

INFLUENCIA DE CONDICIONES DE CONTORNO DE ALBEDO SOBRE LA FORMACION DE ESTRUCTURAS EN UN MODELO ACTIVADOR-INHIBIDOR

H. S. Wio

*Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica,
CC 439, 8400 San Carlos de Bariloche.*

C. Borzi

*Centro Atómico Ezeiza, Comisión Nacional de Energía Atómica,
Av. Libertador 8250, 1429 Buenos Aires*

y

G. Izús, O. Ramírez, R. Deza

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad Nacional de Mar del Plata, Deán Funes 3350, 7600, Mar del Plata*

Para analizar los efectos de condiciones de contorno realistas (*albedo*) sobre la formación y estabilidad de estructuras de no equilibrio en sistemas multicomponente, se estudia una versión con nulclinas poligonales de un modelo activador-inhibidor. Esta forma del modelo permite obtener resultados analíticos para las distribuciones de ambas componentes, así como expresiones cerradas para los autovalores en el estudio de estabilidad lineal. Este trabajo se limita al análisis del caso "simétrico", es decir de igual reflectividad (parámetro de albedo) para ambas componentes.

INTRODUCCION

La formación y propagación de estructuras no lineales es uno de los principales tópicos en la física de sistemas complejos. La gran generalidad y actualidad de estos fenómenos es evidenciada por la cantidad de contribuciones provenientes de diferentes áreas¹. Entre las varias posibles descripciones de fenómenos tan complejos, uno de los esquemas más usados (debido a su simplicidad) es el de reacción-difusión².

Los sistemas reacción-difusión han provisto una fuente extraordinariamente fértil de modelos en todas las ciencias, desde la descripción de relojes químicos (p.ej. la reacción de Belousov-Zhabotinski) hasta la propagación de pulsos nerviosos en axones o la actividad temporalmente periódica y espacialmente organizada en el tejido cardíaco, etc^{2,3,4,5}.

Aparte del estudio de estructuras propagantes o localizadas en sistemas infinitos, el caso de sistemas finitos tiene considerable interés. Existe evidencia de que en este caso las condiciones de contorno juegan un papel relevante en la formación, propagación y estabilidad de estructuras⁶.

Debido a la complejidad de las ecuaciones que gobiernan el comportamiento en la mayoría de dichos sistemas, tales estudios conllevan la necesidad de recurrir a métodos numéricos o de perturbaciones singulares⁷: por eso es importante plan-

tear modelos adecuadamente simplificados que manteniendo las características esenciales del problema permitan un tratamiento exacto, dada la gran comprensión que éstos aportan.

Las condiciones de contorno normalmente usadas son del tipo de Dirichlet o de Neumann (absorción o reflexión total, respectivamente). Sin embargo existen condiciones de contorno más generales, que en principio proveerían una descripción más realista en numerosas situaciones. Recientemente se ha estudiado el efecto de condiciones de contorno parcialmente reflectivas (condiciones de albedo) en el contexto de un modelo simplificado de una inestabilidad electro-térmica³. Sin embargo, dicho estudio estuvo restringido a un sistema de una sola componente. Si se pretende tratar situaciones más realistas, es necesario estudiar sistemas multicomponente.

Como ha sido discutido por varios autores^{2a-d,4}, una gran cantidad de sistemas de interés pueden ser modelados en el esquema conocido como "propagador-controlador" o "activador-inhibidor". Tales sistemas son descritos por el siguiente par de ecuaciones":

$$\begin{aligned}\partial X/\partial t &= D_x \partial^2 X/\partial z^2 + F(X,Y) \\ \partial Y/\partial t &= D_y \partial^2 Y/\partial z^2 + G(X,Y)\end{aligned}\quad (1)$$

donde X,Y son las concentraciones de activador e inhibidor respectivamente y D_x, D_y los coeficientes de difusión correspondientes. Las funciones no lineales $F(X,Y)$ y $G(X,Y)$ representan los términos de reacción, y típicamente $F(X,Y)=0$ tiene forma de S en el plano (X,Y) y $G(X,Y)=0$ representa implícitamente una función monótona creciente $Y(X)$.

Como en Ref.[8], se considerará un sistema unidimensional. En este caso será la versión lineal por tramos del modelo de Fitz Hugh-Nagumo⁹. Esto permite obtener resultados analíticos para las estructuras de propagador e inhibidor, así como expresiones cerradas para los autovalores del estudio de estabilidad lineal.

En este trabajo se considera el caso simétrico, o sea cuando el parámetro de albedo es el mismo para ambos campos. Esta es la generalización más inmediata del caso de una componente estudiado en Ref.[8]. Es caso más general de albedos distintos está en estudio¹¹.

En la sección siguiente se esboza el método de cálculo, la forma de alguna de las estructuras resultantes y finalmente se hacen algunos comentarios sobre su estabilidad.

EL MODELO Y SU ANALISIS

Mediante adecuados cambios de escala y adoptando para F y G una forma poligonal continua y sencilla (la "nulclina" $F(X,Y)=0$ se aproxima por una "Z" invertida y $G(X,Y)=0$ por una recta) puede reescribirse (1) en forma adimensional:

$$\partial X/\partial t = \partial^2 X/\partial z^2 - X - aY + \gamma \Theta(X-X_c) \quad (2)$$

$$\partial Y/\partial t = d \partial^2 Y/\partial z^2 + bX - cY$$

donde $\Theta(X)$ es la función de Heaviside. Se supone al sistema definido en el intervalo $-Z_L < Z < Z_L$ y (como en la Ref.[8]) se considera el caso estacionario y condiciones de contorno de *albedo*, que se escriben:

$$\begin{aligned} dX/dz|_{\pm z_L} \pm k_X X(\pm z_L) &= 0 \\ dY/dz|_{\pm z_L} \pm k_Y Y(\pm z_L) &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

(se analiza aquí el caso simétrico $k_X=k_Y=k$).

Como se discute en Ref.[8], se proponen diferentes formas analíticas para X e Y según $X > X_c$ ó $X < X_c$. Estas definen regiones (llamadas respectiva-

mente I y II) en el intervalo, unidas por puntos (llamados genéricamente z_c) en los que ocurre la transición. Se espera que, como en Ref.[8], sea la estabilidad la que seleccione entre los posibles valores de z_c .

De acuerdo con resultados previos^{8,9} se considera que los intervalos $(-z_L, -z_c)$ y (z_c, z_L) (correspondientes a la región II) involucran soluciones con $X < X_c$ y el intervalo $(-z_c, z_c)$ (región I) soluciones con $X > X_c$. Por tratarse de problemas lineales en las respectivas regiones, las soluciones serán combinaciones de exponenciales $e^{\alpha z}$ y $e^{\beta z}$ donde $2\alpha^2 = \varepsilon + \Delta$, $2\beta^2 = \varepsilon - \Delta$, $\varepsilon = (1+c/d)$, $\Delta = [(1-c/d)^2 - 4ab/d]^{1/2}$. De la condición $X_1(z_c) = X_2(z_c) = X_c$ se obtiene una ecuación implícita para z_c , a resolver numéricamente.

RESULTADOS Y DISCUSION

Se adoptaron los siguientes valores para los parámetros: $a=1/4$, $b/d=1/6$, $c/d=1/20$ (con lo que $\alpha=0,9766799$ y $\beta=0,3099941$), $X_c=1$ y $z_L=3$. En la Fig.1 se observa la dependencia de z_c en el parámetro de albedo k para $\gamma = 2$. La región explorada abarca valores negativos de k y valores de z_c mayores que z_L , para entender mejor el comportamiento de las raíces en la región de interés ($k > 0$, $z_c < z_L$). En esta región se aprecia la existencia de dos ramas z_{c1} y z_{c2} .

Como en el caso discutido en la Ref.[8], se ve que partiendo del límite de Neumann $k=0$ sólo existe z_{c1} hasta que se llega a un valor particular k^* (que depende de γ) a partir del cual la segunda raíz z_{c2} se hace menor que z_L , y esta situación continúa hasta alcanzar el límite de Dirichlet $k \rightarrow \infty$.

Un hecho interesante que se observa en la Fig. 1 es la presencia de dos raíces extra pertenecientes a la rama z_{c1} en el intervalo $0 \leq k \leq 0,02$. Dichas raíces surgen de un comportamiento biestable del campo X más complicado que el encontrado en la Ref. [8], debido a la variación conjunta del campo Y. Esta característica está presente para valores pequeños de γ y desaparece para valores ligeramente superiores a $\gamma = 2$, dado que la tendencia observada es que z_{c2} crezca y z_{c1} decrezca al aumentar γ .

Aparte del tipo de estructura estudiado es posible considerar los siguientes casos:

a) la región I cubre todo el intervalo (o sea $X \geq X_c$ en $-z_L < z < z_L$). Este caso corresponde a la existencia de la solución z_{c2} con $|z_{c2}| > |z_L|$ cuando $0 \leq k \leq k^*$. Para $k=0$ es la solución homogénea de

Neumann como en Ref.[8];

b) soluciones de tipo periódico, en que se alternan regiones I y II. Este tipo de soluciones, en similitud a lo hallado en Ref.[8], deberían ser inestables y dejar de existir a partir de algún valor finito de k (que depende de γ).

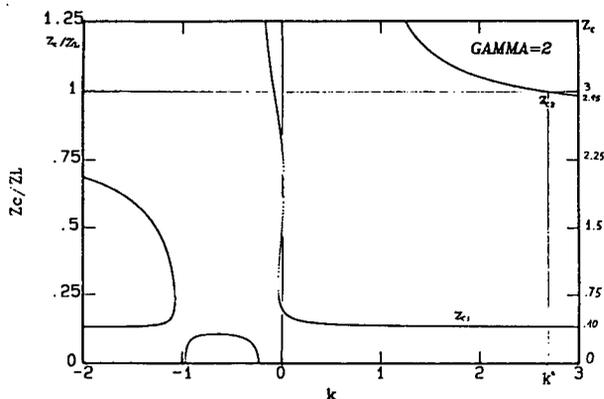


Figura 1: Dependencia de z_c con k para $\gamma=2$ y $z_L=3$. Para favorecer la comprensión del comportamiento de las ramas z_{c1} y z_{c2} se muestran también los valores de $z_c > z_L$, así como valores negativos de k ; k^* es el valor en que $z_{c2}=z_L$. Los valores anotados $z_{c2} \approx 2,95$ y $z_{c1} \approx 0,40$ corresponden a $k=3$.

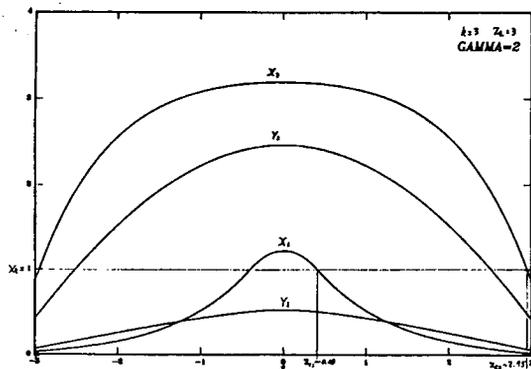


Figura 2: Forma de soluciones correspondiente a $k=3$ en la Fig. 1. Se espera que (X_2, Y_2) sea la solución estable y (X_1, Y_1) sea inestable.

CONCLUSIONES

Se ha considerado aquí una versión unidimensional y lineal por tramos del modelo de Fitz Hugh-Nagumo en un intervalo finito, para estudiar los efectos de las condiciones de contorno sobre la formación y estabilidad de perfiles estacionarios.

Las condiciones de contorno impuestas son las llamadas "de albedo", que indican la posibilidad

de reflectividad parcial y permiten interpolar entre los límites de Dirichlet y Neumann. Existen numerosas posibles aplicaciones de este tipo de resultados relacionados con problemas biológicos, médicos y computacionales¹⁰.

Para extraer conclusiones es necesario discutir previamente la estabilidad de los patrones encontrados: para ello se está realizando un análisis de estabilidad lineal. En contraposición con el caso de una componente es altamente no trivial (si es siquiera posible) encontrar aquí una funcional del tipo de Lyapunov. Como es usual⁶, se considera una pequeña perturbación alrededor de la solución estacionaria y se llega a un problema temporal de autovalores. La estabilidad del patrón está directamente asociada con la positividad del espectro

Como en Ref.[8] es posible encontrar una expresión implícita cerrada no resoluble por métodos analíticos directos, pero que, usando métodos numéricos, permite discutir la estabilidad para un gran conjunto de valores de los parámetros, tarea que se lleva a cabo en la actualidad. Se espera que (como en Ref.[8]) la rama z_{c2} sea la estable y la z_{c1} resulte inestable.

RECONOCIMIENTOS

Este trabajo se ha llevado a cabo con el apoyo del CONICET y CNEA.

REFERENCIAS

- [1] Un claro ejemplo son los siguientes artículos de revisión:
 - a) P.C. Hohenberg y M.C. Cross, "An Introduction to Pattern Formation in Nonequilibrium Systems" en *Fluctuations and Stochastic Phenomena in Condensed Matter* (Lecture Notes in Physics N° 268), Ed. L. Garrido (Springer-Verlag, Berlín, 1987);
 - b) P.C. Cross, "Theoretical Methods in Pattern Formation in Physics, Chemistry and Biology" en *Far From Equilibrium Phase Transitions*, Ed. L. Garrido (Springer-Verlag, Berlín, 1988); y las referencias allí insertas.
- [2] a) P. C. Fife, "Current Topics in Reaction-Diffusion Systems" en *Nonequilibrium Cooperative Phenomena in Physics and Related Fields*, Ed. M. G. Velarde (Plenum, New York, 1984);
 - b) G. Nicolis, T. Erneux and M. Herschowitz-Kaufman Adv. in Chem. Phys. Vol.

- 38, Ed. I. Prigogine y S. Rice (Wiley, New York, 1978);
- c) Y. Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves and Turbulence* (Springer-Verlag, Berlín, 1984);
- d) J. D. Murray, *Mathematical Biology* (Springer-Verlag, Berlín, 1985).
- [3] Varios artículos relacionados con la reacción de Belousov y Zhabotinski pueden ser hallados en *Evolution of Order and Chaos in Physics, Chemistry and Biology*, Eds. C. Vidal y A. Pacault (Synergetics Vol. 17, Ed. H. Haken, Springer-Verlag, Berlín, 1982).
- [4] J. P. Keener, *SIAM J. Appl. Math.* **39**, 528 (1980).
- [5] A. T. Winfree, "Stably Rotating Patterns of Reaction and Diffusion" en *Theor. Chem. Vol. 4*, Ed. H. Eyring y D. Henderson (Academic, N. Y., 1978).
- [6] C. Borzi y H. S. Wio, *Phys. Lett. A* (1991), en prensa.
- [7] a) L. Kramer, E. Ben-Jacob, H. Brand y P. C. Cross, *Phys. Rev. Lett.* **41**, 1891 (1982);
b) L. Kramer y P. C. Hohenberg, *Physica D13*, 357 (1984);
c) P. C. Hohenberg, L. Kramer y H. Riecke, *Physica D15*, 402 (1985);
d) T. Ohta, A. Ito y A. Tetsuka, *Phys. Rev.* **A42**, 3225 (1990).
- [8] C. Schat y H. S. Wio, "an Electrothermal Instability: The Influence of *albedo* boundary conditions on the stationary states of an exactly solvable model", *Physica A* (en prensa).
- [9] a) S. Koga y Y. Kuramoto, *Prog. Theor. Phys.* **63**, 106 (1980);
b) H. P. McKlean, *Adv. Math.* **4**, 209 (1979);
c) R. FitzHugh, *Biophys. J.* **1**, 445 (1961);
d) J. Nagumo, S. Arimoto y S. Yoshizawa, *Proc. IRE* **50**, 2061 (1950).
- [10] B. Y. Kogan, W. J. Karplus, B. S. Billett, A. T. Pang, H. S. Karagueuzian y S. S. Khan, *Physica D50*, 327 (1991); B. Y. Kogan, W. J. Karplus, H. S. Karagueuzian y S. S. Khan, "Simulation of Reentrating Processes in a Heart Muscle Using a Massively Parallel Computer" en *Computers in Biomedicine*, Eds. K. D. Held, S. A. Brebbia y R. D. Ciskowski (Comp. Mech. Pub, Southampton, 1991).
- [11] H. S. Wio, R. Deza, G. Izús y O. Ramírez, en preparación.