Morfogénesis en sistemas de reacción-difusión con coeficientes de difusión dependientes de un catalizador.

J.L. García-Cortí, A. Almeida y J.M. Pacheco

Depto. de Matemáticas
Universidad de Las Palmas de G.C.
Campus de Tafira Baja
E35017 Las Palmas, Spain

Abstract

Se considera un modelo de reacción-difusión unidimensional donde la interacción entre n especies -químicas, biológicas o de cualquier otro tipo- está regida por otra especie $(n+1)$, que actúa como catalizador. Los coeficientes de difusión D_i dependen del catalizador, y la dinámica de éste es rápida comparada con la de las restantes variables. Por tanto se puede reducir el problema a otro con sólo n especies con los D_i dependientes de la variable espacial. Se plantea un problema de existencia global y se llevan a cabo experimentos numéricos con diferentes cinéticas, para analizar la aparición de pautas espaciales.

AMS CLASSIFICATIONS: 35B25, 35B32, 35K57

1 INTRODUCCION

Algunos procesos implican interacciones entre n especies, aunque aquí nos restringimos a sólo dos -químicas, biológicas o de cualquier otro tipo- en presencia de otra que actúa como catalizador. Esta última no reacciona con las otras; por tanto el modelo está descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales [Murray, 1988]:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \gamma f_1(X_1, X_2) + div(D_1 grad X_1) \tag{1}$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \gamma f_2(X_1, X_2) + div(D_2 grad X_2) \tag{2}$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial t} = \gamma f_3(X_3) + div(D_3 grad X_3) \tag{3}$$

más condiciones iniciales y de contorno. En la mayoría de los casos de interés, el problema se reduce espacialmente al caso unidimensional, así que el término de difusión es:

$$\frac{\partial}{\partial x}(D_i \frac{\partial X_i}{\partial x})$$

Por otra parte, para el catalizador la difusión está regida por un coeficiente constante, mientras que los coeficientes de difusión D_1 y D_2 dependen de la concentración del catalizador. De este modo el modelo puede escribirse:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \gamma f_1(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_1(X_3)\frac{\partial X_1}{\partial x}) \tag{4}$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \gamma f_2(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_2(X_3)\frac{\partial X_2}{\partial x}) \tag{5}$$

$$\frac{\partial X_3}{\partial t} = -dX_3 + k\frac{\partial^2 X_3}{\partial x^2} \tag{6}$$

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 $X_3(1,t) = c$. En general, 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 (6) puede ser reemplazada por la concentración de equilibrio de X_3. Resolviendo $\dfrac{\partial X_3}{\partial t} = 0$ con las condiones de contorno, se obtiene (ver figura 1) que:

$$X_3(x) = c\frac{Ch(x\sqrt{\frac{d}{k}})}{Ch(\sqrt{\frac{d}{k}})} \tag{7}$$

y el modelo se reduce a:

$$\frac{\partial X_1}{\partial t} = \gamma f_1(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_1(X_3(x))\frac{\partial X_1}{\partial x}) \tag{8}$$

$$\frac{\partial X_2}{\partial t} = \gamma f_2(X_1, X_2) + \frac{\partial}{\partial x}(D_2(X_3(x))\frac{\partial X_2}{\partial x}) \tag{9}$$

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 (ver figura 2) de X_3, esto es:

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

Hay que tener en cuenta que α y β deben ser tales que $D_1 > 0$. En todo caso, los coeficientes de difusión quedan descritos por funciones de la variable espacial x:

$$D_1 = D_1(X_3(x)) = \alpha X_3(x) + \beta = \alpha c \frac{Ch(x\sqrt{\frac{d}{k}})}{Ch(\sqrt{\frac{d}{k}})} + \beta = D_1(x)$$

$$D_2 = mD_1(x)$$

El caso de un único reactivo ha sido tratado por dos de los autores en otro trabajo [García-Cortí y Pacheco, 1993], y otras condiciones, como dependencia temporal de los coeficientes de difusión, pueden considerarse tambien, véase p. ej. [Padilla *et al.*, 1993].

2 EXISTENCIA DE SOLUCIONES

Las ecuaciones del modelo pueden escribirse en la forma abstracta siguiente:

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} + G\mathbf{X} = f(\mathbf{X}) \tag{10}$$

donde $\mathbf{X} = (X_1, X_2)^{\mathrm{T}}$ y:

$$G = -\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x}(D_1 \frac{\partial}{\partial x}) & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x}(D_2 \frac{\partial}{\partial x}) \end{pmatrix}$$

más las condiciones de flujo nulo en los extremos, y $f(\mathbf{X}) = (f_1, f_2)^{\mathrm{T}}$. Además se utilizará una condición inicial $\mathbf{X}(x, 0) = \mathbf{X}_0(x)$. Con esta formulación el problema se considera como un problema de valores iniciales con soluciones en un espacio de Banach E, que puede resolverse formalmente aplicando la regla de variación de las constantes:

$$\mathbf{X}(t) = e^{-Gt}\mathbf{X}_0 + \int_0^t e^{-G(t-s)} f(\mathbf{X}(s))ds \tag{11}$$

donde e^{-Gt} es el semigrupo analítico cuyo generador infinitesimal es el operador G. Ello queda garantizado pues el operador G es sectorial y todo operador sectorial es el generador infinitesimal de un semigrupo analítico [Henry, 1981]. La aparición de pautas espaciales estables exige que las soluciones construidas existan para todo $t > 0$, lo que equivale geométricamente a que no se produzca el fenómeno de "explosión" o "blow-up" de las soluciones. Una aplicación del lema de Gronwall asegura que tal cosa es cierta si se cumple una acotación del tipo

$$\|f(x)\|_E < cte(1 + \|\mathbf{X}\|_\alpha) \tag{12}$$

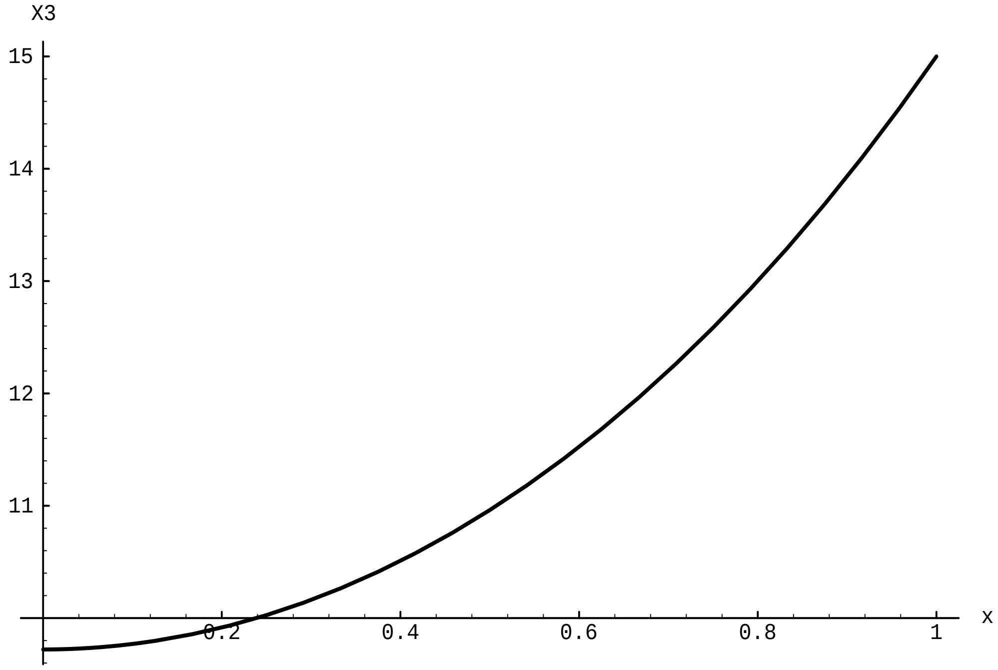

Figure 1:

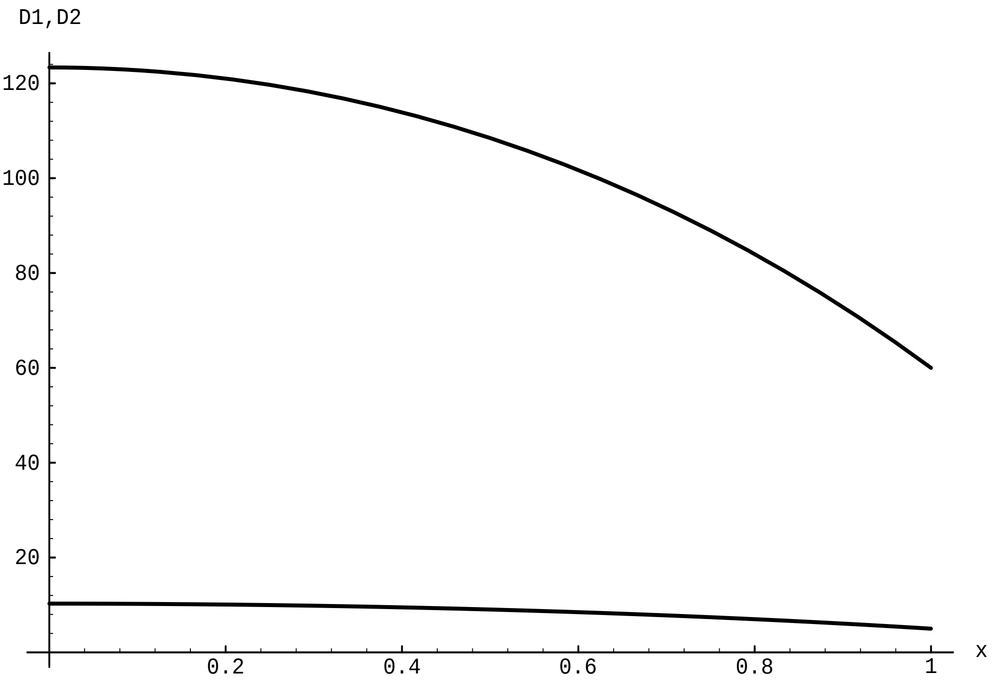

Figure 2:

donde $\|\mathbf{X}\|_\alpha$ es la norma en el espacio $E_\alpha = Dom(G + aI)^\alpha$, siendo α una potencia fraccionaria que define el espacio de Banach donde se hallan las condiciones iniciales $\mathbf{X}_0$ que garantizan la existencia y unicidad de soluciones. La norma $\| \ \|_\alpha$ se define como:

$$\|\mathbf{X}\|_\alpha = \|(G + aI)^\alpha \, \mathbf{X}\|_2 \quad con \quad a \in I\!R \tag{13}$$

El cálculo efectivo de $\| \ \|_\alpha$ no se lleva a cabo directamente; se utilizan en su lugar resultados que indican que E_α son subespacios de espacios de Sobolev adecuados:

$$E_\alpha \subseteq H^k[0,1] \quad para \quad \alpha > \frac{k}{2}$$

Además, el teorema de inmersión de Sobolev garantiza que, por ser $n = 1$, los elementos de E_α pueden considerarse como funciones continuas, por lo que las soluciones halladas también lo son.

3 ANALISIS LINEAL

Sean $f_i(X_1, X_2)$ que cumplen la condición, para el sistema sin difusión, de tener un punto singular (X_{10}, X_{20}) en el primer octante y sea:

$$J = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

la matriz jacobiana de las f_i en el punto singular. Con la intención de descubrir posibles formaciones de pautas [Turing, 1952], se buscan soluciones de la forma:

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

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

Sustituyendo éstas en las ecuaciones y escribiendo $D_i(X_3)$ en la forma dada anteriormente, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$(\alpha X_3 + \beta) Y_1'' + \alpha X_3' Y_1' + (a_{11} - \lambda) Y_1 + a_{12} Y_2 = 0$$

$$m(\alpha X_3 + \beta) Y_2'' + m\alpha X_3' Y_2' + a_{21} Y_1 + (a_{22} - \lambda) Y_2 = 0$$

Este sistema puede reducirse a una sola ecuación en la nueva variable $Y_1 + AY_2$ eligiendo un valor apropiado de A. La primera ecuación más $\frac{A}{m}$ veces la segunda nos da:

$$
\begin{aligned}
&(\alpha X_3+\beta)(Y_1''+AY_2'')+\alpha X_3'(x)(Y_1'+AY_2')+ \\
&+((a_{11}-\lambda)+\tfrac{a_{21}A}{m})(Y_1+\tfrac{a_{12}+(a_{22}-\lambda)\frac{A}{m}}{a_{11}-\lambda+\frac{a_{21}A}{m}}Y_2)=0
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Elegimos A tal que: $A = \dfrac{a_{12}+(a_{22}-\lambda)\frac{A}{m}}{a_{11}-\lambda+\frac{a_{21}A}{m}}$. Esta es una ecuación de segundo grado en A, cuyas raíces representamos por A_1 y A_2. Llamando $Z_j = Y_1 + A_j Y_2$, se obtienen dos ecuaciones :

$$(\alpha X_3+\beta)Z_j''+\alpha X_3'(x)Z_j'+((a_{11}-\lambda)+\frac{a_{21}A_j}{m})Z_j=0 \quad (j=1,2) \tag{15}$$

cuyas soluciones tienen la forma general:

$$Z_j(x) = c_{1j}e^{x(H_1-H_{2j})}+c_{2j}e^{x(H_1+H_{2j})}$$

donde

$$H_1 = \frac{-\alpha c\sqrt{\frac{d}{k}}Sh(x\sqrt{\frac{d}{k}})}{2(\beta Ch(\sqrt{\frac{d}{k}})+\alpha cCh(x\sqrt{\frac{d}{k}})}$$

$$H_{2j} = \frac{\sqrt{-4\beta p_j Ch^2(\sqrt{\frac{d}{k}})-4\alpha p_j cCh(\sqrt{\frac{d}{k}})Ch(x\sqrt{\frac{d}{k}})+\alpha^2c^2\frac{d}{k}Sh^2(x\sqrt{\frac{d}{k}})}}{2(\beta Ch(\sqrt{\frac{d}{k}})+\alpha cCh(x\sqrt{\frac{d}{k}})}$$

con $p_j = (a_{11}-\lambda)+\frac{a_{21}A_j}{m}$.

La condición de flujo cero para $x = 0$ implica que $c_{1j} = c_{2j}$, por lo que se obtiene el siguiente sistema:

$$Z_1(x) = Y_1 + A_1Y_2 = c_{11}(e^{x(H_1-H_{21})}+e^{x(H_1+H_{21})})$$

$$Z_2(x) = Y_1 + A_2Y_2 = c_{12}(e^{x(H_1-H_{22})}+e^{x(H_1+H_{22})})$$

y resolviendo para las anteriores Y_1, Y_2:

$$Y_1 = \ 2\tfrac{e^{xH_1}}{A_2-A_1}(c_{11}A_2Ch(xH_{21}) - c_{12}A_1Ch(xH_{22}))$$

$$Y_2 = \ 2\tfrac{e^{xH_1}}{A_2-A_1}(c_{12}Ch(xH_{22}) - c_{11}Ch(xH_{21}))$$

Recordando que $e^{\lambda t}Y_j(x) = X_j - X_{j0}$, se sigue que para $(0,0)$, $Y_1(0) = X_1(0,0) - X_{10}$ y $Y_2(0) = X_2(0,0) - X_{20}$, de donde las constantes c_{11} y c_{12} son:

$$c_{11} = \frac{Y_1(0) + A_1Y_2(0)}{2} \quad ; \quad c_{12} = \frac{Y_1(0) + A_2Y_2(0)}{2}$$

4 MORFOGENESIS

Es necesario un análisis más detallado de la ecuación en Z_j:

$$(\alpha X_3 + \beta)Z_j'' + \alpha X_3'(x)Z_j' + ((a_{11} - \lambda) + \frac{a_{21}A_j}{m})Z_j = 0$$

para justificar la formación de pautas espaciales. La ecuación característica puede escribirse como:

$$r^2 + \frac{\alpha X_3'}{\alpha X_3 + \beta}r + \frac{(a_{11} - \lambda) + \frac{a_{21}A_j}{m}}{\alpha X_3 + \beta} = 0 \tag{16}$$

Debido a la forma de X_3 y $\alpha X_3 + \beta$, siempre se verifica que $\dfrac{\alpha X_3'}{\alpha X_3 + \beta} < 0$. Por tanto:

$$H_1 = -\frac{1}{2}\frac{\alpha X_3'}{\alpha X_3 + \beta} > 0$$

Por consiguiente, si existen raíces complejas su parte real es positiva, y para que las raíces sean complejas se ha de verificar que:

$$(\frac{\alpha X_3'}{\alpha X_3 + \beta})^2 - 4\frac{(a_{11} - \lambda) + \frac{a_{21}A_j}{m}}{\alpha X_3 + \beta} < 0 \tag{17}$$

lo que equivale a decir que H_{2j} ha de ser imaginario puro, esto es $H_{2j} = iK_{2j}$ para algún real K_{2j}. De esta manera, las expresiones finales para Y_1 e Y_2 son:

$$\begin{aligned} Y_1 = & \ \tfrac{e^{xH_1}}{A_2-A_1}((Y_1(0)+A_1Y_2(0))A_2cos(xK_{21})-(Y_1(0)+A_2Y_2(0))A_1cos(xK_{22})) \\ Y_2 = & \ \tfrac{e^{xH_1}}{A_2-A_1}((Y_1(0)+A_2Y_2(0))cos(xK_{22})-(Y_1(0)+A_1Y_2(0))cos(xK_{21})) \end{aligned}$$

mostrando la naturaleza oscilatoria de Y_j. La condición (17) puede expresarse mediante la relación de dispersión $F_j(x,\lambda) < 0$, donde (para j=1,2)

$$F_j(x,\lambda) = (\frac{\alpha X_3'}{\alpha X_3+\beta})^2 - 4\frac{(a_{11}-\lambda)+\frac{a_{21}A_j}{m}}{\alpha X_3+\beta} \tag{18}$$

Las figuras 3 y 4 muestran gráficas de $z_1 = F_1(x,\lambda)$ y $z_2 = F_2(x,\lambda)$ respectivamente.

En ambas figuras se considera el parámetro $\sqrt{\frac{d}{k}} = 1$. Se observa, que fijado x, se obtienen valores de λ de distinto signo, correspondientes a diferentes comportamientos de evolución temporal.

5 EXPERIMENTOS NUMERICOS

Se presentan dos versiones del sistema (4)(5)(6) con diferentes términos de reacción. El primero corresponde a la llamada cinética de Schnackenberg:

$$f_1 = w_1 - X_1 + X_1^2 X_2 \tag{19}$$

$$f_2 = w_2 - X_1^2 X_2 \tag{20}$$

Sistema que podemos escribir:

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{X}) \\ f_2(\mathbf{X}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 - X_1 + X_1^2 X_2 \\ w_2 - X_1^2 X_2 \end{pmatrix}$$

Ahora bien, $\mathbf{f}$ es $L_2(\Omega)$ si f_1 y f_2 son $L_2(\Omega)$ y esto se verifica si y sólo si X_1 y X_2 son $L_{2p}(\Omega)$ o bien $\mathbf{X}$ es $L_{2p}(\Omega)$, donde $\Omega = [0,1]$ y $p = 3$.

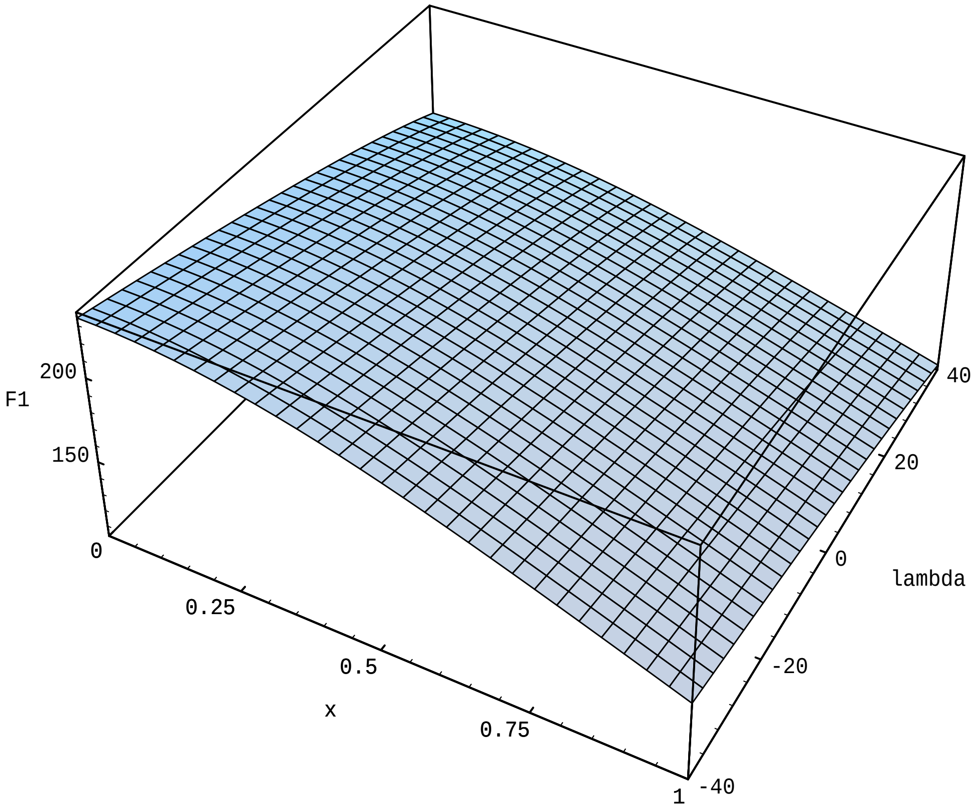

Figure 3:

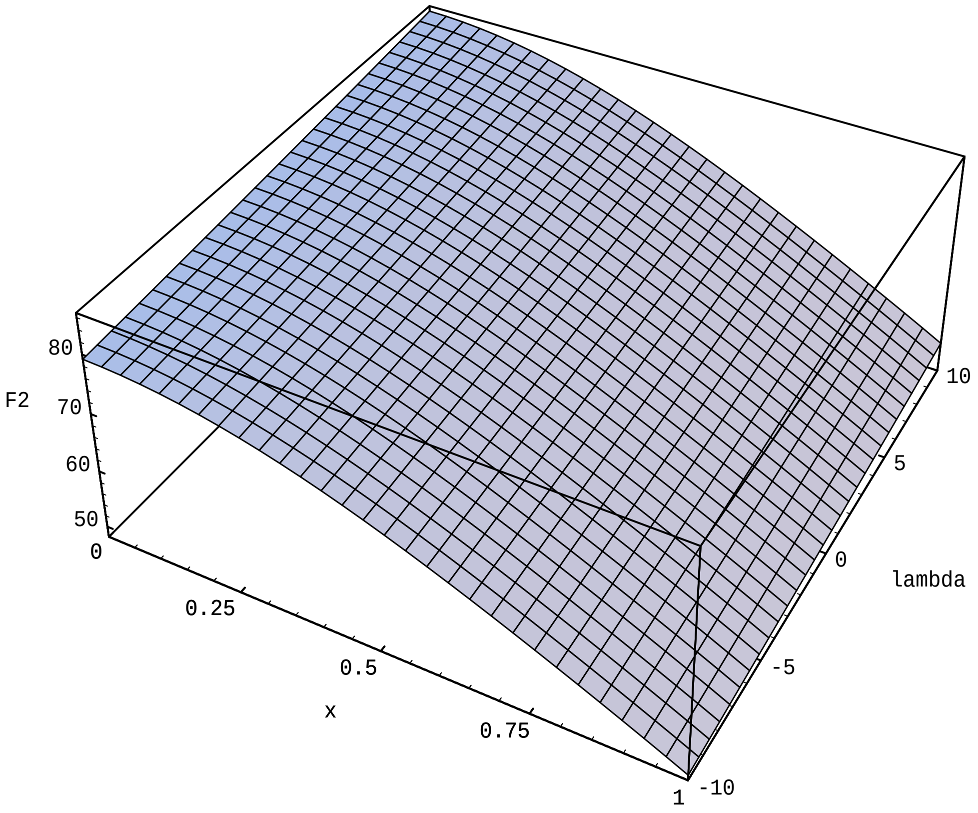

Figure 4:

Utilizando una versión de la desigualdad de Niremberg-Gagliardo, cuyo enunciado es:

$$\|X_i\|_{L_{2p}} \leq \quad cte\ \|X_i\|^{\theta}_{H_q}\ \ \|X_i\|^{1-\theta}_{L_r}$$

si $0 \leq \theta \leq 1$, $p \geq q$, $p \geq r$, y:

$$-\frac{n}{p} \leq \theta(q - \frac{n}{2}) - (1-\theta)\frac{n}{r},$$

con desigualdad estricta si $r = 1$.

Considerando en la desigualdad anterior $\theta = 1$ nos queda que:

$$\|X_i\|_{L_{2p}} \leq \|X_i\|_{H_q}$$

teniendo que verificarse que:

$$\frac{-n}{p} \leq (q - \frac{n}{2}) \quad o\ bien \quad q \geq \frac{n(p-1)}{2p}$$

desigualdad que es trivial para $2q \geq n$.

Buscando soluciones para valores iniciales en $H_1(\Omega)$ (q=1) y teniedo en cuenta que $\Omega \subset I\!R$ (n=1), se deduce que no hay restricción para p (en nuestro caso $p = 3$). Por tanto:

$$f_1 : H_1 \longrightarrow L_2(\Omega) \quad f_2 : H_1 \longrightarrow L_2(\Omega)$$

Veamos ahora que $\mathbf{f}$ es lipschitziana. En efecto:

$$\|f_1(\mathbf{X}) - f_1(\mathbf{Y})\|_{L_2} = \| - X_1 + X_1^2X_2 + Y_1 - Y_1^2Y_2\|_{L_2} \leq$$

$$\leq \|X_1 - Y_1\|_{L_2} + \|X_1^2X_2 - X_1^2Y_2 + X_1^2Y_2 - Y_1^2Y_2\|_{L_2} \leq$$

$$\leq \|X_1 - Y_1\|_{L_2} + \|X_1^2(X_2 - Y_2)\|_{L_2} + \|(X_1 - Y_1)(X_1 + Y_1)Y_2\|_{L_2}$$

utilizando la desigualdad de Hölder, la desigualdad anterior es menor o igual que:

$$cte\|X_1 - Y_1\|_{H_1} + cte\|X_1^2\|_{H_1}\|X_2 - Y_2\|_{H_1} + cte\|(X_1 + Y_1)Y_2\|_{H_1}\|X_1 - Y_1\|_{H_1} =$$

$$(cte + cte\|(X_1 + Y_1)Y_2\|_{H_1})\|X_1 - Y_1\|_{H_1} + cte\|X_1^2\|_{H_1}\|X_2 - Y_2\|_{H_1}$$

Analogamente se demuestra para f_2 y por tanto $\mathbf{f}$ es lipschitziana, con lo que queda garantizada la existencia de soluciones para condiciones iniciales en $H_1(\Omega)$.

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 $\sqrt{\frac{d}{k}} = 1$ para las figuras $5a$ y $5b$, mientras $\sqrt{\frac{d}{k}} = 2$ para las figuras $6a$ y $6b$.

El segundo es el sistema activador-inhibidor donde

$$f_1 = w_1 - w_2 X_1 + \frac{X_1^2}{X_2(1+\theta X_1^2)} \tag{21}$$

$$f_2 = X_1^2 - X_2 \tag{22}$$

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 $\sqrt{\frac{d}{k}} = 0.1$ para las figuras $7a$ y $7b$, mientras $\sqrt{\frac{d}{k}} = 2$ para las figuras $8a$ y $8b$.

Estos experimentos muestran que la raíz cuadrada $\sqrt{\frac{d}{k}}$ del cociente entre los elementos característicos de la cinética del catalizador actúa como parámetro de bifurcación, cambiando la configuración (final) de las distribuciones para X_1 y X_2.

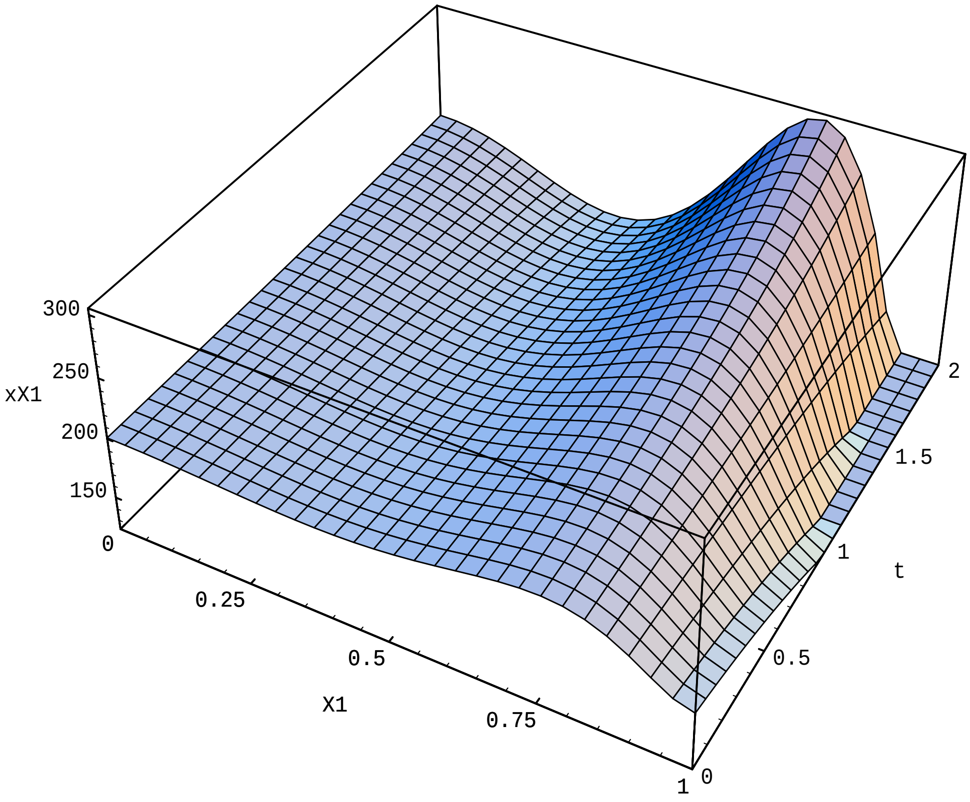

Figure 5:

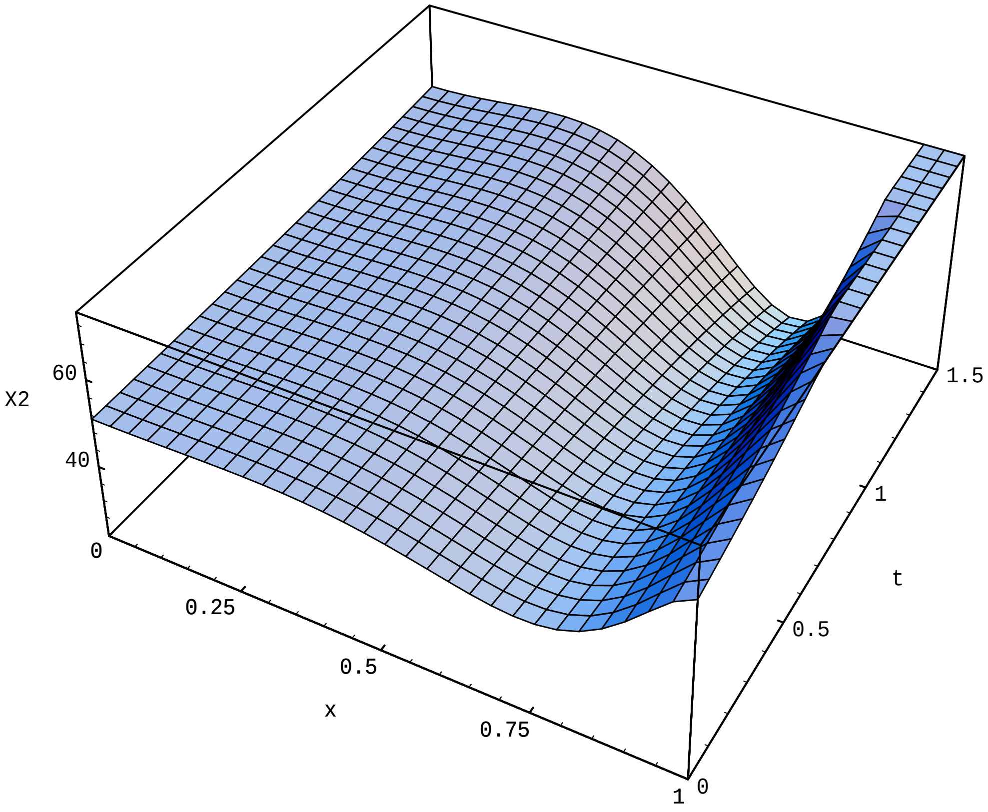

Figure 6:

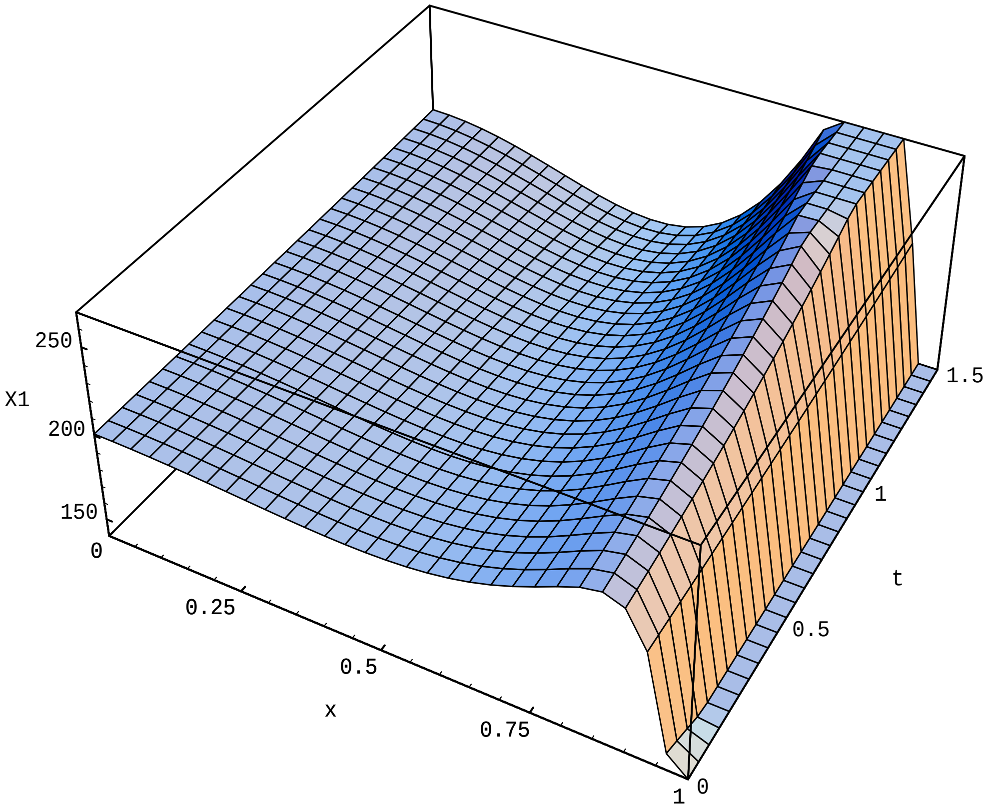

Figure 7:

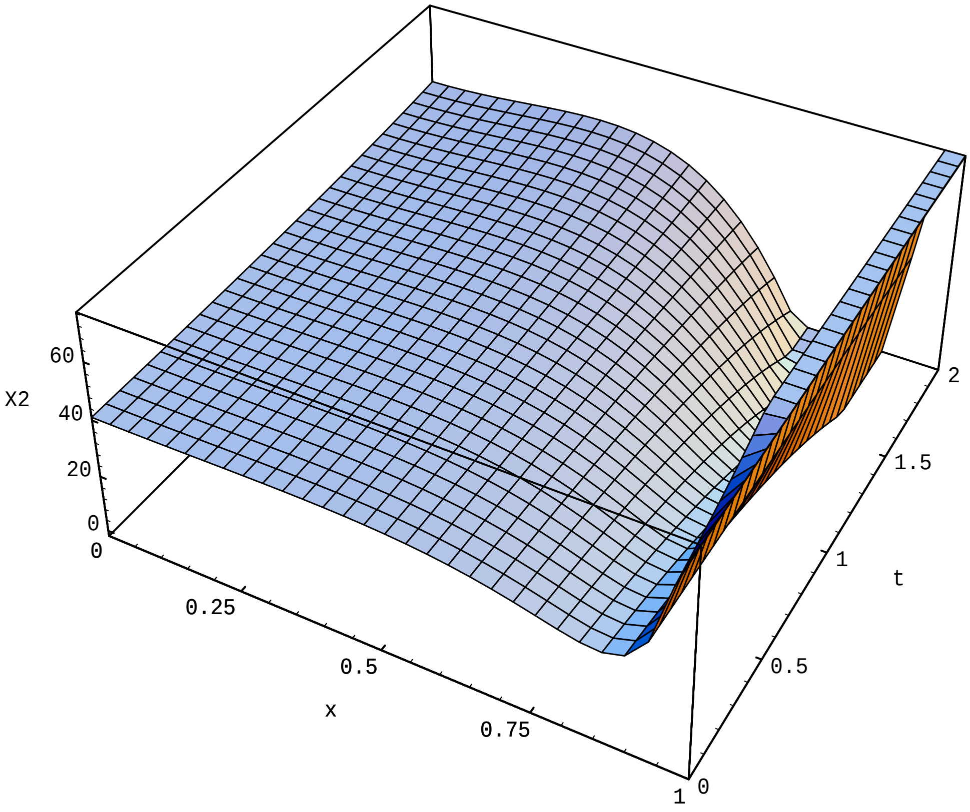

Figure 8:

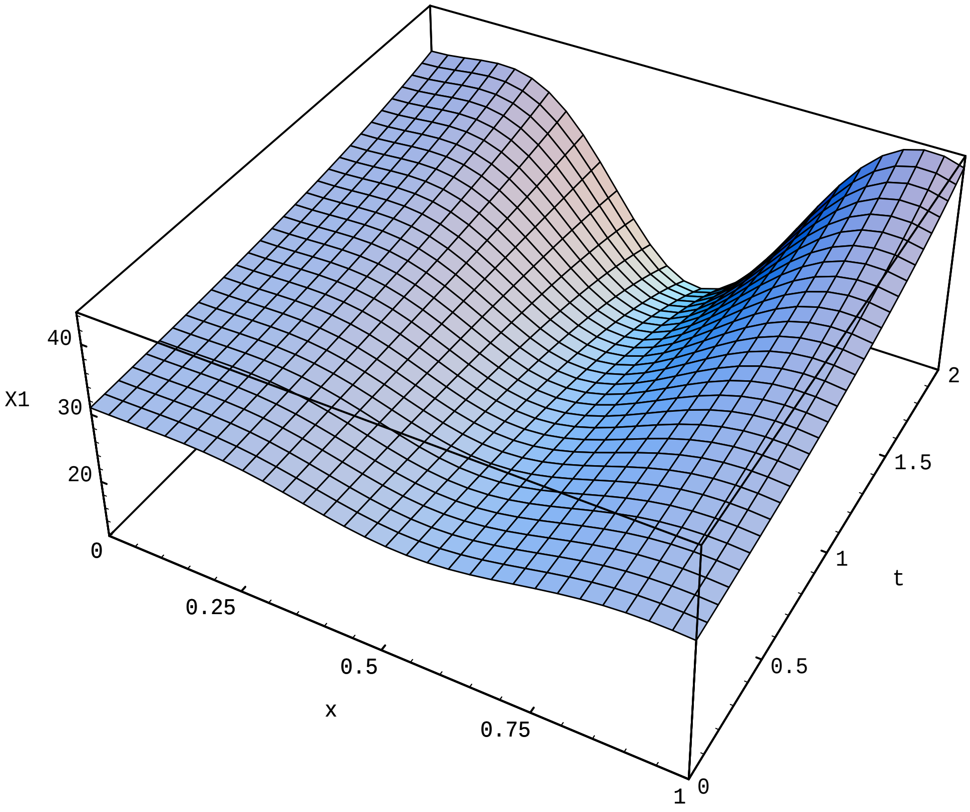

Figure 9:

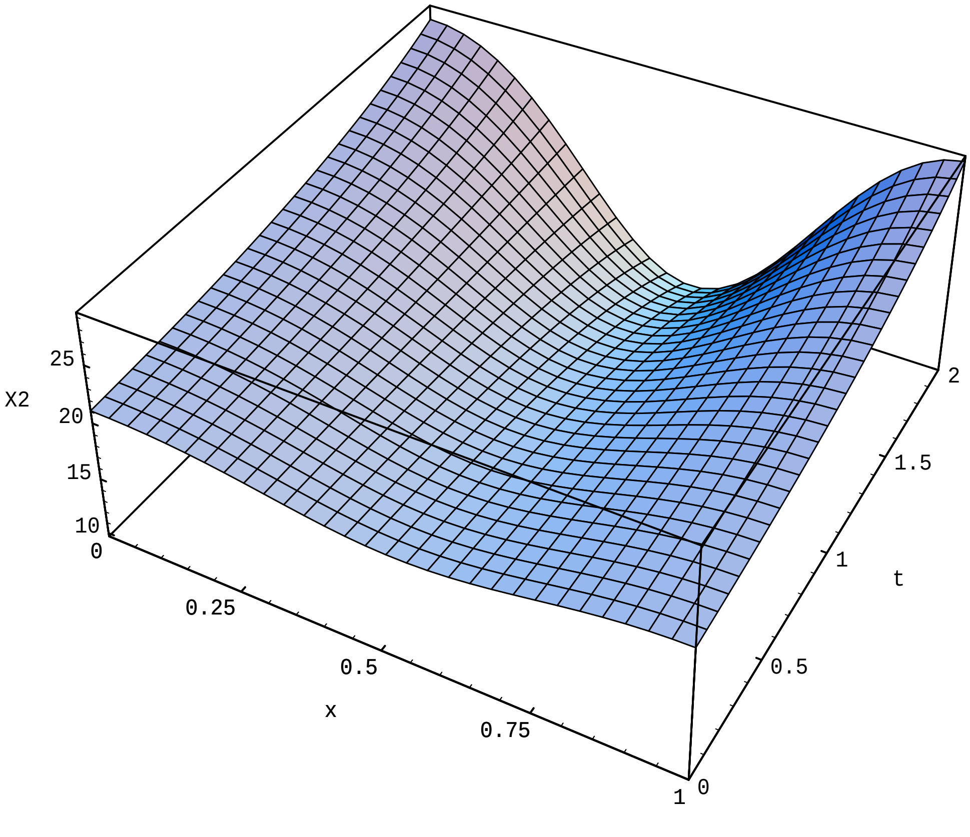

Figure 10:

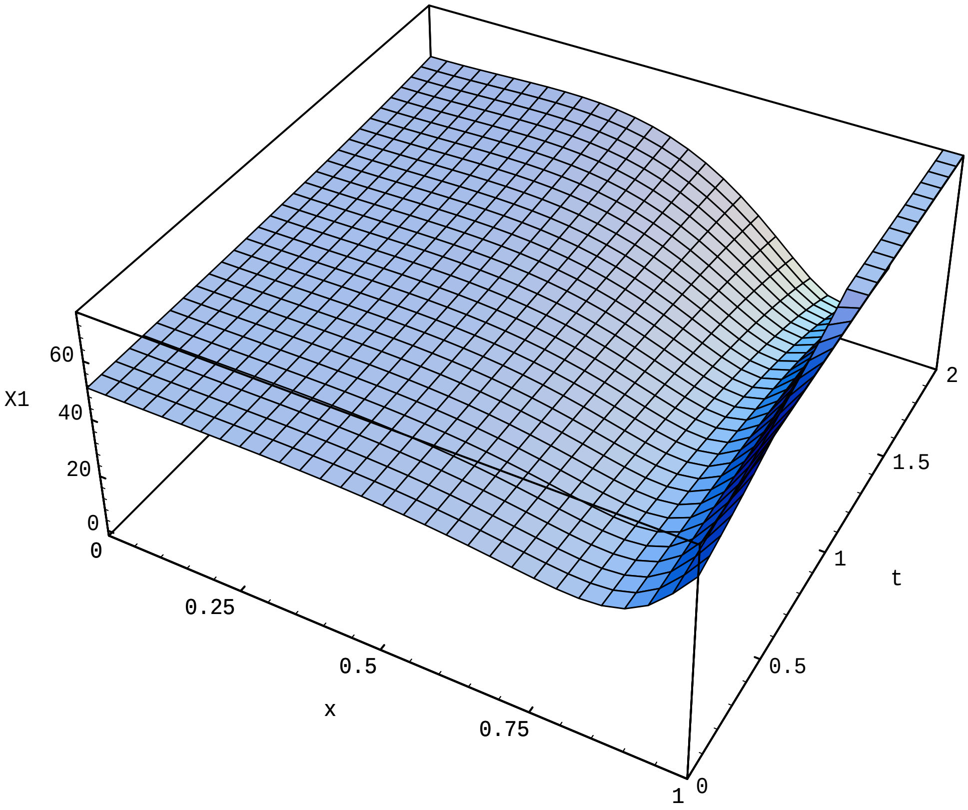

Figure 11:

6 REFERENCIAS

[1] Brézis, H. (1984) : *Análisis Funcional*, Alianza Ed., Madrid

[2] García-Cortí, J.L., Pacheco, J.M. (1993) : Sobre una ecuación de reacción-difusión, *Revista de la Acad. Canaria de Ciencias*, V (Núm. 1), 157-163, La Laguna.

[3] García-Cortí, J.L., Fernández, I., Pacheco, J.M. (1994) : Pattern formation for a reaction-diffusion system: Catalytic-dependent diffusion coefficients, *XXV aniversario de la Facultad de Matemáticas en la Universidad de La Laguna [en prensa]*.

[4] Henry, D. (1981) : *Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations*, Springer Verlag, Berlin.

[5] Holland, S. (1992) : *Applied Analysis by the Hilbert Space method*, M. Dekker, Basel.

[6] Murray, J. (1988) : *Mathematical Biology*, Springer Verlag, Berlin.

[7] Padilla, I., Fernández, I., Pacheco, J.M. (1993) : Estabilidad de sistemas de ecuaciones de reacción-difusión con difusividades variables, *Actas II Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Vol. 2, 892-899, La Coruña.

[8] Turing, A.M. (1952) : The chemical basis of morphogenesis, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, B237, 37-72, Londres.

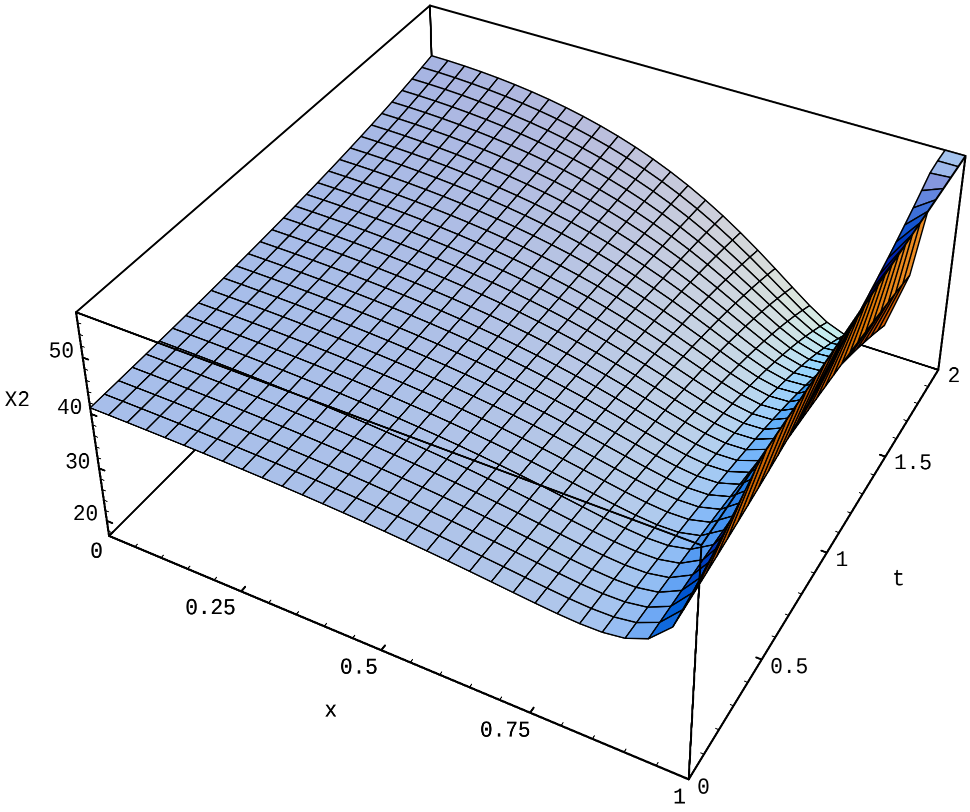

Figure 12: