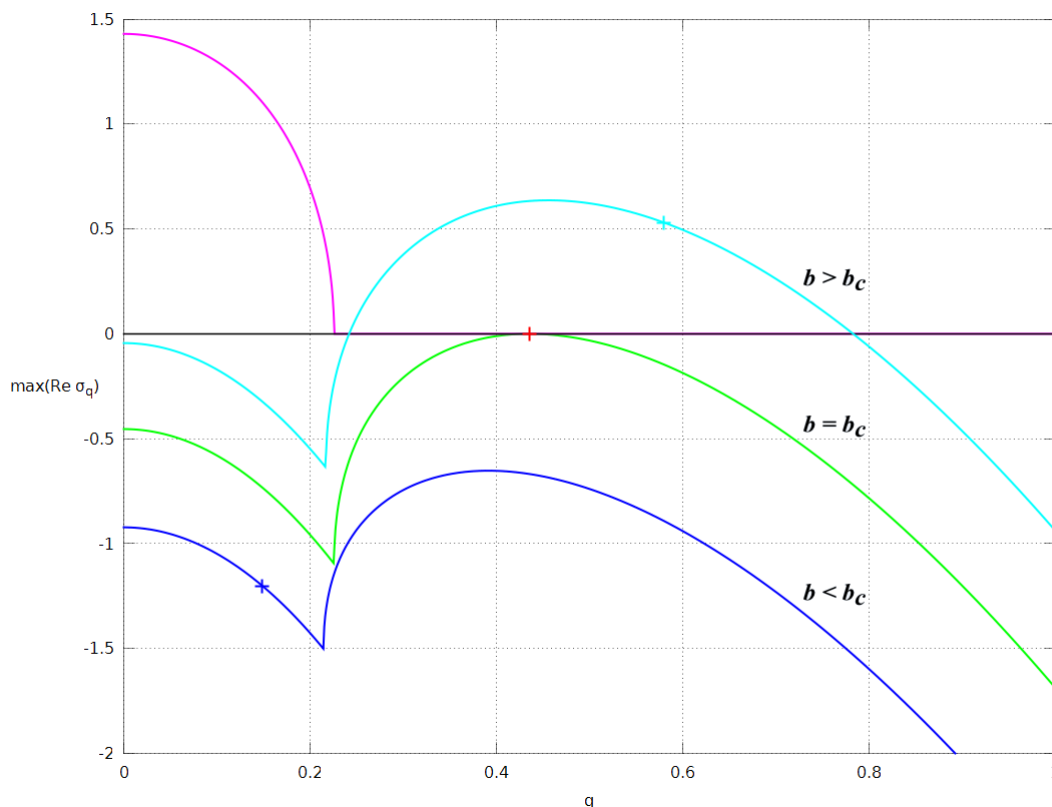
²Nazwa pochodzi od miejsca, w którym szerzej zajmowano się tym modelem - Brukseli w Belgii. Inny model reakcji-dyfuzji, Oregonator, pochodzi z Oregonu w Stanach Zjednoczonych.

³Odpowiedzialnym za zmianę stabilności stanu stacjonarnego.

Niestabilność Turinga może wystąpić, jeśli wyrazy na przekątnej macierzy \mathbf{M} mają przeciwnie znaki. Dla macierzy 4.25 oznacza to, że

$$b > 1.$$

Substancja 1 jest więc aktywatorem ($a_{11} > 0$), natomiast substancja 2 inhibitorem ($a_{22} < 0$).



Rysunek 4.1: Wykres przedstawia zależność maksymalnej wartości części rzeczywistej współczynnika wzrostu ($\max \operatorname{Re} \sigma_q$ - oś pionowa) jako funkcję liczby falowej (q - oś pozioma) dla małego zaburzenia stanu stacjonarnego w modelu Brukselatora (4.23). Narysowano trzy krzywe odpowiadające różnym wartościom parametru b : poniżej niestabilności ($b = 0.6b \approx 1.4051$), dla wartości krytycznej ($b = b_c \approx 2.3419$) oraz powyżej niestabilności ($b = 1.35b \approx 3.1616$). Znakiem '+' oznaczono wartości odpowiadające liczbie falowej q_{\min} (4.15) dla poszczególnych wartości parametru b . Lewa górna krzywa to część urojona wartości własnych o maksymalnej części rzeczywistej dla $b = b_c$.

W przypadku braku dyfuzji $D_1 = D_2 = 0$ w układzie 4.23, stan stacjonarny jest stabilny, gdy spełnione są następujące warunki

$$\operatorname{tr} \mathbf{M} < 0 \quad \Rightarrow \quad b < 1 + a^2 = 3.25, \quad (4.26a)$$

$$\det \mathbf{M} > 0 \quad \Rightarrow \quad a^2 > 0. \quad (4.26b)$$

Warunek 4.26b jest w tym wypadku zawsze spełniony ($a \neq 0$), zaś warunek 4.26a prowadzi do ograniczenia $b < 3.25$. Biorąc pod uwagę, że $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = a^2$, równanie 4.16 dla

macierzy 4.25 przyjmuje postać

$$-a^2 D_1 + D_2(b-1) > 2a\sqrt{D_1 D_2} \quad \Rightarrow \quad b > \left(1 + a\sqrt{\frac{D_1}{D_2}}\right)^2. \quad (4.27)$$

Wartość krytyczna b_c parametru b wyznaczona jest przez równość w warunku 4.27 i wynosi

$$b_c \approx 2.3419.$$

Odpowiadająca tej wartości liczba falowa q_c na mocy równania 4.15 to

$$q_c = \sqrt{\frac{D_1 a_{22} + D_2 a_{11}}{2D_1 D_2}} \approx 0.43521.$$

Powstanie niestabilności dyfuzyjnej możemy zobrazować rysując wykres maksymalnego tempa wzrostu zaburzenia $\left(\max_i \operatorname{Re} \sigma_{iq}\right)$ jako funkcję liczby falowej (q) dla różnych wartości parametru b - patrz rysunek 4.1. Maksymalne tempo wzrostu zaburzenia można dokładnie wyliczyć jako maksimum części rzeczywistych dwóch wartości własnych σ_{iq} ($i = 1, 2$) odpowiadających poszczególnym liczbom falowym q . Wartość krytyczną liczby falowej ($q_c \approx 0.43521$) można zidentyfikować na wykresie jako liczbę falową, dla której maksymalna część rzeczywista współczynnika wzrostu osiąga po raz pierwszy wartość zero. Punkty nieróżniczkowalności krzywych ('dziubki') obrazują moment przejścia wartości własnych σ_q z wartości zespolonych do rzeczywistych. Na wykresie można także zaobserwować, że liczba falowa odpowiadająca najszybciej rosnącemu zaburzeniu powoli wzrasta, wraz ze wzrostem wartości parametru b . Powyżej wartości krytycznej b_c istnieje cały przedział wartości q , dla których powstaje niestabilność Turinga (dyfuzyjna) stanu stacjonarnego 4.24.

Bibliografia

- [BicKal] A. W. Bicadze, D. F. Kalinczenko, *Zbiór zadań z równań fizyki matematycznej*, PWN, Warszawa, 1984.
- [Cross] M. Cross, H. Greenside, *Pattern Formation and Dynamics in Nonequilibrium Systems*, Cambridge University Press, 2009.
- [Keshet] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical Models in Biology*, The Random House / Birkhäuser Mathematics Series, 1988.
- [Evans] L. C. Evans, *Równania różniczkowe cząstkowe*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2008.
- [Fichten] G. M. Fichtenholz, *Rachunek różniczkowy i całkowy*, t. III, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007.
- [Granero] M. I. Granero, A. Porati, D. Zanacca, *A bifurcation analysis of pattern formation in a diffusion governed morphogenetic field*, Journal of Mathematical Biology, Volume 4, Number 1, Pages 21-27, 1977.
- [JackSeg] J. L. Jackson, L. A. Segel, *Dissipative structure: An explanation and an ecological example*, Journal of Theoretical Biology, Volume 37, Issue 3, Pages 545–559, December 1972.
- [Meinh] H. Meinhardt, *The algorithmic beauty of sea shells*, Springer, 1998.
- [Turing] A. M. Turing, *The Chemical Basis of Morphogenesis*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences, Vol. 237, No. 641, Pages 37-72, August 14, 1952.
- [Tolstov] G. P. Tolstov, *Fourier Series*, Dover Publications, Inc., Dover, 1976.