

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Emergentní struktury v reakčně-difusních
systémech: Gray-Scottův model



Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky

Vedoucí bakalářské práce: **RNDr. Tomáš Fürst, Ph.D.**

Vypracovala: **Libuše Horáčková**

Studijní program: B1101 Matematika

Studijní obor: Matematika a její aplikace

Forma studia: prezenční

Rok odevzdání: 2016

BIBLIOGRAFICKÁ IDENTIFIKACE

Autor: Libuše Horáčková

Název práce: Emergentní struktury v reakčně-difuzních systémech: Gray-Scottův model

Typ práce: Bakalářská práce

Pracoviště: Katedra matematické analýzy a aplikací matematiky

Vedoucí práce: RNDr. Tomáš Füst, Ph.D.

Rok obhajoby práce: 2016

Abstrakt: Práce se zaměřuje na studium Gray-Scottova modelu difundujících a vzájemně reagujících látek. Obsahem práce je odvození rovnic Gray-Scottova modelu, studium stability zjednodušených forem systému a implementace numerického řešení tohoto modelu. Práce je doplněna prostoro-časovými vzory, které vznikají jako řešení Gray-Scottova modelu.

Klíčová slova: Gray-Scottův model, reakčně-difuzní systémy, autokatalýza, stacionarita, stabilita, program, vzory

Počet stran: 57

Počet příloh: 0

Jazyk: Český

BIBLIOGRAPHICAL IDENTIFICATION

Author: Libuše Horáčková

Title: Emergent structures in reaction-diffusion systems: Gray-Scott model

Type of thesis: Bachelor's

Department: Department of Mathematical Analysis and Application of Mathematics

Supervisor: RNDr. Tomáš Fürst, Ph.D.

The year of presentation: 2016

Abstract: The work focuses on the study of the Gray-Scott model of diffusing and interacting agents. The content of the work is to derive equations Gray-Scott model, stability studies of simplified forms and implementations of numerical solution of the model. The work is complemented by spatial-temporal patterns that arise as solutions Gray-Scott model.

Key words: Gray-Scott model, reaction-diffusion systems, autocatalysis, stationarity, stability, program, patterns

Number of pages: 57

Number of appendices: 0

Language: Czech

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracovala samostatně a uvedla všechny použité zdroje.

V Olomouci dne 23. 5. 2016

Libuše Horáčková

Poděkování

Na tomto místě bych ráda poděkovala svému vedoucímu bakalářské práce Tomáši Fürstovi za vstřícný přístup, trpělivost a odbornou pomoc. Ráda bych také poděkovala svému příteli Radku Halfarovi za všeobecnou podporu.

Obsah

1	Úvod	8
2	Důležité pojmy	9
2.1	Emergentní struktury	9
2.2	Reakčně-difuzní systémy	9
2.3	Difuze	10
2.3.1	Rovnice difuze	10
2.3.2	Difuzní koeficient	11
2.3.3	První a druhý Fickův zákon	11
2.4	Rychlost chemické reakce	11
2.4.1	Rychlostní konstanta	11
2.5	Autokatalytická reakce	12
3	Gray-Scottův model	13
3.1	Rovnice Gray-Scottova modelu	13
3.2	Odvození reakčních rovnic Gray-Scottova modelu	16
3.2.1	Rovnice hmotnostní rovnováhy pro otevřený systém	16
3.2.2	Převod do bezrozměrných proměnných	17
3.3	Nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku	18
3.3.1	Stacionární stavy pro nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku	18
3.3.2	Stabilita stacionárních stavů pro nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku	22
3.4	Rozpadající se katalyzátor bez přítoku	25
3.4.1	Stacionární stavy pro systémy s rozkladem katalyzátoru bez přítoku	26
3.4.2	Stabilita stacionárních stavů pro systémy s rozkladem katalyzátoru bez přítoku	29
4	Vybrané typy vzorů vyskytujících se v chemických reakcích	30
4.1	Turingovy vzory	30
4.2	Chemické vlny	31
4.3	Solitony a smyčky	31
5	Realizace Gray-Scottova modelu	33
5.1	Laplaceův operátor	33
5.2	Konvoluční matice	33
5.3	Program: Gray Scott model.m	34
5.3.1	Hlavní program	35
5.3.2	Počáteční podmínky 0	36
5.3.3	Počáteční podmínky 1	37

5.3.4	Počáteční podmínky 2	37
5.3.5	Počáteční podmínky 3	38
5.4	Klasifikace vzorů v Gray-Scottově modelu	39
5.5	Vývoj vzorů v čase	49
	Závěr	53
	Literatura	54

1 Úvod

Reakčně-difuzní systémy mohou být použity k popisu nejrůznějších dějů v přírodě. Popisují například vznik vzorů na srsti zvířat a na schránkách měkkýšů, růst krystalů, tuhnutí látek, morfogenezi, chemické vlny, a mnohé jiné zajímavé děje. Gray-Scottův model je jedním z modelů reakčně difuzních rovnic generujících tyto rozmanité vzory.

Gray-Scottův model je založen na dvou matematických rovnicích modelujících danou (dále uvedenou) chemickou reakci. Mezi významné práce věnující se této problematice patří články [1], [2], o základním rozdělení vzorů vznikajících tímto modelem pak pojednává například článek [3].

Cílem této bakalářské práce je popsání Gray-Scottova modelu difundujících a vzájemně reagujících látek, odvození rovnic tohoto modelu, studium stability zjednodušených forem systému a implementace numerického řešení tohoto modelu.

2 Důležité pojmy

2.1 Emergentní struktury

Emergence je charakteristika systému, kdy vzájemně propojené části vykazují jednu nebo více vlastností, které nejsou jasně viditelné z vlastností jednotlivých jeho částí [4]. „Emergentní struktury bývají obtížně předvídatelné a představují jakýsi „fázový přechod“, po kterém se systém zařídí zcela novým, neočekávaným způsobem“ [6]. Emergentní chování vykazují například komplexní systémy [4].

Příkladem emergentních struktur jsou například duny a vrásky vznikající interakcí větru s pískem. Dalším příkladem emergentních vlastností jsou fyzikální veličiny jako tlak nebo teplota, kterým mají smysl jen pro velká množství molekul. [5]

„Svět, který vnímáme, vzniká v každém stadiu „emergencí“ – to jest procesem, v němž značné agregace hmoty mohou spontánně vyvinout vlastnosti, jež u jejich jednodušších složek nemají smysl. – Živá buňka není ještě tygr a jednotlivý atom zlata není ani žlutý ani lesklý.“ napsal fyzik a nositel Nobelovy ceny Philip W. Anderson. [5]

2.2 Reakčně-difuzní systémy

Reakčně-difuzní systémy jsou systémy, ve kterých probíhají chemické reakce i difuzní procesy. Pokud je systém tvořen dvěma složkami, můžeme takovýto systém popsat následujícími rovnicemi:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \nabla^2 a + f(a, b), \quad (1)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_b \nabla^2 b + g(a, b), \quad (2)$$

kde a , b jsou koncentrace jednotlivých složek, podílejících se na reakci, D_a , D_b jsou součinitelé difuze složek a a b , výrazy $f(a, b)$ a $g(a, b)$ jsou typicky nelineární

a vyjadřují přírůstek případně úbytek jednotlivých složek a a b , což se děje v důsledku probíhající chemické reakce.

Touto soustavou rovnic lze modelovat kromě chemicko-difúzních procesů i mnohé biologické procesy, například morfogenezi, vznik vzorů na tělech živočichů (např. skořápka měkkýšů), vznik srdečních arytmií, přenos vzruchu a podobně.

Prvním, kdo dokázal, že v původně homogenním systému, ve kterém probíhají chemické reakce a difúzní procesy, může vzniknout stacionární prostorová struktura (časově stacionární a prostorově periodické rozložení koncentrací) byl britský matematik, logik, kryptoanalytik a zakladatel moderní informatiky Alan Turing. [7]

2.3 Difuze

Difuze je pohyb částic vyvolaný gradientem (např. teplotním nebo koncentračním). V podstatě je to samovolné pronikání částic jedné látky mezi částice druhé látky, pokud jsou tyto látky ve vzájemném styku. Příčinou difuze je rozdílná hustota molekul v různých místech v prostoru [8]. Částice se pohybují z míst s vyšší koncentrací do míst s koncentrací nižší a čím větší je gradient koncentrace, tím větší je difúzní tok [9].

2.3.1 Rovnice difuze

Difúzní rovnice je tvaru:

$$\frac{\partial a}{\partial t} - D\nabla^2 a = \sigma, \quad (3)$$

kde ∇^2 je Laplaceův operátor, D je difúzní koeficient [m^2s^{-1}], σ značí hustotu zdrojů. Druhý člen v rovnici označuje difúzní tok Φ , tzn. množství veličiny a které projde elementární oblastí za jednotku času. [10]

2.3.2 Difuzní koeficient

Difuzní koeficient D je konstantou úměrnosti mezi difuzním tokem a koncentračním gradientem. Je roven látkovému množství difundující složky, které projde jednotkovou plochou za jednotku času při jednotkovém koncentračním gradientu. Má jednotku m^2s^{-1} . [11]

2.3.3 První a druhý Fickův zákon

První Fickův zákon:

Hustota difuzního toku J je úměrná záporně vzatému gradientu koncentrace:

$$J = -D\nabla a, \quad (4)$$

kde a značí koncentraci látky A . [12]

Druhý Fickův zákon:

Mění-li se gradient koncentrace s časem, je časová změna koncentrace dána vztahem:

$$\frac{da}{dt} = D\Delta a \quad (5)$$

pro konstantní D , tedy časová změna koncentrace je úměrná změně gradientu koncentrace. [13], [12]

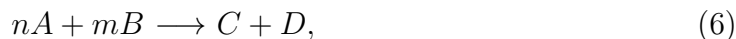
2.4 Rychlost chemické reakce

2.4.1 Rychlostní konstanta

Rychlostní konstanta k je vztah mezi okamžitými koncentracemi reagujících látek a rychlostí reakce. Závisí na reagujících látkách a na podmínkách experimentu. Velký vliv na změnu rychlostní konstanty má teplota, s rostoucí teplotou se hodnota rychlostní konstanty zvětšuje. Dalšími faktory ovlivňujícími hodnotu rychlostní konstanty jsou například: použité rozpouštědlo, tlak nebo přítomnost

katalyzátoru. (Katalyzátory jsou látky, které se vlivem reakce nemění, většinou se používají k urychlení chemické reakce, tento proces se nazývá katalýza.) [14]

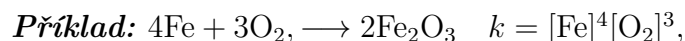
Rychlost chemické reakce vyjadřuje rychlostní rovnice. Pro chemickou rovnici:



kde m a n jsou stechiometrické koeficienty, A , B reaktanty a C , D produkty, má rychlostní rovnice tvar:

$$\frac{dc}{dt} = k(T)a^{n'}b^{m'}, \quad (7)$$

kde a , b , c značí koncentrace látek A , B a C , $k(T)$ je rychlostní konstanta závislá na teplotě a n' a m' značí řád chemické reakce. U jednoduchých reakcí se stechiometrické koeficienty m a n shodují s hodnotami reakčních řádů n' a m' . [15]



kde hranaté závorky značí koncentrace daných látek.

2.5 Autokatalytická reakce

Autokatalytická reakce je reakce, při které je katalyzátorem jeden z produktů reakce. [16]

- **Kvadratická autokatalýza:**

Kvadratickou autokatalýzu vyjadřuje tato chemická rovnice:



Vyjadřuje reakci, při které z jedné molekuly A a jedné molekuly B vznikají 2 molekuly B .

- **Kubická autokatalýza:**

Kubickou autokatalýzu vyjadřuje následující chemická rovnice:



Vyjadřuje reakci, při které z jedné molekuly A ze dvou molekul B vznikají 3 molekuly B .

[1]

3 Gray-Scottův model

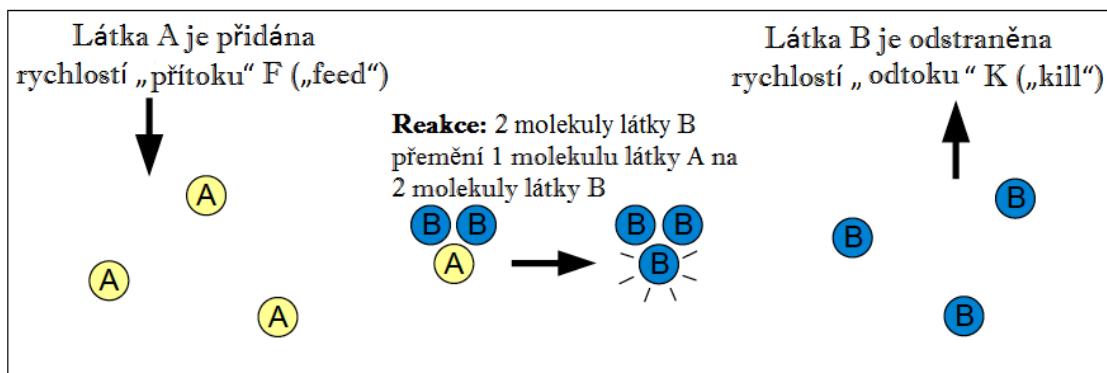
3.1 Rovnice Gray-Scottova modelu

Gray-Scottův model je systém reakčně difuzních rovnic vycházející z následujících chemických reakcí:



Tyto dvě reakce se vyskytující v různých poměrech v celém prostoru a závisí na relativní koncentraci v každém bodě.

Průběh reakce je zobrazen na následujícím obrázku(1):



Obr. 1: Popis chemické reakce. [17]

Celkové chování systému je popsáno následujícími rovnicemi:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \nabla^2 a - ab^2 + F(1 - a), \quad (12)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_b \nabla^2 b + ab^2 - (F + K)b, \quad (13)$$

kde $a(x, t)$ a $b(x, t)$ jsou koncentrace látek A a B v bodě x a v čase t , D_a a D_b jsou difuzní koeficienty, F a K jsou konstanty.

Každá z těchto rovnic má tři členy, tedy tři možné zdroje zvýšení a snížení pro každou z těchto dvou chemických látek. První rovnice (12) vyjadřuje rychlost s jakou se mění koncentrace látky A , druhá rovnice (13) vyjadřuje rychlost s jakou se mění koncentrace látky B .

První člen na pravé straně rovnice, $D_a \nabla^2 a$, označujeme jako difuzní člen. Laplaceův ∇^2 zde vyjadřuje místní rozdíly v gradientu. Koncentrace látky A se zvyšuje spolu s Laplaceovým. Pokud je množství látky A v sousedních oblastech vyšší, koncentrace látky A v daném místě se zvýší. Pokud mají okolní oblasti nižší koncentrace látky A , Laplaceův bude negativní, difuzní člen je tedy negativní a klesá. (Pro druhou rovnici analogicky.) Pokud bychom v rovnici (12) zanedbali druhý a třetí člen, získali bychom systém, který je ekvivalentní s rovnicí vedení tepla, tedy $\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \nabla^2 a$.

Druhý člen na pravé straně rovnic ab^2 vyjadřuje reakční rychlost. První reakce (10) vyžaduje jeden mol látky A a dva moly látky B . V tomto členu se nevyskytuje žádná konstanta závislá na reakčních podmínkách, protože rovnice byly de-dimenzionalizovány.

Třetí člen na pravé straně rovnice (12) $F(1 - a)$ vyjadřuje doplňování látky A . Jelikož reakce spotřebovává látku A a vytváří látku B , všechny moly látky A budou nakonec spotřebovány (pokud bude existovat způsob, jak je doplnit). Koncentrace látky A se zvyšuje rychlostí proporcionální k rozdílu mezi současnou úrovní a 1. Konstanta F je rychlost „přítoku“ a představuje rychlost doplňování látky A . [18]

Třetí člen na pravé straně rovnice (13) $(F + K)b$ vyjadřuje odčerpávání. Je úměrný součtu F a K a koncentraci látky b , která je momentálně k dispozici.

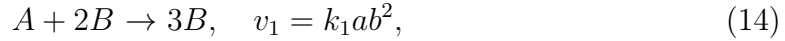
Chování na rozhraních mezi látkami A a B lze popsat následujícím příkladem připomínající mitózu: Černá skvrna na obrázku (2) reprezentuje látku B , látka A je přítomná všude okolo ní. Na konvexních hranicích skvrny (konvexní vůči skvrně) je k dispozici více látky A difundující dovnitř skvrny a „krmící“ látku B , tzn. koncentrace látky B roste a hrany skvrny se rozšiřují ven. Na konkávních hranicích (konkávní vůči skvrně) je k dispozici méně látky A difundující do látky B . B se ztenčuje difundováním do okolního prostoru a zaniká. Časem se tedy stane, že se skvrna rozdělí na dvě části, což připomíná buňku podstupující mitózu. (Takovýto proces nastává například při $F=0,0367$ a $K=0,0649$.) [17]



Obr. 2: Skvrna rozdělující se na dvě části. [17]

3.2 Odvození reakčních rovnic Gray-Scottova modelu

Máme dán následující systém chemických rovnic:



kde A , B , C značí jednotlivé látky účastníci se chemické reakce, k_1 a k_2 značí rychlostní konstanty a v_1 a v_2 rychlosti daných chemických reakcí.

Odvození je provedeno pro systém bez přítoku látky B ($b_0 = 0$) a s nulovým rozpadem autokatalyzátoru (látky B) na C , tedy $c = 0$, (c označuje koncentraci produktu C). (Pokud se žádné B nerozpadne na C , bude koncentrace c produktu C nulová.) Za prostor v němž reakce probíhá se považuje dokonale promíchávaný reaktor, tedy $D\nabla^2 a = 0$ a $D\nabla^2 b = 0$. [1]

3.2.1 Rovnice hmotnostní rovnováhy pro otevřený systém

Otevřený systém, je takový systém, který si s okolím může vyměňovat energii i částice. [19] (V okolí předpokládáme konstantní koncentraci.)

Pro kinetický mechanismus rovnic (14) a (15) můžeme zapsat dvě rovnice hmotnostní rovnováhy pro koncentrace látek A a B:

$$\frac{da}{dt} = -k_1 ab^2 + k_{od}(a_0 - a) = \frac{ab^2}{a_0^2 t_{ch}} + \frac{a_0 - a}{t_{od}}, \quad (16)$$

$$\frac{db}{dt} = k_1 ab^2 - k_2 b + k_{od}(b_0 - b) = \frac{ab^2}{a_0^2 t_{ch}} - \frac{b}{t_z} + \frac{b_0 - b}{t_{od}}, \quad (17)$$

kde $a_0 = a(0)$, $b_0 = b(0)$ a kde $k_{od} = \frac{1}{t_{od}}$ je inverze od střední hodnoty odstraňovacího času t_{od} . Odstraňovací čas k_{od} je průměrný čas, který stráví částice v

systemu, tedy za jak dlouho se částice ze systému odstraní. t_{ch} značí charakteristický chemický čas, ten je určen vztahem $t_{ch} = \frac{1}{k_1 a_0^2}$. Další důležitý čas vyskytující se v těchto rovnicích je čas charakterizující životnost katalyzátoru, je určen vztahem $t_z = \frac{1}{k_2}$. Pokud je rozklad katalyzátoru stabilní je pomalý a má vysoké hodnoty času t_z , nestabilní katalýza je charakterizována krátkými časy životnosti.

3.2.2 Převod do bezrozměrných proměnných

Pokud máme systém bez přítoku a bez rozpadu katalyzátoru (tzn. $b_0 = 0$ a $c = 0$), získáme bezrozměrnou koncentraci reaktantu a katalyzátoru tak, že rovnici (??) vydělíme koncentrací a_0 , získáme tedy: $1 = \frac{a}{a_0} + \frac{b}{a_0}$.

Rovnice (16) a (17) lze tedy přepočítat následujícími bezrozměrnými proměnnými:

- $\alpha = \frac{a}{a_0}$ (bezrozměrná koncentrace reaktantu),
- $\beta = \frac{b}{a_0}$ (bezrozměrná koncentrace katalyzátoru),
- $\gamma = \frac{a_0 - a}{a_0}$ (bezrozměrné rozšíření přeměny),
- $\beta_0 = \frac{b_0}{a_0}$ (bezrozměrná vstupní koncentrace katalyzátoru),
- $\tau_{od} = \frac{t_{od}}{t_{ch}}$ (bezrozměrný odstraňovací čas),
- $\tau_z = \frac{t_z}{t_{ch}}$ (bezrozměrná životnost katalyzátoru),
- $\tau = \frac{t}{t_{ch}}$ (bezrozměrný čas).

Získáme pak tyto rovnice:

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = -\alpha\beta^2 + \frac{1 - \alpha}{\tau_{od}} \quad (18)$$

$$\frac{d\beta}{d\tau} = \alpha\beta^2 - \frac{\beta}{\tau_z} + \frac{\beta_0 - \beta}{\tau_{od}}. \quad (19)$$

Spojitosť mezi α a γ lze jednoduše vyjádřit tímto vztahem:

$$\alpha = 1 - \gamma \quad (20)$$

[1]

Přeznačením $F = \frac{1}{\tau_{od}}$, $K = \frac{1}{\tau_z}$ přejdou tyto rovnice, při nulové difuzi a nulové vstupní koncentraci autokatalyzátoru B ($\beta_0 = 0$) na rovnice (12) (13).

3.3 Nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku

Pokud je katalyzátor perfektně stabilní, tzn. limitně se přibližuje k perfektní stabilitě ($k_2 \rightarrow 0$; $t_z \rightarrow \infty$), výše zmíněný systém rovnic (18) a (19) se zredukuje na systém s jedinou proměnnou:

$$\beta = 1 - \alpha + \beta_0 = \gamma + \beta_0 \quad (21)$$

V tomto případě tedy můžeme říci, že pokud je přítok nulový ($\beta_0 = 0$), platí: $\beta = \gamma$. V obecném případě, kdy $k_2 > 0$ již γ a β nejsou (pro $\beta_0 = 0$) stejné, a dokonce nejsou ani v přímém vztahu.

Vyšetření extrémních situací pro nekonečně stabilní katalyzátor, kde lze využít zjednodušení (21), poskytuje užitečné poznatky pro pochopení obecnějších případů. [1]

3.3.1 Stacionární stavy pro nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku

Pro systémy, ve kterých se katalyzátor B nerozpadá ($\tau_z \rightarrow \infty$) a nepřitéká ($\beta_0 = 0$), lze k získání rovnice pro hmotnostní rovnováhu využít vztah (21). Použitím bezrozměrného rozšíření přeměny γ , získáme vztah:

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = (1 - \gamma)\gamma^2 - \frac{\gamma}{\tau_{od}} \quad (22)$$

Poznámka: Za těchto podmínek platí $\frac{d\gamma}{d\tau} = -\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{d\beta}{d\tau}$. [1]

Odvození rovnice hmotnostní rovnováhy pro nekonečně stabilní katalyzátor:

Využije se zjednodušení pro nekonečně stabilní katalyzátor, tedy aplikováním vztahu pro γ (20) a β (21) na rovnice (18) a (19) získáme:

$$-\frac{d\gamma}{d\tau} = -(1-\gamma)(\gamma+\beta_0)^2 + \frac{\gamma}{\tau_{od}} \quad (23)$$

$$\frac{d(\gamma+\beta_0)}{d\tau} = (1-\gamma)(\gamma+\beta_0)^2 - \frac{\gamma+\beta_0}{\tau_z} + \frac{\beta_0-\gamma-\beta_0}{\tau_{od}} \quad (24)$$

Dále pak využitím předpokladů $\beta_0 = 0$, $\tau_z \rightarrow \infty$ a následným upravením obou rovnic získáme vztah:

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = (1-\gamma)\gamma^2 - \frac{\gamma}{\tau_{od}} \quad (25)$$

Získali jsme tedy vztah (22).

Stacionární stavy hledáme, protože chceme, zjistit při jakých podmínkách budou koncentrace látek A a B v rovnováze. K nalezení stacionárních stavů potřebujeme, aby v rovnici (22) platilo $\frac{d\gamma}{d\tau} = 0$, následným upravením získáme vztah:

$$\gamma \left(\gamma^2 - \gamma + \frac{1}{\tau_{od}} \right) = 0. \quad (26)$$

Nalezením kořenů této rovnice získáme tři stacionární stavy:

$$\gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\tau_{od}}}, \quad \gamma_3 = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\tau_{od}}}, \quad (27)$$

tedy $0 < \gamma_2 < \frac{1}{2}$ a $\frac{1}{2} < \gamma_3 < 1$. Dvojnásobné řešení získáme ve speciálním případě, kdy bude platit $\gamma_2 = \gamma_3$, to nastane pro speciální hodnotu $\tau_{od} = 4$. [1]

Odvození:

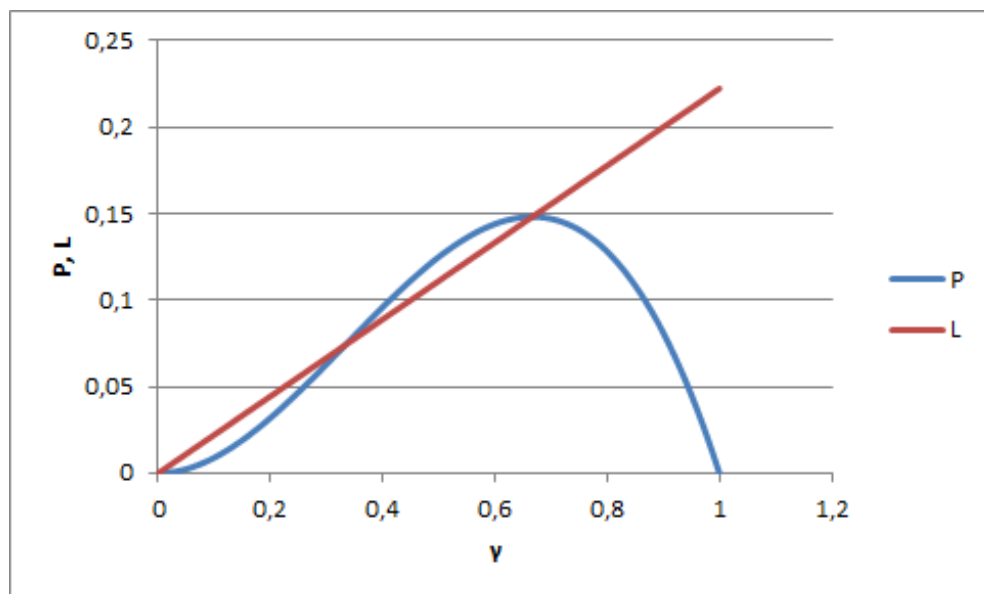
$$\gamma_2 = \gamma_3 \implies \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\tau_{od}}} = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\tau_{od}}} \implies \frac{1}{4} - \frac{1}{\tau_{od}} = 0 \implies \tau_{od} = 4$$

Pro jakoukoliv menší hodnotu τ_{od} , γ_2 a γ_3 zmizí a systém skočí do jediného zbývajících průsečíku γ_1 , který odpovídá stavu, kdy neprobíhají žádné reakce. Tento skok se označuje jako „vyhynutí“.

Graficky získáme stacionární stavy tak, že rovnici (22) ve stacionárním stavu upravíme do tvaru:

$$(1 - \gamma)\gamma^2 = \frac{\gamma}{\tau_{od}} \quad (28)$$

Výraz $\frac{\gamma}{\tau_{od}}$ označíme L a výraz $(1 - \gamma)\gamma^2$ označíme P. Stacionární body získáme vykreslením těchto křivek v závislosti na γ , viz graf (3). Hodnotu γ pro kterou nastává stacionární stav označíme γ_{SS} .



Obr. 3: Diagrama toku: Graf závislosti výrazů P a L na rozsahu přeměny γ .

Každá fyzikálně reálná chemická reakce může probíhat pouze konečnou rychlostí. Maximální reakční rychlost určíme pomocí křivky P. Maximální hodnota $P_{max} = \frac{4}{27}$ odpovídá skutečné maximální reakční rychlosti:

$$-\left(\frac{da}{dt}\right) = \frac{4}{27}k_1a_0^3 \quad (29)$$

[1]

Důkaz:

Nalezení maxima pro křivku P:

$$\frac{dP}{d\gamma} = 0 \implies \frac{d((1-\gamma)\gamma^2)}{d\gamma} = 2\gamma - 3\gamma^2 = \gamma(2 - 3\gamma) = 0$$

$$\gamma_1 = 0, \quad \gamma_2 = \frac{2}{3}$$

$$\gamma_{max} = \frac{2}{3} \implies \alpha = 1 - \frac{2}{3} \implies \alpha = \frac{1}{3}$$

$$\alpha = \frac{a}{a_0} \implies a = a_0\alpha \implies a = \frac{1}{3}a_0$$

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = (1 - \gamma)\gamma^2 \implies -\frac{d\alpha}{d\tau} = \alpha(1 - \alpha)^2 \implies -\frac{d\left(\frac{a}{a_0}\right)}{d\left(\frac{t}{t_{ch}}\right)} = \left(\frac{a}{a_0}\right) \left(1 - \frac{a}{a_0}\right)^2$$

$$\implies -\frac{da}{dt} = \left(\frac{a_0}{t_{ch}}\right) \left(\frac{a}{a_0}\right) \left(1 - \frac{a}{a_0}\right)^2 \implies -\frac{da}{dt} = \frac{1}{t_{ch}} \left(a - \frac{2a^2}{a_0} + \frac{a^3}{a_0^2}\right)$$

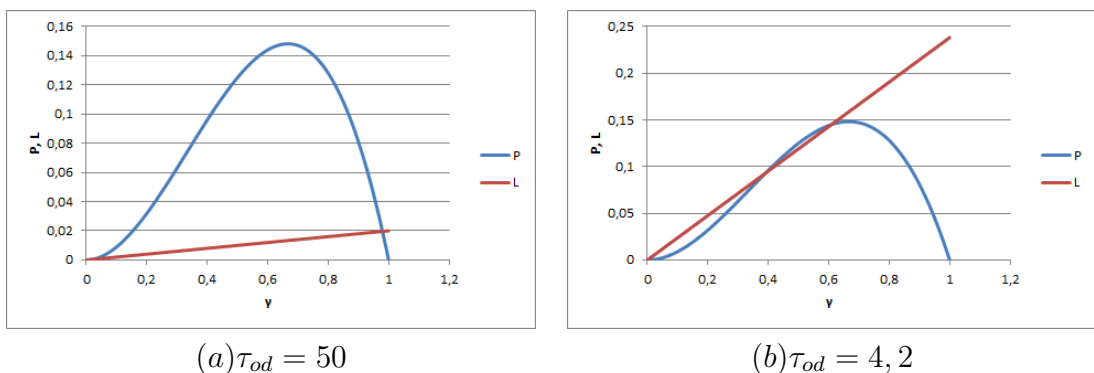
$$\implies -\frac{da}{dt} = \frac{1}{t_{ch}} \left(\frac{1}{3}a_0 - \frac{2\left(\frac{1}{3}a_0\right)^2}{a_0} + \frac{\left(\frac{1}{3}a_0\right)^3}{a_0^2}\right) \implies -\frac{da}{dt} = k_1a_0^2 \left(\frac{1}{3}a_0 - \frac{2}{9}a_0 + \frac{1}{27}a_0\right)$$

$$\implies \frac{da}{dt} = \frac{4}{27}k_1a_0^3$$

□

P je kubická křivka procházející skrz počátek $\gamma_{SS} = 0$ a padající zpátky k nule ve stavu kompletní přeměny $\gamma_{SS} = 1$. L je přímka procházející počátkem s gradientem $\frac{1}{t_{od}}$. Pro toky s pomalou rychlostí (dlouhé odstraňovací časy) je L relativně ploché, pro vysoké toky je L příkré. (viz (3.3.1))

Stacionární stavy pro reakci nastávají, jakmile jsou rychlosti P a L v rovnováze a $\frac{d\gamma}{d\tau} = 0$. Na diagramu toku (3) tyto podmínky reprezentují průniky křivek



Obr. 4: Diagramy toku: (a) pro velký odstraňovací čas, (b) pro malý odstraňovací čas

P a L. Existují zde tři možné průniky křivek P a L, tedy tři možné stacionární stavy ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$). (Pokud má systém několik možných stacionárních stavů, nazýváme jej multistabilní.) Nejpomalejší průsečík je v počátku $\gamma_1 = 0$, neprobíhají zde žádné reakce. [1]

Příklady:

Př.1: Pro velký odstraňovací čas: $\tau_{od} = 50$: $\gamma_1 = 0, \gamma_2 \approx 0,02, \gamma_3 \approx 0,98$ (viz obrázek 3.3.1(a))

Př.2: Pro malý odstraňovací čas: $\tau_{od} = 4,2$: $\gamma_1 = 0, \gamma_2 \approx 0,39, \gamma_3 \approx 0,61$ (viz obrázek 3.3.1(b))

3.3.2 Stabilita stacionárních stavů pro nekonečně stabilní katalyzátor bez přítoku

Stabilitu daného stacionárního stavu lze testovat pozorováním, zda malé perturbace $\Delta\gamma = \gamma - \gamma_{SS}$ rostou (nestabilní stacionární stav) nebo klesají k nule (stabilní stacionární stav). (γ značí aktuální hodnotu přeměny a γ_{SS} hodnotu γ pro stabilní stacionární stav.) [1]

Systém je stabilní, pokud je splněna podmínka stability:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Delta\gamma = 0 \quad (30)$$

[20]

Časová závislost $\Delta\gamma$ je dána Taylorovým rozvojem:

$$\frac{d\Delta\gamma}{d\tau} = \lambda\Delta\gamma + \mu(\Delta\gamma)^2 + \dots, \quad (31)$$

kde členy Taylorova rozvoje λ a μ odrážejí závislost $\frac{d\gamma}{d\tau}$ na rozsahu přeměny: $\lambda = \frac{\partial}{\partial\gamma} \left(\frac{d\gamma}{d\tau} \right)$, $\mu = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} \left(\frac{d\gamma}{d\tau} \right)$.

Pokud je počáteční perturbace $\Delta\gamma_0$ velmi malá, takže:

$$|\mu(\Delta\gamma_0)^2| \ll |\lambda\Delta\gamma_0|, \quad (32)$$

posunutí se mění exponenciálně v závislosti na

$$\Delta\gamma(\tau) = \Delta\gamma_0 e^{-\frac{\tau}{\tau_r}}, \quad (33)$$

kde $\tau_r = -\frac{1}{\lambda}$ je charakteristický relaxační čas. Čas potřebný pro $\Delta\gamma$ k rozpadu či růstu o $\frac{1}{e}$ své počáteční hodnoty. Pro záporné λ je τ_r pozitivní a perturbace se rozpadají s rostoucím τ . Pro kladné hodnoty λ , perturbace exponenciálně rostou.

[1]

Odvození:

Pokud platí vztah (33) budeme brát v úvahu pouze první poruchový člen rovnice (32). Zintegrováním vztahu $\frac{d\Delta\gamma}{d\tau} = \lambda\Delta\gamma$ získáme

$$\ln \left| \frac{\Delta\gamma}{\Delta\gamma_0} \right| = \lambda(\tau - \tau_0) \implies \Delta\gamma = \Delta\gamma_0 e^{\lambda(\tau - \tau_0)}$$

využitím $\tau_0 = 0$ a vztahu pro charakteristický relaxační čas získáme

$$\Delta\gamma = \Delta\gamma_0 e^{-\frac{\tau}{\tau_r}}.$$

Pokud $\beta_0 = 0$, jsou relaxační časy určeny vztahy:

$$\tau_r = -\tau_{od} \text{ pro } \gamma_1 \quad (34)$$

$$\tau_r = \frac{1}{\gamma_2}(1 - 2\gamma_2) \text{ pro } \gamma_2 \quad (35)$$

$$\tau_r = \frac{1}{\gamma_3}(1 - 2\gamma_3) \text{ pro } \gamma_3 \quad (36)$$

Jakmile se blížíme k zániku tečnosti, dostáváme $\gamma_2 \rightarrow \gamma_3 \rightarrow \frac{1}{2}$. Pro tyto hodnoty dosahují relaxační časy nekonečna s λ blížícím se k nule. Ve skutečnosti však nekonečných hodnot nelze dosáhnout, přestože se τ_r prodlužují (tj. perturbace se rozpadají pomaleji). Jakmile λ dosáhne nuly, nerovnosti (32) nelze dosáhnout, bez ohledu na to, jak malé $\Delta\gamma_0$ se vytvoří. Musí se pak zvážit oba výrazy na pravé straně rovnice (31).

Pro $\lambda = 0$ a $\mu = -\frac{1}{2}$ (pro $\gamma_2 = \gamma_3 = \frac{1}{2}$), nahradíme rovnici (33) následující rovnicí:

$$\Delta\gamma = \Delta\gamma_0 \frac{1}{(1 + \frac{1}{2}\Delta\gamma_0\tau)} \quad (37)$$

[1]

Odvození:

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta\gamma}{d\tau} &= \lambda\Delta\gamma + \mu(\Delta\gamma)^2, \text{ jestliže } \lambda = 0 \text{ a } \mu = -\frac{1}{2} \implies \frac{d\Delta\gamma}{d\tau} = -\frac{1}{2}(\Delta\gamma)^2 \implies \int \frac{d\Delta\gamma}{(\Delta\gamma)^2} = \\ &= -\int \frac{1}{2}d\tau \implies -\frac{1}{(\Delta\gamma)} + \frac{1}{(\Delta\gamma_0)} = -\frac{\tau}{2} + \frac{\tau_0}{2}, \text{ položením } \tau_0 = 0 \text{ a následným upra-} \\ &\text{vením získáme vztah } \implies \Delta\gamma = \Delta\gamma_0 \frac{1}{(1 + \frac{1}{2}\Delta\gamma_0\tau)} \end{aligned}$$

Perturbace již tedy nezanikají exponenciálně. Časová závislost závisí na velikosti a znaménku počáteční perturbace. Perturbace, pro něž je $\Delta\gamma_0$ pozitivní, zanikají, perturbace pro které je $\Delta\gamma_0$ negativní, divergují ze stacionárního stavu.

Pro stabilní systémy ($\Delta\gamma_0 > 0$) lze definovat relaxační čas τ_r , jako čas potřebný pro $\Delta\gamma$ k rozkladu na $\frac{1}{e}$ z $\Delta\gamma_0$.

To dává:

$$\tau_r = \frac{2(e-1)}{\Delta\gamma_0} \quad (38)$$

[1]

Odvození:

Chceme aby platilo $\Delta\gamma = \Delta\gamma_0 \frac{1}{e}$, využitím vztahu (37), ve kterém položíme $(1 + \frac{1}{2}\Delta\gamma_0\tau) = e$ a následným vyjádřením τ získáme vztah: $\tau = \tau_r = \frac{2(e-1)}{\Delta\gamma_0}$.

Obecně platí, že čas, který potřebuje perturbace ke snížení z $\frac{\Delta\gamma_0}{e^n}$ na $\frac{\Delta\gamma_0}{e^{n+1}}$ je dán vztahem:

$$\tau_{r(n+1)} = \tau_r e^n \quad (39)$$

To znamená, že relaxační čas se v každém stádiu prodlužuje stejně, jako se perturbace rozpadá. Tato dlouhá životnost přechodových jevů se nazývá „zpomalování“.

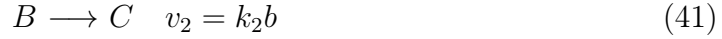
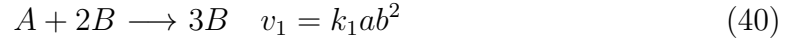
[1]

3.4 Rozpadající se katalyzátor bez přítoku

Systémy v nichž nastává rozpad katalyzátoru, jsou systémy v nichž má katalyzátor konečnou životnost (τ_z je konečné číslo). Konečná životnost katalyzátoru

vytváří důležité změny ve stacionárních stavech a jejich stabilitě.

Tento případ popisují následující rovnice:



Vztah (41) popisuje rozpad katalyzátoru. Koncentrace jednotlivých látek jsou spojeny následujícím vztahem:

$$a_0 + b_0 + c_0 = a + b + c \quad (42)$$

(suma koncentrací v přítoku = suma koncentrací v reaktoru). Budeme uvažovat pouze situace, ve kterých není do přítoku přidán žádný konečně stabilní produkt C, tedy $c_0 = 0$. [1]

3.4.1 Stacionární stavy pro systémy s rozkladem katalyzátoru bez přítoku

Stacionární stav nastává v případě, kdy pro rychlosti změn platí:

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{d\beta}{d\tau} = 0 \quad (43)$$

Pokud přidáme rovnice (18) a (19), získáme vztah mezi bezrozměrnými koncentracemi látek A a B ve stacionárním stavu α_{SS} a β_{SS} . Pronulovou vstupní koncentraci katalyzátoru ($\beta_0 = 0$), tedy platí:

$$\beta_{SS} = \frac{1 - \alpha_{SS}}{1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}} = \frac{\gamma_{SS}}{1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}} \quad (44)$$

[1]

Odvození:

Aplikováním vztahu (43) na rovnice (18) a (19), a jejich následným sečtením získáme:

$$-\frac{\beta_{SS}}{\tau_z} + \frac{1-\alpha_{SS}}{\tau_{od}} + \frac{\beta_0-\beta_{SS}}{\tau_{od}} = 0 \implies \frac{\beta_{SS}}{\tau_z} + \frac{\alpha_{SS}-1-\beta_0+\beta_{SS}}{\tau_{od}} = 0 \text{ a využitím } \beta_0 = 0 \implies \beta_{SS}\left(\frac{1}{\tau_z} + \frac{1}{\tau_{od}}\right) = \frac{1-\alpha_{SS}}{\tau_{od}} \text{ a následným upravením } \implies \beta_{SS} = \frac{1-\alpha_{SS}}{1+\frac{\tau_{od}}{\tau_z}}$$

γ_{SS} je zde redukován redukčním faktorem $1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}$. Vyjadřuje to skutečnost, že nějaké B vytvořené z A bylo následně přeměněno na C . S rostoucím odstraňovacím časem, roste i podíl $\frac{\tau_{od}}{\tau_z}$, a tedy i pravděpodobnost přeměny dané molekuly na finální produkt C .

Dosazením takto získaného β_{SS} do rovnic (18) a (19) získáme:

$$\alpha_{SS}(1 - \alpha_{SS})^2 = \frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}\right)^2 (1 - \alpha_{SS}) \quad (45)$$

$$(1 - \gamma_{SS})\gamma_{SS}^2 = \frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}\right)^2 \gamma_{SS} \quad (46)$$

Zde je gradient pro výraz toku L komplikovanější funkcí odstraňovacího času:

$$\frac{dL}{d\gamma} = \frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}\right)^2 \quad (47)$$

Při krátkých odstraňovacích časech, tedy při nejvyšších rychlostech toku, lze zanedbat výraz $\frac{\tau_{od}}{\tau_z}$, jelikož je malý ve srovnání s jedničkou. Pak je gradient úměrný $\frac{1}{\tau_{od}}$ a průtoková linie se zkracováním odstraňovacího času stává plošší.

Při nejdelších odstraňovacích časech, tedy pomalejších rychlostech toku, je $\frac{\tau_{od}}{\tau_z}$ mnohem větší, než jedna, takže gradient se stává úměrný τ_{od} . Linie toku se zvyšováním odstraňovacího času stává strmější .

Křivka L má minimální sklon (tzn. leží mezi extrémně krátkými nebo velmi dlouhými odstraňovacími časy), když je střední hodnota odstraňovacího času rovna charakteristické životnosti (neboli poloviční životnosti) katalyzátoru, tj.

když $\tau_{od} = \tau_z$. Minimální gradient je dán vztahem:

$$\left(\frac{dL}{d\gamma}\right)_{min} = \frac{4}{\tau_z} \quad (48)$$

[1]

Odvození:

Gradient je nejmenší, když platí: $\tau_{od} = \tau_z \implies \frac{dL}{d\gamma} = \frac{1}{\tau_z} \left(1 + \frac{\tau_z}{\tau_z}\right)^2 \implies \frac{dL}{d\gamma} = \frac{4}{\tau_z}$

Systémy s relativně nestabilním katalyzátorem jsou charakterizovány nízkými hodnotami τ_z . Pro tyto hodnoty je minimální gradient L, popsáný vztahem (48), relativně vysoký, takže linie toku je vždy strmá. Pokud L leží nad linií tečny, která má gradient $\frac{1}{4}$, P a L nemohou mít žádné jiné průsečíky než v počátku. [1]

Odvození:

Zderivováním výrazu na levé straně rovnice (46) získáme vztah:

$$\frac{dP}{d\gamma} = -3\gamma_{SS}^2 + 2\gamma_{SS}, \text{ do kterého dosadíme } \gamma_{SS} = \frac{1}{2}, \text{ tedy } -3\left(\frac{1}{2}\right)^2 + 2\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{4}.$$

V podmínkách, kde je katalyzátor stabilnější se τ_z stává vyšší. Linie toku minimálního gradientu nyní může ležet pod tečnou, existují tedy 3 průsečíky stacionárních stavů v určitém rozmezí odstraňovacího času. Dva nenulové rozsahy přeměny γ_2 a γ_3 leží na uzavřené křivce neboli isole. Vyskytuje se zde jak horní tak dolní mez odstraňovacích časů, pro která tato řešení existují. Dva konce isoly odpovídají dvěma odstraňovacím časům, pro které je L tečnou k P, tj. pro něž platí:

$$\frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}\right)^2 = \frac{1}{4} \quad (49)$$

[1]

Odvození:

$$\frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + \frac{\tau_{od}}{\tau_z}\right)^2 = \frac{1}{4} \implies \frac{1}{\tau_{od}} \left(1 + 2\frac{\tau_{od}}{\tau_z} + \frac{\tau_{od}^2}{\tau_z^2}\right) = \frac{1}{4} \implies \frac{1}{\tau_{od}} + \frac{2}{\tau_z} + \frac{\tau_{od}}{\tau_z^2} = \frac{1}{4}, \text{ protože}$$

$$\tau_z = \tau_{od} \implies \frac{1+2+1}{\tau_z} = \frac{1}{4} \implies \frac{4}{\tau_z} = \frac{1}{4} \implies \tau_z = 16$$

3.4.2 Stabilita stacionárních stavů pro systémy s rozkladem katalyzátoru bez přítoku

Stabilitu systémů ve kterých se katalyzátor rozpadá můžeme zkoumat analogickou cestou jako v předchozím případě. Použitím dvou hlavních rovnic (18) a (19) a dvou nezávislých proměnných α a β získáme čtyři parciální diferenciální koeficienty, které určují znaménko a charakter dvou exponentů λ_1 a λ_2 , pomocí charakteristické kvadratické rovnice:

$$\lambda^2 - Tr A_0 \lambda + det(A_0) = 0 \quad (50)$$

[1]

Odvození:

$$A_0 = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) & \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) \\ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right) & \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right) \end{pmatrix}$$

Hledáme vlastní čísla matice A_0 , tedy řešíme tuto rovnici: $(A_0 - \lambda I) = 0$,

kde I je jednotková matice.

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) - \lambda & \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) \\ \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right) & \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right) - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$det(A) = \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) - \lambda\right) \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right) - \lambda\right) - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right)\right) \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right)\right) = \lambda^2 - \lambda \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right) + \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right)\right) +$$

$$\left(\left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right)\right) \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right)\right) - \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{d\alpha}{d\tau}\right)\right) \left(\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{d\beta}{d\tau}\right)\right)\right) = \lambda^2 - Tr A_0 \lambda + det(A_0)$$

Nalezení kořenů kvadratické rovnice:

$$\lambda_{1,2} = \frac{Tr A_0 \pm \sqrt{Tr A_0^2 - 4det(A_0)}}{2}$$

Podle znamének a velikostí parciálních derivací, mohou být λ_1 a λ_2 reálné, nebo komplexní s nenulovou reálnou částí (tzn. kladnou či zápornou). Časová závislost perturbací je pak popsána vztahy:

$$\Delta\alpha = c_1 e^{\lambda_1 \tau} + c_2 e^{\lambda_2 \tau}, \quad (51)$$

$$\Delta\beta = d_1 e^{\lambda_1 \tau} + d_2 e^{\lambda_2 \tau}, \quad (52)$$

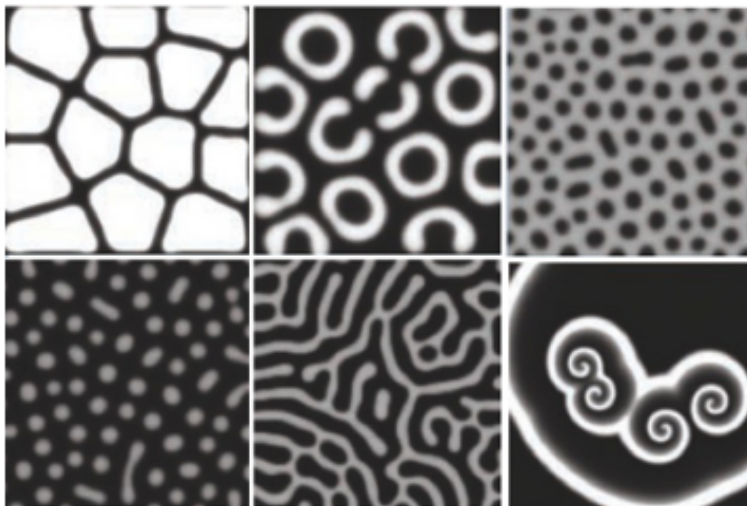
kde c_1, c_2, d_1, d_2 jsou konstanty. [1]

4 Vybrané typy vzorů vyskytujících se v chemických reakcích

4.1 Turingovy vzory

Všechny Turingovy vzory vznikají za pomoci reakčně-difuzního systému. Tento systém se skládá z "aktivátoru" a "inhibitoru". "Aktivátor" je chemická látka urychlující vlastní výrobu a "inhibitor" je chemická látka zpomalující tvorbu "aktivátoru". Kombinací těchto dvou chemických látek pak lze docílit mnoha rozmanitých vzorů. Více informací lze nalézt v článku [21].

Myšlenka Turingovy vzorů byla inspirována vzory na srsti leopardů, jaguárů a tygrů. Avšak tyto vzory lze nalézt i jinde, než na srsti zvířat, například v meteorologii, v buňkách, galaxiích, atd. [22]



Obr. 5: Turingovy vzory. [21]

4.2 Chemické vlny

Pojmem chemická vlna se označuje šíření změny lokální koncentrace ve vrstvě reakčního systému. Je jedním z příkladů samouspořádávání. Tyto vlnové struktury se mohou šířit v oscilujícím nebo klidném excitovatelném prostředí. Chemické vlny jsou speciálním případem autovln. Autovlny jsou samoudržující se signály. Indukují procesy lokálního uvolňování energie v prostředí obsahujícím zdroje energie (aktivní prostředí). Ke spouštění stejných procesů v okolních oblastech se spotřebovává tato uvolněná energie. [23]

4.3 Solitony a smyčky

Solitony jsou vlny, které se pohybují beze změny tvaru a dokáží procházet jedna skrze druhou. [24] Běžné vlny se po naražení na břeh rozptýlí, ve speciálních podmínkách dojde k vzniku vlny, která se pohybuje určitou rychlostí, neroztříští se o břehy a pokračují beze změny svého tvaru mnoho kilometrů. Při setkání takovýchto dvou vln nedojde k interferenci, vlny se navzájem prostoupí a pokračují stejnou rychlostí dál. [25]

Jestliže platí následující vztah:

$$\frac{D_B}{D_A} = \frac{k_2}{k_{od}}, \quad (53)$$

pak existují stacionární prostorové struktury ve formě solitonů a smyček. Tyto vzory zůstávají zachovány i pro hodnoty parametrů, pro které (53) neplatí přesně, ale jen přibližně. Pokud (53) platí, lze solitony a smyčky vypočítat explicitně.

V nebiologických systémech je často reálným předpokladem rovnost difuzí:

$$D_A = D_B, \quad (54)$$

jelikož mobilita inhibitoru a aktivátoru bývají často podobné.

Definujme si následující vztah:

$$\phi = \beta \frac{D_B}{D_A} \quad (55)$$

Jestliže $0 < \phi < \frac{2}{9}$ nebo $\frac{2}{9} < \phi < \frac{1}{4}$ vznikají solitony.

Jestli platí $\phi = \frac{2}{9}$ vznikají smyčky. [2]

5 Realizace Gray-Scottova modelu

Tato kapitola se zaměřuje na realizaci Gray-Scottova modelu pomocí programového prostředí Matlab. Jsou zde rozebrány pojmy potřebné k realizaci, vznikající vzory a vývoj některých vybraných vzorů v čase.

5.1 Laplaceův operátor

Pro 2D případ má Laplaceův operátor tvar:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad (56)$$

[26]

5.2 Konvoluční matice

Laplaceův operátor lze zdiskretizovat pomocí konvoluční matice. Existují různé druhy konvolučních masek pro Laplaceův operátor. V programu Gray Scott model.m je použita konvoluční matice typu 3x3 [17]:

$$K = \begin{pmatrix} 0.05 & 0.2 & 0.05 \\ 0.2 & -1 & 0.2 \\ 0.05 & 0.2 & 0.05 \end{pmatrix}$$

Tato matice reprezentuje lineární filtr typu horní propust (propouští vysoké frekvence, tedy hrany), používá se k zaostření obrazu. Zvýrazňuje detaily, ale i šum. Prvky v matici se nazývají váhové koeficienty. Jejich součet v tomto typu filtru se rovná 0. [28]

Konvoluce se velmi často používá v souvislosti se zpracováním obrazu. Konvoluce je jádrem většiny pokročilejších transformací obrazu a je také často používána k detekci hran, jako konvoluční jádro se používá některý ze známých hranových detektorů.[27]

Pro dvourozměrnou diskrétní konvoluci platí následující vztah:

$$I(x, y) = f(x, y) * g(x, y) = \sum_{i=-k}^k \sum_{j=-k}^k f(x-i, y-j)g(i, j), \quad (57)$$

kde $I(x, y)$ je intenzita výsledného pixelu na pozici $[x, y]$, $f(x, y)$ je intenzita vstupního obrázku na pozici $[x, y]$ a $g(i, j)$ intenzita bodu v masce na pozici $[i, j]$. [29]

Graficky si lze konvoluci obrazu a masky představit jako postupné prostorové posouvání převrácené masky (konvolučního jádra) po obrazu a stanovení odezvy. Pro každou vzájemnou polohu obrazu a masky je vypočítán součet hodnot pixelů obrazu vážených příslušnými koeficienty masky přičemž tento součet určuje výstupní hodnotu signálu (obrazu) v daném bodě. [27]

5.3 Program: Gray Scott model.m

Program pro Gray-Scottův model byl napsán v softwaru Matlab. Při vytváření programu bylo čerpáno ze zdrojů [31] a [30]. Byla použita mřížka o velikosti 300x300, časový krok 0,25, dále byla využita konvoluční maska definovaná v kapitole (5.2). Vstupními proměnnými jsou a a b , kde a je počáteční koncentrace látky A , b je vstupní koncentrace katalyzátoru B . Pro definování počáteční perturbace bylo použito několik druhů počátečních podmínek.

5.3.1 Hlavní program

Tento program generuje vzory znázorněné v kapitole (5.4).

```
function Gray_Scott_model(F, k, Da, Db, maxt)

    % Program na vytvareni vzoru Gray - Scottovym modelem
    % Napriklad: Gray_Scott_model(0.031, 0.002, 1, 0.5, 6000)
    % F-aktivator, napr.: F = 0.026
    % K-inhibitor, napr.: k = 0.052
    % Da-difuzni koeficient latky A, napr.: Da = 1
    % Db-difuzni koeficient latky B, napr.: Db = 0.5
    % maxt-maximalni cas, do kdy se pocita, napr.: maxt = 6000

    dt = 0.25; % krok
    n = 300; % velikost hrany pole

    [a, b] = pocatecni_podminky(n); % pocatecni podminky
    G = [0.05, 0.2, 0.05; 0.2, -1, 0.2; 0.05, 0.2, 0.05]; % konvolucni maska

    for t = 0:dt:maxt

        laplacian_a = conv2(a(2:n-1,2:n-1), G);
        laplacian_b = conv2(b(2:n-1,2:n-1), G);

        % Hlavni rovnice:
        a1 = a + (Da*laplacian_a - a.*b.^2 + F*(1-a))*dt;
        b1 = b + (Db*laplacian_b + a.*b.^2 - (k+F)*b)*dt;

        a = a1;
        b = b1;

        % Vykresleni vzoru:
        c = image(b, 'CDataMapping', 'scaled');
        drawnow

    end

end
```

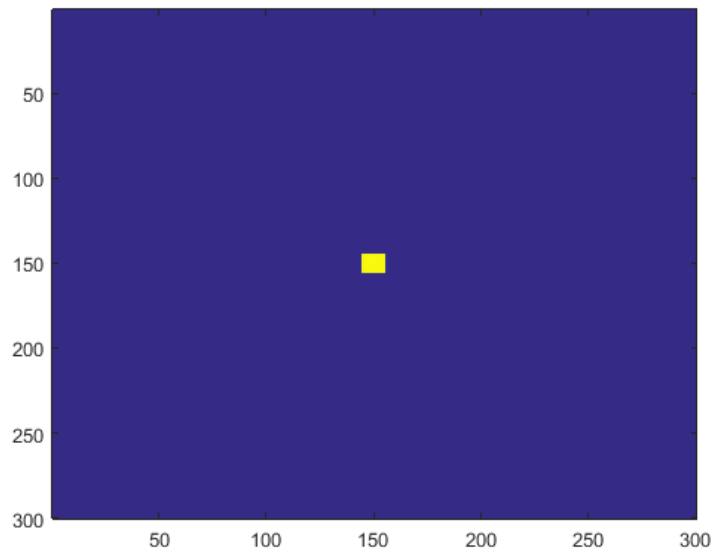
5.3.2 Počáteční podmínky 0

Generuje náhodný počet náhodně velkých náhodně umístěných poruch.

```
function [t,a,b]=pocatecni_podminky0(n)
t = 0;
a = ones(n);
b = zeros(n);
%
%Náhodný počet poruch s náhodnou velikostí:
%
%Počet poruch:
pocet_poruch=randi(10); %náhodný počet poruch, max 10
%
for l=1:1:pocet_poruch
d1=randi(30); %náhodná velikost v x, max 30
d2=randi(30); %náhodná velikost v y, max 30
%
x1=randi(n-d1);
y1=randi(n-d2);
%
    b_porucha=zeros(n,n);
    b_porucha((x1):(x1+d1),(y1):(y1+d2))=rand(1); %pro levý horní roh
    b=b+b_porucha;
end
end
```

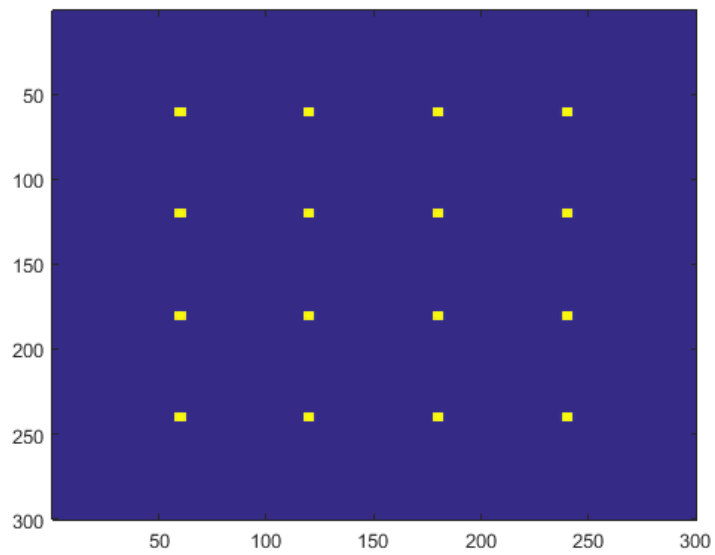
5.3.3 Počáteční podmínky 1

Generuje jednu symetrickou poruchu umístěnou ve středu pole.



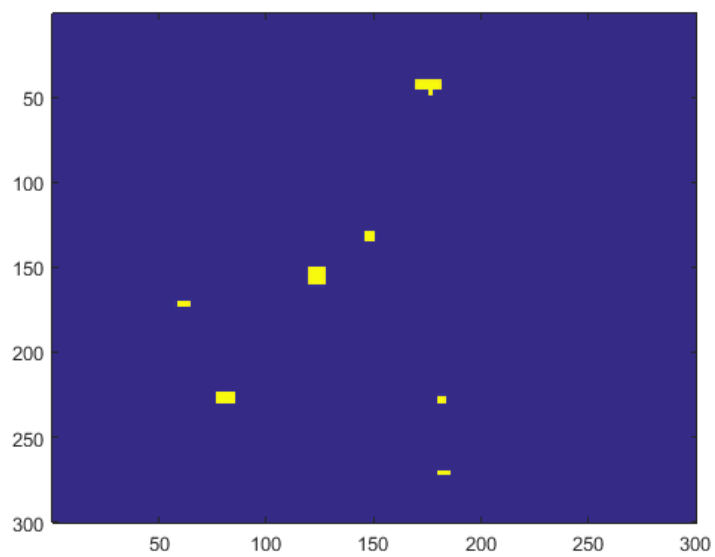
5.3.4 Počáteční podmínky 2

Generuje 16 symetrických a symetricky rozmístěných poruch.



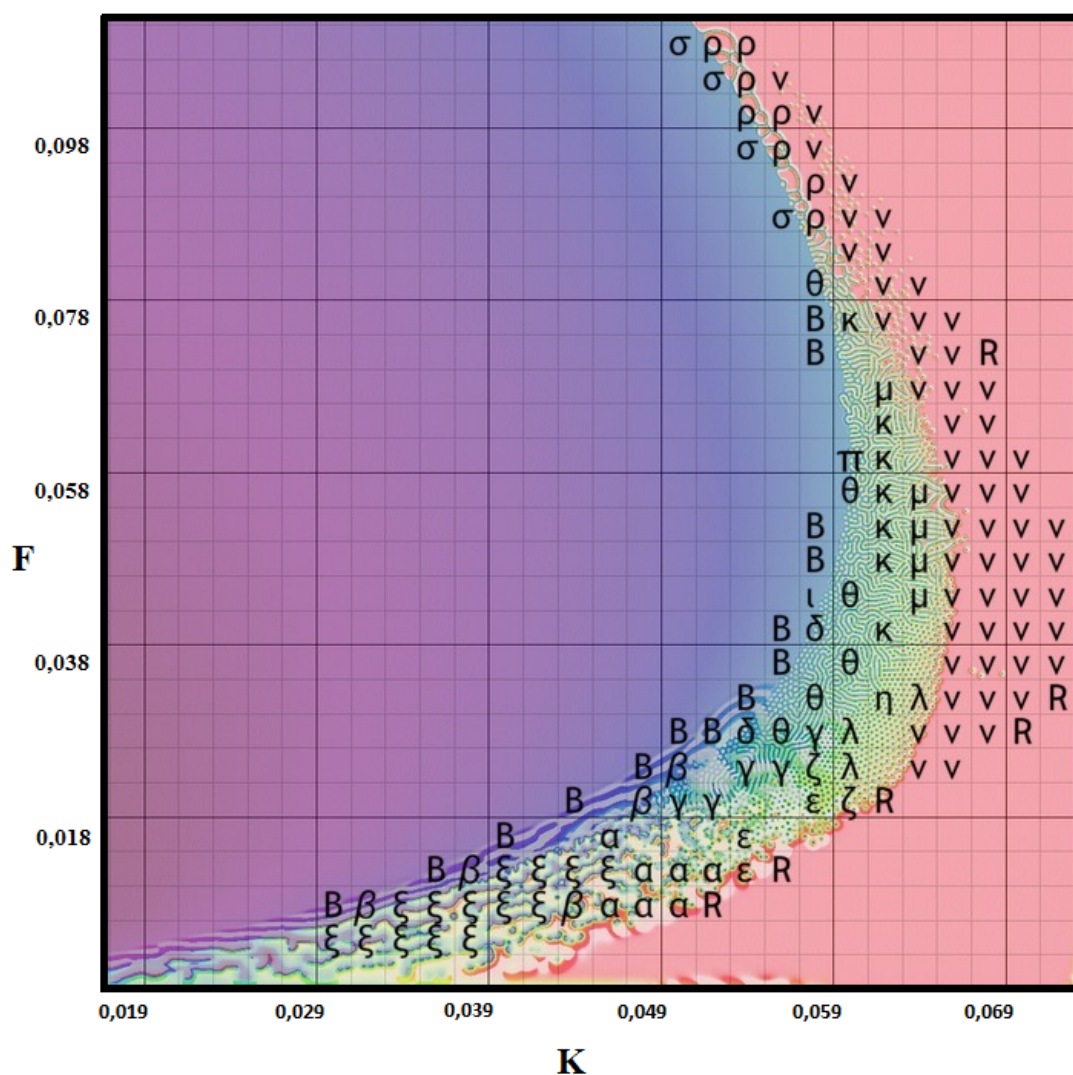
5.3.5 Počáteční podmínky 3

Generuje 8 pevně daných nesymetricky rozmístěných poruch různé velikosti.



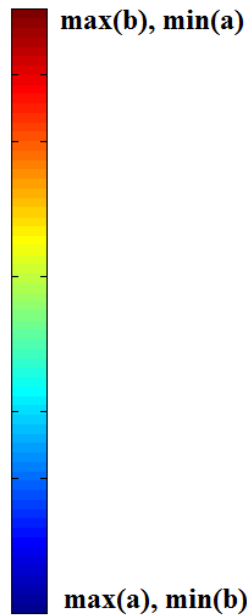
5.4 Klasifikace vzorů v Gray-Scottově modelu

Vzory Gray-Scottova modelu lze rozřítit například pomocí Pearsonovy klasifikace. Pearsonova klasifikace je klasifikace vzorů v Gray-Scottově modelu vytvořená v roce 1993 Johnem E. Pearsonem. V následujícím textu je použita rozšířená Pearsonova klasifikace ze zdroje [31]. Na obrázku (6) lze vidět grafické znázornění této klasifikace v závislosti na F a K s vyznačenými typy vzorů.



Obr. 6: Graf závislosti F na K s vyznačenými typy vzorů dle rozšířené Pearsonovy klasifikace. [31]

Na obrázku (7) je pak zobrazená barevná stupnice, pomocí níž jsou kódovány jednotlivé koncentrace a a b . Barevné kódování je vytvořeno pomocí funkce `CDataMapping`, která převádí jednotlivé hodnoty koncentrací do barevné škály. Tato funkce dynamicky upravuje rozsah hodnot, aby byly jednotlivé vzory dobře viditelné.

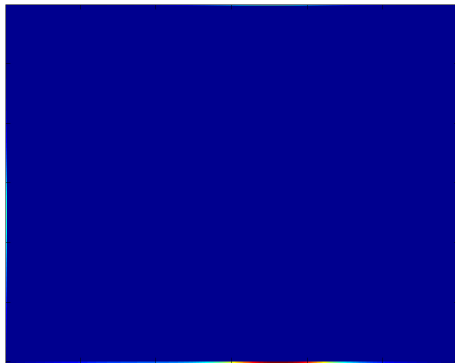


Obr. 7: Barevná stupnice.

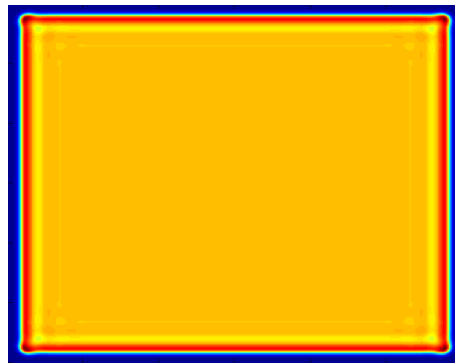
Následující vzory byly vytvořeny programem `Gray_Scott_model.m`, který je popsán v kapitole (5.3). Na základě Pearsonovy klasifikace ze zdroje [31] byly pro každý typ vybrány tři kombinace parametrů F a K , které byly následně proměřeny v takovém rozsahu času t , aby byl co nejlépe zřetelný výsledný vzor. Byly zde použity Počáteční podmínky 3 (5.3.5).

- **Typy R a B:**

Typy R a B popisují stacionární stavy, s výskytem pouze látky A nebo látky B . Typ R (vlevo) značí výskyt pouze látky A a typ B (vpravo) výskyt pouze látky B . (Označení R a B bylo zachováno dle původního zdroje.) [31]



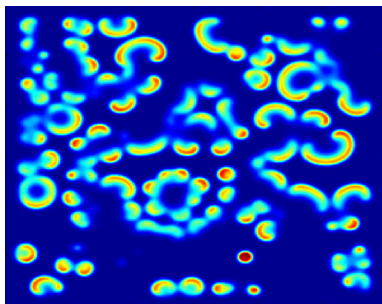
$F=0,010, K=0,053, t=10000$



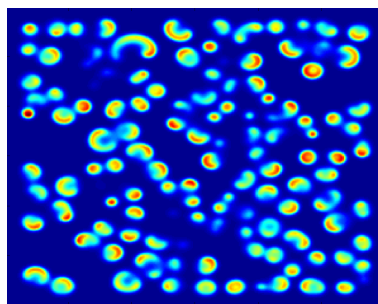
$F=0,038, K=0,057, t=10000$

- **Typ α :**

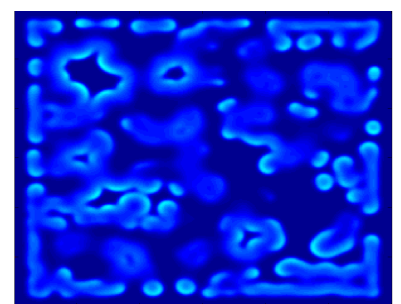
Typ α je závislý na čase, skládá se z rodících se spirál, které neustále kolidují a navzájem se ničí, nikdy nedojde ke vzniku úplných spirál. [3]



$F=0,014, K=0,049, t=20000$



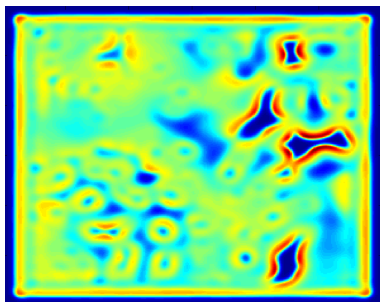
$F=0,014, K=0,051, t=20000$



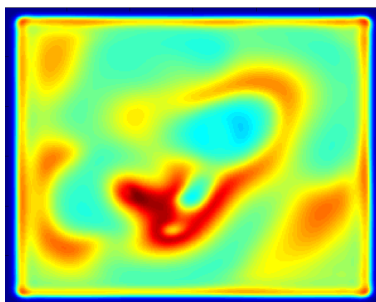
$F=0,018, K=0,047, t=20000$

- **Typ β :**

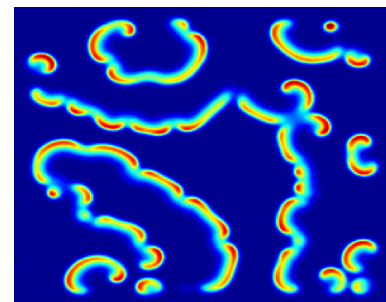
Typ β je závislý na čase, obsahuje lokalizované stavy na různých místech v různých časech. Vypadá jako oceán s periodickými dutinami, které se náhle otevřou a pak se rychle zaplní. [3], [31]



$F=0,022, K=0,049, t=20000$



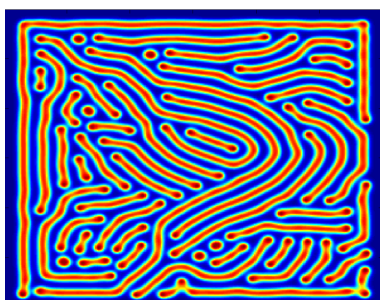
$F=0,010, K=0,033, t=20000$



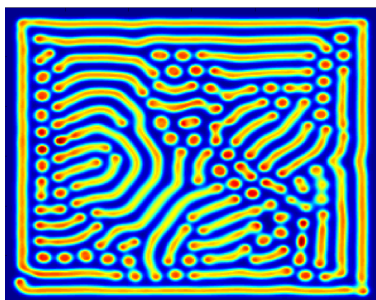
$F=0,010, K=0,045, t=20000$

- **Typ γ :**

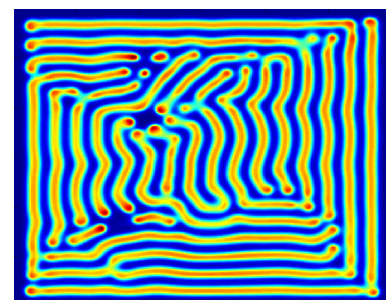
Typ γ je závislý na čase, skládá se převážně z pruhů, ale vyskytují se zde i oblasti, kde dochází k rozpojení pruhů a jejich spojení v pruhy nové. [3]



$F=0,030, K=0,059, t=20000$



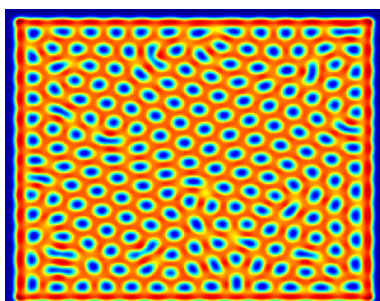
$F=0,026, K=0,057, t=20000$



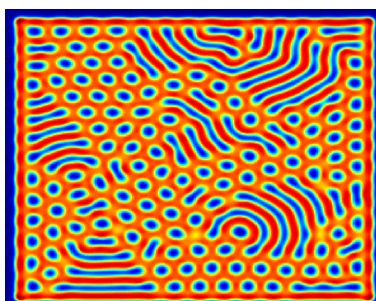
$F=0,022, K=0,053, t=20000$

- **Typ δ :**

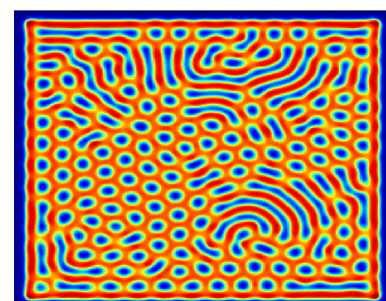
Typ δ se skládá z malých pravidelných oblastí ("kapek") látky A s občasnými krátkými proužky látky A . [3]



$F=0,030, K=0,055, t=20000$



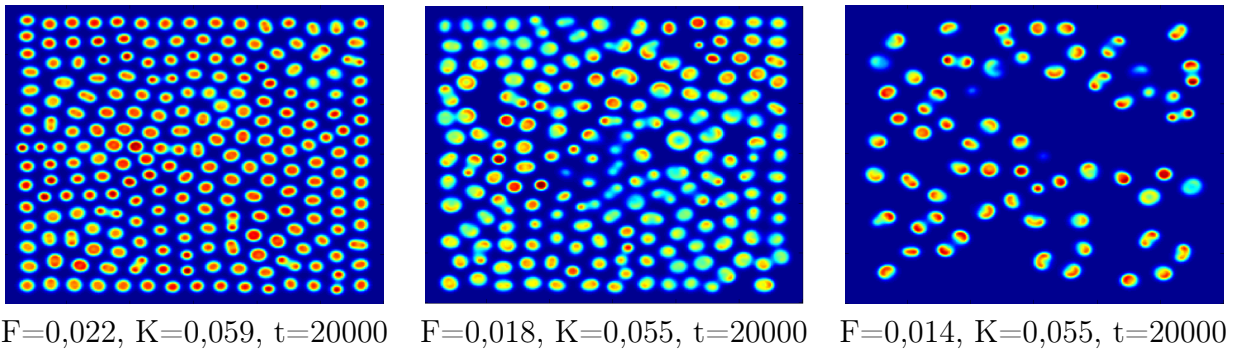
$F=0,042, K=0,059, t=20000$



$F=0,034, K=0,057, t=20000$

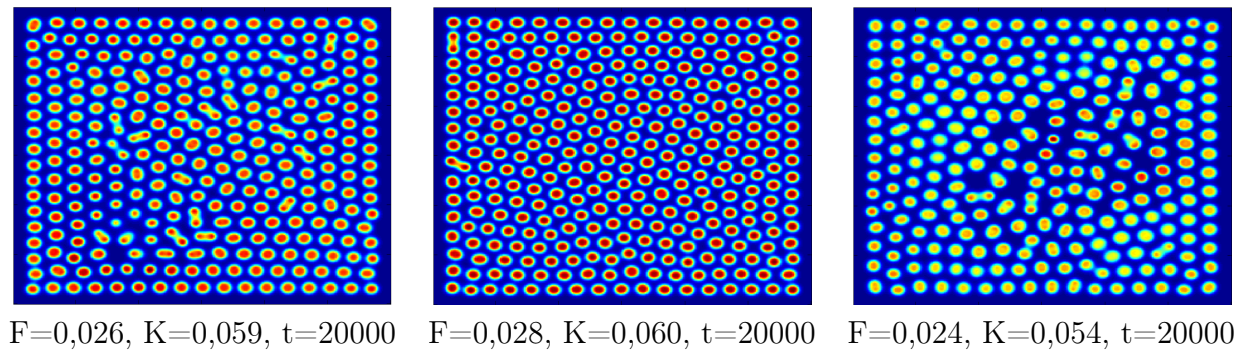
- **Typ ϵ :**

Typ ϵ je závislý na čase, je složen převážně ze skvrn, které mohou nabývat na velikosti dokud se nesetkají s jiným objektem, poté se zmenší nebo zcela zaniknou. Skvrny s menší symetrií mají tendenci žít déle a množit se dělením. Skvrny se navzájem vytlačují. [31]



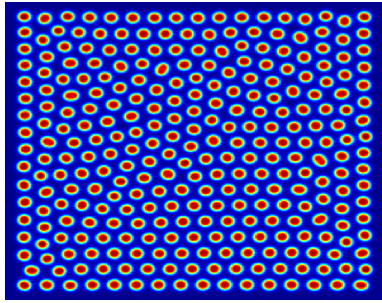
- **Typ ζ :**

Typ ζ je závislý na čase, je velmi podobný typu ϵ , ale skvrny jsou obecně více symetrické a stabilnější. [3], [31]

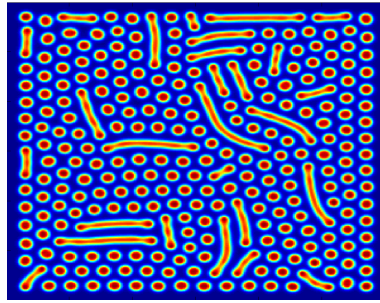


- **Typ η :**

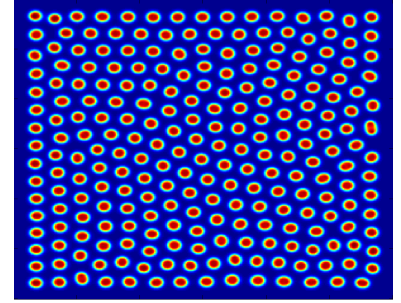
Typ η je závislý na čase. Je podobný typu γ , ale namísto pruhů je zde směsice skvrn a křivek. Skvrny se občas rozdělí nebo znovu spojí v pruhy. Systém vždy dosáhne ustáleného stavu (narozdíl od typu γ , který stability nikdy nedosáhne). [31], [3]



$F=0,034, K=0,063, t=20000$



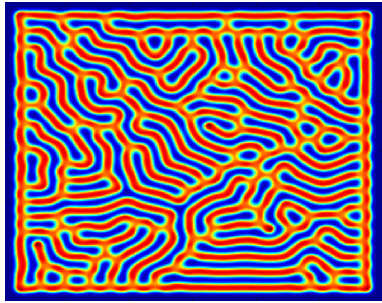
$F=0,036, K=0,063, t=20000$



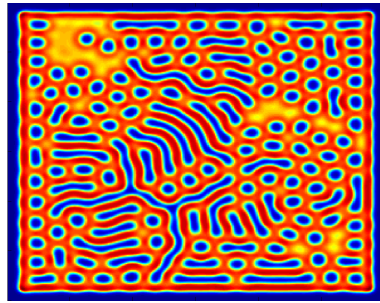
$F=0,038, K=0,065, t=20000$

- **Typ θ :**

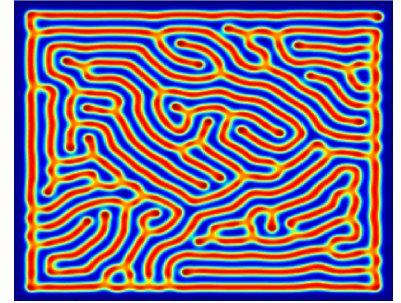
Typ θ obsahuje skvrny rostoucí do soustředných kruhů. Konečným stavem jsou zde většinou rozvětvené pruhy, které mohou být plně propojené. [31]



$F=0,046, K=0,061, t=20000$



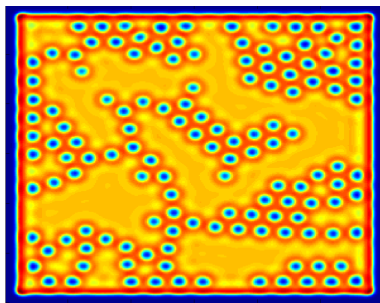
$F=0,058, K=0,061, t=20000$



$F=0,034, K=0,059, t=20000$

- **Typ ι :**

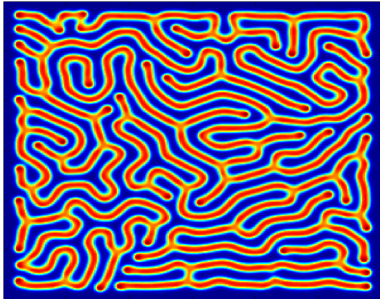
Typ ι je závislý na čase. Pro tento typ byla nalezena pouze jediná kombinace parametrů, při kterých nastává.



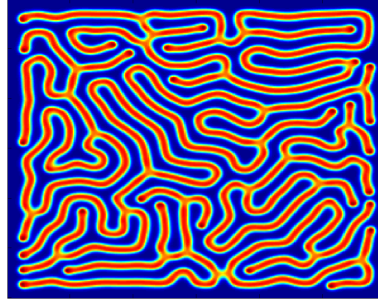
$F=0,046, K=0,0594, t=20000$

- **Typ κ :**

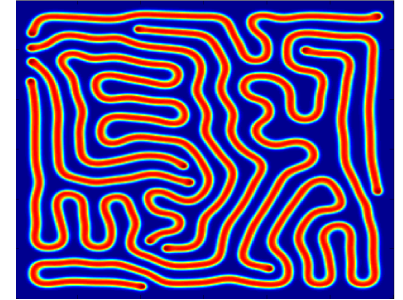
Izolované pruhy tvoří meandry (některé mohou dorůst až do tvaru korálů). Konečný stav většinou tvoří rozvětvené pruhy, které nejsou navzájem propojeny.[31]



$F=0,054, K=0,063, t=20000$



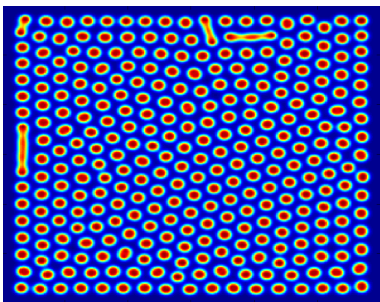
$F=0,062, K=0,063, t=30000$



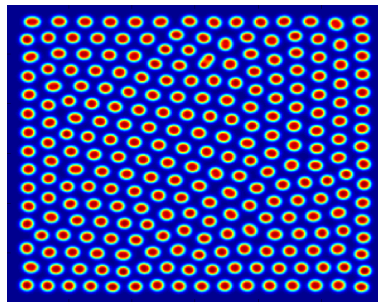
$F=0,078, K=0,061, t=100000$

- **Typ λ :**

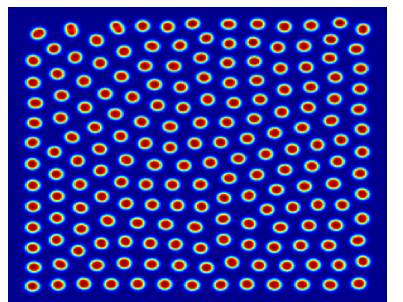
Typ λ je časově nezávislý, obsahuje solitony, které se množí způsobem připomínajícím mitózu. Po zaplnění celého prostoru se solitony přeskupí do hexagonální mřížky. Poté veškerý pohyb ustává a vzor se dostává do ustáleného stavu (narozdíl od typu ϵ , který ustáleného stavu nedosáhne nikdy). [31], [3]



$F=0,030, K=0,061, t=20000$



$F=0,026, K=0,061, t=20000$

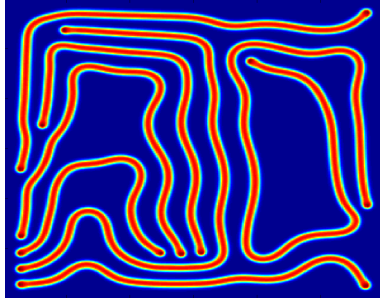


$F=0,034, K=0,065, t=50000$

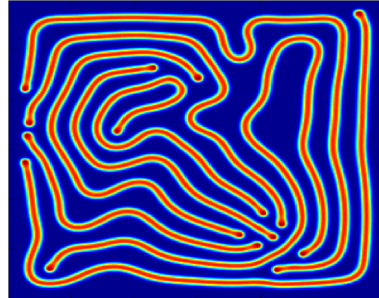
- **Typ μ :**

Pruhy rosou do délky na obou koncích. Pokud dva prvky rostou proti sobě a jejich konce se přiblíží na kritickou vzdálenost, změní svůj směr tak, aby

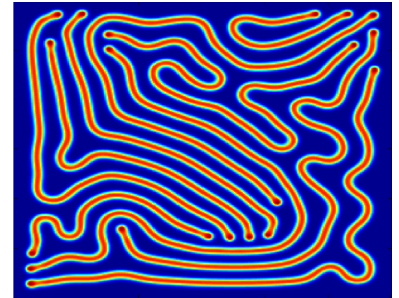
zabránilly srážce. [3]



$F=0,070$, $K=0,063$, $t=100000$



$F=0,054$, $K=0,065$, $t=80000$

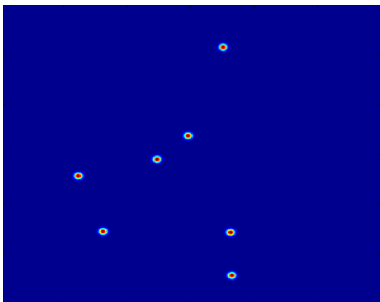


$F=0,050$, $K=0,065$, $t=100000$

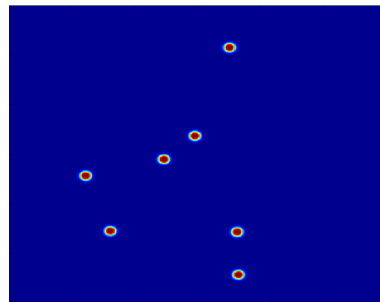
- **Typ ν :**

Inertní solitony, jejich počet závisí na velikosti oblasti na počátku. [31]

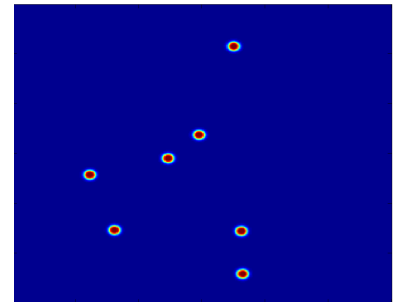
(Tento typ se bohužel nepodařilo dobře nasimulovat, jelikož vytváření tohoto vzoru probíhá velmi pomalu.)



$F=0,102$, $K=0,059$, $t=20000$



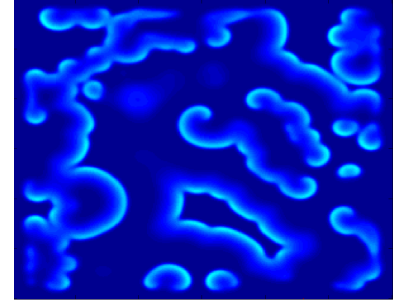
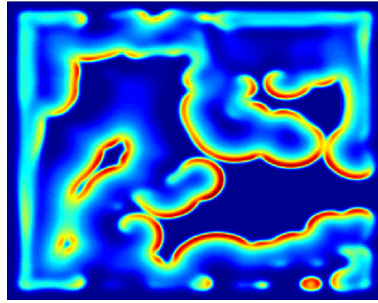
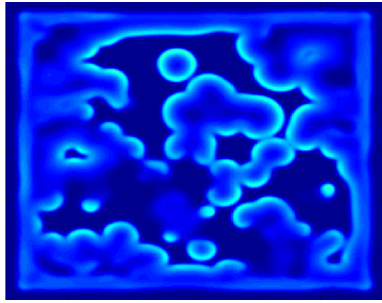
$F=0,086$, $K=0,061$, $t=20000$



$F=0,078$, $K=0,063$, $t=20000$

- **Typ ξ :**

Velké, udržované spirály podobně jako v Bělousov-Žhabotinského reakci v Petriho misce. Pokud je doména malá, spirála vymře, je-li doména dostatečně velká, občasné výchyly generují nová zrození spirál a tím udržují jejich populaci. [31]



F=0,014, K=0,041, t=20000

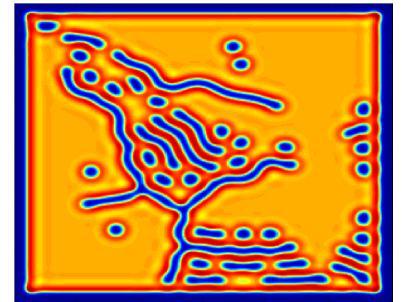
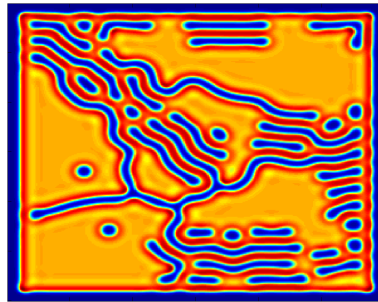
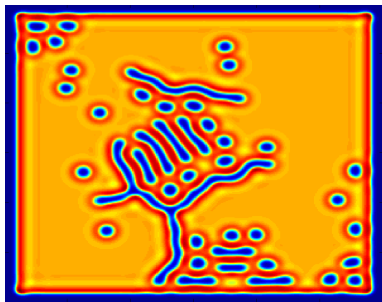
F=0,010, K=0,035, t=20000

F=0,014, K=0,043, t=20000

- **Typ π :**

Typ π vytváří pruhy, smyčky a skvrny. Ty tvoří stabilní lokalizované struktury, a to stacionární i pohyblivé. Mohou zde vzniknout i rotující vzory.

[31]



F=0,062, K=0,061, t=20000

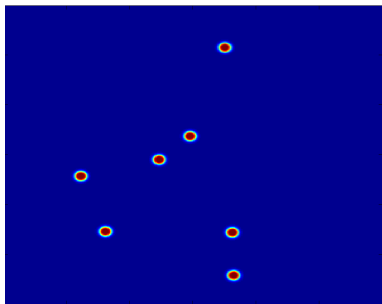
F=0,066, K=0,061, t=20000

F=0,064, K=0,061, t=20000

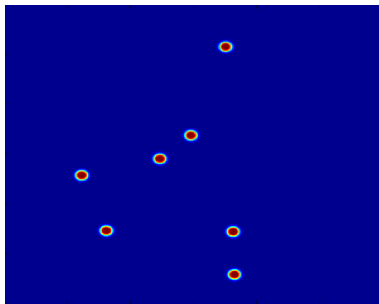
- **Typ ρ :**

Vzory se vyvíjejí do uzavřených "mýdlových bublin" ohraničených pruhy.

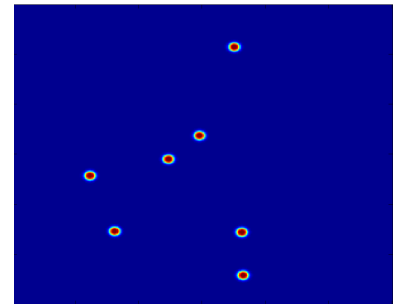
V tomto typu lze pozorovat, větší bubliny rostou na úkor sousední malých bublin, které se zmenšují, až nakonec vymizí.[31]



$F=0,098, K=0,057, t=20000$



$F=0,110, K=0,053, t=20000$

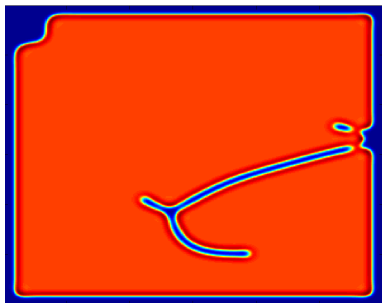


$F=0,094, K=0,059, t=20000$

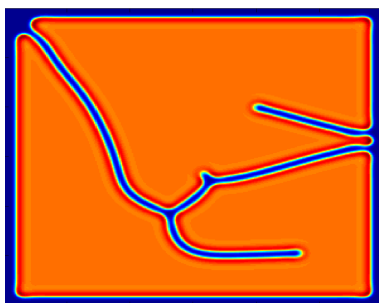
- **Typ σ :**

Vzory se vyvíjejí do uzavřených "mýdlových bublin" sousedících s pruhy.

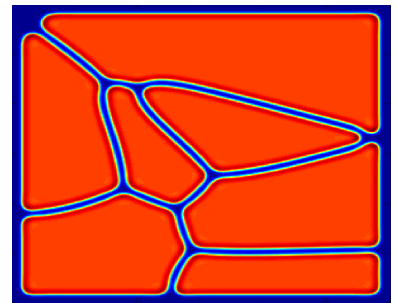
Jedná se o typ inverzní k typu ρ . [31]



$F=0,098, K=0,055, t=20000$



$F=0,90, K=0,057, t=20000$

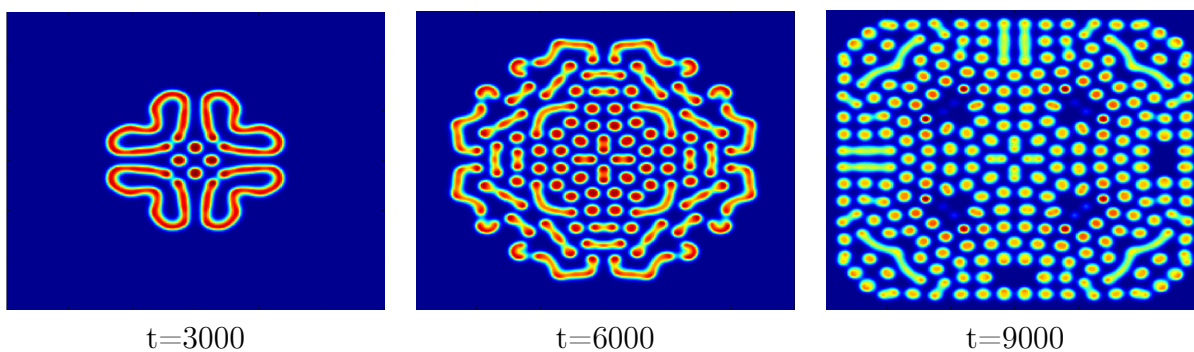


$F=0,106, K=0,053, t=30000$

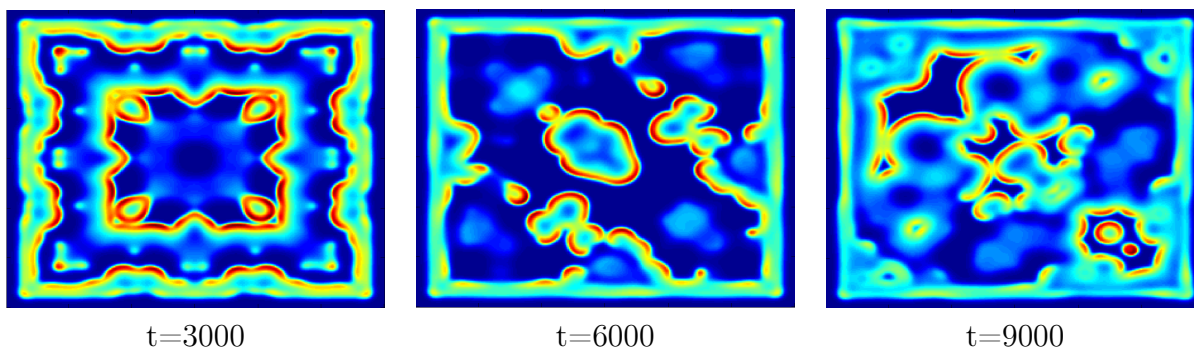
5.5 Vývoj vzorů v čase

Následující obrázky ukazují vývoj některých vybraných vzorů v čase.

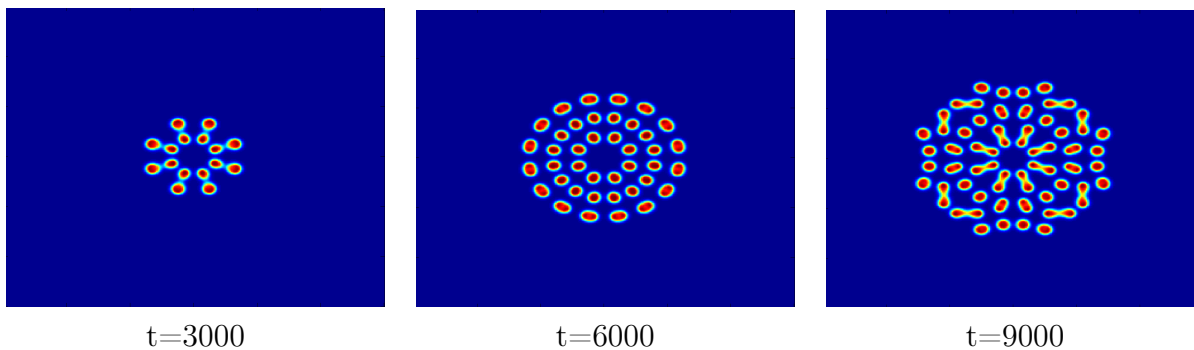
- *Vzory, pro které byla použita jedna symetrická porucha umístěná ve středu pole (5.3.3):*



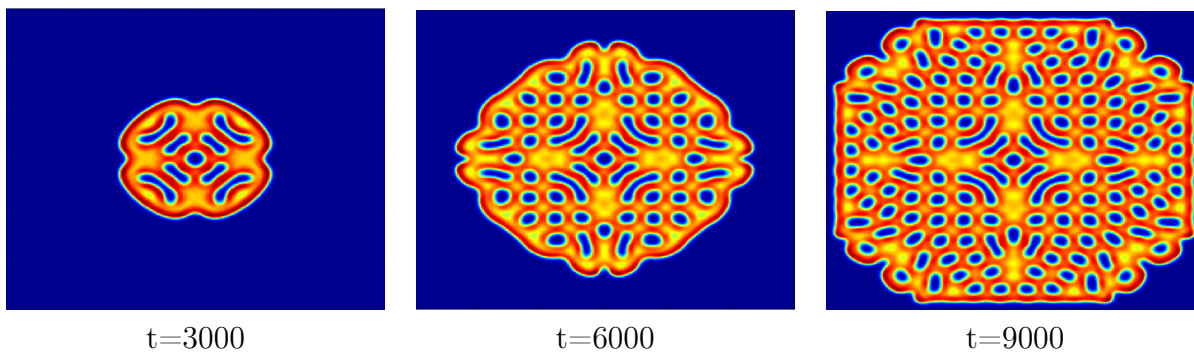
Obr. 8: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0026$, $K=0,0059$. (Typ ζ .)



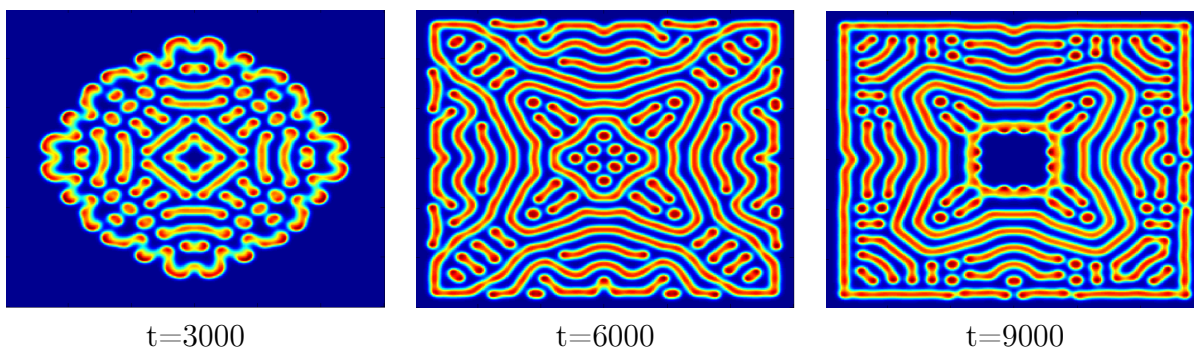
Obr. 9: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0014$, $K=0,0041$. (Typ ξ .)



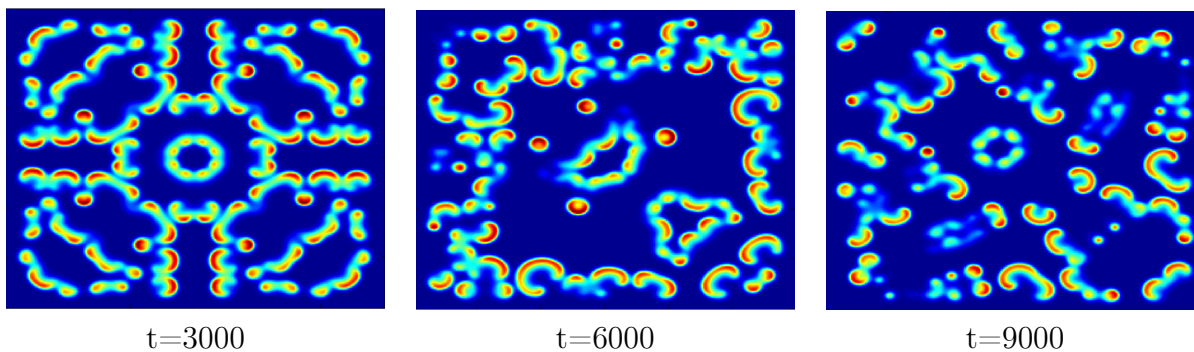
Obr. 10: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0042$, $K=0,0065$. (Typ η .)



Obr. 11: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0058$, $K=0,0061$. (Typ θ .)

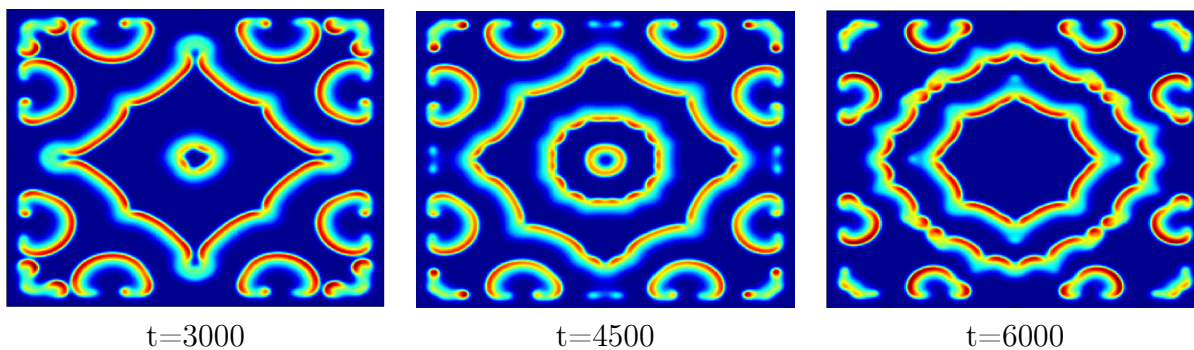


Obr. 12: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0026$, $K=0,0057$. (Typ γ .)

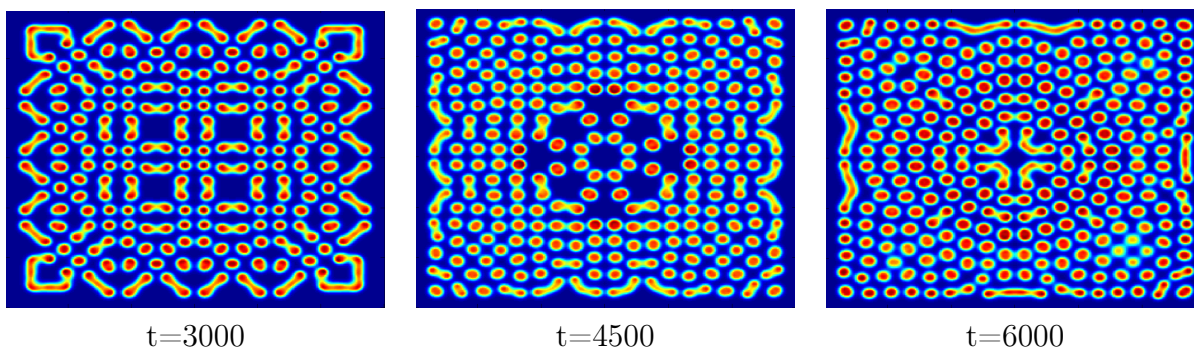


Obr. 13: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0014$, $K=0,0049$. (Typ α .)

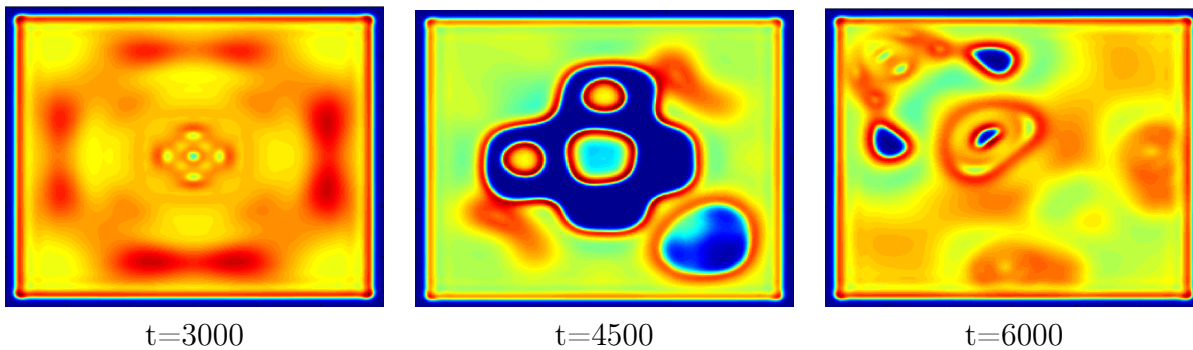
- *Vzory, pro které bylo použito 16 symetrických a symetricky rozmístěných poruch (5.3.4):*



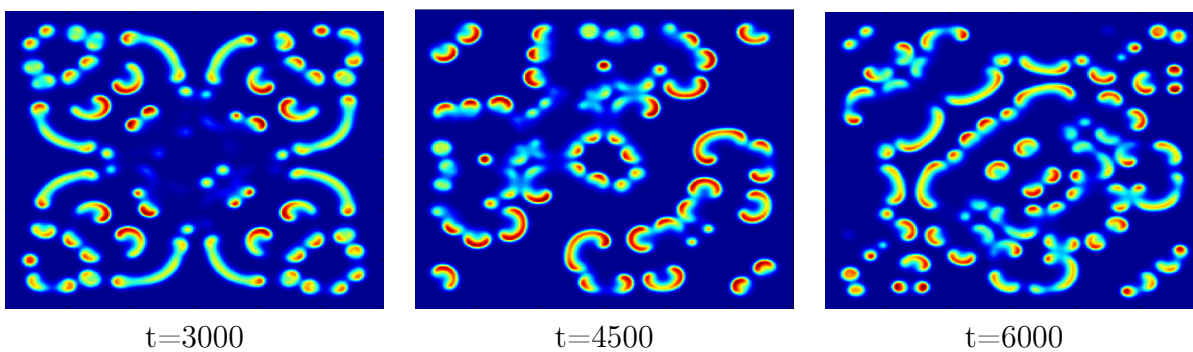
Obr. 14: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0014$, $K=0,0045$. (Typ ξ .)



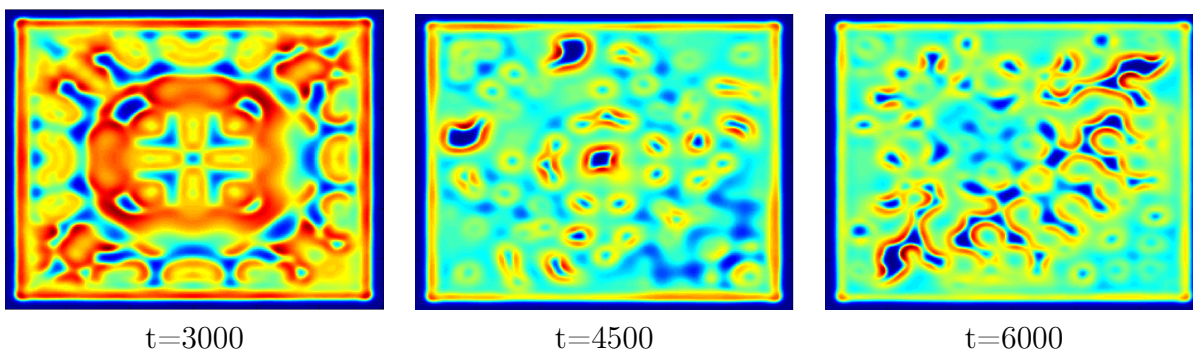
Obr. 15: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0026$, $K=0,0059$. (Typ ζ .)



Obr. 16: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0026$, $K=0,0051$. (Typ β .)



Obr. 17: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0010$, $K=0,0047$. (Typ α .)



Obr. 18: Vývoj vzoru pro parametry $F=0,0018$, $K=0,0045$. (Typ β .)

Závěr

Cílem této bakalářské práce bylo popsání Gray-Scottova modelu difundujících a vzájemně reagujících látek, dále odvození rovnic tohoto modelu, studium stability zjednodušených forem systému a implementace numerického řešení tohoto modelu.

Úvodní část je zaměřena na důležité pojmy potřebné k pochopení fungování Gray-Scottova modelu. Následující část zkoumá odvození Gray-Scottova modelu, jeho popis, vyšetření stacionárních stavů a jejich stability. Předposlední část se zabývá vybranými druhy vzorů, které mohou vznikat v chemických reakcích. Poslední část je zaměřena na tvorbu vzorů pomocí programu vytvořeného v Matlabu, v závislosti na zvolených počátečních perturbacích zde vznikají rozmanité vzory, připomínající vzory živé i neživé přírody.

Mým osobním přínosem bylo seznámení se s Gray-Scottovým modelem, tvorba bezrozměrných proměnných, princip nalezení jeho stacionárních stavů a stability, vytvoření programu v Matlabu, díky němuž jsem objevila mnoho zajímavých vzorů. Dalším přínosem pro mě byla práce v typografickém prostředí LATEX, ve kterém je práce napsána.

Literatura

- [1] GRAY, P. a S. K. SCOTT. *Sustained Oscillations and Other Exotic Patterns of Behavior in Isothermal Reactions*. *J. Phys. Chem.* 1985, 1985(89), 22-32.
- [2] HALE, J. K., L. A. PELETIER a W. C. TROY. *Stability and Instability in the Gray-Scott Model: The Case of Equal Diffusivities*. *Applied Mathematics Letters*. 1999, 1999(12), 59-65.
- [3] PEARSON, John E. *Complex Patterns in a Simple System*. *Science [online]*. American Association for the Advancement of Science, 1993, 261(5118), 189-192 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <https://www.ljll.math.upmc.fr/~hecht/ftp/ff++/2015-cimpa-IIT/edp-tuto/Pearson.pdf>,
- [4] *Komplexní systém*. In: *Wikipedia: the free encyclopedia [online]*. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2016 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/wiki/Komplexn%C3%AD_syst%C3%A9m,
- [5] *Emergence*. In: *Wikipedia: the free encyclopedia [online]*. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2015 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <https://cs.wikipedia.org/wiki/Emergence>,
- [6] FÜRST, Tomáš. *Socialismus s termodynamickou tváří*. *Finmag [online]*. 2011 [cit. 2016-05-01]. ISSN 1802-9612. Dostupné z: <http://finmag.penize.cz/ekonomika/265347-socialismus-s-termodynamickou-tvari>,
- [7] *Teorie reakčně difúzních systémů*. PROKŠOVÁ, Jitka a Jan DURŠPEK. *Jan Durspek's Website: Physics of Living Systems [online]*. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://jandur.cz/thermodynamics/v3/rd4.html>,
- [8] *Základy kinetické teorie*. *Wiki [online]*. 2015 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://wiki.matfyz.cz/index.php?title=6._Z%C3%A1klady_kinetick%C3%A9_teorie,

- [9] DRÁBEK, Pavel a Gabriela HOLUBOVÁ. *Parciální diferenciální rovnice [online]. 2011 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://mi21.usb.cz/sites/mi21.usb.cz/files/unit/parcialni_diferencialni_rovnice.pdf,*
- [10] *Rovnice matematické fyziky. MAŘÍK, Robert. Home Page of Robert Mařík [online]. c2011-2012 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://user.mendelu.cz/marik/am-web/am-webse4.html>,*
- [11] BARTOVSKÁ, Lída a Marie ŠIŠKOVÁ. *Co je co v povrchové a koloidní chemii [online]. Praha: VŠCHT Praha, 2005 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://147.33.74.135/knihy/uid_es-001/hesla/difuzni_koeficient.html,*
- [12] MECHLOVÁ, Erika. *Termodynamika nevratných procesů [online]. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://artemis.osu.cz/molfs/Neuratpr.doc>. Studijní materiály. Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyziky.,*
- [13] *1. Fickův zákon. WikiSkripta [online]. 2016 [cit. 2016-05-22]. ISSN 18046517. Dostupné z:http://www.wikiskripta.eu/index.php/1._Fick%C5%AFv_z%C3%A1kon,*
- [14] ZAORÁLKOVÁ, Zdena. *Didaktika reakční kinetiky [online]. 2000 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://cheminfo.chemi.muni.cz/ianua/Zdena/reakcni_kinetika/index.html. Diplomová práce. Masarykova univerzita.,*
- [15] *Rychlostní rovnice. In: Wikipedia: the free encyclopedia [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2016 [cit. 2016-05-22]. Dostupné z:https://cs.wikipedia.org/wiki/Rychlostn%C3%AD_rovnice,*
- [16] *Autokatalýza. In: Wikipedia: the free encyclopedia [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2012 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://https://cs.wikipedia.org/wiki/Autokatal%C3%BDza>,*

- [17] *Reaction-Diffusion Tutorial. Karl Sims [online]. Karl Sims, c1987-2016 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://www.karlsims.com/rd.html>,*
- [18] *Reaction-Diffusion by the Gray-Scott Model: Pearson's Parametrization. The Published Data of Robert Munafo [online]. Robert Munafo, c1996-2016 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://mrob.com/pub/comp/xmorphia/>,*
- [19] *Otevřený systém. CoJeCo: Vaše Encyklopedie [online]. c1999-2016 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://www.cojeco.cz/index.php?detail=1&id_desc=69207&title=otev%F8en%FD%20syst%E9m&s_lang=2,*
- [20] *MINÁR, Kamil a Renata WAGNEROVÁ. Analýza regulačních obvodů [online]. Ostrava, 2000 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://books.fs.usb.cz/Analyza/prvni.html>. Výukový modul. VŠB-TU Ostrava, Fakulta strojní, Katedra automatizační techniky a řízení.,*
- [21] *TURING, A. M. The Chemical Basis of Morphogenesis. Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences [online]. 1952,237(641), 37-72 [cit. 2016-05-23]. DOI: 10.1098/rstb.1952.0012. ISSN 0962-8436. Dostupné z: <http://rstb.royalsocietypublishing.org/cgi/doi/10.1098/rstb.1952.0012>,*
- [22] *KEIM, Brandon. Alan Turing's Patterns in Nature, and Beyond. WIRED [online]. WIRED, 2011 [cit. 2016-05-23]. Dostupné z: <http://www.wired.com/2011/02/turing-patterns/>,*
- [23] *Aplikace nerovnovážné termodynamiky v chemii. PROKŠOVÁ, Jitka a Jan DURŠPEK. Nerovnovážná termodynamika a její aplikace [online]. Zápa- dočeská univerzita v Plzni, 2007 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://nelterm.kof.zcu.cz/chemie/vlny/vlny.htm>,*
- [24] *Solitony. Aldebaran [online]. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://www.aldebaran.cz/zvuky/blyskani/docs/04.html>,*

- [25] *Solitonové vlny. Portál pro vysokoškolskou matematiku [online]. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://matematika.cuni.cz/dl/analyza/animace/k0042/solitony/hlausol.htm>,*
- [26] *Laplaceův operátor. In: Wikipedia: the free encyclopedia [online]. San Francisco (CA): Wikimedia Foundation, 2016 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z:https://cs.wikipedia.org/wiki/Laplace%C5%AFv_oper%C3%A1tor*
- [27] *Diskrétní konvoluce. HORÁK, Karel. Multimediální interaktivní didaktický systém [online]. Vysoké učení technické v Brně, c2010 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: http://midas.uamt.feec.vutbr.cz/ZVS/Exercise06/content_cz.php,*
- [28] *PAVELEK, Milan, Eva JANOTKOVÁ a Josef ŠTĚTINA. Vizualizační a optické měřicí metody [online]. Brno, 2007 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z:<http://ottp.fme.vutbr.cz/~pavelek/optika/index.htm>. Studijní materiály. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství - Energetický ústav, Odbor termomechaniky a techniky prostředí.,*
- [29] *Diskrétní dvourozměrná konvoluce. Počítačová grafika [online]. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://cgtucna.blogspot.cz/2013/11/diskretni-dvourozmer-na-konvoluce.html>,*
- [30] *GARRITY, Mike. How the Tiger got its Stripes. Get the inside view on MATLAB & Simulink!: Mike on MATLAB Graphics [online]. The MathWorks, 2015 [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://blogs.mathworks.com/graphics/2015/03/16/how-the-tiger-got-its-stripes/>,*
- [31] *Pearson's Classification (Extended) of Gray-Scott System Parameter Values. The Published Data of Robert Munafo [online]. [cit. 2016-05-01]. Dostupné z: <http://mrob.com/pub/comp/xmorphia/pearson-classes.html>,*