

SOBRE UNA ECUACION DE REACCION-DIFUSION

J.L. García Cortí J.M. Pacheco Castelao
Depto. de Matemáticas, Universidad de Las Palmas de G.C.
Campus de Tafira Baja, E35017 Las Palmas.

Resumen

Se analiza la formación de pautas espaciales en una ecuación unidimensional de reacción-difusión cuando el coeficiente de difusividad depende de la distribución espacial de una especie, que actúa como control, cuya dinámica es rápida en comparación con la de la variable principal.

1 INTRODUCCION

Se trata de modelizar la evolución espacio-temporal de la concentración $X(t)$ de una especie (biológica, química,...) que reacciona según una ley $\gamma f(X)$, sometida a difusión espacial. Esta está regulada por otra especie $Y(t)$ -que puede pensarse como elemento de control-, sometida a una cinética similar, pero en una escala temporal mucho más rápida.

El modelo, en un espacio unidimensional, está descrito por el sistema de ecuaciones diferenciales adimensionales en derivadas parciales:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \gamma f(X) + \frac{\partial}{\partial x} (D(Y) \frac{\partial X}{\partial x}) \quad (1)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -dY + k \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} \quad (2)$$

donde $X(x, t)$ representa la concentración en la posición x y tiempo t , y f representa la cinética de reacción. γ es un factor de proporcionalidad de escala a lo largo del dominio y $D(Y)$ representa la difusividad, dependiente de Y .

La evolución del elemento de control viene dada por una degradación dY proporcional a Y y tiene coeficiente de difusión k . Tanto c como k se toman constantes.

Las ecuaciones (1) y (2) están [1] definidas espacialmente en $[0, 1]$ con flujo nulo en las condiciones de contorno de X . Las condiciones de contorno para Y

son:

$$\frac{\partial Y}{\partial x}(0, t) = 0 \quad Y(1, t) = c \quad (3)$$

De acuerdo con las escalas temporales utilizadas, [3] la dinámica regida por la ecuación (2) alcanza un equilibrio estable en un periodo corto de tiempo en el cual la concentración X no cambia significativamente su valor, por lo que la ecuación (2) para Y , puede reemplazarse por la concentración de equilibrio.

Considerando $\frac{\partial Y}{\partial t} = 0$ y resolviendo (2) con las condiciones de contorno (3) se obtiene que:

$$Y = c \frac{Ch(x\sqrt{\frac{d}{k}})}{Ch(\sqrt{\frac{d}{k}})} \quad (\text{Figura 1}) \quad (4)$$

Por tanto, el sistema se reduce a una ecuación de reacción-difusión (1) con coeficiente de difusión dependiente de x :

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \gamma f(X) + \frac{\partial}{\partial x} (D(x) \frac{\partial X}{\partial x}) \quad (5)$$

Consideramos aquí que $D(Y)$ es una función afín de Y , esto es:

$$D(Y) = \alpha Y + \beta \quad (\alpha < 0, \beta > 0) \quad (\text{Figura 2})$$

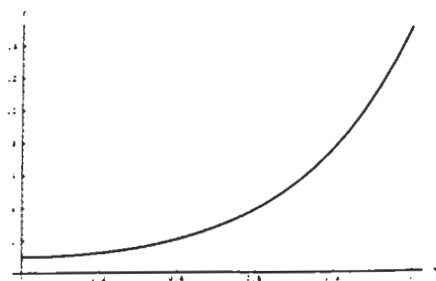


Figura 1

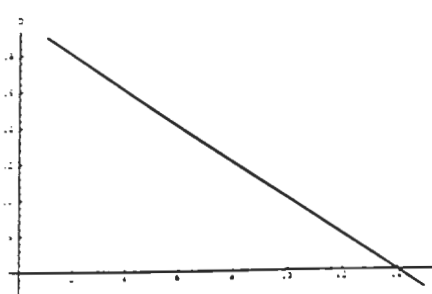


Figura 2

2 ANALISIS LINEAL

El análisis de este tipo de ecuaciones se lleva a cabo buscando soluciones que corresponden a perturbaciones espacio-temporales de las soluciones de equilibrio de la ecuación sin difusión. Esto es, se estudia en primer lugar $\frac{\partial X}{\partial t} = f(X)$ en

el entorno de los puntos X_0 tales que $f(X_0) = 0$. Como es sabido, se sustituye localmente dicha ecuación por $\frac{dh}{dt} = f'(X_0)h$, con $h = X - X_0$.

Linealizando la ecuación en torno a un punto singular X_0 se prueban soluciones del tipo:

$$X = X_0 + e^{\lambda t} Y_1(x) \quad (6)$$

Sustituyendo (6) en la ecuación (5) se obtiene:

$$(\gamma A - \lambda)Y_1 + (D(x)Y_1'(x))' = 0$$

donde A es la derivada de f en el punto singular y $'$ denota diferenciación con respecto a x . Desarrollando la ecuación anterior nos queda:

$$(\alpha Y(x) + \beta)Y_1''(x) + \alpha Y'(x)Y_1'(x) + (\gamma A - \lambda)Y_1(x) = 0$$

cuya solución general es:

$$Y_1(x) = c_1 e^{x(H_1 - H_2)} + c_2 e^{x(H_1 + H_2)}$$

siendo:

$$H_1 = \frac{-\alpha c \sqrt{\frac{d}{k}} S h(x \sqrt{\frac{d}{k}})}{2(\beta C h(\sqrt{\frac{d}{k}}) + \alpha c C h(x \sqrt{\frac{d}{k}}))}$$

$$H_2 = \frac{\sqrt{-4\beta(\gamma A - \lambda)C h^2(\sqrt{\frac{d}{k}}) - 4\alpha(\gamma A - \lambda)c C h(\sqrt{\frac{d}{k}})C h(x \sqrt{\frac{d}{k}}) + \alpha^2 c^2 \frac{d}{k} S h^2(x \sqrt{\frac{d}{k}})}}{2(\beta C h(\sqrt{\frac{d}{k}}) + \alpha c C h(x \sqrt{\frac{d}{k}}))}$$

Imponiendo como condición flujo cero para $x = 0$, se tiene que $c_1 = c_2$, con lo que:

$$Y_1 = 2c_1 e^{xH_1} C h(xH_2) \quad (7)$$

Teniendo en cuenta (6), para $(0,0)$ $Y_1(0) = X(0,0) - X_0$ y entonces la constante c_1 es:

$$c_1 = \frac{X(0,0) - X_0}{2}$$

con lo que la ecuación (7) queda en la forma :

$$Y_1 = (X(0,0) - X_0) e^{xH_1} C h(xH_2) \quad (8)$$

3 MORFOGENESIS

Es necesario un análisis más detallado de la ecuación

$$(\alpha Y(x) + \beta)Y_1''(x) + \alpha Y'(x)Y_1'(x) + (\gamma A - \lambda)Y_1(x) = 0$$

para justificar la formación de pautas espaciales. La ecuación característica puede escribirse como:

$$r^2 + \frac{\alpha Y'(x)}{\alpha Y(x) + \beta} r + \frac{\gamma A - \lambda}{\alpha Y(x) + \beta} = 0 \quad (9)$$

Debido a la forma de $Y(x)$ y de $D(Y) = \alpha Y(x) + \beta$, siempre se verifica que:

$$\frac{\alpha Y'(x)}{\alpha Y(x) + \beta} < 0$$

Un pequeño cálculo nos conduce a que:

$$H_1 = \frac{-1}{2} \frac{\alpha Y'(x)}{\alpha Y(x) + \beta} > 0$$

Por consiguiente, si (9) tiene raíces complejas su parte real es positiva, y para que las raíces de (9) sean complejas se ha de verificar que:

$$\left(\frac{\alpha Y'(x)}{\alpha Y(x) + \beta} \right)^2 - 4 \frac{\gamma A - \lambda}{\alpha Y(x) + \beta} < 0 \quad (10)$$

Llamando:

$$F(x) = \left(\frac{\alpha Y'(x)}{\alpha Y(x) + \beta} \right)^2 - 4 \frac{\gamma A - \lambda}{\alpha Y(x) + \beta}$$

la condición (10) se expresa como $F(x, \lambda) > 0$. En la figura 3, puede verse la gráfica de $z = F(x, \lambda)$.

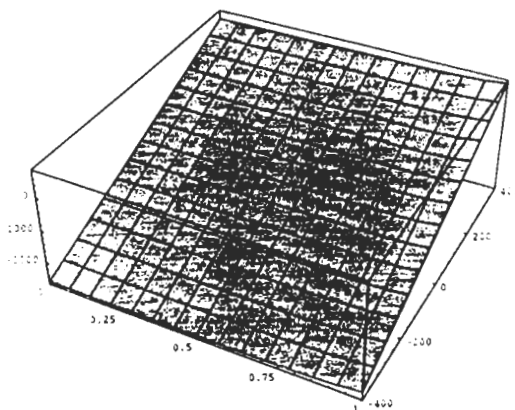


Figura 3

En la figura 4, se representa la intersección de la superficie anterior con el plano $F(x, \lambda) = 0$.

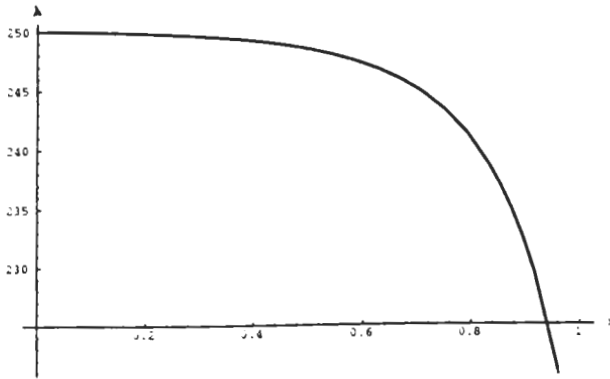


Figura 4

En las figuras anteriores, tanto el término de reacción como los valores de los parámetros, coinciden con los elegidos en los experimentos numéricos en que $\sqrt{\frac{d}{k}} = 2$). Se observa que, fijado x , se obtienen valores de λ de distinto signo, correspondientes a distintos comportamientos de evolución temporal.

La condición (10) equivale a decir que H_2 ha de ser imaginario puro, esto es: $H_2 = iK_2$ para algún real K_2 . De esta manera la ecuación (8) será:

$$Y_1 = (X(0,0) - X_0)e^{xH_1} \cos(xK_2)$$

presentando la natural oscilación de Y_1 .

4 EXPERIMENTOS NUMERICOS

Se considera el sistema (1),(2) con efecto Allée en X , esto es, se toma $f(X)$ como un polinomio de tercer grado [4]:

$$f(X) = rX(s - X)(X - 1) \quad (r > 0, s \in (0, 1))$$

Los puntos singulares corresponden a $X_0 = 0, s, 1$. Como el sistema (1),(2) produce pautas de difusión espacial [5] sólo si el estado estacionario uniforme es inestable para perturbaciones no homogéneas, se considera $X_0 = s$, ya que es el único valor de X_0 en el que existe inestabilidad ($f'(s) > 0$).

En los experimentos numéricos que se presentan, los valores elegidos son:
 $r = 1$, $s = \frac{1}{2}$, $\alpha = -1$, $\beta = 20$, $\gamma = 1000$, $c = 15$ y (Fig.5.a) $\sqrt{\frac{d}{k}} = 0.4857$,
 (Fig.5.b) $\sqrt{\frac{d}{k}} = 1$, (Fig.5.c) $\sqrt{\frac{d}{k}} = 2$.

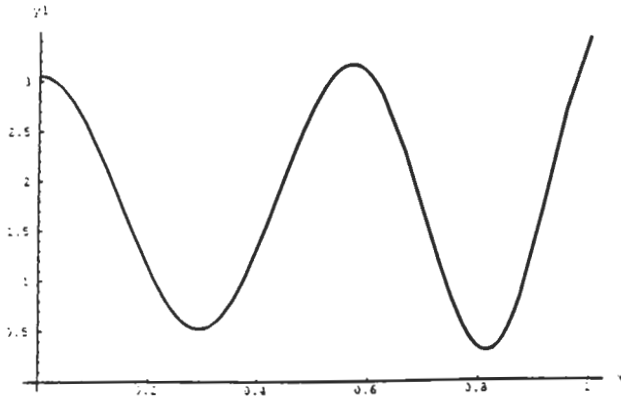


Figura 5.a

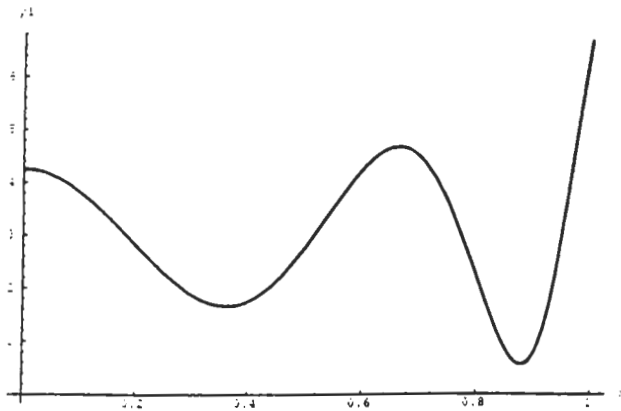


Figura 5.b

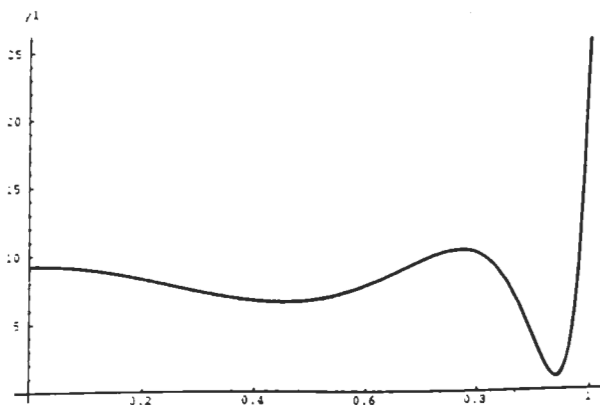


Figura 5.c

Se aprecia que las soluciones muestran diferente comportamiento cualitativo que el observado cuando el coeficiente de difusión es constante. En particular, nuestra ecuación puede generar soluciones con amplitud y longitud de onda espacialmente variables.

Además se observa que el cociente $\frac{d}{k}$ entre los elementos característicos de la cinética de Y actúa como parámetro de control de la formación de pautas espaciales.

5 REFERENCIAS

[1] Murray, J. (1988) : *Mathematical Biology*, Springer Verlag, Berlin.

[2] Padilla, I. *et al.* (1993) : Estabilidad de sistemas de ecuaciones de reacción-difusión con difusividades variables, *Actas II Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Vol. 2, 892-899, La Coruña.

[3] Benson, D.L., Maini, P.K., Sherratt, J.A. (1993) : Analysis of pattern formation in reaction diffusion models with spatially inhomogenous diffusion coefficients, *Mathl. Comput. Modelling*, Vol. 17, No. 12, 29-34, Oxford.

[4] García Cortí, J.L., Villagarcía, M.G., Pacheco, J.M. (1993) : Estudio de una ecuación de reacción-difusión con difusión no lineal y efecto Allée, *Actas XIII Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones*, (en prensa), Madrid.

[5] Turing, A.M. (1952) : The chemical basis of morphogenesis, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, B237, 37-72, Londres.