

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

Teoria della formazione di strutture regolari sulle reti

Relatore

Prof. Sandro Azaele

Correlatore

Prof. Samir Suweis

Laureando

Eleonora Bergamin

Anno Accademico 2020/2021

Indice

1	Formazione di pattern spaziali con sistemi di reazione-diffusione su dominio continuo	1
1.1	Introduzione	1
1.2	Legge di reazione-diffusione	1
1.3	Analisi lineare del sistema di reazione-diffusione	3
1.3.1	Condizioni per la stabilità in assenza di diffusione	4
1.3.2	Condizioni per l'instabilità in presenza di diffusione	4
1.3.3	Considerazioni e punti salienti	5
2	Analisi di sistemi di reazione-diffusione su grafo	7
2.1	Grafi e proprietà	7
2.2	Dinamica dei sistemi di reazione-diffusione su grafo	9
2.2.1	Comportamento del sistema per instabilità	12
2.3	Confronto tra modello su supporto continuo e su grafo e peculiarità del sistema di reazione e diffusione su grafo	14
2.3.1	Relazione tra grado della rete, valor medio degli della matrice laplaciana, topologia della rete	14
2.3.2	Instabilità per piccole lunghezze d'onda	15
2.3.3	Soluzione del sistema di reazione-diffusione e approssimazione di campo medio	16
3	Conclusioni	18
4	Appendice	19
4.1	Modelli utilizzati	19
4.2	Approssimazione di campo medio	20
	Bibliografia	22

Capitolo 1

Formazione di pattern spaziali con sistemi di reazione-diffusione su dominio continuo

1.1 Introduzione

Uno dei pionieri della biologia matematica può essere considerato Alan Turing, che nel 1952 per primo cercò di dare una spiegazione matematica della morfogenesi, che corrisponde in embriologia all'insieme dei processi che portano alla diversificazione di tessuti e organi a partire da elementi costituenti indifferenziati. Egli propose un cosiddetto modello di reazione-diffusione che prevede la presenza di elementi chiamati morfogeni, che diffondono modificando la loro concentrazione e controllano i processi di differenziazione. Il problema, matematicamente, è definito da equazioni alle derivate parziali. Il modello è tuttavia molto versatile e può essere applicato a diversi ambiti, tra cui ad esempio chimica, ecologia, biologia. Esso infatti è in grado di descrivere la formazione di strutture spaziali regolari in un sistema costituito da due sostanze, attivatore e inibitore. Ciò è conseguenza dell'instabilità del sistema a piccole perturbazioni senza le quali esso si troverebbe in uno stato omogeneo.

Lo studio delle dinamiche descritte è stato effettuato storicamente su sistemi caratterizzati da un dominio spaziale continuo. Negli ultimi decenni, con la diffusione dell'utilizzo della teoria dei grafi, o reti, in diverse discipline, si è ampliato l'interesse alla descrizione dei fenomeni di formazione di strutture regolari su reti.

È questo anche l'interesse di questa analisi, che vuole ripercorrere la teoria matematica del meccanismo proposto da Turing e generalizzarlo a grafi non orientati, andando ad analizzare le analogie e le differenze rispetto al caso costituito da dominio continuo.

La teoria descritta e sviluppata è applicata al modello di Mimura-Murray. I risultati ricavati in questo elaborato sono ricavati da grafi detti di tipo scale-free costruiti con l'algoritmo di Barabási-Albert, come è illustrato in modo più approfondito nella trattazione. Le reti scale-free infatti sono particolarmente interessanti in quanto si prestano a descrivere diverse reti reali quali ad esempio reti sociali, Internet e il World Wide Web.

1.2 Legge di reazione-diffusione

I modelli di reazione-diffusione sono modelli matematici basati sulla legge di reazione-diffusione, e descrivono la variazione nel tempo e nello spazio delle determinate quantità che si vogliono osservare, che possono essere

ad esempio popolazioni o insiemi di particelle, cellule, animali o sostanze chimiche.

Nella trattazione si farà riferimento in particolare all'esempio di specie chimiche interagenti, ma è da ricordare che questi modelli hanno ambito di applicazione molto più vasto.

Si vuole ora dunque ricavare la legge di reazione-diffusione.

Si consideri una sostanza, o specie, U con concentrazione $u(\vec{x}, t)$ in \mathbb{R}^3 e $\vec{J}(\vec{x}, t)$ il flusso di tale sostanza. Sia S una superficie nello spazio e \vec{k} il versore normale ad essa, V il volume racchiuso da tale superficie. La generale equazione di conservazione di materia dice che la velocità di cambiamento di quantità di sostanza nel volume è dato dalla velocità di flusso relativa alla sostanza che fuoriesce dalla superficie S sommata alla quantità di sostanza creata nel volume V . Allora se $f(u(\vec{x}, t))$ controlla la dinamica e quindi rappresenta la sorgente di sostanza, deve valere

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u(\vec{x}, t) dV = - \int_S \vec{k} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t) dS + \int_V f(u(\vec{x}, t)) dV \quad (1.1)$$

Utilizzando il teorema della divergenza, si può riscrivere l'equazione 1.1 come

$$\int_V \left(\frac{\partial}{\partial t} u(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t) - f(u(\vec{x}, t)) \right) dV = 0 \quad (1.2)$$

Poiché l'equazione deve essere soddisfatta per ogni volume scelto, si può non considerare l'integrale e rimane

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\vec{x}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t) - f(u(\vec{x}, t)) = 0 \quad (1.3)$$

Si utilizza quindi la legge di Fick $\vec{J}(\vec{x}, t) = -D \nabla u(\vec{x}, t)$, dove D è la diffusività. Dunque sostituendola in 1.3 si ottiene che

$$\frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} = f(u(\vec{x}, t)) + D \nabla^2 u(\vec{x}, t) \quad (1.4)$$

La legge appena ottenuta è chiamata di reazione-diffusione, ed è cruciale nello studio di interazioni tra sostanze e specie, ognuna descrivibile da una legge espressa in questa forma, con una propria funzione che descrive la dinamica associata.

Si considera qui un sistema costituito da due specie interagenti U e V in un mezzo omogeneo continuo, con concentrazioni rispettivamente $u(\vec{x}, t)$ e $v(\vec{x}, t)$. Qui U è considerato essere una specie attivatore, ossia la concentrazione u aumenta proprio a causa della presenza di sostanza u , ma aumenta anche la concentrazione v , e V è la specie inibitore, che fa diminuire la concentrazione della specie U . Questo sistema è descritto da un sistema di equazioni differenziali

$$\begin{cases} \frac{\partial u(\vec{x}, t)}{\partial t} = f(u(\vec{x}, t), v(\vec{x}, t)) + D_u \nabla^2 u(\vec{x}, t) = f(u(\vec{x}, t), v(\vec{x}, t)) + \epsilon \nabla^2 u(\vec{x}, t) \\ \frac{\partial v(\vec{x}, t)}{\partial t} = g(u(\vec{x}, t), v(\vec{x}, t)) + D_v \nabla^2 v(\vec{x}, t) = g(u(\vec{x}, t), v(\vec{x}, t)) + \sigma \epsilon \nabla^2 v(\vec{x}, t) \end{cases} \quad (1.5)$$

dove $f(u, v)$ e $g(u, v)$ descrivono l'interazione tra u e v , e dipendono dal sistema in esame. I coefficienti di diffusione D_u e D_v sono reali positivi, $\epsilon = D_u > 0$ è la mobilità dell'attivatore, e $\sigma = \frac{D_v}{D_u}$ è il rapporto tra i coefficienti di diffusione. D'ora in poi non verranno riportate esplicitamente le dipendenze da \vec{x} e t , saranno sottintese.

L'intuizione di Turing nel 1952 fu che, se in assenza di diffusione u e v tendono a uno stato stabile omogeneo e uniforme allora sotto particolari condizioni si possono creare pattern non omogenei nello spazio a causa dell'instabilità del sistema dovuta alla diffusione.

1.3 Analisi lineare del sistema di reazione-diffusione

Si studia ora il modello di Turing, considerando due specie su dominio continuo e omogeneo, che non hanno una direzione preferenziale di diffusione.

Nella teoria di Turing, il sistema di reazione e diffusione che regola le concentrazioni u e v nel tempo di due specie U e V è nella forma 1.5. È importante notare però che per definire il problema matematico è necessario considerare anche la condizione di zero flusso, per indicare che il sistema è isolato nel proprio dominio, ossia denotato \vec{n} il vettore normale rispetto al bordo del dominio Ω

$$(\vec{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega \quad (1.6)$$

I pattern si possono definire, in un mezzo continuo, come le soluzioni stabili, stazionarie e spazialmente eterogenee del sistema di equazioni 1.5. Una instabilità guidata da diffusione, o instabilità di Turing, si crea quando uno stato stazionario omogeneo stabile in assenza di diffusione risulta instabile a piccole perturbazioni quando la diffusione è presente.

Si ricorda che la formazione di pattern spaziali è un fenomeno fortemente non lineare, determinato dalle equazioni 1.5. Una buona indicazione tuttavia può essere data da un'analisi lineare vicino agli equilibri del sistema, che ora dunque si effettua. Definiti

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \quad \vec{F}(\vec{u}) = \begin{pmatrix} f(u, v) \\ g(u, v) \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \sigma\epsilon \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Si ottiene, riscrivendo le 1.5, $\vec{u}_t = \vec{F}(\vec{u}) + D\nabla^2\vec{u}$. Considerato \vec{u}_0 tale che $\vec{F}(\vec{u}_0) = 0$, allora \vec{u}_0 è un equilibrio per il sistema, ed è possibile effettuare una linearizzazione attorno a questo equilibrio. Definito $\vec{w} = \vec{u} - \vec{u}_0$ e $\|\vec{w}\| \ll 1$ Il sistema linearizzato (trascurando i termini di ordine superiore in \vec{w}) diventa

$$\vec{w}_t = \vec{F}(\vec{u}_0) + J\vec{w} + D\nabla^2\vec{w} = J\vec{w} + D\nabla^2\vec{w} \quad J = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix} \Big|_{\vec{u}=\vec{u}_0} = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \Big|_{\vec{u}=\vec{u}_0} \quad (1.8)$$

Con J matrice costante Jacobiano della linearizzazione. Successivamente, dove non indicato le derivate si intenderanno sempre effettuate nello stato \vec{u}_0 . Risolvendo quindi l'equazione 1.8 unita alla condizione di zero flusso 1.6 per \vec{w} , si nota che questa è lineare e dunque la soluzione generale deve essere somma di singole separabili. Inoltre, si può applicare il metodo di separazione delle variabili, perciò si cerca una soluzione della forma $\vec{w}(\vec{x}, t) = C(t)\vec{W}(\vec{x})$. Sostituendo in 1.8 si ottiene

$$\frac{1}{C} \frac{dC}{dt} \vec{W} = J\vec{W} + D\nabla^2\vec{W} \quad (1.9)$$

Poiché \vec{W} non dipende dal tempo e quindi il membro a destra non dipende dal tempo, è necessario che $\frac{1}{C} \frac{dC}{dt}$ non dipenda dal tempo e dunque sia costante, perciò $\frac{1}{C} \frac{dC}{dt} = \lambda$, con $\lambda \in \mathbb{C}$. Integrando si trova che $C(t) = C_0 e^{\lambda t}$. Sostituendo questo in 1.9 si ottiene che per \vec{W} deve dunque valere $\lambda\vec{W} - J\vec{W} - D\nabla^2\vec{W} = 0$.

\vec{W} deve soddisfare la condizione di zero flusso analoga a 1.6 e $\nabla^2\vec{W} + k^2\vec{W} = 0$, e dunque deve valere $[\lambda I - J + Dk^2]\vec{W} = 0$, e il polinomio caratteristico è dato da $\det[\lambda I - J + Dk^2] = 0$, che si scrive

$$\text{Det} \begin{pmatrix} \lambda - f_u + \epsilon k^2 & -f_v \\ -g_u & \lambda - g_v + \sigma\epsilon k^2 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.10)$$

Che risulta

$$\begin{aligned}\lambda^2 + [\epsilon(1 + \sigma)k^2 - (f_u + g_v)]\lambda + h(k^2) &= 0 \\ h(k^2) &= \text{Det}(k^2 D - J) = \epsilon^2 \sigma k^4 - \epsilon(\sigma f_u + g_v)k^2 + (f_u g_v - g_u f_v)\end{aligned}\quad (1.11)$$

Dunque, per ogni k^2 soluzione di $\nabla^2 \vec{W} + k^2 \vec{W} = 0$ si può trovare $\lambda(k^2)$ tale che la soluzione a variabili separabili sia della forma $\vec{w}(\vec{x}, t) = C_0 e^{\lambda(k^2)t} \vec{W}_k(\vec{x})$. La relazione $\lambda = \lambda(k^2)$ è detta relazione di dispersione e k , autovalore dell'equazione spaziale, è chiamato numero d'onda.

La forma più generale della soluzione è quindi data dalla combinazione delle soluzioni separabili esistenti, ossia

$$\vec{w}(\vec{x}, t) = \sum_k C_k e^{\lambda(k^2)t} \vec{W}_k(\vec{x}) \quad (1.12)$$

In una dimensione le $\vec{W}_k(\vec{x})$ sono delle funzioni sinusoidali. Nel caso di più dimensioni, le autofunzioni spaziali sono costituite dai prodotti delle autofunzioni spaziali in una dimensione, in cui ciascuna delle autofunzioni nel prodotto è associata a una dimensione spaziale. Il nuovo valore k^2 è dato dalla somma dei quadrati degli autovalori relativi alle diverse direzioni.

Dunque l'equazione 1.12 corrisponde a effettuare un'espansione in serie di Fourier della perturbazione $\vec{w}(\vec{x}, t)$ sui modi $\vec{W}_k(\vec{x})$, dove i coefficienti C_k sono dati dalle condizioni iniziali del problema.

È da notare che, data la forma generale della soluzione e la presenza dell'esponenziale, la relazione di dispersione indica la velocità iniziale della crescita della perturbazione. In particolare, si ha che essa cresce se $\text{Re}(\lambda) > 0$, mentre si estingue se $\text{Re}(\lambda) < 0$.

Per avere instabilità di Turing deve essere verificato che lo stato stazionario omogeneo, stabile in assenza di diffusione, diventa instabile con diffusione. Si vogliono studiare le condizioni per cui avviene questo fenomeno.

1.3.1 Condizioni per la stabilità in assenza di diffusione

Si considera ora il caso in cui $k = 0$, corrispondente l'assenza di diffusione. Si ha che la condizione matematica per l'instabilità sulle equazioni 1.11 è $\text{Re}(\lambda) < 0$ per ogni valore di λ . In particolare le equazioni 1.11 diventano

$$\lambda^2 - (f_u + g_v)\lambda + (f_u g_v - g_u f_v) = 0 \quad \lambda_{\pm} = \frac{(f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)}}{2} \quad (1.13)$$

Si ricava dunque che la condizione per ottenere $\text{Re}(\lambda) < 0$ sono tali che

$$\begin{cases} \text{Tr} J = (f_u + g_v) < 0 \\ \text{Det} J = (f_u g_v - f_v g_u) > 0 \end{cases} \quad (1.14)$$

1.3.2 Condizioni per l'instabilità in presenza di diffusione

Ci si interessa al caso in cui $k \neq 0$, corrispondente alla presenza di diffusione. Di nuovo, considerando le equazioni 1.11 si ha che per avere instabilità deve esistere un k tale che $\text{Re}(\lambda) > 0$. Le soluzioni delle equazioni 1.11 sono

$$\lambda_{\pm} = \frac{-\text{Tr}(k^2 D - J) \pm \sqrt{(\text{Tr}(k^2 D - J))^2 - 4 \text{Det}(k^2 D - J)}}{2} \quad (1.15)$$

Sfruttando il fatto che devono valere le condizioni per la stabilità dello stato omogeneo, si vede che $Tr(k^2 D - J) = \epsilon(1 + \sigma)k^2 - (f_u + g_v) > 0$.

Allora dall'equazione 1.15 si ricava che la condizione per l'instabilità è che $Det(k^2 D - J) < 0$ per qualche k , altrimenti si avrà sempre $Re(\lambda) < 0$. Perché tale condizione valga, ricordando che $Det J > 0$ e osservando le equazioni 1.11, si ricava che deve valere $\epsilon(\sigma f_u + g_v) > 0$.

Questa condizione non è tuttavia sufficiente: è necessario anche richiedere che il minimo di $Det(k^2 D - J)$ sia minore di zero. Derivando dunque la sua espressione in 1.11 rispetto a k^2 e ponendola pari a zero si ottiene

$$\min(Det(k^2 D - J)) = (f_u g_v - g_u f_v) - \frac{(\sigma f_u + g_v)^2}{4\sigma} \quad k_{min}^2 = \frac{(\sigma f_u + g_v)}{2\epsilon\sigma} \quad (1.16)$$

E dunque la condizione per cui tale valore sia negativo è $(\sigma f_u + g_v)^2 > 4\sigma(f_u g_v - g_u f_v)$.

È possibile in questa analisi anche ricavare il valore critico per il rapporto σ tra i coefficienti di diffusione delle specie una volta fissati i parametri del sistema, e si trova ponendo $Det(k^2 D - J) = 0$. Si trova

$$\sigma_c^2 f_u^2 + 2(2f_v g_u - f_u g_v)\sigma_c + g_v^2 = 0 \quad \sigma_c = \frac{-(2f_v g_u - f_u g_v) + \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - f_u^2 g_v^2}}{f_u^2} \quad (1.17)$$

Ricordando che si richiede $\sigma > 0$.

Dall'analisi ora effettuata si possono ricavare i valori di k per cui si ha instabilità, che sono $k_-^2 < k^2 < k_+^2$, con $Det(k^2 D - J) < 0$. Si ha instabilità dunque per

$$\begin{cases} k_-^2 < k^2 < k_+^2 \\ k_{\pm}^2 = \frac{\epsilon(\sigma f_u + g_v) \pm \sqrt{(\epsilon(\sigma f_u + g_v))^2 - 4\epsilon^2\sigma(f_u g_v - g_u f_v)}}{2\epsilon^2\sigma} \end{cases} \quad (1.18)$$

con k tale che $\nabla^2 \vec{W} + k^2 \vec{W} = 0$ e per cui è verificata la condizione di zero flusso per \vec{W} , dunque riprendendo la forma dell'equazione 1.6, $\vec{n} \cdot \nabla \vec{W} = 0 \quad \forall \vec{x} \in \partial\Omega$.

Le condizioni per avere la condizione di instabilità, unite alle 1.14, sono

$$\begin{cases} (\sigma f_u + g_v) > 0 \\ (\sigma f_u + g_v)^2 > 4\sigma(f_u g_v - g_u f_v) \end{cases} \quad (1.19)$$

È possibile anche individuare il valore di k di soglia per cui può cominciare a verificarsi la crescita di un modo a causa della perturbazione. Ciò avviene quando $h(k^2) = Det(k^2 D - J) = \epsilon^2 \sigma k^4 - \epsilon(\sigma f_u + g_v)k^2 + (f_u g_v - g_u f_v) = 0$. Inoltre, deve verificarsi dalle equazioni 1.18 $(\epsilon(\sigma f_u + g_v))^2 = 4\epsilon^2\sigma(f_u g_v - g_u f_v)$, ossia devono coincidere k_- e k_+ . Risolvendo l'equazione si ricava il valore critico di k , che corrisponde a $k_c^2 = \frac{(\sigma f_u + g_v)}{2\epsilon\sigma}$.

1.3.3 Considerazioni e punti salienti

Dalle condizioni trovate si ricava anche perché il sistema è di tipo attivatore-inibitore. Si è ricavato infatti che si deve verificare $Tr J < 0$. Allora deve essere vero che almeno uno tra f_u e g_v deve essere negativo. Senza perdere generalità si assume $g_v < 0$. Poiché deve valere anche la prima delle 1.19 si ottiene $f_u > 0$ in quanto $D_v = \epsilon\sigma > 0$ e $\epsilon > 0$. Allora dalla linearizzazione delle 1.5 si vede che $g_v < 0$ implica che la presenza di sostanza v frena la crescita della propria concentrazione e $f_u > 0$ determina che u agisca come autocatalizzatore. Inoltre si vede che $D_v > D_u$, altrimenti non potrebbe verificarsi contemporaneamente

$TrJ < 0$ e $(\sigma f_u + g_v) > 0$.

Dall'analisi effettuata si ricava inoltre che, nel caso in cui $Re(\lambda) < 0$ per tutti i k , l'equilibrio \vec{u}_0 è stabile e stazionario e dunque perturbazioni a tale stato si estinguono e la soluzione stazionaria stabile rimane l'equilibrio. Per questo non si ha emergenza di pattern dalla perturbazione dello stato stabile stazionario omogeneo.

Nel caso in cui invece siano presenti dei valori del numero d'onda per cui $Re(\lambda) > 0$ (ed è vero dunque $\sigma > \sigma_c$) l'equilibrio \vec{u}_0 è instabile, e perturbazioni dello stato stazionario possono crescere: in particolare, finché tali perturbazioni sono di piccola entità il sistema può ancora essere descritto dall'analisi lineare. Con il passare del tempo tuttavia le perturbazioni crescono, e la dinamica diventa totalmente non lineare.

Si può verificare che la teoria lineare è comunque un buon indicatore dello stato stazionario stabile che il sistema assume a seguito di una perturbazione. Questo è vero in particolar modo se i modi instabili corrispondono a piccoli numeri d'onda e se il sistema ha parametri vicini al loro valore di biforcazione, ossia il valore per cui lo stato omogeneo passa da essere stabile a instabile in presenza di diffusione.

In una dimensione e in presenza di un solo possibile modo instabile, che è una cosinusoide, le soluzioni stabili stazionarie per le concentrazioni hanno ancora andamento sinusoidale.

In particolare, si assume che nell'espressione della generica soluzione 1.12 il modo dominante sia quello associato al valore massimo di $Re(\lambda)$, a causa della presenza del termine esponenziale in $Re(\lambda)$ che contribuisce inizialmente alla crescita.

Ad ogni numero d'onda può essere associata una lunghezza d'onda, $\omega_k = \frac{2\pi}{k}$. Allora, in una dimensione, a un tempo sufficientemente lungo dopo la perturbazione si otterrà uno stato stazionario stabile avente andamento sinusoidale nel dominio, con lunghezza d'onda caratteristica associata. Questo implica che si creano zone nel dominio in cui si ha maggiore concentrazione di una delle due specie rispetto all'altra. In più dimensioni, si ha un processo analogo, tenendo tuttavia conto dell'analisi sulla forma delle autofunzioni già fatta.

In generale quindi la soluzione che si sviluppa dalle perturbazioni è uno stato stazionario spazialmente eterogeneo: si viene quindi a formare un pattern nel dominio del sistema che inizialmente era spazialmente omogeneo.

È importante sottolineare inoltre che il numero d'onda è vincolato ad assumere valori in modo discreto nel caso di dominio finito per soddisfare alla condizione di zero flusso, mentre questo non è più vero nel caso di dominio infinito.

In questa trattazione si considera come riferimento il caso di dominio infinito, in modo che k assuma valori in modo continuo.

Capitolo 2

Analisi di sistemi di reazione-diffusione su grafo

2.1 Grafi e proprietà

Questo elaborato, che si focalizza sulla formazione dei cosiddetti pattern di Turing su reti, ha come interesse quelle che vengono chiamate reti complesse. Esse sono grafi, o reti, ossia un set di elementi che sono collegati tra loro. In particolare esse hanno proprietà tali da poter modellizzare sistemi reali, e hanno perciò una topologia non banale. Nelle reti complesse inoltre possono emergere dinamiche collettive degli elementi.

Questo è di interesse in tutti gli ambiti che prevedono la possibilità di interazione dei componenti, quali la biologia, le telecomunicazioni, la sociologia. Questa sezione ha come obiettivo descrivere brevemente gli elementi di teoria dei grafi utili alla descrizione del meccanismo di Turing su reti.

Un grafo $G = (N, L)$ è costituito da due insiemi, N che è formato dai nodi, o vertici, $i = 1, \dots, N$ e L che è costituito dagli archi, o link, tra coppie di nodi dell'insieme N .

In particolare un grafo si dice non orientato se tutte le coppie di vertici del grafo sono non ordinate. Questo implica che le connessioni non hanno una direzione preferenziale, e dunque c'è simmetria di scambio di informazione tra due nodi. È da notare che questo tipo di grafo non può contenere cappi, ossia archi da un nodo a sé stesso. Viceversa, quando i link hanno una direzione preferenziale per scambiare informazione tra due nodi, il grafo viene detto orientato. Per questo tipo di grafo in L sono contenuti anche i cappi.

Se esiste un link tra due nodi essi si dicono adiacenti. Si può fare quindi una descrizione del grafo tramite la sua matrice di adiacenza A . Questa è una matrice quadrata $N \times N$ a coefficienti reali definita come

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se esiste un link dal nodo } i \text{ al nodo } j \\ 0 & \text{se non esiste un link dal nodo } i \text{ al nodo } j \end{cases} \quad (2.1)$$

Per i grafi non orientati la matrice di adiacenza è simmetrica, perché un link tra il nodo i e il nodo j costituisce sia un arco tra il nodo i e il nodo j ma anche un arco tra il nodo j e il nodo i .

Il grado di un nodo è costituito dal numero di link connessi a un vertice. In un grafo non orientato il numero di archi uscenti ed entranti nel nodo coincidono. In un grafo orientato invece i due valori differiscono.

Il grado di un nodo e il grado medio del grafo sono calcolabili come

$$k_i = \sum_{j \in N} A_{ij} \quad \bar{k} = \frac{1}{N} \sum_{i \in N} k_i \quad (2.2)$$

Il cammino minimo è il percorso più breve attraverso il grafo da un vertice a un altro. È caratterizzato dal numero di collegamenti che devono essere percorsi per collegare i due nodi considerati. In particolare è da ricordare che può esistere più di un cammino minimo tra due nodi.

In un grafo non orientato il cammino minimo medio l tra le coppie di vertici della rete è dato da

$$l = \frac{1}{\frac{N(N+1)}{2}} \sum_{i \geq j} d_{ij} \quad (2.3)$$

con d_{ij} il cammino minimo tra due nodi i e j .

Il diametro del grafo invece è la lunghezza del più lungo cammino minimo presente tra due nodi della rete.

Un'altra importante caratteristica che definisce il grafo è la distribuzione dei gradi o degree distribution, che rappresenta appunto la distribuzione dei gradi dei nodi nel grafo. In particolare si definisce p_k la probabilità che un vertice casualmente scelto nella rete abbia grado k , che corrisponde anche alla frazione di vertici della rete che hanno tale grado.

Le reti possono essere identificate dalla loro degree distribution.

Ci sono in particolare alcuni casi notevoli di strutture topologiche di un grafo.

In un reticolo con struttura regolare costruito in S dimensioni con N nodi, si ha che il cammino minimo medio tra due nodi del reticolo è $N^{1/S}$.

Una rete small-world è una rete tale per cui il cammino minimo medio l è piccolo rispetto al numero N di nodi presenti nella rete, e dunque la maggioranza di coppie di vertici ha un breve cammino che li congiunge.

Di particolare interesse sono i cosiddetti grafi scale-free. In questi la degree distribution segue una legge di potenza, e dunque il numero di nodi con grado k ha un andamento del tipo

$$p_k \sim k^{-\gamma} \quad (2.4)$$

Questo tipo di grafo è caratterizzato dalla compresenza di nodi ad alto e basso grado. In questo tipo di rete inoltre si ha che il cammino minimo medio cresce meno rapidamente della funzione $\log N / \log \log N$ al variare di N .

È da notare quindi che per avere lo stesso cammino minimo medio di una rete small-world o scale-free in un reticolo regolare, e dunque avere una rete molto connessa, è necessario avere $d \gg 1$.

Un altro elemento chiave per l'analisi successiva è la matrice laplaciana L del grafo. Questa è una matrice $N \times N$ a coefficienti reali definita come

$$L_{ij} = A_{ij} - k_i \delta_{ij} \quad (2.5)$$

In un grafo non orientato la matrice di adiacenza è simmetrica e dunque anche la matrice laplaciana. In particolare, poiché L è reale e simmetrica per il teorema spettrale ha N autovalori reali (con N il numero di nodi del grafo) ciascuno associato al rispettivo autovettore, e questi ultimi sono tra loro ortonormali. Gli

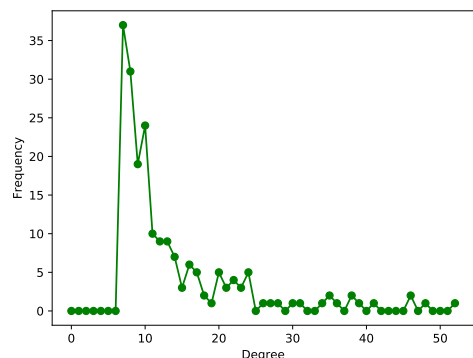


Fig. 2.1: Rappresentazione della degree distribution per una rete costruita con l'algoritmo di Barabási-Albert con i parametri descritti nella sezione 4.1.

autovalori Λ_α e gli autovettori $\phi^\alpha = (\phi_1^\alpha, \phi_2^\alpha, \dots, \phi_N^\alpha)^t$ sono determinati dalla relazione

$$\sum_{j \in N} L_{ij} \phi_j^\alpha = \Lambda_\alpha \phi_i^\alpha \quad \text{con} \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.6)$$

Si può dimostrare inoltre che L è una matrice semi-definita negativa, e dunque tutti i suoi autovalori sono minori o uguali a zero.

Considerate la matrice A e L come definite e il grado di un vertice definito come in 2.2, scelto un qualsiasi vettore in \mathbb{R}^N $b = (b_1, b_2, \dots, b_N)^t$, vale

$$\begin{aligned} b^t L b &= \sum_{i,j \in N} b_i A_{ij} b_j - \sum_{i,j \in N} b_i k_i \delta_{ij} b_j = \sum_{i,j \in N} b_i A_{ij} b_j - \sum_{i \in N} k_i b_i^2 = \sum_{i,j \in N} (A_{ij} b_i b_j - A_{ij} b_i^2) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j \in N} (2A_{ij} b_i b_j - A_{ij} b_i^2 - A_{ji} b_j^2) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in N} A_{ij} (b_i - b_j)^2 \leq 0 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Un'altra proprietà della matrice laplaciana è che un suo autovalore è $\Lambda = 0$, con autovettore dato da $\phi = (1, 1, \dots, 1)^t$.

$$L\phi = \sum_{j \in N} (A_{ij} - k_i \delta_{ij}) \phi_j = k_i - k_i = 0 \quad (2.8)$$

Poiché L è semi-definita negativa e 0 è il maggiore dei suoi autovalori, si sceglie di ordinare gli indici in modo tale che valga sempre $0 = \Lambda_1 \geq \Lambda_2 \geq \dots \geq \Lambda_N$.

2.2 Dinamica dei sistemi di reazione-diffusione su grafo

In questa sezione si vuole andare ad analizzare la dinamica dei sistemi di reazione e diffusione su grafo e la creazione di instabilità di Turing sullo stesso, già presentata e discussa nel capitolo precedente in mezzi continui. Si considera quindi di nuovo il caso di due specie U e V interagenti, che possono diffondere nello spazio. Poiché in questo caso il supporto è discreto, si ha che la diffusione può avvenire tra i nodi tramite i link che li collegano. Il grafo, e dunque l'insieme dei suoi link, è descritto dalla matrice di adiacenza. In questo elaborato si considera il caso in cui il grafo è non orientato, e dunque la matrice di adiacenza è simmetrica, con $A_{ij} = A_{ji}$.

Si considerino quindi due specie U e V presenti nei vertici del grafo costituito da N nodi, che diffondono da un vertice all'altro tramite gli archi presenti nel grafo. Le specie, analogamente al caso di supporto continuo, sono caratterizzate da coefficienti di diffusione D_u e D_v reali positivi, $\epsilon = D_u > 0$ la mobilità della specie U chiamata attivatore.

Il grafo è costituito da un numero finito di vertici $i = 1, \dots, N$; le concentrazioni delle specie assumono un valore definito in ciascuno dei nodi distinti della rete, e verranno indicate come u_i e v_i sul vertice i -esimo del grafo.

Il flusso di sostanza relativo alla specie U in ingresso nel nodo i -esimo considerati tutti i contributi portati dagli archi incidenti è dato da $J_i = \sum_{j \in N} A_{ij} (u_j - u_i)$, e si dimostra

$$\sum_{j \in N} A_{ij} (u_j - u_i) = \left(\sum_{j \in N} A_{ij} u_j - u_i \sum_{j \in N} A_{ij} \right) = \left(\sum_{j \in N} A_{ij} u_j - k_i u_i \right) = \sum_{j \in N} (A_{ij} - k_i \delta_{ij}) u_j = \sum_{j \in N} L_{ij} u_j \quad (2.9)$$

Ricordando la definizione di grado di un nodo 2.2. Riprendendo dal capitolo 1 in 1.2 la definizione delle funzioni $f(u_i, v_i)$ e $g(u_i, v_i)$ come funzioni che descrivono la dinamica tra le specie al nodo i -esimo, le equazioni che descrivono il sistema reattore-inibitore su grafo sono simili alle equazioni 1.5, e sono

$$\begin{cases} \frac{du_i(t)}{dt} = f(u_i, v_i) + \epsilon \sum_{j \in N} L_{ij} u_j \\ \frac{dv_i(t)}{dt} = g(u_i, v_i) + \sigma \epsilon \sum_{j \in N} L_{ij} v_j \end{cases} \quad (2.10)$$

Si consideri ora lo stato stabile omogeneo del sistema in assenza di diffusione (u_0, v_0) , tale per cui $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$. Dall'analisi lineare in 1.3, per avere questo tipo di stato deve essere verificato $Tr J < 0 \wedge Det J > 0$, dove J è lo jacobiano della linearizzazione. In presenza di diffusione, come visto, tale stato può diventare instabile per effetto di una perturbazione. Viene allora introdotta una perturbazione attorno allo stato stabile uniforme omogeneo, non omogenea in quanto dipendente dal nodo coerentemente con quanto spiegato in 2.1, con $w_{u,i} = u_i - u_0 \wedge w_{v,i} = v_i - v_0$. Inserendo tale perturbazione nelle equazioni 2.10 e linearizzando si ottiene

$$\begin{cases} \frac{dw_{u,i}(t)}{dt} = f_u w_{u,i} + f_v w_{v,i} + \epsilon \sum_{j \in N} L_{ij} w_{u,j} \\ \frac{dw_{v,i}(t)}{dt} = g_u w_{u,i} + g_v w_{v,i} + \sigma \epsilon \sum_{j \in N} L_{ij} w_{v,j} \end{cases} \quad (2.11)$$

Per risolvere il sistema si possono espandere le perturbazioni sugli autovettori, ortonormali, della matrice laplaciana, con i suoi autovalori e autovettori come definiti nella sezione precedente, e per cui vale 2.6.

Le perturbazioni si possono dunque esprimere come

$$\begin{cases} w_{u,i} = \sum_{\alpha \in N} c_{\alpha} e^{\lambda_{\alpha} t} \phi_i^{\alpha} \\ w_{v,i} = \sum_{\alpha \in N} c_{\alpha} B_{\alpha} e^{\lambda_{\alpha} t} \phi_i^{\alpha} \end{cases} \quad (2.12)$$

con i valori c_{α} e B_{α} determinati dalle condizioni iniziali del problema.

Sostituendo tali espressioni nel sistema 2.11, si ottiene un set di N equazioni indipendenti ciascuna associata a un modo ϕ_{α} e dunque al suo autovalore Λ_{α} .

Sostituendo si ottiene dunque il sistema

$$\lambda_{\alpha} \begin{pmatrix} c_{\alpha} \\ c_{\alpha} B_{\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u + \epsilon \Lambda_{\alpha} & f_v \\ g_u & g_v + \sigma \epsilon \Lambda_{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\alpha} \\ c_{\alpha} B_{\alpha} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Portando il membro di destra a sinistra, il sistema equivale a $[\lambda_{\alpha} I - J - D \Lambda_{\alpha}](c_{\alpha}, c_{\alpha} B_{\alpha})^t = 0$. Si deve ora calcolare il determinante della matrice in modo da calcolare il polinomio caratteristico e trovare le soluzioni λ_{α} . Si nota che l'analisi che si sta effettuando è analoga al caso continuo, sostituendo a $k^2 \leftrightarrow -\Lambda_{\alpha}$ (e ricordando che tuttavia k può assumere valori in modo continuo, mentre Λ_{α} solo in modo discreto). Risolvendo

$$Det \begin{pmatrix} \lambda_{\alpha} - f_u - \epsilon \Lambda_{\alpha} & -f_v \\ -g_u & \lambda_{\alpha} - g_v - \sigma \epsilon \Lambda_{\alpha} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.14)$$

Si ricava dunque che le soluzioni sono

$$\lambda_{\alpha, \pm} = \frac{Tr(\Lambda_{\alpha} D + J) \pm \sqrt{(Tr(\Lambda_{\alpha} D + J))^2 - 4 Det(\Lambda_{\alpha} D + J)}}{2} \quad (2.15)$$

Valgono di nuovo le considerazioni effettuate per l'analisi su dominio continuo a causa della forma simile delle perturbazioni, dunque se nessun autovalore λ_α ha parte reale positiva, si ha che la perturbazione non cresce e il sistema torna allo stato omogeneo originale. È da notare inoltre che si può vedere $\lambda_{\alpha,\pm}$ come restrizione della funzione λ_\pm definita per tutti i valori negativi della variabile Λ a un dominio discreto costituito dagli autovalori della matrice laplaciana. Questo è illustrato graficamente nella figura 2.2.

Se invece esiste un Λ_α per cui $Re(\lambda_\alpha) > 0$, allora si ha che dal modo corrispondente la perturbazione cresce, e il sistema tende a un nuovo stato stabile che tuttavia è non omogeneo.

Poiché delle radici 2.15 solo quella con il segno positivo può avere parte reale positiva, si considera $\lambda_{\alpha,+} = \lambda_\alpha$.

Dalle condizioni di stabilità è noto che $Tr J < 0$, e poiché gli autovalori Λ_α sono negativi si ha che $Tr(\Lambda_\alpha D + J) < 0$. Dunque, per avere qualche $Re(\lambda_\alpha) > 0$ dall'equazione 2.15 si vede che è necessario avere $Det(\Lambda_\alpha D + J) < 0$.

Questa espressione si può riscrivere come quadratica in Λ_α :

$$Det(\Lambda_\alpha D + J) = \sigma(\epsilon \Lambda_\alpha)^2 + \epsilon(\sigma f_u + g_v) \Lambda_\alpha + (f_u g_v - g_u f_v) \quad (2.16)$$

In questa espressione il termine noto, corrispondente a $Det J$, è positivo dalle condizioni di stabilità, e gli autovalori della matrice laplaciana sono negativi. Dunque perché l'espressione sia negativa è necessario che $(\sigma f_u + g_v) > 0$. È inoltre necessario, come nel caso continuo, imporre che il minimo di 2.16 sia minore di zero. Questo avviene, derivando l'espressione rispetto a Λ_α e ponendola pari a zero, per $\Lambda_\alpha = -\frac{(\sigma f_u + g_v)}{2\epsilon\sigma}$. Sostituendo nell'espressione di minimo e imponendo che quest'ultima sia minore di zero, in modo del tutto analogo al caso continuo si ricava $(\sigma f_u + g_v)^2 > 4\sigma(f_u g_v - g_u f_v) = 4\sigma Det J$.

Riassumendo, le condizioni per instabilità guidata da diffusione o instabilità di Turing sono le 1.14 e

$$\begin{cases} (\sigma f_u + g_v) > 0 \\ (\sigma f_u + g_v)^2 > 4\sigma(f_u g_v - g_u f_v) \end{cases} \quad (2.17)$$

Si vede che i risultati sono quelli ottenuti per il caso continuo, ed è possibile allo stesso modo trovare il valore σ_c , che ha un'espressione del tutto identica. Si ricorda che tale soglia per il parametro σ è il valore al di sopra del quale il sistema può diventare instabile sotto piccole perturbazioni dello stato omogeneo.

$$\sigma_c = \frac{-(2f_v g_u - f_u g_v) + \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - f_u^2 g_v^2}}{f_u^2} \quad (2.18)$$

Dall'uguaglianza $Det(\Lambda_\alpha D + J) = 0$ si ricava anche una condizione per ϵ .

$$\epsilon(\sigma)_{\alpha,\pm} = \frac{(\sigma f_u + g_v) \pm \sqrt{(\sigma f_u + g_v)^2 - 4\sigma(f_u g_v - g_u f_v)}}{2\sigma \Lambda_\alpha} \quad (2.19)$$

Le curve trovate delimitano la regione per il parametro $\epsilon(\sigma)$ per cui è possibile avere instabilità.

Dunque, per ogni autovalore Λ_α della matrice laplaciana si ha un insieme di valori $(\sigma, \epsilon(\sigma))$ per cui è vero $Det(\Lambda_\alpha D + J) < 0$ che è ulteriormente ristretto rispetto a quello già trovato dalla condizione $\sigma > \sigma_c$,

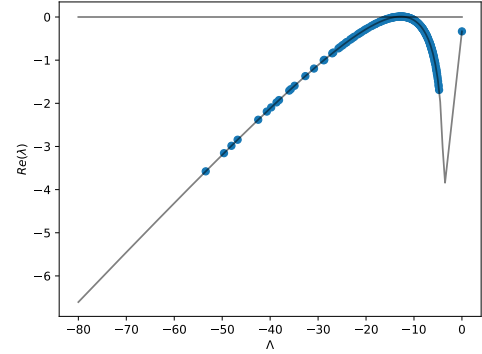


Fig. 2.2: Si considera una rete costruita come descritto nella sezione 4.1. È rappresentata la relazione di dispersione continua $\lambda = \lambda(\Lambda)$ in grigio. Sono poi rappresentati in blu gli effettivi valori λ_α calcolati per gli autovalori Λ_α .

con σ_c dato da 2.18. Questa regione ha, per un singolo autovalore diverso da zero, l'andamento come rappresentato in figura 2.3.

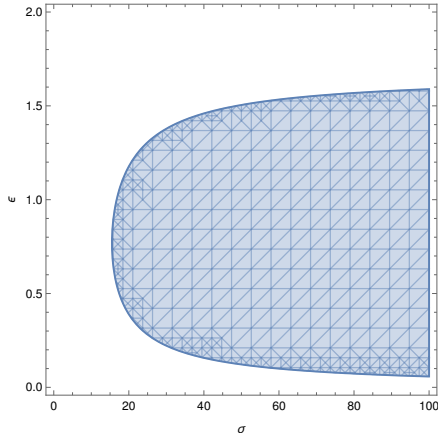


Fig. 2.3: In blu sono rappresentati i valori $(\sigma, \epsilon(\sigma))$ per cui $\text{Det}(\Lambda D + J) < 0$ per il valore arbitrariamente scelto $\Lambda = -2$, con $\epsilon = 0.12$, $\sigma = 15.6$.

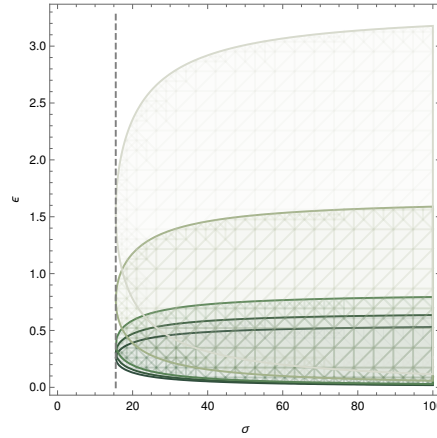


Fig. 2.4: Per un grafo di tipo Barabási-Albert di 6 nodi con $\epsilon = 0.12$, $\sigma = 15.6$, $\bar{k} \sim 6$, rappresentazione per ogni autovalore Λ_α dell'area $\text{Det}(\Lambda_\alpha D + J) < 0$. Il colore diventa più scuro all'aumentare del modulo di Λ_α . Il valore di σ_c è segnalato dalla linea tratteggiata.

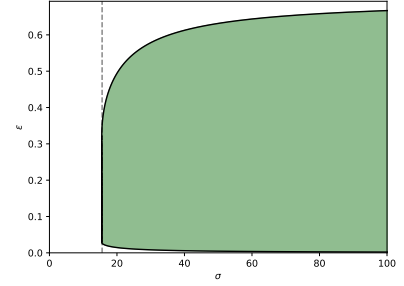


Fig. 2.5: Spazio di Turing per i parametri (σ, ϵ) considerando una rete costruita come descritto in 4.1. La linea tratteggiata rappresenta nel piano la soglia $\sigma = \sigma_c$. Si vede che ora nel caso di $\sigma > \sigma_c$ si hanno punti nel piano per cui non si ha la stabilità.

Considerando poi l'unione degli insiemi di valori $(\sigma, \epsilon(\sigma))$ individuati per ogni autovalore, si ottiene lo spazio di Turing per i parametri (σ, ϵ) ossia l'insieme di valori in cui se lo stato stazionario omogeneo viene perturbato si può creare uno stato stabile non omogeneo a causa della diffusione. Ciò è esemplificato in figura 2.5 per una rete costruita come descritto in 4.1.

Si costruisce in figura 2.4 un grafico rappresentante le regioni in cui $\text{Det}(\Lambda_\alpha D + J) < 0$ per l'insieme di autovalori $0 = \Lambda_1 \geq \Lambda_2 \geq \dots \geq \Lambda_N$ relativi a un grafo di tipo Barabási-Albert di sei nodi con $\epsilon = 0.12$, $\sigma = 15.6$ e $\bar{k} \sim 6$. Il colore della regione diventa più scuro all'aumentare del modulo dell'autovalore. Si osserva che le regioni in cui $\text{Det}(\Lambda_\alpha D + J) < 0$ per i diversi autovalori si intersecano ma non sono contenute le une nelle altre, e all'aumentare del modulo di Λ_α la regione diventa meno estesa e si abbassano i valori di ϵ per cui è verificata la disuguaglianza. Poiché lo spazio di Turing è definito come unione di tutte queste aree, si osserva che la sua estensione aumenta all'aumentare del numero di autovalori ed è tanto maggiore quanto più è piccolo il modulo di questi ultimi.

È necessario prestare attenzione al fatto dunque che per $\sigma > \sigma_c$ non per tutti i valori di ϵ si ha instabilità, ma deve essere verificata anche la condizione sopra spiegata per il parametro ϵ .

Inoltre dalla forma di 2.19 si vede che, fissato un valore di $\sigma > \sigma_c$, per $\Lambda_\alpha \rightarrow +\infty$ si ha che $\epsilon(\sigma)_{\alpha, \pm} \rightarrow 0$, e per $\Lambda_\alpha \rightarrow 0$ $\epsilon(\sigma)_{\alpha, \pm} \rightarrow +\infty$. Allora si vede che nel limite di un numero infinito di autovalori che possono assumere valori in modo continuo, la condizione per instabilità torna a essere $\sigma > \sigma_c$.

2.2.1 Comportamento del sistema per instabilità

La condizione di instabilità per il sistema su grafo è $\text{Re}(\lambda_\alpha) > 0$ per qualche λ_α . Il fenomeno di instabilità può verificarsi, come detto nella sezione precedente, per $\sigma > \sigma_c$ e le condizioni espone per ϵ . In corrispondenza del valore di soglia σ_c , si individua il valore Λ_c per cui il corrispondente λ_c è massimo e pari a zero. La forma per Λ_c si trova derivando l'espressione continua associata al ramo con segno + delle 2.15, e ponendola

pari a zero. È da ricordare che il massimo della funzione continua λ che ha forma 2.15 corrisponde anche al massimo di $Re(\lambda)$. Si ottiene

$$\Lambda_c = \frac{(f_u - g_v) \sigma_c - \sqrt{(-f_v g_u \sigma_c)} (\sigma_c + 1)}{\epsilon \sigma_c (\sigma_c - 1)} \quad (2.20)$$

Come detto Λ_c corrisponde al valore in cui la funzione continua $Re(\lambda)$ assume il suo massimo, zero, per il parametro σ che assume il suo valore critico. Esso ha lo stesso ruolo del valore di soglia k_c nel caso di dominio continuo, presentato nella sezione 1.3.2: entrambi questi valori indicano la soglia oltre la quale un modo può cominciare a crescere a causa della perturbazione iniziale.

Si nota però che gli autovalori della matrice laplaciana sono discreti, e dunque può accadere che tra i reali autovalori non sia presente Λ_c e l'autovalore ad esso più vicino sia $\Lambda_{\alpha,c}$. Questo si considera autovalore critico, in corrispondenza del quale la funzione continua $Re(\lambda)$ ristretta al dominio costituito dagli autovalori ha valore massimo. A causa della discretezza dello spettro, se $Re(\lambda_{\alpha,c}(\Lambda_{\alpha,c}))$ non è maggiore di zero, non si può avere instabilità.

In generale, l'espressione 2.20 calcolata per $\sigma \neq \sigma_c$ determina Λ_{max} in cui $Re(\lambda)$ è massimo per i fissati valori di σ e ϵ . Per valori di σ vicini alla soglia, comunque, tale valore è prossimo a Λ_c .

Analizzando l'espressione 2.20, si osserva che σ_c dato dall'espressione 2.18 non dipende da ϵ , dunque Λ_c dipende da ϵ in modo inversamente proporzionale. Poiché come detto $\Lambda_{\alpha,c}$ è l'effettivo autovalore più vicino a Λ_c , anche questo sarà approssimativamente proporzionale a $\frac{1}{\epsilon}$. Di conseguenza, regolando la mobilità ϵ si può selezionare il valore di $\Lambda_{\alpha,c}$.

Come già individuato, Λ_{max} ha un'espressione analoga a 2.20, con σ scelto che è indipendente da ϵ , dunque si possono fare gli stessi ragionamenti e ricavare la proporzionalità inversa tra Λ_{max} e ϵ . Inoltre si ha che gli autovalori della matrice laplaciana per cui $Re(\lambda_\alpha) > 0$, che quindi contribuiscono alla crescita della perturbazione 2.12, hanno $Re(\lambda_\alpha)$ vicino al massimo della funzione $Re(\lambda)$. Dunque i valori corrispondenti a tali autovalori Λ_α sono vicini a Λ_{max} . Perciò, oltre a $\Lambda_{\alpha,c}$ come già trovato, anche il range di autovalori che danno contributo alla crescita della perturbazione può essere selezionato tramite regolazione della mobilità.

Ad esemplificare quanto illustrato, per valori piccoli di ϵ si ha che Λ_{max} e $\Lambda_{\alpha,c}$ sono grandi in modulo a causa della dipendenza inversa da ϵ , e i modi che contribuiscono alla crescita della perturbazione corrispondono a Λ_α intorno a Λ_{max} e dunque saranno grandi anche questi.

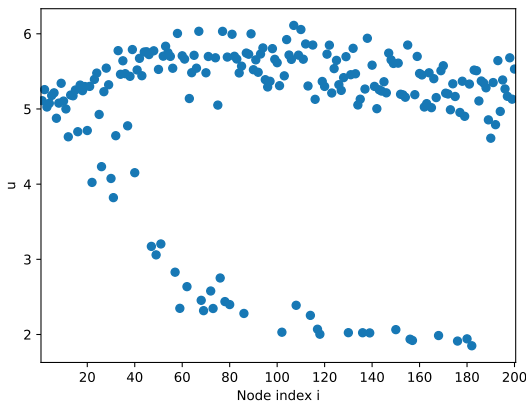


Fig. 2.6: Grafo costruito come in 4.1. Si rappresentano i valori per la concentrazione u trovati numericamente a $t = 1500$ perturbando inizialmente lo stato omogeneo. I nodi della rete sono indicizzati in ordine decrescente di grado.

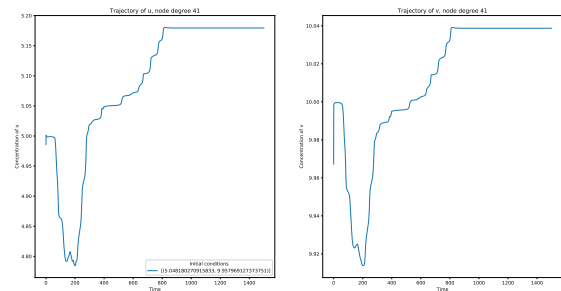


Fig. 2.7: Per la stessa rete, andamento delle concentrazioni delle specie U e V nel tempo trovate numericamente su un nodo scelto, con grado 41, a partire da una perturbazione iniziale dello stato omogeneo.

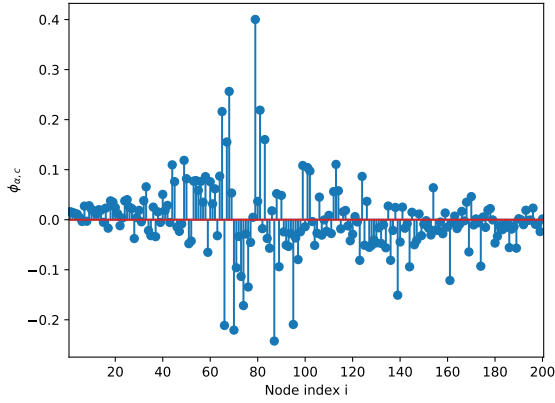


Fig. 2.8: Rappresentazione delle componenti dell'autovettore $\phi_{\alpha,c}$ relativo all'autovalore $\Lambda_{\alpha,c}$ sui diversi nodi. I nodi della rete sono indicizzati in ordine decrescente di grado.

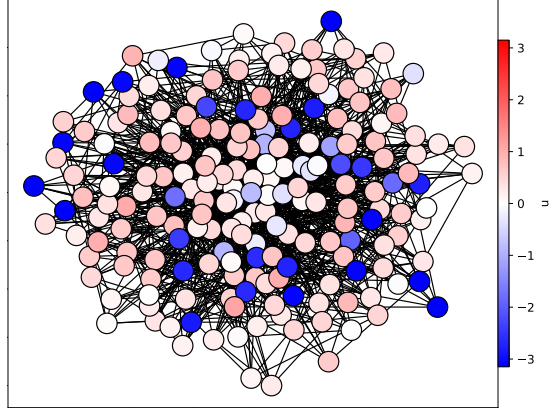


Fig. 2.9: Visualizzazione della soluzione trovata in 2.6 sul grafo, in cui sono rappresentati al centro i nodi che hanno grado maggiore e all'esterno quelli il cui grado è minore. Si rappresenta qui la differenza tra la soluzione calcolata per la specie U e il valore della concentrazione all'equilibrio stabile omogeneo in assenza di diffusione, $u_0 = 5$.

2.3 Confronto tra modello su supporto continuo e su grafo e peculiarità del sistema di reazione e diffusione su grafo

Si può dunque pensare di collegare le analisi effettuate per i casi di supporto continuo e discreto. Estendendo la definizione della matrice laplaciana già data a un dominio continuo, i suoi autovalori sono i valori $-k^2$ con k definito come nell'analisi continua. In particolare quindi, per $N \rightarrow \infty$ gli autovalori Λ_α della matrice laplaciana tenderanno a corrispondere allo spettro costituito dai $-k^2$ nel caso continuo.

Nonostante la somiglianza nella trattazione teorica nel caso di supporto continuo e discreto, tra i due casi emergono anche sostanziali differenze.

In particolare, in caso di supporto discreto anche se si ha un intervallo nella relazione di dispersione continua per cui $Re(\lambda) > 0$ si ha che il sistema potrebbe comunque essere stabile se ogni $Re(\lambda_\alpha) < 0$ associato agli autovalori Λ_α .

2.3.1 Relazione tra grado della rete, valor medio degli della matrice laplaciana, topologia della rete

Si può vedere poi che c'è un importante legame tra il valore assunto da $Re(\lambda_\alpha)$ e il grado medio del grafo \bar{k} precedentemente definito.

Per questo è da ricordare la definizione di matrice laplaciana L data in 2.1, $L_{ij} = A_{ij} - k_i \delta_{ij}$. È noto matematicamente dall'algebra lineare che $Tr L = \sum_{\alpha \in N} \Lambda_\alpha$.

Si può dimostrare anche che $Tr L = -\sum_{i \in N} k_i$. Si ha infatti $L_{ij} = A_{ij} - k_i \delta_{ij}$ e $Tr L = \sum_{i \in N} L_{ii}$. È da notare che $A_{ii} = 0$ se nel grafo non sono presenti cappi, che è il caso analizzato. Dunque $Tr L = \sum_{i \in N} L_{ii} = -\sum_{i \in N} k_i$.

Da questo segue dunque $-\sum_{i \in N} k_i = \sum_{\alpha \in N} \Lambda_\alpha$. Dividendo per il numero di nodi presenti nella rete, si ottiene che in modulo il valor medio degli autovalori Λ_α è pari al grado medio dei nodi della rete, infatti $-\bar{k} = \bar{\Lambda}_\alpha$.

Questo semplice fatto ha tuttavia un importante risvolto: fissati i parametri fisici del sistema e $\sigma > \sigma_c$, si possono creare instabilità guidate da diffusione per ogni tipo di topologia del grafo aggiustando il grado medio della rete.

Si ricorda che l'espressione di λ_α è data da 2.15 ricordando $\lambda_{\alpha,+} = \lambda_\alpha$. Essa è dipendente unicamente dai parametri fisici del sistema, infatti compaiono solo la mobilità, il rapporto tra i coefficienti di diffusione e le componenti dello Jacobiano della linearizzazione, con queste ultime che dipendono solo dalle equazioni che descrivono il modello che si vuole studiare.

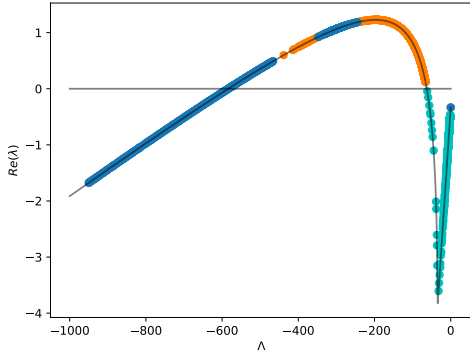


Fig. 2.10: Rappresentazione di $Re(\lambda_\alpha)$ relativi agli autovalori Λ_α . Considerato uno stesso grafo costruito come descritto a lato, sono rappresentati i tre diversi casi di grado medio della rete in tre diversi colori, come descritto nel testo.

Allora, fissati i parametri fisici, la curva $Re(\lambda)$ a cui appartengono i valori $Re(\lambda_\alpha)$ associati ai diversi autovalori della matrice laplaciana è determinata, ma regolando il grado medio della rete è possibile portare gli autovalori Λ_α ad avere valore medio nella regione in cui si ha $Re(\lambda) > 0$ e può verificarsi l'instabilità.

Sfruttando le stesse equazioni si vede che questo è vero anche al contrario, infatti fissati una topologia per il grafo e il grado medio della rete si possono modificare i parametri fisici del sistema in modo che gli autovalori della matrice laplaciana possano partecipare a generare un'instabilità di Turing.

Quanto esposto è illustrato dalla figura 2.10. Si è costruito un grafo costituito da 1000 nodi con l'algoritmo di Barabási-Albert, con $\sigma = 40$, $\epsilon = 0.005$. Si è dunque variato il grado medio della rete. Si sono scelti i tre casi $\bar{k} \sim 6$, $\bar{k} \sim 140$, $\bar{k} \sim 970$, rappresentati rispettivamente in azzurro arancione e blu. Si vede che, in funzione del grado medio varia il valor medio degli autovalori della matrice laplaciana, e dunque nel sistema possono verificarsi instabilità di Turing o meno solo modificando tale parametro del grafo.

2.3.2 Instabilità per piccole lunghezze d'onda

Un'ulteriore differenza rispetto al caso continuo è data dai casi limite in cui si ha D_u o D_v pari a zero.

È conveniente ora effettuare la trattazione in termini di D_u e D_v anziché in termini di ϵ e σ come fatto finora in quanto i coefficienti di diffusione sono legati da ϵ , e annullare D_u porta anche all'annullamento di D_v , ma si vogliono studiare ora i casi estremi in cui solo uno dei coefficienti è pari a zero, e si vogliono quindi slegare le due variabili.

Si ricorda che vale $TrJ < 0$ e $(\sigma f_u + g_v) > 0$, con $\sigma > 1$, dunque f_u e g_v devono avere segno opposto. Si suppone come in 1.3.3 $f_u > 0$, e dunque $|g_v| > f_u$. È da ricordare anche che si ottiene $(\sigma f_u + g_v) > 0$ dopo aver semplificato $\epsilon > 0$, e che dunque la condizione completa è $(D_v f_u + D_u g_v) > 0$.

Si supponga di avere $D_v = 0$. Allora $(D_v f_u + D_u g_v) > 0$ diventa $D_u g_v > 0$, e questo non è possibile in quanto $g_v < 0$ per ipotesi.

Si supponga ora di avere $D_u = 0$. Allora la condizione diventa $D_v f_u > 0$ che è sempre verificata. Le soluzioni 2.15 invece diventano

$$\lambda_{\alpha,\pm} = \frac{(D_v \Lambda_\alpha + f_u + g_v) \pm \sqrt{(D_v \Lambda_\alpha + f_u + g_v)^2 - 4(f_u(D_v \Lambda_\alpha + g_v) - g_u f_v)}}{2} \quad (2.21)$$

Si ha che $(D_v \Lambda_\alpha + f_u + g_v) < 0$ in quanto $TrJ < 0$ e gli autovalori della matrice laplaciana sono negativi mentre $D_v > 0$. Allora per avere $Re(\lambda_{\alpha,\pm}) > 0$ è necessario che $(f_u(D_v \Lambda_\alpha + g_v) - g_u f_v) < 0$. Ricordando

$DetJ > 0$, questo è verificato se $\Lambda_\alpha > \frac{-DetJ}{f_u D_v}$. Riprendendo l'analogia formale tra l'analisi nel caso continuo e discreto, si trova che nel caso continuo il risultato che si trova è lo stesso effettuando la sostituzione $\Lambda_\alpha \leftrightarrow -k^2$. Allora si vede che, nel caso discreto, poiché il numero di autovalori è finito, si ha un numero finito di modi instabili, e come dalle analisi precedenti questo può generare uno stato finale stabile stazionario non omogeneo a causa della diffusione.

Nel caso continuo il numero di modi instabili è infinito perché non c'è un limite sul valore che il numero d'onda può assumere per cui il sistema è instabile. Si vede inoltre che la lunghezza d'onda $\omega = \frac{2\pi}{k}$ tende a zero quando il numero d'onda k ad essa associato tende a infinito.

Tale fenomeno di instabilità in questo caso limite per cui si ha che un solo coefficiente di diffusione è non nullo è chiamato instabilità per piccole lunghezze d'onda.

Come si è già esposto, tuttavia, per il caso continuo l'analisi lineare descrive più accuratamente il comportamento del sistema per grandi lunghezze d'onda.

2.3.3 Soluzione del sistema di reazione-diffusione e approssimazione di campo medio

Come detto nel capitolo 1 il fenomeno che caratterizza la presenza di instabilità di Turing su dominio continuo è la formazione di strutture regolari nel dominio, cioè alternanza di zone in cui si ha maggiore presenza di sostanza attivatore e altre in cui si ha maggiore presenza di inibitore. Nel caso discreto invece, come si osserva dalla soluzione calcolata numericamente su tutti i nodi del grafo in 2.6, non si osserva la formazione di strutture regolari. Si vede anche come presentato dal lavoro [5] che, allo stato stazionario finale in cui non si ha più dinamica del sistema, i nodi subiscono una differenziazione, con la tendenza a due distinti valori di concentrazione finale.

Questo può essere visualizzato e analizzato matematicamente dalla approssimazione di campo medio. Riscrivendo le equazioni 2.10 esplicitando le componenti della matrice laplaciana come

$$\begin{cases} \frac{du_i(t)}{dt} = f(u_i, v_i) + \epsilon \left(\sum_{j \in N} A_{ij} u_j - k_i u_i \right) \\ \frac{dv_i(t)}{dt} = g(u_i, v_i) + \sigma \epsilon \left(\sum_{j \in N} A_{ij} v_j - k_i v_i \right) \end{cases} \quad (2.22)$$

Si possono considerare $h_{i,u} = \sum_{j \in N} A_{ij} u_j$ e l'analogo per la specie V come i campi sentiti da ciascun nodo i a causa della presenza dei vertici vicini. Si nota che l'espressione $h_{i,u}$ è proporzionale al grado del nodo k_i in quanto $A_{ij} = 1$ solo se esiste un link tra i e j , dunque assumerà valore tanto maggiore quanto maggiore è k_i . Si scompone dunque $h_{i,u} \sim k_i H^u$, con H^u campo globale medio. Questo valore quindi è uguale per ogni nodo e tiene conto dell'effetto medio della presenza degli altri nodi della rete. Analogo ragionamento si effettua con la specie V . Chiamando $\beta_i = \epsilon k_i$ si riscrivono le equazioni

$$\begin{cases} \frac{du_i(t)}{dt} = f(u_i, v_i) + \beta_i (H^u - u_i) \\ \frac{dv_i(t)}{dt} = g(u_i, v_i) + \sigma \beta_i (H^v - v_i) \end{cases} \quad (2.23)$$

Il procedimento appena eseguito permette di trattare indipendentemente un nodo dai propri vicini, semplificando il problema in termini analitici e computazionali.

Infatti esso permette di passare da un sistema di $2N$ equazioni accoppiate per descrivere il sistema a due sole equazioni, le stesse per ogni nodo. Proprio per tale indipendenza dal nodo si può omettere l'indice i nelle equazioni 2.23.

Una stima e analisi dei valori dei campi globali medi H^u , H^v è stata fatta in appendice. Qui si usano i valori riportati da [5] per una rete costruita come in 4.1, dunque $(H^u, H^v) = (4.95, 9.97)$.

Per una rete con i parametri descritti in 4.1 si crea il diagramma delle biforcazioni in funzione di $\beta = \epsilon k$ per le equazioni 2.23 fissando i parametri del sistema, con β che va da circa 0.45 a 10. Sono rappresentati nel diagramma in funzione di β i diversi tipi di punti critici del sistema. Fino a $\beta \approx 2$ si ha che effettivamente sono presenti due stati stabili per il sistema, che corrispondono a nodi stabili. Si vede quindi che è spiegata e giustificata la differenziazione dei nodi numericamente trovata precedentemente: ciò corrisponde all'esistenza di due equilibri stabili per ciascun nodo.

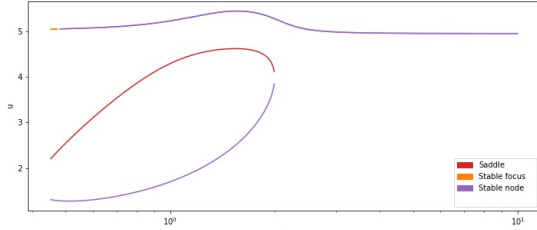


Fig. 2.11: Diagramma delle biforcazioni per la concentrazione della specie U per un singolo nodo. Si sfrutta l'approssimazione di campo medio, con parametri presentati in descritto in 4.1. Sono rappresentati al variare del parametro β i punti critici del sistema e la loro natura. In asse delle ascisse si utilizza la scala logaritmica.

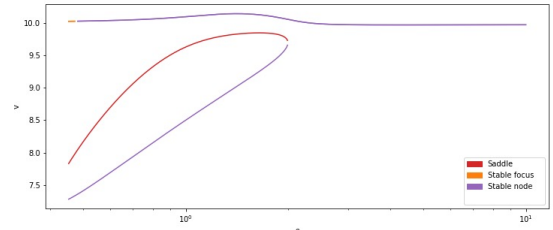


Fig. 2.12: Diagramma delle biforcazioni per la concentrazione della specie V per un singolo nodo. Si sfrutta l'approssimazione di campo medio, con parametri presentati in descritto in 4.1. Sono rappresentati al variare del parametro β i punti critici del sistema e la loro natura. In asse delle ascisse si utilizza la scala logaritmica.

Il fatto di semplificare il problema all'interazione di un singolo elemento con un campo esterno è particolarmente utile poiché permette in modo semplice di effettuare il ritratto in fase del sistema e individuare le traiettorie delle variabili u e v per il singolo nodo.

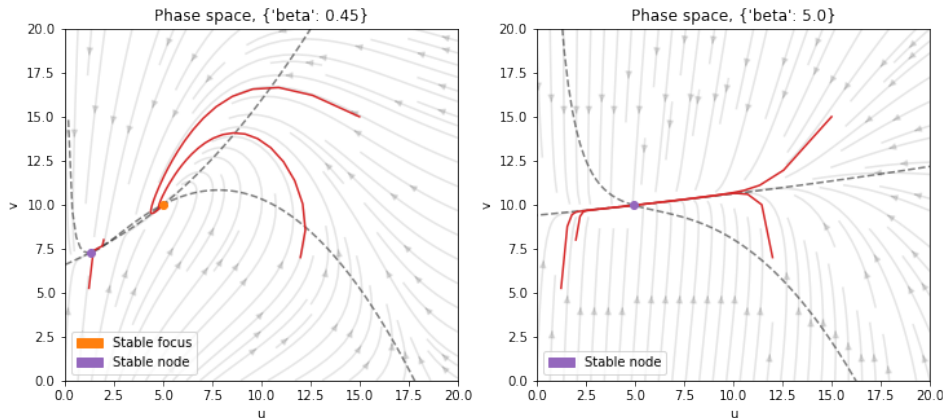


Fig. 2.13: Rappresentazione dello spazio delle fasi per il sistema 2.23 per due diversi valori del parametro β . Si rappresentano in rosso le traiettorie per diversi stati iniziali, e in diversi colori gli stati stabili del sistema in base alla loro natura. Le curve $\frac{du(t)}{dt} = 0$ e $\frac{dv(t)}{dt} = 0$ sono rappresentate tratteggiate.

Capitolo 3

Conclusioni

Nell'ultimo decennio è stata riconosciuta l'importanza del ruolo della teoria dei grafi in ambito scientifico e sociale. Si pensi ad esempio che tramite i grafi si possono descrivere reti tecnologiche quali Internet, reti telefoniche, reti elettriche o di trasporto, ma anche reti sociali ad esempio reti di amicizie, reti di informazioni come il World Wide Web o reti di citazioni di articoli, reti biologiche quali reti metaboliche o di interazione tra proteine, reti ecologiche.

Proprio per l'importanza assunta dalla teoria dei grafi, in questo elaborato si è voluto investigare un fenomeno, quello dell'instabilità di Turing, tipicamente studiato su dominio continuo, in questo caso applicato però alle reti.

Specificatamente, in questo lavoro si sono studiate le teorie di formazione di instabilità di Turing su grafi non orientati costruiti con l'algoritmo di Barabási-Albert, approfondendone gli aspetti matematici e numerici.

Come presentato e analizzato, nonostante si abbia un'analogia formale tra i meccanismi su dominio continuo e discreto, i risultati ottenuti sono molto diversi.

In particolare, la caratteristica fondamentale dell'instabilità di Turing nel caso di supporto continuo è la formazione di pattern, ossia strutture regolari nel dominio. Su supporto discreto invece non si verifica la formazione di strutture regolari, anche se avviene una differenziazione dei nodi in due gruppi caratterizzati rispettivamente da alta e bassa concentrazione di attivatore.

L'analisi svolta in questo elaborato è stata effettuata, come detto, per reti costruite con un algoritmo che prevede un meccanismo di attaccamento preferenziale. È possibile effettuare questa stessa analisi per reti con topologia diversa; ad esempio si possono prendere reticoli regolari o grafi completi. È necessario però ricordare che i risultati per diverse topologie della rete sono differenti, in quanto cambiano il grado medio e il diametro della rete, e ciò influenza il termine di diffusione nelle equazioni che descrivono il sistema 2.10.

Un'importante espansione dell'analisi dell'instabilità di Turing su grafi non orientati è stata realizzata con lo studio dello stesso fenomeno su grafi orientati. Il meccanismo in tale caso è differente da quello trattato in questo elaborato e altrettanto importante in quanto molte reti complesse reali possono essere modellizzate da grafi orientati.

Capitolo 4

Appendice

4.1 Modelli utilizzati

Si vogliono qui presentare i diversi modelli utilizzati nell'elaborato, che vengono usati nelle simulazioni numeriche se non indicato altrimenti.

Come modello per il sistema attivatore-inibitore si sceglie il modello preda-predatore sviluppato da Mimura-Murray. Esso è caratterizzato dalle equazioni

$$\begin{cases} f(u, v) = u \left(\frac{a+bu-u^2}{c} - v \right) \\ g(u, v) = v (u - (1 + dv)) \end{cases} \quad (4.1)$$

Con a, b, c, d parametri scelti come in [5] dunque $a = 35, b = 16, c = 9, d = 2/5$.

Gli stati stabili omogenei e stazionari sono quelli tali per cui si annullano contemporaneamente le due funzioni. Poiché u e v sono concentrazioni, si sceglieranno solo le soluzioni per cui tali valori sono maggiori o uguali a zero.

Il sistema ha come stati omogenei stazionari $(u_0, v_0) = (0, 0)$ e

$$u_0 = \frac{c}{2} \left(\left(\frac{b}{c} - \frac{1}{d} \right) + \sqrt{\left(\frac{b}{c} - \frac{1}{d} \right)^2 + \frac{b}{c} \left(\frac{a}{c} + \frac{1}{d} \right)} \right) \quad v_0 = \frac{u_0 - 1}{d} \quad (4.2)$$

Solo il secondo tuttavia soddisfa le condizioni di stabilità 1.14 per piccole perturbazioni, ed è lo stato omogeneo stabile stazionario che quindi si considera.

Se non diversamente specificato si considera il parametro delle equazioni di reazione e diffusione pari a $\epsilon = 0.12$. Con i parametri così definiti si trova da 1.17 $\sigma_c \approx 15.5$ e da 2.20 $\Lambda_c \approx -12.8$. Nelle analisi si utilizza se non diversamente indicato $\sigma = 15.6$.

Con i parametri scelti questo corrisponde a $(u_0, v_0) = (5, 10)$.

Per quanto riguarda le reti scale-free su cui sono svolte le simulazioni, esse sono generate dall'algoritmo di Barabási-Albert, che sfrutta l'attaccamento preferenziale. Questo algoritmo prende m_0 nodi iniziali e ad ogni passo aggiunge un nodo con m archi uscenti che si collegano a m diversi nodi già esistenti. La probabilità che il nuovo vertice si colleghi a un nodo i già esistente di grado k_i è $p = \frac{k_i}{\sum_j k_j}$. Per un grande numero finale di nodi si vede che la probabilità di un nodo di avere grado k è $p_k \sim k^{-\gamma}$ con $\gamma = 3$, e dunque la rete può essere considerata di tipo scale-free.

In questo tipo di grafi il grado medio della rete è $\bar{k} \sim 2m_0$.

Se non indicato diversamente nell'elaborato, i nodi della rete sono sempre considerati in ordine decrescente di grado, dunque detto k_i il grado del nodo i -esimo si ha $k_1 \geq k_2 \geq k_3 \geq \dots \geq k_N$.

Inoltre, se non specificato altrimenti si considera nell'elaborato un grafo non orientato costruito con l'algoritmo di Barabási-Albert costituito da un numero di nodi $N = 100$ e $\bar{k} \sim 14$ a cui è applicato il modello di Mimura-Murray con i parametri sopra indicati.

Le soluzioni del sistema sono state calcolate tramite integrazione numerica usando il metodo LSODA del pacchetto Odespy di Python. I grafi sono stati creati e analizzati tramite il pacchetto NetworkX. La soluzione numerica calcolata è a $t=1500$.

4.2 Approssimazione di campo medio

In questa sezione si vuole approfondire il metodo di approssimazione di campo medio, individuando anche i possibili modi di stima dei campi medi globali.

La stesura di questa appendice è stata stimolata da un confronto diretto con Hiroya Nakao, che gentilmente è stato disponibile ad offrirmi chiarimenti sui metodi utilizzati in [5].

Per quanto riguarda i campi locali sentiti dai nodi, la proporzionalità è stata individuata e studiata già da Nakao, come riportato in figura 4.1, gentilmente inviata dall'autore.

Nel lavoro [5] sono stati calcolati i campi globali medi come medie pesate dei contributi delle concentrazioni di tutti i nodi, con peso relativo a ciascun nodo dato dal proprio grado normalizzato alla somma dei gradi dei nodi della rete. Questa stima si è rivelata essere accurata per le reti scale free, comprese quindi quelle costruite con algoritmo di Barabási-Albert.

I valori del campo globale medio sono stati ricavati dalla soluzione del sistema allo stato stazionario, dopo il transiente iniziale che è mostrato apparire anche in figura 2.7. Poiché lo stato è appunto stazionario, il membro sinistro delle equazioni 2.23 è nullo per ogni nodo, e dunque invertendo la relazione si possono ottenere e mediare i risultati del campo sui diversi nodi.

Non è stata però effettuata una derivazione analitica: la difficoltà è dovuta alla multistabilità, ossia la coesistenza di più possibili stati stazionari finali per gli stessi parametri del sistema. Questo implica che possono formarsi dei pattern diversi, che tuttavia hanno approssimativamente lo stesso valore di campo globale medio.

La mia derivazione per la scelta dei pesi, sebbene non quella considerata dall'autore, porta al medesimo risultato, ed è stata ritenuta possibile dall'autore.

In generale, un random multigraph può essere generato tramite l'algoritmo configuration model a partire da una certa sequenza di gradi k_1, k_2, \dots, k_N . In particolare quindi il grafo generato può avere una qualsiasi degree distribution. Il numero di archi totali nel grafo è $L = \frac{1}{2} \sum_{i \in N} k_i$. La probabilità che due nodi i e j siano connessi allora per questo modello è $p_{ij} \sim \frac{k_i k_j}{2L-1}$. Per un grande numero di nodi essa diventa

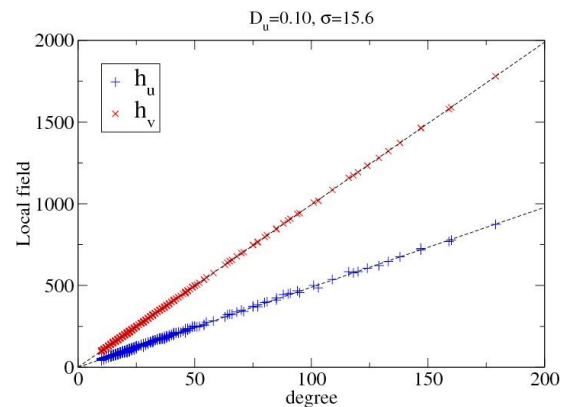


Fig. 4.1: Grafico costruito da Nakao. È rappresentata la proporzionalità tra il campo locale sentito dal nodo e il grado del nodo stesso.

$p_{ij} \sim \frac{k_i k_j}{2L}$. Si può allora considerare il metodo configuration model per una rete con degree distribution di un grafo di tipo Barabasi-Albert. Allora nel calcolo del campo locale sentito dal nodo i -esimo anziché le entrate della matrice di adiacenza A_{ij} , che sono 0 o 1 in base a se i nodi i e j sono connessi, si possono utilizzare le probabilità che i nodi i e j siano connessi. Il campo locale può essere quindi approssimato $h_{i,u} \sim \sum_{j \in N} \frac{(k_i k_j)}{2L} u_j = k_i \sum_{j \in N} \frac{k_j}{k_{tot} u_j} = k_i \sum_{j \in N} w_j u_j = k_i H^u$. Questo è il medesimo risultato utilizzato nell'articolo. È importante sottolineare che in questo approccio si sfrutta la definizione data della matrice di adiacenza, in particolare il fatto che possa essere approssimata da numeri reali.

Per la stima dei campi globali medi della sezione 2.3.3 si sono utilizzati tre approcci. Il primo è quello utilizzato anche da [5], il secondo è mediante i pesi, dunque $H^u = \sum_{j \in N} w_j u_j$ e il terzo, considerato $h_{i,u} = \sum_{j \in N} A_{ij} u_j \sim k_i H^u$ ricava $H^u \sim \frac{\sum_{j \in N} A_{ij} u_j}{k_i}$. È da notare che quest'ultimo metodo è più generico del secondo presentato, in quanto una volta determinata la relazione tra il campo locale sentito dal nodo e il campo globale medio non vengono fatte ulteriori assunzioni sulla forma della matrice di adiacenza, e dunque essa non è vincolata ad assumere valori reali ed essere approssimata da questi.

Per effettuare le stime di campo globale medio si è scelto di prendere un grande numero di nodi nella rete in modo da avere una buona rappresentazione dell'andamento medio della soluzione stazionaria ottenuta perturbando il sistema. Si opera quindi con una rete di 1000 nodi e $\bar{k} = 20$ costruita secondo l'algoritmo di Barabási-Albert. Si riportano in tabella i valori ricavati da cinque differenti simulazioni per i diversi metodi presentati.

Metodo 1, H^u	Metodo 2, H^u	Metodo 3, H^u	Metodo 1, H^v	Metodo 2, H^v	Metodo 3, H^v
4.96	4.96	4.96	9.97	9.97	9.97
4.96	4.98	4.97	9.96	9.98	9.97
4.96	4.97	4.96	9.97	9.97	9.97
4.96	4.96	4.95	10.0	9.97	9.97
4.96	4.95	4.94	10.0	9.97	9.97

Si vede che i tre metodi danno tutti stime coerenti e vicine tra loro, e nella sezione 2.3.3 si usano le stime effettuate da [5].

Bibliografia

- [1] Turing, A. M. The chemical basis of morphogenesis. *Phil Trans. R. Soc. Lond. B* **237**, 37 (1952). <https://doi.org/10.1098/rstb.1952.0012>
- [2] Murray J. D., *Mathematical Biology I. An Introduction*, Terza edizione, Springer (2002).
- [3] Murray J. D., *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*, Terza edizione, Springer (2003).
- [4] Edelstein-Keshet L., *Mathematical Models in Biology*, Random House, New York (1988).
- [5] Nakao, H., Mikhailov, A. Turing patterns in network-organized activator–inhibitor systems. *Nature Phys* **6**, 544–550 (2010). <https://doi.org/10.1038/nphys1651>
- [6] Mimar S., Juane M. M., Park J., Muñuzuri A. P., Ghoshal G. Turing patterns mediated by network topology in homogeneous active systems. *Physical Reveview E* **99**, 062303 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.062303>
- [7] Ji Y., Shen J. Turing Instability of Brusselator in the Reaction-Diffusion Network. *Complexity* **2020**, 1-12 (2020). <https://doi.org/10.1155/2020/1572743>
- [8] Beentjes C., Robustness of Turing patterns on networks. Technical Report, Oxford University (2017).
- [9] Asllani, M., Challenger, J., Pavone, F. et al. The theory of pattern formation on directed networks. *Nat Commun* **5**, 4517 (2014). <https://doi.org/10.1038/ncomms5517>
- [10] Mimura, M., Murray, J. D. On a diffusive prey-predator model which exhibits patchiness. *Journal of Theoretical Biology* **75**, 249–262 (1978). [https://doi.org/10.1016/0022-5193\(78\)90332-6](https://doi.org/10.1016/0022-5193(78)90332-6)
- [11] Newman, M. E. J. The Structure and Function of Complex Networks. *SIAM Review* **45**, 167-256 (2003). <https://doi.org/10.1137/s003614450342480>
- [12] Newman, M. E. J. *Networks: An Introduction*, Oxford University Press, United States (2010).
- [13] Zhang Q., Shen J. Turing instability induced by random network in FitzHugh-Nagumo model. *Applied Mathematics and Computation* **381**, 125304, (2020). <https://doi.org/10.1016/j.amc.2020.125304>
- [14] Byrne H. M. *Further Mathematical Biology, Lecture Notes*, Oxford University, (2017).
- [15] Albert R., Barabási A. L. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 47-97 (2002). <https://doi.org/10.1103/revmodphys.74.47>
- [16] Busiello D. M. *Instabilità di Turing su grafi complessi e multiplex*, Tesi di Laurea in Fisica, Università degli Studi di Pisa (2014).

- [17] Cormen T. H., Leiserson C. E., Rivest R. L. *Introduzione Agli Algoritmi*, Seconda edizione, Jackson Libri (1999).
- [18] Doulcier, G. 2019. Numerical bifurcation diagrams and bistable systems. San Francisco (CA): GitLab; [accessed 2021 August]. https://gitlab.com/geeklhem/teaching/-/blob/master/modeling/bistable_systems.ipynb, CC BY-SA.