Równania reakcji-dyfuzji w biologii

Grzegorz Karch

Uniwersytet Wrocławski

SESJA NAUKOWA W 100. ROCZNICĘ URODZIN
PROF. JACKA SZARSKIEGO

Układ równań różniczkowych

$$\frac{d}{dt}u = au + bv, \qquad \frac{d}{dt}v = cu + dv$$

Warunek początkowy

$$u(0) = u_0, \qquad v(0) = v_0$$

Ustalone współczynniki $a, b, c, d \in \mathbb{R}$

Stabilność rozwiązań

$$\frac{d}{dt}u = au + bv, \qquad \frac{d}{dt}v = cu + dv$$

Twierdzenie

Załóżmy, że

$$Det = \left| \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \right| = ad - bc > 0 \quad \text{oraz} \quad Tr = a + d < 0.$$

Wówczas rozwiązanie $(u, v) = (0, 0)$ jest **asymtotycznie stabilne**.

Niestabilność Turinga (1952)

Układ równań reakcji-dyfuzji

$$\frac{\partial}{\partial t} u = \gamma \Delta u + au + bv, \qquad \frac{\partial}{\partial t} v = D \Delta v + cu + dv$$

w obszarze ograniczonym

$$\Omega \subset \mathbb{R}^n$$

z warunkami brzegowymi Neumanna

$$\frac{\partial}{\partial n} u = \frac{\partial}{\partial n} v \quad \text{na brzegu} \quad \Omega$$

Niestabilność Turinga (1952)

$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + au + bv, \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + cu + dv$$

Twierdzenie (Alan Turing (1952))

Załóżmy, że

$$Det = \left|\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\right| = ad - bc > 0 \quad \text{oraz} \quad Tr = a + d < 0$$

oraz, dodatkowo,

$$a > 0 \qquad \text{oraz} \qquad d < 0.$$

Jeżeli współczynnik dyfuzji $\gamma > 0$ jest dostatecznie mały, to rozwiązanie $(u, v) = (0, 0)$ jest **niestabilne**.

Niestabilność Turinga (1952)

Dowód Twierdzenia Turinga

Znajdujemy rozwiązanie układu reakcji-dyfuzji

$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + au + bv, \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + cu + dv$$

w postaci

$$\begin{pmatrix} u(x,t) \\ v(x,t) \end{pmatrix} = e^{\lambda t}\begin{pmatrix} c_1\varphi_k(x) \\ c_2\varphi_k(x) \end{pmatrix}$$

gdzie

– c_1, c_2 to stałe

- $\varphi_k(x)$ to funkcja własna $-\Delta$ z warunkiem brzegowym Neumanna (np. $\varphi_k(x) = \cos(k\pi x)$ gdy $\Omega = (0,1)$.

Linearyzacja

Ogólny układ równań reakcji-dyfuzji

$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + f(u,v) \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + g(u,v)$$

w obszarze ograniczonym $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ z warunkami brzegowymi Neumanna.

Rozwiązanie stałe $(\bar{u},\bar{v}) \in \mathbb{R}^2$:

$$f(\bar{u},\bar{v}) = 0, \qquad g(\bar{u},\bar{v}) = 0.$$

Układ zlinearyzowany

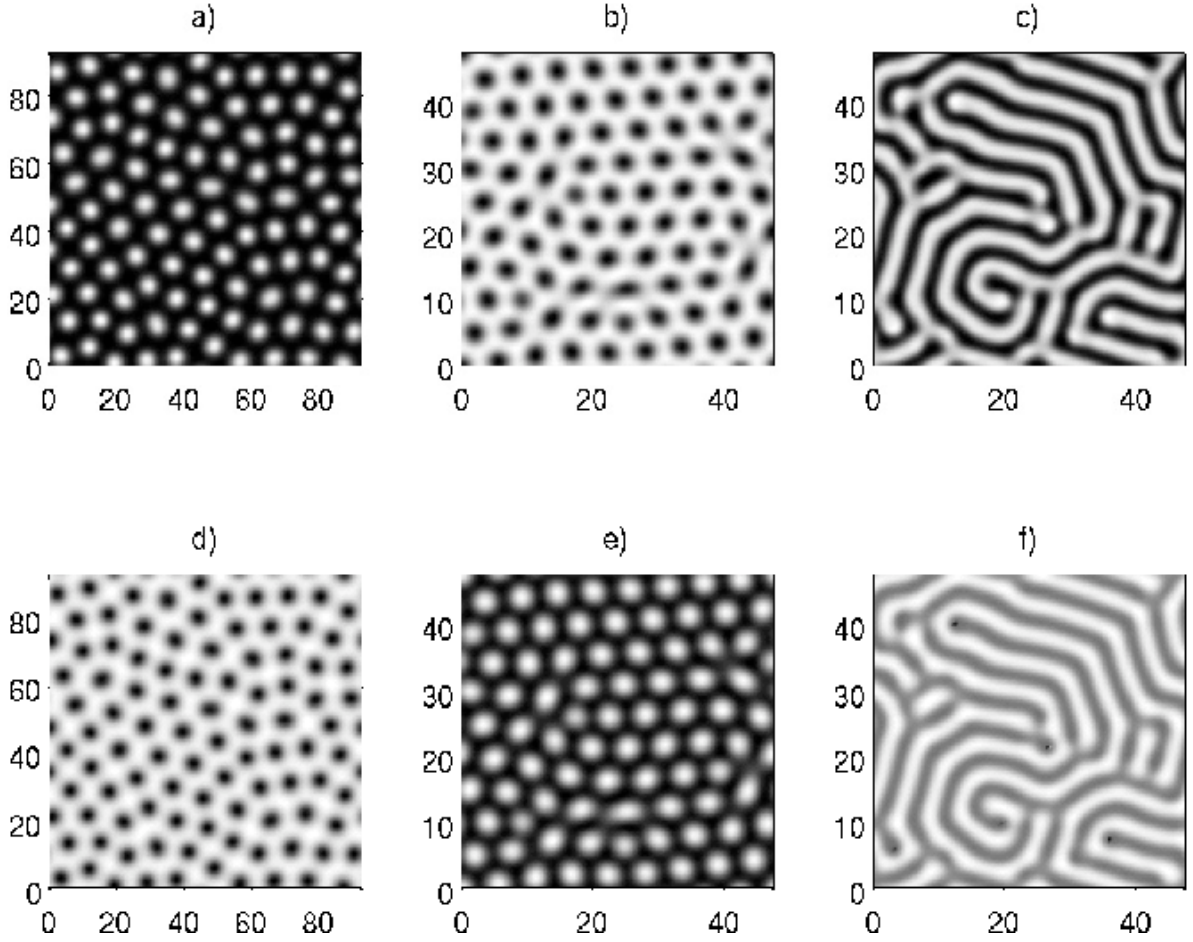
$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + au + bv, \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + cu + dv$$

gdzie

$$a = f_u(\bar{u},\bar{v}), \qquad b = f_v(\bar{u},\bar{v}), \qquad c = g_u(\bar{u},\bar{v}), \qquad d = g_v(\bar{u},\bar{v})$$

Brusselator (Ilya Prigogine (1968))

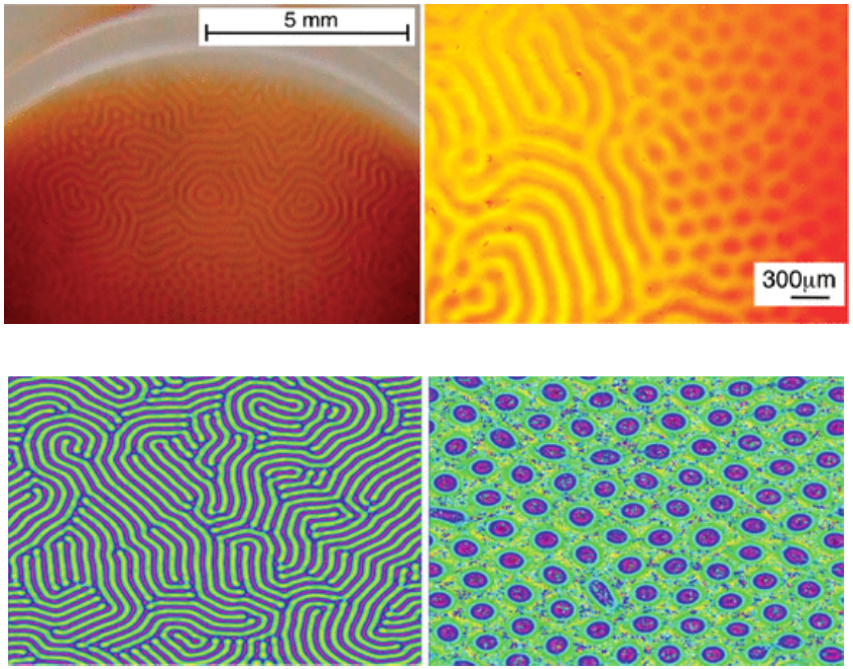
$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + A - (B+1)u + u^2 v, \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + Bu - u^2 v$$



Reakcja CIMA (Lengyel & Epstein (1991))

Chlorite-iodide-malonic acid (CIMA)

$$\frac{\partial}{\partial t}u = \gamma\Delta u + a - \frac{4uv}{1+u^2} \qquad \frac{\partial}{\partial t}v = D\Delta v + bcu - \frac{cuv}{1+u^2}$$



Równania reakcji-dyfuzji-ODE

$$
\begin{aligned}
u_t &= f(u,v), && x \in \overline{\Omega}, \quad t > 0,\\
v_t &= \Delta_\nu v + g(u,v), && x \in \Omega, \quad t > 0,
\end{aligned}
$$

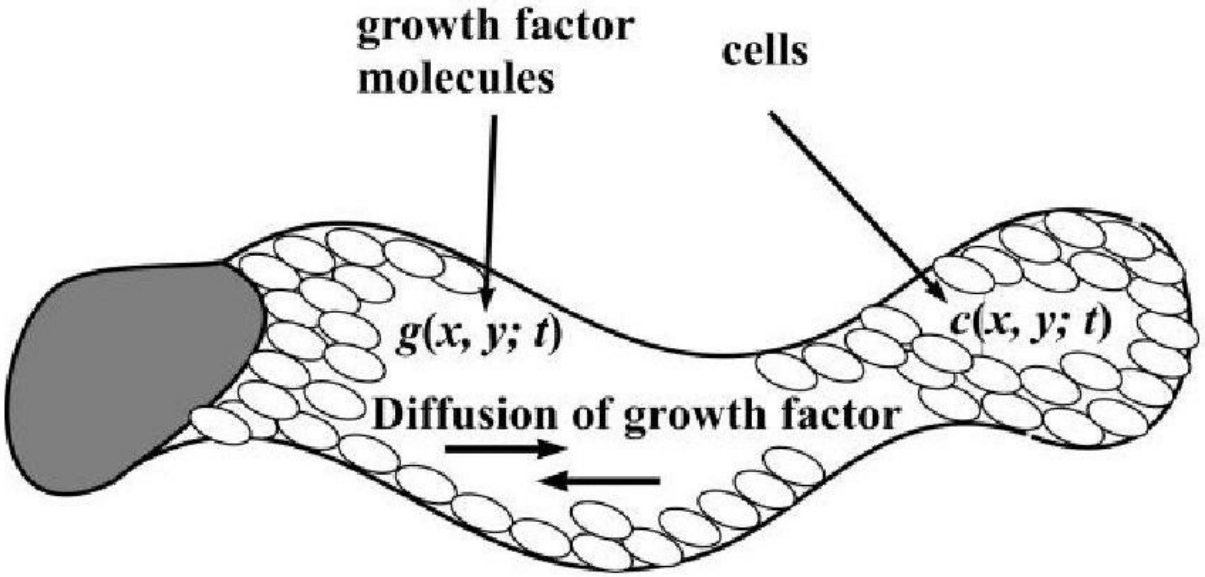
- Δ_ν - Laplasjan z warunkami brzegowymi Neumanna,
- Nieliniowości $f, g \in C^2$.

Wspólne prace z

- Anną Marciniak-Czochrą (Uniwersytet w Heidelbergu)
- Kanako Suzuki (Tohoku University i Ibaraki University)
- Szymonem Cyganem (Uniwersytet Wrocławski)

Biologiczne motywacje

$$
\begin{aligned}
u_t &= \left(\frac{av}{u+v} - d_c \right) u, \\
v_t &= - d_b v + u^2 w - dv, \\
w_t &= D\Delta_\nu w - d_g w - u^2 w + dv + \kappa_0,
\end{aligned}
$$



Stałe rozwiązania stacjonarne

$$
\begin{aligned}
&u_t = f(u,v),\\
&v_t = \Delta v + g(u,v)\\
&\partial_n v = 0 \qquad x \in \partial\Omega,\ t > 0
\end{aligned}
$$

Twierdzenie

Załóżmy, że wektor $(\bar{u}, \bar{v})$ jest stałym rozwizwiązaniem powyższego układu. Jeżeli

$$f_u(\bar{u}, \bar{v}) > 0,$$

to $(\bar{u}, \bar{v})$ jest rozwiązaniem niestabilnym.

Rozwiązania stacjonarne $\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big)$

$$\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big) = 0, \quad x \in \overline{\Omega}$$
$$\Delta_\nu V + g\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big) = 0, \quad x \in \Omega$$

Regularne rozwiązania stacjonarne

$$\boldsymbol{U}(x) = \boldsymbol{k}\big(V(x)\big) \quad \text{for} \quad \boldsymbol{k} \in C^2,$$

Theorem

Niech (U, V) będzie regularnym rozwiązaniem stacjonarnym spełniającym

$$f_u(U(x), V(x)) > 0 \quad \text{for all } x \in \overline{\Omega}.$$

Wówczas (U, V) jest **niestabilne**.

Mechanizm Turinga destabilizuje również rozwiązania niestałe !

Przykład

$\Omega \subset \mathbb{R}^N$ otwarty ograniczony z brzegiem klasy C^2

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}_0 \boldsymbol{u} + \boldsymbol{B}_0 v &= 0, \qquad x \in \overline{\Omega}, \\ \Delta_\nu v + \boldsymbol{C}_0 \boldsymbol{u} + d_0 v &= 0, \qquad x \in \Omega, \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\det \boldsymbol{A}_0} \det \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_0 & \boldsymbol{B}_0 \\ \boldsymbol{C}_0 & d_0 \end{pmatrix} = \mu_k > 0$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{U} \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\boldsymbol{A}_0^{-1} \boldsymbol{B}_0 \Phi_k \\ \Phi_k \end{pmatrix}$$

regularne rozwiązanie stacjonarne

Istnienie rozwiązań regularnych

Proposition

Niech $(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}) \in \mathbb{R}^{n+1}$ spełnia

$$\boldsymbol{f}(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}) = 0 \quad \text{and} \quad g(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}) = 0.$$

Zdefiniujmy

$$\boldsymbol{A}_0 = D_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{f}(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}), \quad \boldsymbol{B}_0 = D_v\boldsymbol{f}(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}), \quad \boldsymbol{C}_0 = D_{\boldsymbol{u}}g(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}), \quad d_0 = D_v g(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V})$$

i załóżmy że

$$\det \boldsymbol{A}_0 \neq 0 \quad \text{and} \quad \frac{1}{\det \boldsymbol{A}_0} \det \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_0 & \boldsymbol{B}_0 \\ \boldsymbol{C}_0 & d_0 \end{pmatrix} = \gamma\mu_k > 0,$$

istnieje ciąg liczb rzeczywistych $d_\ell \to 1$ takich że problem "zaburzony"

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}, V) &= 0, \qquad x \in \overline{\Omega}, \\ \gamma d_\ell \Delta_\nu V + (1 - d_\ell)V + g(\boldsymbol{U}, V) &= 0, \qquad x \in \Omega \end{aligned}$$

ma niestałe rozwiązanie regularne.

Niestabilność (2021)

$\Omega \subset \mathbb{R}^N$ otwarty ograniczony z brzegiem klasy C^2

Theorem

Niech $(\boldsymbol{U}, V)$ *będzie regularnym rozwiązaniem stacjonarnym. Jeżeli*

$$s\big(D_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}(\cdot),\ V(\cdot))\big) > 0$$

to $(\boldsymbol{U}, V)$ *jest niestabilne.*

Theorem

Załóżmy ponadto, że $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ *jest wypukła. Niech* $(\boldsymbol{U}, V) = \big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big)$ *będzie niestałym regularnym rozwiązaniem stacjonarnym takim że*

$$s\big(D_{\boldsymbol{u}}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}(\cdot),\ V(\cdot))\big) \leqslant 0$$

oraz

$$\det D_{\boldsymbol{u}}\big(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{U}(x),\ V(x))\big) \neq 0 \quad \textit{dla wszystkich} \quad x \in \overline{\Omega}.$$

Wtedy $(\boldsymbol{U}, V)$ *jest niestabilne.*

Linearyzacja

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\varphi}_t &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{B}\psi, && x \in \overline{\Omega}, \quad t > 0,\\
\psi_t &= \Delta_\nu \psi + \boldsymbol{C}\boldsymbol{\varphi} + d\psi, && x \in \Omega, \quad t > 0,
\end{aligned}
$$

$$
\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(x) = \begin{pmatrix} a_{11}(x) & \dots & a_{1n}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}(x) & \dots & a_{nn}(x) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}(x) = \begin{pmatrix} b_1(x) \\ \vdots \\ b_n(x) \end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}(x) = \begin{pmatrix} c_1(x) & \dots & c_n(x) \end{pmatrix}, \qquad d = d(x),
$$

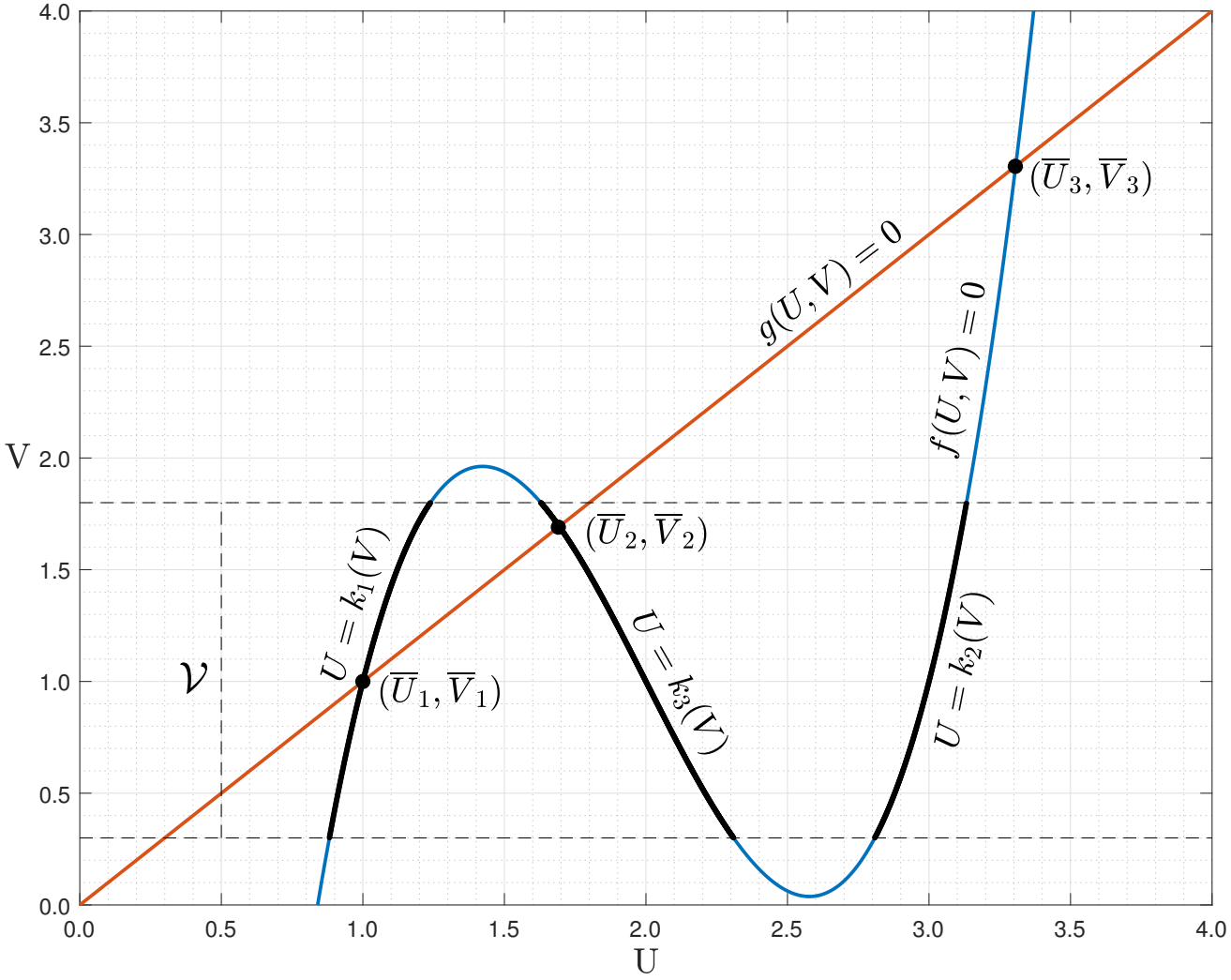
$$
a_{ij},\ b_i,\ c_i,\ d \in L^\infty(\Omega), \quad \text{for } i, j \in \{1, \cdots, n\}.
$$

Nieciągłe rozwiązania stacjonarne $\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big)$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big) &= 0, \quad x \in \overline{\Omega} \\ \Delta_\nu V + g\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big) &= 0, \quad x \in \Omega \end{aligned}$$

Przykład - Bistability in pattern formation

$$u_t = v - p(u), \qquad v_t = \gamma v_{xx} + \alpha u - \beta v,$$



Rozwiązanie nieciągłę

Definition

Słabe rozwiązanie jest nazywane *nieciągłym* jeżeli $\boldsymbol{U}, V \in L^\infty(\Omega)$ oraz $\boldsymbol{U}$ jest nieciągłą funkcją V.

Niech

$$\boldsymbol{U}(x) = \begin{cases} \boldsymbol{k}_1(V(x)), & x \in \Omega_1, \\ \boldsymbol{k}_2(V(x)), & x \in \Omega_2, \end{cases}$$

spełnia $\boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{U}(x), V(x)\big) = 0$ dla prawie wszystkich $x \in \Omega$, oraz $V = V(x)$ jest słabym rozwiązaniem problemu

$$\gamma \Delta_\nu V + g(\boldsymbol{U}, V) = 0 \quad \text{for} \quad x \in \Omega.$$

Istnienie rozwiązań nieciągłych

Theorem

Niech $N \leqslant 3$. Załóżmy że

- *istnieje stałe rozwiązanie* $(\overline{\boldsymbol{U}}, \overline{V}) \in \mathbb{R}^{n+1}$
- *Założenia ... są spełnione,*
- $\Omega \subset \overline{\Omega_1 \cup \Omega_2}$ *dla dowolnych rozłącznych zbiorów* $\Omega_1 \subset \Omega$ *i* $\Omega_2 \subset \Omega$.

Dla dostatecznie małego $\varepsilon > 0$ *i dostatecznie małej* $|\Omega_2| > 0$ *istnieje słabe rozwiązanie:*

- $(\boldsymbol{U}, V) \in L^\infty(\Omega)^n \times W^{2,2}_\nu(\Omega)$,
- $V = V(x)$ *spełnia* $\Delta_\nu V + g(\boldsymbol{U}, V) = 0 \quad \textit{for} \quad x \in \Omega$ *oraz*

$$\boldsymbol{U}(x) = \begin{cases} \boldsymbol{k}_1(V(x)), & x \in \Omega_1, \\ \boldsymbol{k}_2(V(x)), & x \in \Omega_2, \end{cases}$$

- *Rozwiązanie* $(\boldsymbol{U}, V)$ *spełnia*

$$\|V - \overline{V}\|_{L^\infty(\Omega)} < \varepsilon \quad \textit{and} \quad \|\boldsymbol{U} - \boldsymbol{k}_1(\overline{V})\|_{L^\infty(\Omega_1)} + \|\boldsymbol{U} - \boldsymbol{k}_2(\overline{V})\|_{L^\infty(\Omega_2)} < C\varepsilon$$

Stabilność rozwiązań nieciągłych

Theorem

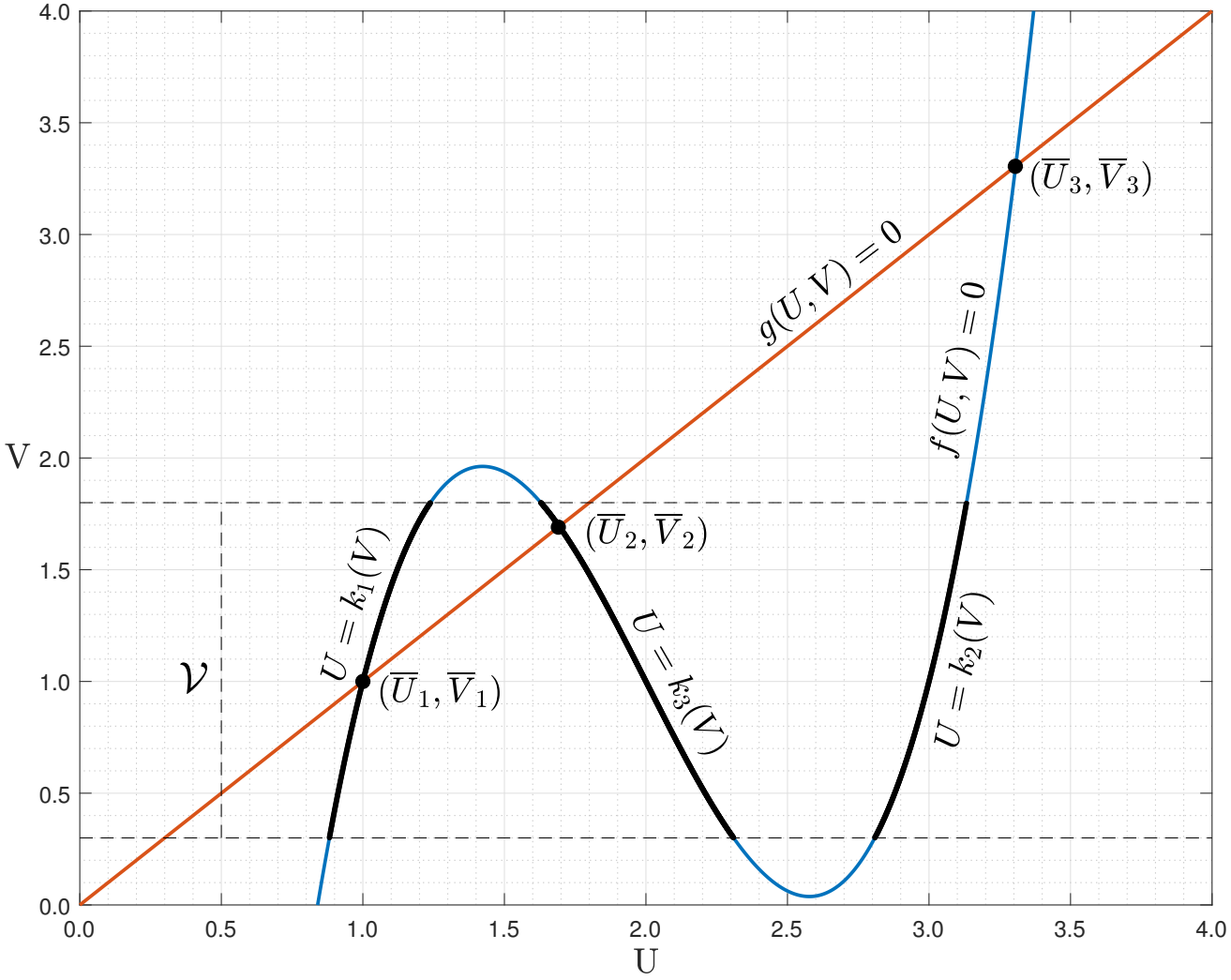
Załóżmy że rozwiązanie nieciągłe spełnia pewne techniczne założenia oraz

$$g_v(\boldsymbol{k}_1(\overline{V}), \overline{V}) < 0 \quad \textit{and} \quad g_v(\boldsymbol{k}_2(\overline{V}), \overline{V}) < 0$$

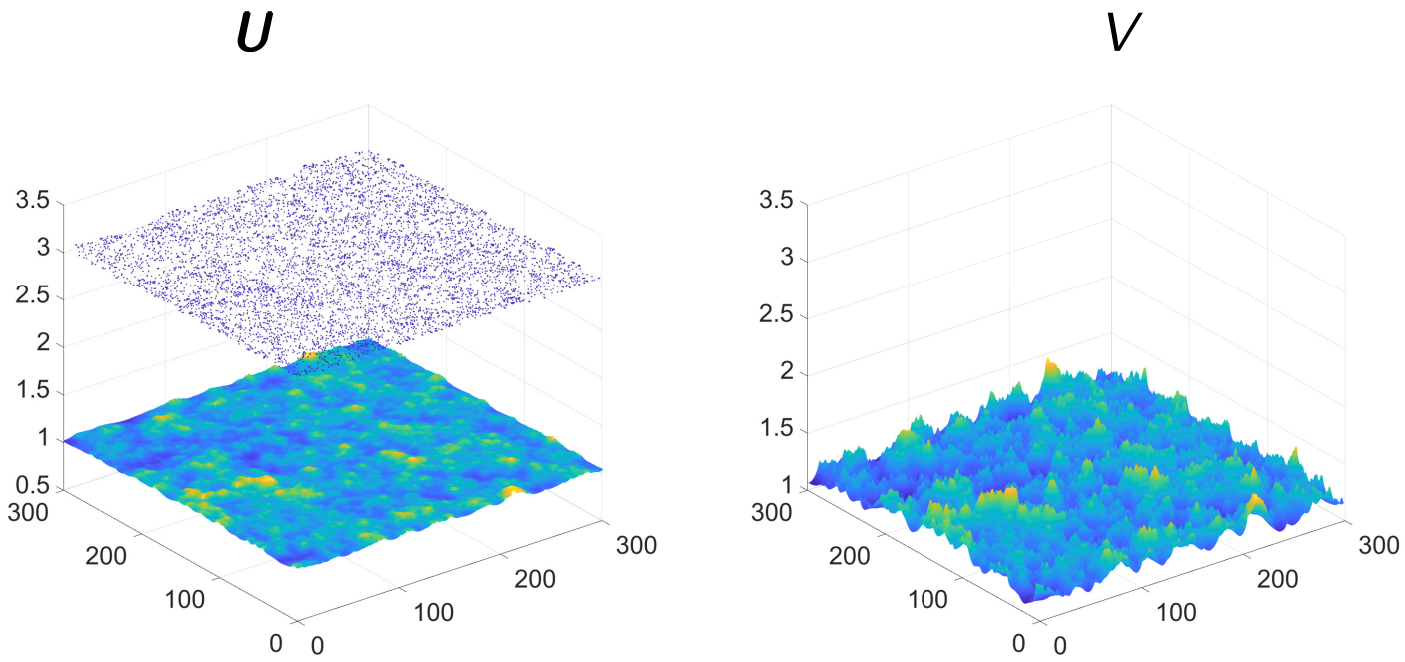
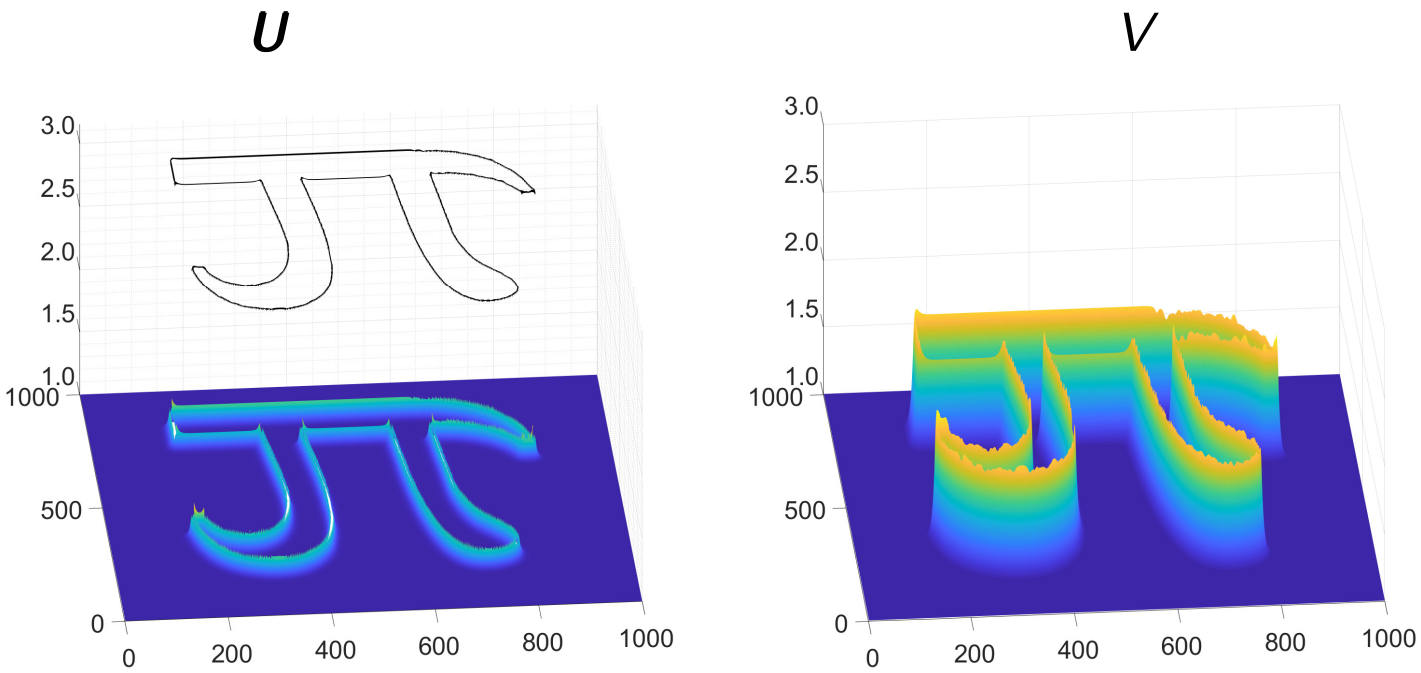
Wtedy rozwiązanie $(\boldsymbol{U}, V)$ *jest stabilne w* $L^\infty(\Omega)^{n+1}$.

Przykład - Bistability in pattern formation

$$u_t = v - p(u), \qquad v_t = \gamma v_{xx} + \alpha u - \beta v,$$



Symulacje - losowy warunek początkowy



Symulacje - π-warunek początkowy