

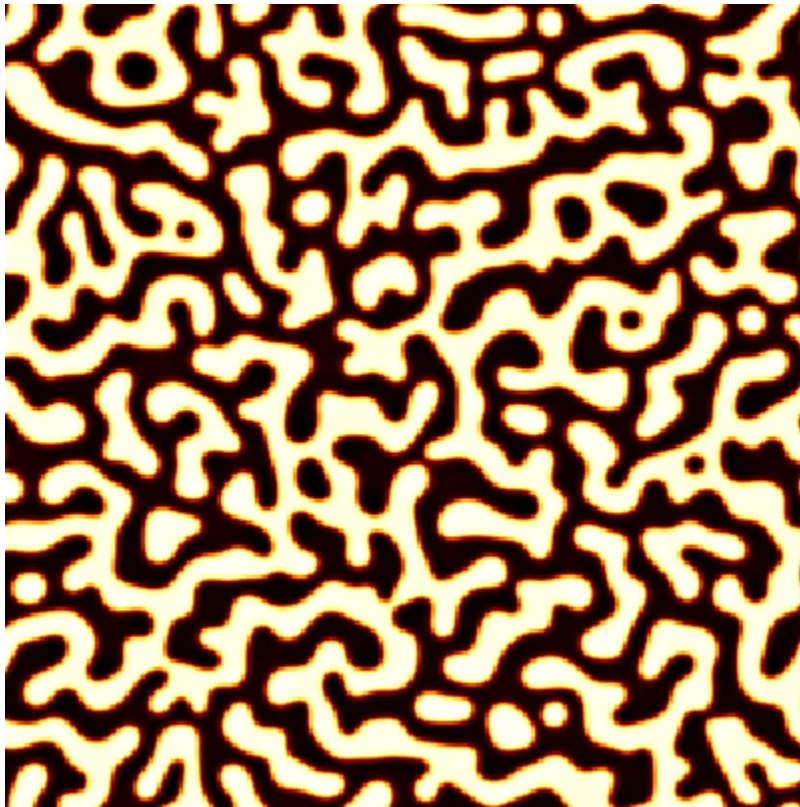
Wzory Turinga

Maciej Romański

03.02.2021

1 Wzory Turinga

Pojęcie wzorów Turinga zostało przedstawione przez angielskiego matematyka Alana Turinga w 1952 roku w artykule "The Chemical Basis of Morphogenesis". Praca opisywała potencjalny mechanizm powstawania w naturze wzorów, takich jak paski i spirale widoczne np. na zwierzętach. Turing rozważał zachowanie systemu złożonego z dwóch substancji, które oddziałują na siebie nawzajem poprzez mechanizm reakcji chemicznej (jedna substancja przechodzi w drugą i odwrotnie) oraz dyfuzji. Okazało się, że taki system prowadzi do powstawania wzorów niemal niezależnie od warunków początkowych. Turing postawił hipotezę, że takie zachowanie jest chemiczną podstawą morfogenezy.



W raporcie zaprezentowane zostanie rozwiązanie dwuwymiarowego równania reakcji-dyfuzji za pomocą metody różnic skończonych.

2 Równanie dyfuzji

Zjawisko dyfuzji powoduje samorzutne rozprzestrzenianie się cząstek substancji, co prowadzi do wyrównania stężenia substancji w układzie. Cząsteczki substancji przemieszczają się z obszarów o dużej koncentracji do obszarów o małej koncentracji aż do ich wyrównania.

Jest to opisane równaniem dyfuzji:

$$\frac{\partial C(r, t)}{\partial t} = D \nabla^2 C(r, t)$$

gdzie:

- $C(r, t)$ - stężenie substancji w punkcie r i czasie t ;
- $D(C, t)$ - współczynnik dyfuzji (stały).

Dla jednego wymiaru równanie przyjmuje postać:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2}$$

Równanie zostanie rozwiązane za pomocą schematu explicit metodą różnic skończonych.

Pochodną po czasie można przybliżyć jako:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} \approx \frac{1}{dt} (C_{x,t+1} - C_{x,t})$$

Drugą pochodną po x (czyli Laplasjan) można przybliżyć jako:

$$\frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \approx \frac{1}{dx^2} (C_{x+1,t} - 2C_{x,t} + C_{x-1,t})$$

Zatem:

$$C_{x,t+1} = C_{x,t} + dt \left(D \frac{1}{dx^2} (C_{x+1,t} - 2C_{x,t} + C_{x-1,t}) \right)$$

Przejdźmy do rozwiązania:

```
[52]: # Import bibliotek
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
```

```
[53]: # Funkcja licząca operato Laplace'a w przypadku jednowymiarowym:
def laplacian1D(a, dx):
    return (
        - 2 * a
        + np.roll(a,1,axis=0)
        + np.roll(a,-1,axis=0)
    ) / (dx ** 2)
```

```
[54]: # Ustawienia symulacji:
width = 100      # szerokość domeny
dx = 10 / width  # krok przestrzenny
```

```

T = 1          # czas symulacji
sigma = 0.9    # liczba Couranta, potrzebna do warunku CFL
nu = 0.5       # lepkość pełniąca funkcję współczynnika dyfuzji
dt = sigma * dx**2 / (2 * nu) #krok czasowy z uwzględnieniem warunku CFL
steps = int(T / dt) #liczba iteracji w czasie

```

```

[55]: # Przygotowanie danych do obliczeń:
X = np.linspace(-5, 5, width)
f = np.exp(-np.pi* X**2) # przykładowa funkcja określająca stężenie początkowe
    ↳(rozkład Gaussa)
f_an = np.exp(-0.5 * X**2) / pow(2*np.pi, 0.5)

```

```

[56]: # Funkcja przeprowadzająca obliczenia
def update(f):
    for i in range(steps):
        La = laplacian1D(f, dx)
        f += dt * nu * La

```

Dla porównania, rozwiązanie analityczne równania dyfuzji dla rozkładu Gaussa ma postać:

$$C(x,t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{n/2}}{(2\pi(\sigma_0^2 + 2Dt))^{n/2}} C_0 \exp\left(-\frac{(x - x_0 - ut)^2}{2(\sigma_0^2 + 2Dt)}\right)$$

gdzie:

- C_0 - stężenie początkowe,
- n - liczba wymiarów,
- t - czas,
- D - współczynnik dyfuzji,
- u - prędkość adwekcji (równa u nas 0)
- σ_0 wariancja rozkładu początkowego (równa 1).

```

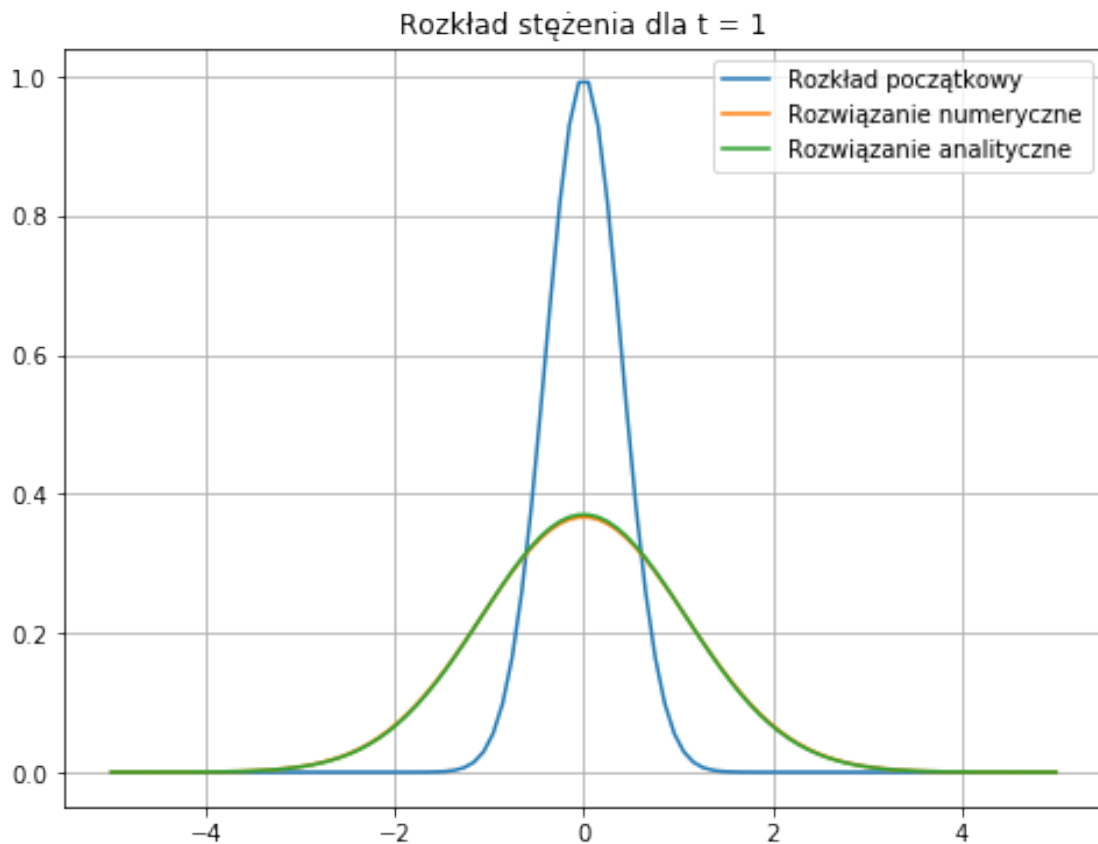
[57]: plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(X, f, label = "Rozkład początkowy")
update(f)

# Rozwiązanie analityczne:
f_an = 1 / pow(2*np.pi*(1/2/np.pi+2*nu*T), 0.5) * np.exp(- (X**2) / (2*(1/2/np.
    ↳pi+2*nu*T)))

# Wykres:
plt.plot(X, f, label = "Rozwiązanie numeryczne")
plt.plot(X, f_an, label = "Rozwiązanie analityczne")
plt.title("Rozkład stężenia dla t = " + str(T))
plt.grid()
plt.legend()

```

[57]: <matplotlib.legend.Legend at 0x27a405ecfd0>



Jak widać, równanie dyfuzji powoduje “rozmycie” rozkładu stężenia w czasie. Układ dąży do wyrównania stężeń.

3 Równanie reakcji

Drugim zjawiskiem występującym w rozważanym układzie jest reakcja między dwoma substancjami. Opisana jest ona za pomocą równań FitzHugh-Nagumo:

$$R_a(a, b) = a - a^3 - b + \alpha$$

$$R_b(a, b) = \beta(a - b)$$

gdzie:

- R_a, R_b - Zmiany stężeń substancji a i b zależne tylko od lokalnych stężeń tych substancji;
- a, b - Lokalne stężenia substancji a i b;
- α, β - Stałe współczynniki

Zatem rozwiązanie numeryczne ma postać:

$$a_{t+1} = a_t + dt \cdot R_a(a_t, b_t)$$

```
[58]: # Inicjalizacja danych:
```

```
# Współczynniki:
alpha = 0.2
beta = 5
# Stężenia początkowe
a0 = 0.1
b0 = 0.7
# Ustawienia solvera
dt = 0.01
T = 5
steps = int(T / dt)
a = np.zeros(steps)
b = np.zeros(steps)
times = np.arange(steps) * dt
```

```
[59]: # Funkcje liczące zmiany stężeń:
```

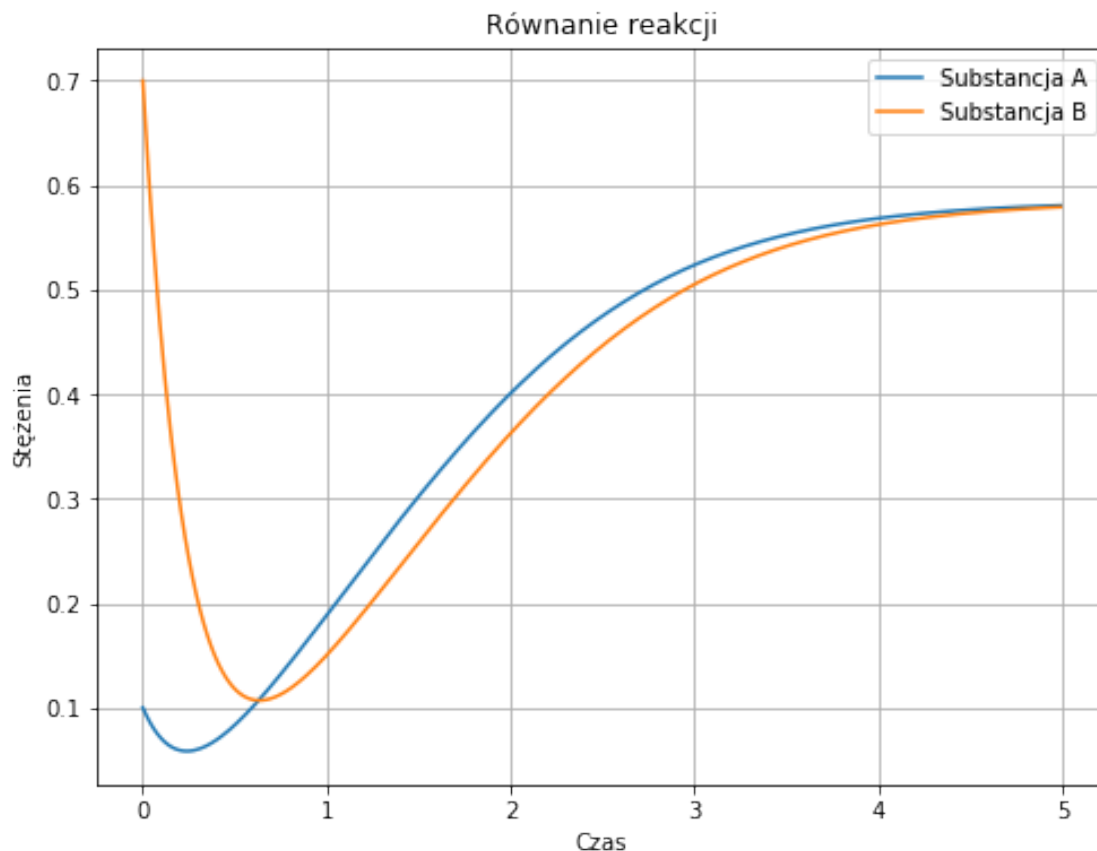
```
def Ra(a, b):
    return a - a ** 3 - b + alpha
def Rb(a, b):
    return (a - b) * beta
```

```
[60]: #Obliczenia:
```

```
a[0] = a0
b[0] = b0

for i in range(steps-1):
    a[i+1] = a[i] + dt * Ra(a[i], b[i])
    b[i+1] = b[i] + dt * Rb(a[i], b[i])

# Wykres
plt.figure(figsize=(8,6))
plt.plot(times, a, label = "Substancja A")
plt.plot(times, b, label = "Substancja B")
plt.legend(loc = "best")
plt.xlabel("Czas")
plt.ylabel("Stężenia")
plt.title("Równanie reakcji")
plt.grid()
```



Jak widać, układ dąży do wyrównania stężeń na poziomie $a = b = \sqrt[3]{0.2} = \sqrt[3]{\alpha} \approx 0.585$.

4 Pełny model: reakcja + dyfuzja (1D)

Z połączenia członów dyfuzyjnego i reakcyjnego dostajemy równanie reakcji-dyfuzji:

$$\frac{\partial a(x,t)}{\partial t} = D_a \cdot \frac{\partial^2 a(x,t)}{\partial x^2} + R_a(a(x,t), b(x,t))$$

$$\frac{\partial b(x,t)}{\partial t} = D_b \cdot \frac{\partial^2 b(x,t)}{\partial x^2} + R_b(a(x,t), b(x,t))$$

gdzie:

- a, b - stężenia substancji;
- D_a, D_b - współczynniki dyfuzji substancji a i b;
- R_a, R_b - funkcje zmiany stężeń substancji a i b na skutek reakcji chemicznej.

[61]: # Współczynniki:

Da = 1

Db = 100

```
alpha = -0.005
beta = 10
```

[62]: *# Ustawienia solvera:*

```
width = 100
dx = 1
dt = 0.001
steps = 10000
```

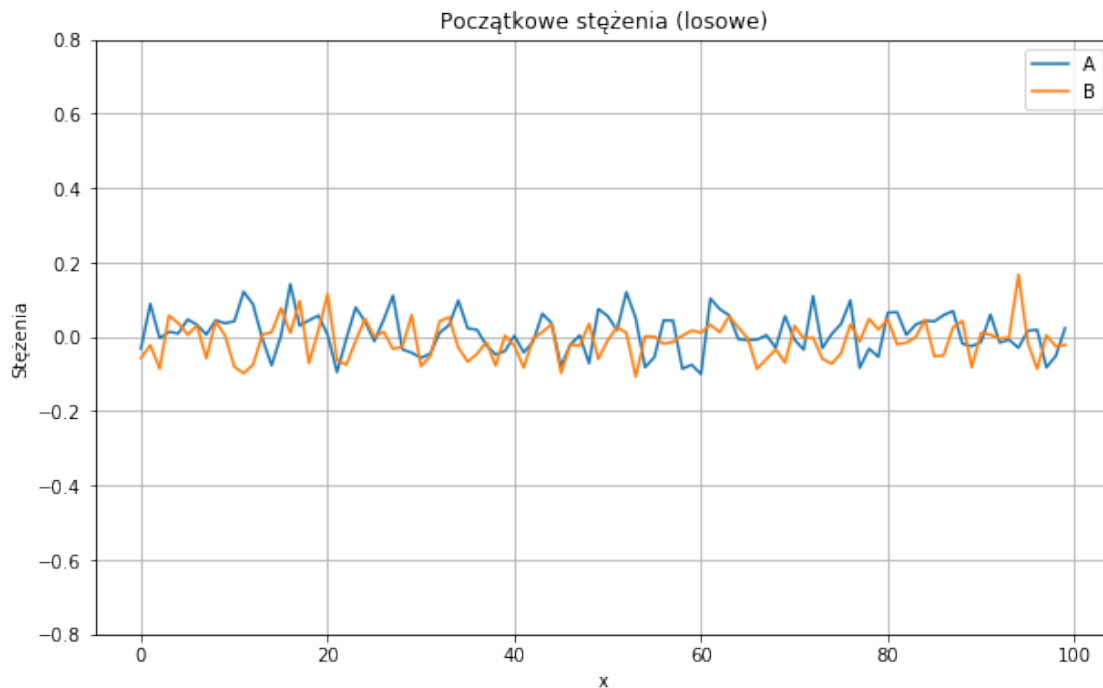
[63]: *# Inicjalizacja stężeń (losowo):*

```
a = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=width)
b = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=width)
```

Wykres:

```
plt.figure(figsize=(10,6))
plt.plot(np.arange(width), a, label = "A")
plt.plot(np.arange(width), b, label = "B")
plt.legend(loc = "best")
plt.grid()
plt.title("Początkowe stężenia (losowe)")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Stężenia")
plt.ylim([-0.8, 0.8])
```

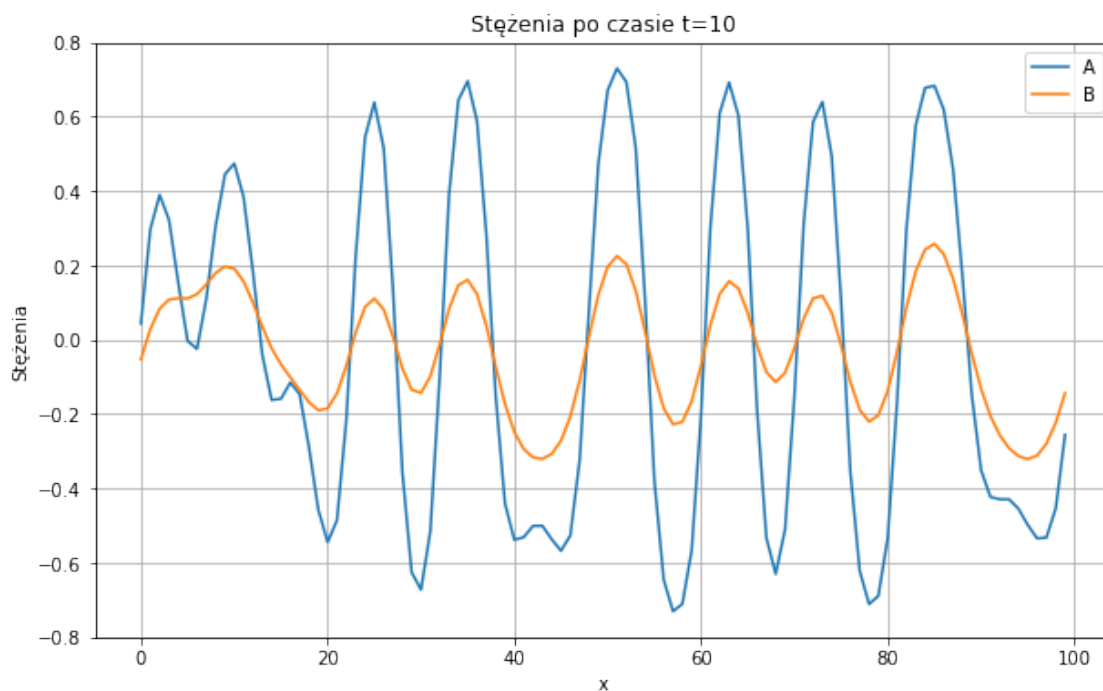
[63]: (-0.8, 0.8)



```
[64]: # Obliczenia:
t = 0
for i in range(steps):
    t += dt
    La = laplacian1D(a, dx)
    Lb = laplacian1D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

# Wykres:
plt.figure(figsize=(10,6))
plt.plot(np.arange(width), a, label = "A")
plt.plot(np.arange(width), b, label = "B")
plt.legend(loc = "best")
plt.grid()
plt.title("Stężenia po czasie t="+str(round(t)))
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Stężenia")
plt.ylim([-0.8, 0.8])
```

[64]: (-0.8, 0.8)



Intuicja podpowiadałaby, że zarówno człon dyfuzyjny równania, jak i człon reakcyjny prowadzą do wyrównania stężeń, czyli układ powinien dążyć do stanu ustalonego. Tymczasem możemy zaobserwować, że stężenia tworzą wzory.

Aby lepiej zobrazować zjawisko, stworzono wykresy po kilku odstępach czasu:

```
[65]: t = 0
a = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=width)
b = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=width)

fig, ax = plt.subplots(nrows=2, ncols=2, figsize=(15,10))
plt.suptitle("Zmiana stężeń w czasie")
ax[0][0].plot(np.arange(width), a, label = "A")
ax[0][0].plot(np.arange(width), b, label = "B")
ax[0][0].legend(loc = "best")
ax[0][0].grid()
ax[0][0].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[0][0].set_xlabel("x")
ax[0][0].set_ylabel("Stężenia")
ax[0][0].set_ylim([-0.8, 0.8])

for i in range(int(steps / 4)):
    t += dt
    La = laplacian1D(a, dx)
    Lb = laplacian1D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[0][1].plot(np.arange(width), a, label = "A")
ax[0][1].plot(np.arange(width), b, label = "B")
ax[0][1].legend(loc = "best")
ax[0][1].grid()
ax[0][1].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[0][1].set_xlabel("x")
ax[0][1].set_ylabel("Stężenia")
ax[0][1].set_ylim([-0.8, 0.8])

for i in range(int(steps / 4)):
    t += dt
    La = laplacian1D(a, dx)
    Lb = laplacian1D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[1][0].plot(np.arange(width), a, label = "A")
ax[1][0].plot(np.arange(width), b, label = "B")
ax[1][0].legend(loc = "best")
ax[1][0].grid()
```

```

ax[1][0].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[1][0].set_xlabel("x")
ax[1][0].set_ylabel("Stężenia")
ax[1][0].set_ylim([-0.8, 0.8])

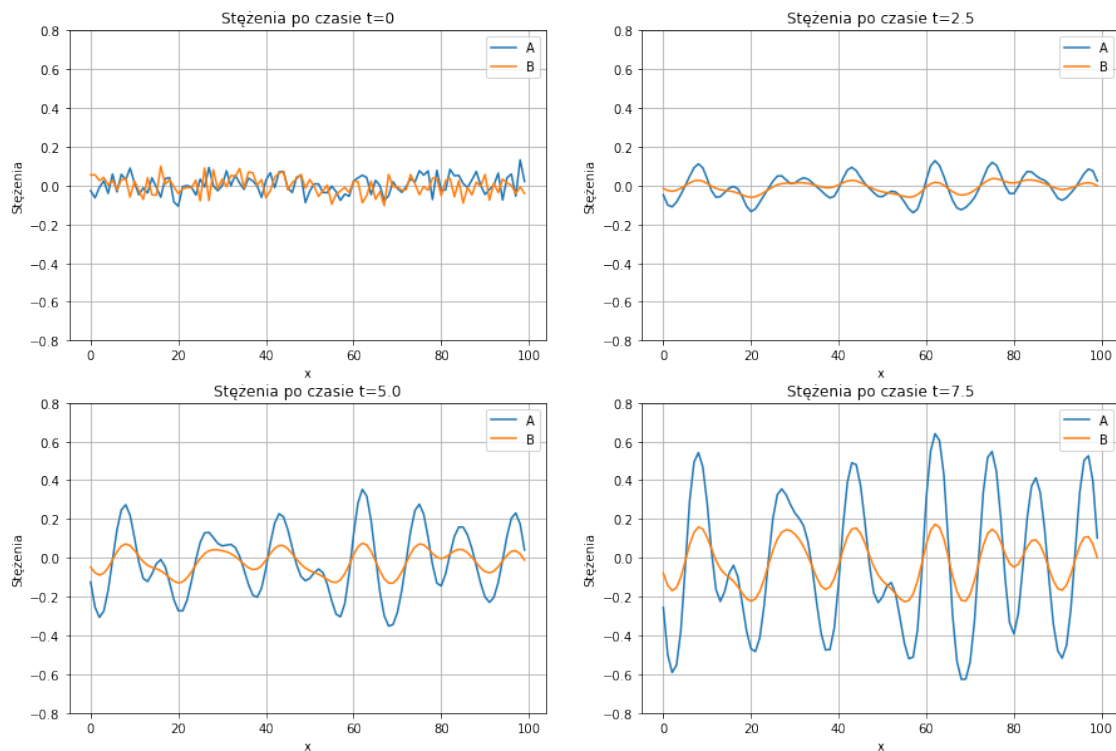
for i in range(int(steps / 4)):
    t += dt
    La = laplacian1D(a, dx)
    Lb = laplacian1D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[1][1].plot(np.arange(width), a, label = "A")
ax[1][1].plot(np.arange(width), b, label = "B")
ax[1][1].legend(loc = "best")
ax[1][1].grid()
ax[1][1].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[1][1].set_xlabel("x")
ax[1][1].set_ylabel("Stężenia")
ax[1][1].set_ylim([-0.8, 0.8])

```

[65]: (-0.8, 0.8)

Zmiana stężeń w czasie



5 Pełny model 2D

Rozwiązanie równania reakcji-dyfuzji w dwóch wymiarach pozwala dużo lepiej zobrazować powstające wzory:

```
[66]: # Współczynniki:
```

```
Da = 1
Db = 100
alpha = -0.005
beta = 10
```

```
[67]: # Ustawienia solvera:
```

```
width = 300
height = 300
shape = (width, height)
dx = 1
dt = 0.001
steps = 20000
```

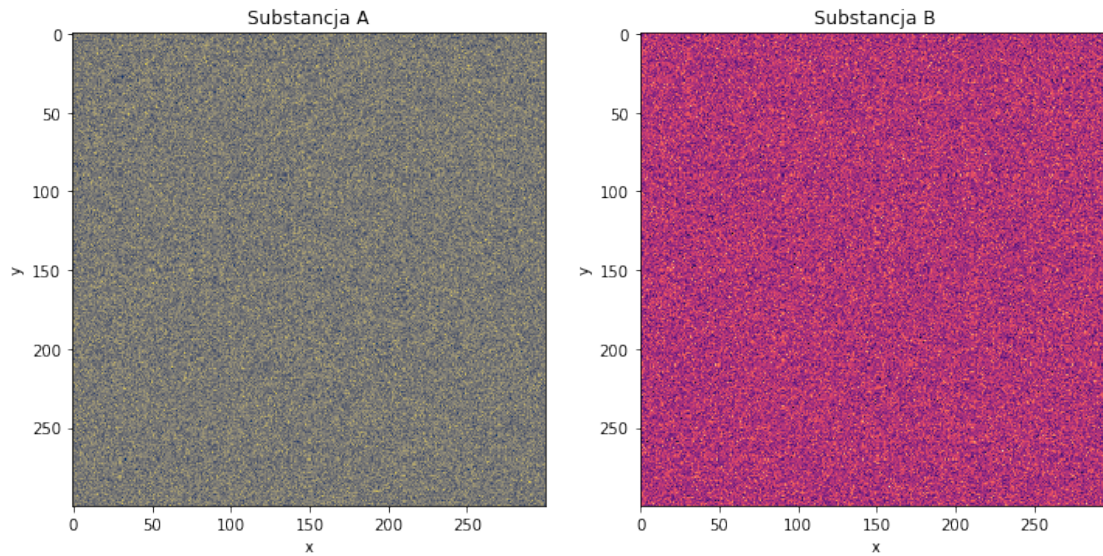
```
[68]: #inicjalizacja stężeń:
```

```
a = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)
b = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)

#wykresy:
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=2, figsize=(12,6))
ax[0].imshow(a, cmap='cividis')
ax[1].imshow(b, cmap='magma')
plt.suptitle("Stężenia początkowe (losowe)")
ax[0].set_title("Substancja A")
ax[1].set_title("Substancja B")
ax[0].set_xlabel("x")
ax[1].set_xlabel("x")
ax[0].set_ylabel("y")
ax[1].set_ylabel("y")
```

```
[68]: Text(0, 0.5, 'y')
```

Stężenia początkowe (losowe)



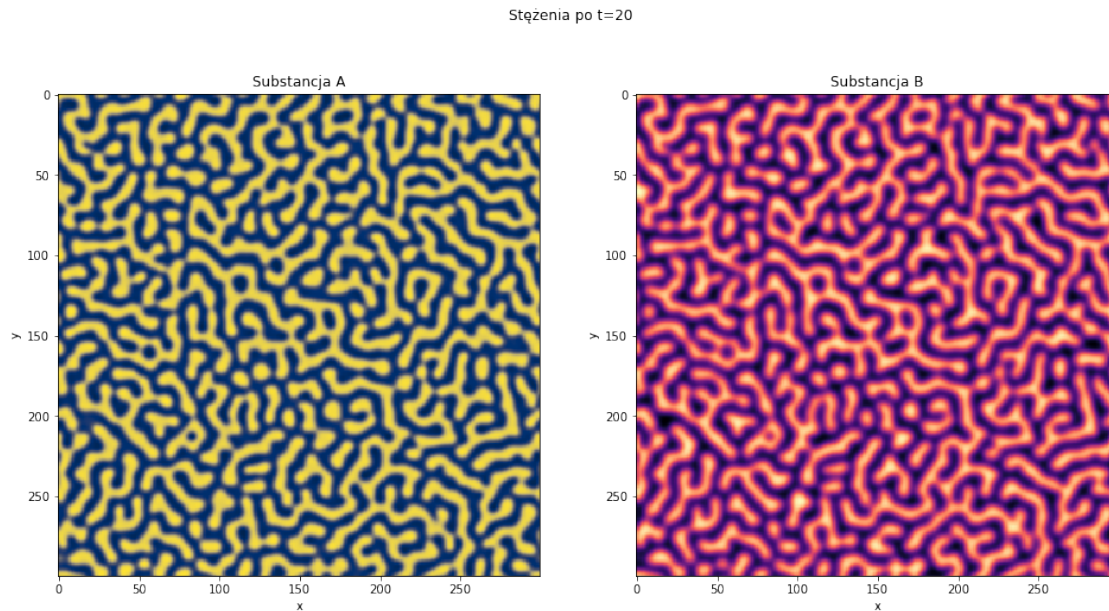
```
[69]: # Funkcja licząca laplacian w 2D:
def laplacian2D(a, dx):
    return (
        - 4 * a
        + np.roll(a,1,axis=0)
        + np.roll(a,-1,axis=0)
        + np.roll(a,+1,axis=1)
        + np.roll(a,-1,axis=1)
    ) / (dx ** 2)
```

```
[70]: # Obliczenia:
t = 0
for i in range(steps):
    t += dt
    La = laplacian2D(a, dx)
    Lb = laplacian2D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))
```

```
[71]: #wykresy:
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=2, figsize=(16,8))
ax[0].imshow(a, cmap='cividis')
ax[1].imshow(b, cmap='magma')
plt.suptitle("Stężenia po t="+str(round(t)))
ax[0].set_title("Substancja A")
ax[1].set_title("Substancja B")
ax[0].set_xlabel("x")
```

```
ax[1].set_xlabel("x")
ax[0].set_ylabel("y")
ax[1].set_ylabel("y")
```

```
[71]: Text(0, 0.5, 'y')
```



Poniżej przedstawiono proces tworzenia wzorów w czasie:

```
[72]: t = 0
width = 100
height = 100
shape = (width, height)
steps = 10000

a = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)
b = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)

fig, ax = plt.subplots(nrows=2, ncols=2, figsize=(11,10))
plt.suptitle("Zmiana stężeń w czasie (substancja A)")

for i in range(int(steps/10)):
    t += dt
    La = laplacian2D(a, dx)
    Lb = laplacian2D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))
```

```

ax[0][0].imshow(a, cmap='plasma')
ax[0][0].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[0][0].set_xlabel("x")
ax[0][0].set_ylabel("y")

for i in range(int(steps/(20/3))):
    t += dt
    La = laplacian2D(a, dx)
    Lb = laplacian2D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[0][1].imshow(a, cmap='plasma')
ax[0][1].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[0][1].set_xlabel("x")
ax[0][1].set_ylabel("y")

for i in range(int(steps/4)):
    t += dt
    La = laplacian2D(a, dx)
    Lb = laplacian2D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[1][0].imshow(a, cmap='plasma')
ax[1][0].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[1][0].set_xlabel("x")
ax[1][0].set_ylabel("Stężenia")

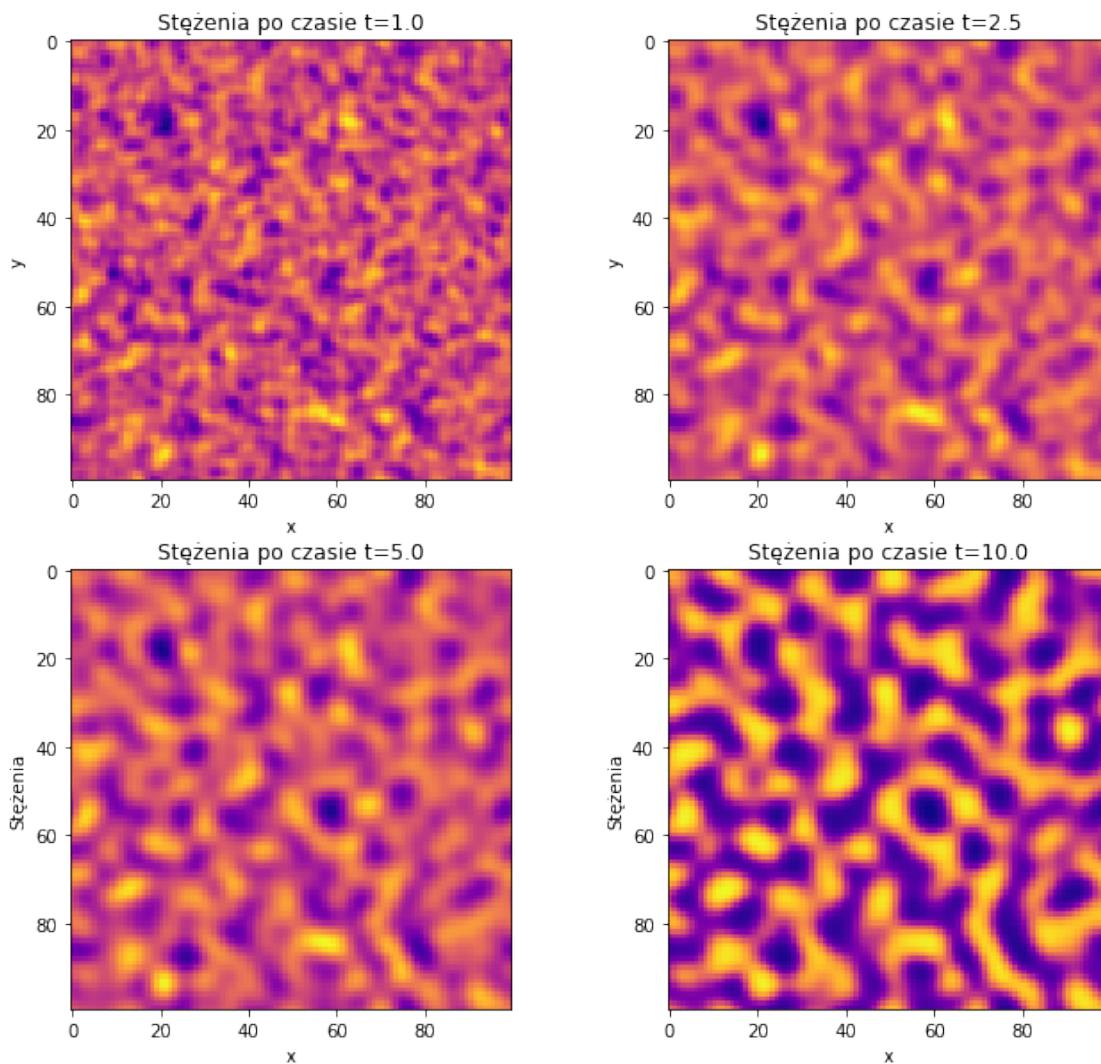
for i in range(int(steps/2)):
    t += dt
    La = laplacian2D(a, dx)
    Lb = laplacian2D(b, dx)
    a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
    b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

ax[1][1].imshow(a, cmap='plasma')
ax[1][1].set_title("Stężenia po czasie t="+str(round(t, 3)))
ax[1][1].set_xlabel("x")
ax[1][1].set_ylabel("Stężenia")

```

```
[72]: Text(0, 0.5, 'Stężenia')
```

Zmiana stężeń w czasie (substancja A)



Widzimy już, jak zachowują się równania i formują się wzory Turinga. Omówmy krótko, dlaczego tak się dzieje.

6 Układy aktywator-inhibitor

Aby zrozumieć przyczynę powstawania wzorów w układzie reakcji-dyfuzji, należy przeprowadzić analizę jego stabilności. Nie zostanie ona przedstawiona w tym raporcie, ponieważ nie jest to jego celem. Skorzystamy z gotowych wyników zaczerpniętych z literatury.

Jak podano w artykule [2], układ jest stabilny, jeżeli po niewielkim wytrąceniu ze stanu równowagi, wraca samoczynnie do tego stanu. Aby w układzie reakcji-dyfuzji nastąpiło formowanie wzorów, musi być on niestabilny, czyli spełniać następujące warunki:

1. $r_{aa} + r_{bb} < 0$
2. $r_{aa}r_{bb} - r_{ab}r_{ba} > 0$
3. $d_b r_{aa} + d_a r_{bb} > 2 \cdot \sqrt{d_a d_b (r_{aa}r_{bb} - r_{ab}r_{ba})} > 0$

gdzie:

$$r_{i,j} = \frac{\partial R_i(a,b)}{\partial j}$$

d_a, d_b - współczynniki dyfuzji

Współczynniki dyfuzji są dodatnie, więc aby warunki pierwszy i trzeci były spełnione jednocześnie, wartości r_{aa} i r_{bb} muszą być różnych znaków oraz ta ze znakiem ujemnym musi być większa (co do modułu).

Wtedy z drugiego warunku wynika, że również r_{ab} i r_{ba} muszą być różnych znaków.

Ostatnim wnioskiem jest, że aby trzecie równanie było spełnione, współczynniki dyfuzji muszą być różne - jeżeli przykładowo r_{aa} jest ujemne, wtedy stojące przy nim d_{bb} musi być odpowiednio mniejsze od d_{aa} , aby cała lewa strona była większa od zera.

Taki układ nazywamy układem **aktywator-inhibitor**. Działa on w następujący sposób: Niewielki wzrost stężenia jednej substancji, zwanej aktywatorem, w danym punkcie powoduje wzrost stężenia drugiej substancji, zwanej inhibitorem, w tym punkcie. Obie substancje jednocześnie dyfundują do sąsiednich obszarów, przy czym inhibitor dyfunduje szybciej, czym zmniejsza stężenie aktywatora w tych obszarach. To zmniejszenie stężenia aktywatora powoduje następnie zmniejszenie stężenia inhibitora itd. W efekcie zmiany stężeń rozprzestrzeniają się w przestrzeni jak fala, formując wzory. Kształt i wielkość wzorów zależy od parametrów układu (D_a, D_b, α, β) oraz od warunków początkowych.

7 Przykłady dla innych współczynników:

```
[73]: # Ubiierzmy wcześniejszy kod w funkcję:
def patterns(Da, Db, alpha, beta, initializer, time):
    width = 100
    height = 100
    shape = (width, height)
    dx = 1
    dt = 0.001
    steps = int(time / dt)

    a, b = initializer(shape)
    def Ra(a, b):
        return a - a ** 3 - b + alpha
    def Rb(a, b):
        return (a - b) * beta
    t = 0
    for i in range(steps):
        t += dt
        La = laplacian2D(a, dx)
        Lb = laplacian2D(b, dx)
```



```

a += dt * (Da * La + Ra(a, b))
b += dt * (Db * Lb + Rb(a, b))

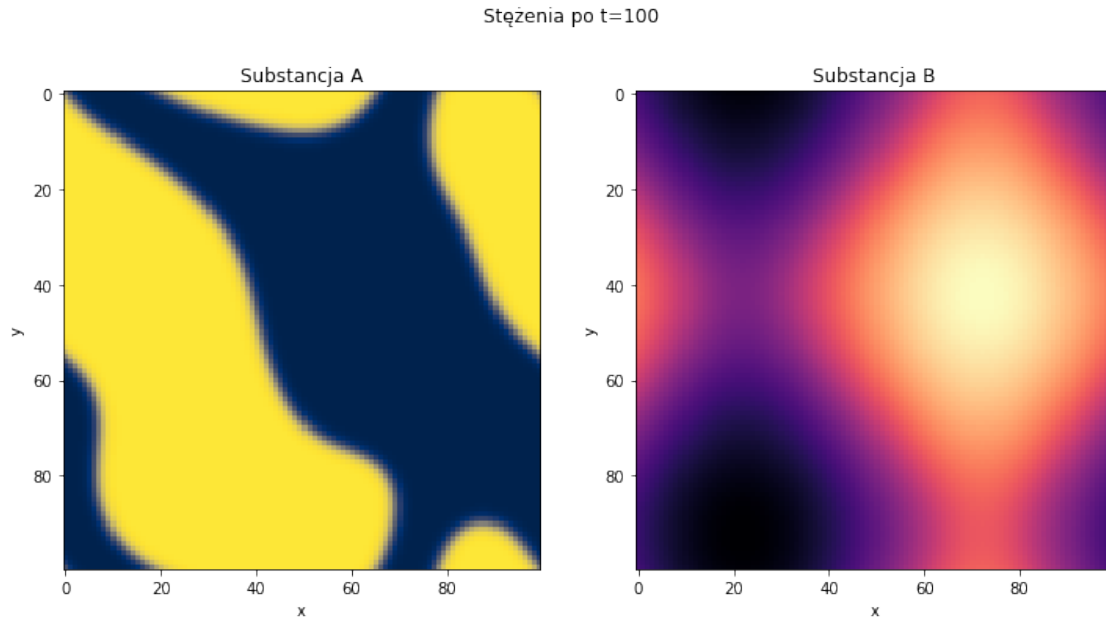
fig, ax = plt.subplots(nrows=1, ncols=2, figsize=(12,6))
ax[0].imshow(a, cmap='cividis')
ax[1].imshow(b, cmap='magma')
plt.suptitle("Stężenia po t="+str(round(t)))
ax[0].set_title("Substancja A")
ax[1].set_title("Substancja B")
ax[0].set_xlabel("x")
ax[1].set_xlabel("x")
ax[0].set_ylabel("y")
ax[1].set_ylabel("y")

def random_initializer(shape):
    a = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)
    b = np.random.normal(loc=0, scale=0.05, size=shape)
    return a, b

```

Dla współczynników α i β równych 0:

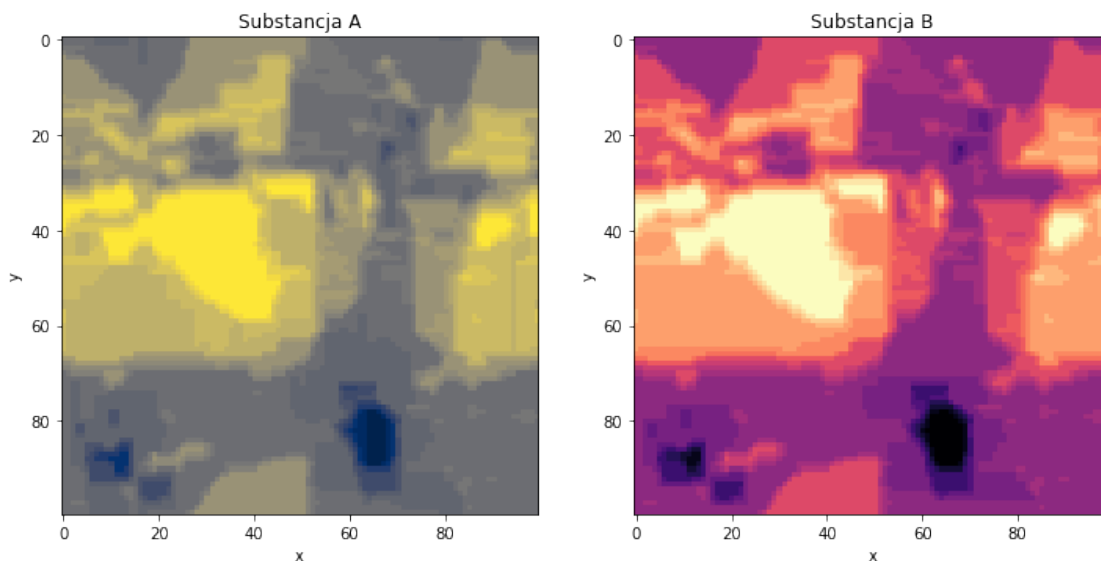
```
[74]: patterns(1, 100, 0, 0, random_initializer, time = 100)
```



Dla równych współczynników dyfuzji otrzymujemy układ stabilny - po długim czasie nie powstają wzory:

```
[75]: patterns(1, 1, -0.005, 10, random_initializer, time = 1000)
```

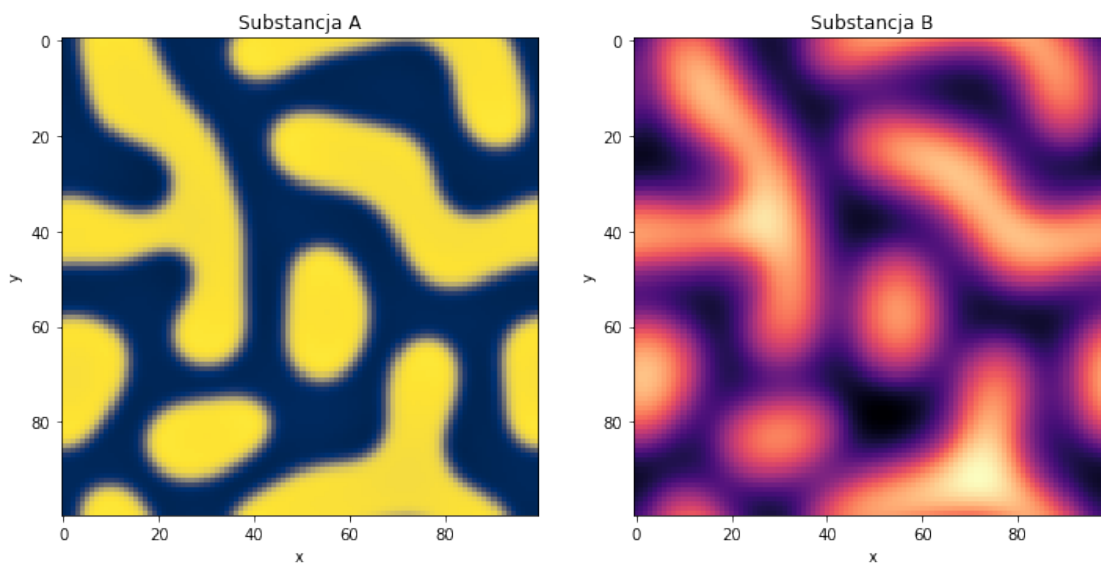
Stężenia po t=1000



Inne kształty wzorów:

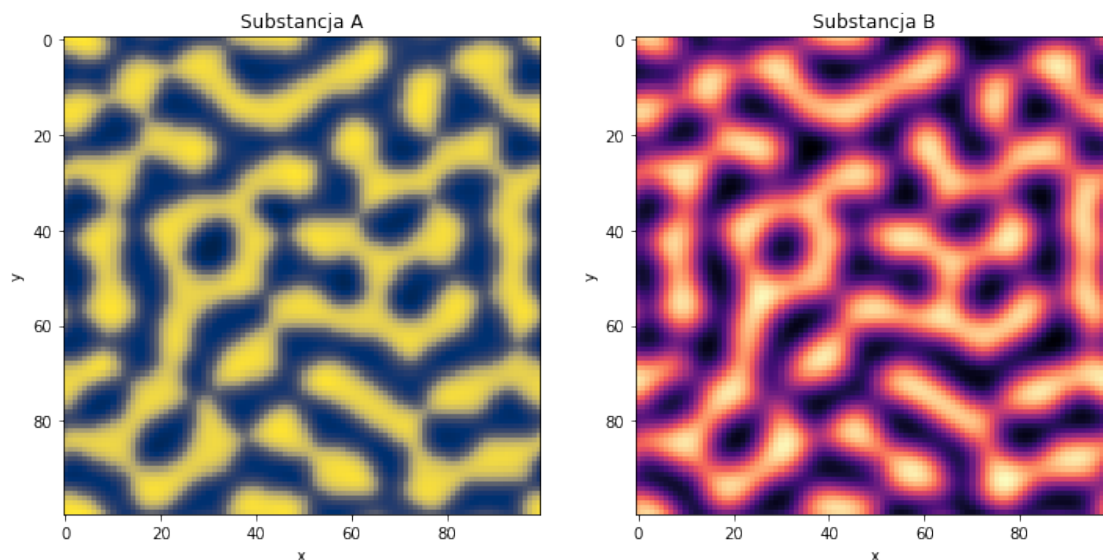
```
[76]: patterns(1, 50, -0.005, 0.25, random_initializer, time = 100)
```

Stężenia po t=100



```
[77]: patterns(1, 100, 0.2, 5, random_initializer, time = 100)
```

Stężenia po t=100



8 Źródła:

- [1] Ian Turing, *The Chemical Basis o Morphogenesis*, 1952
- [2] <http://www.degeneratestate.org/posts/2017/May/05/turing-patterns/>
- [3] https://en.wikipedia.org/wiki/Turing_pattern
- [4] https://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion_equation
- [5] https://en.wikipedia.org/wiki/FitzHugh%E2%80%93Nagumo_model
- [6] https://en.wikipedia.org/wiki/Reaction%E2%80%93diffusion_system

Autor: Maciej Romański nr. albumu: 427604