České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Turingův model prostorového uspořádání a vliv geometrie

Turing model for self-organisation and influence of geometry

Bakalářská práce

Autor: **Juraj Kováč**

Vedoucí práce: **doc. Ing. Václav Klika, Ph.D.**

Konzultant: **Mgr. Michal Kozák**

Akademický rok: 2016/2017

- Zadání práce -

- Zadání práce (zadní strana) -

Poďakovanie:
Chcem poďakovať predovšetkým svojmu školiteľovi doc. Ing. Václavovi Klikovi, Ph.D. za ochotu, ústretovosť, poskytnutie množstva užitočných materiálov, najmä však za trpezlivosť do poslednej chvíle a kvalitné odborné vedenie pri písaní tejto bakalárskej práce. Ďalej ďakujem svojmu konzultantovi Mgr. Michalovi Kozákovi za zastúpenie úlohy školiteľa, kedykoľvek to bolo potrebné, a Róbertovi Babjakovi za cenné postrehy a rady pri práci s formátovacím jazykom LaTeX. V neposlednom rade ďakujem svojej rodine za prejavenú podporu a poskytnutie optimálnych podmienok pre sústredenú prácu a Bohu, že som sa napriek všetkému tohto dňa dožil.

Čestné prehlásenie:
Prehlasujem, že som túto bakalársku prácu vypracoval samostatne a uviedol som všetku použitú literatúru.

Nemám závažný dôvod proti použitiu tohto diela v zmysel § 60 Zákona č. 121/2000 Sb., o práve autorskom, o právach súvisiacich s právom autorským a o zmene niektorých zákonov.

V Prahe dňa 7. júla 2017

Název práce:

Turingův model prostorového uspořádání a vliv geometrie

Autor: Juraj Kováč

Obor: Matematické inženýrství

Zaměření: Matematická fyzika

Druh práce: Bakalářská práce

Vedoucí práce: doc. Ing. Václav Klika, Ph.D., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Konzultant: Mgr. Michal Kozák, Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Predstavíme koncept difúziou poháňanej nestability. Budeme sa zaoberať vplyvom geometrie a špecificky okrajových podmienok na vlastné čísla Laplaceovho operátora. Porovnáme riešenie Turingových rovníc a príslušné vlastné čísla a funkcie, ako aj vzniklé módy, pre 2-zložkový Turingovský systém na povrchu sféry (t.j. bez okrajových podmienok) s najjednoduchšími prípadmi úsečkou a obdĺžnikom, na ktoré nakladáme podmienky nulového toku na hranici.

Klíčová slova: difúziou poháňaná nestabilita, okrajové podmienky, reakčno-difúzne rovnice, spektrum Laplaceovho operátora, Turingov model

Title:

Turing model for self-organisation and influence of geometry

Author: Juraj Kováč

Abstract: We will introduce the concept of diffusion-driven instability. We will investigate the influence of geometry and specifically of boundary conditions on the eigenvalues of the Laplace operator. In addition, we will compare the solutions to Turing's reaction-diffusion equations for a 2-component Turing system, and the corresponding spectra of the Laplacian, on a spherical surface of given radius (with no boundaries) with the simple cases of Turing equations on a line and on a rectangle equipped with zero-flux boundary conditions.

Key words: boundary conditions, diffusion-driven instability, reaction-diffusion equations, spectrum of the Laplace operator, Turing model

Obsah

Úvod

Je tomu 65 rokov, čo Alan Turing vo *Philosophical Transactions of the Royal Society* publikoval vo svojej dobe novátorskú myšlienku, že minimálne za časť ou nesmierne bohatého spektra tvarov a vzorov, ktoré pozorujeme v prírode, sa môže skrývať difúzia. Difúzia, dovtedy vnímaná prakticky výlučne ako stabilizačný a homogenizačný faktor naberá v jeho teórii celkom novú úlohu: úlohu práve toho hráča, ktorý počiatočný homogénny stav vyvíjajúceho sa systému urobí definitívne minulosť ou. Turing vo svojom pôvodnom článku podáva pomerne rozsiahlu matematicko-fyzikálno-chemickú analýzu toho, ako a za akých okolností môže k tomuto javu, dnes nazývanému *difúziou poháňaná nestabilita* (angl. *diffusion-driven instability*), dôjsť. Napriek pomerne podrobnej analýze, ktorej tento model podrobil už samotný autor a po ňom mnohí ď alší, sa dá povedať, že pôvodná myšlienka konceptu difúziou poháňanej nestability je vlastne ohromujúco jednoduchá. Turing totiž ukázal, že i relatívne nepatrná, čisto štatistická či bunkovými fluktuáciami spôsobená nehomogenita, ktorá sa "votrie"do pôvodne homogénneho systému, sa môže vplyvom difúzie rozšíriť a priviesť systém do úplne nového nehomogénneho stavu.

Z biologického hľ adiska tento model vsádzame do počiatkov embryogenézy. Turingova myšlienka zapadá do širšieho konceptu tzv. polohovej informácie (angl. *positional information*), ktorý postuluje, že kmeňové bunky majú pri procese diferenciácie informáciu o tom, kde sa v rámci daného embrya nachádzajú, a podľ a toho "vedia", akým spôsobom sa majú diferencovať. Táto informácia sa k nim podľ a tejto teórie prenáša prostredníctvom koncentračného gradientu látok, ktoré Turing nazýva *morfogény*. Model má však širšie uplatnenie, napr. v chémií či ekológií. Vskutku v chémií sa "turingovské"procesy a reakcie pozorovali a potvrdili relatívne dávno, zatiaľ čo v biológií sa na experimentálne potvrdenie modelu čakalo veľ mi dlho. Až posledné 2 desať ročia priniesli pozorovania, ktoré podávajú pomerne silné svedectvo o prítomnosti javu difúziou poháňanej nestability pri vzniku usporiadania vo vyvíjajúcich sa organizmoch.

My sa v tejto práci zameriavame najmä na matematické aspekty Turingovej myšlienky. Najskôr predkladáme ideový a matematický aparát potrebný pre prácu s týmto konceptom. Ide najmä o myšlienku linearizácie systémov obyčajných a parciálnych diferenciálnych rovníc a s tým spojený koncept lineárnej stability, a vlastnosti Laplaceovho operátora, ktorý slúži na popis difúzie. Tu zohrávajú dôležitú rolu okrajové podmienky "izolovaného systému". Ďalej odvodzujeme podmienky, aké musí systém spĺňať, aby v ňom boli Turingom predkladané javy vôbec možné a nachádzame obmedzenia pre to, aké vzory možno od "turingovských" systémov očakávať. V ď alších kapitolách uvádzame analytické riešenia geometricky najjednoduchších prípadov difúziou poháňanej nestability na úsečke a obdĺžniku a diskutujeme rolu geometrie a okrajových podmienok v nich. V praktickej časti sa potom pokúšame o analytické riešenie tohto modelu na povrchu sféry, t.j. na ploche s výrazne odlišnou - nerovinnou - geometriou a bez akýchkoľ vek okrajových podmienok. Na záver zhŕňame obdržané výsledky a pozorovania.

Kapitola 1

Teoretický úvod

1.1 Lineárna stabilita PDR

Pojmom lineárna stabilita budeme rozumieť stabilitu riešenia (pojem stability definujeme zakrátko) lineárnych a linearizovaných systémov parciálnych diferenciálnych rovníc (PDR). Uvažujme teda najprv obecný systém PDR tvaru

$$u_t = Au + F(u), \tag{1.1}$$

kde A je nejaký lineárny operátor (trebárs diferenciálny) na Banachovom priestore X a $F(u)$ je nelineárne zobrazenie $X \supset \mathrm{Dom}\, F \to X$. Túto úlohu sa pokúsime linearizovať. Predpokladajme existenciu stacionárneho riešenia $u_*(x)$ úlohy $u_t = Au + F(u)$, t.j. $Au_* + F(u_*) = 0$. Ďalej uvažujme perturbáciu v, t.j. položme $u = u_* + v$. Pre F primerane hladké potom rozvinutím do Taylorovho radu dostávame

$$v_t = (u_* + v)_t = A(u_* + v) + F(u_* + v) = Au_* + Av + F(u_*) + DF(u_*)v + O(v^2) = Av + DF(u_*)v + O(v^2), \tag{1.2}$$

kde $DF(u_*)$ je Jacobiho matica zobrazenia F vyčíslená v bode u_*. Pre riešenia blízke stacionárnemu stavu u_*, t.j. $\|v\|$ dostatočne malé, zanedbáme člen $O(v^2)$, čím pre úlohu 1.1 dostaneme

$$v_t = Av + DF(u_*)v = (A + DF(u_*))v =: Lv,$$

kde L je lineárny operátor na X, pretože lineárne zobrazenia nad Banachovými priestormi tvoria lineárny vektorový (dokonca Banachov) priestor. [19] Takto sme obdržali tzv. linearizovaný tvar pôvodnej PDR. Z tohto dôvodu budeme ďalej uvažovať lineárne systémy

$$u_t = Lu \tag{1.3}$$

pre lineárny operátor L na Banachovom priestore X, $u \in X$. Pretože z 1.2 plynie, že na vzťah 1.3 môžme nahliadať ako na rovnicu pre perturbáciu nejakého stacionárneho riešenia $u_*(x)$ (ak toto existuje), bude nás zaujímať stabilita nulového riešenia $u(t) \equiv 0$. Tú definujeme nasledovne:

Definícia 1.1.1. Nulové riešenie $\tilde{u}(t) \equiv 0$ systému 1.3 s počiatočnou podmienkou $u(t = 0) = u_0$ nazývame lineárne (Ljapunovsky) stabilným $\Leftrightarrow$ $(\forall \varepsilon > 0)(\exists \delta > 0)(\|u_0\| < \delta \Rightarrow \forall t \geq 0 : \|u(t)\| \leq \varepsilon)$. Toto riešenie ďalej nazývame asymptoticky stabilným $\Leftrightarrow$ $(\exists \delta^* > 0)(\|u_0\| < \delta^* \Rightarrow \lim_{t\to\infty} \|u(t)\| = 0)$.

Pre potreby riešenia systému 1.3 pre *obmedzené* operátory L zavádzame maticovú/operátorovú exponenciálu vzťahom

$$e^{Lt} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(Lt)^k}{k!}. \tag{1.4}$$

Z platnosti nerovnosti $\|A^k\| \leq \|A\|^k$ pre operátorovú normu $\|A\| = \sup\limits_{\|x\|=1} \|Ax\|$ dostávame odhad

$$||e^{Lt}|| = ||\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(Lt)^k}{k!}|| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \frac{||L||^k t^k}{k!} = e^{||L||t}, \forall t \geq 0.$$

Teda ak je L obmedzený operátor (t.j. $||L|| < \infty$), je aj e^{Lt} obmedzený operátor pre každé $t \geq 0$. Na konečnej dimenzii, kde pojmy matica a operátor splývajú, bude pre maticu $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ a $u_0 \in \mathbb{R}^n$ platiť (pri derivovaní "po zložkách")

$$e^{Lt}|_{t=0}u_0 = Iu_0 = u_0, \qquad \frac{d}{dt}\left(e^{Lt}u_0\right) = Le^{Lt}u_0, \tag{1.5}$$

z čoho plynie, že $e^{Lt}u_0$ je v tomto prípade jediným riešením úlohy 1.3 s počiatočnou podmienkou $u(t = 0) = u_0$ (L je teraz číselná matica, takže ide o systém obyčajných diferenciálnych rovníc). Všimnime si ďalej, že ak je L diagonalizovateľná, t.j. $L = TDT^{-1}$ pre nejakú regulárnu maticu $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ a diagonálnu maticu $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (ktorej diagonálne prvky sú v tom prípade vlastné čísla $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ matice L), dostaneme využitím $L^k = TD^kT^{-1}$

$$e^{Lt} = T\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(Dt)^k}{k!}T^{-1} = T\begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & e^{\lambda_n t}\end{pmatrix}T^{-1} \tag{1.6}$$

t.j. "časový vývoj" operátora e^{Lt} bude plne obsiahnutý v príslušnej diagonálnej matici. V tomto prípade je zrejmé, že riešenie úlohy 1.3 bude asymptoticky stabilné práve vtedy, ak bude Re $\lambda_k < 0$ pre $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$. Ljapunovskú stabilitu zasa zaručí Re $\lambda_k \leq 0, \forall k \in \{1, \ldots, n\}$ (pre Re $\lambda_i > 0$ by i-tá zložka vektoru u_0 rástla s časom neobmedzene, pre Re $\lambda_i = 0$ sa jej absolútna hodnota v čase nemení). Tieto výsledky možno za pomoci Jordanovej podobnostnej transformácie pomerne priamočiaro zovšeobecniť aj pre nediagonalizovateľné matice. Časový vývoj bude opäť obsiahnutý v Jordanovej matici, avšak Re $\lambda_k \leq 0$ nebude pre stabilitu postačovať. Nutnou a postačujúcou podmienkou (Ljapunovskej) stability bude v tomto prípade, aby Re $\lambda_k \leq 0, \forall k \in \{1, \ldots, n\}$ a aby všetky vlastné čísla s Re $\lambda_i = 0$ mali svoju geometrickú násobnosť rovnú algebraickej. Asymptotická stabilita ostane ekvivalentná tomu, aby Re $\lambda_k < 0, \forall k \in \{1, \ldots, n\}$ (viď. [4]).

S podobným prístupom, keď sa časový vývoj systému "schová"do operátora, sa čitateľ mohol stretnúť napr. v Heisenbergovom obraze kvantovej mechaniky, viď napr. str. 665-666 v [8]. Treba dodať, že trieda operátorov $\{e^{Lt}\}_{t\geq 0}$ (avšak pre neobmedzené, napr. diferenciálne, operátory zavedená obecnejšie než v 1.4), v literatúre nazývaná semigrupa pridružená lineárnemu operátoru L, si za určitých dodatočných predpokladov mnoho "príjemných"vlastností zachová aj na priestoroch nekonečnej dimenzie (napríklad silná spojitosť tejto semigrupy zaručuje jednoznačnosť riešenia príslušnej PDR danej operátorom L). Tieto a ďalšie skutočnosti podnietili rozsiahly výskum tohto objektu, ktorý ďaleko presahuje potreby a rozsah tejto práce. Súhrn tejto teórie spolu s dôkazmi tu uvedených tvrdení pre nediagonalizovateľné matice poskytujú napr. Engel a Nagel v [7].

1.2 Pojem vzoru v biológii

Pojem vzoru je jedným z fundamentálnych pojmov (nielen) modernej biológie. Vzory pozorujeme prakticky na všetkých škálach a úrovniach, počnúc štruktúrovaným a vysoko organizovaným správaním sa populácií mikroorganizmov či baktérií, cez usporiadanie listov v kvete tulipánu či kolektívne vystupovanie svoriek divých vlkov pri love, až po sofistikovanú a pozoruhodne funkčne uspôsobenú stavbu ľudských končatín. Pokiaľ ide o vzory morfologického charakteru, všetko nasvedčuje tomu, že akýsi základný plán budúceho vývinu je spravidla položený v najranejšom štádiu vývinu jedinca, ktorého popisom sa zaoberá embryológia. Napríklad v prípade ľudského embrya je tento základný plán budúceho vývoja, ktorý po počatí riadi prvotné delenie buniek a ich následnú priestorovú organizáciu, položený do 5. týždňa vývoja. [12] Pôvod a mechanizmus prvotnej realizácie tohto "pôdorysu"vyvíjajúceho sa organizmu nie sú známe. Objektom nášho záujmu bude z embryologického hľadiska predovšetkým následná fáza vývoja, morfogenéza, teda vznik a vývoj vzoru, resp. tvaru, na pozadí tohto pôdorysu. Budeme sa zaoberať otázkou vzniku stacionárneho, priestorovo heterogénneho vzoru, konkrétne jedným z matematických modelov (mechanizmov) jeho vzniku, reakčno-difúznym modelom predloženým Alanom Turingom v roku 1952. Treba však dodať, že tento model je len jedným z mnohých dosiaľ predložených konceptov vzniku samovoľného usporiadania, ktorých rozmanitosť a univerzálnosť zväčša ďaleko zaostávajú za nesmiernou rozmanitosťou a bohatosťou palety vzorov pozorovaných vo svete biológie. Ich pôvod a mechanizmus vzniku zostáva napriek vedeckým pokrokom zväčša neznámy a teda predstavuje obrovskú výzvu, a to tak pre teoretikov, v oblasti skúmania predložených modelov, príp. predkladania nových, ako aj pre experimentátorov, v oblasti konfrontácie týchto modelov s biologickou realitou. Sotva možno očakávať, že niektorý individuálny model by sám zodpovedal otázky súvisiace so vznikom a vývinom biologických vzorov, no ich štúdium a následná experimentálna verifikácia nám môžu poskytnúť cennú predstavu o tom, aké vlastnosti a prvky by mal kompletný model/súbor modelov zahŕňať.

1.3 Turingov reakčno-difúzny model

Jedným z najznámejších a azda aj najdiskutovanejších mechanizmov vzniku samovoľného usporiadania je reakčno-difúzny model predložený pred vyše pol storočím Alanom Turingom. [18] Jeho obecný tvar je

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = f(\mathbf{c}) + D\Delta\mathbf{c}, \tag{1.7}$$

kde $\Delta = \nabla^2$ reprezentuje Laplaceov operátor, D je diagonálna matica (kladných) difúznych koeficientov, $\mathbf{c}$ je vektor koncentrácií prítomných morfogénov a $f(\mathbf{c})$ je obecne nelineárny člen popisujúci kinetiku prebiehajúcich chemických reakcií. Popis difúzie pomocou Laplaceovho operátora zodpovedá tradičnej predstave o difúzii, t.j. že každá z prítomných látok (morfogénov) sa presúva z oblasti vyššej koncentrácie do oblasti nižšej koncentrácie v miere, ktorá je úmerná gradientu tejto koncentrácie a "difúzivite"(popísanej príslušným difúznym koeficientom), pričom však táto miera nezávisí na polohe.[18] Táto predstava sa zdá adekvátna pre popis embryogenézy, avšak v biomedicínskych aplikáciach sa čoraz častejšie využívajú modely, kde difúzny koeficient na polohe závisí, napr. na popis vývoja populácie geneticky modifikovaných organizmov v heterogénnom prostredí (viď kapitolu 11 v [13]). Uveďme ešte, že pojem morfogén nemá v turingovskom zmysle presné vymedzenie a rozumie sa ním akákoľvek chemická látka, resp. sada látok, ktoré ovplyvňujú proces diferenciácie buniek počas embryogenézy, a ktorých reakčno-difúzny mechanizmus spĺňa podmienky pre jav tzv. blízkej aktivácie - vzdialenej inhibície (angl. "short-range activation, long-range inhibition"), ktorých odvodeniu sa budeme venovať v ďalšom texte. [3]

Turingov model je pozoruhodný hneď z niekoľkých hľadísk. Asi najviac púta jeho jednoduchosť: model uvažuje len chemické zmeny vo forme difúzie a reakcií prítomných chemikálií (morfogénov) a úplne zanedbáva mechanické vlastnosti systému. Zameriava sa teda na prípady, kde chemické mechanizmy prevládajú a kde nie je potrebné uvažovať mechaniku jednotlivých buniek ani aproximovať vlastnosti príslušného biologického materiálu mechanikou pružného spojitého prostredia. V praxi to znamená, že predpokladá dej prebiehajúci v tkanive, ktoré je stacionárne (nerastie) a jeho jediným prejavom je, že poskytuje prostredie pre difúziu prítomných látok. Zaujímavá je tiež úloha difúzie. Model totiž popisuje procesy, ktorých kinetika umožňuje ustálenie lineárne stabilného stacionárneho stavu, ktorý je narušený náhodnými priestorovými perturbáciami, ktoré vplyvom difúzie spôsobia vznik nového, priestorovo heterogénneho usporiadania. Difúzia tu teda hrá rolu destabilizačného elementu, čo je v silnom kontraste s tradičným vnímaním jej úlohy ako stabilizátora a deja, ktorý zmenšuje až eliminuje koncentračný gradient. Za povšimnutie stojí tiež skutočnosť, že hoci v chémií sa s difúziou poháňanou (turingovskou) nestabilitou stretáme bežne, jej prítomnosť v prírode (biológii) bola dlho otvorenou otázkou. Upútala napríklad záujem výskumnej skupiny vedenej M. Akamom, ktorý na základe pozorovania muchy zvanej drozdofila v roku 1989 tento koncept pre biológiu úplne zavrhol. Renesanciou mu však bolo skúmanie distribúcie vlasových folikulov vo vyvíjajúcej sa myšej koži, pri ktorom Sick et al. konštatovali, že proteín WNT, ktorého prebytok zvyšuje koncentráciu folikulov a teda zahusťuje srsť vyvíjajúcej sa myši, a jeho inhibítor DKK s presne opačným účinkom, vskutku majú pri tomto procese všetky vlastnosti morfogénov v turingovskom zmysle. [9] Tento vývoj udalostí podnietil v posledných rokoch novú vlnu záujmu o skúmanie Turingovho modelu, ktoré sa takto opäť stalo nielen teoreticky zaujímavým, ale aj prakticky zmysluplným bádaním.

Venujme sa teraz špecificky reakčno-difúznemu systému o dvoch zložkách $A(\mathbf{r}, t)$, $B(\mathbf{r}, t)$. V tomto prípade 1.7 prejde na

$$\begin{aligned}\frac{\partial A}{\partial t} &= F(A, B) + D_A \Delta A,\\ \frac{\partial B}{\partial t} &= G(A, B) + D_B \Delta B,\end{aligned} \tag{1.8}$$

kde F a G sú nelineárne členy popisujúce reakčnú kinetiku skúmaných látok. Ako sme už spomenuli, fenomén difúziou poháňanej (turingovskej) nestability je založený na jave blízkej aktivácie - vzdialenej inhibície, ktorý, ako možno očakávať, požaduje rôznu rýchlosť difúzie u jednotlivých zložiek systému, t.j. $D_A \neq D_B$. Pre intuíciu sa tento jav pokúsime demonštrovať na ilustratívnom, i keď nerealistickom príklade prevzatom z [12].

Uvažujme lúku so suchou trávou a populáciou kobyliek. Povedzme, že tieto kobylky na teplo reagujú potením a tak môžu zvlhčovať prostredie, v ktorom sa nachádzajú. Predstavme si teraz, i keď neradi, že sa touto lúkou začne rýchlosťou D_p šíriť požiar. Tento scenár pochopiteľne vyruší aj prítomné kobylky, ktoré sa pokúsia uniknúť pred šíriacimi sa plameňmi. Ak pred nimi budú unikať rýchlosťou $D_k < D_p$, čaká ich aj samotnú lúku neblahý osud. Buďme teda optimisti a predpokladajme $D_k > D_p$. Potom vypuknutie požiaru spôsobí, že sa kobylky presunú do ešte nezasiahnutých častí lúky, kde sa ich koncentrácia zvýši. Nielen to; možno tiež očakávať, že ich požiar nenechá chladnými a pri presune a po ňom sa budú potiť. Ak sa budú potiť dostatočne výdatne, vytvoria vlhkú zónu, do ktorej sa požiar nerozšíri. Ak teraz - už azda oslobodení od katastrofických predstáv - uvážime situáciu, že na lúke sa takto objaví niekoľko náhodne rozmiestnených zdrojov plameňov, môžme usúdiť, že na základe popísaného mechanizmu sa vytvoria zóny vyhorené a v ich okolí, vďaka vysokej koncentrácii potiacich sa kobyliek, zóny pred požiarom uchránené. Mohli by sme povedať, že takto na lúke samovoľne vznikne usporiadanie, resp. *vzor*.

1.4 Podmienky pre jav difúziou poháňanej nestability

Zaoberajme sa teraz podmienkami, za akých je možný vznik usporiadania mechanizmom difúziou poháňanej nestability (DDI). Pre tento účel prevedieme rovnicu 1.8 vhodným preškálovaním a algebraickými úpravami do bezrozmerného tvaru, ktorého výhodou je okrem iného tiež to, že má omnoho širšie možnosti aplikácie, napr. v ekológii. Pre ilustráciu, ale aj pre potreby ďalšieho textu, uvedieme príklad takejto transformácie pre hypotetickú reakčnú kinetiku schopnú Turingovskej nestability v tvare

$$\begin{aligned}F(A, B) &= k_1 - k_2 A + k_3 A^2 B\\ G(A, B) &= k_4 - k_3 A^2 B\end{aligned} \tag{1.9}$$

predloženú Schnakenbergom (1979). [15] Ak položíme (viď kapitolu 2.2 v [12])

$$d = \frac{D_A}{D_B}, \qquad a = \frac{k_1}{k_2}\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \qquad b = \frac{k_4}{k_2}\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \qquad \gamma = \frac{L^2 k_2}{D_A}$$

$$u = A\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \qquad v = B\sqrt{\frac{k_3}{k_2}}, \qquad \tau = \frac{D_A t}{L^2}, \qquad \tilde{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{L}, \tag{1.10}$$

kde sme zaviedli L ako typický rozmer (škálu) pre danú úlohu, dostaneme hľadaný bezrozmerný tvar

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = \gamma(a - u + u^2 v) + \Delta_{\tilde{\mathbf{r}}} u$$

$$\frac{\partial v}{\partial \tau} = \gamma(b - u^2 v) + d\Delta_{\tilde{\mathbf{r}}} v. \tag{1.11}$$

Preznačením $\tau \to t, \tilde{\mathbf{r}} \to \mathbf{r}$ (z čiste praktických dôvodov) a pridaním okrajovej podmienky nulového toku na hranici uvažovanej oblasti $W = \mathrm{Dom}\, u = \mathrm{Dom}\, v$ (zaujíma nás vznik *samovoľného* usporiadania) a počiatočnej podmienky potom obdržíme obecný bezrozmerný predpis úlohy DDI pre 2-zložkový systém v tvare

$$\frac{\partial u}{\partial t} \equiv u_t = \gamma f(u, v) + \Delta u,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} \equiv v_t = \gamma g(u, v) + d\Delta v,$$

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla)\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0, \qquad \mathbf{r} \in \partial W,$$

$$u(\mathbf{r}, 0) = u_0(\mathbf{r}), \qquad v(\mathbf{r}, 0) = v_0(\mathbf{r}), \tag{1.12}$$

kde $d = D_A/D_B$ je pomer difúznych koeficientov, γ je škálovacia konštanta obecne závislá na typickej veľkosti (resp. škále) uvažovanej oblasti a na konkrétnom tvare kinetických členov F, G v 1.8, u a v sa získajú z A a B vynásobením patričnými konštantami (ako príklad viď 1.10) a $\mathbf{n}$ je vonkajšia normála W. Dôležité však je, že parametre reakčnej kinetiky sa volia kladné, a teda budú kladné aj príslušné škálovacie konštanty.

Dôležitým predpokladom turingovských systémov je existencia homogénneho stacionárneho stavu (u_0, v_0), ktorý bude riešením sústavy

$$f(u_0, v_0) = 0, \qquad g(u_0, v_0) = 0. \tag{1.13}$$

Ako sme už uviedli, Turingovská nestabilita je spôsobená difúziou; Turingovské systémy sú teda systémy, ktoré sú lineárne stabilné voči perturbáciam v neprítomnosti difúzie, t.j. pre homogénnu počiatočnú podmienku rôznu od (u_0, v_0), ale nestabilné s difúziou, čo znamená, že priestorovo heterogénne perturbácie (ktoré difúziu "spustia") povedú za určitých podmienok k ustáleniu heterogénneho stavu. Vlastnosti systému z pohľadu Turingovho modelu budú teda do značnej miery závisieť od vlastností funkcií f a g v okolí priesečníku grafov ich nulových bodov. Ako sme naznačili, budeme požadovať, aby bol tento stav lineárne stabilný voči (dostatočne malým) homogénnym perturbáciam. Homogénny stav potom musí spĺňať

$$u_t = \gamma f(u, v), \qquad v_t = \gamma g(u, v). \tag{1.14}$$

Linearizáciou v okolí (u_0, v_0) a využitím 1.2 pre $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix}$ dostávame za predpokladu, že $\|\mathbf{w}\|$ je dostatočne malá

$$\mathbf{w}_t = \gamma A \mathbf{w}, \qquad \text{kde } A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{u_0, v_0}. \tag{1.15}$$

Maticu A nazývame maticou stability. Dostali sme systém lineárnych diferenciálnych rovníc s konštantnými koeficientami, ktorého riešenie hľadáme v tvare $\mathbf{w} = \mathbf{c}e^{\lambda t}$ (viď kapitolu 5 v [17]). Dosadenie tohto tvaru do 1.15 a predelenie nenulovým výrazom $e^{\lambda t}$ vedie na charakteristickú rovnicu matice γA

$$\left|\gamma A - \lambda I\right| = 0 \Rightarrow \lambda^2 - \lambda\gamma(f_u + g_v) + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) = 0, \tag{1.16}$$

ktorej riešením je

$$\lambda_{1,2} = \frac{\gamma}{2}[f_u + g_v \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)}]. \tag{1.17}$$

Z podmienky stability (definícia 1.1.1; požadujeme, aby $||\mathbf{w}|| \to 0$ pre $t \to \infty$) dostávame požiadavku Re $\lambda < 0$. Lineárna stabilita riešenia teda bude zaručená za predpokladu

$$f_u + g_v = \mathrm{tr}A < 0, \qquad f_u g_v - f_v g_u = |A| > 0. \tag{1.18}$$

Všetky parciálne derivácie funkcií f a g v predchádzajúcich výrazoch vyhodnocujeme v bode (u_0, v_0), ktorý zodpovedá homogénnemu stacionárnemu riešeniu rovníc 1.12. Je vhodné poznamenať, že podmienky 1.18 sú podmienkami na reakčnú kinetiku skúmaného systému popísanú funkciami f a g, ktoré budú závisieť na reakčných parametroch. V konečnom dôsledku sa teda DDI pripúšťa len pre vybrané kombinácie reakčných parametrov.

Máme teda podmienky pre lineárnu stabilitu systému bez difúzie; zaoberajme sa teraz podmienkami pre *nestabilitu* systému s difúziou, ktorá je podmienkou pre vznik Turingovských vzorov. Uvažujme teda systém 1.12 po linearizácii, t.j.

$$\mathbf{w}_t = \gamma A\mathbf{w} + D\Delta\mathbf{w}, \qquad \text{kde } D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

s príslušnými počiatočnými a okrajovými podmienkami. Vyjadrime riešenie tohto systému v báze vlastných vektorov Laplaceovho operátora. Existencia takejto bázy pre obmedzenú oblasť W plynie z vlastností Sturm-Liouvilleovho operátora

$$Lh(x) = -\mathrm{div}(p(x)\mathrm{grad}h(x)) + q(x)h(x)$$

s Robinovou okrajovou podmienkou

$$\alpha(x)h(x) + \beta(x)(\mathbf{n}\cdot\nabla)h(x) = 0, x \in \partial W,$$

kde $\alpha, \beta \geq 0, \alpha+\beta > 0, p(x) > 0, q(x) \geq 0, p \in C^1(\bar{W}), q \in C(\bar{W})$ a $\mathbf{n}$ opäť značí vonkajšiu normálu. Dá sa totiž ukázať, že tento operátor definovaný na podpriestore $L^2(W)$ danom Dom $L = \{h \in C^2(W) \cap C^1(\bar{W}) :$ $Lh \in L^2(W), h$ spĺňa okrajové podmienky$\}$ je symetrický a má inverziu - integrálny operátor so spojitým jadrom v podobe Greenovej funkcie (pre prípad 1D viď kapitolu 6 v [11]). Operátory so spojitým (a teda kvadraticky integrabilným) jadrom sú na $L^2(W)$ kompaktné (dokonca Hilbert-Schmidtove, viď str. 32 v [10]). Z Hilbert-Schmidtovej vety (Veta 6.2.4 v [6]) potom plynie, že vlastné vektory L^{-1} (a teda aj L) tvoria ON bázu priestoru $L^2(W)$. Vidíme, že voľbou $q \equiv 0, p \equiv 1, \alpha \equiv 0, \beta \equiv 1$ dostávame $L = -\Delta, (\mathbf{n}\cdot\nabla)h(x) = 0$. Vlastné vektory Laplaceovho operátora s von Neumannovou okrajovou podmienkou teda skutočne tvoria ON bázu $L^2(W)$.

Označme teda $\mathbf{w}_k$ riešenie úlohy

$$\Delta\mathbf{w}_k + k^2\mathbf{w}_k = 0, \qquad (\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{w}_k = 0, \qquad \mathbf{r} \in \partial\mathrm{Dom}\ \mathbf{w}_k, \tag{1.20}$$

kde Dom $\mathbf{w}_k \equiv$ Dom $\mathbf{w}$ je nezávislý na k. Reálnosť a nekladnosť vlastného čísla $-k^2$ pre úlohu s touto okrajovou podmienkou elegantne plynie z kaptioly 2.1.1 v [2]. Riešenie lineárneho problému 1.19 teda budeme hľadať v tvare

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \sum_k c_k\mathbf{w}_k(\mathbf{r})e^{\lambda_k t}. \tag{1.21}$$

Dosadením tohto tvaru do 1.19 a využitím vlastností $\mathbf{w}_k$ dostávame po predelení výrazom $e^{\lambda t}$

$$\lambda \mathbf{w}_k = \gamma A \mathbf{w}_k - Dk^2 \mathbf{w}_k.$$

Aby sme odvodili hľadanú podmienku nestability systému s difúziou, použijeme požiadavku netriviálneho riešenia

$$|\lambda I - \gamma A + Dk^2| = \begin{vmatrix} \lambda - \gamma f_u + k^2 & -\gamma f_v \\ -\gamma g_u & \lambda - \gamma g_v + dk^2 \end{vmatrix} = 0,$$

ktorá po jednoduchej úprave vedie na kvadratickú rovnicu

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1+d) - \gamma(f_u+g_v)] + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) - k^2\gamma(g_v + df_u) + dk^4 \equiv \lambda^2 + \lambda[k^2(1+d) - \gamma(f_u+g_v)] + h(k^2) = 0,$$

kde

$$h(k^2) = \gamma^2|A| - k^2\gamma(g_v + df_u) + dk^4. \tag{1.22}$$

Vzťah $\lambda(k^2)$ plynúci z tejto kvadratickej rovnice sa nazýva *disperzná relácia*. Povšimnime si, že podmienka lineárnej stability systému bez priestorových efektov v podobe difúzie, t.j. pre $k = 0$, vedie na rovnicu 1.16 a z požiadavky Re $\lambda < 0$ sme obdržali podmienky 1.18. Pretože ale požadujeme, aby systém s difúziou *nebol* lineárne stabilný, budeme chcieť, aby pre nejakú (nenulovú) hodnotu k bolo Re $\lambda(k) > 0$. Zo vzťahu pre korene kvadratickej rovnice je zrejmé, že toto môže nastať buď v prípade, keď je koeficient lineárneho člena rovnice 1.22 záporný, alebo v prípade, keď je záporný absolútny člen $h(k^2)$. Zároveň však platí, že $k^2(1 + d) > 0$ bez ohľadu na hodnotu k a z 1.18 máme $f_u + g_v < 0$. Preto bude

$$k^2(1 + d) - \gamma(f_u + g_v) > 0.$$

Aby teda mohli byť splnené podmienky DDI, musí platiť

$$h(k^2) < 0 \qquad \text{pre nejaké } k \neq 0. \tag{1.23}$$

Pretože ale v 1.18 požadujeme, aby bolo

$$f_u g_v - f_v g_u = |A| > 0,$$

je z tvaru $h(k^2)$ zrejmé, že pre splnenie 1.23 musí byť $df_u + g_v > 0$. Opäť sa vráťme k podmienkam 1.18, z ktorých vidíme, že zároveň musí byť splnené $f_u + g_v = \mathrm{tr}A < 0$. Aby mohli platiť oba tieto vzťahy, musia mať f_u a g_v (v bode (u_0, v_o)) opačné znamienka a musí byť tiež $d \neq 1$. Teda dostávame ďalšiu podmienku pre Turingovskú nestabilitu v tvare

$$df_u + g_v > 0 \Rightarrow d \neq 1. \tag{1.24}$$

Pripomeňme si, že d je pomer difúznych koeficientov jednotlivých zložiek systému, a teda podmienka $d \neq 1$ nie je ničím iným, než vyjadrením intuitívneho záveru, ku ktorému sme dospeli už v kapitole 1.3.

Obdržali sme teda ďalšiu podmienku pre DDI. Táto podmienka je však nutná, nie postačujúca. Pokúsme sa teda nájsť postačujúcu podmienku pre splnenie 1.23. Pretože koeficient pri "kvadratickom"člene $(k^2)^2$ je $d > 0$, je z tvaru príslušnej paraboly zrejmé, že musíme požadovať, aby bola podmienka $h(k^2) < 0$ splnená v jej vrchole (minime). Elementárnym užitím diferenciálneho počtu voči premennej k^2 dostaneme pre vrchol tejto paraboly

$$k_m^2 = \frac{\gamma(df_u + g_v)}{2d} \qquad \Rightarrow \qquad h_{min} \equiv h(k_m^2) = \gamma^2\left[|A| - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}\right]. \tag{1.25}$$

Podmienka 1.23 teda prejde na

$$|A| = f_u g_v - f_v g_u < \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \tag{1.26}$$

Pre dané parametre reakčnej kinetiky teda môžme uvažovať istý kritický pomer difúznych koeficientov d_c, ktorý bude spĺňať $(d_c f_u + g_v)^2/4d = |A|$, t.j. minimum funkcie $h(k^2)$ pre túto hodnotu d bude práve 0. Tento kritický difúzny koeficient bude (kladným) koreňom rovnice

$$d_c^2 f_u^2 + 2d_c(2f_v g_u - f_u g_v) + g_v^2 = 0. \tag{1.27}$$

Odpovedajúce "kritické"vlastné (vlnové) číslo potom spĺňa

$$k_c^2 = \gamma \frac{d_c f_u + g_v}{2d_c} = \gamma \sqrt{\frac{|A|}{d_c}} = \gamma \sqrt{\frac{f_u g_v - f_v g_u}{d_c}}. \tag{1.28}$$

Zhrňme teraz naše doterajšie výsledky ohľadom podmienok pre jav difúziou poháňanej nestability (DDI). Tento jav požaduje, aby bol homogénny stacionárny stav systému bez difúzie lineárne stabilný. Lineárna stabilita bude zaručená, ak budú splnené podmienky 1.18. Zároveň požadujeme, aby difúzia tento systém destabilizovala. Nutnou podmienkou nestability systému s difúziou je 1.24. Postačujúcou podmienkou je zasa 1.26 (všetky parciálne derivácie vyhodnocujeme v bode (u_0, v_0)). Za predpokladu splnenia týchto podmienok bude mať totiž rovnica 1.22 také riešenie, ktorého reálna časť bude kladná, a teda odpovedajúci mód z 1.21 nevymizne pre $t \to \infty$. Naskytá sa teda otázka, *ktoré* módy to v obecnom prípade budú. Pochopiteľne to budú všetky tie, pre ktoré takéto riešenie 1.22 existuje, t.j. všetky také k, pre ktoré je $h(k^2)$ záporné. Z tvaru paraboly zobrazujúcej závislosť $h(k^2)$ to budú všetky k medzi koreňmi rovnice $h(k^2) = 0$. Pomocou 1.22 určíme, že to budú práve také k, ktoré splnia

$$\begin{aligned} k_1^2 \equiv \frac{\gamma}{2d}\left[df_u + g_v - \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|}\right] < k^2 \\ < \frac{\gamma}{2d}\left[df_u + g_v + \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d|A|}\right] \equiv k_2^2. \end{aligned} \tag{1.29}$$

Pre hodnotu k_m určenú 1.25 bude mať reálna časť $\lambda(k^2)$ (za predpokladu $d > d_c$) maximum, ktoré bude zodpovedať najrýchlejšie rastúcemu módu riešenia 1.21. Je dobré si tiež uvedomiť, že s pribúdajúcim časom prevládnu v tomto riešení tie mody, ktoré majú Re $\lambda(k^2) > 0$ (ostatné, naopak, vymiznú), takže bude

$$\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) \sim \sum_{k_1}^{k_2} c_k \mathbf{w}_k(\mathbf{r}) e^{\lambda(k^2)t}, \qquad t \gg 0. \tag{1.30}$$

Kľúčovým predpokladom "rozumného"riešenia tvaru 1.21 je, že nelineárne členy pôvodných reakčno-difúznych rovníc 1.12 utlmia módy z 1.30 (ktoré sú s rastúcim časom neobmedzené) takým spôsobom, aby došlo k ustáleniu priestorovo heterogénneho stacionárneho stavu systému. Zásadnú rolu v tejto úvahe hrá existencia obmedzenej oblasti pre kinetiku systému v rovine (u, v), t.j. existencia takej oblasti, ktorej hranicu integrálne krivky (grafy vektorovej funkcie) $(u(t), v(t))$ s počiatočnou podmienkou vnútri tejto oblasti nepretnú (inak povedané z danej oblasti "nevylezú"). J. Smollerovi sa podarilo dokázať, že ak takáto oblasť existuje pre *reakčnú* kinetiku systému, tá istá oblasť bude obsahovať aj integrálne krivky plného *reakčno-difúzneho* systému. [16] Súčasťou analýzy takéhoto modelu je teda aj hľadanie takejto oblasti v rámci pozitívneho kvadrantu roviny (u, v).

Uveďme teraz kompletnú sadu dosiaľ obdržaných podmienok pre jav DDI:

$$f_u + g_v = \mathrm{tr}\, A < 0, \qquad f_u g_v - f_v g_u = |A| > 0,$$

$$df_u + g_v > 0, \qquad f_u g_v - f_v g_u < \frac{(df_u + g_v)^2}{4d}. \tag{1.31}$$

Z týchto podmienok vyplýva, že pre realizáciu javu DDI musia mať f_u a g_v opačné znamienka. Väčšina dosiaľ skúmaných modelov reakčnej kinetiky Turingovských systémov (či už empirických alebo predložených v rámci teoretického skúmania) má v bode (u_0, v_0) $f_u > 0, g_v < 0$, čo zodpovedá prípadu $d > 1$ (viď. kapitolu 2.2 v [12]). Podmienky 1.31 potom dávajú analogickú požiadavku $f_v g_u < 0$ aj pre druhý člen determinantu matice A. Túto podmienku možno splniť 2 spôsobmi: $f_v > 0, g_u < 0$ alebo $f_v < 0, g_u > 0$. Tieto 2 prípady zodpovedajú 2 kvalitatívne odlišným javom DDI, ktoré si teraz rozoberieme. Pripomeňme si, že reakčná kinetika systému (bez difúzie) musí spĺňať rovnice 1.14. Potom prípad

$$f_u > 0, f_v > 0, g_u < 0, g_v < 0 \tag{1.32}$$

zjavne popisuje systém, kde v je aktivátor (stimuluje koncentráciu druhého reaktantu u) s rýchlejšou difúziou, ktorý sám seba inhibuje, kým u je autoaktivačný inhibítor. V prípade

$$f_u > 0, f_v < 0, g_u > 0, g_v < 0 \tag{1.33}$$

je, naopak, u autoaktivačným aktivátorom, kým v zohráva úlohu inhibítora s autoinhibičnými účinkami a difunduje rýchlejšie, než aktivátor u. V tomto prípade budú vysoké koncentrácie u a v vďaka rýchlejšej difúzii zložky v priestorovo korelovať, prekrývať sa, budú "vo fáze". V prvom prípade to bude naopak, zóny zvýšenej koncentrácie u a v sa budú striedať, budú "mimo fázy". Tieto javy budeme opäť demonštrovať na modelových situáciach z oblasti ekológie prevzatých z [12]. Uvážme ekosystém skladajúci sa z dvoch živočíšnych druhov: predátora a koristi. Vysoká koncentrácia predátorov populáciu koristi preriedi; naopak, pri nízkej koncentrácii predátorov sa bude populácia koristi zvyšovať (neuvažujeme teda vplyvy prostredia ako dostatok či nedostatok potravy pre korisť a pod.). Bez rozptylu jedného či druhého druhu do okolitého prostredia teda bude existovať ustálený stav, kedy sa ich počty následkami predácie nebudú meniť.

Nech teda u reprezentuje populáciu koristi a v populáciu predátora (t.j. sme v prípade $f_v < 0$). Predchádzajúci odstavec nám potom vraví, že pozorovať jav DDI bude možné, len ak sa budú predátory rozptylovať do prostredia rýchlejšie než ich korisť a v takto vzniklom usporiadaní sa budú zóny zvýšenej koncentrácie oboch druhov striedať so zónami redšie osídlenými. Vskutku, ak uvážime v nejakej oblasti zvýšenú koncentráciu koristi, možno očakávať, že aj počty predátorov budú v danej oblasti stúpať. Pretože ale do našich úvah vpúšťame aj difúziu, nedôjde k ustáleniu rovnovážneho stavu, ako sme to načrtli pre prípad bez rozptylu. Počty predátorov totiž vďaka dostatku potravy síce stúpnu, v dôsledku rýchlejšej difúzie než u koristi sa však ich zvýšená koncentrácia začne "prelievať"do okolitých oblastí. Ak bude rozdiel v rýchlosti difúzie dosť veľký, ich koncentrácia v oblasti s hojnejším výskytom koristi síce stúpne, vďaka rozptylu však nie natoľko, aby "zrazila"populáciu koristi späť do homogénnej rovnováhy. Rozptyl predátorov do okolia tejto oázy koristi však zníži jej počty v susedných oblastiach, kde teda nebude dosť potravy pre ustálenie vyššej koncentrácie predátorov. Výsledkom budú zóny bohaté na výskyt oboch druhov popretkávané riedko osídlenými oblasťami.

Uvažujme teraz opačný prípad, nech teda u zastupuje dravca a v korisť, čo zodpovedá prípadu $g_u < 0$. Povšimnime si, že teraz (vďaka $f_u > 0$) je populácia dravca autokatalytická, t.j. jej bezprostredný nárast z rovnovážneho stavu podporuje ďalší rast. Takáto situácia nie je nijak výnimočná a v ekologickom kontexte môže byť jej vysvetlením vyššia efektivita pri love či rozmnožovaní. Opäť za pomoci diskusie matematických aspektov 1.32 usúdime, že pre jav DDI je nevyhnutné, aby sa rýchlejšie rozptyľovala korisť, a koncentrácie oboch druhov budú vo vzniklom übytovacom poriadku"mimo fázy. Tento tvrdenie podporíme nasledujúcou úvahou: nájdime v našom pomyselnom safari opäť oblasť zvýšeného výskytu koristi. Táto výchylka z rovnovážneho stavu by bez difúzie opäť viedla k nárastu populácie dravca a následnému návratu do rovnováhy. Môže sa ale stať, že katalytický efekt nárastu populácie dravca na seba samú spôsobí u dravca premnoženie, ktoré krátkodobo "zrazí"populáciu koristi až pod hladinu rovnovážneho stavu. To bude mať za následok príliv koristi z okolitých oblastí, kde následne poklesne aj populácia dravca. Autokatalytický efekt u dravca (tentoraz v opačnom smere) tento pokles ešte zosilní, vďaka čomu bude populácii koristi umožnený opätovný vzrast až nad úroveň rovnovážneho stavu. Týmto mechanizmom sa vytvorí usporiadanie s oblasťami zvýšenej koncentrácie koristi, ktoré budú vďaka intenzívnejšiemu rozptylu zásobovať oblasti s vyššou koncentráciou predátorov a tým udržiavať vzniklú heterogenitu.

Zamerajme sa na záver tejto kapitoly na spektrum Laplaceovho operátora na priestore $L^2(W)$ bez okrajových podmienok. Ukážme, že v tomto prípade bude $\sigma(\Delta) = (-\infty, 0]$. riešme úlohu $(\lambda - \Delta)v = w$. Použitím Fourierovej transformácie dostávame $(\lambda + \|\xi\|^2)\tilde{v}(\xi) = \tilde{w}(\xi)$, kde $\tilde{v}, \tilde{w}$ sme označili Fourierove obrazy funkcií v, w. Odtiaľ $v(x) = \mathcal{F}^{-1}\left(\frac{1}{\|\xi\|^2+\lambda}\tilde{w}(\xi)\right)(x)$. Pre každé $\lambda \in (-\infty, 0]$ potom nájdeme $w \in L^2(\Omega)$ (nenulovú na okolí nejakého bodu ξ, že $\|\xi\|^2 = -\lambda$), že $\|v\|_{L^2}$ nebude konečná, t.j. $(\lambda - \Delta)^{-1}$ nie je dobre definované všade. Naopak, z obmedzenosti $\mathcal{F}^{-1}$ na obmedzenej oblasti W plynie, že pre $\lambda > 0$ bude $(\lambda - \Delta)^{-1}$ tiež obmedzený. Tento výsledok znamená, že okrajové podmienky zásadným (apriórnym) spôsobom obmedzujú možné vzory vzniklé mechanizmom DDI. Bez nich totiž existuje v riešení 1.21 nestabilný mód, kedykoľvek má podmienka 1.29 zmysel (t.j. kedykoľvek je $k_1^2 < k_2^2$. Naopak s okrajovými podmienkami bude mať Laplaceov operátor, ako sme naznačili, čisto bodové spektrum a teda existencia nestabilných módov bude závisieť od toho, či podmienku 1.29 splní niektorý z bodov tohto bodového spektra. V ďalšom texte uvidíme, že ani v prípade bez okrajových podmienok nedostaneme spojité spektrum vlastných hodnôt pre riešenie 1.21. Obmedzenia na spektrum Laplacea však budú plynúť zo silno netriviálnej analýzy regularity príslušného riešenia.

Kapitola 2

Riešenie najjednoduchších prípadov DDI

V tejto kapitole sa budeme venovať dvom (geometricky) najjednoduchším prípadom DDI, ktoré modelovo vyriešime. Dôraz bude kladený najmä na vplyv okrajových podmienok na spektrum Laplaceovho operátora, ktoré udáva, aké druhy vzorov/usporiadania sú pre systém s danou geometriou vôbec prípustné. Uvedené výsledky porovnáme s výsledkom obdržaným v nasledujúcej kapitole, kde budeme obdobnú úlohu riešiť na povrchu sféry (teda bez okrajových podmienok).

2.1 Úsečka dĺžky L

Riešme reakčno-difúzne rovnice 2-zložkového systému v jednom rozmere, t.j. na úsečke dĺžky L. Po prevedení do bezrozmerného tvaru príslušným preškálovaním dostaneme pre túto úlohu systém 1.12 (uvažujeme obecnú úlohu bez počiatočnej podmienky) v tvare

$$u_t = \gamma f(u, v) + u_{xx},$$

$$v_t = \gamma g(u, v) + dv_{xx},$$

$$u_x(x = 0, t) = 0 = u_x(x = L, t), \qquad v_x(x = 0, t) = 0 = v_x(x = L, t). \tag{2.1}$$

Aby malo riešenie Turingovho modelu vôbec zmysel, musíme predpokladať existenciu homogénneho stacionárneho riešenia $(u(x, t) = u_*, v(x, t) = v_*), \forall x, t$ sústavy

$$0 = (u_*)_t = f(u_*, v_*)$$

$$0 = (v_*)_t = g(u_*, v_*).$$

Podľa postupu z predchádzajúcej kapitoly riešime najprv úlohu

$$\mathbf{w}_{xx} = \lambda \mathbf{w}$$

$$\mathbf{w}_x(0) = 0 = \mathbf{w}_x(L)$$

pre časovo nezávislú zložku riešenia $\mathbf{w}(x)$. Už vieme (viď 1.20), že vlastné číslo λ máme pri daných okrajových podmienkach očakávať reálne a nekladné. To je v súlade s našimi poznatkami o riešení obyčajných diferenciálnych rovníc. Pre $\lambda > 0$ by totiž riešením bola lineárna kombinácia exponenciálnych funkcií s reálnymi exponentmi neschopná netriviálneho splnenia okrajových podmienok. V prípade $\lambda = 0$ zasa dostávame riešenie ako priamku, ktorá je ale podľa okrajových podmienok nulová v 2 rôznych bodoch, a teda všade. Môžme teda písať

$$\mathbf{w}_{xx} = -k^2\mathbf{w} \Rightarrow \mathbf{w}(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx).$$

Dosadením okrajových podmienok v bode 0 obdržíme $B = 0$ a v bode L zasa $k_nL = n\pi, n \in \mathbb{N} \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L}$. Prípustné riešenia budú lineárnou kombináciou obdržaných módov, t.j.

$$\mathbf{w}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{w}_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \tag{2.2}$$

Vidíme, že práve okrajové podmienky sú zdrojom výrazných obmedzení na množinu vlastných čísel $-k^2$ ako aj na tvar prípustných módov. Pripomeňme, že to, ktoré módy - popísané vlnovým číslom k_n - z riešenia 2.2 budú nestabilné a vďaka javu DDI "nevymiznú", závisí od pomeru difúznych koeficientov d a konkrétneho tvaru funkcií f a g. Aby bol jav DDI vôbec možný, musia tieto funkcie (resp. ich Jacobiho matica J vyčíslená v bode (u_*, v_*)) spĺňať podmienky 1.31, ktoré tu z praktických dôvodov uvádzame znova:

$$\begin{aligned} &f_u + g_v = \operatorname{tr} J < 0, \qquad f_u g_v - f_v g_u = |J| > 0, \\ &d f_u + g_v > 0, \qquad f_u g_v - f_v g_u < \frac{(d f_u + g_v)^2}{4d}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Nestabilné módy sú potom dané podmienkou

$$\begin{aligned} k_{min}^2 \equiv \frac{\gamma}{2d}\left[d f_u + g_v - \sqrt{(d f_u + g_v)^2 - 4d|A|}\right] < k_n^2 = \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \\ < \frac{\gamma}{2d}\left[d f_u + g_v + \sqrt{(d f_u + g_v)^2 - 4d|A|}\right] \equiv k_{max}^2, \qquad n \in \mathbb{N} \end{aligned} \tag{2.4}$$

odvodenou v 1.29 (tu uvedená s malou zmenou značenia z čisto praktických pohnútok).
Dôležitým pozorovaním je skutočnosť, že kým pre dostatočne veľké n sa prvú nerovnosť (pre pevne zvolené d, f a g) podarí splniť vždy, L dostatočne malé môže mať za následok, že bude $\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \geq k_{max}^2$ (parameter γ síce tiež súvisí s veľkosťou uvažovanej oblasti, ako uvádzame v kapitole 1.4, v jednorozmernom prípade je však podľa Murrayho (viď kapiotlu 2.2 v [12], príp. príklad transformácie 1.10) $\sqrt{\gamma}$ úmerné lineárnemu rozmeru uvažovanej oblasti, t.j. $k_{max}^2 \sim L^2$, kým $k_n^2 \sim \frac{1}{L^2}$, teda pre L dostatočne malé bude druhá nerovnosť v 2.4 naozaj nesplniteľná). Pre podkritickú dĺžku L uvažovanej úsečky nebude mať žiaden z módov v riešení 2.2 vlnovú dĺžku zo zóny nestability. Vznik vzoru Turingovým mechanizmom je teda vylúčený.

Využime jednoduchosť tohto prípadu na demonštráciu konkrétnych podmienok nestability a konkrétnej disperznej relácie, ktoré obdržíme, ak za f a g dosadíme Schnakenbergovu kinetiku z 1.11, t.j.

$$f = a - u + u^2 v,$$

$$g = b - u^2 v.$$

Aby sme našli homogénny stacionárny stav tohto systému, musíme nájsť (u_*, v_*), že $f(u_*, v_*) = 0 = g(u_*, v_*)$. Sčítaním týchto 2 rovníc máme okamžite $u_* = a + b$ a následným dosadením do druhej z nich obdržíme $v_* = \frac{b}{(a+b)^2}$. Pretože riešenie hľadáme v 1. kvadrante roviny (u, v), požadujeme zároveň $b > 0, a + b > 0$. Matica stability má tvar

$$J = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{u_*, v_*} = \begin{pmatrix} \frac{b-a}{a+b} & (a+b)^2 \\ \frac{-2b}{a+b} & -(a+b)^2 \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Od nej požadujeme, aby spĺňala podmienky 2.3, z čoho postupne dostávame

$$
\begin{aligned}
b - a &< (a+b)^3, \\
(a+b)^2 &> 0, \\
d(b-a) &> (a+b)^3 \qquad (\Rightarrow b > a \wedge d > 1), \\
4d(a+b)^4 &< [d(b-a) - (a+b)^3]^2.
\end{aligned} \tag{2.6}
$$

Pomocou týchto podmienok možno množinu takých kombinácií parametrov, ktoré pripúšťajú jav DDI, chápať ako varietu v priestore parametrov (a, b, d). Z výsledkov kapitoly 1.4 vieme, že za predpokladu splnenia týchto podmienok bude mať príslušná disperzná relácia

$$
\lambda\left(\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right) = \frac{1}{2}\left[M \pm \sqrt{M^2 - 4\left(\gamma^2(a+b)^2 - \gamma\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{d(b-a)-(a+b)^3}{a+b} + d\left(\frac{n\pi}{L}\right)^4\right)}\right],
$$

$$
\text{kde } M = \gamma\frac{b-a-(a+b)^3}{a+b} - \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2(1+d) \tag{2.7}
$$

pozitívne korene pre všetky $n \in \mathbb{N}$ spĺňajúce

$$
k_{min}^2 = \frac{\gamma}{2d}\left[K - \sqrt{K^2 - 4d(a+b)^2}\right] < \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 < \frac{\gamma}{2d}\left[K + \sqrt{K^2 - 4d(a+b)^2}\right] = k_{max}^2,
$$

$$
\text{kde } K = \frac{d(b-a)-(a+b)^3}{a+b}.
$$

V okolí stacionárneho stavu $\left(u_* = a+b, v_* = \frac{b}{(a+b)^2}\right)$, kde je linerizovaná úloha dostatočne presnou aproximáciou plného, nelineárneho reakčno-difúzneho systému, sa potom začne vyvíjať vzor daný práve nestabilnými vlnovými dĺžkami ako

$$
\mathbf{W}(x,t) = \begin{pmatrix} u - u_* \\ v - v_* \end{pmatrix} \sim \sum_{\substack{n\in\mathbb{N} \\ k_{min}^2 < \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 < k_{max}^2}} \mathbf{C}_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\exp\left[\lambda\left(\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2\right)t\right] \tag{2.8}
$$

2.2 Obdĺžnik o stranách a,b

Opäť riešime reakčno-difúzne rovnice 2-zložkového systému, tentokrát však na obdĺžniku $(0, a) \times (0, b)$ v $\mathbb{R}^2[x, y]$. Bezrozmerný systém 1.12 tak prejde na

$$
\begin{aligned}
u_t &= \gamma f(u,v) + u_{xx} + u_{yy}, \\
v_t &= \gamma g(u,v) + d(v_{xx} + v_{yy}), \\
u_x(x=0,y,t) = v_x(x=0,y,t) &= 0 = u_x(x=a,y,t) = v_x(x=a,y,t), \text{pre } y \in (0,b) \\
u_y(x,y=0,t) = v_y(x,y=0,t) &= 0 = u_y(x,y=b,t) = v_y(x,y=b,t), \text{pre } x \in (0,a).
\end{aligned} \tag{2.9}
$$

Znova predpokladajme spoločný homogénny stacionárny nulový bod funkcií f a g, ktorý označíme (u_*, v_*). Analogicky predchádzajúcemu prípadu pre časovo nezávislú zložku riešenia $\mathbf{w}(x)$ riešme úlohu

$$
\Delta\mathbf{w} + k^2\mathbf{w} = 0, \qquad (\mathbf{n}\cdot\nabla)\mathbf{w} = 0, \qquad \mathbf{r} \in \partial\mathrm{Dom}\ \mathbf{w}, \tag{2.10}
$$

kde Dom $\mathbf{w}(x, y) = [(0, a) \times (0, b)],$. Túto úlohu budeme riešiť metódou separácie premenných, t.j. riešenie hľadáme v tvare $\mathbf{w}(x, y) = X(x)Y(y)$. Dosadením tohto tvaru do 2.10 a separáciou (na komponentoch súvislosti, kde $X(x)Y(y) \neq 0$) obdržíme

$$\frac{X''(x)}{X(x)} + \frac{Y''(y)}{(Y(y)} = -k^2 \Leftrightarrow \frac{X''(x)}{X(x)} = -\frac{Y''(y)}{Y(y)} - k^2 \equiv c \tag{2.11}$$

Zamerajme sa najprv na rovnicu

$$X''(x) - cX(x) = 0,$$

ktorú v závislosti na znamienku c rozdelíme do 3 podprípadov.

- $c = 0$
  V prípade $c = 0$ dostávame $X(x) = A_1 x + A_2$, dosadením okrajovej podmienky $X'(0) = X'(a) = 0$ máme $X = A_2 = const$ a úloha opäť prakticky prejde na jednorozmerný problém, takže tento prípade pre nás nebude príliš zaujímavý.

- $c > 0$
  Pre $c > 0$ dostávame riešenie v tvare $X(x) = A_1 e^{\sqrt{c}x} + A_2 e^{-\sqrt{c}x}$, pri ktorom opäť narážame na nemožnosť netriviálneho splnenia okrajových podmienok. Totiž $X'(0) = 0 \Rightarrow A_1 = A_2$ a pre nenulové a máme $X'(a) = 0 \Rightarrow A_1 = 0 = A_2$.

- $c < 0$
  V tomto prípade si označíme $\tilde{c} := -c > 0$. Máme teda rovnosť $X''(x) + \tilde{c}X(x) = 0$, ktorej riešením je $X(x) = A_1 \sin(\sqrt{\tilde{c}}x) + A_2 \cos(\sqrt{\tilde{c}}x)$. Opäť dosadíme okrajové podmienky:

  $$X'(0) = A_1 = 0,$$

  $$X'(a) = -\sqrt{\tilde{c}}A_2 \sin(\sqrt{\tilde{c}}a) = 0 \Rightarrow \sqrt{\tilde{c}}a = n\pi, n \in \mathbb{N}$$

  a odtiaľ $\tilde{c} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} = -c$. Pre funkciu $X(x)$ teda máme

  $$X(x) = A_2 \cos(\tfrac{n\pi}{a}x) \equiv A \cos(\tfrac{n\pi}{a}x).$$

Analogicky si teraz rozoberme rovnicu

$$Y''(y) + (c + k^2)Y(y) = 0.$$

Z predchádzajúcej diskusie vieme, že zaujímavý pre nás bude iba prípad $c < 0$. Pre úplnosť ale uveďme aj ostatné 2 prípady.

- $c = 0$
  Ako sme uviedli, prípad $c = 0$ vedie na de facto 1D problém, ktorého riešením bude po dosadení okrajových podmienok, podobne ako pri úlohe na úsečke,

  $$Y(y) = B \cos\left(\tfrac{l\pi}{b}y\right) \Rightarrow \mathbf{w}(x, y) = \mathbf{w}(y) = \tilde{B} \cos\left(\tfrac{l\pi}{b}y\right), l \in \mathbb{N}.$$

- $c > 0$
  Nemá netriviálne riešenie spĺňajúce okrajové podmienky.

- $c = -\frac{n^2\pi^2}{a^2} < 0$
  Od tohto prípadu očakávame "zmysluplné"riešenie systému 2.10. Opäť by sme ho mohli rozdeliť podľa znamienka koeficientu lineárneho člena na 3 podprípady, avšak z diskusie rovnice pre $X(x)$ už vieme, že zaujímavý bude pre nás iba prípad $k^2 + c = k^2 - \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 > 0$. Jeho riešenie má tvar

$$Y(y) = B_1 \cos\left(\sqrt{k^2 - \left(\tfrac{n\pi}{a}\right)^2} y\right) + B_2 \sin\left(\sqrt{k^2 - \left(\tfrac{n\pi}{a}\right)^2} y\right).$$

Z okrajových podmienok opäť obdržíme

$$Y'(0) = B_2 = 0$$

$$Y'(b) = -\sqrt{k^2 - \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} B_1 \sin\left(\sqrt{k^2 - \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} b\right) = 0 \Rightarrow \sqrt{k^2 - \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} b = l\pi, l \in \mathbb{N},$$

čo po úprave vedie na

$$k_{l,n} = \pi\sqrt{\frac{l^2}{b^2} + \frac{n^2}{a^2}}. \tag{2.12}$$

Z linearity Laplaceovho operátora dostávame riešenie v tvare

$$\mathbf{w}(x, y) = \sum_{l,n\in\mathbb{N}} A_{l,n} \cos\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{l\pi}{b} y\right) \tag{2.13}$$

Nestabilné módy v sume 2.13 budú opäť tie, ktorých vlnové číslo $k^2_{l,n}$ bude ležať v rozmedzí určenom k^2_{min} a k^2_{max} z 2.4. Ak označíme Z_n "zónu nestability", t.j. množinu takých dvojíc (l, n), že im odpovedajúce vlnové číslo $k^2_{l,n}$ spĺňa nerovnosť $k^2_{min} < k^2_{l,n} < k^2_{max}$, bude sa vznikajúci vzor v blízkosti stacionárneho stavu (u_*, v_*) (t.j. predtým, než bude utlmený nelinearitou f a g v 2.9) rozvíjať ako

$$\mathbf{W}(x, y, t) = \begin{pmatrix} u - u_* \\ v - v_* \end{pmatrix} \sim \sum_{(l,n)\in Z_n} A_{l,n} \cos\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \cos\left(\frac{l\pi}{b} y\right) e^{\lambda(k^2_{l,n})t}, \tag{2.14}$$

kde $\lambda(k^2_{l,n})$ je príslušný pozitívny koreň disperznej relácie 1.22. Opäť si môžme všimnúť, že pre a, b dostatočne malé bude druhá podmienka existencie nestabilných módov z 2.4 nesplniteľná, t.j. vznik vzoru Turingovým mechanizmom nebude možný.

Kapitola 3

Riešenie Turingovho modelu na povrchu sféry o polomere R

V tejto kapitole sa budeme zaoberať riešením reakčno-difúznych rovníc 2-zložkového systému na povrchu sféry o polomere R. Motiváciou pre túto úlohu môže byť napr. skúmanie rozmiestnenia už spomínaných vlasových folikulov na hlave vyvíjajúceho sa embrya (či už ľudského alebo zvieracieho). Ako je zrejmé z kapitoly 1.4 a z predchádzajúcich riešených prípadov DDI, kľúčovým faktorom pre určenie toho, ktoré špecifické módy sa prejavia v usporiadaní vzniklom reakčno-difúznym mechanizmom, sú tvar a parametre funkcií F a G v 1.8, resp. funkcií f a g v 1.12 popisujúcich kinetiku systému. Z 1.29 je tiež vidno, že dôležitú úlohu zohráva aj parameter γ, ktorý sme dávali do súvislosti s veľkosťou príslušnej domény, kde sa jav DDI realizuje. My sa budeme zatiaľ sústrediť na niečo, čo by sme mohli nazvať obecným riešením Turingovho modelu, t.j. na riešene úlohy na vlastné funkcie Laplaceovho operátora, ktoré nám rámcovo prezradí, aké druhy vzorov možno pri danej geometrii systému očakávať. Podstatný kvalitatívny rozdiel v porovnaní s doteraz riešenými úlohami však je, že náš definičný obor, povrch sféry, nemá hranicu, t.j. strácame príslušnú okrajovú podmienku z 1.20.

Majme teda tentoraz systém 1.12 bez okrajovej podmienky, t.j.

$$u_t = \gamma f(u,v) + \Delta u,$$
$$v_t = \gamma g(u,v) + d\Delta v. \tag{3.1}$$

Na popis povrchu sféry potrebujeme 3 kartézske súradnice, takže Laplaceov operátor má v nich pre túto úlohu tvar $\Delta_{x,y,z} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Nie je ťažké uhádnuť, že bude výhodné prejsť k sférickým súradniciam

$$x = r \sin\vartheta \cos\varphi$$
$$y = r \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$z = r\cos\vartheta,$$
$$r \in [0,\infty), \vartheta \in [0,\pi], \varphi \in [0,2\pi]$$

v ktorých má Laplaceov operátor tvar

$$\Delta_{r,\vartheta,\varphi} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{3.2}$$

Pretože hľadané funkcie u a v sa realizujú na povrchu sféry o polomere $R = const$, budú iba funkciami uhlových premenných ϑ a φ, takže pre naše potreby budú derivácie podľa radiálnej premennej r identicky nulové. Podobne ako v predchádzajúcich prípadoch nájdeme homogénne stacionárne riešenie rovníc 3.1 (u_*, v_*) a úlohu následne linearizujeme pre $\mathbf{W}(\vartheta, \varphi, t) = \begin{pmatrix} u - u_* \\ v - v_* \end{pmatrix}$. Pre časovo nezávislú zložku riešenia $\mathbf{w}(\vartheta, \varphi)$ opäť riešime úlohu

$$\Delta \mathbf{w} = \frac{1}{R^2 \sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2\vartheta} \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial\varphi^2} = -\kappa \mathbf{w}, \tag{3.3}$$

kde príslušnú (reálnu) vlastnú hodnotu sme z dôvodov, ktoré budú zrejmé neskôr, označili $-\kappa \leq 0$. Použime teraz opätovne metódu separácie premenných, t.j. kladieme $\mathbf{w} = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi)$ pre $\vartheta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi]$. Dosadenie do 3.3 vedie na

$$\frac{1}{R^2}\Theta''(\vartheta)\Phi(\varphi) + \frac{\cot\vartheta}{R^2}\Theta'(\vartheta)\Phi(\varphi) + \frac{1}{R^2 \sin^2\vartheta}\Theta(\vartheta)\Phi''(\varphi) = -\kappa\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi), \tag{3.4}$$

odkiaľ úpravou a separáciou obdržíme

$$\sin^2\vartheta \frac{\Theta''(\vartheta)}{\Theta(\vartheta)} + \cos\vartheta \sin\vartheta \frac{\Theta'(\vartheta)}{\Theta(\vartheta)} + \kappa R^2 \sin^2\vartheta = -\frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)} \equiv c \tag{3.5}$$

Venujme sa najskôr rovnici $\Phi'' + c\Phi = 0$. Pretože φ opisuje na našej sfére pre každé pevné ϑ celú kružnicu, budeme od zmysluplného riešenia pre Φ požadovať

$$\Phi(2\pi) = \Phi(0). \tag{3.6}$$

V závislosti na znamienku c, podobne ako pri úlohe na obdĺžniku, riešime 3 prípady:

- $c < 0$
  Znova pre $\tilde{c} := -c > 0$ dostávame riešenie tvaru $\Phi(\varphi) = A_1 e^{\sqrt{\tilde{c}}\varphi} + A_2 e^{-\sqrt{\tilde{c}}\varphi}$, ktoré však nespĺňa netriviálne podmienku 3.6.

- $c = 0$
  Tentoraz dostávame riešenie ako priamku. Podmienka 3.6 potom vedie na $\Phi(\varphi) = A = const$. Riešenie pre tento prípad je teda symetrické voči rotácii okolo osi kolmej na rovinu udanú kružnicou $\vartheta = \vartheta_0 = const$ a prechádzajúcu stredom tejto kružnice (t.j. okolo osi prechádzajúcej "pólmi").

- $c > 0$
  Pre kladné c bude $\Phi(\varphi) = A_1 \cos(\sqrt{c}\varphi) + A_2 \sin(\sqrt{c}\varphi)$, ktoré požiadavku periodicity 3.6 spĺňa netriviálne pre $c = n^2, n \in \mathbb{N}$.

Rovnicu pre $\Theta(\vartheta)$ najprv upravme do tvaru

$$\Theta''(\vartheta)\sin\vartheta + \Theta'(\vartheta)\cos\vartheta + \Theta(\vartheta)\left[\kappa R^2 \sin\vartheta - \frac{c}{\sin\vartheta}\right] = 0 \tag{3.7}$$

a následne použime substitúciu $x = \cos\vartheta$. Za pomoci vety o derivácii zloženej funkcie vyjadríme

$$\frac{d\Theta}{d\vartheta} = -\sin\vartheta \frac{d\Theta}{dx}$$

$$\frac{d^2\Theta}{d\vartheta^2} = \sin^2\vartheta \frac{d^2\Theta}{dx^2} - \cos\vartheta \frac{d\Theta}{dx}, \tag{3.8}$$

čo po dosadení do 3.7, podelení $\sin\vartheta$ a úprave vedie na

$$(1 - x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \left[\kappa R^2 - \frac{c}{1 - x^2}\right]\Theta = 0. \tag{3.9}$$

Ak položíme $\kappa R^2 =: \nu(\nu+1)$, $c =: \mu$, dostávame presne tvar pridruženej Legendrovej diferenciálnej rovnice, ktorej dvoma lineárne nezávislými riešeniami sú tzv. pridružené Legendrove funkcie prvého a druhého druhu $P^\mu_\nu(x)$, resp. $Q^\mu_\nu(x)$, známe aj ako guľové funkcie. Ich explicitné definície v reči hypergeometrickej funkcie a $\Gamma-$funkcie možno nájsť v [1]. Tieto definície však neudávajú hodnoty týchto funkcií pre $|x| = |\cos\vartheta| = 1$, t.j. pre $\vartheta \in \{0, \pi\}$. Tieto body zodpovedajú pomyselným pólom našej sféry. Pretože však naša sféra nemá žiadne význačné body a voľba súradníc (a teda aj poloha pólov) je ponechaná našej ľubovôli, požadujeme od riešenia, aby bolo definované (a konečné!) na celom povrchu sféry, vrátane bodov $\vartheta = 0$ a $\vartheta = \pi$. Z diskusie riešenia pre $\Phi(\varphi)$ vieme, že podľa hodnoty $c = \mu$ nás zaujímajú nasledujúce dva prípady:

- $c = \mu = 0$

  V tomto prípade prejde *pridružená* Legendrova rovnica 3.9 na Legendrovu rovnicu tvaru

$$(1-x^2)\frac{d^2\Theta}{dx^2} - 2x\frac{d\Theta}{dx} + \kappa R^2\Theta = 0. \tag{3.10}$$

Pre účely skúmania správania sa príslušného riešenia rovnice 3.10 v bodoch $\vartheta = 0$ a $\vartheta = \pi$ sa pokúsime nájsť ho Frobeniovou metódou (viď kapitolu 1 v [5]) v tvare mocninného radu (MR) ako

$$\Theta(x) = x^s \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n,\ s \in \mathbb{N}_0 \tag{3.11}$$

kde BÚNO $a_0 \neq 0$ (v opačnom prípade prejdeme od s k $s+k$, kde a_k je prvý nenulový člen postupnosti $\{a_n\}$). Tento tvar riešenia používame pre rovnice obecného tvaru

$$x^2\frac{d^2y}{dx^2} + xq(x)\frac{dy}{dx} + r(x)y = 0, \tag{3.12}$$

t.j. v našom prípade je $q(x) = \frac{-2x^2}{1-x^2}$ a $r(x) = \frac{\kappa R^2 x^2}{1-x^2}$. Od funkcií $q(x)$ a $r(x)$ požadujeme, aby boli rozvinuteľné do mocninného radu konvergentného na nejakom okolí bodu $x = 0$, čo je v našom prípade splnené (v menovateli máme súčty geometrických radov s kvocientom x^2 konvergentné pre $|x| < 1$). Zdôraznime, že výhodnejšie je riešiť rovnicu 3.10; od tvaru 3.12 nám stačí, aby bolo (kvôli obecnosti riešenia) možné doň túto rovnicu previesť. Dosadením tvaru 3.11 do 3.10 a predelením spoločným faktorom x^{s-2} obdržíme

$$\sum_{k=0}^{\infty}(k+s)(k+s-1)a_k x^k - \sum_{k=0}^{\infty}(k+s)(k+s-1)a_k x^{k+2} - 2\sum_{k=0}^{\infty}(k+s)a_k x^{k+2} + \kappa R^2 \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^{k+2}. \tag{3.13}$$

Pre nulovosť ľavej strany (na obore riešenia pôvodnej diferenciálnej rovnice) musia byť nulové všetky koeficienty jednotlivých mocnín x. Zamerajme sa najprv na koeficienty najnižších mocnín x^0 a x^1. Tie vystupujú iba v prvom člene, z ktorého pre ne dostávame sústavu

$$s(s-1)a_0 = 0$$

$$s(s+1)a_1 = 0,$$

ktorú (kvôli $a_0 \neq 0$) splnia $s = 0$ a $s = 1$. Pre $s = 0$ budú splnené obe rovnosti a a_1 ostane voľným parametrom. Teraz pre koeficient x^{n+2} dostávame požiadavku

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} - n(n-1)a_n - 2na_n + \kappa R^2 a_n = (n+2)(n+1)a_{n+2} - n(n+1)a_n + \kappa R^2 a_n = 0, \tag{3.14}$$

čo je rekurencia druhého rádu, z ktorej dosadením $\kappa R^2 = \nu(\nu+1)$ ľahko získame vzťah

$$a_{n+2} = \frac{n(n+1) - \nu(\nu+1)}{(n+2)(n+1)} a_n = \frac{n^2 - \nu^2 + n - \nu}{(n+2)(n+1)} a_n = \frac{(n-\nu)(n+\nu+1)}{(n+2)(n+1)} a_n. \tag{3.15}$$

Z neho je vidieť, že riešenie je určené 2 počiatočnými podmienkami a_0, a_1, ktoré vedú na 2 lineárne nezávislé riešenia rovnice 3.10 (suma párnych a suma nepárnych mocnín v 3.11 sú určite lineárne nezávislé).
Venujme sa teraz otázke konvergencie obdržaného riešenia (čerpáme z Appendixu 1 v [5]). Označme

$$\Theta_1(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2n} x^{2n}$$

$$\Theta_2(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2n+1} x^{2n+1}, \tag{3.16}$$

2 lineárne nezávislé riešenia 3.10, kde postupnosť $\{a_n\}$ spĺňa rekurentný vzťah 3.15. Ak ďalej označíme $b_n := a_{2n}x^{2n}$, $c_n := a_{2n+1}x^{2n+1}$, dostaneme

$$\frac{b_{n+1}}{b_n} = \frac{(2n-\nu)(2n+\nu+1)}{(2n+2)(2n+1)} x^2$$

$$\frac{c_{n+1}}{c_n} = \frac{(2n+1-\nu)(2n+\nu+2)}{(2n+3)(2n+2)} x^2. \tag{3.17}$$

Použime teraz D'Alembertovo podielové kritérium (dôkaz viď v [14]):

Veta 3.0.1. *Buď $\{a_n\}$ postupnosť kladných čísel.*

1. *Ak $\exists q < 1$ a n_0, že pre $\forall n > n_0$ je $\frac{a_{n+1}}{a_n} \leq q$, tak $\sum_{k=0}^{\infty} a_n$ konverguje.*
2. *Ak je pre $\forall n > n_0$ $\frac{a_{n+1}}{a_n} \geq 1$, tak $\sum_{k=0}^{\infty} a_n$ diverguje.*

Ak teraz v bode 1 prejdeme k limite $n \to \infty$, okamžite dostaneme $\lim_{n\to\infty} \frac{a_{n+1}}{a_n} < 1 \Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} a_n$ konverguje. Limitným prechodom v podieloch 3.17 máme $\lim_{n\to\infty} \frac{b_{n+1}}{b_n} = x^2 = \lim_{n\to\infty} \frac{c_{n+1}}{c_n}$, z čoho okamžite plynie konvergencia radov Θ_1 a Θ_2 pre $\forall x \in (-1, 1)$. O prípade $|x| = 1$ však toto kritérium rozhodnúť nedokáže. Naň sa pokúsime aplikovať kritérium Gaussovo (jeho dôkaz možno opäť nájsť v [14]):

Veta 3.0.2. *Buď $\{a_n\}$ postupnosť kladných čísel. Nech $\exists q, \alpha \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$ a obmedzená postupnosť $\{d_n\}$, že $\frac{a_{n+1}}{a_n} = q - \frac{\alpha}{n} + \frac{d_n}{n^{1+\varepsilon}}$ pre $\forall n \in \mathbb{N}$. Potom platí:*

1. *Ak $q < 1$ alebo $q = 1 \wedge \alpha > 1$, tak $\sum_{k=0}^{\infty} a_n$ konverguje.*
2. *Ak $q > 1$ alebo $q = 1 \wedge \alpha \leq 1$, tak $\sum_{k=0}^{\infty} a_n$ diverguje.*

Upravme teda pomer $\frac{b_{n+1}}{b_n}$ do požadovaného tvaru (zaujímajú nás body $x = \pm 1$):

$$\begin{aligned} \frac{b_{n+1}}{b_n} &= \frac{(2n-\nu)(2n+\nu+1)}{(2n+2)(2n+1)} = 1 + \frac{\nu(2n-\nu) - (\nu+2)(2n+1)}{(2n+2)(2n+1)} \\ &= 1 - \frac{4n^2 + 2n + (\nu^2+\nu)n}{n(2n+2)(2n+1)} = 1 - \frac{1}{n} + \frac{4n + 2 - (\nu^2+\nu)n}{n(2n+2)(2n+1)}, \end{aligned}$$

čo zodpovedá hľadanému tvaru pre

$$q = 1, \alpha = 1, \varepsilon = 1, d_n = \frac{4n + 2 - \nu(\nu + 1)n}{(2n + 2)(2 + \frac{1}{n})}. \tag{3.18}$$

Podobne by sa upravil aj pomer $\frac{c_{n+1}}{c_n}$. Z $\lim_{n\to\infty} d_n = 1 - \frac{\nu(\nu+1)}{4}$ je zrejmá obmedzenosť d_n, z čoho plynie divergencia Θ_1 a Θ_2 v bodoch ± 1. Ako teda obdržať riešenie konečné na *celom* povrchu sféry? Jediná možnosť je, aby boli sumy vo vzťahu 3.16 konečné. Pomocou 3.15 vidíme, že to nastane pre $\nu = l \in \mathbb{N}$; pre $\nu = 2k, k \in \mathbb{N}$ bude konečná suma Θ_1, pre $\nu = 2k - 1, k \in \mathbb{N}$ zasa Θ_2. V oboch prípadoch je posledným nenulovým členom postupnosti $\{a_n\}$ a_l, takže aj vzniklý polynóm je potom stupňa l. V závislosti od parity l potom dostávame riešenie Θ buď ako Θ_1 alebo Θ_2, t.j.

$$\Theta(x) = a_l x^l + a_{l-2} x^{l-2} + \ldots + \begin{cases} a_0 \text{ pre } l \text{ párne} \\ a_1 x \text{ pre } l \text{ nepárne} \end{cases} = \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} a_{l-2k} x^{l-2k},$$

kde $\lfloor a \rfloor$ označuje dolnú celú časť čísla $a \in \mathbb{R}$. Ak by sme teraz zadali ako počiatočnú podmienku a_l miesto a_0, resp. a_1, a vyjadrili rekurenciu 3.15 zostupne, obdržali by sme

$$a_n = a_{n+2} \frac{(n + 2)(n + 1)}{(n - \nu)(n + \nu + 1)}, \tag{3.19}$$

čo vedie na

$$\begin{aligned} a_{l-2} &= -a_l \frac{l(l - 1)}{2(2l - 1)} \\ a_{l-4} &= -a_{l-2} \frac{(l - 2)(l - 3)}{4(2l - 3)} = a_l \frac{l(l - 1)(l - 2)(l - 3)}{2 \cdot 4(2l - 1)(2l - 3)}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Odtiaľ usúdime na obecný vzťah

$$\begin{aligned} a_{l-2k} &= (-1)^k a_l \frac{l(l - 1)(l - 2) \cdots (l - 2k + 1)}{2 \cdot 4 \cdots 2k(2l - 1)(2l - 3) \cdots (2l - 2k + 1)} = (-1)^k a_l \frac{l(l - 1)(l - 2) \cdots (l - 2k + 1)}{2^k k!(2l - 1)(2l - 3) \cdots (2l - 2k + 1)} = \\ &= (-1)^k a_l \frac{l!}{2^k k!(2l - 1)(2l - 3) \cdots (2l - 2k + 1)(l - 2k)!}, \end{aligned} \tag{3.21}$$

ktorý úpravou

$$\begin{aligned} (2l - 1)(2l - 3) \cdots (2l - 2k + 1) &= \frac{2l(2l - 1)(2l - 2) \cdots (2l - 2k + 1)}{2l(2l - 2) \cdots (2l - 2k - 2)} \\ &= \frac{(2l)!}{2^k l(l - 1) \cdots (l - k - 1)(2l - 2k)!} = \frac{(2l)!(l - k)!}{2^k l!(2l - 2k)!} \end{aligned} \tag{3.22}$$

prevedieme na tvar

$$a_{l-2k} = (-1)^k a_l \frac{(l!)^2 (2l - 2k)!}{k!(2l)!(l - k)!(l - 2k)!}. \tag{3.23}$$

Vďaka tomu máme riešenie

$$\Theta(x) = a_l \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 \rfloor} (-1)^k \frac{(l!)^2 (2l - 2k)!}{k!(2l)!(l - k)!(l - 2k)!} x^{l-2k} \tag{3.24}$$

pre ľubovoľnú počiatočnú podmienku $a_l \neq 0$. Voľbou $a_l = \frac{(2l)!}{2^l(l!)^2}$ obdržíme riešenie v tvare tzv. Legendrových polynómov (viď vzťah 3.17 v [5])

$$P_l(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 \rfloor}(-1)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k)!} x^{l-2k}. \tag{3.25}$$

Všimnime si ešte, že rovnicu 3.10 možno pre $z_1(x) := \Theta(x), z_2(x) := \frac{d\Theta(x)}{dx}$ jednoduchým spôsobom previesť na sústavu 2 lineárnych diferenciálnych rovníc

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{-\kappa R^2}{1-x^2} & \frac{2x}{1-x^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \tag{3.26}$$

na ktorú môžme aplikovať vetu o existencii a jednoznačnosti riešenia (Veta 3.49 v [17]):

Veta 3.0.3. *Buďte $I \subset \mathbb{R}$ otvorený interval, $(A)_{ij} = a_{ij} : I \to \mathbb{R}, (b)_j = b_j : I \to \mathbb{R}$ spojité zobrazenia pre $\forall i, j \in \{1, \ldots n\}$, $x_0 \in I, y_0 \in \mathbb{R}^n$. Potom úloha*

$$y' = A(x)y + b(x)$$

$$y(x_0) = y_0$$

má na I jediné riešenie $\varphi = \varphi(x)$.

Odtiaľ okamžite plynie, že riešenie rovnice 3.10 na intervale $(-1, 1)$ s príslušnou počiatočnou podmienkou je jednoznačne určená lineárna kombinácia lineárne nezávislých funkcií Θ_1, Θ_2 z 3.16. Z našej požiadavky konečnosti riešenia v bodoch $x = \pm 1$ dostávame podmienku $\nu \in \mathbb{N}$, vďaka ktorej prejde 1 z týchto riešení na konečnú sumu, resp. polynóm v premennej x, ktorý je násobkom príslušného Legendrovho polynómu. Z toho plynie, že toto je (až na multiplikatívny faktor) jediné riešenie rovnice 3.10 konečné na celom intervale $[-1, 1]$. Vďaka podmienke konečnosti riešenia $\nu = l \in \mathbb{N}$ máme pre príslušné vlastné číslo κ v 3.10 podmienku

$$\kappa R^2 = l(l+1) \Rightarrow \kappa_l = \frac{l(l+1)}{R^2}, l \in \mathbb{N}. \tag{3.27}$$

Keď teraz prejdeme od premennej x späť k premennej ϑ, dostaneme celkové riešenie úlohy 3.1 vo sférických súradniciach (pre pripomenutie, stále sme v prípade $c = 0$) ako

$$\mathbf{W}(\vartheta, \varphi, t) = \begin{pmatrix} u - u_* \\ v - v_* \end{pmatrix} = \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{C}_l P_l(\cos\vartheta) \exp\left[\lambda(\kappa_l^2)t\right], \tag{3.28}$$

v ktorom sú nestabilné módy s Re $\lambda > 0$ opäť udané podmienkou 1.29 pre κ_l^2.

- $c = \mu = m^2 > 0, m \in \mathbb{N}$
  Riešenie tohto prípadu úzko súvisí s riešením prípadu $c = 0$, čo dokladá aj nasledujúce tvrdenie, ktoré možno (aj s dôkazom) nájsť v knihe o špeciálnych funkciách (Veta 3.9 v [5]).

Veta 3.0.4. *Nech $z(x)$ je riešením Legendrovej rovnice*

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + l(l+1)y = 0. \tag{3.29}$$

Potom $(1-x^2)^{m/2}\frac{d^mz}{dx^m}$ je riešením pridruženej Legendrovej rovnice

$$(1-x^2)\frac{d^2y}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]y = 0. \tag{3.30}$$

Okamžitým dôsledkom je, že funkcia $P_l^m(x)$, tzv. pridružená Legendrova funkcia, definovaná

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m P_l}{dx^m}, \tag{3.31}$$

kde P_l je pre $l \in \mathbb{N}$ definovaná v 3.25, je riešením rovnice 3.30, ktoré je naviac konečné na celom intervale $[-1,1]$. Na intervale $(-1,1)$ budú pridruženú Legendrovu rovnicu riešiť aj funkcie $(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m\Phi_i}{dx^m}$, $i=1,2$, kde Φ_1 a Φ_2 sú definované vzťahom 3.16. Existenciu riešenia teda máme zaručenú. Funkcie Φ_1 a Φ_2, ktoré riešia rovnicu 3.10 pre $\kappa R^2 = \nu(\nu+1)$, v bodoch 1 a -1 divergujú. O správaní sa k nim pridružených riešení rovnice 3.9 (pre $c = m^2$) tak z predpisu daného uvedenou vetou nevieme rozhodnúť. Ukázať divergenciu takto získaných riešení pre obecnú hodnotu ν v bodoch ± 1 je technicky veľmi náročné, ako sa čitateľ mohol presvedčiť pri štúdiu kvantovej mechaniky, konkrétne spoločných vlastných funkcií kvadrátu momentu hybnosti a jednej z jeho zložiek, a celý postup možno nájsť v kapitole 2.3 v [8]. Požiadavka konečnosti riešení rovnice 3.30 na celej sfére potom opäť vedie na podmienku celočíselnosti ν. My si však uvedomíme, že budeme riešenie Turingových rovníc hľadať v tvare 1.21, t.j. v *báze* vlastných vektorov Laplaceovho operátora. Časovo nezávislú zložku riešenia máme pre dosiaľ nájdené (všade konečné) riešenie P_l^m v tvare

$$\mathbf{w} = \Theta(\vartheta)\Phi(\varphi) = \mathbf{C}_{lm}P_l^m(\cos\vartheta)\left(A_1\cos(m\varphi) + A_2\sin(m\varphi)\right), l \in \mathbb{N}.$$

Tu nám prichádza na pomoc tvrdenie 18.5.3 z [6], ktoré hovorí, že ak pripustíme $m \in \mathbb{Z}$, čo si za daných okolností môžme dovoliť (na m máme len požiadavku celočíselnosti jeho druhej mocniny), tvoria tieto funkcie po prechode v podpriestore $\{\sin(m\varphi), \cos(m\varphi)\}_{lin}$ k báze $\{e^{im\varphi}, e^{-im\varphi}\}$ a vhodnej normalizácii tvaru

$$Y_{lm}(\vartheta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\vartheta)e^{im\varphi}, l \in \mathbb{N}_0, m = -l,\dots,l \tag{3.32}$$

skutočne ON bázu priestoru $L^2((0,\pi)\times(0,2\pi), \sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta\,\mathrm{d}\varphi)$. Je teda pre nás skutočne postačujúce uvažovať $\nu = l \in \mathbb{N}_0$. Vlastné hodnoty Laplaceovho operátora majú potom tvar $\kappa_l = \frac{l(l+1)}{R^2}$ a riešenie 3.1 je dané ako

$$\mathbf{W}(\vartheta,\varphi,t) = \sum_{\substack{l\in\mathbb{N}_0\\ -l\le m\le l}} \mathbf{D}_{lm}Y_{lm}e^{\lambda(\kappa_l^2)t}. \tag{3.33}$$

Nestabilné módy v tomto riešení sú opäť dané nerovnosťami 1.29 pre κ_l^2. Môžme vidieť, že napr. mód s vlnovou dĺžkou $\lambda(\kappa_0^2) = \lambda(0)$ bude vždy stabilný. Takisto opäť pozorujeme, že pre podkritickú veľkosť uvažovanej sféry polomeru R budú všetky módy v 3.33 stabilné a vznik vzoru Turingovým mechanizmom bude opäť nemožný.

Záver

V tejto práci sme sa čitateľovi snažili poskytnúť základnú predstavu o Turingovom modele a fenoméne difúziou poháňanej nestability. V teoretickom úvode sme predstavili jeho úplnú matematickú formuláciu pre homogénne prostredie, v ktorom difúzne koeficienty nie sú priestorovo závislé, linearizovanú formuláciu, ktorá je tradične objektom snahy o analytické riešenie, a naznačili kľúčovú úlohu skúmania vlastností Laplaceovho operátora s príslušnými okrajovým podmienkami pre tento model. Ďalej sme načrtli rolu nelinearity plného reakčno-difúzneho systému s implikáciami pre analytické riešenie lienarizovanej úlohy a tiež základné súvislosti ako aj možné aplikácie z oblasti biológie či ekológie. Venovali sme sa tiež matematickej formulácii podmienok na chemické (reakčné) vlastnosti systému, ktoré podmieňujú realizáciu javu DDI.

V druhej kapitole sme tieto poznatky aplikovali pri analytickom riešení jednoduchých a známych prípadov DDI nájdením vlastných funkcií Laplaceovho operátora na príslušných oblastiach. Demonštrovali sme kľúčovú rolu okrajových podmienok, ktoré v daných prípadoch diskretizujú jeho spektrum a tým kladú zásadné obmedzenie na vzory a usporiadania, ktoré môžu vzniknúť v dôsledku javu DDI. Ukázali sme, že v daných prípadoch možno od dvojzložkových turingovských systémov očakávať výlučne harmonické vzory. Dôležitým postrehom bola tiež skutočnosť, že v oboch prípadoch existovala kritická (minimálna) veľkosť príslušnej oblasti, ktorá umožňovala vznik vzoru mechanizmom DDI. Pri podkritickej veľkosti bol pri danej geometrii prostredia vznik vzoru týmto mechanizmom pre linearizovanú úlohu vylúčený.

V tretej kapitole sme potom pristúpili k riešeniu 2-zložkového Turingovho systému za kvalitatívne odlišných okolností. Dôležitými zmenami v porovnaní s úlohou na úsečke a obdĺžniku boli "krivočiará" geometria uvažovanej oblasti a predovšetkým neexistencia hranice tejto oblasti a teda aj absencia akýchkoľvek okrajových podmienok. Viedlo nás to na "fyzikálne" dobre známu úlohu počítania vlastných funkcií Laplacea na povrchu sféry. Museli sme si však poradiť so singularitami v popise sféry uhlovými premennými ϑ a φ na póloch, ako aj s neexistenciou apriórnych požiadaviek na spektrum Laplaceovho operátora, ktoré v predošlých prípadoch plynuli z okrajových podmienok. Výsledkom bola nutnosť silno netriviálnej analýzy nájdených riešení a ich správania sa na celom povrchu sféry, vrátane "singulárnych" pólov.

Literatúra

[1] M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, chapter 8. Applied mathematics series. Dover Publications, 1964.

[2] R E Baker, E A Gaffney, and P K Maini. Partial differential equations for self-organization in cellular and developmental biology. *Nonlinearity*, 21(11):R251, 2008.

[3] Ruth E. Baker and Philip K. Maini. *Pattern Formation and Development*, pages 1145–1149. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2015.

[4] Margaret Beck. A brief introduction to stability theory for linear pdes. `http://math.bu.edu/people/mabeck/lin_stab_minicourse_2012.pdf`, June 2012. Vid: 2.7.2017.

[5] W.W. Bell. *Special functions for scientists and engineers*. Van Nostrand, 1968.

[6] Jiří Blank, Pavel Exner, and Miloslav Havlíček. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Univ. Karlova, Praha, 1993.

[7] Klaus-Jochen Engel and Rainer Nagel. *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, volume 194 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer-Verlag New York, 2000.

[8] Jiří Formánek. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, Praha, 1983.

[9] Philip K. Maini, Ruth E. Baker, and Cheng-Ming Chuong. The turing model comes of molecular age. *Science*, 314(5804):1397–1398, 2006.

[10] Jindřich Makovička. Funkcionální analýza, wikiskriptum. `https://http://wikiskripta.fjfi.cvut.cz/wiki/index.php/01FA2`, 2017. Vid: 7.7.2017.

[11] Jan Mazáč. Zápisky z rmf, wikiskriptum. `http://wikiskripta.fjfi.cvut.cz/wiki/index.php/01RMF`, 2017. Vid: 7.7.2017.

[12] J. D. Murray. *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer, 3. edition, 2003.

[13] J.D. Murray. *Mathematical Biology: I. An Introduction*. Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer New York, 2007.

[14] E. Pelantová. *Matematická analýza II*. ČVUT, Praha, 2014.

[15] J. Schnakenberg. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *Journal of Theoretical Biology*, 81(3):389 – 400, 1979.

[16] J. Smoller. *Shock Waves and Reaction—Diffusion Equations*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1983.

[17] Zbyšek Štěpáník. Diferenciální rovnice, wikiskriptum. `https://wikiskripta.fjfi.cvut.cz/wiki/index.php/01DIFRnew`, 2016. Vid: 7.7.2017.

[18] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B 1952 237, 37-72*, 1952.

[19] L. Vrána. *Matematická analýza III.: Diferenciální počet*. ČVUT, Praha, 1981.