

MARIA GROPPI (*)

Un metodo numerico-stocastico per equazioni scalari di reazione-diffusione (**)

1 - Introduzione

In tempi recenti [7] sono stati proposti metodi probabilistici per risolvere problemi ai valori iniziali per equazioni di reazione-diffusione (R-D) del tipo

$$(1.1) \quad u_t = Du_{xx} + f(u)$$

Le principali caratteristiche di questi metodi sono la stabilità, l'adattabilità della discretizzazione alla soluzione con concentrazione degli elementi computazionali dove il gradiente è elevato, il costo computazionale non eccessivo.

L'equazione (1.1), per particolari scelte di f quali ad esempio $f(u) = u(1 - u)$ (equazione di Kolmogorov), $f(u) = u(1 - u)(u - a)$, $0 < a < \frac{1}{2}$ (equazione di Nagumo), ammette una soluzione di tipo fronte d'onda mobile [1]; lo spessore e la velocità del fronte sono entrambe di ordine $O(\sqrt{D})$. Il risolvere la (1.1) fino ad un tempo T assegnato, con metodi standard quali differenze finite su un reticolo fisso, richiede, per ottenere un buon grado di accuratezza, un costo computazionale pari a $O(D^{-\frac{1}{2}})$, e risulta quindi oneroso per problemi a piccola diffusione ($D \ll 1$).

I metodi stocastici permettono invece di raffinare in modo automatico la griglia nella regione dove la soluzione u presenta significative e rapide variazioni, senza creare instabilità; gli algoritmi risultano espliciti ed incondizionatamente stabili, ed il costo computazionale è indipendente dal coefficiente di diffusione D .

L'utilizzo di tecniche stocastiche di tipo Monte Carlo (particle method) per approssimare numericamente la soluzione dell'equazione del calore è ben noto,

(*) Dip. di Matem., Univ. Parma, Via M. D'Azeglio 85, 43100 Parma, Italia.

(**) Ricevuto il 29.12.1995. Classificazione AMS 35 K 57.

soprattutto in fisica [3]; non è però finora mai stata presentata chiaramente in letteratura la giustificazione teorica rigorosa di un procedimento di approssimazione fondata sulla relazione esistente tra equazioni alle derivate parziali di tipo parabolico ed equazioni differenziali stocastiche.

Scopo di questo lavoro è colmare alcune lacune teoriche, circa l'applicabilità di queste tecniche, fornendo un'interpretazione probabilistica della soluzione del problema di Cauchy per equazioni di diffusione. Il risultato fondamentale è rappresentato dal Teorema 1. Precisamente, in questo lavoro analizziamo e completiamo dal punto di vista teorico il metodo di Sherman e Peskin [7], e consideriamo, a titolo di esempio, l'equazione di reazione diffusione di Nagumo per la simulazione numerica del potenziale d'azione cardiaco nel modello unidimensionale del cavo, analizzando sia il caso a diffusione costante che il caso di diffusione variabile, non trattato in [7].

Il metodo presentato in questo lavoro è a passo frazionato totalmente stocastico ed è di tipo *gradient random walk*. Esso consiste nel rappresentare la parte diffusiva mediante un cammino aleatorio di particelle computazionali, che trasportano gradienti della funzione incognita, e la parte reattiva mediante un procedimento di creazione e distruzione di elementi.

Riportiamo preliminarmente un noto risultato che permette di dare un'interpretazione probabilistica alla soluzione dell'equazione di Kolmogorov (*all'indietro*)

$$(1.2) \quad \frac{\partial}{\partial t} q(t, x) + a(t, x) \frac{\partial}{\partial x} q(t, x) + \frac{1}{2} b^2(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} q(t, x) = 0$$

con la condizione finale $\lim_{t \uparrow T} q(t, x) = f(x)$.

Se a , b , f sono sufficientemente regolari, si ha che la soluzione

$$(1.3) \quad q(t, x) = \int_{\mathbf{R}} \Gamma_0^*(x, t; y, T) f(y) dy$$

dove $\Gamma_0^*(x, t; y, T)$ indica la soluzione fondamentale dell'operatore $\frac{1}{2} b^2(t, x) \frac{\partial^2}{\partial x^2} + a(t, x) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}$ ($t < T$), può essere interpretata dal punto di vista probabilistico come *valore atteso* di un funzionale di un opportuno processo stocastico

$$(1.4) \quad q(t, x) = E[f(u(T, t, x))] \quad 0 < t < T \quad x \in \mathbf{R}$$

dove $u(T, t, x)$ è il processo stocastico dell'equazione differenziale stocastica (EDS)

$$(1.5) \quad du(T) = a(T, u(T)) dT + b(T, u(T)) dW_T \quad u(t) = x \text{ q.c.}$$

dove $(W_s)_{s \in [0, T]}$ indica il moto browniano.

In questo lavoro si vuole risolvere un problema ai valori iniziali. Allo scopo, si dimostra che anche in questo caso la soluzione ammette interpretazione probabilistica. Inoltre, simulando il processo stocastico di diffusione associato alla soluzione dell'equazione parabolica, si deduce una soluzione approssimata del problema ai valori iniziali per un'equazione di reazione-diffusione.

2 - Descrizione del metodo stocastico a passo frazionato per l'equazione di Nagumo

Analizziamo ora il metodo proposto da Sherman e Peskin per la risoluzione di equazioni scalari di R-D e dimostriamo che la soluzione ottenuta dal passo di diffusione ha un'interpretazione probabilistica; ciò permette di giustificare dal punto di vista teorico la possibilità di approssimare soluzioni di problemi di reazione-diffusione mediante la simulazione numerica di opportuni processi stocastici.

Cosideriamo il problema ai valori iniziali:

$$(2.1) \quad c \frac{\partial u}{\partial t} = d \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \quad u(x, 0) = u_0(x) \quad -\infty < x < +\infty \quad t > 0.$$

Posto $f(u) = \frac{s}{a} u(u - a)(1 - u)$ la (2.1) è detta equazione di Fitzhugh-Nagumo ed è di particolare interesse nelle applicazioni; essa rappresenta una semplificazione del modello Hodgkin-Huxley [5] ed è adatta a descrivere il potenziale cardiaco di transmembrana durante la fase di depolarizzazione nel modello del cavo monodimensionale.

Le quantità coinvolte hanno significato fisico. L'incognita $u(x, t)$ rappresenta in questa equazione il rapporto fra il potenziale d'azione e il suo valore di attivazione o di *plateau* u_p , (si è considerata una traslazione del *range* del potenziale di azione, in modo tale che il valore a riposo u_r sia uguale a 0 mV e u_p sia uguale a 100 mV); quindi cresce da 0 a 1 all'aumentare del tempo. $c = C_m$ rappresenta la capacità specifica di membrana; d è il coefficiente di diffusione, ed è pari a $\chi^{-1} g_i g_e (g_i + g_e)^{-1}$, dove g_i, g_e rappresentano rispettivamente le conduttività intra- ed extra-cellulare del dominio e χ è il rapporto tra l'area totale della membrana e il volume totale del tessuto. a rappresenta il rapporto $u_{th} u_p^{-1}$ fra il *valore del potenziale di soglia*, superato il quale si innesca la reazione, e il *valore di*

plateau; s rappresenta la massima conduttanza della membrana per unità di area.

Derivando la (2.1) rispetto a x si ottiene:

$$(2.2) \quad c \frac{\partial v}{\partial t} = d \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + f'(u)v \quad v(x, 0) = u_0'(x).$$

L'idea di Sherman e Peskin [7] è di risolvere numericamente la (2.1) tramite la (2.2) utilizzando un metodo a passo frazionato, in cui la diffusione viene attribuita al moto Browniano di particelle e simulata da un cammino aleatorio, mentre la parte reattiva viene interpretata stocasticamente come un fenomeno di diramazione (*branching*) con interazione. I valori di u sono poi ottenuti integrando v .

In relazione al passo di diffusione, gli Autori non giustificano teoricamente l'algoritmo utilizzato. Dimostriamo ora la correttezza del procedimento Sherman-Peskin dando un'*interpretazione probabilistica* alla soluzione del problema di Cauchy.

Consideriamo il problema di Cauchy per l'equazione di diffusione associata a (2.2)

$$(2.3) \quad c \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} = d \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \quad v(x, 0) = u_0'(x) \quad x \in \mathbf{R} \quad t \in [0, T].$$

Teorema 1. *La soluzione $v(x, t)$ di (2.3) ha interpretazione probabilistica data da:*

$$(2.4) \quad v(x, t) = E[u_0'(X(t, 0, x))]$$

dove $\{X(t) | t \in [0, T]\}$ è il processo di diffusione soluzione dell'EDS $dX(t) = \sqrt{\frac{2d}{c}} dW_t$.

Dimostrazione. Mediante un cambiamento di variabile che inverta il verso di percorrenza dell'asse dei tempi (ottenuto sostituendo a t il valore $T - t$), la (2.3) è riscrivibile come:

$$(2.5) \quad \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{2d}{c} \right) \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad x \in \mathbf{R} \quad t \in (0, T)$$

con la condizione $\lim_{t \uparrow T} v(x, t) = u_0'(x)$

L'equazione (2.5) è di Kolmogorov all'indietro ed esiste quindi un'interpreta-

zione stocastica per l'unica soluzione del problema (2.5), data da:

$$v(x, t) = E[u_0'(X(T, t, x))] = E_{t, x}[u_0'(X(T))]$$

dove $X(T, t, x)$ rappresenta il processo stocastico soluzione dell'equazione differenziale stocastica associata a (2.5):

$$(2.6) \quad dX(T) = \sqrt{\frac{2d}{c}} dW_T \quad X(t) = x \quad \text{q.c.}$$

Ad ogni istante t , $X(T, t, x)$ è una variabile aleatoria che rappresenta la posizione all'istante T a partire da x nell'istante t . La (2.6) permette di affermare che il processo stocastico $X(T, t, x)$ è un moto browniano scalato; infatti vale il seguente:

Lemma 2. *Fissata una costante $K \in \mathbf{R}$, la variabile aleatoria KW_t ammette differenziale stocastico dato da $d(KW_t) = K dW_t$.*

Dimostrazione. Dalla definizione di integrale stocastico di Itô [6], indicato con $\lim_{n \rightarrow \infty} -P$ il limite in probabilità, si ha

$$\int_{t_1}^{t_2} K dW_t = \lim_{n \rightarrow \infty} -P K(W_{t_2} - W_{t_1}) = K(W_{t_2} - W_{t_1}).$$

Come conseguenza, otteniamo che $X(T, t, x)$ è un processo a incrementi indipendenti in cui, come per il moto browniano, si ha $X(0, t, x) = 0$ q.c. e, in virtù del Lemma 2, risulta che $X(T_2, t, x) - X(T_1, t, x)$ ha distribuzione normale $N(0, (2dc^{-1})(T_2 - T_1))$ ($0 \leq T_1 < T_2$).

$X(T, t, x)$ è quindi un processo gaussiano ed è completamente nota la densità di probabilità di transizione. Poiché i problemi (2.3) e (2.5) sono equivalenti a meno di una inversione dell'asse dei tempi, per le rispettive soluzioni $v^{(2.3)}$, $v^{(2.5)}$ si ha

$$v^{(2.3)}(x, t) = v^{(2.5)}(x, T - t) = E[u_0'(X(T, T - t, x))].$$

Inoltre, poiché il moto browniano è un processo omogeneo rispetto al tempo, in quanto l'equazione differenziale stocastica di cui è soluzione è autonoma, vale l'uguaglianza

$$X(T, T - t, x) = X(t, 0, x)$$

cioè $X(T, T - t, x)$ rappresenta proprio la posizione all'istante t a partire dalla posizione x all'istante 0. Quindi abbiamo ottenuto la tesi (2.4).

Il risultato del Teorema 1 consente e giustifica dal punto di vista teorico un'importante applicazione numerica, che è quella di approssimare la soluzione di (2.3) simulando numericamente la soluzione dell'EDS (2.6).

Sia $T > 0$, $\Delta t = TP^{-1}$ il passo di discretizzazione del tempo. Consideriamo N posizioni iniziali ordinate $X_j(0) = x_0^j$ ($X_1(0) \leq X_2(0) \leq \dots \leq X_N(0)$), mediante le quali il dato iniziale di (2.1) viene approssimato con una funzione a gradino nel seguente modo

$$u(x, 0) = u_0(x) \cong \sum_{j=1}^N m_j H(X_j(0) - x)$$

dove $H(x) = 0$ per $x < 0$ e $H(x) = 1$ per $x \geq 0$ (*funzione di Heaviside*).

Di conseguenza, il dato iniziale del problema derivato (2.3) è discretizzato mediante una somma di funzioni δ di Dirac con intensità m_j , ossia

$$v(x, 0) = u_0'(x) \cong - \sum_{j=1}^N m_j \delta(X_j(0) - x).$$

Ad ogni istante t la soluzione approssimata sarà data da:

$$(2.7) \quad v_N(x, t) = - \sum_{j=1}^N m_j \delta(X_j(t) - x)$$

dove $X_j(t)$, $j = 1, \dots, N$ rappresentano le soluzioni indipendenti delle equazioni differenziali stocastiche:

$$dX_j(t) = \sqrt{\frac{2d}{c}} dW_t \quad X_j(0) = x_0^j \quad \text{q.c.}$$

Si vede facilmente che la (2.7) rappresenta la stima discreta del valore atteso (2.4), e quindi risulta fondata dal punto di vista teorico una tale rappresentazione approssimata della soluzione nel discreto.

Se si applica il metodo di Eulero per l'approssimazione numerica delle EDS, posto $t_i = i\Delta t$, si ottiene

$$X_j(t_{i+1}) - X_j(t_i) = \eta$$

dove η è una variabile aleatoria gaussiana con media 0 e varianza $2dc^{-1}\Delta t$. La posizione $X_j(t)$ della particella j -esima (punto di discretizzazione spaziale) durante la fase di diffusione è quindi soggetta ad un cammino aleatorio gaussiano. La densità delle particelle determina il valore di v ed euristicamente si può pensare m_j come *massa* della j -esima particella.

La funzione $u(x, t)$ soluzione di (2.1) si ottiene da v mediante integrazione,

tra $-\infty$ e x . Quindi

$$(2.8) \quad u(x, t) \cong u_N(x, t) = \sum_{j=1}^N m_j H(X_j(t) - x).$$

Il termine reattivo, modellato mediante crescita o decadimento esponenziali di masse di particelle (fenomeno di branching con interazione), è trattato esattamente come in [7]. Più in dettaglio, una particella nella posizione x ha, durante un intervallo di tempo Δt , una probabilità pari a $|f'(u_N(x, t))|\Delta t$ (dipendente quindi da u_N) di essere distrutta se $f' < 0$ oppure di scindersi in due particelle se $f' > 0$.

Se tutte le particelle hanno uguale massa m , la loro densità spaziale è proporzionale al gradiente di u . Ciò indica che il metodo concentra automaticamente gli elementi dove u ha gradienti elevati e quindi dove è necessario, per ottenere un buon grado di accuratezza, un passo di discretizzazione molto piccolo perché la soluzione subisce rapide variazioni. Un altro vantaggio del metodo è che non occorre nessuna griglia di discretizzazione fissa del dominio.

3 - Algoritmo

Il metodo descritto per la risoluzione di (2.1) fino ad un tempo T fissato può essere algoritmicamente sintetizzato nel modo seguente:

Suddivisione di $[0, T]$ in P sottointervalli uguali di ampiezza $\Delta t = T P^{-1}$.

Scelta delle posizioni iniziali X_i^0 delle N_0 masse che rappresentano il dato iniziale $u_0(x)$.

Per ogni scelta $p = 1, 2, \dots, P$ occorre procedere così:

a. Passo di Random walk: $X_i^p = X_i^{p-1} + \eta_i^p$, $i = 1, \dots, N_{p-1}$

dove η_i^p sono variabili aleatorie indipendenti gaussiane con media 0 e varianza $\frac{2d}{c} \Delta t$.

b. Ordinamento degli N_{p-1} elementi secondo la loro posizione.

c. Creazione e distruzione di elementi. Per ogni scelta $i = 1, \dots, N_{p-1}$ si opera:

i. Valutazione di $u_N(X_i^p, p \Delta t)$ mediante la (2.8).

ii. Valutazione di $f'(u_N(X_i^p, p \Delta t))$. Se $f' > 0$, viene creato un nuovo elemento in X_i^p con probabilità $f'(u_N(X_i^p, p \Delta t)) \Delta t$. Se $f' < 0$, l' i -esimo elemento viene distrutto con probabilità $-f'(u_N(X_i^p, p \Delta t)) \Delta t$.

Naturalmente Δt dovrà essere scelto in modo tale che $|f'(u_N(X_i^p, p \Delta t)) \Delta t|$ sia effettivamente una probabilità, e cioè sia minore di 1.

Osserviamo che nel caso in cui $u_0(x)$ sia una funzione di distribuzione di probabilità (cioè cresce monotonamente da 0 a 1, $\lim_{x \rightarrow -\infty} u_0(x) = 0$; $\lim_{x \rightarrow +\infty} u_0(x) = 1$), allora per ogni t , la soluzione $u(\cdot, t)$ è una funzione di distribuzione e posto $v = \frac{\partial u}{\partial x}$, $v(\cdot, t)$ può essere considerata la corrispondente densità di probabilità [4]. Si trova che la soluzione approssimata u_N è tale che $\lim_{x \rightarrow -\infty} u_N(x, t) = 0$, cioè u_N soddisfa la stessa condizione che è presente su u , mentre la condizione $\lim_{x \rightarrow +\infty} u_N(x, t) = 1$ è soddisfatta in media con fluttuazioni [7]; ciò significa che la tecnica stocastica impiegata rispetta il principio della conservazione della massa totale.

Poiché u è ottenuto integrando v , gran parte delle oscillazioni di origine stocastica vengono smorzate rispetto a quanto si otterrebbe ricavando u direttamente senza il passaggio all'equazione in v ; infatti tutte le particelle in questo modo contribuiscono al valore di u in ogni punto x .

4 - Richiami sulla convergenza e possibili estensioni del metodo

Il metodo a passo frazionato descritto rientra nella classe dei metodi *gradient random walk* (GRW) [3], così detti in quanto ciò che si diffonde con il cammino aleatorio non è la soluzione ma, come visto, il suo gradiente.

La convergenza per il metodo Sherman-Peskin è stata dimostrata da Chauvin e Rouault [4], quando il dato iniziale è una funzione monotona fra 0 a 1, nell'ambito dei problemi di convergenza per successioni di processi di diramazione (*branching*) spaziale con interazione. L'interazione è insita nella dipendenza del tasso di diramazione $f'(u)$ dallo stato della popolazione (cioè dei punti di discretizzazione) ad ogni istante.

La scelta di dati iniziali monotoni fra 0 e 1 non è restrittiva nelle applicazioni alla simulazione del potenziale di azione mediante l'equazione di Nagumo, in quanto solo per dati iniziali di questo tipo si ha che la soluzione rimane monotona ad ogni istante ed evolve nel tempo verso la soluzione fronte d'onda mobile con profilo stazionario, in accordo con le osservazioni sperimentali.

Il metodo stocastico di Sherman e Peskin, per l'approssimazione numerica di equazioni scalari di reazione-diffusione, può essere esteso al caso di problemi con diffusione non costante. Consideriamo l'equazione

$$(4.1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(p(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(u).$$

Supponiamo che $p(x)$ e $f(x)$ siano sufficientemente regolari e consideriamo il problema derivato rispetto a x ; ponendo $v = u_x$ otteniamo

$$(4.2) \quad \frac{\partial v}{\partial t} = p(x) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + 2p'(x) \frac{\partial v}{\partial x} + (p''(x) + f'(u))v$$

Per risolvere equazioni di questo tipo con il metodo a passo frazionato esposto in precedenza occorre considerare come tasso di diramazione, per la creazione o distruzione di particelle, $p''(x) + f'(u)$ ed inoltre occorre modificare il passo che discretizza la diffusione. Le particelle infatti non effettuano più un cammino aleatorio gaussiano, ma il nuovo tipo di processo di diffusione da considerare per rappresentare il moto sarà ottenuto dalla soluzione della equazione differenziale stocastica associata all'equazione di Kolmogorov relativa alla parte convettivo-diffusiva di (4.2)

$$(4.3) \quad dX_t = 2p'(x) dt + \sqrt{2p(x)} dW_t.$$

La soluzione di tale equazione è un processo di Markov di diffusione con coefficiente di diffusione $2p(x)$ e di deriva $2p'(x)$.

Analogamente al caso già mostrato al numero 2, scelte N posizioni iniziali $x_j^0 = X_j(0)$, $j = 1, \dots, N$, e N masse m_j tali che il dato iniziale di (4.1) sia approssimabile mediante

$$u_N(x, 0) = \sum_{j=1}^N m_j H(x - X_j(0))$$

allora, ad ogni istante t , la posizione al tempo $t + \Delta t$ della j -esima particella X_j sarà ottenuta approssimando numericamente la (4.3) scritta per la j -esima particella. Se ad esempio utilizziamo lo schema di Eulero [2], si ha

$$X_j(t + \Delta t) = X_j(t) + 2p'(X_j(t))\Delta t + \sqrt{2p(X_j(t))}(W_{t+\Delta t} - W_t).$$

Bibliografia

- [1] D. G. ARONSON and H. F. WEINBERGER, *Nonlinear diffusion in population genetics, combustion and nerve pulse propagation*, in Partial differential equations and related topics, Lecture Notes in Math. 446, Springer, Berlin 1975.

- [2] P. BERNARD, D. TALAY and L. TUBARO, *Rate of convergence of a stochastic particle method for the Kolmogorov equation with variable coefficients*, Math. Comp. **63** (1994), 555-587.
- [3] A. J. CHORIN, *Numerical methods for use in combustion modeling*, in Comput. Methods Appl. Sci. Engng., R. Glowinski and J. L. Lions, eds, North Holland, Amsterdam 1980.
- [4] B. CHAUVIN and A. ROUALT, *A stochastic simulation for solving scalar reaction-diffusion equations*, Adv. in Appl. Probab. **22** (1990), 88-100.
- [5] A. L. HODGKIN and A. F. HUXLEY, *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, J. Physiol. **117** (1957), 500-544.
- [6] Z. SCHUSS, *Theory and applications of stochastic differential equations*, Wiley, Chichester, UK 1980.
- [7] A. S. SHERMAN and C. S. PESKIN, *A Monte Carlo method for scalar reaction diffusion equations*, SIAM J. Sci Statist. Comput. **7** (1986), 1360-1372.

Summary

A probabilistic method of «gradient random walk» type to solve reaction diffusion equation is presented. The method is based on the strong connection between partial differential equations of parabolic type and stochastic differential equations. It is a fractional step method, with both steps of stochastic type: a random walk is combined with creation and destruction of elements. The probabilistic interpretation is emphasized and a rigorous derivation of the random walk as solution of a stochastic differential equation is deduced.
