



**Universitat de les
Illes Balears**

Facultat de Ciències

Memòria del Treball de Fi de Grau

Estudio de eventos demográficos en sistemas de partículas interactivas.

Ismael Rodríguez López

Grau de Física

Any acadèmic 2019-20

DNI de l'alumne: 43215454H

Treball tutelat per Cristóbal López Sánchez
Departament de Física

S'autoritza la Universitat a incloure aquest treball en el Repositori Institucional per a la seva consulta en accés obert i difusió en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació	Autor		Tutor	
	Sí	No	Sí	No
	X		X	

Paraules clau del treball:

Formación de patrones, partículas interactivas, interacción demográfica.

ÍNDICE

1. Motivación.	1
2. Introducción.	2
2.1. Movimiento Browniano.	2
2.2. Partículas interactivas. Dispersiones coloidales.	3
3. Modelos de partículas interactivas.	4
3.1. Eventos demográficos.	4
3.2. Potencial repulsivo.	10
4. Modelo mixto: interacción demográfica acoplada a potencial repulsivo.	14
5. Resumen y conclusiones.	17
Apéndice 1. Integración numérica de ecuaciones diferenciales estocásticas.	19
Apéndice 2. estructura gaussiana de los clústeres formados en la interacción gem-3. ...	22
Bibliografía.	22

1. MOTIVACIÓN.

El objetivo de este trabajo es ayudar a comprender el impacto de los eventos de nacimiento y muerte en suspensiones coloidales y como estos eventos modifican las condiciones en las cuales cohesionan los cristales de clústeres [1-4], en los cuales la celda unidad asociada a la fase cristalina está ocupada por un agregado de partículas dando lugar a lo que se conoce como densidades de grano grueso. Se estudiará un sistema unidimensional de partículas Brownianas con una interacción repulsiva de núcleo blando, la cual permite que las partículas se solapen, acoplada a una interacción demográfica de nacimiento y muerte. Estos fenómenos son importantes en el estudio de dinámica celular ya que aparecen en procesos de cicatrización de heridas [5] y biología tumoral [6] entre otros.

La importancia de ambos mecanismos ha sido abordada por separado mostrando que ambos son procesos asociados a la formación de patrones en sistemas de partículas Brownianas. En el caso de las interacciones de nacimiento y muerte el rango finito de las interacciones que explican como individuos biológicos interactúan de manera competitiva [7-13] da lugar bajo las condiciones necesarias a formación de patrones. Mientras que los estudios realizados en el marco de la materia condensada muestran la aparición de densidades granulares gruesas en sistemas coloidales caracterizadas por distribuciones espaciales periódicas [14]. El conocimiento de las condiciones en las cuales ambas interacciones acopladas permiten la formación de estructuras periódicas son un tema central en la caracterización y estudio a escala molecular de tejidos tumorales [15]. Así pues, este trabajo se centra en el estudio discreto de sistemas, basado en la dinámica de los individuos y sus interacciones. Para ello se presenta un modelo de partículas Brownianas las cuales están sometidas a dos tipos de interacciones, la primera de las cuales es una interacción competitiva de rango finito a través de la cual la tasa de reproducción de los individuos se modifica en función de la cantidad de vecinos en un rango finito. Por otro lado los individuos interactúan entre ellos vía un potencial repulsivo.

El trabajo está organizado de la siguiente manera. En la sección 2 se presentan las bases teóricas necesarias para la realización del estudio. En la sección 3 se introducen los algoritmos numéricos empleados en las simulaciones en los casos de tener solo interacción demográfica o potencial repulsivo, también se presentan y discuten los resultados obtenidos para cada uno de los casos. En la sección 4 se estudia el modelo conjunto en el que se tienen en cuenta ambas interacciones. El trabajo concluye con un resumen y discusión de los resultados en la sección 5.

2. INTRODUCCIÓN.

2.1. MOVIMIENTO BROWNIANO.

Descubierto por el botánico Robert Brown en 1827 cuando observaba partículas de polen suspendidas en la superficie del agua [16]. El movimiento Browniano es el movimiento aleatorio que se observa en las partículas que se hallan en un medio fluido debido a las colisiones con las moléculas de dicho fluido. Sin embargo, no fue hasta casi ochenta años más tarde cuando Albert Einstein, en 1905, consiguió introducir un tratamiento matemático válido para la descripción de este movimiento errático [17].

En su teoría Einstein introduce una visión probabilística del proceso válida para un conjunto de partículas brownianas en vez de centrarse en la trayectoria de las partículas individuales. Este segundo punto de vista fue tratado más tarde por Paul Langevin, quien tuvo en consideración la ecuación de Newton para cada partícula de manera individual empleando dos tipos de fuerzas actuando sobre las partículas Brownianas: la primera de ellas fue una fuerza de fricción proporcional a la velocidad y la segunda una fuerza fluctuante $\vec{\xi}(t)$ la cual representaba la erraticidad debida a la acción del fluido sobre las partículas Brownianas (ver Fig.1). Otras contribuciones a la teoría del movimiento Browniano se atribuyen a Smolochowski y Wiener entre otros.

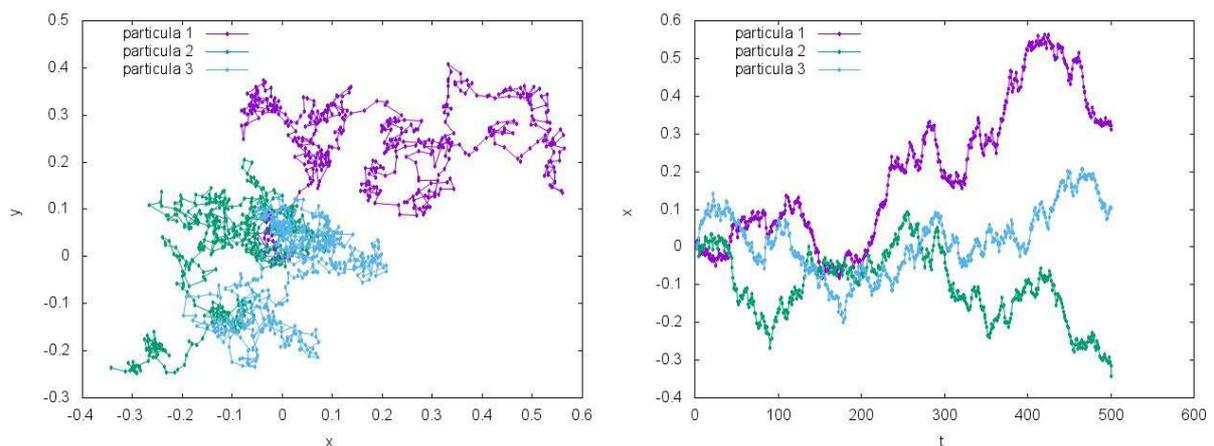


Figura 1. Una realización de la dinámica Browniana asociada a tres partículas puntuales. En el panel de la izquierda puede verse como las partículas se desplazan de manera errática por un dominio bidimensional, la condición inicial es que todas parten

del origen de coordenadas. En el cuadro de la derecha se muestra la evolución temporal de la componente x del movimiento de cada una de las partículas.

2.2. PARTÍCULAS INTERACTIVAS. DISPERSIONES COLOIDALES.

Un coloide o dispersión coloidal es un sistema físico formado por dos fases no miscibles, una dispersante o continua y otra dispersa constituida por partículas no solubles de mayor tamaño. A diferencia de las disoluciones donde el solvente y el soluto constituyen una única fase homogénea, los coloides son sistemas heterogéneos ya que las partículas coloidales se encuentran dispersas en la fase continua. Ejemplos de estos sistemas son los aerosoles, la pintura y el polvo en suspensión entre otros. También se ha observado que este fenómeno en tejidos vivos [18] así como en algunos insectos [19].

Desde el punto de vista microscópico, los coloides son partículas que interactúan entre ellas y con el medio, por lo tanto es lógico pensar que estas partículas no se encuentren en reposo y tengan direcciones de movimiento privilegiadas asociadas a sus velocidades. No obstante, debido a la agitación térmica, los coloides sufren un gran número de colisiones con las partículas que conforman el medio dispersante. Por este motivo, los coloides cambian constantemente la dirección de su movimiento presentando un comportamiento errático en el tiempo, debido a este fenómeno es de gran utilidad asemejar el comportamiento de estas partículas al de partículas Brownianas capaces de interactuar entre sí.

A partir de diversas simulaciones se intentará estudiar el comportamiento de dichos coloides cuando las interacciones entre partículas típicamente observadas en estos sistemas se acoplan a eventos de nacimiento y muerte. Los movimientos de las partículas están impulsados por fuerzas derivadas de potenciales a dos cuerpos que pueden actuar de manera variada según el sistema que se considere. En el caso de este trabajo se llevarán a cabo el estudio cuando las interacciones son puramente repulsivas, utilizando el modelo de potencial exponencial generalizado.

3. MODELOS DE PARTÍCULAS INTERACTIVAS.

3.1. EVENTOS DEMOGRÁFICOS.

La primera parte de la dinámica que se pretende estudiar es la debida a procesos demográficos típicos entre individuos biológicos. Para ello se presenta un sistema continuo constituido por el conjunto inicial de $N(t = 0) = N_0$ partículas puntuales distribuidas de manera aleatoria en un segmento unidimensional de longitud L con condiciones de contorno periódicas. Dichos individuos se difunden de manera browniana y se reproducen a un ritmo λ_i y mueren a un ritmo β_i , $i = 1, \dots, N$. Siendo $N \equiv N(t)$ el número de partículas en el sistema a tiempo t .

Para la realización de las simulaciones numéricas se ha empleado el algoritmo de Gillespie [20] adaptado al caso de interacciones demográficas tal como se presenta en [21]. La secuencia consiste en, dados las tasas de nacimiento y muerte de cada una de las partículas se determina cual es el paso de tiempo transcurrido el cual una de las partículas del sistema o bien se reproducirá o morirá. Esta secuencia se repite hasta que se alcanza el final de la simulación. El algoritmo consta de los siguientes pasos:

1º Paso. Cada partícula del sistema tiene asociada tasa individual de nacimiento y otra de muerte. Dada la partícula i -ésima sus tasas individuales vienen dadas por las siguientes expresiones,

$$\lambda_i = \max\left(0, \lambda_0 - N_R^i / N_S\right), \quad \beta_i = \beta_0, \quad (1)$$

donde λ_0 y β_0 son constantes que representan las tasas de reproducción y muerte, respectivamente, que se le asociarían a un individuo que estuviera aislado del resto, N_S es una constante de saturación y N_R^i es el número de individuos que se encuentran a una distancia igual o inferior que un cierto rango de interacción fijo R (véase Fig.2) y la función **max** se ha introducido para evitar valores negativos de las tasas,

$$N_R^i = \sum_{|x_i - x_j| < R} n_j. \quad (2)$$

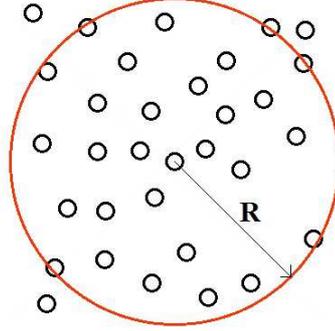


Figura 2. Representación de N_R^i . La partícula que se encuentra en el centro del círculo representa la partícula de referencia i todas las partículas que están dentro del círculo de radio R son las que se tienen en cuenta en la ecuación (2).

Conocidas las tasas λ_i y β_i de cada partícula, se calculan las tasas totales de nacimiento y muerte,

$$B_{tot} = \sum_{i=1}^N \lambda_i, \quad D_{tot} = \sum_{i=1}^N \beta_i \quad (3)$$

y se calcula la tasa total como la suma de ambas,

$$R_{tot} = B_{tot} + D_{tot} = \sum_{i=1}^N (\lambda_i + \beta_i). \quad (4)$$

2º Paso. El siguiente objetivo es obtener el incremento de tiempo Δt transcurrido el cual una partícula del sistema se reproducirá o morirá, para ello se emplea una densidad de probabilidad exponencial la cual, una vez invertida, tiene la forma siguiente,

$$\Delta t = -\frac{\ln(\xi_0)}{R_{tot}}, \quad (5)$$

donde ξ_0 es un número aleatorio uniformemente distribuido en el intervalo (0,1).

3º Paso. Tras el paso de tiempo Δt , un individuo i , elegido de entre todos los $N(t)$ individuos, bien se reproduce o bien desaparece. Con probabilidad B_{tot}/R_{tot} el evento será el de reproducción, y con probabilidad D_{tot}/R_{tot} será el de muerte.

4° Paso. Una vez determinado cual será el evento que ocurrirá, se ha de determinar a qué partícula le ocurrirá. Para ello, en el caso de que el evento sea una muerte, dado que la tasa de muerte por partícula es la misma para todas, dicha elección se hace de manera aleatoria entre el conjunto de partículas. Si el evento es un nacimiento, la probabilidad de elegir a un individuo i está ponderada proporcionalmente a su contribución a la tasa total de nacimiento. Para ello se toma un número aleatorio ξ_2 distribuido de manera uniforme sobre el intervalo $(0,1)$ y se elige la partícula i que cumpla que,

$$\sum_{j=1}^{i-1} \lambda_j < \xi_2 \mathbf{B}_{tot} \leq \sum_{j=1}^i \lambda_j. \quad (6)$$

De esta forma si el evento es una muerte la partícula seleccionada se elimina del sistema y se actualiza el número de partículas, $N(t + \Delta t) = N(t) - 1$. Si el evento es un nacimiento, la partícula recién nacida se coloca sobre su pariente y se actualiza el número de partículas en el sistema, $N(t + \Delta t) = N(t) + 1$.

5° Paso. Finalmente todos los individuos realizan un salto aleatorio de longitud Δx , el cual está caracterizado por ser un número aleatorio gaussiano generado a través del algoritmo de Box-Muller [22].

En las simulaciones realizadas se implementa el algoritmo mostrado anteriormente para representar la evolución temporal de un conjunto de $N_0 = 1000$ individuos en un segmento unidimensional de longitud $L = 1$ y valores de los parámetros $N_S = 50$ y $R = 0.1$, de manera que la densidad inicial de partículas es $\rho_0 = N/L^d = 1000$ donde d es la dimensión en la que se está trabajando ($d = 1$). Se pretende estudiar el comportamiento del sistema en función del coeficiente de difusión D y del parámetro de control $\mu = \lambda_0 - \beta_0$.

Para valores del coeficiente de difusión suficientemente altos, véase Fig.3, el sistema se encuentra en una fase en la cual la dinámica de las partículas es completamente aleatoria ocupando todo el espacio de manera homogénea. Al disminuir el valor de D puede verse en las Fig.4, 5, 6 (paneles inferiores) que el sistema presenta una transición de fase a una en la que emergen procesos de agregación, este hecho queda reflejado en Fig.4, 5, 6 (paneles superiores) los cuales muestran la densidad en función de la posición, la cual muestra regiones del espacio completamente vacías.

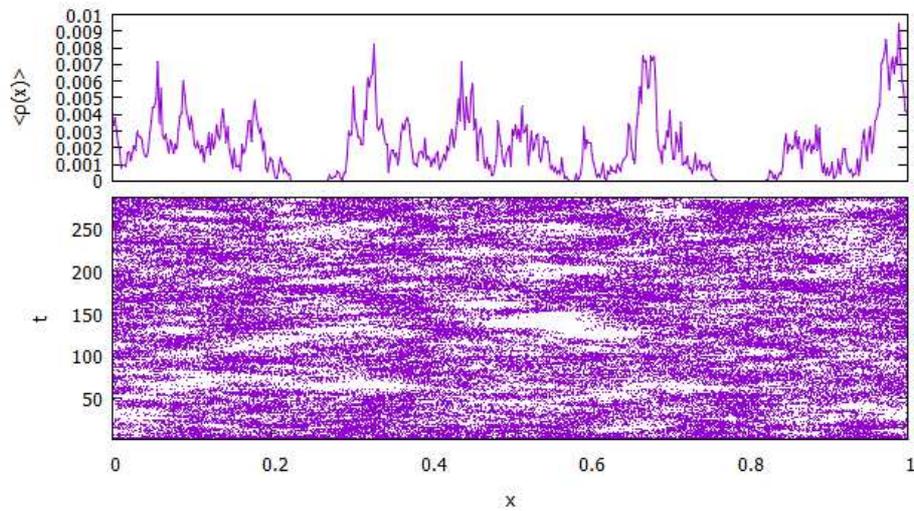


Figura 3. Dinámica del conjunto de partículas evolucionando según el algoritmo presentado para las interacciones demográficas en un dominio unidimensional de tamaño $L = 1$. Inicialmente se tienen $N_0 = 1000$ partículas en el sistema. Los valores de los parámetros empleados son $\mu = 0.46$ y $D = 3 \times 10^{-4}$. Los paneles inferiores muestran la distribución espaciotemporal y los paneles superiores muestran la densidad de partículas en función de la posición, $\langle \rho(x) \rangle$, para tiempos largos. La densidad se ha obtenido promediando espacialmente sobre celdas de tamaño $0.02R$, sobre el conjunto de individuos $N(t)$ presentes en las 150 últimas iteraciones y temporalmente sobre estas.

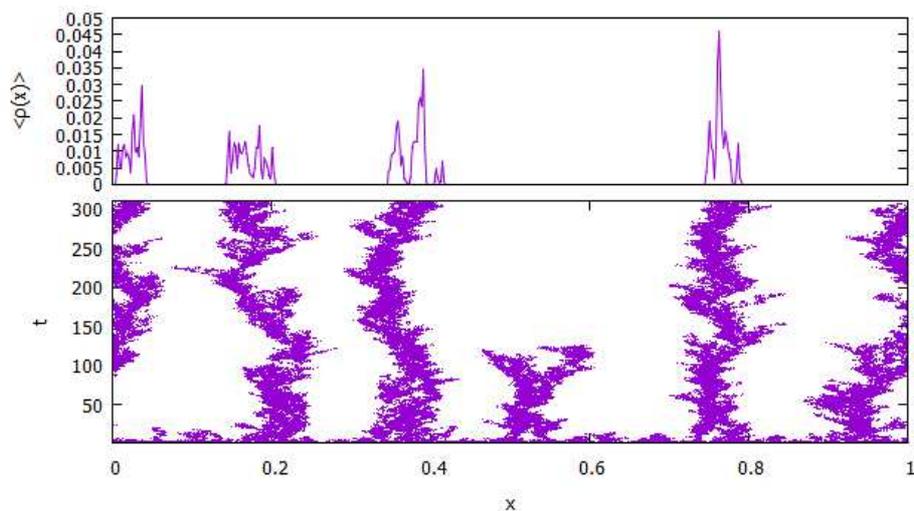


Figura 4. Dinámica del conjunto de partículas para los valores de los parámetros $\mu = 0.5$ y $D = 1 \times 10^{-5}$. En este caso los individuos se encuentran en una fase de agregación y los patrones formados son ruidosos. En el panel superior puede verse

como para tiempos suficientemente largos los individuos se encuentran únicamente en los clústeres (no hay partículas en el espacio entre estos)

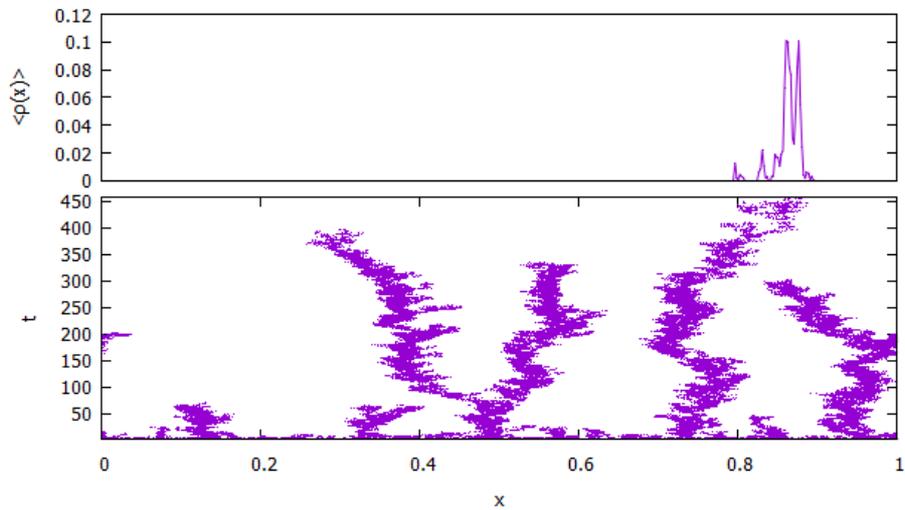


Figura 5. Dinámica del conjunto de partículas para los valores de los parámetros $\mu = 0.4$ y $D = 1 \times 10^{-5}$. En este caso los individuos se encuentran en una fase de agregación y los patrones formados son ruidosos. La densidad de partículas en el estado final viene dada por un único pico, en este caso se ha visto que para tiempos suficientemente largos el sistema tiende una configuración vacía (todos los individuos han desaparecido y el sistema se ha extinguido)

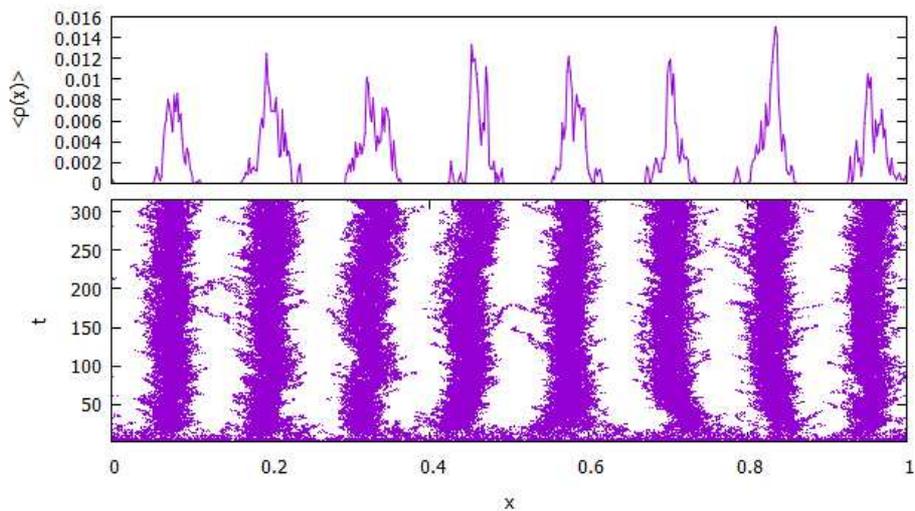


Figura 6. Ídem que en Fig.4, 5 excepto por $\mu = 0.9$. En este caso se observan patrones bien formados. Este hecho queda reflejado en la densidad en función de la posición, la

cual muestra una mayor concentración de partículas en el centro de cada uno de los clústeres.

El estudio realizado en este modelo de partículas brownianas muestra que si nos encontramos en el régimen difusivo en el que la formación de patrones es observada, existe un valor crítico del parámetro de control ($\mu = \mu_c \approx 0.45$) por encima del cual, en la fase de agregación, los individuos tienden a una situación estable a tiempos largos en la cual el número de partículas en función del tiempo oscila en torno a un valor estacionario $N_{st} = \mu N_S / 2R$ para el caso unidimensional [23]. Si, por lo contrario nos encontramos en la situación de $\mu < \mu_c$ el estado final del sistema es un estado completamente vacío, lo que muestra que el sistema se ha extinguido. Este hecho queda reflejado en la Fig.7 en la cual puede verse la evolución temporal del número de partículas. Para el caso de la Fig.3 el sistema rápidamente alcanza valores cercanos al valor estacionario dado por N_{st} . Para el caso presentado en la Fig.4 puede verse que para $\mu = 0.5 > \mu_c$ el sistema también oscila sobre un valor estacionario. Para el caso de la Fig.5 donde $\mu = 0.4 < \mu_c$ el sistema se extingue. Finalmente para el caso de la Fig.6 el sistema rápidamente alcanza el valor estacionario mencionado antes pero, a medida que pasa el tiempo el número de partículas se incrementa ligeramente, haciendo que para tiempos largos el número de partículas oscile alrededor de un valor ligeramente superior al valor introducido antes.

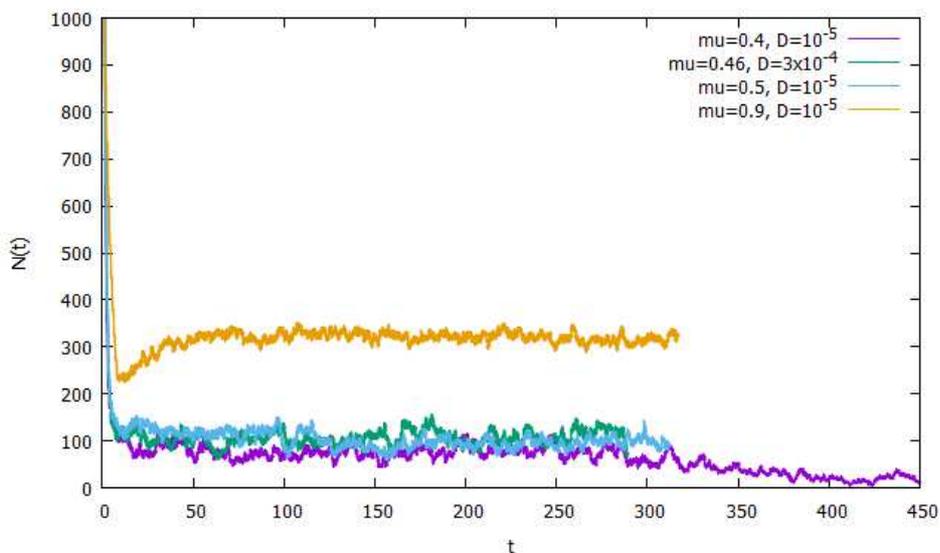


Figura 7. Evolución temporal del número de partículas obtenido a través de las simulaciones numéricas. Puede verse el comportamiento anómalo para el caso en que los clústeres aparecen formando estructuras periódicas y que para $\mu < \mu_c$ el sistema se extingue.

3.2. POTENCIAL REPULSIVO.

El siguiente objetivo es presentar la ecuación del movimiento para una partícula Browniana interactuando vía potencial a dos cuerpos. Para ello se partirá de la segunda Ley de Newton en la que se podrán identificar los términos de fuerza de fricción, la fuerza fluctuante característica de sistemas de partículas Brownianas, la cual se modula como un ruido blanco y un término de fuerza repulsiva. De esta forma, la ecuación del movimiento que se obtiene es la siguiente,

$$m \frac{dv_i}{dt} = F_i + \sqrt{2k_B T} \eta_i(t) - \gamma v_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (7)$$

donde el factor η_i es un ruido blanco, cuya media y correlaciones vienen dadas por:

$$\langle \eta_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \delta(t - t') \delta_{ij}. \quad (8)$$

En particular se pretende estudiar el caso sobreamortiguado, donde $\gamma \gg 1$. En este régimen los términos inerciales pueden despreciarse debido a la dificultad que tienen las partículas en adquirir aceleración al estar su movimiento dominado por la fricción. De esta manera la ecuación (7) puede reescribirse únicamente con los términos difusivos y de interacción:

$$v_i = \frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i}{\gamma} + \sqrt{\frac{2k_B T}{\gamma}} \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (9)$$

donde la fuerza F_i es producida por el gradiente de una energía potencial, $F_i = -\nabla U = -\nabla(\gamma V) = -\gamma \nabla V$. Por lo tanto, la ecuación (8) puede reescribirse como:

$$\frac{dx_i}{dt} = -\nabla_i V + \sqrt{2D} \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N \quad (10)$$

Donde se ha introducido el coeficiente de difusión D , el cual está relacionado con el coeficiente de fricción y la temperatura a partir de la relación de Einstein $D = k_B T / \gamma$ [17]. Además, como el potencial de interacción que se pretende estudiar es un potencial a dos cuerpos la forma final de la ecuación del movimiento de una partícula puede escribirse como

$$\frac{dx_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N \nabla v(x_i - x_j) + \sqrt{2D} \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (11)$$

una vez introducida la ecuación del movimiento que se pretende simular se presenta el potencial que se empleará de ahora en adelante, el cual es un potencial repulsivo a toda distancia que decae de manera exponencial,

$$v(r) = \epsilon e^{-\left(\frac{r}{R}\right)^\alpha}, \quad \epsilon, R, \alpha > 0, \alpha \in \mathbb{R} \quad (12)$$

Este potencial es conocido como modelo exponencial generalizado de orden α (GEM- α), donde el parámetro ϵ es la amplitud de la interacción y R es la distancia típica de la interacción. Tal como puede verse en la Fig.8 la característica más importante de este potencial es que es un potencial repulsivo a toda distancia y que a diferencia de otros potenciales con comportamientos semejantes este no diverge en el origen por lo tanto da lugar a la posibilidad de que las partículas se superpongan.

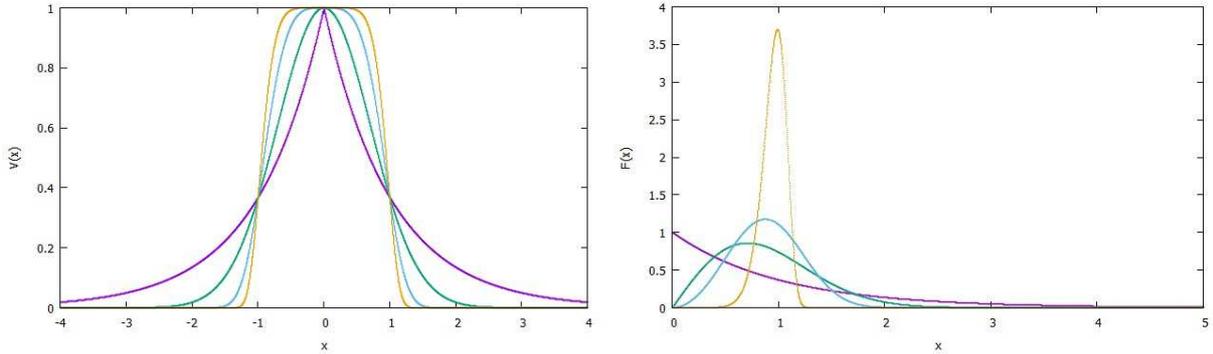


Figura 8. Representación gráfica del potencial GEM- α (panel izquierdo) y de la fuerza asociada (panel derecho) para distintos valores de α ; $\alpha = 1$ (violeta), $\alpha = 2$ (verde), $\alpha = 3$ (azul) y $\alpha = 10$ (amarillo) para los valores de los parámetros $\epsilon = R = 1$.

Para poder realizar las simulaciones del sistema se debe discretizar la ecuación (11), para ello se ha empleado el algoritmo de Euler-Mayurama [24], el cual es un método de integración de ecuaciones diferenciales estocásticas (ver Apéndice 1). La forma discreta de la ecuación del movimiento viene dada por:

$$x_i(t+h) = x_i(t) - h \sum_{j=1}^N \nabla v(x_i(t) - x_j(t)) + \sqrt{2Dh} \eta_i(t), \quad i = 1, \dots, N, \quad (13)$$

donde h es el paso de tiempo de integración y $\boldsymbol{\eta}_t$ un vector de ruido blanco con las características introducidas en (8).

En las simulaciones se empleará únicamente el potencial GEM-3 que es conocido por presentar la aparición de formaciones periódicas [14], para todas las realizaciones se ha empleado un conjunto de $N = 1000$ partículas en un segmento unidimensional de $L = 3$ con condiciones de contorno periódicas. Los valores de los parámetros se han fijado a $R = 0.1$, $\epsilon = 1/30$ y un paso de tiempo $h = 0.001$. La densidad de empaquetamiento en este caso es $\rho_0 = N/L^d = 1000/3$ ya que seguimos en el caso de $d = 1$. El movimiento de las partículas vendrá determinado por la ecuación (13), la cual se implementará de forma directa para la realización de las simulaciones. El objetivo de estas simulaciones es estudiar el sistema en función del coeficiente de difusión D .

Los resultados obtenidos muestran, tal como puede verse en la Fig.9, que para coeficientes de difusión suficientemente altos, la agitación térmica hace que el sistema se encuentre en una fase homogénea. Sin embargo si se disminuye el valor del coeficiente de difusión patrones periódicos comienzan a emerger (ver Fig.10). Para valores de D suficientemente pequeños, tal como se muestra en la Fig.11 la distribución de partículas se convierte en una formación periódica de clústeres bien separada. Esta es la que se conoce como fase de cristales de clústeres, ya que cada clúster está formado por una agrupación de partículas juntas unas a las otras, a pesar de la fuerza repulsiva que experimentan entre ellas. En la Fig. 11 también se hace apreciable el hecho de que la densidad de partículas a tiempos largos es de tipo granular gruesa, mostrando que la distribución espacial de esta es un conjunto de gaussianas (ver apéndice 2).

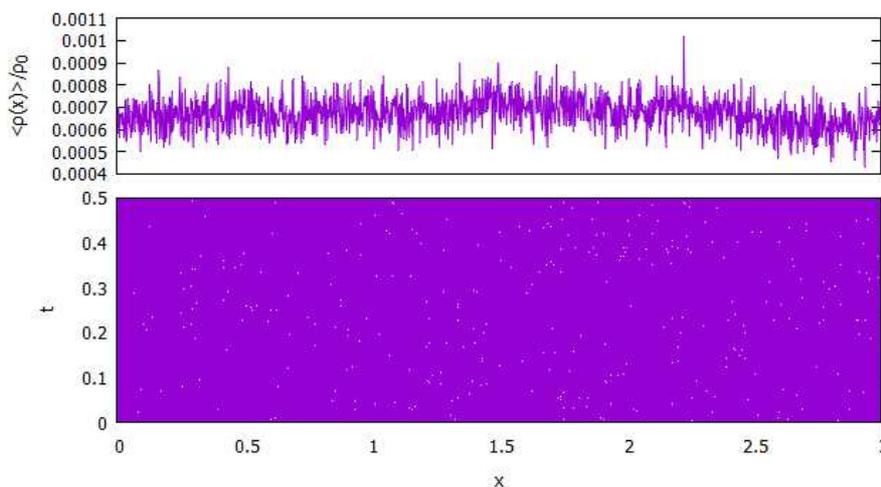


Figura 9. Dinámica de un conjunto de $N = 1000$ partículas evolucionando según la ecuación (13). Para el valor de $D = 0.3$, puede verse una situación en la que las partículas se encuentran en una fase homogénea (panel inferior), hecho que queda

confirmado dada la densidad en función de la posición (panel superior) que se ha calculado promediando espacialmente sobre celdas de tamaño $0.02R$ y temporalmente sobre estas las últimas 150 iteraciones.

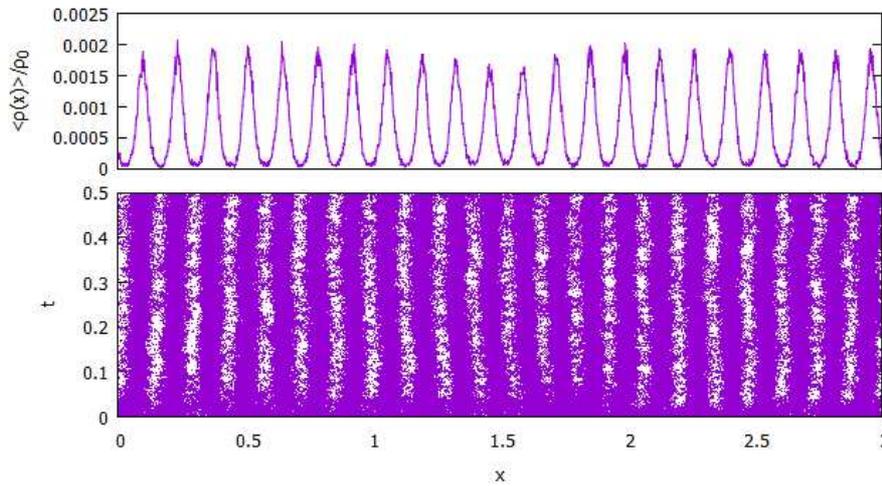


Figura 10. Evolución temporal del mismo conjunto de partículas que en la Fig.9. Esta vez el valor del coeficiente de difusión es $D = 0.1$. Es este caso se puede apreciar un patrón espacial en la densidad en función de la posición.

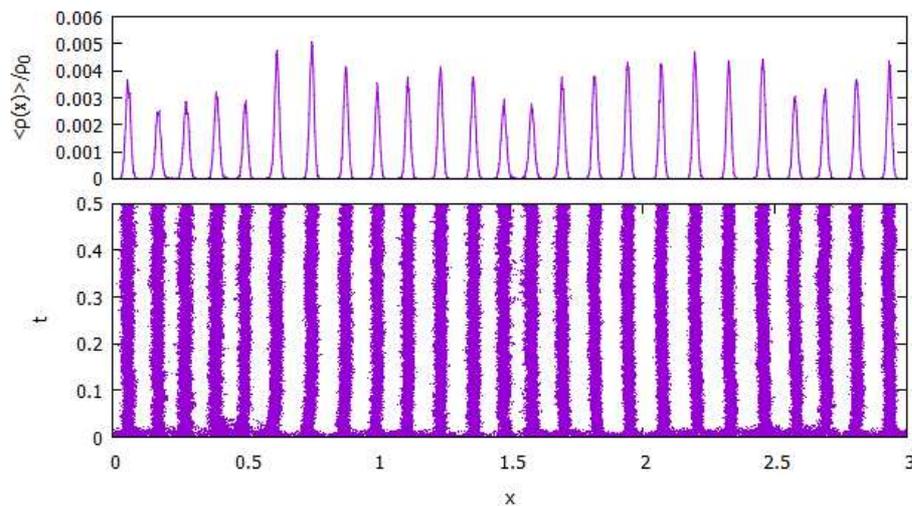


Figura 11. Para $D = 0.03$ puede apreciarse que el sistema se encuentra en una fase de densidad granular. Los clústeres formados son un conjunto de gaussianas.

4. MODELO MIXTO: INTERACCIÓN DEMOGRÁFICA ACOPLADA A POTENCIAL REPULSIVO.

Finalmente, se introduce el estudio realizado para el modelo mixto que incluye una parte de interacción demográfica y otra de fuerza repulsiva asociada a un potencial tipo GEM- α . En las simulaciones realizadas se ha empleado un conjunto inicial de $N_0 = 1000$ partículas distribuida de manera aleatoria sobre un segmento unidimensional de longitud $L = 3$ con condiciones de contorno periódicas. Para implementar este algoritmo se ha modificado el algoritmo de Gillespie introducido en la sección anterior para que la posición de las partículas se actualice de acuerdo a la ecuación (13) empleando un paso de tiempo determinado por la ecuación (5). El comportamiento del sistema se estudiará en función del coeficiente de difusión D y del parámetro de control $\mu = \lambda_0 - \beta_0$.

Los resultados obtenidos muestran que para coeficientes de difusión suficientemente bajos y valores altos de μ tal como se ven en la Fig.12 el sistema muestra una dinámica espaciotemporal caracterizada por un patrón romboidal formado por estructuras que se difunden hacia la derecha. Cuando se disminuye el valor del coeficiente μ , se puede ver en la Fig.13 que los patrones romboidales desaparecen y se obtienen estructuras formadas por clústeres finos (semejantes a los presentados en la Fig.11) los cuales presentan difusión de individuos aislados hacia la derecha. Estos individuos abandonan el clúster al que pertenecen y se desplazan por las zonas intraclúster hasta llegar a un clúster vecino al que se adhieren, también puede observarse que en esta misma situación, debido a la posibilidad que tienen los individuos de reproducirse, los que han abandonado sus clústeres son capaces de formar nuevos. En la Fig.14 se aprecia que, para el mismo valor del coeficiente de difusión, el sistema se encuentra en un estado en el cual $\mu < \mu_c$, situación en la cual el sistema tiende a extinguirse. Si se aumenta todavía más el valor del coeficiente de difusión puede verse (Fig.15, 16) que se repiten los mismos comportamientos mencionados pero esta vez el sistema presenta estructuras más ruidosas. Finalmente, para D suficientemente grande la distribución espaciotemporal de las partículas es completamente homogénea.

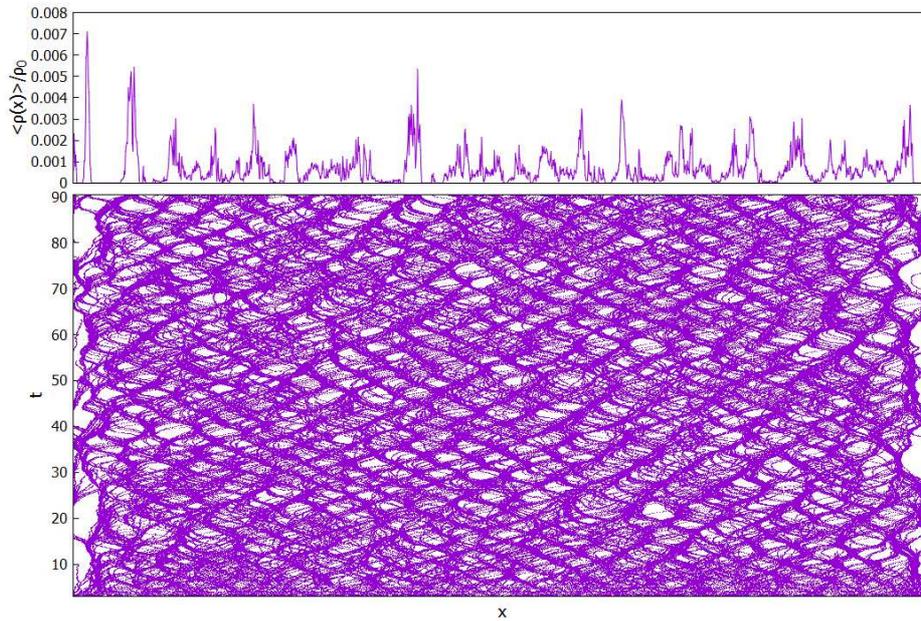


Figura 12. Dinámica de un conjunto inicial de $N_0 = 1000$ partículas para los valores de los parámetros $\mu = 0.9$, $D = 1 \times 10^{-5}$ y mismos N_S y R que en la sección anterior. Se aprecia un patrón romboidal en la dinámica espaciotemporal. Puede apreciarse que en este caso la densidad en función de la posición no muestra concentraciones de partículas características de la presencia de clústeres.

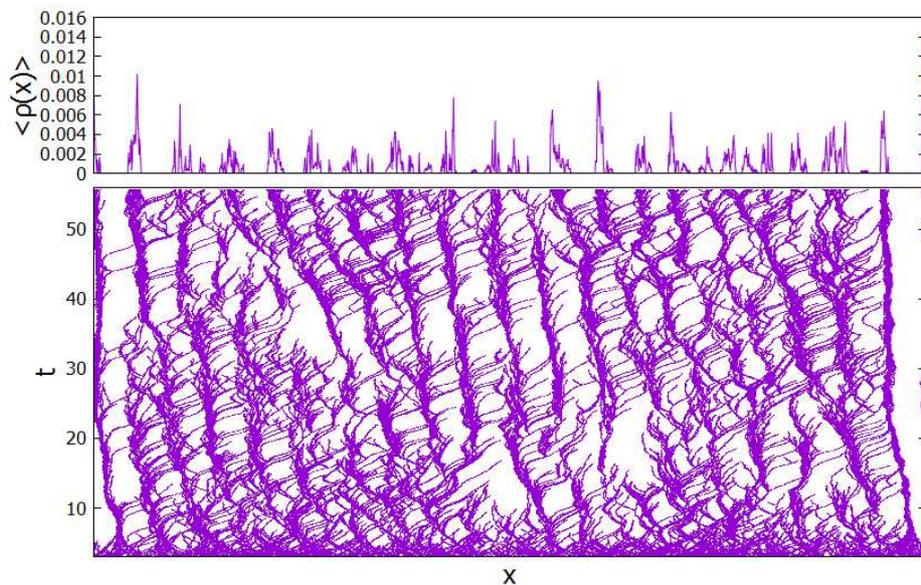


Figura 13. Dinámica del mismo conjunto de partículas para los valores de los parámetros $\mu = 0.5$, $D = 1 \times 10^{-5}$. En el panel inferior pueden apreciarse clústeres que se ramifican. Las partículas en espacio intraclúster son capaces de dar lugar a la generación de nuevos clústeres. Esta vez, la densidad en función de la posición (panel superior) sí que muestra picos característicos de la formación de estructuras periódicas.

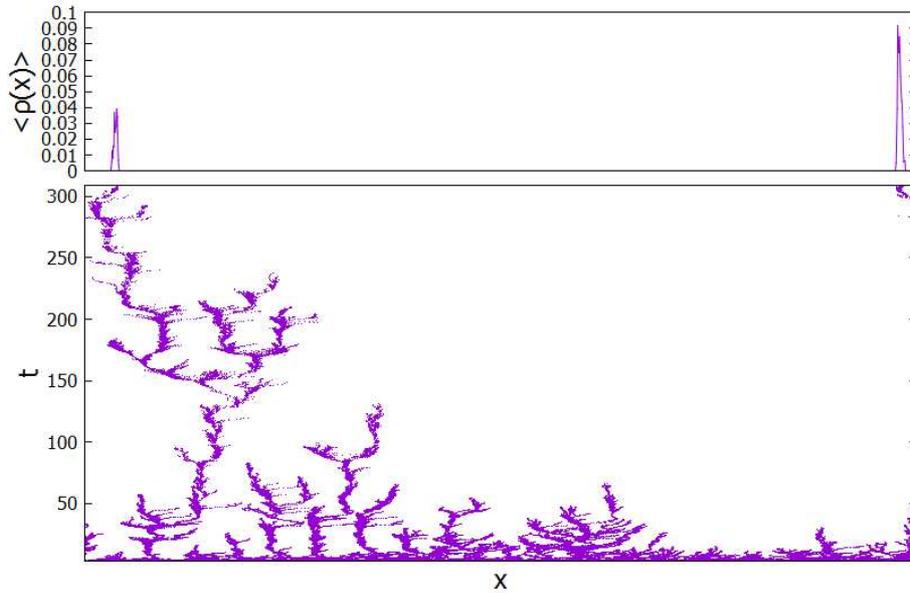


Figura 14. Para la combinación de parámetros $\mu = 0.3$, $D = 1 \times 10^{-5}$ puede verse que el sistema tiende a extinguirse.

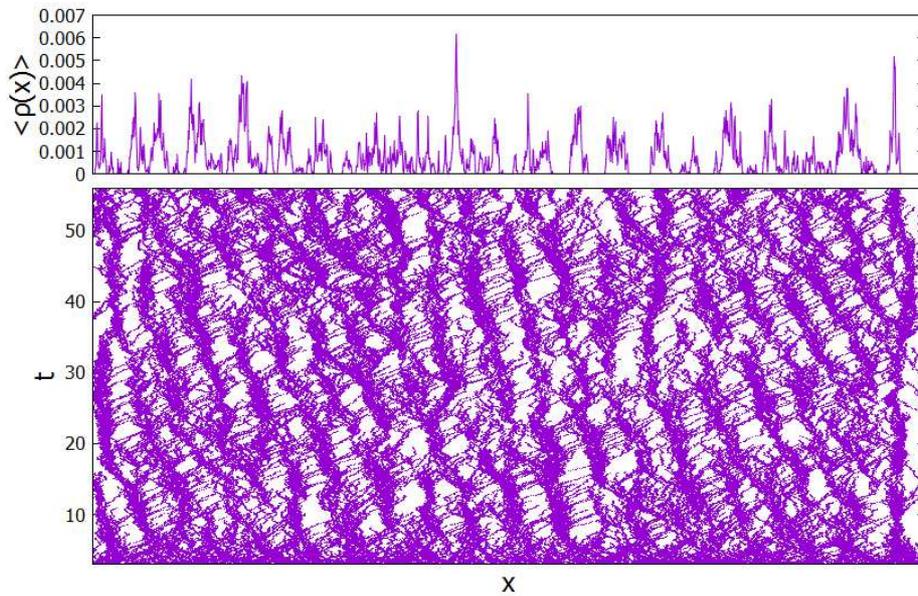


Figura 15. Para la combinación de parámetros $\mu = 0.5$, $D = 1 \times 10^{-4}$ se repite el patrón mostrado en la Fig.13, en este caso los clústeres formados son más dispersos.

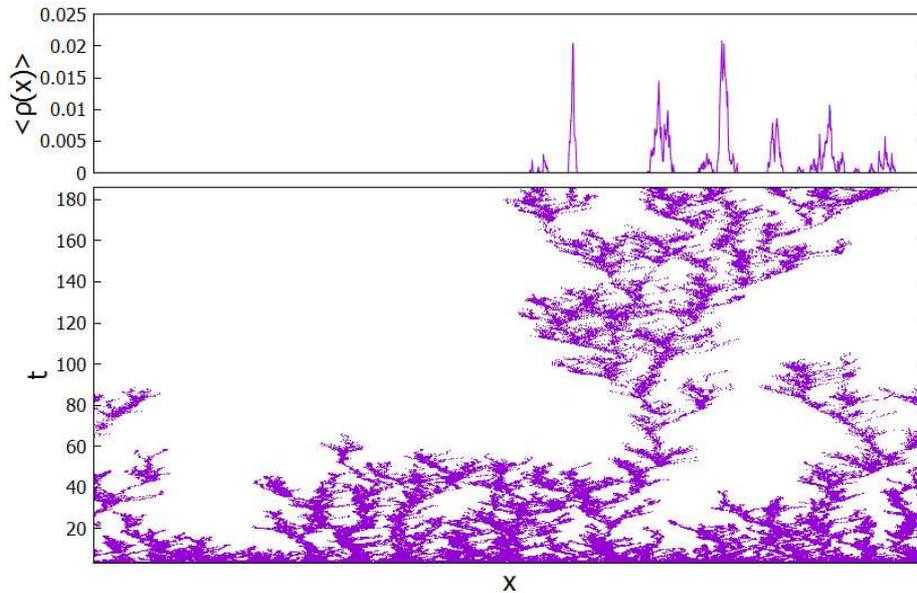


Figura 16. Para la combinación de parámetros $\mu = 0.3$, $D = 1 \times 10^{-4}$ se repite el patrón mostrado en la Fig. 14, en este caso el sistema se recupera y aumenta el número de partículas aumenta.

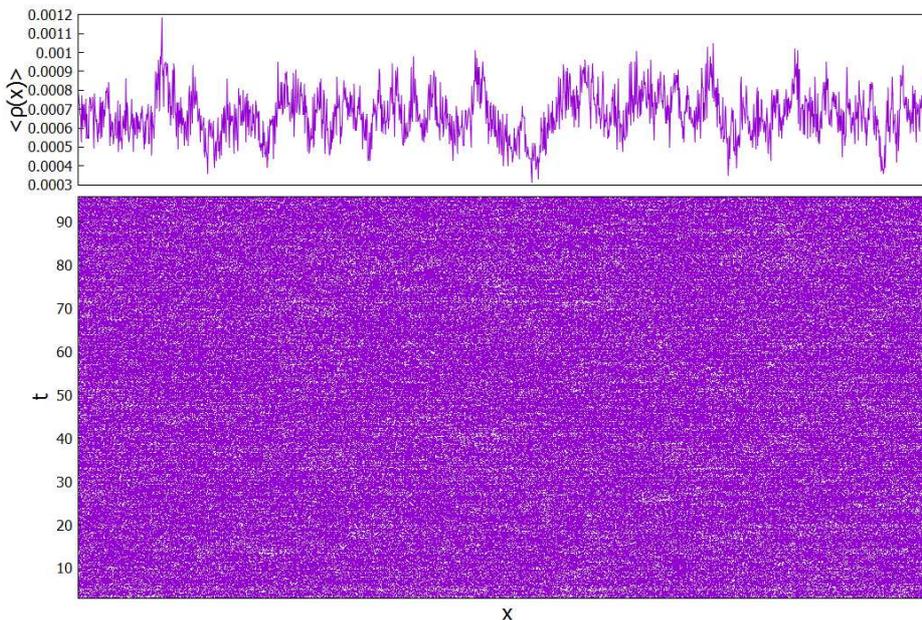


Figura 17. Para la combinación de parámetros $\mu = 0.9$, $D = 1 \times 10^{-2}$ la distribución espaciotemporal de las partículas es homogénea.

5. RESUMEN Y CONCLUSIONES.

En este trabajo se han estudiado algunos de los mecanismos implicados en la formación de patrones en sistemas de partículas brownianas tanto para el caso de

individuos biológicos interactuando a través de mecanismos demográficos, en el caso de soluciones coloidales en las cuales las partículas interactúan a través de un potencial a dos cuerpos repulsivo de núcleo blando y en el caso de un sistema mixto en el cual ambas interacciones se combinan. Los resultados obtenidos son que, dados los rangos de los parámetros adecuados, todos los sistemas presentan procesos de agregación mediante los cuales las partículas se organizan de manera periódica en el espacio, a pesar de estar interactuando de manera competitiva o repeliéndose entre ellas. Se ha estudiado como los mecanismos interactúan entre ellos y como las estructuras formadas en un sistema en el que estas coexisten difieren de las que se observan para cada uno de los mecanismos aislados.

Al estudiar el sistema con interacciones demográficas, implementado a través del algoritmo de Gillespie se ha observado que existe un valor crítico del parámetro de control μ_c , por debajo del cual todas las configuraciones iniciales de partículas tienden a un estado en el que el sistema queda completamente vacío. Al aumentar el valor del crecimiento neto μ se han observado dos situaciones diferentes: Si el coeficiente de difusión es suficientemente grande puede verse en la Fig.3 que el sistema tiene a un estado en el que la distribución de partículas es homogénea en el espacio. Si el coeficiente de difusión es suficientemente bajo ($D = 10^{-5}$) las partículas se organizan de manera espontánea en agregados casi equiespaciados (Fig.6). También se ha comprobado que el número de partículas esperado en el estado estacionario N_{st} obtenido en [23] a través de la aproximación de campo medio concuerda con los datos obtenidos a excepción del caso en el que se forman agregados periódicos ya que, como puede verse en la Fig.7 el número de partículas en ese sistema no decae directamente al estado estacionario como ocurriría en el resto de casos, sino que se puede observar un ligero crecimiento antes de llegar a este valor.

En el estudio de partículas interaccionando vía potencial GEM-3 se ha obtenido que para coeficientes de difusión suficientemente pequeños $D < 3 \times 10^{-1}$ las partículas se agregan (como puede verse en las Fig.11) en formaciones periódicas con un espaciado proporcional a la distancia típica de interacción R . A través del estudio de la densidad en función de la posición se ha podido comprobar que los clústeres que se han formado debido a esta interacción son un conjunto de campanas gaussianas, cada una de ellas centrada en la posición central del clúster. Este hecho es a causa del equilibrio entre la repulsión entre partículas que, junto con la difusión, tienden a aumentar la anchura de los clústeres y la fuerza debida a los clústeres vecinos que tienden a estrecharlos.

Finalmente, el estudio realizado para el sistema en el que se han implementado ambas interacciones de manera conjunta ha mostrado que para coeficientes de difusión

suficientemente bajos y valor del parámetro de control μ alto (Fig.12) no se muestran formaciones periódicas en el espacio, en su lugar ha aparecido un patrón espaciotemporal en el que clústeres formados por individuos que se difunden en la misma dirección presenta un patrón romboidal. Al disminuir el valor de μ se ha observado que dicha difusión se ha disminuido y, por lo tanto, los individuos se organizan en clústeres cuyo tamaño se asemeja a los obtenidos en las simulaciones para el potencial GEM- α con la característica que ciertos individuos se desprenden del clúster al que pertenecen desembocando en dos posibles efectos, el primero de ellos es que dicho individuo acabe uniéndose al uno de los clústeres vecinos, si por el contrario dicho individuo se reproduce mientras se encuentra en la zona intraclúster, un nuevo clúster se forma a partir de ahí. Igual que para el caso de partículas libres, existe un cierto valor del parámetro de control $\mu = \mu_c \approx 0.32$ por debajo del cual el sistema acaba extinguiéndose para tiempos de integración suficientemente largos.

Si se aumenta el valor del coeficiente de difusión, tal como puede verse en las Fig. 15, 16 se aprecia que el sistema presenta los mismos comportamientos ya mencionados, solo que esta vez las estructuras formadas son más anchas debido a la difusión. Para valores del coeficiente de difusión suficientemente altos ($D > 10^{-3}$) a diferencia de lo que se podría esperar, sabiendo que el sistema interaccionando vía potencial GEM- α presenta formaciones periódicas, en este caso no se ha observado ningún tipo de agregado, hecho que se debe a que cuando se implementa el sistema con interacción mixta, la posibilidad de que los individuos desaparezcan del sistema y, por lo tanto, la fracción de empaquetamiento disminuya, hace que no se alcance el equilibrio entre las fuerzas entre los individuos y las debidas a los clústeres vecinos.

APÉNDICE 1. INTEGRACIÓN NUMÉRICA DE ECUACIONES DIFERENCIALES ESTOCÁSTICAS.

En la sección 3 se ha presentado la ecuación discreta del movimiento de una partícula browniana sometida a un potencial repulsivo. En esta sección se introduce el desarrollo matemático necesario para llegar a la expresión mostrada. Partiendo de una ecuación diferencial estocástica del tipo

$$\frac{dx(t)}{dt} = f(x(t)) + g(x(t))\xi(t). \quad (\text{A.1})$$

Si se divide el tiempo en intervalos constantes de amplitud h de manera que el instante de tiempo t viene dado por $t = t_i = t_0 + ih$ con $i = 1, 2, \dots$, se puede aproximar el valor de $x(t_{i+1})$ como una función de $x(t_i)$,

$$\mathbf{x}(t_{i+1}) = \mathbf{x}(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{f}(\mathbf{x}(u)) du + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{g}(\mathbf{x}(u)) \xi(u) du, \quad (\text{A.2})$$

si se asume que las funciones $\mathbf{q}(\mathbf{x}(t))$ y $\mathbf{g}(\mathbf{x}(t))$ son funciones diferenciables, se puede realizar una expansión en Serie de Taylor alrededor de $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t_i)$,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}(\mathbf{x}(u)) &= \mathbf{f}(\mathbf{x}(t_i)) + (\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i)) \left. \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}(t_i)} + \mathbf{O} \left[(\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i))^2 \right], \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}(u)) &= \mathbf{g}(\mathbf{x}(t_i)) + (\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i)) \left. \frac{d\mathbf{g}}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}(t_i)} + \mathbf{O} \left[(\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i))^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

sustituyendo ambas expresiones en (A.2) se obtiene la expresión siguiente

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t_{i+1}) &= \mathbf{x}(t_i) + h\mathbf{f}(\mathbf{x}(t_i)) + \left. \frac{d\mathbf{f}}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}(t_i)} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i)) du + \mathbf{w}_h(t_i) \mathbf{g}(\mathbf{x}(t_i)) \\ &\quad + \left. \frac{d\mathbf{g}}{d\mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}(t_i)} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i)) \xi(u) du + \mathbf{O} \left[(\mathbf{x}(u) - \mathbf{x}(t_i))^2 \right], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

donde $\mathbf{w}_h(t_i)$ es la integral del término estocástico en la interpretación de Stratonovich

$$\mathbf{w}_h(\mathbf{t}) \equiv \int_{\mathbf{t}}^{\mathbf{t}+h} \xi(u) du = \mathbf{W}(\mathbf{t} + h) - \mathbf{W}(\mathbf{t}), \quad (\text{A.5})$$

y viene caracterizado por una media y correlaciones dadas por:

$$\langle \mathbf{w}_h(\mathbf{t}) \rangle = \mathbf{0}, \langle \mathbf{w}_h(t_i) \mathbf{w}_h(t_j) \rangle = h \delta_{ij}. \quad (\text{A.6})$$

Para poder evaluar la parte derecha de la ecuación (A.4) se debe aproximar $x(u)$. El primer orden en el que la contribución a la integral es no nula es de orden $h^{1/2}$. A este orden se puede escribir

$$x(u) - x(t_i) = g(x(t_i)) \int_{t_i}^u \xi(s) ds. \quad (\text{A.7})$$

Introduciendo (A.7) en la integral de (A.4) se tiene que

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} (x(u) - x(t_i)) \xi(u) du = g(x(t_i)) \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_i}^u \xi(s) \xi(u) du ds + \mathcal{O}[h^{3/2}], \quad (\text{A.8})$$

en la interpretación de Stratonovich la doble integral puede evaluarse tal y como se muestra a continuación,

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \int_{t_i}^u \xi(s) \xi(u) du ds &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} [W(u) - W(t_i)] \xi(u) du \\ &= \frac{W(t_{i+1})^2 - W(t_i)^2}{2} - W(t_i)[W(t_{i+1}) - W(t_i)] = \frac{w_h(t_i)^2}{2}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

De esta forma la contribución de la segunda integral al lado derecho de la ecuación (A.4) viene dada por

$$\left. \frac{dg}{dt} \right|_{x(t_i)} \int_{t_i}^{t_{i+1}} (x(u) - x(t_i)) \xi(u) du = \frac{1}{2} \left. \frac{dg}{dt} \right|_{x(t_i)} g(x(t_i)) w_h(t_i)^2 + \mathcal{O}[h^{3/2}]. \quad (\text{A.10})$$

Puede verse, si se emplea la misma aproximación que la primera contribución de la otra integral de (A.4) es de orden h^2 y por lo tanto se puede despreciar. Juntando los resultados obtenidos hasta orden h se obtiene la expresión general para el algoritmo de Euler-Maruyama,

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + hq(x(t_i)) + h^{1/2} g(x(t_i)) \xi(t) + \frac{h}{2} \left. \frac{dg}{dt} \right|_{x(t_i)} g(x(t_i)) + \mathcal{O}[h^{3/2}]. \quad (\text{A.11})$$

Si se sustituyen en el algoritmo las funciones $q(x)$ y $g(x)$ por las que aparecen en la ecuación (10) de la Sección 3 se obtiene el resultado presentado en la misma sección:

$$x_i(t+h) = x_i(t) - h \sum_{j=1}^N \nabla v(x_j(t) - x_i(t)) + \sqrt{2Dh} \xi_i(t), \quad i = 1, \dots, N. \quad (\text{A.12})$$

APÉNDICE 2. ESTRUCTURA GAUSSIANA DE LOS CLÚSTERES FORMADOS EN LA INTERACCIÓN GEM-3.

Cuando se ha estudiado un sistema que presenta únicamente interacciones debidas al potencial a dos cuerpos se ha obtenido que los clústeres observados tienen la forma de una campana de Gauss centrada en el centro del clúster. Para incrementar la validez de dicha afirmación, a continuación se muestra un ajuste por gaussianas realizado un pico aleatorio de la densidad en función de la posición asociadas a los conjuntos de datos de las Fig.10 (panel de la izquierda) y Fig.11 (panel de la derecha). Puede verse que dicho ajuste se ha realizado de manera satisfactoria.

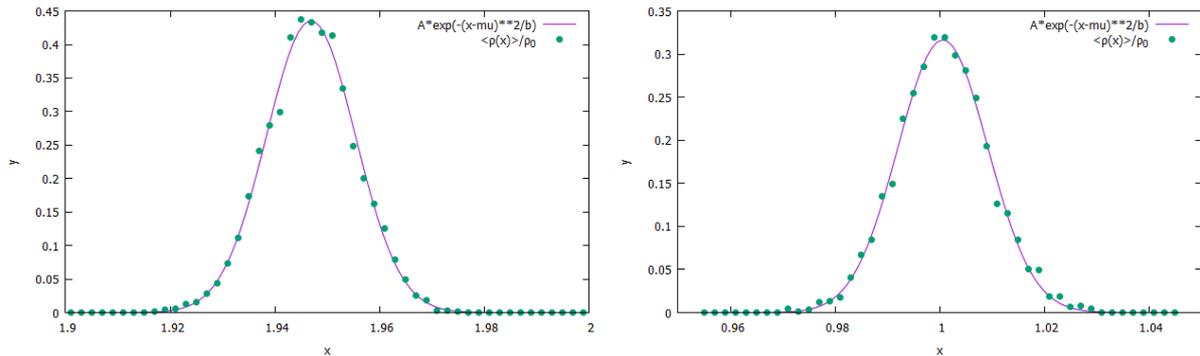


Figura A2.1. Ajuste por gaussianas realizado en un pico aleatorio de la densidad en función de la posición asociada al rango de parámetros en el que aparecen formaciones periódicas en un sistema de partículas interactuando a través de un potencial de tipo GEM- α .

BIBLIOGRAFÍA.

- [1] B. M. Mladek, D. Gottwald, G. Kahl, M. Neumann, C. N. Likos, *Formation of Polymorphic Cluster Phases for a Class of Models of Purely Repulsive Soft Spheres*, PRL 96, 045701 (2016).
- [2] A. J. Archer, A. M. Rucklidge, E. Knobloch, *Soft-core particles freezing to form a quasicrystal and a crystal-liquid phase*, Phys. Rev. E 92, 012324 (2015).

- [3] S. Prestipino, D. Gazzillo, N. Tassinato, *Probing the existence of phase transitions in one-dimensional fluids of penetrable particles*, Phys. Rev. E 92, 022138 (2015).
- [4] A. J. Archer, A. M. Rucklidge, E. Knobloch, *Quasicrystalline order and a crystal-liquid state in a soft-core fluid*, Phys. Rev. Lett. 111, 165501 (2013).
- [5] T. E. Angelini, E. Hannezo, X. Trepant, M. Marquez, J. J. Fredberg, D. A. Witz, *Glass-likedynamics of collective cell migration*, Proc Natl Acad Sci U S A. 108, 12, 4714-4719 (2011).
- [6] A. Chauviere, H. Hatzikirou, I.G. Kevrekidis, J. S. Lowengrub, V. Cristini, *Dynamic density functional theory of solid tumor growth: Preliminary models*, AIP Advances 2, 011210 (2012).
- [7] E. Hernández-García, E. Heinsalu, C. López, *Spatial patterns of competing random walkers*. Ecological Complexity 21, 166-176 (2015).
- [8] E. Hernández-García, C. López, *Spatial patterns in non-locally interacting particles systems*, Eur. Phys. J. Spec. Top. 146, 37-45 (2007).
- [9] E. Hernández-García, E. Heinsalu, C. López, *Spatial clustering of interacting bugs: Lévy flights versus Gaussian jumps*, EPL, 92 (2010) 40011.
- [10] N. Khalil, C. López, E. Hernández-García, *Nonlocal birth-death competitive dynamics with volume exclusion*, J. Stat. Mech. (2017) 063505.
- [11] E. Heinsalu, E. Hernández-García, C. López, *Clustering determines the survivor for competing Brownian and Lévy walkers*, Phys. Review Letters 110, 258101 (2013).
- [12] E. Hernández-García, C. López, *Birth, death and diffusion of interacting particles*, Journal of Physics: Condensed Matter 17, S4263-S4274 (2005).
- [13] E. Hernández-García, C. López, *Clustering, advection and patterns in a model of population dynamics with neighborhood-dependent rates*, Phys. Review E 70, 016216 (2004).
- [14] J-B. Delfau, C. López, E. Hernández-García, *Pattern formation with repulsive soft-core interactions: discrete particle dynamics and Dean-Kawasaki equation*, Phys. Rev. E 94, 042120 (2016).
- [15] P. Macklin, M. E. Edgerton, A. M. Thompson, V. Cristini, *Patient-calibrated agent-based modeling of ductal carcinoma in situ (DCIS): From microscopic measurements to macroscopic predictions of clinical progression*, J. Theor. Biol. May 21; 301: 122-140 (2012).

- [16] R. Brown, *A brief account of microscopical observations [...] in organic and inorganic bodies*, Edinburgh new Philosophical Journal, July-September, 358-371 (1828).
- [17] A. Einstein, *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*, *Annalen der Physik*, 322, 8, 549-560 (1905).
- [18] P. G. Saffman, M. Delbrück, *Brownian motion in biological membranes*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A*, 72, 8, 3111-3113 (1975).
- [19] C. Kenyon, B. Wang, *A cluster of Antennapedia-class homeobox genes in a nonsegmented animal*, *Science*, 253, 5019, 516-517 (1991).
- [20] D. T. Gillespie, *Exact stochastic simulations of coupled chemical reactions*, *J. Phys. Chem*, 81, 25, 2340-2361 (1977).
- [21] E. Heinsalu, E. Hernández-García, C. López, *Competitive Brownian and Lévy walkers*, *Phys. Review E* 85, 041105 (2012).
- [22] G. E. P. Box, M. E. Muller, *A note on the generation of random normal deviates*, *The Annals of Mathematical Statistics* 29 (2), 610-611 (1958).
- [23] C. López, E. Hernández-García, *Fluctuations impact on a pattern-forming model of population dynamics with non-local interactions*, *Phys. D.* 199, 223-234 (2004).
- [24] P. Colet, R. Toral, *Stochastic Numerical Methods. An introduction for Students and Scientists*, 192-197 (2014).