



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



ΧΡΙΣΤΟΦΟΡΙΔΗΣ ΧΡΗΣΤΟΣ

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΓΙΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΜΟΝΤΕΛΑ ΓΙΑ ΤΟ
ΦΑΙΝΟΜΕΝΟ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΟΤΑΞΙΑΣ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Ιωάννινα, 2025



UNIVERSITY OF IOANNINA
Department of Mathematics



CHRISTOFORIDIS CHRISTOS

NUMERICAL METHODS FOR MATHEMATICAL MODELS IN
CHEMOTAXIS

Master's Thesis

Ioannina, 2025

Αφιερώνεται στους γονείς μου Κωνσταντίνο και Καλλιόπη.

Η παρούσα Μεταπτυχιακή Διατριβή εκπονήθηκε στο πλαίσιο των σπουδών για την απόκτηση του Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης στα Εφαρμοσμένα Μαθηματικά και Πληροφορική, που απονέμει το Τμήμα Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

Εγκρίθηκε την 09/12/2025 από την εξεταστική επιτροπή:

Όνοματεπώνυμο	Βαθμίδα
Φωτεινή Καρακατσάνη	Επίκουρη Καθηγήτρια
Μιχαήλ Ξένος	Καθηγητής
Θεόδωρος Χωρίκης	Καθηγητής

ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ

“Δηλώνω υπεύθυνα ότι η παρούσα διατριβή εκπονήθηκε κάτω από τους διεθνείς ηθικούς και ακαδημαϊκούς κανόνες δεοντολογίας και προστασίας της πνευματικής ιδιοκτησίας. Σύμφωνα με τους κανόνες αυτούς, δεν έχω προβεί σε ιδιοποίηση ξένου επιστημονικού έργου και έχω πλήρως αναφέρει τις πηγές που χρησιμοποίησα στην εργασία αυτή.”

Χρήστος Χριστοφορίδης

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Με την ολοκλήρωση της παρούσας μεταπτυχιακής διατριβής, θα ήθελα να εκφράσω τις θερμές μου ευχαριστίες σε όσους στάθηκαν δίπλα μου σε αυτή την προσπάθειά, συμβάλλοντας καθοριστικά στην επιτυχή περάτωσή της.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες οφείλω στην επιβλέπουσα καθηγήτρια μου, κ. Φωτεινή Καρακατσάνη για την καθοδήγηση και την υποστήριξη της καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ένας από τους γνωστούς παράγοντες που επηρεάζουν την κίνηση των κυττάρων είναι η χημειοταξία ή χημειοτακτισμός. Ο στόχος αυτής της μεταπτυχιακής εργασίας είναι η μελέτη και η υλοποίηση σε Python αριθμητικών μεθόδων κατάλληλων για την επίλυση κάποιων συστημάτων διαφορικών εξισώσεων που περιγράφουν αυτό το βιολογικό φαινόμενο.

Αρχικά, θα ορίσουμε τη χημειοταξία και θα συζητήσουμε προβλήματα του πραγματικού κόσμου στα οποία εμφανίζεται. Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε γνωστά μαθηματικά μοντέλα που περιγράφουν το φαινόμενο της χημειοταξίας υπό κατάλληλες υποθέσεις για το πραγματικό πρόβλημα, όπως το μοντέλο των Keller-Segel και παραλλαγές του, και θα συζητήσουμε βασικές ιδιότητες των λύσεων αυτών των συστημάτων διαφορικών εξισώσεων.

Στη συνέχεια θα εφαρμόσουμε και θα μελετήσουμε μεθόδους πεπερασμένων διαφορών δεύτερης τάξης για την αριθμητική επίλυση των μοντέλων. Αρχικά θα εξετάσουμε κλασσικά σχήματα πεπερασμένων διαφορών και θα δείξουμε ότι δεν είναι κατάλληλα για την αριθμητική επίλυση των μοντέλων. Στη συνέχεια, θα παρουσιάσουμε και θα μελετήσουμε σχήματα πεπερασμένων διαφορών (όπως τα upwind σχήματα), τα οποία έχουν προταθεί στη βιβλιογραφία ως πιο κατάλληλα. Τέλος, θα παρουσιάσουμε αριθμητικά πειράματα που επιβεβαιώνουν τα θεωρητικά αποτελέσματα.

ABSTRACT

One of the well-known factors that influence cell movement is chemotaxis. The aim of this MSc thesis is to study and implement in Python numerical methods suitable for solving systems of partial differential equations (PDEs) that describe this biological phenomenon.

First, we define chemotaxis and discuss several real-world problems in which this phenomenon occurs. We then present well-known mathematical models that describe chemotactic behavior under appropriate assumptions for the physical problem, such as the Keller–Segel model and its variations, and we outline fundamental properties satisfied by the solutions of these differential equation systems.

Next, we apply and analyze second-order finite difference methods for the numerical solution of these models. We begin by implementing classical finite difference schemes and show that they are not suitable for accurately solving such systems. Subsequently, we present and study finite difference schemes (e.g., upwind schemes) that have been proposed in the literature as more appropriate for these problems. Finally, suitable numerical experiments are carried out to verify the theoretical results.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Περίληψη

Abstract

1	Εισαγωγή	3
1.1	Χημειοταξία και Γενικό Μοντέλο Keller–Segel	5
2	Παρουσίαση και ανάλυση των μοντέλων Keller–Segel	7
2.1	Το κλασικό μοντέλο των Keller–Segel	7
2.2	Minimal Keller-Segel Μοντέλο	10
2.2.1	Ανάλυση του minimal μοντέλου	14
2.2.2	Αστάθεια Turing	19
3	Αριθμητική Επίλυση του Minimal Μοντέλου	29
3.1	Σχήμα Άμεσης Euler και Κεντρικών Διαφορών.	30
3.2	Αριθμητικά αποτελέσματα	42
4	Upwind μέθοδοι (Upwind Schemes)	49
4.1	Μέθοδοι Upwind (Upwind Schemes)	49
4.1.1	Άμεση Upwind μέθοδος	52
4.1.2	Πεπλεγμένη Upwind μέθοδος	53
4.2	Αριθμητικά Αποτελέσματα.	55
5	Συμπεράσματα	59

Βιβλιογραφία	60
A Κώδικες σε Python	63
A.1 Κεντρικές διαφορές και άμεση Euler.	63
A.2 Urwind μέθοδοι.	65

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το αντικείμενο της εργασίας αυτής είναι η μελέτη αριθμητικών μεθόδων που έχουν προταθεί στη διεθνή βιβλιογραφία ως κατάλληλες για την επίλυση συστημάτων μερικών διαφορικών εξισώσεων που μοντελοποιούν το φαινόμενο της χημειοταξίας. Στο κεφάλαιο αυτό θα εξηγήσουμε εν συντομία την έννοια της χημειοταξίας και θα παρουσιάσουμε το γενικό μοντέλο των Keller–Segel, ένα σύστημα δύο εξισώσεων παραβολικού τύπου που την περιγράφει.

Χημειοταξία (Chemotaxis) είναι ένας μηχανισμός με τον οποίο τα κύτταρα ή ολόκληροι οργανισμοί κινούνται σε απόκριση σε ένα χημικό ερέθισμα. Μονοκύτταροι και πολυκύτταροι οργανισμοί κατευθύνουν τις κινήσεις τους αλληλεπιδρώντας με συγκεκριμένες χημικές ουσίες στο περιβάλλον. Αυτές οι χημικές ουσίες ονομάζονται χημειοελκυστικές (chemoattractants) αλλά στην πραγματικότητα μπορεί να είναι είτε χημειοελκυστικές είτε χημειοαπωθητικές. Ανάλογα με την αντίδραση του κυττάρου ή του οργανισμού απέναντι στη χημική ουσία, δηλαδή αν το κύτταρο έλκεται ή απομακρύνεται από αυτήν, διακρίνουμε δύο είδη χημειοταξίας, τη θετική και την αρνητική, βλ. [2], [10]. Στη θετική χημειοταξία, η κίνηση κατευθύνεται προς την πηγή της χημικής ουσίας, όπου η συγκέντρωσή της είναι αυξημένη, ενώ στην αρνητική η κίνηση έχει αντίθετη φορά, απομακρυνόμενη από τη χημική ουσία.

Για παράδειγμα, μπορούμε να σκεφτούμε ένα βακτήριο ενός συγκεκριμένου είδους. Το βακτήριο αυτό μπορεί να χρειάζεται τροφή για να επιβιώσει, αλλά επίσης μπορεί να διαθέτει την ικανότητα να αποφεύγει απειλές. Χρειάζεται, λοιπόν, έναν μηχανισμό με τον οποίο να μπορεί να ανιχνεύει υψηλότερες συγκεντρώσεις τροφής ώστε να κινείται προς αυτές, ή να ανιχνεύει απειλές από απόσταση και να τις αποφεύγει. Αυτές οι διαδικασίες αποτελούν παραδείγματα χημειοταξίας — είτε προς θετικά ερεθίσματα όπως η τροφή, είτε προς αρνητικά ερεθίσματα, όπως ένα δηλητήριο.

Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί το βακτήριο *Escherichia coli* (*E.*

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Coli), το οποίο ανήκει στην κατηγορία των εντεροβακτηριδίων και μπορεί να προκαλέσει ουρολοίμωξη ή και γαστρεντερίτιδα, βλ. [4], [10]. Το βακτήριο *E. Coli* διαθέτει μικρές «ουρές» που βοηθούν την κίνησή του, οι οποίες αναφέρονται ως μαστίγια. Αυτά τα μαστίγια μπορούν να περιστρέφονται είτε δεξιόστροφα είτε αριστερόστροφα. Όταν τα μαστίγια περιστρέφονται αριστερόστροφα, ευθυγραμμίζονται και το βακτήριο κινείται ευθύγραμμα προς τα εμπρός. Αντίθετα, κατά τη δεξιόστροφη κίνηση, τα μαστίγια διαχωρίζονται, και το βακτήριο κινείται ελάχιστα, περιστρεφόμενο ή «στριφογυρίζοντας». Όταν δε λαμβάνει χώρα χημειοταξία, το βακτήριο εναλλάσσεται μεταξύ των δύο αυτών καταστάσεων, με έναν σταθερό ρυθμό, επιτρέποντάς του έτσι να περιπλανιέται άσκοπα μέχρι να εντοπίσει κάποιο ερέθισμα. Όταν εντοπίσει κάποιο ερέθισμα, ρυθμίζει τη συχνότητα των μεταβάσεων αυτών, ανάλογα με το αν το ερέθισμα προκαλεί θετική ή αρνητική χημειοταξία. Στην παρακάτω εικόνα φαίνεται η κίνηση του βακτηρίου (βλ. [10]).

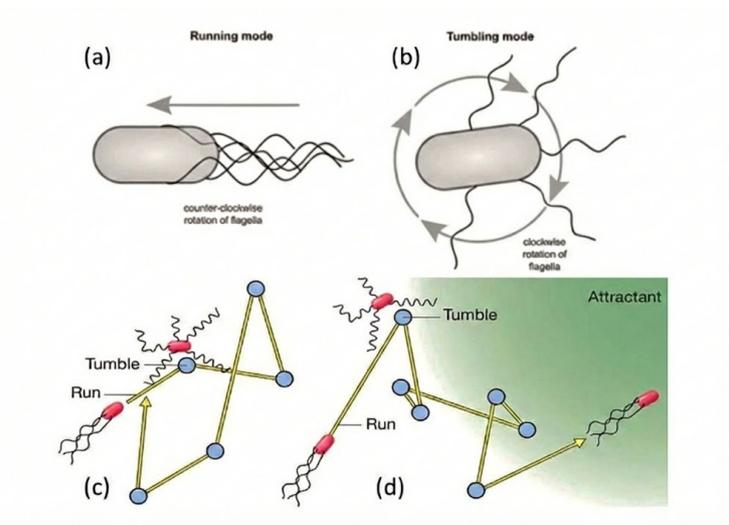


Figure 1.1: Μια απεικόνιση του βακτηρίου *E. coli* και του μηχανισμού κίνησης του. Με αλφαβητική σειρά, αριστερόστροφη περιστροφή του μαστιγίου προς τα εμπρός, δεξιόστροφη περιστροφή του μαστιγίου και περιστροφή (tumbling mode), τυχαία κίνηση του βακτηρίου *E. coli* χωρίς χημικό ερέθισμα, κατευθυνόμενη κίνηση του βακτηρίου *E. coli* προς θετικό χημικό ερέθισμα.

Ένα ακόμα χαρακτηριστικό παράδειγμα χημειοταξίας σε ευκαρυωτικούς οργανισμούς είναι αυτό του *Dictyostelium discoideum*, ενός μονοκύτταρου αμοιβαδοειδούς οργανισμού, γνωστού και ως «κοινωνικός αμοιβάς» [14]. Πρόκειται για

έναν μυξομύκητα του εδάφους, ο οποίος σε κανονικές συνθήκες ζει ως ελεύθερο μονοκύτταρο και τρέφεται με βακτήρια. Όταν εξαντλούνται τα θρεπτικά συστατικά στο περιβάλλον του, τα κύτταρα ενεργοποιούν έναν μηχανισμό χημειοταξίας και εκκρίνουν μια χημική ουσία που ονομάζεται κυκλικό AMP (cAMP). Η ουσία αυτή διαχέεται στο περιβάλλον και λειτουργεί ως οδηγό σήμα για τα υπόλοιπα κύτταρα, ενεργοποιώντας την κίνησή τους προς περιοχές όπου η συγκέντρωσή της είναι μεγαλύτερη. Τα κύτταρα μπορούν να ανιχνεύσουν αυτή την ουσία μέσω υποδοχέων που βρίσκονται στην επιφάνειά τους και να ξεκινήσουν έτσι να κινούνται προς την κατεύθυνση όπου η συγκέντρωσή της είναι μεγαλύτερη. Καθώς μετακινούνται, εκκρίνουν και τα ίδια επιπλέον ποσότητες της ίδιας ουσίας, ενισχύοντας το χημικό ερέθισμα. Με αυτόν τον τρόπο, όλο και περισσότερα κύτταρα ακολουθούν το σήμα και συγκεντρώνονται στο ίδιο σημείο. Αφού συγκεντρωθούν, τα κύτταρα ενώνονται και σχηματίζουν μια μεγαλύτερη δομή, αρχικά σε μορφή μάζας. Στη συνέχεια, η δομή αυτή μετακινείται σαν ενιαία μονάδα και τελικά δημιουργεί μια ειδική μορφή, όπου τα κύτταρα διαφοροποιούνται για να επιβιώσουν σε δύσκολες συνθήκες και να συνεχίσουν τον κύκλο ζωής τους όταν οι συνθήκες βελτιωθούν.

1.1 Χημειοταξία και Γενικό Μοντέλο Keller–Segel

Για να μελετήσουμε τη χημειοταξία, πρέπει να εισάγουμε το γενικό μοντέλο των Keller–Segel. Το 1970, η Evelyn Fox Keller και ο Lee A. Segel επιχείρησαν για πρώτη φορά να περιγράψουν τη χημειοταξία [9]. Οι Keller και Segel πρότειναν ένα μαθηματικό μοντέλο που αποτελείται από το ακόλουθο σύστημα μη γραμμικών παραβολικών εξισώσεων (βλ. [11])

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (k_1(u, v)\nabla u) - \nabla \cdot (k_2(u, v)u\nabla v) + f(u, v), \\ v_t = D_2\Delta v + g(u, v) - h(u, v). \end{cases} \quad (1.1)$$

Αυτό το σύστημα είναι πλέον γνωστό ως το *γενικό μοντέλο των Keller–Segel*. Οι άγνωστες συναρτήσεις $u = u(x, t)$ και $v = v(x, t)$, $x \in \mathbb{R}^3$, $t > 0$, συμβολίζουν, αντίστοιχα, την πυκνότητα του πληθυσμού των κυττάρων και τη συγκέντρωση της χημειοελκτικής ουσίας.

Η συνάρτηση k_1 συμβολίζει τη διάχυση των κυττάρων, δηλαδή την κίνηση των κυττάρων σε ένα περιβάλλον ως απόκριση σε κάποιο χημικό ερέθισμα, του οποίου ο ρυθμός και ο τρόπος παραγωγής του περιγράφεται από την κινητική συνάρτηση g . Ως κινητική, θεωρείται μια συνάρτηση που δείχνει τον ρυθμό και τον τρόπο

μεταβολής μιας ποσότητας. Η συνάρτηση k_2 συμβολίζει τη χημειοτακτική ευαισθησία, δηλαδή το πόσο έντονη είναι η απόκριση των κυττάρων στο συγκεκριμένο χημικό ερέθισμα. Επιπλέον, η συνάρτηση f περιγράφει τη διαίρεση ή τον θάνατο των κυττάρων με την πάροδο του χρόνου, ρυθμίζοντας έτσι το πλήθος τους. Η συνάρτηση h περιγράφει τη μείωση του χημικού ερεθίσματος, είναι μία κινητική συνάρτηση όπως η g , που αναπαριστά τον τρόπο κατανάλωσης της συγκέντρωσης του χημικού ερεθίσματος κατά την εξέλιξη του χρόνου. Τέλος, το D_2 είναι ο συντελεστής διάχυσης της χημειοελκτικής ουσίας.

Το γενικό μοντέλο των Keller–Segel αποτέλεσε τη βάση για την ανάπτυξη πλήθους μαθηματικών μοντέλων που περιγράφουν τον μηχανισμό της χημειοταξίας, υιοθετώντας κάθε φορά διαφορετικές παραδοχές, ανάλογα με το υπό μελέτη βιολογικό φαινόμενο. Κάποια από αυτά τα μοντέλα θα παρουσιάσουμε στο επόμενο κεφάλαιο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΚΑΙ ΑΝΑΛΥΣΗ ΤΩΝ ΜΟΝΤΕΛΩΝ KELLER–SEGEL

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εισάγουμε αρχικά το κλασικό και το minimal μοντέλο των Keller–Segel καθώς και ορισμένες παραλλαγές του minimal μοντέλου που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία. Στη συνέχεια, θα αποδείξουμε κάποιες θεμελιώδεις ιδιότητες του minimal μοντέλου. Τέλος, θα εισάγουμε την θεωρία της αστάθειας Turing, την οποία θα εξετάσουμε στο minimal μοντέλο των Keller και Segel.

2.1 Το κλασικό μοντέλο των Keller–Segel

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε το λεγόμενο κλασικό μοντέλο των Keller–Segel, το οποίο είναι μία ειδική περίπτωση του γενικού μοντέλου που παρουσιάσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Θεωρούμε μία αυθαίρετη επιφάνεια $\partial U \subset \mathbb{R}^3$ που περικλείει χώρο $U \subset \mathbb{R}^3$. Υποθέτουμε ότι το U είναι φραγμένο και ότι το σύνορο του ∂U είναι κατά τμήματα λείο.

Το κλασικό μοντέλο των Keller–Segel προκύπτει από το αντίστοιχο γενικό υποθέτοντας ότι ο ρυθμός διάχυσης των κυττάρων $k_1(u, v)$ και η χημειοτακτική ευαισθησία $k_2(u, v)$ παραμένουν σταθερές στον χώρο και στον χρόνο, δηλαδή $k_1(u, v) = D_1 > 0$ και $k_2(u, v) = \chi > 0$, $\forall (x, t) \in U \times (0, \infty)$. Κάνοντας αυτές τις παραδοχές, λαμβάνουμε το ακόλουθο σύστημα παραβολικών εξισώσεων.

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \chi u \nabla v) + f(u, v), & (x, t) \in U \times (0, \infty), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u, v) - h(u, v), & (x, t) \in U \times (0, \infty). \end{cases} \quad (2.1)$$

Υπενθυμίζουμε, ότι η πρώτη και η δεύτερη εξίσωση του συστήματος περιγράφουν, αντίστοιχα, τη μεταβολή της κυτταρικής πυκνότητας και της συγκέντρωσης της χημειοελκτικής ουσίας στην πάροδο του χρόνου.

Οι σταθερές D_1 και χ αναφέρονται, αντίστοιχα, ως ο συντελεστής διάχυσης και ο συντελεστής της χημειοτακτικής ευαισθησίας των κυττάρων. Η σταθερά D_2 αναφέρεται ως ο συντελεστής διάχυσης της χημειοελκυστικής ουσίας. Επίσης, η συνάρτηση f ρυθμίζει τη διαίρεση ή τον θάνατο των κυττάρων καθορίζοντας τον ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού στην πάροδο του χρόνου. Ακόμα, οι συναρτήσεις g, h ρυθμίζουν την παραγωγή ή την κατανάλωση της χημειοελκυστικής ουσίας, αντίστοιχα.

Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε τη μαθηματική προέλευση του κλασικού μοντέλου των Keller–Segel. Υποθέτουμε ότι, κάθε κύτταρο έχει μάζα ίση με ένα. Τότε, ο συνολικός αριθμός των κυττάρων N στο U δίνεται από το ολοκλήρωμα $N = \int_U u dx$. Ακόμα, αφού η f είναι μία συνάρτηση πηγής, ο συνολικός αριθμός διαίρεσης ή θανάτου των κυττάρων στο U δίνεται από το ολοκλήρωμα $\int_U f dx$. Επίσης, η παροχή (flux) αντιπροσωπεύει τον όγκο του ρευστού που διέρχεται από το ∂U στην μονάδα του χρόνου. Συμβολίζεται με $\Phi : U \rightarrow \mathbb{R}^3$ και είναι μία συνεχώς διαφορίσιμη διανυσματική συνάρτηση στο U . Η ροή των κυττάρων στο ∂U δίνεται από το ολοκλήρωμα $\int_{\partial U} \Phi \cdot n ds$, όπου $n(s)$ το μοναδιαίο κάθετο στην επιφάνεια ∂U με φορά προς τα έξω.

Σύμφωνα με τον νόμο διατήρησης της μάζας, έχουμε ότι ο ρυθμός μεταβολής του αριθμού των κυττάρων στο U ισούται με τη ροή των κυττάρων u κατά μήκος της επιφάνειας ∂U στο U συν τον αριθμό των κυττάρων που διαιρέθηκαν ή πέθαναν στο U .

Συνεπώς, από τον νόμο διατήρησης της μάζας, έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_U u dx = - \int_{\partial U} \Phi \cdot n ds + \int_U f dx. \quad (2.2)$$

Όμως, από το θεώρημα απόκλισης του Gauss, γνωρίζουμε ότι

$$\int_{\partial U} \Phi \cdot n ds = \int_U \nabla \cdot \Phi dx.$$

Οπότε η (2.2) παίρνει τη μορφή

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_U u dx = - \int_U \nabla \cdot \Phi ds + \int_U f dx,$$

δηλαδή,

$$\int_U u_t dx = - \int_U \nabla \cdot \Phi ds + \int_U f dx. \quad (2.3)$$

Δεδομένου ότι η u είναι συνεχής και το U τυχαίο, το ολοκλήρωμα της εξίσωσης πρέπει να είναι μηδέν, δηλαδή

$$\int_U (u_t + \nabla \cdot \Phi - f) dx = 0,$$

από την οποία καταλήγουμε στην εξίσωση,

$$u_t = -\nabla \cdot \Phi + f. \quad (2.4)$$

Η εξίσωση (2.4) ισχύει για οποιαδήποτε ροή Φ , ανεξαρτήτως των παραγόντων που οφείλεται η ροή, καθώς θεωρήσαμε τυχαίο U . Στο μοντέλο της χημειοταξίας, η συνολική ροή Φ_{total} είναι το άθροισμα της κυτταρικής διάχυσης $\Phi_{\text{diffusion}}$ και της ροής λόγω της χημειοταξίας $\Phi_{\text{chemotaxis}}$, δηλαδή,

$$\Phi_{\text{total}} = \Phi_{\text{diffusion}} + \Phi_{\text{chemotaxis}}.$$

Από τον νόμο του Fick, βλ. [11], γνωρίζουμε ότι η ροή Φ μιας ύλης είναι ανάλογη της παραγωγού της συγκέντρωσής της. Συνεπώς, η ροή που οφείλεται στην κυτταρική διάχυση ισούται με $\Phi_{\text{diffusion}} = -D_1 \nabla u$, όπου $D_1 > 0$ ο συντελεστής κυτταρικής διάχυσης. Η ροή που οφείλεται στη χημειοταξία είναι $\Phi_{\text{chemotaxis}} = \chi u \nabla v$, όπου χ ο συντελεστής χημειοτακτικής ευαισθησίας.

Αντικαθιστώντας τα $\Phi_{\text{chemotaxis}}$ και $\Phi_{\text{diffusion}}$ στην Φ_{total} προκύπτει

$$\Phi_{\text{total}} = -D_1 \nabla u + \chi u \nabla v,$$

συνεπώς, η εξίσωση (2.4) γράφεται ως

$$u_t = \nabla \cdot D_1 \nabla u - \nabla \cdot \chi u \nabla v + f,$$

η οποία είναι ακριβώς η πρώτη εξίσωση στο κλασικό μοντέλο των Keller–Segel. Η δεύτερη εξίσωση του μοντέλου (2.1) προκύπτει με παρόμοια διαδικασία, με τη μόνη διαφορά ότι η ροή της χημειοελκτικής ουσίας οφείλεται αποκλειστικά στη διάχυση. Άρα,

$$\Phi_{\text{total}} = \Phi_{\text{diffusion}} = -D_2 \nabla v.$$

Επομένως, χρησιμοποιώντας ξανά το θεώρημα απόκλισης του Gauss, έχουμε

$$\int_U v_t dx = - \int_U \nabla \cdot \Phi ds + \int_U g dx - \int_U h dx,$$

δηλαδή,

$$\int_U (v_t + \nabla \cdot \Phi - g + h) dx = 0,$$

από όπου οδηγούμαστε στην

$$v_t = -\nabla \cdot \Phi + g - h.$$

Αντικαθιστώντας τη συνάρτηση Φ στην τελευταία σχέση παίρνουμε

$$v_t = \nabla \cdot D_2 \nabla v + g - h,$$

η οποία είναι ακριβώς η δεύτερη εξίσωση στο κλασικό μοντέλο των Keller-Segel.

Για να μοντελοποιήσουμε πλήρως το φαινόμενο που μελετάμε θα χρειαστεί να ορίσουμε κατάλληλες συνοριακές και αρχικές συνθήκες. Για παράδειγμα, μπορούμε να θεωρήσουμε ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann, δηλαδή,

$$\frac{\partial u}{\partial n}(x, t) = \frac{\partial v}{\partial n}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \partial U \times (0, \infty), \quad (\Sigma.\Sigma.)$$

και αρχικές συνθήκες,

$$u(x, 0) = u_0(x) \geq 0, \quad v(x, 0) = v_0(x) \geq 0. \quad (\Lambda.\Sigma.)$$

Η φυσική ερμηνεία των ομογενών συνοριακών συνθηκών Neumann, στο συγκεκριμένο βιολογικό φαινόμενο, είναι ότι το σύστημα μας θεωρείται κλειστό, δηλαδή, δεν υπάρχει εισροή ή εκροή κυττάρων του οργανισμού ή της χημειοελκτικής ουσίας από και προς το χωρίο U .

2.2 Minimal Keller-Segel Μοντέλο

Σε αυτή την ενότητα θα παρουσιάσουμε το minimal μοντέλο των Keller-Segel. Κάνοντας κάποιες επιπλέον παραδοχές στο κλασικό μοντέλο των Keller-Segel, τις οποίες και αναφέρουμε στη συνέχεια, οδηγούμαστε στο λεγόμενο minimal μοντέλο των Keller-Segel.

Συγκεκριμένα, υποθέτουμε επιπλέον ότι η κίνηση των μεμονωμένων κυττάρων οφείλεται στη χημειοελκτική ουσία και είναι τυχαία. Επιπλέον, υποθέτουμε ότι, τα κύτταρα δεν πεθαίνουν και δε διαιρούνται. Επίσης, η χημειοελκτική ουσία παράγεται με ρυθμό ανάλογο της πυκνότητας των κυττάρων και ο ρυθμός μείωσής της

εξαρτάται γραμμικά από τη συγκέντρωσή της. Υποθέτουμε επίσης ότι, η χημειοελκτική ουσία διαχέεται παθητικά στο χωρίο, δηλαδή, η συγκέντρωση $v(x, t)$ ακολουθεί έναν παθητικό μηχανισμό διάχυσης, χωρίς να επηρεάζεται από μηχανισμούς όπως η ενεργή κατανάλωσή της από τα κύτταρα.

Κάνοντας τις παραπάνω παραδοχές, η συνάρτηση πηγής $f(u, v)$ που προκύπτει είναι ταυτοτικά μηδέν. Επίσης, $g(u, v) = g(u)$ και $h(u, v) = h(v)$. Υποθέτουμε, όπως και στο κλασικό μοντέλο Keller-Segel, ότι οι παράμετροι D_1, D_2, χ είναι θετικές σταθερές.

Έτσι, το κλασικό μοντέλο των Keller-Segel απλοποιείται και παίρνει την ακόλουθη μορφή

$$\begin{cases} u_t = D_1 u_{xx} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi u \frac{\partial v}{\partial x} \right), & (x, t) \in U \times (0, \infty), \\ v_t = D_2 v_{xx} + g(u) - h(v), & (x, t) \in U \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = 0, & (x, t) \in \partial U \times (0, \infty), \\ u(x, 0) = u_0(x) \geq 0, \quad v(x, 0) = v_0(x) \geq 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

Το σύστημα (2.5), αναφέρεται ως το minimal μοντέλο στη θεωρία της χημειοταξίας. Στη συνέχεια της εργασίας θα ασχοληθούμε με το minimal μοντέλο των Keller-Segel στη μία χωρική διάσταση. Αρχικά, θα εισάγουμε τον αναγκαίο συμβολισμό.

Υπαρξη και μοναδικότητα των λύσεων στη μία χωρική διάσταση.

Έστω $U \subseteq \mathbb{R}$ ένα φραγμένο σύνολο. Ορίζουμε τον χώρο $L^2(U)$ ως

$$L^2(U) = \{f : U \rightarrow \mathbb{R} \mid \|f\|_{L^2(U)} < \infty\}, \quad \|f\|_{L^2(U)}^2 = \int_U |f(x)|^2 dx,$$

με εσωτερικό γινόμενο

$$(f, g)_{L^2(U)} = \int_U f(x) g(x) dx.$$

Για κάθε $k \in \mathbb{N}$, ο χώρος Sobolev $H^k(U)$ ορίζεται ως

$$H^k(U) = \{f \in L^2(U) \mid \partial_x^j f \in L^2(U), j = 1, 2, \dots, k\},$$

δηλαδή αποτελείται από συναρτήσεις των οποίων οι ασθενείς παράγωγοι μέχρι τάξης k ανήκουν στο $L^2(U)$. Ο χώρος $H^k(U)$ είναι χώρος Hilbert με εσωτερικό γινόμενο

$$(f, g)_{H^k(U)} = \sum_{j=0}^k (\partial_x^j f, \partial_x^j g)_{L^2(U)},$$

και αντίστοιχη νόρμα $\|f\|_{H^k(U)}^2 = (f, f)_{H^k(U)}$. Τέλος, ορίζουμε τον υποχώρο με ομογενείς συνθήκες Neumann

$$H_N^k(U) = \{f \in H^k(U) \mid \partial_x f = 0 \text{ στο } \partial U\}.$$

Ο $H_N^k(U)$ είναι κλειστός υποχώρος του $H^k(U)$ και επομένως, είναι ένας χώρος Hilbert με την ίδια νόρμα και εσωτερικό γινόμενο.

Με τον παραπάνω συμβολισμό διατυπώνεται το Θεώρημα ύπαρξης και μοναδικότητας της λύσης του (2.5) στη μία χωρική διάσταση, το οποίο αποδείχθηκε από τους Osaki και Yagi στην εργασία [12]. Συγκεκριμένα, ισχύει το παρακάτω αποτέλεσμα

Θεώρημα 2.1. Έστω $U \subseteq \mathbb{R}$ φραγμένο και $0 \leq u_0(x) \in L^2(U)$ και $v_0 \in H^1(U)$ με $\inf_{x \in U} v_0 > 0$. Τότε το σύστημα (2.5) έχει λύση τέτοια ώστε,

$$0 \leq u \in C([0, \infty]; L^2(U)) \cap C^1((0, \infty); L^2(U)) \cap C((0, \infty); H_N^2(U)),$$

$$0 < v \in C([0, \infty]; H^1(U)) \cap C^1((0, \infty); H^1(U)) \cap C((0, \infty); H_N^3(U)).$$

Παρατήρηση 2.1. Από το συμπέρασμα του παραπάνω Θεωρήματος έχουμε ότι $v \in C((0, \infty); H_N^3(U))$, οπότε για κάθε $t > 0$, $v_{xx}(x, t) \in H^1(U)$. Επιπλέον, στο μονοδιάστατο χωρίο U ο χώρος $H^1(U)$ περιέχεται συνεχώς στον $L^\infty(U)$. Συνεπώς, για κάθε $t > 0$, $v_{xx}(x, t) \in L^\infty(U)$. Δηλαδή, το v_{xx} είναι φραγμένο σε κάθε χρονική στιγμή $t > 0$.

Στην επόμενη παράγραφο θα δούμε κάποιες γνωστές κατηγορίες μοντέλων χημειοταξίας, από τις οποίες προκύπτει το minimal μοντέλο ως κατάλληλο όριο βλ. [5].

Κατηγορίες μοντέλων χημειοταξίας. Μια από τις πιο γνωστές κατηγορίες είναι τα λεγόμενα μοντέλα ευαισθησίας που εξαρτώνται από τη χημειοελκτική ουσία (chemoattractant-dependent sensitivity models). Σε αυτά τα μοντέλα θεωρούμε ότι η χημειοτακτική απόκριση γίνεται μέσω της εξωτερικής ανίχνευσης της χημικής ουσίας από υποδοχείς στην κυτταρική επιφάνεια. Η χημειοελκτική ουσία μεταφέρεται στο εσωτερικό του κυττάρου λόγω του μετασχηματισμού του εσωτερικού του υποδοχέα. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα την κίνηση των κυττάρων αλλά και τον έλεγχο της παραγωγής και τελικά την μείωση της χημειοελκτικής ουσίας. Έτσι, η χημειοελκτική ουσία επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό διαφορετικά στοιχεία του μοντέλου. Σε αυτή την κατηγορία ανήκει το μοντέλο

υποδοχέα (receptor model),

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \frac{\chi u}{(1+av)^2} \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u) - h(v), \end{cases}$$

από το οποίο, παίρνοντας το όριο καθώς $a \rightarrow 0$, προκύπτει το minimal μοντέλο (2.5). Ένα άλλο μοντέλο που ανήκει σε αυτή την κατηγορία είναι το λογιστικό μοντέλο (logistic model),

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \chi u \frac{1+\beta}{u+\beta} \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u) - h(v), \end{cases}$$

από το οποίο, επίσης, προκύπτει το minimal μοντέλο (2.5) ως όριο καθώς $b \rightarrow \infty$.

Μια άλλη γνωστή κατηγορία είναι τα μοντέλα ευαισθησίας που εξαρτώνται από την πυκνότητα της χημειοελκτικής ουσίας (Density-dependent sensitivity models). Σε αυτά τα μοντέλα υποθέτουμε ότι τα κύτταρα έχουν έναν περιορισμένο (μη μηδενικό) όγκο και η κατάληψη μιας περιοχής περιορίζει άλλα κύτταρα να διεισδύσουν. Έτσι προκύπτει μια συνάρτηση χημειοτακτικής ευαισθησίας που εξαρτάται από την πυκνότητα των κυττάρων. Επομένως, εισάγουμε στο μοντέλο μια συνάρτηση που εκφράζει την πιθανότητα εύρεσης χώρου, δεδομένης μιας τοπικής πυκνότητας κυττάρων. Τα πιο γνωστά μοντέλα αυτής της κατηγορίας είναι το μοντέλο πλήρωσης όγκου (volume filling model) το οποίο περιγράφεται από το σύστημα

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \chi u (1 - \frac{u}{c}) \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u) - h(v), \end{cases}$$

και από το οποίο ξανά προκύπτει το minimal μοντέλο (2.5) ως όριο για $c \rightarrow \infty$. Ακόμα, έχουμε το μοντέλο,

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \chi \frac{u}{1+\epsilon u} \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u) - h(v), \end{cases}$$

το οποίο για $\epsilon \rightarrow \infty$ μας δίνει το minimal μοντέλο (2.5).

Μια άλλη κατηγορία αποτελεί το μοντέλο μη γραμμικής διάχυσης (nonlinear-diffusion model). Τυπικά τα μοντέλα χημειοτάξιας ενσωματώνουν έναν όρο διάχυσης των κυττάρων για να μοντελοποιήσουν έναν μη κατευθυνόμενο ή τυχαίο παράγοντα στην κίνηση τους. Στην πλειονότητα των περιπτώσεων θεωρούμε

έναν σταθερό συντελεστή διάχυσης, ωστόσο είναι πολύ πιθανόν ο συντελεστής διάχυσης να μην είναι σταθερός και να εξαρτάται μη γραμμικά από τη συγκέντρωση του χημειοελκτικού αλλά, επίσης, από την πυκνότητα των κυττάρων. Αυτό το μοντέλο περιγράφεται από τις παρακάτω εξισώσεις

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 u^n \nabla u - \chi u \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + g(u) - h(v), \end{cases}$$

από το οποίο προκύπτει το minimal μοντέλο (2.5) ως όριο καθώς $n \rightarrow 0$.

Τέλος, ένα ακόμα γνωστό μοντέλο είναι το μη γραμμικό μοντέλο κινητικής σήματος (nonlinear signal kinetics model). Όπως αναφέραμε, η απόκριση των κυττάρων σε κάποια χημική ουσία μπορεί να προκαλέσει, εκτός από την κίνηση των κυττάρων, τη μείωση της χημικής ουσίας. Αυτό μπορεί να συμβεί είτε από την ίδια τη χημική ουσία είτε από άλλες εξωτερικές πηγές. Το μοντέλο δίνεται από τις εξισώσεις

$$\begin{cases} u_t = \nabla \cdot (D_1 \nabla u - \chi u \nabla v), \\ v_t = D_2 \Delta v + \frac{u}{1 + \phi u} - v, \end{cases}$$

από τις οποίες προκύπτει ξανά το minimal μοντέλο (2.5) ως όριο $\phi \rightarrow 0$.

2.2.1 Ανάλυση του minimal μοντέλου

Όπως προαναφέραμε το minimal μοντέλο προκύπτει ως όριο πολλών μοντέλων χημειοταξίας. Σε αυτή την παράγραφο θα θεωρήσουμε την πιο συνηθισμένη μορφή του και θα παρουσιάσουμε κάποια θεωρητικά αποτελέσματα για τη λύση του. Θεωρούμε λοιπόν την ακόλουθη μορφή του minimal μοντέλου στη μία χωρική διάσταση που περιγράφεται από το σύστημα (βλ. [15]),

$$\begin{cases} u_t = D_1 u_{xx} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi u \frac{\partial v}{\partial x} \right), & (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty), \\ v_t = D_2 v_{xx} + au - bv, & (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, x) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, x) = \frac{\partial v}{\partial x}(0, x) = \frac{\partial v}{\partial x}(L, x) = 0, & t > 0 \\ u(x, 0) = u_0(x) \geq 0, & v(x, 0) = v_0(x) \geq 0. \end{cases} \quad (2.6)$$

Με άλλα λόγια, το σύστημα (2.6) προκύπτει από το σύστημα (2.5) θέτοντας $g(u) = au, a > 0$, και $h(v) = bv, b > 0$. Αρχικά, θα αποδείξουμε τη διατήρηση της μάζας των κυττάρων.

Πρόταση 2.1. (Διατήρηση της Μάζας). Έστω (u_0, v_0) μη αρνητικές αρχικές συνθήκες του συστήματος (2.6). Ορίζουμε την ολική μάζα των κυττάρων την χρονική στιγμή $t \geq 0$ ως

$$M(t) := \int_0^L u(x, t) dx.$$

Τότε, το σύστημα (2.6) πράγματι διατηρεί την ολική μάζα, δηλαδή,

$$M(t) = M(0), \quad \forall t > 0.$$

Απόδειξη.

Ολοκληρώνοντας την πρώτη εξίσωση του συστήματος (2.6) στο $[0, L]$ παίρνουμε

$$\int_0^L u_t dx = \int_0^L \left[D_1 u_{xx} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi u \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] dx,$$

δηλαδή,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^L u(x, t) dx = D_1 \int_0^L u_{xx} dx - \chi \int_0^L \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx.$$

Άρα,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^L u dx = D_1 [u_x]_0^L - \chi \left[\left(u \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]_0^L,$$

Χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι οι u και v ικανοποιούν ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann έχουμε

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^L u(x, t) dx = 0,$$

δηλαδή,

$$\int_0^L u(x, t) dx = \int_0^L u(x, 0) dx = M(0),$$

το οποίο είναι και το ζητούμενο. \square

Στη συνέχεια θα αποδείξουμε τη μη αρνητικότητα της λύσης. Αυτό το αποτέλεσμα διατυπώνεται στην παρακάτω πρόταση.

Πρόταση 2.2. Έστω $u_0(x) \geq 0$, $v_0(x) \geq 0$, $\forall x \in [0, L]$. Τότε η λύση (u, v) του συστήματος (2.6) ικανοποιεί

$$u(x, t) \geq 0, \quad v(x, t) \geq 0, \quad \forall (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty).$$

Απόδειξη.

Συμβολίζουμε με u^+ και u^- το θετικό και αρνητικό μέρος της u , αντίστοιχα, και έχουμε

$$u^+ = \begin{cases} u, & u \geq 0, \\ 0, & u < 0. \end{cases} \quad \text{και} \quad u^- = \begin{cases} -u, & u \leq 0, \\ 0, & u > 0. \end{cases} \quad (2.7)$$

Αρχικά παρατηρούμε ότι $u = u^+ - u^-$. Θα δείξουμε ότι, $u^-(x, t) = 0$ για κάθε $x \in [0, L]$. Πολλαπλασιάζοντας την πρώτη εξίσωση του συστήματος (2.6) με u^- και ολοκληρώνοντας στο $[0, L]$, λαμβάνουμε

$$I := \int_0^L u_t u^- dx = \int_0^L D_1 u_{xx} u^- dx - \chi \int_0^L (uv_x)_x u^- dx =: I_1 - \chi I_2. \quad (2.8)$$

Θα εξετάσουμε κάθε ολοκλήρωμα ξεχωριστά. Αρχικά, έχουμε ότι

$$\begin{aligned} I &= \int_0^L u_t u^- dx = \int_0^L (u^+ - u^-)_t u^- dx = \int_0^L u_t^+ u^- dx - \int_0^L u_t^- u^- dx \\ &= -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^L |(u^-(x, t))|^2 dx \end{aligned} \quad (2.9)$$

Χρησιμοποιώντας ολοκλήρωση κατά παράγοντες, το ολοκλήρωμα I_1 γράφεται ως

$$I_1 = \int_0^L D_1 u_{xx} u^- dx = D_1 [u_x u^-]_0^L - D_1 \int_0^L u_x u_x^- dx,$$

από όπου, χρησιμοποιώντας ότι η u_x μηδενίζεται για $x = 0, L$, και ότι $u_x = u_x^+ - u_x^-$, παίρνουμε

$$I_1 = D_1 \int_0^L (u_x^-)^2 dx. \quad (2.10)$$

Όσο αφορά το I_2 , από τη μία έχουμε ότι

$$I_2 = \int_0^L (uv_x)_x u^- dx = \int_0^L u_x v_x u^- dx + \int_0^L uv_{xx} u^- dx,$$

από όπου, χρησιμοποιώντας και την (2.7), έχουμε

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^L -u_x^- v_x u^- dx + \int_0^L -(u^-)^2 v_{xx} dx \\ &= -\int_0^L \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (u^-)^2 v_x dx - \int_0^L (u^-)^2 v_{xx} dx. \end{aligned}$$

Η τελευταία σχέση, εφαρμόζοντας ξανά ολοκλήρωση κατά παράγοντες στο πρώτο ολοκλήρωμα, δίνει

$$I_2 = -\frac{1}{2} \left[(u^-)^2 v_x \right]_0^L + \frac{1}{2} \int_0^L (u^-)^2 v_{xx} dx - \int_0^L (u^-)^2 v_{xx} dx.$$

Χρησιμοποιώντας ότι η v_x μηδενίζεται για $x = 0, L$, παίρνουμε τελικά ότι

$$I_2 = -\frac{1}{2} \int_0^L (u^-)^2 v_{xx} dx. \quad (2.11)$$

Η σχέση (2.8), σύμφωνα με τις (2.9), (2.10) και (2.11), δίνει

$$\frac{d}{dt} \int_0^L (u^-)^2 dx = -2D_1 \int_0^L (u_x^-)^2 dx - \chi \int_0^L (u^-)^2 v_{xx} dx. \quad (2.12)$$

Σύμφωνα με το Θεώρημα 2.1, υπάρχει θετική σταθερά M τέτοια ώστε

$$\|v_{xx}\|_{L^\infty([0,L] \times (0,\infty))} \leq M.$$

και συνεπώς η (2.12) δίνει

$$\frac{d}{dt} \int_0^L (u^-)^2 dx \leq \chi M \int_0^L (u^-)^2 dx,$$

δηλαδή,

$$\frac{d}{dt} \|u^-\|_{L^2}^2 \leq \chi M \|u^-\|_{L^2}^2. \quad (2.13)$$

Θέτοντας

$$y(t) := \|u^-(t)\|_{L^2}^2,$$

η παραπάνω ανισότητα (2.13) γράφεται ισοδύναμα ως

$$y'(t) - \chi M y(t) \leq 0.$$

Πολλαπλασιάζοντας την τελευταία ανισότητα με τον ολοκληρωτικό παράγοντα $e^{-\chi M t}$ προκύπτει ότι

$$\frac{d}{dt} (e^{-\chi M t} y(t)) \leq 0,$$

δηλαδή η συνάρτηση $t \mapsto e^{-\chi M t} y(t)$ είναι φθίνουσα και επομένως

$$e^{-\chi M t} y(t) \leq y(0), \quad \forall t \geq 0,$$

από όπου και συμπεραίνουμε ότι,

$$\|u^-(t)\|_{L^2}^2 \leq e^{-\chi M t} \|u_0^-\|_{L^2}^2, \quad \forall t \geq 0,$$

όπου u_0^- το αρνητικό μέρος της u_0 .

Αλλά έχουμε υποθέσει ότι $u_0 = u(x, 0) \geq 0 \quad \forall x \in [0, L]$, συνεπώς

$$\|u_0^-\|_{L^2} = 0.$$

Τελικά καταλήγουμε ότι

$$\|u^-(x, t)\|_{L^2} = 0 \quad \forall t \geq 0,$$

και άρα λόγω συνέχειας,

$$u^-(x, t) = 0, \quad \forall (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty).$$

Επομένως $u(x, t) \geq 0$ για κάθε $(x, t) \in [0, L] \times (0, \infty)$.

Ανάλογα θα εργαστούμε και για το v . Πολλαπλασιάζοντας τη δεύτερη εξίσωση του συστήματος (2.6) με το αρνητικό μέρος v^- της v και ολοκληρώνοντας στο $[0, L]$, παίρνουμε

$$\int_0^L v_t v^- dx = \int_0^L D_2 v_{xx} v^- dx + \int_0^L a u v^- dx - \int_0^L b v v^- dx,$$

δηλαδή,

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^L (v^-)^2 dx = D_2 \int_0^L (v_x^-)^2 dx + \int_0^L a u v^- dx + \int_0^L b (v^-)^2 dx.$$

Συνεπώς,

$$\frac{d}{dt} \int_0^L (v^-)^2 dx = -2D_2 \int_0^L (v_x^-)^2 dx - 2 \int_0^L a u v^- dx - 2 \int_0^L b (v^-)^2 dx.$$

Αλλά $-2D_2 \int_0^L (v_x^-)^2 dx \leq 0$ και $-2 \int_0^L a u v^- dx \leq 0$ οπότε

$$\frac{d}{dt} \int_0^L (v^-)^2 dx \leq 2 \int_0^L b (v^-)^2 dx,$$

δηλαδή,

$$\frac{d}{dt} \|v^-\|_{L^2}^2 \leq 2b \|v^-\|_{L^2}^2.$$

Από την τελευταία σχέση, δουλεύοντας όπως και στην περίπτωση της u , δηλαδή χρησιμοποιώντας τον ολοκληρωτικό παράγοντα e^{-2bt} , προκύπτει ότι

$$\|v^-(t)\|_{L^2}^2 = 0, \quad \forall t \geq 0,$$

δηλαδή $v^-(x, t) = 0$ για κάθε $(x, t) \in [0, L] \times (0, \infty)$. Επομένως,

$$v(x, t) \geq 0, \quad \forall (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty).$$

□

2.2.2 Αστάθεια Turing

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε την αστάθεια Turing του συστήματος βλ. [2]. Η αστάθεια Turing είναι ένας μηχανισμός δημιουργίας μοτίβων σε συστήματα αντίδρασης-διάχυσης (reaction-diffusion). Κατά το φαινόμενο αυτό, μια ομοιογενής σταθερή κατάσταση (homogeneous steady state) του συστήματος αντίδρασης-διάχυσης, αποσταθεροποιείται λόγω της διάχυσης, και οδηγεί στη δημιουργία χωρικών προτύπων. Με τον όρο ομοιογενή κατάσταση ισορροπίας εννοούμε μία λύση των μαθηματικών μοντέλων αντίδρασης-διάχυσης που είναι ίδια σε όλο τον χώρο και δεν μεταβάλλεται στον χρόνο.

Η θεωρία αυτή εισήχθη από τον Alan Turing το 1952, προκειμένου να εξηγήσει τη *μορφογένεση*, δηλαδή τον τρόπο με τον οποίο σχηματίζονται οργανωμένες δομές κατά την ανάπτυξη των οργανισμών.

Η βασική ιδέα είναι ότι ένα σύστημα δύο χημικών ουσιών μπορεί, χωρίς τη διάχυση, να φτάνει σε μια ομοιόμορφη σταθερή κατάσταση, στην οποία οι συγκεντρώσεις τους είναι ίδιες σε όλο τον χώρο. Ωστόσο, όταν προστεθεί η διάχυση —ιδιαίτερα όταν οι δύο ουσίες διαχέονται με διαφορετικούς ρυθμούς— αυτή η κατάσταση μπορεί να αποσταθεροποιηθεί. Σε αυτή την περίπτωση, μικρές χωρικές διαταραχές στις συγκεντρώσεις δεν εξασθενούν, αλλά, αντιθέτως, ενισχύονται με την πάροδο του χρόνου, με αποτέλεσμα τη δημιουργία σταθερών, μη ομοιογενών προτύπων. Αυτά τα πρότυπα μπορεί να πάρουν τη μορφή περιοδικών δομών όπως κυρτές, λωρίδες ή κυψελοειδείς κατανομές.

Η σημασία της αστάθειας Turing έγκειται στο ότι αποδεικνύει πως η διάχυση, ένας μηχανισμός που θεωρείται σταθεροποιητικός, μπορεί, υπό κατάλληλες συνθήκες, να προκαλέσει αστάθεια και να οδηγήσει στη δημιουργία πολύπλοκων δομών. Το φαινόμενο αυτό αποτελεί θεμελιώδη μηχανισμό για την ερμηνεία φυσικών και βιολογικών σχηματισμών, όπως είναι τα μοτίβα στο δέρμα ζώων, οι συγκεντρώσεις κυττάρων σε έμβρυα ή οι αποικίες μικροοργανισμών.

Θεωρητική ανάλυση της αστάθειας κατά Turing. Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιαστεί η βασική ιδέα που βασίστηκε η θεωρία του Turing βλ. [10]. Στόχος μας είναι ο προσδιορισμός αναγκαίων και ικανών συνθηκών, ώστε η ομοιογενή σταθερή κατάσταση να αποσταθεροποιείται λόγω της διάχυσης. Για λόγους απλότητας, αλλά και για να μπορούμε να μιλήσουμε με συγκεκριμένους όρους, θα θεωρήσουμε ένα σύστημα δύο χημικών ουσιών που διαχέονται και αλληλεπιδρούν σε έναν μονοδιάστατο τομέα. Ορίζουμε ως $u = u(x, t)$ και $v = v(x, t)$ τις συγκεντρώσεις των ουσιών, ενώ $f(u, v)$ θα είναι ο ρυθμός παραγωγής της συγκέντρωσης u και $g(u, v)$ θα είναι ο ρυθμός παραγωγής της συγκέντρωσης v . Ακόμα, με D_1, D_2 θα συμβολίσουμε τους συντελεστές διάχυσης της πρώτης και της δεύτερης ουσίας αντίστοιχα. Με βάση τα παραπάνω, θεωρούμε το ακόλουθο σύστημα,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v). \end{cases} \quad (2.14)$$

Για τη μελέτη των συνθηκών που επιδρούν για να εμφανιστεί το φαινόμενο της αστάθειας λόγω διάχυσης αρχικά θα πρέπει να υποθέσουμε, σύμφωνα με τη θεωρία του Turing, πως το σύστημα (2.14), θα παρουσιάζει κάποια ευσταθή χωρικά ομοιόμορφη σταθερή κατάσταση (\bar{u}, \bar{v}) , $\bar{u}, \bar{v} \in \mathbb{R}$. Για την σταθερή κατάσταση (\bar{u}, \bar{v}) εξ' ορισμού ισχύει,

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

Στη συνέχεια, μας ενδιαφέρει να εξετάσουμε την επίδραση μικρών ανομοιογενών διαταραχών αυτής της ομοιογενούς σταθερής κατάστασης. Πιο συγκεκριμένα μας αφορούν εκείνες οι διαταραχές που ενισχύονται από τις συνδυασμένες δυνάμεις των διαδικασιών της αντίδρασης και της διάχυσης. Θεωρούμε u', v' διαταραχές τέτοιες ώστε,

$$u = \bar{u} + u', \quad v = \bar{v} + v',$$

όπου u', v' αρκετά μικρές διαταραχές, $|u'| \ll 1$ και $|v'| \ll 1$. Συνεπώς, μπορούμε να γραμμικοποιήσουμε το σύστημα (2.14) γύρω από την ομοιογενή σταθερή κατάσταση, εφαρμόζοντας Θεώρημα Taylor στις f, g . Παραλείποντας τους όρους δεύτερης τάξης αφού οι διαταραχές μας είναι μικρές έχουμε,

$$\begin{cases} f(u, v) = u' \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}) + v' \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}), \\ g(u, v) = u' \frac{\partial g}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}) + v' \frac{\partial g}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}). \end{cases}$$

Οπότε, το σύστημα (2.14) παίρνει τη μορφή,

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

Ακόμα,

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

ανάλογα και για το v . Έτσι, αντικαθιστώντας, καταλήγουμε στο γραμμικοποιημένο σύστημα,

$$\begin{cases} \frac{\partial u'}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u'}{\partial x^2} + au' + bv', \\ \frac{\partial v'}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v'}{\partial x^2} + cu' + dv', \end{cases} \quad (2.15)$$

όπου,

$$a = \frac{\partial f}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}), \quad b = \frac{\partial f}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}), \quad c = \frac{\partial g}{\partial u}(\bar{u}, \bar{v}), \quad d = \frac{\partial g}{\partial v}(\bar{u}, \bar{v}).$$

Σε συμπαγή μορφή το σύστημα μπορεί να γραφεί ως

$$Y_t = DY_{xx} + MY, \quad (2.16)$$

με

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

Η εξίσωση (2.16) χρησιμοποιώντας τη μέθοδο χωρισμού μεταβλητών έχει πιθανή λύση το σύνολο,

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

Οδηγούμαστε σε αυτή τη μορφή λύσεων διότι η συνάρτηση $\cos(kx)$, λόγω της μορφής της (της παρουσίας μεγίστων και ελαχίστων), δύναται να περιγράψει ικανοποιητικά ένα πεδίο όπου υπάρχει εξάντληση ουσίας σε ορισμένα σημεία και συσσώρευση σε άλλα. Τέλος, η χρονική εξάρτηση της συνάρτησης $e^{\lambda t}$ ενδείκνυται για την αυξομείωση των εισαγόμενων διαταραχών. Άρα, έχουμε

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

Αντικαθιστώντας στο σύστημα (2.15) και απαλείφοντας τον όρο $\cos(kx)e^{\lambda t}$, έχουμε

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

δηλαδή,

$$\begin{cases} A(\lambda + k^2D_1 - a) - bB = 0, \\ -cA + B(\lambda + k^2D_2 + d) = 0. \end{cases} \quad (2.17)$$

Για να έχει το σύστημα (2.17) λύση, θα πρέπει η ορίζουσα του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή,

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

από όπου προκύπτει η εξίσωση,

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

Για να έχουμε μία ευσταθή ομοιογενή σταθερή κατάσταση, θα πρέπει να ισχύει για το πραγματικό μέρος των ιδιοτιμών ότι, $\Re(\lambda) \leq 0$, δηλαδή θα πρέπει να ισχύει

$$a + d - k^2D_1 - k^2D_2 < 0, \quad -cb + (a - k^2D_1)(d - k^2D_2) > 0.$$

Παραβιάζοντας μία από τις παραπάνω συνθήκες η ομοιογενή σταθερή κατάσταση γίνεται ασταθής.

Έτσι, σύμφωνα με τα παραπάνω, για να μελετήσουμε την αστάθεια Turing του minimal μοντέλου Keller–Segel, αρχικά υποθέτουμε ότι έχουμε μία ομοιογενή σταθερή κατάσταση, δηλαδή, θεωρούμε ότι η πυκνότητα της χημειοελκτικής ουσίας και η συγκέντρωση των κυττάρων είναι σταθερές συναρτήσεις των x, t , βλ. [1]. Επομένως, θεωρούμε λύσεις της μορφής,

$$u(x, t) = c_1, \quad v(x, t) = c_2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R},$$

οι οποίες σύμφωνα με τη δεύτερη εξίσωση του συστήματος (2.6), ικανοποιούν

$$ac_1 = bc_2.$$

Η τελευταία ισότητα δείχνει ότι ο ρυθμός παραγωγής της χημειοελκτικής ουσίας ισούται με τον ρυθμό κατανάλωσης της. Είναι εύκολο να δούμε ότι οι ομοιογενείς σταθερές καταστάσεις του συστήματος (2.6) είναι της μορφής

$$(U_0, V_0) = \left(c_1, \frac{a}{b}c_1 \right), \quad c_1 \in \mathbb{R}. \quad (2.18)$$

Θα δείξουμε τώρα ότι η ομοιογενής σταθερή κατάσταση (U_0, V_0) είναι ευσταθής κατά την απουσία διάχυσης στο σύστημα. Πράγματι, όταν δεν υπάρχει διάχυση, το σύστημα (2.6) παίρνει τη μορφή

$$u_t = 0, \quad v_t = au - bv, \quad (2.19)$$

και η (U_0, V_0) είναι ομοιογενής κατάσταση ισορροπίας του.

Το γραμμικοποιημένο σύστημα γύρω από το (U_0, V_0) έχει Ιακωβιανό πίνακα

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a & -b \end{pmatrix},$$

του οποίου οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = -b < 0.$$

Επομένως, όλες οι ιδιοτιμές έχουν μη θετικό πραγματικό μέρος, γεγονός που συνεπάγεται ότι η ομοιογενής κατάσταση ισορροπίας είναι ευσταθής κατά την απουσία διάχυσης. Αυτό αποτελεί απαραίτητη προϋπόθεση για την εμφάνιση αστάθειας Turing.

Μέθοδος των μη χωρικά ομοιογενών διαταραχών – minimal μοντέλο των Keller-Segel. Στη συνέχεια θα γραμμικοποιήσουμε το σύστημα (2.6) γύρω από μια ομοιογενή σταθερή κατάστασή του, με σκοπό να προσδιορίσουμε αναγκαίες και ικανές συνθήκες ώστε η κατάσταση αυτή να παραμείνει ευσταθής και να μην αποσταθεροποιείται από μικρές χωρικές διαταραχές. Για αυτόν το σκοπό θα εφαρμόσουμε τη μέθοδο των μη χωρικά ομοιογενών διαταραχών.

Η μέθοδος αυτή συνίσταται στην προσθήκη μικρών, χωρικά μεταβαλλόμενων διαταραχών σε μια ομοιογενή κατάσταση ισορροπίας ενός συστήματος αντίδρασης-διάχυσης, και αποτελεί το βασικό εργαλείο για τη μελέτη της αστάθειας Turing στο σύστημα (2.6) [1], [2].

Θεωρούμε, λοιπόν, διαταραχές u_1 και v_1 τέτοιες ώστε,

$$u(x, t) = c_1 + u_1(x, t), \quad v(x, t) = c_2 + v_1(x, t).$$

με

$$u_1 \approx \bar{u}_1 e^{\lambda t} e^{I\xi x}, \quad v_1 \approx \bar{v}_1 e^{\lambda t} e^{I\xi x}, \quad |\bar{u}_1|, |\bar{v}_1| \ll 1$$

όπου, ο όρος $e^{\lambda t}$, $\lambda > 0$, περιγράφει την εξέλιξη της διαταραχής στον χρόνο, ενώ ο όρος $e^{I\xi x}$ περιγράφει τη χωρική μεταβολή ως ένα επίπεδο κύμα στο διάστημα

$[0, L]$ με κυματριθμό $\xi = \frac{2\pi n}{L}$, $n \in \mathbb{N}$ ο οποίος προκύπτει από τις συνοριακές συνθήκες και I την φανταστική μονάδα. Η επιλογή αυτή της μορφής των διαταραχών οφείλεται στο γεγονός ότι οι συναρτήσεις $e^{I\xi x}$ είναι ιδιοσυναρτήσεις του τελεστή ∂_{xx} , ενώ οι συναρτήσεις $e^{\lambda t}$ αντιστοιχούν σε λύσεις ενός γραμμικού συστήματος διαφορικών εξισώσεων που προκύπτει μετά τη γραμμικοποίηση γύρω από την ομοιογενή σταθερή κατάσταση. Παρατηρήστε, ότι οι διαταραχές ικανοποιούν περιοδικές συνοριακές συνθήκες στο $[0, L]$, και όχι ομογενείς συνθήκες Neumann. Αυτή η επιλογή είναι καθιερωμένη στη βιβλιογραφία γιατί διευκολύνει τη φασματική ανάλυση, (δείτε την παρατήρηση στο τέλος της παραγράφου).

Αντικαθιστώντας στην πρώτη εξίσωση του (2.6) έχουμε,

$$\frac{\partial(c_1 + u_1)}{\partial t} = D_1(c_1 + u_1)_{xx} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\chi(c_1 + u_1) \frac{\partial(v_1 + c_2)}{\partial x} \right),$$

από όπου προκύπτει ότι

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \chi \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial v_1}{\partial x} + (u_1 + c_1) \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} \right).$$

Οπότε,

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \chi \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial v_1}{\partial x} + u_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + c_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} \right).$$

Η εξίσωσή μας όμως παραμένει μη γραμμική. Έχουμε ότι

$$u_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} = -\xi^2 \bar{v}_1 \bar{u}_1 e^{2\lambda t} e^{2I\xi x}, \quad \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial v_1}{\partial x} = -\xi^2 \bar{v}_1 \bar{u}_1 e^{2\lambda t} e^{2I\xi x}.$$

Παρατηρούμε ότι οι όροι $u_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}$, $\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial v_1}{\partial x}$, είναι πολύ μικρότεροι σε σχέση με τους υπόλοιπους λόγω του όρου $\bar{v}_1 \bar{u}_1$ αφού $|\bar{u}_1|, |\bar{v}_1| \ll 1$, συνεπώς μπορούμε να τους παραλείψουμε.

Επομένως, προκύπτει η εξίσωση,

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \chi c_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}.$$

Δουλεύοντας με τον ίδιο τρόπο στη δεύτερη εξίσωση του (2.6) λαμβάνουμε ότι,

$$\frac{\partial v_1}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + a u_1 - b v_1.$$

Άρα το γραμμικοποιημένο σύστημα εξισώσεων έχει τη μορφή

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - \chi c_1 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2}, \\ \frac{\partial v_1}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + a u_1 - b v_1. \end{cases} \quad (2.20)$$

Αντικαθιστώντας τις διαταραχές u_1, v_1 στο σύστημα (2.20) παίρνουμε ότι

$$\begin{cases} \lambda \bar{u}_1 = -D_1 \xi^2 \bar{u}_1 + \chi c_1 \xi^2 \bar{v}_1, \\ \lambda \bar{v}_1 = -D_2 \xi^2 \bar{v}_1 + a \bar{u}_1 - b \bar{v}_1, \end{cases}$$

δηλαδή,

$$\begin{pmatrix} \lambda \bar{u}_1 \\ \lambda \bar{v}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -D_1 \xi^2 & \chi c_1 \xi^2 \\ a & -D_2 \xi^2 - b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_1 \\ \bar{v}_1 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Αρχικά, βρίσκουμε τη χαρακτηριστική εξίσωση που ικανοποιούν οι ιδιοτιμές του πίνακα των συντελεστών του γραμμικοποιημένου συστήματος (2.21).

$$\begin{vmatrix} -\lambda - \xi^2 D_1 & \xi^2 \chi c_1 \\ a & -\lambda - \xi^2 D_2 - b \end{vmatrix} = 0,$$

δηλαδή,

$$\lambda^2 + \lambda \xi^2 D_2 + \lambda b + \lambda \xi^2 D_1 + \xi^4 D_1 D_2 + b \xi^2 D_1 - a \chi \xi^2 c_1 = 0.$$

Έτσι καταλήγουμε στην χαρακτηριστική εξίσωση,

$$\lambda^2 + \lambda(\xi^2(D_1 + D_2) + b) + \xi^2(D_1(\xi^2 D_2 + b) - a \chi c_1) = 0,$$

δηλαδή, στην εξίσωση,

$$\lambda^2 + p\lambda + q = 0, \quad (2.22)$$

όπου $p = (\xi^2(D_1 + D_2) + b)$ και $q = \xi^2(D_1(\xi^2 D_2 + b) - a \chi c_1)$.

Οπότε οι ιδιοτιμές $\lambda_{1,2}$ του γραμμικοποιημένου συστήματος εξαρτώνται από τις σταθερές D_1, D_2, χ, a, b τον κυματριθμό ξ , και την ομοιογενή κατάσταση ισορροπίας, δηλαδή την τιμή c_1 . Αν και οι δύο ιδιοτιμές έχουν αρνητικό ή μηδενικό πραγματικό μέρος, τότε η ομοιογενής σταθερή κατάσταση του συστήματος είναι

ευσταθής. Αντίθετα, αν τουλάχιστον μία ιδιοτιμή έχει θετικό πραγματικό μέρος, η ομοιογενής κατάσταση ισορροπίας είναι ασταθής, βλ. [1].

Μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τη διακρίνουσα του τριωνύμου (2.22) και να δούμε ότι είναι παντού θετική. Πράγματι,

$$\begin{aligned}\Delta &= p^2 - 4q = (D_1\xi^2 + D_2\xi^2 + b)^2 - 4(D_1\xi^2)(D_2\xi^2 + b) + 4a\chi c_1\xi^2, \\ &= (D_1\xi^2 - D_2\xi^2 - b)^2 + 4a\chi c_1\xi^2 > 0,\end{aligned}$$

οπότε οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές.

Για την ευστάθεια απαιτούμε και δύο ιδιοτιμές να είναι αρνητικές. Αφού $p > 0$ και

$$\lambda_1 + \lambda_2 = -p < 0, \quad \lambda_1\lambda_2 = q,$$

συμπεραίνουμε ότι και οι δύο ιδιοτιμές είναι αρνητικές αν $q > 0$.

Οπότε, για κάθε κυματαριθμό ξ , ικανή και αναγκαία συνθήκη για την ευστάθεια της αντίστοιχης διαταραχής, είναι

$$\xi^2(D_1(\xi^2 D_2 + b) - a\chi c_1) > 0,$$

δηλαδή

$$D_1(\xi^2 D_2 + b) - a\chi c_1 > 0.$$

Επομένως, η διαταραχή που αντιστοιχεί στον κυματαριθμό ξ φθίνει με τον χρόνο (και άρα το σύστημα είναι ευσταθές ως προς αυτήν) αν και μόνο αν ικανοποιείται η παραπάνω ανισότητα.

Άρα, για να είναι, κάθε διαταραχή της μορφής $e^{i\xi x}$ ευσταθής, ικανή και αναγκαία συνθήκη είναι η

$$a\chi c_1 < D_1 b.$$

Μπορούμε να συνοψίσουμε το αποτέλεσμα αυτής της παραγράφου στην παρακάτω πρόταση

Πρόταση 2.3 (Συνθήκη αστάθειας Turing). *Θεωρούμε το γραμμικοποιημένο minimal μοντέλο Keller–Segel (2.20), το οποίο προκύπτει από γραμμικοποίηση του minimal μοντέλου (2.6) γύρω από μια ομοιογενή σταθερή κατάσταση*

$$\left(c_1, \frac{a}{b}c_1\right), \quad c_1 \in \mathbb{R}.$$

Τότε, η ομοιογενής κατάσταση ισορροπίας είναι Turing–ασταθής αν και μόνο αν υπάρχει κυματαριθμός $\xi = \frac{2\pi n}{L} > 0$ τέτοιο ώστε

$$D_1(\xi^2 D_2 + b) - a\chi c_1 < 0. \quad (2.23)$$

Ισοδύναμα, η αστάθεια εμφανίζεται αν και μόνο αν

$$a\chi c_1 > D_1 b, \quad (2.24)$$

οπότε οι ασταθείς κυματαριθμοί ικανοποιούν

$$0 < \xi^2 < \frac{a\chi c_1/D_1 - b}{D_2}. \quad (2.25)$$

Παρατήρηση 2.2. Στην απόδειξη της συνθήκης αστάθειας *Turing*, επιλέχθηκαν χωρικές διαταραχές της μορφής $e^{i\xi x}$, παρόλο που αυτές δεν ικανοποιούν ομογενείς συνοριακές συνθήκες *Neumann* στο διάστημα $[0, L]$. Οι χωρικές διαταραχές που ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες στην περίπτωσή μας, είναι πραγματικές και περιγράφονται από συναρτήσεις της μορφής $\cos(\xi x)$, $\xi = \frac{n\pi}{L}$, $n \in \mathbb{Z}$, διευκολύνει τη φασματική ανάλυση μέσω του μετασχηματισμού *Fourier*. Οι δύο μορφές των χωρικών διαταραχών είναι ισοδύναμες, αφού

$$e^{i\xi x} = \cos(\xi x) + i \sin(\xi x),$$

δηλαδή ο εκθετικός όρος $e^{i\xi x}$ αποτελεί γραμμικό συνδυασμό των συναρτήσεων $\cos(\xi x)$ και $\sin(\xi x)$.

Στις ομογενείς συνοριακές συνθήκες *Neumann*, η συνθήκη (2.23) ελέγχεται μόνο για τους κυματαριθμούς $\xi = \frac{n\pi}{L}$, $n \in \mathbb{Z}$.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΠΙΛΥΣΗ ΤΟΥ MINIMAL MONTELOU

Σε αυτό το κεφάλαιο θα συζητήσουμε την αριθμητική επίλυση του minimal μοντέλου των Keller–Segel. Αρχικά για τη χωρική διακριτοποίηση θα χρησιμοποιήσουμε κεντρικές πεπερασμένες διαφορές και για τη διακριτοποίηση στον χρόνο θα χρησιμοποιήσουμε αρχικά την άμεση μέθοδο του Euler. Στη συνέχεια θα δούμε κάποιες αριθμητικές μεθόδους που προτείνονται στη βιβλιογραφία ως κατάλληλες για το μοντέλο των Keller–Segel. Συγκεκριμένα, όπως είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, στο συνεχές μοντέλο οι λύσεις $u(x, t)$, $v(x, t)$ ικανοποιούν ορισμένες φυσικές και μαθηματικές ιδιότητες, όπως η διατήρηση της μάζας και η θετικότητα της λύσης. Κατά τη διακριτοποίηση του προβλήματος, επιδιώκουμε τα αντίστοιχα μεγέθη της αριθμητικής λύσης να ικανοποιούν αντίστοιχες ιδιότητες σε διακριτή μορφή.

Αρχικά, θα εισάγουμε τον αναγκαίο συμβολισμό. Έστω $N, M \in \mathbb{N}$. Θεωρούμε έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του $[0, L]$, $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N < x_{N+1} = L$, με βήμα $h = \frac{L}{N+1}$. Θεωρούμε, επίσης, έναν ομοιόμορφο διαμερισμό του $[0, T]$, $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^M = T$, με χρονικό βήμα $k = \frac{T}{M}$. Συμβολίζουμε με (U_i^n, V_i^n) τις προσεγγίσεις των ακριβών τιμών $(u(x_i, t^n), v(x_i, t^n))$, $i = 0, \dots, N+1$, $n = 0, \dots, M$. Στο προηγούμενο κεφάλαιο δείξαμε ότι η μάζα των κυττάρων διατηρείται, δηλαδή

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^1[0, L]} = \|u_0\|_{L^1[0, L]}, \quad \forall t > 0.$$

Στη διακριτή περίπτωση, θεωρούμε το διακριτό ανάλογο της L^1 -νόρμας η οποία προκύπτει προσεγγίζοντας το ολοκλήρωμα με τον σύνθετο τύπο του τραπεζίου.

Εισάγουμε, δηλαδή, στον χώρο \mathbb{R}^{n+2} τη διακριτή L^1 νόρμα ως

$$\|w\|_{1,h} := h \sum_{i=0}^{N+1} |w_i|, \quad w = (w_0, w_1, \dots, w_{N+1})^T \in \mathbb{R}^{n+2},$$

όπου οι δύο τόνοι στο σύμβολο του αθροίσματος υποδηλώνουν τον υποδιπλασιασμό του πρώτου και του τελευταίου όρου. Θέτοντας $U^n = (U_0^n, U_1^n, \dots, U_{N+1}^n)^T$, $n = 0, \dots, M$, το διακριτό ανάλογο της μάζας διατυπώνεται ως

$$\|U^n\|_{1,h} = \|U^0\|_{1,h} \quad \forall n > 0.$$

Όσο αφορά τη μη αρνητικότητα των συναρτήσεων $u(x, t)$ και $v(x, t)$ στο συνεχές πρόβλημα έχουμε,

$$u(x, t) \geq 0, \quad v(x, t) \geq 0, \quad \forall (x, t) \in [0, L] \times (0, \infty),$$

εφόσον οι αρχικές συνθήκες ικανοποιούν $u_0(x) \geq 0$ και $v_0(x) \geq 0$. Το διακριτό ανάλογο αυτής της ιδιότητας ορίζει ότι, αν οι αρχικές τιμές της αριθμητικής λύσης είναι μη αρνητικές,

$$U_i^0 \geq 0, \quad V_i^0 \geq 0, \quad \forall i = 1, \dots, N,$$

τότε για κάθε χρονικό βήμα n πρέπει να ισχύει

$$U_i^n \geq 0, \quad V_i^n \geq 0, \quad \forall i = 1, \dots, N, \quad n \geq 0.$$

Η ιδιότητα αυτή εξασφαλίζει ότι το αριθμητικό σχήμα διατηρεί τη φυσική σημασία του προβλήματος, αποτρέποντας την εμφάνιση μη ρεαλιστικών (αρνητικών) τιμών για την πυκνότητα u και τη συγκέντρωση της χημειοεγκυστετικής ουσίας v .

3.1 Σχήμα Άμεσης Euler και Κεντρικών Διαφορών.

Η πρώτη αριθμητική μέθοδος που θα μελετήσουμε για την επίλυση του συστήματος (2.6) προκύπτει ως συνδυασμός της άμεσης μεθόδου του Euler για τη διακριτοποίηση στον χρόνο και κεντρικών διαφορών για τη χωρική διακριτοποίηση.

Κεντρικές διαφορές για τη διακριτοποίηση των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης. Αρχικά, για την προσέγγιση των χωρικών παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης θα χρησιμοποιήσουμε κεντρικές διαφορές.

Με άλλα λόγια, για $i = 1, \dots, N-1$, με $u, v \in C^4[0, L]$, προσεγγίζουμε την παράγωγο $u_x(x_i, t)$ με το πηλίκο διαφορών

$$u_x(x_i, t) \approx \frac{u(x_{i+1}, t) - u(x_{i-1}, t)}{2h} =: \delta_h^c u(x_i, t),$$

και την παράγωγο δεύτερης τάξης $u_{xx}(x_i, t)$ με

$$u_{xx}(x_i, t) \approx \frac{u(x_{i+1}, t) - 2u(x_i, t) + u(x_{i-1}, t))}{h^2} =: \delta_h^2 u(x_i, t).$$

Ανάλογα προσεγγίζουμε και τις παραγώγους $v_x(x_i, t), v_{xx}(x_i, t)$. Για τις παραπάνω προσεγγίσεις των παραγώγων πρώτης και δεύτερης τάξης με κεντρικές διαφορές είναι γνωστές οι ακόλουθες εκτιμήσεις σφάλματος.

Πρόταση 3.1. Έστω $u : [0, L] \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ και έστω $x_i = ih$ με $h = \frac{L}{N+1}$. Αν για κάθε $t \in [0, T]$ ισχύει $u(\cdot, t) \in C^3([0, L])$, τότε η κεντρική διαφορά πρώτης τάξης $\delta_h^c u(x_i, t)$ ικανοποιεί την εκτίμηση

$$|\delta_h^c u(x_i, t) - u_x(x_i, t)| \leq \frac{h^2}{6} \sup_{x \in [0, L]} |u_{xxx}(x, t)|.$$

Αν επιπλέον $u(\cdot, t) \in C^4([0, L])$, η κεντρική διαφορά δεύτερης τάξης $\delta_h^2 u(x_i, t)$ ικανοποιεί την εκτίμηση

$$|\delta_h^2 u(x_i, t) - u_{xx}(x_i, t)| \leq \frac{h^2}{12} \sup_{x \in [0, L]} |u_{xxxx}(x, t)|.$$

Συνεπώς, και οι δύο προσεγγίσεις είναι τάξης $O(h^2)$ υπό τις παραπάνω υποθέσεις ομαλότητας.

Χωρική διακριτοποίηση με κεντρικές διαφορές. Διακριτοποιώντας τις χωρικές παραγώγους $u_{xx}(x_i), v_{xx}(x_i), u_x(x_i), v_x(x_i)$, $i = 1, \dots, N$ με τα αντίστοιχα πηλίκα κεντρικών διαφορών καταλήγουμε στο ακόλουθο ημιδιακριτό πρόβλημα για το minimal μοντέλο των Keller-Segel

$$\begin{cases} u_t(x_i, t) = D_1 \delta_h^2 u(x_i, t) - \chi u(x_i, t) \delta_h^2 v(x_i, t) - \chi \delta_h^c u(x_i, t) \delta_h^c v(x_i, t), \\ v_t(x_i, t) = D_2 \delta_h^2 v(x_i, t) + au(x_i, t) - bv(x_i, t). \end{cases} \quad (3.1)$$

Υπενθυμίζουμε ότι στο συνεχές πρόβλημα έχουμε υποθέσει ότι η ακριβής λύση (u, v) ικανοποιεί ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann, δηλαδή

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = \frac{\partial v}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial v}{\partial x}(L, t) = 0, \quad \forall t > 0.$$

Για την προσέγγιση των ομογενών συνοριακών συνθηκών Neumann, χρησιμοποιούμε το γεγονός ότι η παράγωγος μίας άρτιας και ομαλής συνάρτησης μηδενίζεται στο 0. Τότε, θεωρώντας άρτια επέκταση της u αριστερά του μηδενός, θα παίρναμε ότι $u_x(0, t) = 0$. Ομοίως, αν επεκτείνουμε άρτια τη u δεξιά του L θα παίρναμε $u_x(L, t) = 0$. Εισάγοντας δύο τεχνητούς κόμβους (ghost nodes) $x_{-1} = -h$ και $x_{N+2} = L + h$, και υποθέτοντας ότι

$$u(x_1, t) = u(x_{-1}, t), \quad u(x_{N+2}, t) = u(x_N, t).$$

έχουμε,

$$\delta_h^c u(x_0, t) = \frac{u(x_1, t) - u(x_{-1}, t)}{2h} = 0, \quad \delta_h^c u(x_{N+1}, t) = \frac{u(x_{N+2}, t) - u(x_N, t)}{2h} = 0,$$

Μπορούμε τότε να προσεγγίσουμε τις $u_{xx}(0, t)$ και $u_{xx}(L, t)$ με τα αντίστοιχα ηλίκια κεντρικών διαφορών ως εξής

$$u_{xx}(0, t) \approx \delta_h^2 u(x_0, t) = \frac{u(x_{-1}, t) - 2u(x_0, t) + u(x_1, t))}{h^2} = \frac{2(u(x_1, t) - u(x_0, t))}{h^2},$$

και

$$u_{xx}(L, t) \approx \delta_h^c u(x_{N+1}, t) = \frac{2(u(x_N, t) - u(x_{N+1}, t))}{h^2}.$$

Ανάλογες προσεγγίσεις προκύπτουν για τις αντίστοιχες χωρικές παραγώγους της συνάρτησης v .

Πλήρως διακριτό σχήμα - Άμεση μέθοδος του Euler. Στη συνέχεια θα διακριτοποιήσουμε το σύστημα (3.1) με την άμεση μέθοδο του Euler. Πριν προχωρήσουμε με τη διατύπωση του πλήρους διακριτού σχήματος, θα εισαγάγουμε επιπλέον συμβολισμό.

Έστω $w = (w_0, w_1, \dots, w_{N+1}) \in \mathbb{R}^{N+2}$. Συμβολίζουμε με $\tilde{\Delta}_h, \tilde{\Delta}_h : \mathbb{R}^{N+2} \rightarrow \mathbb{R}^{N+2}$, τον διακριτό τελεστή του Laplace για ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann και ο οποίος ορίζεται ως εξής

$$\tilde{\Delta}_h w_i := (\tilde{\Delta}_h w)_i := \begin{cases} \frac{2(w_1 - w_0)}{h^2}, & i = 0, \\ \frac{w_{i+1} - 2w_i + w_{i-1}}{h^2}, & i = 1, \dots, N, \\ \frac{2(w_N - w_{N+1})}{h^2}, & i = N + 1. \end{cases}$$

Επίσης, εισάγουμε τον διακριτό τελεστή πρώτης παραγώγου $\partial_{2h}w : \mathbb{R}^{N+2} \rightarrow \mathbb{R}^{N+2}$, τον οποίο ορίζουμε ως

$$(\partial_{2h}w)_i := \begin{cases} 0, & i = 0, \\ \frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2h}, & i = 1, \dots, N, \\ 0, & i = N + 1. \end{cases}$$

Τότε, διακριτοποιώντας το σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων (3.1) με την άμεση μέθοδο του Euler, και υποθέτοντας ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann, οδηγούμαστε στο πλήρως διακριτό σχήμα για το (2.6)

$$\begin{cases} \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{k} = D_1 \tilde{\Delta}_h U_i^n - \chi U_i^n \tilde{\Delta}_h V_i^n - \chi \partial_{2h} U_i^n \partial_{2h} V_i^n, \\ \frac{V_i^{n+1} - V_i^n}{k} = D_2 \tilde{\Delta}_h V_i^n + a U_i^n - b V_i^n, \end{cases} \quad (3.2)$$

όπου $i = 0, \dots, N + 1$, $n = 0, \dots, M$. Το σχήμα αυτό έχει ακρίβεια πρώτης τάξης ως προς το χρονικό βήμα (λόγω της χρονικής διακριτοποίησης με την άμεση μέθοδο του Euler) και δεύτερης τάξης ως προς το χωρικό βήμα (λόγω της προσέγγισης των χωρικών παραγώγων με κεντρικές διαφορές).

Ανάλυση Von Neumann. Γνωρίζουμε ότι κατά τους αριθμητικούς υπολογισμούς εμφανίζονται σφάλματα στρογγύλευσης λόγω της παράστασης των πραγματικών αριθμών στον ηλεκτρονικό υπολογιστή με αριθμούς πεπερασμένης ακρίβειας. Μας ενδιαφέρει, λοιπόν, να εξετάσουμε πώς τα σχήματα πεπερασμένων διαφορών μεταδίδουν αυτά τα σφάλματα στον χρόνο. Με άλλα λόγια, θέλουμε να γνωρίζουμε αν ένα μικρό αρχικό σφάλμα μπορεί να ενισχυθεί αργότερα και να οδηγήσει σε λανθασμένα ή ακόμη και καταστροφικά αριθμητικά αποτελέσματα.

Ιδιαίτερα σε συστήματα που παρουσιάζουν αστάθεια Turing, όπως το minimal μοντέλο των Keller–Segel, ένα ακατάλληλο ή αριθμητικά ασταθές σχήμα μπορεί να δημιουργήσει τεχνητά πρότυπα (numerical artefacts). Αυτά τα μη-φυσικά μοτίβα δεν προκύπτουν από τη δυναμική του συνεχούς προβλήματος, αλλά από την αστάθεια του διακριτού σχήματος και την ακατάλληλη επιλογή του χρονικού ή του χωρικού βήματος. Για τον λόγο αυτό είναι κρίσιμο να μελετηθεί η αριθμητική ευστάθεια του σχήματος, ώστε να εξασφαλιστεί ότι οι χωρικές δομές που εμφανίζονται στις προσομοιώσεις αντανακλούν την πραγματική δυναμική των εξισώσεων και δεν προκύπτουν λόγω της συσσώρευσης των σφαλμάτων στρογγύλευσης.

Ένας τρόπος να μελετήσουμε αυτή τη συμπεριφορά είναι μέσω της ευστάθειας Von Neumann. Η ανάλυση Von Neumann εξετάζει τον τρόπο με τον οποίο το αρ-

ιθμητικό σχήμα μεταδίδει μικρές διαταραχές (ή σφάλματα) στον χρόνο, αναλύοντας την εξέλιξη διακριτών Fourier διαταραχών. Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να προσδιορίσουμε αν το αριθμητικό σχήμα αποσβένει ή ενισχύει τις διαταραχές, και συνεπώς αν είναι αριθμητικά ευσταθές.

Ανάλυση Von Neumann για γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις. Η ανάλυση ευστάθειας Von Neumann είναι μία τεχνική που χρησιμοποιείται για τη μελέτη της ευστάθειας αριθμητικών σχημάτων που προσεγγίζουν γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με σταθερούς συντελεστές.

Η γενική ιδέα βασίζεται στην έκφραση της διακριτής λύσης ως σειρά Fourier και στη μελέτη του αντίστοιχου συντελεστή Fourier κάθε κυματικής συνιστώσας βλ.[13]. Αρχικά, η γενική εξίσωση ενός γραμμικού αριθμητικού σχήματος δίνεται ως

$$u_i^{n+1} = \sum_{m=-M}^M a_m u_{i+m}^n,$$

όπου $M \in \mathbb{N}$ και $a_m \in \mathbb{R}$ οι συντελεστές που προκύπτουν από τη χρονική και χωρική διακριτοποίηση της εξίσωσης. Οι συντελεστές a_m είναι μη μηδενικοί μόνο για $|m| \leq M$, ενώ για $|m| > M$ ισχύει $a_m = 0$. Επειδή ο διακριτός τελεστής είναι γραμμικός και οι συντελεστές σταθεροί, οι συναρτήσεις e^{Irx_i} αποτελούν ιδιοσυναρτήσεις του διακριτού τελεστή, γεγονός που επιτρέπει την αναπαράσταση της διακριτής λύσης ως σειρά Fourier

$$u_i^n = \sum_r \hat{u}^n(r) e^{Irx_i},$$

όπου r είναι ο αριθμός κύματος, I η φανταστική μονάδα και $\hat{u}^n(r)$ οι αντίστοιχοι συντελεστές Fourier. Οι συντελεστές Fourier $\hat{u}^n(r)$ ορίζονται μέσω του διακριτού μετασχηματισμού Fourier ως

$$\hat{u}^n(r) = \frac{h}{2\pi} \sum_{i=-\infty}^{\infty} u_i^n e^{-Irih}, \quad r \in \left[-\frac{\pi}{h}, \frac{\pi}{h}\right].$$

Αντικαθιστώντας τους συντελεστές Fourier στο αριθμητικό σχήμα και χρησιμοποιώντας τη σχέση $u_i^n = \hat{u}^n(r) e^{Irx_i}$ στο αριθμητικό σχήμα έχουμε

$$\hat{u}^{n+1}(r) = g(hr) \hat{u}^n(r),$$

όπου η συνάρτηση $g(hr)$ αποτελεί τον ενισχυτικό παράγοντα (amplification factor) και δίνεται ως

$$g(hr) = \sum_{m=-M}^M a_m e^{Irmh}$$

Αναδρομικά μετά από n βήματα προκύπτει ότι

$$\hat{u}^n(r) = g^n(hr) \hat{u}^0(r).$$

Επίσης, επειδή οι συντελεστές Fourier είναι ορθοκανονικοί, η l^2 νόρμα της διακριτής λύσης δίνεται ως

$$\|u^n\|_{l^2}^2 = \sum_r |\hat{u}^n(r)|^2 = \sum_r |g(hr)|^{2n} |\hat{u}^0(r)|^2.$$

Συνοπώς, η ευστάθεια ισοδυναμεί με το να παραμένει η νόρμα φραγμένη για όλα τα n . Αυτό επιτυγχάνεται αν και μόνο αν κάθε συντελεστής Fourier δεν αυξάνεται με τον χρόνο, δηλαδή αν ισχύει

$$|g(hr)| \leq 1, \quad \forall r \in \mathbb{R}.$$

Η παραπάνω συνθήκη αποτελεί το κριτήριο ευστάθειας Von Neumann και εκφράζει ότι ο διακριτός τελεστής δεν αυξάνει την l^2 νόρμα εκφράζοντας έτσι το διακριτό ανάλογο της διατήρησης της l^2 νόρμας. Επιπλέον, αν $\rho = \sup_r |g(hr)|$ είναι η φασματική ακτίνα, τότε η συνθήκη

$$\rho = \sup_r |g(hr)| \leq 1,$$

αποτελεί το θεμελιώδες κριτήριο ευστάθειας Von Neumann για το αριθμητικό σχήμα και εξασφαλίζει ότι κανένας συντελεστής Fourier δεν αυξάνεται ανεξέλεγκτα με τον χρόνο.

Στη συνέχεια για να δούμε πως εφαρμόζεται στην πράξη η ανάλυση Von Neumann, θα εξετάσουμε ένα απλό παράδειγμα με τη γραμμική εξίσωση μεταφοράς, το οποίο δείχνει ότι το σχήμα κεντρικών διαφορών και άμεσης Euler δεν ικανοποιεί την συνθήκη Von Neumann.

Απόδειξη μη ευστάθειας Von Neumann του σχήματος για την εξίσωση μεταφοράς. Στη συνέχεια, θα αποδείξουμε γιατί η διακριτοποίηση των όρων μεταφοράς με πηλίκα κεντρικών διαφορών προκαλούν μη φυσικές ταλαντώσεις στην αριθμητική λύση. Θεωρούμε την εξίσωση μεταφοράς,

$$u_t + au_x = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x). \quad (3.3)$$

Διακριτοποιώντας την εξίσωση (3.3) με κεντρικές διαφορές στον χώρο και με άμεση Euler στον χρόνο έχουμε το αριθμητικό σχήμα,

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{ak}{2h} (U_{i+1}^n - U_{i-1}^n), \quad (3.4)$$

Υποθέτοντας λύσεις της μορφής,

$$U_i^n = \hat{U}^n e^{Irx_i}$$

και αντικαθιστώντας στο αριθμητικό σχήμα (3.4) προκύπτει

$$\hat{U}^{n+1} = \hat{U}^n \left[1 - \frac{ak}{2h} \left(e^{Irh} - e^{-Irh} \right) \right] = \hat{U}^n \left[1 - I \frac{ak}{h} \sin(rh) \right].$$

Δηλαδή, ο παράγοντας ενίσχυσης $g(r)$ είναι

$$g(r) = 1 - I \frac{ak}{h} \sin(rh),$$

με μέτρο

$$|g(r)|^2 = 1 + \left(\frac{ak}{h} \sin(rh) \right)^2 > 1 \quad \forall r \neq 0.$$

Συνεπώς, δεν πληρείται η συνθήκη ευστάθειας $|g(r)| < 1$, γεγονός που κάνει το αριθμητικό μας σχήμα ασταθές, το οποίο οδηγεί σε μη φυσικές ταλαντώσεις στην αριθμητική λύση μας.

Ανάλυση Ευστάθειας Von Neumann για το minimal μοντέλο των Keller–Segel. Επειδή το minimal μοντέλο των Keller–Segel είναι μη γραμμικό, δεν είναι εφικτό να αποδειχθεί η ολική ευστάθεια στην L^2 νόρμα και δεν μπορούμε να εφαρμόσουμε απευθείας την τεχνική ευστάθειας Von Neumann. Για το λόγο αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε την τεχνική των τοπικά σταθερών συντελεστών (frozen coefficients), δηλαδή, θα γραμμικοποιήσουμε το αρχικό σύστημα σε μία περιοχή μιας ομογενούς σταθερής κατάστασης του, ώστε να εξετάσουμε τοπικά τη διακριτή ευστάθεια στην L^2 νόρμα.

Έστω $(U_0, V_0) \in \mathbb{R}_+^2$ μία ομογενή σταθερή κατάσταση του συστήματος (2.6) με

$$(U_0, V_0) = \left(U_0, \frac{a}{b} U_0 \right), \quad U_0 > 0.$$

Θεωρούμε μικρές διαταραχές $\bar{u}(x, t), \bar{v}(x, t)$ με $|\bar{u}|, |\bar{v}| \ll 1$ στις λύσεις του συστήματος (2.6) και θέτουμε,

$$u(x, t) = U_0 + \bar{u}(x, t) \quad \text{και} \quad v(x, t) = V_0 + \bar{v}(x, t).$$

Τότε, ανάλογα με την απόδειξη του συστήματος (2.20) προκύπτει το γραμμικοποιημένο σύστημα,

$$\begin{cases} \bar{u}_t = D_1 \bar{u}_{xx} - \chi U_0 \bar{v}_{xx}, \\ \bar{v}_t = D_2 \bar{v}_{xx} + a \bar{u} - b \bar{v}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Διακριτοποιούμε το σύστημα (3.5) με την άμεση μέθοδο του Euler στον χρόνο και κεντρικές διαφορές στον χώρο, και παίρνουμε,

$$\begin{cases} \frac{\bar{U}_i^{n+1} - \bar{U}_i^n}{k} = D_1 \delta_h^2 \bar{U}_i^n - \chi U_0 \delta_h^2 \bar{V}_i^n, \\ \frac{\bar{V}_i^{n+1} - \bar{V}_i^n}{k} = D_2 \delta_h^2 \bar{V}_i^n + a \bar{U}_i^n - b \bar{V}_i^n. \end{cases} \quad (3.6)$$

όπου $(\bar{U}_i^n, \bar{V}_i^n)$ οι προσεγγίσεις των $(\bar{u}(x_i, t^n), \bar{v}(x_i, t^n))$, $i = 0, \dots, N+1$, $n = 0, \dots, M$. Από την πρώτη εξίσωση του συστήματος παίρνουμε,

$$\bar{U}_i^{n+1} - \bar{U}_i^n = \frac{k}{h^2} D_1 (\bar{U}_{i+1}^n - 2\bar{U}_i^n + \bar{U}_{i-1}^n) - \chi U_0 (\bar{V}_{i+1}^n - 2\bar{V}_i^n + \bar{V}_{i-1}^n),$$

ή, θέτοντας $\lambda := \frac{k}{h^2}$,

$$\bar{U}_i^{n+1} = D_1 \lambda \bar{U}_{i+1}^n + (1 - 2D_1 \lambda) \bar{U}_i^n + D_1 \lambda \bar{U}_{i-1}^n - \lambda \chi U_0 (\bar{V}_{i+1}^n - 2\bar{V}_i^n + \bar{V}_{i-1}^n). \quad (3.7)$$

Ομοίως, στη δεύτερη εξίσωση έχουμε,

$$\bar{V}_i^{n+1} = D_2 \lambda \bar{V}_{i+1}^n + (1 - 2D_2 \lambda) \bar{V}_i^n + D_2 \lambda \bar{V}_{i-1}^n + a k \bar{U}_i^n - b k \bar{V}_i^n. \quad (3.8)$$

Θέτουμε

$$\bar{U}_i^n = \hat{u}_n e^{rx_i I}, \quad \bar{V}_i^n = \hat{v}_n e^{rx_i I}, \quad r \in \mathbb{R},$$

όπου $r = \frac{2\pi n}{L}$, $n \in \mathbb{Z}$ είναι ο αριθμός κύματος, I είναι η φανταστική μονάδα και \hat{u}_n, \hat{v}_n οι συντελεστές Fourier. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (3.7) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \hat{u}_{n+1} e^{rx_{i+1} I} &= D_1 \lambda \hat{u}_n e^{rx_{i+1} I} + (1 - 2D_1 \lambda) \hat{u}_n e^{rx_i I} + D_1 \lambda \hat{u}_n e^{rx_{i-1} I} \\ &\quad - \chi U_0 \lambda (\hat{v}_n e^{rx_{i+1} I} - 2\hat{v}_n e^{rx_i I} + \hat{v}_n e^{rx_{i-1} I}), \end{aligned}$$

και χρησιμοποιώντας ότι

$$\begin{aligned} \hat{u}_n e^{rx_{i+1} I} &= \hat{u}_n e^{r(x_i+h)I} = \hat{u}_n e^{rx_i I} e^{rhI} \\ \hat{u}_n e^{rx_{i-1} I} &= \hat{u}_n e^{r(x_i-h)I} = \hat{u}_n e^{rx_i I} e^{-rhI} \end{aligned}$$

έχουμε

$$\begin{aligned} \hat{u}_{n+1} &= D_1 \lambda \hat{u}_n e^{rhI} + (1 - 2D_1 \lambda) \hat{u}_n + D_1 \lambda \hat{u}_n e^{-rhI} \\ &\quad - \chi U_0 \lambda (\hat{v}_n e^{rhI} - 2\hat{v}_n + \hat{v}_n e^{-rhI}), \end{aligned}$$

δηλαδή

$$\begin{aligned}\hat{u}_{n+1} &= (D_1\lambda(e^{rhI} + e^{-rhI}) + (1 - 2\lambda D_1))\hat{u}_n - \chi U_0(\lambda(e^{rhI} + e^{-rhI}) - 2\lambda)\hat{v}_n, \\ &= (2D_1\lambda \cos(rh) + (1 - 2\lambda D_1))\hat{u}_n - \chi U_0(2\lambda \cos(rh) - 2\lambda)\hat{v}_n, \\ &= (2D_1\lambda(1 - 2\sin^2(\frac{rh}{2})) + 1 - 2\lambda D_1)\hat{u}_n - \chi U_0(2\lambda(1 - 2\sin^2(\frac{rh}{2})) - 2\lambda)\hat{v}_n,\end{aligned}$$

οπότε έχουμε,

$$\hat{u}_{n+1} = (1 - 4D_1\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}))\hat{u}_n + 4\chi U_0\lambda \sin^2(\frac{rh}{2})\hat{v}_n.$$

Ανάλογα, αντικαθιστώντας στην εξίσωση (3.8) προκύπτει ότι,

$$\hat{v}_{n+1} = (1 - 4D_2\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}))\hat{v}_n + ak\hat{u}_n - bk\hat{v}_n.$$

δηλαδή,

$$\begin{pmatrix} \bar{u}_{n+1} \\ \bar{v}_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 4D_1\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}) & 4\chi U_0\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}) \\ ak & 1 - 4D_2\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}) - bk \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_n \\ \bar{v}_n \end{pmatrix},$$

ή

$$\begin{pmatrix} \bar{u}_{n+1} \\ \bar{v}_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - D_1\sigma & \chi U_0\sigma \\ ak & 1 - D_2\sigma - bk \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_n \\ \bar{v}_n \end{pmatrix} =: G \begin{pmatrix} \bar{u}_n \\ \bar{v}_n \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

όπου $\sigma = 4\lambda \sin^2(\frac{rh}{2}) \geq 0$. Θέλουμε να βρούμε την συνθήκη των παραμέτρων του συστήματος για τις οποίες $\rho(G) < 1$ [13]. Έχουμε

$$\begin{aligned}\det(G - \mu I) &= \begin{vmatrix} 1 - D_1\sigma - \mu & \chi U_0\sigma \\ ak & 1 - D_2\sigma - bk - \mu \end{vmatrix} = \det(J + I - \mu I) \\ &= \det(J - (\mu - 1)I),\end{aligned}$$

όπου μ_i , $i = 1, 2$ οι ιδιοτιμές του πίνακα G . Άρα αν ν_1, ν_2 είναι οι ιδιοτιμές του πίνακα J , τότε $\mu_i = \nu_i + 1$, $i = 1, 2$ ιδιοτιμές του G και θέλουμε να βρούμε συνθήκες έτσι ώστε $|1 + \nu_i| < 1$, $i = 1, 2$. Θα βρούμε τη χαρακτηριστική εξίσωση που ικανοποιούν οι ιδιοτιμές του πίνακα J

$$\det(J - \nu I) = \begin{vmatrix} -D_1\sigma - \nu & \chi U_0\sigma \\ ak & -D_2\sigma - bk - \nu \end{vmatrix} = 0,$$

δηλαδή

$$(D_1\sigma + \nu)(D_2\sigma + bk + \nu) - ak\chi U_0\sigma = 0.$$

Έτσι καταλήγουμε στη χαρακτηριστική εξίσωση

$$\nu^2 + (D_1\sigma + D_2\sigma + bk)\nu + D_1\sigma(D_2\sigma + bk) - ak\chi U_0\sigma = 0.$$

Υπολογίζοντας τη διακρίνουσα του τριωνύμου παρατηρούμε ότι είναι θετική. Πράγματι,

$$\begin{aligned}\Delta &= (D_1\sigma + D_2\sigma + bk)^2 - 4D_1\sigma(D_2\sigma + bk) + 4ak\chi U_0\sigma \\ &= (D_1\sigma - (D_2\sigma + bk))^2 + 4ak\chi U_0\sigma > 0,\end{aligned}$$

οπότε και οι δύο ιδιοτιμές είναι πραγματικές και η συνθήκη

$$|1 + \nu_i| < 1,$$

δίνει

$$-2 < \nu_i < 0, \quad i = 1, 2.$$

Γνωρίζουμε ότι,

$$\nu_1 + \nu_2 = -(D_1\sigma + D_2\sigma + bk) < 0.$$

Συνεπώς, για να είναι οι $\nu_1, \nu_2 < 0$ πρέπει,

$$\nu_1\nu_2 = D_1\sigma(D_2\sigma + bk) - ak\chi U_0\sigma > 0,$$

δηλαδή,

$$D_1D_2\sigma + (D_1b - a\chi U_0)k > 0. \quad (3.10)$$

Η ανισότητα (3.10) θέλουμε να ικανοποιείται για κάθε $\sigma \geq 0$, συνεπώς καταλήγουμε στη συνθήκη,

$$D_1b - a\chi U_0 > 0. \quad (3.11)$$

Επιπλέον, σύμφωνα με την (3.10), έχουμε

$$\begin{aligned}\nu_1 &= \frac{-((D_1 + D_2)\sigma + bk) - \sqrt{((D_1 + D_2)\sigma + bk)^2 - 4(D_1\sigma(D_2\sigma + bk) - 4ak\chi U_0\sigma)}}{2}, \\ &\geq \frac{-((D_1 + D_2)\sigma + bk) - ((D_1 + D_2)\sigma + bk)}{2}, \\ &= -((D_1 + D_2)\sigma + bk).\end{aligned}$$

Συνεπώς για να ισχύει ότι $-2 < \nu_1 < 0$, αρκεί

$$-2 < -((D_1 + D_2)\sigma + bk) \leq \nu_1 < 0,$$

δηλαδή

$$((D_1 + D_2)\sigma + bk) < 2$$

Αλλά $\sigma = 4\lambda \sin^2(\frac{rh}{2})$, συνεπώς

$$(b + (D_1 + D_2)\frac{4}{h^2} \sin^2(\frac{rh}{2}))k < 2.$$

Αρκεί να επιλέξουμε k τέτοιο ώστε,

$$k < \frac{2}{b + (D_1 + D_2)\frac{4}{h^2}}, \quad \mu\epsilon \quad D_1b - a\chi U_0 > 0. \quad (3.12)$$

Τώρα είναι εύκολο να δούμε για την ιδιοτιμή ν_2

$$\nu_1 < \nu_2 < 0.$$

και συνεπώς η συνθήκη (3.12) εξασφαλίζει ότι $\rho(G) < 1$. Μπορούμε να συνοψίσουμε το αποτέλεσμα αυτής της παραγράφου στην παρακάτω πρόταση

Πρόταση 3.2 (Συνθήκη ευστάθειας Von Neumann). *Θεωρούμε το γραμμικοποιημένο minimal μοντέλο Keller–Segel (3.5), γύρω από μια ομοιογενή γραμμικά σταθερή κατάσταση*

$$\left(U_0, \frac{a}{b}U_0 \right), \quad U_0 \in \mathbb{R},$$

διακριτοποιημένο χρονικά με την άμεση μέθοδο του Euler και χωρικά με κεντρικές διαφορές (3.6). Τότε, το διακριτό σχήμα (3.6), είναι Von Neumann ευσταθές αν και μόνο αν υπάρχει $k > 0$, τέτοιο ώστε

$$k < \frac{2}{b + (D_1 + D_2)\frac{4}{h^2}}, \quad \mu\epsilon \quad D_1b - a\chi U_0 > 0.$$

Παρατήρηση 3.1. Παρατηρούμε ότι η συνθήκη ευστάθειας Von Neumann ενσωματώνει τη συνθήκη ευστάθειας Turing του συνεχούς προβλήματος, δηλαδή η αριθμητική ευστάθεια επηρεάζεται από τη δυναμική του συνεχούς συστήματος.

Κατά συνέπεια, η συνθήκη ευστάθειας Von Neumann καθορίζει τον τρόπο επιλογής των βημάτων της διακριτοποίησης, έτσι ώστε, όταν το συνεχές σύστημα είναι ευσταθές κατά Turing, το αριθμητικό σχήμα να μην δημιουργεί μη-φυσικά πρότυπα. Με άλλα λόγια, η Von Neumann ευστάθεια εξασφαλίζει ότι η αριθμητική λύση δεν θα εισάγει τεχνητές αστάθειες πέρα από τη φυσική δυναμική του προβλήματος.

Απόδειξη της έλλειψης της ιδιότητας της μη αρνητικότητας. Όπως έχουμε αναφέρει, η ιδιότητα της μη αρνητικότητας αποτελεί θεμελιώδες χαρακτηριστικό των λύσεων του συστήματος Keller–Segel, καθώς οι συναρτήσεις $u(x, t)$ και $v(x, t)$ δεν μπορούν να λάβουν αρνητικές τιμές. Ιδανικά, το αριθμητικό σχήμα θα πρέπει να διατηρεί αυτή την ιδιότητα σε κάθε χρονικό βήμα, ώστε να εξασφαλίζεται η φυσική συνέπεια της προσεγγιστικής λύσης. Σε αυτή την παράγραφο εξετάζεται η ικανότητα του αριθμητικού σχήματος (3.2) να διατηρεί τη μη αρνητικότητα των διακριτών λύσεων. Για το σκοπό αυτό, θεωρούμε ένα βήμα της μεθόδου, $t^0 \rightarrow t^1$ με κατάλληλα επιλεγμένες μη αρνητικές αρχικές τιμές (U_i^0, V_i^0) , $i = 0, \dots, N + 1$. Αν η υπολογιστική λύση (U_i^1, V_i^1) μπορεί να πάρει αρνητικές τιμές, τότε το αριθμητικό σχήμα δε διατηρεί τη μη αρνητικότητα των λύσεων.

Επιλέγουμε έναν οποιοδήποτε εσωτερικό κόμβο x_i , $i = 0, \dots, N + 1$ και θέτουμε

$$U_i^0 = a > 0, \quad U_l^0 = 0, \quad l = 0, \dots, N + 1, \quad l \neq i$$

και

$$V_{i-1}^0 = V_{i+1}^0 = M > 0, \quad V_l^0 = 0, \quad l \neq i + 1, i - 1.$$

Προφανώς $U_i^0 \geq 0$ και $V_i^0 \geq 0 \forall i = 1, \dots, N + 1$. Τότε, εύκολα μπορούμε να δούμε ότι

$$\tilde{\Delta}_h U_i^0 = \frac{U_{i+1}^0 - 2U_i^0 + U_{i-1}^0}{h^2} = \frac{-2a}{h^2}, \quad \tilde{\Delta}_h V_i^0 = \frac{V_{i+1}^0 - 2V_i^0 + V_{i-1}^0}{h^2} = \frac{2M}{h^2},$$

και

$$\partial_{2h} U_i^0 = \frac{U_{i+1}^0 - U_{i-1}^0}{2h} = 0, \quad \partial_{2h} V_i^0 = \frac{V_{i+1}^0 - V_{i-1}^0}{2h} = 0.$$

Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στο αριθμητικό σχήμα (3.2) έχουμε την αριθμητική λύση

$$\frac{U_i^1 - a}{k} = -D_1 \frac{2a}{h^2} - \chi a \frac{2M}{h^2},$$

δηλαδή

$$U_i^1 = a \left(1 - 2D_1 \frac{k}{h^2} - 2\chi M \frac{k}{h^2} \right).$$

Παρατηρούμε ότι η τιμή U_i^1 γίνεται αρνητική αν ισχύει η ανισότητα

$$1 - 2D_1 \frac{k}{h^2} - 2\chi M \frac{k}{h^2} < 0,$$

η οποία μας οδηγεί στη συνθήκη

$$\frac{1 - 2D_1 \frac{k}{h^2}}{2\chi \frac{k}{h^2}} < M.$$

Συνεπώς, ακόμα κι αν $U_i^0 \geq 0$ για όλα τα i , μπορούμε να επιλέξουμε M τέτοιο ώστε το αριθμητικό σχήμα στο επόμενο χρονικό βήμα να λαμβάνει αρνητική τιμή. Το παραπάνω αποδεικνύει ότι η μη αρνητικότητα της προσεγγιστικής λύσης που προκύπτει από το αριθμητικό σχήμα (3.2) δεν διασφαλίζεται.

3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε αριθμητικά αποτελέσματα για το minimal μοντέλο των Keller–Segel (2.6) διακριτοποιημένο με κεντρικές διαφορές και την άμεση μέθοδο του Euler. Θεωρούμε το minimal μοντέλο Keller–Segel με παραμέτρους

$$D_1 = 10^{-2} = D_2, \quad a = 1 = b.$$

Τότε η $(U_0, V_0) = (1, 1)$, είναι μια ομοιογενή σταθερή κατάσταση με αρχικές συνθήκες

$$u(x, 0) = 1 + \frac{0.1e^{(x-0.5)^2}}{2\sigma^2}, \quad v(x, 0) = 1$$

όπου $\sigma = 0.025$. Το χωρίο το οποίο εξετάζουμε είναι το $[0, 1]$ και θεωρούμε $N = 200$, δηλαδή $h \approx 0.05$. Υπενθυμίζουμε τη συνθήκη για την αστάθεια Turing της πρότασης 2.3

$$D_1 b - a\chi U_0 > 0.$$

Αντικαθιστώντας τις τιμές των παραμέτρων στη συνθήκη αστάθειας Turing, προκύπτει ότι το σύστημα είναι Turing ασταθές αν και μόνο αν $\chi > D_1 = 0.01$. Ακόμα, έχουμε τη συνθήκη ευστάθειας Von Neumann 3.2

$$k < \frac{2}{b + (D_1 + D_2) \frac{4}{h^2}}, \quad \mu \in D_1 b - a\chi U_0 > 0,$$

από την οποία μπορούμε να επιλέξουμε κατάλληλο k για να είναι η μέθοδος μας ευσταθής. Αντικαθιστώντας τις τιμές των παραμέτρων προκύπτει ότι

$$k < \frac{2}{1 + \frac{0.08}{0.005^2}} \approx 6.25 \times 10^{-4}.$$

Για τις αριθμητικές προσομοιώσεις επιλέγουμε χρονικό βήμα $k = 10^{-5}$, όπου το αριθμητικό σχήμα είναι Von Neumann ευσταθές. Παρακάτω, παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις των αριθμητικών λύσεων u, v και τις τιμές της L^1 νόρμας της συνάρτησης $u(x, t)$, ώστε να εξετάσουμε την ιδιότητα της διατήρησης της μάζας. Επιλέγουμε την παράμετρο χ κατάλληλα για την αριθμητική μελέτη της συμπεριφοράς των λύσεων.

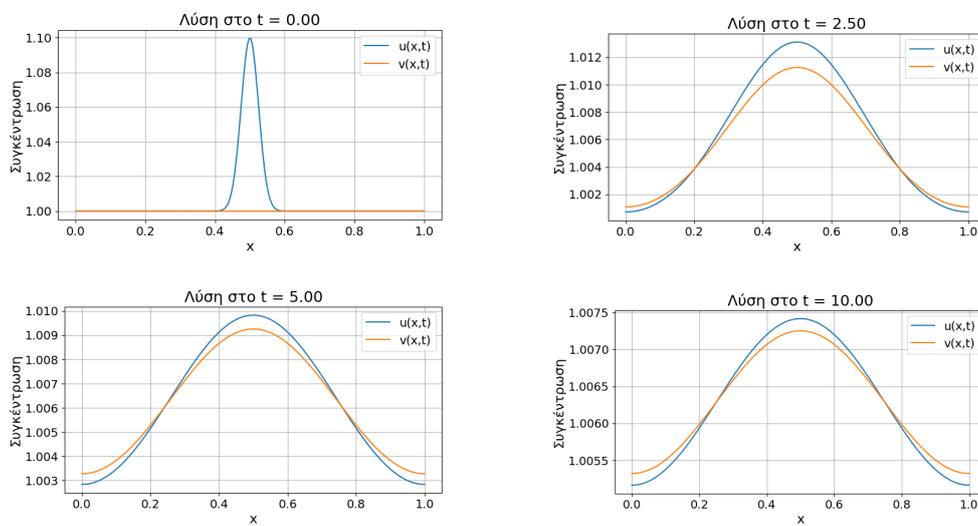


Figure 3.1: Αριθμητικά αποτελέσματα των λύσεων (u, v) για $\chi = 0.005$, όπου το σύστημα είναι Turing ευσταθές. Η λύση επιστρέφει στην ομοιογενή σταθερή κατάσταση.

Παρατηρούμε, ότι για την τιμή $\chi = 0.005$, η παράμετρος είναι αρκετά μικρή ώστε να μην ικανοποιείται η συνθήκη αστάθειας Turing. Ως αποτέλεσμα, το σύστημα παραμένει κοντά στην ομοιογενή σταθερή κατάσταση που δόθηκε ως αρχική συνθήκη, και δεν εμφανίζονται μοτίβα. Η λύση παραμένει ομοιόμορφη, ενώ η αριθμητική ευστάθεια εξασφαλίζεται πλήρως από το επιλεγμένο χρονικό βήμα $k = 10^{-5}$, το οποίο ικανοποιεί τη συνθήκη Von Neumann. Παρακάτω, παρουσιάζουμε την μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας για $\chi = 0.005$, με σκοπό να εξετάσουμε αν διατηρείται η ολική αρχική μάζα.

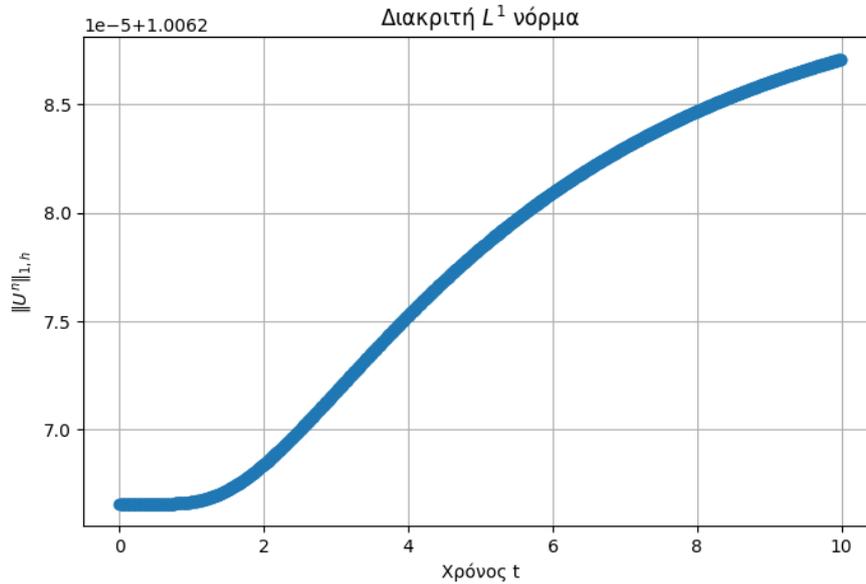


Figure 3.2: Μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας για $\chi = 0.005$. Η μεταβολή της L^1 νόρμας είναι της τάξης $\Delta L^1 = 2.05256485e - 05$.

Παρατηρούμε, ότι για την τιμή $\chi = 0.005$ η μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας είναι της τάξης 10^{-5} . Συμπεραίνουμε έτσι ότι η ολική μάζα δεν διατηρείται για μικρές τιμές του χ .

Στη συνέχεια, θέλουμε να εξετάσουμε τι συμβαίνει για μεγάλες τιμές του χ . Συγκεκριμένα, επιλέγουμε $\chi = 2$ όπου για αυτή την τιμή του χ το σύστημα μας είναι Turing ασταθές. Έτσι, αναμένουμε τη δημιουργία χωρικών μοτίβων και προτύπων και την αποσταθεροποίηση της αρχικής ομοιογενούς κατάστασης. Παρουσιάζουμε και την ολική μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας.

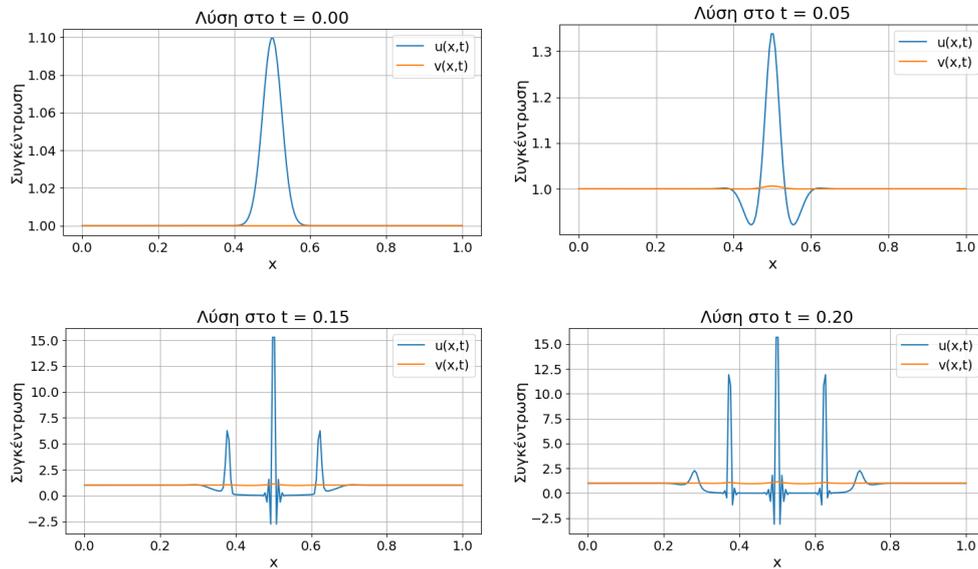


Figure 3.3: Αριθμητικά αποτελέσματα των λύσεων (u, v) για $\chi = 2$, όπου το σύστημα είναι Turing ασταθές. Η ομοιογενή σταθερή κατάσταση (U_0, V_0) αποσταθεροποιείται και δημιουργούνται χωρικά μοτίβα (κορυφές).

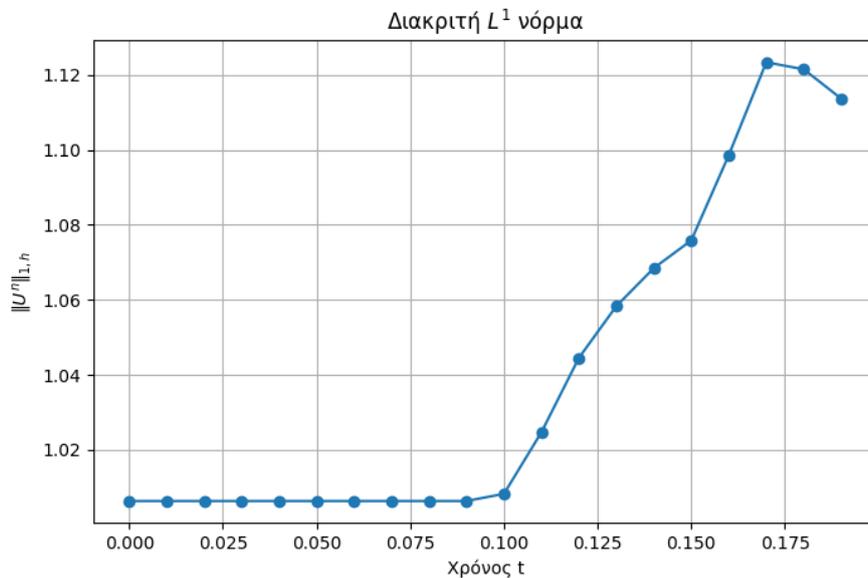


Figure 3.4: Μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας για $\chi = 2$. Η μεταβολή της L^1 νόρμας είναι της τάξης $\Delta L^1 = 1.19962606e - 01$.

Αντίθετα, για την τιμή $\chi = 2$, η συνθήκη αστάθειας Turing πληρείται για πολλούς κυματαριθμούς, με αποτέλεσμα να αναπτύσσονται σαφή Turing μοτίβα στο σύστημα. Τα μοτίβα αυτά αντικατοπτρίζουν την ενίσχυση των μικρών διαταραχών της αρχικής ομοιογενούς κατάστασης, και η χωρική κατανομή των u, v αποκλίνει εμφανώς από την αρχική ομοιογένεια. Παρατηρούμε ότι πλέον δεν διατηρείται η θετικότητα της λύσης από την δημιουργία μη φυσικών ταλαντώσεων, σε αντίθεση με την τιμή $\chi = 0.005$.

Συνολικά, η σύγκριση των δύο τιμών δείχνει καθαρά τον ρόλο της παραμέτρου χ στην εμφάνιση μοτίβων καθώς μικρές τιμές διατηρούν την ομοιογένεια 3.1, ενώ μεγάλες τιμές προκαλούν Turing αστάθεια και δημιουργία χωρικών μοτίβων 3.3. Παρατηρούμε ότι και στις δύο περιπτώσεις, η συνολική L^1 νόρμα δεν διατηρείται, δηλαδή η συνολική μάζα δεν διατηρείται όπως φαίνεται και στις προσομοιώσεις 3.4, 3.2. Έτσι, το σχήμα δεν πληρεί τις δύο θεμελιώδεις ιδιότητες της διατήρησης της μάζας και της μη αρνητικότητας γεγονός που κάνει το σχήμα μη κατάλληλο για την προσομοίωση του minimal μοντέλου των Keller–Segel.

Στη συνέχεια, θέλουμε να εξετάσουμε τη συμπεριφορά των λύσεων στην περίπτωση που το σύστημα είναι Turing ευσταθές αλλά δεν πληρείται η συνθήκη ευστάθειας Von Neumann. Έτσι, επιλέγοντας τις ίδιες τιμές για τις παραμέτρους και $\chi = 0.005$, διαλέγουμε χρονικό βήμα $k = 1.3 \times 10^{-3}$, το οποίο δεν ικανοποιεί τη συνθήκη ευστάθειας Von Neumann. Στα αριθμητικά αποτελέσματα περιμένουμε να εμφανιστούν αστάθειες και μη φυσικές ταλαντώσεις στην λύση του συστήματος καθώς δεν πληρείται η συνθήκη ευστάθειας Von Neumann, παρόλο που το σύστημα είναι Turing ευσταθές για μικρή τιμή του χ .

Τα αριθμητικά αποτελέσματα της λύσης σε αυτή την περίπτωση εμφανίζονται παρακάτω.

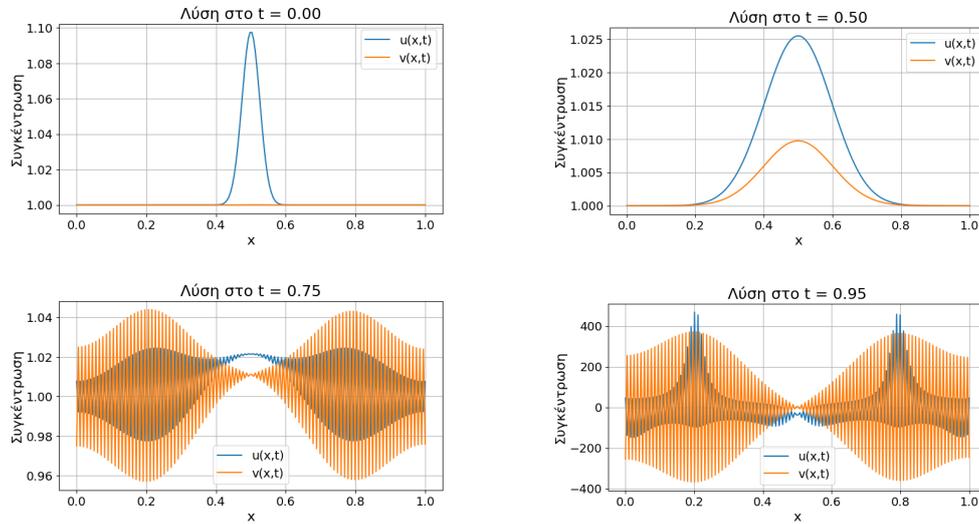


Figure 3.5: Αριθμητικά αποτελέσματα για $\chi = 0.005$ όπου το σύστημα είναι Turing ευσταθές και χρονικό βήμα $k = 1.3 \times 10^{-3}$, το οποίο δεν πληρεί την συνθήκη ευστάθειας Von Neumann.

Όπως αναμέναμε, η λύση του συστήματος όσο αυξάνεται ο χρόνος αυξάνεται και δημιουργούνται μη φυσικές ταλαντώσεις και αστάθειες. Παρατηρούμε ότι λόγω της αστάθειας του σχήματος μετά από μία χρονική στιγμή, η λύση λαμβάνει μεγάλες τιμές και εκρήγνυται (blow up).

UPWIND ΜΕΘΟΔΟΙ (UPWIND SCHEMES)

Η πρώτη εξίσωση του minimal μοντέλου των Keller–Segel, όπως είδαμε προηγούμενως, περιέχει έναν όρο μεταφοράς, $-\chi(uv_x)_x$. Διακριτοποιώντας αυτόν τον όρο με πηλίκο κεντρικών διαφορών, όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, οδηγεί στην εμφάνιση μη φυσικών ταλαντώσεων στην αριθμητική λύση. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ο όρος μεταφοράς χuv_x είναι υπερβολικού τύπου, δηλαδή, έχει την ιδιότητα ότι η ροή μεταδίδεται με συγκεκριμένη κατεύθυνση και τα αριθμητικά σχήματα πρέπει να σέβονται αυτή την ροή. Οι κεντρικές διαφορές, ως συμμετρικό σχήμα αγνοούν αυτή την κατεύθυνση, καθώς υπολογίζουν την παράγωγο χρησιμοποιώντας τιμές και από τις δύο κατευθύνσεις γεγονός που προκαλεί αστάθεια στην αριθμητική λύση. Έτσι, σε αυτό το κεφάλαιο για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος, θα χρησιμοποιήσουμε μεθόδους upwind που θεωρούνται κατάλληλες κατά την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων που περιέχουν όρους μεταφοράς.

4.1 Μέθοδοι Upwind (Upwind Schemes)

Η βασική ιδέα των μεθόδων upwind είναι η διακριτοποίηση του όρου μεταφοράς με κατάλληλα πηλίκα διαφορών που λαμβάνουν υπόψη τη φορά της ροής. Για την αριθμητική επίλυση του minimal Keller–Segel μοντέλου, χρησιμοποιούμε μία ημι-πεπλεγμένη (semi-implicit) μέθοδο όπου οι δύο εξισώσεις επιλύονται διαδοχικά σε κάθε χρονικό βήμα βλ. [2].

Χωρική διακριτοποίηση με Upwind μέθοδο. Για τη χωρική διακριτοποίηση θα αντιμετωπίσουμε τους όρους διάχυσης και μεταφοράς με διαφορετικό τρόπο. Συγκεκριμένα, θα διακριτοποιήσουμε τους όρους διάχυσης u_{xx} , v_{xx}

με κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης όπως και προηγουμένως, ενώ ο όρος μεταφοράς χv_x , θα διακριτοποιηθεί με μέθοδο upwind.

Αρχικά, διακριτοποιώντας τους όρους διάχυσης με κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης έχουμε

$$u_{xx}(x_i, t) \approx \delta_h^2 u(x_i, t), \quad i = 1, \dots, N.$$

Ανάλογα προσεγγίζουμε και την v_{xx} . Για την διακριτοποίηση του όρου μεταφοράς, χv_x , ο οποίος μοντελοποιείται ως παροχή (flux) και περιγράφει τη ροή μεταξύ των διακριτών σημείων θα εφαρμόσουμε μία μέθοδο upwind, δηλαδή θα διακριτοποιήσουμε τον όρο v_x με κατάλληλα ημίλια διαφορών. Στο συνεχές πρόβλημα, ο όρος $-\chi v_x$ εκφράζει την ταχύτητα κίνησης των κυττάρων λόγω χημειοταξίας. Τα κύτταρα κινούνται αντίθετα από τη διάχυση και προς την κατεύθυνση του v_x , δηλαδή, αν η διάχυση γίνεται προς τα αριστερά τότε τα κύτταρα κινούνται προς τα δεξιά και αντίστροφα. Στο αριθμητικό σχήμα upwind διακριτοποιούμε την παράγωγο v_x με προς τα εμπρός διαφορές δηλαδή

$$v_x(x_i, t) \approx \frac{v(x_{i+1}, t) - v(x_i, t)}{h} = \frac{V_{i+1} - V_i}{h}.$$

Ορίζουμε την τοπική ταχύτητα μεταφοράς $\beta_{i+\frac{1}{2}}$ στα σημεία $x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2}$, ως

$$\beta_{i+\frac{1}{2}} = \chi \frac{V_{i+1} - V_i}{h}, \quad i = 1, \dots, N.$$

Επειδή, η upwind μέθοδος απαιτεί γνώση της κατεύθυνσης της ροής, η τοπική ταχύτητα $\beta_{i+\frac{1}{2}}$ διασπάται στο θετικό και αρνητικό της μέρος. Το θετικό μέρος, $\beta_{i+\frac{1}{2},+}$ αντιπροσωπεύει τη ροή προς τα δεξιά, ενώ αντίστοιχα το $\beta_{i+\frac{1}{2},-}$, αντιπροσωπεύει τη ροή προς τα αριστερά,

$$\beta_{i+\frac{1}{2},+} = \max\{\beta_{i+\frac{1}{2}}, 0\}, \quad \beta_{i+\frac{1}{2},-} = \max\{-\beta_{i+\frac{1}{2}}, 0\}.$$

Οπότε, αν $\beta_{i+\frac{1}{2},+}^n > 0$, ($\beta_{i+\frac{1}{2}}^n > 0$), η συγκέντρωση στο x_{i+1} είναι μεγαλύτερη από αυτή στο x_i , συνεπώς η διάχυση της χημειοελακτικής ουσίας γίνεται προς τα αριστερά, άρα τα κύτταρα κινούνται προς τα δεξιά. Αντίθετα, αν $\beta_{i+\frac{1}{2},-}^n > 0$, ($\beta_{i+\frac{1}{2}}^n < 0$) τότε η ροή γίνεται προς τα αριστερά. Συνδυάζοντας τα παραπάνω προκύπτει η διακριτή upwind παροχή,

$$F_{\text{UP},i+\frac{1}{2}} = -\beta_{i+\frac{1}{2},+} U_i + \beta_{i+\frac{1}{2},-} U_{i+1}. \quad (4.1)$$

Έτσι, το ημιδιακριτοποιημένο σύστημα που προκύπτει με upwind μέθοδο του συστήματος (2.6) για $i = 1, \dots, N$, είναι

$$\begin{cases} u_t(x_i, t) = D_1 \delta_h^2 u(x_i, t) - \frac{F_{\text{UP}, i+1/2} - F_{\text{UP}, i-1/2}}{h}, \\ v_t(x_i, t) = D_2 \delta_h^2 v(x_i, t) - bv(x_i, t) + au(x_i, t). \end{cases} \quad (4.2)$$

Υπενθυμίζουμε ότι για τις ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann έχουμε ότι $v_x(0, t) = v_x(L, t) = 0$. Απαιτώντας ότι τα άκρα $x_0 = 0$, $x_{N+1} = L$ πληρούν ομογενείς συνοριακές συνθήκες Neumann προκύπτει ότι

$$V_0 = V_1, \quad V_{N+1} = V_N.$$

δηλαδή

$$v_x(0, t) \approx \frac{V_1 - V_0}{h} = 0, \quad v_x(L, t) \approx \frac{V_{N+1} - V_N}{h} = 0,$$

Συνεπώς, στα ενδιάμεσα σημεία $x_{i+1/2}$ έχουμε

$$\beta_{\frac{1}{2}} = 0, \quad \beta_{N+\frac{1}{2}} = 0.$$

Οπότε, η διακριτή παροχή στα άκρα δίνεται ως,

$$F_{\text{UP}, \frac{1}{2}} = F_{\text{UP}, N+\frac{1}{2}} = 0. \quad (4.3)$$

Η συνθήκη (4.3) μας εξασφαλίζει ότι έχουμε μηδενική ροή στα άκρα του διαστήματος.

Πλήρως διακριτό σχήμα με θ -μέθοδο και upwind. Θα διακριτοποιήσουμε τώρα το σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων (4.2) για να οδηγηθούμε σε πλήρως διακριτά σχήματα για το σύστημα (2.6). Συγκεκριμένα, λύνουμε πρώτα την εξίσωση της συγκέντρωσης της χημειοελεκτρικής ουσίας θεωρώντας μία άμεση-πεπλεγμένη μέθοδο του Euler, άμεσα ως προς u και πεπλεγμένα ως προς v . Στην εξίσωση της πυκνότητας ο όρος διάχυσης διακριτοποιείται με μία θ -μέθοδο ενώ ο όρος μεταφοράς με την πεπλεγμένη μέθοδο του Euler. Έστω $\theta \in [0, 1]$, θεωρούμε το πλήρως διακριτό upwind σχήμα όπου για (U_i^n, V_i^n) , $i = 1, \dots, N$ δεδομένα ζητούνται προσεγγίσεις (U_i^n, V_i^n) που πληρούν το ακόλουθο αριθμητικό σχήμα

$$\frac{V_i^n - V_i^{n-1}}{k} = D_2 \tilde{\Delta}_h^n V_i^n - bV_i^n + aU_i^{n-1}, \quad (4.4)$$

και

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{k} = D_1 \tilde{\Delta}_h^n U_i^n + \theta \frac{F_{\text{UP}, i+\frac{1}{2}}^n - F_{\text{UP}, i-\frac{1}{2}}^n}{h} + (1-\theta) \frac{F_{\text{UP}, i+\frac{1}{2}}^{n-1} - F_{\text{UP}, i-\frac{1}{2}}^{n-1}}{h}, \quad (4.5)$$

Οι εξισώσεις (4.4), (4.5) και (4.3) αποτελούν το πλήρως διακριτό upwind σχήμα.

Από την εξίσωση (4.5) είναι προφανές πως για $\theta = 0$ έχουμε μία άμεση μέθοδο ενώ για $\theta = 1$ έχουμε μία πεπλεγμένη μέθοδο. Η παρακάτω πρόταση ισχύει και για την άμεση και για την πεπλεγμένη μέθοδο [2].

Πρόταση 4.1 (Διατήρηση της μάζας). Έστω

$$U^n = (U_0^n, U_1^n, \dots, U_{N+1}^n)^T, \quad n = 0, 1, \dots,$$

η λύση του πλήρους διακριτού σχήματος (4.5) με συνοριακές συνθήκες (4.3). Τότε

$$\|U^n\|_{1,h} = \|U^0\|_{1,h}, \quad \forall n > 0.$$

Επομένως, η διακριτή λύση του σχήματος διατηρεί τη συνολική αρχική μάζα.

4.1.1 Άμεση Upwind μέθοδος

Στην άμεση upwind μέθοδο έχουμε $\theta = 0$ και θεωρούμε το σχήμα ως εξής:

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{k} = D_1 \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{h^2} + \frac{F_{\text{UP}, i+\frac{1}{2}}^{n-1} - F_{\text{UP}, i-\frac{1}{2}}^{n-1}}{h}. \quad (4.6)$$

Θέλουμε να αποδείξουμε την CFL συνθήκη της μεθόδου. Η συνθήκη CFL είναι μια απαραίτητη συνθήκη ευστάθειας για αριθμητικές μεθόδους επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων, η οποία εξασφαλίζει ότι η αριθμητική μέθοδος δε δημιουργεί αστάθειες. Η παρακάτω πρόταση έχει αποδειχθεί στην εργασία [2].

Πρόταση 4.2. Έστω U_i^0 η διακριτή προσέγγιση της αρχικής συνθήκης $u_0(x)$. Αν $U_i^0 \geq 0$ και το βήμα $k > 0$ ικανοποιεί την,

$$k < \frac{h}{2\|\beta\|_\infty}, \quad (4.7)$$

όπου $\|\beta\|_\infty = \max_{0 \leq i \leq N} |\beta_{i+\frac{1}{2}}^{n-1}|$, τότε η λύση του (4.6) ικανοποιεί την,

$$U_i^n \geq 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad \forall n \geq 0. \quad (4.8)$$

Απόδειξη.

Αρχικά, αντικαθιστούμε τα $F_{\text{UP},i+\frac{1}{2}}^{n-1}, F_{\text{UP},i-\frac{1}{2}}^{n-1}$ από την (4.1) στην (4.6) και οργανώνοντας τους όρους έχουμε,

$$U_i^n = U_i^{n-1} + D_1 \frac{k}{h^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n) + \frac{k}{h} \beta_{i+\frac{1}{2},-}^{n-1} U_{i+1}^{n-1} + \frac{k}{h} \beta_{i-\frac{1}{2},+}^{n-1} U_{i-1}^{n-1} - \frac{k}{h} (\beta_{i+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{i-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_i^{n-1}.$$

Θέτουμε δείκτη $l \in \{1, \dots, N\}$ τέτοιο ώστε, $U_l^{n-1} = \min_{i=1, \dots, N} U_i^{n-1}$. Τότε ισχύει ότι,

$$U_{l-1}^{n-1} \geq U_l^{n-1}, \quad U_{l+1}^{n-1} \geq U_l^{n-1}, \quad (4.9)$$

δηλαδή $-\Delta_h U_l^{n-1} \leq 0$, όπου $\Delta_h U_l^{n-1} = \frac{U_{l+1}^{n-1} - 2U_l^{n-1} + U_{l-1}^{n-1}}{h^2}$. Οπότε, για $i = l$ προκύπτει ότι,

$$U_l^n \geq U_l^{n-1} + \frac{k}{h} \beta_{l+\frac{1}{2},-}^{n-1} U_{l+1}^{n-1} + \frac{k}{h} \beta_{l-\frac{1}{2},+}^{n-1} U_{l-1}^{n-1} - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_l^{n-1}.$$

Δηλαδή, χρησιμοποιώντας την ανισότητα (4.9) και ότι $\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1}, \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1} \geq 0$ έχουμε

$$U_l^n \geq U_l^{n-1} - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_l^{n-1},$$

$$U_l^n \geq U_l^{n-1} (1 - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1})).$$

Από την υπόθεση έχουμε ότι, $U_i^{n-1} \geq 0$, $i = 1, \dots, N$, άρα ισχύει ότι $U_l^n \geq 0$ αν,

$$1 - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) \geq 0.$$

Από την οποία προκύπτει το ζητούμενο δηλαδή,

$$k < \frac{h}{2 \|\beta\|_\infty}.$$

4.1.2 Πεπλεγμένη Upwind μέθοδος

Στην πεπλεγμένη Upwind μέθοδο έχουμε $\theta = 1$ στην εξίσωση (4.5) και θεωρούμε το σχήμα ως εξής:

$$\frac{U_i^n - U_i^{n-1}}{k} = D_1 \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{h^2} + \frac{F_{\text{UP},i+\frac{1}{2}}^n - F_{\text{UP},i-\frac{1}{2}}^n}{h}. \quad (4.10)$$

Θα αποδείξουμε την CFL συνθήκη της πεπλεγμένης Upwind μεθόδου βλ.[2].

Πρόταση 4.3. Έστω U_i^0 η διακριτή προσέγγιση της αρχικής συνθήκης $u_0(x)$. Αν $U_i^0 \geq 0$ και $\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1}, \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1} \geq 0$, τότε η λύση του (4.10) ικανοποιεί την,

$$U_i^n \geq 0, \quad i = 0, \dots, N, \quad \forall n \geq 0. \quad (4.11)$$

χωρίς περιορισμό στο χρονικό βήμα k .

Απόδειξη.

Ανάλογα με την άμεση μέθοδο αντικαθιστούμε τα $F_{\text{UP},i+\frac{1}{2}}^n, F_{\text{UP},i-\frac{1}{2}}^n$ από την (4.1) στο πεπλεγμένο σχήμα της (4.10) και οργανώνοντας τους όρους έχουμε,

$$\begin{aligned} U_i^n = U_i^{n-1} + D_1 \frac{k}{h^2} (U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n) + \frac{k}{h} \beta_{i+\frac{1}{2},-}^{n-1} U_{i+1}^n \\ + \frac{k}{h} \beta_{i-\frac{1}{2},+}^{n-1} U_{i-1}^n - \frac{k}{h} (\beta_{i+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{i-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_i^n. \end{aligned}$$

Θέτουμε δείκτη $l \in \{1, \dots, N\}$ τέτοιο ώστε, $U_l^n = \min_{i=1, \dots, N} U_i^n$. Για $i = l$ έχουμε,

$$U_l^n \geq U_l^{n-1} + \frac{k}{h} \beta_{l+\frac{1}{2},-}^{n-1} U_{l+1}^n + \frac{k}{h} \beta_{l-\frac{1}{2},+}^{n-1} U_{l-1}^n - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_l^n.$$

Επειδή $\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1}, \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1} \geq 0$ παραλείπουμε τους θετικούς όρους και έχουμε,

$$U_l^n \geq U_l^{n-1} - \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_l^n,$$

άρα,

$$\begin{aligned} U_l^n + \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) U_l^n &\geq U_l^{n-1}, \\ U_l^n (1 + \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1})) &\geq U_l^{n-1}. \end{aligned}$$

Από την υπόθεση έχουμε ότι, $U_i^{n-1} \geq 0$, $i = 0, \dots, N$, άρα ισχύει ότι $U_l^n \geq 0$ αν,

$$1 + \frac{k}{h} (\beta_{l+\frac{1}{2},+}^{n-1} + \beta_{l-\frac{1}{2},-}^{n-1}) \geq 0.$$

Το οποίο είναι πάντα μη αρνητικό. Έτσι, προκύπτει το ζητούμενο, δηλαδή ότι $U_i^n \geq 0$, $i = 0, \dots, N$, $\forall n \geq 0$, χωρίς περιορισμό στο χρονικό βήμα k .

4.2 Αριθμητικά Αποτελέσματα.

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε αριθμητικά αποτελέσματα του minimal μοντέλου των Keller–Segel με την μέθοδο upwind για $\theta = 0$. Αρχικά, θεωρούμε το minimal μοντέλο Keller–Segel (2.6) με τιμές για τις παραμέτρους και αρχικές συνθήκες όπως στην παράγραφο 3.2. Θα επιλέξουμε τις ίδιες τιμές για την παράμετρο χ , ώστε να συγκρίνουμε τα αριθμητικά αποτελέσματα των δύο σχημάτων. Επιλέγουμε ως χρονικό βήμα $k = 1.0 \times 10^{-5}$, ώστε να πληρείται η CFL συνθήκη της upwind μεθόδου. Παρακάτω, παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις των αριθμητικών λύσεων u, v και την μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας της συνάρτησης $u(x, t)$ βλ. [2].

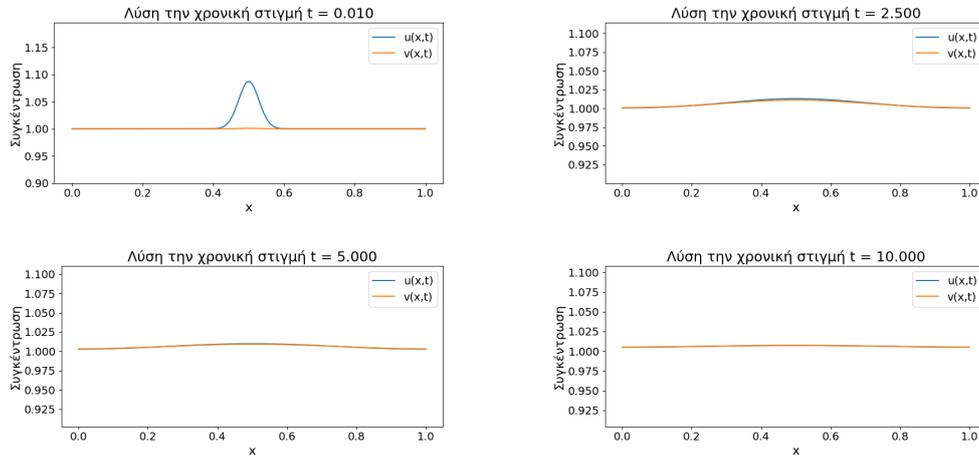


Figure 4.1: Αριθμητικά αποτελέσματα των λύσεων (u, v) για $\chi = 0.005$, όπου το σύστημα είναι Turing ευσταθές. Η λύση επιστρέφει στην ομοιογενή σταθερή κατάσταση.

Παρατηρούμε ότι όπως και στο σχήμα κεντρικών διαφορών με άμεση μέθοδο του Euler, οι αριθμητικές λύσεις έχουν παρόμοια συμπεριφορά. Δηλαδή, η λύση επιστρέφει στην ομοιογενή σταθερή κατάσταση αφού το σύστημα είναι Turing ευσταθές.

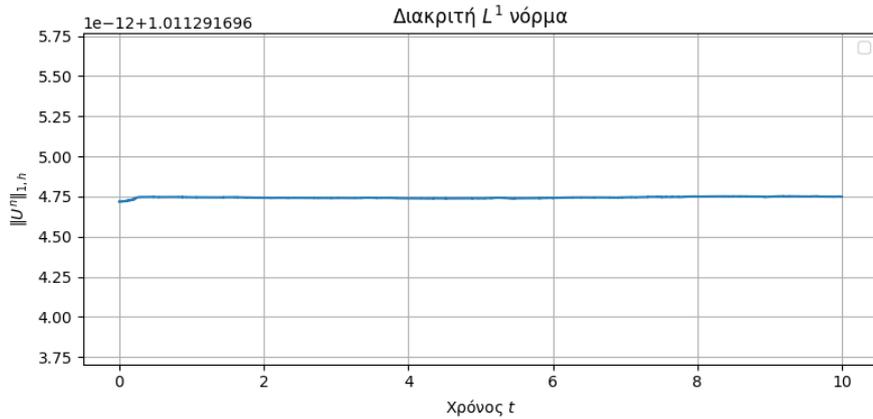


Figure 4.2: Μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας για $\chi = 0.005$. Παρατηρούμε ότι η ολική μεταβολή είναι της τάξης $\Delta L^1 = 3.1 \times 10^{-14}$, επαληθεύοντας ότι η μάζα διατηρείται.

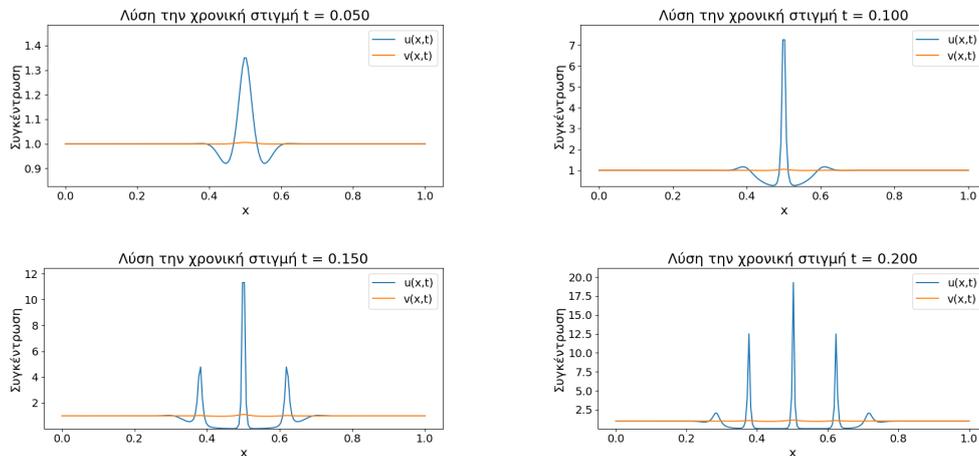


Figure 4.3: Αριθμητικά αποτελέσματα των λύσεων (u, v) για $\chi = 2$, όπου το σύστημα είναι Turing ασταθές. Παρατηρούμε ότι η ομοιογενής σταθερή κατάσταση αποσταθεροποιείται με τη δημιουργία ομαλών χωρικών μοτίβων.

Παρατηρούμε στα αριθμητικά αποτελέσματα των λύσεων u, v για $\chi = 2$ με την μέθοδο upwind ότι συγκριτικά με την μέθοδο κεντρικών διαφορών και άμεσης Euler δημιουργούνται πιο ομαλά χωρικά μοτίβα αποφεύγοντας μη φυσικές ταλαντώσεις. Επίσης, διατηρείται και η μη αρνητικότητα των λύσεων.

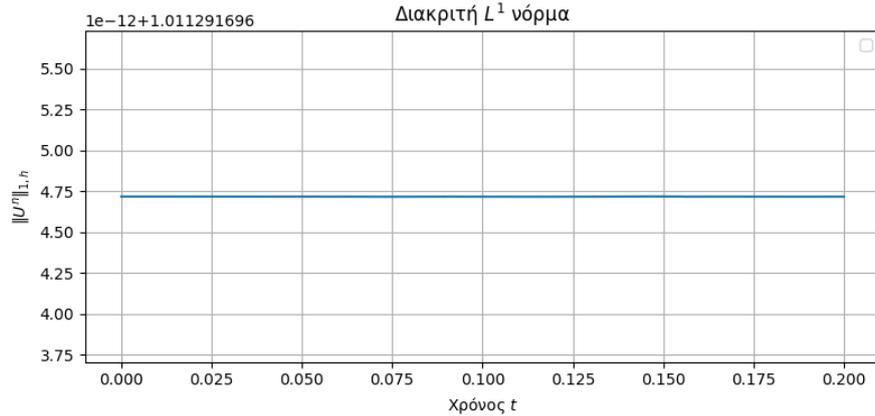


Figure 4.4: Μεταβολή της διακριτής L^1 νόρμας για $\chi = 2$. Παρατηρούμε ότι η ολική μεταβολή είναι της τάξης $\Delta L^1 = 1.9 \times 10^{-13}$, επαληθεύοντας ότι η μάζα διατηρείται και για αυτή την τιμή της παραμέτρου χ .

Συνολικά, στα αποτελέσματα που προέκυψαν από την επίλυση του minimal μοντέλου Keller–Segel με την μέθοδο Upwind, παρατηρούμε ότι η ανάπτυξη χωρικών μοτίβων εξαρτάται όπως και στις κεντρικές διαφορές από την τιμή της παραμέτρου χ . Για μεγάλες τιμές του $\chi = 2$, βλ. 4.3 εμφανίζονται σαφή μοτίβα Turing, ενώ για μικρές τιμές, $\chi = 0.005$, βλ. 4.1 το πεδίο παραμένει σχεδόν ομοιογενές και ακολουθεί την αρχική διαταραχή.

Η Upwind μέθοδος διατηρεί τη θετικότητα των τιμών σε όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης, αποφεύγοντας αρνητικές τιμές που μπορούν να εμφανιστούν στις κεντρικές διαφορές με άμεση Euler κοντά στις κορυφές των μοτίβων. Επιπλέον, η συνολική μάζα παραμένει σταθερή αφού η διακριτή L^1 νόρμα παραμένει σχεδόν σταθερή στην εξέλιξη του χρόνου βλ. 4.4, 4.2.

Σε αντίθεση με τις κεντρικές διαφορές, η Upwind μέθοδος εμφανίζει μειωμένη ευαισθησία σε αριθμητικές ταλαντώσεις, παρέχοντας πιο ομαλά και σταθερά μοτίβα, ενώ οι κεντρικές διαφορές είναι πιο επιρρεπείς σε μη φυσικές ταλαντώσεις και αρνητικές τιμές.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία μελετήθηκε το φαινόμενο της χημειοταξίας, δηλαδή η κίνηση των κυττάρων ως απόκριση σε χημικά ερεθίσματα, μέσω μαθηματικών μοντέλων τύπου Keller–Segel. Αρχικά, παρουσιάστηκαν οι βασικές αρχές που διέπουν τη χημειοταξία και παραδείγματα βιολογικών συστημάτων όπου παρατηρείται το φαινόμενο αυτό. Στη συνέχεια, εισήχθη το κλασικό μοντέλο Keller–Segel και αποδείχθηκε η μαθηματική του προέλευση. Έπειτα, κάνοντας κάποιες παραδοχές στο κλασικό προέκυψε το minimal μοντέλο Keller–Segel το οποίο ήταν και το κύριο αντικείμενο αυτής της εργασίας. Το minimal μοντέλο αναλύθηκε ως προς την ύπαρξη και την μοναδικότητα των λύσεων, καθώς και για τις δύο θεμελιώδεις ιδιότητες του, τη διατήρηση της μάζας και τη μη αρνητικότητα των λύσεων. Ακόμα, εισήχθη η θεωρία της αστάθειας Turing και εφαρμόστηκε στο minimal μοντέλο.

Για την αριθμητική προσομοίωση του minimal μοντέλου εφαρμόστηκαν και μελετήθηκαν σχήματα πεπερασμένων διαφορών δεύτερης τάξης. Αρχικά, εφαρμόστηκε το σχήμα κεντρικών διαφορών με άμεση Euler. Εισήχθη η ανάλυση Von Neumann και αποδείχθηκε η CFL συνθήκη της ευστάθειας Von Neumann για το αριθμητικό σχήμα. Διαπιστώθηκε ότι το σχήμα κεντρικών διαφορών με άμεση Euler δεν είναι κατάλληλο για την επίλυση του minimal μοντέλου Keller–Segel, λόγω εμφάνισης μη ρεαλιστικών αποτελεσμάτων. Για τον λόγο αυτό, εξετάστηκαν εναλλακτικά σχήματα, όπως τα upwind σχήματα, τα οποία σύμφωνα με τη βιβλιογραφία προσφέρουν μεγαλύτερη σταθερότητα και καλύτερη προσεγγιστική συμπεριφορά για την αριθμητική επίλυση του minimal μοντέλου.

Τέλος, πραγματοποιήθηκαν κατάλληλα αριθμητικά πειράματα, τα οποία επιβεβαίωσαν τα θεωρητικά συμπεράσματα σχετικά με την καταλληλότητα των επιλεγμένων μεθόδων. Η υλοποίηση των πειραμάτων σε περιβάλλον Python έδειξε τη δυνατότητα αποτελεσματικής προσομοίωσης του φαινομένου της χημειοταξίας, ενώ ανέδειξε τη σημασία της σωστής επιλογής αριθμητικού σχήματος για την αξιόπιστη επίλυση των σχετικών μοντέλων.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] BOYCE, W. E., DiPRIMA, R. C., AND MEADE, D. B. *Elementary differential equations and boundary value problems. Eighth Edition.* John Wiley & Sons, 2021.
- [2] BUBBA, F. Conservative finite difference schemes for Keller-Segel models of chemotaxis applied to breast cancer growth, Politecnico di Milano, 2016.
- [3] GONÇALVES, A. M. Keller-Segel models for chemotaxis: stable and second order approximations. Master's thesis, 2023.
- [4] HAWLEY, L., ZIEGLER, R. J., AND CLARKE, B. L. *Microbiology and immunology.* Wolters Kluwer Health, 2013.
- [5] HILLEN, T., AND PAINTER, K. J. A user's guide to PDE models for chemotaxis. *Journal of mathematical biology* 58, 1 (2009), 183–217.
- [6] HUANG, X., GOUBET, O., AND SHEN, J. Numerical analysis of a semi-implicit Euler scheme for the Keller-Segel model. *arXiv preprint arXiv:2503.01427* (2025).
- [7] HULZEBOS, J. A. Keller-Segel models for chemotaxis. *Universidad del Estado de Iowa, EEUU* 41 (2017).
- [8] ISAACSON, E., AND KELLER, H. B. *Analysis of numerical methods.* Courier Corporation, 2012.
- [9] KELLER, E. F., AND SEGEL, L. A. Traveling bands of chemotactic bacteria: A theoretical analysis. *Journal of Theoretical Biology* 30, (2) (1971), 235–248.

- [10] KUKS, A. Chemotaxis 2021.
- [11] MURRAY, J. D. *Mathematical biology: I. An introduction*, vol. 17. Springer Science & Business Media, 2007.
- [12] OSAKI, K., AND YAGI, A. Finite dimensional attractor for one-dimensional Keller-Segel equations. *Funkcialaj ekvacioj serio internacia* 44, 3 (2001), 441–470.
- [13] STRIKWERDA, J. C. *Finite difference schemes and partial differential equations*. SIAM, 2004.
- [14] VAN HAASTERT, P. Sensory adaptation of dictyostelium discoideum cells to chemotactic signals. *The Journal of cell biology* 96, 6 (1983), 1559–1565.
- [15] Χιντίρογλου, Κ. Μαθηματικά μοντέλα στο βιολογικό φαινόμενο της χημειοταξίας Μεταπτυχιακή Εργασία, 2022.

APPENDIX A

ΚΩΔΙΚΕΣ ΣΕ PYTHON

Παρακάτω παρουσιάζουμε τους κώδικες που εφαρμόστηκαν για τα αριθμητικά αποτελέσματα.

A.1 Κεντρικές διαφορές και άμεση Euler.

```
import numpy as np
import os
import matplotlib.pyplot as plt
# Παράμετροι συστήματος
L = 1.0
N = 200
dx = L / (N-1)
x = np.linspace(0, L, N)

D1 = 1e-2
D2 = 1e-2
chi = 2
a = 1.0
b = 1.0
U0 = 1.0
V0 = 1.0

# Αρχικές συνθήκες
A = 0.1
x0 = 0.5
sigma = 0.025

u = U0 + A * np.exp(-((x - x0)**2)/(2*sigma**2))
v = V0 * np.ones_like(x)
```

```

# Χρονικό βήμα για άμεση Euler

k = 1e-5
tmax = 0.2
steps = int(tmax / k)

folder = "KS_solutions"
os.makedirs(folder, exist_ok=True)

#Διάχυση

def laplacian(f, dx):
    lap = np.zeros_like(f)
    lap[1:-1] = (f[2:] - 2*f[1:-1] + f[:-2]) / dx**2
# Neumann BC
    lap[0] = 2*(f[1] - f[0]) / dx**2
    lap[-1] = 2*(f[-2] - f[-1]) / dx**2
    return lap

def compute_norms(u, v):
    L1 = np.sum(np.abs(u))
    L2 = np.sqrt(np.sum(u**2))
    return L1, L2

L1_list = []
L2_list = []
time_list = []

for n in range(steps):
    # Κεντρικές διαφορές για διάχυση
    lap_u = laplacian(u, dx)
    lap_v = laplacian(v, dx)

    # Chemotaxis:  $-chi * x(u, v)$ 
    dv_dx = np.zeros_like(v)
    dv_dx[1:-1] = (v[2:] - v[:-2]) / (2*dx)
    chemotaxis = np.zeros_like(u)
    chemotaxis[1:-1] = -chi * ( (u[2:] * dv_dx[2:] - u[:-2]*dv_dx[:-2]) / (2*dx) )

    # Άμεση Euler
    u_new = u + k*(D1*lap_u + chemotaxis)
    v_new = v + k*(D2*lap_v + a*u - b*v)

```

```

u, v = u_new, v_new

if n % 1000 == 0:
    np.save(os.path.join(folder, f"u_{n:05d}.npy"), u)
    np.save(os.path.join(folder, f"v_{n:05d}.npy"), v)

    L1, L2 = compute_norms(u, v)
    L1_list.append(L1)
    L2_list.append(L2)
    time_list.append(n*k)

# Plot L1 και L2 νορμών

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.semilogy(time_list, L1_list, label="L1 norm")
plt.semilogy(time_list, L2_list, label="L2 norm")
plt.xlabel("Χρόνος t")
plt.ylabel("")
plt.legend()
plt.title("Τιμές για τις νόρμες L1 και L2")
plt.show()

# Plot τελικής λύσης u και v

plt.figure(figsize=(8,5))
plt.plot(x, u, label="u(x, t)")
plt.plot(x, v, label="v(x, t)")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Συγκέντρωση")
plt.legend()
plt.title("Λύση τη χρονική στιγμή t = {:.3f}".format(tmax))
plt.show()

```

A.2 Upwind μέθοδοι.

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

```

```

#Παράμετροι
L = 1.0
N = 200
dx = L / (N-1)
x = np.linspace(0, L, N)

D1 = 1e-2
D2 = 1e-2
chi = 2
a = 1.0
b = 1.0
U0 = 1.0
V0 = 1.0

# Αρχικές συνθήκες
A = 0.1
x0 = 0.5
sigma = 0.025

u = U0 + A * np.exp(-((x - x0)**2)/(2*sigma**2))
c = V0 * np.ones_like(x)

# Χρονικό βήμα
k = 1e-5
tmax = 0.2
steps = int(tmax / k)

times = []
mass_list = []
Linf_list = []
L1_list = []
L2_list = []

snapshot_times = [0.05, 0.1, 0.15, 0.2]
snapshot_indices = set(int(round(t/k)) for t in snapshot_times)
snapshots = []
eps = 1e-14

#Διάχυση
def laplacian(f, dx):
    lap = np.zeros_like(f)
    lap[1:-1] = (f[2:] - 2*f[1:-1] + f[:-2]) / dx**2
    # Neumann BC
    lap[0] = 2*(f[1]-f[0])/dx**2

```

```

    lap[-1] = 2*(f[-2]-f[-1])/dx**2
    return lap

# Upwind παροχή
def upwind_flux(u, c, chi, dx):
    dc = c[1:] - c[:-1]
    beta = chi * dc / dx
    beta_plus = np.maximum(beta, 0)
    beta_minus = np.maximum(-beta, 0)
    J = np.zeros(N+1)
    du = u[1:] - u[:-1]
    J_mid = -D1*du/dx + beta_plus*u[:-1] - beta_minus*u[1:]
    J[1:N] = J_mid
    return J

def compute_norms(u, c):
    L1 = np.sum(np.abs(u))
    L2 = np.sqrt(np.sum(u**2))
    return L1, L2

for n in range(steps):
    lap_c = laplacian(c, dx)

    # Upwind παροχή για u
    J = upwind_flux(u, c, chi, dx)
    u_new = u - (k/dx)*(J[1:] - J[:-1])

    # Υπολογισμός v
    c_pad = np.zeros(N+2)
    c_pad[1:-1] = c
    c_pad[0] = c[0]
    c_pad[-1] = c[-1]
    lap_c = (c_pad[2:] - 2*c + c_pad[:-2]) / dx**2
    c_new = c + k*(D2*lap_c + a*u - b*c)

    #Νόρμες
    L1, L2 = compute_norms(u_new, c_new)
    L1_list.append(L1)
    L2_list.append(L2)

    mass = np.sum(u_new)*dx
    mass_list.append(mass)

    if n==0:
        Linf_list.append(np.nan)

```

```

else:
    Linf_list.append(np.max(np.abs(u_new-u))/(np.max(np.abs(u))+eps))

times.append((n+1)*k)

if (n+1) in snapshot_indices:
    snapshots.append(((n+1)*k, u_new.copy(), c_new.copy()))

u, c = u_new, c_new

# Γράφημα για τις νόρμες.
plt.figure(figsize=(8,4))
plt.semilogy(times, L1_list, label="L1 ")
plt.semilogy(times, L2_list, label="L2 ")
plt.xlabel("Χρόνος t")
plt.ylabel("Νόρμες")
plt.title(f"L1 και L2 Νόρμες, chi={chi}")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

# Γράφημα Μάζας
plt.figure(figsize=(8,4))
plt.plot(times, mass_list, label="Συνολική μάζα u")
plt.axhline(mass_list[0], color='k', linestyle='--', label="Αρχική μάζα")
plt.xlabel("Χρόνος t")
plt.ylabel("Μάζα")
plt.title(f"Διατήρηση μάζας, chi={chi}")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

for t_snap, u_snap, c_snap in snapshots:
    plt.figure(figsize=(8,4))
    plt.plot(x, u_snap, label="u(x,t)")
    plt.plot(x, c_snap, label="v(x,t)")
    plt.xlabel("x")
    plt.ylabel("Συγκέντρωση")
    plt.title(f"Λύση την χρονική στιγμή t = {t_snap:.3f}")
    ymin = min(u_snap.min(), c_snap.min())*0.9
    ymax = max(u_snap.max(), c_snap.max())*1.1
    plt.ylim([ymin, ymax])
    plt.legend()
    plt.tight_layout()

```

```
plt.show()  
plt.figure(figsize=(8,5))
```