Rafael Fernández Ortiz
Manuel Núñez González

2. El siguiente sistema de ecuaciones ha sido utilizado para modelar la formación de radios en la aleta caudal del pez cebra:

$$\begin{aligned}\frac{\partial r}{\partial t} &= a\,(r-\bar{r})(R^2-(r-\bar{r})^2)-b\,(j-\bar{j})+\mu_1\frac{\partial^2 r}{\partial x^2},\\ \frac{\partial j}{\partial t} &= c\,(r-\bar{r})-d\,(j-\bar{j})+\mu_2\frac{\partial^2 j}{\partial x^2}.\end{aligned}$$

donde

- la unidad de la variable x es la longitud característica de una célula;
- la unidad de la variable t es el tiempo característico en el que se produce una división celular;
- $r(x,t)$ es la concentración de una sustancia actividora de la formación de células de radio en x en el instante t: una célula pasa a ser de tipo radio cuando el valor de r es mayor que un cierto valor crítico $\bar{r}$;
- $j(x,t)$ es la concentración de una sustancia inhibidora de la formación de células de radio en x en el instante t;
- a, b,c, d, $\bar{j}$, R, μ_1, μ_2 son constantes positivas.

Se trata por tanto de un modelo de reacción-difusión: las sustancias r y j son creadas y destruidas en las células y además pasan de unas a otras a través de sus membranas por difusión.

(a) Si se introducen las variables

$$t'=\frac{t}{t^*},\quad x'=\frac{x}{x^*},\quad u=\frac{r-\bar{r}}{r*},\quad v=\frac{j-\bar{j}}{j*},$$

siendo

$$t^*=\frac{1}{aR^2},\quad x^*=\sqrt{\frac{\mu_1}{aR^2}},\quad r^*=R,\quad j^*=\frac{aR^3}{b},$$

pruebe que el sistema se puede expresar como sigue

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t'} &= u(1-u^2)-v+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\\ \frac{\partial v}{\partial t'} &= \gamma u-\delta v+l\frac{\partial^2 v}{\partial x^2},\end{aligned}$$

para ciertos parámetros γ, δ, l.

(b) Se consideran las ecuaciones obtenidas en el apartado anterior en el intervalo $x\in[0,L]$, siendo L la longitud de la capa distal de células medida en número de células y en $t\in[0,\infty)$, con condiciones iniciales:

$$u(x,0)=u_0(x),\quad v(x,0)=v_0(x),\quad x\in[0,L],$$

siendo u_0 y v_0 funciones conocidas, así como con condiciones de contornode tipo Neumann homogéneas:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t)=\frac{\partial u}{\partial x}(L,t)=0,\quad t\in[0,\infty),$$

$$\frac{\partial v}{\partial x}(0,t)=\frac{\partial v}{\partial x}(L,t)=0,\quad t\in[0,\infty).$$

Escriba un esquema de diferencias finitas explícito para el sistema de ecuaciones en derivadas parciales, basado en una discretización centrada de las derivadas segundas.

(c) Confeccione un programa que resuelva numéricamente las ecuaciones con el esquema descrito en el apartado anterior.

(d) Resuelva las ecuaciones con $L = 30$, $\delta = 1.78$, $\gamma = 1.8$, $l = 12$,

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } 10 \leq x \leq 20 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \qquad v_0 = -u_0.$$

Si una célula es de tipo radio cuando $u \geq 0$ y de tipo interradio cuando $u < 0$, ¿cómo son la configuración inicial y final de la capa distal de la aleta?

Apartado a

$t' = \frac{t}{t^*}$; $x' = \frac{x}{x^*}$; $u = \frac{r-\bar{r}}{r^*}$; $v = \frac{j-\bar{j}}{j^*}$

$t^* = \frac{1}{aR^2} \equiv cte$; $x^* = \sqrt{\frac{\mu_1}{aR^2}} \equiv cte$; $r^* = R \equiv cte$; $j^* = \frac{aR^3}{b} \equiv cte$

$$\boxed{\frac{\partial u}{\partial t} = u(1-u^2) - v + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}}$$

$$\overbrace{\frac{\partial r}{\partial t}}^{I} = \overbrace{a(r-\bar{r})(R^2-(r-\bar{r})^2) - b(j-\bar{j}) + \mu_1 \frac{\partial^2 r}{\partial x^2}}^{II}$$

Por un lado:

$\boxed{II}$ (1) $a r^* \frac{(r-\bar{r})}{r^*}\left(r^{*2} - r^{*2}\left(\frac{r-\bar{r}}{r^*}\right)^2\right) - b j^* \frac{(j-\bar{j})}{j^*} + \mu_1 \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} =$

como $u = \frac{r-\bar{r}}{r^*} \longrightarrow \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{r^*}\frac{\partial r}{\partial x} \Rightarrow \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{r^*}\frac{\partial^2 r}{\partial x^2}$; se tiene:

$= (2)\ a r^* \frac{(r-\bar{r})}{r^*}\left(r^{*2} - r^{*2}\left(\frac{r-\bar{r}}{r^*}\right)^2\right) - b j^* \frac{(j-\bar{j})}{j^*} + \mu_1 r^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} =$

$= (3)\ a r^* \cdot u\, r^{*2}(1-u^2) - b j^* v + \mu_1 r^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} =$

$= (4)\ a r^{*3} u(1-u^2) - b j^* v + \mu_1 r^* \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} =$

$= (5)\ a r^{*3} u(1-u^2) - a r^{*3} v + x^{*2} a r^{*3} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} =$

como $x' = \frac{x}{x^*}$; $x^* x' = x \Rightarrow \partial x = x^* \partial x' \Rightarrow \partial^2 x = x^{*2} \partial^2 x'$; Así:

$= (6)\ a r^{*3} u(1-u^2) - a r^{*3} v + \frac{\cancel{x^{*2}} a r^{*3}}{\cancel{x^{*2}}} \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} =$

$= (7)\ (a r^{*3}) u(1-u^2) - (a r^{*3}) v + (a r^{*3}) \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}$

Por otro lado:

$\boxed{I}$ como $\frac{t}{t^*} = t'$ con $t^* = cte$; $t = t' \cdot t^* \Rightarrow \partial t = \partial t'\, t^* = \partial t' \frac{1}{a r^{*2}}$

y como $u = \frac{r-\bar{r}}{r^*}$; $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial r}{\partial t}\frac{1}{r^*} \Rightarrow r^* \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial r}{\partial t}$; se tiene:

$$(1)\quad \frac{\partial r}{\partial t} = r^* \frac{\partial u}{\partial t} = a r^{*2} \cdot r^* \frac{\partial u}{\partial t'} = a r^{*3} \frac{\partial u}{\partial t}$$

$\boxed{\text{con I y II}}$ $\Rightarrow$

$$a r^{*3} \frac{\partial u}{\partial t} = (a r^{*3})\, u\,(1-u^2) - (a r^{*3})\, v + (a r^{*3}) \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1-u^2) - v + \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2}$$

$$\boxed{\frac{\partial v}{\partial t'} = \gamma u - \delta v + \rho \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}}$$

$$\underbrace{\frac{\partial j}{\partial t}}_{\mathrm{I}} = \underbrace{c(r-\bar{r}) - \partial(j-\bar{j}) + \mu_2 \frac{\partial^2 j}{\partial x^2}}_{\mathrm{II}}$$

Por un lado

$\boxed{\mathrm{I}}$

Como $v = \frac{j-\bar{j}}{j^*}$; $\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{j^*}\frac{\partial j}{\partial t} \Rightarrow j^* \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial j}{\partial t}$ y

como $t' = \frac{t}{t^*}$; $t^* t' = t$; $\partial t = \partial t' \cdot t^* = \frac{\partial t'}{a r^{*2}}$; entonces

$$(1)\quad \frac{\partial j}{\partial t} = j^* \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{a r^*}{b} \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{a^2 r^{*3}}{b} \frac{\partial v}{\partial t'}$$

Por otro lado

$\boxed{\mathrm{II}}$

$$(1)\quad c\,(r-\bar{r}) - \partial(j-\bar{j}) + \mu_2 \frac{\partial^2 j}{\partial x^2} =$$

$$= (2)\quad c\, r^* \frac{(r-\bar{r})}{r^*} - \partial j^* \frac{(j-\bar{j})}{j^*} + \mu_2 j^* \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} =$$

$$= (3)\quad (c r^*)\, u - \left(\partial \frac{a r^{*}}{b}\right) v + \left(\mu_2 \frac{a r^*}{b}\right) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} =$$

$$= (4)\quad (c r^*)\, u - \left(\partial \frac{a r^{*3}}{b}\right) v + \left(\mu_2 \frac{a r^{*3}}{x^{*2} b}\right) \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2} =$$

$$= (5)\quad (c r^*)\, u - \left(\partial \frac{a r^{*3}}{b}\right) v + \left(\mu_2 \frac{a^2 r^{*5}}{\mu_1 b}\right) \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2} =$$

~~(6)~~ $\cancel{\frac{\partial^2 v}{\partial x'^2}}$

Así, $\boxed{\text{Con I y II}}$

$$\Rightarrow \quad \frac{a^2 r^{3*}}{b} \frac{\partial v}{\partial t'} = (c r^{*})\, u - \left(d \frac{a r^{3*}}{b}\right) v + \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \frac{a^2 r^{5*}}{b}\right) \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t'} = \left(\frac{c b}{a^2 r^{*}}\right) u - \left(\frac{d}{a}\right) v + \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} r^{2*}\right) \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2}$$

$$\boxed{\frac{\partial v}{\partial t'} = \alpha u - \beta v + \gamma \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2}}$$

Apartado b

Consideremos el conjunto de puntos $X = \{x_0, \dots, x_N\}$ en el intervalo $[0,L]$, es decir, $x_i \in [0,L]$ $\forall i$ con $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = L$; y un conjunto de instantes en el intervalo $[0,T]$; $t_0 = 0, t_1, \dots, t_M = T$

Consideremos además los nodos y los niveles de tiempo igualmente separados y definidos:

$$\Delta x = x_{i+1} - x_i \quad \forall i$$
$$\Delta t = t_{n+1} - t_n \quad \forall n$$

De este modo $x_i = i \cdot \Delta x$; $t_n = n \cdot \Delta t$

Aplicando el método de las diferencias finitas para aproximar las derivadas parciales:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_n) \simeq \frac{u(x_i, t_{n+1}) - u(x_i, t_n)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_n) \simeq \frac{u(x_{i-1}, t_n) - 2u(x_i, t_n) + u(x_{i+1}, t_n)}{\Delta x^2}$$

Denotando por u_i^n $\forall i \neq 0, N$, $n \geq 1$, a las aproximaciones de $u(x_i, t_n)$, la ecuación $u_t - u_{xx} = u(1 - u^2) - v$ queda entonces:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\, G(x_i, t_n) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n\right)$$

con $G(x_i, t_n) = u_i^n \left(1 - (u_i^n)^2\right) - v_i^n$

- Imponiendo las condiciones de la frontera, como $\frac{\partial u}{\partial x}(0, t_n) = 0$ $\forall n$.

Para $i = 0$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t_n) \simeq \frac{u_1^n - u_{-1}^n}{2\Delta x} \text{ ; es decir, } u_0^n = \frac{u_1^n - u_{-1}^n}{2\Delta x}$$

$$\Rightarrow \frac{u_1^n - u_{-1}^n}{2\Delta x} = 0 \Leftrightarrow \boxed{u_1^n = u_{-1}^n}$$

Así: $u_0^{n+1} = u_0^n + \Delta t\, G(x_0, t_n) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}(u_1^n - u_0^n)$; por ser $u_1^n = u_{-1}^n$

Para $\underline{i = N}$; como $\frac{\partial u}{\partial x}(L, t_n) = 0 \ \forall n.$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L, t_n) \simeq u_N^n$$

$$u_N^n = \frac{u_{N+1}^n - u_{N-1}^n}{2\Delta x} \Rightarrow \frac{u_{N+1}^n - u_{N-1}^n}{2\Delta x} = 0 \Leftrightarrow \boxed{u_{N+1}^n = u_{N-1}^n}$$

$$\Rightarrow u_N^{n+1} = u_N^n + \Delta t\, G(x_N, t_n) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{N-1}^n - 2u_N^n + u_{N+1}^n)$$

$$\Rightarrow u_N^{n+1} = u_N^n + \Delta t\, G(x_N, t_n) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}(u_{N-1}^n - u_N^n)$$

Por tanto

$$\begin{cases} \text{Para } i=0; & u_0^{n+1} = u_0^n + \Delta t\, G(x_0, t_n) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}(u_1^n - u_0^n) \\ \text{Para } i=1,\dots,N-1; & u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t\, G(x_i, t_n) + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{i-1}^n - 2u_i^n + u_{i+1}^n) \\ \text{Para } i=N; & u_N^{n+1} = u_N^n + \Delta t\, G(x_N, t_n) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}(u_{N-1}^n - u_N^n) \end{cases}$$

- De manera análoga:

$$\frac{\partial v}{\partial t} \cong \frac{v(x_i, t_{n+1}) - v(x_i, t_n)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x_i, t_n) \simeq \frac{v(x_{i-1}, t_n) - 2v(x_i, t_n) + v(x_{i+1}, t_n)}{\Delta x^2}$$

Denotemos v_i^n $\forall i \neq 0, N$ y $n \geq 1$ a las aproximaciones de $v(x_i, t_n)$; por tanto, la ecuación $v_t - \ell v_{xx} = \gamma u - \delta v$ queda entonces:

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{\Delta t\, \ell}{\Delta x^2}(v_{i-1}^n - 2v_i^n + v_i^{n+1}) + \Delta t\, H(x_i, t_n)$$

Con $H(x_i, t_n) = \gamma u_i^n - \delta v_i^n$

Imponiendo las condiciones de la frontera, como $\frac{\partial V}{\partial x}(0,t_n)=0$;

Para $\underline{i=0}$

$$\frac{\partial V}{\partial x}(0,t_n) \cong \frac{V_1^n - V_{-1}^n}{2\Delta x} \; ; \text{ es decir, } V_0^n = \frac{V_1^n - V_{-1}^n}{2\Delta x}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{V_1^n - V_{-1}^n}{2\Delta x} = 0 \iff \boxed{V_1^n = V_{-1}^n}$$

$$\Rightarrow \quad V_0^{n+1} = V_0^n + \Delta t\, H(x_0,t_n) + \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}\left(V_1^n - V_0^n\right) \; ; \quad \text{por ser } V_1^n = V_{-1}^n$$

Para $\underline{i=N}$; como $\frac{\partial V}{\partial x}(L,t_n)=0 \quad \forall n$

$$\frac{\partial V}{\partial x}(L,t_n) \cong V_N^n$$

$$V_N^n = \frac{V_{N+1}^n - V_{N-1}^n}{2\Delta x} \Rightarrow \frac{V_{N+1}^n - V_{N-1}^n}{2\Delta x} = 0 \iff V_{N+1}^n = V_{N-1}^n$$

$$\Rightarrow \quad V_N^{n+1} = V_N^n + \Delta t\, H(x_N,t_n) + \frac{2\Delta t \ell}{\Delta x^2}\left(V_{N+1}^n - V_N^n\right)$$

Por tanto

$$\begin{cases} \text{Para } i=0; & V_0^{n+1} = V_0^n + \Delta t\, H(x_0,t_n) + \frac{2\Delta t \ell}{\Delta x^2}\left(V_1^n - V_0^n\right) \\ \text{Para } i=1,\dots,N-1; & V_i^{n+1} = V_i^n + \Delta t H(x_i,t_n) + \frac{\Delta t \cdot \ell}{\Delta x^2}\left(V_{i-1}^n - 2V_i^n + V_{i+1}^n\right) \\ \text{Para } i=N; & V_N^{n+1} = V_N^n + \Delta t\, H(x_N,t_n) + \frac{2\Delta t \ell}{\Delta x^2}\left(V_{N-1}^n - V_N^n\right) \end{cases}$$