Pub.Mat. UAB
Nº 19 Maig 1980
Actas II Congreso de Ecuaciones Diferenciales y
Aplicaciones -Valldoreix, Mayo 1979

Un problema per als matematics: Com es perd l'uniformitat d'un medi.

Carles Perelló

Secció de Matemàtiques. Universitat Autònoma de Barcelona.

Introducció:A un gran nombre de fenomens naturals s'observa que, al transcórrer el temps, un medi que originalment és uniforme (es a dir, amb els valors de les variables definidores independents del punt de la regió on té lloc el fenòmen), perd aquesta uniformitat i es distribueix amb una densitat o amb una forma que canvia d'un punt a un altre de l'espai. Els exemples poden incloure: formació de galaxies i d'altres globuls estelars a partir d'un gas uniforme, líquids que passen d'un estat de repòs a un de convecció distribuida en cel.les, ondulació d'un terreny per erosió, distribució en comarques d'una població, diferenciació lingüística, aparició dels pols animal i vegetal a un òvul fecundat, agrumollament de certs microorganismes, etc..

No tots aquests fenòmens admeten el mateix model matemàtic, però per a algun d'ells es tenen models amb equacions en derivades parcials no lineals del tipus parabólic, que defineixen sistemes dinàmics (dits evolutius) en un espai de funcions escaient. És un problema per als matemàtics, si més no per a tenir un millor coneixement de l'estructura del món, el donar i analitzar els models de tants fenomens d'aquests com sigui possible. En el que segueix considerarem que les equacions d'evolució siguin del tipus de reacció i difusió, i veurem com es produeix la pèrdua d'uniformitat en aquest cas. Sembla que una anàlisi del tipus que fem pot funcionar per a altres sistemes evolutius definits per equacions del tipus parabòlic.

Entre els exemples que es troben a la literatura de models de reacció i difusió presentant pèrdua d'uniformitat esmentem els següents.

i) Un model d'un sistema ecològic herbívor-carnívor (a una regió unidimensional) a [1].

ii) El "Brusselator", que dóna un sistema amb dues espècies (a regions d'una i dues dimensions), estudiat a [2] i [3].

iii) El model d'activador i inhibidor donat a [4], [5] i [6], incloent cassos bidimensionals.

iv) El comportament de les amebes acrasials està descrit a [7], i es dóna un model que no l'explica satisfactoriament.

Cap d'aquest treballs, encara que es fan servir conceptes matemàtics bastant elaborats, està fet per matemàtics. S'empren les eines sense fer un anàlisi de la validesa dels metodes. Per altra banda hi ha força treball de matemàtics ocupant-se de les equacions d'evolució ([8] i [9]), i alguns d'ells s'ocupen particularment de les del tipus de reacció i difusió. No costa gaire doncs el fer un anàlisi del problema morfogenètic presentat pels biòlegs i químics, utilitzant la matemàtica ja desenvolupada.

Acabo aquesta introducció agraint a en Xavier Mora el que em parlés d'aquests problemes. Aquestes questions han encaixat amb inquietuts que tenia des de fa molts anys.

1. Una equació de reacció i difusió és de la forma

$$u_t = f(u) + d\Delta u,$$

en que $u(t,x)$ ens dóna la distribució de m espécies (o reactants) en funció del temps t i del punt x d'un domini acotat de $\mathbb{R}^n$, amb frontera regular. Per u_t designem la derivada parcial de u respecte de t.

El terme $f(u)$ és anomenat de reacció, i dóna la taxa de canvi temporal de u deguda a les interaccions entre espècies a cada punt. El terme $d\Delta u$ dóna la taxa de canvi deguda a la difusió, és a dir, al moviment de les espècies, que considerem proporcional al gradient de les seves concentracions. Per a això, suposem que d és una matriu diagonal amb termes no negatius. Encara que fem servir les paraules "espècie" o "reactant", les components de u poden representar no sols la distribució d'especies biològiques o les concentracions de reactants químics, sinó també temperatures, altures i en general qualsevol variable definidora de l'estat.

Es demostra que si $f: \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ és diferenciable, i si es dóna un valor inicial de u, u_0, a un espai convenient H^m de funcions de $\Omega \to \mathbb{R}^m$, llavors existeix una única funció $u(t,x)$ amb valors a $\mathbb{R}^m$, que satisfà l'equació per $t > 0$, tal que $u(0,x) = u_0(x)$ i amb $u(t,.)$ a H^m. L'espai H, al que pertany cada una de les components de u, pot ser, per exemple, l'espai de Sobolev de les funcions definides a Ω, que tenen les derivades (distribucionals) fins a segon ordre amb quadrat integrable, i que compleixen una condició a la frontera (en el sentit generalitzat). Aquesta condició pot ser la de flux nul, equivalent a $u_\nu = 0$. El que $u(t,x)$ existeixi per tota $t > 0$ serà necessariament cert per una u_0 donada, si es pot comprovar que u roman acotada (en la norma de H) o bé si f compleix certes condicions de creixement a l'infinit. Es demostra, a més, que $u(t,.)$ depèn diferenciablement de u_0. Per tant, si definim $T(t)u_0 = u(t,.)$, tenim un (semi-) sistema dinàmic diferenciable a H^m i té sentit parlar de conjunts invariants, d'atractors, de punts de repòs, d'òrbites tancades, de varietats asimptòtiques, de conjunt límit, etc.

En particular el concepte d'atractor resulta d'utilitat en el nostre context, puix que ens defineix els estats terminals del sistema. De fet, quan observem una forma "permanent" d'un fenomen, és a dir, una distribució que no canvia en el temps, pensem que el sistema es troba en un estat d'equilibri asimptòticament estable, que correspon a una solució $\bar{u}$ que és un punt de repòs atractor. Si no fós un atractor, les fluctuacions el farien canviar d'estat (i per tant de "forma", si és que aquesta és mesurada per alguna component de u). Si tenim una òrbita periòdica atractora, el sistema tendrà a un comportament periòdic en el temps (reacció de Belousov-Jabotinski en medi homogeneïtzat), i si l'atractor és més complicat, tindrem comportaments que es podrien calificar de caòtics o de turbulents, dintre de l'estabilitat que els dóna l'estructura mateixa de l'atractor.

Els sistemes que semblen més interessant, morfogenèticament, són els estructuralement estables, és a dir, aquells que tenen una estructura invariant sota perturbacions petites. Aquesta estructura no ha de ser necesariament la de l'equivalencia topològica del sistemes òrbita per òrbita, sinó que es pot basar, per exemple, en certes propietats qualitatives dels atractors, com poden ser el repòs, la periodicitat o certes característiques del caos.

Fem notar, aprofitant l'avinentesa, que les teories modernes de la turbulència i del caos, preveuen que els atractors estan encabits en subespais de dimensió finita de l'espai d'estats, i que es comença a intentar una classificació dels atractors "genèrics" en espais de dimensió finita i petita. (Es poden veure els treballs de Rössler en aquest sentit). En el nostre cas, sent puntuals els atractors de que ens ocuparem, no hem de preocupar-nos d'aquestes questions.

Tornant al nostre tema, la morfogènesi es pot presentar de la següent manera: tenim una distribució uniforme de les diferents variables $u_1, \ldots u_m$ (constants respecte a x). Aquests valors van canviant amb el temps, potser, pero lentament i mantenint la uniformitat espacial (suposem que les condicions a la frontera ho permeten). En un moment donat, però, les distribucions "s'ondulen", i aquesta forma ondulada evoluciona amb el temps, també lentament. Si el model que tenim per el nostre sistema és de reacció i difusió, és clar que l'explicació que donem pressuposa que no estem pas en un estat d'equilibri.

Podem però, intentar d'obtenir un model acceptable del que passa distingint entre les variables que canvien ràpidament i les que ho fan lentament. De fet podem suposar fixos els valors de les variables lentes i podem estudiar el sistema dinàmic resultant per a les variables ràpides. Aquest sistema tindrà uns atractors, que, si les coses van bé, seran aquestes distribucions, uniformes o no, que van apareixent a l'anar canviant les variables lentes. En altres paraules, per a cada valor fixat de les variables "lentes", tenim un sistema dinàmic, anomenat "metabòlic", per a les "ràpides". El que observem com a "forma" són els atractors d'aquest sistema que "evolucionen" al anar canviant les variables "lentes". (Vegi's [10]).

Per a precisar un xic aquests conceptes considerem les equacions

$$\varepsilon u' = f(u,v) + d(v)\Delta u$$
$$v' = g(u,v),$$

en que u i v són funcions que prenen valors a $\mathbb{R}^p$ i $\mathbb{R}^q$ respectivament. Notem que no considerem difusió per a v; això ho fem perque el sistema de parametres definint l'evolució sigui de dimensió finita.

Per a cada v fixada considerem l'equació $\varepsilon u' = f(u,v) + d(v)u$, que ens dóna un sistema dinàmic (metabòlic) a H^p. Aquest sistema tindrà un punt de repòs a la "varietat" $V: f(u,v) + d(v)\Delta u = 0$ de $H^p \oplus \mathbb{R}^q$. Si $D_u(f(u,v) + d(v)\Delta u)$ és un isomorfisme, podem obtenir u com a funció U de v. Substituint a la 2a equació queda $v' = g(U(v),v) = G(v)$. Aquesta equació ens dóna un sistema dinàmic a $\mathbb{R}^q$, que ens defineix "l'evolució" del sistema metabòlic, i en particular dels atractors situats a V. Si tenim alguna sigularitat a V, aquests atractors poden sufrir discontinuitats (catàstrofes). El sistema descomposat, dit "model de varietat lenta", no gaudeix ja de propietats com la d'unicitat. Totes les trajectories tendeixen (o s'allunyen) de V amb velocitat infinita, i a V es mouen d'acord amb $v' = G(v)$; quan la varietat V té singularitats es produeixen salts del tipus dels de "relaxáció", clàssicament estudiats. Un problema fonamental, en que s'està treballant, és saber per quins cassos el model reduït és fidel per ε petita, és a dir, si el model de varietat lenta es comporta com el límit del model original quan ε tendeix a zero.

Feta la reducció, això ens justifica a considerar v com a paràmetre q-dimensional independent.

D'aquí endavant considerarem les equacions depenent d'un parametre μ que prendrem unidimensional, i estudiarem les bifurcacions experimentades pels atractors puntuals al variar μ.

2. Prenem l'equació

$$u_t = f_\mu(u) + d_\mu \Delta u,$$

on μ és un paràmetre unidimensional. Suposem u definida a Ω , un acotat de $\mathbb{R}^n$ i tal que $u_\nu = 0$. També suposem $\bar{u}_\mu$ a $\mathbb{R}^m$ tal que $f_\mu(\bar{u}_\mu) = 0$. La solució uniforme corresponent és un punt de repòs per al sistema dinàmic definit per l'equació, que també designarem per $\bar{u}_\mu$.

Per veure les propietats d'estabilitat de $\bar{u}_\mu$ considerem l'espectre de $A_\mu := D(f_\mu + d_\mu \Delta)(\bar{u}_\mu)$. Sabem que tot l'espectre és puntual i discret. Si existeix μ_0 tal que per $\mu < \mu_0$ tots els valors propis tenen part real menor que 0, i n'hi ha un d'ells, $\rho(\mu)$, tal que és simple, $\rho(\mu_0) = 0$ i $\rho'(\mu_0) > 0$, llavors, per $\mu-\mu_0$ positiva i petita, $\bar{u}_\mu$ serà inestable i a μ_0 es bifurcaran dues solucions atractores, que poden no ser espacialment uniformes. A continuació estudiarem per quins valors de μ es produeix aquesta bifurcació i quines característiques tenen les solucions bifurcades, al menys en primera aproximació. La validesa d'aquest anàlisi radica en que A_μ és el generador infinitessimal del semigrup analític d'operadors lineals definit per la part lineal del sistema dinàmic al punt $\bar{u}_\mu$. (Vegi's [11]).

Per a trobar l'espectre de A_μ hem de cercar solucions v a H^m, no nules, de l'equació $A_\mu v = \rho(\mu)v$. Siguin $\phi_1,\ldots,\phi_r$ les solucions a H del problema $\Delta\phi = \lambda\phi$ a Ω, $\phi_\nu = 0$ a $\partial\Omega$, corresponents als r eigenvalors més grans, $\lambda_1,\ldots,\lambda_r$. Estem suposant que aquest eigenvalors son simples, el que és una propietat genèrica si no suposem Ω simètrica. Observem que tot eigenvalor d'aquest problema (de Neumann homogeni), és real i no positiu. Sigui Φ el subespai de dimensió r de H generat per les eigenfuncions $\phi_1,\ldots,\phi_r$, i sigui Ψ el complementari de Φ a H (de dimensió infinita).

La component v_j de v a H^m, la podem expressar com a

$$v_j = a_{1j}\phi_1 + \ldots + a_{rj}\phi_r + \psi_j,$$

amb ψ_j a Ψ, a_{ij} a $\mathbb{R}$, $j = 1,\ldots, m$.

D'aquesta manera $A_\mu v = \rho(\mu)v$ queda explícitament:

$D_1 f_j(v_1)+\ldots+ D_j f_j(v_j) + d_j v_j +\ldots+ D_m f_j(v_m) = \rho v_j$, $j = 1,\ldots, m$, on no hem fet notar la dependencia de f, d i ρ en μ per tal de facilitar la notació.

Tenint en compte la independència lineal de les diferents ϕ_i d'elles respecte als elements de Ψ, tenim;

$D_1 f_j a_{i1} +\ldots+ (D_j f_j + d_j\lambda_i - \rho)a_{ij} +\ldots+ D_m f_j a_{im} = 0$, $i = 1,\ldots, r$, $j = 1,\ldots, m$,

i a més

$D_1 f_j\psi_1 +\ldots+ (D_j f_j + d_j\Delta - \rho)\psi_j +\ldots+ D_m f_j\psi_m = 0$, $j = 1,\ldots, m$.

Si podem trobar solucions no nules d'alguna d'aquestes equacions per un valor de ρ, la v corresponent (és a dir amb els valors de a_{ij} i ψ_j obtinguts) donarà origen a una solució $ve^{\rho t}$ de la part lineal de l'equació a $\bar{u}_\mu$. Si només una equació, la corresponent a i, admet solucions no trivials, llavors veiem que totes les components de v són proporcionals al "mode" ϕ_i, i que ρ_i serà simple si el rang de la matriu de l'equació és m-1, el que és genèric.

Suposem que per $\mu < \mu_0$ cap d'aquestes equacions admet solució diferent de 0 quan ρ és real no negativa. Això implica que $\bar{u}_\mu$ és asimptoticament estable per aquests valors de μ. Si ara fem créixer μ i per $\mu-\mu_0$ petit tenim que una sola equació, diguem la corresponent a i, admet solució no trivial, amb rang m-1 de la matriu, per ρ real positiva, resulta que el mode φ_i ha esdevingut inestable: existirà un m-vector a_i tal que $a_i\phi_i e^{\rho t}$ és solució de la part lineal. Això implica en particular la bifurcació de dos punts de repòs atractors de la forma

$$\bar{u}_{\mu_0} \pm \sqrt{\mu-\mu_0}\, a_i\phi_i + o(\mu-\mu_0).$$

Per tal de comprovar si la i-èssima equació té solucions no nules hem de tenir

$$\det\,(D_k f_j - d\lambda_i I - \rho I) = 0.$$

Si fem $\rho = 0$, obtenim que les posibles bifurcacions s'efectuaran per els valors de en que

$$\det\,(D_k f_{\mu j} - d_\mu \lambda_i I) = 0.$$

Si la solució $\bar{u}$ corresponent a $d = 0$ és estable i si λ_i és prou petita (és a dir, té valor absolut prou gran), això no podrà ser, i per tant els modes que es faran inestables seran les ϕ_i per λ_i no massa petits.

Una vegada un mode ϕ_i ha esdevingut inestable, al continuar el creixement de μ, més i més modes poden esdevenir-ho, donant origen a successives bifurcacions de la $\bar{u}_\mu$ corresponent. Degut a que aquesta ja no és un atractor, cap d'aquestes solucions bifurcades és estable, llevat de la primera.

Per cloure aquesta secció, fem notar que l'anàlisi feta descansa en l'acotament de Ω, el que dóna un espectre discret per a l'operador de Laplace. Un problema obert, i difícil, és el que passa quan la regió Ω no és acotada.

3. Estudiarem un cas particular per $m=2$, que correspon a un exemple de l'ecologia presentat a [1]. El determinant corresponent a l'equació i-èssima queda:

$$\rho^2 - b\rho + c = 0,$$

en que $b = f_{1u} + f_{2v} + \lambda_i(d_1 + d_2)$, i

$c = f_{1u}f_{2v} - f_{1v}f_{2u} + (f_{1u}d_2 + f_{2v}d_1)\lambda_i + d_1d_2\lambda_i^2$. Els subíndexs u i v denoten derivació respecte a u i a v, mentre que els subíndexs i 2 denoten components.

En el nostre exemple prendrem com a parametre μ el valor d_2, mantenint fixes f i d_1.

Suposem que $f_{1u} + f_{2v}$ és negatiu, i que $M := f_{1u}f_{2v} - f_{1v}f_{2u}$ és positiu. Aixo assegura que la solució $\bar{u}$ de $f(\bar{u}) = 0$ és asimptòticament estable si $d = 0$. També suposarem $f_{1u} > 0$.

Si ρ_1 i ρ_2 denoten les dues arrels de l'equació, tenim que b n'és la suma i que c n'és el producte. Com que λ_i és sempre negatiu o zero i d_1,

d_2 són positius o zero, tindrem sempre que $\rho_1 + \rho_2 < 0$.

En el cas que c sigui positiu, això implicarà que tant ρ, com ρ_2 tenen part real negativa, i que per tant hi ha estabilitat segons el mode ϕ_i. En canvi, si c és negatiu, tindrem una arrel, diguem ρ, negativa i l'altra, ρ_2, positiva. El mode ϕ_i serà inestable en aquest cas.

Considerem la funció definida per λ real i no positiva per

$$c(\lambda) = M + (f_{1u}d_2 + f_{2v}d_1)\lambda + d_1 d_2 \lambda^2.$$

Tenim que aquesta funció és negativa si

$$(f_{1u}\lambda + d_1\lambda^2)d^2 < - M - f_{2v}d_1\lambda,$$

és a dir, si

$$d_2 > d_2^*(\lambda) := (M + f_{2v}d_1\lambda)/(-f_{1u}\lambda - d_1\lambda^2),$$

per $\lambda > - f_{1u}/d_1$, i si

$$d_2 < (-M - f_{2v}d_1\lambda)/(f_{1u}\lambda + d_1\lambda^2) \text{ per } \lambda < - f_{1u}/d_1.$$

Com que el segon cas implica $d_2 < 0$, no resulta interessant.

Obtindrem doncs inestabilitat del mode ϕ_i quan (λ_i, d_2) siguin tals que $d_2 > d_2^*(\lambda_i)$.

El que això sigui possible depèn doncs de que hi hagi eigenvalors λ_i per el problema homogeni de Neumann a l'interval $(-f_{1u}/d_1, 0)$. Si Ω conté una bola prou gran, l'interval entre els eigenvalors λ_i és petit i podrem garantir que augmentant d_2 obtindrem una bifurcació.

Notem que $d_2^*(\lambda)$ és una funció convexa i que el seu mínim es troba a

$$\lambda^* = (\sqrt{-f_{1v}f_{2u}M} - M)/d_1 f_{2v}$$

(per a valors negatius de λ), i que si els eigenvalors λ_i són prou espessos, el que passarà si Ω és gran, la primera bifurcació, la estable, es produirà per la ϕ_i corresponent a una λ_i prop de λ^*. En general no es tindrà la igualtat de d_2^* per a dos valors λ_i diferents.

El que determina doncs les propietats de les bifurcacions primàries és la restricció de $d^*(\lambda)$ a l'espectre de la laplaciana (amb condició de Neumann homogènia a la frontera, en el nostre exemple). Com que $d_2^*(\lambda)$ és independent de la regió Ω, és a dir, només depen de f i de d_1, podem dir que Ω influeix "quantitzant" a $d_2^*(\lambda)$ i que el valor de λ_i és relativament independent de Ω, que el determina tan sols a través d'aquesta "quantització" o "modulació".

Ara voldriem dir alguna cosa respecte a la relació que hi ha entre el valor de λ_i i les propietats "ondulatòries" de la eigenfunció corresponent ϕ_i.

Suposem que Ω, de dimensió 1, és l'interval [0,L]. Llavors

$$\lambda_i = -i^2\pi^2/L^2, \quad \phi_i = \cos(2\pi/L)x.$$

En aquest cas les propietats ondulatòries de ϕ_i són donades per λ_i:el període de la ondulació de la solució que es bifurca, ϕ_i, és precisament $2\pi/\sqrt{-\lambda_i}$, i a més λ_i és tant més a prop de λ^* com més gran sigui L.

Conjecturem que una propietat anàloga és certa per $n > 1$. El que esperem és que el període aproximat de l'ondulació de ϕ_i sigui de l'ordre de $1/\sqrt{-\lambda_i}$. El que vol dir període aproximat queda per definir, pero pensem en coses com el diàmetre de la màxima bola que càpiga a les regions en que ϕ_i no s'anul.la, o bé en la distancia entre "crestes" o "fóns de valls" de la gràfica de ϕ_i. Si això fós cert es té certa independència entre el període de la ondulació del mode morfogenètic i la mida de la regió Ω, que només afectaria a través de la modulació amb l'espectre de la laplaciana. Estem treballant en la questió.

Referencies.

[1]. Murray, J.D. - "Lectures on nonlinear differential equations models in biology". Clarendon, 1977.

[2] Nicolis, G.- Prigogine, I. - Self-organization in nonequilibrium systems". Wiley, 1977.

[3] Prigogine, I. - "Order through fluctuation: Self organization and Social Systems", a"Evolution and Consciousness". Addison-Wesley,1976.

[4] Gierer, A. i Meinhardt, H. - "Biological Pattern formation involving lateral inhibition". Lectures on Mathematics in the Life Sciences. Vol. 7. AMS, 1974.

[5] Meinhardt, H. "The spatial control of cell differentiation by autocatalysis and lateral inhibition". A "Synergetics (workshop)". Springer, 1977.

[6] Haken, H. "Synergetics". Springer, 1978.

[7] Segel, L.A. "On collective motions of chemotactic cells". Lectures on Mathematics in the Life Sciences, Vol. 4. AMS, 1972.

[8] Friedman, A. "Partial Differential Equations". Holt, Rinehart and Winston, 1969.

[9] Tanabe, H. "Equations of Evolutions". Pitman, 1979.

[10] Perelló, C. "Metabolisme i Evolució". Butlletí de la Soc. Catalana de Ciencies Fís. Quím. i Matematiques. Vol. 1, pgs. 11-22, 1977.

[11] Sattinger, D.H. "Group theoretic methods in bifurcation theory". Springer, 1979.