

Struktury Turinga

Zadanie zaliczeniowe z przedmiotu "Programowanie i Metody Numeryczne"

1 Wstęp

Układy reakcja-dyfuzja to modele matematyczne opisujące układy chemiczne, w których obok reakcji chemicznych zachodzi dyfuzja reagentów. Alan Turing zauważył, że w tego typu układach może dochodzić do spontanicznego powstawania periodycznych struktur przestrzennych, o ile układ znajduje się daleko od stanu równowagi. Warunkiem powstania takich struktur jest różnica w szybkości dyfuzji reagentów i nieliniowość reakcji chemicznej. Uważa się, że struktury Turinga mogą odgrywać rolę w morfogenezie, tj. powstawaniu struktur przestrzennych podczas rozwoju embrionalnego. Przykładowo, rozwój kręgosłupa może być modelowany jako jednowymiarowa struktura Turinga, a rozwój wzorów na powierzchni ciała jako struktura dwuwymiarowa (rys. 1). Celem tego zadania jest napisanie programu do modelowania dwuwymiarowej struktury Turinga oraz analiza uzyskanej struktury za pomocą transformaty Fouriera.

2 Układy reakcja-dyfuzja

Dynamikę układu składającego się z N reagentów opisuje układ N równań różniczkowych typu:

$$\partial_t c_i(\mathbf{x}, t) = f_i(c_1, c_2, \dots, c_N) - \nabla \cdot \mathbf{j}_i, \quad (1)$$

gdzie $c_i(\mathbf{x}, t)$ to stężenie i -tego reagentu w punkcie $\mathbf{x}$ w czasie t , $\mathbf{j}_i$ to strumień dyfuzji, a $f_i(c_1, c_2, \dots, c_N)$ to tempo zmiany stężenia i -tego składnika na skutek reakcji chemicznych. W wielu przypadkach strumień dyfuzji można policzyć za pomocą prawa Ficka: $\mathbf{j}_i = -D_i \nabla c_i$, gdzie D_i to współczynnik dyfuzji i -tego składnika. Jeżeli współczynnik dyfuzji jest stały, to równanie (1) przyjmuje postać:

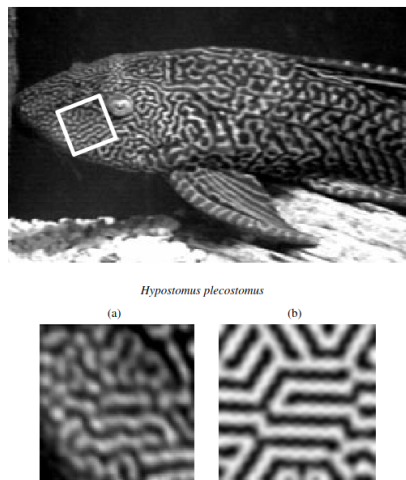
$$\partial_t c_i(\mathbf{x}, t) = f_i(c_1, c_2, \dots, c_N) + D_i \Delta c_i, \quad (2)$$

gdzie Δ oznacza operator Laplace'a.

Stany stacjonarne układu są to stany, dla których dla wszystkich reagentów zachodzi:

$$\partial_t c_i(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (3)$$

Stany stacjonarne mogą być stabilne lub niestabilne. Dla stanów stabilnych, niewielkie wychylenia będą z czasem znikły, podczas gdy dla stanów niestabilnych, będą one rosły. Analizę stabilności stanów stacjonarnych zaczniemy od przypadku układów jednorodnych, w których możemy zaniedbać dyfuzję. Przykładem takiego układu są reaktory z mieszaniem. Stan układu



Rysunek 1: (a) Wzór na skórze głożojada i (b) podobna do niego struktura Turinga (za [1]).

składającego się z N reagentów opiszemy wektorem $\mathbf{c} = [c_1, c_2, \dots, c_N]$, gdzie c_i to stężenie i -tego reagenta. Dynamikę układu opisuje układ N równań różniczkowych:

$$\begin{aligned} d_t c_1 &= f_1(\mathbf{c}) \\ &\vdots \\ d_t c_N &= f_N(\mathbf{c}). \end{aligned} \tag{4}$$

Stany stacjonarne można znaleźć rozwiązując układ równań $d_t \mathbf{c} = 0$. Stabilność stanu stacjonarnego $\mathbf{c}^s$ określamy poprzez rozwinięcie równań z układu (4) w szereg Taylora wokół tego stanu. Ponieważ interesują nas niewielkie wychylenia $\mathbf{u} = \mathbf{c} - \mathbf{c}^s$, zachowujemy jedynie człony liniowe. Uwzględniając $f_i(\mathbf{c}^s) = 0$, otrzymujemy:

$$d_t \mathbf{u}^T = \mathbf{J}^s \mathbf{u}^T, \quad \mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial c_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_N}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial c_N} \end{bmatrix}, \tag{5}$$

gdzie $\mathbf{J}^s$ oznacza macierz Jacobiego liczoną w punkcie $\mathbf{c}^s$. Rozwiązanie układu równań (5) ma postać kombinacji liniowej czynników $\exp(\lambda_i t)$, $i = 1, \dots, N$, gdzie λ_i są to wartości własne macierzy $\mathbf{J}^s$, którym odpowiadają wektory własne $\mathbf{v}_i$. Stan stacjonarny jest stabilny, gdy część rzeczywista wszystkich tych wartości własnych jest ujemna, a niestabilny, gdy któraś z nich jest dodatnia.

3 Struktury Turinga w jednym wymiarze

Teorię struktur Turinga przedstawimy na przykładzie jednowymiarowego układu dwóch reagentów, opisanego ich koncentracjami u i v [2].

$$\partial_t u(x, t) = f(u, v) + D_u \partial_{xx} u \tag{6}$$

$$\partial_t v(x, t) = g(u, v) + D_v \partial_{xx} v. \tag{7}$$

Zakładamy, że punkt $(0, 0)$ to stan stacjonarny układu, czyli $f(0, 0) = g(0, 0) = 0$. Skalę odległości dobieramy tak, żeby uzyskać $D_u = 1$. Stosunek stałych dyfuzji oznaczamy jako $d = D_v/D_u$. Za pomocą analizy stabilności liniowej chcemy określić warunki, dla których stan ten jest stabilny wobec jednorodnych zaburzeń, ale niestabilny wobec zaburzeń przestrzennie periodycznych.

Analiza stabilności liniowej układu dwóch zmiennych bez dyfuzji opisana jest w poprzednim rozdziale. Stan $(0, 0)$ jest jednorodnie stabilny, jeśli wyznacznik macierzy Jacobiego w tym punkcie jest dodatni, a jej ślad jest ujemny:

$$\text{tr} \mathbf{J}|_{(0,0)} = (f_u + g_v)|_{(0,0)} < 0, |\mathbf{J}| = (f_u g_v - f_v g_u)|_{(0,0)} > 0. \tag{8}$$

Następnie przeprowadzimy analizę stabilności pełnego układu, uwzględniając dyfuzję. Przedstawmy rozwiązanie w postaci kombinacji liniowej członów harmoniczných

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{i=\infty} a_i \exp(\lambda_i t + i k_i x) \tag{9}$$

$$v(x, t) = \sum_{i=1}^{i=\infty} b_i \exp(\lambda_i t + i k_i x). \tag{10}$$

Po linearyzacji funkcji f i g w okolicy punktu $(0, 0)$ i z uwzględnieniem (9,10) układ równań (6,7) przybiera postać

$$\lambda_i u = f_u(0, 0)u + f_v(0, 0)v - k_i^2 u \tag{11}$$

$$\lambda_i v = g_u(0, 0)u + g_v(0, 0)v - k_i^2 v \tag{12}$$

dla każdej liczby falowej k_i . Współczynniki λ_i są to wartości własne macierzy

$$\begin{bmatrix} f_u - k_i^2 & f_v \\ g_u & g_v - k_i^2 d \end{bmatrix}_{(0,0)}, \quad (13)$$

czyli spełniając:

$$\lambda_i^2 + \lambda_i [k_i^2(1+d) - (f_u(0,0) + g_v(0,0))] + h(k_i^2) = 0, \quad (14)$$

$$h(k_i^2) = dk_i^4 - (f_u(0,0)d + g_v(0,0))k_i^2 + f_u(0,0)g_v(0,0) - f_v(0,0)g_u(0,0). \quad (15)$$

Każdej liczbie falowej odpowiadają dwie wartości własne $\lambda_i^\pm$. Jeśli część rzeczywista którejś z nich jest dodatnia, stan stacjonarny jest niestabilny wobec perturbacji przestrzennych o danej liczbie falowej i w układzie powstanie stabilna struktura przestrzenna. Może mieć to miejsce, albo gdy współczynnik przy pierwszej potęgze λ_i w powyższym równaniu jest ujemny, albo gdy $h(k_i^2) < 0$. Pierwsza z tych możliwości nie może być spełniona, ponieważ z warunków (8) wynika

$$f_u(0,0) + g_v(0,0) < 0. \quad (16)$$

Druga z tych możliwości, czyli $h(k_i^2) < 0$ dla jakiegoś $k_i > 0$, może być spełniona tylko, gdy współczynnik stojący przy k_i^2 jest ujemny, ponieważ $f_u(0,0)g_v(0,0) - f_v(0,0)g_u(0,0) > 0$ zgodnie z drugim warunkiem (8), czyli:

$$f_u(0,0)d + g_v(0,0) > 0. \quad (17)$$

Biorąc pod uwagę (16) warunek ten może być spełniony tylko, gdy $d = D_v/D_u \neq 1$. Tak więc struktury Turinga mogą powstawać tylko w układach, których składniki mają różne mobilności.

4 Zadanie

Rozważmy układ dwóch zmiennych u i v , w którym mogą powstawać struktury Turinga [1]. Dynamikę układu opisują równania:

$$\partial_t u = \alpha u(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 u) + D\delta\Delta u \quad (18)$$

$$\partial_t v = \beta v \left(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} uv \right) + u(-\alpha + r_2 v) + D\delta\Delta v \quad (19)$$

gdzie $\alpha, \beta, r_1, r_2, \delta$ i D to parametry modelu.

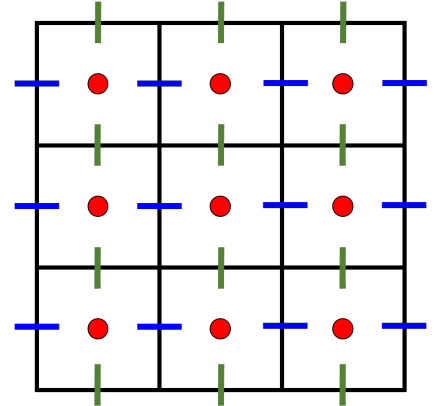
Jedyny jednorodny stan stacjonarny to $u = 0$ i $v = 0$.

Celem zadania jest wykonanie symulacji komputerowych tego układu w dwóch wymiarach. Równania powinny zostać rozwiązane metodą różnic skończonych na siatce kwadratowej typu Arakawa-C (Rys. 3). Pierwsze pochodne przestrzenne liczone są na krawędzi oczek siatki. Przykładowo:

$$\partial_x u|_{i+1/2,j} = (u|_{i+1,j} - u|_{i,j})/h, \quad (20)$$

gdzie h oznacza rozmiar oczka siatki, indeksy i i j numerują oczka siatki, a indeks $i+1/2$ oznacza krawędź pomiędzy i a $i+1$. Operator Laplace'a, równy dywergencji gradientu, przyjmuje postać:

$$\Delta u = \nabla \cdot \nabla u = \frac{1}{h^2} (u|_{i+1,j} + u|_{i-1,j} + u|_{i,j+1} + u|_{i,j-1} - 4u|_{i,j}) \quad (21)$$



Rysunek 2: Schematyczne przedstawienie siatki typu Arakawa-C. Czarne linie oznaczają granice między oczkami siatki. Zmienne u i v modelowane są na środku oczek (czerwone punkty). Gradienty liczone są na krawędzi oczek (niebieska linia dla kierunku x i zielona dla y). Źródło: pikpng.com.

Przy liczeniu operatora Laplace'a należy uwzględnić warunki brzegowe. Użyj warunków Neumanna: zerowa pochodna na brzegu domeny (brak przepływu przez ścianki).

Całkowanie po czasie można wykonać metodą Eulera:

$$u|^{t+1} = u|^{t} + d_t u|^{t} \Delta t \quad (22)$$

gdzie indeks t numeruje kroki czasowe, a $d_t u$ uzyskujemy podstawiając 21 do 18.

Parametry symulacji:

- liczba punktów siatki w każdym kierunku $L = 100$
- $\Delta t = 0.05$ (dla metody Eulera; użycie metody wyższego rzędu, np Runge-Kutta4, pozwala użyć dłuższego Δt)
- $h = 1$
- $\delta = 2$
- Długość symulacji 1000 (20000 kroków dla domyślnego Δt)
- Warunki początkowe: losowe wartości u i v z przedziału $[0, 1]$

Parametry α , β i D kontrolują, która liczba falowa ma największą wartość własną (k_{max}). Powstała struktura Turinga powinna mieć okres $2\pi/k_{max}$. Przeprowadź symulacje dla dwóch zestawów tych parametrów:

- $\alpha = 0.899$, $\beta = -0.91$, $D = 0.516$, co odpowiada $k_{max} = 0.42$
- $\alpha = 0.398$, $\beta = -0.4$, $D = 0.122$, co odpowiada $k_{max} = 0.84$

Parametry r_1 i r_2 kontrolują kształt struktury Turinga. Przeprowadź symulacje dla dwóch zestawów tych parametrów:

- $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$, co powinno dać kropki
- $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$, co powinno dać paski

Dla każdej kombinacji parametrów zaprezentuj ewolucję wartości u i v w czasie (za pomocą animacji bądź serii rysunków).

Dodatkowo, wykonaj analizę fourierowską struktury utworzonej na końcu symulacji. Taka analiza polega na wykonaniu transformacji Fouriera pola u (lub v):

$$\hat{u}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{u}(\mathbf{x}) \exp(-i2\pi \mathbf{x} \cdot \mathbf{k}) d\mathbf{x} \quad (23)$$

gdzie wektor $\mathbf{x} = (x, y)$, wektor $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, a całkowanie odbywa się po całej domenie. Wartość bezwzględna transformaty (pamiętaj, że transformata może być liczbą zespoloną), $|\hat{u}(\mathbf{k})|$, nazywana widmem amplitudowym, zawiera informację o zmienności pola na odległościach odpowiadających liczbom falowym $\mathbf{k}$. Większa wartość $|\hat{u}(\mathbf{k})|$ oznacza silniejszą zmienność w skali długości odpowiadającej $\mathbf{k}$.

Możemy założyć, że struktura przestrzenna jest radialnie symetryczna. Wygodnie będzie użyć współrzędnych polarnych (K, θ) :

$$k_x = K \cos(\theta) \quad (24)$$

$$k_y = K \sin(\theta) \quad (25)$$

Aby uzyskać widmo amplitudowe uśrednione po wszystkich kierunkach, liczymy całkę:

$$A(K) = \int_0^{2\pi} |\hat{u}(K, \theta)| d\theta \quad (26)$$

Narysuj tak policzone widmo amplitudowe. Czy jego maksimum wypada w okolicy $K = k_{max}$?

W praktyce, dwuwymiarową transformatę Fouriera możemy policzyć używając algorytmu FFT z jednej z bibliotek (np. NumPy). W jej wyniku otrzymamy wartości transformaty dla dyskretnych wartości w dwuwymiarowej przestrzeni (k_x, k_y) . Dyskretyzacja wynika ze skończonej liczby punktów siatki. Do policzenia całki 26 potrzebna może być interpolacja transformaty pomiędzy tymi punktami.

Do kodu programu dołącz sprawozdanie, opisujące program (wraz z instrukcją jego użycia) i uzyskane wyniki.

Opracowanie: Piotr Dziekan.

References

- [1] RA Barrio et al. “A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting Turing systems”. In: *Bulletin of mathematical biology* 61.3 (1999), pp. 483–505.
- [2] Piotr Dziekan. “Dynamics of far-from-equilibrium chemical systems: microscopic and mesoscopic approaches”. PhD thesis. Université Pierre et Marie Curie-Paris VI; Instytut chemii fizycznej (Pologne), 2014.