Simulación del proceso de Markov asociado al sistema SKT conservativo de difusión cruzada

Simulación Estocástica

Benjamin Bórquez
Vicente Poblete

Universidad de Chile
FCFM
DIM

22 Diciembre 2022

Contexto

Buscamos modelar la interacción entre dos especies animales que conviven en un determinado ecosistema espacio-temporal. Para esto consideramos funciones u y v que representan, para una variable espacial ($\mathbb{R}^n$) y una temporal ($\mathbb{R}_+$), la densidad de población de cada especie en ese lugar y tiempo.

$$(SKT)\begin{cases}\partial_t u - \Delta(d_1 u + a_{11}u^2 + a_{12}uv) = u(r_1 - s_{11}u - s_{12}v)\\ \partial_t v - \Delta(d_2 v + a_{21}uv + a_{22}v^2) = v(r_2 - s_{21}u - s_{22}v)\end{cases}$$

Este modelo fue propuesto por Shigesada, Kawasaki y Teramoto (SKT), con el fin de describir especies en competencia con difusión y repulsión local.

Soluciones a SKT general

- En [4] desarrollan condiciones suficientes sobre los coeficientes para existencia de soluciones.
- Luego, en [1] y [2] Amann aproxima el problema desde la perspectiva de sistemas parabólicos cuasilineales genéricos para dar existencia de soluciones locales regulares y un criterio para determinar si son globales.
- Sin embargo, la pregunta de existencia global al sistema general sigue abierta (09/2021).
- Otra posibilidad es atacar el problema sacrificando regularidad y trabajar en base a soluciones débiles. En [3] se llega a resultados de existencia global para soluciones débiles.

SKT conservativo

Entendemos por sistema SKT conservativo aquel que no considera una variación en la cantidad de individuos de ninguna de las dos especies en el tiempo. Además, asumimos que los coeficientes de difusión cuadrática a_{ii} son también 0 para simplificar el problema. Así, queda el sistema $(SKT)_C$ de la forma:

$$(SKT)_C \begin{cases} \partial_t u - \Delta(d_1 u + a_{12} uv) = 0 \\ \partial_t v - \Delta(d_2 v + a_{21} uv) = 0 \end{cases}$$

Donde los coeficientes d_i y a_{ij} son positivos.

Modelo Estocástico

Para aproximar la solución al sistema conservativo, [5] propone un proceso estocástico que describe el sistema microscópico. Consideremos una discretización del espacio, de tamaño M que serán los posibles sitios donde la población se puede ubicar. El proceso es una cadena de Markov a tiempo continuo $(U(t), V(t))_{t\geq 0}$ que toma valores en $\mathbb{N}^M \times \mathbb{N}^M$. Cada individuo de cada especie sigue un paseo aleatorio. La dinámica de saltos es tal que para todo vector $(u, v) \in \mathbb{N}^M \times \mathbb{N}^M$, las transiciones son:

$$
\begin{aligned}
u &\longrightarrow u + (e_{i+\theta} - e_i), \text{ a tasa } 2u_i(d_1 + a_{12}v_i) \\
v &\longrightarrow v + (e_{i+\theta} - e_i), \text{ a tasa } 2v_i(d_2 + a_{21}u_i)
\end{aligned}
$$

Donde $(e_i)_{1\leq i\leq M}$ es la base canónica de $\mathbb{R}^M$.
Consideraremos el espacio como un toro discreto, es decir los sitios $i = 1$ e $i = M$ son vecinos.
Es por esto que $e_0 = e_M$ y $e_1 = e_{M+1}$
Además, $\theta \in \{-1, 1\}$ con igual probabilidad.

Implementación del modelo

Dado que nos interesa ver el comportamiento de este modelo estocástico, es esencial poder visualizar los saltos de la cadena de Markov. Para esto obtuvimos algo similar (más no igual) a la Q-matriz asociada a la cadena y en base a ella dedujimos la de saltos. Notar que es una cadena de Markov a tiempo continuo no homogénea.

$$u \longrightarrow u + (e_{i+\theta} - e_i), \text{ a tasa } 2u_i(d_1 + a_{12}v_i)$$
$$v \longrightarrow v + (e_{i+\theta} - e_i), \text{ a tasa } 2v_i(d_2 + a_{21}u_i)$$

Implementación del modelo

La implementación se basa en la siguiente observación: para (u, v) un estado cualquiera de poblaciones (indexado en M), posee hastas $4M$ vecinos posibles:

- O bien cambia u o bien v: dos posibilidades de especie w
- Para cada especie, puede cambiar en uno de los M sitios en los que se puede ubicar.
- Una vez escogido la especie w y el sitio i, puede ocurrir que la especie se desplace al sitio siguiente o al anterior: $\theta \in \{\pm 1\}$

Por lo que basta calcular las tasas de los $4M$ vecinos y no de toda la Q-matriz, que sería de gran tamaño.

tasas(w, i, u_0, v_0, a, d)

1. Recibe especie $w \in \{0, 1\}$, sitio $i \in \{0, ..., M-1\}$, vectores iniciales $u_0, v_0 \in \mathbb{R}^M$, parámetros $a, d \in \mathbb{R}^2_+$.
2. Si $w = 0$:
   - Retorna $2u_i(d_1 + a_{12}v_i)$
3. Si $w = 1$:
   - Retorna $2v_i(d_2 + a_{21}u_i)$
4. Si no, retorna 0.

tasaTotal(u_0, v_0, a, d)

Luego, necesitamos la diagonal de la Q-matriz y para esto definimos la función tasaTotal:

1. Recibe vectores iniciales $u_0, v_0 \in \mathbb{R}^M$ y parámetros $a, d \in \mathbb{R}^2_+$.
2. $S = 0$
3. Para $w \in \{0, 1\}$:
    1. Para $i \in \{0, ..., M - 1\}$:
        - $S = S + 2\cdot$ tasas(w, i, u_0, v_0, a, d)
4. Retorna S.

mSaltos(u_0, v_0, a, d)

Para obtener las tasas a todos los vecinos de un estado inicial (u_0, v_0) hicimos la función mSaltos:

1. Recibe vectores iniciales $u_0, v_0 \in \mathbb{R}^M$ y parámetros $a, d \in \mathbb{R}^2_+$.
2. Define R como un array de ceros de dimensiones $(2, M, 2)$.
3. Define q como tasatotal(u_0, v_0, a, d).
4. Si $q \neq 0$:
    1. Para $w \in \{0, 1\}$:
        1. Para $i \in \{0, ..., M-1\}$:
            1. Para $\theta \in \{0, 1\}$:

               $R[w, i, \theta] =$ tasas(w, i, u_0, v_0, a, d) / q
5. Retorna R.

saltos(u_0, v_0, a, d)

Finalmente, la matriz de saltos asociada a la cadena de Markov está dada por la función salto:

1. Recibe vectores iniciales $u_0, v_0 \in \mathbb{R}^M$ y parámetros $a, d \in \mathbb{R}^2_+$.
2. Define U como una uniforme en $[0, 1]$ y $p = 0$.
3. Define R como mSaltos(u_0, v_0, a, d).
4. Define $u_f = u_0, v_f = v_0$.
5. Para $w \in \{0, 1\}$:
   1. Para $i \in \{0, ..., M-1\}$:
      1. Para $\theta \in \{0, 1\}$:
         $p = p + R[w, i, \theta]$
         Si $p > U$:
            $u_f, v_f = \text{mover}(uf, vf, w, i, \theta)$
6. Retorna u_f, v_f.

MarkovChain(u_0, v_0, T, a, d)

Con todas estas funciones auxiliares, es fácil construir la cadena de Markov a tiempo continuo. ∞ es un número muy grande para efectos de guardar los saltos ($\infty \approx 10^7$)

1. Recibe (u_0, v_0) estado inicial determinista, a, d parámetros y T tiempo máximo a simular.
2. $x_0 \leftarrow [u_0, v_0]$
3. $tsaltos \leftarrow array(\infty)$; $X \leftarrow array((2, M, \infty))$
4. $t \leftarrow 0$; $n \leftarrow 0$
5. Mientras $n < \infty, tsaltos[n] < T$:
   - $u, v = X[0, :, n], X[1, :, n]$
   - $t_{exp} \leftarrow exp(1/tasaTotal(u, v))$
   - $n = n + 1$; $t = t + t_{exp}$
   - $u_f, v_f \leftarrow salto(u, v, a, d)$
   - $X[0, :, n] = u_f$; $X[1, :, n] = v_f$; $tsaltos[n] = t$
6. Retorna $X, tsaltos$ y n

Ejemplo de poblaciones por sitio

Con condiciones dadas por $M = 4, a = [3/2, 2]$ y $d = [1/2, 1/4]$, tenemos:

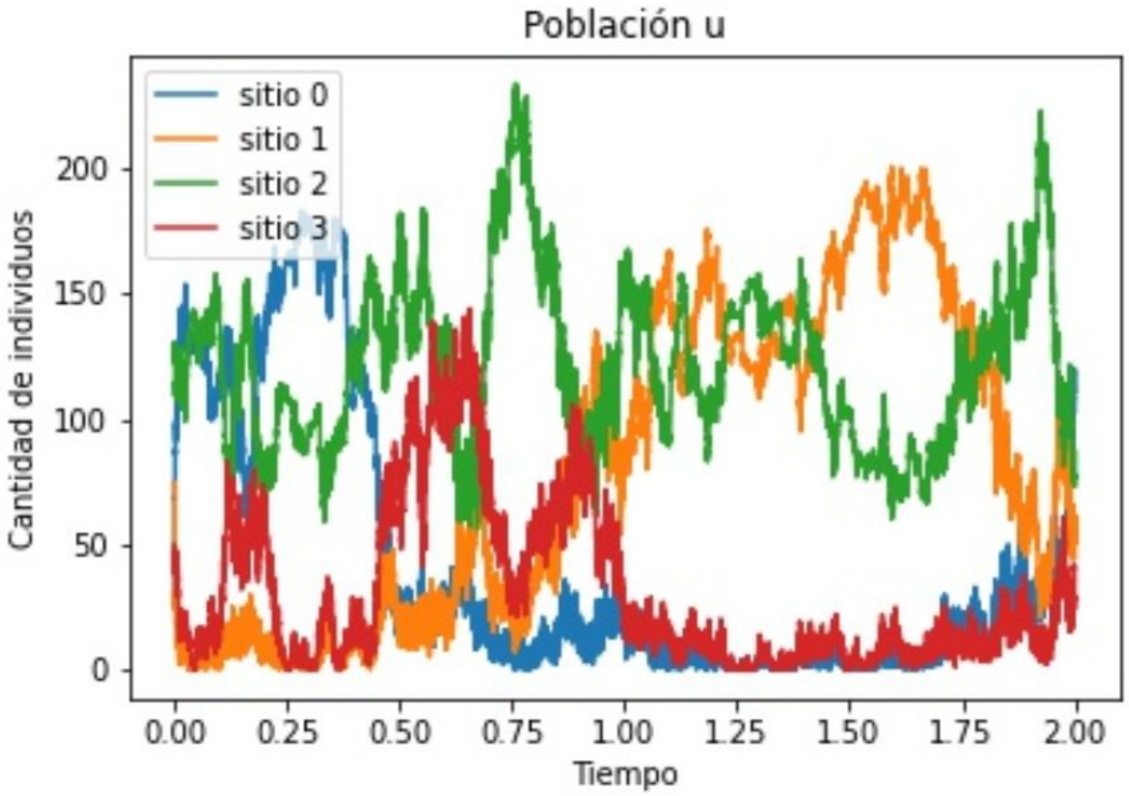


Figura: Distribución de u por sitio

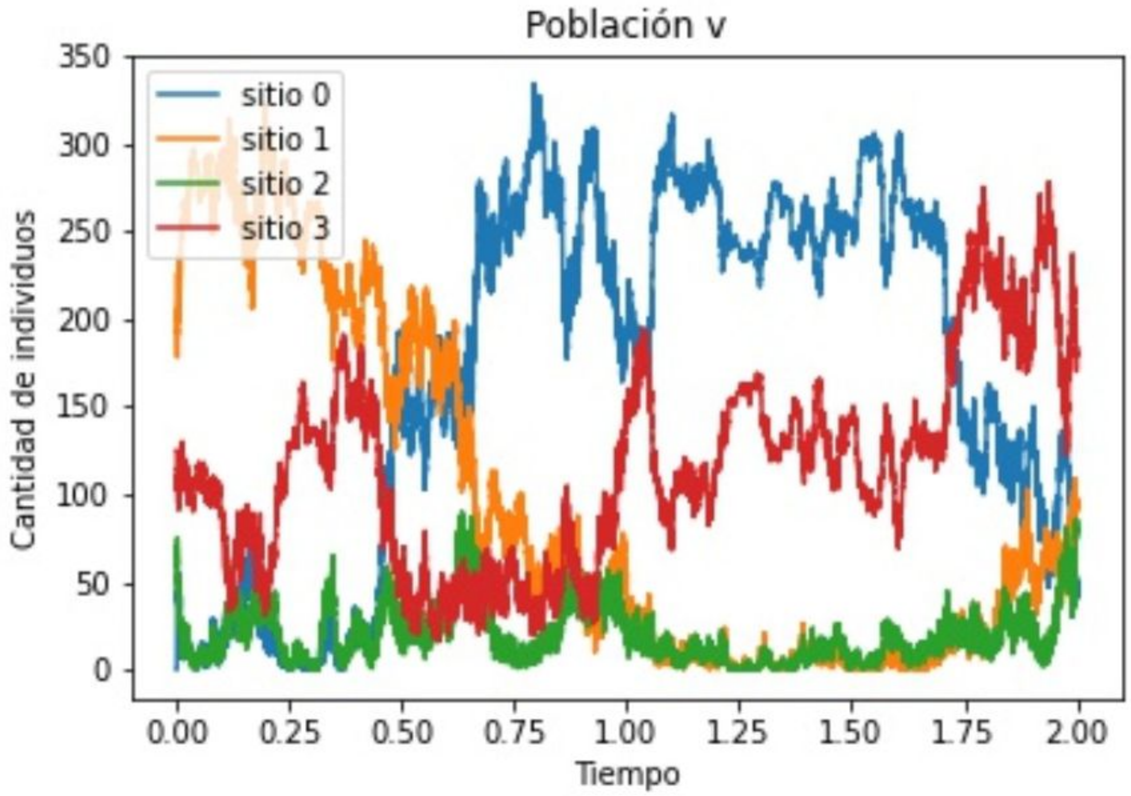


Figura: Distribución de v por sitio

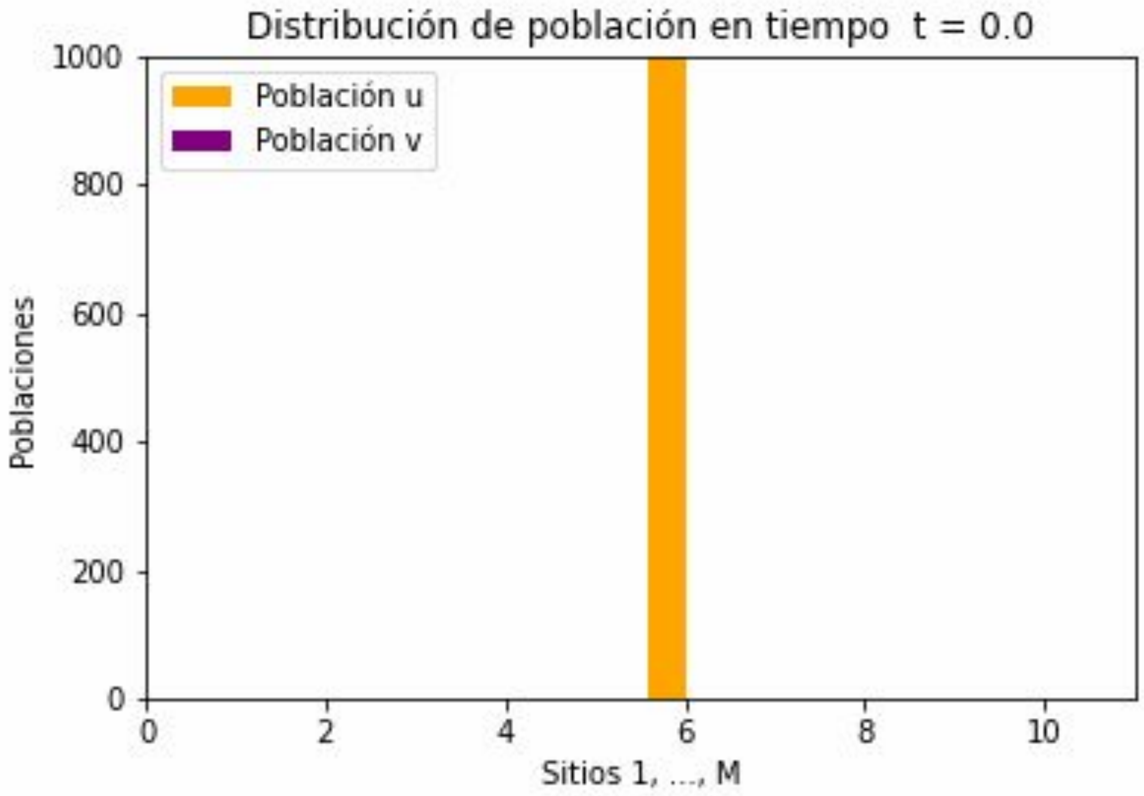
Simulando

Ahora queremos observar el comportamiento del proceso descrito anteriormente, para esto generamos diversas gráficas variando las condiciones inciales y/o los parámetros a y d.
Las condiciones a las que someteremos al proceso serán $N = 1000$, $M = 10$, $T = 5$ y:

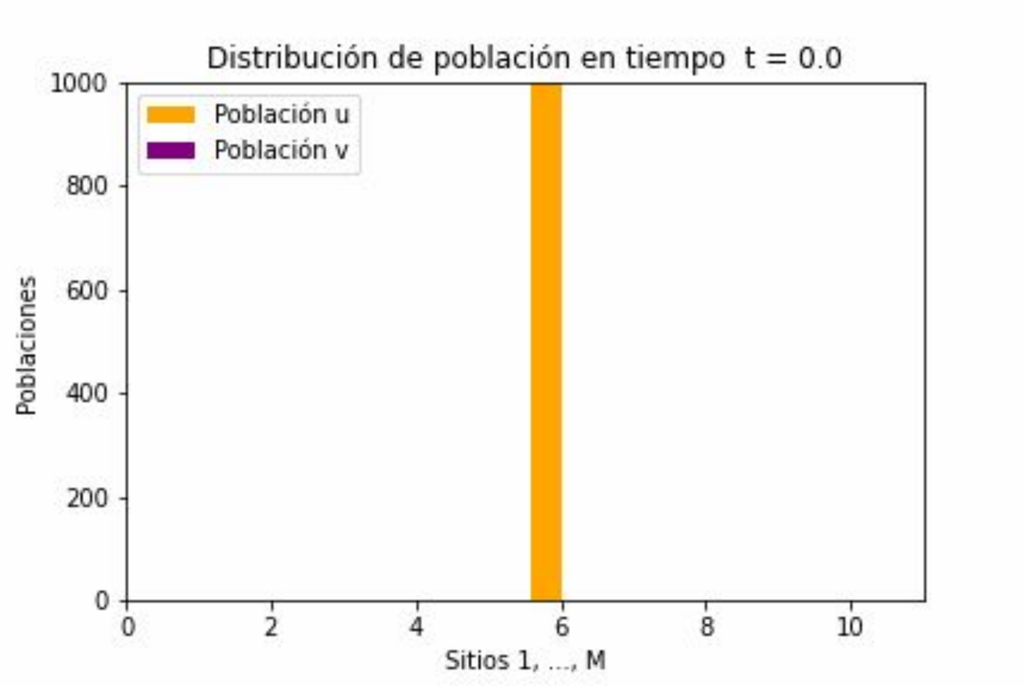
- Para ver la injerencia del parámetro d
  1. $a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$
  2. $a_{control} = [1, 1], d_G = [4, 1]$
  3. $a_{control} = [1, 1], d_C = [1/4, 1]$
- Mientras que para el parámetro a
  1. $a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$
  2. $a_G = [4, 1], d_{control} = [1, 1]$
  3. $a_C = [1/4, 1], d_{control} = [1, 1]$

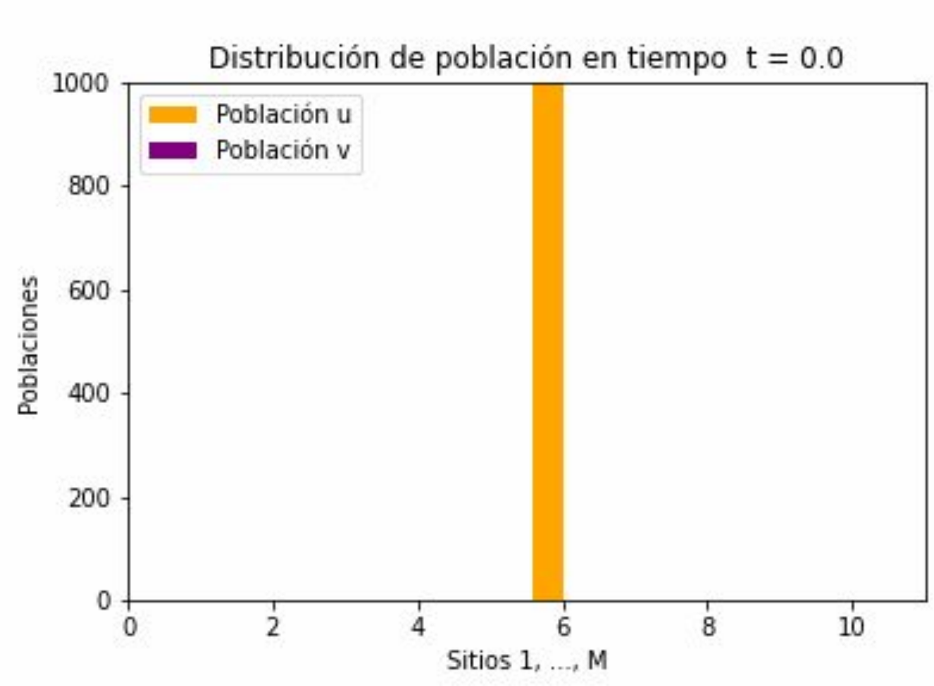
$a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$

Con condiciones iniciales dadas por $u(0) = 1000e_5$ y $v(0) = 0$, tenemos:



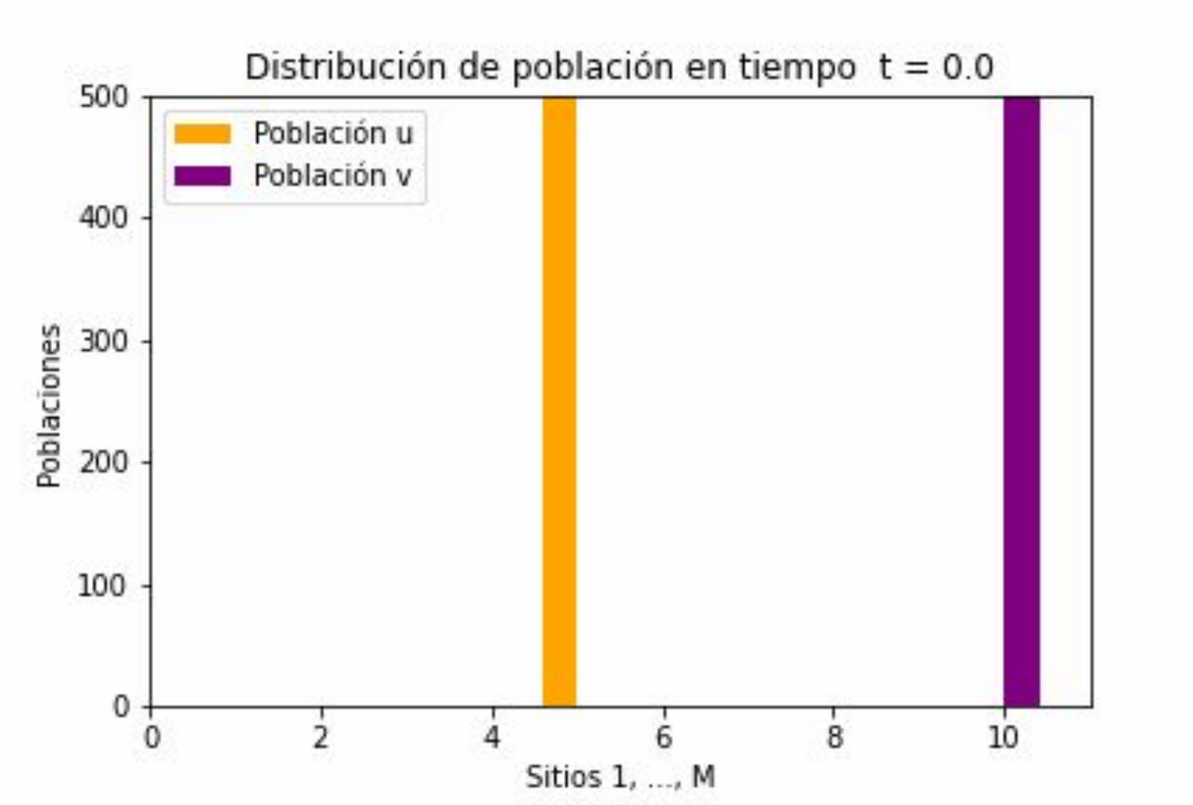
$a_{control} = [1, 1], d_G = [4, 1]$ y $a_{control} = [1, 1], d_C = [1/4, 1]$



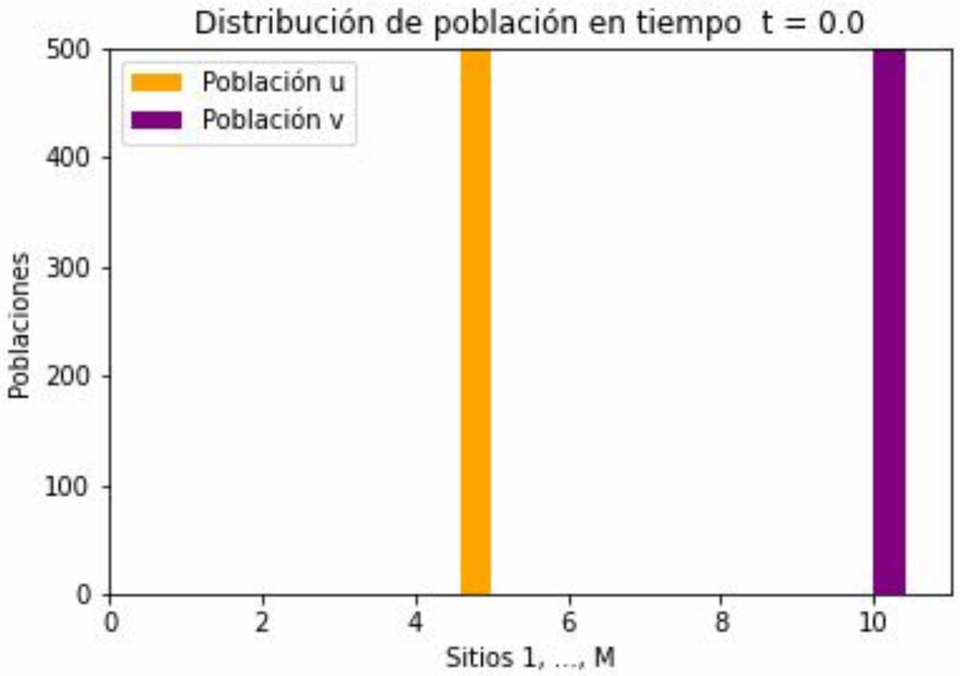


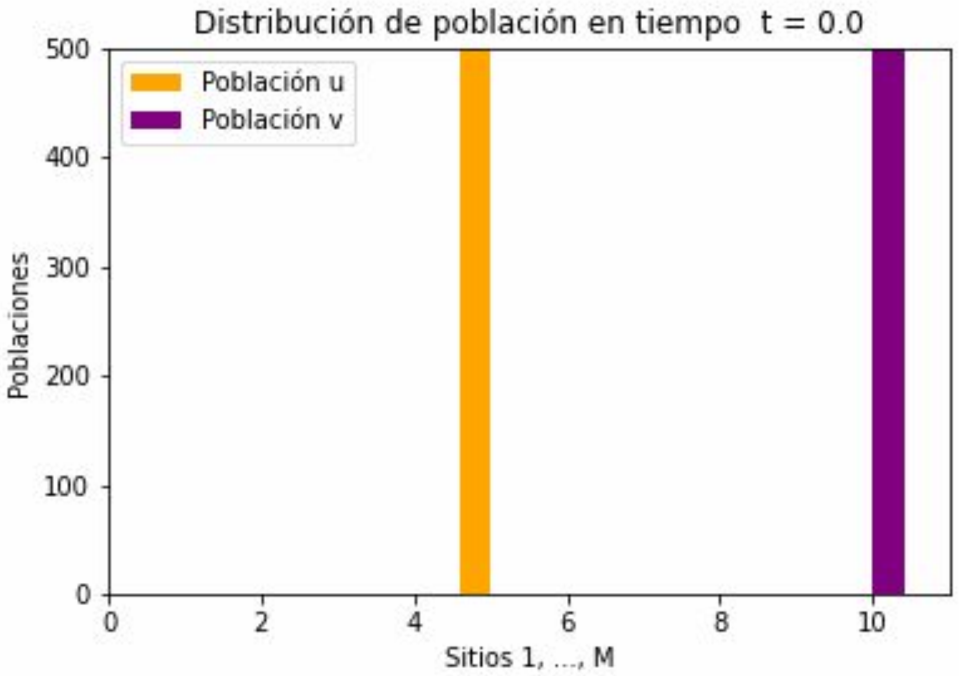
$a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$

Con condiciones iniciales dadas por $u(0) = 500e_5$, $v(0) = 500e_{10}$, tenemos:



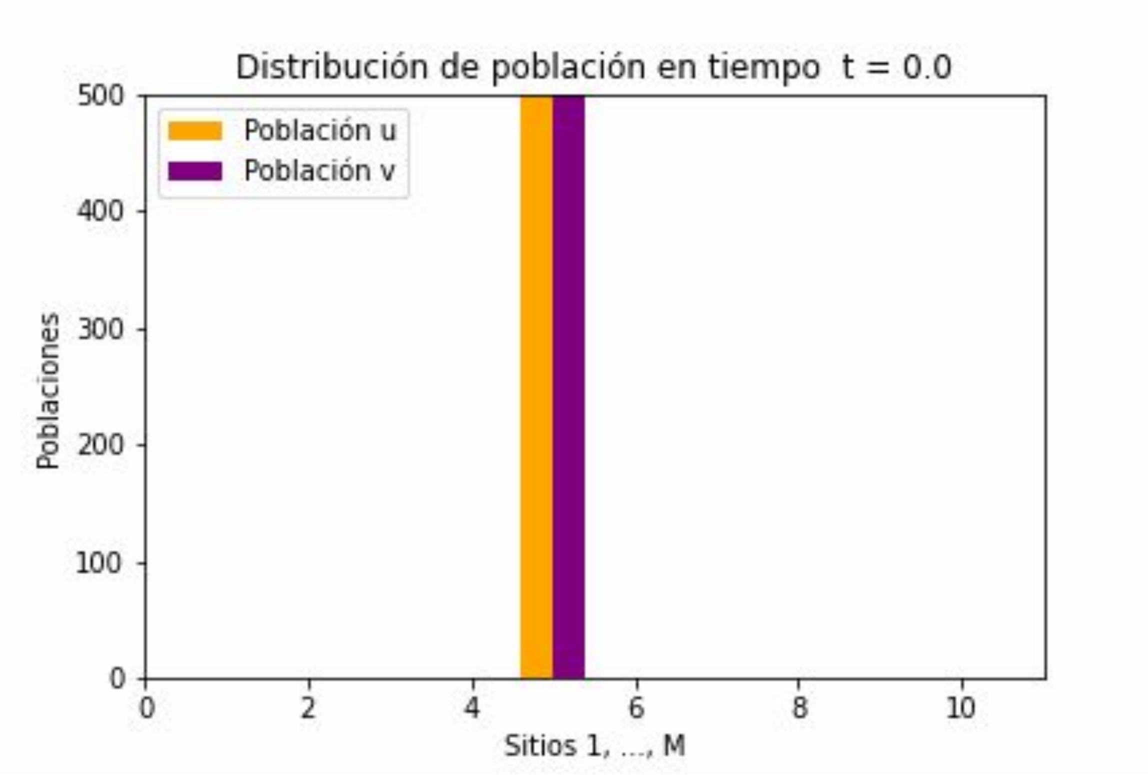
$a_{control} = [1, 1], d_G = [4, 1]$ y $a_{control} = [1, 1], d_C = [1/4, 1]$



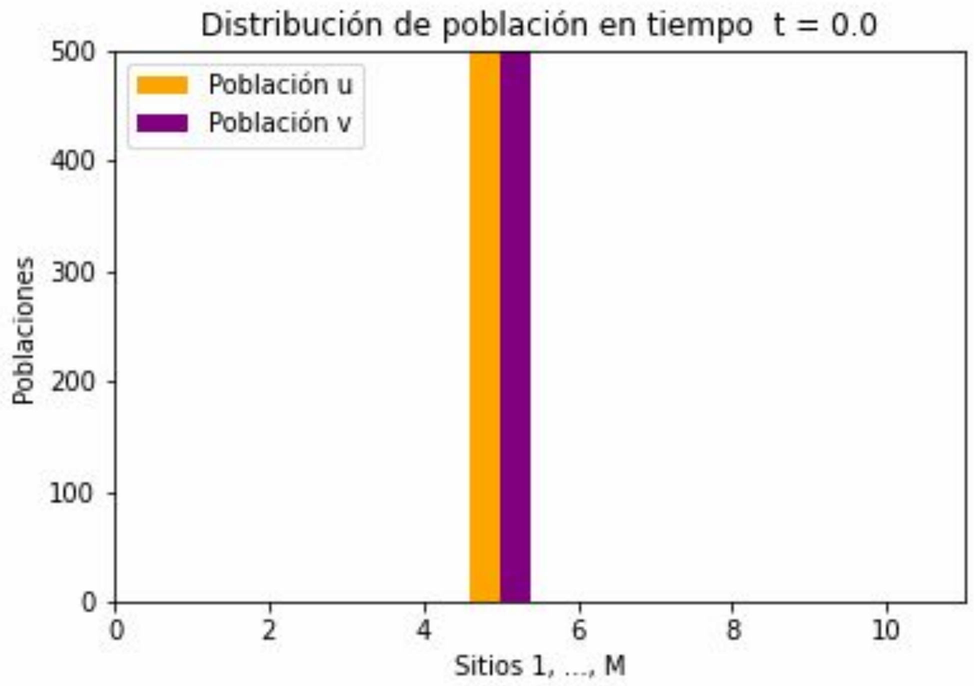


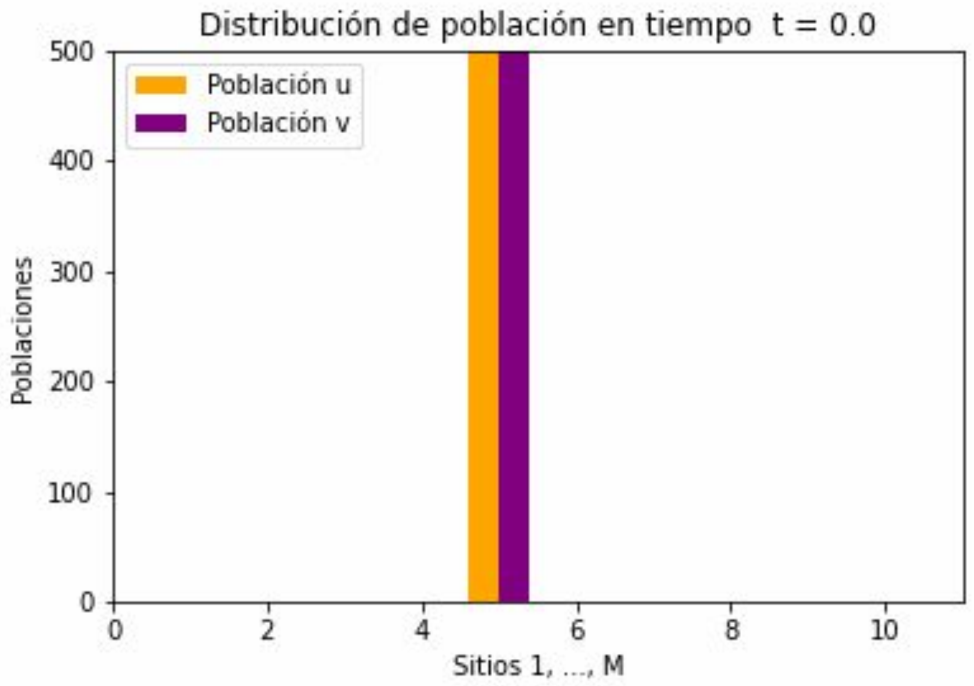
$a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$

Con condiciones iniciales dadas por $u(0) = 500e_5$, $v(0) = 500e_5$, tenemos:



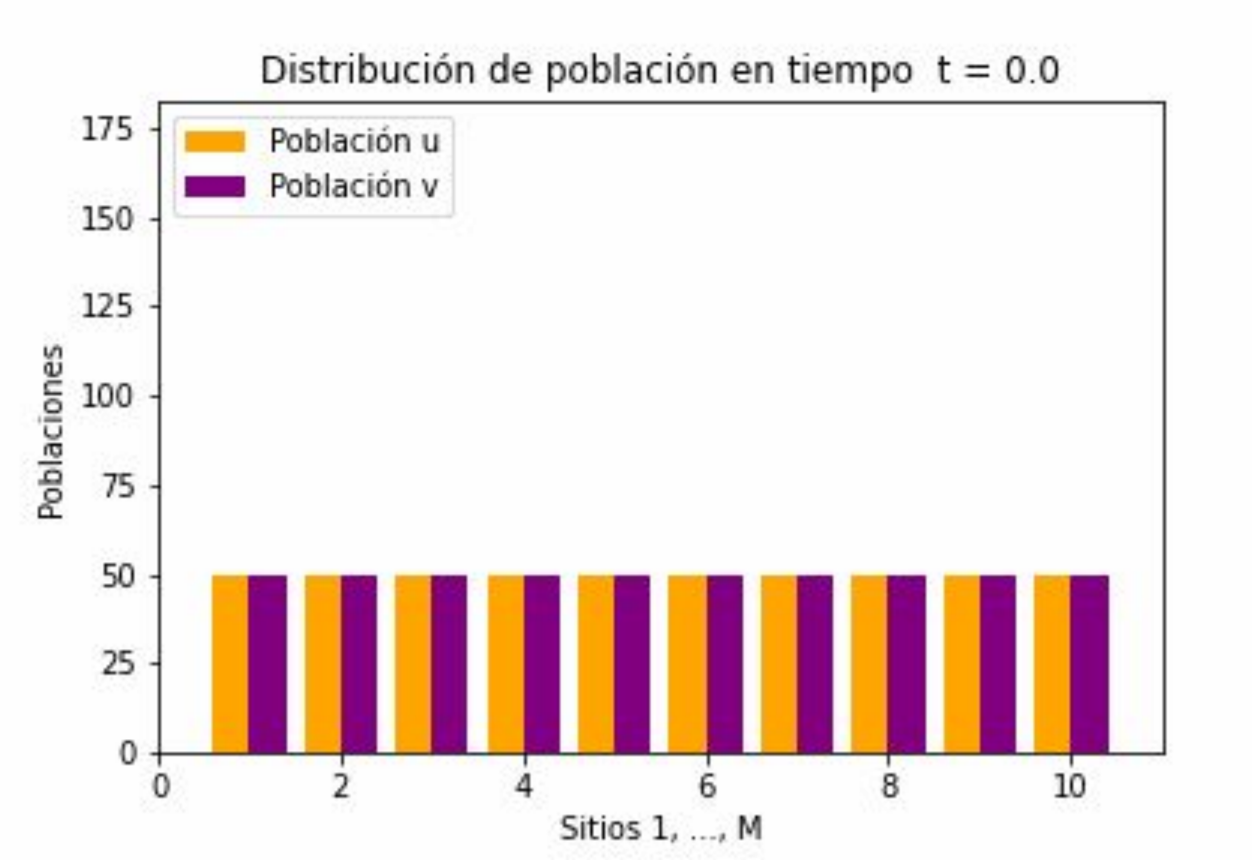
$a_G = [4, 1], d_{control} = [1, 1]$ y $a_C = [1/4, 1], d_{control} = [1, 1]$



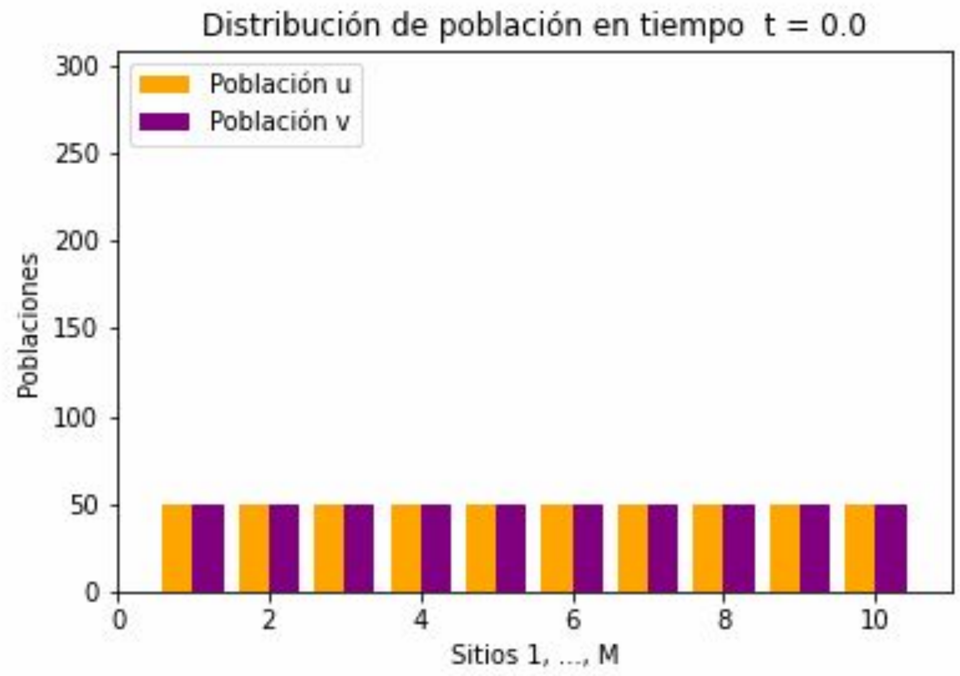


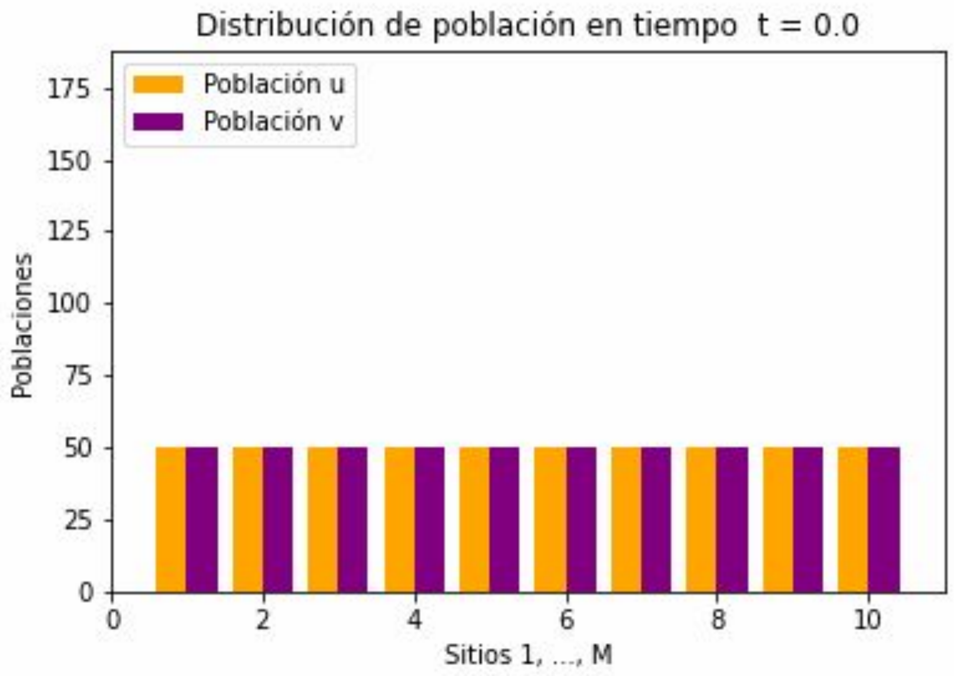
$a_{control} = [1, 1], d_{control} = [1, 1]$

Con condiciones iniciales dadas por $u(0) = v(0) = \sum_{i=1}^{M} 50e_i$, tenemos:



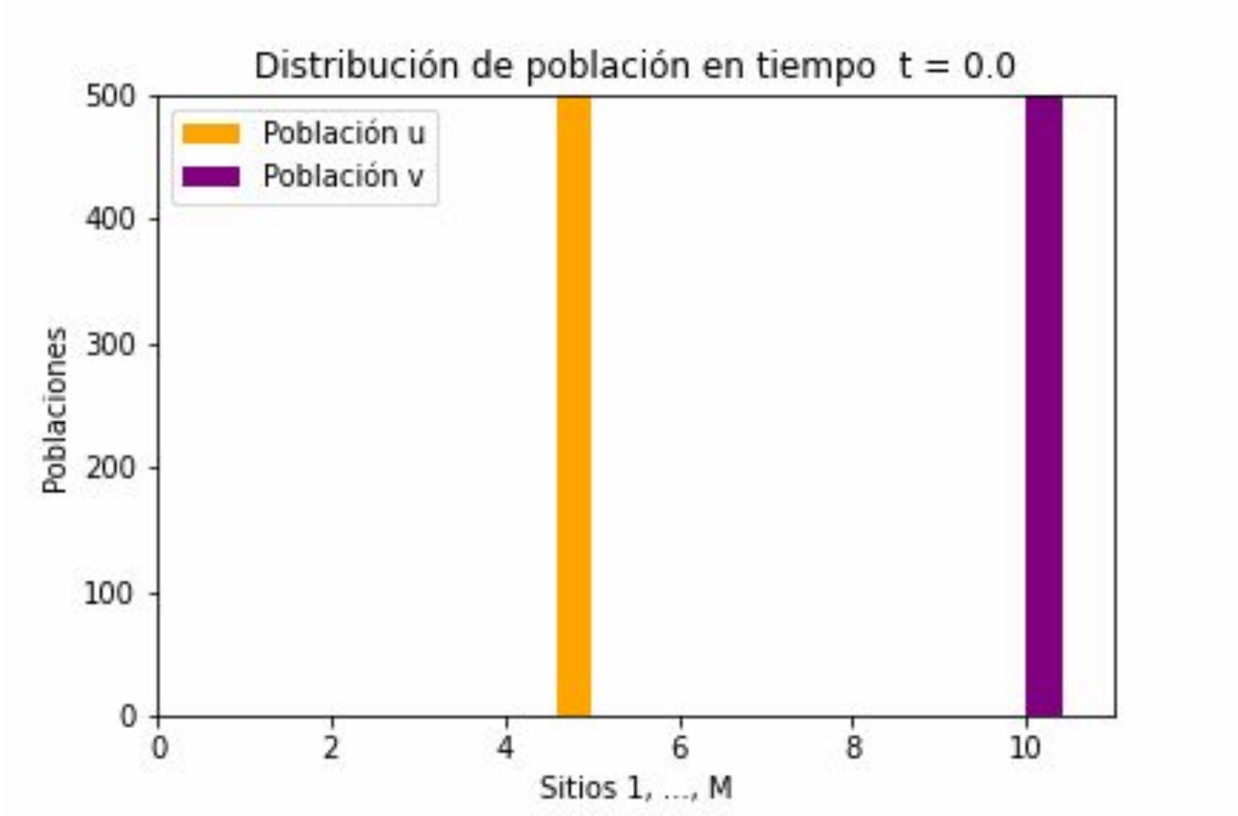
$a_G = [4, 1], d_{control} = [1, 1]$ y $a_C = [1/4, 1], d_{control} = [1, 1]$



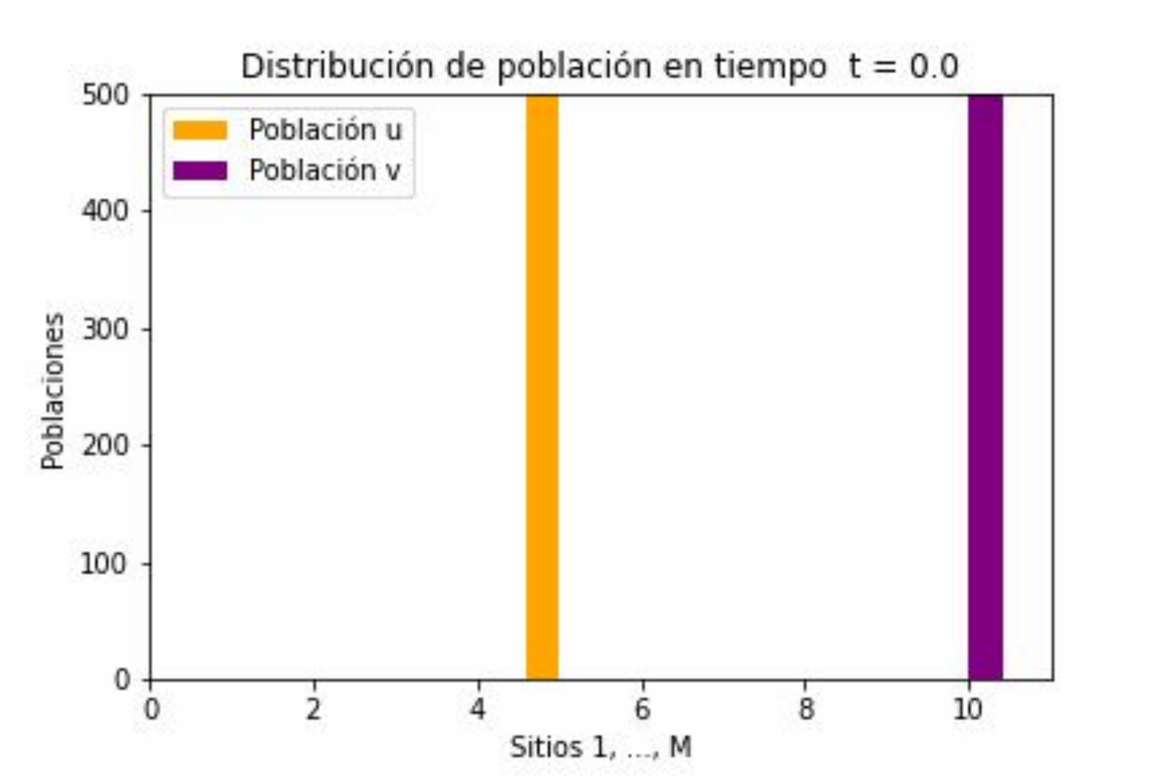


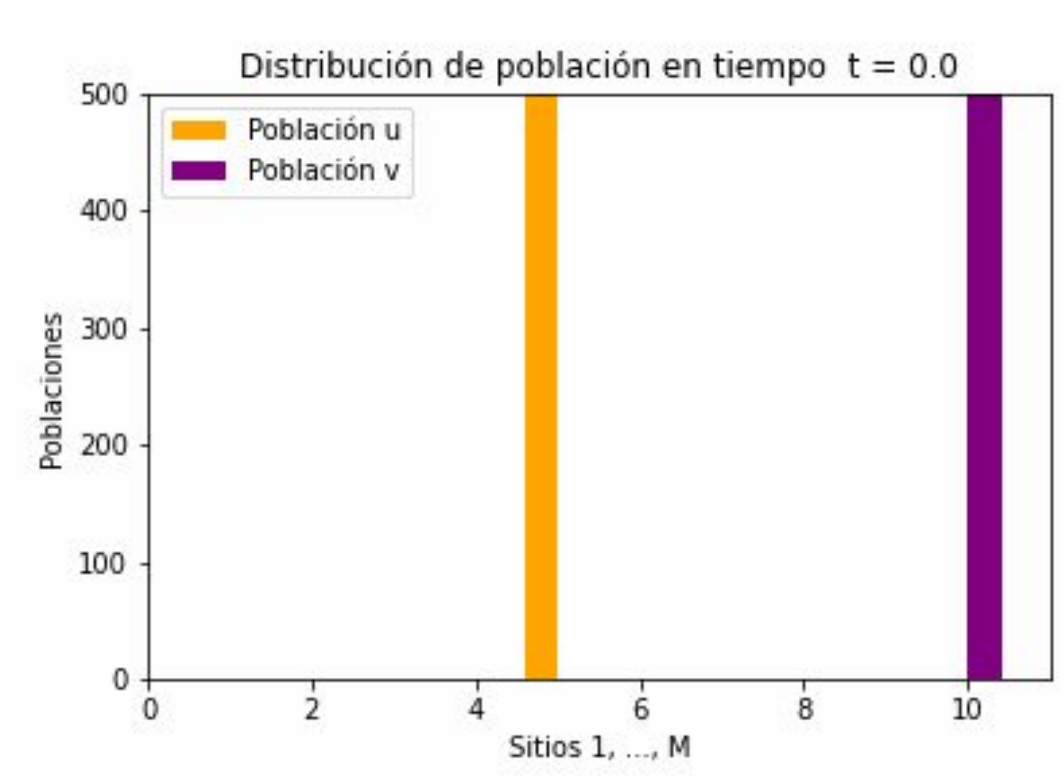
$a_{control} = [1,1], d_{control} = [1,1]$

Con condiciones iniciales dadas por $u(0) = 500e_5$, $v(0) = 500e_{10}$, tenemos:



$a_G = [4, 1], d_{control} = [1, 1]$ y $a_C = [1/4, 1], d_{control} = [1, 1]$





Conclusión

- El proceso de Markov modela efectivamente lo esperado por un sistema de especies en difusión cruzada, para distintas configuraciones iniciales del sistema.
- Para comprobar resultados límite, se requiere de optimización en la implementación del proceso.
- Se requiere de mayor investigación del caso determinista para poder comparar numéricamente las soluciones probabilistas del sistema SKT.

Bibliografía

- [1] Herbert Amann. Dynamic theory of quasilinear parabolic equations. II. Reaction-diffusion systems. *Differential integral equations*, 3(1):13-75,1990.
- [2] Herbert Amann. Erratum: "Dynamic theory of quasilinear parabolic systems. III. Global existence"[Math. Z. 202 (1989), no. 2, 219-250; MR1013086 (90i:35125)]. Math. Z., 205(2):331, 1990.
- [3] L. Chen and A. Jüngel. Analysis of a parabolic cross-diffusion population model without self-diffusion. *J. Differential Equations*, 224(1):39–59, 2006.
- [4] Jong Uhn Kim. Smooth solutions to a quasi-linear system of diffusion equations for a certain populations model. *Nonlinear analysis*, 8(10):1121-1144, 1984.
- [5] V. Bansaye, A. Moussa and F. Muñoz-Hernández. Stability of a cross-diffusion system and approximation by repulsive random walks: a duality approach