Reação-Difusão: Modelo de Gray-Scott

Ou: Como Gerar Imagens Bonitas

Thales Magalhães
Tiago Montalvão

ANEDO
Profª Juliana Valério

Equações de Reação-Difusão

- Modelam a evolução de concentrações ao longo do tempo
- Tipicamente são concentrações de substâncias químicas
- Dividida nos componentes “reação” e “difusão”

$$\partial_t \boldsymbol{q} = \underline{\underline{\boldsymbol{D}}}\, \nabla^2 \boldsymbol{q} + \boldsymbol{R}(\boldsymbol{q})$$

Componente único

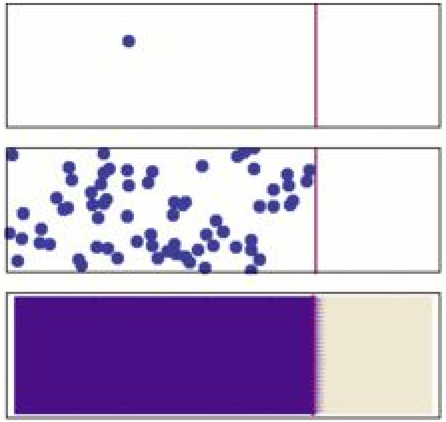
- Versão mais simples da equação
- Ainda assim pode modelar diversos fenômenos

$$\partial_t u = D\partial_x^2 u + R(u)$$

Componente único: Leis de Fick

- Modela a difusão unidimensional ao longo do tempo.

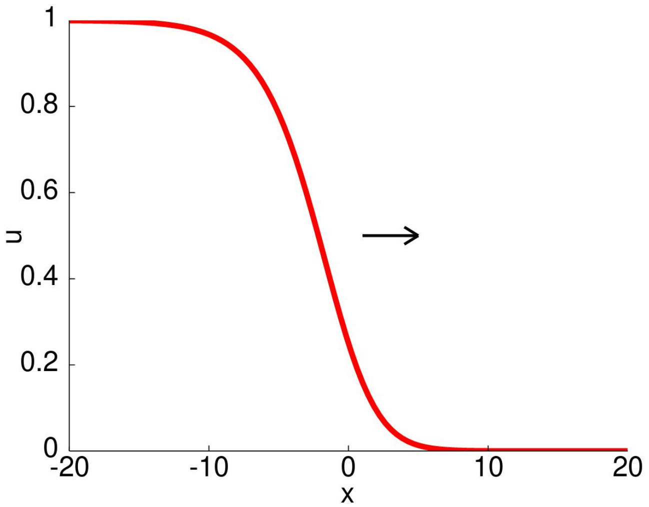
$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}$$



Componente único: Equação de Fisher

- Pode ser utilizada para modelar diversos fenômenos
- Dentre eles fenômenos: ecológicos, de combustão, cristalização, transição de fases

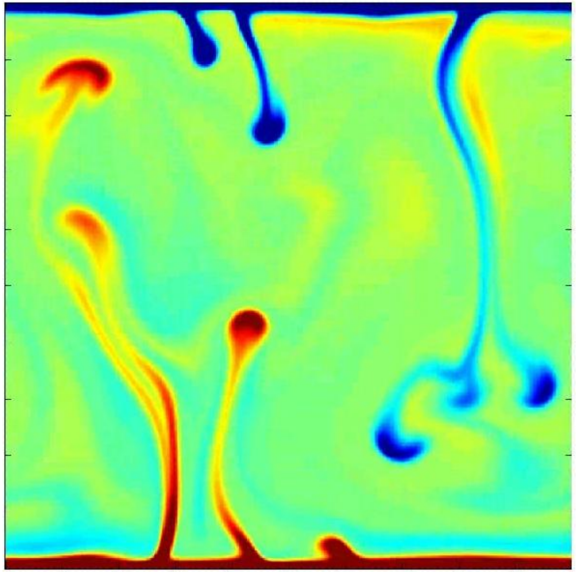
$$R(u) = u(1 - u)$$



Componente único: Rayleigh-Bénard

- Modela fenômenos de convecção
- Equação de Newell–Whitehead-Segel

$$R(u) = u(1 - u^2)$$



Dois componentes

- Modela fenômenos mais complexos
- Apresenta diversas propriedades emergentes
- Estabilidade?

$$\begin{pmatrix} \partial_t u \\ \partial_t v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_{xx} u \\ \partial_{xx} v \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F(u,v) \\ G(u,v) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\boldsymbol{q}}_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}, t) = \begin{pmatrix} \tilde{u}(t) \\ \tilde{v}(t) \end{pmatrix} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

$$\cdots(t) = -k^2 \begin{pmatrix} D_u \tilde{u}_{\boldsymbol{k}}(t) \\ D_v \tilde{v}_{\boldsymbol{k}}(t) \end{pmatrix} + \mathbf{R} \begin{pmatrix} \tilde{u}_{\boldsymbol{k}}(t) \\ \tilde{v}_{\boldsymbol{k}}(t) \end{pmatrix},$$

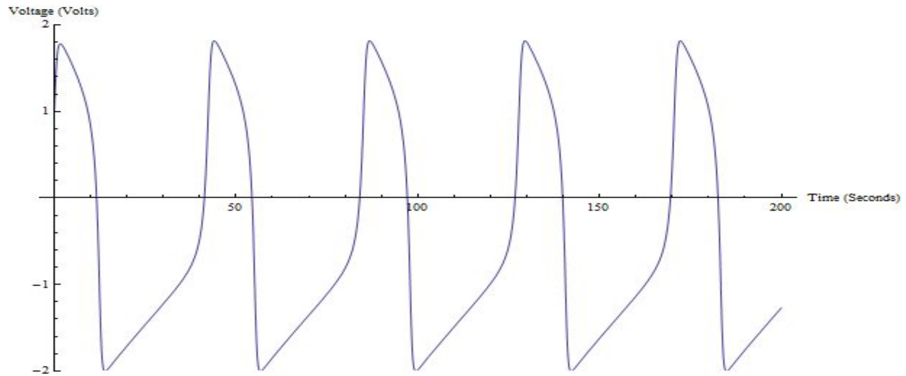
Dois componentes: FitzHugh-Nagumo

- Modela sistemas de tipo ativador-inibidor

$$\partial_t u = d_u^2 \nabla^2 u + f(u) - \sigma v$$
$$\tau \partial_t v = d_v^2 \nabla^2 v + u - v$$

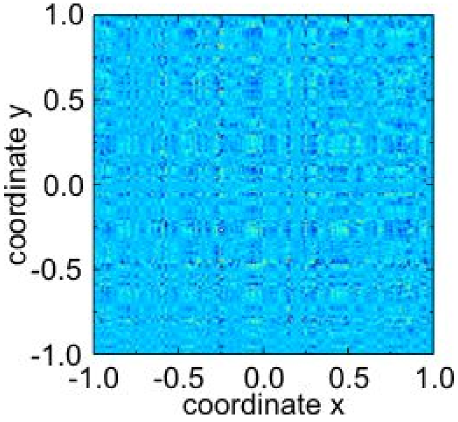
- Por exemplo, como o potencial de ação se propaga ao longo de um neurônio

$$f(u) = \lambda u - u^3 - \varkappa$$

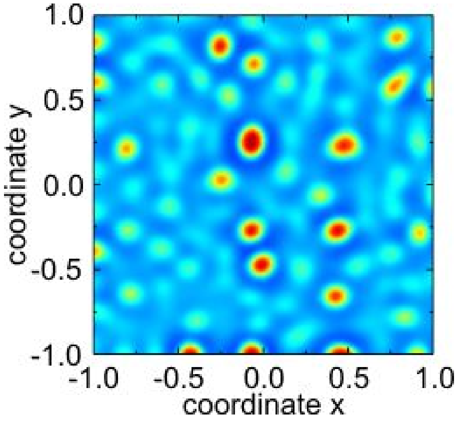


Dois componentes: FitzHugh-Nagumo

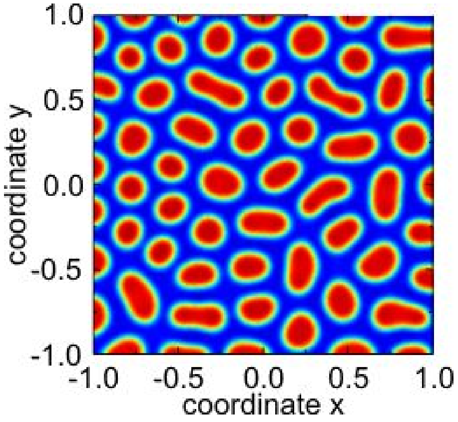
- Mudança de parâmetros leva a uma “bifurcação”
- Pode levar a um novo estado estável ou oscilatório



t = 0



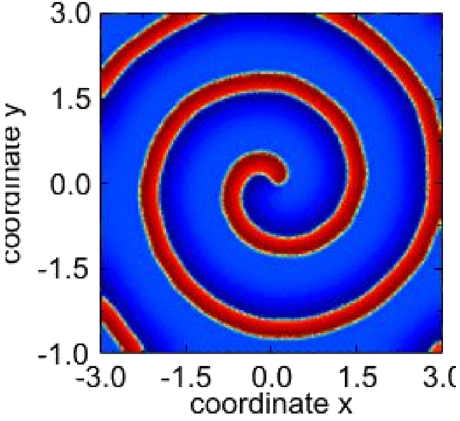
t = 10



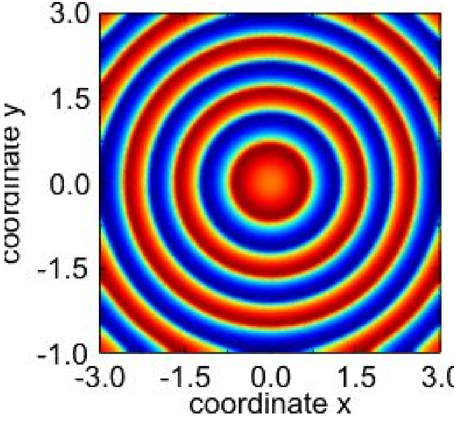
t = 100

Dois componentes: FitzHugh-Nagumo

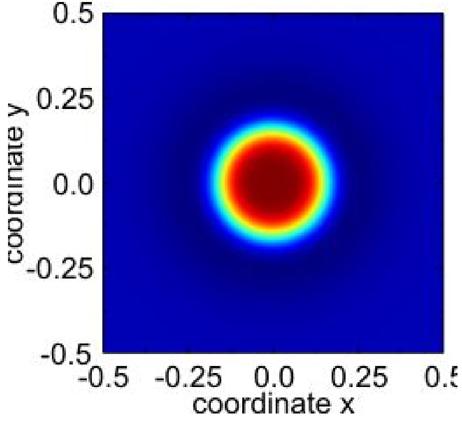
- Apresenta diversos padrões emergentes
- Dependem do estado inicial e parâmetros



Espiral rotatória



Alvo



Pulso

Dois componentes: Modelo de Gray-Scott

- Dois componentes U e V reagem e P inerte
- A reação é dada por:

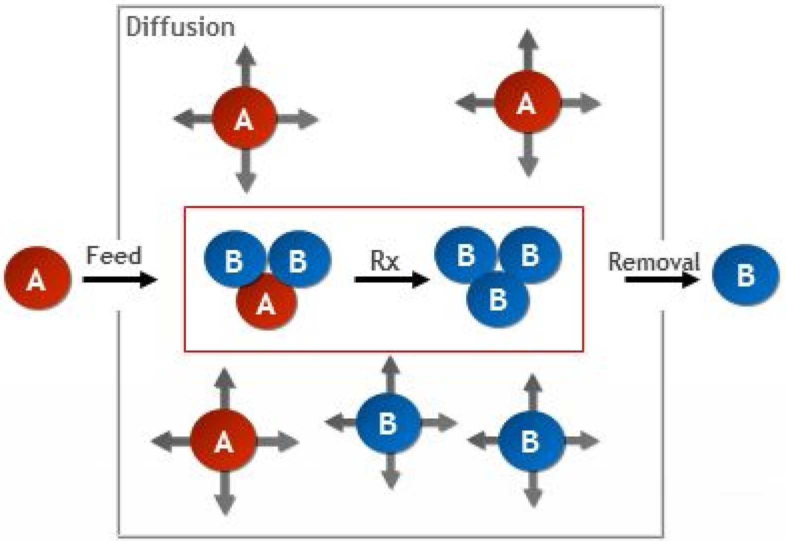
$$U + 2V \longrightarrow 3V$$

$$V \longrightarrow P$$

- U e V difundem no meio, com taxas respectivamente D_u e D_v .
- O componente U é adicionado ao sistema a uma taxa *f* (feed rate).
- O componente V torna-se P a uma taxa *k* (kill rate).

Dois componentes: Modelo de Gray-Scott

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u)$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v$$



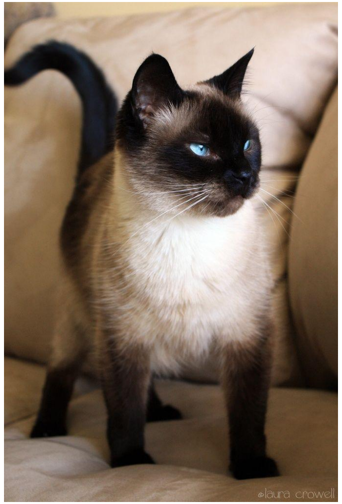
Dois componentes: Modelo de Gray-Scott

- Apesar de simples, é capaz de reproduzir diversos tipos de fenômenos naturais



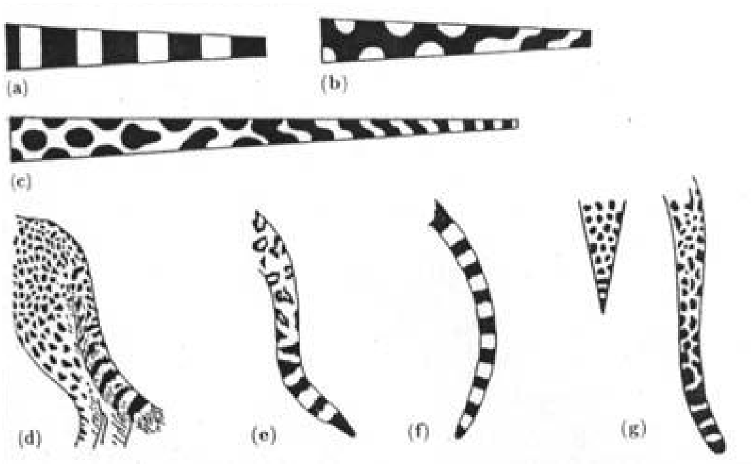
Formação de Manchas em Animais

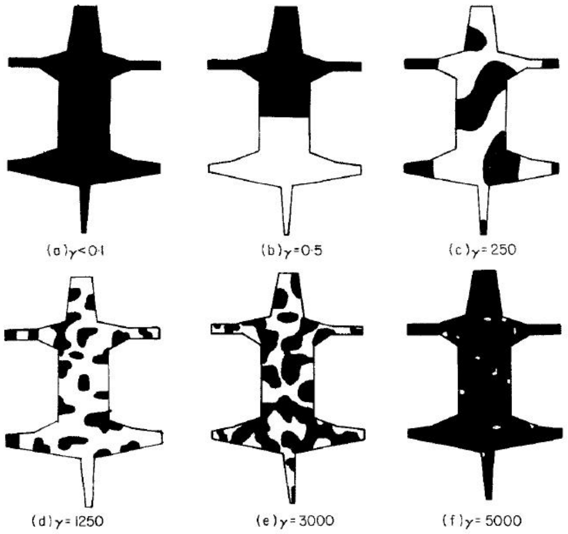
- A formação de manchas em animais se dá por vários mecanismos
- A biologia ainda não explica alguns desses mecanismos por completo
- James Murray sugeriu uma possível explicação para alguns destes mecanismos
- Segundo a teoria, durante o desenvolvimento do embrião reações do tipo ativador-inibidor determinam a formação de manchas no animal



Formação de Manchas em Animais

- O formato e a escala do domínio afetam os padrões formados





Formação de Manchas em Animais

- O formato e a escala do domínio afetam os padrões formados

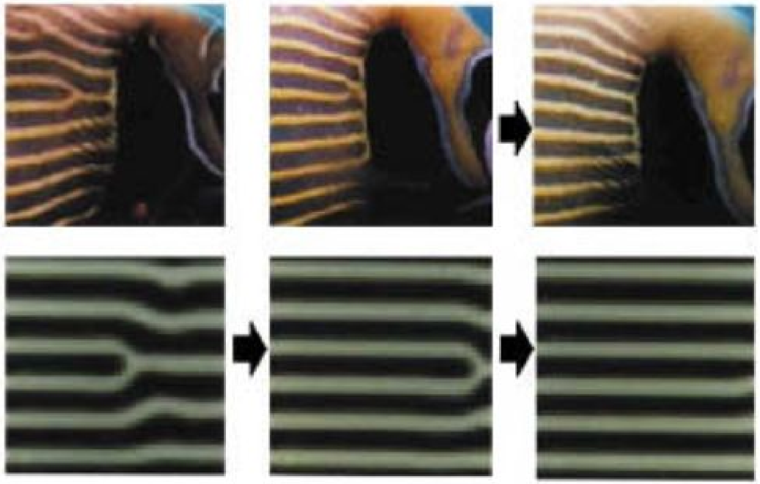
Genetta

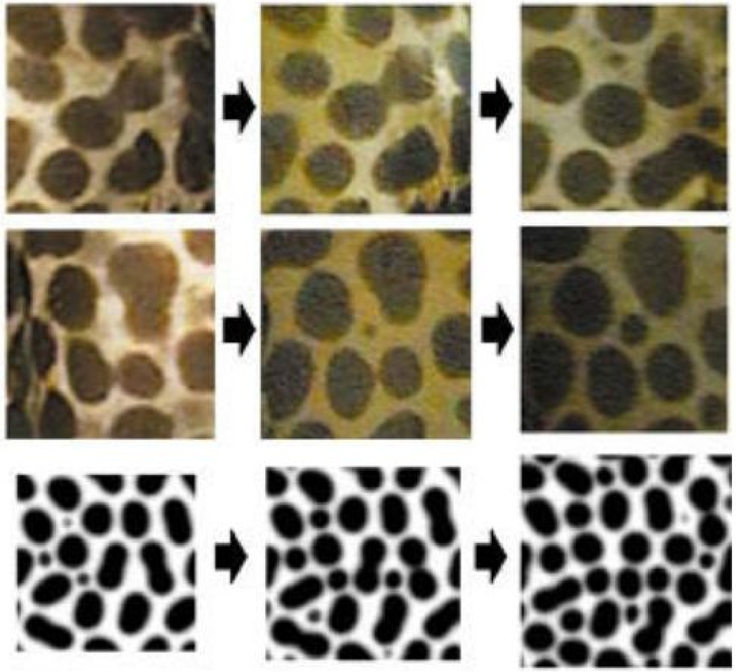
Ocapi

Guepardo

Formação de Manchas em Animais

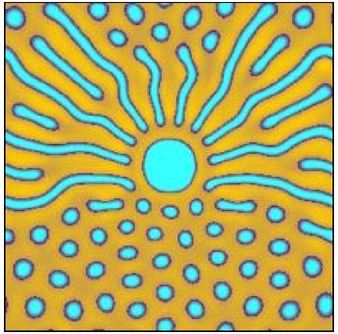
- Alterações nas manchas ao longo do tempo são reproduzidas pelo modelo

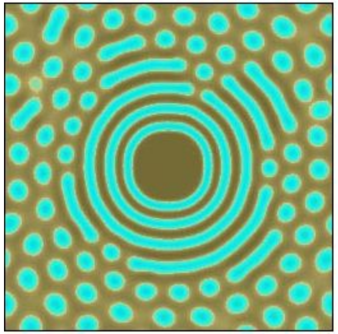


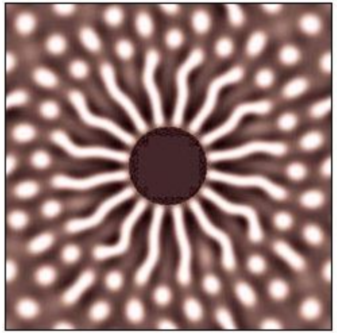


Formação de Manchas em Animais

- Teoria de Murray: prova irrefutável







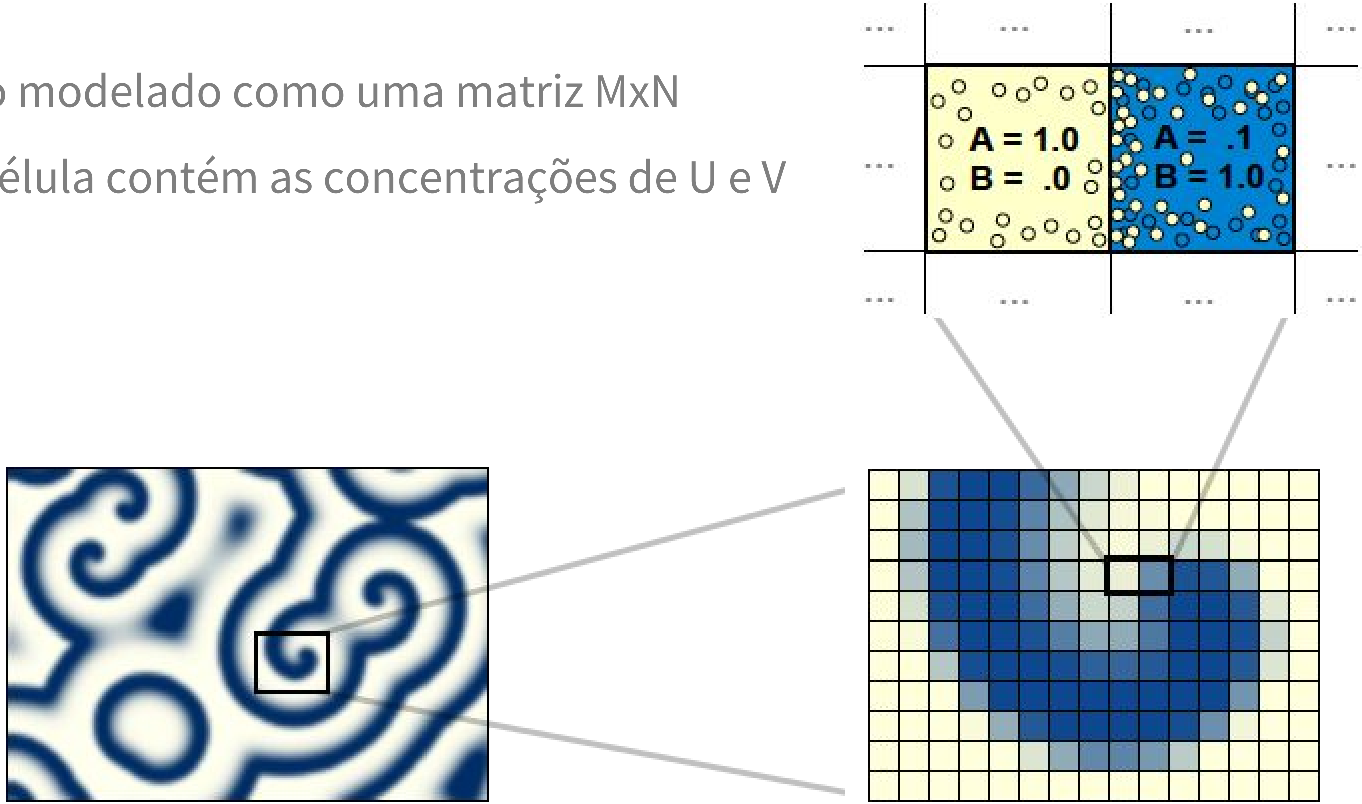
Solução numérica

- Discretização do tempo e do espaço
- Solução por método do passo único:
  - Euler explícito
  - Runge-Kutta de 2ª ordem
  - Runge-Kutta de 4ª ordem
- Aproximação do laplaciano:

$$\begin{bmatrix} 0.05 & 0.20 & 0.05 \\ 0.20 & -1.00 & 0.20 \\ 0.05 & 0.20 & 0.05 \end{bmatrix}$$

Solução numérica

- Espaço modelado como uma matriz MxN
- Cada célula contém as concentrações de U e V



Euler explícito

Sejam:

$$f_u(u,v) = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u)$$

$$f_v(u,v) = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v$$

O Euler explícito atualiza os valores *U* e *V* da seguinte forma:

$$u' = u + f_u(u,v)\Delta t$$

$$v' = v + f_v(u,v)\Delta t$$

Runge-Kutta de 2ª ordem

O RK2 atualiza os valores *U* e *V* da seguinte forma:

$$u' = u + (u_1 + u_2)\frac{\Delta t}{2}$$

$$v' = v + (v_1 + v_2)\frac{\Delta t}{2}$$

$$u_1 = f_u(u, v) \qquad u_2 = f_u(u + u_1\Delta t, v + v_1\Delta t)$$

$$v_1 = f_v(u, v) \qquad v_2 = f_u(u + u_1\Delta t, v + v_1\Delta t)$$

Runge-Kutta de 4ª ordem

O RK4 atualiza os valores *U* e *V* da seguinte forma:

$$u' = u + (u_1 + 2u_2 + 2u_3 + u_4)\frac{\Delta t}{6}$$

$$v' = v + (v_1 + 2v_2 + 2v_3 + v_4)\frac{\Delta t}{6}$$

$$u_1 = f_u(u, v)$$

$$v_1 = f_v(u, v)$$

$$u_2 = f_u\left(u + u_1\frac{\Delta t}{2}, v + v_1\frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$v_2 = f_v\left(u + u_1\frac{\Delta t}{2}, v + v_1\frac{\Delta t}{2}\right)$$

Runge-Kutta de 4ª ordem

$$u_3 = f_u\left(u + u_2\frac{\Delta t}{2}, v + v_2\frac{\Delta t}{2}\right)$$

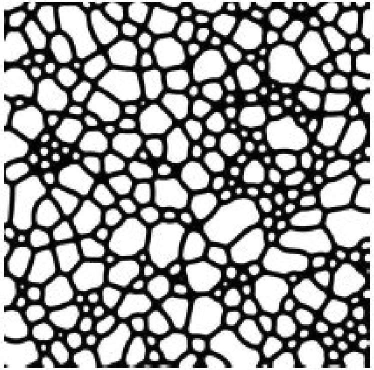
$$v_3 = f_v\left(u + u_2\frac{\Delta t}{2}, v + v_2\frac{\Delta t}{2}\right)$$

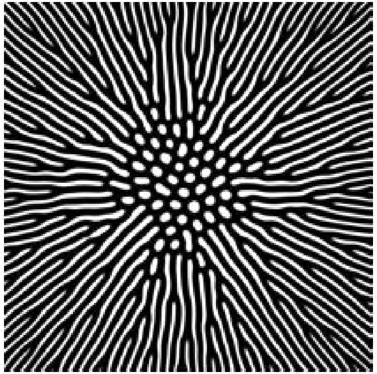
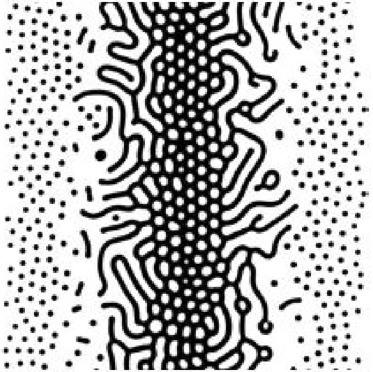
$$u_4 = f_u(u + u_3\Delta t, v + v_3\Delta t)$$

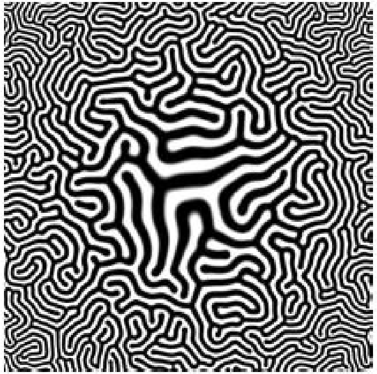
$$v_4 = f_v(u + u_3\Delta t, v + v_3\Delta t)$$

Resultados (dos outros)

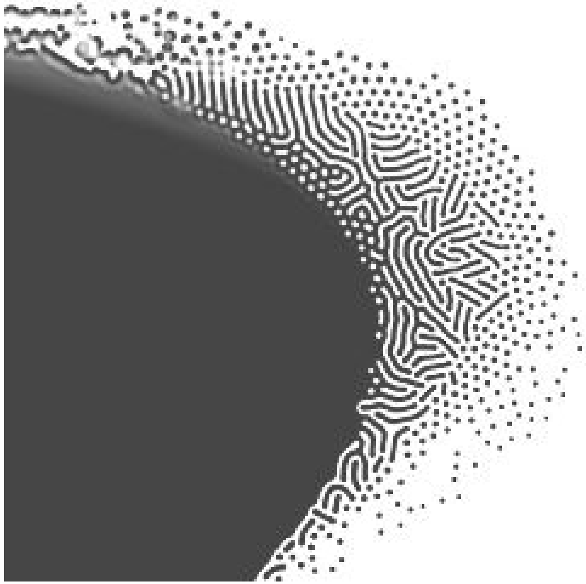


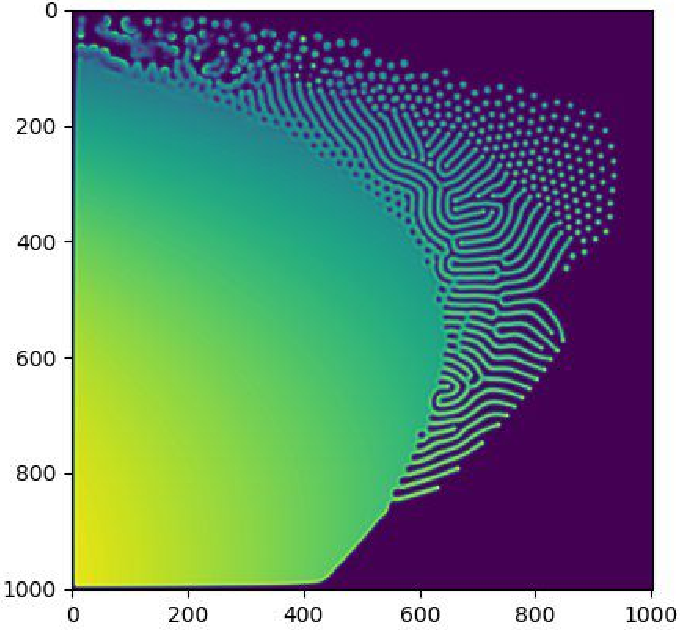




Resultados





Resultados

Demonstração

Referências

- https://en.wikipedia.org/wiki/Reaction%E2%80%93diffusion_system
- Karl Sims. http://www.karlsims.com/rd.html
- Robert Munafo. http://www.mrob.com/pub/comp/xmorphia/index.html
- http://www.algosome.com/articles/reaction-diffusion-gray-scott.html
- https://pmneila.github.io/jsexp/grayscott/
- https://www.wired.com/2011/02/turing-patterns/