

A MINTÁZATKÉPZŐDÉS TURING FÉLE MECHANIZMUSA

Emlékeztető: Az $u_t = u_{xx}$, $u(t, 0) = u(t, \pi) = 0$, $u(0, x) = g(x)$ homogén Dirichlet feladat megoldható Fourier-sor alakjában:

$$u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \sin(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \sin(nx) dx, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1)$$

Maga az egyenlet homogén lineáris, és a peremfeltétel is homogén. Így az $u(t, x)$ ($t \geq 0$, $x \in [0, \pi]$) megoldás az $e^{-n^2 t} \sin(nx)$ alapmegoldások lineáris kombinációja. A lineáris kombináció együtthatóit a $t = 0$ kezdeti állapotot leíró $g \in L_2[0, \pi]$ függvény Fourier sorfejtése szolgáltatja. Hasonlóképpen, az $u_t = u_{xx}$, $u_x(t, 0) = u_x(t, \pi) = 0$, $u(0, x) = g(x)$ homogén Neumann feladat megoldása

$$u(t, x) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-n^2 t} \cos(nx) \quad \text{ahol} \quad c_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) \cos(nx) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2)$$

Fontos megjegyeznünk, hogy — még akkor is, ha a g függvény folytonos, sőt ha még a $g(0) = g(\pi) = 0$ kompatibilitási feltételek is teljesülnek — a megoldás “döccenve” indul: a $t = 0$ időpontban a Fourier-sorok konvergenciája általában csak az $L_2[0, \pi]$ térben garantált. Szerencsére ha $t > 0$, akkor a sorösszeg végtelenszer deriválható a t és az x hibrid változóknak. A $t \rightarrow \infty$ határátmenetben a homogén Dirichlet feladat megoldásának képlete egyenletes $u(t, x) \rightarrow 0$ kihűlést, a homogén Neumann feladat megoldásának képlete pedig az integrál-átlaghoz tartó $u(t, x) \rightarrow \frac{c_0}{2} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} g(x) dx$ teljes hőmérséklet-kiegyenlítődést mutat.

Első hallásra ugyancsak meglepő, hogy az inhomogenitás homogén lineáris rendszerek megoldásaiban is megjelenik. Ennek a viselkedésnek első, egyébként teljesen spekulatív példáját Alan Turing (1912–1954) adta meg 1952-es, még sok esztendeig nem igazán megértett és nem is igazán értékelt *The chemical basis of morphogenesis* című cikkében. A jelenséget magát először egy konkrét példa végeredményeként mutatjuk be, és csak azután ismertetjük a (3)–(4) peremértékprobléma¹ általános megoldásának levezetését.

A változók szétválasztása módszer, amelynek skalár változatán a (1) és a (2) képletek levezetése is alapult, tehát a változók szétválasztása módszer

¹Turing (4) helyett az $u'_t = u''_{xx} + 5u + 6v$, $v'_t = 4v''_{xx} - 6u - 7v$ egyenletrendszert vizsgálta, amely a főtágban $e^{t/2}$ aszimptotikát eredményezett

vektoros alkalmazásával hosszadalmas, de mégsem nehéz számolás igazolja, hogy az

$$u'_x(t, 0) = u'_x(t, \pi) = 0 \quad , \quad v'_x(t, 0) = v'_x(t, \pi) = 0 \quad \text{ahol } t > 0 \quad (3)$$

Neumann féle homogén peremfeltétellel ellátott

$$u'_t = u''_{xx} + 4u + 2v \quad , \quad v'_t = 17v''_{xx} - 26u - 8v \quad \text{ahol } t > 0 \text{ és } x \in [0, \pi] \quad (4)$$

parciális differenciálegyenlet-rendszer általános megoldása Fourier sorfejtéssel

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = c_{1,1} e^t \cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} + \text{exponenciálisan lecsengő tagok} \quad , \quad c_{1,1} \in \mathbb{R} \quad (5)$$

alakú. Hogy mi ebben a mintázat? Csekély, de mégis ott van, éspedig a $c_{1,1} e^t \cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ főtagban, s annak is $\cos(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ részében. Leszámítva azokat a kezdeti feltételeket — pontosan meg fogjuk mondani, melyek ezek —, amelyekre $c_{1,1} = 0$, $u(t, x)$ és $v(t, x)$ előjele minden elég nagy $t > 0$ és minden, a $\frac{\pi}{2}$ ponthoz nem túl közeli $x \in [0, \pi]$ esetén ellentétes egymással, de az, hogy u vagy v előjele a pozitív, egyedül azon múlik, hogy $x \geq \frac{\pi}{2}$. A mintázat tehát az előjel, s ha $c_{1,1} \cos(x)$ ($c_{1,1} \neq 0$) helyett $c_{1,17} \cos(17x)$ ($c_{1,17} \neq 0$) állna, akkor a “sign pattern” mintázat sokkal gazdagabb, a zebra csikozásához hasonló lenne. Turing természetesen jól tudta, hogy az e^t szorzótényező $t \gg 1$ esetén biológiaiag értelmetlen, a (4)–(3) modellt tehát csak viszonylag rövid időintervallumon definiálta. Igazából az

$$u'_t = \alpha^2 u''_{xx} + f(u, v, \mu) \quad , \quad v'_t = \beta^2 v''_{xx} + g(u, v, \mu) \quad (6)$$

feladat érdekelte, az (u_0, v_0, μ) egyensúlyi helyzet kis környezetében — ott, ahol az $\begin{pmatrix} f(u, v, \mu) \\ g(u, v, \mu) \end{pmatrix}$ csatolás $\begin{pmatrix} f(u, v, \mu) \\ g(u, v, \mu) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} a(\mu)u + b(\mu)v \\ c(\mu)u + d(\mu)v \end{pmatrix}$ linearizálása még jogosult, mert lokálisan nem változtatja meg a megoldások lényegi viselkedését. Itt $\mu \in \mathbb{R}$ bifurkációs paraméter, amely a μ_0 kritikus értéken balról jobbra áthaladva a (4)–(3) peremérték-feladat (u_0, v_0, μ) egyensúlyi helyzetének² stabil \Rightarrow instabil változását idézi elő.

Megjegyzés: Mindez a kémia nyelvén is elmondható. Egydimenziós térváltozóval leginkább egy hosszú és vékony kémcsőben van dolgunk, amelyben reakció és diffúzió zajlik egyszerre, a reakcióban két anyagfajta vesz részt

²az általánosság sérelme nélkül feltehetjük és fel is tesszük, hogy $f(0, 0, \mu) = g(0, 0, \mu) = 0$ és így $(u_0, v_0, \mu) = (0, 0, \mu) \in \mathbb{R}^3$ minden $\mu \in \mathbb{R}$ esetén

(ez a legegyszerűbb eset, a reakció által okozott hőmérséklet-változást elhanyagoljuk). A diffúzióhoz valamely oldat vagy gáz jelenléte szükséges. A reakció kémiai átalakulás, a fogyó és keletkező anyagok pedig diffúzióval terjednek. Ilyen folyamatokat a (6) szerkezetű parciális differenciálegyenlet-rendszerekkel szokás modellezni, ahol u és v az egyes anyagok koncentrációját jelölik, az $f(u, v, \mu)$ és a $g(u, v, \mu)$ úgynevezett reakció-tagok a kémiai kinetikából jönnek, $\mu \in \mathbb{R}$ pedig a bifurkációs paraméter. A térbeliséget nem figyelembevéve, a kémiai reakciót az $\dot{u} = f(u, v, \mu)$, $\dot{v} = g(u, v, \mu)$ kétszer kettes közönséges differenciálegyenlet-rendszer írja le. A folyamatok az $0 \leq u \ll 1$, $0 \leq v \ll 1$ koncentráció-tartományban zajlanak le. A $\mu \in \mathbb{R}$ paraméter egy enzim jelenlétét méri, szerepe a reakció szabályozása. A mintázatképződés akkor indul be, ha a μ paraméter egy kritikus μ_0 értéket meghalad.

Turing semmit nem ír a konkrét (bio)kémiaiáról, sőt még a zebrákat sem említi. Méltán híressé vált matematikai dolgozatát azzal a megjegyzéssel zárja, hogy az általa leírt mintázatképződés mechanizmusához hasonló differenciálódási és szabályozási folyamatok játszódhatnak le az egyedfejlődés során, az embrionális szakasz legelejétől kezdve.

És most jön a konkrét (4)-(3) példa konkrét matematikája. A (4) egyenletrendszert mátrixos formába írva

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + \mathbf{D} \begin{pmatrix} u_{xx} \\ v_{xx} \end{pmatrix}, \quad \text{ahol } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ -26 & -8 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 17 \end{pmatrix}$$

adódik. Először speciális, szorzat alakú $\begin{pmatrix} u(t,x) \\ v(t,x) \end{pmatrix} = T(t)X(x) \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$ megoldásokat keresünk.

Visszahelyettesítés a (4) egyenletbe, majd a $t > 0$ és az $x \in [0, \pi]$ változókat átosztással két külön oldalra gyűjtve

$$\frac{T'(t)}{T(t)} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} + \frac{X''(x)}{X(x)} \mathbf{D} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix},$$

következésképpen mind $\frac{T'(t)}{T(t)} = \sigma$, mind $\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda$ állandók. A Neumann-féle homogén (3) peremfeltételből $X'(0) = X'(\pi) = 0$. A λ sajátértékre és a hozzá tartozó $X = X_\lambda$ sajátfüggvényre tehát egy lineáris (állandó együtthatós, másodrendű homogén autonóm közönséges) differenciálegyenlet érvényes, amelyhez az $X'(0) = X'(\pi) = 0$ homogén peremértékek tartoznak. Így

$$X''(x) - \lambda X(x) = 0 \quad , \quad X'(0) = X'(\pi) = 0 \quad ,$$

ahol a $\lambda \in \mathbb{R}$ állandó és az $X : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$ függvény egyaránt ismeretlen. Az általános

$$X(x) = \left. \begin{array}{ll} c_1 \cos(\omega x) + c_2 \sin(\omega x) & \text{ha } \lambda = -\omega^2 < 0 \\ c_1 x + c_2 & \text{ha } \lambda = 0 \\ c_1 \cosh(\omega x) + c_2 \sinh(\omega x) & \text{ha } \lambda = \omega^2 > 0 \end{array} \right\}$$

megoldás abban a speciális esetben tesz eleget az $X'(0) = X'(\pi) = 0$ peremfeltételnek³, ha $\lambda = -k^2 \leq 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$ és $c_2 = 0$, $c_1 \in \mathbb{R}$ pedig tetszőleges, szabad konstans.

A λ meghatározása után most jön a σ meghatározása:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} - k^2 \mathbf{D} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \Leftrightarrow (\mathbf{A} - k^2 \mathbf{D} - \sigma \mathbf{I}) \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2. \quad (7)$$

Ez is sajátérték-sajátvektor probléma, amely már nem a homogén Neumann peremfeltétellel ellátott $\Delta_N = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ differenciáloperátorra vonatkozik, hanem csak a $k = 0, 1, 2, \dots$ egészekkel sorszámozott kétszer kettes $A - k^2 \mathbf{D}$ mátrixokra. A két sajátértéket mostantól kezdve $\sigma = \sigma_{k,1}$ & $\sigma_{k,2}$ jelöli, a hozzájuk tartozó sajátvektorokat pedig $\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{s}_{k,1}$ & $\mathbf{s}_{k,2}$. A $\frac{T'(t)}{T(t)} = \sigma$ egyenletben tehát $\sigma = \sigma_{k,\ell}$ és így $T(t) = T_{k,\ell}(t) = e^{\sigma_{k,\ell} t}$, $\ell = 1, 2$.

Az eddigiek alapján az (4)-(3) feladat általános megoldását

$$\begin{pmatrix} u(t, x) \\ v(t, x) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^2 c_{k,\ell} e^{\sigma_{k,\ell} t} \cos(kx) \mathbf{s}_{k,\ell}$$

alakban kereshetjük, az $\begin{pmatrix} u(0,x) \\ v(0,x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g(x) \\ h(x) \end{pmatrix}$ kezdeti feltételhez tartozó megoldás pedig a mindkét koordinátájában klasszikus, a $[0, \pi]$ intervallumon cosinusos Fourier sorfejtést kívánó

$$\begin{pmatrix} g(x) \\ h(x) \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\ell=1}^2 c_{k,\ell} \cos(kx) \mathbf{s}_{k,\ell}$$

képletből⁴ adódik. A (5) képlet⁵ már magában foglalja, hogy $\text{Re } \sigma_{k,\ell} < 0$ ha $(k, \ell) \neq (1, 1)$ és $\sigma_{1,1} = -1$, $\mathbf{s}_{1,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. Valóban, $\sigma_{0,1} = -2 + 4i$ és

³amint azzal a (2) képlet levezetése során már találkoztunk

⁴azért nem minden ennyire egyszerű: a többszörös és a komplex sajátértékek külön "kezelést" kívánnak ...

⁵az általános esetben $c_{1,1}$ és $c_{1,2}$ a

$$\begin{pmatrix} g_1 \\ h_1 \end{pmatrix} = c_{1,1} \mathbf{s}_{1,1} + c_{1,2} \mathbf{s}_{1,2} \quad \text{lineáris egyenletrendszerből számolható, ahol}$$

$\sigma_{0,2} = -2 - 4i$ ha $k = 0$, továbbá $\sigma_{1,1} = 1$, $\mathbf{s}_{1,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$, valamint $\sigma_{1,2} = -23$ ha $k = 1$. A $k \geq 2$ esetben már érdemes a k -t meghagyni paraméternek:

$$\begin{pmatrix} 4 - k^2 & 2 \\ -26 & -8 - 17k^2 \end{pmatrix} \Rightarrow T = -4 - 18k^2 < 0 \text{ és } D = 17k^4 - 76k^2 + 20 > 0, \text{ ha } k = 2, 3, \dots,$$

sőt $D < \frac{T^2}{4} \Leftrightarrow 17k^4 - 76k^2 + 20 < 81k^4 + 36k^2 + 4$ ha $k = 3, 4, \dots$. A nyom-determináns diagramról tanultak szerint a $k \geq 3$ esetben stabil fókusz, a $k = 2$ esetben stabil csomó az eredmény.

Tanulságos gyakorló feladat: Ábrázolja a $p(\mu, \sigma) = \det(\mathbf{A} - \mu \mathbf{D} - \sigma \mathbf{I})$ polinom $\sigma_{1,2} = \sigma_{1,2}(\mu)$ gyökeit a komplex számsíkon haladó két, egyenként a $0 \leq \mu \leq 9$ paraméterrel ellátott egy-paraméteres görbe segítségével. Ha jól számolunk, pontosabban ha a számítógéppel jól számoltatunk és jól ábrázoltatunk, akkor speciális esetként vissza kell kapnunk az imént vizsgált (7) sajátérték-probléma $\mu = k^2$, $k = 0, 1, 2, 3$ megoldásait.

Ha a reakció-tag nemlineáris, akkor a diffúzió sokkal bonyolultabb mintázatokot is okozhat.⁶ Ez a helyzet például a $t > 0$, $0 \leq x \leq 100$ tartományon értelmezett és ott homogén Neumann peremfeltétellel ellátott

$$u'_t = u''_{xx} + 0.1 - u + u^2v, \quad v'_t = 40v''_{xx} + 0.9 - u^2v$$

rendszer esetében ... egy "nemlineáris Turing", amit persze összehasonlíthatatlanul nehezebb vizsgálni.

A kezdeti $\begin{pmatrix} u(0,x)=g(x) \\ v(0,x)=h(x) \end{pmatrix}$ állapotot az $\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.9 \end{pmatrix}$ egyensúlyi helyzet (ami egy, a $[0, 100]$ intervallumon értelmezett konstans függvény) kicsiny perturbációjának szokás⁷ választani. Utazó hullámra itt nem számíthatunk, hiszen ahhoz legalább két egyensúlyi helyzet kellene.

$$g_1 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi g(x) \cos(x) dx \quad \text{és} \quad h_1 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi h(x) \cos(x) dx.$$

⁶Csapadékképződés egy kémcsőben, a híres Liesegang gyűrűk, még a XIX. századból, véletlen felfedezés, teljesen átlátszó kémcső, benne néhány, egyenletes ritmusban elhelyezkedő, keskeny, ködszerű hengerrel.

⁷PH.K. MAINI ET AL., Turing's modell for biological pattern formation and the robustness problem, *Interface Focus* **2**(2012), 487–496. Nem tudom, mennyi munka ezen cikk első ábráját (Figure 1.) rekonstruálni. Vajon működik-e itt a Fisher féle parciális differenciálegyenlet megoldására használt diskretizációs numerika a zero-flux peremfeltétellel?

ÚJ BEKEZDÉS: Az $\dot{u} = 0.1 - u + u^2v$, $\dot{v} = \mu - u^2v$ (a $\mu = 0.9$ már globálisan vonzó egyensúlyi helyzetet jelent) a fenti Schnakenberg rendszer esetében. Amúgy $\mu_1 = 0.109$ Hopf születés, $\mu_1 = 0.779$ Hopf halál, az egyensúlyi helyzet $P(\mu) = \left(\frac{0.1+\mu}{\mu/(0.1+\mu)^2} \right)$ — ezeket könnyen kiszámoltam a WOLFRAM ALPHA segítségével, de hogy a fenti parciális egyenletrendszerben milyen mintázatok lehetnek ... sejtésem sincs, de ha a numerika hamar kiadná ... rém jó lenne. Amúgy egy periodikus pálya mondjuk ha $\mu_1 = 0.45$ azért lesz maga is mintázat, mert akkor a periodikus pálya bal oldali részén (ahol u relative kicsiny) a lakmuspapír kék, a jobb oldali részén (ahol u relative nagy) piros. Ezt a színváltást valóban láttam: egy mozdulatlan tálkában olyan reakció megy végbe, amely az oldat színét fél percenként megváltoztatja kékről pirosra és vissza. Az $u > 0$ és a $v > 0$ anyagkoncentrációkat jelentenek egy autokatalitikus (ezért van a két harmadfokú tag) kémiai reakcióban. Az $u \geq 1$ meg azért értelmes, mert az egyenlet már egy átskálázott matematikában érvényes.