

Równania chemotaksji i wybuchy rozwiązań

Dariusz WRZOSEK*

*Zakład Równań Fizyki Matematycznej, IMSM, WMIM, Uniwersytet Warszawski

Przykładowym obiektem może być wybrany osobnik jakiejś populacji, a jako stan obiektu można wybrać masę ciała. Innym przykładem obiektu może być planeta, a stanem jej odległość od Słońca.

Na przykład zmiana prędkości, czyli przyspieszenie określające ruch planety, jest w klasycznej mechanice proporcjonalna do siły zależnej od położenia, czyli stanu planety.

W tym przypadku stanem procesu określającego rozmieszczenie komórek w naczyniu w danej chwili jest właśnie funkcja rozkładu gęstości, a proces, który nas interesuje, określa, jak taka funkcja gęstości zmienia się w czasie.

Jako przykłady można podać klucze ptaków wędrownych, ławice ryb czy agregacje komórek bakteryjnych na szalkach Petriego.

o C.S. Patlak, Random walk with persistence and external bias, *Bull. Math. Biophys.* (1953) 15, 311–338.
o E.F. Keller, L.A. Segel. Initiation of Slime Mold Aggregation Viewed as Instability, *J. Theor. Biol.* (1970) 26, 399–415.

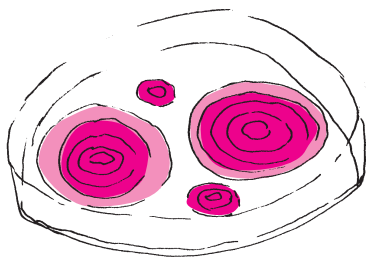
Wszystko to po to, aby się przemieścić, uformować coś na kształt kolumny, której szczyt wypełniony jest zarodnikami. Dalszy los śluzowca łatwo przewidzieć, wyniesione zarodniki rozwiewa wiatr i przenosi je w miejsce bardziej zasobne w pokarm.

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \Delta u(x, t) - \operatorname{div}(\chi u(x, t) \nabla v(x, t)),$$
$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} = \Delta v(x, t) + u(x, t) - v(x, t),$$

gdzie $x \in \Omega$, $t > 0$ to czas, Δ to operator dyfuzji, a $\chi > 0$ parametr określający intensywność chemotaksji. Układ uzupełniamy o warunek początkowy dla $t = 0$ oraz warunek izolacji na brzegu obszaru Ω .

Patrząc z bardzo ogólnego punktu widzenia, całą obserwowalną przyrodę ożywioną i nieożywioną można przedstawić jako wzajemnie powiązane procesy, czyli funkcje, które chwilom przyporządkowują stany różnych obiektów wyrażone poprzez wartości liczbowe. Aby przewidywać przebieg różnych procesów, tworzy się modele matematyczne, które określają w każdej chwili zmiany stanów procesów w zależności od samych stanów. Matematycznie zmianę funkcji opisuje jej pochodna (różniczka), która określa, jak wielkie są przyrosty ewentualnie spadki wartości funkcji w krótkich przedziałach czasu. Równania, których rozwiązaniami są owe procesy przyjmujące jakieś zadane stany początkowe, to równania różniczkowe zwyczajne. W zasadzie wszystkie prawa fizyki można zapisać w postaci układów równań różniczkowych. Wiele modeli biologicznych także daje się przedstawić w postaci układów równań różniczkowych. W tym miejscu trzeba podkreślić, że stany obiektów mogą być tylko w najprostszych przypadkach charakteryzowane za pomocą liczb rzeczywistych. Jest tak, na przykład, gdy obiektem naszych zainteresowań jest populacja komórek znajdujących się w jakimś naczyniu w wodnym roztworze, i interesuje nas, ile komórek znajduje się w jednostce objętości, np. mililitrze wody zaczerpniętej z tego naczynia. Jeśli jednak komórki w naczyniu są rozmieszczone nieregularnie, tak że ich lokalne zagęszczenia w różnych miejscach są różne, to wtedy stan takiej populacji w danej chwili lepiej oddaje funkcja określająca rozkład przestrzenny gęstości komórek w całym naczyniu, a nie liczba, która jest średnią wartością gęstości. By opisać tego typu procesy, stosuje się równania różniczkowe cząstkowe, zawierające pochodne cząstkowe funkcji, które określają, jak bardzo funkcja zmienia się w kierunkach wyznaczonych przez osie układu współrzędnych.

Bardzo wiele modeli matematycznych konstruuje się w celu wyjaśnienia powstawania różnych form i kształtów powstających z żywych organizmów tworzących grupy. Tego typu efekty uważa się za przejawy samoorganizacji, ale nie ma w tym nic metafizycznego i wiele z tych zjawisk można zrozumieć poprzez badanie nieliniowych modeli matematycznych. Jednym z takich modeli, który od ponad 50 lat z różną intensywnością przyciąga uwagę matematyków, jest układ Patlaka–Keller–Segela opisujący zjawisko chemotaksji, powszechnie występujące w przyrodzie. Taksja to ukierunkowany ruch organizmu żywego w kierunku jakiegoś źródła sygnału. Jeśli źródłem jest światło – mówimy o fototaksji, jeśli jakiś związek chemiczny – mamy do czynienia z chemotaksją. Szczególnie interesujący jest przypadek, gdy ów sygnałowy związek chemiczny, zwany atraktantem, ukierunkowuje ruch tych samych indywidualów, które są zdolne do jego emisji. Najbardziej znanym organizmem, u którego zaobserwowano tego typu efekt, jest *Dictostelium discoideum*, śluzowiec, który w warunkach dostatecznej obfitości związków odżywczych żyje w postaci osobnych komórek. Spadek poziomu związków odżywczych uruchamia, oparty o chemotaksję, proces gromadzenia się komórek i tworzenia agregatów zawierających nawet po kilkaset komórek, które po pewnym czasie różnicują się do tego stopnia, że ów agregat komórkowy nabiera cech autonomicznego organizmu przypominającego pełzającego ślimaka. Nas jednak interesuje początek tego złożonego procesu – powstawanie agregatów i tu z pomocą przychodzi model Patlaka–Keller–Segela. Jest to układ dwóch równań różniczkowych cząstkowych, który omówimy, wskazując, co opisują poszczególne jego człony. Pierwsze równanie opisuje zmiany w czasie gęstości komórek u wywołane przez swobodną dyfuzję oraz ruch w kierunku wzrastającej gęstości atraktanta. Drugie równanie opisuje dyfuzję atraktanta v , jego degradację oraz, przede wszystkim, jego emisję przez komórki. Rzecz jasna tam, gdzie jest więcej komórek, tam większa emisja atraktanta, a więc silniejszy sygnał wskazujący kierunek ruchu dla pozostałych komórek.



W tym miejscu zaczyna się matematyka. Dodajmy tylko, że poszukujemy takich par funkcji (u, v) określonych na tym samym obszarze Ω , które są rozwiązaniami tego układu równań oraz spełniają warunek całkowitej izolacji, tzn. przez brzeg zbioru Ω nic nie wpływa ani nie wypływa. (Zatem całkowita masa komórek jest stała i równa masie początkowej.) Zgodnie z oczekiwaniami istnieją takie rozwiązania tego układu, które reprezentują wzrost gęstości komórek w otoczeniu określonych punktów zbioru Ω – to są właśnie te agregaty, których tworzenie chcemy opisać, ale rozwiązania okazują się mieć zdumiewające własności. Jeśli obszar Ω jest odcinkiem, to rozwiązania określone są dla wszystkich czasów $t > 0$ i dążą do stanów równowagi. Jeśli początkowo w okolicy pewnego punktu gęstość komórek była dostatecznie duża, będzie ona wzrastać, aż do utworzenia w tym miejscu wąskiej wysokiej góry o wygładzonym szczycie. Jeśli początkowo nie było dostatecznie dużych skupisk komórek, dyfuzja wygrywa i gęstości u i v dążą do funkcji stałych, niwelując po drodze wszystkie góry i dołki gęstości. Sytuacja zmienia się radykalnie, gdy zbiór Ω jest podzbiorem płaszczyzny lub przestrzeni trójwymiarowej. Można udowodnić, że w przypadku podzbioru płaszczyzny los rozwiązania zależy od masy początkowej komórek. Jeśli jest zbyt duża, to rozwiązanie „żyje” jako funkcja o wartościach rzeczywistych do pewnej chwili wyznaczającej maksymalny czas istnienia T_{MAX} , zależny od danych początkowych. Co się dzieje? Formuje się taka wąska, coraz wyższa góra, ale jej szczyt, początkowo wygładzony, staje się coraz ostrzejszy, gdy czas zbliża się do T_{MAX} , aż przestaje być funkcją o wartościach rzeczywistych. Ale czy to naprawdę koniec? Tak, w pewnym sensie doszliśmy do kresu stosowalności naszego modelu, a efekt, który tu opisujemy, nazywa się nawet wybuchem rozwiązania użytym w tytule tego artykułu. Matematyka jednak przekracza granice naszej wyobraźni, ukazując szerszą klasę rozwiązań, które wprawdzie nie są funkcjami o wartościach rzeczywistych, ale wciąż są funkcjami czasu o wartościach w szerszym zbiorze, zwanym przestrzenią miar. Ale wróćmy do naszego układu równań Patlaka–Keller–Segela. Dlaczego efekt wybuchu rozwiązań tego samego układu równań nie występuje nigdy w przypadku jednowymiarowej dziedziny, ale może występować w przypadku dwóch lub trzech wymiarów? Bez skomplikowanej analizy dostępnej dla specjalistów trudno to wyjaśnić, ale można spekulować, że jest to jakoś związane z tym, że osobliwość będąca przyczyną wybuchu w dwuwymiarowej przestrzeni ma istotnie więcej miejsca do uformowania się niż w przypadku jednowymiarowym.

Miary to też funkcje, ale określone na pewnym zbiorze podzbiorów zbioru Ω . Wtedy jednak definicję rozwiązania układu równań różniczkowych cząstkowych trzeba, oczywiście, przeformułować. To trochę tak jak z szukaniem pierwiastków funkcji kwadratowej o współczynnikach rzeczywistych tylko wśród liczb rzeczywistych. Dobrze wiadomo, że dopiero rozszerzenie koncepcji rozwiązania i przyjęcie pojęcia liczb zespolonych daje możliwość znalezienia wszystkich rozwiązań.



Rozwiązanie zadania M 1538. Każdy ciąg dodatnich liczb całkowitych

$$a = (a_1, a_2, a_3, \dots, a_k),$$

których suma jest równa n , nazwiemy *kompozycją* liczby n .

Zauważmy, że k -elementowe kompozycje liczby n pozostają we wzajemnie jednoznacznej odpowiedniości z $(k - 1)$ -elementowymi podzbiórmi zbioru $\{1, 2, \dots, n - 1\}$. Każdej takiej kompozycji a możemy przypisać zbiór

$$\{a_1, a_1 + a_2, a_1 + a_2 + a_3, \dots, a_1 + a_2 + \dots + a_{k-1}\}$$

i odwrotnie: każdy podzbiór, którego elementy są wypisane w porządku rosnącym, wyznacza w powyższy sposób pewną kompozycję. Zatem liczba wszystkich kompozycji liczby n jest równa liczbie podzbiorów zbioru $(n - 1)$ -elementowego, czyli 2^{n-1} .

Określmy funkcję f , która przyporządkowuje każdej kompozycji a liczby n pewną kompozycję następująco: jeżeli $a_1 = 1$, to

$$f(a) = (a_1 + a_2, a_3, \dots, a_k),$$

a jeżeli $a_1 > 1$, to

$$f(a) = (1, a_1 - 1, a_2, a_3, \dots, a_k).$$

Zauważmy, że $f(f(a)) = a$ dla każdej kompozycji a , więc f zadaje podział zbioru wszystkich kompozycji liczby n na pary. Wprost z definicji f wynika, że kompozycje w obrębie każdej pary różnią się parzystością liczby parzystych wyrazów. To oznacza, że liczba kompozycji zawierających parzystą liczbę liczb parzystych jest równa połowie liczby wszystkich kompozycji, czyli 2^{n-2} .



Rozwiązanie zadania F 934. Gdybyśmy znali masę atmosfery ziemskiej, to znając średnią masę cząsteczkową powietrza, moglibyśmy obliczyć liczbę zawartych w niej cząsteczek. Atmosfera z dołu jest ograniczona powierzchnią Ziemi. Za jej górną granicę przyjmijmy sferę o promieniu $R + h$, gdzie h – wysokość 100 km, na której praktycznie nie występuje opór powietrza. Obliczmy, jak zmienia się przyspieszenie ziemskie w tak określonych granicach atmosfery:

$$g(h) = \frac{GM_z}{(R + h)^2} = \frac{g}{\left(1 + \frac{h}{R}\right)^2},$$

gdzie M_z – masa Ziemi, G – stała grawitacji, g – przyspieszenie ziemskie na powierzchni Ziemi. Korzystając z tego, że $h/R \ll 1$, możemy przyjąć, że w pierwszym przybliżeniu

$$g(h) \approx g \left(1 - 2 \frac{h}{R}\right) \approx g.$$

Przy takim przybliżeniu wartość ciśnienia na powierzchni Ziemi, równa ciężarowi słupa powietrza o wysokości atmosfery, zawierającego masę powietrza m i mającego podstawę jednostkową wynosi $p = mg$. Całkowitą masę atmosfery m_0 znajdujemy, mnożąc m przez powierzchnię Ziemi: $m_0 = 4\pi R^2 p/g$, a stąd znajdujemy liczbę zawartych w atmosferze cząsteczek powietrza

$$N = \frac{m_0}{\mu} N_A = \frac{4\pi R^2 p}{g\mu} N_A,$$

gdzie N_A – liczba Avogadro. Podstawiając dane liczbowe, otrzymujemy $N \approx 10^{44}$.