

# CONSTRUCCIÓN DE BASES WAVELETS ORTOGONALES

Lucila Calderón<sup>†</sup>, María Teresa Martín<sup>‡</sup> y Victoria Vampa<sup>†</sup>

<sup>†</sup>*Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata,*  
[lucila.calderon@ing.unlp.edu.ar](mailto:lucila.calderon@ing.unlp.edu.ar)

<sup>‡</sup>*Instituto de Física de La Plata, Universidad Nacional de La Plata,*

**Resumen:** En este trabajo se describe la construcción de una base wavelet a partir de la B-spline cúbica. Las wavelets en diferentes niveles son ortogonales con respecto al producto interior  $\langle u', v' \rangle$ . Este requerimiento de ortogonalidad es muy ventajoso en aplicaciones para la solución numérica de ecuaciones diferenciales por las propiedades de la matriz de rigidez que se obtiene.

**Palabras clave:** *Wavelets, B-spline, EDO*

2000 AMS Subject Classification: 21A54 - 55P54

## 1. INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas el análisis wavelet ([2],[3],[4]), ha emergido como una alternativa atractiva a las técnicas tradicionales en varias disciplinas. Sus ventajas radican principalmente en su localización temporal y su soporte compacto. Sus propiedades permiten una eficiente transformación multiresolución. Muchas de estas propiedades hacen que las wavelets sean ventajosas como bases para la formulación débil de las soluciones de EDPs, especialmente para representar soluciones con gradientes bruscos o discontinuidades.

En este trabajo se describe la construcción de una base wavelet a partir de la B-spline cúbica, basada en el método propuesto por Jia y Liu [1]. Las wavelets en diferentes niveles son ortogonales con respecto al producto interior  $\langle u', v' \rangle$ . Este requerimiento de ortogonalidad es muy ventajoso cuando se aplica en la formulación débil para resolver ecuaciones diferenciales de segundo orden.

## 2. B-SPLINE WAVELET

Llamemos  $\varphi_4(x)$  a la B-spline cúbica. Sean  $S_0$  y  $S_1$ , los espacios generados por las traslaciones de  $\varphi_4(x)$  y  $\varphi_4(2x)$ , respectivamente. Nuestro objetivo es construir un espacio wavelet  $W$  de modo tal que  $S_1$  sea la suma directa de  $S_0$  y  $W$ , esto es  $S_1 = S_0 + W$ . Deseamos encontrar una wavelet  $\psi \in W$  tal que sus trasladadas generen espacio  $W$  y además satisfaga el siguiente requerimiento de ortogonalidad:

$$\langle \psi'(x), \varphi_4'(x-l) \rangle = 0, \quad \forall l \in \mathbb{Z}. \quad (1)$$

Como  $W \subset S_1$ , existirá una sucesión  $\{d_k\}$  tal que :

$$\psi(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} d(k) \varphi_4(2x - k), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2)$$

Entonces, para  $l \in \mathbb{Z}$ , el producto interno adopta la siguiente forma:

$$\langle \psi'(x), \varphi_4'(x-l) \rangle = \sum_{k \in \mathbb{Z}} d(k) \langle \varphi_4'(2x - k), \varphi_4'(x-l) \rangle. \quad (3)$$

Recordemos que  $\varphi_4(x)$  tiene soporte  $[0, 4]$ , por lo que  $\varphi_4(x-l)$  tiene soporte  $[l, 4+l]$ . Por otro lado,  $\varphi_4(2x-k)$  tiene soporte  $\left[\frac{k}{2}, \frac{4+k}{2}\right]$ . Existe intersección entre los soportes si  $2l-4 < k < 2l+8$ , por lo

cual la sumatoria anterior es finita:

$$\langle \psi'(x), \varphi_4'(x-l) \rangle = \sum_{k=2l-3}^{2l+7} d(k) \langle \varphi_4'(2x-k), \varphi_4'(x-l) \rangle. \quad (4)$$

Por otra parte, sabemos que  $\varphi_4(x)$ , satisface una relación de 2 escalas dada por,

$$\varphi_4(x) = \sum_{n=0}^4 h_n \varphi_4(2x-n), \quad (5)$$

donde  $h_n$  son las componentes del vector  $h = [\frac{1}{8}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}, \frac{1}{8}]$ . Teniendo en cuenta esto y propiedades de las B-splines se obtiene la siguiente expresión para el producto interno de las derivadas:

$$\langle \varphi_4'(2x-k), \varphi_4'(x-l) \rangle = -2 \sum_{n=0}^4 h_n \varphi_8''(4+2l+n-k). \quad (6)$$

Por lo tanto, para cada  $l \in \mathbb{Z}$ , la Ec. (4) adopta la forma:

$$\langle \psi'(x), \varphi_4'(x-l) \rangle = -4 \sum_{k=2l-3}^{2l+7} d(k) \sum_{n=0}^4 h_n \varphi_8''(4+2l+n-k), \quad (7)$$

donde  $\varphi_8''(4+2l+n-k)$  representa la derivada segunda de la spline de orden 7 evaluada en  $x = 4+2l+n-k$  y los valores  $h_n$  están dados por la mencionada relación de 2 escalas.

Es decir que sólo resta hallar los valores  $d(k)$ ,  $k = \{2l-3, 2l-2, \dots, 2l+7\}$ , que satisfagan la condición de ortogonalidad dada en la Ec. (1) para cada valor de  $l$ . Para resolver este sistema llamemos

$$q_1(z) := \sum_{l \in \mathbb{Z}} d(2l+1)z^{2l+1} \quad q_2(z) := \sum_{l \in \mathbb{Z}} d(2l)z^{2l} \quad (8)$$

la condición de ortogonalidad se puede reescribir matricialmente:

$$B(z)(q_1(z), q_2(z))^T = 0 \quad (9)$$

donde

$$(B(z))^T = \begin{bmatrix} -\frac{1}{240}z^7 - \frac{39}{80}z^5 + \frac{59}{120}z^3 - \frac{59}{120}z - \frac{39}{80}z^{-1} - \frac{1}{240}z^{-3} \\ -\frac{7}{60}z^6 - \frac{8}{15}z^4 - \frac{13}{10}z^2 - \frac{8}{15} - \frac{7}{60}z^{-2} \end{bmatrix}$$

Una solución para este sistema, está dada por:

$$\begin{bmatrix} q_1(z) \\ q_2(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -28z^5 - 184z^3 - 28z^1 \\ z^6 + 119z^4 + 119z^2 + 1 \end{bmatrix}.$$

Se obtiene así la siguiente expresión para la wavelet buscada:

$$\psi(x) = \varphi_4(2x) - 28\varphi_4(2x-1) + 119\varphi_4(2x-2) - 184\varphi_4(2x-3) + 119\varphi_4(2x-4) - 28\varphi_4(2x-5) + \varphi_4(2x-6).$$

Como se muestra en la Figura 1 (b), la wavelet  $\psi(x)$  que se obtuvo, tiene soporte  $[0, 5]$ , es simétrica y además satisface la condición de ortogonalidad requerida.

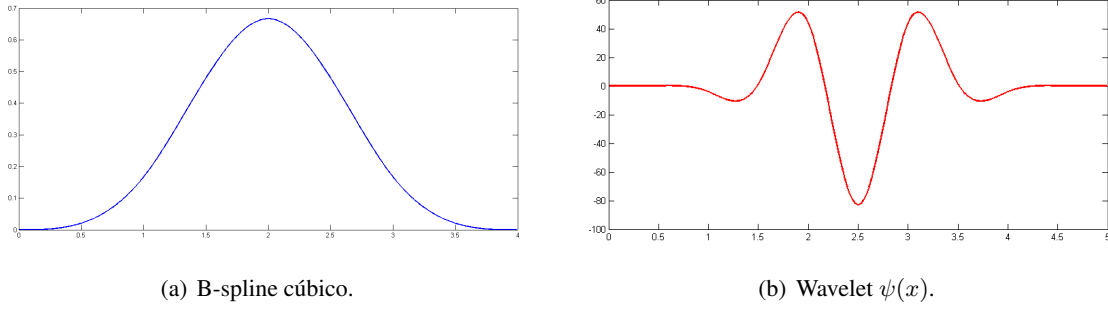


Figura 1: Función de escala y wavelet

### 3. WAVELET EN EL INTERVALO

Utilizaremos la spline wavelet obtenida en la sección anterior para construir una base wavelet del espacio  $H_0^1(0, 1)$ .

Consideremos los espacios  $V_j$  de un análisis multirresolución de  $L^2[0, 1]$  determinado por las traslaciones de la B-spline cúbica que son interiores al intervalo  $[0, 1]$ . Se demuestra que la dimensión de  $V_j$  es  $2^j - 3$  [2].

Por otro lado, sean  $\Phi_j$  y  $\Psi_j$ , para  $j \geq 3$  los conjuntos definidos por

$$\Phi_j = \{\varphi_4(2^j x - k) : k = 0, 1, \dots, 2^j - 4\} \quad (10)$$

$$\Psi_j = \{\psi(2^j x - k) : k = -2, -1, 0, \dots, 2^j - 3\} \quad (11)$$

$\Phi_j$  es una base de  $V_j$ . Llamemos  $W_j$  el espacio generado por el conjunto  $\Psi_j$ . La dimensión de  $W_j$  es  $2^j$ . Por nuestra construcción es fácil ver que

$$\int_0^1 w'(x) v'(x) dx = 0 \quad \forall w \in W_j \quad y \quad v \in V_j. \quad (12)$$

Teniendo en cuenta la expresión que define a  $\psi(x)$ , vemos que  $V_{j+1} \supset V_j + W_j$  y además  $V_j \cap W_j = \{0\}$ . Por lo tanto,

$$\dim(V_j + W_j) = \dim V_j + \dim W_j = 2^{j+1} - 3 = \dim(V_{j+1}). \quad (13)$$

Por lo tanto  $V_{j+1}$  es suma directa de  $V_j$  y  $W_j$ . Consecuentemente,

$$V_{j+1} = V_3 + W_3 + \dots + W_j.$$

Así, tenemos la siguiente descomposición de  $H_0^1(0, 1)$ :

$$H_0^1(0, 1) = V_3 + W_3 + W_4 + \dots \quad (14)$$

### 4. APLICACIÓN

Se presenta en esta sección la aplicación de las bases wavelets anteriormente construidas en el cálculo de los elementos de la matriz de rigidez correspondiente a la formulación débil del siguiente problema diferencial de segundo orden:

$$\begin{cases} -u'' = f & \text{en } (0, 1) \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \quad (15)$$

Buscamos una aproximación a la solución del problema planteado en el espacio  $V_{j+1}$ , teniendo en cuenta la Ec.(14), una base  $G_j$  está dada por la unión de las bases de cada uno de los espacios que componen la suma directa Ec. (10) y Ec. (11).

Como consecuencia de la condición de ortogonalidad requerida Ec. (1), la matriz de rigidez cuyos elementos son  $\langle g'_n, g'_m \rangle$ , resulta diagonal por bloques y además cada bloque es una matriz banda (ver Figura (2)) . El número de condición  $cond = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$  de la matriz se mantiene uniformemente acotado. Esta afirmación se comprobó numéricamente (ver Tabla (1)).

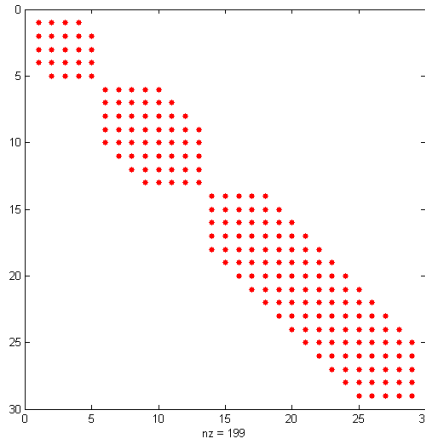


Figura 2: Forma de la matriz de rigidez para  $j = 4$

$j$	3	4	5	6	7	8
$\lambda_{max}$	1.3567	1.3581	1.3593	1.3597	1.3598	1.3598
$\lambda_{min}$	0.4352	0.4003	0.3894	0.3864	0.3855	0.3853
$cond$	3.1176	3.3926	3.4907	3.5193	3.5270	3.5290

Tabla 1: Número de condición de la matriz  $K_j$

## 5. CONCLUSIÓN

A partir de las funciones de escala B-splines cúbicas se construyeron bases wavelets ortogonales respecto al producto interno de las derivadas. Se mostró que al utilizarlas en la resolución de ecuaciones diferenciales, esas bases resultan muy ventajosas en cuanto a las propiedades de la matriz de rigidez, ya que además de ser una matriz por bloques, su condicionamiento se mantiene acotado uniformemente a medida que aumenta la escala.

## 6. AGRADECIMIENTOS

A nuestro querido amigo Profesor Eduardo Serrano por las enseñanzas y la amistad que nos brindó.

## REFERENCIAS

- [1] R.Q JIA AND S.T LIU, *Wavelet bases of Hermite cubic splines on the interval*, Advance in Computational Mathematics 25 (2006), pp 23-39.
- [2] C.K. CHUI, *An introduction to Wavelet Analysis*, Academic Press, 1992.
- [3] D. WALNUT, *An introduction to Wavelet Analysis*, Birkhauser, 2001.
- [4] S.G. MALLAT, *A Wavelet Tour og Signal Processing - The Sparse Way*, Academic Press, 2009.

# HOMOTOPY ANALYSIS METHOD APPLIED TO PROTEIN AGGREGATION MODELS

Pablo Amster<sup>†</sup> and Carlos Héctor Daniel Alliera<sup>‡</sup>

<sup>†, ‡</sup>*Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Buenos Aires, Argentina, [pamster@dm.uba.ar](mailto:pamster@dm.uba.ar), [calliera@dm.uba.ar](mailto:calliera@dm.uba.ar)*

<sup>†</sup>*IMAS - CONICET*

**Abstract:** Irregular folding of proteins can lead to the formation of insoluble fibers known as amyloids, that generate severe disorders such as Alzheimer's disease, type II diabetes, Creutzfeldt-Jakob disease, or spongiform encephalopathy Bovine (see [9]).

In this paper, we approximate rescaled concentrations of proteins, proteic nuclei and amyloid fibers by using the homotopy analysis method (HAM).

**Keywords:** *HAM, protein folding, parameter estimation, characteristic time.*

2000 AMS Subject Classification: 65L20 - 34N05

## 1 INTRODUCTION

Protein folding is an essential process for the development of life but, when it is done incorrectly, the results can be very serious and usually irreversible. The phenomenon by which misfolded proteins accumulate and clump together is known as Aggregation of proteins. This process can be intra or extracellular; among several reasons, it is due to aging, extreme temperature or PH, problems during transcription or translation or DNA mutations.

Proteins come together to form nuclei, fiber is produced when nuclei meet protein.

Delfino et al [1] proposed a model which studies concentrations of protein, nuclei and fibers depending on time  $t$ . It is assumed that concentration of protein decays to generate nuclei which, combined with proteins, transform in turn into fibers, whose concentration increases until the protein is finished or it is negligible. Models of this kind have already been considered for example in [8]

In this work, we study a numerical approximation for a model of aggregation, which is produced by the incorrect folding of proteins, their composition in nuclei and their subsequent fibrillation. The Homotopy Analysis Method (HAM - see [3]) has been used successfully in a wide variety of cases such as [3],[4] or [5]. The method will be applied to this rescaled model of aggregation in order to provide numerical solutions. Finally, by using Mathematica<sup>®</sup> (see [7]) we compare solutions graphically.

## 2 GENERALITIES

The model of protein aggregation proposed by [1] can be written as follows:

$$\left\{ \begin{array}{l} P'(t) = -aP(t) - bN(t)P(t) \\ N'(t) = aP(t) - bN(t)P(t) \\ F'(s) = bN(t)P(t) \\ P(0) = P_0 > 0, N(0) = 0, F(0) = 0. \end{array} \right. \quad (1)$$

Here,  $a, b > 0$  are parameters related to the model kinetics. The concentrations are time-depending functions  $P, N$  and  $F$  of monomers, nuclei and fibers respectively. The law of conservation of this system turns out to be:

$$P'(t) + N'(t) + 2F'(t) = 0 \Rightarrow P(t) + N(t) + 2F(t) = P_0$$

Under conditions mentioned in [2], system (1) has solution.

## 2.1 INTRODUCING DIMENSIONLESS VARIABLES

The following change of variables is proposed:

$$s = \frac{t}{k}, \quad x(s) = \frac{P(ks)}{P_0}, \quad y(s) = \frac{N(ks)}{P_0}, \quad z(s) = \frac{F(ks)}{P_0}$$

where  $k = \frac{1}{\sqrt{abP_0}}$  is defined as the *characteristic time*. We remark that this change of variables requires

$$ak = 1 \quad \text{and} \quad bP_0k = 1;$$

in particular, the parameter  $a$  depends on initial concentration  $P_0$ , namely  $a = bP_0$ .

Thus a dimensionless system, independent of conservation law parameters  $x(s) + y(s) + 2z(s) = x_0$  is obtained, so it can be reduced in one dimension to the rescaled system:

$$\begin{cases} x'(s) = -x(s) - y(s)x(s) \\ y'(s) = x(s) - y(s)x(s) \\ x(0) = 1, \quad y(0) = 0 \end{cases} \quad (2)$$

According to laboratory data, it is known that  $x$  is decreasing and that  $z$  is increasing and also:

$$\lim_{s \rightarrow +\infty} x(s) = 0, \quad \lim_{s \rightarrow +\infty} z(s) = z_0, \quad \lim_{s \rightarrow +\infty} y(s) = y_0 \quad (3)$$

The critical points are of the form:  $(x^*, y^*) = (0, y_0)$ ; that is to say, they are all located on the equation line  $x = 0$ .

## 3 ANALYTIC RESOLUTION

Rescaled system (2) for  $x_0 = 1$  has a solution that can be written as a contour line:

$$x - y - 2 \log(1 - y) = C_0$$

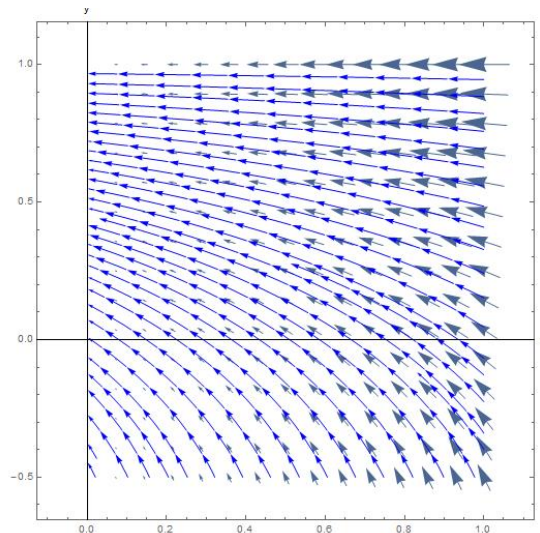


Figure 1: Concentration of  $y$  in relation to  $x$

In Figure 1, we can see the flow diagram for concentrations of  $x$  (horizontal axis) between 0 and 1.

Also, an explicit formula for the solutions can be found in this case:

$$x(t) = H^{-1}(t)(C_0 - 2t), \quad y(t) = 1 + 2W\left(\pm \frac{1}{2}\sqrt{e^{C_0-1+x(t)}}\right),$$

where

$$H(t) = \int_1^t \frac{1}{r \left( W\left(\pm \frac{1}{2}\sqrt{e^{r+C_1-1}}\right) + 1 \right)} dr$$

and  $W(t)$  is the inverse of  $te^t$ , known in the literature as the Lambert function.

#### 4 NUMERICAL APPROACH: THE HAM

We will apply the homotopy analysis method (or HAM) to find the approximate formulas of the solutions of (2).

In order to establish what we shall consider a ‘good’ approximation, an error criterion is needed.

**Definition 1** Given a differential equation  $X'(t) = \Phi(X(t))$  such that  $\tilde{X}(t)$  is an approximate solution calculated for a set  $\Omega \in \mathbb{R}$ . The **Mean Squared Error (MSE)** is defined as the integral:

$$E_m = ECM = \int_{\Omega} (\tilde{X}'(t) - \Phi(\tilde{X}(t)))^2 dt$$

Initial functions were chosen as:

$$x_0(t) = e^{-t}, \quad y_0(t) = 0.2(1 - e^{-t}).$$

Thus, a solution of order 5 was obtained, for which we observe a very similar behaviour to that of the numerical solution given by Mathematica for  $0 \leq t \leq 10$  with initial conditions  $x_0 = 1, y_0 = 0$ .

In Figure 2, we may observe two almost coincident graphs; the continuous one corresponds to the solution given by the Mathematica, the dashed one was obtained by the HAM.

The Mean Squared Error in the interval  $[0, 10]$  was estimated as  $MSE < 5.72 \cdot 10^{-7}$ .

With the above, an approximate order 5 formula can be computed for  $y(t)$  with acceptable MSE which result  $MSE < 1.83 \cdot 10^{-5}$  as can be seen in the Figure 3 where the solution given by Mathematica (dashed) and the one obtained by HAM (continuous) are shown.

Once  $x$  and  $y$  are known, the function  $z(t)$  that determines the concentration of fibers in the interval  $[0, 10]$  is given by:

$$z(t) = \frac{1}{2}(1 - x(t) - y(t))$$

Here  $MSE < 5.4 \cdot 10^{-6}$ , it can be improved by increasing the degree of HAM.

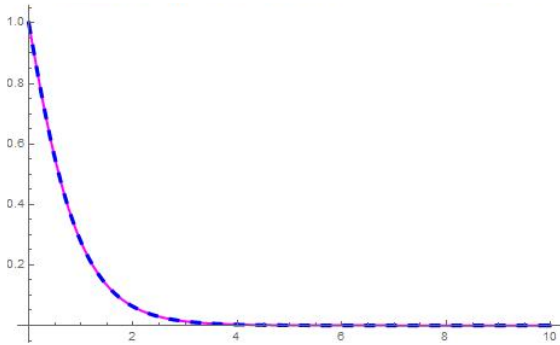


Figure 2: Comparison of the graphs of the numerical solution of  $x$

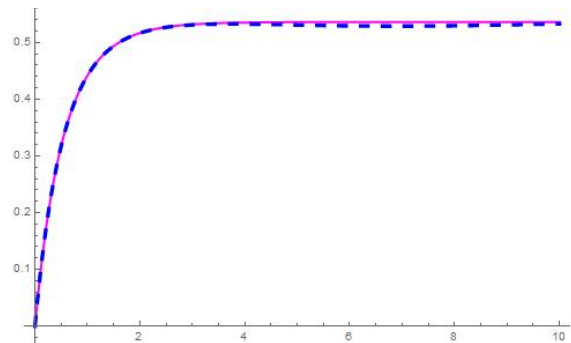


Figure 3: Comparison of the graphs for  $y$

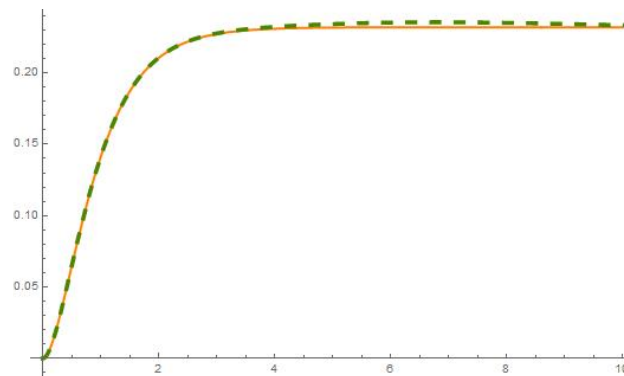


Figure 4: Graph of the approximation for the function  $z$ .

#### ACKNOWLEDGEMENT

This work was partially supported by project UBACyT 20020120100029BA. We are grateful to Dr Walter Reartes and Dr Romina Cobiaga for their helpful comments.

#### REFERENCES

- [1] CARLA R ANGELANI, INÉS S. CABANAS, JULIO J. CARAMELO, LUCRECIA M. CURTO, JOSÉ M. DELFINO , *Intervening in the beta barrel of fatty acid binding protein Consequences on folding, ligand binding and aggregation propensity*, Department of Biological Chemistry and Institute of Biochemistry and Biophysics (IQIFIB), School of Pharmacy and Biochemistry, University of Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, 2014.
- [2] PABLO AMSTER, *Topological Methods in the Study of Boundary Value Problems*, Springer, New York, 2014.
- [3] SHIJUN LIAO, *Beyond Perturbation*, Chapman and Hall/CRC, 2004.
- [4] WALTER REARTES, ROMINA COBIAGA, *Search for Periodic Orbits in Delay Differential Equations*, International Journal of Bifurcation and Chaos, pp 1-11, 2014.
- [5] ANDREA LILIANA BEL, *Soluciones Oscilatorias en Ecuaciones Diferenciales con Retardo*, tesis doctoral, Bahía Blanca, 2014.
- [6] SHIJUN LIAO, *Homotopy Analysis Method in Nonlinear Differential Equations*, Springer, Higher Educational Press, Berlin/Beijing, 2012.
- [7] STEPHEN LYNCH, *Dynamical Systems with Applications using Mathematica*, Birkhäuser, Boston 2007.
- [8] AIMEE M. MORRIS, MURIELLE WATZKY, RICHARD G. FINKE, *Protein aggregation kinetics, mechanism, and curve-fitting: A review of the literature*, *Biochimica et Biophysica Acta* 1794 (2009), 375-397, Elsevier.
- [9] MARÍA ELENA CHÁNEZ-CÁRDENAS, DAVID ALEJANDRO CISNEROS ARMAS, LUIS DEL POZO YAUNER, BALTAZAR BECERRIL, D. ALEJANDRO FERNÁNDEZ-VELASCO, *Enfermedades relacionadas al plegamiento anómalo de las proteínas*, Mensaje Bioquímico, Vol. 26, pp 73-97 Universidad Autónoma de México, 2002