

Nemlineáris Dinamikai Modellek a Biológiában

Mintázat képződés

10. gyakorlat

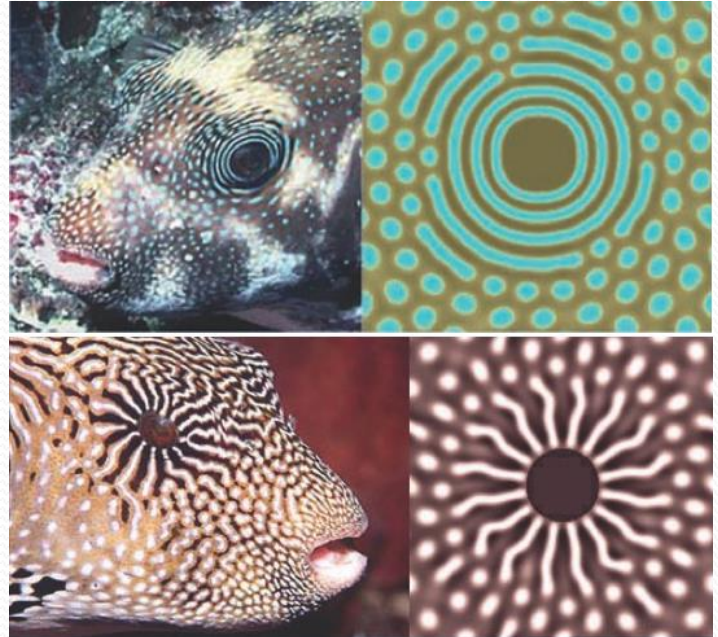
Juhász János (juhasz.janos@itk.ppke.hu)

Schäffer Katalin (sch.katalin17@gmail.com)

Mintázat képződés

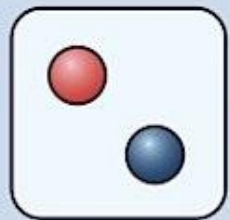
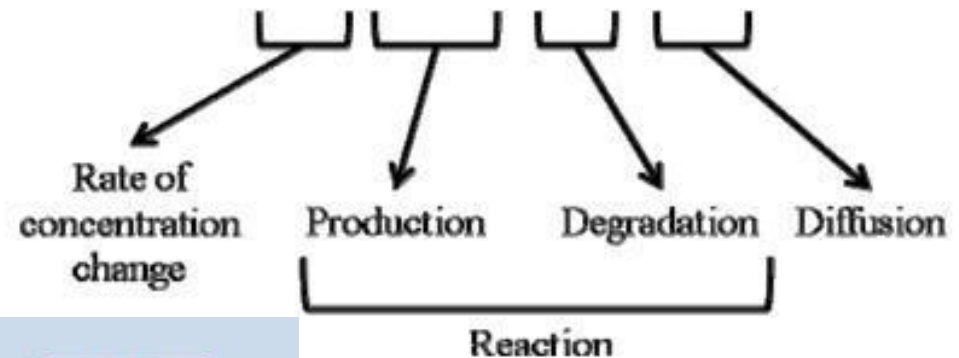
- Kémiai reakciók, során kialakuló gradiensek nem mindig a kiegyenlítődés felé tartanak
- Stabil térbeli mintázatok, tartós inhomogenitások is képződhetnek, az egyes anyagok (morfogének) közti kölcsönhatásokból (képződés, bomlás, serkentés, gátlás, egymásba alakulás)
- Pl: emlősök bundájának mintái, csiga/kagyló házak vagy növények rajzolatai, az ujjak számának, pozíciójának kialakulása az embrió fejlődése során
- Parciális egyenletek (időbeli fejlődés + térbeli dinamika)
- -> explicit Euler módszerrel oldjuk meg őket (lásd múlt hét)

Mintázatok

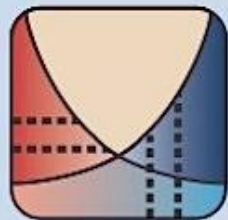


Általános séma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = F(u,v) - d_u u + D_u \Delta u$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = G(u,v) - d_v v + D_v \Delta v$$



Two morphogens



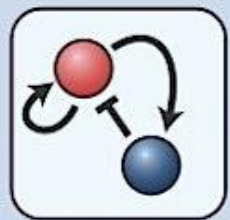
Gradients



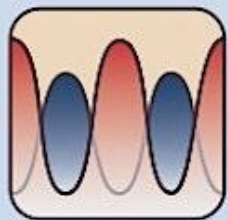
2D pattern



More complicated



Interactions



"Wave"



Spots and stripes



Labyrinth

1D Turing mintázat

- Alan Turing nevéhez fűződik a mintázat képződés 1. matematikai leírása:
 - <http://www.dna.caltech.edu/courses/cs191/paperscs191/turing.pdf> (The chemical Basis of Morphogenesis, 1952)
 - Még számítógépek nélkül dolgozott, így találta meg és elemezte a lent bemutatott rendszert!
 - A valós mintázatképződési folyamatok általában összetettebbek az lent bemutatottnál, de hasonló elemekből épülnek fel, hasonló elven működnek

1D Turing mintázat

$$\frac{dU}{dt} = a * U + b * V + D_u * \frac{d^2U}{dx^2}$$

$$\frac{dV}{dt} = c * V + d * U + D_v * \frac{d^2V}{dx^2}$$

- 2 anyag (U,V) hat egymásra (és önmagára) -> kölcsönhatásukból gradiens alakul ki -> ez stabilizálódik -> térbeli mintázat
- Reakciós és diffúziós tagok az egyenletben
- A klasszikus paraméterek:
 - **dt=0.00002** (időbeli felbontás); **dx=pi/100** (térbeli felbontás);
 - Tartomány: **x=[0, pi]** (1 tér dimenzió)
 - **Du=1; Dv=17**; (U és V diffúziós együtthatói)
 - **a=4** (U hatása U-ra); **b=2** (V hatása U-ra);
 - **c=-8** (V hatása V-re); **d=-26** (U hatása V-re);
 - **Neumann perem**;
- Kezdeti értékek:
 - **U(0 : pi/4)=1; U(pi/4 : pi)= -1**
 - **V=0**

1D Turing mintázat

$$\frac{dU}{dt} = a * U + b * V + D_u * \frac{d^2U}{dx^2}$$

$$\frac{dV}{dt} = c * V + d * U + D_v * \frac{d^2V}{dx^2}$$

A mintázat képződés feltételei:

- A két diffúzió nem lehet egyforma gyors
- Nem lehet szimmetrikus az [a, b; c, d] mátrix
- Legalább 2D-s rendszer kell (U,V)

1D Turing mintázat

Feladatok, kérdések:

- Implementáljuk a klasszikus Turing rendszert!
 - `gyak10_turing_1d_feladat.m`
- Mit tapasztalunk, hogy viselkedik a rendszer?
- Mennyire érzékeny a rendszer a paraméterekre?
- Más a b c d paraméterekkel is kialakul a mintázat?
 - Mit tapasztalunk a D_v diffúziós paramétert változtatva?
Mikor kezd megjelenni a stabil mintázat?
 - Mennyire érzékeny a rendszer a kezdeti állapotokra?

1D Grey-Scott rendszer

$$\frac{dU}{dt} = D_u * \frac{d^2U}{dx^2} - U * V^2 + F * (1 - U)$$
$$\frac{dV}{dt} = D_v * \frac{d^2V}{dx^2} + U * V^2 - (C + F) * V$$

- A Turingnál egy fokkal realisabb kémiai rendszer
- Másféle mintázatot állít elő
- A leírt folyamat:
 - U, V gradiensek
 - $D_u * d^2U/dx^2$ és $D_v * d^2V/dx^2$: diffúzió
 - $U * V^2$: $U + 2V \rightarrow 3V$ kémiai reakció (U mennyiségét csökkenti, V mennyiségét növeli, ennek rátája legyen $K=1$)
 - $+F$: U F mértékű folyamatos utánpótlása egy végtelen nagy külső forrásból (input)
 - $-F * U$; $-F * V$: U és V F mértékű távozása a rendszerből (output), $\rightarrow \max(U)=1$ \leftarrow nem szállnak el a koncentrációk
 - $-C * V$: C V mértékű elbomlása (pl. valamilyen P végső terméké)

1D Grey-Scott rendszer

$$\frac{dU}{dt} = D_u * \frac{d^2U}{dx^2} - U * V^2 + F * (1 - U)$$

$$\frac{dV}{dt} = D_v * \frac{d^2V}{dx^2} + U * V^2 - (C + F) * V$$

- Paraméterek:
 - **dt=0.2** (időbeli felbontás); **dx=pi/100** (térbeli felbontás);
 - Tartomány: **x=[0, 1]** (1 tér dimenzió)
 - **D_u=6*10⁻⁵**; **D_v=2*10⁻⁵**; (U és V diffúziós együtthatói)
 - **C=0.065** (bomlás); **F=0.06** (átáramlás);
 - **Periodikus perem;**
- Kezdeti értékek:
 - **U=1;**
 - **V(20:40)=1; egyébként V=0;**

1D Grey-Scott rendszer

Feladatok, kérdések:

- Implementáljuk a Grey-Scott rendszert a Turing példa alapján!
- Mit tapasztalunk, hogy viselkedik a rendszer?
- Mennyire érzékeny a rendszer a paraméterekre?
- Más C , F paraméterekkel is kialakul mintázat?
 - Mit tapasztalunk a diffúziós paramétereket változtatva?
 - Mennyire érzékeny a rendszer a kezdeti állapotra?

2D Grey-Scott rendszer

Feladat:

- Terjesszük ki a Grey-Scott rendszert 2 tér dimenzióba (az x és y irányú diffúziós együttható legyen egyenlő az egyszerűség kedvéért!)
 - `Gyak10_grey-scott_2d_feladat.m` (lásd 2 óra 2D-s diffúzió)
- Hogyan viselkedik a rendszer?
- Készítsünk különböző térbeli mintázatokat! Keress olyan paraméter beállításokat, ahol sávok és ahol foltok alakulnak ki! Készíts szabályosabb szabálytalanabb mintákat!

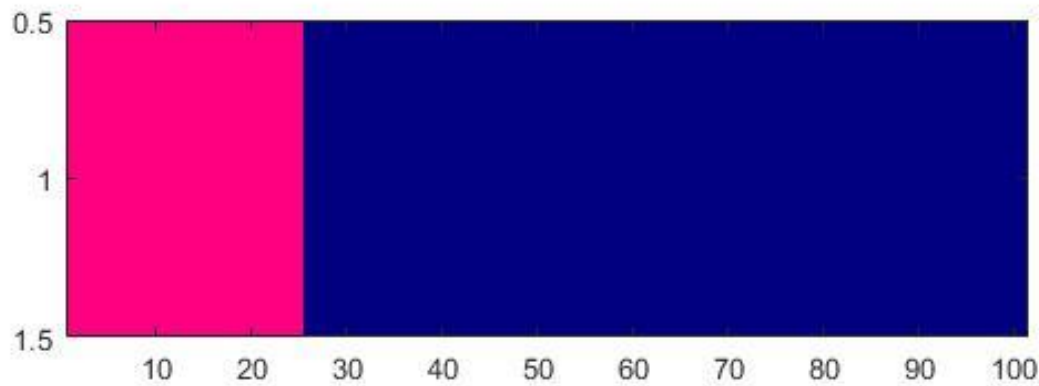
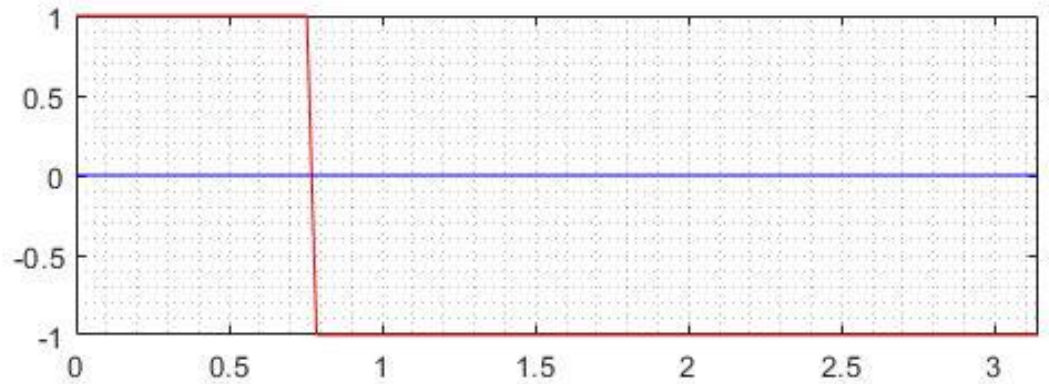
1D Turing mintázat

Megoldások:

- Implementáljuk a klasszikus Turing rendszert!
- Mit tapasztalunk, hogy viselkedik a rendszer?
 - A két gradiens (U,V) lefutása ellentétes
 - A két gradiens metszéspontja: $\pi/2$ ($[0,\pi]$ tartományt vizsgáljuk), a rendszer oszcillálva áll be ide
 - A gradiensek folyamatosan nőnek/csökkennek (nyílt rendszert feltételez, ahol van anyagutánpótlás) -> az átmenet egyre élesebb lesz

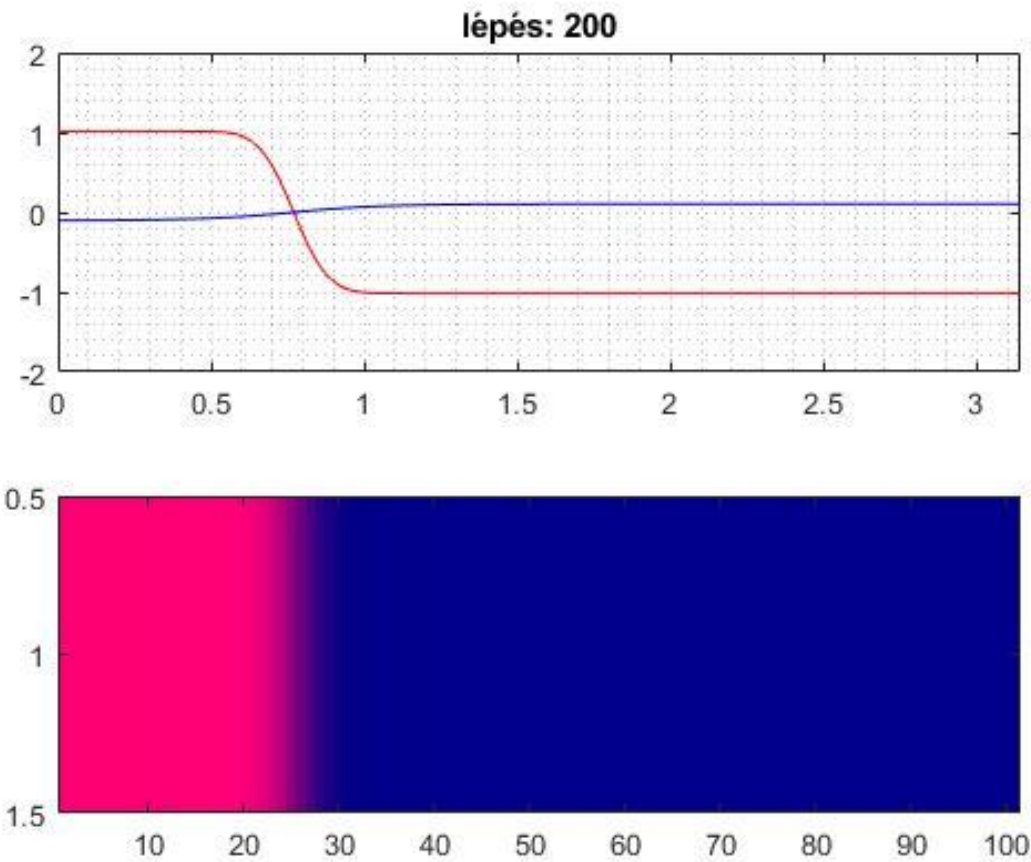
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=0$



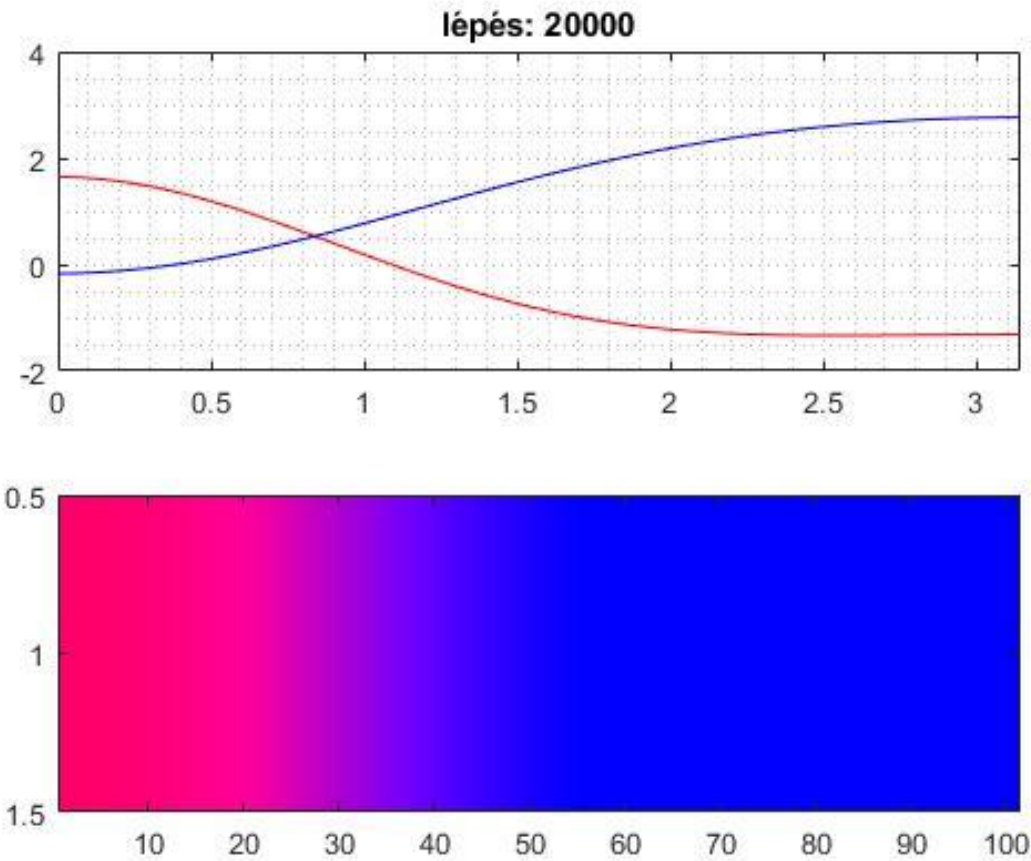
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=200$



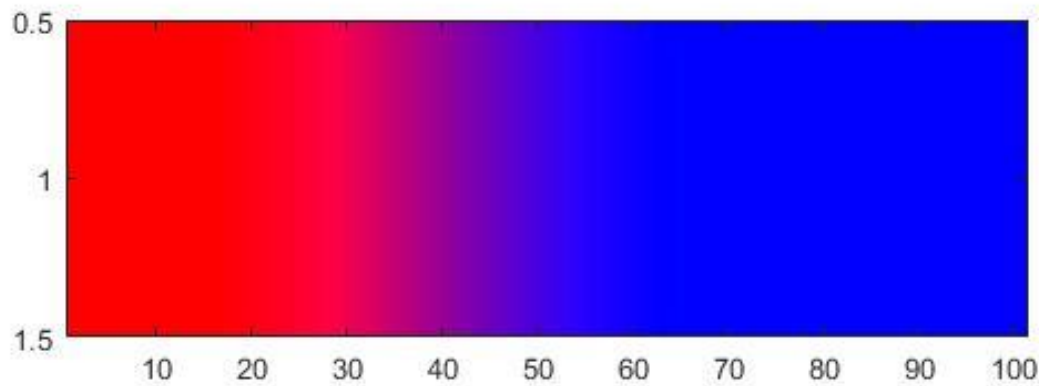
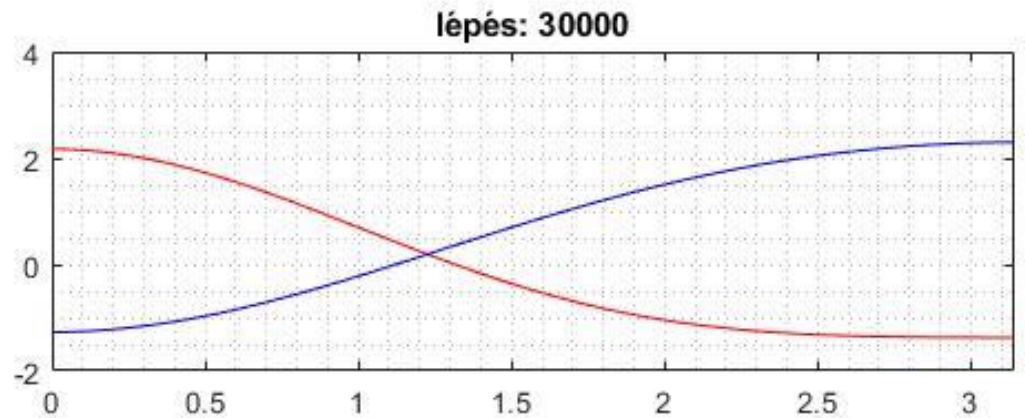
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=20000$



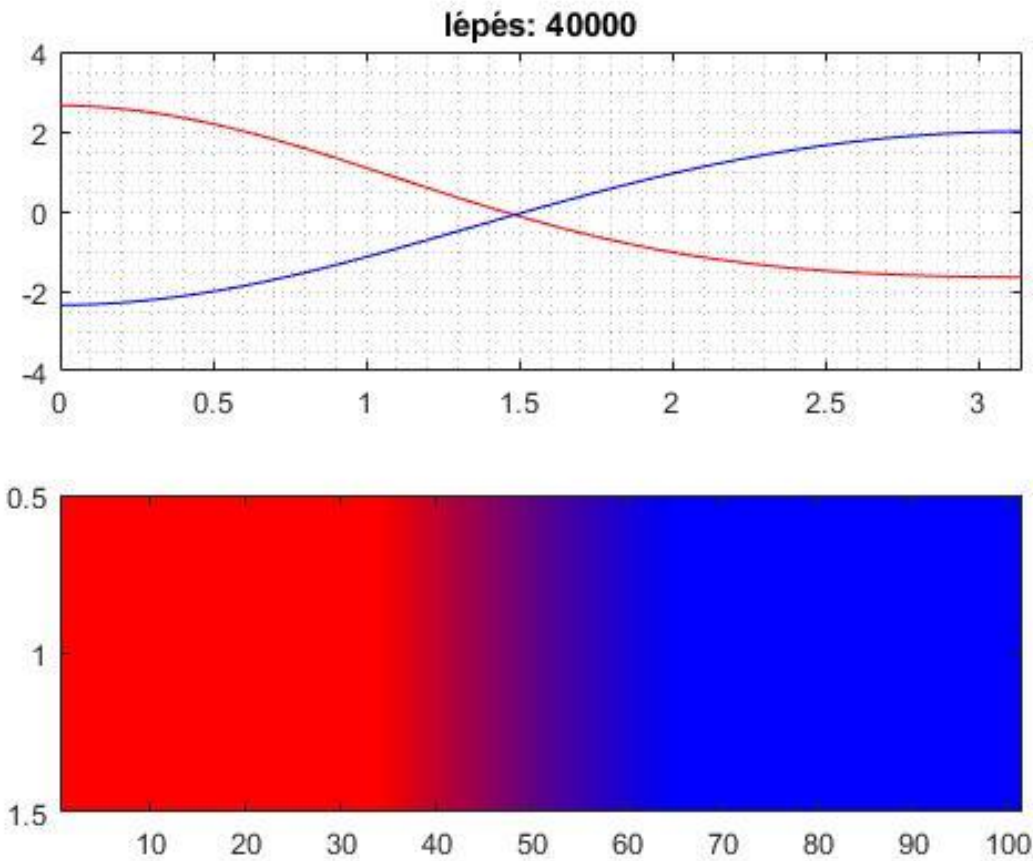
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=30000$



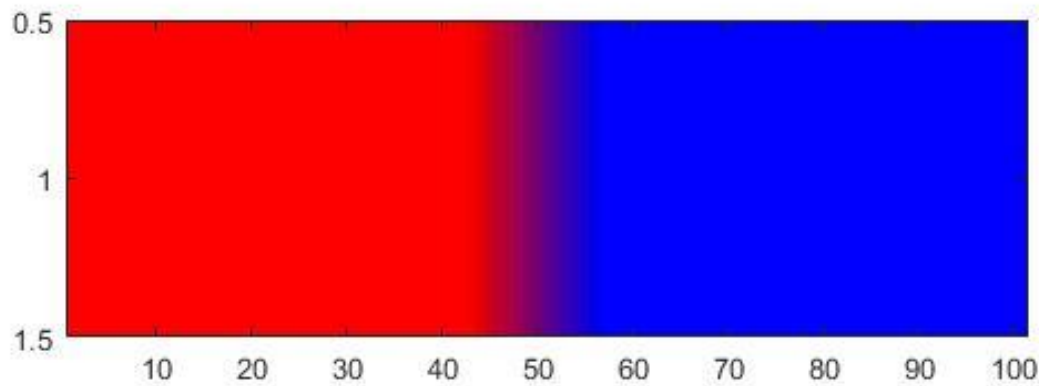
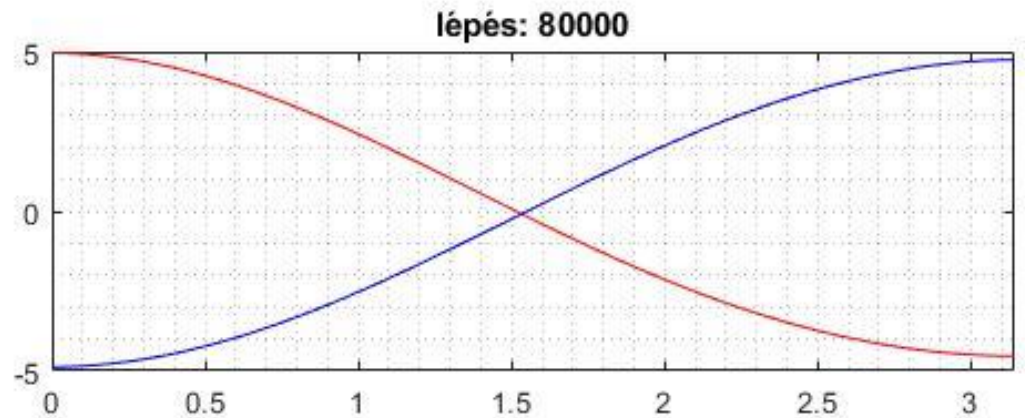
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=40000$



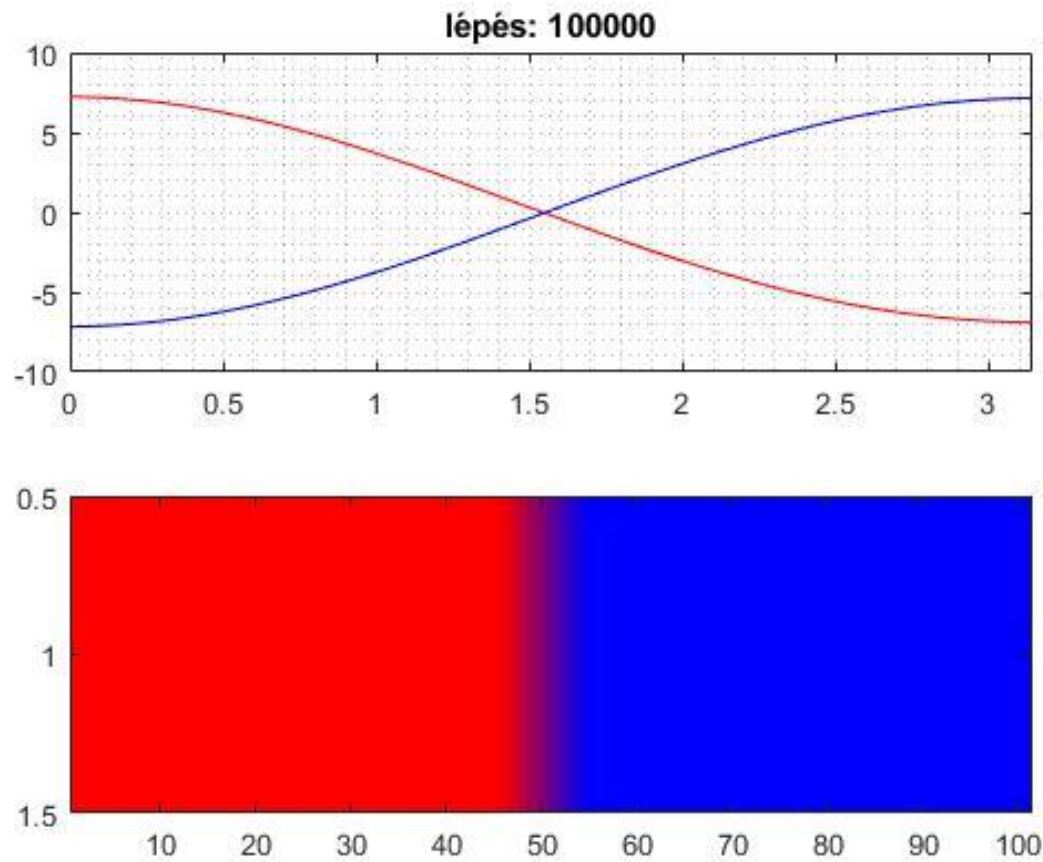
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=80000$



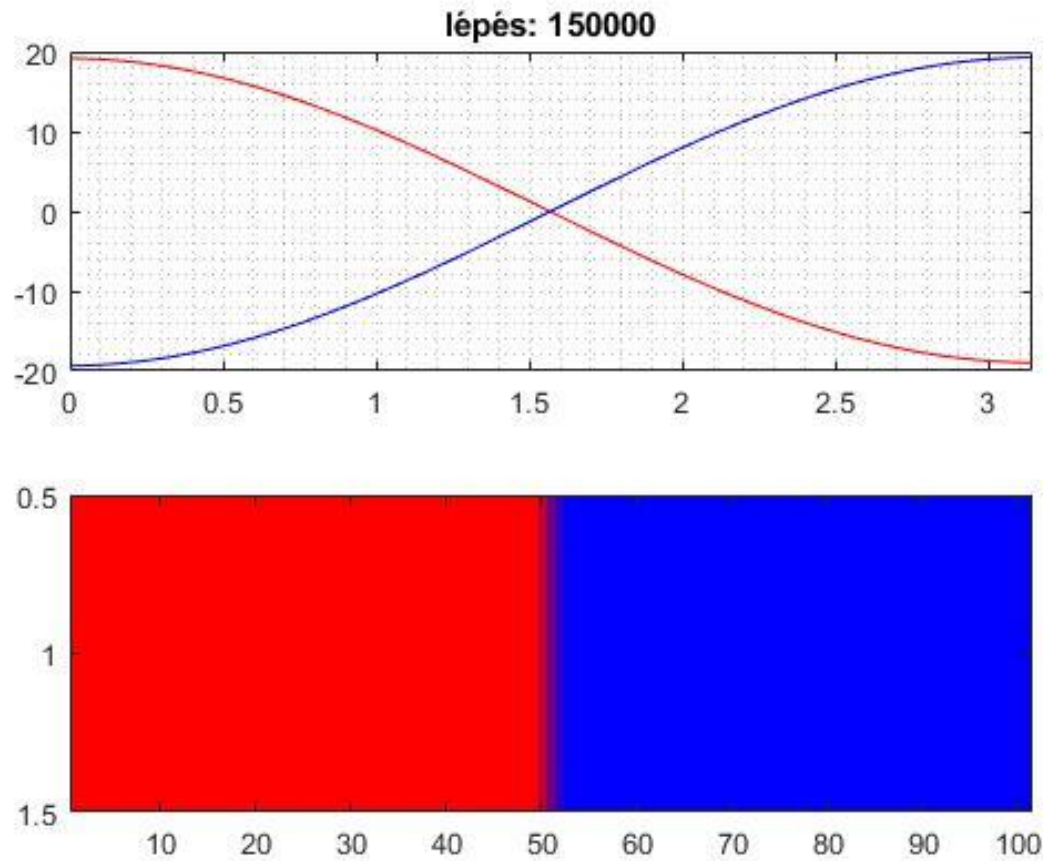
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=100000$



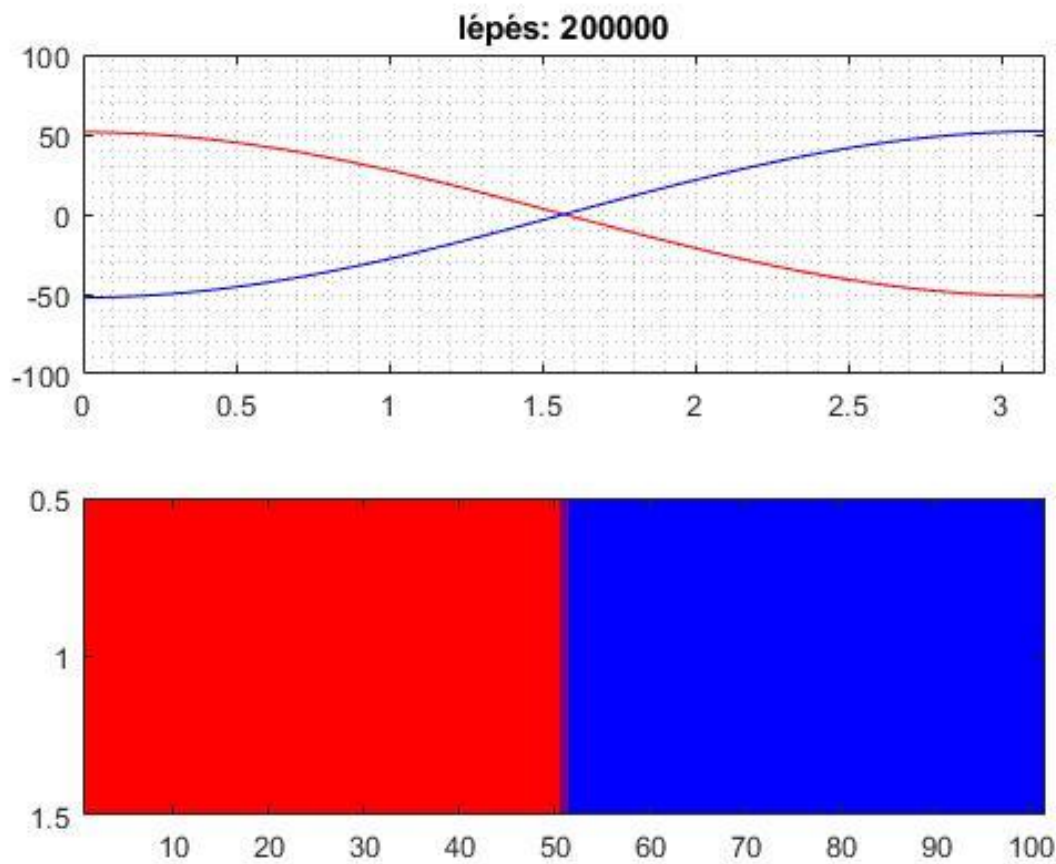
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=150000$



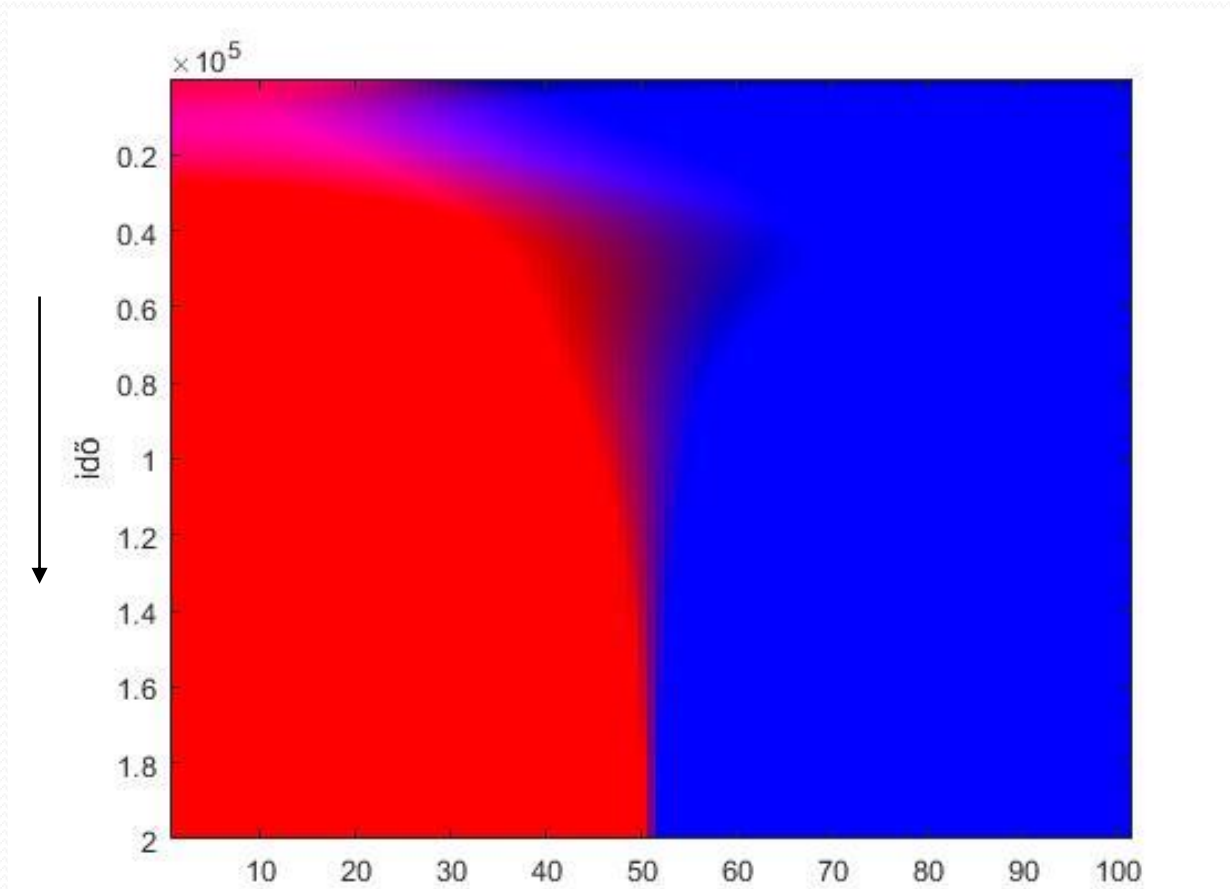
1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, $t=200000$



1D Turing mintázat

- Alap paraméterek, összesítve



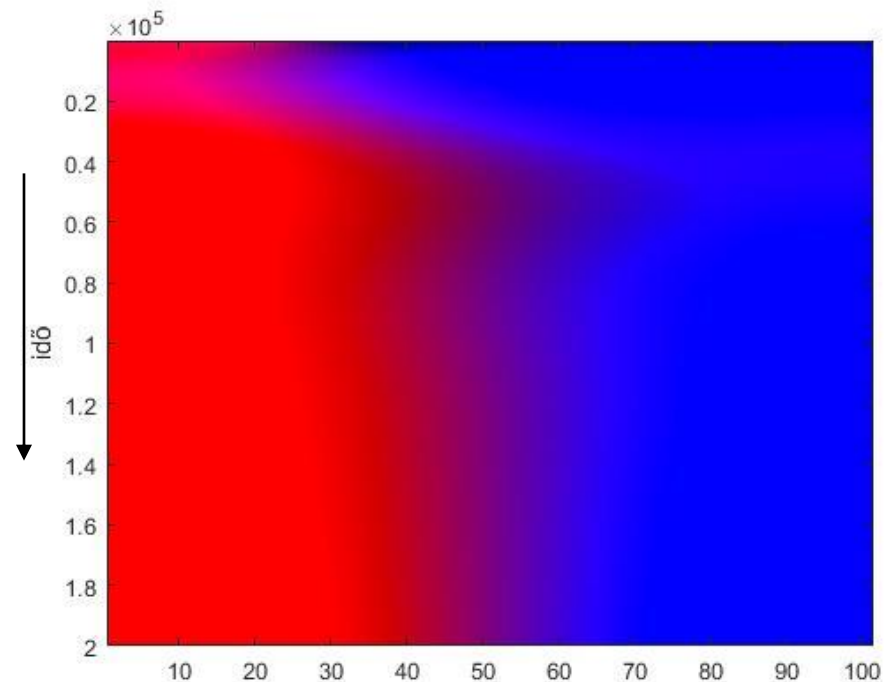
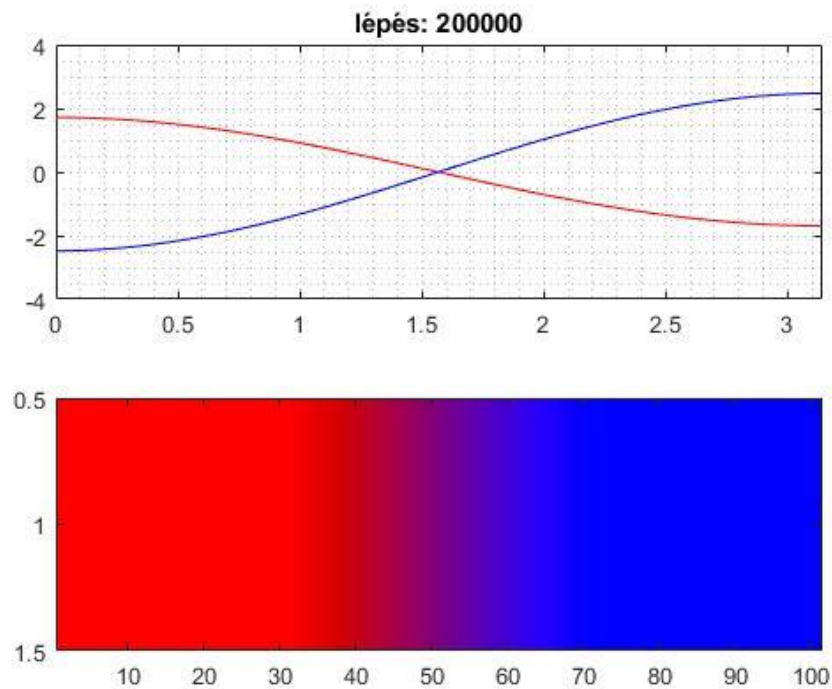
1D Turing mintázat

Megoldások:

- Más a b c d paraméterekkel is kialakul a mintázat?
 - Igen, más paraméterkészletet is megadhatunk.
- Mit tapasztalunk a D_v diffúziós paramétert változtatva?
Mikor kezd megjelenni a stabil mintázat?
 - A többi paramétert változatlanul hagyva, kis D_v -nél homogenizálódik a rendszer. $D_v=10$ -nél már van stabil mintázat (lassabban alakul ki ,többet oszcillál az gradiensek metszéspontja)
- Mennyire érzékeny a rendszer a kezdeti állapotra?
 - Az alap paraméterek mellet a rendszer random kezdeti állapotról is a $\pi/2$ egyensúlyba áll be -> a kezdeti értékek okozta tranziens lecseng, az egyenlet csak a meghatározó

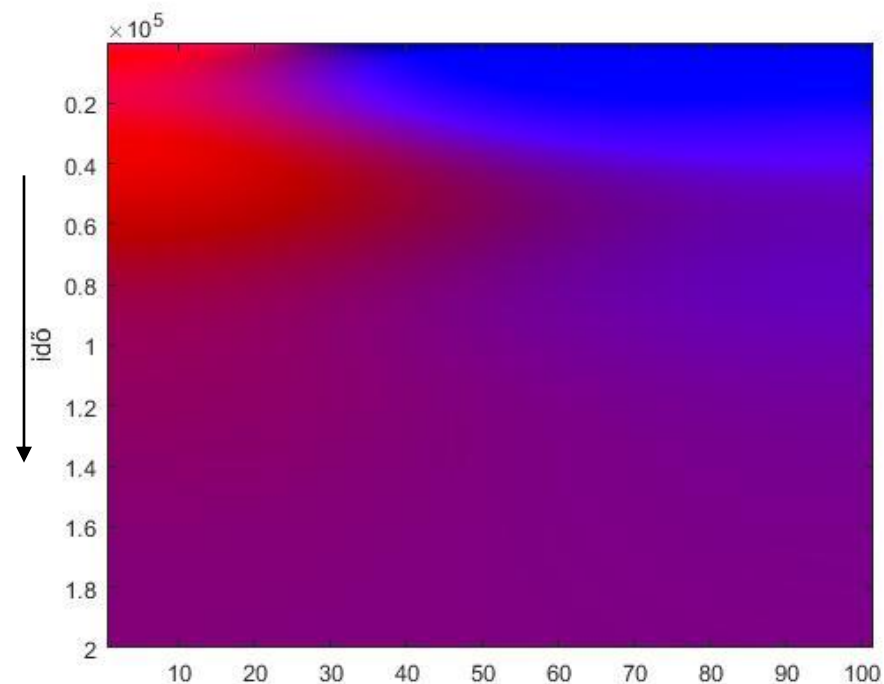
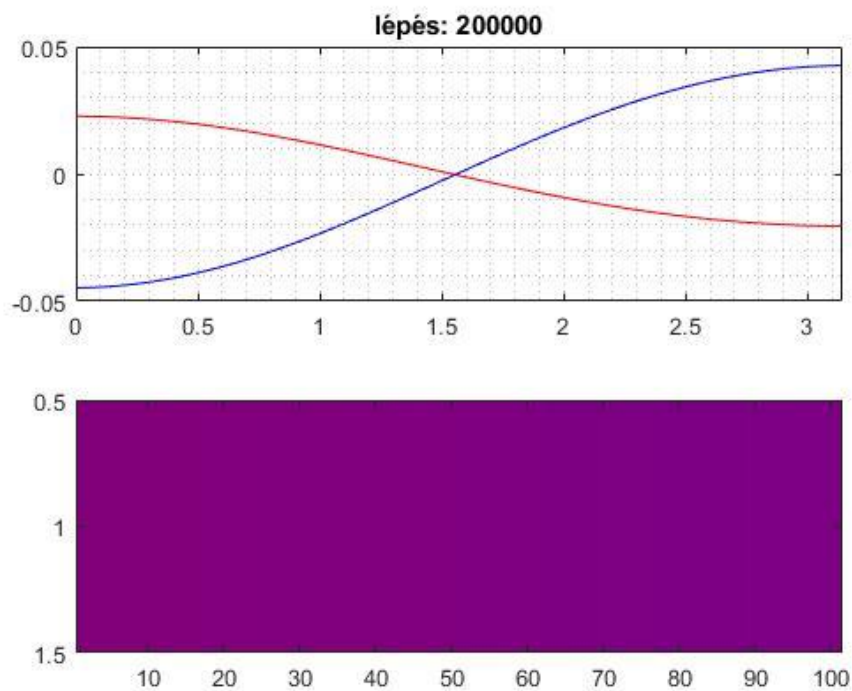
1D Turing mintázat

- $D_v=10$
- $\pi/2$ -nél marad a metszéspont
- Hosszabb oszcilláló tranziens



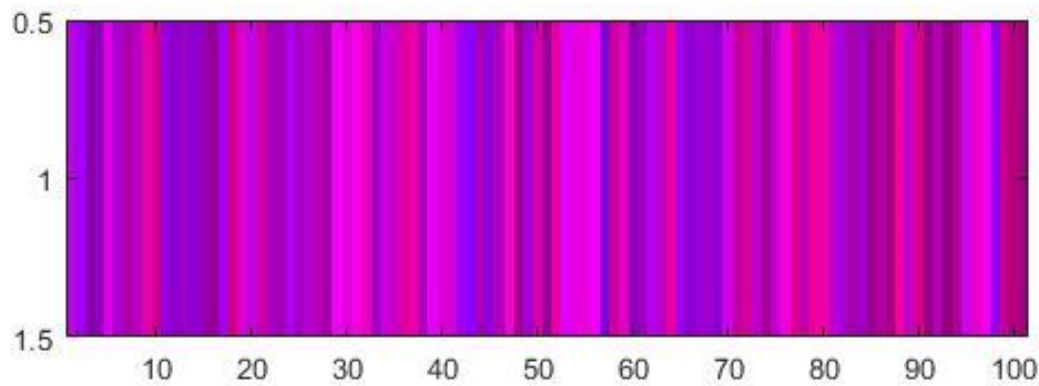
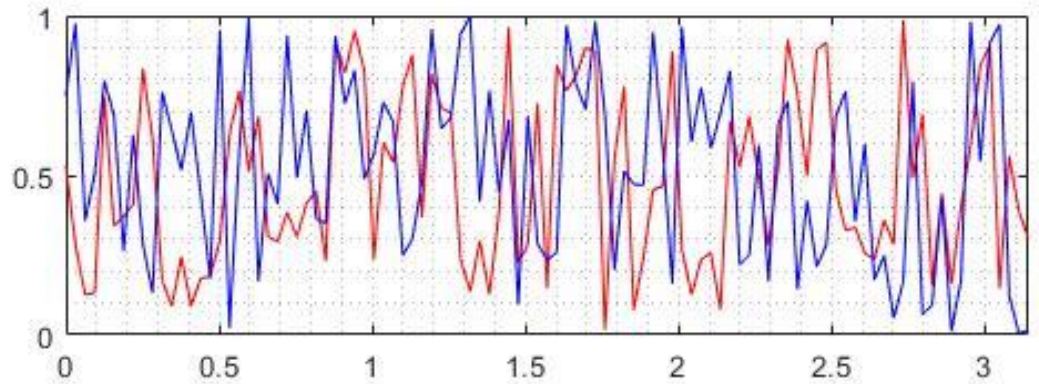
1D Turing mintázat

- $D_v=6$
- Nem marad fenn mintázat
- Kiegyenlítődés 0-hoz



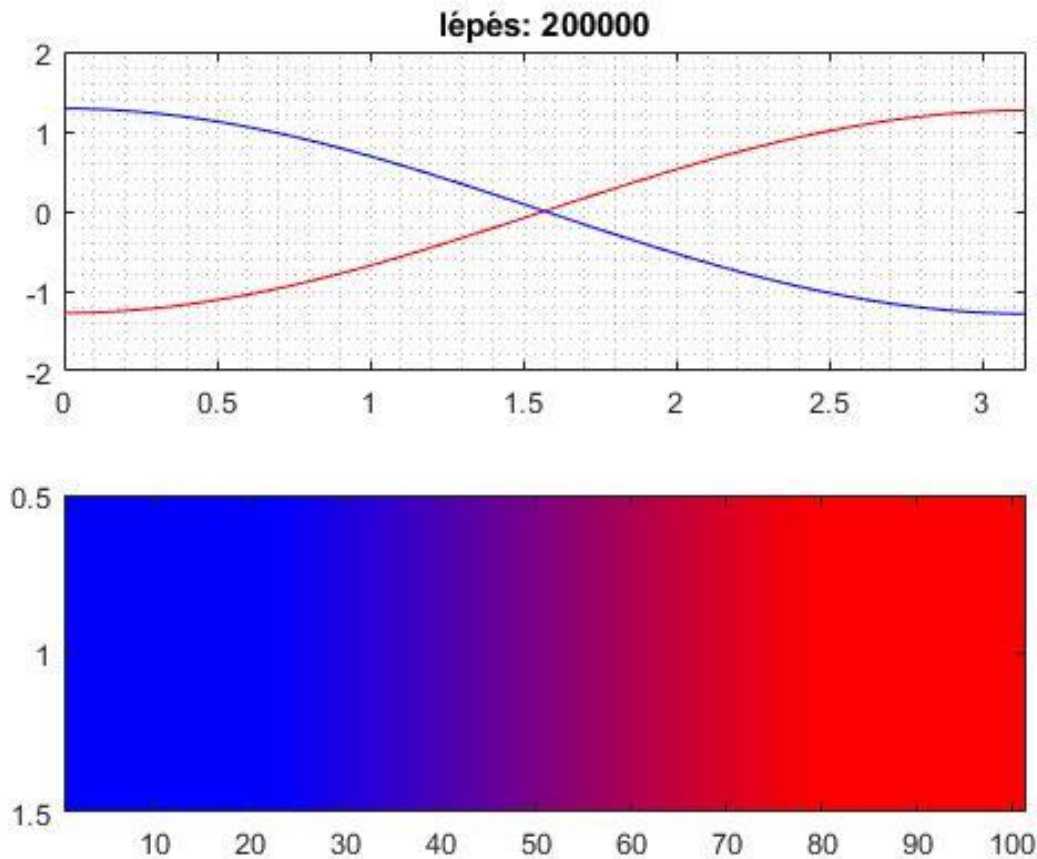
1D Turing mintázat

- Random kezdeti értékek, $t=0$



1D Turing mintázat

- Random kezdeti értékek, $t=200000$
- $\pi/2$ -nél marad a metszéspont



1D Grey-Scott rendszer

Megoldások:

- Implementáljuk a Grey-Scott rendszert a Turing példa alapján!
- Mit tapasztalunk, hogy viselkedik a rendszer?
 - Stabil mintázat alakul ki több sávval
 - A gradiensek lefutása itt is ellentétes
 - A sávok megkettőződéssel képződnek
 - 0 és 1 közt maradnak a koncentrációk

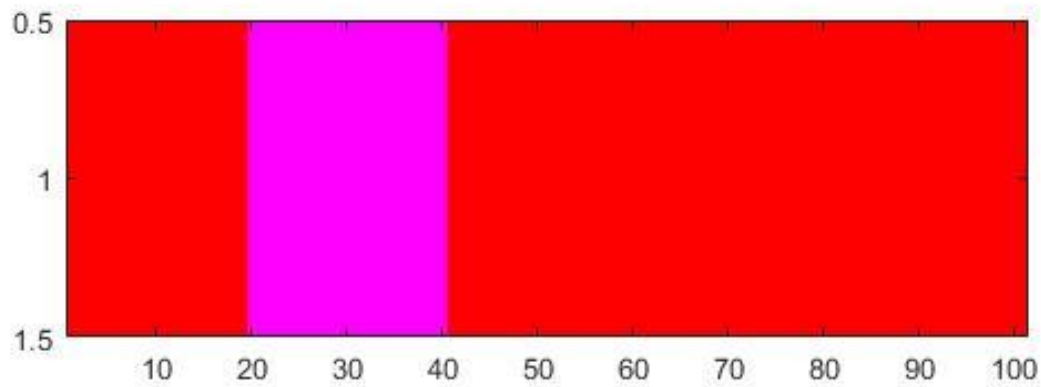
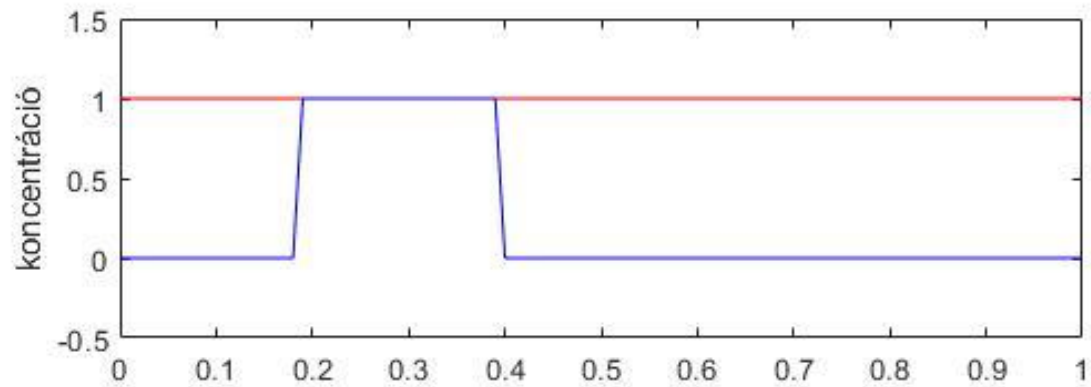
1D Grey-Scott rendszer

Megoldások:

- Más C , F paraméterekkel is kialakul mintázat? Mit tapasztalunk a diffúziós paramétereket változtatva?
 - Más paraméterekkel a rendszer vagy homogenizálódik, vagy más mintázat alakul ki (több/kevesebb, más szélességű sáv)
 - Gyorsabb/lassabb stabilizálódás
- Mennyire érzékeny a rendszer a kezdeti állapotra?
 - Kell adott kiterjedésű és nagyságú kezdeti inhomogenitás, a mintázat kialakulásához (egyébként homogenizálódik a rendszer),
 - A sávok helyzetet változhat ennek függvényében

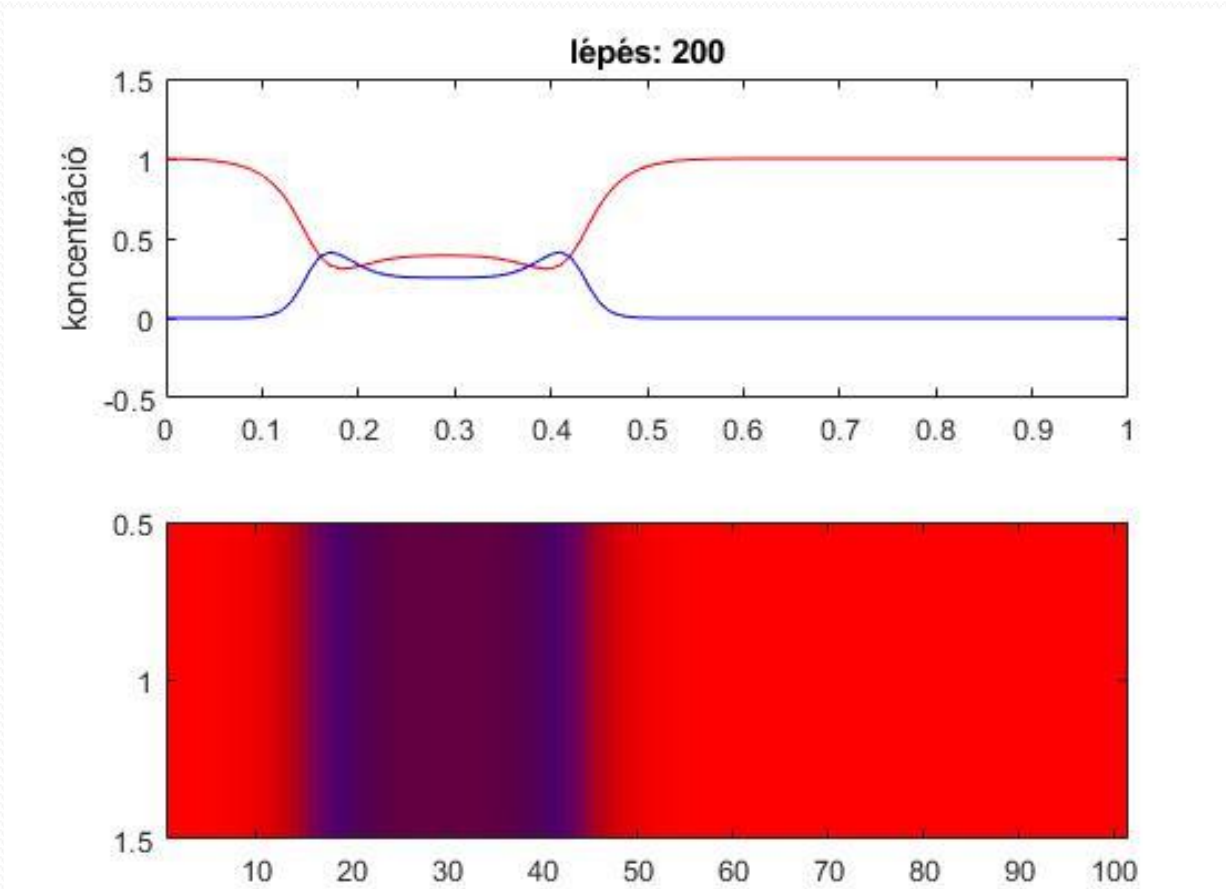
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=0$



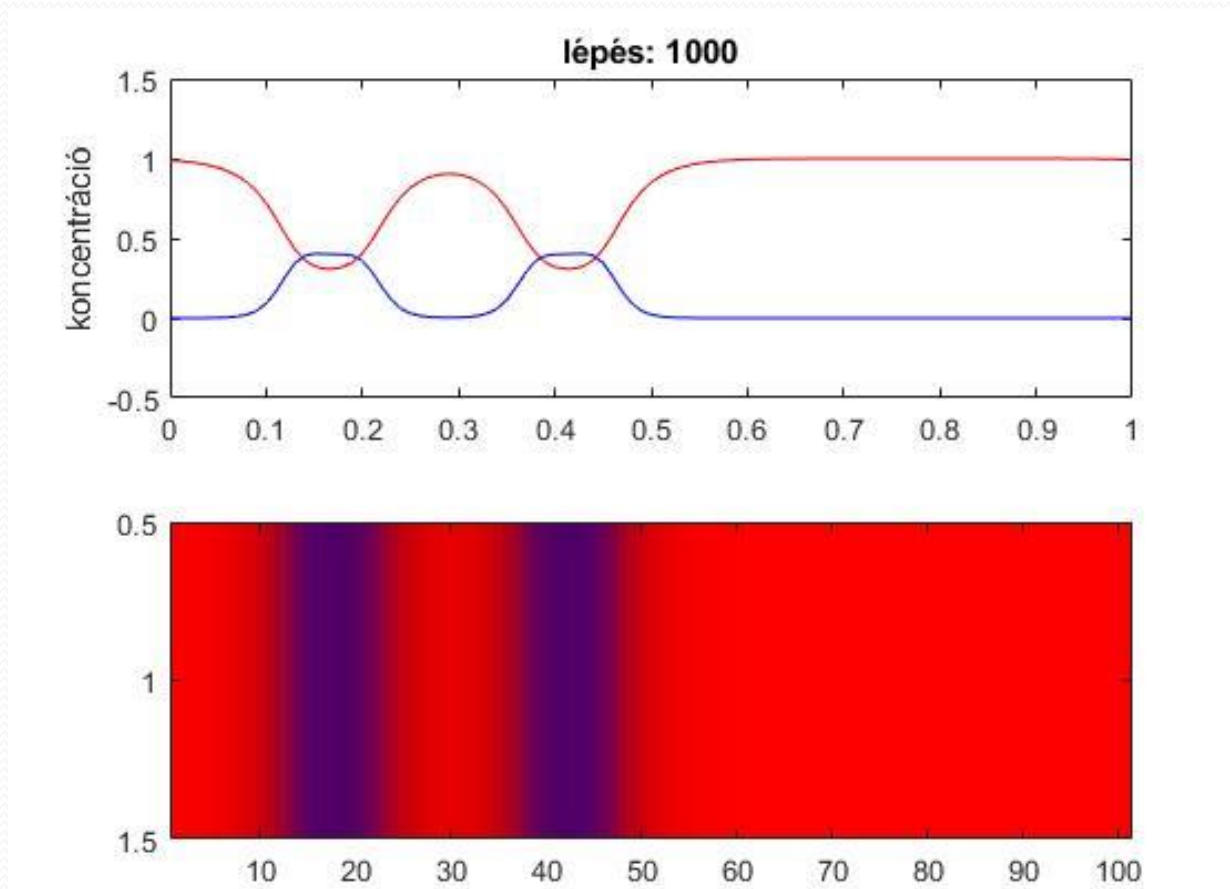
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=200$



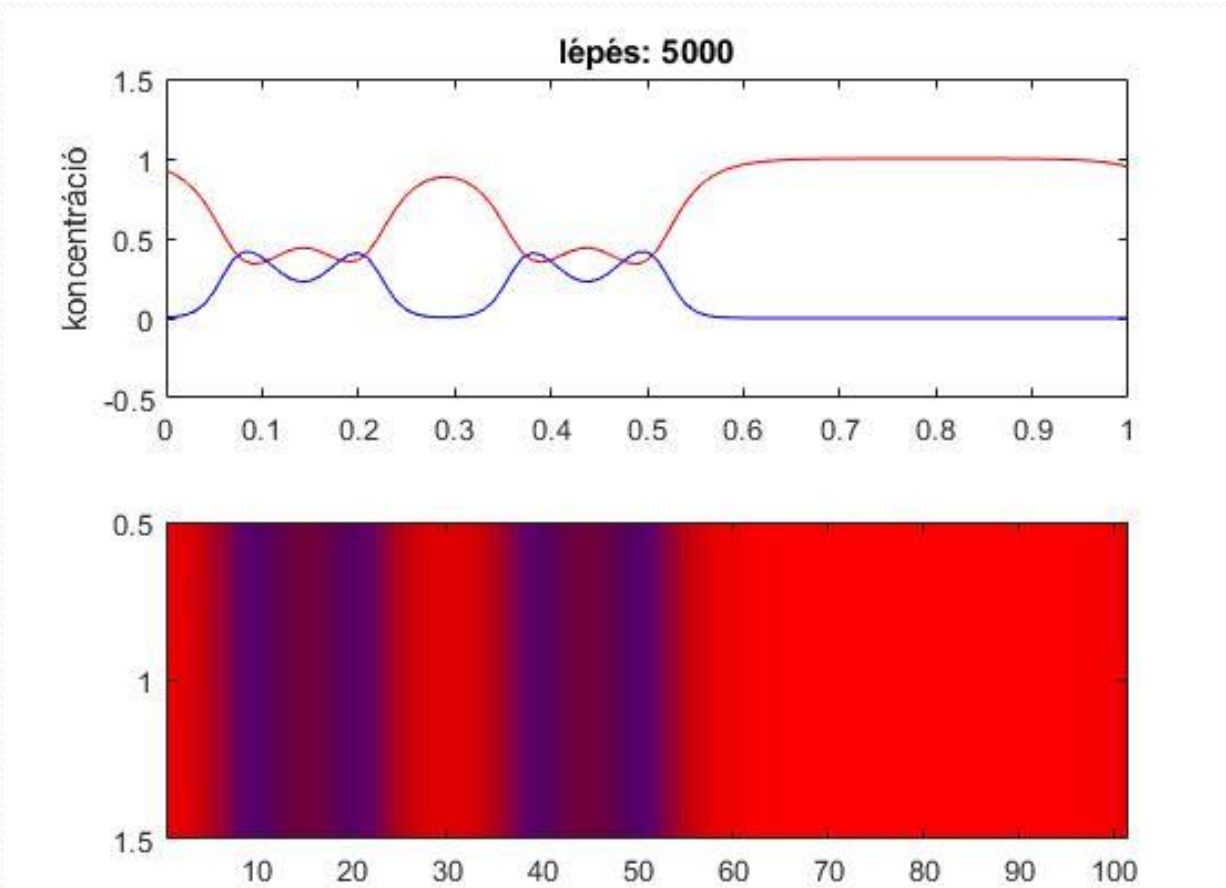
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=1000$



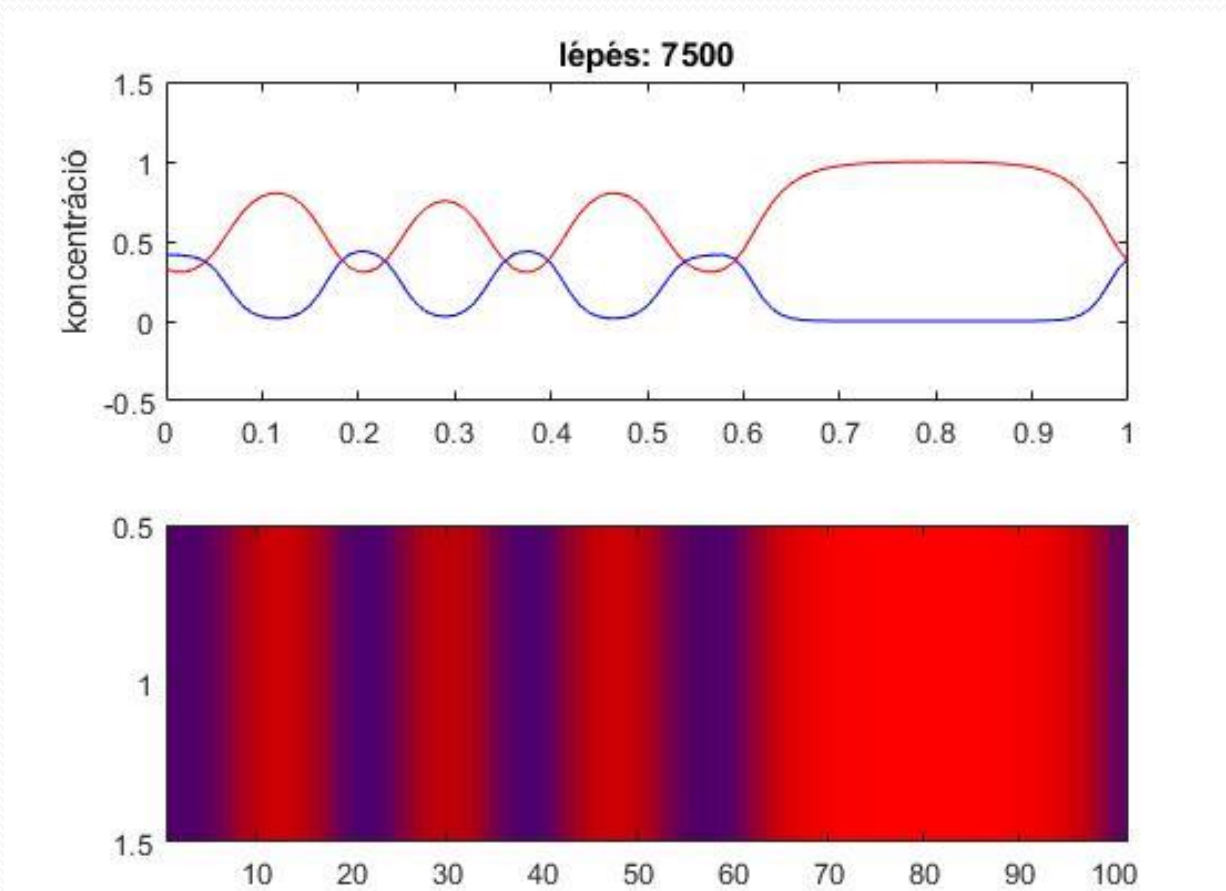
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=5000$



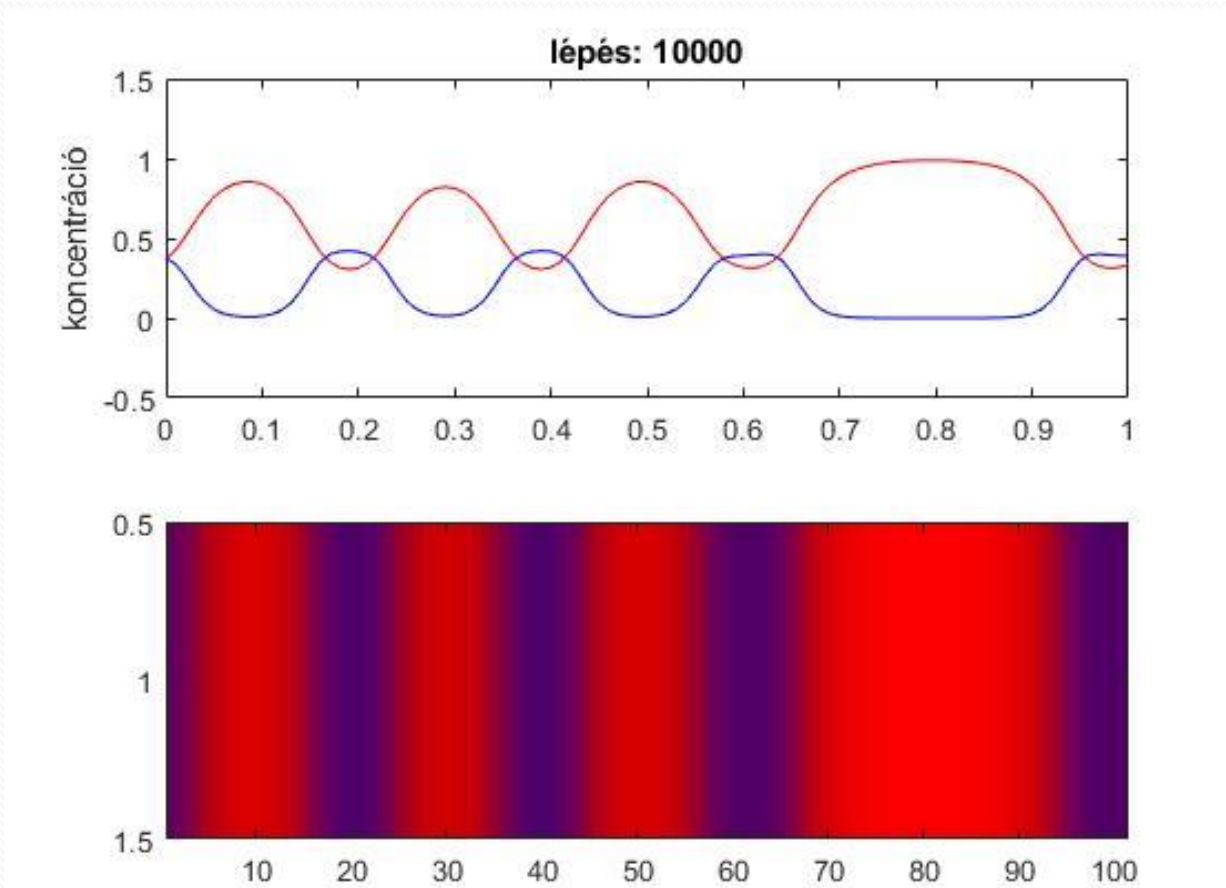
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=7500$



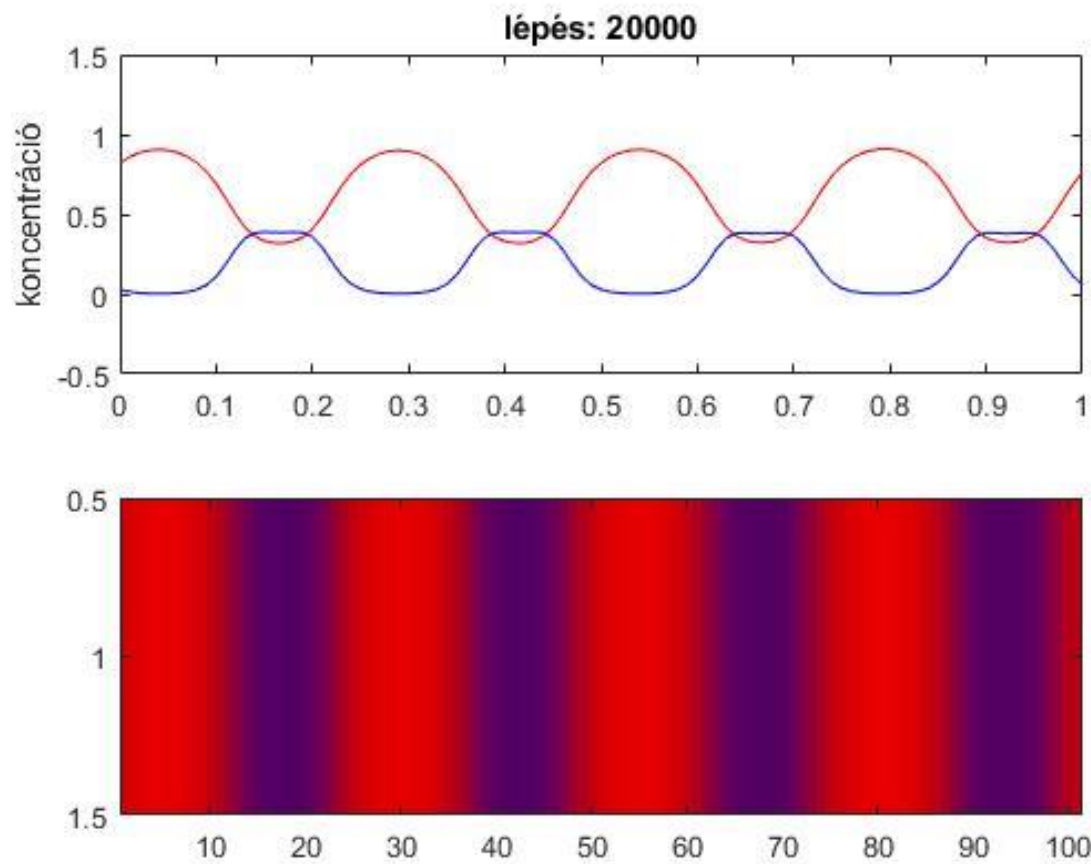
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=10000$



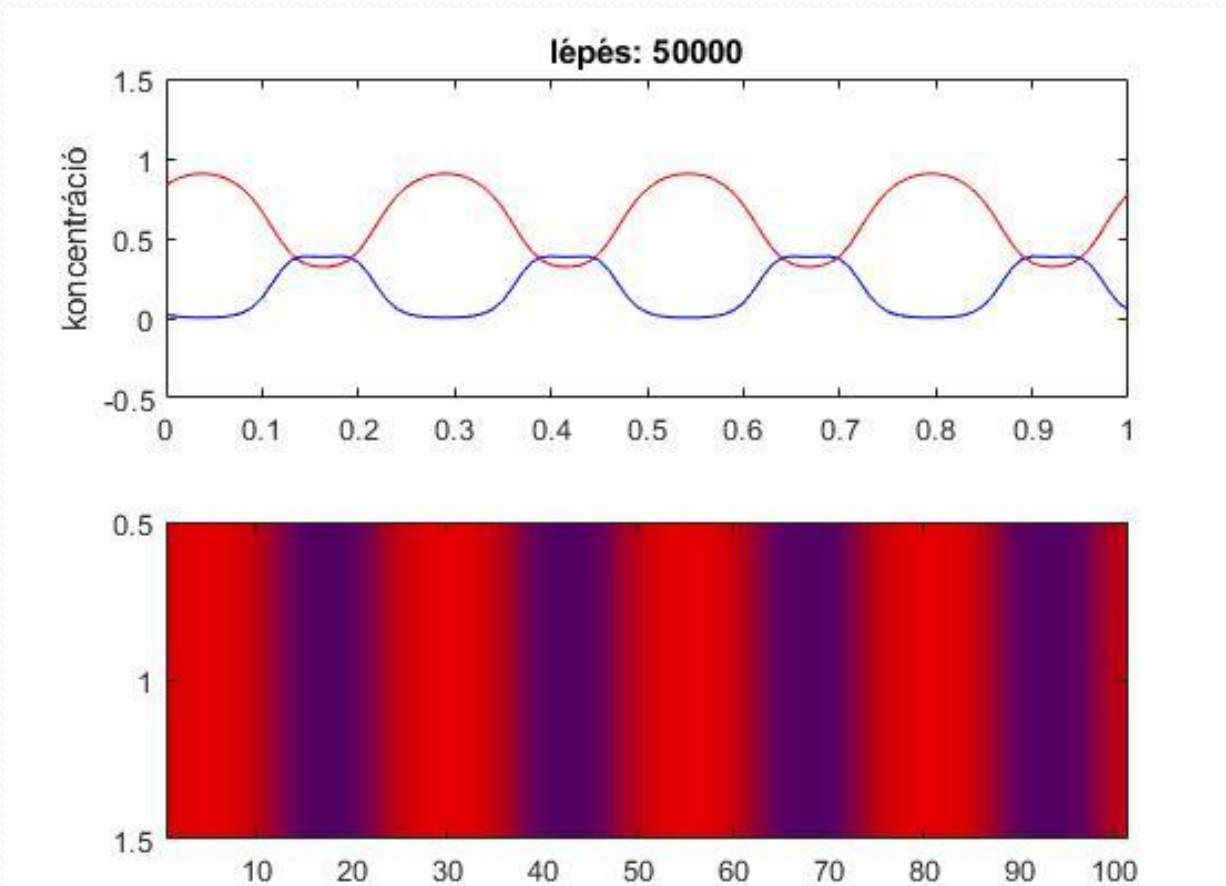
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=20000$



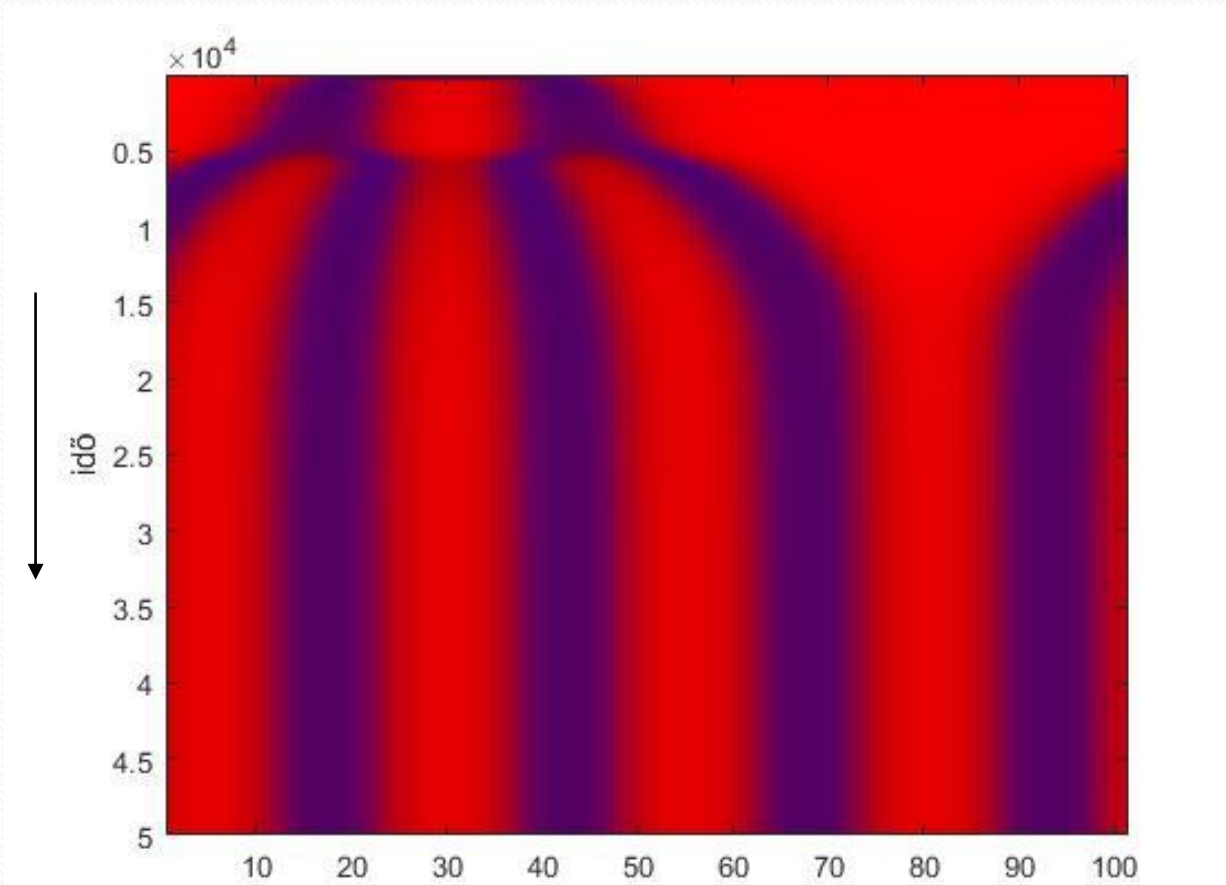
1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, $t=50000$



1D Grey-Scott rendszer

- Alap paraméterek, összesítve



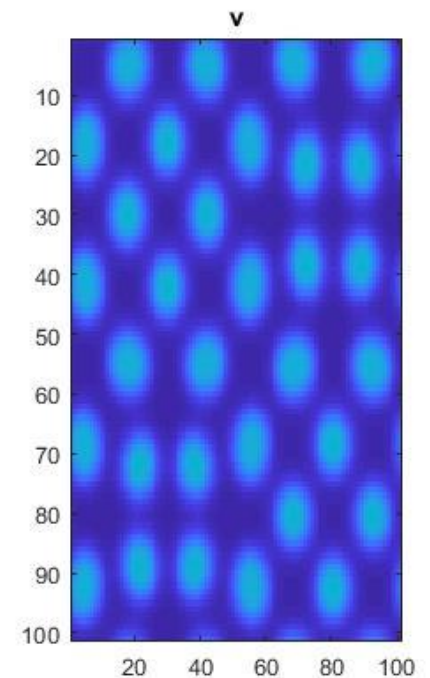
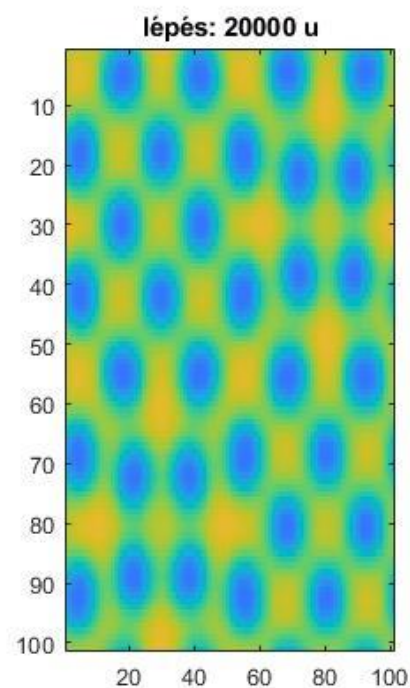
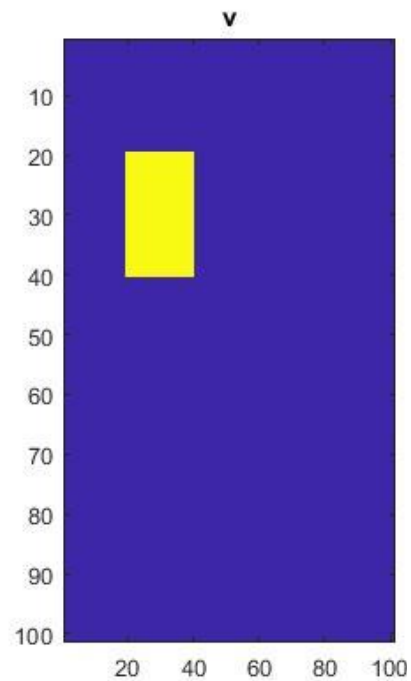
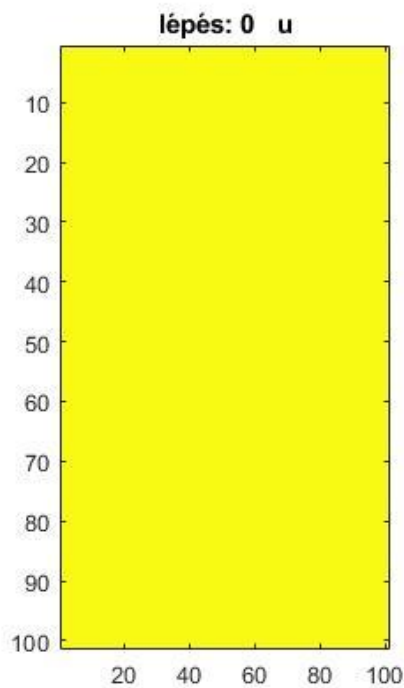
2D Grey-Scott rendszer

Megoldások:

- Hogyan viselkedik a rendszer?
 - A rendszer az 1D-s változathoz hasonlóan viselkedik.
Mintázat vagy kiegyenlítődés a paraméterek függvényében
- Készítsünk különböző térbeli mintázatokat! Keress olyan paraméter beállításokat, ahol sávok és ahol foltok alakulnak ki! Készíts szabályosabb szabálytalanabb mintákat!
 - $F=0.06$ -> sávok ; $F=0.03$ -> foltok
 - Komplexebb, aszimmetrikusabb kiindulási állapot -> szabálytalanabb minták

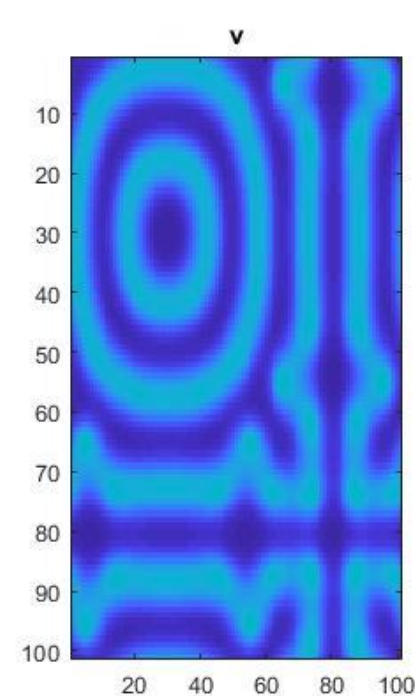
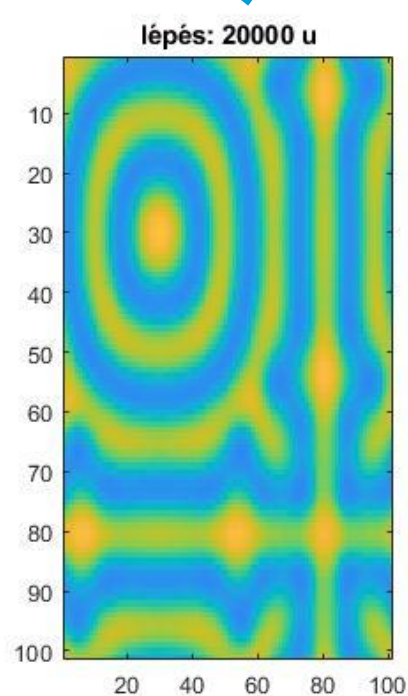
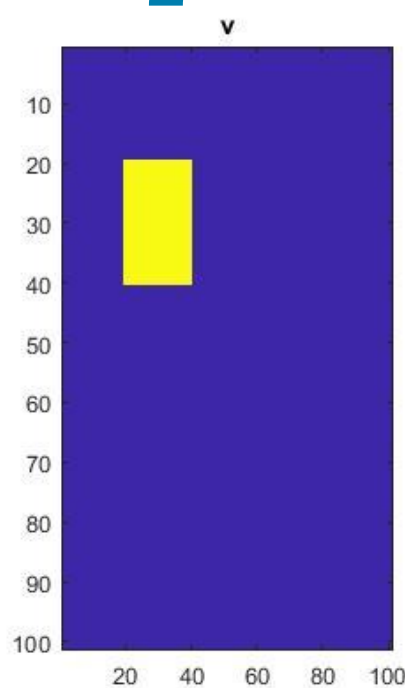
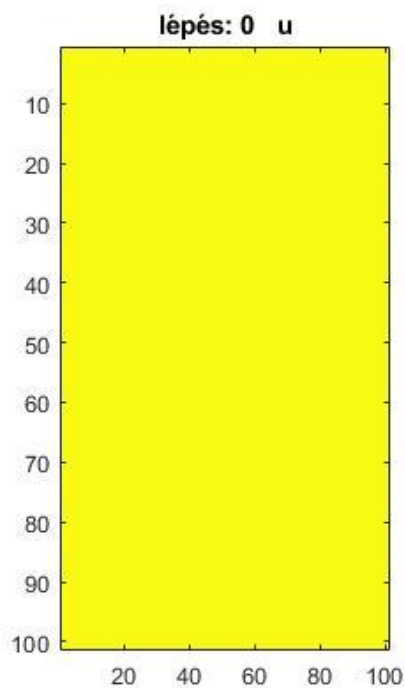
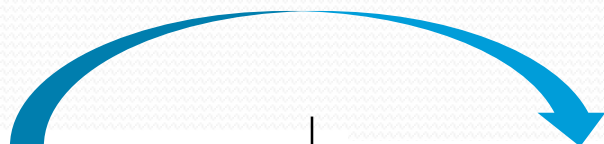
2D Grey-Scott rendszer

- $C=0.065$; $F=0.03$;
- $D_u=6 \cdot 10^{-5}$; $D_v=2 \cdot 10^{-5}$
- **Foltok**



2D Grey-Scott rendszer

- $C=0.065$; $F=0.06$;
- $D_u=6 \cdot 10^{-5}$; $D_v=2 \cdot 10^{-5}$
- **Sávok**



2D Grey-Scott rendszer

- $C=0.065$; $F=0.06$;
- $D_u=6 \cdot 10^{-5}$; $D_v=2 \cdot 10^{-5}$
- **Más kezdeti állapot -> Szabálytalanabb minta**

