Lokális bifurkációk detektálása biológiai rendszerekben

Önálló projekt II., szakmai gyakorlat – Beszámoló

Gyúró Noémi

Témavezető: Dr. Kovács Sándor

Numerikus Analízis Tanszék

2021. december 8.

Ismeretes, hogy a szerkezetképződés az embrionális fejlődés egyik sajátos jellemzője. Cooke és Zeeman tanulmánya óta több cikk is modellezte a szomitogenezist vagy más néven csigolyaképződést. A Schlögl-féle séma, a Gray-Scott-modell, illetve a Schnackenberg-modell mintájára a tanulmányban egy

$$\left.\begin{aligned} \partial_t[A] &= d_A \Delta_{\mathbf{r}}[A] + f_1([A],[B]), \\ \partial_t[B] &= d_B \Delta_{\mathbf{r}}[B] + f_2([A],[B]) \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

alakú kémiai reakció-diffúzió-rendszert javasoltak a szerzők két anyag koncentrációja időfejlődésének leírására, ahol a modell alapjául szolgáló

$$A \xrightarrow{k_1} R, \qquad 2A + B \xrightarrow{k_2} 3A, \qquad B \underset{k'_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} R \tag{2}$$

kémiai séma az

$$\begin{aligned} [\dot{A}] &= f_1([A],[B]) :\equiv -k_1[A] + k_2[A]^2[B], \\ [\dot{B}] &= f_2([A],[B]) :\equiv k'_{-3} - k_3[B] - k_2[A]^2[B] \end{aligned} \tag{3}$$

közönséges differenciálegyenlet-rendszert generálja. Itt A és B az adott kémiai anyagokat reprezentálják, melyek koncentrációját szögletes zárójel, azok rezervoárját pedig R jelöli, a (k_1, k_2, k_3, k'_{-3}) állandók pedig pozitív paraméterek. A (3) kinetikai rendszert szokás sebességi egyenletnek is hívni, a benne szereplő paramétereket pedig sebességi állandóknak (vö. [5]). Az egyenletben lévő harmadfokú nem-linearitásnak a (2)-beli második autokatalitikus reakció az oka.

Az áttekinthetőség kedvéért bevezetjük az

$$\alpha := k_1, \qquad \beta := k_2, \qquad \gamma := k'_{-3}, \qquad \delta := k_3$$

jelöléseket és a koncentrációk esetében elhagyjuk a zárójeleket: $A := [A]$, $B := [B]$. Így a vizsgálatunk tárgya az

$$\boxed{\dot{A} = f_1(A, B) :\equiv -\alpha A + \beta A^2 B, \qquad \dot{B} = f_2(A, B) :\equiv \delta - \gamma B - \beta A^2 B} \tag{4}$$

nemlineáris közönséges differenciálegyenlet-rendszer. A rendszerben háromféle bifurkáció felléptét igazoltunk, amelyekre vonatkozó elégséges feltételeket az alábbiakban tárgyaljuk:

Tegyük fel, hogy a $\mu := \mu_{SN}$ paraméterértéknél a (4) rendszer $\mathbf{x}_{SN}$ egyensúlyi helyzetére az alábbi feltételek teljesülnek.

(SN1) A $\partial_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN})$ mátrixnak a 0 egyszeres sajátértéke, és a többi sajátérték valós része zérustól különböző.

(SN2) Ha $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$ a $\partial_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN})$ mátrix zérus sajátértékéhez tartozó baloldali sajátvektora, akkor $a := \mathbf{p}^T \cdot \partial_2 \mathbf{f}(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN}) \neq 0$.

(SN3) Ha $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^2$ a $\partial_1 \mathbf{f}(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN})$ mátrix zérus sajátértékéhez tartozó (jobb oldali) sajátvektora, akkor $b := \mathbf{p}^T \cdot [\partial_{11} \mathbf{f}(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN})(\mathbf{q}, \mathbf{q})] \neq 0$.

Ekkor igaz az alábbi állítás.

Tétel (nyereg-csomó-bifurkáció.) Az **(SN1)-(SN3)** feltételek teljesülése esetén

1. van olyan $0 \in I \subset \mathbb{R}$ nyílt intervallumon értelmezett $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2) : I \to \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ $\mathfrak{C}^1$-görbe, amelyre

$$\boldsymbol{\gamma}[I] = \left\{ (\mathbf{x}, \mu) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} : \ \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mu) = \mathbf{0} \right\}, \qquad \boldsymbol{\gamma}(0) = (\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN}), \qquad \dot{\boldsymbol{\gamma}}(0) = (\mathbf{q}, 0).$$

2. az $(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN})$ rendezett pár az

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mu) = \mathbf{0}$$

egyenlet **bifurkációs pont**ja, ami azt jelenti, hogy $(\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN}) \in \mathbb{R}^2 \times I$ tetszőleges környezetében vannak olyan

$$(\mathbf{u}_n, \mu_n), (\mathbf{v}_n, \mu_n) \in \mathbb{R}^2 \times I, \quad \mathbf{u}_n \neq \mathbf{v}_n \qquad (n \in \mathbb{N})$$

sorozatok, amelyekre

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}_n, \mu_n) = \mathbf{0} = \mathbf{f}(\mathbf{v}_n, \mu_n) \quad (n \in \mathbb{N}) \quad \text{és} \quad \lim_{n\to\infty}(\mathbf{u}_n, \mu_n) = (\mathbf{x}_{SN}, \mu_{SN}) = \lim_{n\to\infty}(\mathbf{v}_n, \mu_n);$$

3. a $\boldsymbol{\gamma}$ görbe második komponensének második deriváltja nem tűnik el a 0-ban: $\ddot{\gamma}_2(0) = -b/a$, továbbá
   - $b/a < 0$ esetén
   $$\left|\left\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 :\ \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mu) = \mathbf{0}\right\}\right| = \begin{cases} 0 & (\mu < \mu_{SN}), \\ 1 & (\mu = \mu_{SN}), \\ 2 & (\mu > \mu_{SN}) \end{cases}$$
   (**szuperkritikus bifurkáció**);
   - $b/a > 0$ esetén
   $$\left|\left\{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 :\ \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mu) = \mathbf{0}\right\}\right| = \begin{cases} 0 & (\mu > \mu_{SN}), \\ 1 & (\mu = \mu_{SN}), \\ 2 & (\mu < \mu_{SN}) \end{cases}$$
   (**szubkritikus bifurkáció**).

Tegyük fel, hogy a $\mu := \mu_H$ paraméterértéknél a (4) rendszer $\mathbf{x}_H$ egyensúlyi helyzetére az alábbi feltételek teljesülnek.

(PAH1) Alkalmas $\varepsilon > 0$, illetve tetszőleges $\mu \in (\mu_H-\varepsilon, \mu_H+\varepsilon)$ esetén a $\partial_1\mathbf{f}(\mathbf{x}_H, \mu)$ mátrixnak van egy $\rho(\mu) \pm \omega(\mu)\imath$ sajátértékpárja.

(PAH2) Teljesül az **áthaladási feltétel**: $\rho(\mu_H) = 0$, $\omega(\mu_H) \neq 0$.

(PA3) Teljesül az **transzverzalitási feltétel**: $\rho'(\mu_H) \neq 0$.

Ekkor igaz az alábbi állítás.

Tétel (Poincaré-Andronov-Hopf-bifurkáció). A **(PAH1)-(PAH3)** feltételek teljesülése esetén

1. van olyan $\delta > 0$ szám, hogy

$$(\mu_H - \delta, \mu_H + \delta) \subset (\mu_H - \varepsilon, \mu_H + \varepsilon)$$

és van olyan $\mu : (\mu_H - \delta, \mu_H + \delta) \to \mathbb{R}$ függvény, hogy bármely $\tau \in (\mu_H - \delta, \mu_H + \delta)$ esetén az

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mu(\tau))$$

egyenletnek van

$$I \ni t \mapsto \mathbf{p}(t, \tau)$$

periodikus megoldása.

2. Az $(\mathbf{x}_H, \mu_H) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ pontnak van olyan környezete, amely a

$$\mathbf{p}(t, \tau) \qquad (t \in I,\ \tau \in (\mu_H - \delta, \mu_H + \delta))$$

családon kívül nem tartalmaz határciklust.

Legyen $\mathbf{F} \in \mathfrak{C}^1(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^2)$, $\boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^2$, majd tegyük fel, hogy az

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\mu}) \tag{5}$$

rendszer $\mathbf{x}_{BT} := \mathbf{0}$ egyensúlyi helyzete esetén az

$$\mathfrak{A}_{BT} := \partial_1 \mathbf{F}(\mathbf{x}_{BT}, \boldsymbol{\mu}_{BT})$$

mátrixnak a 0 kétszeres sajátértéke, ahol $\boldsymbol{\mu}_{BT} := \mathbf{0}$, majd jelölje $\mathbf{q}_0, \mathbf{q}_1$, ill. $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1$ az $\mathfrak{A}_{BT}$ mátrix ezen sajátértékéhez tartozó általánosított jobb oldali, ill. bal oldali sajátvektorait, pontosabban legyen

$$\mathfrak{A}_{BT}\mathbf{q}_0 = \mathbf{0}, \quad \mathfrak{A}_{BT}\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_0 \qquad \text{és} \qquad \mathfrak{A}_{BT}^T\mathbf{p}_1 = \mathbf{0}, \quad \mathfrak{A}_{BT}^T\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_1,$$

ill.

$$\langle \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0 \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{p}_1 \rangle = 1 \qquad \text{és} \qquad \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{p}_0 \rangle = \langle \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_1 \rangle = 0. \tag{6}$$

Írjuk fel valamely $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ vektort

$$\mathbf{x} = y_1 \mathbf{q}_0 + y_2 \mathbf{q}_1$$

alakban, ahol

$$y_1 := \langle \mathbf{x}, \mathbf{p}_0 \rangle \qquad \text{és} \qquad y_2 := \langle \mathbf{x}, \mathbf{p}_1 \rangle,$$

majd tegyük fel, hogy fennállnak az alábbi feltételek.

(BT0) A $\mathfrak{A}_{\mathrm{BT}}$ mátrix különbözik a zérusmátrixtól: $\mathfrak{A}_{\mathrm{BT}} \neq \mathbf{O}$.

(BT1) $a_{20} + b_{11} \neq 0$, ahol

$$a_{20} := \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \langle \mathbf{F}(y_1\mathbf{q}_0 + y_2\mathbf{q}_1, \mu), \mathbf{p}_0\rangle\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}}, \qquad b_{11} := \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2} \langle \mathbf{F}(y_1\mathbf{q}_0 + y_2\mathbf{q}_1, \mu), \mathbf{p}_1\rangle\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}};$$

(BT2) $b_{20} \neq 0$, ahol

$$b_{20} := \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \langle \mathbf{F}(y_1\mathbf{q}_0 + y_2\mathbf{q}_1, \mu), \mathbf{p}_1\rangle\bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{0}};$$

(BT3) a

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mu) := [\mathbf{F}(\mathbf{x}, \mu), \mathrm{Tr}\,(\partial_1 \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mu)), \det(\partial_1 \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mu))] \qquad ((\mathbf{x}, \mu) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^2)$$

leképezés reguláris az $(\mathbf{x}_{\mathrm{BT}}, \mu_{\mathrm{BT}})$ pontban: az $(\mathbf{x}_{\mathrm{BT}}, \mu_{\mathrm{BT}})$ pontbeli Jacobi-mátrixa invertálható.

Ekkor igaz az alábbi állítás (vö. [4]).

Tétel (Bogdanov-Takens-bifurkáció). A **(BT0)-(BT3)** feltételek teljesülése esetén a (5) rendszer topologikusan ekvivalens egy

$$\dot{\eta}_1 = \eta_2, \qquad \dot{\eta}_2 = \beta_1 + \beta_2\eta_1 + \eta_1^2 + s\eta_1\eta_2 + \mathcal{O}(\|\boldsymbol{\eta}\|^3) \tag{7}$$

alakú rendszerrel, ahol β_1 és β_2 a μ paraméternek olyan függvénye, amelyre $\beta_1(\mathbf{0}) = 0 = \beta_2(\mathbf{0})$ teljesül, továbbá $s := \mathrm{sgn}\,[b_{20}(a_{20} + b_{11})] = \pm 1$.

Hivatkozások

[1] Farkas, M.: *Periodic Motions*, Berlin, Heidelberg and New York: Springer-Verlag, 1994.

[2] Farkas, M.: *Dynamical models in biology*, Academic Press, Inc., San Diego, CA, 2001.

[3] Hirsch, M. W.; Smale, S.; Devaney, R. L.: *Differential equations, dynamical systems, and an introduction to chaos*, Elsevier/Academic Press, Amsterdam, 2013.

[4] Kuznetsov, Y. A..: *Elements of applied bifurcation theory, Third edition*, Applied Mathematical Sciences, Berlin, Heidelberg, New York and Tokyo: Springer-Verlag, 2004.

[5] Lente, G.: *A Michaelis-Menten-kinetika determinisztikus és sztochasztikus modelljei*, Alkalmaz. Mat. Lapok, **33**(2) (2016), 159–174.