

Niestabilność Turinga w modelu Gray'a-Scotta

Paweł Węgrzyn

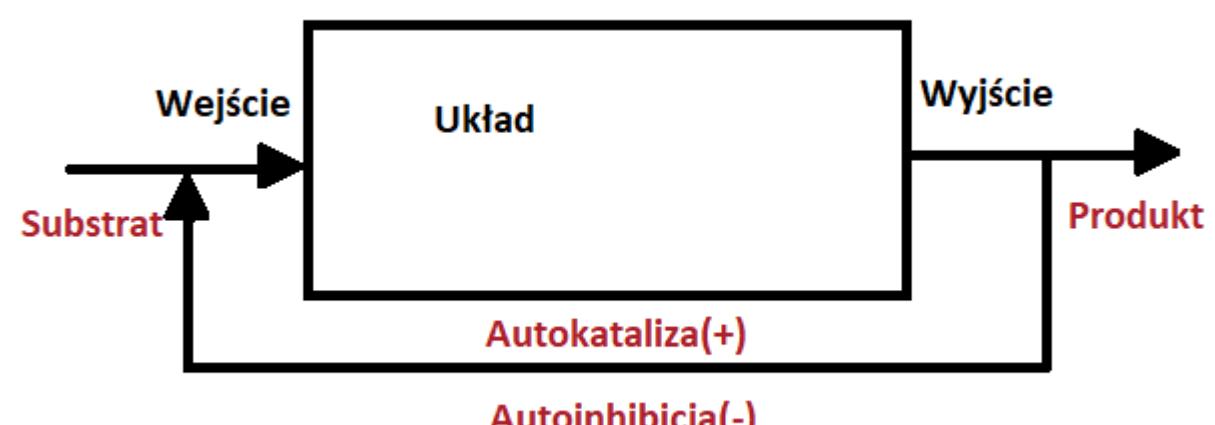
Akademia Górnictwo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

Motywacja

Równania reakcji-dyfuzji odgrywają dużą rolę w chemii oraz biochemii. W tej pracy zajmiemy się modelem Gray'a-Scotta odzwierciedlającym reakcję autokatalityczną w której powstają struktury. Niestabilność Turinga jest standardowym podejściem do analizy mechanizmu powstawania czasoprzestrzennych wzorów w nieliniowych układach dynamicznych.

Autokataliza

Autokataliza jest procesem chemicznym, w którym substancja chemiczna jest zaangażowana do produkcji samej siebie lub też wpływa na tempo przebiegu reakcji. Zachodzi wówczas chemiczne sprzężenie zwrotne.



Rysunek 1. Produkt ma wpływ na produkcję samego siebie

Rozważmy przykładowo następujący **układ zamknięty** (masa substratu jest doprowadzona do układu tylko na początku procesu), w którym cząsteczką substancji X w połączeniu z cząsteczką substancji A tworzą dwie cząsteczki substancji X , tj. $A + X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 2X$. Przyjmując że ilość substancji A jest utrzymywana na stałym poziomie a korzystając z prawa zachowania masy otrzymujemy

$$\frac{dx}{dt} = k_1ax - k_2x^2,$$

gdzie x oznacza ilość substancji X . Przykład ten ukazuje reakcję autokatalityczną w której produkt spowalnia reakcję.

Model ogólny

Niestabilność Turinga polega na utracie stabilności w punktach stacjonarnych przy pojawienniu się perturbacji przestrzennych. Postać ogólna modelu zjawiska reakcji-dyfuzji

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + f(u, v), & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d\nabla^2 v + g(u, v), & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ (\nu \cdot \nabla)u = (\nu \cdot \nabla)v = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t > 0 \\ u(x, y, 0), v(x, y, 0) \text{ dane} & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

gdzie $\partial\Omega$ jest brzegiem zbioru Ω , a ν jest wektorem normalnym do $\partial\Omega$ takim, że $\|\nu\| = 1$. Przyjmujemy zerowe warunki brzegowe, czyli rozważamy brak wpływów zewnętrznych na generację desenu.

Stabilność bez dyfuzji

Przy nieobecności dyfuzji układ przyjmuje postać

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} = g(u, v). \end{cases}$$

Niech $(u_0, v_0) \in \Omega$ będzie punktem stacjonarnym. Poprzez $J(\mathbf{p})$ oznaczmy macierz linearyzacji w punkcie stacjonarnym $\mathbf{p} = (u_0, v_0)$.

$$J(\mathbf{p}) = \begin{bmatrix} f_u(\mathbf{p}) & f_v(\mathbf{p}) \\ g_u(\mathbf{p}) & g_v(\mathbf{p}) \end{bmatrix}.$$

Stabilność układu będzie zagwarantowana jeżeli obie wartości własne macierzy leżą w lewej półpłaszczyźnie płaszczyzny zespolonej. Co pociąga za sobą

$$\begin{cases} f_u + g_v < 0 \\ f_u g_v - f_v g_u > 0. \end{cases}$$

Niestabilność w obecności dyfuzji

Rozważmy zlinearyzowany układ odpowiadający autonomicznemu układowi równań różniczkowych cząstkowych

$$\begin{cases} \mathbf{c}_t = J(\mathbf{p})\mathbf{c} + D\nabla^2 \mathbf{c}, & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ (\nu \cdot \nabla)\mathbf{c} = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t > 0 \\ \mathbf{c}(x, y, 0) = \mathbf{c}_0, & (x, y) \in \Omega \end{cases}$$

gdzie $\mathbf{c} = (u - u_0, v - v_0)^T$, $\mathbf{c}_t = (\frac{\partial(u-u_0)}{\partial t}, \frac{\partial(v-v_0)}{\partial t})^T$, $D = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix}$, $J(\mathbf{p})$ – jak wcześniej,

$$\mathbf{c}_0 = (u(x, y, 0) - u_0, v(x, y, 0) - v_0)^T.$$

Za pomocą metody Fouriera poszukujemy rozwiązań postaci

$$\mathbf{c}(x, y, t) = \sum_k d_k e^{\lambda t} c_k(x, y),$$

gdzie d_k jest wektorem współczynników rozwinięcia Fouriera $d_k = (d_k^1, d_k^2)^T$, a c_k jest funkcją własną operatora Laplace'a, czyli spełnia

$$\begin{cases} \nabla^2 \mathbf{c} + k^2 \mathbf{c} = 0, & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ (\nu \cdot \nabla)\mathbf{c} = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t > 0, \end{cases}$$

Po odpowiednich przekształceniach i obliczeniach otrzymujemy równość

$$|\lambda I - J(\mathbf{p}) + Dk^2| = 0.$$

Stąd wartości własne $\lambda(k)$ jako funkcje k są pierwiastkami wielomianu

$$w(\lambda) = \lambda^2 + \lambda[-(f_u + g_v) + k^2(1 + d)] + \text{Det}(J(\mathbf{p})) + dk^4 - k^2(df_u + g_v).$$

Aby zostały spełnione wymagania niestabilności Turinga jeden z pierwiastków tego wielomianu musi spełniać $\text{Re}\lambda(k^2) > 0$ dla pewnego $k^2 > 0$. Po wyznaczeniu warunków dla których zostanie spełniona ta zależność i zestawieniu ich z pozostałymi otrzymujemy

$$(*) \begin{cases} \text{Tr}(J(\mathbf{p})) < 0 \\ \text{Det}(J(\mathbf{p})) > 0 \\ df_u + g_v > 0 \\ (df_u + g_v)^2 > 4d\text{Det}(J(\mathbf{p})). \end{cases}$$

Model Gray'a-Scotta

Model ten przedstawia zjawisko utraty substancji U na rzecz produkcji V oraz odprowadzanie V z układu. Równania reakcji chemicznych mają postać



Substancja P nie bierze udziału w reakcji, jednakże rozważana przemiana substancji V w P w tempie α jest potrzebna aby kontrolować ilość substancji V . Model matematyczny przyjmuje postać

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -uv^2 + \beta(1 - u) + \nabla^2 u, & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} = uv^2 - (\beta + \alpha)v + d\nabla^2 v, & (x, y) \in \Omega, t > 0 \\ (\nu \cdot \nabla)u = (\nu \cdot \nabla)v = 0, & (x, y) \in \partial\Omega, t > 0 \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y) > 0, v(x, y, 0) = v_0(x, y) > 0, & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

gdzie u i v reprezentują ilości substancji U oraz V , a α i β są stałymi większymi od zera, gdzie α reprezentuje tempo zamiany $V \rightarrow P$, a β jest tempem w jakim U jest dostarczane. Substancje U oraz V dyfundują w czasie, iloraz współczynników ich dyfuzji oznaczamy przez $d = \frac{D_v}{D_u}$. Składnik uv^2 opisuje reakcję $U + 2V \rightarrow 3V$. Składnik ten pojawia się w obu równaniach jednak z różnymi znakami gdyż U jest pochłaniana, a V jest wytwarzana. Składnik $\beta(1 - u)$ odzwierciedla tempo dostarczania do systemu substancji U , które zależy od koncentracji tejże substancji. Składnik $-(\beta + \alpha)v$ jest odpowiedzialny za usuwanie z układu substancji V w tempie zależnym od jej koncentracji ale także większym niż tempo dostarczania U .

Analiza stabilności

W celu analizy niestabilności Turinga oraz potencjalnego powstawania wzorów korzystamy z wyznaczonych warunków. Wyliczając punkty stacjonarne układu

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -uv^2 + \beta(1 - u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = uv^2 - (\beta + \alpha)v, \end{cases}$$

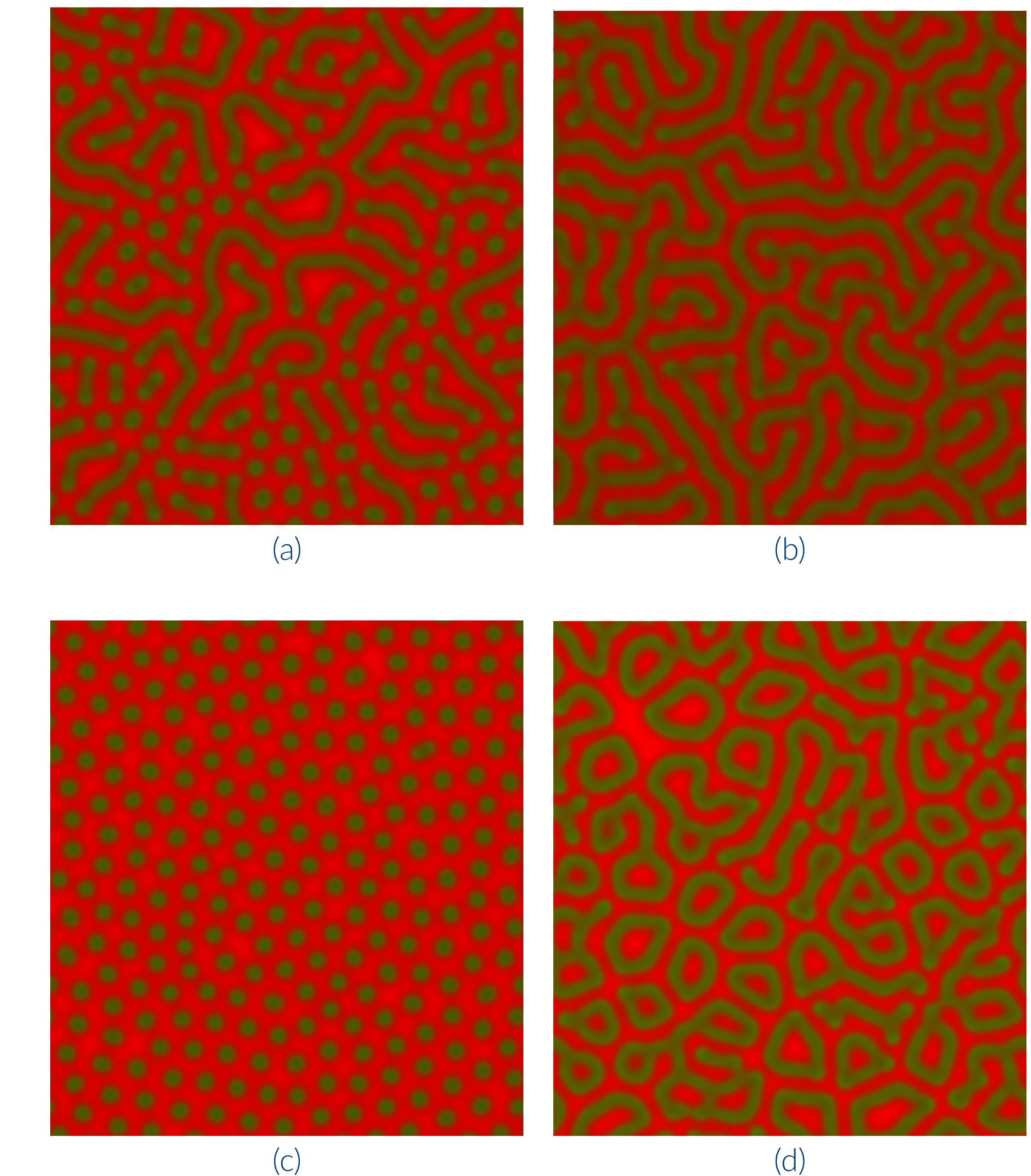
otrzymujemy

$$\begin{aligned} p_1 &= (u_1, v_1) = (1, 0) \\ p_2 &= (u_2, v_2) = \left(\frac{\beta - \sqrt{-\beta(4\alpha^2 + 8\alpha\beta + \beta(4\beta - 1))}}{2\beta}, -\frac{2\beta(\alpha + \beta)}{\beta - \sqrt{-\beta(4\alpha^2 + 8\alpha\beta + \beta(4\beta - 1))}}\right) \\ p_3 &= (u_3, v_3) = \left(\frac{\beta + \sqrt{-\beta(4\alpha^2 + 8\alpha\beta + \beta(4\beta - 1))}}{2\beta}, -\frac{2\beta(\alpha + \beta)}{\beta + \sqrt{-\beta(4\alpha^2 + 8\alpha\beta + \beta(4\beta - 1))}}\right), \end{aligned}$$

gdzie istnienie punktów p_2 i p_3 jest zależne od stałych reakcji chemicznych. Przy analizie układu od razu można pominać punkt p_1 , ponieważ reakcja nie może zachodzić przy braku substancji V . Rozważając więc problem dla punktów p_2 i p_3 warunki na niestabilność Turinga (*) przyjmą postać

$$\begin{cases} -v_i^2 + \alpha < 0 \\ v_i^2 - \beta > 0 \\ -d(v_i^2 - \beta) + \alpha + \beta > 0 \\ (-d(v_i^2 + \beta) + \alpha + \beta)^2 > 4d(\alpha + \beta)(-v_i^2 - \beta). \end{cases}$$

Symulacje



Rysunek 2. Wzory powstałe podczas symulacji dla różnych parametrów α, β : (a) $\alpha = 0.06, \beta = 0.03$, (b) $\alpha = 0.057, \beta = 0.029$, (c) $\alpha = 0.062, \beta = 0.028$, (d) $\alpha = 0.062, \beta = 0.055$

Bibliografia

- [1] Ali Atabaigil. Turing instabilities in a glycolysis reaction-diffusion system. *Appl. Anal.*, 103(2):377–392, 2024.
- [2] James D.Murray. *Mathematical Biology I and II*. Springer-Verlag, Berlin, 3rd Edn., 2003.
- [3] Anotida Madzvamuse. Stability analysis of reaction-diffusion systems with constant coefficients on growing domains. *International Journal of Dynamical Systems and Differential Equations*, 1, 01 2008.
- [4] Jingjing Wang and Yunfeng Jia. Analysis on bifurcation and stability of a generalized Gray-Scott chemical reaction model.