

Condições críticas para a formação de padrões em populações biológicas

Critical conditions for the formation of patterns on biological populations

Tiago Mourão C. e Silva, tiagomcsphysics@gmail.com

Orientadora: Celia Anteneodo

Departamento de Física PUC-Rio, Rio de Janeiro, RJ

Submetido em 30/07/2017

Revisado em 02/08/2017

Aprovado em 10/11/2017

Resumo: O estudo da formação de estruturas na distribuição espacial de populações biológicas aqui desenvolvido elucidam padrões observados em meios homogêneos, devido à competição intraespecífica e a dispersão. A modelagem é feita por meio de equações diferenciais parciais não-lineares e é estudada pela análise de aproximações lineares em comparação com métodos computacionais. Com o modelo aqui introduzido e os resultados desse trabalho, é possível estudar casos mais complexos e realistas do que antes.

Palavras Chave: Física Biológica. Dinâmica não-linear. Dinâmicas Populacionais. Distribuições Populacionais.

Abstract: The study of the formation of structures on spatial distributions of biological populations here presented elucidates patterns observed on homogeneous medium, due to intraspecific competition and dispersion. The modelling was done through nonlinear partial differential equations and was studied by linear approximations and computational methods. With the model proposed and the results obtained, it is possible to study more realistic and complex biological populations.

Keywords: Biological Physics. Nonlinear Dynamics. Population Dynamics. Population Distribution.

Introdução

Entender a formação de padrões em populações biológicas é fundamental para tratar diversos problemas, desde os relativos às populações de bactérias em laboratórios até questões ecológicas como a formação de metapopulações [1]. Nesse sentido, é útil desenvolver modelos para explicar e prever a formação desses padrões, em particular estabelecer as condições críticas em que estes surgem.

Neste trabalho, o ponto de partida foi o estudo da dinâmica populacional de um único tipo de organismo simples, por exemplo, bactérias, cuja dinâmica é governada, principalmente, pela reprodução, competição intraespecífica e difusão. Para isso, partimos de uma equação paradigmática no estudo de populações biológicas, a equação de Fisher-KPP [2] para a taxa de crescimento da densidade populacional u , que no caso unidimensional é

$$\partial_t u(x, t) = u(x, t)(a - bJ[u(x, t)]) + D\partial_{xx}u(x, t), \quad (1)$$

onde a , b e D são constantes positivas, x é a localização espacial e t o tempo. Portanto, esta equação contém os ingredientes mais fundamentais da evolução espaciotemporal de uma população biológica: o crescimento logístico, com uma taxa de reprodução per capita a e um termo de competição devido ao fato de que os recursos são limitados evitando a explosão exponencial da população, e a dispersão, descrita como difusão normal. Além disso, na equação de Fisher-KPP, a competição é não local, é dizer envolve uma vizinhança. Esta não localidade é introduzida pela operação de convolução sobre a distribuição de indivíduos, dada por $J[u(x, t)] \equiv \int f(x - x')u(x', t)dx'$, que recupera o caso local quando a função de influência f é uma delta de Dirac.

Objetivo

O primeiro passo foi generalizar a equação fundamental (1), para torná-la mais realista, através da introdução de não linearidades em alguns de seus termos, resultando

$$\partial_t u(x, t) = au^m(x, t) - bu^n(x, t) + D\partial_{xx}u^v(x, t), \quad (2)$$

sendo n , m , v constantes positivas. Este modelo é mais realista porque, em populações biológicas, a difusão não é normal, mas anômala, o que é representado fenomenologicamente por um coeficiente de difusão dependente

de u , dado por $v \neq 1$ [3], que inclui casos em que há subdifusão ($v > 1$), superdifusão ($v < 1$) e recupera também a difusão usual ($v = 1$). Com efeito, trabalhos anteriores mostram que a dispersão de populações biológicas não é dada apenas por movimentação aleatória, mas é influenciada pela densidade, seja a favor ou contra a aglomeração [3,4]. Enquanto os termos de crescimento e competição podem ser não lineares se afetados por efeitos cooperativos, de retroalimentação, o que é representado mediante os expoentes $m, n \neq 1$. O funcional $J[u^n(x, t)]$ é definido por

$$J[u^n(x, t)] \equiv \int f(x - x')u^n(x', t)dx'. \quad (3)$$

Em todos os casos, consideramos que a função de influência f na equação (3) é um pulso quadrado de largura ω , isto é, $f(x - x') = \frac{1}{2\omega}\theta(\omega - |x - x'|)$, onde θ é a função de Heaviside. Assim, $f(x - x')$ apenas será diferente de zero quando x' estiver a uma distância menor que ω do ponto x . Desta forma, o parâmetro ω controla o alcance da interação de competitividade não local.

Uma vez proposta a equação de evolução (2), o objetivo principal é a determinação da região no espaço de parâmetros onde surgem padrões espaciais, generalizando resultados anteriores [4].

O problema pode ser abordado teoricamente mediante a técnica de linearização da equação de evolução, o que permite conhecer como se desenvolve uma perturbação do estado homogêneo. Ainda, esta análise será complementada com a integração numérica [5] da equação de evolução (2), que é uma equação diferencial parcial não linear, tendo como variáveis uma dimensão espacial e o tempo.

Metodologia e resultados

A primeira parte deste trabalho centrou-se no estudo de análise de estabilidade das soluções da equação diferencial (2) através de um processo de linearização considerando como solução $u(x, t)$ uma perturbação ondulatória em torno da solução homogênea $u_0 = (a/b)^{1/(n-m+1)}$, de tal forma que

$$u(x, t) = u_0 + \varepsilon \exp(ikx + \lambda(k)t). \quad (4)$$

onde ε é a amplitude original da perturbação, k é o número de onda e $\lambda(k)$ é a taxa temporal. Substituindo esta forma na equação de evolução (2) e eliminando termos de ordem superior ao primeiro em ε , obtemos (mediante os cálculos exibidos no apêndice) a seguinte relação de dispersão:

$$\Lambda(k) = \beta(\omega k)^2 \frac{\text{sen}(\omega k)}{\omega k} + \frac{m-1}{n}, \quad (5)$$

onde $\Lambda(k) \equiv \lambda_k/(nbu_0^n)$, $\beta \equiv Dv u_0^{v-m}/(a \omega^2 n)$. Com isso, chegamos analiticamente a uma relação de dispersão que permite estabelecer condições críticas para as quais a equação de evolução gera padrões espaciais. A relação de dispersão é exemplificada na Figura 1.

Por simplicidade, e sem perda de generalidade, de agora em diante consideraremos $a = 1$. Isto equivale a um reescalonamento do tempo e dos outros parâmetros da equação, de forma a obter uma equação de evolução adimensional.

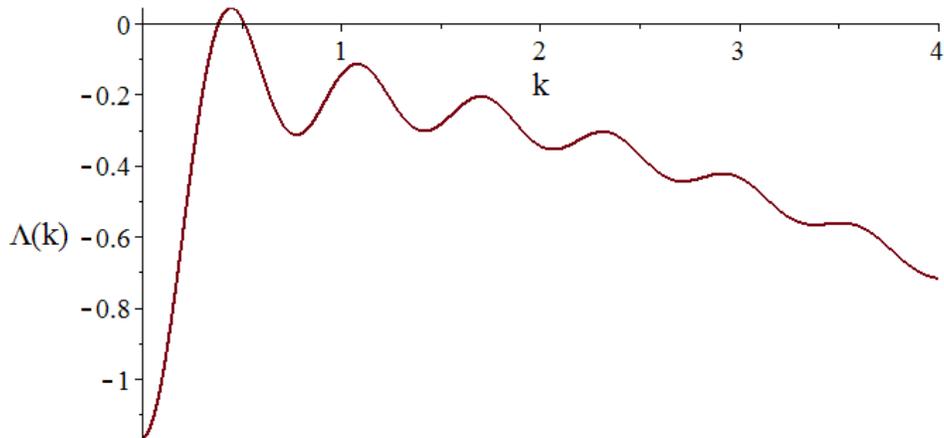


Figura 1 - Relação de dispersão para $D=0.1$, $\omega=10$, $n=3$, $m=0.5$, $v=1$, $u_0=1$.

Se a perturbação ondulatória dada pela equação (4) diminui conforme o sistema evolui, então será recuperado o estado estacionário uniforme u_0 , mas no caso contrário poderão ocorrer padrões. Nesse sentido, para a estabilidade do estado uniforme, $\lambda(k)$ deve ser negativo para todo k , e caso contrário surgirão padrões, o que implica numa condição para determinar os valores críticos dos parâmetros, mediante a equação de dispersão. Esta condição é $\Lambda(k_{max}) > 0$, onde k_{max} é o valor de k que maximiza a relação de dispersão (próximo de $k = 0,5$ no caso da Figura 1) e é calculado numericamente.

Essa condição foi utilizada para gerar diagramas de fase, como os mostrados na Figura 2, construída para um valor típico do coeficiente de difusão $D = 0.1$. Os padrões se formam para valores dos parâmetros na região acima de cada curva, que corresponde a $\Lambda(k_{max}) > 0$. O ponto assinalado em vermelho corresponde aos valores $n = 3$ e $\omega = 10$, que foram os valores utilizados nas integrações numéricas da equação de evolução temporal.

A partir destes diagramas de fase é possível visualizar a influência dos parâmetros do modelo. Por exemplo, o expoente ν da difusão. Observando a Figura 2, fica claro que $\nu > 1$ dificulta a formação de padrões para valores grandes de u_0 e a facilita para valores pequenos de u_0 . O contrário ocorre para $\nu < 1$, o que mostra a transição entre as regiões de super e subdifusão. Além disso, percebe-se também que quando $m = \nu$ não há dependência de u_0 , como previsto pela equação de dispersão.

Por último e mais interessante, vemos que a assíntota vertical (associada a $n = 0$ no caso $m = 1$) se desloca com m , sendo que na região à esquerda da assíntota não há padrões, independentemente dos valores de u_0 , ν ou ω . Do ponto de vista da dinâmica, isso sugere que o aumento da cooperatividade (maior m) facilita a formação de padrões, fazendo com que mais valores de u_0 sejam capazes de gerá-los, além de permitir valores menores de n , de forma que surjam padrões mesmo quando a competitividade é comparativamente baixa.

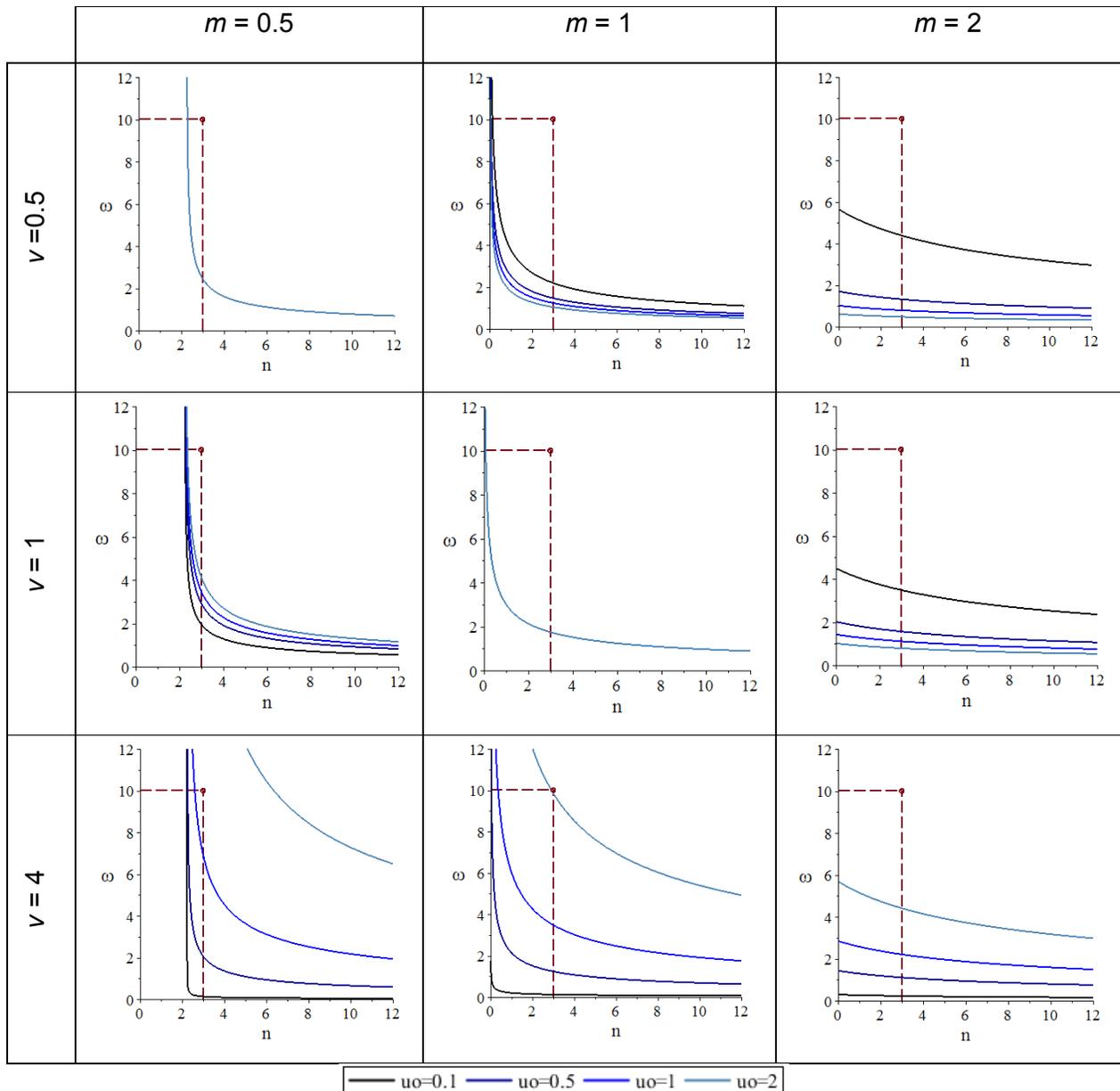


Figura 2 - Curvas correspondentes a $\lambda(k_{max}) = 0$ no plano $n - \omega$ para $D = 0.1$

A fim de verificar os resultados encontrados pela aproximação linear e confirmar os diagramas de fase, resolvemos a equação (2) numericamente, através do método de Euler FTCS (*Forward in Time Centered in Space*), que é um algoritmo condicionalmente estável para a equação considerada [5], com condições de contorno cíclicas. Esta análise numérica é fundamental para confirmar a validade da aproximação linear e permite visualizar os padrões

formados, cuja forma pode depender dos valores dos parâmetros, como mostrado na Figura 3. Nesta figura, as escalas foram escolhidas todas iguais para facilitar a comparação, exceto quando $m = 2$ e $\nu = 0.5$, pois neste caso a população se concentra muito nos pontos de pico, diferentemente dos outros casos em que o estado estacionário tem valores finitos para todo x (como será mostrado na Figura 4 sobre a evolução temporal).

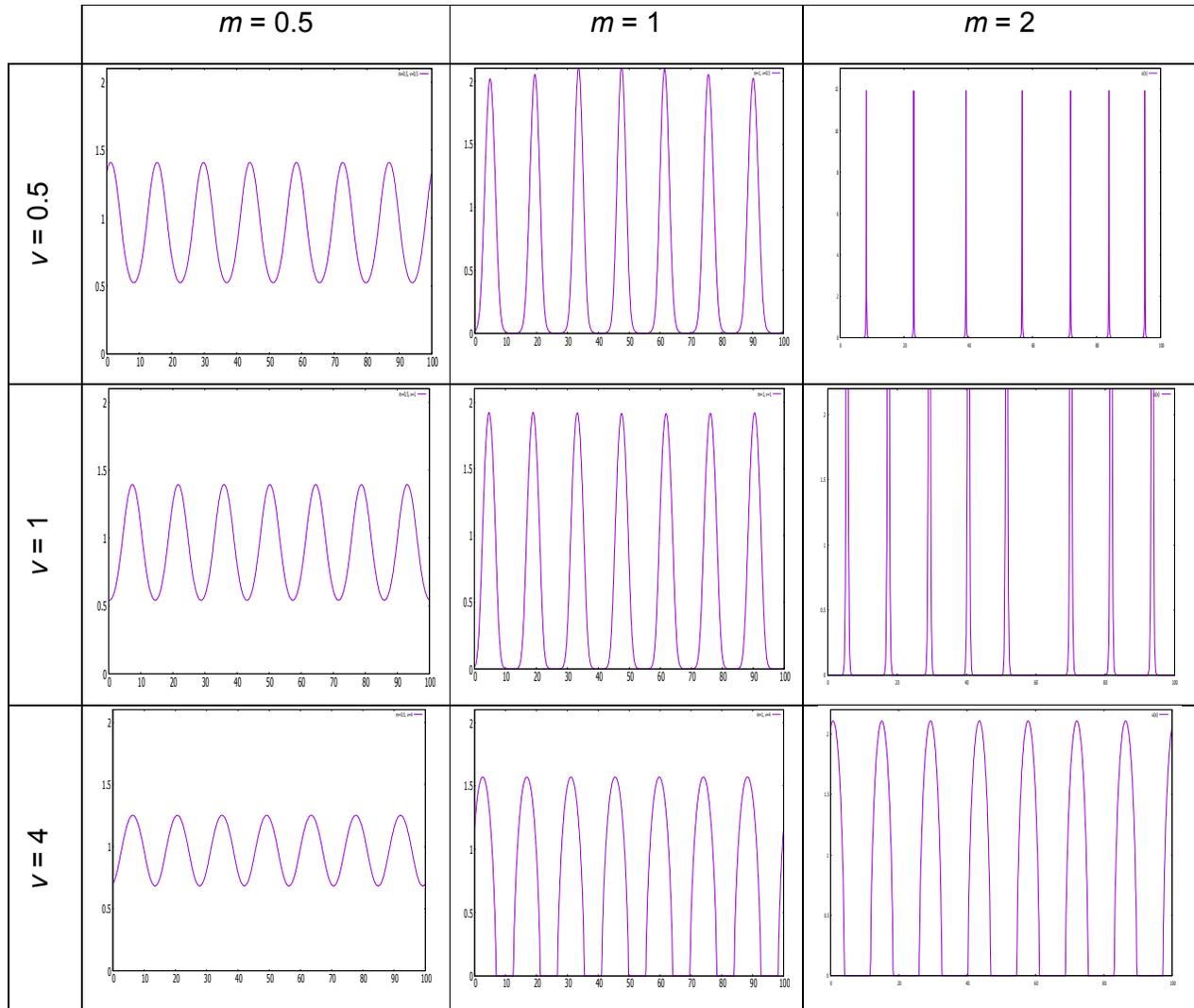


Figura 3 - Padrões obtidos para $t = 200$, onde $u_0 = 1$, $\omega = 10$, $D = 0.1$.

Finalmente, na Figura 4 mostramos a evolução temporal dos casos de difusão normal ($\nu = 1$).

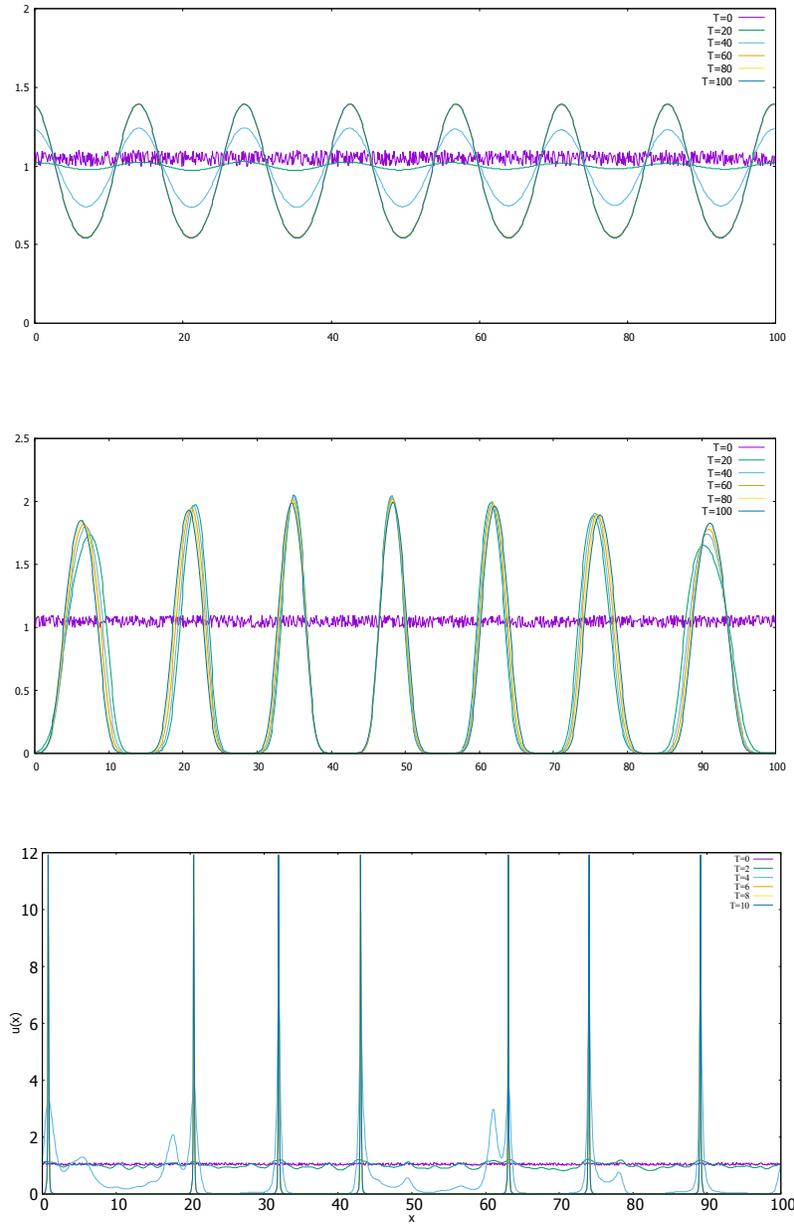


Figura 4 - Evolução temporal da distribuição da população para os casos $m = 0.5, 1$ e 2 , de cima para baixo. Sendo $D = 0,1$, $\omega = 10$, $n = 3$, $\nu = 1$, $u_0 = 1$ em todos os casos.

Como pode ser observado na Figura 4, em todos os casos, a população começa com uma distribuição próxima do estado estacionário $u_0 = 1$. Nos dois primeiros casos, a distribuição evolui de maneira a formar padrões, como esperado pelos diagramas de fase, e estes padrões são estacionários, ou seja, atingem um estado que fica praticamente inalterado depois de um tempo suficientemente longo. O último gráfico, entretanto, é diferente, neste caso a perturbação cresce, e formam padrões peculiares, muito concentrados em alguns pontos, de modo que parece formar um pente de funções delta de Dirac. Um dos resultados mais interessantes é o que pode ser observado na Figura 4 para $m = 0,5$ em que os valores mínimos do padrão são muito diferentes de zero, como observado em experimentos de bactérias [4].

Conclusões

Com os resultados da simulação e os diagramas de fase teóricos foi possível determinar os efeitos das não linearidades na equação de evolução generalizada, confirmando a validade da aproximação linear para este caso e abrindo caminho para novas pesquisas que envolvam outras formas da função de influência f . Além disso, o caso $m = 0,5$ provou gerar padrões muito mais parecidos aos observados em alguns casos reais de distribuições de populações biológicas, devido à densidade muito diferente de zero entre os picos. Este resultado indica que nessas populações pode existir um efeito de retroalimentação negativa ($m < 1$) no processo de reprodução.

Apêndice

Detalhamos aqui os cálculos para derivar a relação de dispersão (5). Substituiremos a expressão (4) dentro da equação (2), definindo também $\varepsilon_k(x, t) = \varepsilon \exp(ikx + \lambda(k)t)$, logo $u(x, t) = u_0 + \varepsilon_k(x, t)$. Mas antes, vale analisar cada termo da equação considerando apenas primeira ordem em ε :

$$[u(x, t)]^v = u_0^v + v u_0^{v-1} \varepsilon_k(x, t)$$

Onde $u_0^{n-m+1} = a/b$. Assim

$$\partial_{xx}([u(x, t)]^v) = v u_0^{v-1} k^2 \varepsilon_k(x, t).$$

Além disso,

$$J[u^n] = \int (u_0^n + n u_0^{n-1} \varepsilon_k(x', t)) \frac{1}{2\omega} \Theta(\omega |x - x'|) dx' = u_0^n + n u_0^{n-1} J[\varepsilon_k].$$

Então

$$\lambda_k \varepsilon_k = Dv u_0^{v-1} k^2 \varepsilon_k + a u_0^m + a m u_0^{m-1} \varepsilon_k - b u_0^{n+1} - b u_0^n \varepsilon_k - b n u_0^n J[\varepsilon_k].$$

Finalmente, considerando que $a u_0^m = b u_0^{n+1}$ e dividindo por $\varepsilon_k \equiv \varepsilon_k(x, t)$ obtemos:

$$\lambda_k = Dv u_0^{v-1} k^2 + a(m-1) u_0^{m-1} - nb u_0^n J[\varepsilon_k]/\varepsilon_k.$$

Notando que $J[\varepsilon_k]/\varepsilon_k$ representa a transformada de Fourier do kernel (nesse caso, a transformada de Fourier de um pulso de Heaviside de largura ω), podemos substituir $J[\varepsilon_k]/\varepsilon_k$ por $\text{sen}(\omega k)/\omega k$. Logo, dividindo por $nb u_0^n$ a equação acima obtemos a equação de dispersão (5).

Referências

- 1 – HOLMES, ELIZABETH E., et al. Partial differential equations in ecology: spatial interactions and population dynamics. **Ecology**, 1994, p. 17-29.
- 2 – R. A. FISHER. The wave of advance of advantageous genes. **Annals of Eugenetics** Volume 7, Issue 4, 1937.
- 3 – MURRAY, JAMES D., **Mathematical biology I: An introduction**, vol. 17 of Interdisciplinary Applied Mathematics, 2002.
- 4 – E.H. COLOMBO e C. ANTENEODO, Nonlinear diffusion effects on biological population spatial patterns. **Phys. Rev. E** 86, 036215, 2012.
- 5 – WILLIAM H. PRESS... [et al.] **Numerical recipes in C: The art of scientific computing**, 2nd ed. Cambridge University Press, 2002.