



Σχολή Θετικών Επιστημών και Τεχνολογίας
Μεταπτυχιακές Σπουδές στα Μαθηματικά

Διπλωματική Εργασία

Μαθηματικά Μοντέλα Διάχυσης με Εφαρμογές
στη Μαθηματική Βιολογία

Κουνδουράκη Άννα

Επιβλέπων καθηγητής: Νικολόπουλος Χρήστος

Πάτρα, Μάιος 2024

Η παρούσα εργασία αποτελεί πνευματική ιδιοκτησία του φοιτητή («συγγραφέας/δημιουργός») που την εκπόνησε. Στο πλαίσιο της πολιτικής ανοικτής πρόσβασης ο συγγραφέας/δημιουργός εκχωρεί στο ΕΑΠ, μη αποκλειστική άδεια χρήσης του δικαιώματος αναπαραγωγής, προσαρμογής, δημόσιου δανεισμού, παρουσίασης στο κοινό και ψηφιακής διάχυσής τους διεθνώς, σε ηλεκτρονική μορφή και σε οποιοδήποτε μέσο, για διδακτικούς και ερευνητικούς σκοπούς, άνευ ανταλλάγματος και για όλο το χρόνο διάρκειας των δικαιωμάτων πνευματικής ιδιοκτησίας. Η ανοικτή πρόσβαση στο πλήρες κείμενο για μελέτη και ανάγνωση δεν σημαίνει καθ' οιονδήποτε τρόπο παραχώρηση δικαιωμάτων διανοητικής ιδιοκτησίας του συγγραφέα/δημιουργού ούτε επιτρέπει την αναπαραγωγή, αναδημοσίευση, αντιγραφή, αποθήκευση, πώληση, εμπορική χρήση, μετάδοση, διανομή, έκδοση, εκτέλεση, «μεταφόρτωση» (downloading), «ανάρτηση» (uploading), μετάφραση, τροποποίηση με οποιονδήποτε τρόπο, τμηματικά ή περιληπτικά της εργασίας, χωρίς τη ρητή προηγούμενη έγγραφη συναίνεση του συγγραφέα/δημιουργού. Ο συγγραφέας/δημιουργός διατηρεί το σύνολο των ηθικών και περιουσιακών του δικαιωμάτων.



Μαθηματικά Μοντέλα Διάχυσης με Εφαρμογές
στη Μαθηματική Βιολογία

Κουνδουράκη Άννα

Επιτροπή Επίβλεψης Διπλωματικής Εργασίας

Επιβλέπων Καθηγητής:
Νικολόπουλος Χρήστος

Συν-Επιβλέπουσα Καθηγήτρια:
Χατζηνικολάου Μαρία

Αναπληρωτής Καθηγητής
Τμήματος Μαθηματικών,
Πανεπιστήμιο Αιγαίου

Καθηγήτρια
Τμήματος Μαθηματικών,
Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο

Πάτρα, Μάιος 2024

*Αφιερώνεται στις κόρες μου
Μαρία και Τσαμπίκα.*

Ευχαριστίες

Ολοκληρώνοντας την εκπόνηση της Διπλωματικής μου Εργασίας θα ήθελα να απευθύνω τις θερμές μου ευχαριστίες στους ανθρώπους που συνέβαλλαν σε αυτή μου την προσπάθεια. Ευχαριστώ ιδιαίτερα τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ. Χρήστο Νικολόπουλο για την πολύτιμη καθοδήγηση, τις εύστοχες παρατηρήσεις και την υποστήριξη που μου προσέφερε σε κάθε βήμα. Ευχαριστώ επίσης τους καθηγητές μου, κ. Ιωάννη Στρατή, κ. Νικόλαο Τσίτσα και κ. Φραγκίσκο Κουτελιέρη, των οποίων η αφοσίωση στην εκπαιδευτική διαδικασία συνέβαλλε σημαντικά στο να φτάσω στην ολοκλήρωση του Προγράμματος Σπουδών. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου, τον σύζυγό μου Κωνσταντίνο και τα δύο παιδιά μας Μαρία και Τσαμπίκα, για την υπομονή, την υποστήριξη και την αγάπη τους.

Περίληψη

Η παρούσα εργασία αποτελεί μία μελέτη των κυριότερων μαθηματικών μοντέλων διάχυσης, τα οποία χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν και να ερμηνεύσουν φαινόμενα που απασχολούν την επιστήμη της Βιολογίας. Ιδιαίτερα μελετώνται οι εξισώσεις διάχυσης-αντίδρασης και το μοντέλο του *Allan Turing* για την μορφογένεση. Πιο συγκεκριμένα η εργασία χωρίζεται σε πέντε κεφάλαια.

Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι βασικές έννοιες, οι οποίες θα βοηθήσουν τον αναγνώστη να προχωρήσει στη μελέτη του κυρίως σώματος της εργασίας.

Το δεύτερο κεφάλαιο περιλαμβάνει την παρουσίαση της φυσικής προέλευσης της εξίσωσης διάχυσης από δύο διαφορετικές σκοπιές, μέσω της εφαρμογής των νόμων διατήρησης και από το μοντέλο του τυχαίου περιπάτου. Μελετάται ακόμη η θεμελιώδης λύση της εξίσωσης αυτής ενώ επιπλέον δίνεται η μαθηματική μοντελοποίηση της διάχυσης σε τρεις διαστάσεις.

Στο τρίτο κεφάλαιο περιέχεται η μελέτη των δυναμικών συστημάτων και δίνονται οι προϋποθέσεις για την ευστάθεια των κρίσιμων σημείων ενός τέτοιου συστήματος. Η ανάλυση αυτή, παρέχει τα εργαλεία για την κατανόηση της δυναμικής εξέλιξης των συστημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζεται η φυσική προέλευση της εξίσωσης αντίδρασης-διάχυσης καθώς και δύο εξισώσεις αυτής της μορφής, οι οποίες έχουν πολλές εφαρμογές στον τομέα της Μαθηματικής Βιολογίας, η εξίσωση *Fisher-Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov* γνωστή ως εξίσωση *Fisher-KPP* και η εξίσωση *Skellam*.

Στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο αναλύεται το φαινόμενο της αστάθειας λόγω διάχυσης, της λεγόμενης αστάθειας *Turing*, παρουσιάζονται οι συνθήκες κάτω από τις οποίες ένα σύστημα αντίδρασης-διάχυσης θα παρουσιάσει αυτού του είδους την αστάθεια και αναλύεται ο τρόπος με τον οποίο το φαινόμενο αυτό συνδέεται με τον σχηματισμό μοτίβων. Συγκεκριμένη αναφορά γίνεται στα χωρικά μοτίβα που αναπτύσσονται κατά την εμβρυογένεση. Το κεφάλαιο αυτό περιλαμβάνει αρχικά μια ποιοτική ανάλυση του φαινομένου αλλά και μία αριθμητική προσομοίωση, που σχετίζεται με το μοντέλο *Gierer-Meinhardt* αλλά και το μοντέλο *Snakenberg*.

Λέξεις – Κλειδιά

Μαθηματική Βιολογία, εξίσωση διάχυσης, εξίσωση διάχυσης-αντίδρασης, μοντέλα διάχυσης, εξίσωση *Fisher-KPP*, εξίσωση *Skellam*, αστάθεια *Turing*, σχηματισμός μοτίβων, μορφογένεση, μοντέλο *Gierer-Meinhardt*, μοντέλο *Snakenberg*.

«Mathematical Models of Diffusion with Mathematical Biology Applications»

Anna Koundouraki

Abstract

This thesis includes a study of the main mathematical models of diffusion, which are used to describe and interpret phenomena that concern the science of Biology. Diffusion-reaction equations and Allan Turing's model of morphogenesis are particularly studied. More specifically, the work is divided into five chapters.

In the first chapter, the basic concepts are presented. This chapter's goal is to help the reader proceed with the study of the main body of the thesis.

The second chapter includes the presentation of the physical origin of the diffusion equation from two different points of view, through the application of conservation laws and from the random walk model. The fundamental solution of this equation is also being studied, while in addition, the mathematical modeling of the diffusion in three dimensions is given.

The third chapter contains the study of dynamic systems and focuses on the conditions for the stability of the critical points of such a system. This analysis provides the tools for understanding the dynamic evolution of systems of partial differential equations.

The fourth chapter presents the physical origin of the reaction-diffusion equation as well as two equations of this form, which have many applications in the field of Mathematical Biology, the *Fisher-Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov* equation known as the *Fisher-KPP* equation and the *Skellam* equation.

In the fifth and last chapter, the phenomenon of instability due to diffusion, the so-called *Turing* instability, is analyzed, the conditions under which a reaction-diffusion system will exhibit this type of instability are presented and furthermore the way in which this phenomenon is connected to the pattern formation is studied. Specific reference is made to the spatial patterns that develop during embryogenesis. This chapter includes the

qualitative analysis of the phenomenon and numerical simulations of the *Gierer-Meinhardt* model and the *Snakenberg* model.

Keywords

Mathematical Biology, diffusion equation, reaction-diffusion equation, diffusion models, *Fisher-KPP* equation, *Skellam* equation, *Turing* instability, pattern formation, morphogenesis, *Gierer-Meinhardt* model, *Snakenberg* model.

Περιεχόμενα

Περίληψη.....	vi
Abstract	viii
Περιεχόμενα	x
Κατάλογος Σχημάτων	xi
Συνομογραφίες & Ακρωνύμια.....	xiii
Εισαγωγή.....	1
1. Βασικές Έννοιες.....	5
1.1 Μαθηματικό Μοντέλο	5
1.2 Μαθηματική Μοντελοποίηση	6
1.3 Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις.....	7
1.4 Προβλήματα Αρχικών και Συνοριακών Τιμών	11
1.5 Καλή Τοποθέτηση Προβλήματος κατά Hadamard	12
2. Διάχυση	14
2.1 Φυσική Προέλευση Εξίσωσης Διάχυσης	15
2.2 Αρχικές και Συνοριακές Συνθήκες	17
2.3 Θεμελιώδης Λύση Εξίσωσης Διάχυσης	18
2.4 Το Μοντέλο του Τυχαίου Περιπάτου	22
2.5 Διάχυση σε Τρεις Διαστάσεις.....	25
3. Διάγραμμα Φάσεων.....	29
3.1 Δυναμικά Συστήματα	29
3.2 Γενική Θεωρία Διαγωνιοποίηση	31
3.3 Γραμμικά Συστήματα	32
3.4 Μελέτη Ιδιοτιμών	34
3.5 Μη Γραμμικά Συστήματα	37
4. Οι εξισώσεις Αντίδρασης-Διάχυσης	39
4.1 Φυσική Προέλευση της Εξίσωσης Αντίδρασης-Διάχυσης	39
4.2 Η εξίσωση Fisher-Kolmogorov, Petrovskii, Piskunov	40
4.3 Οδεύοντα Κύματα	42
4.4 Ευστάθεια των Λύσεων της Εξίσωσης Fisher-KPP	44
4.5 Η Εξίσωση Skellam.....	47
5. Η Αστάθεια Turing.....	52
5.1 Το Μοντέλο Turing για την Μορφογένεση.....	52
5.2 Μελέτη Ευστάθειας και Προϋποθέσεις για την Αστάθεια Turing.....	54
5.3 Αστάθεια Turing σε Δισδιάστατο Πεπερασμένο Χωρίο	62
5.4 Σχηματισμός Μοτίβων-Το μοντέλο Schnakenberg.....	69
5.5 Μοτίβα στην Εμβρυολογία-Το Μοντέλο Gierer-Meinhardt	75
6. Συμπεράσματα	92
Βιβλιογραφία.....	95

Κατάλογος Σχημάτων

Σχήμα 1. 1: Μαθηματική μοντελοποίηση, διαγραμματική περιγραφή.....	6
Σχήμα 1. 2: Πρόβλημα αρχικών τιμών, με δεδομένες τιμές της u στο Γ	11
Σχήμα 1. 3: Ρευστό σε λεπτό κυλινδρικό σωλήνα.....	15
Σχήμα 2. 1: Διάχυση ουσίας με την πάροδο του χρόνου.....	19
Σχήμα 2. 2: Μονοδιάστατος τυχαίος περίπατος.....	23
Σχήμα 2. 3: Οι συντεταγμένες ροής στον τρισδιάστατο χώρο.....	26
Σχήμα 2. 4: Εισροή και εκροή ουσίας σε κύβο απειροελάχιστου όγκου.....	26
Σχήμα 3. 1: Διαγράμματα φάσης διακεκριμένων πραγματικών ιδιοτιμών.....	35
Σχήμα 3. 2: Διαγράμματα φάσης ίσων πραγματικών ιδιοτιμών.....	35
Σχήμα 3. 3: Διαγράμματα φάσης μιγαδικών ιδιοτιμών.....	36
Σχήμα 3. 4: Συγκεντρωτικό διάγραμμα διαγραμμάτων φάσης.....	36
Σχήμα 4. 1: Ρευστό σε λεπτό κυλινδρικό σωλήνα που περιέχει χημικές ενώσεις.....	39
Σχήμα 4. 2: Λύση της εξίσωσης <i>Fisher-KPP</i> για $c=3$ με την μορφή οδεύοντος κύματος.....	41
Σχήμα 4. 3: Τυπική μορφή ενός οδεύοντος κύματος «κυματικό μέτωπο».....	42
Σχήμα 4. 4: Μορφή οδεύοντος κύματος «παλμικό κύμα».....	43
Σχήμα 4. 5: Διάγραμμα φάσεων για $c=3$	46
Σχήμα 4. 6: Διάγραμμα φάσεων για $c=1$	46
Σχήμα 4. 7: Εξάπλωση των μοσχοβολιστών στην Ευρώπη (Skellam, 1951).....	48
Σχήμα 4. 8: Προσέγγιση του εύρους του πληθυσμού για τις διάφορες τιμές του θ	51
Σχήμα 5. 1: Πρόσημο της παραβολής $H(k^2)$	61
Σχήμα 5. 2: Χωρικά μοτίβα με ρίγες.....	67
Σχήμα 5. 3: Χωρικά μοτίβα με κηλίδες.....	67
Σχήμα 5. 4: Γραφική απεικόνιση των ιδιοσυναρτήσεων της γενικής λύσης του συστήματος διάχυσης-αντίδρασης σε δισδιάστατο πεπερασμένο χωρίο με ομογενείς $\Sigma\Sigma$ <i>Neumann</i> για τις διάφορες τιμές των ακεραίων (n,m)	68
Σχήμα 5. 5: Σχηματική αναπαράσταση ενός συστήματος αυτό-οργάνωσης ενεργοποιητή-αναστολέα.....	71
Σχήμα 5. 6: Γραφική αναπαράσταση των συγκεντρώσεων ενεργοποιητή και αναστολέα σε σχέση με τον χρόνο στο μοντέλο <i>Schnakenberg</i>	73
Σχήμα 5. 7: Δισδιάστατη προσομοίωση του μοντέλου <i>Schnakenberg</i> σε διακριτά χρονικά βήματα.....	74
Σχήμα 5. 8: Χρωματική κλίμακα-δείκτης αναφοράς συγκέντρωσης της ουσίας u στο μοντέλο <i>Snakenberg</i>	75
Σχήμα 5. 9: Σύγκριση διαγραμμάτων που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Snakenberg</i> για τις χρονικές στιγμές $T=100$ και $T=1000$	75
Σχήμα 5. 10: Αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i>	83
Σχήμα 5. 11: Χρωματική κλίμακα-δείκτης αναφοράς συγκέντρωσης της ουσίας u	84
Σχήμα 5. 12: Σύγκριση διαγραμμάτων που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i> για τις χρονικές στιγμές $T=10$ και $T=100$	84
Σχήμα 5. 13: Επίδραση της μεταβολής των παραμέτρων D_u, D_v στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i>	86

Σχήμα 5. 14: Επίδραση της μεταβολής της παραμέτρου c στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i>	86
Σχήμα 5. 15: Επίδραση της μεταβολής της παραμέτρου μ στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i>	87
Σχήμα 5. 16: Επίδραση της ταυτόχρονης μεταβολής των παραμέτρων D_u , D_v στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i>	88
Σχήμα 5. 17: Αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου <i>Gierer-Meinhardt</i> με την επιβολή περιοδικών αρχικών συνθηκών.	89
Σχήμα 5. 18: Επίδραση των περιοδικών αρχικών συνθηκών στο μοντέλο <i>Gierer-Meinhardt</i>	90
Σχήμα 5. 19: Επίδραση της μεταβολής των τιμών των παραμέτρων D_u , D_v , c και μ στο μοντέλο <i>Gierer-Meinhardt</i> με αρχικές συνθήκες $u(0, x) = 4 + 2 \cos x$ και $v(0, x) = 12.5 + 2 \cos x$	90

Συντομογραφίες & Ακρωνύμια

ΣΔΕ	Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις
ΜΔΕ	Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις
ΑΣ	Αρχικές Συνθήκες
ΣΣ	Συνοριακές Συνθήκες
ΠΑΤ	Πρόβλημα Αρχικών Τιμών
ΠΣΤ	Πρόβλημα Συνοριακών Τιμών
ΠΑΣΤ	Πρόβλημα Αρχικών και Συνοριακών Τιμών
G-M	Gierer-Meinhardt

Εισαγωγή

Η Μαθηματική Βιολογία αποτελεί το σταυροδρόμι της επιστήμης της Βιολογίας με τις πλούσιες μεθόδους και τεχνικές των Μαθηματικών Επιστημών. Ο διεπιστημονικός της χαρακτήρας είναι το στοιχείο, το οποίο καθιστά δυνατή την ανάλυση και την προσομοίωση πολύπλοκων διεργασιών στον βιολογικό κόσμο, όπως η εξέλιξη των ειδών, οι διαδικασίες διάχυσης, η δυναμική των πληθυσμών και οι βιοχημικές αντιδράσεις. Σαν επιστήμη, η Μαθηματική Βιολογία, θεωρείται αρκετά σύγχρονη καθώς γνώρισε ιδιαίτερη ανάπτυξη από τον 17^ο αιώνα και έπειτα [1]. Παρόλα αυτά, η απαρχή της χρονολογείται στο 1202 με την εισαγωγή της ακολουθίας *Fibonacci*, την οποία ο Ιταλός μαθηματικός χρησιμοποίησε για τη μελέτη και την περιγραφή της αύξησης ενός ιδανικού πληθυσμού κουνελιών, δηλαδή ενός προβλήματος που εντάσσεται στο πεδίο της Οικολογίας [2], [3].

Η Οικολογία συνιστά τον πιο ανεπτυγμένο και μελετημένο κλάδο της Μαθηματικής Βιολογίας καθώς αποτέλεσε πρόσφορο έδαφος για εισαγωγή και μελέτη προβλημάτων άμεσα παρατηρήσιμων και συνδεδεμένων με την καθημερινή ζωή. Ένα από τα πιο χαρακτηριστικά παραδείγματα που εντάσσεται στον τομέα, είναι αυτό της μελέτης της δυναμικής των πληθυσμών. Πρωτοπόρος στο συγκεκριμένο πεδίο υπήρξε ο Ελβετός μαθηματικός *Leonhard Euler*, ο οποίος το 1748 εισήγαγε το μοντέλο γεωμετρικής (ή εκθετικής) ανάπτυξης, ενώ το 1760 παρουσίασε ένα διακριτό μοντέλο μελέτης, ενός γεωμετρικά αυξανόμενου πληθυσμού ατόμων [2].

Η επανάσταση στον τομέα της Βιολογίας όμως πραγματοποιήθηκε στα τέλη του 17ου αιώνα και πυροδοτήθηκε από την εφεύρεση του μικροσκοπίου. Αυτό το εργαλείο αποκάλυψε προηγουμένως άγνωστους κόσμους, επεκτείνοντας σημαντικά το πεδίο της έρευνας και των εφαρμογών στη Μαθηματική Βιολογία, όχι μόνο στον τομέα της Οικολογίας και της Επιδημιολογίας αλλά και στους πλέον σύγχρονους τομείς της Βιοχημικής Κινητικής, της Κυτταρικής Βιολογίας, της Γενετικής, της Μορφογένεσης, της Ογκολογίας και των Νευροεπιστημών [1], [4]. Επιπλέον η εκπληκτική πρόοδος που έχει σημειωθεί τα τελευταία 500 χρόνια και στα τρία σημαντικά πεδία της επιστήμης των Μαθηματικών, της Γεωμετρίας και Τοπολογίας, της Άλγεβρας και της Ανάλυσης, έχει εμπλουτίσει σε μεγάλο βαθμό την επιστήμη της Βιολογίας εφόσον έχει καταστήσει

δυνατή τόσο την ποιοτικότερη μελέτη των υπαρχόντων υποθέσεων όσο και τη δημιουργία νέων προβληματισμών [4].

Θα ήταν όμως παράλογο να ισχυριστούμε πως από το συνονθύλευμα αυτών των δύο επιστημών επωφελείται μόνο ο τομέας της Βιολογίας, καθώς πληθώρα μαθηματικών θεωρημάτων, υποθέσεων και μοντέλων έχει αναπτυχθεί για τη μελέτη βιολογικών διαδικασιών [3]. Ενδεικτικά μπορούμε να αναφέρουμε τη Λογιστική Εξίσωση του *Verhulst* (1838), με την οποία εκφράζεται ο τρόπος αύξησης ενός πληθυσμού σε σχέση με τη βιοχωρητικότητα του περιβάλλοντος του. Τη Συσχέτιση *Pearson* (1903), που αποτελεί το πιο γνωστό μέτρο της εξάρτησης και φανερώνει την ισχύ της γραμμικής συσχέτισης μεταξύ δύο μεταβλητών. Τις Αλυσίδες του *Markov* (1906), ένα μοντέλο μελέτης στοχαστικών συστημάτων, των οποίων η μελλοντική εξέλιξη επηρεάζεται αποκλειστικά από την παρούσα τους κατάσταση. Τον νόμο *Hardy-Weinberg* για τη γενετική παραλλαγή (1908), που ερμηνεύει τα αίτια της σταθερότητας των γονιδιακών συχνοτήτων, εφαρμόζοντας το διωνυμικό θεώρημα. Το Μοντέλο *Lotka-Volterra* (1925-1931), για την αλληλεπίδραση των ειδών (θηρευτή-θηράματος) σε ένα οικοσύστημα. Τη Δοκιμή Διακύμανσης των *Luria-Delbrück* (1943), που απέδειξε την τυχειότητα στις μεταλλάξεις του γενετικού υλικού των βακτηρίων. Τη μελέτη του *Turing* για τη μορφογένεση (1952) και το στοχαστικό μοντέλο για την εξέλιξη των γονιδιακών συχνοτήτων στη γενετική του πληθυσμού από τον *Kimura* (1994) [4].

Η παρούσα εργασία θα εστιάσει στα Μαθηματικά Μοντέλα που έχουν αναπτυχθεί για τη μελέτη φαινομένων διάχυσης. Η διάχυση, σαν επιστημονικό πεδίο, εμφανίζεται για πρώτη φορά στις αρχές του 19^{ου} αιώνα. Η πρώτη συστηματική μελέτη των διεργασιών διάχυσης οφείλεται στον Σκωτσέζο χημικό *Thomas Graham* (1805-1869). Το ερευνητικό του έργο για τη διάχυση των αερίων, που περιελάμβανε το πρώτο ποσοτικό πείραμα διάχυσης, διεξήχθη από το 1828 έως το 1833 και παρείχε την πρώτη αξιόπιστη μέτρηση για τον προσδιορισμό ενός συντελεστή διάχυσης [13]. Μεταξύ άλλων, ο *Graham*, είναι ο εφευρέτης της αιμοκάθαρσης, που ορίστηκε ως μέθοδος διαχωρισμού βιολογικών υγρών, με διάχυση μέσω μιας ημιδιαπερατής μεμβράνης το 1854. Η έννοια του συντελεστή διάχυσης βέβαια θα καθιερωθεί 26 χρόνια αργότερα χάρη στη συμβολή του *Fick* [14].

Η συνεισφορά του *Adolf Fick* (1829-1901) στον τομέα υπήρξε καταλυτική καθώς το 1855 δημοσίευσε τη διάσημη μελέτη του για τη διάχυση, καθιερώνοντας έπειτα τις δύο, κλασικές πλέον, εξισώσεις διάχυσης που γνωρίζουμε ως “πρώτο και δεύτερο νόμο του

Fick". Για την κατανόηση των διαδικασιών διάλυσης και διάχυσης του αλατιού στο νερό, ο *Fick* έκανε νύξη στην ατομική θεωρία. Παρόλο που οι σύγχρονες αντιλήψεις για τα άτομα και τα μόρια διαφοροποιούνται σημαντικά από αυτές του *Fick*, δεν θα μπορούσαμε να παραβλέψουμε την εξαιρετική αντίληψη της βαθιάς αναλογίας μεταξύ της διάχυσης και της αγωγιμότητας της θερμότητας ή του ηλεκτρισμού και τη διαίσθηση του να πραγματοποιήσει τον παραπάνω συσχετισμό [14], [15].

Οι πρώτες ποσοτικές μετρήσεις για τη διάχυση σε στερεά σώματα οφείλονται στον μεταλλουργό και χημικό *William Chandler Roberts-Austen* (1843-1905). Βασισμένος στα συμπεράσματα του *Fick*, πραγματοποίησε πειράματα σχετικά με τη διάχυση πολύτιμων μετάλλων αρχικά σε υγρό μόλυβδο, κασσίτερο και βισμούθιο. Έπειτα, έκανε μια προσπάθεια συμπαγούς διάχυσης χρυσού σε μόλυβδο. Για τον υπολογισμό της σταθεράς διάχυσης, χρησιμοποίησε τους πίνακες του Σλοβένου φυσικού *Josef Stefan* για τη διάχυση των αλάτων (οι ίδιοι πίνακες είχαν χρησιμοποιηθεί νωρίτερα και από τον *Graham*). Ο *Stefan* (1835-1893) είχε επίσης σημαντική συνεισφορά στον τομέα καθώς έδωσε τη λύση της εξίσωσης διάχυσης με δύο μορφές: με τη μορφή τριγωνομετρικής σειράς και με τη χρήση της συμπληρωματικής συνάρτησης σφάλματος [14].

Η σύνδεση του μακροσκοπικού με τον μικροσκοπικό κόσμο στον τομέα της διάχυσης αποτελεί έργο του *Albert Einstein* (1879-1955), ο οποίος χρησιμοποίησε την στοχαστική θεωρία της *Κίνησης Brown*¹ για να εκφράσει τον συντελεστή διάχυσης, μια μακροσκοπική ποσότητα, σε μικροσκοπικά δεδομένα (στοιχειώδη άλματα ατόμων ή μορίων). Ο *Einstein* κατάφερε το 1905 να εξάγει μια εξίσωση για την κατανομή του χώρου των σωματιδίων, που αποτελεί ουσιαστικά τον δεύτερο νόμο του *Fick*, αλλά με τη διαχυτικότητα να ορίζεται τώρα σε μικροσκοπική βάση. Ήταν ένα χρόνο αργότερα που ο *Marian von Smoluchowski* (1872-1917) δημοσίευσε μια θεωρία της κίνησης *Brown*. Η τελευταία διαφοροποιήθηκε από τη θερμοδυναμική προσέγγιση του *Einstein* καθώς ήταν βασισμένη σε μια κινητική προσέγγιση των αλληλεπιδράσεων και των συγκρούσεων μεταξύ σωματιδίων. Συνέπεια των παραπάνω γεγονότων ήταν η εισαγωγή της “*εξίσωσης διάχυσης Einstein–Smoluchowski*”, που γεφύρωσε το χάσμα μεταξύ της μηχανικής και της

¹ Η θεωρία της Κίνησης Brown αναπτύχθηκε από τον Γάλλο μαθηματικό *Louis Bachelier* (1870- 1946) με σκοπό, όχι τη μελέτη κάποιου βιολογικού φαινομένου, αλλά για τη μελέτη των δεικτών του χρηματιστηρίου. Ονομάστηκε έτσι προς τιμήν του *Robert Brown* (1773-1858), που ανακάλυψε την ακατάπαυστη και ακανόνιστη κίνηση των αιωρούμενων σε ρευστό σωματιδίων.

θερμοδυναμικής και επαληθεύτηκε πειραματικά από τον Γάλλο νομπελίστα *Jean Baptiste Perrin* και τους συνεργάτες του [13], [14].

Οι εξισώσεις των *Fick* και *Einstein–Smoluchowski* αποτέλεσαν μια ισχυρή βάση για νέα πειράματα με στόχο τον προσδιορισμό των συντελεστών διάχυσης στα στερεά και τον εντοπισμό των ατομικών μηχανισμών στο πλαίσιο των θεωρητικών εξελίξεων, ειδικά σε σχέση με μοντέλα τυχαίων περιπάτων και αποκλίσεων από καθαρά τυχαίες κινήσεις. Ένα στάδιο σταθμός στις μετρήσεις διάχυσης είναι η μελέτη του 1920 για την αυτοδιάχυση² των ατόμων σε υγρό και στερεό μόλυβδο και την ταχύτητα της ανταλλαγής ατόμων μολύβδου μεταξύ διαφορετικών ιοντικών και μοριακών ενώσεων του στοιχείου, που συγκαταλέγεται στο πλούσιο έργο του Ούγγρου ραδιοχημικού *György von Hevesy* (1885-1966) [14], [16].

Στις μέρες μας, οι διαδικασίες διάχυσης έχουν ένα ευρύ πεδίο εφαρμογών, το οποίο δεν περιορίζεται μόνο στον προφανή τομέα των διάφορων μαθηματικών και φυσικών επιστημών, αλλά επεκτείνεται και στη μελέτη φαινομένων που συγκαταλέγονται στον κλάδο των επιστημών υγείας και των κοινωνικών επιστημών. Μοντέλα διάχυσης για παράδειγμα εφαρμόζονται στη Θερμοδυναμική και τη Στατιστική Μηχανική, στη μελέτη των πορωδών μέσων, στη Χημική και Βιοχημική Κινητική, στην Οικολογία και στη Γενετική στη Φυσιολογία και στη διάλυση δια μέσου βιολογικών μεμβρανών ακόμη και στη Χρηματοοικονομική. Επίσης, μαθηματικά μοντέλα αντίδρασης-διάχυσης χρησιμοποιούνται για τη μελέτη προβλημάτων Επιδημιολογίας και Φυσιολογίας [1].

² Η αυτοδιάχυση είναι η πιο βασική διαδικασία διάχυσης σε ένα στερεό. Πρόκειται για τη διάχυση του ίδιου συστατικού μέσα στο πλέγμα. Στα μέταλλα προκύπτει λόγω κενών πλεγματοκινητικών θέσεων, στις οποίες μεταπηδούν άτομα από τις πλησιέστερες γειτονικές τοποθεσίες στο πλέγμα.

1. Βασικές Έννοιες

Όπως μπορεί να γίνει εύκολα αντιληπτό από τον τίτλο της παρούσας εργασίας, αντικείμενό της θα αποτελέσει η μελέτη του φαινομένου της διάχυσης, η οποία θα εξεταστεί με τη χρήση μαθηματικών μεθόδων. Για να καταστεί εφικτό το παραπάνω, το φυσικό φαινόμενο της διάχυσης μοντελοποιείται μαθηματικά με τη δημιουργία προβλημάτων που βασίζονται στις μερικές διαφορικές εξισώσεις (ΜΔΕ). Σκοπός του συγκεκριμένου κεφαλαίου είναι να παρουσιάσει τη βασική και προαπαιτούμενη γνώση για τη μελέτη και την κατανόηση των όσων αναφέρονται στη συνέχεια της παρούσας εργασίας. Για το λόγο αυτό, δίνεται ο ορισμός του Μαθηματικού Μοντέλου και της Μαθηματικής Μοντελοποίησης, ενώ επιπλέον παρουσιάζεται η βασική θεωρία των ΜΔΕ. Στη συνέχεια, δίνονται τα είδη προβλημάτων που μπορούμε να δημιουργήσουμε όταν στην ΜΔΕ επιβάλουμε επιπλέον περιορισμούς (συνθήκες), ώστε αυτή να δύναται να περιγράψει τα διάφορα φυσικά φαινόμενα. Τέλος, παρουσιάζονται οι προϋποθέσεις ώστε ένα τέτοιο πρόβλημα να είναι καλά τοποθετημένο, καθώς η καλή τοποθέτηση ενός προβλήματος αποτελεί έναν κρίσιμο παράγοντα στην Μαθηματική Μοντελοποίηση και στην επιτυχή μελέτη των φαινομένων.

1.1 Μαθηματικό Μοντέλο

Ορισμός: πρόκειται για μία μαθηματική εξίσωση ή ένα σύνολο μαθηματικών εξισώσεων, που περιγράφει ένα πρόβλημα ή φαινόμενο, ένα σύστημα ή μια διαδικασία, που προέρχεται από τη φυσική, τη μηχανική, την οικονομία, την κοινωνιολογία, τη βιολογία ή κάποια άλλη επιστημονική περιοχή [5], [17].

Το εύρος των επιστημονικών πεδίων στα οποία μπορεί να αναφέρεται ένα μαθηματικό μοντέλο είναι ιδιαίτερα ευρύ και καλύπτει εφαρμογές από πολλούς, μα και εντελώς διαφορετικούς μεταξύ τους, επιστημονικούς κλάδους. Συνεπώς, υπάρχει μια πληθώρα μαθηματικών μοντέλων, τα οποία μελετώνται και με διαφορετικά μαθηματικά εργαλεία. Έχει προκύψει έτσι και μια κατηγοριοποίηση των μοντέλων σε στοχαστικά ή ντετερμινιστικά, συνεχή ή διακριτά, στατικά ή δυναμικά, ποσοτικά ή ποιοτικά κ.α.

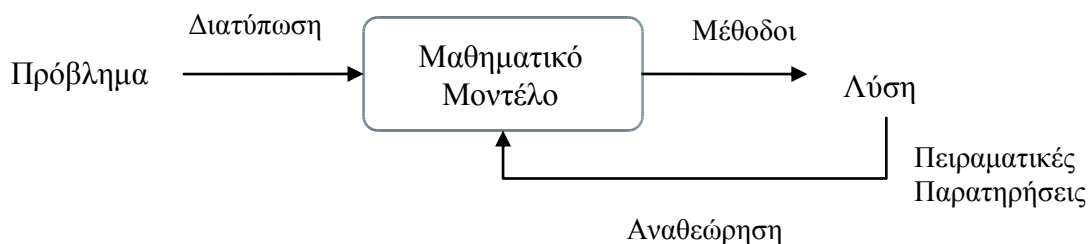
Σε κάθε περίπτωση, ένα καλό μαθηματικό μοντέλο, θα πρέπει να ανταποκρίνεται στα δεδομένα και να έχει εφαρμογές σε πολλές καταστάσεις, να είναι ικανό να προβλέψει την

εξέλιξη του υπό μελέτη φαινομένου, να είναι απλό και ταυτόχρονα περιεκτικό. Η μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων, η χρήση και η ανάπτυξη νέων μαθηματικών εργαλείων και ο συνεχής έλεγχος των υποθέσεων αποτελούν τους βασικότερους στόχους ενός μαθηματικού μοντέλου.

1.2 Μαθηματική Μοντελοποίηση

Ορισμός: είναι η διαδικασία με την οποία διατυπώνουμε και αναλύουμε το μαθηματικό μοντέλο. Δηλαδή, η ανάπτυξη της μαθηματικής περιγραφής ενός φαινομένου, ενός συστήματος ή μιας διαδικασίας και η μελέτη τους με τη χρήση μαθηματικών εργαλείων. [5], [17].

Στον χώρο της μαθηματικής μοντελοποίησης, βασικός στόχος είναι η ποσοτική κατανόηση των φαινομένων που παρατηρούμε, δημιουργώντας συχνά απλοποιημένες αναπαραστάσεις της πραγματικότητας. Σε ορισμένες περιπτώσεις, η επιστημονική ακρίβεια ενδέχεται να παραμεριστεί ώστε να καταστήσουμε το μοντέλο μαθηματικά εφαρμόσιμο. Οι προβλέψεις του μοντέλου εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από τις υποθέσεις, έτσι μία διαφοροποίηση στις υποθέσεις έχει ως αποτέλεσμα και τη διαφοροποίηση του ίδιου του μοντέλου. Στην περίπτωση που κάποιες υποθέσεις θεωρούνται λιγότερο σημαντικές από άλλες, αναφερόμαστε σε ανθεκτικό μοντέλο σε αυτές τις υποθέσεις. Η διαδικασία της μαθηματικής μοντελοποίησης ακολουθεί τη ροή που παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 1. 1: Μαθηματική μοντελοποίηση, διαγραμματική περιγραφή.

1.3 Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις

Οι μερικές διαφορικές εξισώσεις (ΜΔΕ) κατέχουν αδιαμφισβήτητα ένα σημαντικό ρόλο στη μαθηματική μοντελοποίηση φαινομένων που καλύπτουν πολλούς επιστημονικούς τομείς. Η ευρεία χρήση τους στον τομέα των φυσικών επιστημών οφείλεται στο γεγονός πως μπορούν να περιγράψουν προβλήματα, τα οποία εξαρτώνται από περισσότερες από μία ανεξάρτητες μεταβλητές.

Θεωρούμε ένα χωρίο $U \subset \mathbb{R}^n$, δηλαδή ένα ανοικτό μη κενό σύνολό του.

Ως ΜΔΕ ορίζεται μία σχέση του ακόλουθου τύπου:

$$F(x_1, \dots, x_n, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1 x_1}, u_{x_1 x_2}, \dots, u_{x_n x_n}, u_{x_1 x_1 x_1}, \dots) = 0,$$

όπου η άγνωστη ποσότητα $u = u(x_1, \dots, x_n)$ είναι μια ομαλή συνάρτηση n μεταβλητών και οι $u_{x_1}, \dots, u_{x_1 x_j}, \dots$ μερικές παράγωγοι της. Η υψηλότερη τάξη διαφορίσης που εμφανίζεται σε μία ΜΔΕ αποτελεί την *τάξη* της.

Οι ΜΔΕ χωρίζονται σε *γραμμικές* ή *μη γραμμικές* ανάλογα με το αν η ομαλή συνάρτηση F είναι γραμμική ως προς u ή όχι, ενώ μία επιπλέον σημαντική κατηγοριοποίηση προκύπτει από τον τύπο της μη γραμμικότητας. Έτσι, ορίζουμε ως ημιγραμμικές, τις εξισώσεις όπου το F είναι μη γραμμικό μόνο ως προς το u , αλλά είναι γραμμικό ως προς όλες τις παραγώγους του. Ως οιοινεί ή σχεδόν γραμμικές, τις εξισώσεις όπου η F είναι γραμμική ως προς τις παραγώγους υψηλότερης τάξης του u και ως πλήρως μη γραμμικές, τις εξισώσεις όπου η F είναι μη γραμμική ως προς τις παραγώγους υψηλότερης τάξης του u .

Μερικές από τις πιο γνωστές ΜΔΕ στον \mathbb{R}^2 είναι οι παρακάτω:

❖ Γραμμικές ΜΔΕ:

- Η εξίσωση μεταφοράς (*linear transport equation*):

$$u_t + cu_x = 0, \quad u = u(x, t).$$

Η συγκεκριμένη εξίσωση αποτελεί την απλούστερη εξίσωση κυματικής διάδοσης.

Η λύση της είναι της μορφής $u(x, t) = f(x - ct)$ και παριστάνει ένα κύμα, που

κινείται προς τα δεξιά, με σταθερή ταχύτητα c . Σε αυτού του είδους τις λύσεις, που ονομάζονται *οδεύοντα κύματα*, θα αναφερθούμε εκτενέστερα στο κεφάλαιο 4.

- Η εξίσωση του *Laplace* ή εξίσωση δυναμικού, η οποία τις δύο διαστάσεις έχει τη μορφή:

$$\Delta u = \nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = 0, \quad u = u(x, y),$$

και αποτελεί μία από τις πιο σημαντικές ΜΔΕ. Οι λύσεις της ονομάζονται *αρμονικές συναρτήσεις (harmonic functions)*, ενώ τυπικές της λύσεις αποτελούν οι τριγωνομετρικές συναρτήσεις ημίτονο και συνημίτονο.

- Η εξίσωση του *Helmholtz*:

$$\Delta u = -\lambda u, \quad u = u(x, y),$$

η οποία είναι γνωστή και ως εξίσωση ιδιοτιμών. Η εξίσωση αυτή έχει εφαρμογές σε πολλά φυσικά φαινόμενα.

- Η κυματική εξίσωση (*wave equation*):

$$u_{tt} = c^2 u_{xx}, \quad u = u(x, t),$$

που αποτελεί την σημαντικότερη εξίσωση κυματικής διάδοσης καθώς δύναται να περιγράψει μια πληθώρα κυμάτων όπως ηχητικά κύματα, κύματα φωτός και κύματα στο νερό.

- Η εξίσωση του *Schrödinger (Schrödinger's equation)*, η οποία σε μία απλή της εκδοχή και για μία χωρική διάσταση έχει τη μορφή:

$$i u_t + u_{xx} = 0, \quad u = u(x, t).$$

Η εξίσωση αυτή περιγράφει τη συμπεριφορά ενός κβαντικού σωματιδίου, όπως ένα ηλεκτρόνιο, σε ένα μονοδιάστατο κανάλι και έχει πολλές εφαρμογές που δεν περιορίζονται μόνο στην κβαντομηχανική και την κβαντική φυσική, αλλά επεκτείνονται και σε τομείς όπως στην Οπτική και στα Συστήματα Επικοινωνίας.

❖ Μη γραμμικές ΜΔΕ:

- Η εξίσωση του *Burgers* χωρίς ιξώδες³ (*inviscid Burgers' equation*) ή εξίσωση του *Hopf*:

$$u_t + uu_x = 0, \quad u = u(x, t),$$

η οποία χρησιμοποιείται για την περιγραφή της μετάδοσης ενός κύματος με ταχύτητα που εξαρτάται από το πλάτος του.

- Η μη-γραμμική εξίσωση του *Poisson*:

$$\Delta u = -f(u), \quad u = u(x, y),$$

η οποία αποτελεί μία μη-ομογενή εξίσωση δυναμικού και έχει ευρεία εφαρμογή στην ηλεκτροστατική, τη μηχανολογία και τη θεωρητική φυσική.

- Η εξίσωση των *Korteweg–de Vries* (*KdV*):

$$u_t + u_{xxx} + uu_x = 0, \quad u = u(x, t).$$

Η εξίσωση αυτή, εισήχθη αρχικά ως μοντέλο της διάδοσης κυμάτων σε ρηχά στρώματα νερού, όμως πέρα από αυτό, βρίσκει εφαρμογές σε ένα μεγάλο πλήθος φυσικών φαινομένων.

Αντικείμενο της παρούσας εργασίας, αποτελεί η μελέτη της γραμμικής εξίσωσης θερμότητας ή διάχυσης (*heat or diffusion equation*):

$$u_t = Du_{xx}, \quad u = u(x, t),$$

όπου $D > 0$, η σταθερά διάχυσης, καθώς και η μη-γραμμική εξίσωση αντίδρασης-διάχυσης (*reaction-diffusion equation*):

$$u_t = Du_{xx} + f(u), \quad u = u(x, t),$$

οι οποίες παρουσιάζονται αναλυτικότερα στα επόμενα κεφάλαια.

³ Η λέξη «ιξώδες» προέρχεται από τη λέξη «ιξός» και σημαίνει το «κολλώδες». Αντίθετος όρος του ιξώδους είναι η ρευστότητα, έτσι ένα υγρό που παρουσιάζει μικρό ιξώδες έχει μεγάλη ρευστότητα και αντίστροφα.

Η θεωρία των γραμμικών εξισώσεων, τουλάχιστον όσο αφορά τα πιο σημαντικά ερωτήματα, θεωρείται επαρκώς ανεπτυγμένη και παγιωμένη. Στον αντίποδα, οι μη γραμμικότητες στερούνται μίας θεωρίας με καθολική ισχύ. Τα υπάρχοντα αποτελέσματα και οι νέες έρευνες επικεντρώνονται, περισσότερο ή λιγότερο, σε συγκεκριμένες περιπτώσεις, ιδιαίτερα ενδιαφέρουσες στις εφαρμοσμένες επιστήμες. Το παραπάνω προκύπτει ως φυσική συνέπεια της πλούσιας ποικιλίας πτυχών και περιπλοκών που παρουσιάζουν οι μη γραμμικές ΜΔΕ.

Είναι γνωστό, πως η γενική λύση μιας Συνήθους Διαφορικής Εξίσωσης (ΣΔΕ) k -τάξης είναι μια παραμετρική οικογένεια που περιέχει k αυθαίρετες σταθερές, οι οποίες προκύπτουν από τις k ολοκληρώσεις κατά την επίλυση της εξίσωσης. Σε μια ΜΔΕ οι αντίστοιχες αυθαίρετες σταθερές ως προς τη μεταβλητή παραγώγισης μπορεί, όταν $u: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, να εξαρτώνται από τις υπόλοιπες $n-1$ μεταβλητές, να είναι δηλαδή αυθαίρετες συναρτήσεις.

Κάθε ομαλή συνάρτηση $u: U \rightarrow \mathbb{R}$ που ικανοποιεί την παραπάνω σχέση, κάθε δηλαδή ομαλή συνάρτηση για τον οποία ισχύει:

$$F(x_1, \dots, x_n, u, u_{x_1}, \dots, u_{x_n}, u_{x_1 x_1}, u_{x_1 x_2}, \dots, u_{x_n x_n}, u_{x_1 x_1 x_1}, \dots) = 0,$$

για κάθε $(x_1, \dots, x_n) \in U$, λέγεται *λύση* ή *κλασική λύση* της ΜΔΕ. Επιπλέον, ως *γενική λύση* της, θεωρούμε το σύνολο όλων των ομαλών συναρτήσεων που την ικανοποιούν.

Κάθε λύση που θα προκύψει από τη γενική λύση με συγκεκριμένη επιλογή αυθαίρετων συναρτήσεων ονομάζεται *ειδική λύση* και το σύνολο όλων των λύσεων της εξίσωσης καλείται *πλήρης λύση*. Στην περίπτωση που οι παραπάνω λύσεις είναι εκφρασμένες σε πεπλεγμένη μορφή καλούνται, κατ' αντιστοιχία, γενικό ολοκλήρωμα, ειδικό ολοκλήρωμα και πλήρες ολοκλήρωμα. Επιπλέον, μία λύση που δεν εξαρτάται από αυθαίρετες συναρτήσεις και η οποία δεν προκύπτει από την γενική λύση της ΜΔΕ λέγεται *ιδιάζουσα λύση* και αντιστοιχεί συνήθως σε περιβάλλουσα σύνολο λύσεων που ανήκουν στη γενική λύση.

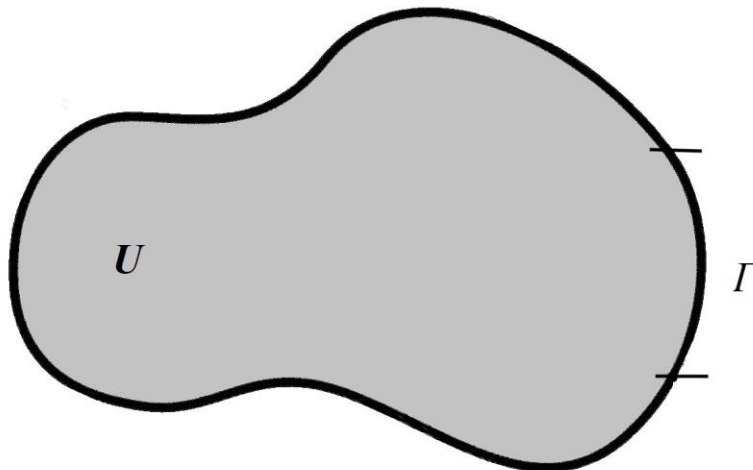
1.4 Προβλήματα Αρχικών και Συνοριακών Τιμών

Για να είναι δυνατή η περιγραφή ενός φυσικού φαινομένου μέσω μιας ΜΔΕ, θα πρέπει η εξίσωση αυτή να έχει μοναδική λύση. Για το λόγο αυτό οι ΜΔΕ συνοδεύονται από διάφορες συνθήκες, οι οποίες μας επιτρέπουν να επιλέξουμε μία από τις πολλές λύσεις τους. Η μορφή των παραπάνω συνθηκών εξαρτάται από τη φύση της εξίσωσης και ανάλογα το φαινόμενο που μελετάται μπορεί να επιβάλλουμε στη ΜΔΕ είτε αρχικές είτε συνοριακές συνθήκες ή ακόμη και συνθήκες και των δύο ειδών. *Αρχική συνθήκη* (ΑΣ), είναι μία συνθήκη που ισχύει για $t=0$ σε κάποιο διάστημα του άξονα των x , ενώ *συνοριακή συνθήκη* (ΣΣ), η συνθήκη που δίνεται σε μια οποιαδήποτε άλλη καμπύλη στο επίπεδο x, t . Το σύνολο των συνθηκών μαζί με τη ΜΔΕ αποτελεί ένα πρόβλημα, το οποίο ονομάζουμε ανάλογα με το είδος των συνθηκών. Έτσι, όταν στη ΜΔΕ επιβάλλουμε ΑΣ έχουμε ένα *πρόβλημα αρχικών τιμών* (ΠΑΤ) ή *πρόβλημα Cauchy*, ενώ με την επιβολή ΣΣ θα έχουμε ένα *πρόβλημα συνοριακών τιμών* (ΠΣΤ). Στην περίπτωση που η ΜΔΕ επιδέχεται και ΑΣ και ΣΣ έχουμε ένα *πρόβλημα αρχικών συνοριακών τιμών* (ΠΑΣΤ).

Αν, για παράδειγμα, U ένα χωρίο του \mathbb{R}^2 , Γ ένα μέρος του συνόρου ∂U του U , $\Gamma \subset \partial U$, $F: \mathbb{R}^3 \times U \rightarrow \mathbb{R}$ και $g: \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$ μία δεδομένη συνάρτηση, το πρόβλημα

$$\begin{cases} F(u_x, u_y, u, x, y) = 0, \text{ για } (x, y) \in U, \\ u = g, \text{ στο } \Gamma, \end{cases}$$

αποτελεί ένα πρόβλημα *Cauchy*.



Σχήμα 1. 2: Πρόβλημα αρχικών τιμών, με δεδομένες τιμές της u στο Γ .

Όπως γνωρίζουμε, όταν μια ΣΔΕ είναι πρώτης τάξης, τότε η γενική της λύση, γενικά, θα περιέχει μια αυθαίρετη σταθερά. Ανάλογα, η γενική λύση μιας ΜΔΕ πρώτης τάξης, περιλαμβάνει, γενικά, μια αυθαίρετη συνάρτηση. Αντίστοιχα με τις ΣΔΕ, περιμένουμε το παραπάνω ΠΑΤ να έχει μοναδική λύση. Στην περίπτωση αυτή όμως, αναμένουμε το θέμα να είναι αρκετά πιο σύνθετο, καθώς υπάρχει, γενικά, η εξάρτηση και από το σύνολο Γ .

1.5 Καλή Τοποθέτηση Προβλήματος κατά Hadamard

Στη μαθηματική μοντελοποίηση φαινομένων, ένας από τους κυριότερους στόχους μιας θεωρίας είναι να δημιουργήσει καλά τοποθετημένα προβλήματα. Ένα πρόβλημα θεωρείται καλά τοποθετημένο όταν ικανοποιούνται οι εξής συνθήκες

1. Ύπαρξη: Το πρόβλημα έχει μια λύση
2. Μοναδικότητα: Η λύση είναι μοναδική
3. Ευστάθεια: Η λύση εξαρτάται κατά συνεχή τρόπο από τα δεδομένα του προβλήματος

Στην περίπτωση της ευστάθειας, η συνεχής εξάρτηση από τα δεδομένα υπονοεί πως μια μικρή μεταβολή των δεδομένων, θα προκαλέσει και μία ανάλογο μεγέθους μεταβολή στη λύση. Η ιδιότητα αυτή είναι αρκετά σημαντική και μπορεί να εκφραστεί και ως τοπική ευστάθεια της λύσης ως προς τα δεδομένα.

Προφανώς, όταν μία τουλάχιστον από τις παραπάνω συνθήκες δεν ικανοποιείται, έχουμε ένα μη καλά τοποθετημένο πρόβλημα.

Η παραπάνω τριάδα προϋποθέσεων συνιστά την *αρχή Hadamard*. Όπως είδαμε, οι πρώτες δύο αρχές εξασφαλίζουν την ύπαρξη μοναδικής συνάρτησης, η οποία θα ικανοποιεί τόσο την ΜΔΕ, όσο και τις επιμέρους συνθήκες που επιβάλλουμε σε αυτή. Η τρίτη αρχή είναι επίσης πολύ σημαντική γιατί εξασφαλίζει την πρακτική χρησιμότητα μιας τέτοιας λύσης.

Η *αρχή Hadamard* οφείλει την ονομασία της στον σπουδαίο γάλλο μαθηματικό *Jacques Salomon Handamard*, ο οποίος εισήγαγε πρώτος την έννοια του καλά τοποθετημένου προβλήματος. Στην Μαθηματική Μοντελοποίηση, η μελέτη της καλής τοποθέτησης ενός προβλήματος αποτελεί ένα κεντρικό ζήτημα καθώς τα Μαθηματικά Μοντέλα είναι

συνήθως προϊόντα υποθέσεων ή απλουστεύσεων. Γίνεται λοιπόν εύκολα αντιληπτό πως η πρακτική εφαρμογή και η ικανότητα ενός τέτοιου μοντέλου να περιγράψει το υπό εξέταση φαινόμενο, συνδέεται απρόσκοπτα με την καλή τοποθέτηση του αντίστοιχου προβλήματος.

2. Διάχυση

Ο όρος διάχυση προέρχεται από τη λατινική λέξη *diffundere* που σημαίνει «να απλώνομαι». Έτσι, ως διάχυση ορίζουμε την εξάπλωση από μια περιοχή υψηλής συγκέντρωσης σε μια περιοχή χαμηλής συγκέντρωσης. Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να αναφέρεται τόσο σε εξάπλωση ουσίας όσο και ενέργειας και στη φυσική αποτελεί έναν από τους βασικούς μηχανισμούς μεταφοράς.

Η διαδικασία της διάχυσης μπορεί να γίνει εύκολα αντιληπτή μέσω του απλού παραδείγματος της εναπόθεσης μιας σταγόνας μελανιού σε δοχείο με νερό (χωρίς ανάδευση). Εκεί θα μπορέσουμε να παρατηρήσουμε την σταδιακή εξάπλωση του μελανιού μέχρις ότου το διάλυμα να αποκτήσει ένα ενιαίο χρώμα. Αυτό που οδηγεί στην πλήρη ανάμειξη είναι η κίνηση Brown των ατόμων και μορίων, η οποία είναι συνεχής ακόμα και σε καθαρό νερό (τότε μιλάμε για αυτό-διάχυση). Στα αέρια η κίνηση αυτή πραγματοποιείται με ρυθμό εκατοστών ανά δευτερόλεπτο, ενώ στα υγρά πραγματοποιείται με πιο βραδύ ρυθμό, δηλαδή με κλάσματα χιλιοστών ανά δευτερόλεπτο. Στα στερεά η διαδικασία είναι πολύ δύσκολο να γίνει αντιληπτή παρόλα αυτά, συμβαίνει με πολύ αργό ρυθμό, ο οποίος μειώνεται έντονα με τη μείωση της θερμοκρασίας. Πιο συγκεκριμένα, ο ρυθμός διάχυσης είναι περίπου ένα μικρόμετρο ανά δευτερόλεπτο όταν το μέταλλο βρίσκεται σε θερμοκρασία τήξης, ενώ περιορίζεται στην τάξη των νανομέτρων ανά δευτερόλεπτο όταν η παραπάνω θερμοκρασία μειωθεί κατά το ήμισυ.

Στο κεφάλαιο που ακολουθεί παρουσιάζεται η φυσική προέλευση της εξίσωσης διάχυσης, μέσω δύο διαφορετικών μαθηματικών μεθόδων, με την χρήση του νόμου διατήρησης και από τη θεωρία της κίνησης Brown. Αποσαφηνίζονται επιπλέον τα είδη των αρχικών και συνοριακών συνθηκών που θα επιβάλουμε στα διάφορα προβλήματα διάχυσης, ώστε να μπορεί να παρουσιαστεί και το πρώτο πρόβλημα τέτοιου είδους, το οποίο θα δώσει την θεμελιώδη λύση της εξίσωσης διάχυσης. Τα παραπάνω αφορούν μια μονοδιάστατη μελέτη του φαινομένου, όμως, επειδή συχνά στα φυσικά και βιολογικά φαινόμενα η διάχυση δεν περιορίζεται σε μία μόνο διάσταση, κρίθηκε απαραίτητο να επεκτείνουμε την μελέτη μας σε περισσότερες διαστάσεις. Για τον λόγο αυτό, στο τέλος του κεφαλαίου εξετάζεται η τρισδιάστατη διάχυση και πιο συγκεκριμένα δύο μορφές της, η ισότροπη και η ανισότροπη διάχυση σε τρεις διαστάσεις.

2.1 Φυσική Προέλευση Εξίσωσης Διάχυσης

Οι διαφορικές εξισώσεις έχουν πρωταγωνιστικό ρόλο στον τομέα της μαθηματικής μοντελοποίησης και η εξίσωση διάχυσης αποτελεί μία από τις βασικότερες διαφορικές εξισώσεις που έχουν προκύψει από θεμελιώδεις αρχές της Φυσικής. Παρακάτω παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο προκύπτει η εξίσωση αυτή.

Θεωρούμε ένα υλικό κατανεμημένο στον άξονα των x . Κάποιο ρευστό για παράδειγμα, που βρίσκεται σε έναν πολύ λεπτό κυλινδρικό σωλήνα. Ορίζουμε ως $\rho(x,t)$, την πυκνότητα του ρευστού στο σημείο x τη χρονική στιγμή t , με $\rho : \mathbb{R} \times (0, \infty) \rightarrow [0, \infty)$ μια ομαλή συνάρτηση. Τότε, η σχέση που θα δίνει τη συνολική μάζα $M(t)$, η οποία θα περιέχεται τη χρονική στιγμή t σε ένα σταθεροποιημένο διάστημα $[x_1, x_2]$ θα είναι:

$$M(t) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x,t) dx. \quad (2.1)$$



Σχήμα 1. 3: Ρευστό σε λεπτό κυλινδρικό σωλήνα.

Υποθέτοντας πως η μεταβολή της μάζας στο $[x_1, x_2]$ οφείλεται αποκλειστικά στην κίνηση του υγρού, μπορούμε να έχουμε είτε εισροή προς, είτε εκροή από το διάστημα αυτό μέσω των άκρων του. Στο σημείο αυτό θα πρέπει να οριστεί μια συνάρτηση ροής, οπότε εισάγουμε την $q(x,t)$, η οποία δίνει τη ροή της μάζας που διέρχεται, από αριστερά προς τα δεξιά, δια μέσου του x , ανά μονάδα χρόνου, τη χρονική στιγμή t . Έστω ότι έχουμε εκροή μάζας και από τα δύο άκρα x_1, x_2 . Τότε, προφανώς, η μεταβολή της μάζας θα είναι αρνητική και επιπλέον, σύμφωνα με τα παραπάνω, θα είναι $q(x_2,t) > 0$ και $q(x_1,t) < 0$. Όσα προαναφέρθηκαν μπορούν να εκφραστούν με μια ολοκληρωτική μορφή ως εξής:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} \rho(x,t) dx = -[q(x_2,t)(+1) + q(x_1,t)(-1)]. \quad (2.2)$$

Η έκφραση (2.2) αποτελεί την *ολοκληρωτική μορφή του νόμου διατήρησης της μάζας*, η οποία, υπό κατάλληλες συνθήκες ομαλότητας $\rho \in C^1(\mathbb{R} \times (0, \infty))$, $q \in C^1(\mathbb{R}) \times C(0, \infty)$, οδηγεί

σε μια «τοπική» διαφορική μορφή. Εναλλάσσοντας την παραγωγή με την ολοκλήρωση στο αριστερό μέλος της (2.2) έχουμε:

$$\int_{x_1}^{x_2} \rho_t(x,t) dx = -[q(x_2,t)(+1) + q(x_1,t)(-1)],$$

που με χρήση του Θεωρήματος Μέσης Τιμής του Ολοκληρωτικού Λογισμού δίνει:

$$\rho_t(\tilde{x}(t),t)(x_2 - x_1) = -[q(x_2,t) - q(x_1,t)],$$

για κάποιο $\tilde{x}(t) \in (x_1, x_2)$. Οπότε οδηγούμαστε στη μορφή:

$$\rho_t(\tilde{x}(t),t) = -\frac{q(x_2,t) - q(x_1,t)}{x_2 - x_1},$$

απ' όπου, αφήνοντας τα x_1, x_2 να τείνουν συγχρόνως σε κάποιο x , οδηγούμαστε στην διαφορική μορφή του νόμου διατήρησης της μάζας, γνωστή ως εξίσωση της συνέχειας:

$$\rho_t(x,t) = -q_x(x,t), \quad (2.3)$$

ή αλλιώς:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0.$$

Η ποσότητα που διατηρείται δεν είναι αναγκαστικά η μάζα και τα ρ και q μπορούν να συνδεθούν με μία καταστατική σχέση, ανάλογα με το φαινόμενο που μελετάται. Στην περίπτωση της διάχυσης, η σχέση αυτή είναι ο $1^{ος}$ Νόμος του Fick. Πρόκειται για έναν εμπειρικό νόμο που διέπει το φαινόμενο, δηλαδή ότι αναμένουμε μετακίνηση μάζας από περιοχές υψηλής σε περιοχές χαμηλής πυκνότητας. Πιο συγκεκριμένα η σχέση αυτή δηλώνει πως η ροή της διαχεόμενης ουσίας είναι αντίθετη προς τη βαθμίδα συγκέντρωσης αλλά και ανάλογη προς αυτήν, με συντελεστή αναλογίας μια θετική σταθερά c . Το c εξαρτάται από τη διαχεόμενη ουσία αλλά και από το υγρό μέσα στο οποίο αυτή διαχέεται και ονομάζεται συντελεστής διάχυσης. Η μαθηματική διατύπωση της σχέσης είναι η εξής:

$$q(x,t) = -c\rho_x(x,t). \quad (2.4)$$

Έτσι, λόγω της σχέσης (2.4), η εξίσωση (2.3) παίρνει τη μορφή:

$$\rho_t(x,t) = c\rho_{xx}(x,t), \quad (2.5)$$

που είναι γνωστή ως εξίσωση διάχυσης.

Η εξίσωση διάχυσης είναι μία γραμμική, παραβολική ΜΔΕ 2^{ης} τάξης.

Σε περίπτωση που η εξίσωση (2.5) είναι *μη ομογενής*, δηλαδή της μορφής:

$$\rho_t(x,t) - c\rho_{xx}(x,t) = f(x,t),$$

τότε μιλάμε για μία μη γραμμική ΜΔΕ, γνωστή ως *εξίσωση αντίδρασης-διάχυσης*. Εδώ η f είναι μια πραγματική συνάρτηση, η οποία εξαρτάται από το είδος της διάχυσης που εξετάζεται και μοντελοποιεί και άλλες πηγές που επηρεάζουν την εξέλιξη της μεταβλητής u στον χώρο και τον χρόνο. Αν, για παράδειγμα, εξετάζουμε με τη διάχυση θερμότητας σε ένα υλικό, η συνάρτηση f θα μπορούσε να αντιπροσωπεύει μία θερμική πηγή που προστίθεται στο υλικό αυτό.

2.2 Αρχικές και Συνοριακές Συνθήκες

Η εξίσωση διάχυσης

$$u_t = cu_{xx}, \quad (2.6)$$

όπως προέκυψε παραπάνω, δεν δύναται να επιλυθεί μονοσήμαντα με κάποιο γενικό τρόπο, καθώς η λύση της κάθε φορά εξαρτάται από τις αρχικές ή και τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος, το οποίο μελετάται. Συνεπώς, θα πρέπει να γνωρίζουμε το είδος και το πλήθος των συνθηκών, οι οποίες θα καθορίσουν επαρκώς το πρόβλημα. Για τον λόγο αυτό, προσδιορίζουμε την τάξη της κυρίαρχης εξίσωσης του προβλήματος. Η παράγωγος χρόνου ($\partial u/\partial t$) είναι πρώτης τάξης και επομένως απαιτεί μία μόνο αρχική συνθήκη (για κάθε τιμή x). Τυπικά, η αρχική κατανομή συγκέντρωσης δίνεται ως:

$$u(x,0) = f(x),$$

όπου η f είναι μια δεδομένη συνάρτηση που παριστάνει την αρχική συγκέντρωση.

Επιπλέον, η χωρική παράγωγος ($\partial^2 u/\partial x^2$) είναι δεύτερης τάξης, επομένως απαιτεί δύο συνοριακές συνθήκες. Συνήθως, ένα πρόβλημα περιλαμβάνει μία συνοριακή συνθήκη σε κάθε άκρο του τομέα (έστω $x = x_1$ και $x = x_2$). Από μαθηματική άποψη, θα ήταν ευκολότερο, να επιβληθούν οι συγκεντρώσεις στο σύνορο του χωρίου, για παράδειγμα:

$$u(x_1, t) = g(t), \quad u(x_2, t) = h(t), \quad t > 0,$$

με τις g και h , να παριστάνουν τη συγκέντρωση στα άκρα του τομέα.

Οι παραπάνω συνθήκες ονομάζονται *συνοριακές συνθήκες 1^{ov} είδους* ή *συνοριακές συνθήκες Dirichlet*.

Παρόλα αυτά, είναι πολύ σύνηθες να συναντάμε και συνοριακές συνθήκες ροής, που εφαρμόζονται όταν η ροή στα άκρα του χωρίου είναι ελεγχόμενη, δηλαδή:

$$u_x(x_1, t) = g(t), \quad u_x(x_2, t) = h(t), \quad t > 0.$$

Οι συνθήκες αυτές είναι γνωστές ως *συνοριακές συνθήκες 2^{ov} είδους* ή *συνοριακές συνθήκες Neumann*.

Φυσικά, είναι δυνατή και η επιβολή μικτών συνθηκών για το πρόβλημα. Οι μεικτές συνοριακές συνθήκες που δίνονται με την εξής μορφή:

$$u_x(x_1, t) + r(x_1, t)u(x_1, t) = g(t), \quad u_x(x_2, t) + r(x_2, t)u(x_2, t) = h(t), \quad t > 0,$$

όπου r μια δεδομένη συνάρτηση, καλούνται *συνοριακές συνθήκες 3^{ov} είδους* ή *συνοριακές συνθήκες Robin* και αποτελούν έναν γραμμικό συνδυασμό των παραπάνω συνοριακών συνθηκών.

2.3 Θεμελιώδης Λύση Εξίσωσης Διάχυσης

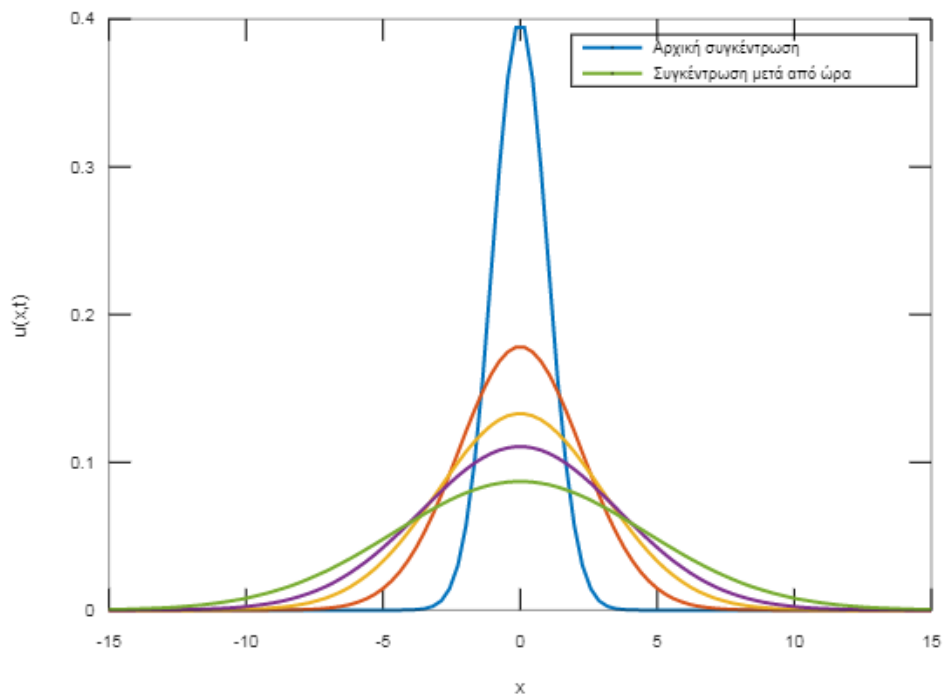
Όπως προαναφέρθηκε, η εξίσωση διάχυσης είναι γραμμική, επομένως μία λύση της μπορεί να προκύψει από το άθροισμα κάποιων άλλων λύσεων της. Μία στοιχειώδης λύση της, που δύναται να λειτουργήσει ως δομικός λίθος για την επίλυση διάφορων προβλημάτων διάχυσης, αναφέρεται στην εστιασμένη και σχεδόν σημειακή απελευθέρωση ουσίας σε μία άπειρη περιοχή, αρχικά απαλλαγμένη από την ουσία αυτή. Για παράδειγμα, όταν μία σημειακή σταγόνα μελάνης αφήνεται στο «μέσον» ενός λεπτού, γυάλινου, απείρου μήκους σωλήνα με νερό.

Η μαθηματική μοντελοποίηση του προβλήματος είναι η εξής:

- $-\infty < x < \infty$.
- c σταθερά.
- Καμία αρχική συγκέντρωση, εκτός από την τοπική αποδέσμευση: $u_0(x) = M\delta(x)$ για $t=0$.
- $\lim_{x \rightarrow +\infty} u(x,t) = \lim_{x \rightarrow -\infty} u(x,t) = 0$ για πεπερασμένους χρόνους ($t < \infty$), εφόσον η ουσία θα χρειαστεί άπειρο χρόνο για να φτάσει στα άπειρα μακρινά «άκρα» του χωρίου.

Στα παραπάνω, το M εκφράζει τη συνολική μάζα της ουσίας που απελευθερώνεται ανά μονάδα διατομής του χωρίου, ενώ $\delta(x)$ είναι τη συνάρτηση *Dirac*⁴.

Από φυσική άποψη αναμένεται η συμπεριφορά που απεικονίζεται στο σχήμα (2.1). Η αρχικά σημειακή συγκέντρωση ουσίας αναμένεται σταδιακά να διαχυθεί σε ολόκληρη την περιοχή (πχ στον σωλήνα), διατηρώντας όμως σταθερή την ολική της ποσότητα.



Σχήμα 2. 1: Διάχυση ουσίας με την πάροδο του χρόνου.

$$^4 \delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{για } x \neq 0 \\ +\infty, & \text{για } x = 0 \end{cases}$$

Η $\delta(x)$ διαμορφώνεται ως διάδοση σε ένα σημείο (συγκεκριμένα στο $x=0$). Διαισθητικά μπορούμε να πούμε πως έχει απεριόριστο ύψος (απεριόριστη τιμή) στο σημείο $x=0$, ενώ το εμβαδόν κάτω από την απεριόριστα ψηλή και απεριόριστα στενή κορυφή είναι μονάδα.

Η μέγιστη τιμή της ουσίας στο κέντρο μειώνεται ανάλογα με τη διάχυση της προς τα άκρα του τομέα. Έτσι, οι καμπύλες σε μεταγενέστερες χρονικές στιγμές θα εμφανίζονται παρόμοιες με αυτές των προγενέστερων χρόνων, θα είναι όμως πιο επίπεδες και θα έχουν μεγαλύτερο εύρος. Αναμένοντας και μία τέτοια ομοιότητα στη λύση, θεωρούμε το μετασχηματισμό:

$$u(x,t) = t^{-a} F(\eta) \text{ με } \eta = \frac{x^2}{4ct}, \quad (2.7)$$

όπου το t^{-a} αποτελεί τον παράγοντα που περιγράφει την πτώση της μέγιστης συγκέντρωσης της ουσίας με την πάροδο του χρόνου, στο σημείο $x=0$. Έτσι ο αδιάστατος εκθέτης a αναμένεται να είναι θετικός. Επιπλέον, η συνάρτηση $F(\eta)$ περιγράφει το προφίλ της καμπύλης της συγκέντρωσης με την πάροδο του χρόνου. Δείχνει δηλαδή πως, καθώς ο χρόνος προχωρά, η καμπύλη της συγκέντρωσης εξαπλώνεται στον χώρο, αλλά η μορφή της καμπύλης παραμένει παρόμοια. Αυτό επιτυγχάνεται λόγω της «τεταμένης συντεταγμένης» της F , η οποία ονομάζεται και μεταβλητή ομοιότητας, καθώς περιέχει τον λόγο x^2/t που παραμένει ίδιος για τα διάφορα t, x , καθώς έχουμε αύξηση του x με την πάροδο του χρόνου, οπότε λαμβάνεται η ίδια τιμή $F(\eta)$ για κάθε χρονική στιγμή. Η επιλογή του τετραγωνικού εκθέτη στο x , βασίζεται στο γεγονός πως στη ΜΔΕ η χρονική παράγωγος είναι πρώτης τάξης και η χωρική είναι δεύτερης τάξης. Με την επιλογή αυτή συνεπώς καθίσταται η συναρτησιακή εξάρτηση συμβατή με την εξίσωση (2.6). Επιπλέον ο παράγοντας c στον παρονομαστή του η κάνει τον λόγο x^2/ct αδιάστατο. Έτσι η παράσταση η δεν έχει μονάδες και η συνάρτησή της $F(\eta)$ παίρνει καθολικό χαρακτήρα, μπορεί δηλαδή να εφαρμοστεί ανεξάρτητα από μονάδες μέτρησης. Τέλος, η εισαγωγή του παράγοντα 4 γίνεται καθαρά για λόγους μαθηματικής διευκόλυνσης.

Παραγωγίζοντας τη σχέση (2.7) έχουμε τα εξής:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -at^{-a-1}F(\eta) + t^{-a} \frac{dF}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = -at^{-a-1}F(\eta) - t^{-a} \frac{x^2}{4ct^2} \frac{dF}{d\eta} = -at^{-a-1}F(\eta) - \eta t^{-a-1} \frac{dF}{d\eta},$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = t^{-a} \frac{dF}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{xt^{-a-1}}{2c} \frac{dF}{d\eta},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{t^{-a-1}}{2c} \frac{dF}{d\eta} + \frac{xt^{-a-1}}{2c} \frac{d^2 F}{d\eta^2} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{t^{-a-1}}{2c} \frac{dF}{d\eta} + \frac{xt^{-a-1}}{c} \frac{d^2 F}{d\eta^2} \frac{x}{4ct} = \frac{t^{-a-1}}{2c} \frac{dF}{d\eta} + \eta \frac{t^{-a-1}}{c} \frac{d^2 F}{d\eta^2}.$$

Έπειτα, αντικαθιστώντας τα $\frac{\partial u}{\partial t}$ και $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ στην εξίσωση διάχυσης (2.6) παίρνουμε:

$$aF(\eta) + \eta \frac{dF}{d\eta} + \frac{1}{2} \frac{dF}{d\eta} + \eta \frac{d^2 F}{d\eta^2} = 0,$$

$$\eta \frac{d}{d\eta} \left(F + \frac{dF}{d\eta} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{dF}{d\eta} + 2aF(\eta) \right) = 0.$$

Στην παραπάνω σχέση οι παράγοντες του χρόνου εξαλείφονται (γεγονός που οφείλεται στην προσεκτική επιλογή του η) και η ΜΔΕ ανάγεται στην παρακάτω συνήθη διαφορική εξίσωση (ΣΔΕ):

$$aF(\eta) + \eta \frac{dF}{d\eta} + \frac{1}{2} \frac{dF}{d\eta} + \eta \frac{d^2 F}{d\eta^2} = 0,$$

που γράφεται ισοδύναμα:

$$\eta \frac{d}{d\eta} \left(\frac{dF}{d\eta} + F \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{dF}{d\eta} + 2aF(\eta) \right) = 0.$$

Επιλέγουμε $a=1/2$. Η επιλογή αυτή, όπως θα δούμε παρακάτω, ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες και τότε οι παραστάσεις μέσα στις παρενθέσεις θα είναι πανομοιότυπες. Συνεπώς θα πρέπει να ισχύει:

$$\frac{dF}{d\eta} + F(\eta) = 0,$$

που δίνει:

$$F(\eta) = Ae^{-\eta},$$

όπου A θα είναι η αυθαίρετη σταθερά της ολοκλήρωσης.

Από τα παραπάνω οδηγούμαστε τελικά στη λύση:

$$u(x,t) = At^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4ct}\right).$$

Στο σημείο αυτό, παρατηρούμε πως η αυτή η λύση πληροί ήδη τις συνοριακές συνθήκες

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} u(x,t) = \lim_{x \rightarrow -\infty} u(x,t) = 0.$$

Η εναπομείνασα αρχική συνθήκη θα προσδιορίσει την σταθερά ολοκλήρωσης A . Λόγω της διατήρησης της συνολικής ουσίας ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} u_0(x) dx = M,$$

σε κάθε χρονική στιγμή. Υπολογίζοντας το ολοκλήρωμα προκύπτει:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u(x,t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A t^{-1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4ct}\right) dx = A t^{-1/2} \sqrt{4\pi ct} = A \sqrt{4\pi c}.$$

Οπότε $A = M / \sqrt{4\pi c}$. Έτσι, η τελική λύση είναι:

$$u(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi ct}} \exp\left(-\frac{x^2}{4ct}\right). \quad (2.8)$$

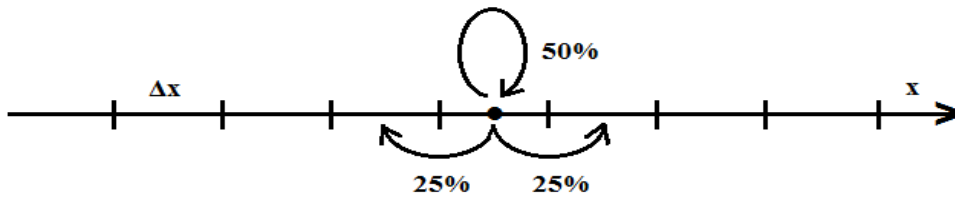
Προς επαλήθευση της παραπάνω λύσης, μπορούμε να δούμε πως όχι μόνο ικανοποιείται η αρχική συνθήκη, εφόσον η ποσότητα της ουσίας είναι σωστή, αλλά και ότι το αρχικό προφίλ είναι η κατανομή της κορυφής με $c=0$ για $x \neq 0$ και $c=\infty$ για $x=0$. Για σταθερό $x \neq 0$ και καθώς το t τείνει στο μηδέν, η αναλογία $x^2 / 4ct$ αυξάνεται προς το άπειρο, οπότε το $\exp(-x^2 / 4ct)$ τείνει στο μηδέν. Εφόσον η παραπάνω εκθετική συνάρτηση τείνει στο μηδέν ταχύτερα από ότι το $t^{-1/2}$ τείνει στο άπειρο, η οριακή τιμή της u θα είναι μηδέν καθώς το t τείνει στο μηδέν. Για $x=0$ ωστόσο, $x^2 / 4ct = 0$ και $\exp(-x^2 / 4ct) = 1$, δηλαδή $u(0,t) = t^{-1/2}$ που τείνει στο άπειρο όταν το t τείνει στο μηδέν. Από τα παραπάνω, είναι πλέον εμφανές πως έκφραση (2.8) ικανοποιεί την αρχική εξίσωση, (2.6), ενώ παράλληλα πληροί και τις συνοριακές και αρχικές συνθήκες.

2.4 Το Μοντέλο του Τυχαίου Περιπάτου

Θα δούμε τώρα πως η παραπάνω λύση προκύπτει από μία εντελώς διαφορετική σκοπιά, λαμβάνοντας υπόψη την τυχαία κίνηση των σωματιδίων που, όπως προαναφέρθηκε, είναι γνωστή ως κίνηση *Brown*. Όπως αποδείχθηκε από τον *Albert Einstein* το 1905, η

διαδικασία τυχαίας βάδισης που αντιπροσωπεύει την κίνηση *Brown* σε ένα αέριο είναι μαθηματικά ισοδύναμη με τη διάχυση κατά *Fick*. Παρακάτω θα παρουσιαστεί μια απλοποιημένη μορφή της αναλογίας μεταξύ της διάχυσης και του τυχαίου περιπάτου.

Έστω πως έχουμε ένα μονοδιάστατο χωρίο, έναν άξονα μίας διάστασης, χωρισμένο σε πλαίσια πανομοιότυπου μήκους και ένα σωματίδιο, το οποίο βρίσκεται σε ένα από αυτά τα πλαίσια. Θεωρούμε πως το σωματίδιο είναι εφοδιασμένο με ένα μηχανισμό που το κάνει να πηδά τυχαία κάθε χρονικό διάστημα, Δt , με 25% πιθανότητα να κινηθεί στο πλαίσιο που βρίσκεται στα δεξιά του, 25% πιθανότητα να κινηθεί στο πλαίσιο που βρίσκεται στα αριστερά του και 50% πιθανότητα να παραμείνει στο πλαίσιο που βρίσκεται ήδη (σχήμα 2.2).



Σχήμα 2. 2: Μονοδιάστατος τυχαίος περίπατος.

Η απάντηση στο ερώτημα «πού θα βρίσκεται το σωματίδιο μετά από m βήματα;» μπορεί να δοθεί με όρους πιθανοτήτων, προφανώς λόγω της τυχαίας φύσης του προβλήματος. Ορίζουμε έτσι ως

$$p(n\Delta x, m\Delta t),$$

την πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται στο πλαίσιο με αριθμό n τη χρονική στιγμή $t=m\Delta t$. Έτσι, μπορούμε σε κάθε χρονικό βήμα να υπολογίσουμε την πιθανότητα με βάση το προηγούμενο χρονικό βήμα ως εξής: Τη χρονική στιγμή $(m+1)\Delta t$, η πιθανότητα το σωματίδιο να βρίσκεται στο πλαίσιο n ισούται με την πιθανότητα ότι ήταν ήδη εκεί επί την πιθανότητα να παρέμεινε εκεί, συν την πιθανότητα ότι ήταν στο πλαίσιο προς τα αριστερά επί την πιθανότητα να πήδηξε προς τα δεξιά, συν την πιθανότητα ότι ήταν στο πλαίσιο προς τα δεξιά επί την πιθανότητα να πήδηξε προς τα αριστερά. Η μαθηματική διατύπωση των παραπάνω είναι

$$p[n\Delta x, (m+1)\Delta t] = \frac{1}{2} p[n\Delta x, m\Delta t] + \frac{1}{4} p[(n-1)\Delta x, m\Delta t] + \frac{1}{4} p[(n+1)\Delta x, m\Delta t]. \quad (2.9)$$

Δεδομένης της θέσης του σωματιδίου στην αρχή της παρατήρησης, έστω $n = 0$, η λύση μπορεί να βρεθεί μέσω επαναλήψεων δεδομένου πως

$$p(0,0)=1, \quad p(n\Delta x,0)=0 \text{ για } n \neq 0.$$

Η σύνδεση των παραπάνω με την εξίσωση διάχυσης επιτυγχάνεται όταν θα πάρουμε το όριο της διαδικασίας του τυχαίου περιπάτου σε απειροελάχιστα μικρά πλαίσια Δx και απειροελάχιστα μικρά χρονικά βήματα Δt . Τότε, η συνάρτηση πιθανότητας μπορεί να προσεγγιστεί με τη χρήση του αναπτύγματος *Taylor*.

$$p[(n \pm 1)\Delta x, m\Delta t] = p(n\Delta x, m\Delta t) \pm \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \pm \frac{1}{6} \Delta x^3 \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} + O(\Delta x^4),$$

$$p[n\Delta x, (m+1)\Delta t] = p(n\Delta x, m\Delta t) + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + O(\Delta t^2).$$

Έτσι η σχέση (2.9) δίνει:

$$\begin{aligned} p(x,t) + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + O(\Delta t^2) &= \frac{1}{2} p(x,t) + \\ &+ \frac{1}{4} \left[p(x,t) - \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \right] \\ &+ \frac{1}{4} \left[p(x,t) + \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^3}{6} \frac{\partial^3 p}{\partial x^3} + O(\Delta x^4) \right], \end{aligned}$$

απ' όπου απλοποιώντας προκύπτει:

$$\Delta t \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\Delta x^2}{4} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + O(\Delta t^2, \Delta x^4).$$

Διαιρώντας την παραπάνω σχέση με Δt έχουμε:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + O(\Delta t, \frac{\Delta x^4}{\Delta t}), \quad (2.10)$$

όπου

$$D = \frac{\Delta x^2}{4\Delta t}.$$

Όπως μπορούμε να δούμε η σχέση (2.10) παρουσιάζει μεγάλη ομοιότητα με την εξίσωση διάχυσης. Επιπλέον, για να έχουμε ένα πεπερασμένο συντελεστή D , καθώς τα Δx και Δt τείνουν να μηδενιστούν, θα πρέπει το Δt να τείνει στο μηδέν με τον ίδιο ρυθμό που το Δx^2 θα τείνει στο μηδέν. Στην περίπτωση αυτή, που το D είναι πεπερασμένο, το σφάλμα της τάξης του $\Delta x^4/\Delta t$ στο όριο τείνει να μηδενιστεί και έτσι η εξίσωση για τη συνάρτηση συνεχούς πιθανότητας-κατανομής $p(x,t)$ υπακούει ακριβώς στην εξίσωση διάχυσης (2.6).

2.5 Διάχυση σε Τρεις Διαστάσεις

Η μονοδιάστατη ανάλυση προβλημάτων διάχυσης έχει αρκετές εφαρμογές κυρίως σε χωρικά επιμήκη συστήματα, όπως αυτό του σωλήνα ή ενός ποταμού, τα οποία σε πρώτη προσέγγιση, μπορούν να μοντελοποιηθούν ως μονοδιάστατα. Τα περισσότερα όμως προβλήματα αναφέρονται σε δύο ή τρεις διαστάσεις, γεγονός που καθιστά αναγκαία την επέκταση της μελέτης μας σε προβλήματα διάχυσης υψηλότερων διαστάσεων.

Σε αυτό το σημείο λοιπόν, θεωρούμε πως η ουσία διαχέεται ισότροπα και στις τρεις κατευθύνσεις του χώρου, βοράς-νότος, ανατολή-δύση, πάνω-κάτω, ενώ η ροή της είναι, όπως και πριν, καθαρά διαχυτική. Η ποσότητα της ροής θα έχει τώρα τρεις συνιστώσες, άρα μπορεί να εκφραστεί ως διάνυσμα (σχήμα 2.3). Αν $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$ το διάνυσμα αυτό, τότε ομοίως με όσα αναφέρθηκαν στην ενότητα 2.1 για την ανάκτηση της σχέσης (2.4) (νόμος του *Fick*) θα έχουμε:

$$q_x = -c \frac{\partial \rho}{\partial x}, \quad q_y = -c \frac{\partial \rho}{\partial y}, \quad q_z = -c \frac{\partial \rho}{\partial z}.$$

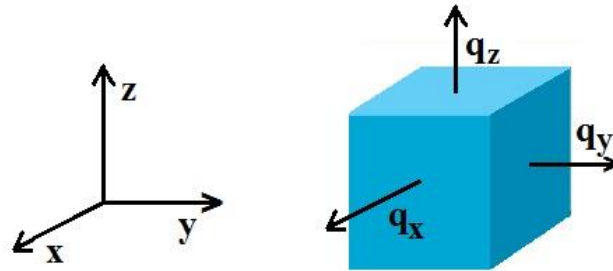
Συνοπώς:

$$\vec{q} = -c \left(\frac{\partial \rho}{\partial x}, \frac{\partial \rho}{\partial y}, \frac{\partial \rho}{\partial z} \right),$$

δηλαδή:

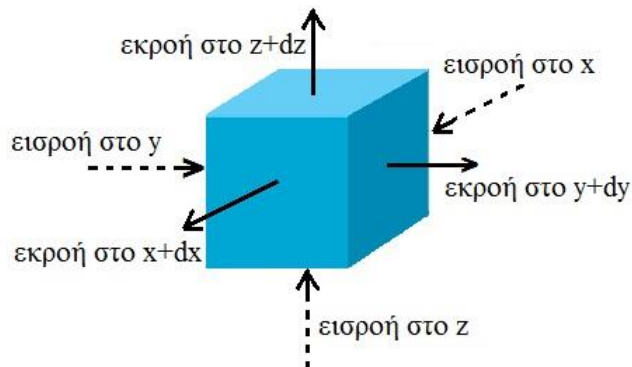
$$\vec{q} = -c \vec{\nabla} \rho, \tag{2.11}$$

όπου $\vec{\nabla}$ είναι ο συντελεστής κλίσης.



Σχήμα 2. 3: Οι συντεταγμένες ροής στον τρισδιάστατο χώρο.

Όπως και πριν, η συγκέντρωση της ουσίας ορίζεται από το σύνολο της εισροής και της εκροής της σε κάθε πεδίο (σχήμα 2.4).



Σχήμα 2. 4: Εισροή και εκροή ουσίας σε κύβο απειροελάχιστου όγκου.

Θεωρώντας πως έχουμε ένα απειροελάχιστο μικρό τρισδιάστατο κύβο όγκου $dx dy dz$ προκύπτει:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho dx dy dz) = & \left(q_x \text{ στο } x \right) dy dz - \left(q_x \text{ στο } x + dx \right) dy dz \\ & + \left(q_y \text{ στο } y \right) dx dz - \left(q_y \text{ στο } y + dy \right) dx dz \\ & + \left(q_z \text{ στο } z \right) dx dy - \left(q_z \text{ στο } z + dz \right) dx dy , \end{aligned}$$

που ισοδυναμεί με:

$$dxdydz \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right) dxdydz .$$

Απλοποιώντας το παραπάνω έχουμε:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{q} ,$$

όπου $\vec{\nabla}$ ο τελεστής απόκλισης.

Λαμβάνοντας υπόψη τη σχέση (2.11) για τη ροή, οδηγούμαστε τώρα στη μορφή:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = +\vec{\nabla} \cdot (c \vec{\nabla} \rho) ,$$

που με c σταθερά γράφεται:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = c \nabla^2 \rho ,$$

όπου ∇^2 ο συντελεστής του Laplace:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} .$$

Στην περίπτωση της τρισδιάστατης μελέτης, η λύση της εξίσωσης διάχυσης που αφορά μια τοπική και στιγμιαία απελευθέρωση μιας ποσότητας M της ουσίας, στη θέση $(0,0,0)$ τη χρονική στιγμή $t = 0$, θα είναι:

$$\rho(x, y, z, t) = \frac{M}{(\sqrt{4\pi ct})^3} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{4ct}\right) .$$

Η παραπάνω, όπως εύκολα μπορεί να επαληθευτεί, αποτελεί το γινόμενο των τριών θεμελιωδών λύσεων με χωρικές μεταβλητές x , y και z , αντίστοιχα. Σε αντίθεση με την μονοδιάστατη μελέτη, όπου το M εκφράζεται σε μονάδες μάζας ανά μονάδα διατομής, η ποσότητα M εδώ εκφράζεται καθαρά σε μονάδες μάζας, για παράδειγμα σε γραμμάρια.

Επιπλέον, η συγκέντρωση ρ εξαρτάται μόνο από τον χρόνο και την απόσταση από το σημείο απελευθέρωσης: $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, ενώ είναι ανεξάρτητη της κατεύθυνσης ως προς τους άξονες συντεταγμένων, εφόσον, όπως προαναφέρθηκε, η ουσία διαχέεται ισότροπα.

Θα εξετάσουμε τώρα την περίπτωση της ανισότροπης διάχυσης σε τρεις διαστάσεις. Όπως μπορεί να γίνει εύκολα αντιληπτό, στα περισσότερα τρισδιάστατα συστήματα η απελευθέρωση μιας ουσίας δεν προϋποθέτει απαραίτητα την ομοιόμορφη της εξάπλωση προς όλες τις κατευθύνσεις. Ας πάρουμε για παράδειγμα ένα περιβαλλοντικό σύστημα, όπως την διάχυση ενός ρύπου σε μία λίμνη. Εκεί, λόγω της βαρύτητας, η διάχυση στον κατακόρυφο άξονα θα διαφοροποιείται σημαντικά από την διάχυση της ουσίας στους δύο οριζόντιους άξονες.

Γενικεύοντας λοιπόν, στην περίπτωση μιας ανισότροπης διάχυσης θα ορίσουμε τρεις διακριτούς συντελεστές διάχυσης.

$$D_x \text{ για την διάχυση στην } x\text{-κατεύθυνση: } q_x = -D_x \frac{\partial \rho}{\partial x},$$

$$D_y \text{ για την διάχυση στην } y\text{-κατεύθυνση: } q_y = -D_y \frac{\partial \rho}{\partial y},$$

$$D_z \text{ για την διάχυση στην } z\text{-κατεύθυνση: } q_z = -D_z \frac{\partial \rho}{\partial z}.$$

Η εξίσωση διάχυσης παίρνει τώρα την μορφή:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \rho}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial \rho}{\partial z} \right).$$

Η λύση της παραπάνω για μία στιγμιαία και τοπική απελευθέρωση μιας ποσότητας M της ουσίας, στη θέση $(0,0,0)$ τη χρονική στιγμή $t = 0$, θα είναι:

$$\rho(x, y, z, t) = \frac{M}{(\sqrt{4\pi t})^3 \sqrt{D_x D_y D_z}} \exp \left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t} \right).$$

3. Διάγραμμα Φάσεων

Στο σημείο αυτό, και πριν προχωρήσουμε στη μελέτη των βασικών μαθηματικών μοντέλων διάχυσης, κρίνεται σκόπιμο να θα παρουσιαστεί η γεωμετρική, ποιοτική άποψη της θεωρίας των διαφορικών εξισώσεων. Το παραπάνω, τουλάχιστον στις δύο διαστάσεις, επιτυγχάνεται μέσω της μελέτης του πορτραίτου των φάσεων ενός δυναμικού συστήματος που περιγράφεται από ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι έννοιες του δυναμικού συστήματος, των κρίσιμων σημείων του και αναλύεται, σε ένα βαθμό, η ευστάθεια των παραπάνω σημείων μέσω της μελέτης των ιδιοτιμών του. Η θεωρία των δυναμικών συστημάτων θα αποτελέσει τη βάση για την ανάλυση των μοντέλων σε βιολογικά συστήματα, τα οποία αποτελούν το αντικείμενο που εξετάζεται στα επόμενα κεφάλαια.

3.1 Δυναμικά Συστήματα

Ένα δυναμικό σύστημα έχει τη μορφή

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ \frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ \vdots \\ \frac{dx_n}{dt} = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n), \end{cases}$$

όπου $P^{-1}AP = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]$ ορίζεται σε ένα ανοιχτό υποσύνολο D του \mathbb{R}^n και είναι τουλάχιστον κλάσης C^1 στο D . Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε η ανεξάρτητη μεταβλητή t δεν εμφανίζεται σε καμία από τις συναρτήσεις f_i . Για τον λόγο αυτό το σύστημα χαρακτηρίζεται και ως αυτόνομο δυναμικό σύστημα. Η διανυσματική του μορφή είναι η ακόλουθη

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(x),$$

με \mathbf{f} ένα διανυσματικό πεδίο με συνιστώσες (f_1, f_2, \dots, f_n) στον \mathbb{R}^n και $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$. Το υποσύνολο του \mathbb{R}^n όπου ορίζεται το \mathbf{f} λέγεται χώρος φάσεων ή χώρος καταστάσεων του δυναμικού συστήματος.

Ως λύση του συστήματος ορίζουμε μία διαφορίσιμη απεικόνιση $\mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}(t)): I \rightarrow \mathbb{R}^n$, η οποία γεωμετρικά είναι μία καμπύλη στον \mathbb{R}^n με εφαπτόμενο διάνυσμα $\boldsymbol{\varphi}(t)$ που ισούται με το $\mathbf{f}(\boldsymbol{\varphi}(t))$. Δηλαδή, ως λύση εκλαμβάνουμε την τροχιά ενός σημείου που κινείται στον \mathbb{R}^n και σε κάθε στιγμή t , η ταχύτητά του είναι ίση με το διανυσματικό πεδίο \mathbf{f} υπολογισμένο στην θέση του σημείου. Έτσι οι όροι λύση και τροχιά είναι ταυτόσημοι.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην μελέτη ενός δυναμικού συστήματος παρουσιάζουν επιπλέον τα κρίσιμα σημεία ή τα σημεία ισορροπίας του. Τα σημεία αυτά αντιστοιχούν σε μία λύση μόνιμης κατάστασης η οποία παραμένει αναλλοίωτη στο χρόνο. Έτσι τα σημεία αυτά θα προκύπτουν ως λύση της

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = 0 \text{ ή } \mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0.$$

Το σύνολο των τροχιών και των κρίσιμων σημείων, σχεδιασμένο στον χώρο φάσεων ονομάζεται διάγραμμα φάσεων του συστήματος.

Μία ακόμη πολύ σημαντική έννοια που θα μας απασχολήσει και αναφέρεται στα κρίσιμα σημεία είναι αυτή της ευστάθειάς τους. Η ευστάθεια ενός σημείου ισορροπίας αναφέρεται στον βαθμό της σταθερότητάς του υπό την επήρεια μικρών διαταραχών. Πιο συγκεκριμένα, ένα σημείο χαρακτηρίζεται ως ευσταθές όταν όλες οι τροχιές που ξεκινούν αρκετά κοντά στο σημείο παραμένουν κοντά στο σημείο αυτό, ενώ σε αντίθετη περίπτωση λέγεται ασταθές. Ο χαρακτηρισμός της ευστάθειας προκύπτει από την μελέτη των ιδιοτιμών του συστήματος.

Στη συνέχεια, για λόγους απλότητας, θα αναλύσουμε τα παραπάνω για τα δισδιάστατα γραμμικά συστήματα και θα δούμε πως τα συμπεράσματα επεκτείνονται και στα μη γραμμικά.

3.2 Γενική Θεωρία Διαγωνιοποίηση

Ένα δισδιάστατο γραμμικό σύστημα μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} := (x_1, x_2),$$

όπου A είναι ο πίνακας 2×2 των συντελεστών. Σύμφωνα με γνωστό θεώρημα της γραμμικής άλγεβρας εάν οι ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ενός πίνακα A διαστάσεων $n \times n$ είναι πραγματικές και διακριτές, τότε οποιοδήποτε σύνολο των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$ είναι βάση του \mathbb{R}^n , ο πίνακας $P = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]$ είναι αντιστρέψιμος και $P^{-1}AP = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]$.

Για να βρούμε τη γενική λύση του γραμμικού συστήματος ορίζουμε ένα νέο διάνυσμα μεταβλητών

$$\mathbf{y} = P^{-1}\mathbf{x},$$

για το οποίο θα ισχύει

$$\dot{\mathbf{y}} = P^{-1}\dot{\mathbf{x}} = P^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = P^{-1}A\mathbf{P}\mathbf{y},$$

που σύμφωνα με το παραπάνω θεώρημα

$$\dot{\mathbf{y}} = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]\mathbf{y}.$$

Η γενική λύση του συστήματος δίνεται με ολοκλήρωση της παραπάνω σχέσης, έτσι έχουμε

$$\mathbf{y}(t) = \text{diag}[e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t}, \dots, e^{\lambda_n t}]\mathbf{y}(0),$$

όπου $\mathbf{y}(0)$ οι αρχικές συνθήκες εκφρασμένες στις μεταβλητές \mathbf{y} . Συνεπώς η γενική λύση ως προς τις αρχικές μεταβλητές \mathbf{x} με αρχικές συνθήκες $\mathbf{x}(0)$ θα είναι:

$$\mathbf{x}(t) = P \text{diag}[e^{\lambda_1 t}, e^{\lambda_2 t}, \dots, e^{\lambda_n t}] P^{-1} \mathbf{x}(0).$$

Για την παραπάνω μελέτη είναι χρήσιμο να θυμηθούμε τον ορισμό του αντίστροφου ενός 2×2 πίνακα, ο οποίος είναι:

$$\text{Για } P = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad P^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

3.3 Γραμμικά Συστήματα

Διατηρώντας τους συμβολισμούς της προηγούμενης ενότητας, με χρήση πινάκων ένα γραμμικό σύστημα 2×2 έχει τη μορφή

$$\dot{\mathbf{x}} = A\mathbf{x}, \tag{3.1}$$

με το διάνυσμα των αγνώστων

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix},$$

και τον πίνακα του συστήματος

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}.$$

Όπως προαναφέρθηκε, τα σημεία ισορροπίας θα είναι λύσεις του συστήματος

$$A\mathbf{x} = 0.$$

Οι λύσεις του συστήματος γράφονται στη μορφή

$$\mathbf{x}(t) = e^{\lambda t} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix},$$

όπου \mathbf{v} θα είναι ένα σταθερό διάνυσμα.

Ισχύουν τα εξής:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \frac{d}{dt}(e^{\lambda t} \mathbf{v}) = \lambda e^{\lambda t} \mathbf{v},$$

και

$$A\mathbf{x} = A(e^{\lambda t}\mathbf{v}) = e^{\lambda t}A\mathbf{v}.$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση (3.1) έχουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad \text{ή} \quad \lambda \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}. \quad (3.2)$$

Συνεπώς τα εκθετικά λ είναι οι δύο ιδιοτιμές του πίνακα του συστήματος και οι λύσεις για τα (r, s) αποτελούν τα ιδιοδιανύσματά του.

Με άλλη διατύπωση, αναλυτικά η (3.2) δίνει:

$$\begin{cases} (a - \lambda)r + bs = 0, \\ cr + (d - \lambda)s = 0, \end{cases}$$

θεωρώντας ως αγνώστους τα r, s . Η συνθήκη για να έχει το παραπάνω σύστημα λύσεις πέραν της τετριμμένης $(r, s) = (0, 0)$ είναι να μηδενίζεται η ορίζουσα του, δηλαδή

$$\begin{vmatrix} a - \lambda & b \\ c & d - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

από την οποία προκύπτει η χαρακτηριστική εξίσωση ή το χαρακτηριστικό πολυώνυμο του συστήματος

$$\lambda^2 - (a + d)\lambda + (ad - bc) = 0$$

ή

$$\lambda^2 - \text{tr}(A)\lambda + \det(A) = 0,$$

η λύση του οποίου θα μας δώσει τις ιδιοτιμές του συστήματος.

3.4 Μελέτη Ιδιοτιμών

Οι ιδιοτιμές του συστήματος κατέχουν κεντρικό ρόλο στην μελέτη του καθώς κατηγοριοποιώντας τις μπορούμε να εξάγουμε συμπεράσματα τόσο για το είδος όσο και για τη ευστάθεια των σημείων ισορροπίας ενός γραμμικού συστήματος όπως το (3.1). Παρακάτω παρουσιάζονται οι διαφορετικές περιπτώσεις.

Όπως είδαμε οι ιδιοτιμές είναι λύσεις του χαρακτηριστικού πολυωνύμου

$$\lambda^2 - tr(A)\lambda + \det(A) = 0.$$

Ορίζουμε ως

$$\Delta = tr(A)^2 - 4\det(A).$$

Συνεπώς οι ιδιοτιμές μπορεί να είναι:

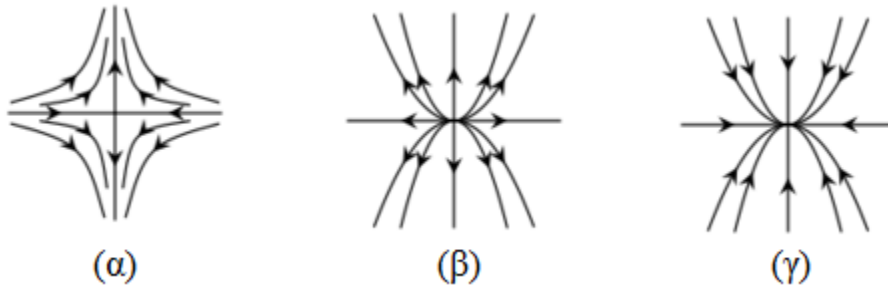
$$\begin{cases} \text{πραγματικές, αν } \Delta \geq 0, \\ \text{μιγαδικές, αν } \Delta < 0. \end{cases}$$

Εξετάζουμε πρώτα την περίπτωση των πραγματικών λύσεων, όπου διακρίνουμε τις παρακάτω περιπτώσεις.

Για $\Delta > 0$ και $\det(A) < 0$ οι ιδιοτιμές είναι διακριτές και ετερόσημες και το σημείο ισορροπίας είναι σάγμα. Τα σαγματικά σημεία είναι πάντοτε ασταθή (σχήμα 3.1, α).

Για $\Delta > 0$, $\det(A) > 0$ και $tr(A) > 0$ οι ιδιοτιμές είναι διακριτές και θετικές και το σημείο ισορροπίας αποτελεί έναν ασταθή κόμβο (σχήμα 3.1, β).

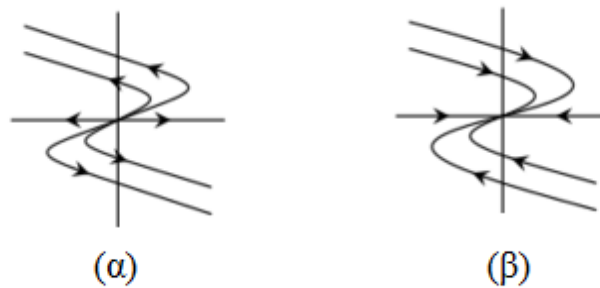
Για $\Delta > 0$, $\det(A) > 0$ και $tr(A) < 0$ οι ιδιοτιμές είναι διακριτές και αρνητικές και το σημείο ισορροπίας αποτελεί έναν ευσταθή κόμβο (σχήμα 3.1, γ).



Σχήμα 3. 1: Διαγράμματα φάσης διακεκριμένων πραγματικών ιδιοτιμών.

Για $\Delta=0$ $\det(A) > 0$ και $tr(A) > 0$ οι ιδιοτιμές είναι ίσες και θετικές και το σημείο ισοροπίας είναι ένας ασταθής νόθος κόμβος (σχήμα 3.2, α).

Για $\Delta=0$ $\det(A) > 0$ και $tr(A) < 0$ οι ιδιοτιμές είναι ίσες και αρνητικές και το σημείο ισοροπίας είναι ένας ευσταθής νόθος κόμβος (σχήμα 3.2, β).



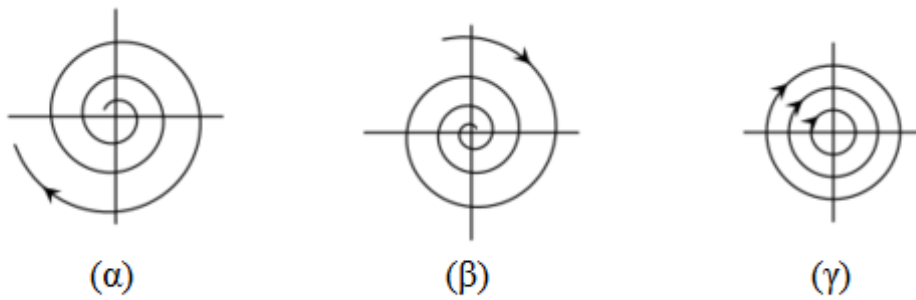
Σχήμα 3. 2: Διαγράμματα φάσης ίσων πραγματικών ιδιοτιμών.

Αν τώρα οι ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου είναι μιγαδικές, τότε πάλι διακρίνουμε τις παρακάτω περιπτώσεις.

Για $\det(A) > 0$ και $tr(A) > 0$ το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών είναι θετικό και το σημείο ισοροπίας είναι μία ασταθής εστία συγκεκριμένα μια ασταθής έλικά ή σπείρα (σχήμα 3.3, α).

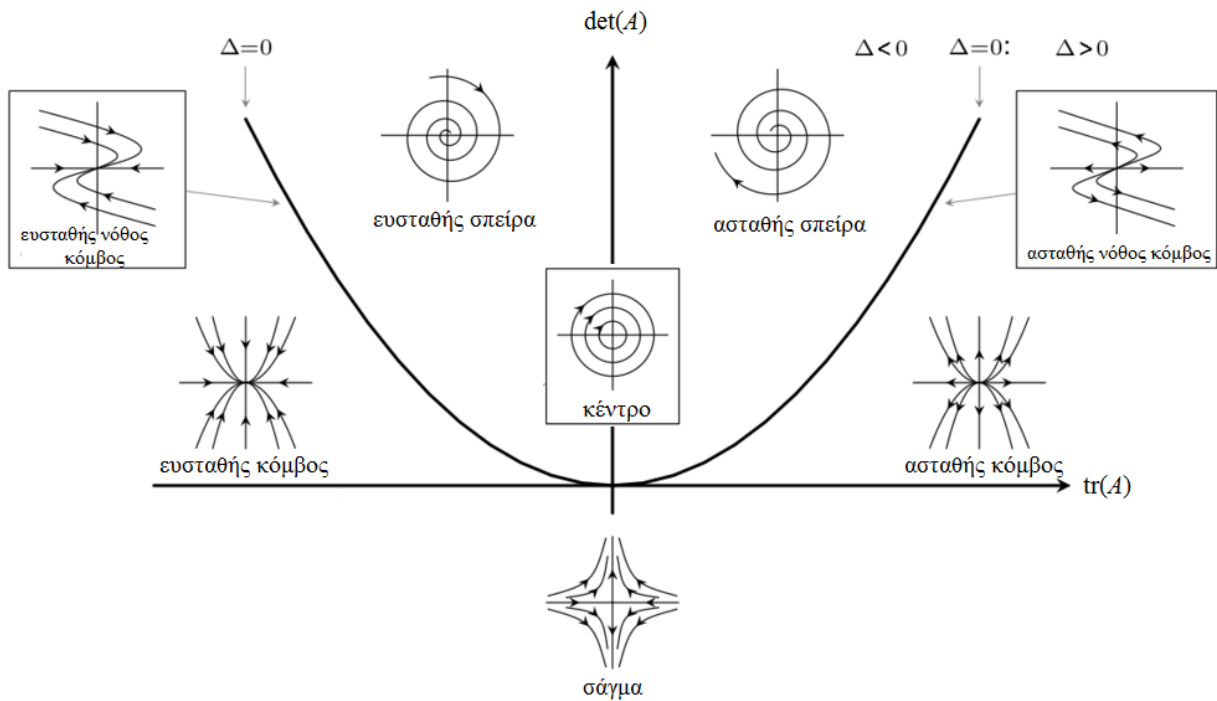
Για $\det(A) > 0$ και $tr(A) < 0$ το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών είναι αρνητικό και το σημείο ισοροπίας είναι μία ευσταθής εστία συγκεκριμένα μια ευσταθής έλικά ή σπείρα (σχήμα 3.3, β).

Για $\det(A) > 0$ και $\text{tr}(A) = 0$ οι ιδιοτιμές είναι φανταστικοί αριθμοί και το σημείο ισορροπίας είναι κέντρο (σχήμα 3.3, γ).



Σχήμα 3. 3: Διαγράμματα φάσης μιγαδικών ιδιοτιμών.

Το σχήμα που ακολουθεί συνοψίζει την παραπάνω ανάλυση



Σχήμα 3. 4: Συγκεντρωτικό διάγραμμα διαγραμμάτων φάσης.

3.5 Μη Γραμμικά Συστήματα

Επεκτείνοντας τη μελέτη μας στα μη γραμμικά συστήματα, ας θεωρήσουμε ξανά ένα δυσδιάστατο σύστημα, το οποίο αυτή τη φορά περιέχει και μη γραμμικούς όρους. Το σύστημα αυτό θα έχει τη μορφή

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}),$$

όπου, όμοια με πριν, \mathbf{x} το διάνυσμα δύο μεταβλητών και \mathbf{f} ένα διάνυσμα δύο συναρτήσεων.

Αν \mathbf{x}_0 είναι το σημείο ισορροπίας του συστήματος, τότε ο Ιακωβιανός πίνακας στο σημείο αυτό θα είναι:

$$D\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{df_1}{dx_1} & \frac{df_1}{dx_2} \\ \frac{df_2}{dx_1} & \frac{df_2}{dx_2} \end{bmatrix}.$$

Όπως έχει αποδειχθεί, το γραμμικοποιημένο σύστημα

$$\dot{\xi} = D\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\xi, \quad \xi := \mathbf{x} - \mathbf{x}_0$$

διατηρεί την μορφή του διαγράμματος φάσης του γραμμικού συστήματος κοντά στο σημείο ισορροπίας \mathbf{x}_0 .

Το παραπάνω συμπέρασμα προκύπτει από το εξής θεώρημα:

Αν E ανοιχτό υποσύνολο του \mathbb{R}^n που περιέχει την αρχή των αξόνων και $f \in C^1(E)$, όπου $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x})$. Υποθέτουμε ότι $\mathbf{f}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ και ότι $D\mathbf{f}(\mathbf{0})$ έχει k ιδιοτιμές με αρνητικό πραγματικό μέρος και $n-k$ ιδιοτιμές με θετικό πραγματικό μέρος. Τότε υπάρχει μία διαφορίσιμη πολλαπλότητα S διαστάσεως k , η οποία είναι εφαπτόμενη στον ευσταθή υποχώρο E^S του γραμμικοποιημένου συστήματος στο σημείο $\mathbf{0}$, τέτοια ώστε για κάθε αρχική συνθήκη $\mathbf{x}_0 \in S$ να ισχύει:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{x}(t) = \mathbf{0}.$$

Επίσης, υπάρχει μία πολλαπλότητα διαστάσεως $n-k$ η οποία είναι εφαπτόμενη στον ασταθή υποχώρο E^U του γραμμικοποιημένου συστήματος στο σημείο $\mathbf{0}$, τέτοια ώστε για κάθε αρχική συνθήκη $\mathbf{x}_0 \in U$ να είναι:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \mathbf{x}(t) = \mathbf{0}.$$

Οι πολλαπλότητες S και U είναι αναλλοίωτες στις εξισώσεις.

Με βάση λοιπόν το θεώρημα αυτό, όταν ένα σημείο ισορροπίας έχει όλες τις ιδιοτιμές με μη-μηδενικό πραγματικό μέρος, τότε η συμπεριφορά του μη γραμμικού συστήματος στην περιοχή του σημείου ισορροπίας είναι τοπολογικά ισοδύναμη με την συμπεριφορά του γραμμικοποιημένου συστήματος.

4. Οι εξισώσεις Αντίδρασης-Διάχυσης

Όπως προαναφέρθηκε, η εξίσωση αντίδρασης-διάχυσης κατατάσσεται στις μη-γραμμικές ΜΔΕ. Αποτελεί μάλιστα μία από τις πιο σημαντικές εξισώσεις αυτού του είδους λόγω της δυνατότητας της να περιγράφει τις μεταβολές ως προς τον χρόνο και τον χώρο διάφορων φυσικών ποσοτήτων. Εκτός από την επιστήμη της Βιολογίας έχει εφαρμογές και στους τομείς της Γεωλογίας, της Φυσικής, της Χημείας και της Οικολογίας. Στο κεφάλαιο αυτό, παρουσιάζεται αρχικά η φυσική προέλευση της εξίσωσης αντίδρασης-διάχυσης και έπειτα μελετώνται δύο τέτοιου είδους εξισώσεις. Πιο συγκεκριμένα, εξετάζεται η *εξίσωση Fisher-KPP* και η *εξίσωση Skellam*. Ο λόγος που επιλέχθηκαν οι παραπάνω εξισώσεις, είναι η ευρεία χρήση τους στην μαθηματική μοντελοποίηση των φαινομένων που σχετίζονται με την επιστήμη της Μαθηματικής Βιολογίας.

4.1 Φυσική Προέλευση της Εξίσωσης Αντίδρασης-Διάχυσης

Η εξίσωση διάχυσης, η οποία μελετήθηκε παραπάνω, είναι μία εξίσωση χωρίς πηγές. Στον τομέα της Μαθηματικής Βιολογίας όμως, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν και τα προβλήματα στα οποία η διάχυση δεν οφείλεται αποκλειστικά στη φυσική ροή μιας ουσίας, αλλά επηρεάζεται από παράγοντες οι οποίοι παράγουν ή καταναλώνουν τη διαχεόμενη ουσία. Στην περίπτωση αυτή προστίθεται στην εξίσωση μία συνάρτηση πηγής f , και έτσι προκύπτει η *εξίσωση αντίδρασης-διάχυσης*

$$u_t - Du_{xx} = f(x, t, u). \quad (4.1)$$

Ας θεωρήσουμε ξανά το παράδειγμα της ροής ενός ρευστού σε λεπτό κυλινδρικό σωλήνα (ενότητα 2.1), υποθέτοντας αυτή τη φορά πως στο εσωτερικό του περιέχονται χημικές ενώσεις, οι οποίες υπόκεινται σε κάποια αντίδραση (σχήμα 4.1). Στην περίπτωση αυτή, σύμφωνα με τον *νόμο διατήρησης*, ο χρονικός ρυθμός μεταβολής της συγκέντρωσης μιας χημικής ένωσης θα ισούται με το ρυθμό εισροής μείον το ρυθμό εκροής αυτής στο σύστημα συν το ρυθμό παραγωγής ή κατανάλωσής της.



Σχήμα 4. 1: Ρευστό σε λεπτό κυλινδρικό σωλήνα που περιέχει χημικές ενώσεις.

Έτσι, για το σταθεροποιημένο διάστημα $[x_1, x_2]$, αν έχουμε εκροή μάζας και από τα δύο άκρα x_1, x_2 , η ολοκληρωτική μορφή του νόμου διατήρησης έχει την εξής μορφή:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} u(x,t) dx = -[q(x_2,t)(+1) + q(x_1,t)(-1)] + \int_{x_1}^{x_2} f(x,t,u) dx, \quad (4.2)$$

όπου, όμοια με πριν, $q(x,t)$ η συνάρτηση ροής της μάζας που διέρχεται, από αριστερά προς τα δεξιά, δια μέσου του x , ανά μονάδα χρόνου, τη χρονική στιγμή t και $u(x,t)$, η πυκνότητα του ρευστού στο σημείο x τη χρονική στιγμή t . Επιπλέον, αν $f > 0$ τότε η f ονομάζεται πηγή, ενώ στην περίπτωση που $f < 0$, η f ονομάζεται απαγωγή ή καταβόθρα. Η σχέση (4.2) ισχύει ακόμα και αν οι u, q, f δεν είναι ομαλές συναρτήσεις. Αν θεωρήσουμε όμως κατάλληλες συνθήκες ομαλότητας $u \in C^1(\mathbb{R} \times (0, \infty))$, $q \in C^1(\mathbb{R}) \times C(0, \infty)$ και εργαστούμε όπως στην ενότητα 2.1, θα έχουμε τον νόμο διατήρησης σε διαφορική μορφή:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) + \frac{\partial q}{\partial x}(x,t) - f(x,t,u) = 0.$$

Εφαρμόζοντας τον νόμο του Fick στην παραπάνω σχέση προκύπτει η εξίσωση αντίδρασης-διάχυσης:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) + f(x,t,u).$$

4.2 Η εξίσωση Fisher-Kolmogorov, Petrovskii, Piskunov

Μία από τις απλούστερες ημιγραμμικές εξισώσεις αντίδρασης-διάχυσης είναι η λογιστική εξίσωση με όρο διάχυσης που αναπτύχθηκε για τη μελέτη προβλημάτων δυναμικής πληθυσμού.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = ru \left(1 - \frac{u}{K} \right) + D \nabla^2 u. \quad (4.3)$$

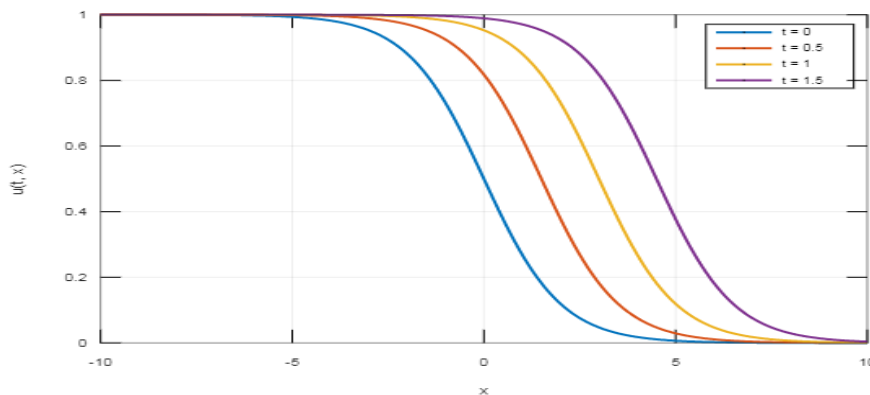
Σε αυτό το πλαίσιο, ο όρος πηγής $f = ru \left(1 - \frac{u}{K} \right)$, όπου r ο γραμμικός ρυθμός αναπαραγωγής και K η φέρουσα ικανότητα που περιβάλλοντος, αντιπροσωπεύει την διαδικασία γεννήσεων-θανάτων των μελών ενός πληθυσμού πυκνότητας u .

Η λογιστική εξίσωση με όρο διάχυσης χρησιμοποιήθηκε αρχικά στον τομέα της Οικολογίας, ως μοντέλο της Γενετικής Θεωρίας της Φυσικής Επιλογής από τον *Fisher*, που το 1937 πρότεινε τη μονοδιάστατη έκδοση ως μοντέλο για τη διάδοση ενός πλεονεκτικού γονιδίου σε έναν πληθυσμό. Παράλληλα, και ανεξάρτητα από τον *Fisher*, οι *Kolmogorov*, *Petrovskii* και *Piskunov* κατάφεραν να ανακτήσουν μερικά από τα βασικά αναλυτικά της αποτελέσματα, θεωρώντας και μελετώντας εις βάθος μια γενίκευση του μοντέλου, η οποία αφορά τον μη γραμμικό του όρο. Έτσι η σχέση (4.3) είναι πλέον ευρέως γνωστή ως *εξίσωση του Fisher*, και ως *εξίσωση Kolmogorov–Petrovsky–Piskunov* (*εξίσωση KPP*) ή *εξίσωση Fisher–KPP*.

Στην πιο απλή της μορφή, για τις θετικές παραμέτρους k και D η εξίσωση *Fisher–KPP* δίνεται ως εξής:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = ku(1-u) + D\nabla^2 u, \quad (4.4)$$

για την οποία ο *Fisher* στην πρωτοποριακή εργασία του, το 1937 παρατήρησε πως για οποιαδήποτε σταθερά $c \geq c_0 := 2\sqrt{rD}$ οι λύσεις έρχονται στη μορφή οδεύοντων κυμάτων. Τα οδεύοντα κύματα προκύπτουν από λύσεις της μορφής $f(x-ct)$ με c σταθερά και αποτελούν μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα κατηγορία κυμάτων, για τον λόγο αυτό θα αναφερθούμε αναλυτικότερα σε αυτό το φαινόμενο στην ενότητα που ακολουθεί. Στο σχήμα 4.2 που ακολουθεί αναπαρίσταται η λύση της εξίσωσης για διάφορες χρονικές στιγμές. Όπως μπορούμε η μορφή της είναι αυτή ενός κύματος που διαδίδεται.



Σχήμα 4. 2: Λύση της εξίσωσης *Fisher–KPP* για $c=3$ με την μορφή οδεύοντος κύματος.

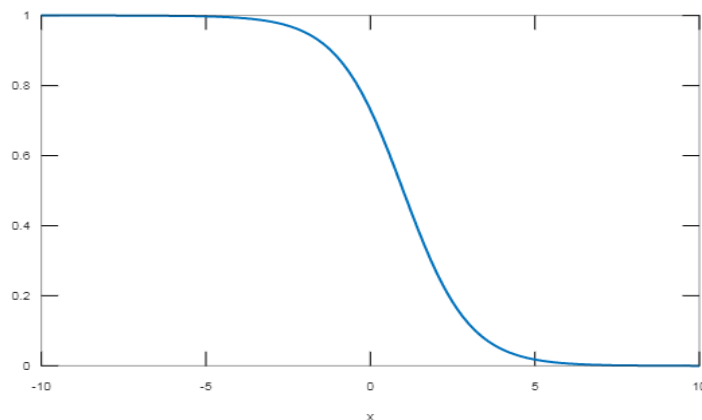
4.3 Οδεύοντα Κύματα

Στο σημείο αυτό θα πρέπει να αποσαφηνίσουμε την έννοια του όρου «οδεύον κύμα». Ως κύμα, γενικότερα, ορίζεται μια συλλογική διαταραχή με την οποία μεταφέρεται ενέργεια από ένα σημείο του χώρου ή του μέσου διάδοσης σε ένα άλλο, χωρίς να υπάρχει μεταφορά μάζας. Τα οδεύοντα κύματα παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς είναι τα κύματα, τα οποία έχουν την ιδιότητα να διατηρούν την μορφή τους καθώς διαδίδονται ενώ επιπλέον σχετίζονται και με την ύπαρξη σταθερής ταχύτητας καθ' όλη τη διάρκεια της διάδοσής τους. Άρα ένα οδεύον κύμα δύναται να ταξιδεύει διατηρώντας το σχήμα και την ταχύτητά του. Κατά συνέπεια, μία λύση $u(x,t)$ που δίνεται σε μορφή οδεύοντος κύματος, θα έχει την ίδια μορφή σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή. Αν δηλαδή θα ισχύει:

$$u(x,t) = u(x-ct) = u(z), \quad z = x-ct, \quad (4.5)$$

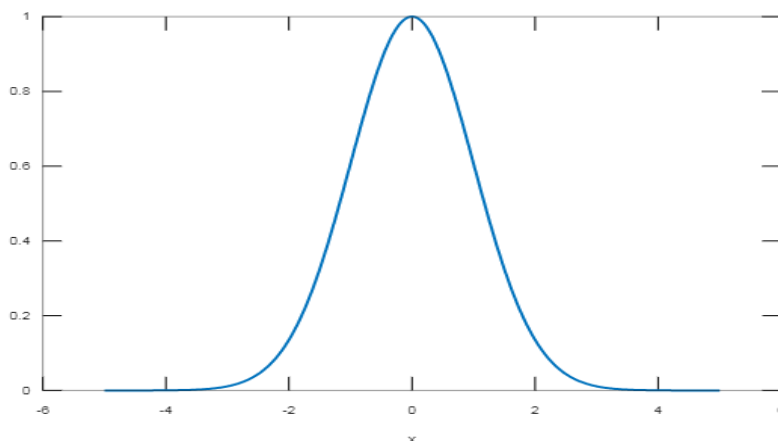
τότε η $u(x,t)$ είναι ένα οδεύον κύμα που κινείται με σταθερή ταχύτητα c προς την θετική x -κατεύθυνση. Αντίστοιχα ένα κύμα που θα οδεύει αντίθετα θα έχει τη μορφή $u(x+ct)$. Αν $x-ct$ σταθερό, τότε προφανώς θα είναι και u σταθερή, πράγμα που σημαίνει πως το σύστημα συντεταγμένων θα κινείται με ταχύτητα c επίσης. Δηλαδή θα έχουμε ένα κινούμενο πλαίσιο, στο οποίο το κύμα θα εμφανίζεται στατικό.

Στην τυπική του μορφή, ένα οδεύον κύμα, θα βρίσκεται σε μία κατάσταση ισορροπίας u_l καθώς $z \rightarrow -\infty$ και σε μία κατάσταση ισορροπίας u_r καθώς $z \rightarrow \infty$, με $u_l \neq u_r$. Τότε το οδεύον κύμα ονομάζεται «κυματικό μέτωπο» (σχήμα 4.3).



Σχήμα 4. 3: Τυπική μορφή ενός οδεύοντος κύματος «κυματικό μέτωπο».

Ωστόσο μπορεί να έχουμε και $u_l = u_r$, δηλαδή το κύμα μπορεί να βρίσκεται στην ίδια κατάσταση ισορροπίας καθώς $z \rightarrow -\infty$ και καθώς $z \rightarrow \infty$. Τότε, το αντίστοιχο κύμα είναι γνωστό ως «παλμικό κύμα» (σχήμα 4.4).



Σχήμα 4. 4: Μορφή οδεύοντος κύματος «παλμικό κύμα».

Καθώς αναζητούμε λύσεις της μορφής (4.5), οι μερικές διαφορικές εξισώσεις ως προς x και t μετατρέπονται σε συνήθεις διαφορικές εξισώσεις ως προς z , εφόσον

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c \frac{du}{dz} \quad \text{και} \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{du}{dz}.$$

Επιπλέον, η $u(z)$ θα πρέπει να είναι μη αρνητική και φραγμένη για κάθε z ώστε να ανταποκρίνεται στα ρεαλιστικά δεδομένα των προβλημάτων της Μαθηματικής Βιολογίας, τα οποία αφορούν ποσότητες όπως χημικές ουσίες, πληθυσμούς, βακτήρια, κύτταρα κ.α.

Μια γραμμική παραβολική εξίσωση, όπως η ομογενής εξίσωση διάχυσης $u_t = Du_{xx}$, δεν επιδέχεται φυσικά αποδεκτές λύσεις που να έχουν τη μορφή οδεύοντων κυμάτων. Αν επιχειρήσουμε να αναζητήσουμε τέτοιες λύσεις τότε η παραπάνω σχέση δίνει:

$$D \frac{d^2 u}{dz^2} + c \frac{du}{dz} = 0,$$

εκ του οποίου προκύπτει: $u(z) = A + Be^{-cz/D}$, με A, B σταθερές ολοκλήρωσης.

Εφόσον, όπως προαναφέρθηκε, το u θα πρέπει να είναι φραγμένο για κάθε z , θα είναι $B=0$ διαφορετικά η $e^{-cz/D}$ θα είναι μη φραγμένη καθώς $z \rightarrow -\infty$. Έτσι προκύπτει $u(z) = A$ που με A σταθερό προφανώς δεν μπορεί να αντιπροσωπεύει μία λύση σε μορφή κύματος.

Στον αντίποδα, η παραβολική εξίσωση διάχυσης-αντίδρασης, μπορεί να παρουσιάσει λύσεις στη μορφή οδεύοντων κυμάτων, τα οποία προκύπτουν ανάλογα με τη μορφή του όρου αντίδρασης/αλληλεπίδρασης $f(u)$. Αυτή η συμπεριφορά της λύσης αποτέλεσε έναν καθοριστικό παράγοντα για την έναρξη ολόκληρου του μαθηματικού πεδίου της θεωρίας αντίδρασης-διάχυσης.

4.4 Ευστάθεια των Λύσεων της Εξίσωσης Fisher-KPP

Επιστρέφουμε τώρα στην μελέτη της εξίσωσης (4.4). Για λόγους ευκολίας μπορούμε να κάνουμε αλλαγή κλίμακας θέτοντας

$$t^* = kt \quad \text{και} \quad x^* = x \sqrt{\frac{k}{D}}.$$

Οπότε η (4.4), παραλείποντας τους αστερίσκους για σημειολογική διευκόλυνση, δίνει:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1-u) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (4.6)$$

Το γεγονός πως στη χωρικά ομογενή περίπτωση έχουμε ως λύσεις ισορροπίας την ασταθή $u=0$ και την ευσταθή $u=1$, υποδεικνύει ότι θα πρέπει να αναζητήσουμε κυματικές λύσεις για τις οποίες $0 \leq u \leq 1$, καθώς ένα οδεύον κύμα θα συνδέει τις δύο καταστάσεις ισορροπίας, λαμβάνοντας επίσης υπόψη πως οι αρνητικές τιμές για το u είναι φυσικά μη αποδεκτές.

Επιπλέον, οι λύσεις με τη μορφή οδεύοντων κυμάτων θα έχουν απαραίτητα την μορφή (4.5). Έστω:

$$u(x, t) = U(z), \quad z = x - ct, \quad (4.7)$$

όπου $c \geq 0$ η ταχύτητα του κύματος, ενώ το x μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή (θετική ή αρνητική), εφόσον η (4.6) παραμένει αμετάβλητη καθώς $x \rightarrow -x$.

Αντικαθιστώντας την σχέση (4.7) στην εξίσωση (4.6) έχουμε:

$$U''(z) + cU'(z) + U(z)(1-U(z)) = 0. \quad (4.8)$$

Σε μία τυπική κυματική λύση, η U θα βρίσκεται στη μία κατάσταση ισορροπίας καθώς $z \rightarrow -\infty$ και στην άλλη όταν $z \rightarrow \infty$, ώστε να εκφράζει τη φυσική διάδοση ενός κινούμενου μετώπου, έστω:

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} U(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = 1, \quad (4.9)$$

θέτοντας $U' = V$ στην (4.8) έχουμε το σύστημα:

$$\begin{cases} U' = V, \\ V' = -cV - U(1-U), \end{cases} \quad (4.10)$$

εκ του οποίου προκύπτει :

$$\frac{dV}{dU} = \frac{-cV - U(1-U)}{V},$$

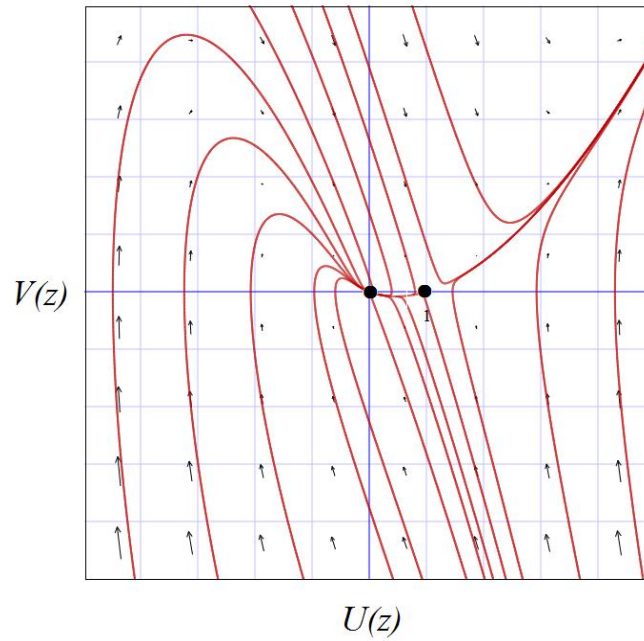
που παρουσιάζει δύο στάσιμα σημεία στο επίπεδο (U, V) το $(0, 0)$ και το $(1, 0)$. Από τη γραμμική ανάλυση ευστάθειας για τα σημεία αυτά και τη μελέτη των αντίστοιχων ιδιοτιμών λ προκύπτουν τα παρακάτω:

$$(0, 0): \lambda_{\pm} = \frac{-c \pm \sqrt{c^2 - 4}}{2} \Rightarrow \begin{cases} \text{ευσταθής κόμβος για } c^2 > 4, \\ \text{ευσταθής σπείρα για } c^2 < 4, \end{cases}$$

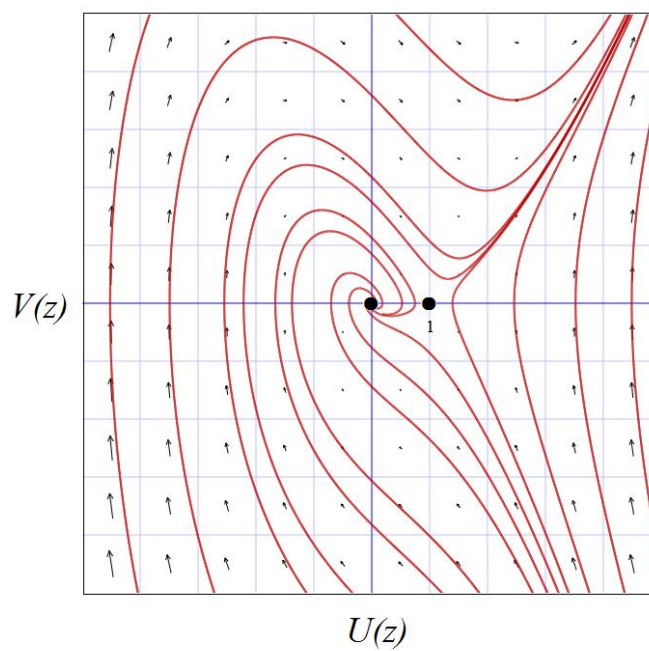
$$(1, 0): \lambda_{\pm} = \frac{-c \pm \sqrt{c^2 + 4}}{2} \Rightarrow \text{σαγματικό σημείο.}$$

Άρα, για οποιαδήποτε κυματική ταχύτητα c το σημείο $(1, 0)$ είναι ασταθές και συγκεκριμένα σάγμα ενώ η αρχή των αξόνων είναι πάντα ευσταθές σημείο, το είδος του οποίου επηρεάζεται από την ταχύτητα του κύματος.

Στο σχήμα 4.5 απεικονίζεται το διάγραμμα φάσεων του συστήματος (4.10) για $c=3$ ενώ στο σχήμα 4.6 έχουμε το διάγραμμα φάσεων του ίδιου συστήματος για $c=1$.



Σχήμα 4. 5: Διάγραμμα φάσεων για $c=3$.



Σχήμα 4. 6: Διάγραμμα φάσεων για $c=1$.

Η λύση του συστήματος (4.10) που θα επαληθεύει τις συνθήκες (4.9) και τη σχέση $0 \leq U \leq 1$ θα δίνεται για $c \geq c_{\min} = 2\sqrt{kD}$.

Για $c < 2$ υπάρχουν επίσης λύσεις στη μορφή οδεύοντων κυμάτων αλλά είναι φυσικά μη αποδεκτές καθώς $U < 0$ για κάποια z . Αυτό συμβαίνει γιατί στην περίπτωση αυτή το U παρουσιάζει μια σπειροειδή μορφή γύρω από το $(0,0)$.

Ένας επιπλέον καθοριστικός παράγοντας που επιδρά στο να αναπτύξει η εξίσωση (4.6) λύσεις στη μορφή οδεύοντων κυμάτων, είναι η επιβολή των κατάλληλων αρχικών συνθηκών. Όπως αποδείχθηκε από τους *Kolmogoroff et al.* [27] αν ισχύει:

$$u(x,0) = u_0 \geq 0 \text{ όπου } u_0 = \begin{cases} 1 & \text{για } x \leq x_1 \\ 0 & \text{για } x \geq x_2 \end{cases},$$

με $x_1 < x_2$ και u_0 συνεχή στο $x_1 < x < x_2$, τότε η λύση της (4.6) $u(x,t)$ αναπτύσσει τη μορφή ενός κυματικού μετώπου $U(z)$ με $z = x - 2t$. Εξελίσσεται δηλαδή σε κυματική λύση με $c_{\min} = 2$.

Για οποιαδήποτε άλλη μορφή αρχικών συνθηκών η λύση εξαρτάται σημαντικά από τη συμπεριφορά της εκάστοτε αρχικής συνθήκης καθώς $x \rightarrow \pm\infty$.

4.5 Η Εξίσωση Skellam

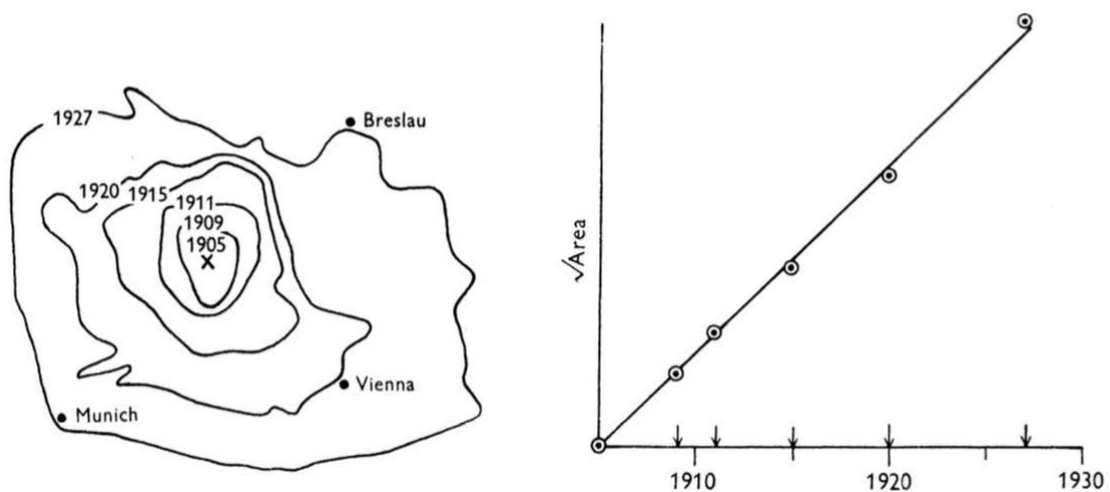
Μια ακόμη πρωτοποριακή εργασία στον τομέα της μαθηματικής μοντελοποίησης της διάδοσης και της ταχύτητας εξάπλωσης, με χρήση εξισώσεων αντίδρασης-διάχυσης οφείλεται στον *J.G.Skellam*, ο οποίος το 1951 ανέπτυξε το εκθετικό μοντέλο με όρο διάχυσης για να περιγράψει την εισβολή ενός είδους σε έναν οικότοπο. Η εξίσωση που είναι πλέον γνωστή ως *εξίσωση Skellam*, έχει την μορφή:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = ru, \quad (4.11)$$

όπου $u(x, t)$ η πυκνότητα του τοπικού πληθυσμού τη στιγμή t και $r \in \mathbb{R}$ ο εγγενής ρυθμός ανάπτυξης του πληθυσμού.

Ο *Skellam* κατόρθωσε μέσω της μελέτης της εξάπλωσης των μοσχοβολιστών⁵ στην Ευρώπη να παράγει τα πρώτα χειροπιαστά στοιχεία σχετικά με την σταθερή ταχύτητα της εξάπλωσης αυτής, επιβεβαιώνοντας παράλληλα τα συμπεράσματα των *Fisher-KPP*. Πιο συγκεκριμένα, μελετώντας δημοσιευμένα δεδομένα και χάρτες σχετικά με το εν λόγω ζήτημα, παρατήρησε πως η τετραγωνική ρίζα της περιοχής $A(t)$ που καταλάμβανε αυτός ο πληθυσμός αυξήθηκε ως μια γραμμική συνάρτηση του χρόνου, δηλαδή η συνάρτηση $t \rightarrow \sqrt{A(t)}$ είναι γραμμική (σχήμα 4.6). Ενώ για την ακτίνα $R(t)$ εύρους της παραπάνω περιοχής ισχύει $R(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{A(t)}$.

$$R(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{A(t)}.$$



Σχήμα 4. 7: Εξάπλωση των μοσχοβολιστών στην Ευρώπη [26].

Από το παραπάνω εξάγεται άμεσα το συμπέρασμα για τη σταθερή ταχύτητα διάδοσης, της οποίας το μέτρο, όπως απέδειξε ο *Skellam* είναι $2\sqrt{rD}$.

Η λύση της εξίσωσης (4.11) με αρχική συνθήκη $u(R, 0) = N_0\delta(x)$, όπου N_0 τα άτομα του πληθυσμού που εισβάλλουν αρχικά στο κέντρο των συντεταγμένων και $\delta(x)$ η συνάρτηση δ -Dirac, είναι:

$$u(x, t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(rt - \frac{x^2}{4Dt}\right),$$

⁵ Ο μοσχοβολιστής είναι ένα μεσαίου μεγέθους ημιυδρόβιο τρωκτικό εγγενές στη Βόρεια Αμερική και εισαγόμενο είδος σε μέρη της Ευρώπης, της Ασίας και της Νότιας Αμερικής.

όπου x η ακτινική απόσταση από το κέντρο των συντεταγμένων.

Θα δούμε τώρα τον τρόπο με τον οποίο προκύπτει η λύση αυτή. Αρχικά στην εξίσωση (4.11) θεωρούμε τον μετασχηματισμό:

$$u(x,t) = e^{rt} y(x,t), \quad (4.12)$$

με

$$\frac{\partial u}{\partial t} = r e^{rt} y(x,t) + e^{rt} \frac{\partial}{\partial t} y(x,t) \quad \text{και} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = e^{rt} \frac{\partial^2}{\partial x^2} y(x,t).$$

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στην σχέση (4.11), έχουμε:

$$r e^{rt} y(x,t) + e^{rt} \frac{\partial}{\partial t} y(x,t) - D e^{rt} \frac{\partial^2}{\partial x^2} y(x,t) = r e^{rt} y(x,t),$$

που απλοποιώντας θα δώσει την ομογενή εξίσωση διάχυσης

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

Σε αυτή τη μορφή, το πρόβλημα ισοδυναμεί με αυτό που μελετήθηκε στην ενότητα 2.3 καθώς θεωρητικά δεν υπάρχει περιορισμός στο χωρίο ενώ ο πληθυσμός σε πεπερασμένο χρόνο είναι αδύνατον να φτάσει στα άπειρα άκρα του. Ανάλογα λοιπόν με τα εξαγόμενα της ενότητας 2.3, η λύση του παραπάνω προβλήματος θα είναι:

$$y(x,t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right).$$

Υπό το πρίσμα του μετασχηματισμού (4.12) η λύση της (4.11) παίρνει την μορφή

$$u(x,t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(rt - \frac{x^2}{4Dt}\right),$$

που επαληθεύει όσα προαναφέρθηκαν.

Στο σημείο αυτό, αξίζει να αναφερθεί πως η παραπάνω λύση περιλαμβάνει και μία φάση εγκατάστασης, κατά την οποία δεν παρατηρείται επέκταση του εύρους. Για να

αποσαφηνίσουμε τον ισχυρισμό αυτόν, αρχικά θα πρέπει να ορίσουμε την συνάρτηση του εύρους.

Είναι φυσικά αποδεκτό πως για να παρατηρηθεί ένας πληθυσμός σε οποιοδήποτε σημείο x , απαιτείται το πλήθος του να ξεπερνά έναν συγκεκριμένο θετικό ουδό u_{thr} . Στο παραπάνω πρόβλημα θεωρήσαμε ότι ο αρχικός πληθυσμός N_0 έχει συμπυκνωθεί γύρω από ένα σημείο, την αρχή των αξόνων. Έτσι μας ενδιαφέρει να δούμε ποια χρονική στιγμή ο πληθυσμός αυτός θα ξεκινήσει να γίνεται αντιληπτός, δηλαδή, προσεγγιστικά, πότε θα γίνει αντιληπτό το $u(x,t)$ στα σημεία $x \neq 0$.

Για δεδομένο $u_{thr} > 0$ και $t > 0$ θα προσδιορίσουμε τη συνάρτηση του εύρους $|x_{thr}|$, λύνοντας την

$$u(x_{thr}(t), t) \equiv u_{thr},$$

ως εξής:

$$u_{thr} = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(rt - \frac{x_{thr}^2}{4Dt}\right).$$

Η παραπάνω σχέση γράφεται ισοδύναμα

$$\exp\left(\frac{4Drt^2 - x_{thr}^2}{4Dt}\right) = \frac{\sqrt{4\pi Dt}}{N_0} u_{thr},$$

και με τη χρήση λογάριθμου γίνεται

$$\frac{4Drt^2 - x_{thr}^2}{2Dt} = 2 \ln\left(\frac{u_{thr}}{N_0} \sqrt{4\pi Dt}\right).$$

Γράφοντας το δεύτερο μέλος σε άλλη μορφή έχουμε

$$\frac{4Drt^2 - x_{thr}^2}{2Dt} = \ln\left(4\pi D \left(\frac{u_{thr}}{N_0}\right)^2 t\right).$$

Έτσι το εύρος θα δίνεται από την σχέση:

$$|x_{thr}| = \left(4Drt^2 - 2Dt \ln \left(4\pi D \left(\frac{u_{thr}}{N_0} \right)^2 t \right) \right)^{\frac{1}{2}}.$$

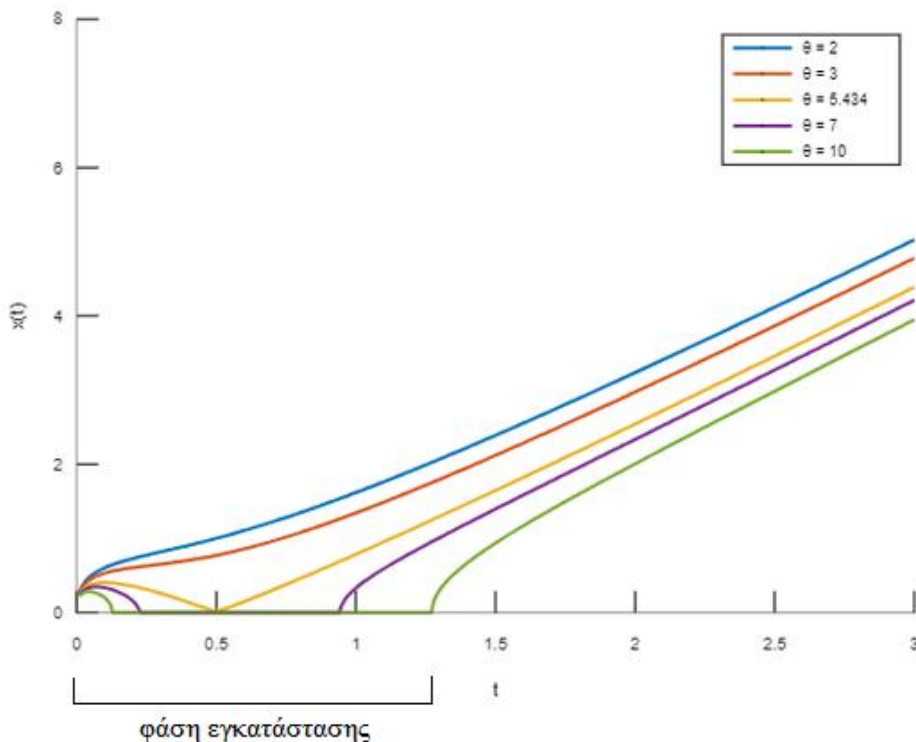
Αν θέσουμε στην τελευταία σχέση

$$\theta = 4\pi D \left(\frac{u_{thr}}{N_0} \right)^2,$$

προκύπτει η μορφή:

$$|x_{thr}| = \left(4Drt^2 - 2Dt \ln(\theta t) \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ όπου } u_{thr} < N_0 \frac{e^{rt}}{2\sqrt{\pi Dt}}.$$

Στο σχήμα 4.8 που ακολουθεί, δίνεται η γραφική παράσταση της προσέγγισης του εύρους του πληθυσμού για διάφορες τιμές του θ , με $D=1$ και $r=0,1$. Όπως μπορούμε να δούμε, για $\theta > 5.434$ ο πληθυσμός αρχικά παρατηρείται για σύντομο χρονικό διάστημα, έπειτα εισέρχεται σε φάση εγκατάστασης ώσπου στο τέλος γίνεται ανιχνεύσιμος. Επιπλέον φαίνεται πως για μεγάλους χρόνους t η κλίση παραμένει περίπου σταθερή.



Σχήμα 4. 8: Προσέγγιση του εύρους του πληθυσμού για τις διάφορες τιμές του θ

5. Η Αστάθεια Turing

Οι αρχές που διέπουν τον σχηματισμό χωρικών μοτίβων, όπως αυτά που συχνά παρατηρούμε στο δέρμα των ζώων ή στο κέλυφος των κοχυλιών, αποτελούν ένα ιδιαίτερα δημοφιλές αντικείμενο μελέτης στον τομέα της Μαθηματικής Βιολογίας. Πολυάριθμες θεωρίες έχουν προταθεί με σκοπό να αποκαλυφθούν οι μηχανισμοί που οδηγούν στον σχηματισμό των εν λόγω μοτίβων. Ωστόσο, λίγες από αυτές είναι τόσο καθολικές όσο η θεωρία των συστημάτων αντίδρασης-διάχυσης, που προτάθηκε για πρώτη φορά από τον *Alan Turing* το 1952.

Στο παρόν κεφάλαιο, παρουσιάζεται η θεωρία του *Turing* για την μορφογένεση και αναλύονται οι παράγοντες που οδηγούν σε *αστάθεια λόγω διάχυσης*, την λεγόμενη *αστάθεια Turing*, αλλά και στον σχηματισμό χωρικών μοτίβων. Ειδική αναφορά γίνεται στα μοτίβα που παρατηρούνται στους έμβριους οργανισμούς και σχηματίζονται κατά την διάρκεια της εμβρυογένεσης. Για τους παραπάνω σκοπούς μελετώνται δύο από τα πιο γνωστά συστήματα αντίδρασης-διάχυσης, το μοντέλο *Snakenberg*, για τον σχηματισμό χωρικών δομών, και το μοντέλο *Gierer-Meinhardt* για τα μοτίβα που αναπτύσσονται κατά την εμβρυογένεση. Η αριθμητική επίλυση και η δισδιάστατη απεικόνιση της συμπεριφοράς των μοντέλων πραγματοποιήθηκε με τη βοήθεια του λογισμικού *MATLAB*.

5.1 Το Μοντέλο Turing για την Μορφογένεση

Όπως προαναφέρθηκε η εξίσωση (4.1) αναφέρεται στη διάχυση μιας μόνο ουσίας. Υπάρχουν όμως περιπτώσεις, όπως για παράδειγμα η μελέτη δύο ή περισσότερων αλληλεπιδρώντων ειδών ή χημικών ουσιών, στις οποίες θα πρέπει να θεωρήσουμε μια γενίκευση της εξίσωσης αντίδρασης-διάχυσης που θα πάρει την εξής μορφή:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{f} + \nabla \cdot (D \nabla \mathbf{u}), \quad (5.1)$$

όπου το διάνυσμα $u_i(\mathbf{x}, t)$, $i = 1, \dots, m$ αντιπροσωπεύει την πυκνότητα ή την συγκέντρωση κάθε ουσίας, η οποία διαχέεται με τον αντίστοιχο συντελεστή διάχυσης D_i και αλληλεπιδρά σύμφωνα με την διανυσματική πηγή \mathbf{f} . Συνεπώς το D στην εξίσωση (5.1) θα

είναι ένας πίνακας, ο οποίος στην περίπτωση που η διάχυση κάθε ουσίας δεν επηρεάζεται από τις υπόλοιπες, θα είναι απλά ένας διαγώνιος πίνακας. Άρα στην αναλυτική της μορφή η σχέση (5.1) παριστάνει το παρακάτω σύστημα:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial u_m}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & D_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & D_{m-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & D_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla^2 u_1 \\ \nabla^2 u_2 \\ \vdots \\ \nabla^2 u_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} f_1(u_1, u_2, \dots, u_m) \\ f_2(u_1, u_2, \dots, u_m) \\ \vdots \\ f_m(u_1, u_2, \dots, u_m) \end{bmatrix}.$$

Το σύστημα αυτό είναι γνωστό ως *σύστημα αντίδρασης-διάχυσης*. Ένας τέτοιος μηχανισμός προτάθηκε από τον *A.M. Turing*, το 1952, ως μοντέλο για τη χημική βάση της μορφογένεσης σε μία εργασία, η οποία θεωρείται από τις σημαντικότερες στον τομέα της θεωρητικής Βιολογίας. Αυτό που παρατήρησε ο *Turing* είναι το γεγονός πως ένα σύστημα όπως το παραπάνω εμφανίζει *αστάθεια λόγω διάχυσης*, εάν η ομοιογενής κατάσταση ισορροπίας είναι σταθερή σε μικρές διαταραχές απουσία διάχυσης, αλλά ασταθής σε μικρές χωρικές διαταραχές όταν υπάρχει διάχυση. Έκανε δε ένα σημαντικό βήμα μπροστά, όταν υπέθεσε ότι αυτού του είδους η αστάθεια, γνωστή επίσης και ως *αστάθεια Turing* ευθύνεται για τον σχηματισμό μοτίβων που εμφανίζονται στη Βιολογία, όπως, π.χ., στην Εμβρυολογία.

Η θεωρία του *Turing* εξηγεί τους πολύπλοκους μηχανισμούς αυτό-οργάνωσης που ευθύνονται για τον σχηματισμό των εμβρυακών μοτίβων χρησιμοποιώντας απλές αντιδράσεις διαχεόμενων ουσιών. Τα συστήματα αυτά έχουν μερικές αξιοσημείωτες ιδιότητες. Πρώτον, μπορούν να σχηματίσουν πραγματικά αυτό-οργανωμένα μοτίβα απουσία αρχικών ασυμμετριών, δημιουργώντας έτσι εκ νέου πληροφορίες θέσης. Δεύτερον, μπορούν να δημιουργήσουν μια μεγάλη ποικιλία μοτίβων, μεταβάλλοντας απλώς τις παραμέτρους αντίδρασης και διάχυσης. Τρίτον, τα μοτίβα ανταποκρίνονται σε εξωτερικές διαταραχές και διαθέτουν την αξιοσημείωτη ικανότητα να αναγεννιούνται μετά από διαταραχές.

5.2 Μελέτη Ευστάθειας και Προϋποθέσεις για την Αστάθεια Turing

Στην παρούσα ενότητα συνέχεια θα παρουσιαστεί η βασική ιδέα πάνω στην οποία βασίστηκε η θεωρία του *Turing*. Για λόγους απλότητας, αλλά και για να μπορούμε να μιλήσουμε με συγκεκριμένους όρους, θα θεωρήσουμε ένα σύστημα δύο χημικών ουσιών που διαχέονται και αλληλεπιδρούν σε έναν μονοδιάστατο τομέα. Όπως θα αποδειχθεί παρακάτω, τα συμπεράσματα επεκτείνονται και σε περισσότερες διαστάσεις.

Ορίζουμε ως $u=u(x,t)$ και $v=v(x,t)$ τις συγκεντρώσεις των ουσιών, ενώ $f(u,v)$ θα είναι ο ρυθμός παραγωγής της συγκέντρωσης u και $g(u,v)$ ο ρυθμός παραγωγής της συγκέντρωσης v . Τέλος με D_1, D_2 θα συμβολίσουμε τους συντελεστές διάχυσης της πρώτης και της δεύτερης ουσίας αντίστοιχα.

Με βάση τα παραπάνω, θεωρούμε το ακόλουθο σύστημα, το οποίο θα έχει την μορφή:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v). \end{cases} \quad (5.2)$$

Απουσία διάχυσης, δηλαδή για $D_1 = D_2 = 0$ το παραπάνω δίνει:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v). \end{cases} \quad (5.3)$$

Σύμφωνα με τη θεωρία του *Turing* ένα σημείο ισορροπίας μπορεί να είναι ευσταθές ως προς το σύστημα (5.3) και ασταθές ως προς το σύστημα (5.2).

Για την μελέτη των συνθηκών που επιδρούν για να εμφανιστεί το φαινόμενο της αστάθειας λόγω διάχυσης αρχικά θα πρέπει να υποθέσουμε, σύμφωνα με την θεωρία του *Turing*, πως το σύστημα (5.3) θα παρουσιάζει κάποια θετική χωρικά ομοιόμορφη κατάσταση ισορροπίας (\bar{u}, \bar{v}) . Αυτό θα μπορεί να συμβεί στην περίπτωση που έχουμε πολύ καλή ανάμειξη των διαλυμάτων των χημικών ουσιών, άρα δεν πραγματοποιούνται διαδικασίες διάχυσης ($D_1 = D_2 = 0$). Για την σταθερή κατάσταση (\bar{u}, \bar{v}) εξ' ορισμού ισχύουν:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = 0,$$

εκ των οποίων προκύπτει:

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

Στο σημείο αυτό, και σύμφωνα με όσα προαναφέρθηκαν, μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε την επίδραση μικρών ανομοιογενών διαταραχών αυτής της κατάστασης ισορροπίας. Πιο συγκεκριμένα μας αφορούν εκείνες οι διαταραχές που ενισχύονται από τις συνδυασμένες δυνάμεις των διαδικασιών της αντίδρασης και της διάχυσης. Αν u' , v' είναι διαταραχές τέτοιου είδους, τότε για τις ομοιόμορφες κατανομές των συγκεντρώσεων (\bar{u}, \bar{v}) ισχύουν:

$$u(x, t) = \bar{u} + u'(x, t) \quad \text{και} \quad v(x, t) = \bar{v} + v'(x, t). \quad (5.4)$$

Εφόσον u' , v' αρκετά μικρές, έστω $|u'| \ll 1$ και $|v'| \ll 1$, δύναται να γραμμικοποιήσουμε το σύστημα (5.2) γύρω από την ομογενή κατάσταση ισορροπίας, κάνοντας χρήση του *αναπτύγματος Taylor* για τις $f(u, v)$ και $g(u, v)$.

$$f(u, v) = f(\bar{u}, \bar{v}) + \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} (u - \bar{u}) + \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} (v - \bar{v}) + \mathcal{O}\left((u - \bar{u})^2 + (v - \bar{v})^2\right),$$

$$g(u, v) = g(\bar{u}, \bar{v}) + \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} (u - \bar{u}) + \left. \frac{\partial g}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} (v - \bar{v}) + \mathcal{O}\left((u - \bar{u})^2 + (v - \bar{v})^2\right),$$

που λόγω των σχέσεων (5.4) και των συνθηκών $f(\bar{u}, \bar{v}) = g(\bar{u}, \bar{v}) = 0$ θα δώσουν

$$f(u, v) = u' \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} + \mathcal{O}\left((u')^2 + (v')^2\right),$$

$$g(u, v) = u' \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \left. \frac{\partial g}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})} + \mathcal{O}\left((u')^2 + (v')^2\right).$$

Στην περίπτωση των πολύ μικρών διαταραχών, την οποία μελετάμε, οι όροι ανώτερης τάξης των διαταραχών αυτών $\mathcal{O}\left((u')^2 + (v')^2\right)$ μπορούν να αγνοηθούν. Συνεπώς έχουμε:

$$f(u, v) = u' \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})},$$

$$g(u, v) = u' \frac{\partial g}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})},$$

συμφώνα με τα οποία το σύστημα (5.2) παίρνει προσεγγιστικά την εξής μορφή:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u' \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + u' \frac{\partial g}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}. \end{cases}$$

Αν επιπλέον λάβουμε υπόψη μας πως

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\bar{u} + u') = \frac{\partial u'}{\partial t}, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\bar{u} + u') = \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2}, \end{cases} \quad \text{και} \quad \begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\bar{v} + v') = \frac{\partial v'}{\partial t}, \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\bar{v} + v') = \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2}, \end{cases}$$

τότε καταλήγουμε στο παρακάτω σύστημα, το οποίο είναι γραμμικό:

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} + u' \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} + u' \frac{\partial g}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})} + v' \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}. \end{cases} \quad (5.5)$$

Για λόγους απλούστευσης θα θέσουμε στο σύστημα (5.5)

$$\begin{aligned} a &= \frac{\partial f}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \quad b = \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \\ c &= \frac{\partial g}{\partial u} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \quad d = \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(\bar{u}, \bar{v})}. \end{aligned}$$

Έτσι έχουμε

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} + au' + bv', \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} + cu' + dv'. \end{cases} \quad (5.6)$$

Μια πιο συμπαγής μορφή του παραπάνω που δίνεται με τη χρήση πινάκων είναι η:

$$\Psi_t = D\Psi_{xx} + M\Psi, \quad (5.7)$$

όπου:

$$\Psi = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix} \text{ και } M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Η εξίσωση (5.7) μπορεί να λυθεί με διάφορους τρόπους, ανάμεσα σε αυτούς είναι και η μέθοδος χωρισμού των μεταβλητών και μία πιθανή λύση της αποτελεί το παρακάτω σύνολο:

$$\Psi = \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \cos(kx) e^{\lambda t}. \quad (5.8)$$

Στην επιλογή λύσεων της παραπάνω μορφής οδηγούμαστε λόγω των ακόλουθων θεωρήσεων:

Αρχικά οι συναρτήσεις $\cos(kx)$ και $e^{\lambda t}$ που εμφανίζονται ως παράγοντες στις σχέσεις (5.8) παρουσιάζουν συσχέτιση με τις μερικές τους παραγώγους, τόσο ως προς το χώρο όσο και προς το χρόνο, γεγονός που συνάδει με τη μορφή της εξίσωσης (5.7). Έπειτα, η συνάρτηση $\cos(kx)$ λόγω της μορφής της (της παρουσίας μεγίστων και ελαχίστων), δύναται να περιγράψει ικανοποιητικά ένα πεδίο όπου υπάρχει εξάντληση ουσίας σε ορισμένα σημεία και συσσώρευση σε άλλα. Τέλος, η χρονική εξάρτηση της συνάρτησης $e^{\lambda t}$ ενδείκνυται για την αυξομείωση των εισαγόμενων διαταραχών.

Από τις σχέσεις (5.8) τώρα προκύπτουν:

$$\begin{cases} u' = A \cos(kx) e^{\lambda t}, \\ v' = B \cos(kx) e^{\lambda t}, \end{cases}$$

με

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = \lambda A \cos(kx)e^{\lambda t}, \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = \lambda B \cos(kx)e^{\lambda t}, \end{cases} \quad \text{και} \quad \begin{cases} \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} = -Ak^2 \cos(kx)e^{\lambda t}, \\ \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} = -Bk^2 \cos(kx)e^{\lambda t}. \end{cases}$$

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στο σύστημα (5.6) και απαλείφοντας τον όρο $\cos(kx)e^{\lambda t}$ έχουμε:

$$\begin{cases} A\lambda = -Ak^2 D_1 + aA + bB, \\ B\lambda = -Bk^2 D_2 + cA + dB. \end{cases}$$

Οι ποσότητες A , B , k και λ δεν μπορούν να είναι γνωστές εκ των προτέρων, όμως στην περίπτωση που μας ενδιαφέρουν πολύ μικρές διαταραχές που αυξάνονται με το χρόνο μπορούμε να γράψουμε τις παραπάνω ως γραμμικές εξισώσεις των A , B . Τότε έχουμε:

$$\begin{cases} (\lambda + k^2 D_1 - a)A - bB = 0, \\ -cA + (\lambda + k^2 D_2 - d)B = 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

Το παραπάνω, ως ομογενές γραμμικό σύστημα, έχει ως λύση την τετριμμένη $(A, B) = (0, 0)$, η οποία δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον καθώς στην περίπτωση αυτή θα έχουμε μηδενικές διαταραχές για κάθε χρονική στιγμή t .

Για την ύπαρξη μη τετριμμένης λύσης θα πρέπει η ορίζουσα του συστήματος (5.9) να είναι μηδενική. Έχουμε:

$$\det \begin{pmatrix} (\lambda + k^2 D_1 - a) & -b \\ -c & (\lambda + k^2 D_2 - d) \end{pmatrix} = 0,$$

εκ του οποίου προκύπτει:

$$(\lambda + k^2 D_1 - a)(\lambda + k^2 D_2 - d) - cb = 0,$$

που δίνει τη χαρακτηριστική εξίσωση του συστήματος (5.9):

$$\lambda^2 - (a + d - k^2 D_1 - k^2 D_2)\lambda + (a - k^2 D_1)(d - k^2 D_2) - cb = 0. \quad (5.10)$$

που απουσία διάχυσης για $D_1 = D_2 = 0$ δίνει

$$\lambda^2 - (a+d)\lambda + ad - cb = 0,$$

η οποία έχει ρίζες τις

$$\lambda = \frac{(a+d) \pm \sqrt{(a+d)^2 - 4(ad - cb)}}{2}.$$

Για να έχουμε λοιπόν μία γραμμικά ευσταθή κατάσταση ισορροπίας, θα πρέπει $\text{Re}(\lambda) < 0$, δηλαδή να ισχύουν τα εξής:

$$a+d < 0 \text{ αν } \lambda \in \mathbb{C},$$

$$a+d < 0, \text{ ad} - cb > 0 \text{ αν } \lambda \in \mathbb{R}.$$

Εξετάζοντας ξανά την (5.10) για $D_1, D_2 \neq 0$, μπορούμε να εκτιμήσουμε πώς η διάχυση μπορεί να δράσει ως αποσταθεροποιητική επιρροή. Πιο συγκεκριμένα, για να έχουμε μια ευσταθή κατάσταση ισορροπίας θα πρέπει να ισχύουν

$$(a+d - k^2 D_1 - k^2 D_2) < 0 \text{ και } (a - k^2 D_1)(d - k^2 D_2) - cb > 0.$$

Παραβιάζοντας μία από τις παραπάνω συνθήκες το σημείο ισορροπίας γίνεται ασταθές.

Παρατηρούμε πως για $a+d < 0$ η σχέση $(a+d - k^2 D_1 - k^2 D_2) < 0$ ισχύει εφόσον, όπως προαναφέρθηκε, $D_1, D_2 > 0$. Οπότε μένει να εξετάσουμε τα πρόσημο της παράστασης $(a - k^2 D_1)(d - k^2 D_2) - cb$ για τις διάφορες τιμές των παραμέτρων.

Έστω:

$$H = (a - k^2 D_1)(d - k^2 D_2) - cb.$$

Για να παρουσιαστεί αστάθεια λόγω διάχυσης θα πρέπει συνεπώς να είναι:

$$H < 0.$$

Για να μελετήσουμε το πρόσημο του H θεωρούμε το ανάπτυγμά του, το οποίο όπως θα δούμε είναι ένα τριώνυμο ως προς k^2 :

$$H(k^2) = D_1 D_2 (k^2)^2 - (dD_1 + aD_2)k^2 + ad - cb. \quad (5.11)$$

Έτσι η γραφική του παράσταση της $H(k^2)$ θα είναι μία παραβολή που λόγω του συντελεστή $D_1 D_2 > 0$ του μεγιστοβάθμιου όρου, θα στρέφει τα κοίλα προς τα πάνω (σχήμα 5.1). Συνεπώς η H θα παρουσιάζει ελάχιστο για:

$$k^2 = k_{\min}^2 = \frac{dD_1 + aD_2}{2D_1 D_2}.$$

Άρα, σύμφωνα με όσα προαναφέρθηκαν, θα πρέπει να είναι:

$$H(k_{\min}^2) < 0.$$

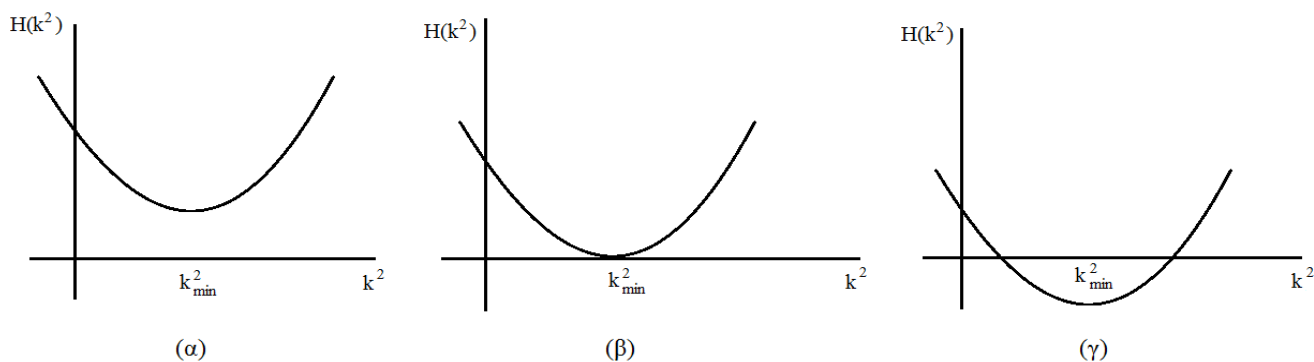
Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται με τη μελέτη της γραφικής παράστασης της $H(k^2)$. Παρατηρώντας το σχήμα 5.1 εξάγουμε τα εξής συμπεράσματα:

Αν $H(k^2) > 0$ για κάθε k^2 έχουμε ευσταθείς διαταραχές που δεν οδηγούν σε αστάθεια λόγω διάχυσης (σχήμα 5.1, α).

Αν $H(k^2) = 0$ για μοναδικό $k^2 = \frac{dD_1 + aD_2}{2D_1 D_2}$, ενώ για οποιαδήποτε άλλη τιμή του k^2

ισχύει $H(k^2) > 0$, έτσι δεν δύναται να προκληθεί αστάθεια λόγω διάχυσης (σχήμα 5.1, β).

Αν $H(k^2) < 0$ για ένα ολόκληρο διάστημα του k^2 , τότε οποιαδήποτε τιμή του k^2 ανήκει στο εν λόγω διάστημα μπορεί να οδηγήσει το σύστημα σε αστάθεια (σχήμα 5.1, γ).



Σχήμα 5. 1: Πρόσημο της παραβολής $H(k^2)$.

Επιστρέφουμε τώρα στη σχέση (5.11), απ' όπου για $k^2 = k_{\min}^2$ έχουμε

$$H(k_{\min}^2) < 0,$$

που ισοδύναμα γράφεται:

$$D_1 D_2 \left(\frac{dD_1 + aD_2}{2D_1 D_2} \right)^2 - (dD_1 + aD_2) \frac{dD_1 + aD_2}{2D_1 D_2} + ad - cb < 0.$$

Απλοποιώντας η παραπάνω σχέση παίρνει την μορφή

$$ad - cb - \frac{(dD_1 + aD_2)^2}{4D_1 D_2} < 0,$$

η οποία μπορεί να διατυπωθεί και ως εξής:

$$dD_1 + aD_2 > 2\sqrt{D_1 D_2 (ad - cb)} > 0.$$

Όταν λοιπόν ικανοποιείται η παραπάνω συνθήκη θα έχουμε αστάθεια λόγω διάχυσης, η οποία προκύπτει μόνο αν οι συντελεστές διάχυσης είναι άνισοι. Σε αντίθετη περίπτωση για $D_1 = D_2 = D$ από την $dD_1 + aD_2 > 2\sqrt{D_1 D_2 (ad - cb)} > 0$ διαιρώντας με D , προκύπτει $d + a > 0$ που είναι άτοπο σύμφωνα με τα παραπάνω συμπεράσματα.

Συνοψίζοντας τα συμπεράσματα μας, οι προϋποθέσεις για να παρουσιάσει ένα σύστημα όπως το (5.2) αστάθεια λόγω διάχυσης είναι:

$$\begin{cases} D_1 \neq D_2, \\ a + d < 0, \\ dD_1 + aD_2 > 2\sqrt{D_1D_2(ad - cb)} > 0. \end{cases} \quad (5.12)$$

5.3 Αστάθεια Turing σε Δισδιάστατο Πεπερασμένο Χωρίο

Η ποιοτική μελέτη των συστημάτων αντίδρασης-διάχυσης έχει μέχρι στιγμής περιοριστεί σε μονοδιάστατους τομείς άπειρου, θεωρητικά, μήκους. Στην παρούσα ενότητα θα επεκτείνουμε την μελέτη μας σε υψηλότερες διαστάσεις, παρατηρώντας παράλληλα τα νέα χαρακτηριστικά που προκύπτουν όταν το σύστημα περιορίζεται σε ένα πεπερασμένο χωρίο με αδιαπέραστα όρια. Για παράδειγμα, ένα ορθογώνιο παραλληλόγραμμο με διαστάσεις $L_x \times L_y$.

Θεωρούμε έτσι το σύστημα:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \nabla^2 u + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \nabla^2 v + g(u, v), \end{cases} \quad (5.13)$$

όπου, όμοια με πριν, $u=u(x,t)$ και $v=v(x,t)$ οι συγκεντρώσεις των ουσιών, $f(u,v)$, $g(u,v)$ ο ρυθμός παραγωγής των u , v αντίστοιχα, D_1 , D_2 οι θετικοί συντελεστές διάχυσης και (\bar{u}, \bar{v}) η ευσταθής κατάσταση ισορροπίας του συστήματος.

Εισάγουμε ξανά τις μικρές διαταραχές u' , v' για τις οποίες ισχύουν

$$u(x,t) = \bar{u} + u'(x,t) \quad \text{και} \quad v(x,t) = \bar{v} + v'(x,t), \quad \text{με} \quad |u'| \ll 1, \quad |v'| \ll 1.$$

Η γραμμικοποίηση του συστήματος (5.13) προκύπτει ανάλογα με αυτή του συστήματος

(5.2) με τους όρους $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}$ να αντικαθίσταται στην παρούσα μελέτη από τους $D_1 \nabla^2 u$

και $D_2 \nabla^2 v$ αντίστοιχα. Έτσι έχουμε το σύστημα:

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = D_1 \left(\frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u'}{\partial y^2} \right) + au' + bv', \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = D_2 \left(\frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v'}{\partial y^2} \right) + cu' + dv', \end{cases}$$

με

$$\begin{aligned} a &= \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}, & b &= \left. \frac{\partial f}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \\ c &= \left. \frac{\partial g}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}, & d &= \left. \frac{\partial g}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}, \end{aligned}$$

όπου θέτουμε

$$\psi = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix} \text{ και } M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},$$

ώστε να πάρει τη μορφή:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) + M \psi. \quad (5.14)$$

Όπως προαναφέρθηκε, τα όρια του χωρίου θα είναι αδιαπέραστα, δηλαδή στα άκρα του θα έχουμε μηδενικές συνθήκες ροής, αλλιώς γνώστες ως ομογενείς συνθήκες *Neumann*:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= 0 \text{ για } x = 0, x = L_x, \\ \frac{\partial v}{\partial x} &= 0 \text{ για } y = 0, y = L_y, \end{aligned}$$

εκ των οποίων και για $\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} = 0$ προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{\partial u'}{\partial x} &= 0 \text{ για } x = 0, x = L_x, \\ \frac{\partial v'}{\partial x} &= 0 \text{ για } y = 0, y = L_y. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Οπότε προκύπτει το Πρόβλημα Συνοριακών Τιμών (5.14), (5.15).

Για τον προσδιορισμό της λύσης θα χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών. Έστω:

$$\psi(x, y; t) = S(x, y)T(t) \neq 0.$$

Αντικαθιστώντας στην σχέση (5.14) έχουμε

$$S(x, y)\dot{T}(t) = DT(t) \left(\frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial y^2} \right) + MS(x, y)T(t),$$

ή διαιρώντας με $DS(x, y)T(t)$:

$$\frac{1}{D} \left(\frac{\dot{T}(t)}{T(t)} - M \right) = \frac{\left(\frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial y^2} \right)}{S(x, y)} = -\lambda,$$

εκ του οποίου προκύπτουν

$$\dot{T}(t) = (M - \lambda D)T(t) \quad \text{και} \quad \frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S(x, y)}{\partial y^2} = -\lambda S(x, y).$$

Στην τελευταία εξίσωση επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία χωρισμού των μεταβλητών, για:

$$S(x, y) = W(x)V(y),$$

όμοια με πριν θα έχουμε

$$\frac{\ddot{W}(x)}{W(x)} = -\lambda - \frac{\ddot{V}(y)}{V(y)} = -\mu.$$

Οι συνοριακές συνθήκες (5.15) τώρα, δίνουν:

$$\dot{W}(0) = \dot{W}(L_x) = 0 \quad \text{και} \quad \dot{V}(0) = \dot{V}(L_y) = 0.$$

Έτσι δημιουργούνται δύο επιμέρους προβλήματα ιδιοτιμών

$$\begin{cases} \ddot{W}(x) + k_1^2 W(x) = 0, \\ \dot{W}(0) = \dot{W}(L_x) = 0, \end{cases} \quad \text{και} \quad \begin{cases} \ddot{V}(y) + k_2^2 V(y) = 0, \\ \dot{V}(0) = \dot{V}(L_y) = 0, \end{cases}$$

όπου $k_1^2 = \mu > 0$, $k_2^2 = \lambda - \mu > 0$ και $\lambda = k^2 = k_1^2 + k_2^2 > 0$.

Το πρόβλημα για το W δίνει:

$$W(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x),$$

με

$$\dot{W}(L_x) = 0 \Leftrightarrow -A \sin(k_1 x) = 0,$$

απ' όπου με την επιβολή των συνοριακών συνθηκών έχουμε:

$$\dot{W}(x) = 0 \Leftrightarrow B = 0 \text{ και } \dot{W}(L_x) = 0 \Leftrightarrow -A \sin(k_1 x) = 0.$$

Θα πρέπει $A \neq 0$ καθώς αναζητούμε μη τετριμμένη λύση, οπότε

$$k_1 = \frac{n\pi}{L_x}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Όμοια λειτουργούμε και στο πρόβλημα για το V . Συνεπώς έχουμε:

$$W_n(x) = \cos\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \text{ και } V_m(y) = \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right).$$

Επιπλέον η συνήθης διαφορική εξίσωση για το T

$$\dot{T}(t) = (M - \lambda D)T(t),$$

θα δώσει:

$$T(t) = e^{(M - \lambda D)t}.$$

Συνεπώς η γενική λύση θα είναι:

$$\psi(x, y; t) = \sum_{n=0, m=0}^{\infty} c_{n,m} e^{(M - \lambda_{n,m} D)t} \cos\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right).$$

Καθώς οι διαστάσεις και η γεωμετρία του πεδίου δεν επηρεάζουν τις συνθήκες κάτω από τις οποίες ένα σύστημα θα παρουσιάσει αστάθεια λόγω διάχυσης, τα συμπεράσματα της

μελέτης της μονοδιάστατης περίπτωσης θα έχουν και εδώ ισχύ. Δηλαδή για να έχουμε τέτοιου είδους αστάθεια θα πρέπει:

$$H(k_{\min}^2) < 0,$$

με

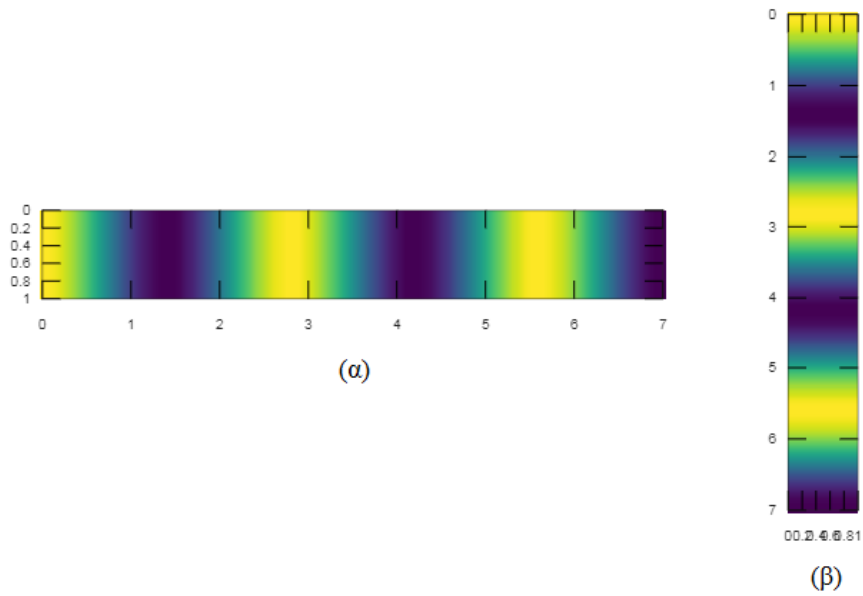
$$k^2 = k_1^2 + k_2^2 = \pi^2 \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right).$$

Άρα θα πρέπει να ικανοποιείται η ανισότητα:

$$k_1^2 < \pi^2 \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right) < k_2^2. \quad (5.16)$$

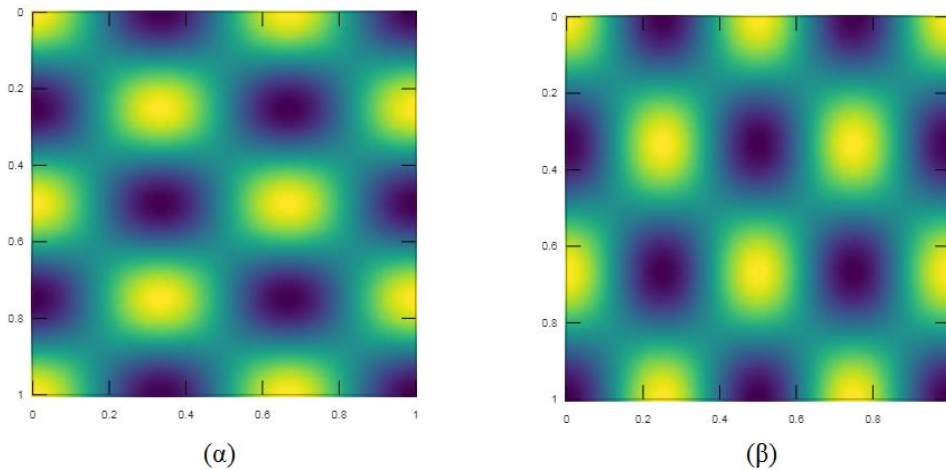
Παρατηρώντας την παραπάνω σχέση μπορούμε να εξάγουμε δύο σημαντικά συμπεράσματα. Αρχικά η ανισότητα δεν μπορεί να ικανοποιείται για μη μηδενικά n , m και σταθερές τιμές των παραμέτρων του συστήματος αντίδρασης διάχυσης, όταν τα L_x , L_y θα είναι αρκετά μικρά. Υπάρχει δηλαδή ένα ελάχιστο μέγεθος χωρίου, το οποίο επιτρέπει τον σχηματισμό μοτίβων. Έπειτα, η αύξηση του μεγέθους του χωρίου θα επιφέρει αύξηση και στην πολυπλοκότητα του μοτίβου. Αυτό συμβαίνει πρώτον γιατί, όπως φανερώνει το χαμηλότερο κομμάτι της ανισότητας, αυξάνεται ο ελάχιστος επιτρεπτός αριθμός κύματος k , κατά συνέπεια θα υπάρχουν περισσότερες κορυφές και κοιλάτες. Δεύτερον καθώς αυξάνονται τα L_x , L_y αυξάνεται και ο αριθμός των βιώσιμων ακεραίων n , m δηλαδή αυξάνεται το εύρος των επιτρεπτών κυμάτων.

Τα παραπάνω προφανώς ισχύουν και για την μονοδιάστατη περίπτωση. Αν εμβαθύνουμε όμως στο κομμάτι των δύο διαστάσεων μπορούμε επιπλέον να εξάγουμε συμπεράσματα και για το είδος του μοτίβου που αναλογεί σε κάθε μέγεθος ορθογωνίου παραλληλογράμμου $[0, L_x] \times [0, L_y]$. Για παράδειγμα, αν έχουμε ένα πολύ μακρύ και πολύ λεπτό χωρίο, τότε από την σχέση (5.16) προκύπτει $m=0$. Συνεπώς οποιαδήποτε δομή με χωρικά μοτίβα θα ποικίλλει μόνο στην κατεύθυνση x , δηλαδή το σύστημα θα εμφανίζει ρίγες. Όμοια, αν έχουμε ένα πολύ στενό και ψηλό χωρίο, θα είναι $n=0$ και η δομή των χωρικών μοτίβων θα ποικίλλει μόνο στην κατεύθυνση y (σχήμα 5.2).



Σχήμα 5. 2: Χωρικά μοτίβα με ρίγες.
 Περίπτωση (α) μακρύ και λεπτό χωρίο. Περίπτωση (β) στενό και ψηλό χωρίο.

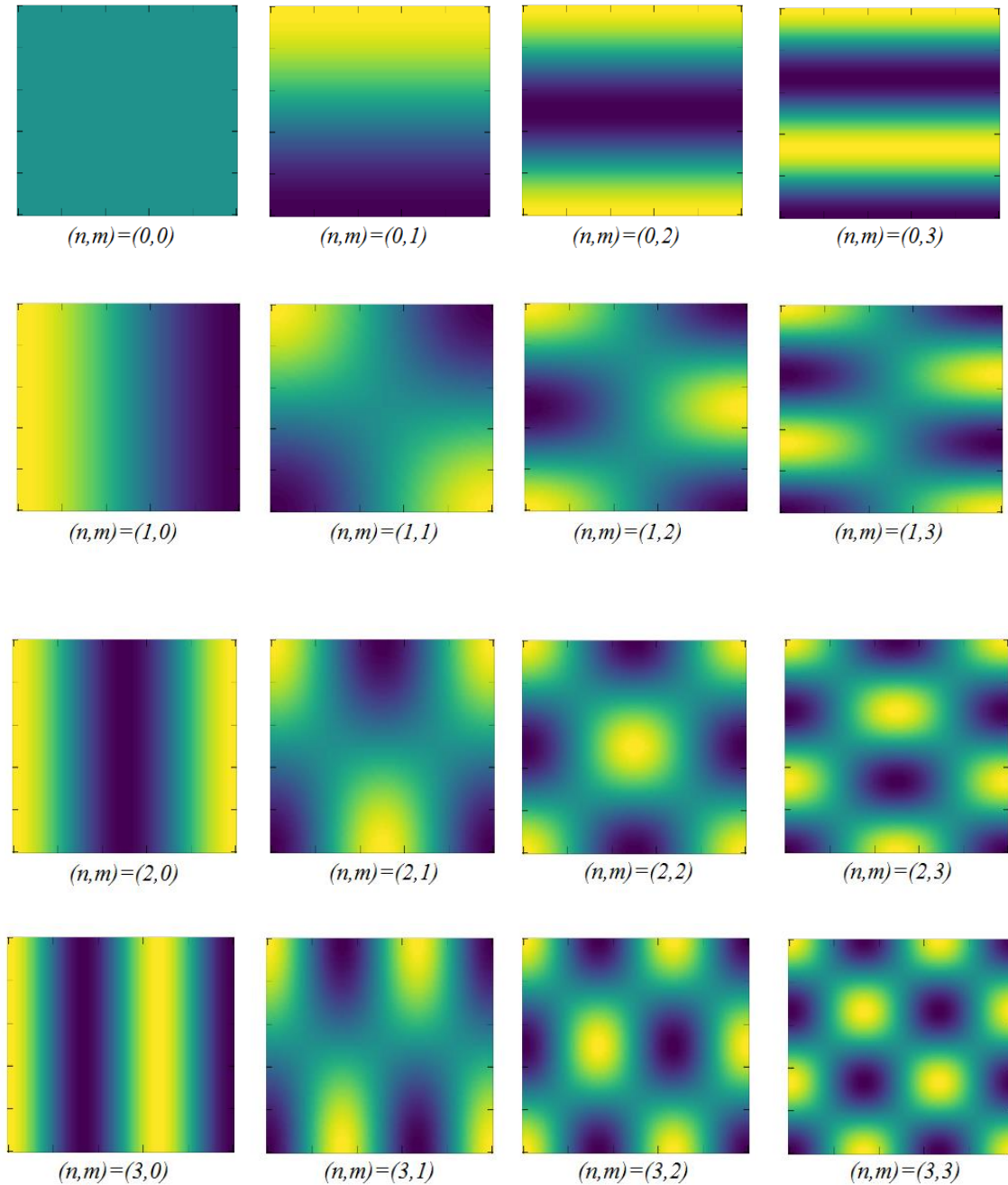
Σε άλλη περίπτωση, αν έχουμε L_x και L_y πολύ μεγάλα, η ανισότητα (5.16) μπορεί να ισχύει για n, m ταυτόχρονα μη μηδενικά και τότε το χωρικό μοτίβο θα αποτελείται από κηλίδες (σχήμα 5.3).



Σχήμα 5. 3: Χωρικά μοτίβα με κηλίδες.

Συνοψίζοντας, στο παρακάτω σχήμα παρουσιάζονται οι γραφικές απεικονίσεις των ιδιοσυναρτήσεων $S(x, y)$, σε δισδιάστατο χωρίο διαστάσεων $L_x = L_y = 1$, για τις

διάφορες τιμές των ακεραίων (n,m) , οι οποίες, όπως μπορούμε να δούμε, επαληθεύουν τα συμπεράσματά μας. Τα γραφήματα που ακολουθούν, όπως και τα παραπάνω, δημιουργήθηκαν με τη βοήθεια του λογισμικού *MATLAB*.



Σχήμα 5. 4: Γραφική απεικόνιση των ιδιοσυναρτήσεων της γενικής λύσης του συστήματος διάχυσης-αντίδρασης σε δισδιάστατο πεπερασμένο χωρίο με ομογενείς ΣΣ *Neumann* για τις διάφορες τιμές των ακεραίων (n,m) .

Βέβαια στην περίπτωση των δύο διαστάσεων ίσως να έχουμε και το θέμα του εκφυλισμού. Για παράδειγμα, για $L_x = L_y = 1$, αν ένα σύστημα είναι ασταθές για $k^2 = 25\pi^2$ τότε, τόσο τα ζεύγη $(0,5)$, $(5,0)$ που αντιστοιχούν σε ρίγες, όσο και τα $(3,4)$, $(4,3)$ που αντιστοιχούν σε κηλίδες θα επαληθεύουν την ανισότητα. Το μοτίβο σε αυτή την περίπτωση καθορίζεται από τις αρχικές συνθήκες και τη μορφή των μη γραμμικών όρων και ενδεχομένως να είναι ένας συνδυασμός και των δύο περιπτώσεων.

5.4 Σχηματισμός Μοτίβων-Το μοντέλο Schnakenberg

Όπως έχει προαναφερθεί η αστάθεια Turing που παρουσιάζεται σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης μπορεί να προκαλέσει τον σχηματισμό μοτίβων. Χρησιμοποιώντας τα εξαγόμενα της ενότητας 5.2, μπορούμε τώρα να ερμηνεύσουμε την σύνδεση αυτή.

Από τη συνθήκη $a + d < 0$ προκύπτει πως ένα τουλάχιστον από τα a , d θα είναι αρνητικό. Αν υποθέσουμε πως αυτό είναι το d , τότε από την ανισότητα $dD_1 + aD_2 > 0$ θα είναι οπωσδήποτε $a > 0$.

Η ερμηνεία των παραπάνω είναι η εξής:

Το γεγονός ότι $a = \left. \frac{\partial f}{\partial u} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}$ θετικό, υποδεικνύει πως η πρώτη χημική ουσία προωθεί ή ενεργοποιεί τον σχηματισμό της. Για τον λόγο αυτό ονομάζεται ενεργοποιητής.

Έπειτα $d = \left. \frac{\partial g}{\partial v} \right|_{(\bar{u}, \bar{v})}$ αρνητικό, άρα η δεύτερη χημική ουσία αναστέλλει τον ρυθμό σχηματισμού της. Θα ονομάσουμε αυτή την ουσία αναστολέα.

Σε συνέχεια των παραπάνω, έχουμε λοιπόν σε κάθε περίπτωση $ad < 0$. Συνεπώς για να έχει ισχύ η ανισότητα $ad - cb > 0$ θα πρέπει $cb < 0$. Αυτό σημαίνει πως $c < 0$ ή $b < 0$ και προφανώς οι δύο ανισότητες δεν μπορούν να ισχύουν ταυτόχρονα. Έχουμε λοιπόν δύο πιθανές περιπτώσεις, που η κάθε μία δίνει ένα χαρακτηριστικό μοτίβο προσήμου στην Ιακωβιανή ορίζουσα M .

Στην πρώτη περίπτωση για $b < 0$ και $c > 0$ συμβολικά έχουμε

$$M = \begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix}$$

και το σύστημα ονομάζεται σύστημα διάχυσης *ενεργοποιητή-αναστολέα*.

Στην δεύτερη περίπτωση για $b > 0$ και $c < 0$ συμβολικά έχουμε

$$M = \begin{pmatrix} + & + \\ - & - \end{pmatrix}$$

και το σύστημα ονομάζεται σύστημα διάχυσης *θετικής ανάδρασης*.

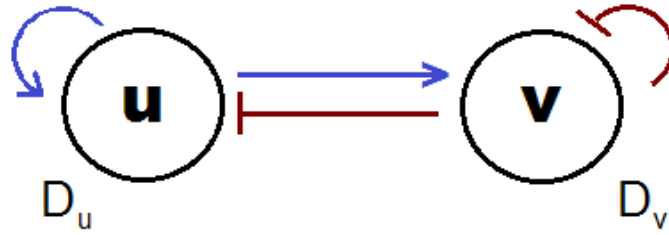
Δηλαδή ένα σύστημα αντίδρασης-διάχυσης δύο χημικών ουσιών που αλληλεπιδρούν θα εμφανίσει *αστάθεια Turing* αν εμπίπτει σε μία από τις παραπάνω περιπτώσεις.

Επιπλέον, $a < -d$ άρα $-\frac{d}{a} > 1$, εφόσον $a > 0$. Έτσι η σχέση $dD_1 + aD_2 > 0$ δίνει

$\frac{D_2}{D_1} > -\frac{d}{a} > 1$, δηλαδή $D_2 > D_1$ που σημαίνει πως για να έχουμε αστάθεια λόγω διάχυσης

οι ουσίες θα πρέπει να διαχέονται με διαφορετικό ρυθμό. Στην περίπτωσή μας, ο αναστολέας θα διαχέεται ταχύτερα από τον ενεργοποιητή.

Αν συνοψίσουμε όλα τα παραπάνω προκύπτει η ακόλουθη εικόνα για το πώς προκαλείται η *αστάθεια Turing*. Ας πάρουμε την πρώτη περίπτωση, του συστήματος *ενεργοποιητή-αναστολέα*. Ως αποτέλεσμα τυχαίων διαταραχών, δημιουργείται μια μικρή μέγιστη συγκέντρωση του ενεργοποιητή σε κάποια τοποθεσία, η οποία προκαλεί την ενεργοποίηση του αναστολέα. Στη συνέχεια, ο αναστολέας μειώνει την αύξηση της συγκέντρωσης κοντά στην κορυφή του ενεργοποιητή. Ωστόσο, ο αναστολέας διαχέεται πιο γρήγορα από τον ενεργοποιητή, επομένως δεν μπορεί να ελέγξει την τοπική παραγωγή ενεργοποιητή. Έτσι η κορυφή θα μεγαλώσει ενώ η περιοχή που περιβάλλει την αρχική κορυφή θα περιέχει επαρκή επίπεδα αναστολής για την αποτροπή περαιτέρω κορυφών ενεργοποίησης. Στο σχήμα 5.5 που ακολουθεί αναπαριστάνεται η λειτουργία ενός συστήματος αυτού του είδους. Όπως μπορούμε να δούμε, ο ενεργοποιητής u προάγει την παραγωγή του εαυτού του και του αναστολέα v , ενώ ο αναστολέας περιορίζει την παραγωγή ενεργοποιητή.



Σχήμα 5. 5: Σχηματική αναπαράσταση ενός συστήματος αυτό-οργάνωσης ενεργοποιητή-αναστολέα. Η μπλε γραμμή με το βέλος δηλώνει ενεργοποίηση ενώ η κόκκινη γραμμή με την ράβδο αναστολή.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, μπορεί πλέον εύκολα να γίνει αντιληπτό πως η *αστάθεια λόγω διάχυσης* μπορεί να οδηγήσει στον σχηματισμό χωρικών μοτίβων. Ας δούμε όμως πιο συγκεκριμένα πως προκύπτουν τα χωρικά μοτίβα σε ένα σύστημα ενεργοποιητή-αναστολέα της μορφής (5.2) με όρους αντίδρασης

$$\begin{cases} f(u, v) = a - u + u^2v, \\ g(u, v) = b - u^2v. \end{cases}$$

Σε ολοκληρωμένη μορφή το μοντέλο γράφεται:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + a - u + u^2v, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + b - u^2v, \end{cases} \quad (5.17)$$

και είναι γνωστό ως *μοντέλο Schnakenberg* [29]. Το συγκεκριμένο μοντέλο είναι ένα από τα πιο γνωστά μοντέλα χημικής αντίδρασης-διάχυσης και χρησιμοποιείται ευρέως στην μαθηματική μοντελοποίηση ποικίλων βιολογικών διαδικασιών. Οφείλει το όνομά του στον γερμανό φυσικό *Jürgen Schnakenberg*, ο οποίος το εισήγαγε το 1979.

Για την αριθμητική επίλυση του εν λόγω συστήματος θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος των *πεπερασμένων διαφορών*, η οποία θα υλοποιηθεί μέσω του λογισμικού *MATLAB*. Στην αριθμητική αυτή μέθοδο επίλυσης ΜΔΕ η χρονική και η χωρική παράγωγος προσεγγίζονται με πεπερασμένες διαφορές και το διάστημα του χώρου και του χρόνου διακριτοποιείται ομοιόμορφα ως εξής:

$$\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y], \quad \Psi = [0, T],$$

$$0 = x_0, \dots, x_{N-1} = L_x, \quad 0 = y_0, \dots, y_{M-1} = L_y, \quad 0 = t_0, \dots, t_{F-1} = T,$$

με

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i = \Delta y = y_{j+1} - y_j = h, \text{ για κάθε } i \in \{0, \dots, N-2\}, j \in \{0, \dots, M-2\},$$

$$\Delta t = t_{n+1} - t_n = k, \text{ για κάθε } n \in \{0, \dots, F-2\}.$$

Αν $u_{i,j}^n$ και $v_{i,j}^n$ αντιπροσωπεύουν τις αριθμητικές προσεγγίσεις των $u(x_i, y_j, t_n)$ και $v(x_i, y_j, t_n)$ αντίστοιχα, τότε

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{k},$$

$$\nabla^2 u = \frac{u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n}{h^2}.$$

Οι παραπάνω σχέσεις μετασχηματίζουν το σύστημα (5.17) στην μορφή:

$$\begin{cases} u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \frac{D_1 k}{h^2} (u_{i+1,j}^n + u_{i-1,j}^n + u_{i,j+1}^n + u_{i,j-1}^n - 4u_{i,j}^n) + k (a - u_{i,j}^n + (u_{i,j}^n)^2 v_{i,j}^n), \\ v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^n + \frac{D_2 k}{h^2} (v_{i+1,j}^n + v_{i-1,j}^n + v_{i,j+1}^n + v_{i,j-1}^n - 4v_{i,j}^n) + k (b - (u_{i,j}^n)^2 v_{i,j}^n). \end{cases}$$

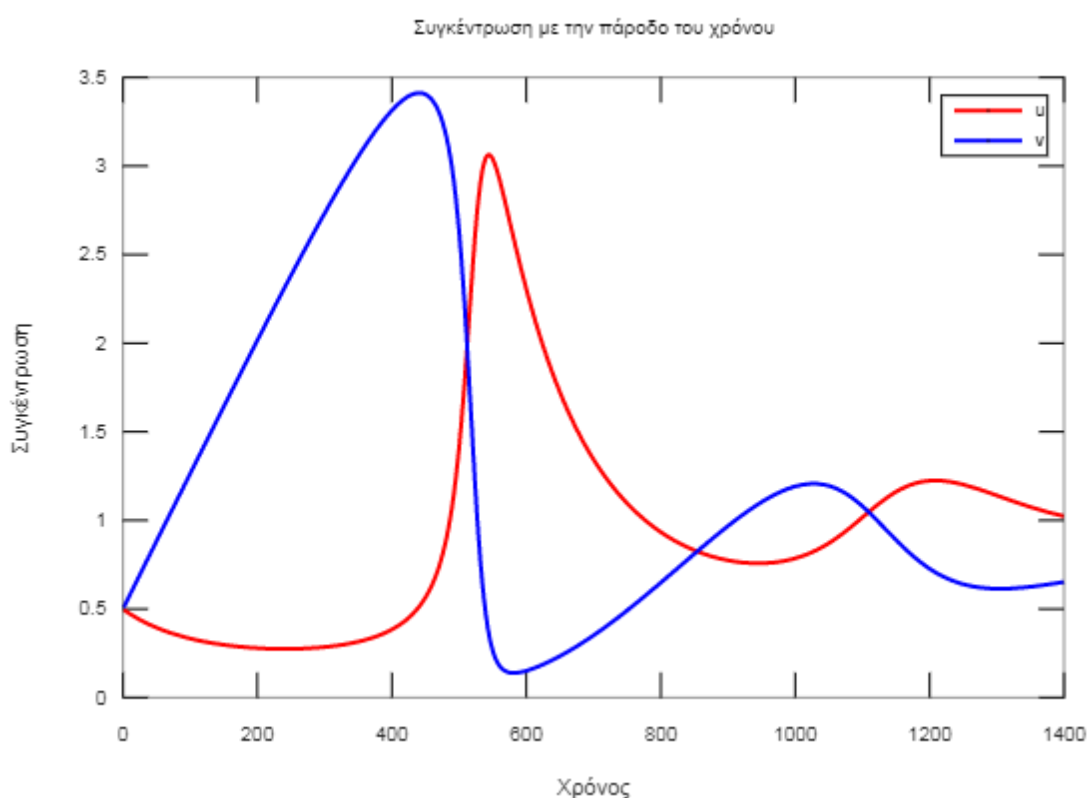
Η αριθμητική προσομοίωση θα πραγματοποιηθεί επιβάλλοντας συνοριακές συνθήκες μηδενικής ροής τύπου *Neumann*, οι οποίες διακριτοποιούνται στο $\partial\Omega$ σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{h} = \frac{v_{i+1,j}^n - v_{i,j}^n}{h} = \frac{u_{i,j+1}^n - u_{i,j}^n}{h} = \frac{v_{i,j+1}^n - v_{i,j}^n}{h} = 0.$$

Οι αρχικές συνθήκες αφορούν την εισαγωγή μικρών τυχαίων διαταραχών στις αρχικές συγκεντρώσεις των u και v που επιτυγχάνονται μέσω της συνάρτησης $randn(N,N)$, η οποία παράγει τυχαίες τιμές από μια κανονική κατανομή με μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1.

Επιπλέον, για τις τιμές των παραμέτρων θεωρούμε $D_1 = 1$, $D_2 = 40$, $a = 0.1$ και $b = 0.9$. Τα αποτελέσματα της παραπάνω μελέτης οπτικοποιούνται, τόσο στη μία όσο και στις δύο διαστάσεις, με τη βοήθεια των διαγραμμάτων που ακολουθούν.

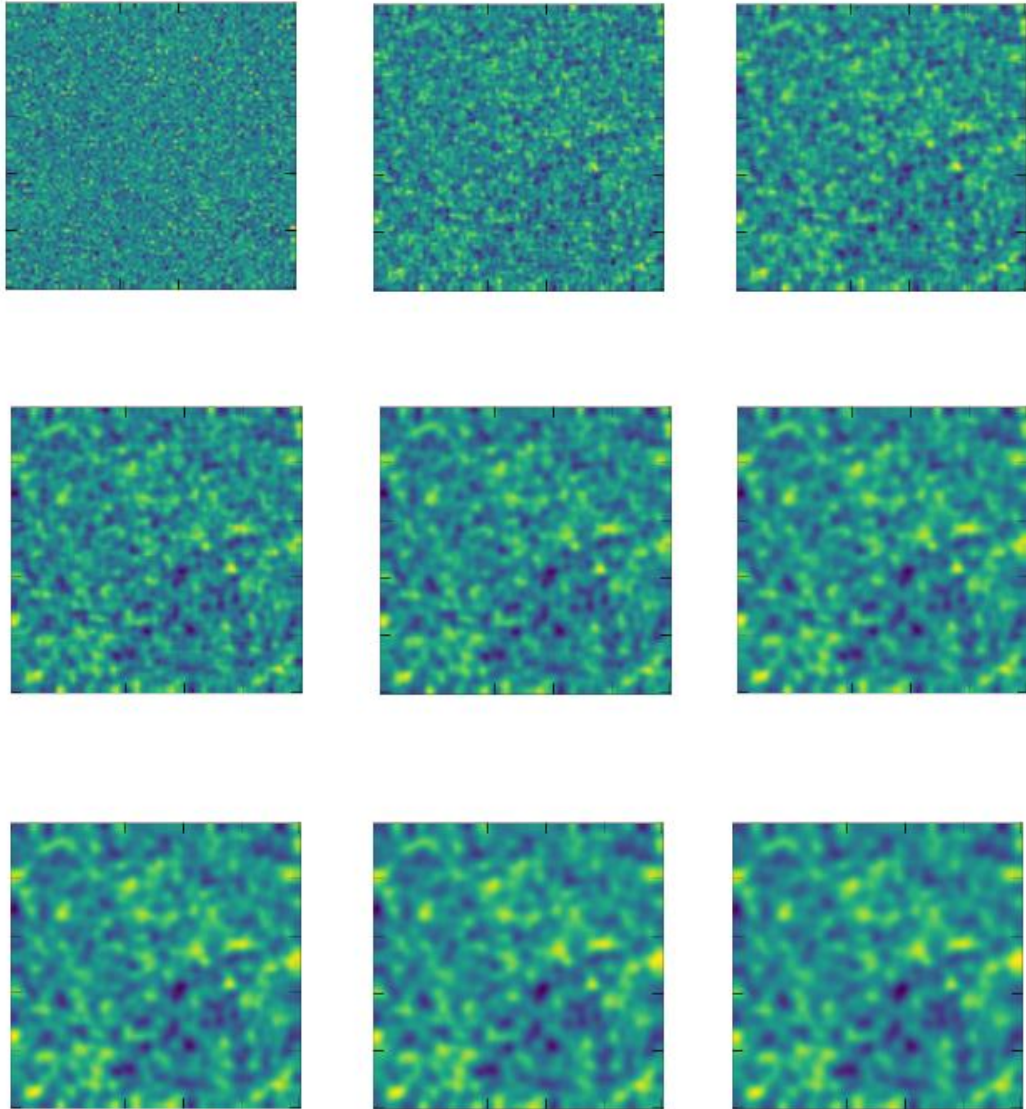
Στο σχήμα 5.6, μπορούμε να δούμε την γραφική παράσταση των συγκεντρώσεων των ουσιών ενεργοποιητή και αναστολέα u και v αντίστοιχα σε σχέση με τον χρόνο t . Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε, η συγκέντρωση του ενεργοποιητή αυξάνεται κατά τα χρονικά διαστήματα που η συγκέντρωση του αναστολέα μειώνεται και το αντίστροφο, καταδεικνύοντας έτσι την αντίστροφη συσχέτιση των συγκεντρώσεων των δύο ουσιών.



Σχήμα 5. 6: Γραφική αναπαράσταση των συγκεντρώσεων ενεργοποιητή και αναστολέα σε σχέση με τον χρόνο στο μοντέλο *Schnakenberg*.

Για να δούμε αν το παραπάνω μοντέλο οδηγεί στον σχηματισμό χωρικών μοτίβων αρκεί να κάνουμε την δισδιάστατη προσομοίωση του. Για να επιτευχθεί αυτό, δημιουργούμε τα δισδιάστατα γραφήματα που προκύπτουν από την παραπάνω μέθοδο αριθμητικής επίλυσης. Χρησιμοποιώντας δηλαδή ξανά την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών και διατηρώντας τις ίδιες αρχικές και συνοριακές συνθήκες, αλλά και τις τιμές των παραμέτρων που προαναφέρθηκαν, επιλύουμε αριθμητικά το πρόβλημα σε ένα χωρίο

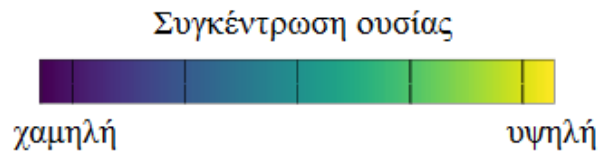
μήκους $L_x = L_y = 100$. Από την αριθμητική αυτή επίλυση προκύπτουν τα παρακάτω γραφήματα για τη συγκέντρωση του ενεργοποιητή u , που αντιστοιχούν σε διακριτά χρονικά βήματα της αριθμητικής προσομοίωσης, η οποία διεξήχθη για συνολικό χρονικό διάστημα $T=1000$.



Σχήμα 5. 7: Δισδιάστατη προσομοίωση του μοντέλου *Schnakenberg* σε διακριτά χρονικά βήματα.

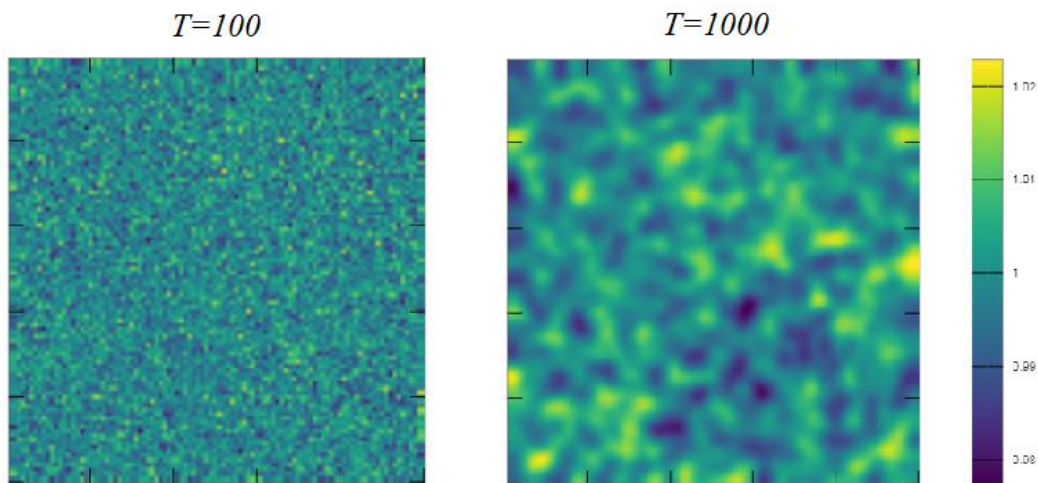
Όπως μπορούμε να δούμε το σύστημα αρχικά δεν φαίνεται να εμφανίζει κάποια μορφή χωρικής δομής. Ωστόσο με την πάροδο του χρόνου αυτό αλλάζει, καθώς τα μοτίβα αρχίζουν σταδιακά να διαφαίνονται, ενώ γίνονται όλο και πιο ξεκάθαρα προς το τέλος της

προσομοίωσης. Η συγκέντρωση του μορφογόνου u στα γραφήματα απεικονίζεται σύμφωνα με την παρακάτω χρωματική κλίμακα.



Σχήμα 5. 8: Χρωματική κλίμακα-δείκτης αναφοράς συγκέντρωσης της ουσίας u στο μοντέλο *Snakenberg*.

Τέλος, για την καλύτερη σύγκριση της αρχικής και τελικής μορφής του διαγράμματος, στο σχήμα 5.9 που ακολουθεί, παραθέτονται τα γραφήματα τις χρονικές στιγμές $T=100$ και $T=1000$ καθώς και ο δείκτης αναφοράς της συγκέντρωσης.



Σχήμα 5. 9: Σύγκριση διαγραμμάτων που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Snakenberg* για τις χρονικές στιγμές $T=100$ και $T=1000$.

5.5 Μοτίβα στην Εμβρυολογία-Το Μοντέλο Gierer-Meinhardt

Τα μοτίβα υπάρχουν παντού γύρω μας, από τη μοριακή διάταξη στους κρυστάλλους και τις χιονονιφάδες, μέχρι τη μελέτη της δυναμικής των κοινωνιών και τον σχηματισμό των γαλαξιών στο σύμπαν. Είναι εντυπωσιακό δε το γεγονός πως πολλά από αυτά τα χωρικά

μοτίβα είναι παρόμοια ακόμη και σε πολύ διαφορετικές κλίμακες μεγέθους. Στην ενότητα αυτή θα εστιάσουμε στα μοτίβα που δημιουργούνται κατά την εμβρυογένεση μέσω των πολύπλοκων μηχανισμών αυτό-οργάνωσης, τους οποίους κατάφερε να εξηγήσει ο *Turing* με τη θεωρία του για την μορφογένεση το 1952.

Η αυτό-οργάνωση είναι μία διαδικασία, η οποία κατέχει κεντρικό ρόλο στον σχηματισμό μοτίβων κατά την εμβρυική ανάπτυξη καθώς οδηγεί στην δημιουργία ποικίλων δυναμικών δομών διαφορετικής φύσης, που ρυθμίζουν τη διαφοροποίηση των κυττάρων εντός του αναπτυσσόμενου εμβρύου. Η πιο γενικά αποδεκτή ιδέα είναι ότι οι ειδικές εκκρινόμενες πρωτεΐνες, τα μορφογόνα, παίζουν κρίσιμο ρόλο στη δημιουργία αυτών των χωρικών δομών. Αυτό συμβαίνει επειδή οι διαφορετικές οριακές συγκεντρώσεις ενός μορφογόνου ενεργοποιούν και διαφορετικά σύνολα γονιδίων, με αποτέλεσμα να δημιουργούνται χωρικά μοτίβα διαφορετικών τύπων κυτταρικής διαφοροποίησης.

Ο κύκλος ζωής ενός ανώτερου οργανισμού ξεκινά, κατά κανόνα, με ένα μόνο γονιμοποιημένο κύτταρο, και καταλήγει, στο τέλος της εμβρυϊκής ανάπτυξης, στην δημιουργία μιας ιδιαίτερα περίπλοκης διάταξης εξαιρετικά εξειδικευμένων κύτταρων. Η ανάπτυξη μιας μαθηματικής περιγραφής για μία τόσο σύνθετη διαδικασία μπορεί να φαίνεται ακατόρθωτη. Ωστόσο, έχει αποδειχτεί πως η διαδικασία αυτή μπορεί να χωριστεί σε ποικίλα στάδια, τα οποία θεωρούνται, σε πρώτη προσέγγιση, ανεξάρτητα μεταξύ τους. Για παράδειγμα, μια πολύ σημαντική διαδικασία για ένα αναπτυσσόμενο έμβρυο είναι ο σχηματισμός των πρωτογενών εμβρυϊκών αξόνων, δηλαδή του προσθιοπίσθιου και του ραχιαίου άξονα.

Η θεωρία αντίδρασης-διάχυσης δηλώνει ότι η αρχική συμμετρία στα έμβρυα μπορεί να διαταραχθεί από την αλληλεπίδραση δύο διαφορετικών μορίων που διαχέονται και των οποίων οι αλληλεπιδράσεις οδηγούν στο σχηματισμό μοτίβων, τα οποία παραμένουν σταθερά στον χρόνο για μία συγκεκριμένη χρονική περίοδο. Τέτοια μοτίβα απαιτούνται στην πρώιμη ανάπτυξη ενός εμβρύου όταν προσδιορίζονται οι εμβρυϊκοί άξονες. Για την *Drosophila melanogaster*, την κοινή φρουτόμυγα, έχει αποδειχτεί πως η δομή κατά μήκος του προσθιοπίσθιου άξονα (κεφαλή προς ουρά) μπορεί να τροποποιηθεί ουσιαστικά χωρίς οποιαδήποτε επίδραση του ραχιαίου άξονα (από την πλάτη στην κοιλιά) και το αντίστροφο. Αντίστοιχα, κατά την ανάπτυξη ενός βραχίονα, ο προσθιοπίσθιος άξονας (από τον αντίχειρα προς το μικρό δάχτυλο) μπορεί να τροποποιηθεί χωρίς να έχει

σημαντική επίδραση στον άξονα που εκτείνεται από τον ώμο προς τα δάκτυλα. Διαφορετικά σύνολα γονιδίων εμπλέκονται στον καθορισμό των δύο αξόνων.

Φυσικά ο σχηματισμός μοτίβων κατά την εμβρυογένεση δεν περιορίζεται μόνο σε έναν τομέα ή σε ένα αναπτυξιακό στάδιο. Αντιθέτως, η διαδικασία αυτή παρατηρείται καθ' όλη τη διάρκεια της ανάπτυξης σε διάφορα μέρη του εμβρύου. Χαρακτηριστικά μπορούμε να αναφέρουμε τα μοτίβα που διέπουν τον σχηματισμό των ζωτικών οργάνων και των νευρολογικών δομών, συμβάλλοντας στην πλήρη διαμόρφωση του ενήλικου οργανισμού. Ίσως, τα πιο γνωστά μοτίβα είναι αυτά που παρατηρούμε στο δέρμα ή στο τρίχωμα των ζώων, τα οποία αποτελούν ένα ξεκάθαρο παράδειγμα της επίδρασης των αυτό-οργανωμένων διεργασιών.

Στην αναπτυξιακή βιολογία, ένας βασικός στόχος είναι η κατανόηση των μηχανισμών που διέπουν το σχηματισμό χωροχρονικών μοτίβων. Με τις σύγχρονες μοριακές-γενετικές τεχνικές είναι δυνατή η ταυτόχρονη παρακολούθηση της αμοιβαίας παρεμβολής εκατοντάδων γονιδίων και η αποκωδικοποίηση, σε ένα βαθμό, των λειτουργιών που οδηγούν στον σχηματισμό αυτών των δομών. Όμως και πολύ πριν γίνουν διαθέσιμες οι μοριακές-γενετικές μέθοδοι, η μελέτη των μοριακών μηχανισμών που διέπουν τον σχηματισμό μοτίβων μέσω της μαθηματικής διατύπωσης των αντιδράσεων κατάφερε, όπως έχει αποδειχθεί, να περιγράψει τα βασικά βήματα μιας τέτοιας διαδικασίας με εκπληκτική λεπτομέρεια. Επιπλέον, αν και τα γονίδια σαφώς διαδραματίζουν έναν κρίσιμο ρόλο, μια μελέτη της γενετικής από μόνη της δεν δύναται να προσφέρει μια πλήρη κατανόηση του τρόπου με τον οποίο οι φυσικές και χημικές διεργασίες σε ένα αναπτυσσόμενο σύστημα συνεργάζονται για να παράγουν τα πολύπλοκα σήματα στα οποία τα κύτταρα αντιδρούν.

Κατά την εμβρυογένεση, ένας αριθμός πολύπλοκων μηχανικών και βιοχημικών διεργασιών αλληλεπιδρούν συχνά με εξαιρετικά μη γραμμικό τρόπο. Τέτοια συστήματα επιδέχονται μαθηματική μοντελοποίηση, η οποία έχει ως στόχο όχι μόνο την παροχή εξηγήσεων που βασίζονται στην παρατήρηση και σε βιολογικά εύλογους μηχανισμούς, αλλά και την πειραματική πρόβλεψη των υποθέσεων. Η πρωτοποριακή εργασία του *Turing* για την μορφογένεση έθεσε τα θεμέλια για την μελέτη των διαδικασιών αυτό-οργάνωσης. Έκτοτε έχουν προταθεί πολλά μοντέλα αντίδρασης-διάχυσης με μη γραμμικούς όρους αντίδρασης. Ένα από τα πιο γνωστά είναι το μοντέλο ενεργοποιητή-

αναστολέα που εισήχθη το 1974 από τους *Alfred Gierer* και *Hans Meinhardt* [40], γνωστό και ως μοντέλο *G-M*, το οποίο έχει την εξής μορφή:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \rho_0 \rho + c \rho \frac{u^2}{v} - \mu u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + c' \rho' u^2 - kv. \end{cases}$$

Στο μοντέλο αυτό, το $u(x,t)$ αντιπροσωπεύει την συγκέντρωση του ενεργοποιητή και το $v(x,t)$ την συγκέντρωση του αναστολέα, στην χωρική θέση x την χρονική στιγμή $t > 0$. Οι ουσίες αυτές διαχέονται με συντελεστές D_u και D_v αντίστοιχα. Το ρ_0 είναι η συγκέντρωση πηγής για τον ενεργοποιητή και το ρ' για τον αναστολέα. Οι πηγές των ουσιών αυτών μπορεί να οφείλονται σε βιολογικές διαδικασίες όπως σε ενζυμικά συστήματα.⁶ Οι συγκεντρώσεις των ουσιών αυτών μεταβάλλονται σύμφωνα με τους όρους αντίδρασης πρώτης τάξης μu και kv για τα u και v αντίστοιχα. Η μεταβολή αυτή μπορεί να οφείλεται σε διάφορους μηχανισμούς, όπως για παράδειγμα στην αποσύνθεση των ενζύμων στα προαναφερόμενα συστήματα. Επιπλέον, οι πηγές του ενεργοποιητή και του αναστολέα υποθέτεται ότι είναι ομοιόμορφα κατανεμημένες, δηλαδή ρ και ρ' είναι σταθερές.

Συμφώνα με τα παραπάνω, μπορούμε να δώσουμε την ερμηνεία των όρων των εξισώσεων του μοντέλου *G-M*. Στην πρώτη εξίσωση, ο ενεργοποιητής u διασπάται αυθόρμητα με ρυθμό μ , διαχέεται με τον ρυθμό $D_u \partial^2 u$ και δημιουργείται με δύο τρόπους: από έναν μικρό όρο πηγής $\rho_0 \rho$, ο οποίος θα μπορεί να ποικίλλει ανάλογα με τη θέση του στον χώρο και από μια αυτοκαταλυτική αντίδραση που αντιπροσωπεύεται από τον όρο $c \rho \frac{u^2}{v}$.

Η παρουσία του v στον παρονομαστή του τελευταίου όρου δηλώνει πως ο αναστολέας τείνει να μειώσει τον ρυθμό παραγωγής του ενεργοποιητή. Στην δεύτερη εξίσωση, ο αναστολέας v παράγεται ως αποτέλεσμα της διασταυρούμενης καταλυτικής επίδρασης του ενεργοποιητή u^2 . Ως εκ τούτου, το u καταλήγει έμμεσα στη δική του αναστολή εφόσον δημιουργεί έναν αρνητικό κύκλο ανάδρασης ενισχύοντας την παραγωγή του αναστολέα v , ο οποίος στη συνέχεια αναστέλλει την παραγωγή του ενεργοποιητή u . Το v επίσης

⁶ Τα ενζυμικά συστήματα αναφέρονται στα βιολογικά συστήματα που χρησιμοποιούν ένζυμα ως καταλύτες για την εκτέλεση βιοχημικών αντιδράσεων. Τα ένζυμα είναι πρωτεΐνες που επιταχύνουν τις χημικές αντιδράσεις χωρίς να τροποποιούνται μόνιμα κατά τη διάρκεια της αντίδρασης.

διασπάται αυθόρμητα με ρυθμό k , διαχέεται με ρυθμό $D_v \partial^2 v$ και έχει έναν μικρό όρο πηγής ανεξάρτητου ενεργοποιητή $c' \rho' u^2$, ο οποίος ενεργοποιεί την παραγωγή του v ενώ επιπλέον αποτρέπει το σχηματισμό μοτίβων σε χαμηλές συγκεντρώσεις του u .

Το παραπάνω σύστημα, όπως αναφέρεται στο [41], γράφεται σε αδιάστατη μορφή:

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial \tau} = \bar{D}_U \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + C + \frac{U^2}{V} - \bar{\mu}U, \\ \frac{\partial V}{\partial \tau} = \bar{D}_V \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + U^2 - V, \end{cases}$$

όπου:

$$u = \frac{c\rho U}{c'\rho'}, \quad v = \frac{c^2\rho^2 V}{kc'\rho'}, \quad \bar{D}_U = \frac{D_u}{k}, \quad \bar{D}_V = \frac{D_v}{k}, \quad t = \frac{\tau}{k}, \quad \bar{\mu} = \frac{\mu}{k}, \quad C = \frac{\rho_0\rho'c'}{kc}.$$

Για λόγους απλότητας αντικαθιστούμε τα $U, V, C, \tau, \bar{\mu}, \bar{D}_U, \bar{D}_V$ με $u, v, c, t, \mu, D_u, D_v$ αντίστοιχα και έτσι το σύστημα γράφεται:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c + \frac{u^2}{v} - \mu u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + u^2 - v, \end{cases} \quad (5.18)$$

όπου $\mu, C, D_u, D_v > 0$, όπως και $u, v > 0$.

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε το σύστημα σε ένα χωρίο $L_x = L_y = [0, \pi]$ με ομογενείς συνοριακές συνθήκες *Neumann*, καθώς οι μηχανισμοί αυτό-οργάνωσης που μελετάμε δεν επηρεάζονται από εξωτερικούς παράγοντες. Έτσι, οι εν λόγω συνθήκες θα έχουν την μορφή:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(\pi, t) = 0 \quad \text{και} \quad \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial v}{\partial x}(\pi, t) = 0.$$

Παρατηρούμε πως το σύστημα (5.18) είναι στην μορφή του συστήματος (5.2):

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v), \end{cases}$$

με

$$\begin{cases} f(u, v) = c + \frac{u^2}{v} - \mu u, \\ g(u, v) = u^2 - v. \end{cases}$$

Απουσία διάχυσης είναι εύκολο να δούμε πως το σύστημα (5.18) έχει μοναδικό σημείο ισορροπίας. Όντως για $D_u = D_v = 0$, έχουμε το σύστημα:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = c + \frac{u^2}{v} - \mu u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = u^2 - v. \end{cases}$$

Για να βρούμε τα σημεία ισορροπίας του παραπάνω λύνουμε τις εξισώσεις

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = 0, \end{cases}$$

που δίνουν ισοδύναμα

$$\begin{cases} c + \frac{u^2}{v} - \mu u = 0, \\ u^2 - v = 0, \end{cases}$$

εκ των οποίων προκύπτει το μοναδικό σημείο ισορροπίας

$$(u_0, v_0) = \left(\frac{c+1}{\mu}, \frac{(c+1)^2}{\mu^2} \right), \text{ με } 0 < c < 1.$$

Ο Ιακωβιανός πίνακας του συστήματος στο σημείο ισορροπίας (u_0, v_0) θα είναι:

$$J(\mu) = \begin{pmatrix} \frac{1-c}{1+c}\mu & -\frac{\mu^2}{(c+1)^2} \\ \frac{2(c+1)}{\mu} & -1 \end{pmatrix},$$

Παρουσία διάχυσης, ακολουθώντας ξανά την διαδικασία που παρουσιάστηκε στην ενότητα 5.2, εισάγουμε τις ανομοιογενείς διαταραχές u' , v' , με $|u'| \ll 1$ και $|v'| \ll 1$, οπότε έχουμε

$$u(x,t) = u_0 + u'(x,t) \quad \text{και} \quad v(x,t) = v_0 + v'(x,t).$$

Το γραμμικοποιημένο σύστημα γύρω από το σημείο ισορροπίας (u_0, v_0) παίρνει τώρα τη μορφή:

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} + \frac{1-c}{1+c} \mu u' - \frac{\mu^2}{(c+1)^2} v', \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} + \frac{2(c+1)}{\mu} u' - v'. \end{cases} \quad (5.19).$$

Με την επιβολή συνοριακών συνθηκών *Neumann*

$$\frac{\partial u'}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial v'}{\partial x}(0,t) = \frac{\partial u'}{\partial x}(\pi,t) = \frac{\partial v'}{\partial x}(\pi,t) = 0, \quad (5.20)$$

Το πρόβλημα (5.19)-(5.20) έχει λύση της μορφής:

$$\begin{pmatrix} u'(x,t) \\ v'(x,t) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} e^{\lambda_k t} \cos kx. \quad (5.21)$$

Επιπλέον, σύμφωνα με την ανάλυση ευστάθειας που παρουσιάστηκε στην ενότητα 5.2 για να έχουμε μια ευσταθή κατάσταση ισορροπίας απουσία διάχυσης θα πρέπει να ισχύει:

$$Tr(J(\mu)) < 0,$$

ή ισοδύναμα:

$$\mu < \frac{1+c}{1-c},$$

ενώ παρουσία διάχυσης θα πρέπει να ισχύει:

$$\frac{1-c}{1+c} \mu D_v - D_u > 2 \sqrt{D_u D_v \left(\frac{2\mu}{c+1} - \frac{1-c}{1+c} \mu \right)} > 0.$$

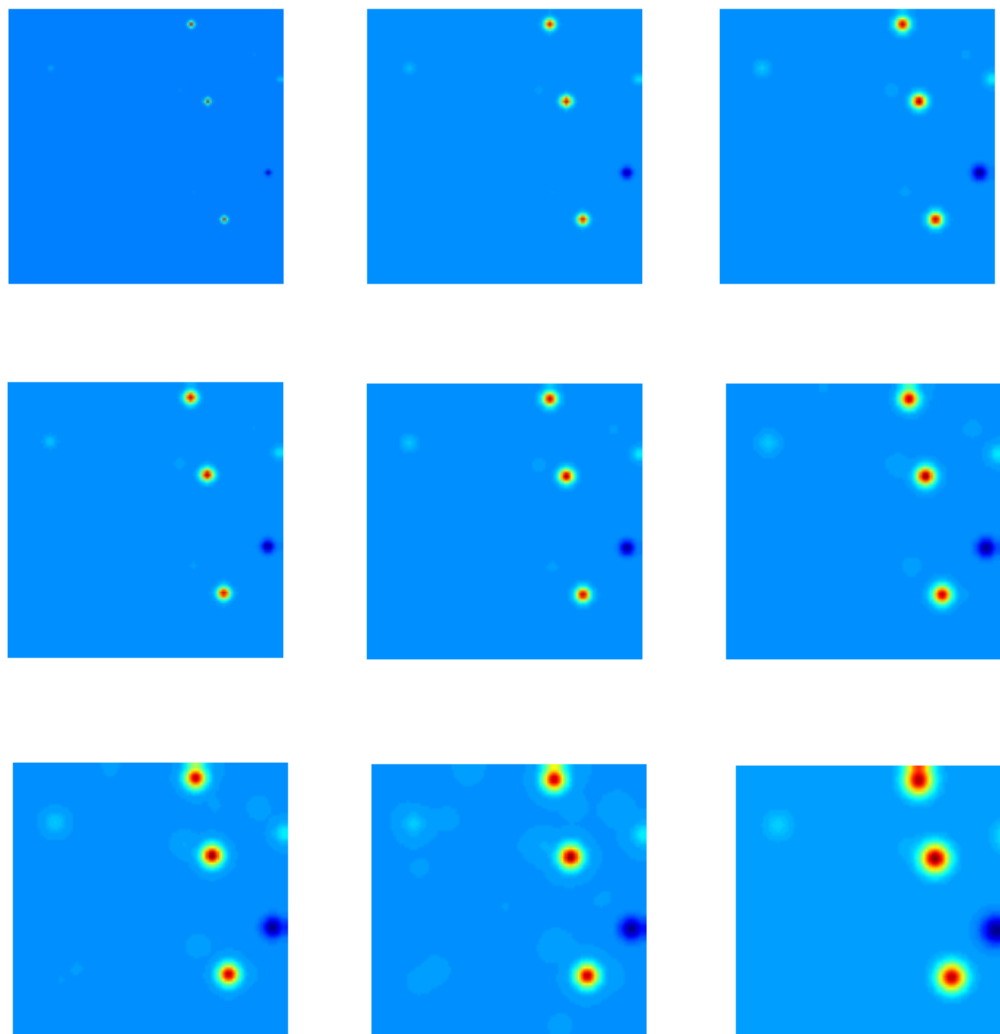
Συνοψίζοντας, σύμφωνα και με την συνθήκη (5.12) το σύστημα (5.18) θα παρουσιάσει αστάθεια *Turing* αν:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_u < D_v, \\ \mu < \frac{1+c}{1-c}, \\ \frac{1-c}{1+c} \mu D_v - D_u > 2 \sqrt{D_u D_v \left(\frac{2\mu}{c+1} - \frac{1-c}{1+c} \mu \right)} > 0. \end{array} \right. \quad (5.22)$$

Στο σημείο αυτό, να επισημάνουμε πως η σχέση $D_u \neq D_v$ της συνθήκης (5.12) παίρνει την πιο συγκεκριμένη μορφή $D_u < D_v$ καθώς το μοντέλο *G-M* αποτελεί, όπως προαναφέρθηκε, ένα μοντέλο συστήματος διάχυσης-αντίδρασης ενεργοποιητή-αναστολέα. Σύμφωνα με την ανάλυση της ενότητας 5.4, σε αυτού του είδους τα μοντέλα, ο αναστολέας θα πρέπει να διαχέεται ταχύτερα από τον ενεργοποιητή.

Παρακάτω παρουσιάζεται η αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου, η οποία πραγματοποιήθηκε με την βοήθεια του λογισμικού *MATLAB*. Ομοίως με την ενότητα 5.4, υλοποιούμε έναν κώδικα που εφαρμόζει την μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Στην προσομοίωση αυτή, το σύστημα (5.18) επιλύεται με την επιβολή μικρών τυχαίων διαταραχών, οι οποίες εισάγονται ξανά μέσω της συνάρτησης $randn(N,N)$ και αποτελούν τις αρχικές συνθήκες. Επιπλέον, όπως προαναφέρθηκε, στο σύνορο του χωρίου επιβάλλονται συνθήκες μηδενικής ροής τύπου *Neumann*. Για τις τιμές των παραμέτρων θεωρούμε: $D_u = 0.01$, $D_v = 5$, $c = 0.75$ και $\mu = 0.5$. Στο σχήμα 5.10 απεικονίζεται η διαχρονική εξέλιξη της συμπεριφοράς του συστήματος μέσω της διδιάστατης γραφικής απεικόνισης της συγκέντρωσης του ενεργοποιητή u για διακριτά χρονικά βήματα, ενώ η συνολική διάρκεια της προσομοίωσης ορίστηκε να είναι $T = 100$.

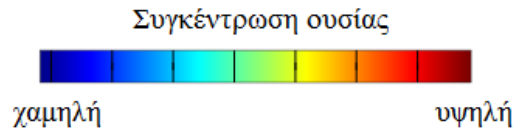
Επιβεβαιώνοντας τα συμπεράσματα της ποιοτικής μελέτης που προηγήθηκε, μπορούμε να δούμε πως η αστάθεια λόγω διάχυσης οδηγεί στον σχηματισμό μοτίβων, από την διαχρονική εξέλιξη της αριθμητικής προσομοίωσης που ακολουθεί.



Σχήμα 5. 10: Αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt*.

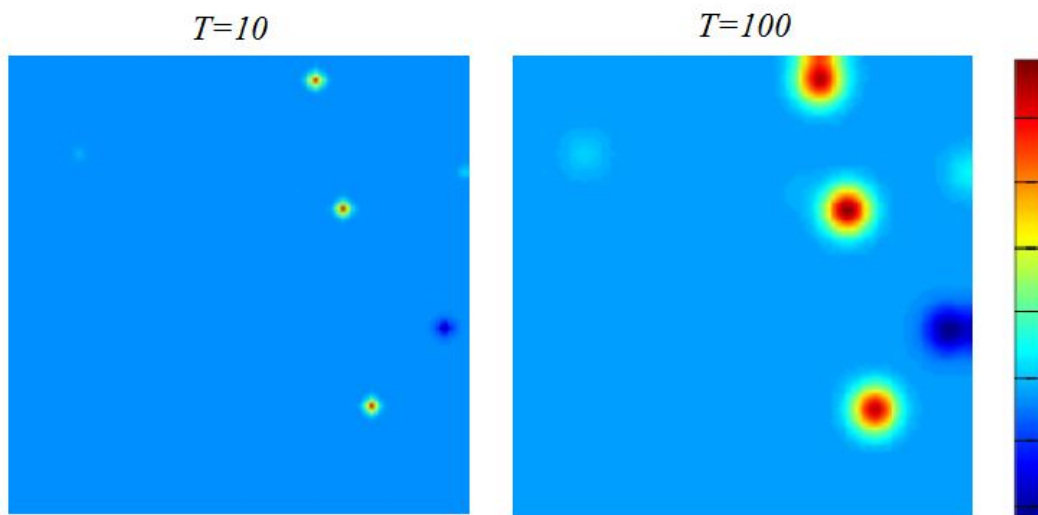
Όπως μπορούμε να δούμε, για τις επιλεγμένες τιμές των παραμέτρων σχηματίζονται κηλίδες, των οποίων η διάμετρος αυξάνεται με την πάροδο του χρόνου. Το συγκεκριμένο μοντέλο ευνοεί γενικά τον σχηματισμό χωρικών μοτίβων με κηλίδες. Τα πιο διακριτά μοτίβα φαίνεται να σχηματίζονται στα σημεία στα οποία η συγκέντρωση του μορφογόνου u είναι υψηλή. Οι περιοχές αυτές παρουσιάζονται στο σχήμα με κόκκινο χρώμα, ενώ με μπλε χρώμα απεικονίζονται τα σημεία χαμηλότερης συγκέντρωσης. Παρακάτω

παραθέτουμε την χρωματική κλίμακα (*colorbar*) της συγκέντρωσης της ουσίας u , η οποία θα αφορά και τις επόμενες αριθμητικές προσομοιώσεις.



Σχήμα 5. 11: Χρωματική κλίμακα-δείκτης αναφοράς συγκέντρωσης της ουσίας u .

Για διευκόλυνση της σύγκρισης της αρχικής με την τελική μορφή του γραφήματος που προκύπτει από την αριθμητική επίλυση, εισάγουμε το σχήμα 5.12 που ακολουθεί.

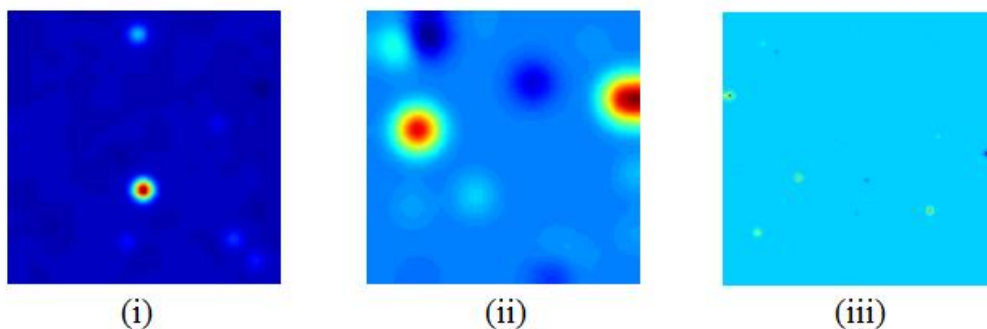


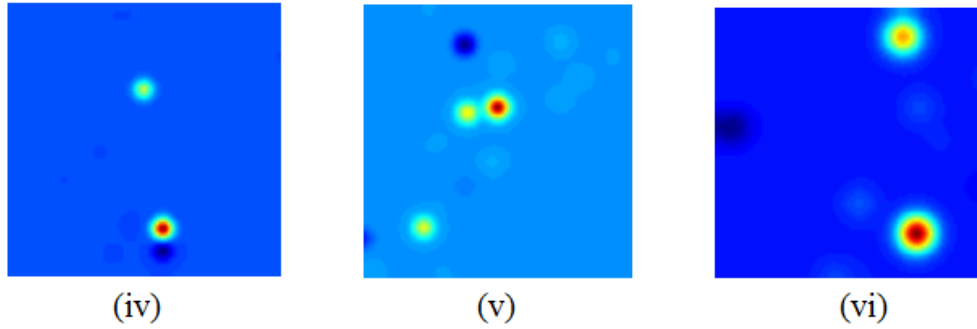
Σχήμα 5. 12: Σύγκριση διαγραμμάτων που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt* για τις χρονικές στιγμές $T=10$ και $T=100$.

Για να διερευνηθεί η επίδραση των διάφορων παραμέτρων στο μοτίβο, πραγματοποιούμε ξανά την προσομοίωση μεταβάλλοντας κάθε φορά μία από τις παραμέτρους D_u , D_v , c και μ . Παρακάτω παρουσιάζεται η μορφή του γραφήματος, όπως αυτή προκύπτει στο τέλος της προσομοίωσης, δηλαδή για $t_{end} = 100$.

Αρχικά, θα εξεταστεί η επίδραση των συντελεστών διάχυσης D_u , D_v στην συμπεριφορά του συστήματος. Για το λόγο αυτό, κρατάμε σταθερές τις τιμές των c και μ . Συγκεκριμένα θεωρούμε $c=0.75$ και $\mu=0.5$. Στο σχήμα 5.13, δίνονται τα γραφήματα για τις διάφορες τιμές των συντελεστών διάχυσης. Συγκρίνοντας τα υπόλοιπα γραφήματα του σχήματος αυτού με το γράφημα της περίπτωσης (i), εξάγουμε τα ακόλουθα συμπεράσματα.

Όπως μπορούμε να δούμε, ο συντελεστής διάχυσης του ενεργοποιητή D_u επηρεάζει δραστικά το μοτίβο και συγκεκριμένα επιδρά στη διάμετρο των κηλίδων, η οποία αυξάνεται με την αύξηση του D_u (σχήμα 5.13, ii), ενώ μειώνεται με την μείωσή του (σχήμα 5.13, iii). Αντίθετα, η μεταβολή του συντελεστή διάχυσης του αναστολέα D_v , δεν φαίνεται να έχει σημαντική επίδραση στην διάμετρο των κηλίδων, καθώς αυτή παρουσιάζει ελάχιστη, οριακά μηδενική, μεταβολή τόσο με την αύξηση (σχήμα 5.13, iv), όσο και με την μείωση της συγκεκριμένης παραμέτρου (σχήμα 5.13, v). Αυτό που διαφοροποιείται στην περίπτωση αυτή, είναι ο αριθμός των κηλίδων, ο οποίος φαίνεται να αυξάνεται καθώς η παράμετρος D_v μειώνεται. Αντίθετα, όπως μπορούμε να δούμε στο σχήμα 5.13 (iv), η αύξηση του D_v οδηγεί σε μία πιο ομοιόμορφη τελική συγκέντρωση του ενεργοποιητή στο σύνολο του χωρίου, με εξαίρεση τα σημεία όπου παρατηρούνται οι κηλίδες. Τέλος, στο γράφημα του σχήματος 5.13 (vi), παρουσιάζεται το μοτίβο που προκύπτει με την αύξηση και των δύο συντελεστών διάχυσης, αποτελεί δηλαδή ένα συνδυασμό των περιπτώσεων (ii) και (iv). Όπως αναμένεται σύμφωνα με τις προηγούμενες παρατηρήσεις, σε σύγκριση με την περίπτωση του σχήματος 5.13 (i), έχουμε κηλίδες μεγαλύτερης διαμέτρου ενώ ταυτόχρονα, στα σημεία του χωρίου όπου δεν παρατηρούνται τα συγκεκριμένα χωρικά μοτίβα, η συγκέντρωση του ενεργοποιητή u δεν παρουσιάζει μεγάλες διαφοροποιήσεις.

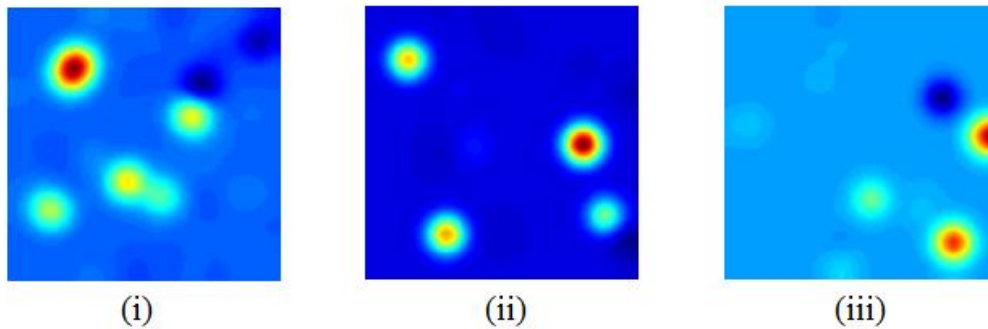




Σχήμα 5. 13: Επίδραση της μεταβολής των παραμέτρων D_u , D_v στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt*.

- (i) $D_u = 0.01, D_v = 27$ (ii) $D_u = 0.05, D_v = 27$ (iii) $D_u = 0.001, D_v = 27$
 (iv) $D_u = 0.01, D_v = 32$ (v) $D_u = 0.01, D_v = 10$ (vi) $D_u = 0.03, D_v = 17$.

Στο σημείο αυτό, προχωράμε στη μελέτη της επίδρασης της μεταβολής του συντελεστή c στην συμπεριφορά του συστήματος. Στο σχήμα 5.14 παρουσιάζεται το τελικό γράφημα της προσομοίωσης για $D_u = 0.03, D_v = 10, \mu = 0.5$ και τις διάφορες τιμές του c . Συγκεκριμένα, στο σχήμα 5.14 (i) έχουμε ορίσει $c = 0.25$, στο σχήμα 5.14 (ii) $c = 0.5$ και στο σχήμα 5.14 (iii) $c = 0.7$. Όπως μπορούμε να δούμε η αύξηση του c , οδηγεί σε απλούστερα χωρικά μοτίβα, ενώ μειώνοντας την τιμή του ο αριθμός των κηλίδων αυξάνεται.

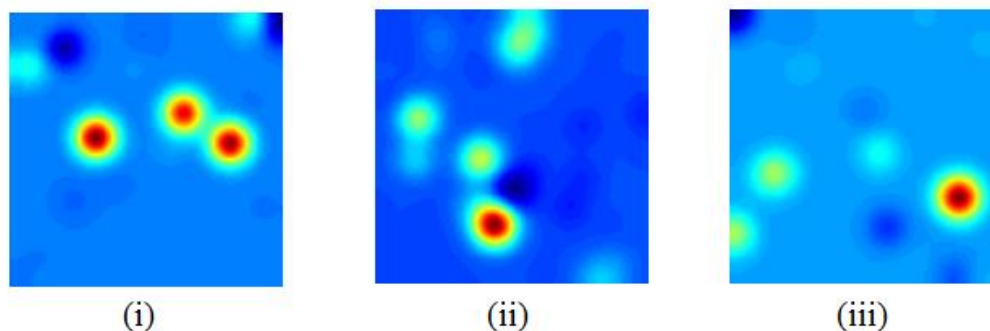


Σχήμα 5. 14: Επίδραση της μεταβολής της παραμέτρου c στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt*.

- (i) $c = 0.25$ (ii) $c = 0.5$ (iii) $c = 0.7$.

Όμοια συμπεράσματα προκύπτουν και για την μεταβολή της τιμής του συντελεστή μ , με την διαφορά πως στην περίπτωση αυτής της μεταβολής, η πολυπλοκότητα του μοτίβου φαίνεται να διαφοροποιείται όχι ως προς τον αριθμό των κηλίδων του σχήματος, αλλά ως προς την συγκέντρωση του μορφογόνου u , που κάνει αυτά τα χωρικά μοτίβα περισσότερο ή λιγότερο διακριτά. Το σχήμα 5.15 παρουσιάζει την αριθμητική προσομοίωση του

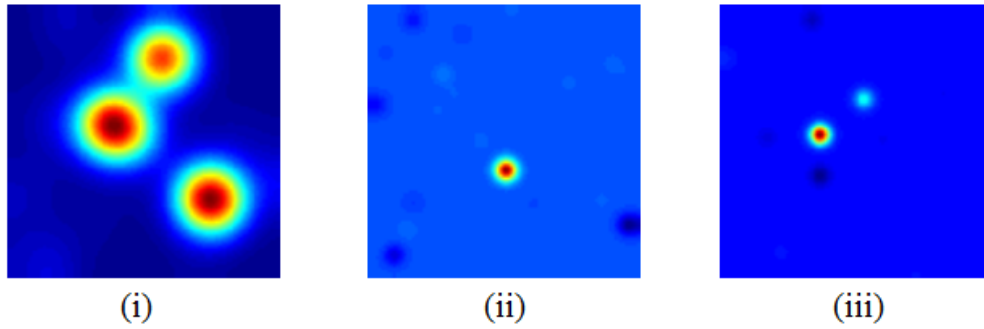
συστήματος για $D_u = 0.03$, $D_v = 10$, $c=0.75$ και τις διάφορες τιμές του μ . Για $\mu=1$, έχουμε ένα μοτίβο με κηλίδες, στις περισσότερες εκ των οποίων η συγκέντρωση του μορφογόνου u φαίνεται να είναι ιδιαίτερα υψηλή (σχήμα 5.15, i). Έπειτα καθώς η τιμή του μ αυξάνεται η συγκέντρωση του ενεργοποιητή u στις περισσότερες κηλίδες φαίνεται να μειώνεται, ενώ ο αριθμός τους δεν διαφοροποιείται δραστικά. Τα παραπάνω μπορούμε να τα δούμε στα σχήματα 5.15 (ii) και (iii), όπου $\mu=2$ και $\mu=3$ αντίστοιχα.



Σχήμα 5. 15: Επίδραση της μεταβολής της παραμέτρου μ στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt*.

(i) $\mu=1$ (ii) $\mu=2$ (iii) $\mu=3$.

Κρατώντας τώρα τις τιμές των παραμέτρων $c=0.25$ και $\mu=1$ που δίνουν τα πιο διακριτά μοτίβα, μπορούμε να διερευνήσουμε περισσότερο την μεταβολή των συντελεστών διάχυσης με την ταυτόχρονη μεταβολή τους. Παραλείποντας την περίπτωση της ταυτόχρονης αύξησης των τιμών των δύο συντελεστών, η οποία αναφέρεται παραπάνω, θα εξετάσουμε τις υπόλοιπες περιπτώσεις συγκρίνοντας ξανά με το γράφημα του σχήματος 5.13 (i), όπου $D_u = 0.01$, $D_v = 27$. Όπως φαίνεται στο σχήμα 5.16 που ακολουθεί, αυξάνοντας τον συντελεστή D_u και μειώνοντας τον συντελεστή D_v , δημιουργείται ένα χωρικό μοτίβο με αρκετές κηλίδες μεγάλης διαμέτρου (σχήμα 5.16, i). Στην περίπτωση της ταυτόχρονης μείωσης και των δύο συντελεστών διάχυσης, ο αριθμός των κηλίδων αλλά και η διάμετρος μειώνονται αισθητά αφού, όπως μπορούμε να δούμε στο σχήμα 5.16 (ii), έχουμε μόνο μία περιοχή όπου η συγκέντρωση του ενεργοποιητή u παρουσιάζεται υψηλή. Όμοια συμπεράσματα εξάγονται και από την ταυτόχρονη μείωση και των δύο συντελεστών διάχυσης, ενώ επιπλέον η συγκέντρωση της ουσίας παρουσιάζεται γενικά πιο ομοιόμορφη στο σύνολο του χωρίου (σχήμα 5.16, iii).



Σχήμα 5. 16: Επίδραση της ταυτόχρονης μεταβολής των παραμέτρων D_u , D_v στα μοτίβα που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt*.

(i) $D_u = 0.05, D_v = 1$ (ii) $D_u = 0.009, D_v = 10$ (iii) $D_u = 0.009, D_v = 30$.

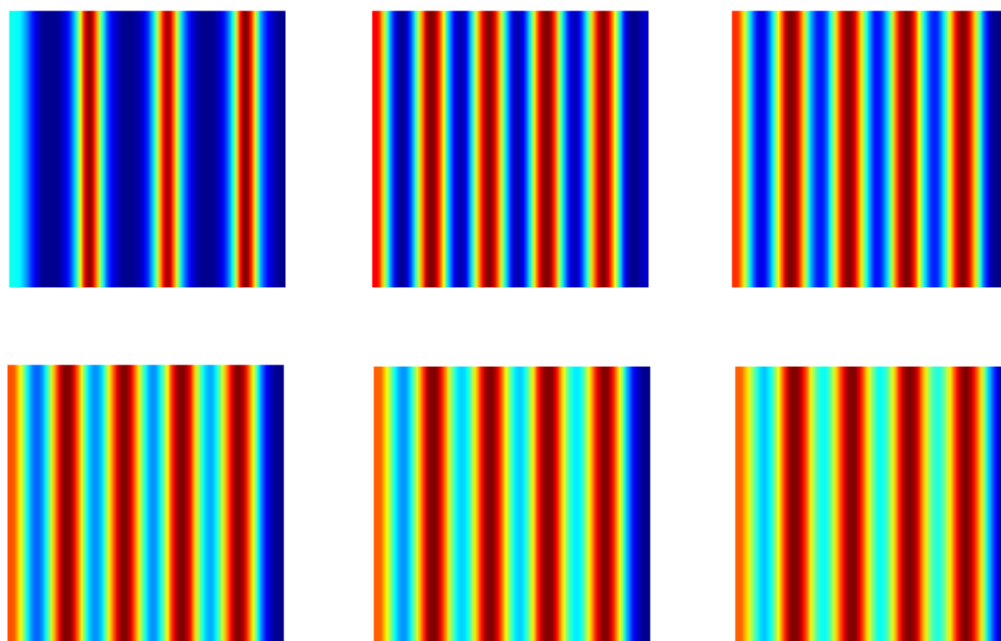
Ενδιαφέρον ακόμη παρουσιάζει ο τρόπος με τον οποίο οι αρχικές συνθήκες επηρεάζουν το μοτίβο. Μέχρι στιγμής μελετήθηκε η περίπτωση των μικρών τυχαίων διαταραχών, είναι όμως πολύ σύνηθες στα συστήματα τέτοιου είδους να επιβάλλονται περιοδικές αρχικές συνθήκες. Συγκεκριμένα στον τομέα της εμβρυογένεσης, ένας λόγος για την επιβολή συνθηκών αυτού του είδους κατά τη μαθηματική μοντελοποίηση των φαινομένων αποτελεί η ανάπτυξη περιοδικών δομών. Μία από τις πιο χαρακτηριστικές μορφές αυτού του είδους είναι οι σωμίτες. Οι σωμίτες είναι ομάδες κυττάρων, τα οποία εμφανίζονται στα έμβρυα των σπονδυλωτών και προάγουν, μεταξύ άλλων, την διάπλαση της σπονδυλικής στήλης και των μυών. Όπως χαρακτηριστικά αναφέρεται στο [42] «η σωματογένεση είναι μια θεμελιώδης διαδικασία σχηματισμού δομών, που παρατηρείται στα έμβρυα όλων των σπονδυλωτών και η οποία προάγει την περιοδική διαίρεση του μεσοδέρματος σε ομόλογες ομάδες κυττάρων, τους σωμίτες».

Για την κατανόηση των μηχανισμών της σωματογένεσης έχουν προταθεί πολλά θεωρητικά μοντέλα, μεταξύ των οποίων και το μοντέλο *διάχυσης-αντίδρασης* από τον *Meinhardt* [43], [44]. Στα μοντέλα αυτά ο συγχρονισμός των κυτταρικών ομάδων που ευθύνεται για τον σχηματισμό των σωμιτών, αποδίδεται στις κυτταρικές ταλαντώσεις του παρααξονικού μεσοδέρματος⁷.

⁷ Το μεσόδερμα είναι ο εξειδικευμένος ιστός που δημιουργείται κατά τη διάρκεια των πρώτων τεσσάρων εβδομάδων της εγκυμοσύνης. Ο ρόλος του μεσοδέρματος είναι να σχηματίσει την καρδιά, τα νεφρά, τα οστά, τους χόνδρους, τους μύες, τα αιμοσφαίρια και άλλα στοιχεία. Η ικανότητα σχηματισμού τμηματικών μονάδων φαίνεται να είναι μια ιδιότητα ειδική του παρααξονικού μεσοδέρματος, αντίθετα με το πλάγιο ή το μεσόδερμα των άκρων. Η ικανότητα αυτή πιθανότατα αποκτάται κατά τη διάρκεια της πρώιμης ανάπτυξης, όταν το παρααξονικό μεσόδερμα που προέρχεται από την αρχική γραμμή, εξειδικεύεται.

Επιβάλλουμε λοιπόν στην αριθμητική μας προσομοίωση περιοδικές αρχικές συνθήκες, οι οποίες σε αυτό το πλαίσιο βοηθούν στην αποτύπωση της εγγενούς ρυθμικότητας των αναπτυξιακών διαδικασιών. Όπως θα δούμε, μία τέτοια μεταβολή έχει καθοριστικό ρόλο στον τρόπο με τον οποίο δημιουργείται η χωρική διάταξη.

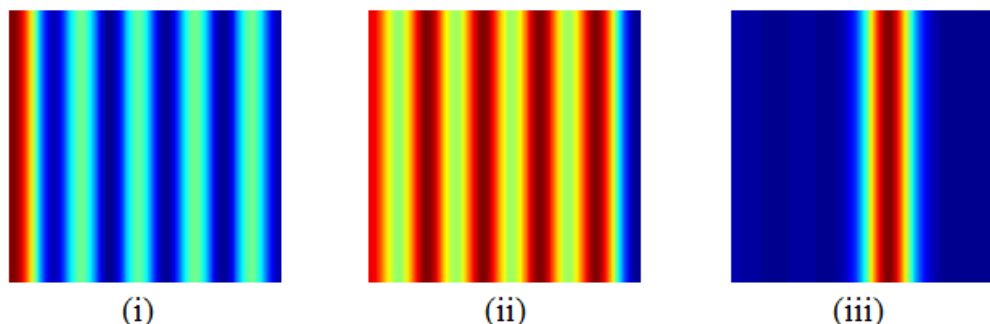
Στο σχήμα 5.17 μπορούμε να δούμε τη διαχρονική εξέλιξη του γραφήματος, όπως αυτό προκύπτει από την αριθμητική επίλυση του συστήματος (5.18). Τα γραφήματα του σχήματος απεικονίζουν την συγκέντρωση της ουσίας u . Ακολουθώντας την ίδια μέθοδο επίλυσης με παραπάνω αυτή τη φορά για $D_u = 0.05$, $D_v = 26$, $c = 0.75$ και $\mu = 0.5$ και την επιβολή των αρχικών συνθηκών $u(0, x) = 4 + 2 \cos x$ και $v(0, x) = 12.5 + 2 \cos x$. Διατηρούμε επιπλέον τις συνοριακές συνθήκες μηδενικής ροής τα άκρα του χωρίου.



Σχήμα 5. 17: Αριθμητική προσομοίωση του μοντέλου *Gierer-Meinhardt* με την επιβολή περιοδικών αρχικών συνθηκών.

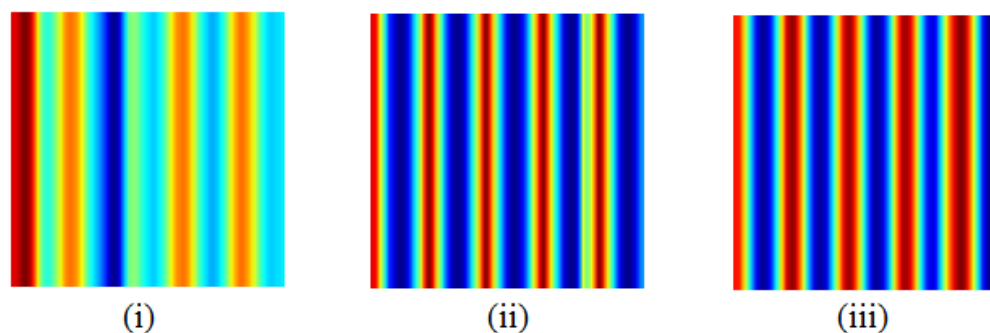
Όπως μπορούμε να δούμε, στην περίπτωση των περιοδικών αρχικών συνθηκών, το χωρικό μοτίβο αποτελείται από ρίγες, των οποίων το πλάτος αυξάνεται σταδιακά με την πάροδο του χρόνου. Για να επιβεβαιώσουμε το γεγονός πως στο μοντέλο *Gierer-Meinhardt* οι περιοδικές συνθήκες προάγουν τον σχηματισμό χωρικών μοτίβων με ρίγες, διεξάγουμε ξανά την αριθμητική προσομοίωση επιβάλλοντας διάφορες αρχικές συνθήκες

περιοδικού τύπου. Τα γραφήματα που προκύπτουν στο τέλος κάθε προσομοίωσης, δηλαδή για $t_{end} = 100$, παρουσιάζονται στο σχήμα 5.18 που ακολουθεί.



Σχήμα 5. 18: Επίδραση των περιοδικών αρχικών συνθηκών στο μοντέλο *Gierer-Meinhardt*.
(i) $u(0, x) = 4 + 2 \sin x$, $v(0, x) = 12.5 + 2 \sin x$ **(ii)** $u(0, x) = 2 \cos x$, $v(0, x) = 2 \cos x$
(iii) $u(0, x) = \sin x$, $v(0, x) = \cos x$.

Επιπλέον, όπως μπορούμε να δούμε στο σχήμα 5.19, ούτε η μεταβολή των τιμών των παραμέτρων D_u , D_v , c και μ αλλάζει το είδος του χωρικού μοτίβου που προκύπτει λόγω των περιοδικών αρχικών συνθηκών. Φυσικά υπάρχουν διαφοροποιήσεις ανάμεσα στις περιπτώσεις, όμως το σύστημα εξακολουθεί να παράγει μοτίβα με ρίγες.



Σχήμα 5. 19: Επίδραση της μεταβολής των τιμών των παραμέτρων D_u , D_v , c και μ στο μοντέλο *Gierer-Meinhardt* με αρχικές συνθήκες $u(0, x) = 4 + 2 \cos x$ και $v(0, x) = 12.5 + 2 \cos x$.
(i) $D_u = 0.01$, $D_v = 10$, $c = 0.75$, $\mu = 0.5$ **(ii)** $D_u = 0.001$, $D_v = 27$, $c = 0.75$, $\mu = 0.5$
(iii) $D_u = 0.01$, $D_v = 27$, $c = 0.25$, $\mu = 1$.

Όπως είδαμε μέσω των γραφικών απεικονίσεων σε δισδιάστατο χωρίο, οι αριθμητικές προσομοιώσεις οδηγούν για τις επιλεγμένες τιμές των παραμέτρων που ικανοποιούν τις συνθήκες (5.22), στον σχηματισμό μοτίβων. Τα μοτίβα αυτά, φαίνεται να είναι ιδιαίτερα

ευαίσθητα στις αρχικές συνθήκες καθώς η διαφοροποίηση τους ανάλογα με το είδος των συνθηκών αυτών υπήρξε δραστική. Η ορθότητα της μαθηματικής μοντελοποίησης των βιολογικών διεργασιών, όπως αυτών που περιγράφονται από τα εν λόγω συστήματα, συχνά αμφισβητείται λόγω της υπεραπλούστευσης των περίπλοκων βιολογικών διεργασιών. Παρόλα αυτά, είναι αξιοθαύμαστο το γεγονός πως η θεωρία του *Turing* για την μορφογένεση μπορεί να επαληθευτεί πειραματικά. Μάλιστα, η πρώτη πειραματική παρατήρηση ενός μοτίβου πραγματοποιήθηκε σχεδόν τέσσερις δεκαετίες μετά το σημαντικό έργο του [45].

6. Συμπεράσματα

Η παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε ένα εύρος θεμάτων σχετικά με τη μαθηματική μοντελοποίηση και μελέτη προβλημάτων διάχυσης και αντίδρασης σε φυσικά και βιολογικά συστήματα, αναδεικνύοντας τη σημασία της μαθηματικής ανάλυσης στην κατανόηση της φυσικής πραγματικότητας αλλά και των διαφόρων βιολογικών διεργασιών. Παρουσιάστηκαν οι πιο γνωστές εξισώσεις διάχυσης-αντίδρασης, οι οποίες έχουν ποικίλες εφαρμογές στον τομέα της Μαθηματικής Βιολογίας και μελετήθηκαν συστήματα διάχυσης-αντίδρασης που επαληθεύουν τη θεωρία του *Allan Turing* για τη μορφογένεση. Τα μοντέλα *Turing* και οι μη γραμμικές διαδικασίες προσέφεραν μια ειδική ματιά στην εμφάνιση μοτίβων και σχηματισμό μορφών σε βιολογικά συστήματα.

Μέσω της εφαρμογής μαθηματικών μοντέλων σε προβλήματα διάχυσης και αντίδρασης, μπορούμε να αναπτύξουμε κατανοητές λύσεις για πολύπλοκες καταστάσεις αλλά και να προβλέψουμε την εξέλιξη πολλών βιολογικών διεργασιών και φαινομένων. Όπως έχει αποδειχτεί ο σαφής, λογικός συλλογισμός σε συνδυασμό με την προσεκτική παρατήρηση και τη μαθηματική σκέψη κατέχει μία τεράστια δύναμη. Οι μαθηματικές θεωρίες παρέχουν ένα πεδίο δοκιμής ιδεών στο οποίο η ορθότητα μίας θεωρίας δύναται να ελεγχθεί ή η δύναμη ανταγωνιστικών θεωριών να μετρηθεί.

Η παρούσα εργασία συνολικά αναδεικνύει τη σημασία της μαθηματικής ανάλυσης στην κατανόηση και την πρόβλεψη φυσικών και βιολογικών φαινομένων. Παρά τις προκλήσεις, η συνεχής έρευνα σε αυτόν τον τομέα θα συνεισφέρει στην περαιτέρω εμπάθυνση της κατανόησής μας για τον κόσμο γύρω μας. Αναμφίβολα, η επιστήμη της Βιολογίας θα εξακολουθήσει να παρακινεί την ανάπτυξη νέων μαθηματικών θεωριών λόγω της ποιοτικής ετερογένειας που παρατηρείται στην έμβια φύση. Αυτή η υπέρ-ποικιλομορφία της ζωής σε κάθε κλίμακα χωρικής ή χρονικής οργάνωσης μπορεί να οδηγήσει σε θεμελιώδης εννοιολογική πρόοδο στην επιστήμη των Μαθηματικών, όπως έχει συμβεί και στο παρελθόν.

Στις μέρες μας, η χρήση των τεχνολογικών εργαλείων και των λογισμικών διευκολύνει την μελέτη των διάφορων βιολογικών φαινομένων μέσω της διεξαγωγής μαθηματικών πειραμάτων και προσομοιώσεων. Έτσι, η επιστήμη των Μαθηματικών μας δίνει πρόσβαση σε βιολογικά και φυσικά φαινόμενα που παρουσιάζουν εξαιρετική

ποικιλομορφία, ενώ επιπλέον οι διαφορετικές συνθήκες που αναλογούν στο καθένα από αυτά, δεν στέκονται εμπόδιο στην μαθηματική τους μοντελοποίηση και ανάλυση. Για παράδειγμα, μέσω της μαθηματικής ανάλυσης μπορούμε να μελετήσουμε φαινόμενα που ανήκουν στο μακροεπίπεδο (βιόσφαιρα) αλλά και στο μικροεπίπεδο (μοριακή δομή), είτε διεργασίες που ενδέχεται να εξελίσσονται πολύ αργά ή πολύ γρήγορα στο χρόνο. Ακόμη, μέσω των μαθηματικών μεθόδων μπορούν να αναλυθούν σύνθετες βιολογικές διεργασίες, όπως η λειτουργία του εγκεφάλου, και να μελετηθούν πειραματικά επικίνδυνες ή αντιδεδοντολογικές συνθήκες όπως η εξάπλωση μίας μολυσματικής νόσου.

Οι εφαρμογές φαίνεται να είναι απεριόριστες. Επιπλέον, το τεχνολογικό άλμα της εποχής μας, που χαρακτηρίζεται από την ανάπτυξη της τεχνητής νοημοσύνης, μπορεί να δημιουργήσει νέες ευκαιρίες μα και προκλήσεις στον τομέα της Μαθηματικής Βιολογίας. Η αυτόματη ανάλυση δεδομένων, η εικονική πραγματικότητα και οι όλο και πιο ρεαλιστικές προσομοιώσεις μπορεί να οδηγήσουν σε νέες επιστημονικές ανακαλύψεις, ενώ η πρόβλεψη των διάφορων διεργασιών μπορεί να βελτιώσει την κατανόησή μας για τη λειτουργία του βιολογικού κόσμου. Παράλληλα, οι εφαρμογές της τεχνητής νοημοσύνης στη Βιολογία θέτουν ηθικά ζητήματα που απαιτούν προσεκτική αντιμετώπιση. Αναμφίβολα, ο συνδυασμός της τεχνητής νοημοσύνης με τη Μαθηματική Βιολογία ενδέχεται να ανοίξει νέους ορίζοντες στην επιστημονική έρευνα και την εφαρμογή της γνώσης στην πράξη. Η προσεκτική αντιμετώπιση των ηθικών ζητημάτων και η εστίαση στη διαφοροποίηση και την καινοτομία μπορούν να προάγουν την ανάπτυξη της επιστήμης της Μαθηματικής Βιολογίας και να διασφαλίσουν την εκμετάλλευση των τεχνολογικών εξελίξεων προς όφελος της επιστήμης και γενικότερα της ανθρωπότητας.

Βιβλιογραφία

- [1] N. Γιαλελής, Β. Μπιτσούνη, and Ι. Γ. Στρατής, *Μια Εισαγωγή στη Μαθηματική Βιολογία*. Κάλλιπος, 2016.
- [2] N. Bacaër, *A Short History of Mathematical Population Dynamics*. Springer, 2011.
- [3] S. T. Vittadello and M. P. H. Stumpf, “Open problems in mathematical biology,” *Math. Biosci.*, vol. 354, no. October, p. 108926, 2022, doi: 10.1016/j.mbs.2022.108926.
- [4] J. E. Cohen, “Mathematics is biology’s next microscope, only better; biology is mathematics’ next physics, only better,” *PLoS Biol.*, vol. 2, no. 12, 2004, doi: 10.1371/journal.pbio.0020439.
- [5] Σ. Κομηνέας and Χ. Χαρμανδάρης, *Μαθηματική Μοντελοποίηση*. Κάλλιπος, 2020. [
- [6] P. Sedgwick, “Pearson ’ s correlation coefficient,” *Br. Med. J.*, vol. 345, pp. 1–3, 2012, doi: 10.1136/bmj.e4483.
- [7] A. Watts, J. K. Grewal, M. Krzywinski, and N. Altman, “Markov models — Markov chains,” *Nat. Methods*, vol. 16, no. August, pp. 663–665, 2019.
- [8] J. Graffelman, D. Jain, and B. Weir, “A genome - wide study of Hardy – Weinberg equilibrium with next generation sequence data,” *Hum. Genet.*, vol. 136, no. 6, pp. 727–741, 2017, doi: 10.1007/s00439-017-1786-7.
- [9] A. Hening and D. H. Nguyen, “Stochastic Lotka–Volterra food chains,” *J. Math. Biol.*, vol. 77, no. 1, pp. 135–163, 2018, doi: 10.1007/s00285-017-1192-8.
- [10] B. A. Niccum, R. Poteau, G. E. Hamman, J. C. Varada, J. H. Dshalalow, and R. R. Sinden, “On an unbiased and consistent estimator for mutation rates,” *J. Theor. Biol.*, vol. 300, pp. 360–367, 2012, doi: 10.1016/j.jtbi.2012.01.029.
- [11] C. A. Pop, “Co-estimates and smoothness of solutions to the parabolic equation defined by Kimura operators,” *J. Funct. Anal.*, vol. 272, no. 1, pp. 47–82, 2017, doi: 10.1016/j.jfa.2016.10.014.

- [12] P. Bourguine and A. Lesne, Eds., *Morphogenesis Origins of Patterns and Shapes*, 2011th ed. Springer, 2011.
- [13] H. Mehrer and N. Stolwijk, “Heroes and Highlights in the History of Diffusion,” *Diffus. Fundam.*, vol. 11, no. 1, pp. 1–32, 2009, [Online]. Available: <http://en.wikipedia.org/wiki/Diffusion>
- [14] J. Philibert, “One and a Half Century of Diffusion: Fick, Einstein, Before and Beyond,” *Diffus. Fundam.*, vol. 6, no. 4, pp. 1–19, 2006, doi: 10.1109/ISSIMM.2017.8124263.
- [15] T. W. Patzek, “Fick’s Diffusion Experiments Revisited —Part I,” *Adv. Hist. Stud.*, vol. 03, no. 04, pp. 194–206, 2014, doi: 10.4236/ahs.2014.34017.
- [16] S. Niese, “George de Hevesy (1885-1966), founder of Radioanalytical Chemistry,” *Czechoslov. J. Phys.*, vol. 56, no. 4, pp. 3–11, 2006, doi: 10.1007/s10582-006-0482-y.
- [17] D. J. Logan, *Applied Mathematics*, 4th ed. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2013.
- [18] Ν. Δ. Αλικάκος and Γ. Η. Καλογερόπουλος, *Συνήθειες Διαφορικές Εξισώσεις*. Αθήνα: Σύγχρονη Εκδοτική, 2003.
- [19] S. Salsa, *Partial Differential Equations in Action From Modelling to Theory*. Springer, 2008.
- [20] Γ. Δ. Ακρίβης and Ν. Δ. Αλικάκος, *Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις*, 2nd ed. Αθήνα: Σύγχρονη Εκδοτική, 2017.
- [21] Σ. Τραχανάς, *Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις Σειρές Fourier και Προβλήματα Συνοριακών Τιμών*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2018.
- [22] S. Howison, *Practical Applied Mathematics Modeling, Analysis, Approximation*. Cambridge University Press, 2005.
- [23] C. J. Tomlin and J. D. Axelrod, “Biology by numbers: Mathematical modelling in developmental biology,” *Nat. Rev. Genet.*, vol. 8, no. 5, pp. 331–340, 2007, doi:

10.1038/nrg2098.

- [24] I. Μυριτζής, *Δυναμικά Συστήματα με Εφαρμογές στη Φυσική και την Οικολογία*. Κάλλιπος, 2015.
- [25] M. El-hachem, S. W. Mccue, W. Jin, Y. Du, M. J. Simpson, and M. J. Simpson, “Revisiting the Fisher – Kolmogorov – Petrovsky – Piskunov equation to interpret the spreading – extinction dichotomy,” *Proc. R. Soc.*, no. 475, 2019.
- [26] J. G. Skellam, “Random Dispersal in Theoretical Populations,” *Biometrika*, vol. 38, no. 1, pp. 196–218, 1951.
- [27] Y. Du, “Propagation and reaction-diffusion models with free boundaries,” *Bull. Math. Sci.*, vol. 12, no. 1, pp. 1–56, 2022, doi: 10.1142/S1664360722300018.
- [28] N. Shigesada, K. Kawasaki, and Y. Takeda, “Modeling stratified diffusion in biological invasions,” *Am. Nat.*, vol. 146, no. 2, pp. 229–251, 1995, doi: 10.1086/285796.
- [29] J. D. Murray, *Mathematical Biology biomedical applications*, 3rd ed. Springer, 2000. doi: 10.1007/b98869.
- [30] A. M. Turing, “The chemical basis of morphogenesis,” *Philos. Trans. R. Soc. London*, vol. 237, no. August, pp. 37–72, 1952.
- [31] L. Edelstein-Keshet, “Models for Development and Pattern Formation in Biological Systems,” in *Mathematical Models in Biology*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1988, pp. 496–555. doi: 10.1137/1.9780898719147.ch11.
- [32] G. Q. Sun, C. H. Wang, and Z. Y. Wu, “Pattern dynamics of a Gierer–Meinhardt model with spatial effects,” *Nonlinear Dyn.*, vol. 88, no. 2, pp. 1385–1396, 2017, doi: 10.1007/s11071-016-3317-9.
- [33] P. K. Maini and T. E. Woolley, “The Turing Model for Biological Pattern Formation,” in *The Dynamics of Biological Systems*, Springer, 2019, pp. 189–204. doi: 10.1007/978-3-030-22583-4_7.

- [34] R. Wu, Y. Zhou, Y. Shao, and L. Chen, “Bifurcation and Turing patterns of reaction–diffusion activator–inhibitor model,” *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 482, pp. 597–610, 2017, doi: 10.1016/j.physa.2017.04.053.
- [35] F. M. Khan, A. Ali, N. Hamadneh, Abdullah, and M. N. Alam, “Numerical Investigation of Chemical Schnakenberg Mathematical Model,” *J. Nanomater.*, vol. 2021, 2021, doi: 10.1155/2021/9152972.
- [36] L. N. Trefethen, *Spectral Methods in MATLAB*. 2000. doi: 10.1137/1.9780898719598.
- [37] A. N. Landge, B. M. Jordan, X. Diego, and P. Müller, “Pattern formation mechanisms of self-organizing reaction-diffusion systems,” *Dev. Biol.*, vol. 460, no. 1, pp. 2–11, 2020, doi: 10.1016/j.ydbio.2019.10.031.
- [38] H. Meinhardt, *The Algorithmic Beauty of Sea Shells*, 4th ed., vol. 5, no. 1. Springer, 2016.
- [39] H. Meinhardt, “Models of Biological Pattern Formation : From Elementary Steps to the Organization of Embryonic Axes,” *Curr. Top. Dev. Biol.*, vol. 81, no. 07, 2008, doi: 10.1016/S0070-2153(07)81001-5.
- [40] H. Meinhardt and A. Gierer, “Applications of a theory of biological pattern formation based on lateral inhibition,” *J. Cell Sci.*, vol. 15, no. 2, pp. 321–346, 1974, doi: 10.1242/jcs.15.2.321.
- [41] Y. Li, J. Wang, and X. Hou, “Stripe and spot patterns for the Gierer–Meinhardt model with saturated activator production,” *J. Math. Anal. Appl.*, vol. 449, no. 2, pp. 1863–1879, 2017, doi: 10.1016/j.jmaa.2017.01.019.
- [42] Δ. Μάλλε-Δημελλή, “Συγκριτική Μελέτη της Διάπλασης των Σωμιτών σε Τρεις Διαφορετικές Φυλές Μυών, με το Οπτικό και το Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο,” Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 2005.
- [43] H. Meinhardt, “Models of segmentation,” in *Somites in Developing Embryos*, Springer, 1986, pp. 179–180. doi: 10.1007/978-1-4899-2013-3.
- [44] H. Meinhardt, “Hierarchical Inductions of Cell States: A Model for Segmentation in

Drosophila,” *Cell Sci. Suppl.*, vol. 4, pp. 357–882, 1986.

- [45] D. Schnörr and C. Schnörr, *Learning system parameters from turing patterns*, vol. 112, no. 9. Springer US, 2023. doi: 10.1007/s10994-023-06334-9.

Υπεύθυνη Δήλωση Συγγραφέα:

Δηλώνω ρητά ότι, σύμφωνα με το άρθρο 8 του Ν.1599/1986, η παρούσα εργασία αποτελεί αποκλειστικά προϊόν προσωπικής μου εργασίας, δεν προσβάλλει κάθε μορφής δικαιώματα διανοητικής ιδιοκτησίας, προσωπικότητας και προσωπικών δεδομένων τρίτων, δεν περιέχει έργα/εισφορές τρίτων για τα οποία απαιτείται άδεια των δημιουργών/δικαιούχων και δεν είναι προϊόν μερικής ή ολικής αντιγραφής, οι πηγές δε που χρησιμοποιήθηκαν περιορίζονται στις βιβλιογραφικές αναφορές και μόνον και πληρούν τους κανόνες της επιστημονικής παράθεσης.