

Patrones en ecuaciones de reacción-difusión

Javier Castro, Juan Garrido, Benjamín Jauregui

August 5, 2020

1 Introducción

2 Modelo reacciones químicas

3 Modelo evolución de bacterias

4 Conclusiones

Introducción

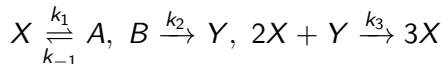
Las ecuaciones de reacción-difusión (**RD**) intentan modelar, a grandes rasgos, la interacción entre los componentes de un sistema. Estos componentes se pueden interpretar como individuos de una población, compuestos químicos, bacterias, etc. La idea es encontrar la evolución temporal de la concentración de los componentes en un dominio, el modelo típico de esta dinámica es el siguiente.

$$\partial_t U = \begin{pmatrix} d_u & 0 \\ 0 & d_v \end{pmatrix} \underbrace{\Delta U}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{R(U)}_{\text{Reaction}}$$

Donde $U = (u, v)$ es la concentración de los componentes. El dominio y condiciones de borde dependen del modelo específico.

Modelo reacciones químicas

Schnakenberg propone un modelo para estudiar la cinética de reacciones químicas con el objetivo de obtener un comportamiento cíclico. Este modelo es de la forma



De esto, se obtienen 4 ecuaciones diferenciales que al hacer el supuesto de que A y B son abundantes en el medio de la reacción, se reducen a dos ecuaciones que modelan la **reacción**. También se introduce un efecto de **difusión** en el medio.

Luego de trabajar un poco las ecuaciones se obtiene un sistema de ecuaciones **RD**

$$\partial u_t = \Delta u + \gamma(a - u + u^2 v)$$

$$\partial v_t = d\Delta v + \gamma(b - u^2 v)$$

donde $u \propto [X]$ y $v \propto [Y]$

Esquema 2D MDF

Para implementar la solución en dos dimensiones, tomaremos un dominio cuadrado de forma que la solución discreta podemos representarla como una matriz cuadrada.

- Espacio: $[0, 1] \times [0, 1]$ con discretización $(x_i, y_j) = (ih, jh)$, con $h = \frac{1}{N+1}$
- Tiempo: $[0, 1]$ y $t_i = i\Delta t$, con $\Delta t = \frac{1}{N_t}$

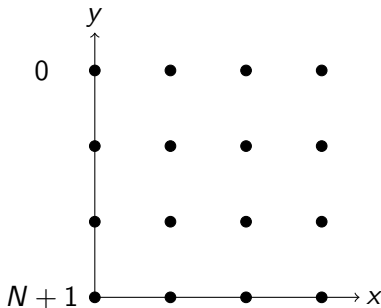


Figure: Discretización espacial

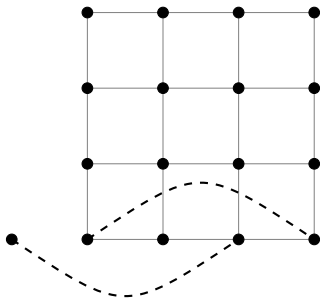
Para ahorrar notación se presentará el esquema de discretización para una ecuación de la forma $\partial_t u = d\Delta u + R(u)$. Se propone el siguiente esquema explícito

$$U^{n+1} = U^n + \frac{d\Delta t}{h^2}(AU^n + U^n B) - \Delta t R(U^n)$$

Este esquema permite simplificar la programación al solamente trabajar con matrices de tamaño $N \times N$. Las matrices A, B resultan ser tridiagonal con pequeñas modificaciones que dependerán de las condiciones de borde.

Resultados

Los resultados que mostraremos de este modelo se obtendrán a partir condiciones de borde periódicas en ambas direcciones.



También se considerará una discretización temporal de tamaño $N_t = 3 \cdot 10^5$ de $[0, 1]$ y espacial de tamaño $N = 80$ de $[0, 1] \times [0, 1]$.

Resultados

Se tomarán parámetros fijos $d = 10$, $a = 0.1$, $b = 0.9$ y γ tomará valores en $[1000, 9000]$. La idea es ver como varían los patrones a medida que cambia el valor de γ , para esto consideraremos condiciones iniciales aleatorias tanto para u como para v . Esto es, a cada nodo se le asigna un número aleatorio en $[0, 1]$.

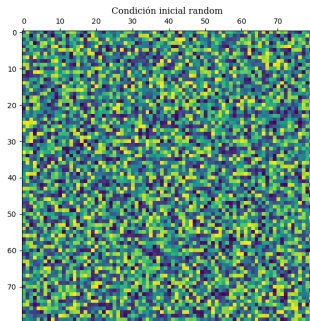


Figure: Condición inicial aleatoria

Resultados

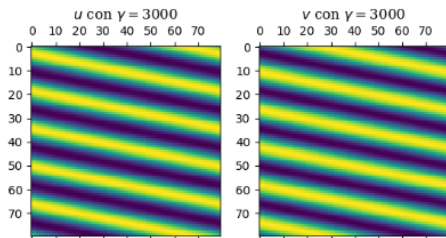


Figure: $\gamma = 3000$

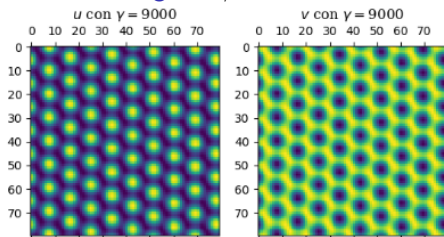


Figure: $\gamma = 9000$

Podemos observar la generación de dos tipos de patrones bien definidos: rayas (**R**) y puntos (**P**).

$\gamma \times 10^3$	6	6.2	6.5	7	7.2	7.5	8	9
R	✓	✓				✓	✓	
P			✓	✓	✓			✓

Table: Patrones en función de γ

Resultados

Ahora consideramos una condición inicial determinista con una concentración inicial en el centro del dominio.

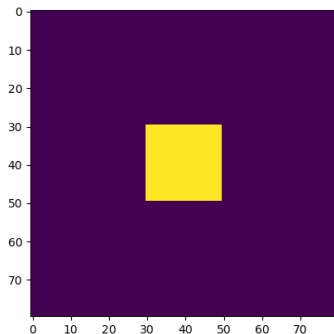


Figure: Condición inicial

Resultados

Para esta condición inicial no se observa generación de patrones **R** para los valores de γ considerados.

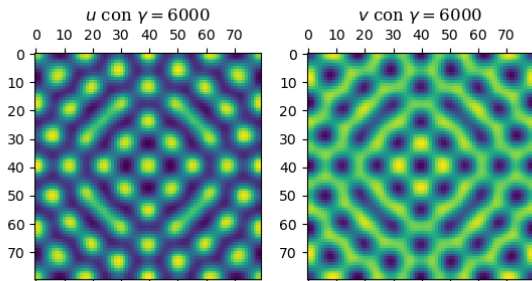


Figure: $\gamma = 6000$

Modelo crecimiento de bacterias

Modelo de crecimiento bacterial sobre un dominio $[0, \infty) \times \Omega$:

$$u_t = \nabla(d(u+w)\nabla u) + uv - a(u, v)u$$

$$v_t = \Delta v - uv$$

$$w_t = a(u, v)u$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad v(0, x) = v_0, \quad w(0, x) = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}(t, 0) = \frac{\partial v}{\partial n}(t, 0) = 0$$

Donde u, w representan la densidad de bacterias activas e inactivas, respectivamente y v es la concentración de nutrientes, d representa la motilidad de las bacterias activas que se asumirá constante y $a(u, v)$ es la tasa de conversión de bacterias activas a inactivas. Se considera

$$a(u, v) = \frac{\alpha}{(1+u/a_1)(1+v/a_2)}$$

Theorem

Si Ω es un dominio acotado, entonces en el modelo de crecimiento bacterial con condiciones de borde de flujo nulo se cumple que existe una constante $v_\infty > 0$ tal que $\forall x \in \Omega$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (u(t, x), v(t, x)) = (0, v_\infty)$$

Implementación - Caso 1D ($\Omega = [0, D]$)

En este caso se usó diferencias finitas implementando un esquema explícito. Si $\lambda = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, entonces

$$\begin{cases} u_j^{n+1} &= d\lambda u_{j+1}^n + (1 - 2d\lambda)u_j^n + d\lambda u_{j-1}^n + (\Delta t)u_j^n(a(u_j^n, v_j^n) - v_j^n) \\ v_j^{n+1} &= \lambda v_{j+1}^n + (1 - 2\lambda)v_j^n + \lambda v_{j-1}^n + (\Delta t)u_j^n v_j^n \\ w_j^{n+1} &= w_j^n + (\Delta t)a(u_j^n, v_j^n)u_j^n \end{cases}$$

Con las condiciones iniciales: $u_j^0 = u_0(j\Delta x)$, $v_j^0 = v_0$, $w_j^0 = 0$ y las condiciones de bordes se convierten en $u_1 = u_{-1}$, $u_{N-1} = u_{N+1}$ y $v_1 = v_{-1}$, $v_{N-1} = v_{N+1}$.

Usamos $\alpha = 1$, $a_1 = a_2 = 1$, $\Delta t = 1/1000$, $\Delta x = 1/20$ y $u_0 = \mathbb{1}_{\{0\}}$.

Resultados 1D: $d = 0.05$ y $v_0 = 0.129$

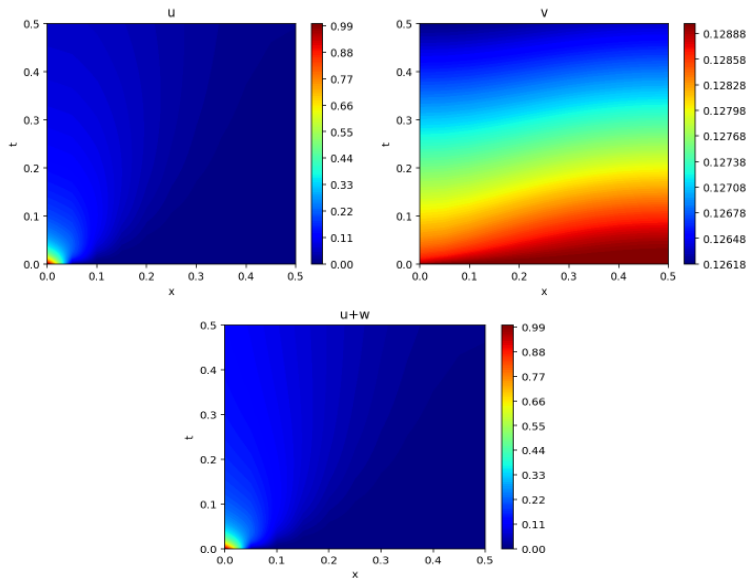


Figure: Caso 1D, $d = 0.05$

Resultados 1D: $d = 0.1$ y $v_0 = 0.117$

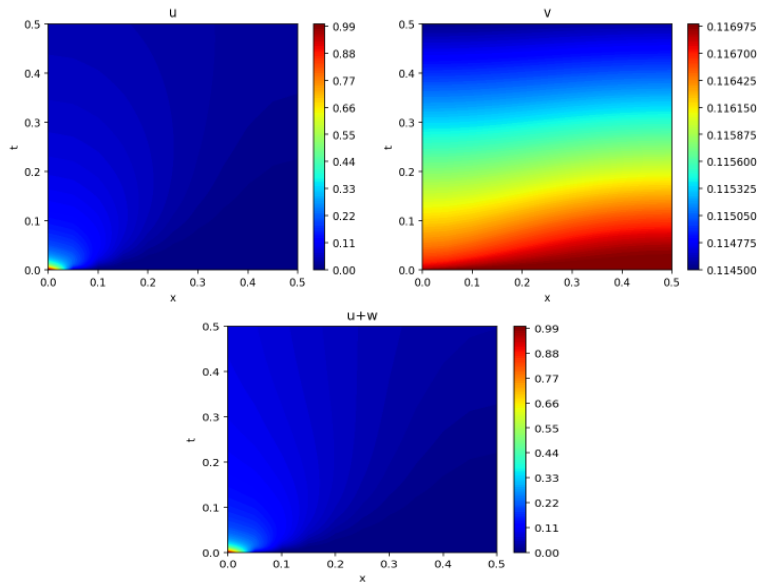


Figure: Caso 1D, $d = 0.1$

Implementación - Caso 2D

Para modelar el modelo en 2D, se usó el software **Fenics**, usando la formulación variacional del modelo

$$\begin{cases} \int \frac{u^t - u^{t-1}}{\Delta t} t_1 &= -d \int \nabla u^t \nabla t_1 + \int u^t v^t t_1 - \int a(u^t, v^t) u^t t_1 \\ \int \frac{v^t - v^{t-1}}{\Delta t} t_2 &= - \int \nabla v^t \nabla t_2 - \int u^t v^t t_2 \\ \int \frac{w^t - w^{t-1}}{\Delta t} t_3 &= \int a(u^t, v^t) u^t t_3 \end{cases}$$

Con las funciones test $t_1, t_2, t_3 \in \mathbb{P}_1$ y las derivada temporales se aproximaron por

$$u_t \approx \frac{u^t - u^{t-1}}{\Delta t}$$

Resultados

Para los resultados que se presentan, se usaron las constantes

$a_1 = \frac{1}{100}$, $a_2 = \frac{1}{100}$, $\Delta t = 0.01$ y la siguiente grilla de $[-1, 1] \times [-1, 1]$

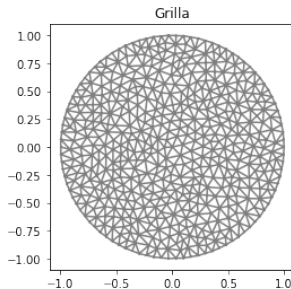


Figure: Grilla utilizada

A continuación se usa $u_0(x, y) = e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$ y $v_0 = 0.087$

Resultados : $d = 0.05; \alpha = 1$

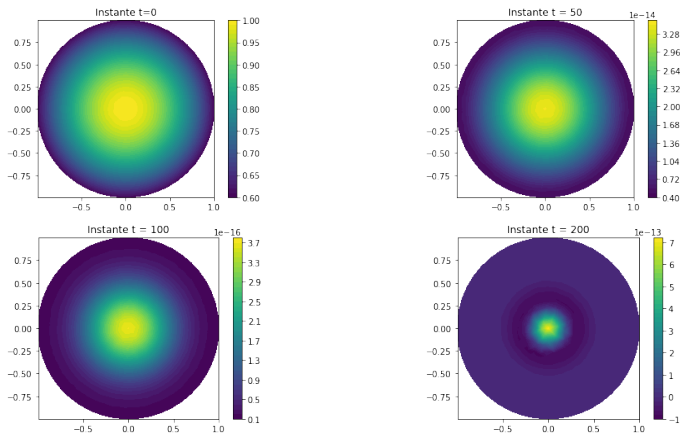


Figure: Densidad bacterias $u + w$

Resultados: $d = 0.9$; $\alpha = 1$

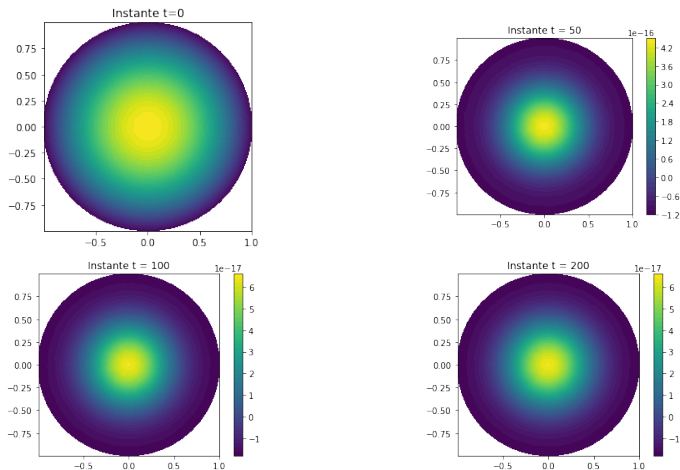


Figure: Densidad bacterias

Resultados: $d = 0.9$; $\alpha = 2,400$

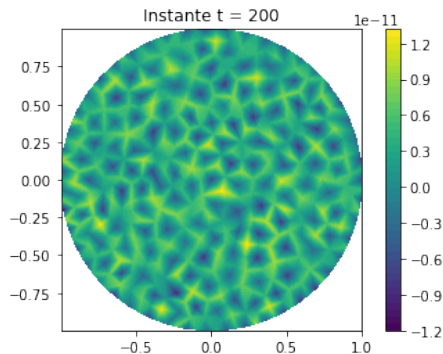


Figure: Densidad bacterias $u + w$

- Se observa una ramificación de las bacterias activas.
- $u(x, y) \rightarrow 0$.

Resultados: $d = 0.9, \alpha = 1, v_0$ no constante

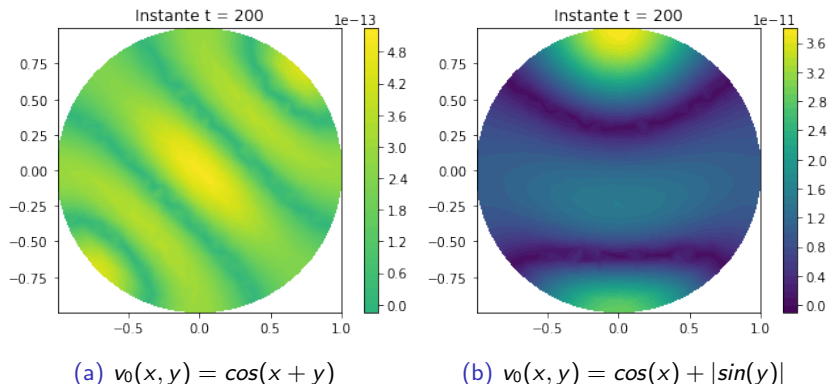


Figure: Densidad de bacterias

- Se observó dependencia principalmente sobre la tasa de motilidad d y el factor α de $a(v, u)$ en los patrones encontrados.
- Se depende fuertemente de la condición inicial en el caso que v_0 no sea constante.
- En el modelo de reacciones químicas, el parámetro γ condiciona el tipo de patrón al fijar el resto de los parámetros. Además, las condiciones iniciales también influyen en el patrón obtenido.

- Utilizar una tasa de motilidad $d(u)$ que dependa de los activos.
- Resolver el modelo Schnakenberg 2D con elementos finitos o esquemas implícitos en diferencias finitas. También disminuir los tiempos de ejecución.

- [1] Reaction–diffusion modelling of bacterial colony patterns
Masayasu Mimuraa, Hideo Sakaguchib, Mitsugu Matsushitac (2000)
- [2] (Lecture notes in mathematics 1812) Luigi Ambrosio, Klaus Deckelnick, Gerhard Dziuk, Masayasu Mimura, Vsvolod Solonnikov, Halil Mete Soner, Pierluigi Colli, José Francisco Rodrigues -
Mathematical asp.
- [3] G. Allaire, Analyse numérique et optimisation, Editions de l'Ecole Polytechnique, Paris, 2006.
- [4] A. Ledesma, Patrones de Turing en sistemas biológicos, 2012.