

A Turing-modell biológiai mintázatképződésre

Szakdolgozat

Gyebnár Márton Bálint

Matematika alapszak

Témavezető:

Dr. Csomós Petra

egyetemi docens

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék



Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar

2025

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom szakdolgozati témavezetőmnek, Dr. Csomós Petrának, amiért nagy odaadással támogatta és hosszas konzultációinkon értékes meglátásaival segítette munkámat.

Tartalomjegyzék

Bevezetés	2
1. Matematikai háttér	4
1.1. Parciális differenciálegyenletek	4
1.2. Reakció-diffúzió egyenletek és lineáris stabilitás	5
1.3. Ortonormált bázisok a Fourier-módszerhez	7
1.4. Közöséges differenciálegyenletek	8
2. Modell egy morfogénre	11
2.1. Lineáris stabilitásvizsgálat	11
3. Modell két morfogénre	17
3.1. Egy dimenzióban	17
3.1.1. Turing-instabilitás	18
3.1.2. A Gierer–Meinhardt-modell	23
3.2. Két dimenzióban	28
3.2.1. A Schnakenberg-modell	29
4. Numerikus módszerek	34
4.1. Intervallumon	34
4.2. Téglalapon	36
Összefoglalás	39
Irodalomjegyzék	39

Bevezetés

A természetben fellelhető különféle struktúrák és mintázatok szabályossága, sokszínűsége és szépsége mindig is nagy csodálattal töltötte el az emberek széles körét. Ide tartoznak például egyes halak és emlősök bőrén és pikkelyein, illetve bundáján megjelenő minták, akár csak a sokak által emlékként őrzött csigákon és kagylókon megfigyelhető szimmetriák. Azt, hogy vajon pontosan miféle természeti törvényszerűségek állnak ezek kialakulásának hátterében, ugyanakkor mind a mai napig sok bizonytalanság övezi.

Szakdolgozatom témájául egy olyan, 1952-ben Alan Turing által [5] cikkében felvetett matematikai modellt választottam, amely erre a kérdésre hivatott választ adni. Speciálisan az állatok bőrén megmutatkozó pöttyös, csíkos és egyéb mintázatok keletkezésének tükrében mutatom be a Turing által kidolgozott elméletet. És bár a dolgozatban alapvetően a modell matematikai vetületével foglalkozom, amely lényegében egy parciális differenciálegyenlet-rendszerből, konkrétan egy reakció-diffúzió rendszerből áll, alább néhány mondatban vázlatosan ismertetem az olvasóval az azóta valamelyest továbbfejlesztett elmélet biológiai hátterét.

Az emlősállatok, így például tigrisek, leopárdok és zebrák bőrén látható minták az embriogenezis során, azaz az embrió fejlődése során több lépésben keletkeznek [4]. A vemhesség kezdeti szakaszában diffúzió révén eloszlik az embrió felületén néhány vegyület, amelyeknek az előmintázatnak nevezett együttes térbeli eloszlása később meghatározza a mintát. A vemhesség egy későbbi szakaszában, mikor helyükre kerülnek a pigmentsejtek, azok képesek az előmintázat szerint melanint termelni. Az említett vegyületeknek a melanintermelésben lehet akár aktiváló, akár gátló szerepe. Fontos feltételezés, hogy az embrió felületén nemcsak egyetlen vegyület oszlik szét, hanem egyszerre kettő vagy több. Az ilyen vegyületeket, amelyeknek meghatározó szerepük van a mintázatképződésben, *morfogéneknek* hívjuk. Ezek mind diffundálnak a térben, és közben egymással is reakcióba lépnek. Turing korszakalkotó felfedezése az volt, hogy a morfogének egy stabil, térben közel homogén eloszlásából bizonyos feltételek mellett a diffúzió képes egy térben heterogén eloszlást, előmintázatot előidézni. Ez a heterogén előmintázat eredményezi az általunk a természetben megfigyelhető mintákat.

Ezen a ponton röviden ismertetem a szakdolgozat szerkezetét. Az első fejezet olyan matematikai definíciók és állítások gyűjteménye, amelyek elengedhetetlenek a modell elem-

zéséhez. Ezek a definíciók és állítások a parciális differenciálegyenletek, a reakció-diffúzió egyenletek, a Fourier-módszer és a közönséges differenciálegyenletek témakörökbe esnek. A második fejezetben lépésenként felépítem a modellt egyetlen morfogén esetére, és megvizsgálom, hogy ilyenkor van-e lehetőség mintázatképződésre. Ezt követően a harmadik fejezetben ismertetem a két morfogénre vonatkozó modellt, és hasonló eszközökkel megvizsgálom, hogy egy, illetve két térbeli dimenzióban milyen feltételek mellett alakulhat ki minta. A feltételek meghatározása után konkrét példák következnek, amelyeket ábrák segítségével mutatok be és elemzek. Végül a negyedik fejezetben levezetem azokat a numerikus sémákat, amelyeket Python programnyelven implementáltam.

A dolgozatban szereplő valamennyi ábrához a kapcsolódó animációk az alábbi linken keresztül elérhetők: https://github.com/MartonBGyebnar/Thesis_animations.git.

1. fejezet

Matematikai háttér

Ebben a fejezetben áttekintjük azokat a matematikai fogalmakat, állításokat és eszközöket, amelyekre a dolgozat további részeiben szükség van a téma alapos tárgyalásához. Először [1] alapján felsoroljuk a parciális differenciálegyenletek témakörébe eső legfontosabb fogalmakat, majd röviden áttérünk a reakció-diffúzió egyenletek kapcsán használt definíciókra. Ez utóbbi részben a [3] és a [7] könyvfejezetekben használt fontos kifejezéseket rögzítjük és fogalmazzuk meg matematikai formulákkal. A harmadik alfejezetben a Fourier-módszer alkalmazásakor felhasznált összefüggésekről, így például a Laplace-operátor spektrumáról írunk alapvetően saját egyetemi előadásjegyzetek felhasználásával. A közönséges differenciálegyenletekről szóló rész a [2] jegyzet alapján készült.

1.1. Parciális differenciálegyenletek

1.1. Jelölés. Legyenek $n \in \mathbb{N}^+$ és $\alpha_j \in \mathbb{N}$, $j = 1, \dots, n$. Ekkor $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ elnevezése *multiindex*. Az α multiindex *abszolút értéke* $|\alpha| := \alpha_1 + \dots + \alpha_n$. Továbbá valamely $m \in \mathbb{N}^+$ esetén jelölje N_m azon $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ multiindexek számát, amelyekre $|\alpha| \leq m$.

1.2. Jelölés. Legyen $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ multiindex. Ekkor egy $f \in C^{|\alpha|}(\Omega)$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^n$) valós értékű függvényre $\partial^\alpha f := \partial_1^{\alpha_1} \dots \partial_n^{\alpha_n} f$. Megállapodás szerint $\alpha = (0, \dots, 0)$ esetén $\partial^\alpha f = f$.

1.3. Definíció. Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ ($n \in \mathbb{N}^+$) tartomány, azaz összefüggő és nyílt halmaz. Tekintsünk egy $F : \Omega \times G \rightarrow \mathbb{R}$ ($G \subset \mathbb{R}^{N_m}$) függvényt. Ekkor *parciális differenciálegyenletnek* (PDE-nek) nevezzük az

$$F(x, u(x), \partial_1 u(x), \dots, \partial_n u(x), \dots, \partial_n^m u(x)) = 0, \quad x \in \Omega$$

egyenletet, ahol $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ a keresett ismeretlen függvény. Azt mondjuk, hogy u a *PDE klasszikus megoldása*, ha u kielégíti a PDE-et és $u \in C^m(\Omega)$.

1.4. Definíció. Egy parciális differenciálegyenlet *főrésztében lineáris* vagy másképpen *semilineáris*, ha

$$\sum_{|\alpha|=m} a_\alpha(x) \partial^\alpha u(x) = f(x, u(x), \partial_1 u(x), \dots, \partial_n(x), \dots, \partial_n^{m-1} u(x)), \quad x \in \Omega$$

alakú, ahol $a_\alpha : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ($|\alpha| = m$) és $f : \Omega \times G \rightarrow \mathbb{R}$ ($G \subset \mathbb{R}^{N_{m-1}}$) adott függvények.

1.5. Definíció. Egy parciális differenciálegyenlet *lineáris*, ha

$$\sum_{|\alpha| \leq m} a_\alpha(x) \partial^\alpha u(x) = f(x), \quad x \in \Omega$$

alakú, ahol $a_\alpha : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ($|\alpha| \leq m$) és $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ adott függvények. Ha az a_α függvények konstansok, akkor *állandó együtthatós* lineáris parciális differenciálegyenletről beszélünk.

A parciális differenciálegyenleteket gyakran *mellékfeltétellel* látjuk el, többek között azért, hogy garantáljuk a megoldás egyértelműségét. A mellékfeltétel állhat *peremfeltételből*, *kezdeti feltételből* vagy mindkettőből. Peremfeltétel megszabásával *peremérték-feladathoz* jutunk. Erre akkor van szükség, ha az Ω tartomány korlátos. A peremfeltétel alakja rendszerint az alábbi három típus egyike:

- Dirichlet-féle peremfeltétel esetén $u|_{\partial\Omega}$ adott,
- Neumann-féle peremfeltétel esetén $(\partial_\nu u)|_{\partial\Omega}$ adott,
- Vegyes peremfeltétel esetén $hu|_{\partial\Omega} + g(\partial_\nu u)|_{\partial\Omega}$ adott,

ahol f, g adott, az Ω tartomány peremén, jelölésben $\partial\Omega$ -án értelmezett függvények. Kezdeti feltételt időtől is függő feladatok esetén szokás megszabni. Ilyenkor a kiindulási időpillanatban adjuk meg a megoldásnak és esetleg bizonyos rendig a deriváltjainak az értékét. Kezdeti feltétel megadásával *kezdetiérték-feladatot*, más néven *Cauchy-feladatot* nyerünk. *Vegyes feladatról* beszélünk, ha perem- és kezdeti feltételt is előírunk.

1.6. Definíció. Azt mondjuk, hogy egy mellékfeltétellel ellátott parciális differenciálegyenlet *korrekt kitűzésű*, ha

- (i) létezik a megoldása,
- (ii) a megoldás egyértelmű,
- (iii) és a megoldás folytonosan függ az adatoktól.

1.2. Reakció-diffúzió egyenletek és lineáris stabilitás

1.7. Definíció. Egy parciális differenciálegyenlet-rendszert *reakció-diffúzió egyenletnek* hívunk, ha

$$\partial_t \mathbf{u} = D \Delta \mathbf{u} + F(\mathbf{u}), \quad x \in \Omega, t > 0 \quad (1.1)$$

alakú, ahol $\mathbf{u} : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^n$ tartomány) a keresett ismeretlen függvény, $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ folytonosan differenciálható függvény és $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$ pozitív elemű diagonális mátrix. Vektorértékű $\mathbf{u}$ függvény esetén, azaz $m > 1$ mellett itt és a továbbiakban Δ a koordinátánként értelmezett Laplace operátort jelöli. Típusukat tekintve a reakció-diffúzió egyenletek szemilineárisak.

Legyen mostantól $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány és írjunk elő homogén Neumann peremfeltételt. Ekkor az alábbi peremérték-feladathoz jutunk.

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} = D\Delta \mathbf{u} + F(\mathbf{u}), & x \in \Omega, t > 0 \\ (\partial_\nu \mathbf{u})|_{\partial\Omega} = 0, & t \geq 0 \end{cases} \quad (1.2)$$

1.8. Definíció. Azt mondjuk, hogy az (1.2) peremérték-feladat $\mathbf{u} : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ megoldása stacionárius, ha az időben nem változik, azaz

$$\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}(x, 0), \quad t \geq 0.$$

Speciálisan, ha $\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^m$ konstans, akkor térben homogén stacionárius állapotról beszélünk.

1.9. Definíció. Tekintsük az (1.2) feladatot, és legyen $\mathbf{u}_0$ térben homogén stacionárius állapot. Ekkor az ($\mathbf{u}_0$ körül) *linearizált feladat* alatt a következő lineáris reakció-diffúzió egyenletet értjük.

$$\begin{cases} \partial_t \hat{\mathbf{u}} = D\Delta \hat{\mathbf{u}} + J\hat{\mathbf{u}}, & x \in \Omega, t > 0, \\ (\partial_\nu \hat{\mathbf{u}})|_{\partial\Omega} = 0, & t \geq 0, \end{cases} \quad (1.3)$$

ahol $J = F'(\mathbf{u}_0)$ az F függvény Jacobi-mátrixa kiértékelve az $\mathbf{u}_0$ pontban.

Az eredeti (1.2) feladat és a fenti linearizált feladat között a kapcsolatot az F függvény Taylor-sorfejtése teremti. A linearizált feladatot ugyanis úgy nyerjük az eredetiből, hogy az (1.2) egyenlet $\mathbf{u}$ megoldását $\mathbf{u}_0 + \hat{\mathbf{u}}$ alakban keressük, és az $F(\mathbf{u}_0 + \hat{\mathbf{u}})$ helyébe az F függvény $\mathbf{u}_0$ körüli lineáris tagig vett sorfejtését helyettesítjük. Részletesebben erről a 2. és a 3. fejezetekben írunk.

1.10. Jelölés. Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ korlátos tartomány és jelölje

$$\|\mathbf{u}\| = \sup_{x \in \bar{\Omega}} |\mathbf{u}(x)|, \quad \mathbf{u} \in C(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^m)$$

a $C(\bar{\Omega}, \mathbb{R}^m)$ téren értelmezett szuprémum normát. Itt $y = (y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$ esetén $|y| = \sqrt{y_1^2 + \dots + y_m^2}$ az euklideszi normát jelöli, míg $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$.

1.11. Definíció. Azt mondjuk, hogy az (1.2) feladat $\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}_0 \in \mathbb{R}^m$ térben homogén stacionárius állapota

(i) *lineárisan stabil*, vagy röviden csak *stabil*, ha

- a) minden $\varepsilon > 0$ -hoz létezik $\delta > 0$, hogy valahányszor $\mathbf{v} : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ megoldása az $\mathbf{u}_0$ körül linearizált (1.3) feladatnak és $\|\mathbf{v}(\cdot, 0)\| < \delta$, akkor

$$\|\mathbf{v}(\cdot, t)\| < \varepsilon, \quad t > 0$$

és

- b) létezik $\delta > 0$, hogy valahányszor $\mathbf{v} : \Omega \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^m$ megoldása az $\mathbf{u}_0$ körül linearizált (1.3) feladatnak és $\|\mathbf{v}(\cdot, 0)\| < \delta$, akkor $t \rightarrow \infty$ esetén

$$\|\mathbf{v}(\cdot, t)\| \rightarrow 0,$$

(ii) *lineárisan instabil*, vagy röviden csak *instabil*, ha nem teljesül a fenti a) pont.

Megjegyezzük, hogy az 1.11. Definícióban a differenciálegyenletek elméletében konvencionális stabilitásfogalmaktól eltérő definíciókat vezetünk be. Míg az a) és b) alpontok együttes teljesülése esetén *aszimptotikus* stabilitásról szokás beszélni, ebben a dolgozatban erre használjuk a stabil kifejezést. Amennyiben tehát csak az a) alpont teljesül, úgy instabillnak hívjuk a stacionárius állapotot. Ennek oka, hogy a biológiai matematikához kapcsolódó szakirodalomban stabilitás alatt aszimptotikus stabilitást szokás érteni.

1.3. Ortonormált bázisok a Fourier-módszerhez

1.12. Állítás. Tekintsük az egydimenziós $-\Delta : D(-\Delta) \rightarrow L^2(\Omega)$, $-\Delta u = -u''$ operátort homogén Neumann peremfeltétel esetén az $\Omega = (0, L)$ intervallumon valamely $L > 0$ mellett, ahol

$$D(-\Delta) = \{u \in C^2(0, L) \cap C^1([0, L]) : u'(0) = u'(L) = 0\}.$$

Ekkor az operátor sajátértékei

$$\lambda_k = \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

és a hozzájuk tartozó sajátfüggvényei

$$e_0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad \text{és} \quad e_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \quad k = 1, 2, \dots$$

Ezek a sajátfüggvények teljes ortonormált rendszert alkotnak az $L^2(\Omega)$ térben.

1.13. Állítás. Tekintsük a kétdimenziós $-\Delta : D(-\Delta) \rightarrow L^2(\Omega)$, $-\Delta u = -\partial_x^2 u - \partial_y^2 u$ operátort homogén Neumann peremfeltétel esetén az $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ tartományon valamely $L_x, L_y > 0$ mellett, ahol

$$D(-\Delta) = \{u \in C^2(\Omega) \times C^1(\overline{\Omega}) : (\partial_\nu u)|_{\partial\Omega} = 0\}.$$

Ekkor az operátor sajátértékei

$$\lambda_{k\ell} = \pi^2 \left(\frac{k^2}{L_x^2} + \frac{\ell^2}{L_y^2} \right), \quad k, \ell = 0, 1, 2, \dots$$

és a hozzájuk tartozó sajátfüggvényei

$$\begin{aligned} e_{00}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{L_x L_y}}, \\ e_{k0}(x, y) &= \sqrt{\frac{2}{L_x L_y}} \cos\left(\frac{k\pi}{L_x} x\right), & k = 1, 2, \dots, \\ e_{0\ell}(x, y) &= \sqrt{\frac{2}{L_x L_y}} \cos\left(\frac{\ell\pi}{L_y} y\right), & \ell = 1, 2, \dots, \\ e_{k\ell}(x, y) &= \frac{2}{\sqrt{L_x L_y}} \cos\left(\frac{k\pi}{L_x} x\right) \cos\left(\frac{\ell\pi}{L_y} y\right), & k, \ell = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Ezek a sajátfüggvények teljes ortonormált rendszert alkotnak az $L^2(\Omega)$ térben.

1.14. Állítás. Legyenek $(\mathcal{H}_1, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1})$ és $(\mathcal{H}_2, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_2})$ Hilbert-terek. Ekkor $(\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2})$ is Hilbert-tér, ahol $(x, y), (x', y') \in \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$ esetén

$$\langle (x, y), (x', y') \rangle_{\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2} = \langle x, x' \rangle_{\mathcal{H}_1} + \langle y, y' \rangle_{\mathcal{H}_2}.$$

1.15. Állítás. Legyenek $(\mathcal{H}_1, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1})$ és $(\mathcal{H}_2, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_2})$ Hilbert-terek, és tegyük fel, hogy $(e_{1,n})_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}_1$ és $(e_{2,n})_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{H}_2$ teljes ortonormált rendszerek. Legyen minden $n \in \mathbb{N}$ esetén

$$\phi_{2n} = \begin{pmatrix} e_{1,n} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \phi_{2n+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ e_{2,n} \end{pmatrix}.$$

Ekkor $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2, \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2})$ teljes ortonormált rendszer.

1.4. Közöséges differenciálegyenletek

1.16. Definíció. Legyen $I \subset \mathbb{R}$ nyílt intervallum, $M \subset \mathbb{R}^n$ ($n \in \mathbb{N}^+$) tartomány, $T = I \times M$ és $f : T \rightarrow \mathbb{R}^n$ adott folytonos függvény. Legyen továbbá $(t_0, x_0) \in T$ adott pont. Ekkor f jobboldalú explicit elsőrendű közöséges differenciálegyenletnek (KDE-nek)

nevezzük az

$$\begin{cases} x'(t) = f(t, x(t)), & t \in I \\ x(t_0) = x_0 \end{cases} \quad (1.4)$$

egyenletet, ahol $x : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ az ismeretlen függvény. Azt mondjuk, hogy x *megoldása* az (1.4) egyenletnek, ha

1. differenciálható I -n,
2. $\{(t, x(t)) : t \in I\} \subset T$,
3. $x'(t) = f(t, x(t))$ minden $t \in I$ esetén
4. és $x(t_0) = x_0$, azaz x kielégíti a kezdeti feltételt.

Autonóm KDE-ről beszélünk, ha a fenti 1.16. Definícióban $f(t, x(t)) = g(x(t))$ minden $t \in I$ esetén valamely $g : M \rightarrow \mathbb{R}^n$ függvény mellett. Ismeretes, hogy autonóm egyenlet esetén egy megoldás időbeli eltolásával szintén megoldáshoz jutunk, így innentől feltehető, hogy $0 \in I$, és elegendő a $t_0 = 0$ időpontban megadni kezdeti feltételt. Az (1.4) közönséges differenciálegyenlet egy speciális esete, amikor adott $A \in \mathbb{R}^n$ mátrix mellett $f(t, x(t)) = Ax(t)$. Az ilyen egyenlet autonóm. Mivel ebben a dolgozatban csak ilyen alakú közönséges differenciálegyenletekkel dolgozunk, ezért ezt az esetet külön definiáljuk.

1.17. Definíció. Legyen $I \subset \mathbb{R}$ nyílt intervallum, amelyre $0 \in I$, $T \subset \mathbb{R}^n$ ($n \in \mathbb{N}^+$) tartomány, $T = I \times M$ és $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ adott konstans mátrix. Legyen továbbá $x_0 \in M$ adott pont. Ekkor *állandó együtthatós homogén lineáris közönséges differenciálegyenlet-rendszernek* nevezzük az

$$\begin{cases} x'(t) = Ax(t), & t \in I \\ x(0) = x_0 \end{cases} \quad (1.5)$$

egyenletet, ahol $x : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ az ismeretlen függvény.

1.18. Állítás. Az (1.5) egyenletnek bármely kezdeti feltétel esetén egyértelműen létezik megoldása, amely az egész I intervallumon van értelmezve.

1.19. Jelölés. Adott $x(0) = x_0$ kezdeti feltétel esetén jelölje az (1.5) differenciálegyenlet megfelelő megoldását $\Phi(t, x_0)$.

1.20. Definíció. Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($n \in \mathbb{N}^+$) mátrix. Ekkor legyen

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}.$$

Ez a mátrix jól definiált, mivel minden $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ esetén normában konvergens.

1.21. Állítás. Az (1.5) állandó együtthatós homogén lineáris KDE megoldása tetszőleges $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ esetén

$$x(t) = e^{tA}x_0.$$

1.22. Definíció. Tekintsük az (1.5) egyenletet. A $p \in M$ pont pályája a

$$\{\Phi(t, p) : t \in I\} \subset M$$

halmaz. Azt mondjuk, hogy a $p \in M$ pont pályája

- (i) *stabil*, ha $\forall \varepsilon > 0$ -ra $\exists \delta > 0$, hogy $|p - q| < \delta$ esetén $|\Phi(t, p) - \Phi(t, q)| < \varepsilon$ minden $t \in I$ mellett,
- (ii) *aszimptotikusan stabil*, ha stabil és $|p - q| < \delta$ esetén $|\Phi(t, p) - \Phi(t, q)| \rightarrow 0$, ahogy $t \rightarrow 0$,
- (iii) *instabil*, ha nem stabil.

A $p \in M$ pont *egyensúlyi pont*, ha $\Phi(t, p) = p$ minden $t \in I$ esetén.

Megjegyezzük, hogy az (1.5) egyenlet bármely két pályájának stabilitása megegyezik, mivel

$$|\Phi(t, p) - \Phi(t, q)| = |e^{tA}p - e^{tA}q| = |e^{tA}(p - q)| \leq \|e^{tA}\| |p - q|.$$

Emiatt a KDE-rendszer pályáinak stabilitása helyett beszélhetünk a magának a rendszernek a stabilitásáról, és elegendő például a $p = 0$ egyensúlyi ponthoz tartozó $\{0\}$ pálya stabilitását vizsgálni.

1.23. Állítás. Az (1.5) rendszer

- (a) *aszimptotikusan stabil akkor és csak akkor, ha A minden λ sajátértékére*

$$\operatorname{Re}(\lambda) < 0,$$

- (b) *stabil akkor és csak akkor, ha A minden λ sajátértékére*

$$\operatorname{Re}(\lambda) \leq 0, \text{ illetve } \operatorname{Re}(\lambda) = 0 \text{ esetén } \lambda \text{ multiplicitása a minimálpolinomban } 1.$$

2. fejezet

Modell egy morfogénre

Ebben a fejezetben egy egydimenziós térrészt tekintünk, amelyben egyetlen vegyület van jelen. A fejezet a [3] könyvfejezet alapján, az ott szereplő levezetések alaposabb kifejtésével készült. Jelölje $u(x, t)$ a morfogén koncentrációját az $x \in [0, L]$, $L > 0$ térbeli pontban és $t \geq 0$ időpillanatban, és tegyük fel, hogy a morfogén az $f(u(x, t))$ ráta szerint termelődik, ahol $f: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható függvény. Ekkor az f által meghatározott reakció-diffúzió egyenlet az 1.1. Definíció alapján

$$\partial_t u = D \partial_x^2 u + f(u), \quad x \in (0, L), \quad t > 0, \quad (2.1a)$$

ahol $D > 0$ a diffúziós együttható és $u: [0, L] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ az ismeretlen függvény. A megoldás nemnegativitását a modell biológiai vonatkozása miatt követeljük meg, ugyanis egy vegyület koncentrációja csak nemnegatív lehet. Mivel a morfogének nem tudják elhagyni a tartományt annak peremén keresztül, valamint ott forrásuk és nyelőjük nincs, ezért a feladatot homogén Neumann peremfeltétellel látjuk el:

$$\partial_x u(0, t) = \partial_x u(L, t) = 0, \quad t \geq 0. \quad (2.1b)$$

Megjegyezzük, hogy ekkor a (2.1a)-(2.1b) feladat éppen (1.2) alakú. Ahogy az a bevezetőben is szerepelt, minket az érdekel, hogy egy kezdetben térben közel homogén morfogénkoncentrációból milyen feltételek mellett alakulnak ki térben heterogén mintázatok. Ebben a fejezetben azt fogjuk látni, hogy egy morfogén esetén az elég nagy mértékű diffúzió mindig stabilizáló hatással van, ám későbbi fejezetekben kiderül, hogy több morfogén esetén, azaz reakció-diffúzió rendszerben ez már nem feltétlenül van így.

2.1. Lineáris stabilitásvizsgálat

Vizsgáljuk az egyenletnek az 1.8. Definíció szerint térben homogén stacionárius állapotának az 1.11. Definíció szerinti lineáris stabilitását. Első lépésben keressük meg a stacionári-

us állapotot. Ha $u(x, t) = u_0$ konstans, akkor $\partial_t u(x, t) = \partial_t u_0 = 0$ és $\partial_x^2 u(x, t) = \partial_x^2 u_0 = 0$ teljesül. Innen világos, hogy ahhoz, hogy $u(x, t) = u_0$ megoldása legyen a (2.1a)-(2.1b) feladatnak, arra van szükségünk, hogy $f(u_0) = 0$ teljesüljön. Legyen tehát mostantól u_0 zérushelye az f függvénynek.

Tökéletes homogenitás a természetben persze sosem fordul elő, kisebb-nagyobb eltérések a stacionárius állapottól itt is lesznek kezdetben. Legyen

$$u(x, 0) = u_0 + \bar{u}(x), \quad x \in [0, L] \quad (2.1c)$$

a feladat kezdeti feltétele, ahol $\bar{u} : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}$ a kezdeti perturbáció. Valójában azt is elvárjuk az $\bar{u}$ függvénytől, hogy $\bar{u}(x) \geq -u_0$ teljesüljön minden $x \in [0, L]$ esetén. Erre azért van szükség, mert különben már a kezdeti feltételben sérülne a megoldásra vonatkozó nemnegativitási feltétel. Arra vagyunk kíváncsiak, hogy ezzel a perturbációval mi történik az idő előrehaladtával. Keressük a megoldást $u(x, t) = u_0 + \tilde{u}(x, t)$ alakban. Behelyettesítéssel (2.1)-be a következőt kapjuk:

$$\begin{cases} \partial_t u_0 + \partial_t \tilde{u} = D\partial_x^2 u_0 + D\partial_x^2 \tilde{u} + f(u_0 + \tilde{u}), & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_x u_0 + \partial_x \tilde{u}(0, t) = \partial_x u_0 + \partial_x \tilde{u}(L, t) = 0, & t \geq 0, \\ u_0 + \tilde{u}(x, 0) = u_0 + \bar{u}(x), & x \in [0, L]. \end{cases}$$

Az f függvény u_0 körüli lineáris tagig való sorba fejtésével kapjuk, hogy

$$f(u_0 + \tilde{u}) = f(u_0) + f'(u_0)\tilde{u} + R(\tilde{u}),$$

ahol

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{R(h)}{h} = 0.$$

A sorfejtést behelyettesítve és kihasználva, hogy u_0 térben és időben is konstans és így a deriváltjai eltűnnek, valamint hogy $f(u_0) = 0$, az alábbi feladathoz jutunk:

$$\begin{cases} \partial_t \hat{u} = D\partial_x^2 \hat{u} + f'(u_0)\hat{u}, & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_x \hat{u}(0, t) = \partial_x \hat{u}(L, t) = 0, & t \geq 0, \\ \hat{u}(x, 0) = \bar{u}(x), & x \in [0, L], \end{cases} \quad (2.2)$$

ahol a nemlineáris $R(\tilde{u})$ tagot elhagytuk. Megjegyezzük, hogy itt $\tilde{u}$ helyett $\hat{u}$ -t írtunk, hiszen a (2.2) linearizált feladat megoldása már nem feltétlenül megoldása az eredeti (2.1) feladatnak. Azzal a feltételezéssel élünk ugyanakkor, hogy a kezdeti perturbáció mindenhol elég kicsi ahhoz, hogy a linearizálással ne vétünk nagy hibát.

Keressük most a (2.2) feladat megoldását. A $D = 0$ esetben a

$$\begin{cases} \partial_t \hat{u} = f'(u_0) \hat{u}, & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_x \hat{u}(0, t) = \partial_x \hat{u}(L, t) = 0, & t \geq 0, \\ \hat{u}(x, 0) = \bar{u}(x), & x \in [0, L], \end{cases}$$

feladathoz jutunk, amelynek a megoldása $\hat{u}(x, t) = \bar{u}(x)e^{f'(u_0)t}$. Ekkor u_0 lineáris stabilitása a következők szerint alakul.

- Ha $f'(u_0) < 0$, akkor $\|\hat{u}(\cdot, t)\| = \|e^{f'(u_0)t}\bar{u}\| = e^{f'(u_0)t}\|\bar{u}\| \rightarrow 0$, ahogy $t \rightarrow \infty$, tehát u_0 lineárisan stabil állapot az 1.11. Definíció alapján.
- Ha $f'(u_0) \geq 0$, akkor $\|\hat{u}(\cdot, t)\| \geq \|\bar{u}\|$ minden $t \geq 0$ esetén, tehát u_0 instabil állapot.

Ebből az alakból az is látszik, hogy az $\bar{u}$ függvénynek teljesítenie kell a homogén Neumann peremfeltételt, hiszen különben az $\hat{u}(x, t) = \bar{u}(x)e^{f'(u_0)t}$ megoldás sem fogja teljesíteni azt.

Legyen most $D > 0$. A (2.2) linearizált feladatot Fourier-módszerrel oldjuk meg. Legyen $\mathcal{L} : D(\mathcal{L}) \rightarrow L^2(0, L)$, $\mathcal{L}u = -Du'' - f'(u_0)u$ lineáris operátor, ahol

$$D(\mathcal{L}) = \{u \in C^2(0, L) \cap C^1([0, L]) : u'(0) = u'(L) = 0\}.$$

Ekkor a feladat a következőképpen írható fel:

$$\begin{cases} \partial_t \hat{u} + \mathcal{L}\hat{u} = 0, & x \in (0, L), t > 0, \\ \hat{u}(x, 0) = \bar{u}(x), & x \in [0, L], \\ \hat{u} \in D(\mathcal{L}). \end{cases}$$

Az (1.12) állítást és az $(\mathcal{L}, D(\mathcal{L}))$ operátor linearitását felhasználva látjuk, hogy a sajátértékei

$$\lambda_k = D \left(\frac{k\pi}{L} \right)^2 - f'(u_0), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

és a hozzájuk tartozó sajátfüggvényei

$$e_0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad \text{és} \quad e_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \left(\frac{k\pi}{L} x \right), \quad k = 1, 2, \dots$$

A megoldást

$$\hat{u}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) e_k(x)$$

alakban keressük. A sor megfelelő konvergenciáját föltéve egyrészt a peremfeltételek au-

tomatikusan teljesülnek, mivel ekkor

$$\partial_x \hat{u}(x, t) = \partial_x \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) e_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) e'_k(x) = 0, \quad x = 0, L, \quad t \geq 0,$$

másrészt behelyettesítéssel és $\mathcal{L}e_k = \lambda_k e_k$, $k = 0, 1, 2, \dots$ felhasználásával

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{u} + \mathcal{L} \hat{u} &= \partial_t \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) e_k(x) + \mathcal{L} \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) e_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \xi'_k(t) e_k(x) + \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(t) \mathcal{L} e_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (\xi'_k(t) + \lambda_k \xi_k(t)) e_k(x), \quad x \in (0, L), \quad t > 0. \end{aligned}$$

A Fourier-sorfejtés egyértelműségéből szükségképpen

$$\xi'_k(t) = -\lambda_k \xi_k(t), \quad t \geq 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

következik, hiszen $(e_k)_{k=0}^{\infty} \subset L^2(0, L)$ teljes ortonormált rendszer, és az azonosan nulla függvény Fourier-együtthatói 0-val egyeznek meg minden $k = 0, 1, 2, \dots$ mellett. Ezenkívül sorba fejtjük a sajátfüggvények bázisában az $\bar{u}$ függvényt is,

$$\bar{u}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e_k(x),$$

amiből a kezdeti feltétel alapján

$$\sum_{k=0}^{\infty} \xi_k(0) e_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e_k(x).$$

Így minden $k = 0, 1, 2, \dots$ mellett

$$\xi_k(0) = \bar{u}_k$$

teljesül, azaz a ξ_k függvényekre kezdeti feltétellel ellátott közönséges differenciálegyenletekhez jutottunk. Ezeknek a megoldásai

$$\xi_k(t) = \bar{u}_k e^{-\lambda_k t}, \quad t \geq 0$$

minden $k = 0, 1, 2, \dots$ esetén.

A (2.2) linearizált feladat megoldása tehát

$$\hat{u}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e^{-\lambda_k t} e_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e^{(f'(u_0) - D(\frac{k\pi}{L})^2)t} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right). \quad (2.3)$$

A Fourier-módszer alkalmazása során azzal a feltételezéssel éltünk, hogy a (2.2) feladat megoldása és a tagonkénti térbeli, illetve időbeli deriváltakból képzett sorok egyenletesen konvergensek, és így jogosak a tagonkénti deriválások. Megmutatjuk, hogy ez valóban teljesül. Először is rögzített $t > 0$ mellett a megoldás és a tagonkénti térbeli deriváltakból képzett sorok

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \\ & \sum_{k=0}^{\infty} -\bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{k\pi}{L}\right) \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \\ & \sum_{k=0}^{\infty} -\bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \end{aligned} \quad (2.4)$$

alakúak. Létezik $N \in \mathbb{N}$, hogy minden $k \geq N$ esetén $\lambda_k > 0$ és így mindhárom esetben $k \geq N$ mellett a tagok abszolút értékei felülről becsülhetők az alábbiak szerint:

$$\begin{aligned} & \left| \bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \right| \leq C_1 e^{-C_2 k^2}, \\ & \left| -\bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{k\pi}{L}\right) \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \right| \leq C_3 k e^{-C_4 k^2}, \\ & \left| -\bar{u}_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \right| \leq C_5 k^2 e^{-C_6 k^2}, \end{aligned}$$

ahol $C_1, \dots, C_6$ alkalmas pozitív, t -től függő konstansok. Itt felhasználtuk, hogy $\bar{u}_k$ az $\bar{u} \in L^2(0, L)$ függvény Fourier-együtthatói, és ebből kifolyólag $(\bar{u}_k) \in \ell^2$, tehát $\bar{u}_k \rightarrow 0$, $k \rightarrow \infty$ és létezik az együtthatók maximuma. Mármint a majoránsokból álló sorok mind konvergensek, így a (2.4) sorok abszolút és egyenletesen konvergensek a $[0, L]$ intervallumon. Legyen most $x \in [0, L]$ rögzített. Ekkor $t > 0$ -hoz válasszunk $\delta > 0$, $T > 0$ értékeket úgy, hogy $\delta < t < T$ teljesüljön. Ekkor a tagonkénti időbeli deriváltakból álló

$$\sum_{k=0}^{\infty} -\bar{u}_k \lambda_k e^{-\lambda_k t} e_k(x)$$

sor egyenletesen konvergens $[\delta, T]$ -n, mivel alkalmas C_7, C_8 pozitív konstansok mellett $k \geq N$ esetén érvényes az alábbi becslés:

$$\left| -\bar{u}_k \lambda_k e^{-\lambda_k t} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right) \right| \leq C_7 k^2 e^{-C_8 \delta k^2}.$$

A (2.2) linearizált feladat megoldásának (2.3) alakjából leolvashatunk feltételeket az u_0 stacionárius állapot lineáris stabilitására. Stabil lesz ugyanis, ha határértékben minden

Fourier-együttható eltűnik, mivel

$$\begin{aligned}
\|\hat{u}(\cdot, t)\| &= \left\| \sum_{k=0}^{\infty} \bar{u}_k e^{\left(f'(u_0) - D\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2\right)t} e_k \right\| \leq \\
&\leq \sum_{k=0}^{\infty} \left\| \bar{u}_k e^{\left(f'(u_0) - D\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2\right)t} e_k \right\| \leq \\
&\leq \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=0}^{\infty} \left| \bar{u}_k e^{\left(f'(u_0) - D\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2\right)t} \right| = \\
&= \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=0}^{\infty} |\bar{u}_k| e^{\left(f'(u_0) - D\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2\right)t},
\end{aligned}$$

ahol használtuk, hogy $\|e_0\| = \frac{1}{\sqrt{L}}$ és $\|e_k\| = \sqrt{\frac{2}{L}}$ minden $k = 1, 2, \dots$ esetén. Pontosan akkor teljesül

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{\left(f'(u_0) - D\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2\right)t} = 0$$

minden k -ra, ha $f'(u_0) < 0$. Ilyenkor a (2.3) sor $T > 0$ mellett egyenletesen konvergens a $[T, +\infty)$ intervallumon, tehát jogos a $t \rightarrow \infty$ határértéket tagonként venni. Innen látszik, hogy ekkor valóban $\lim_{t \rightarrow \infty} \|\hat{u}(\cdot, t)\| = 0$ teljesül. A diffúzió bevezetésével tehát továbbra is stabil marad a diffúzió nélkül stabil rendszer és nincsen lehetőség a mintázatképződésre.

3. fejezet

Modell két morfogénre

Ebben a fejezetben a [3, 7, 4] források feldolgozásával mutatjuk be a Turing-modellt két morfogénre. Először az egyszerűség kedvéért egy egydimenziós térbeli tartományt tekintünk, majd áttérünk az általánosabb, valóságghűbb modellre két dimenzióban. A teljesség szándékával az említett forrásokban szereplő levezetéseket némileg kiegészítve, valamint példák és ábrák kíséretében prezentáljuk.

3.1. Egy dimenzióban

Tekintsünk egy egydimenziós térrészt, amelyben két vegyület van jelen. A rendszerben ilyenkor a diffúzió mellett a vegyületek egymás közti reakciója is befolyásolja azok koncentrációeloszlását a térben. Jelölje $u(x, t)$, illetve $v(x, t)$ a két morfogén koncentrációját az $x \in [0, L]$, $L > 0$ térbeli pontban és $t \geq 0$ időpillanatban. A morfogének termelődését és átalakulását együttesen a megfelelő $f(u(x, t), v(x, t))$, $f \in C^1(\mathbb{R}_+)$ és $g(u(x, t), v(x, t))$, $g \in C^1(\mathbb{R}_+)$ függvények írják le. Felírjuk az u és v függvényekre vonatkozó reakció-diffúzió rendszert. Az egy morfogén esetéhez hasonlóan a biológiai vonatkozás miatt itt is homogén Neumann peremfeltételt írunk elő a feladat megoldására. Ekkor az alábbi peremérték-feladatot nyerjük:

$$\begin{cases} \partial_t u = D_1 \partial_x^2 u + f(u, v), & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_t v = D_2 \partial_x^2 v + g(u, v), & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_x u(0, t) = \partial_x u(L, t) = 0, & t \geq 0, \\ \partial_x v(0, t) = \partial_x v(L, t) = 0, & t \geq 0. \end{cases}$$

Itt $D_1, D_2 > 0$ diffúziós együtthatók és $u : [0, L] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ és $v : [0, L] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ az ismeretlen függvények. Bevezetve az

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}, \quad F(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} f(u, v) \\ g(u, v) \end{pmatrix}$$

jelöléseket, az alábbi alakban írhatjuk fel az egyenletet:

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} = D\partial_x^2 \mathbf{u} + F(\mathbf{u}), & x \in (0, L), t > 0 \\ \partial_x \mathbf{u}(0, t) = \partial_x \mathbf{u}(L, t) = 0, & t \geq 0 \end{cases} \quad (3.1a)$$

Megjegyezzük, hogy ekkor a (3.1a) feladat éppen (1.2) alakú. Ezt a peremérték-feladatot a következő alfejezetben ellátjuk megfelelő kezdeti feltétellel, majd lineáris stabilitás szempontjából vizsgáljuk a térben homogén stacionárius állapotát.

3.1.1. Turing-instabilitás

Tegyük fel, hogy létezik olyan $\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0)^\top \in \mathbb{R}^2$, hogy $F(\mathbf{u}_0) = 0$. Ekkor, ahogyan azt már az egydimenziós esetben is láttuk, $\mathbf{u}_0$ térben homogén stacionárius állapota a (3.1a) feladatnak, mivel a deriváltjai eltűnnek. Az egy morfogén esetéhez hasonlóan ismét felteesszük, hogy a $t = 0$ időpillanatban a vegyületek eloszlása nem tökéletesen homogén, hanem a stacionárius állapothoz képest apró eltérések jellemzik. Megszabjuk az

$$\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0 + \bar{\mathbf{u}}(x), \quad x \in [0, L] \quad (3.1b)$$

kezdeti feltételt, ahol $\bar{\mathbf{u}} = (\bar{u}, \bar{v})^\top : [0, L] \rightarrow \mathbb{R}^2$ a kezdeti perturbáció. A megoldást $\mathbf{u}(x, t) = \mathbf{u}_0 + \tilde{\mathbf{u}}(x, t)$ alakban keressük.

Az f és g függvények $\mathbf{u}_0$ körüli lineáris tagig való sorba fejtésével kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}_0 + \tilde{\mathbf{u}}) &= f(\mathbf{u}_0) + \nabla f(\mathbf{u}_0)^\top \tilde{\mathbf{u}} + R_1(\tilde{\mathbf{u}}), \\ g(\mathbf{u}_0 + \tilde{\mathbf{u}}) &= g(\mathbf{u}_0) + \nabla g(\mathbf{u}_0)^\top \tilde{\mathbf{u}} + R_2(\tilde{\mathbf{u}}), \end{aligned}$$

ahol

$$\lim_{\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{R_1(\mathbf{h})}{|\mathbf{h}|} = \lim_{\mathbf{h} \rightarrow \mathbf{0}} \frac{R_2(\mathbf{h})}{|\mathbf{h}|} = 0.$$

A sorfejtést behelyettesítjük és kihasználjuk, hogy $\mathbf{u}_0$ térben és időben is konstans és így a deriváltjai eltűnnek, valamint hogy $f(\mathbf{u}_0) = g(\mathbf{u}_0) = 0$. A linearizált vegyes feladat ekkor a következő:

$$\begin{cases} \partial_t \hat{\mathbf{u}} = D\partial_x^2 \hat{\mathbf{u}} + J\hat{\mathbf{u}}, & x \in (0, L), t > 0, \\ \partial_x \hat{\mathbf{u}}(0, t) = \partial_x \hat{\mathbf{u}}(L, t) = 0, & t \geq 0, \\ \hat{\mathbf{u}}(x, 0) = \bar{\mathbf{u}}(x), & x \in [0, L], \end{cases} \quad (3.2)$$

ahol

$$J = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$$

és

$$\begin{aligned} f_u &= (\partial_u f)(u_0, v_0), \quad f_v = (\partial_v f)(u_0, v_0), \\ g_u &= (\partial_u g)(u_0, v_0), \quad g_v = (\partial_v g)(u_0, v_0) \end{aligned}$$

az u , illetve v szerinti deriváltjai az f illetve g függvényeknek kiértékelve az $\mathbf{u}_0$ helyen.

A megoldásért ismét a Fourier-módszerhez nyúlunk. Mivel most a keresett függvény vektorértékű, ezért az $L^2(0, L)^2 := L^2(0, L) \times L^2(0, L)$ térben dolgozunk, ami az (1.14) állítás alapján Hilbert-tér. Felhasználva az (1.12) és (1.15) állításokat, az alábbi függvények $k = 0, 1, 2, \dots$ indexek mellett együttesen teljes ortonormált rendszert alkotnak $L^2(0, L)^2$ -ben:

$$\mathbf{e}_{1,k} = \begin{pmatrix} e_k \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathbf{e}_{2,k} = \begin{pmatrix} 0 \\ e_k \end{pmatrix},$$

ahol

$$e_0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad \text{és} \quad e_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \quad k = 1, 2, \dots$$

Ekkor az is látszik, hogy az $e_{i,k}$ függvények minden $k \in \mathbb{N}$ és $i = 1, 2$ esetén sajátfüggvényei a megfelelő téren értelmezett $-\partial_x^2$ operátornak, méghozzá $\lambda_k = \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2$ sajátértékekkel.

A megoldást

$$\hat{\mathbf{u}}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} (\xi_{1,k}(t)\mathbf{e}_{1,k}(x) + \xi_{2,k}(t)\mathbf{e}_{2,k}(x)) = \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x)$$

alakban keressük, ahol $\boldsymbol{\xi}_k = (\xi_{1,k}, \xi_{2,k})^\top$. A sor megfelelő konvergenciáját föltéve egyrészt a peremfeltételek automatikusan teljesülnek, mivel ekkor

$$\partial_x \hat{\mathbf{u}}(x, t) = \partial_x \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e'_k(x) = 0, \quad x = 0, L, \quad t \geq 0,$$

másrészt behelyettesítéssel

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\mathbf{u}} - D\partial_x^2 \hat{\mathbf{u}} - J\hat{\mathbf{u}} &= \partial_t \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x) - D\partial_x^2 \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x) - J \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \boldsymbol{\xi}'_k(t)e_k(x) - \sum_{k=0}^{\infty} D\boldsymbol{\xi}_k(t)e''_k(x) - \sum_{k=0}^{\infty} J\boldsymbol{\xi}_k(t)e_k(x) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (\boldsymbol{\xi}'_k(t) + \lambda_k D\boldsymbol{\xi}_k(t) - J\boldsymbol{\xi}_k(t))e_k(x), \quad x \in (0, L), \quad t > 0. \end{aligned}$$

Írjuk fel a kezdeti feltételt is a sajátfüggvények bázisában:

$$\bar{\mathbf{u}}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \bar{\mathbf{u}}_k e_k(x), \quad x \in [0, L].$$

Ekkor a Fourier-sorfejtés egyértelműsége következtében minden $k = 0, 1, 2, \dots$ mellett egy KDE-rendszert nyerünk a $\boldsymbol{\xi}_k$ függvényekre. Ezeket, bevezetve minden $k = 0, 1, 2, \dots$ esetén az $A_k = J - \lambda_k D$ jelölést,

$$\begin{cases} \boldsymbol{\xi}'_k(t) = A_k \boldsymbol{\xi}_k(t), & t \geq 0 \\ \boldsymbol{\xi}_k(0) = \bar{\mathbf{u}}_k \end{cases} \quad (3.3)$$

alakban írhatjuk. Ezeknek a megoldásai az 1.21. Állítás alapján

$$\boldsymbol{\xi}_k(t) = e^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

A (3.2) linearizált feladat megoldása tehát

$$\hat{\mathbf{u}}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k e_k(x).$$

Vizsgáljuk most ennek alapján az $\mathbf{u}_0$ stacionárius állapot lineáris stabilitását:

$$\begin{aligned} \|\hat{\mathbf{u}}(\cdot, t)\| &= \left\| \sum_{k=0}^{\infty} e^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k e_k \right\| \leq \\ &\leq \sum_{k=0}^{\infty} \|e^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k e_k\| \leq \\ &\leq \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=0}^{\infty} |e^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k|. \end{aligned}$$

Amennyiben a (3.3) KDE-rendszer minden $k = 0, 1, 2, \dots$ esetén aszimptotikusan stabil az 1.22. Definíció szerint, akkor $\mathbf{u}_0$ stabil. Ez az 1.23. Állítás alapján pontosan akkor teljesül, ha minden $k = 0, 1, 2, \dots$ esetén az A_k mátrix összes sajátértékének a valós része negatív. Adott k -ra az $A_k \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ mátrix sajátértékeit jelöljük $\mu_{k,1}$ és $\mu_{k,2}$. A karakterisztikus egyenlet

$$\begin{aligned} 0 &= \det(J - \lambda_k D - \mu I) = \\ &= \mu^2 - b_k \mu + c_k, \end{aligned}$$

ahol

$$b_k = \text{tr}(A_k) = -(D_1 + D_2) \left(\frac{k\pi}{L} \right)^2 + f_u + g_v$$

$$\text{és } c_k = \det(A_k) = D_1 D_2 \left(\frac{k\pi}{L} \right)^4 - (D_2 f_u + D_1 g_v) \left(\frac{k\pi}{L} \right)^2 + f_u g_v - f_v g_u.$$

Ezt az egyenletet $\mu_{k,1}$ és $\mu_{k,2}$ is kielégíti. Tekintsük először a $D_1 = D_2 = 0$ esetet. Ekkor $\text{Re } \mu_{k,1}, \text{Re } \mu_{k,2} < 0$ pontosan akkor teljesül, ha

$$f_u + g_v < 0 \quad \text{és} \quad f_u g_v - f_v g_u > 0. \quad (3.4a)$$

A kérdés az, hogy megadhatóak-e olyan feltételek, amelyek mellett a diffúzió nélkül még stabil $\mathbf{u}_0$ térben homogén stacionárius állapot diffúzió jelenlétében instabillá válik. Ennek eldöntéséért folytassuk az elemzést. Arra van szükségünk, hogy legalább egy k -ra A_k -nak legyen olyan sajátértéke, amelynek a valós része pozitív. Ekkor ugyanis a megfelelő, (3.3) alakú KDE-rendszer instabillá válik, és így $|\mathbf{e}^{A_k t} \bar{\mathbf{u}}_k| \rightarrow \infty$, ahogy $t \rightarrow \infty$. Azt sejtethetjük, hogy ez majd a stacionárius állapot instabilitását okozza.

Elvárjuk, hogy valamely k esetén teljesüljön, hogy

$$b_k > 0 \quad \text{vagy} \quad c_k < 0.$$

A (3.4a) feltétel első pontja miatt $b_k < 0$, így

$$c_k = D_1 D_2 \left(\frac{k\pi}{L} \right)^4 - (D_2 f_u + D_1 g_v) \left(\frac{k\pi}{L} \right)^2 + f_u g_v - f_v g_u < 0$$

kell. A c_k -ra mint k^2 másodfokú polinomja tekintve látható, hogy szükséges feltétel a diszkrimináns pozitivitása:

$$(D_2 f_u + D_1 g_v)^2 \left(\frac{\pi}{L} \right)^4 - 4 D_1 D_2 \left(\frac{\pi}{L} \right)^4 (f_u g_v - f_v g_u) > 0.$$

Sőt, a $D_2 f_u + D_1 g_v$ kifejezésnek is pozitívnak kell lennie. Innen megkapjuk a harmadik feltételt:

$$D_2 f_u + D_1 g_v > 2 \sqrt{D_1 D_2 (f_u g_v - f_v g_u)} > 0. \quad (3.4b)$$

Ezzel azt biztosítjuk, hogy a polinomnak legyen két különböző valós zérushelye, melyeket jelölje

$$k_{\pm}^2 = \left(\frac{L}{\pi} \right)^2 \frac{D_2 f_u + D_1 g_v \pm \sqrt{(D_2 f_u + D_1 g_v)^2 - 4 D_1 D_2 (f_u g_v - f_v g_u)}}{2 D_1 D_2} \in \mathbb{R}_+.$$

Ez önmagában nem elég. A negyedik feltétel, hogy legyen olyan $k \in \mathbb{N}$, amelyre

$$k_-^2 < k^2 < k_+^2. \quad (3.4c)$$

Összesítve azt kapjuk, hogy a (3.4) feltételek mellett a diffúzió instabillá teszi az egyébként stabil térben homogén stacionárius állapotot. Ezt a jelenséget hívjuk *Turing-instabilitásnak* vagy *diffúzió-vezérelt instabilitásnak*.

Ezen a ponton tegyünk néhány észrevételt a feltételekkel kapcsolatban. Először is fontos hangsúlyozni, hogy a (3.4) feltételek egy lineáris stabilitásvizsgálat eredményei, míg az eredeti (3.1) feladat egy nemlineáris egyenletből áll. Ebből kifolyólag csupán a fenti levezetések alapján nem állíthatjuk, hogy a (3.4) feltételek teljes képet adnak a stacionárius állapot stabilitását illetően. Ezt szem előtt tartva fogalmazzuk meg a következő megfigyeléseket.

1. Mivel k_-^2 és k_+^2 függnak L -től, az intervallum hosszától, ezért az a mintázatképződést is befolyásolja. Ha adott paraméterek mellett L túl kicsi, akkor nem teljesül a (3.4c) feltétel, és így stabil marad az $\mathbf{u}_0$ stacionárius állapot. Ahogy növeljük L értékét, úgy általában egyre több $k \in \mathbb{N}$ esetén teljesül a (3.4c) feltétel. Ha csak egy ilyen k létezik, akkor egy egyszerű mintázat képződését figyelhetjük meg, amelyet a megfelelő e_k sajátfüggvény határoz meg. Nagyobb intervallumokon általában egyszerre több sajátfüggvénynek is meghatározó szerepe lesz a mintázatképződésben, és így bonyolultabb minták is keletkezhetnek. Ezeket a mintákat a kezdeti perturbációk véletlenszerű jellegéből adódóan és a nemlineáris összefüggések miatt nem tudjuk előre pontosan meghatározni.
2. Attól még, hogy valamely elég nagy L esetén Turing-instabil rendszert kapunk, előfordulhat, hogy nagyobb intervallumon újból sérül a (3.4c) feltétel, és ismét stabilizálódik a rendszer. Erre később, a 3.1.2. fejezetben látunk majd példát.
3. Megfigyelhetjük, hogy a J mátrix alakja az elemei előjele szerint az alábbi két alak egyike kell, hogy legyen:

$$J_1 = \begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix} \quad \text{vagy} \quad J_2 = \begin{pmatrix} + & + \\ - & - \end{pmatrix}.$$

Ennek oka, hogy egyrészt f_u és g_v ellentétes előjelűek, mert másképp nem teljesülhet egyszerre a (3.4a) első egyenlőtlensége és a (3.4b) feltétel, másrészt ekkor a (3.4a) második egyenlőtlensége alapján f_v és g_u is ellentétes előjelűek. Ezenkívül a

$$J'_1 = \begin{pmatrix} - & + \\ - & + \end{pmatrix}, \quad \text{illetve} \quad J'_2 = \begin{pmatrix} - & - \\ + & + \end{pmatrix}.$$

alakok is megkaphatók J_1 -ből, illetve J_2 -ből az egyenletrendszerben szereplő két egyenlet felcserélésével.

4. Vegyük észre, hogy D_1 és D_2 , a két diffúziós együttható, nem egyezhetnek meg. Ellenkező esetben ugyanis a (3.4b) egyenlőtlenséget leosztva a közös pozitív diffúziós együtthatóval azt kapjuk, hogy $f_u + g_v > 0$, ami ellentmond a (3.4a) feltétel első pontjának. Továbbá mind a J_1 és J_2 alakok esetén az is látszik, hogy $D_2 > D_1$. Ennek az összefüggésnek a jelentőségéről alább írunk.

A 3. pontban szereplő J_1 és J_2 alakok között lényeges kvalitatív különbség van, mivel a két esetben eltérő mechanizmusok állnak a mintázatképződés hátterében. Amennyiben J alakja J_1 -vel megegyező, úgy *serkentő-gátló rendszerről* beszélünk. Ekkor azt mondjuk, hogy az u morfogén serkenti a saját termelődését, mivel $f_u > 0$, míg $f_v < 0$ miatt v gátolja az u termelődését. Továbbá $g_u > 0$ és $g_v < 0$ alapján u serkenti a v termelődését is, v pedig gátolja azt. Láttuk, hogy $D_2 > D_1$, azaz a gátló v gyorsabban diffundál a térben, mint a serkentő u . Ez fontos szerepet játszik a mintázatképződésben: A v vegyület gyorsan eloszlik a térben, így megakadályozza az u elterjedését, míg az u -ban magas koncentrációjú területeken tovább nő az u vegyület koncentrációja.

Ha J alakja J_2 -vel megegyező, akkor *szubsztrát-kimerítő rendszerről* beszélünk. A v egy szubsztrát szerepét tölti be, ami az u termelődése során elhasználódik. A $D_2 > D_1$ összefüggés jelentőségét ebben az esetben a következőképpen lehet értelmezni. Ahol magas az u koncentrációja, ott a v szubsztrát hamar elhasználódik az u további termelődése során. Ha v más területeken nem lenne jelen kellő mértékben, akkor teljesen elfogyna a rendszerből, majd az u a diffúzió hatására egyenletesen eloszlana a térben az egy morfogén esetéhez hasonló módon.

3.1.2. A Gierer–Meinhardt-modell

Lássunk most egy konkrét példát az u és v reakcióit leíró függvényekre. Az egyik leg-híresebb a Gierer–Meinhardt-modell, ahol a (3.1) feladatban az f és g függvények az alábbiak:

$$f(u, v) = \alpha + \frac{u^2}{v} - \beta u \quad \text{és} \quad g(u, v) = u^2 - v. \quad (3.5)$$

Itt α és β pozitív konstansok. Az α paraméter felel meg az u vegyület alap termelődési rátájának, a β paraméter pedig a lebomlási rátájának.

A rendszer térben homogén stacionárius állapota az

$$\begin{cases} \alpha + \frac{u^2}{v} - \beta u = 0 \\ u^2 - v = 0 \end{cases}$$

egyenletrendszer megoldása, azaz

$$\mathbf{u}_0 = \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1+\alpha}{\beta} \\ \left(\frac{1+\alpha}{\beta}\right)^2 \end{pmatrix}.$$

Az f és g függvények parciális deriváltjait kiszámolva megkapjuk a (3.2) linearizált feladatban szereplő J mátrix alakját:

$$J = \begin{pmatrix} 2\frac{u_0}{v_0} - \beta & -\left(\frac{u_0}{v_0}\right)^2 \\ 2u_0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta\frac{1-\alpha}{1+\alpha} & -\left(\frac{\beta}{1+\alpha}\right)^2 \\ 2\frac{1+\alpha}{\beta} & -1 \end{pmatrix}.$$

Innen azonnal látszik, hogy a Gierer–Meinhardt-modell egy serkentő–gátló rendszert ír le, hiszen f_v és g_v negatívak és g_u pozitív. Ahhoz, hogy J valóban a J_1 alakot vegye fel, már csak a $0 < \alpha < 1$ kitétele van szükségünk, amit ezentúl fel is teszünk.

Nézzük meg, hogy mikor teljesülnek a modellben a (3.4a) feltételek, melyek a stacionárius állapot lineáris stabilitását biztosítják diffúzió hiányában.

- Az $f_u + g_v < 0$ feltétel pontosan akkor teljesül, ha $\beta < \frac{1+\alpha}{1-\alpha}$, így rögzített $\alpha \in (0, 1)$ mellett felső korlátot kapunk a β paraméterre.
- Az $f_u g_v - f_v g_u = -\beta\frac{1-\alpha}{1+\alpha} + 2\frac{\beta}{1+\alpha} > 0$ feltétel automatikusan teljesül, mivel α pozitív.

Rögzítsük most az α és β paramétereket úgy, hogy a fenti feltételek teljesüljenek. Ekkor szintén rögzített $D_1 > 0$ diffúziós együttható mellett kereshetjük D_2 és L azon értékeit, amelyekre Turing-instabillá válik a rendszer. A (3.4b) feltétel alapján behelyettesítés után

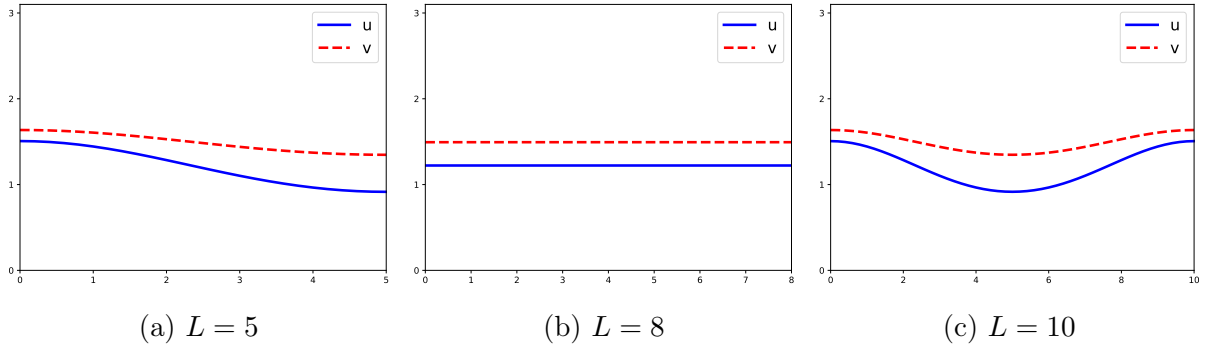
$$D_2 \beta \frac{1-\alpha}{1+\alpha} - D_1 > 2\sqrt{D_1 D_2 \left(-\beta \frac{1-\alpha}{1+\alpha} - 2\frac{\beta}{1+\alpha}\right)} > 0.$$

Ebből

$$D_2 > D_1 \frac{-1 + \frac{4}{1-\alpha} + \sqrt{\left(-1 + \frac{4}{1-\alpha}\right)^2 - 1}}{\beta \frac{1-\alpha}{1+\alpha}}$$

adódik.

Már csak L értékét kell megfelelően megválasztanunk. Például az $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 10$ választással a fenti feltételek teljesülnek. Az 1. ábrán ezen paraméterértékek mellett különböző L intervallumhosszakra láthatjuk a Gierer–Meinhardt-modell megoldását a $t = 500$ időpillanatban. Érdekes felfigyelnünk arra, hogy $L = 5$ esetén a morfogének egy térben heterogén koncentrációeloszlása jelenik meg, a nagyobb $L = 8$ esetén viszont az $u_0 = 1,22$, $v_0 = 1,49$ térben homogén stacionárius állapot látható. Az $L = 10$ esetben ismét egy heterogén minta jelenik meg. Ennek oka nyilvánvaló az 1d. táblázat alapján: $L = 8$ mellett nem létezik olyan $k \in \mathbb{N}$, amire $k_-^2 < k^2 < k_+^2$ teljesülne.



	k_-^2	k^2	k_+^2
$L = 5$	0,54	1	1,07
$L = 8$	1,38	–	2,75
$L = 10$	2,15	4	4,30

(d)

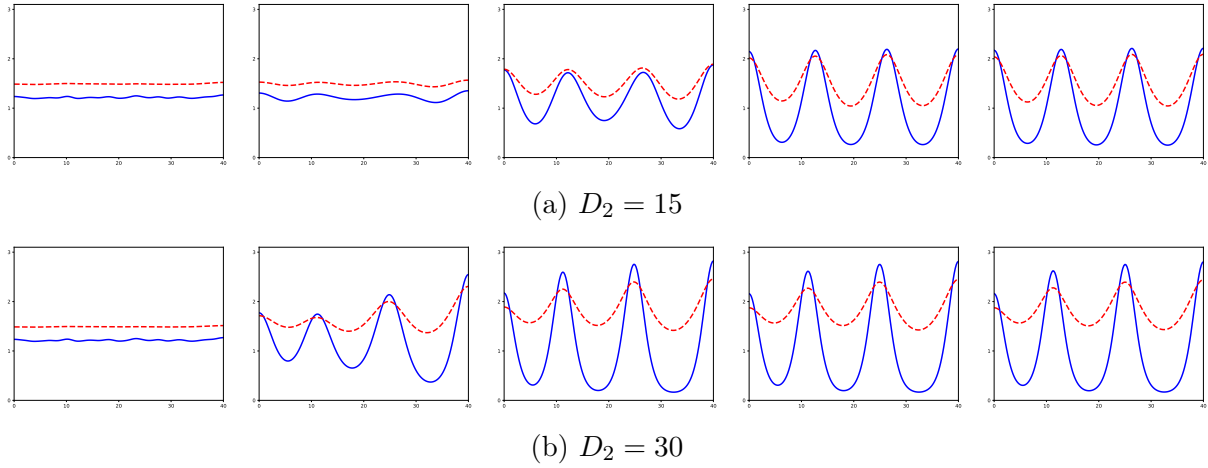
1. ábra. Különböző L értékek mellett a Gierer–Meinhardt-modell numerikus megoldása a $t = 500$ időpillanatban, illetve k_-^2 és k_+^2 kerekített értékei és a közük eső k^2 ($k \in \mathbb{N}$) értékek. Az egyéb paraméterértékek $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$ és $D_2 = 10$.

A másik két esetben létezik, méghozzá rendre a $k = 1$ és a $k = 2$. Nem meglepő innen, hogy a két minta pont $\cos\left(\frac{\pi}{5}x\right)$, illetve $\cos\left(\frac{2\pi}{10}x\right) = \cos\left(\frac{\pi}{5}x\right)$ frekvenciája szerint alakul.

Megjegyezzük, hogy mintázatképződés esetén az u és v vegyületek koncentrációeloszlása azonos fázisú. Vagyis, a serkentő-gátló rendszerek jellemzője, hogy a morfogének koncentrációja azonos helyeken növekszik meg. A 3.2.1. fejezetben látni fogjuk, hogy a szubsztrát-kimerítő rendszerek ebben eltérnek.

A fenti példákban a mintázatképződés egy-egy instabil sajátfüggvény eredményeként következett be. Lássunk most olyan példát, amikor több $k \in \mathbb{N}$ esetén is teljesül a (3.4c) feltétel. Azt várjuk, hogy ekkor változatosabbak és kevésbé kiszámíthatóak lesznek a mintázatok. A 2. ábrán különböző D_2 értékekre láthatjuk az u és v morfogének koncentrációeloszlásának időbeli változását $t = 0$ és $t = 60$ között. Tegyük néhány észrevételt az ábrával kapcsolatban.

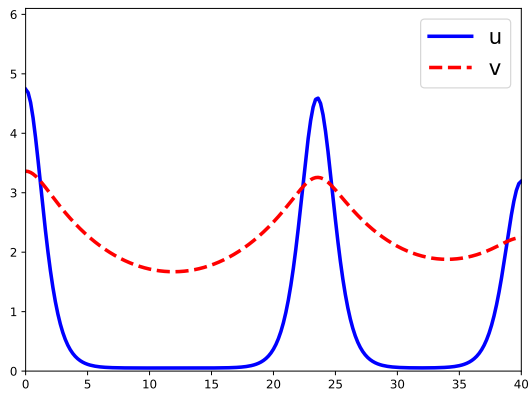
1. Mindkét esetben a megoldás egy térben heterogén stacionárius állapothoz látszik tartani. Míg a linearizált feladat megoldásában az instabil sajátfüggvényekhez tartozó módusok az idő előrehaladtával minden határon túl növekszenek, az eredeti modellben a nemlineáris összefüggések tompítják ezt a növekedést és stabilizálják a vegyületek koncentrációeloszlását.
2. A nagyobb mértékű diffúzió a koncentrációeloszlás gyorsabb stabilizálódásához vezet. Ez megfelel a diffúzió hatásával kapcsolatos intuíciónkkal, még ha itt a diffúzió nem is homogenizáló hatással van a rendszerre.



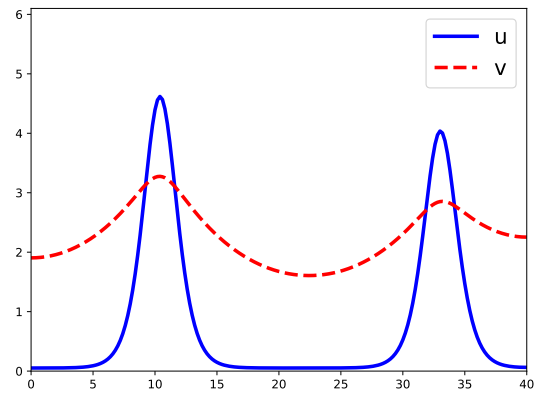
2. ábra. Különböző D_2 értékek mellett a Gierer–Meinhardt-modell numerikus megoldása (u : kék, v : piros) rendre a $t = 0, 15, 30, 45, 60$ időpillanatokban. Az egyéb paraméterértékek $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$ és $L = 40$.

3. Az eltérő diffúziós együtthatók nemcsak a stabilizálódás sebességét befolyásolják, hanem a végeredményt is. A 2. ábrán illusztrált szimulációkat ugyanazon kezdeti feltételből indítottuk, mégsem teljesen azonos minták jelentek meg. Ez érthető például annak alapján, hogy a $D_2 = 15$ esetben $k = 5, \dots, 9$ mellett, a $D_2 = 30$ esetben pedig $k = 3, \dots, 10$ mellett teljesül a (3.4c) feltétel.

A 2. ábrán bemutatott szimulációk esetében a kezdeti feltételek megegyeztek, és láttuk, hogy eltérő diffúziós paraméterek különböző mintákat eredményezhetnek. A természetben azonban a kezdeti állapotok apró, véletlenszerű hatások következtében egyedről egyedre változnak. Felmerül a kérdés, hogy egyező paraméterértékek esetén, eltérő kezdeti feltételek mellett mennyire különböznek a végső minták, azaz mennyire érzékeny a rendszer a kezdeti feltételek kis változásaira. A 3. ábrán két eltérő kezdeti feltételből indított megoldás látható a $t = 40$ időpillanatban, egyező paraméterértékek mellett. A kezdeti feltételek mindkét esetben az $u_0 = 1,05$, $v_0 = 1,10$ térben homogén stacionárius állapot körül vett kis véletlen perturbációk. Látható, hogy a két szimulációból két teljesen különböző minta született. Ez az eredmény összhangban van a természetbeli megfigyeléseinkkel. A zebrák és tigrisek csíkjai és a leopárdok rozetta alakú foltjai például épp olyan egyediek, mint az emberi ujjlenyomatok, ami alkalmassá teszi őket az egyes példányok beazonosítására.



(a)



(b)

3. ábra. Különböző kezdeti feltételek mellett a Gierer–Meinhardt-modell numerikus megoldása a $t = 40$ időpillanatban. A paraméterértékek $\alpha = 0,05$, $\beta = 1$, $D_1 = 0,7$, $D_2 = 70$, és $L = 40$.

3.2. Két dimenzióban

Tekintsünk egy $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ kétdimenziós térbeli tartományt, amelyben két vegyület van jelen. Az egydimenziós esethez hasonló jelölésekkel felírjuk a vonatkozó, vegyes mellékfeltétellel ellátott reakció-diffúzió egyenletet:

$$\begin{cases} \partial_t \mathbf{u} = D\Delta \mathbf{u} + F(\mathbf{u}), & (x, y) \in \Omega, t > 0, \\ (\partial_\nu \mathbf{u})|_{\partial\Omega} = 0, & t \geq 0, \\ \mathbf{u}(x, y, 0) = \mathbf{u}_0 + \bar{\mathbf{u}}(x, y), & (x, y) \in \bar{\Omega}. \end{cases} \quad (3.6)$$

Ezen feladat linearizáltjának a megoldása és abból a Turing-instabilitás feltételeinek levezetése az egydimenziós esethez hasonló módon történik, ezért csak az eltérő lépésekre térünk ki. Ezeket az alábbi pontokban összegezzük.

1. A megoldást a Fourier-módszer segítségével az $L^2(\Omega)^2 := L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ térben keressük. Itt a sajátfüggvényekből álló teljes ortonormált rendszer elemei az 1.13. és az 1.15. Állítások alapján

$$\mathbf{e}_{1,k\ell} = \begin{pmatrix} e_{k\ell} \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathbf{e}_{2,k\ell} = \begin{pmatrix} 0 \\ e_{k\ell} \end{pmatrix}, \quad k, \ell = 0, 1, 2, \dots,$$

ahol az $e_{k\ell}$ függvények az 1.13. Állításban szereplő függvényekkel egyeznek meg. A megfelelő sajátértékek $\lambda_{k\ell} = \pi^2 \left(\frac{k^2}{L_x^2} + \frac{\ell^2}{L_y^2} \right)$.

2. A (3.4a) feltételek változatlanok maradnak. A diffúzió-vezérelt instabilitás feltételeként most olyan $k, \ell \in \mathbb{N}$ számpárt keresünk, amelyre az $A_{k\ell} = J - \lambda_{k\ell} D$ mátrixnak létezik pozitív valós részű sajátértéke. A karakterisztikus egyenlet

$$\begin{aligned} 0 &= \det(J - \lambda_{k\ell} D - \mu I) \\ &= \mu^2 - b_{k\ell} \mu + c_{k\ell}, \end{aligned}$$

ahol

$$\begin{aligned} b_{k\ell} &= \text{tr}(A_{k\ell}) = -(D_1 + D_2)\lambda_{k\ell} + f_u + g_v \\ \text{és } c_{k\ell} &= \det(A_{k\ell}) = D_1 D_2 \lambda_{k\ell}^2 - (D_2 f_u + D_1 g_v) \lambda_{k\ell} + f_u g_v - f_v g_u. \end{aligned}$$

Ismét arra van szükségünk, hogy $c_{k\ell} < 0$ teljesüljön valamely $k, \ell \in \mathbb{N}$ esetén. Ha a $c_{k\ell}$ -re most $\lambda_{k\ell}^2$ polinomjaként tekintünk, akkor ismét a (3.4b) feltételhez jutunk. A (3.4c) feltétel kétdimenziós megfelelője, hogy létezzen $k, \ell \in \mathbb{N}$ számpár, amelyre

$$\lambda_-^2 < \lambda_{k\ell}^2 < \lambda_+^2, \quad (3.7)$$

ahol

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{D_2 f_u + D_1 g_v \pm \sqrt{(D_2 f_u + D_1 g_v)^2 - 4D_1 D_2 (f_u g_v - f_v g_u)}}{2D_1 D_2} \in \mathbb{R}_+.$$

A fenti (3.7) feltétel alapján, amennyiben bekövetkezik a Turing-instabilitás, két dimenzióban az egydimenziós esethez képest sokkal változatosabb és összetettebb mintázatokra számíthatunk. Megjelenhetnek többek között pöttyök vagy csíkok, de akár a kettő mintázattípus egyszerre is érvényesülhet. Csíkokat figyelhetünk meg például akkor, ha a tartomány egy keskeny téglalap. Ugyanis ha L_x elég kicsi, akkor a (3.7) feltételből szükségszerűen $k = 0$ adódik. Ebből következik, hogy bármely olyan $\lambda_{k,\ell}$ sajátérték esetén, amelyre teljesül a (3.7) feltétel, a hozzá tartozó sajátfüggvény az x irányban konstans és csak az y függvényében változhat. A következő alfejezetben újabb modellen keresztül mutatjuk be numerikusan ezeket a meglátásokat.

3.2.1. A Schnakenberg-modell

A Schnakenberg-modellben a (3.1) feladat f és g függvényei

$$f(u, v) = \alpha + u^2 v - u \quad \text{és} \quad g(u, v) = \beta - u^2 v \quad (3.8)$$

alakúak, ahol α és β pozitív konstansok.

A rendszer térben homogén stacionárius állapota az

$$\begin{cases} \alpha + u^2 v - u = 0 \\ \beta - u^2 v = 0 \end{cases}$$

egyenletrendszer megoldása:

$$\mathbf{u}_0 = \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \beta \\ \frac{\beta}{(\alpha + \beta)^2} \end{pmatrix}.$$

Az f és g függvények parciális deriváltjait kiszámolva megkapjuk, hogy a linearizált feladatban szereplő J mátrix alakja

$$J = \begin{pmatrix} 2u_0 v_0 - 1 & u_0^2 \\ -2u_0 v_0 & -u_0^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\frac{\beta}{\alpha + \beta} - 1 & (\alpha + \beta)^2 \\ -2\frac{\beta}{\alpha + \beta} & -(\alpha + \beta)^2 \end{pmatrix}.$$

Innen rögtön látszik, hogy a Schnakenberg-modell egy szubsztrát-kimerítő rendszert ír le, ugyanis g_u és g_v negatívak és f_v pozitív. Ahhoz, hogy J valóban a J_2 alakot vegye fel, már csak a $\beta > \alpha$ feltételre van szükségünk, amit ezentúl fel is teszünk.

A Schnakenberg-modell esetén az $\mathbf{u}_0$ stacionárius állapot diffúzió hiányában való sta-

bilitásának (3.4a) feltételei

$$-\alpha + \beta < (\alpha + \beta)^3 \quad \text{és} \quad (\alpha + \beta)^2 > 0,$$

amelyek közül a második automatikusan teljesül. Ha rögzített α és β paraméterekre $-\alpha + \beta < (\alpha + \beta)^3$ és a (3.4b) feltételből nyert

$$D_2 > D_1(\alpha + \beta) \frac{\alpha + 3\beta + 2(\alpha + \beta)\sqrt{2\beta(\alpha + \beta)}}{\left(2\frac{\beta}{\alpha + \beta} - 1\right)^2}$$

egyenlőtlenség is teljesül alkalmas D_1 és D_2 diffúziós együtthatókkal, akkor L megfelelő választása esetén Turing-instabilitásra számíthatunk.

Az $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 40$, $L = L_x = L_y = 40$ választás mellett teljesülnek a fenti feltételek, továbbá több $k, \ell \in \mathbb{N}$ számpár esetén is fennáll az

$$5,47 = \frac{L^2}{\pi^2} \lambda_-^2 < k^2 + \ell^2 < \frac{L^2}{\pi^2} \lambda_+^2 = 120,17$$

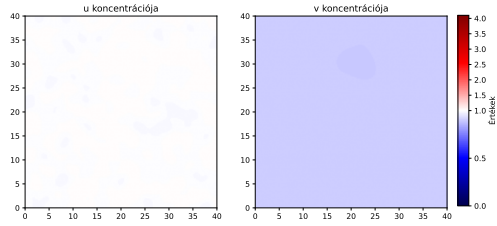
egyenlőtlenség, így a (3.7) feltétel is teljesül. A 4. ábrán ezen paraméterértékek mellett látható a Schnakenberg-modell numerikus megoldása $t = 0$ és $t = 120$ között. Az eredmény egy pöttyökből álló Turing-minta. Mivel a (3.8) Schnakenberg-modell egy szubsztrát-kimerítő rendszer, ezért az u morfogén koncentrációja pontosan azokon a területeken magas, ahol a v koncentrációja alacsony. Ez alátámasztja az ilyen típusú rendszerek értelmezésénél kifejtetteket: az u és v között végbemenő reakciók során a v szubsztrát elhasználódik az u további termelődésére.

A többi paraméterérték változatlanul hagyása mellett legyen most $L_x = 3$. Ekkor kerekítve $\lambda_-^2 = 0,03$ és $\lambda_+^2 = 0,74$, és a (3.7) feltételben olyan $k, \ell \in \mathbb{N}$ számpárt keresünk, amelyre

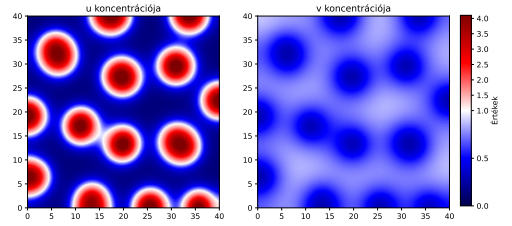
$$\lambda_-^2 < \pi^4 \left(\frac{k^2}{L_x^2} + \frac{\ell^2}{L_y^2} \right)^2 < \lambda_+^2.$$

Pozitív k mellett nem teljesül az egyenlőtlenség, hiszen már $k = 1$ esetén $\pi^4/L_x^4 > 1$, ami meghaladja λ_+^2 értékét. Az 5. ábrán bal oldalt a $t = 100$ időpillanatban látható ezen paraméterértékek mellett a Schnakenberg-modell numerikus megoldása. Mivel a (3.7) feltétel teljesülésének feltétele, hogy $k = 0$ legyen, ezért valamennyi $\lambda_{k,\ell}$ sajátértékre, ami kielégíti az egyenlőtlenséget, a megfelelő $e_{k,\ell}$ sajátfüggvény x függvényében konstans. Ezért a megjelenő minta vízszintes csíkokból áll. Az 5. ábrán jobb oldalt $L_x = 4$ mellett látható a modell numerikus megoldása. Ekkor már $k = 1$ -hez is van olyan $\ell \in \mathbb{N}$, hogy teljesüljön a (3.7) feltétel: $\ell = 0, \dots, 6$. Ennek megfelelően itt már nem csíkos mintázatot kapunk.

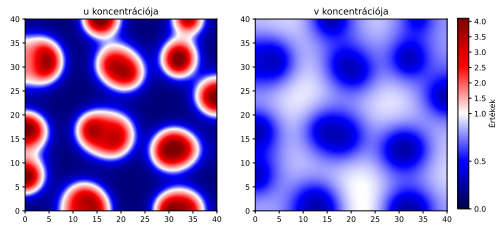
Végül lássunk egy olyan példát, amelyben a kapott mintázat nem kizárólag pöttyökből, sem kizárólag szabályos csíkokból áll. Ehhez a paraméterválasztást a [6] cikk motiválta,



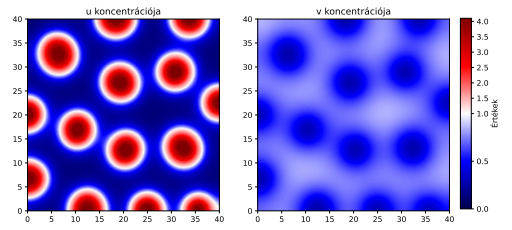
(a) $t = 0$



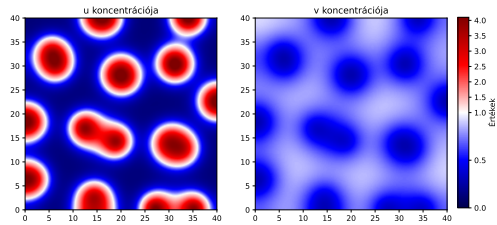
(b) $t = 72$



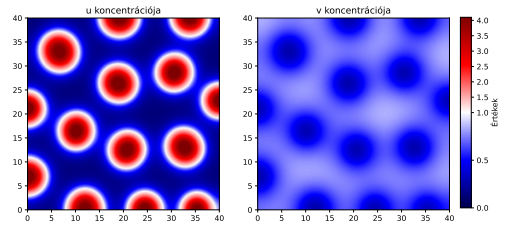
(c) $t = 24$



(d) $t = 96$

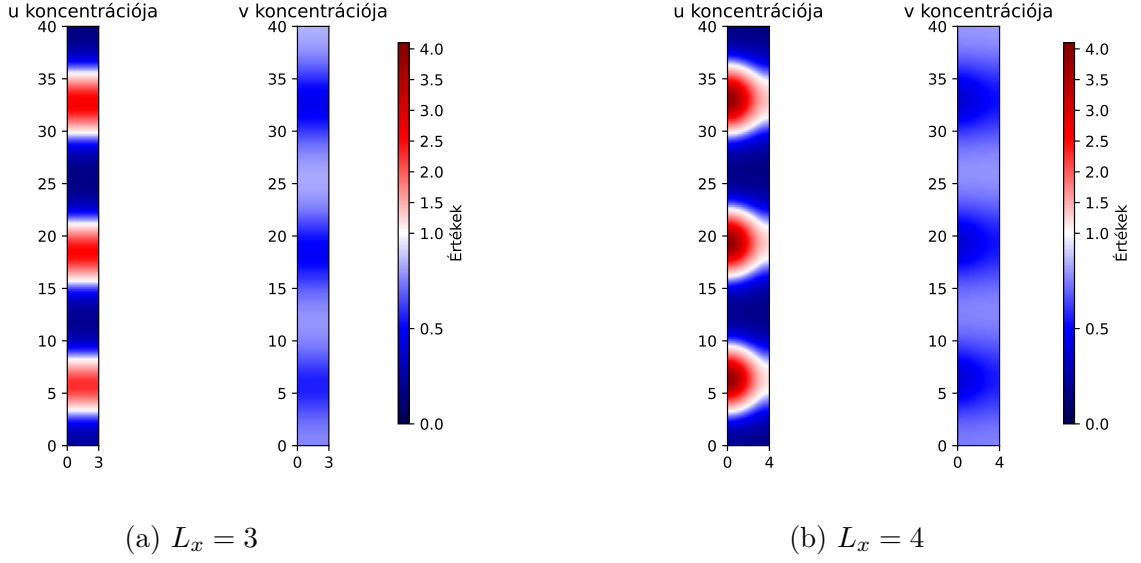


(e) $t = 48$



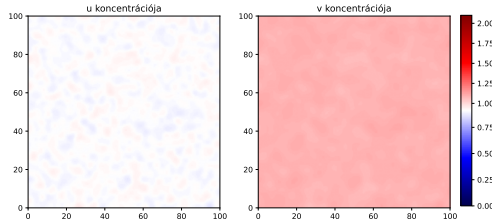
(f) $t = 120$

4. ábra. A Schnakenberg-modell numerikus megoldása (u : bal, v : jobb) a $t = 0$ és $t = 120$ időpillanatok között. Az u_0 színe fehér, míg az annál alacsonyabb értékeket kék, az annál magasabb értékeket piros szín jelöli. A paraméterértékek $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 40$ és $L_x = L_y = 40$.

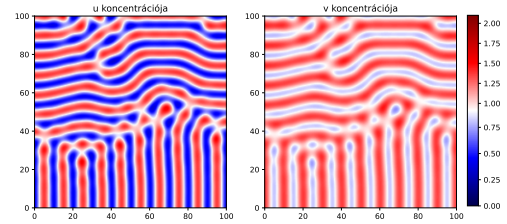


5. ábra. Különböző L_x értékek mellett a Schnakenberg-modell numerikus megoldása a $t = 100$ időpillanatban. Az u_0 színe fehér, míg az annál alacsonyabb értékeket kék, az annál magasabb értékeket piros szín jelöli. Az egyéb paraméterértékek $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 40$, és $L_y = 40$.

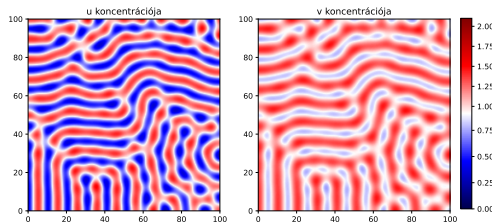
amiben a Gierer–Meinhardt-modellre szerepelnek többek között numerikus megoldások az alábbiakhoz hasonló nagyságrendű paraméterekkel. Legyenek a paraméterértékek tehát $\alpha = 0,01$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 6$ és $L_x = L_y = 100$. A 6. ábrán ezen választás mellett látható a Schnakenberg-modell numerikus megoldása. Itt az alacsony D_2 diffúziós paraméter miatt a mintázatképződés lassabban megy végbe, ezért a szimulációt a $t = 0$ és $t = 1000$ időpillanatok között hajtjuk végre. A kapott koncentrációeloszlást az eddigiektől merőben eltérő mintázatok jellemzik. Arra a természetesen felmerülő kérdésre, hogy az egyes paraméterek megválasztása hogyan befolyásolja a Turing-mintát, a lineáris stabilitásvizsgálat alapján nem tudunk választ adni. A téma további tárgyalása nemlineáris stabilitásvizsgálatot igényel, amely jelen dolgozat keretein túlmutat.



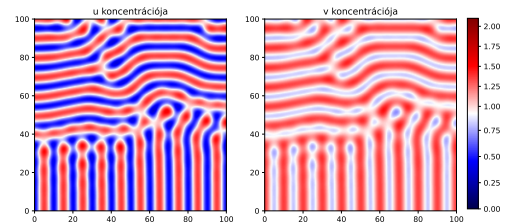
(a) $t = 0$



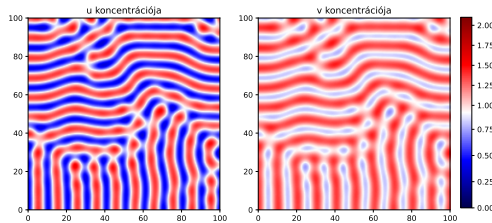
(b) $t = 600$



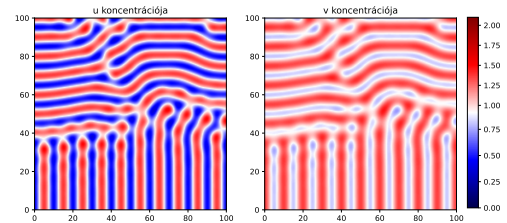
(c) $t = 200$



(d) $t = 800$



(e) $t = 400$



(f) $t = 1000$

6. ábra. A Schnakenberg-modell numerikus megoldása (u : bal, v : jobb) a $t = 0$ és $t = 1000$ időpillanatok között. Az u_0 színe fehér, míg az annál alacsonyabb értékeket kék, az annál magasabb értékeket piros szín jelöli. A paraméterértékek $\alpha = 0,01$, $\beta = 0,9$, $D_1 = 1$, $D_2 = 6$ és $L_x = L_y = 100$.

4. fejezet

Numerikus módszerek

Ebben a fejezetben levezetjük azon numerikus sémákat, amelyeknek a Python programnyelvben történő implementálásával a szakdolgozatban szereplő valamennyi ábra készült.

4.1. Intervallumon

Megoldandó numerikusan a (3.1) vegyes feladat. A megoldáshoz explicit véges differencia sémát alkalmazunk. Legyenek $J, N \in \mathbb{N}$ és

$$\begin{aligned}\Phi_J &= \{x_j = j \frac{L}{J}, j = 0, \dots, J\} \\ \Theta_N &= \{t_n = n \frac{T}{N}, n = 0, \dots, N\}\end{aligned}$$

felosztásai a $[0, L]$, illetve $[0, T]$ intervallumoknak, ahol $0 < T < \infty$. Jelölje $h := L/J$ a térbeli lépésközt, $\tau := T/N$ az időbelit. Jelölje továbbá minden $j = 0, \dots, J$ és $n = 0, \dots, N$ esetén $u_j^n := u(x_j, t_n)$, illetve $v_j^n := v(x_j, t_n)$ a numerikus séma által meghatározott közelítést az u , illetve v függvényeknek az (x_j, t_n) pontban. A v függvény rácspontokbeli közelítése ugyanúgy történik, mint u esetében, ezért az arra vonatkozó sémákat nem mindig írjuk ki.

A Neumann-peremfeltétel kezelésére úgynevezett ghost cellákat vezetünk be u_{-1}^n és u_{J+1}^n jelöléssel, ahol $n = 0, \dots, N - 1$. Ekkor a peremfeltételben szereplő deriváltakat centrális differenciahányadossal közelítve $n = 0, \dots, N - 1$ esetén kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\partial_x u(x_0, t_n) &\approx \frac{u_1^n - u_{-1}^n}{2h}, \\ \partial_x u(x_J, t_n) &\approx \frac{u_{J+1}^n - u_{J-1}^n}{2h}.\end{aligned}$$

Az idő szerinti deriváltakat jobb oldali differenciahányadossal, az x szerinti második deri-

váltakat pedig másodrendű centrális differenciahányadossal közelítjük:

$$\begin{aligned}\partial_t u(x_j, t_n) &\approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau}, \\ \partial_x^2 u(x_j, t_n) &\approx \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2},\end{aligned}$$

ahol $j = 0, \dots, J$ és $n = 0, \dots, N - 1$.

Innen a következő sémát nyerjük $j = 0, \dots, J$ és $n = 0, \dots, N - 1$ esetén:

$$\begin{cases} \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} = D_1 \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{h^2} + f(u_j^n, v_j^n), \\ \frac{v_j^{n+1} - v_j^n}{\tau} = D_2 \frac{v_{j+1}^n - 2v_j^n + v_{j-1}^n}{h^2} + g(u_j^n, v_j^n), \\ u_j^0 = u_0 + \bar{u}(x_j), \\ v_j^0 = v_0 + \bar{v}(x_j), \end{cases}$$

ahol $u_{-1}^n = u_1^n$, $u_{J+1}^n = u_{J-1}^n$, $v_{-1}^n = v_1^n$ és $v_{J+1}^n = v_{J-1}^n$ a homogén Neumann-peremfeltételre felírt séma átrendezéséből.

Ezt átrendezve és bevezetve az

$$\mathbf{u}^n = \begin{pmatrix} u_0^n \\ \vdots \\ u_J^n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}^n = \begin{pmatrix} v_0^n \\ \vdots \\ v_J^n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}^n = \begin{pmatrix} f(u_0^n, v_0^n) \\ \vdots \\ f(u_J^n, v_J^n) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^n = \begin{pmatrix} g(u_0^n, v_0^n) \\ \vdots \\ g(u_J^n, v_J^n) \end{pmatrix}$$

jelöléseket, mátrixos alakban is felírhatjuk a sémát:

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + D_1 \frac{\tau}{h^2} A \mathbf{u}^n + \tau \mathbf{f}^n, \\ \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + D_2 \frac{\tau}{h^2} A \mathbf{v}^n + \tau \mathbf{g}^n, \end{cases}$$

ahol $n = 0, \dots, N - 1$ és

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 2 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 2 & -2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(J+1) \times (J+1)},$$

és $\mathbf{u}^0$ és $\mathbf{v}^0$ a kezdeti feltétel alapján adottak.

4.2. Téglalapon

Megoldandó numerikusan a (3.6) vegyes feladat. A megoldáshoz az egydimenziós esethez hasonlóan explicit véges differencia sémát alkalmazunk. Legyenek $J, K, N \in \mathbb{N}$ és

$$\begin{aligned}\Phi_J &= \{x_j = j \frac{L_x}{J}, j = 0, \dots, J\}, \\ \Psi_K &= \{y_k = k \frac{L_y}{K}, k = 0, \dots, K\}, \\ \Theta_N &= \{t_n = n \frac{T}{N}, n = 0, \dots, N\}\end{aligned}$$

felosztásai a $[0, L_x]$, $[0, L_y]$, illetve $[0, T]$ intervallumoknak, ahol $0 < T < \infty$. Tegyük fel, hogy $\frac{L_x}{J} = \frac{L_y}{K}$, és jelölje h ezt a közös térbeli lépésközt. Jelölje $\tau := \frac{T}{N}$ az időbeli lépésközt. Jelölje továbbá minden $j = 0, \dots, J, k = 0, \dots, K$ és $n = 0, \dots, N$ esetén $u_{j,k}^n \approx u(x_j, y_k, t_n)$, illetve $v_{j,k}^n \approx v(x_j, y_k, t_n)$ a numerikus séma által meghatározott közelítését az u , illetve v függvényeknek az (x_j, y_k, t_n) pontban. A v függvény rácspontokbeli közelítése megint csak ugyanúgy történik, mint u esetében, ezért az arra vonatkozó sémákat most sem írjuk ki mindenhol.

A Neumann-peremfeltétel kezelésére ismét ghost cellákat vezetünk be minden $n = 0, \dots, N - 1$ esetén. Ezeket jelölje $k = 0, \dots, K$ esetén $u_{-1,k}^n$ és $u_{J+1,k}^n$ és $j = 0, \dots, J$ esetén $u_{j,-1}^n$ és $u_{j,K+1}^n$. Ekkor a peremfeltételben szereplő deriváltakat centrális differenciáhozadással közelítve $n = 0, \dots, N - 1$ esetén kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\partial_x u(x_0, y_k, t_n) &\approx \frac{u_{1,k}^n - u_{-1,k}^n}{2h}, & \partial_x u(x_J, y_k, t_n) &\approx \frac{u_{J+1,k}^n - u_{J-1,k}^n}{2h}, & k &= 0, \dots, K, \\ \partial_y u(x_j, y_0, t_n) &\approx \frac{u_{j,1}^n - u_{j,-1}^n}{2h}, & \partial_y u(x_j, y_K, t_n) &\approx \frac{u_{j,K+1}^n - u_{j,K-1}^n}{2h}, & j &= 0, \dots, J,\end{aligned}$$

Az idő szerinti deriváltat jobb oldali differenciáhozadással, az x és y szerinti második deriváltakat pedig másodrendű centrális differenciáhozadással közelítjük:

$$\begin{aligned}\partial_t u(x_j, y_k, t_n) &\approx \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\tau}, \\ \partial_x^2 u(x_j, y_k, t_n) &\approx \frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h^2}, \\ \partial_y^2 u(x_j, y_k, t_n) &\approx \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h^2},\end{aligned}$$

ahol $j = 0, \dots, J, k = 0, \dots, K$ és $n = 0, \dots, N - 1$.

Innen a következő sémát nyerjük $j = 0, \dots, J$, $k = 0, \dots, K$ és $n = 0, \dots, N-1$ esetén:

$$\begin{cases} \frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\tau} = D_1 \left(\frac{u_{j+1,k}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j-1,k}^n}{h^2} + \frac{u_{j,k+1}^n - 2u_{j,k}^n + u_{j,k-1}^n}{h^2} \right) + f(u_{j,k}^n, v_{j,k}^n), \\ \frac{v_{j,k}^{n+1} - v_{j,k}^n}{\tau} = D_2 \left(\frac{v_{j+1,k}^n - 2v_{j,k}^n + v_{j-1,k}^n}{h^2} + \frac{v_{j,k+1}^n - 2v_{j,k}^n + v_{j,k-1}^n}{h^2} \right) + g(u_{j,k}^n, v_{j,k}^n), \\ u_{j,k}^0 = u_0 + \bar{u}(x_j, y_k), \\ v_{j,k}^0 = v_0 + \bar{v}(x_j, y_k), \end{cases}$$

ahol a homogén Neumann-peremfeltételre felírt séma átrendezéséből $u_{-1,k}^n = u_{1,k}^n$ és $u_{J+1,k}^n = u_{J-1,k}^n$ teljesül $k = 0, \dots, K$ esetén és $u_{j,-1}^n = u_{j,1}^n$ és $u_{j,K+1}^n = u_{j,K-1}^n$ teljesül $j = 0, \dots, J$ esetén. A v -hez tartozó ghost cellákra hasonló összefüggések érvényesek.

Az intervallum esetéhez hasonlóan az egyszerűbb és hatékonyabb numerikus szimulációk érdekében szeretnénk itt is egyetlen lépésben kiszámolni a következő időrétegre vonatkozó közelítéseket az aktuálisak alapján. Ennek érdekében egyetlen vektorban tároljuk el minden $n = 0, \dots, N$ mellett a megfelelő t_n időréteghez tartozó összes $u_{k,l}^n$ értéket. Bevezetjük $n = 0, \dots, N$ esetén az

$$\mathbf{u}^n = \begin{pmatrix} u_{0,K}^n \\ \vdots \\ u_{0,0}^n \\ u_{1,K}^n \\ \vdots \\ u_{J,0}^n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(J+1)(K+1)}$$

vektort, melynek az i -edik komponensét az alábbi összefüggés adja. Osszuk el maradékosan az i indexet $K+1$ -gyel:

$$i = (K+1)\ell + m, \quad 0 \leq m < K+1.$$

Ekkor ha $m = 0$, akkor

$$\mathbf{u}_i^n = u_{\ell-1,0}^n,$$

míg $0 < m < K+1$ esetén

$$\mathbf{u}_i^n = u_{\ell,K-m+1}^n.$$

Hasonló vektort vezetünk be a $v_{k,l}^n$ értékekre $\mathbf{v}^n$ jelöléssel, továbbá bevezetjük az $\mathbf{f}^n$, illetve $\mathbf{g}^n$ jelöléseket azon vektorokra, amelyeket úgy kapjuk, hogy koordinátánként alkalmazzuk az f , illetve g függvényeket az $\mathbf{u}^n$, illetve $\mathbf{v}^n$ vektorokra. Ekkor átrendezve a fenti nume-

rikus sémát a következő alakot nyerjük $n = 0, \dots, N - 1$ esetén:

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + D_1 \frac{\tau}{h^2} A \mathbf{u}^n + \tau \mathbf{f}^n, \\ \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}^n + D_2 \frac{\tau}{h^2} A \mathbf{v}^n + \tau \mathbf{g}^n, \end{cases}$$

ahol $\mathbf{u}^0$ és $\mathbf{v}^0$ a kezdeti feltétel alapján adottak, valamint

$$A = \begin{pmatrix} T & 2I & & & \\ I & T & I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & I & T & I \\ & & & 2I & T \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(J+1)(K+1) \times (J+1)(K+1)}$$

blokk-tridiagonális mátrix, ami a tridiagonális

$$T = \begin{pmatrix} -4 & 2 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -4 & 1 \\ & & & 2 & -4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(K+1) \times (K+1)}$$

és az $I \in \mathbb{R}^{(K+1) \times (K+1)}$ egységmátrix blokkokból épül fel.

Összefoglalás

Ebben a dolgozatban összefoglaltuk a biológiai mintázatképződésre vonatkozó Turing-modell legfontosabb jellemzőit. Megmutattuk, hogy egyetlen vegyület jelenléte a vizsgált felületen nem elegendő egy térben heterogén koncentrációeloszlás kialakulásához, viszont két, egymással reakcióba lépő vegyület esetén már létrejöhet egy heterogén elő-mintázat. A modell érdekessége, hogy a diffúciónak instabilizáló szerepe van, pedig a diffúzióra mint homogenizáló folyamatra szokás gondolni. Emellett megkülönböztettük a Turing-instabilitásra vezető rendszerek két típusát, a serkentő-gátló és a szubsztrát-kimerítő rendszereket. Ezeket a Gierer-Meinhardt-modellen és a Schnakenberg modellen keresztül mutattuk be numerikusan.

Néhány figyelemre méltó kutatási terület a Turing-modell kapcsán a mintázatképződés növekvő felületeken, a véletlen zaj hatása a rendszerre és a mintázatképződés általánosabb, akár háromdimenziós felületeken [3, 7]. Fontos feladat továbbá a folyamatban részt vevő morfogének meghatározása [3]. Turing elmélete az utóbbi évtizedekben nagy figyelemnek örvend a témában kutatók körében, és bár vitatott, hogy teljesen hűen tükrözi-e a valóságot, kétségtelenül valószínű eredményekre vezet.

Irodalom

- [1] Besenyei Ádám, Komornik Vilmos és Simon László. *Parciális differenciálegyenletek*. 2014. márc. URL: [http://fizweb.elte.hu/download/Fizika-BSc/Differencialegyenletek-2/Jegyzet/Parcialis-differencialegyenletek-Simon-L.\(eBook\).pdf](http://fizweb.elte.hu/download/Fizika-BSc/Differencialegyenletek-2/Jegyzet/Parcialis-differencialegyenletek-Simon-L.(eBook).pdf) (elérés dátuma 2025. 04.).
- [2] Simon L. Péter. *Közönséges differenciálegyenletek*. 2007. ápr. URL: <https://simonp.web.elte.hu/files/kozdiff.pdf> (elérés dátuma 2025. 05.).
- [3] P. K. Maini és T. E. Woolley. “The Turing Model for Biological Pattern Formation”. Szerk. Arianna Bianchi és tsai. *The Dynamics of Biological Systems*. Springer Cham, 2019. jan., 189–204. old. DOI: [10.1007/978-3-030-22583-4](https://doi.org/10.1007/978-3-030-22583-4). URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-030-22583-4>.
- [4] Farkas Miklós. “Animal Hide and Shell Patterns”. *Dynamical Models in Biology*. Academic Press, 2001. jún., 114–123. old.
- [5] A. M. Turing. “The chemical basis of morphogenesis”. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences* 237 (1952. aug.), 37–72. old. DOI: [10.1098/rstb.1952.0012](https://doi.org/10.1098/rstb.1952.0012).
- [6] Y. Wang, M. Guo és W. Jiang. “Bifurcations and Turing patterns in a diffusive Gierer–Meinhardt model”. *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations* (2023. júl.), 1–22. old. DOI: [10.14232/ejqtde.2023.1.27](https://doi.org/10.14232/ejqtde.2023.1.27). (Elérés dátuma 2025. 04. 21.).
- [7] T. E. Woolley, R. E. Baker és P. K. Maini. “Turing’s Theory of Morphogenesis: Where We Started, Where We Are and Where We Want to Go”. Szerk. S. Barry Cooper és Mariya I. Soskova. *The Incomputable*. Springer Cham, 2017. jan., 219–235. old. DOI: [10.1007/978-3-319-43669-2](https://doi.org/10.1007/978-3-319-43669-2). URL: <https://doi.org/10.1007/978-3-319-43669-2>.

Alulírott Gyebnár Márton Bálint nyilatkozom, hogy szakdolgozatom elkészítése során az alább felsorolt feladatok elvégzésére a megadott MI alapú eszközöket alkalmaztam:

Feladat	Felhasznált eszköz	Felhasználás helye	Megjegyzés
Irodalomkeresés	GPT-4o	Teljes dolgozat	
Ábra készítés	GTP-4o	Összes ábra, GitHub-on elérhető valamennyi animáció (3. oldal)	Az ábrák és animációk készítéséhez Python kód generálás (a numerikus megoldások implementálása saját munka)
Képlet készítés	GPT-4o	35. oldal	LaTeX kód generálás tridiagonális mátrixra
Irodalomjegyzék készítés	GPT-4o	40. oldal	LaTeX kód generálás biblatex csomag megfelelő használatára

A felsoroltakon túl más MI alapú eszközt nem használtam.