

# Reakció-diffúzió egyenletekből származtatott utazó hullámok

Korom Mátyás

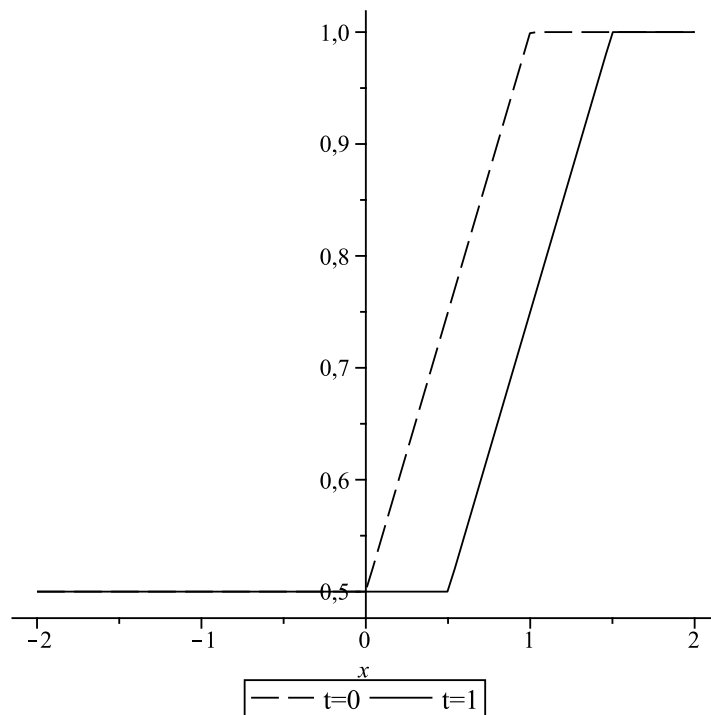
Témavezető: Simon Péter egyetemi docens

Eötvös Lóránd Tudományegyetem

2009 Június, Budapest

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>2</b>
1.1. Reakció-diffúzió . . . . .	3
1.2. Chemotaxis . . . . .	6
<b>2. Utazó hullám</b>	<b>8</b>
2.1. Háttér . . . . .	8
2.2. A Fisher egyenlet . . . . .	9
<b>3. Többváltozós modell</b>	<b>13</b>
<b>4. Belousov-Zhabotinskii reakció</b>	<b>19</b>



1. ábra. Utazó hullám

## 1. Bevezetés

A szakdolgozat speciális alakú differenciálegyenletekről szól, melyek rengeteg, matematikán kívüli tudományterületen elterjedtek. Az elnevezés olyasfajta függvényeket takar, amelyek grafikonja bizonyos idő elteltével sem változik, csupán térben eltolódik. A megértéshez segít az 1. ábra.

Ezek a függvények általában valamiféle reakciót, valaminek a terjedését írják le. Például az agyban létrejövő ingerület (elektromos jel) terjedését egy idegpálya mentén, vagy egy Belousov-Zhabotinskii féle reakcióban a  $HBrO_2$  a  $Br^-$  és a  $M_{ox}$  koncentrációjának változását a folyamat során.

Az első részben gyorsan áttekintem a reakció-diffúzió, illetve a chemotaxis egyenleteket. Ezek szintén speciális alakú parciális differenciálegyenletek, melyekből később az utazó hullámokat fogjuk származtatni. Reakció-diffúzió egyenletekkel anyagok mozgását tudjuk leírni. Több tudós is próbálkozott különféle jelenségekre reakció-diffúzió egyenletet illeszteni és igen sok területen

ebben sikerrel is jártak. Példának okáért ide tartozik a baktériumok, vírusok, gének és állatfajok elterjedése, vagy a hővezetés. A chemotaxist leíró egyenletek a diffúzióhoz igen hasonlóak.

Ezek után megnézzük, hogyan származtatható utazó hullám egyenlet az előzőekből, mindezt a Fisher-egyenlet kapcsán konkrétan végig is számoljuk.

A harmadik szakaszban a megismert reakció-diffúzió egyenleteket terjesszük ki egyenletrendszerre, végignézzve a ragadozó-zsákmány példán, hogyan néznek ki az említett egyenletekkel leírható folyamatok több résztvevő esetén.

A negyedik szakaszban röviden megismerjük a Belousov-Zhabotinskii féle reakciókat általánosan, majd az egyik változatára felírt több résztvevős egyenletekből nyerhető utazó hullám megoldás létezésével foglalkozunk.

Az első három fejezet J. D. Murray, *Mathematical Biology* című könyve alapján készült, míg a negyedik I. Z. Kiss, J. H. Merkin, S. K. Scott és P. L. Simon, *Travelling waves in the Oregonator model for the BZ reaction* című cikke alapján.

## 1.1. Reakció-diffúzió

Képzeljünk el egy állatfajt, melynek egyedei a nulla időpillanatban  $n_0$ -nyian élnek a tér  $(0, 0, 0)$  pontjában. (Természetesen ez némi egyszerűsítés, hiszen ezek az állatok nem férnek meg egy pontban, hacsak nem pontszerűek, de ez a modell szempontjából lényegtelen, tehát a továbbiakban tekintsünk el tőle.) Továbbá azt is képzeljük el, hogy ezek az állatok szeretnek a térben olyan irányba vándorolni, ahol kevesebb a "vetélytárs", alacsonyabb az egyedek koncentrációja. Arra vagyunk kíváncsiak, hogy a tér egy tetszőleges tartományában hogyan változik az egyedek sűrűsége. Ezt a következő képlettel írhatjuk le:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V c(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = - \int_S J d\sigma + \int_V f d\mathbf{x}, \quad (1)$$

ahol  $c$  a helytől ( $\mathbf{x}$ ) és időtől ( $t$ ) függő koncentrációfüggvény,  $J$  az áramlás a határon,  $f$  a tartományon belül született új egyedek száma ( $f$  függhet  $\mathbf{x}$ -től,  $t$ -től és  $c$ -től is, de mi csak a autonóm esettel foglalkozunk),  $V$  pedig egy tartomány, aminek határa  $S$ . Felhasználva a Green tételt (feltéve, hogy  $c$  elég sima), az egyenletünket a következő formára hozhatjuk:

$$\int_V \left( \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla J - f(c) \right) d\mathbf{x} = 0. \quad (2)$$

Mivel  $V$ -t tetszőlegesen választottuk, teljesülnie kell a

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla J = f(c) \quad (3)$$

egyenletnek.

Ez az egyenlet tetszőleges áramlásra is igaz, a mi modellünkben viszont diffúziót tételeztünk fel, tehát az egyedek a magas koncentrációjú tartományból az alacsony koncentrációjú felé vándorolnak. Ennek szellemében, klasszikus diffúzió esetén  $J = -D\nabla c$ , amivel (3) a következő alakban írható:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c, \mathbf{x}, t) + \nabla(D\nabla c), \quad (4)$$

ahol  $D$  függvénye  $\mathbf{x}$ -nek és  $c$ -nek, továbbá az alacsony koncentráció felé való vándorlást a

$$\frac{\partial D}{\partial c} \geq 0 \quad (5)$$

feltétel fejezi ki.

Egy biológiai modellben tipikusan  $D(n) = D_0(n/n_0)^m$  alakú a diffúzófüggvény, ahol  $m$ ,  $D_0$  és  $n_0$  pozitív konstansok,  $n$  pedig a (3)-ban szereplő  $c$  függvény (ezzel jelölve, hogy egész számú egyedről van szó). Feltéve, hogy nincs növekedés ( $f \equiv 0$ ), a (3) egyenlet a következő alakot veszi fel:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_0 \nabla \left[ \left( \frac{n}{n_0} \right)^m \nabla n \right], \quad (6)$$

mely egy dimenzióban felírva a

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left[ \left( \frac{n}{n_0} \right)^m \frac{\partial n}{\partial x} \right] \quad (7)$$

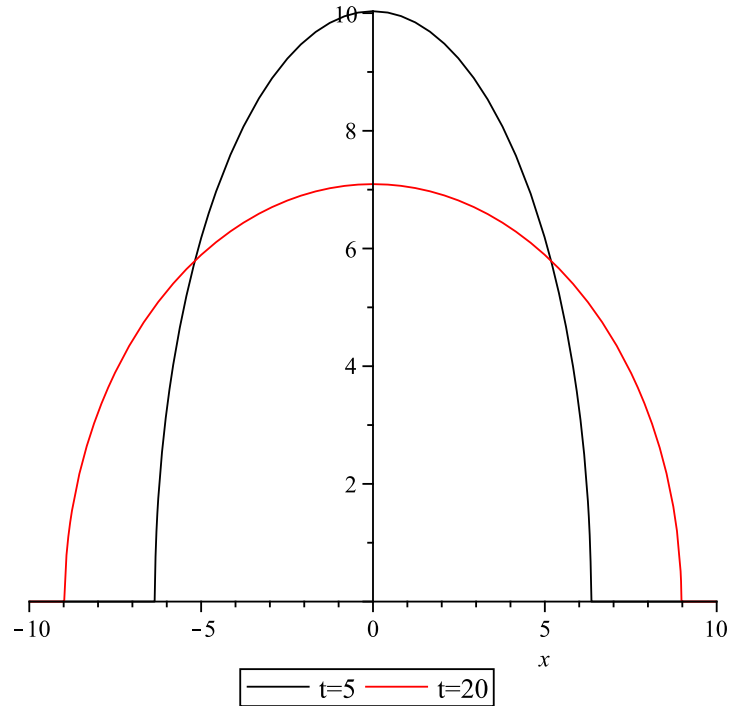
alakra egyszerűsödik. Ennek nagy előnye, hogy ismerjük az egzakt analitikus megoldását,  $m \neq 0$ :

$$n(x, t) = \begin{cases} n_0[\lambda(t)]^{-1} \left[ 1 - \left( \frac{x}{r_0\lambda(t)} \right)^2 \right]^{1/m}, & \text{ha } |x| \leq r_0\lambda(t), \\ 0 & \text{ha } |x| > r_0\lambda(t) \end{cases}, \quad (8)$$

ahol

$$\lambda(t) = \left( \frac{t}{t_0} \right)^{1/(2+m)}, \quad r_0 = \frac{Q\Gamma(\frac{1}{m} + \frac{3}{2})}{\pi^{1/2}n_0\Gamma(\frac{1}{m} + 1)} \quad (9)$$

$$t_0 = \frac{r_0^2 m}{2D_0(m+2)},$$



2. ábra.

megoldás  $\forall r_0$ -ra, ahol  $Q$  a nulla időpillantban, az origóban élő egyedek száma. (9)-ban az  $r_0$  értékre való feltételt onnan kapjuk, hogy  $\int_R n dx = Q$  teljesüljön. Az  $m = 0$  esetben a megoldás meglehetősen különbözik az előzőtől:

$$n(x, t) = \begin{cases} \frac{Q}{2(\pi Dt)^{1/2}} e^{-x^2/4Dt} & , \text{ ha } t > 0 \\ 0 & , \text{ ha } t \leq 0 \end{cases} \quad (10)$$

A (8) egyenlet egyfajta hullámként viselkedik, aminek frontja ( $\sim$  ahol  $n$  "először tűnik el")  $x = x_f = r_0 \lambda(t)$ -ben van, ahol a derivált szakad, továbbá a front  $dx_f/dt = r_0 d\lambda/dt$  sebességgel halad. Ez a sebesség, mint (9)-ből látható, minden  $m$ -re csökken, amint  $t \rightarrow \infty$ . A (8) függvényt a (2) rajz szemlélteti.

## 1.2. Chemotaxis

Rengeteg bogár és állatfaj közvetít információt a faj egyedei között kémiai úton. Ezek az egyedek bizonyos molekulákat juttatnak a levegőbe, amik a fajtársak számára különleges információval bírnak. Ezen molekulákat pheromonoknak nevezzük. Vegyük példának a molylepkéket. A nőstény molyok speciális pheromonokat permeteznek a levegőbe, ezzel tudatva a párzásra kész hímekkel a nőstény helyzetét. Másik példaként az immunrendszerünket említhetnénk. Amikor testünk bizonyos részét bakteriális támadás éri, akkor a leukocyták a chemotaxis eredményeképpen a fertőzött terület felé kezdenek mozogni. Mint látjuk, a reakció hasonló a diffúzióhoz, csak hogy pont ellentétes irányba, az alacsonyabbtól a magasabb koncentrációjú régiók felé hajtja az egyedeket. Ezeket a kémiai irányított mozgásokat hívjuk chemotaxisnak.

Tegyük fel, hogy a pheromonok koncentrációját az  $a(\mathbf{x}, t)$  függvény adja meg, az egyedek pedig a magasabb koncentrációjú területek felé haladnak. Az egyedek számát továbbra is az  $n(\mathbf{x}, t)$ , az áramlást a  $J$ , a születések számát pedig az  $f(n)$  függvények mutatják. Továbbra is fennáll a

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla J = f(n) \quad (11)$$

egyenlet, ahol most az áramlást nem csak a diffúzó határozza meg, hanem a chemotaxis is a következőképpen:

$$J = J_{\text{diffúzió}} + J_{\text{chemotaxis}}, \quad (12)$$

ahol

$$J_{\text{diffúzió}} = D\nabla n, \quad J_{\text{chemotaxis}} = n\chi(a)\nabla a, \quad (13)$$

$\chi(a)$  a pheromonok koncentrációjától függő függvény, ezzel pedig (11) a következő alakra hozható ( $D$  továbbra is a diffúziós együttható):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = f(n) - \nabla n\chi(a)\nabla a + \nabla D\nabla n. \quad (14)$$

Ezt a formát hívják diffúzió-chemotaxis egyenletnek.

Mivel a pheromonok is részecskék, amik nagyjából véletlenszerűen mozognak a térben, ezért ők is diffundálnak, vagyis  $a$ -ra további egyenlet írható fel:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = g(a, n) + \nabla D_a \nabla a, \quad (15)$$

ahol  $D_a$  a pheromonok diffúziós együtthatója,  $g$  pedig a pheromonok termelődését leíró függvény. Egy feltétel, hogy  $D_a > D$  legyen, ami matematikailag nem szükségszerű, de a biológiai folyamat ezt követeli meg.

A molylepkék viselkedését leíró legegyszerűbb elmélet a következő feltételeket teszi a fenti függvényekre:  $g(a, n) = hn - ka$ , ahol  $h$  és  $k$  pozitív konstansok (a feltevés szerint az egyedek számától lineárisan függ, hogy mennyi pheromon termelődik, míg a jelen lévőek bizonyos része elbomlik), továbbá  $f(n) = 0$  és mind a diffúziós együtthatók, mint a chemotaxis együtthatója konstans ( $\chi(a) = \chi_a$ ,  $D(n) = D$  és  $D_a(a) = D_a$ ). Ekkor egy térdimenzióban a (14) egyenlet a következő egyenletrendszeré "egyszerűsödik":

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \chi_0 \frac{\partial}{\partial x} \left( n \frac{\partial a}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= hn - ka + D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2}.\end{aligned}\tag{16}$$

Az ilyen rendszereket azonban csak később, a harmadik fejezetben fogjuk közelebbről szemügyre venni.

Egyéb sűrűn előforduló formái  $\chi(a)$ -nak:

$$\chi(a) = \frac{\chi_0}{a}, \quad \chi(a) = \frac{\chi_0 K}{(K + a)^2}, \quad \chi_0 > 0, \quad K > 0.\tag{17}$$

[1]



## 2. Utazó hullám

### 2.1. Háttér

Ha körbenézünk a világunkban, rengeteg hullámszerű jelenségre lehetünk figyelmesek. Kezdve az embrió fejlődése során bizonyos anyagok terjedésétől a vízben lévő mechanikai hullámok mozgásáig. Általánosságban egy anyag vagy jelenség terjedése mindig hullámszerű. Éppen ezért fontosak mind a biológiában, mind a fizikában, kémiában az utazó hullám egyenletek. Ilyen utazó hullám egyenlet felírásának módját fogjuk most megnézni, az előző fejezetben ismertetett reakció-diffúzió egyenletek segítségével.

Biológiai kísérletek szerint az első példánkban, az embrió fejlődésében, a diffúziós együtthatók igen alacsonyak, nagyjából  $10^{-9}$ - $10^{-11}$   $\text{cm}^2\text{sec}^{-1}$  nagyságrendűek. Ha visszatérünk az előző fejezetben ismertetett konstans együtthatós diffúzió egyenlethez:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (18)$$

és visszaemlékszünk a (10) megoldásra, könnyen láthatjuk, hogy egy bizonyos információ  $L$  távolságra eljutása a koncentrációváltozás által  $O(L^2/D)$  időbe telik. Ez  $L = 1\text{mm}$  esetén  $O(10^7 - 10^9\text{sec})$ , ami meglehetősen sok az embrió fejlődésének korai szakaszában. Ebből levonhatjuk a következtetést, hogy ebben a folyamatban más jelenségeknek is közre kell játszaniuk.

A sima diffúziós egyenlettel ellentétben, ha az egyenletünkbe bele vesszük az anyag termelődését (reakció), akkor rögtön más képet kaphatunk. Tekintsük tehát a következő, már ismerős egyenletet:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(u) + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (19)$$

ahol  $u$  továbbra is a koncentrációfüggvény,  $D$  a diffúziós együttható,  $f$  pedig a megfelelő anyag termelődését leíró függvény.

Most jött el az ideje, hogy definiáljuk az utazó hullám egyenletet. Mint mondtuk már, az olyan függvényt nevezzük utazó hullám megoldásnak, melynek grafikonja minden  $t$ -re megszorítva ugyanazt az alakot veszi fel bizonyos konstanssal eltolódva. Ez egy dimenzióban a következő

$$u(x, t) = U(x - ct) = U(z), \quad z = x - ct, \quad c \text{ pozitív konstans} \quad (20)$$

matematikai feltételnek felel meg. Ebben az esetben  $U$  egy olyan utazó hullám, mely konstans  $c$  sebességgel halad pozitív irányba. Természetesen

$c < 0$  esetben is utazó hullámok kapunk, ekkor viszont negatív irányba haladót.

Most már kereshetjük (19) megoldását utazó hullám alakban. Ekkor

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -c\partial_z U(z) \text{ és } \frac{\partial u}{\partial x} = \partial_z U(z) \quad (21)$$

teljesül. Vegyük észre, hogy a parciális differenciálegyenletből immáron közönséges differenciálegyenletet kaptunk:

$$-cU'(z) = f(u) + DU''(z) \quad (22)$$

Ha még azt is megköveteljük, hogy  $U$  legyen pozitív és egyenletesen korlátos (ezt hívjuk fizikailag reális feltételnek), akkor láthatjuk, hogy (18)-nak nincs fizikailag reális utazó hullám megoldása. Mivel (18) megoldása előáll

$$D\partial_{zz}U(z) + c\partial_z U(z) = 0 \Rightarrow U(z) = A + Be^{-cz/D} \quad (23)$$

alakban, ahol  $A$  és  $B$  konstansok. De mivel  $U$  egyenletesen korlátos  $B$  szükségképpen 0, máskülönben  $U \rightarrow \infty$ , amint  $z \rightarrow -\infty$ . Ekkor viszont  $U(z) = A$ , amit nem nevezünk utazó hullámnak. Ebből is látható, hogy rögzített  $c$  esetén a parabolikus reakció-diffúzió egyenletnek a megoldhatósága a reakciótól,  $f$ -től függ.

## 2.2. A Fisher egyenlet

A klasszikus és legegyszerűbb nemlineáris eset a

$$\frac{\partial u}{\partial t} = ku(1-u) + D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (24)$$

eset, ahol  $k$  és  $D$  pozitív paraméterek. Ezt a formát Fisher javasolta 1937-ben, mint determinisztikus változatát annak a sztochasztikus modellnek, mely egy adott gén terjedését írja le a populáción belül. A megoldását és utazó hullám megoldását pedig Kolmogorov, Petrovsky és Piscounov adta meg.

Mielőtt elkezdenénk keresni az utazó hullám megoldást, vegyük észre, hogy a

$$t^* = kt, \quad x^* = x \left( \frac{k}{d} \right)^{1/2} \quad (25)$$

behelyettesítéssel (24) a

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1 - u) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (26)$$

egyszerűsített alakra hozható. Most, hogyha  $u$ -t utazó hullám formában keressük, ahol

$$u(x, t) = U(z), \quad z = x - ct, \quad (27)$$

$c$  az utazó hullám sebessége (amit természetesen választhatunk pozitívnak, hiszen  $x$  helyére  $-x$ -et helyettesítve  $c$  előjelet vált), (26) átírható a következő közönséges differenciál egyenletté:

$$U'' + cU' + U(1 - U) = 0. \quad (28)$$

Egy tipikus hullám megoldásban  $U(z) \rightarrow U_{\text{egyensúly}_1}$ , amint  $z \rightarrow -\infty$  és  $U(z) \rightarrow U_{\text{egyensúly}_2}$ , amint  $z \rightarrow \infty$ .

Jelen esetben az egyik egyensúlyi pont az  $U = 0$ , míg a másik az  $U = 1$ , vagyis kapunk egy

$$\lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} U(z) = 1 \quad (29)$$

feltételt (vagy fordítva, de az lényegében ugyanez a probléma).

Írjuk át a (28) egyenletet elsőrendű rendszerre a standard helyettesítéssel:

$$U' = V, \quad (30)$$

$$V' = -cV - U(1 - U).$$

Láthatjuk, hogy a rendszernek két egyensúlyi pontja van az  $(U, V)$  térben, név szerint a  $(0, 0)$  és az  $(1, 0)$ . Linearizáljuk ezen két pontban az egyenletrendszerünket.

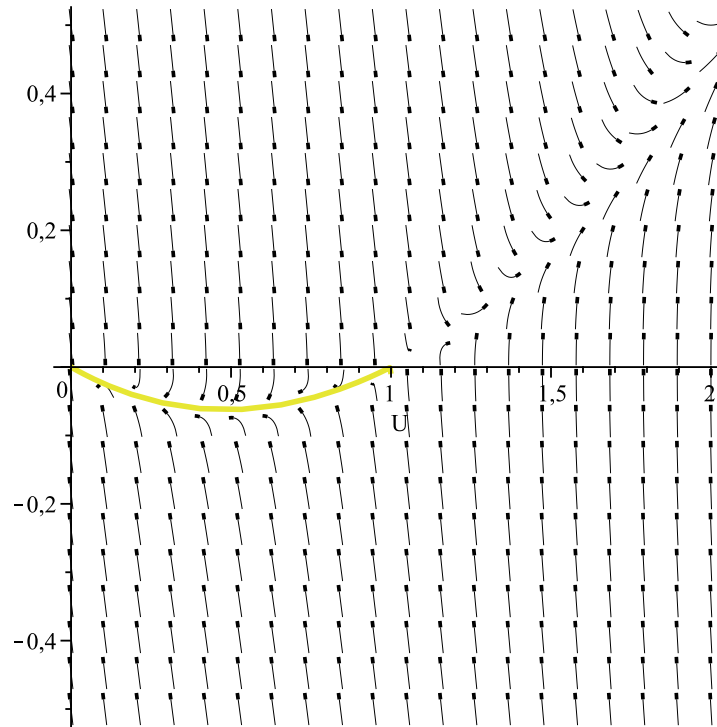
$$(0, 0) : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -c \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$(1, 0) : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -c \end{pmatrix}.$$

Kiszámolva a két mátrix sajátértékeit

$$(0, 0) : \lambda_{1,2} = -\frac{1}{2}(c \pm \sqrt{c^2 - 4}) \quad (32)$$

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



3. ábra.

kapjuk, hogy

$$(0, 0) : \begin{cases} \text{stabil csomó, ha } c^2 \geq 4 \\ \text{stabil fókusz, ha } c^2 < 4 \end{cases} . \quad (33)$$

$(1, 0)$  : nyeregpont

Minket a  $c^2 < 4$  eset nem érdekel, hiszen ekkor a megoldás oszcillálna  $(0, 0)$  körül, ami néha negatív koncentrációt jelentene.

Folytonossági megfontolásokból adódóan léteznie kell a 3. ábrán is látható  $(1, 0)$ -ból  $(0, 0)$ -ba vezető pályának. Ez pedig pont az, amit kerestünk.

Tehát, végeredményben azt kaptuk, hogy  $c^2 \geq 4$  esetén a rendszernek van fizikailag reális utazó hullám megoldása, melynek  $\alpha$ -határpontja a fáziskép  $(1, 0)$  pontja, míg  $\omega$ -határpontja a fáziskép  $(0, 0)$  pontja.  $c^2 < 4$  esetén is megtalálható az előző pálya, ám ekkor  $u$ , vagyis a megfigyelt anyag koncentrációja oszcillálna a  $(0, 0)$  körül, vagyis néha negatív értéket venne fel,

ami az alkalmazott területek számára érdektelenné teszi ezt a megoldást.

További fontos és érdekes kérdésként itt még feltehető lenne, hogy milyen kezdetiérték feltételei vezetnek (26)-nak utazó hullám megoldására, illetve, mennyi ezen esetekben a hullámsebesség. Ezzel részletesen foglalkozott Kolmogorov, de ebben a dolgozat nem ismertetjük részletesebben az eredményeit.

[2]

### 3. Többváltozós modell

Ebben a fejezetben megismerkedünk a ragadozó-zsákmány, diffúzió alapuló modelljével. A feltevés szerint most két faj is él az adott területen, akik diffúzió hatására vándorolnak új területek felé, ám itt a két faj között kölcsönhatás is létezik. A ragadozók megeszik a zsákmányt, sőt minél több a zsákmány, annál jobban szaporodnak a ragadozók, míg értelemszerűen ez a zsákmányra fordítva áll. Ugyan általánosságban több térdimenziós modellel is foglalkozhatnánk, és először azt is írjuk fel, azonban utána az egyszerűség kedvéért áttérünk az egy dimenziós esetre, a modell filozófiája így is ugyanolyan érthető lesz.

A modellünk egy módosított Lotka-Volterra rendszer, logaritmikusan növekedéssel, ahol a vándorlásért a diffúzió a felelős. A diffúziós együttható mindkét esetben konstans,  $U$  jelöli a zsákmány,  $V$  pedig a ragadozó koncentrációfüggvényét.

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= AU \left(1 - \frac{U}{K}\right) - BUV + D_1 \nabla^2 U, \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= CUV - EV + D_2 \nabla^2 V,\end{aligned}\tag{34}$$

ahol  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $E$  és  $K$  (a természet teherbíró képessége) pozitív konstansok. A következő helyettesítésekkel az egyenletrendszer szebb alakra hozható:

$$\begin{aligned}u &= \frac{U}{K}, v = \frac{BV}{A}, t^* = At, x^* = x \left(\frac{A}{D_2}\right)^{1/2}, \\ D &= \frac{D_1}{D_2}, a = \frac{CK}{A}, b = \frac{E}{CK}\end{aligned}$$

Ezekkel a helyettesítésekkel, illetve mivel, mint említettem, áttérünk egy térdimenzióra, a (34) egyenletrendszer a következő alakot veszi fel:

$$\begin{aligned}\partial_t u &= u(1 - u - v) + D \partial_{xx} u, \\ \partial_t v &= av(u - b) + \partial_{xx} v.\end{aligned}\tag{35}$$

Természetesen minket továbbra is csak a nem-negatív megoldások érdekelnek.

Megvizsgálva a fenti rendszer diffúziótól mentes, térbelileg független változatát, egyből láthatjuk, hogy három egyensúlyi állapot létezik. Ezek közül

az első a  $(0, 0)$ , második az  $(1, 0)$ , míg harmadik a  $(b, 1 - b)$ . Az első esetben egyik faj képviselője sincs jelen, a másodikban csak zsákmány van, ragadozók nem élnek (ekkor persze visszakapjuk az egy résztvevős modellt), míg a harmadik eset az igazán izgalmas, hiszen itt mindkét faj jelen van, amennyiben  $b < 1$ , amit most rögtön be is teszünk a feltételek közé.

Az intuícióink alapján mind a  $(0, 0)$ -nak, mind az  $(1, 0)$ -nak instabilnak kell lennie, hiszen míg az első esetben, ha elengedünk néhány zsákmányt, azok elszaporodnak, míg a második esetben ugyanez történik a ragadozókkal, a zsákmány kárára. Ugyanilyen logikával azt várjuk, ha a modellünk helyes, a harmadik állapot stabil, hiszen akármennyi is a kezdeti populáció végül be kell állniuk egyensúlyba, vagy akörül kell oszcillálni.

Valóban, megvizsgálva az egyensúlyi pontjainkat, azt találjuk, hogy  $(0, 0)$  és  $(1, 0)$  instabil,  $(b, 1 - b)$  pedig stabil csomó, ha  $4a \leq b/(1 - b)$  és stabil fókusz, ha  $4a > b/(1 - b)$ .  $(b, 1 - b)$  stabilitását onnan is láthatjuk, hogy a

$$L(u, v) = a \left( u - b - b \ln \left( \frac{u}{b} \right) \right) + \left( v - 1 + b - (1 - b) \ln \left( \frac{v}{1 - b} \right) \right).$$

függvény teljesíti Ljapunov tételét ebben a pontban. Valóban  $L(b, 1 - b) = 0$ ,  $L(u, v) > 0$  a pozitív negyedsíkban ( $(b, 1 - b)$  kivételével) és  $\frac{d}{dt}L(u(t), v(t)) < 0$ .

Keressük most (35) megoldását utazó hullám alakban. A szokásos

$$u(x, t) = U(z), v(x, t) = V(z), z = x + ct. \quad (36)$$

behelyettesítéssel ( $c$  pozitív hullámsebesség):

$$\begin{aligned} cU' &= U(1 - U - V) + DU'', \\ cV' &= aV(U - b) + V''. \end{aligned} \quad (37)$$

Tegyük most fel, hogy a zsákmány diffúziós együtthatója nagyságrendileg kisebb, mint a ragadozóé, vagyis, hogy  $D = d_1/D_2 = 0$ . A következő fejezetben fogunk látni ezen feltétel nélküli példát. Használjuk most a megszokott eljárást, hogy eltüntessük a magasabb rendű tagokat.

$$U' = \frac{U(1 - U - V)}{c}, \quad (38)$$

$$V' = W, W' = cW - av(U - b).$$

Ennek az egyenletnek az egyensúlyi pontjai természetesen a  $(0, 0, 0)$ , az  $(1, 0, 0)$ , (ezek az instabilak) és a  $(b, 1 - b, 0)$  (stabil).

Ahogy a Fisher egyenletnél írtuk fel a határfeltéteket, úgy tehetjük meg most is, azzal a különbséggel, hogy most mindkét instabil egyensúlyi helyzetből van esélyünk utazó hullámot találni a stabil egyensúlyba. Vagyis:

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} U(z) = 1, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = b, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} V(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} V(z) = 1 - b, \quad (39)$$

vagy

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} U(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = b, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} V(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} V(z) = 1 - b. \quad (40)$$

Mi itt most csak a (39) feltétel esetével foglalkozunk.

A rendszer linearizáltja az  $(1, 0, 0)$  pont körül:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{c} & -\frac{1}{c} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -a(1-b) & c \end{pmatrix}, \quad (41)$$

aminek a sajátértékei:

$$\lambda_1 = -\frac{1}{c}, \quad \lambda_{2,3} = \frac{c \pm \sqrt{c^2 - 4a(1-b)}}{2}. \quad (42)$$

Láthatjuk, hogy amennyiben

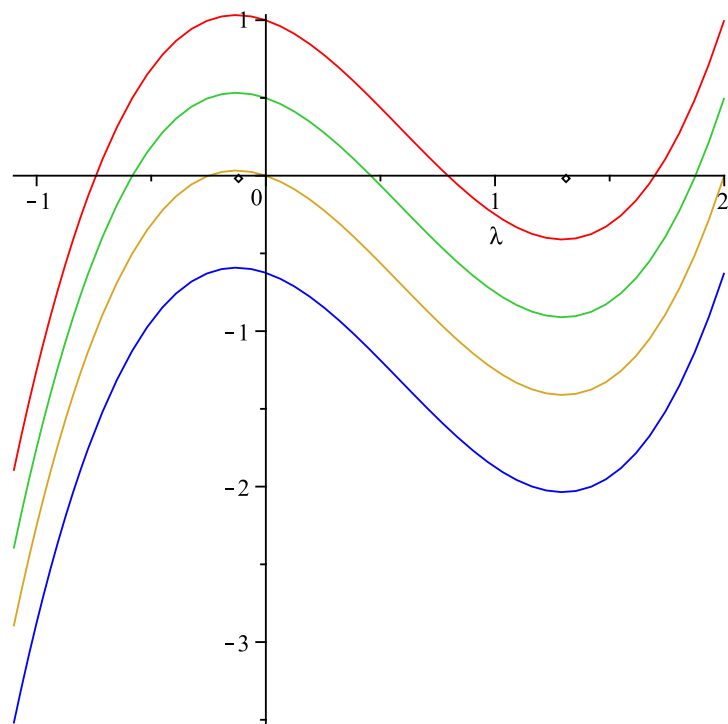
$$c \leq \sqrt{c^2 - 4a(1-b)} \quad (43)$$

van esélyünk utazó hullámot találni, hiszen akkor az  $(1, 0, 0)$  instabillá válik, vagyis lesz onnan kijövő pálya. (Valójában  $c^2 < 4a(1-b)$  esetén az  $(1, 0, 0)$  pont körül a pályák oszcillálnak.) Amennyiben  $c$  teljesíti (43)-t az előző fejezetbeli megfontolások alapján találunk a megfelelő határfeltételeket teljesítő utazó hullámot. Itt azonban a megoldás két alakot vehet fel.

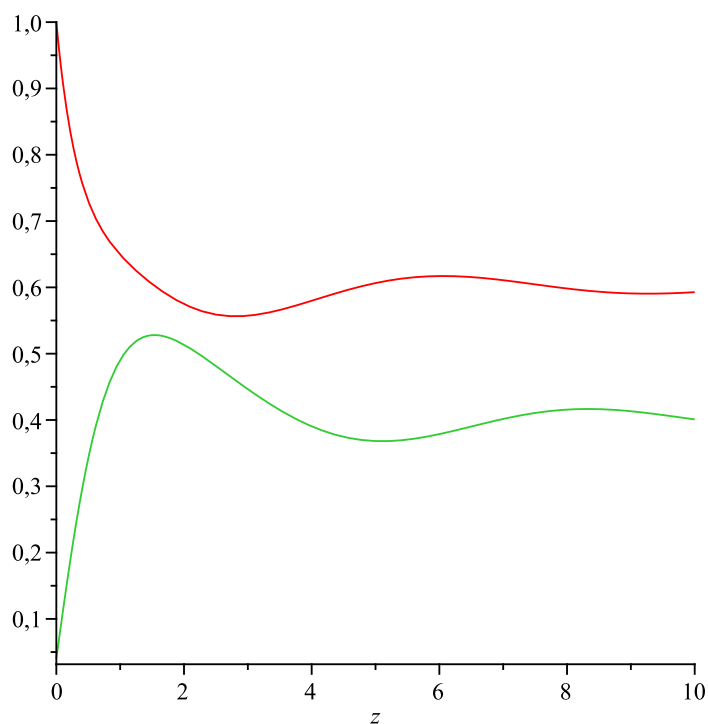
Linearizáljuk a rendszert, a  $(b, 1 - b, 0)$  pont körül, és nézzük a kapott mátrix karakterisztikus polinomját, hogy lássuk, hogyan változnak ezen egyensúlyi ponthoz tartozó sajátértékek a paraméterek megváltoztatásával.

$$\begin{pmatrix} -\frac{b}{c} & -\frac{b}{c} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -a(1-b) & 0 & c \end{pmatrix}, \quad (44)$$





4. ábra.



5. ábra.

amiből

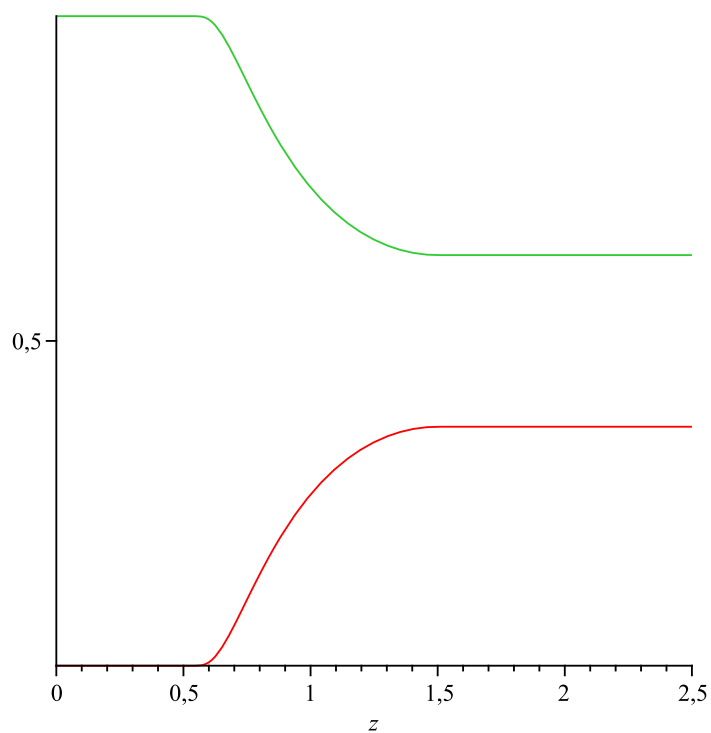
$$p(\lambda) = \lambda^3 - \lambda^2 \left( c - \frac{b}{c} \right) - \lambda b - \frac{ab(1-b)}{c}. \quad (45)$$

Tudjuk, hogy a fenti mátrix sajátértékei a karakterisztikus polinom gyöke, tehát a keresett megoldás viselkedése  $p(\lambda)$ -tól függ. Ábrázoljuk ezt a függvényt, különböző  $a$ -kra, továbbá vizsgáljuk meg a lokális maximum illetve minimumhelyeit. Egyszerű deriválással kapható, hogy:

$$\lambda_m, \lambda_M = \frac{c - \frac{b}{c} \pm \sqrt{\left( c - \frac{b}{c} \right)^2 + 3b}}{3}, \quad (46)$$

ami független  $a$  választásától.

A 4. ábrán jól látszik a gyökök elhelyezkedése  $a$  variálásával.  $a = 0$ -ra egy pozitív és egy negatív gyököt kapunk a 0 mellett. Amint  $a$  növekszik, két negatív gyöke lesz a polinomunknak (az egy pozitív mellett), egészen



6. ábra.

egy kritikus  $a^*$  értékig, amikor is a két negatív gyök egybeesik (ez pont  $\lambda_m$ ), majd  $a$  további növelésével ezek átmennek két komplex gyökbe negatív valósrésszel.

Ennek a kritikus  $a^*$ -nak a létezése azt jelenti, hogy amíg  $a > a^*$  a függvény "oszcillálva" tart a stabil állapothoz (lásd 5. ábra), míg  $a < a^*$  esetén monotonon (lásd 6. ábra).

[3]

## 4. Belousov-Zhabotinskii reakció

Először is ismerkedjünk meg a Belousov-Zhabotinskii (továbbiakban BZ) féle reakciókkal. Ezen reakciók fontos klasszikus példái a nem-egyensúlyi termodinamikának, ugyanis egy nemlineáris kémiai oszcillátornak köszönhetően, ezekben a reakciókban résztvevő anyagok koncentrációja igen hosszú időn át távol van az egyensúlyi állapottól. Általában ezen kísérletekben bromidot és valamilyen fajta savat használnak, a koncentráció ingadozása pedig az oldat színváltozásán keresztül figyelhető meg. A kísérletek kémiai szempontból érdekesek, de az őket leíró matematikai modellek a matematika számára is izgalmasak.

A mi példánkban három aktív molekulafajtát használunk,  $HBrO_2$ -ot, mint autokatalizátort,  $Br^-$ -t és az autokatalizátor egy oxidált formáját,  $M_o x$ -ot, a matematikai modellünk pedig a kétváltozós Oregonator modell lesz. Ezt azért tehetjük meg, mert feltételezzük, hogy a  $Br^-$  koncentrációja a kísérlet során kvázi-állandó.

Jelölje  $u(x, t)$  a  $HBrO_2$  dimenziómentes koncentrációját  $x$  és  $t$  függvényében, míg  $M_o x$ -ét  $w(x, t)$ ,  $D$  pedig a  $\frac{D_w}{D_u}$  hányadosát a diffúziós együtthatóknak. Felírva a kétváltozós Oregonator modellt, kapjuk a

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left( u(1-u) - \frac{fw(u-q)}{u+q} \right) \\ \frac{\partial w}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + u - w \end{aligned} \quad (47)$$

egyenletet, ahol  $f$ ,  $q$  és  $\varepsilon$  konstansok. A  $Br^-$ -ra a feltételben szereplő megkötés:

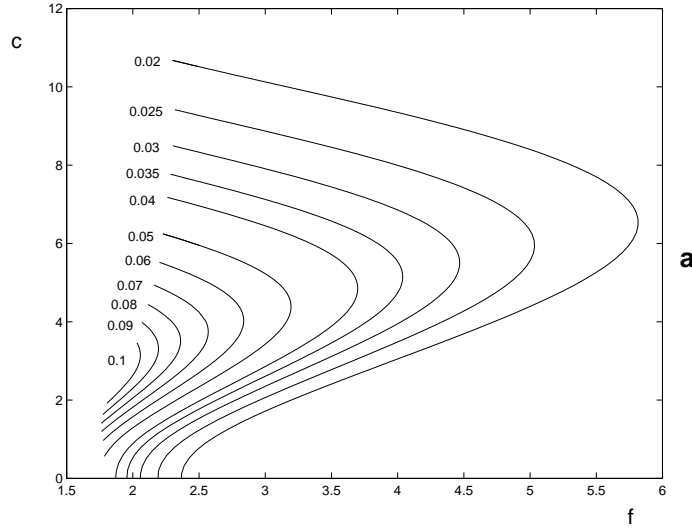
$$v = \frac{fw}{u+q}, \quad (48)$$

ahol  $v(x, t)$  természetesen a  $Br^-$  koncentrációfüggvénye.

Használjuk most a már ismert eljárást, helyettesítsünk be  $y = x - ct$ -t, így módon keresve utazóhullám megoldást. Ekkor

$$U'' + cU' + \frac{1}{\varepsilon} \left( U(1-U) - \frac{fW(U-q)}{U+q} \right), \quad (49)$$

$$DW'' + cW' + U - W = 0. \quad (50)$$



7. ábra.

A fenti közönséges differenciálegyenlet egyensúlyi pontjai: (50) alapján  $U_s = W_s$ , míg (49) alapján, felhasználva az előző megállapítást:

$$U_s = W_s = \frac{1}{2} \left( 1 - f - q + \sqrt{(1 - f - q)^2 + 4q(f + 1)} \right), \quad (51)$$

tehát egyetlen egyensúlyi pont létezik, vagyis a határfeltétel:

$$(U, W) \rightarrow (U_s, W_s), \text{ amennyiben } |y| \rightarrow \infty. \quad (52)$$

Amennyiben tehát utazó hullám megoldást keresünk, feladatunk nem más, mint az  $(U, W, U', W')$  4 dimenziós fázistérben egy homoklinikus hurok megtalálása. Homoklinikus huroknak nevezzük azt a pályát, melynek mind  $\alpha$ , mind  $\omega$ -határhalmaza ugyanaz az egyensúlyi pont, jelen esetben  $(U_s, W_s, 0, 0)$ . Sajnos a homoklinikus hurok létezésére 4 dimenzióban nincs reálisan használható tétel, ezért főként numerikus eredményekkel rendelkezünk.

A 7. ábrán látható, hogy  $\varepsilon$  különböző értékeire  $q = 0.002$ ,  $D = 1$  esetén milyen numerikusan számolt  $c$  értékekhez található utazó hullám megoldás. Mint látjuk, ebben a tartományban van egy kritikus  $f$  érték, melynél kisebbekre nincsen megfelelő  $c$ , míg ha van, kettő is van.

Érdekes lehet megnézni, mi a helyzet kisebb, speciális  $f$ -ekre, ugyanis, ha találunk egy homoklinikus hurokot egy speciális  $f$ -re, akkor elkezdhetjük

vizsgálni annak egy környezetében a fáziskép szerkezetét. Tekintsük az egyenletet  $f = 0$  esetben.

$$U'' + cU' + \frac{1}{\varepsilon}U(1 - U), \quad (53)$$

$$DW'' + cW' + U - W = 0. \quad (54)$$

Ekkor, mint látjuk, a két egyenlet szétesik, illetve az  $U$ -ra vonatkozó egyenlet nem függ  $W$ -től. Tehát vizsgálhatjuk az  $(U, U')$  fázisteret önmagában, ezt viszont láttuk már a második fejezetben. Ha visszaemlékszünk két egyensúlyi pontunk volt, nevezetesen a  $(0, 0)$  és az  $(1, 0)$ .

Ebben a síkban viszont nem fekdhet homoklinikus hurok. Egy homoklinikus hurok létezéséhez egy 2 dimenziós fázistérben, ugyanis legalább két egyensúlyi pont kell, másrészt a homoklinikus hurok kezdőpontjának kell lenni kifelé menő pályájának, majd a huroknak meg kell kerülnie a másik egyensúlyi pontot.

Tegyük most fel ugyanis, hogy létezik ilyen hurok. Lehet-e a  $(0, 0)$  a hurok  $\alpha$  (és  $\omega$ )-határpontja? Nem, hiszen ha visszaemlékszünk  $(0, 0)$  vagy stabil fókusz, vagy stabil csomó ( $c$ -től függően) és egyik sem alkalmas, hiszen nincs kifelé mutató pálya.

Az  $(1, 0)$  szintén nem lehet, hiszen ekkor a huroknak a  $(0, 0)$  pontot kéne megkerülnie. De ugyebár ez sem lehet, különben is ekkor a koncentráció néha negatív lenne.

Tehát ha a  $(U, W, U', W')$  4 dimenziós fázistérben van homoklinikus hurok, ott  $U$ -nak konstansnak kell lenni (még hozzá konstans 1 (51)-ből). Vagyis a  $W$ -re vonatkozó egyenlet:

$$DW'' + cW' - W + 1 = 0, \quad (55)$$

aminek viszont a megoldásai

$$W(y) = k_1 e^{\frac{1}{2} \frac{y(-c + \sqrt{c^2 + 4D})}{D}} + k_2 e^{\frac{1}{2} \frac{y(c + \sqrt{c^2 + 4D})}{D}} \quad (56)$$

alakúak, ahol  $k_1$  és  $k_2$  konstansok. Ebből rögtön látható, hogy nincs homoklinikus hurok.

Minderre persze kevesebb számolás árán is eljuthattunk volna, hiszen rögtön látszik, hogy (55) egyetlen egyensúlyi pontja a  $W \equiv 1$  függvény, tehát a fentiek értelmében nem találhatunk homoklinikus hurkot.

Vagyis levonhatjuk azt a következtetést, hogy  $f = 0$  paraméterérték esetén nincs, a keresett határfeltételeknek eleget tevő utazó hullám megoldás.

Térjünk vissza az 7. ábrán látható numerikus eredményekre. Láthatjuk, hogy nem minden  $f$ -re létezik olyan, megoldás, amelyet mi keresünk. Próbáljunk analitikusan adni szükséges feltételt  $f$ -re.

Egyrészt megnézhetjük az egyenlet linearizáltját az  $(U_s, W_s, 0, 0)$  pontban.

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{\varepsilon}(1 - 2U_s - \frac{2fW_s q}{(U_s + q)^2}) & -c & -\frac{1}{\varepsilon} \frac{f(U_s - q)}{U_s + q} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -\frac{1}{D} & 0 & \frac{1}{D} & -\frac{c}{D} \end{pmatrix} \quad (57)$$

Ha  $J$  pozitív vagy negatív definit, akkor a sajátértékek mind pozitívak vagy negatívak, tehát vagy kimenő, vagy bemenő pálya nem lesz  $(U_s, W_s, 0, 0)$ -be. Tekintsük tehát  $J$  főminorjait. Az első  $D_1 = 0$ , a második

$$D_2 = \frac{1}{\varepsilon} \left( 1 - 2u_s - \frac{2fw_s q}{(u_s + q)^2} \right), \quad (58)$$

a harmadik ismét  $D_3 = 0$ , míg a negyedik

$$D_4 = -\frac{1}{D\varepsilon} \left( 1 - 2U_s - \frac{2fW_s q}{(U_s + q)^2} + \frac{f(U_s - q)}{U_s + q} \right). \quad (59)$$

Látjuk tehát, hogy vagy  $D_2 < 0$  és  $D_4 > 0$  vagy pedig  $D_2 > 0$  és  $D_4 < 0$ , de az is világos, hogy itt  $f$  értéke csak  $q$ -tól,  $\varepsilon$ -tól és  $D$ -től fog függeni,  $c$ -től nem.

Ennél azonban jobb, becslést ad a Routh-Hurwitz kritérium.

Legyen

$$\alpha = 1 - 2U_s - \frac{2fqU_s}{(U_s + q)^2} \text{ és } \beta = \frac{f(U_s - q)}{U_s + q}.$$

Ekkor  $J$  karakterisztikus polinomja felírható a

$$p(\lambda) = D\lambda^4 + c(1 + D)\lambda^3 + \left( c^2 + \frac{D\alpha}{\varepsilon} - 1 \right) \lambda^2 + c \left( \frac{\alpha}{\varepsilon} - 1 \right) \lambda + \left( \frac{\beta - \alpha}{\varepsilon} \right). \quad (60)$$

Ekkor, mivel  $\lambda^3$  együtthatója  $\geq 0$ , a karakterisztikus polinomnak van legalább egy nem-pozitív valósrészi gyöke. Tehát a számunkra rossz lehetőség, ha  $p(\lambda)$ -nak csak negatív valósrészi gyökei vannak. Ez pedig a Routh-Hurwitz kritérium alapján akkor, és csak akkor lehet, ha az alábbi feltételek teljesülnek:

$$c > 0, (\beta - \alpha) > 0, \quad (61)$$

$$c(c^2(1 + D)\varepsilon + D^2\alpha + D(\alpha - \varepsilon) - \alpha) > 0, \quad (62)$$

$$c^2((\alpha - \varepsilon)(c^2((1 + D)\varepsilon + D^2\alpha + D(\alpha - \varepsilon) - \alpha) - (\beta - \alpha)(1 + D)^2\varepsilon) > 0. \quad (63)$$

Ha megvizsgáljuk ezeket a feltételeket, azt láthatjuk, hogy (61) mindig teljesül, míg (63) erősebb, mint (62). Tehát végeredményben (63)-at  $f$ -re átrendezve kapunk egy feltételt, ahol van esély utazó hullám megoldást keresni. Természetesen, mint említettük, ez csak szükséges, de nem elégséges feltétel.

Tehát végeredményben kaptunk egy analitikus feltételt  $f$  nagyságára, megnéztük, mi a helyzet  $f = 0$  esetén, megnéztük a numerikus becsléseket, de még sok megválaszolatlan, nyitott kérdés maradt ezen egyenlet vizsgálatával kapcsolatban ...

[4]



## Hivatkozások

- [1] J. D. Murray, *Mathematical Biology* (1989) 236-244
- [2] J. D. Murray, *Mathematical Biology* (1989) 274-286
- [3] J. D. Murray, *Mathematical Biology* (1989) 311-322
- [4] I. Z. Kiss, J. H. Merkin, S. K. Scott és P. L. Simon, Travelling waves in the Oregonator model for the BZ reaction (2003)