

ANALISIS GRAFICO DEL COMPORTAMIENTO DINAMICO DE PAUTAS ESPACIALES EN SISTEMAS DE REACCION-DIFUSION

J.L. GARCIA, I. FERNANDEZ y J.M. PACHECO

Univ. de las Palmas de Gran Canaria, Depto. de Matemáticas,, Campus de Tafira Baja, E-35017 Las Palmas - España

RESUMEN

En este artículo se presenta un estudio y análisis sobre el comportamiento dinámico de pautas espaciales generadas por sistemas de ecuaciones de reacción-difusión. Se estudió un modelo general de dos ecuaciones en dimensión espacial 1 y se consideró dos expresiones cinéticas para la reacción. Se propone un método gráfico para decidir acerca del movimiento espacial de las pautas obtenidas. Se encontró que el método propuesto describe adecuadamente el movimiento espacial.

GRAPHICAL ANALYSIS OF THE DYNAMIC BEHAVIOR OF SPATIAL PATTERNS IN REACTION-DIFFUSION SYSTEMS

ABSTRACT

The dynamic behavior of spatial patterns generated by reaction-diffusion systems has been analyzed and is presented in this article. A general model for the one-dimensional case was studied considering two kinetic expressions for the reaction. A graphical method is proposed in order to decide about the spatial translation of the obtained patterns. It was found that the proposed method is accurate for the description of the patterns movement.

Keywords: reaction-diffusion, spatial patterns, graphical methods, kinetics

MODELO CON PAUTAS ESPACIALES

Se trata de modelizar la evolución espacio-temporal de las concentraciones $X_1(x, t)$ y $X_2(x, t)$ de dos especies que interactúan entre sí en presencia de una tercera, que actúa como catalizador. Esta última no reacciona con las otras. Restringimos aquí el problema al caso espacialmente unidimensional, considerándose que la difusión del catalizador está regida por un coeficiente constante, mientras que los coeficientes de difusión D_1 y D_2 dependen de la concentración del catalizador. Así el modelo puede escribirse (Murray, 1989):

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \gamma f_1(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_1(X_3) \frac{\partial X_1}{\partial x}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \gamma f_2(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_2(X_3) \frac{\partial X_2}{\partial x}), \quad (2)$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial t} = -\alpha X_3 + \kappa \frac{\partial^2 X_3}{\partial x^2}. \quad (3)$$

El dominio espacio-temporal es $[0, 1] \times [0, \infty)$ y las condiciones de contorno son flujo cero para X_1 y X_2 en los extremos del intervalo, mientras que X_3 está sujeto a flujo cero en $x = 0$ y toma un valor constante en $x = 1$, esto es $X_3(1, t) = c$. X_3 alcanza un equilibrio estable en un periodo corto de tiempo en el cual las concentraciones X_1 y X_2 no cambian significativamente, por lo que la ecuación (3) puede ser reemplazada por la concentración de equilibrio de X_3 :

$$X_3(x) = c \frac{\text{Cosh}(x \sqrt{\frac{\alpha}{\kappa}})}{\text{Cosh}(\sqrt{\frac{\alpha}{\kappa}})}, \quad (4)$$

y el modelo se reduce a:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \gamma f_1(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_1(X_3(x)) \frac{\partial X_1}{\partial x}), \quad (5)$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \gamma f_2(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_2(X_3(x)) \frac{\partial X_2}{\partial x}). \quad (6)$$

Una condición para la aparición de pautas desarrolladas espacialmente es que los coeficientes de difusión sean diferentes (Turing, 1952). En la práctica D_2 se toma como algún múltiplo mD_1 de D_1 , y aquí vamos a considerar que $D_1(X_3)$ es una función afín de X_3 , esto es:

$$D_1(X_3) = \alpha X_3 + \beta, \quad D_2 = mD_1, \quad (\alpha < 0, \beta > 0, m > 0). \quad (7)$$

Este modelo se ha estudiado anteriormente por los autores (García-Cortí *et al.*, 1996) mostrando que cumple las condiciones bajo las que se producen pautas espaciales. En el presente trabajo se analizará la existencia de bifurcaciones para el modelo con cinéticas de retroalimentación positiva y de activación-inhibición, siendo $\sqrt{d/k}$ el parámetro de bifurcación. El proceso de resolución consiste en linealizar en torno a un punto singular del sistema sin difusión y resolver el sistema así obtenido bajo la hipótesis de que posee soluciones de la forma:

$$X_1 = X_{10} + e^{\lambda t} Y_1(x), \quad (8)$$

$$X_2 = X_{20} + e^{\lambda t} Y_2(x). \quad (9)$$

Todos los cálculos, simbólicos y numéricos, de este trabajo han sido efectuados con Mathematica.

Se presentan dos versiones del sistema (1)(2)(3) con diferentes términos de reacción. El primero corresponde a la llamada cinética de Schnackenberg:

$$f_1 = w_1 - X_1 + X_1^2 X_2 \quad (10)$$

$$f_2 = w_2 - X_1^2 X_2 \quad (11)$$

En los experimentos numéricos realizados los parámetros elegidos son:

$\alpha = -1, \beta = 20, \gamma = 1000, c = 15, m = 10, w_1 = 0.1, w_2 = 0.9$ y $\sqrt{d/k} = 1$ para las figuras 1.a y 1.b, mientras $\sqrt{d/k} = 2$ para las figuras 1.c y 1.d.

El segundo es el sistema activador-inhibidor donde:

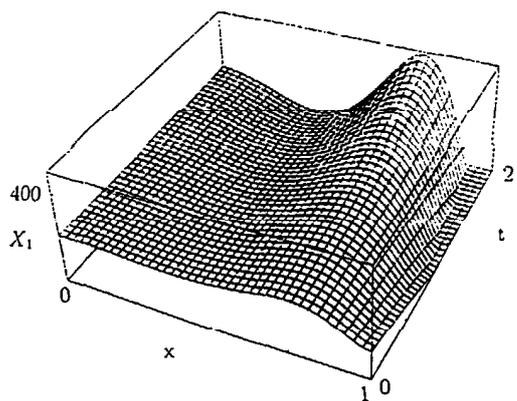
$$f_1 = w_1 - w_2 X_1 + \frac{X_1^2}{X_2(1 + \theta X_1^2)} \quad (12)$$

$$f_2 = X_1^2 - X_2 \quad (13)$$

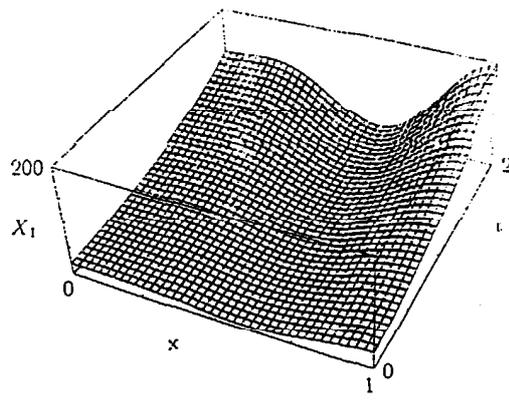
Los parámetros elegidos son:

$\alpha = -1, \beta = 20, \gamma = 1000, c = 15, m = 12, w_1 = 0.1, w_2 = 1, \theta = 0.05$, con $\sqrt{d/k} = 0.1$ para las figuras 2.a y 2.b, mientras $\sqrt{d/k} = 2$ para las figuras 2.c y 2.d.

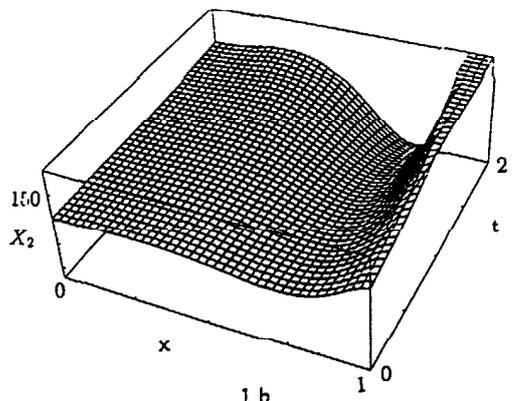
Estos experimentos muestran que la raíz cuadrada $\sqrt{d/k}$ del cociente entre los elementos característicos de la cinética del catalizador actúa como parámetro de bifurcación, en la formación de pautas espaciales para las concentraciones X_1 y X_2 .



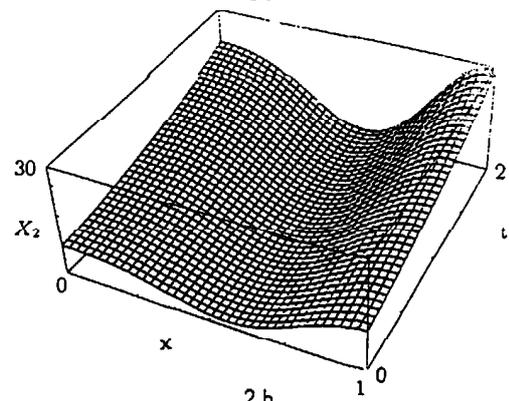
1.a



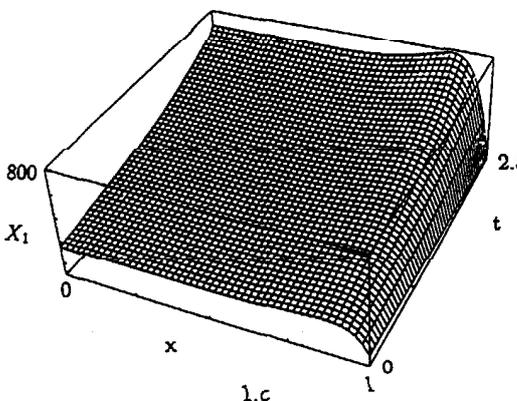
2.a



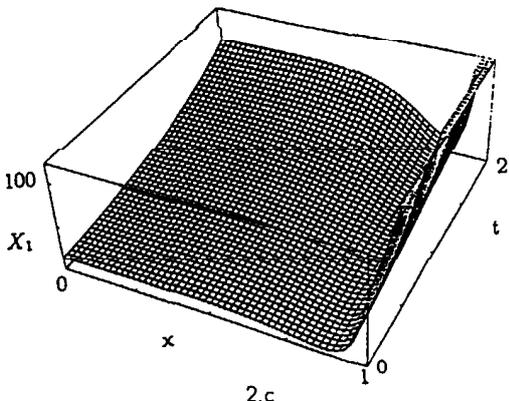
1.b



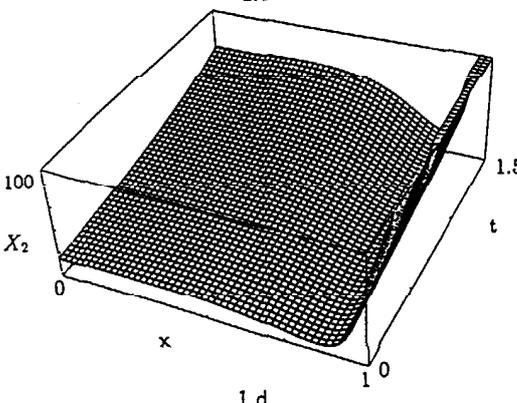
2.b



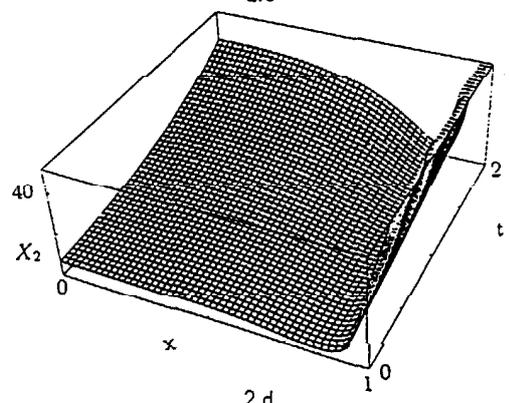
1.c



2.c



1.d



2.d

Fig. 1: Cinética de Schnackenberg: (a) y (b) Concentraciones X_1 y X_2 , con parámetro de bifurcación igual a 1. (c) y (d) con parámetro de bifurcación igual a 2.

Fig. 2: Activador-inhibidor: (a) y (b) Concentraciones X_1 y X_2 , con parámetro de bifurcación igual a 0.1. (c) y (d) con parámetro de bifurcación igual a 2.

ANÁLISIS GRÁFICO

Una observación cuidadosa de las gráficas correspondientes a los modelos analizados indica que la solución obtenida para cada una de las variables $X_i(x, t)$, para t fijo, es una función de x que difiere "poco" de una constante, presentando un único extremo en el intervalo de trabajo $[0, 1]$. Por otra parte, al variar t se constata que este extremo se desplaza sobre el intervalo $[0, 1]$. De este modo se plantea de manera natural el estudio del siguiente problema: ¿Cómo formular matemáticamente el movimiento o desplazamiento de las pautas en el espacio?

En trabajos experimentales, se ha comprobado la existencia de tales desplazamientos en reacciones químicas con difusión dependiente del espacio. Los modelos con catalizador estudiados anteriormente desembocan en modelos de reacción-difusión con difusividades dependientes del espacio, lo cual justifica emprender este análisis.

Existen trabajos teóricos que demuestran tal movilidad para un cierto tipo de cinéticas (Panfilov y Keener, 1995).

En otros de los casos analizados se observa un tipo de movimiento acompañado de evolución, esto es, crecimiento o decrecimiento de la concentración, en uno de los extremos del intervalo $[0, 1]$. Para obtener una relación que nos dé información tanto acerca de la dirección, como de la velocidad en que se produce la acumulación, se considera la función:

$$F(\mu) = n\Lambda, \quad n \in (0, 1), \quad (14)$$

que representa una parte fijada del área bajo la curva trazada en el plano $t = t_k$, que se obtiene al cortar la superficie:

$$X = X(x, t), \quad (15)$$

por el plano $t = t_k$. Por tanto μ es un punto variable del intervalo $[0, 1]$, que depende del tiempo. Esto es; $\mu = \mu(t)$.

Lo anterior conduce a definir (para un t fijo):

$$F(\mu_i(t)) = \int_{\mu_i}^1 X_i(x, t) dx = n\Lambda_i, \quad (16)$$

o bien:

$$F(\mu_i(t)) = \int_0^{\mu_i} X_i(x, t) dx = (1 - n)\Lambda_i, \quad (17)$$

con:

$$\Lambda_i = \int_0^1 X_i(x, t) dx \quad y \quad n \in (0, 1). \quad (18)$$

A la curva que describe un punto interior del intervalo $[0, \mu_i(t)]$ (o bien $[\mu_i(t), 1]$), que se denota $\nu(t)$, se le llama "variedad guía". De esta manera $\nu(t)$ describe la dirección en que aumenta o disminuye la concentración, y su derivada da la velocidad con que esto ocurre.

En el caso de la figura 3.a se ha considerado el sistema activador-inhibidor, con:

$$f_1(X_1, X_2) = X_1 + 5 - X_2, \quad (19)$$

$$f_2(X_1, X_2) = \eta X_1 - 3X_2. \quad (20)$$

Los valores de los parámetros elegidos son:

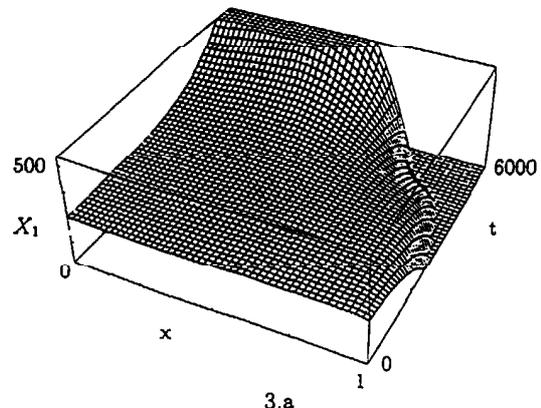
$\alpha = -1, \beta = 20, \gamma = 1000, \eta = 4, c=15, m=20, \sqrt{d/k}=2$. Con esto, los resultados obtenidos (mediante un ajuste no lineal) son:

$$\nu_1(t) = a + b e^{-\frac{t}{c}} \quad (21)$$

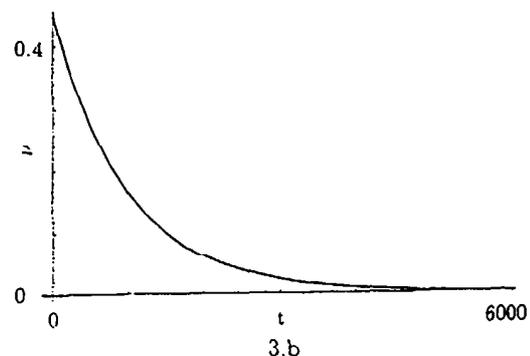
en donde en el caso de X_1 :

$$a=4.719 \cdot 10^{-5}, b=0.448 \text{ y } c=998.604$$

La figura 3.b representa a la "variedad guía" correspondiente.



3.a



3.b

Fig. 3: Activador-inhibidor: (a) La acumulación de concentración X_1 se produce en torno a $x = 0$. (b) Variedad guía correspondiente.

En otros casos la acumulación de concentración no se produce únicamente en los alrededores de uno de los extremos del intervalo. Así, en la figura 4 el fenómeno se produce tanto en un extremo como en el interior del intervalo, mientras que en la figura 5 la acumulación tiene lugar en ambos extremos.

Para tales casos (y para otros más generales), se define una partición $P = \{p_0, p_1, \dots, p_x\}$ del intervalo $[0, 1]$, y en cada subintervalo $[p_{j-1}, p_j]$ se consideran las funciones:

$$F_{j1}(\mu_{1j}(t)) = \int_{\mu_{1j}}^{p_j} X_i(x, t) dx = n\Lambda_{ij}, \quad (22)$$

$$F_{j2}(\mu_{2j}(t)) = \int_{p_{j-1}}^{\mu_{2j}} X_i(x, t) dx = m\Lambda_{ij}, \quad (23)$$

con:

$$\Lambda_{ij} = \int_{p_{i-1}}^{p_j} X_i(x) dx \quad y \quad n, m \in (0, 1). \quad (24)$$

Los signos de $\mu_{1j} - p_{j-1}$ y de $\mu_{2j} - p_j$ nos ofrecen una interpretación cualitativa de lo que ocurre con respecto al crecimiento y decrecimiento de acumulación en $[p_{j-1}, p_j]$. Aquí, definimos la función:

$$\nu_j(t) = \frac{\mu_{1j} + \mu_{2j}}{2}, \quad (25)$$

a cuya gráfica llamamos también "variedad guía", y que nos ofrece una aproximación del movimiento de la pauta.

En los casos de las figuras 4 y 5, se ha considerado el sistema de reacción-difusión con cinética de Schnackenberg.

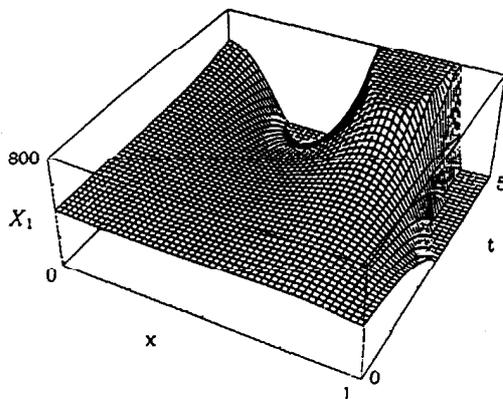


Fig. 4: La acumulación de concentración se produce en torno a un extremo y a un punto interior del intervalo $[0, 1]$.

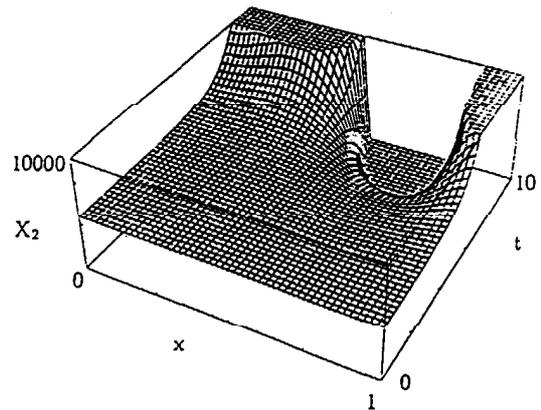


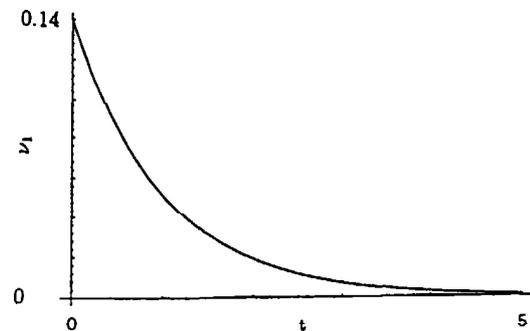
Fig. 5: La acumulación de concentración se produce en torno a los extremos del intervalo $[0, 1]$.

La gráfica 4 representa el comportamiento de X_1 . Aquí la partición considerada ha sido $P = \{0, 0.35, 1\}$, obteniendo para el intervalo $[0, 0.35]$ los siguientes resultados:

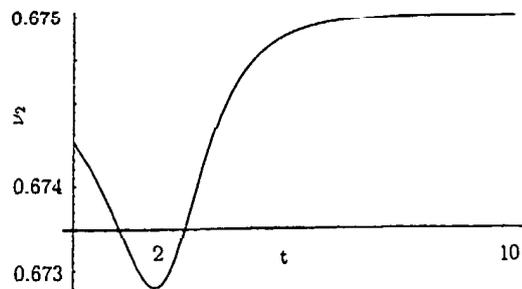
$$\nu_1(t) = a + b e^{-ct}, \quad (26)$$

en donde:

$$a=2.214 \cdot 10^{-5}, \quad b=0.139 \quad y \quad c=0.997$$



6.a



6.b

Fig. 6. Variedades guías para la concentración X_1 con cinética de Schnackenberg. (a) En el intervalo $[0, 0.35]$. (b) En el intervalo $[0.35, 1]$.

La figura 6.a representa a la "variedad guía" en el intervalo $[0, 0.35]$, y puede observarse el crecimiento exponencial de la acumulación hacia las proximidades de $x = 0$.

En el intervalo $[0.35, 1]$ los resultados son:

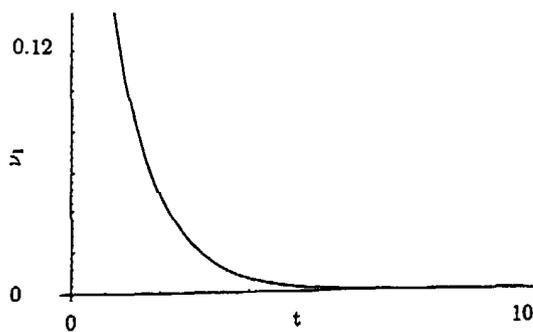
$$\nu_2(t) = \frac{a + ct + et^2}{1 + bt + dt^2}, \quad (27)$$

con:

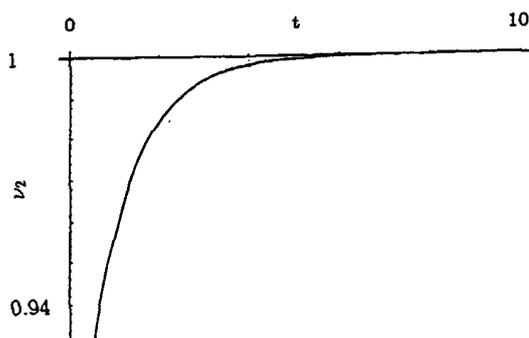
$$a=0.674, b=-0.680, c=-0.459, d=0.161 \text{ y } e=0.108.$$

La figura 6.b representa a la "variedad guía" en este intervalo, y como puede verse, el crecimiento de acumulación tiende a producirse en los alrededores de $x = 0.675$.

La figura 5 representa el comportamiento espacio-temporal de X_2 . La partición considerada es: $P = \{0, 0.75, 1\}$, obteniendo para el intervalo $[0, 0.75]$ los



7.a



7.b

Fig. 7: Variedades guías para la concentración X_2 con cinética de Schnackenberg. (a) En el intervalo $[0, 0.75]$. (b) En el intervalo $[0.75, 1]$.

resultados:

$$\nu_1(t) = a + be^{\frac{-t}{c}}, \quad (28)$$

con:

$$a=3.560 \cdot 10^{-5}, b=0.355, c=0.997.$$

La figura 7.a representa a la "variedad guía" en el intervalo $[0, 0.75]$.

En el intervalo $[0.75, 1]$ los resultados son:

$$\nu_2(t) = a + bt + ct\sqrt{t} + de^{-t} \quad (29)$$

con:

$$a=1.001, b=-0.0008, c=0.0002, d=-0.119.$$

La figura 7.b representa a la "variedad guía" en este intervalo, y como puede verse, el crecimiento de acumulación tiende a producirse en los alrededores de $x = 1$.

CONCLUSIONES

Se muestra gráficamente que para cinéticas, tanto de activación-inhibición como de retroalimentación positiva, se producen movimientos acompañados de evolución de las pautas espaciales. Todo ello, en un modelo de reacción-difusión unidimensional donde la interacción entre dos especies está regida por otra especie, que actúa como catalizador. Este modelo se ha estudiado anteriormente por los autores, mostrando que cumple las condiciones bajo las que se producen pautas espaciales.

REFERENCIAS

- García-Cortí, J.L., Fernández, I., Pacheco, J.M.: An analysis of morphogenesis in reaction-diffusion systems with a catalyst, *Journal of Institute of Mathematics and Computer Sciences (Mathematics Series)*, Vol.9, No.1, 11-18 (1996)
- Murray, J. : *Mathematical Biology*, Springer Verlag (1989)
- Panfilov, A., Keener, J. : Dynamics of dissipative structures in reaction-diffusion equations, *SIAM J. App. Math* 55-1, 205-219 (1995)
- Turing, A.M.: The chemical basis of morphogenesis, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, B237, pp.37-72 (1952)