



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Matemática

Tesis de Licenciatura

Simulación de patrones de Turing por elementos finitos

Gisela Daniela Charó

Director: Gabriel Acosta Rodriguez

30 de Abril 2013

Índice general

Introducción	3
1. Patrones de Turing	5
1.1. Ecuación de Reacción-Difusión	5
1.2. Adimensionalización del sistema	6
1.3. La idea de Turing	7
1.3.1. Equilibrio homogéneo estable	7
1.3.2. Inestabilidad de Turing	8
1.3.3. Condiciones para la formación de patrones	10
1.3.4. Reacción de Schnackenberg	10
1.3.5. Requisitos para la formación de patrones	12
2. Aproximación de soluciones por el método de elementos finitos	13
2.1. Planteo general	13
2.2. Tratamiento numérico del problema	15
2.2.1. Matriz de masa	17
2.2.2. Matriz de rígidez	18
2.2.3. Términos de reacción	18
3. Patrones en dominios que evolucionan en el tiempo	21
3.1. Notación y lemas previos	21
3.2. La ecuación de reacción-difusión en dominios móviles	23
3.3. Formulación débil del problema	25
3.4. Desarrollo numérico del problema	26
3.4.1. La propiedad de transporte de las funciones nodales	27
3.5. Crecimiento del dominio en forma isotrópica	29
3.6. Tratamiento numérico del problema	29
3.7. Funciones nodales	30
3.8. Construcción de las matrices del problema	30
3.8.1. Términos de reacción	30
3.9. Comentarios finales	31
3.10. Crecimiento no isotrópico	31
3.10.1. Métodos de regularización de mallas. Spring Analogy	32
4. Simulaciones numéricas. Patrones de Turing	35
4.1. Sobre las condiciones iniciales y valores de los parámetros usados	35
4.2. Sobre el mallado del dominio	38
4.3. Simulaciones con la reacción de Schnackenberg	38

4.3.1. Más simulaciones con parámetros $a = 0,1; b = 0,9; \gamma = 230,82; d = 8,6676$. . .	38
4.3.2. Simulaciones con parámetros $a = 0,25; b = 0,8; \gamma = 60; d = 23$	41
4.3.3. Simulaciones con parámetros $a = 0,1; b = 0,9; \gamma = 30; d = 100$	42
4.4. Simulaciones para la reacción de Thomas	43
5. Simulaciones numéricas. Patrones en dominios móviles	45
5.1. Reacción de Schnackenberg	45
5.1.1. Simulaciones con parámetros $a = 0,1; b = 0,9; d = 100$	45
5.1.2. Simulaciones con parámetros $a = 0,1; b = 0,9, \gamma = 10; d = 10$	52
5.1.3. Simulaciones con parámetros $a = 0,25; b = 0,8; \gamma = 60; d = 23$	55
5.2. Comparación entre los experimentos con dominio móvil y fijo	57
5.3. Reacción de Thomas	58
6. Patrones en la naturaleza	61
Bibliografía	65

Introducción

La embriología es una rama de la biología que estudia la formación y desarrollo del embrión desde la fertilización hasta el nacimiento. Dentro de esta rama se encuentra la morfogénesis que se encarga del estudio del desarrollo del patrón y de las formas en un organismo. En el embrión en desarrollo, el problema principal que se manifiesta, es la organización espacial de la masa homogénea de células, ya que gracias a ello se produce el proceso de diferenciación celular que conduce a la formación de tejidos y estructuras espacialmente organizadas.

El primero en proponer un modelo para explicar la formación de patrones fue Alan Turing en 1952 en un célebre paper llamado “The Chemical Basis of Morphogenesis” [T], en el cual sugiere que un sistema de sustancias químicas , llamados morfógenos, que reaccionan químicamente entre sí y difunden a través de un tejido pueden ser la base del fenómeno de la morfogénesis. Es así como propuso usar sistemas de reacción-difusión para explicar el desarrollo de patrones. Fundamentalmente hizo la observación notable, que la inclusión de términos difusivos en sistemas de reacción podía desestabilizar los equilibrios originalmente estables generando nuevos equilibrios espacialmente heterogéneos. A esta inestabilidad se la llama *inestabilidad debida a la difusión (diffusion driven instability)*. Considerando que la difusión tiende a homogeneizar espacialmente, el trabajo de Turing causó un gran impacto y continúa teniendo relevancia en la actualidad. Por ejemplo un artículo reciente de la revista *Science* muestra que el patrón de formación de los dedos respondería a un modelo tipo Turing [SR].

Por lo demás, los patrones de Turing se pueden encontrar en las formas de los organismos, el diseño de las pieles en el reino animal, la organización de colonias de las amebas, en dinámica de poblaciones y sistemas ecológicos.

En este trabajo repasamos aspectos relativos a la formación de patrones con las ideas básicas de Turing, siendo el propósito la aproximación numérica de los mismos utilizando el método de elementos finitos tanto en dominios fijos como en dominios móviles. En este sentido no tratamos rigurosamente aspectos teóricos de existencia, regularidad y comportamiento asintótico de los sistemas de interés sino que nos enfocamos en las cuestiones numéricas de implementación sin abordar demostraciones de convergencia.

En el Capítulo 1 repasamos la teoría necesaria para poder abordar la formación de patrones en dominios fijos (Patrones de Turing) [MI] [MII]. En el Capítulo 2 aproximamos el sistema de reacción-difusión en dominios fijos por el método de elementos finitos [BR] y explicamos la implementación de éste [ACF]. En el Capítulo 3 abordamos el mismo problema pero en dominios que evolucionan en el tiempo. En el Capítulo 4 y 5 mostramos algunos resultados de los experimentos y finalmente en el Capítulo 6, a modo de anexo, mostramos imágenes de diferentes patrones encontrados en la naturaleza.

Capítulo 1

Patrones de Turing

En este capítulo explicaremos de donde provienen las ecuaciones de reacción-difusión en dominios fijos, así como también las condiciones que deben cumplir los parámetros de estas ecuaciones para la formación de patrones de Turing.

1.1. Ecuación de Reacción-Difusión

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto acotado y conexo, $\partial\Omega$ su borde, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ y $u_i(\mathbf{x}, t)$ las concentraciones de i sustancias químicas, $i = 1, \dots, N$, que en el contexto de los modelos que estudiaremos se denominan morfógenos. Es sabido que el movimiento natural de las sustancias es el de ir desde puntos donde hay mayor concentración hacia donde hay menor, esto significa que el flujo de la concentración u_i siempre apunta en la dirección en la que u_i decrece más rápido, o sea en la dirección opuesta al gradiente de u_i . Este hecho se lo conoce como la *Ley de Fick* que escribimos a continuación:

$$J(\mathbf{x}, t) = -D_i(\mathbf{x})\nabla_{\mathbf{x}}u_i(\mathbf{x}, t) \quad (1.1)$$

Donde $J(\mathbf{x}, t)$ es el vector de flujo de $u_i(\mathbf{x}, t)$ en \mathbf{x} , $D_i(\mathbf{x})$ es el coeficiente de difusión de la sustancia u_i en \mathbf{x} , que puede ser variable en general, aunque a lo largo de este trabajo asumiremos $D_i(\mathbf{x}) = D_i = \text{cte.}$

Por otro lado, la concentración de cada u_i puede variar por diferentes razones, tales como una reacción química con las otras sustancias, esto establece un término reactivo adicional al que llamaremos $f_i(u_1, \dots, u_N)$, con $i = 1, \dots, N$.

Más aún, de acuerdo al principio de conservación de la materia, la razón de cambio de la cantidad de materia contenida en un volumen $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ fijo es igual al flujo neto de materia a través de la superficie $\partial\tilde{\Omega}$ que delimita el volumen más la cantidad de materia transformada en el interior de $\tilde{\Omega}$ debido al término reactivo.

Esto se muestra en la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\tilde{\Omega}} u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega \right) = - \int_{\partial\tilde{\Omega}} J(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\nu} d\partial\Omega + \int_{\tilde{\Omega}} f_i(u_1, \dots, u_N) d\Omega \quad (1.2)$$

Donde $\boldsymbol{\nu}$ es el vector normal a la superficie $\partial\tilde{\Omega}$. Además, debido al teorema de la divergencia:

$$\int_{\partial\tilde{\Omega}} J(\mathbf{x}, t) \boldsymbol{\nu} d\partial\Omega = \int_{\tilde{\Omega}} \operatorname{div}(J(\mathbf{x}, t)) d\Omega \quad (1.3)$$

de (1.2) y (1.3) resulta

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\tilde{\Omega}} u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega \right) = - \int_{\tilde{\Omega}} \operatorname{div}(J(\mathbf{x}, t)) d\Omega + \int_{\tilde{\Omega}} f_i(u_1, \dots, u_N) d\Omega \quad (1.4)$$

Ahora combinando la ecuación (1.1) con (1.4), sabiendo que $\operatorname{div}(\nabla u) = \Delta u$ nos queda:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\tilde{\Omega}} u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega \right) = \int_{\tilde{\Omega}} D_i \Delta u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega + \int_{\tilde{\Omega}} f_i(u_1, \dots, u_N) d\Omega \quad (1.5)$$

y suponiendo suficiente regularidad como para que

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\tilde{\Omega}} u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega \right) = \int_{\tilde{\Omega}} \frac{d(u_i(\mathbf{x}, t))}{dt} d\Omega$$

Tenemos que:

$$\int_{\tilde{\Omega}} \frac{du_i}{dt}(\mathbf{x}, t) d\Omega = \int_{\tilde{\Omega}} D_i \Delta u_i(\mathbf{x}, t) d\Omega + \int_{\tilde{\Omega}} f_i(u_1, \dots, u_N) d\Omega \quad (1.6)$$

Dado que el argumento vale para una región arbitraria $\tilde{\Omega} \subset \Omega$ obtenemos la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{du_i}{dt}(\mathbf{x}, t) = D_i \Delta u_i(\mathbf{x}, t) + f_i(u_1, \dots, u_N) \quad (1.7)$$

La ecuación (1.7) es la ecuación de reacción-difusión, donde el término difusivo $D_i \Delta u_i(\mathbf{x}, t)$ es responsable del movimiento de las partículas y $f_i(u_1, \dots, u_N)$ es el término de reacción que describe el proceso de creación-desaparición de las partículas o la reacción química que ocurre entre ellas.

Esta ecuación junto con las condiciones de borde dadas, permite predecir la evolución de las concentraciones $u_i(x, t)$. El caso de nuestro interés involucra un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ y dos morfógenos, $u_1 = u$ y $u_2 = v$, con sus reacciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$, respectivamente.

El sistema de reacción-difusión que estudiaremos a lo largo de este trabajo será:

$$\begin{cases} u_t(x, y, t) &= D_1 \Delta u(x, y, t) + f(u, v) \\ v_t(x, y, t) &= D_2 \Delta v(x, y, t) + g(u, v) \end{cases} \quad (1.8)$$

1.2. Adimensionalización del sistema

Para la resolución numérica del sistema en estudio conviene adimensionalizar, esto se debe a dos razones:

- I Hacer al modelo independiente del sistema de unidades, pues a cada variable se la divide por su valor característico.
- II Al ser menor la cantidad de los parámetros del modelo adimensional se puede trabajar con un modelo más simple no sólo desde el punto de vista teórico sino también desde un punto de vista computacional.

Consideremos el cambio de variables

$$(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = \left(\frac{x}{L}, \frac{y}{L}, \frac{D_1}{L^2} t \right)$$

y las nuevas magnitudes asociadas al cambio de variables

$$u(x, y, t) = \hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) \quad v(x, y, t) = \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})$$

un cálculo elemental conduce a

$$\begin{cases} \hat{u}_t(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = \Delta \hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \frac{L^2}{D_1} f(\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}), \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})) \\ \hat{v}_t(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = \frac{D_2}{D_1} \Delta \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \frac{L^2}{D_1} g(\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}), \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})). \end{cases} \quad (1.9)$$

Renombrando las variables y llamando $d = \frac{D_2}{D_1}$ y $\gamma = \frac{L^2}{D_1}$, resulta:

$$u_t(x, y, t) = \Delta u(x, y, t) + \gamma f(u, v) \quad v_t(x, y, t) = d \Delta v(x, y, t) + \gamma g(u, v)$$

que es el sistema con el que trabajaremos, considerando condiciones homogéneas de tipo Neumann. El sistema definitivo ¹ adopta entonces la forma,

$$\begin{cases} u_t(x, y, t) = \Delta u(x, y, t) + \gamma f(u, v) & \text{en } \Omega \\ v_t(x, y, t) = d \Delta v(x, y, t) + \gamma g(u, v) & \text{en } \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\partial v}{\partial \eta} = 0 & \text{en } \partial \Omega \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y) \\ v(x, y, 0) = v_0(x, y). \end{cases} \quad (1.10)$$

1.3. La idea de Turing

En 1952 Turing [T] observa que los sistemas del tipo (1.10) admiten, bajo ciertas condiciones que describiremos luego, la siguiente característica: pueden poseer equilibrios espacialmente homogéneos (i.e. constantes) que son estables en ausencia de difusión, pero que devienen inestables al introducir perturbaciones difusivas, dando origen a la vez a nuevos equilibrios estables espacialmente heterogéneos. Para Turing, esto explicaría de manera sencilla el proceso de morfogénesis. Este mecanismo se denomina comúnmente inestabilidad gobernada por difusión (diffusion driven instability) o inestabilidad de Turing.

Siguiendo esta idea vamos a analizar como se comporta un equilibrio estable homogéneo, provisto solo por los términos de reacción, ante perturbaciones difusivas.

1.3.1. Equilibrio homogéneo estable

Si no hay variación espacial, o sea en ausencia de la difusión, u y v cumplen:

$$\begin{cases} u_t(x, y, t) = \gamma f(u, v) \\ v_t(x, y, t) = \gamma g(u, v) \end{cases} \quad (1.11)$$

Las condiciones que garantizan un punto de equilibrio estable (u_0, v_0) de

$$u_t = \gamma f(u, v) = 0 \quad v_t = \gamma g(u, v) = 0.$$

¹La teoría que brinda existencia local y regularidad de soluciones para la ecuación (1.10) puede verse en el Capítulo 8 de [PAO], pues no se abordará en este trabajo.

las estudiamos linealizando la ecuación (1.11) alrededor de $\mathbf{z}_0 = (u_0, v_0)$ y considerando la variable $\mathbf{z} = (u - u_0, v - v_0)$. En particular buscamos condiciones de equilibrio asintóticamente estable en el origen de

$$\mathbf{z}_t = \gamma A \mathbf{z} \quad (1.12)$$

con

$$A = \begin{bmatrix} f_u(u_0, v_0) & f_v(u_0, v_0) \\ g_u(u_0, v_0) & g_v(u_0, v_0) \end{bmatrix}$$

y eso ocurre, desde luego si $\operatorname{Re}\lambda < 0$, para todo λ autovalor de A (observemos que γ no es relevante en el signo de los autovalores por ser positivo).

Considerando el polinomio característico $P(\lambda) = \lambda^2 - \operatorname{tr}(A)\lambda + \det(A)$, tenemos que pidiendo:

- $\operatorname{tr}(A) = f_u + g_v < 0$
- $\det(A) = f_u g_v - f_v g_u > 0$

se garantiza $\operatorname{Re}\lambda < 0$.

1.3.2. Inestabilidad de Turing

Ahora teniendo en cuenta el sistema (1.10), buscaremos la inestabilidad debido a perturbaciones espaciales cuando la difusión está presente. Para ello haremos un análisis elemental basado en la linearización del sistema alrededor del equilibrio homogéneo.

Sea \mathbf{z} igual que antes, estudiamos

$$\mathbf{z}_t = \gamma A \mathbf{z} + D \Delta \mathbf{z} \quad (1.13)$$

donde D es la matriz de difusión $D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$.

En la resolución del sistema lineal, nos servirá recordar el problema de autovalores para el operador de Laplace con condiciones de Neumann homogéneas en $\Omega \subset \mathbb{R}^N$. Esto es, hallar λ y $w(x)$ tal que:

$$\begin{cases} -\Delta w(x) = \lambda w(x) \\ \frac{\partial w}{\partial \eta} = 0 \end{cases} \quad (1.14)$$

De la teoría espectral clásica asumimos que para este problema se tiene:

- Los autovalores forman una sucesión monótona estrictamente creciente, $0 = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_k \nearrow +\infty$
- Las autofunciones correspondientes a autovalores distintos son ortogonales.
- Sea w_k , la autofunción asociada a λ_k con $\|w_k\|_{L^2(\Omega)} = 1$. El conjunto $\{w_k\}_k$ es una base ortonormal de $L^2(\Omega)$.

La idea ahora es buscar condiciones para que pares de la forma

$$(c_k e^{\beta_k t} w_k(x), d_k e^{\beta_k t} w_k(x))$$

sean soluciones de (1.13). Si ello es posible, y alguno de los β_k resulta ser positivo, entonces habrá datos iniciales tan pequeños como se quiera (múltiplos de las respectivas autofunciones) cuyas trayectorias asociadas, al sistema linealizado, tenderán a crecer exponencialmente.

Por un lado

$$-\Delta w_k(x) = \lambda_k w_k(x)$$

luego

$$\begin{cases} \frac{\partial(c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y))}{\partial t} &= \Delta(c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) + \gamma(f_u c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) + f_v d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) \\ \frac{\partial(d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y))}{\partial t} &= d\Delta(d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) + \gamma(g_u c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) + g_v d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) \end{cases}$$

es decir

$$\begin{cases} \beta_k c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) &= -c_k e^{\beta_k t} \lambda_k w_k(x,y) + \gamma(f_u c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) + f_v d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) \\ \beta_k d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) &= -d d_k e^{\beta_k t} \lambda_k w_k(x,y) + \gamma(g_u c_k e^{\beta_k t} w_k(x,y) + g_v d_k e^{\beta_k t} w_k(x,y)) \end{cases}$$

de donde

$$\begin{cases} \beta_k c_k &= (\gamma f_u - \lambda_k) c_k + \gamma f_v d_k \\ \beta_k d_k &= \gamma g_u c_k + (\gamma g_v - d \lambda_k) d_k \end{cases}$$

lo que indica que debemos tomar $\mathbf{y} = (c_k, d_k)$ como autovector de $\tilde{A} = \begin{pmatrix} \gamma f_u - \lambda_k & \gamma f_v \\ \gamma g_u & \gamma g_v - d \lambda_k \end{pmatrix}$,

$$\beta_k \mathbf{y} = \tilde{A} \mathbf{y} \quad (1.15)$$

Notemos que el polinomio característico de (1.15) tiene la forma

$$F(\beta) = \beta^2 + [(\lambda_k(1+d) - \gamma(f_u+g_v))\beta + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) - \gamma \lambda_k(g_v + d f_u) + d \lambda_k^2],$$

y recordemos que en la sección 1.4.1, asumimos que $f_u + g_v = \text{tr}(A) < 0$ y $f_u g_v - f_v g_u = \det(A) > 0$. Con esa notación resulta

$$F(\beta) = \beta^2 + [(\lambda_k(1+d) - \gamma \text{tr}(A))\beta + \gamma^2 \det(A) - \gamma \lambda_k(g_v + d f_u) + d \lambda_k^2]. \quad (1.16)$$

La estabilidad del equilibrio homogéneo (u_0, v_0) en ausencia de difusión está garantizada con las condiciones de las Sección 1.3.1. Para lograr la inestabilidad de Turing debido a una perturbación espacial, buscamos condiciones para que exista un λ_k para el cual F tenga alguna raíz positiva. Notemos que eso queda garantizado si el término independiente es negativo, ya que tanto el coeficiente cuadrático como lineal son positivos. Buscamos entonces condiciones para que $p(\lambda_k) < 0$ siendo

$$p(z) = dz^2 - \gamma(g_v + d f_u)z + \gamma^2 \det(A) \quad (1.17)$$

y como los λ_k de interés son positivos y $d, \det A > 0$, es necesario que $g_v + d f_u > 0$, y dado que la $\text{tr}(A) < 0$, esto implica que f_u y g_v deben tener distinto signo y que $d \neq 1$.

Por otro lado, $p(z)$ tendrá dos raíces reales positivas

$$z_1, z_2 = \frac{\gamma}{2d} \left(d f_u + g_v \pm \sqrt{(d f_u + g_v)^2 - 4d \det(A)} \right) \quad (1.18)$$

si

$$(d f_u + g_v)^2 - 4d \det(A) > 0$$

o equivalentemente, si

$$c(d) = f_u^2 d^2 + 2(2f_v g_u - f_u g_v)d + g_v^2 > 0. \quad (1.19)$$

Como $c(d)$ es una expresión cuadrática en d con coeficiente principal positivo, la desigualdad (1.19) es verdadera a partir de cierto valor crítico d_c , esto es: $c(d) > 0$ si $d > d_c$.

En resumen tenemos: *Existe un d_c tal que $\forall d > d_c$ vale (1.19) y luego $p(z)$ tiene raíces, que efectivamente son positivas. Denotando al conjunto de negatividad de $p(z)$ como (z_1, z_2) , con $0 < z_1 < z_2$, para cada $z = \lambda_k \in (z_1, z_2)$ tendremos soluciones $\beta_k > 0$ de (1.15).*

1.3.3. Condiciones para la formación de patrones

Finalmente llegamos a ciertas condiciones necesarias para la formación de patrones:
Para asegurar la estabilidad del equilibrio homogéneo en ausencia de difusión necesitamos que en (u_0, v_0) :

- i) $\text{tr}(A) = f_u + g_v < 0$
- ii) $\det(A) = f_u g_v - f_v g_u > 0$

Para asegurar la inestabilidad del equilibrio homogéneo con difusión necesitamos que:

- iii) $d \neq 1$
- iv) f_u y g_v tengan distinto signo.
- v) $df_u + g_v > 0$
- vi) $d > d_c$

Con estas condiciones vemos que, gracias al análisis lineal, toda trayectoria del sistema no lineal con dato inicial en casi todo punto de un entorno reducido del equilibrio homogéneo va a alejarse de ese equilibrio. En efecto, recordemos que las w_k forman una base en $L^2(\Omega)$, en particular todo dato inicial que tenga proyección no nula sobre algún w_j con $\lambda_j > 0$, no va a converger al equilibrio homogéneo.

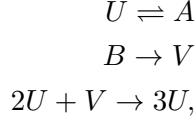
Una vez alejada la trayectoria del equilibrio la linealización ya no da información y el crecimiento de las soluciones será limitado eventualmente por los términos no lineales convergiendo en ocasiones a una solución de equilibrio no homogénea espacialmente que es la responsable, de acuerdo a Turing, de los patrones que ocurren en los procesos de morfogénesis.

Nota 1. *Reacciones del tipo activador-inhibidor* Las condiciones i) a vi) requeridas en los mecanismos de Turing pueden interpretarse para un amplio rango de modelos en términos sencillos [EG] de *activación local* e *inhibición de largo alcance*. El “activador” u es una sustancia tal que, si mantenemos al “inhibidor” v en los niveles de equilibrio del sistema, tenderá a alejarse del equilibrio. Este proceso denominado autocatálisis se describe analíticamente como $f_u > 0$. Vemos entonces que en este caso la condición i) no sólo implica $g_v < 0$, esto es, que el inhibidor tiende a retornar al equilibrio sino que lo hace a una tasa mayor de lo que se aleja u (pues $f_u + g_v < 0$). Por otro lado la condición v) $df_u + g_v > 0$, dado los signos de f_u y g_v , indica que $d > 1$, esto es $D_2 > D_1$, o sea que la tasa de difusión del inhibidor es mayor que la tasa de difusión del activador (de ahí el término inhibición de largo alcance). Vemos pues que como $f_u g_v < 0$, la condición ii) implica que $f_v g_u < 0$, lo cual es compatible con que el activador estimula la producción del inhibidor $g_u > 0$ y el inhibidor limita la producción del activador $f_v < 0$. En definitiva la aparición de una región de activador estimulará la producción del inhibidor, que al tener coeficiente de difusión mayor que el activador, se difundirá más rápido y limitará el crecimiento del activador. En circunstancias apropiadas esto conduce a una distribución *no uniforme* del activador con picos locales que son suficientemente pequeños como para estar en balance con el inhibidor.

1.3.4. Reacción de Schnackenberg

Como ejemplo de lo anterior presentamos un modelo muy sencillo de reacción, que más adelante tratamos en los ejemplos numéricos. El modelo de Schnackenberg [MI] involucra 4 sustancias, A , B , U y V , donde a la concentración de A la denotaremos $[A] = a$, y así también $[B] = b$, $[U] = u$ y

[V] = v. El modelo consiste en :



lo que conduce a:

$$\begin{cases} f(u, v) &= K_4a - K_1u + K_3u^2v \\ g(u, v) &= K_2b - K_3u^2v \end{cases}$$

donde K_1, K_2, K_3 y K_4 , son las velocidades de las reacciones. Las sustancias A y B , son de concentración constante. Por eso definiremos: $K_4a = k_1, K_1 = k_2, K_3 = k_3$ y $K_2b = k_4$, lo que nos queda:

$$\begin{cases} f(u, v) &= k_1 - k_2u + k_3u^2v \\ g(u, v) &= k_4 - k_3u^2v \end{cases} \quad (1.20)$$

Luego, tenemos el modelo de reacción-difusión (1.8) que queda,

$$\begin{cases} u_t(x, y, t) &= D_1\Delta u(x, y, t) + k_1 - k_2u + k_3u^2v \\ v_t(x, y, t) &= D_2\Delta v(x, y, t) + k_4 - k_3u^2v \end{cases} \quad (1.21)$$

Adimensionalizamos como en la Sección 1.2 :

$$\begin{cases} \hat{u}_t(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) &= \Delta \hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \frac{L^2}{D_1}(k_1 - k_2\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + k_3\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})^2\hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})) \\ \hat{v}_t(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) &= \frac{D_2}{D_1}\Delta \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) + \frac{L^2}{D_1}(k_4 - k_3\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})^2\hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t})) \end{cases} \quad (1.22)$$

y a través de la transformación:

$$\hat{u}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = \sqrt{\frac{k_2}{k_3}}u(x, y, t) \quad \hat{v}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = \sqrt{\frac{k_2}{k_3}}v(x, y, t) \quad (1.23)$$

nos queda:

$$\begin{cases} u_t(x, y, t) &= \Delta u(x, y, t) + \sqrt{\frac{k_3}{k_2}}k_1\frac{L^2}{D_1} - k_2\frac{L^2}{D_1}u(x, y, t) + k_2\frac{L^2}{D_1}u^2(x, y, t)v(x, y, t) \\ v_t(x, y, t) &= \frac{D_2}{D_1}\Delta v(x, y, t) + \sqrt{\frac{k_3}{k_2}}k_4\frac{L^2}{D_1} - k_2\frac{L^2}{D_1}u^2(x, y, t)v(x, y, t). \end{cases}$$

De ahora en más llamamos $\gamma = k_2\frac{L^2}{D_1}$ y $d = \frac{D_2}{D_1}$, y escribiendo $a = \sqrt{\frac{k_3}{k_2}}\frac{k_1}{k_2}$ y $b = \sqrt{\frac{k_3}{k_2}}\frac{k_4}{k_2}$, resulta

$$\begin{cases} u_t &= \Delta u + \gamma(a - u + u^2v) \\ v_t &= d\Delta v + \gamma(b - u^2v). \end{cases} \quad (1.24)$$

1.3.5. Requisitos para la formación de patrones

Puntos de equilibrio de la reacción

Las soluciones de

$$\begin{cases} f(u, v) = a - u + u^2v = 0 \\ g(u, v) = b - u^2v = 0 \end{cases}$$

nos permiten encontrar el punto de equilibrio, el cual es $(u_0, v_0) = (a+b, \frac{b}{(a+b)^2})$. Dado que estamos en el caso de concentraciones de sustancias, los puntos de equilibrio que vamos a considerar son aquellos que son positivos, es decir:

- $a + b > 0$
- $b > 0$

En el caso de esta reacción la matriz jacobiana A resulta:

$$\begin{bmatrix} f_u(u_0, v_0) & f_v(u_0, v_0) \\ g_u(u_0, v_0) & g_v(u_0, v_0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{b-a}{a+b} & (a+b)^2 \\ \frac{-2b}{a+b} & -(a+b)^2 \end{bmatrix}$$

Luego, las condiciones que tiene que cumplir los parámetros para que se dé el mecanismo de Turing son:

Para asegurar la estabilidad del equilibrio homogéneo se necesita que:

- $\text{tr}(A) < 0 \iff b - a < (a+b)^3$
- $\det(A) > 0 \iff (a+b)^2 > 0$

Para asegurar la inestabilidad del equilibrio homogéneo se necesita que:

- $d \neq 1$
- f_u y g_v tengan distinto signo. Dado que $g_v < 0 \implies f_u > 0 \iff b > a$
- $df_u + g_v > 0 \iff d(b-a) > (a+b)^3$
- $d > d_c$, donde d_c es el valor que hace que $\forall d > d_c, c(d) > 0$, donde

$$\left(\frac{b-a}{a+b}\right)^2 d^2 + 2[-4b(a+b) + (b-a)(a+b)]d + (a+b)^4 > 0.$$

Capítulo 2

Aproximación de soluciones por el método de elementos finitos

El método de elementos finitos provee un modo sistemático de producir aproximantes para soluciones de ecuaciones en derivadas parciales. Su teoría es particularmente directa en ecuaciones elípticas lineales, en donde la convergencia del método se desprende de propiedades de proyección de la solución discreta y de propiedades de aproximación de los espacios subyacentes [BR].

2.1. Planteo general

Vamos a construir un espacio de dimensión finita donde hallar buenos aproximantes. Para ello, siguiendo el procedimiento estándar [BR] primero dividiremos el dominio $\Omega \subset R^2$ en triángulos, necesitando así definir una *triangulación admisible* \mathcal{T} :

Definición 2.1.1. Una familia de elementos \mathcal{T} se llama una *triangulación admisible* de Ω si:

- $\bar{\Omega} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}} T$, donde los T son triángulos.
- $int(T) \cap int(\tilde{T}) = \emptyset \quad \forall T, \tilde{T} \text{ con } T \neq \tilde{T}$
- $T \cap \tilde{T}$ es o bien \emptyset , o un lado ó un vértice de ambos triángulos.

La definición formal de elemento finito sobre un conjunto T es la siguiente:

Definición 2.1.2. Dado T , un triple de la forma $(T, \mathcal{P}, \mathcal{N})$ se llama *elemento finito* si:

- \mathcal{P} : es un espacio de dimensión finita, compuesto por funciones definidas sobre T .
- T : es un conjunto compacto con borde C^1 a trozos.
- $\mathcal{N} = \{\mathcal{N}_1, \dots, \mathcal{N}_n\}$ es una base del dual de \mathcal{P} . Los elementos de \mathcal{N} se llaman variables nodales, y su base dual $\tilde{\mathcal{N}} = \{\tilde{\mathcal{N}}_1, \dots, \tilde{\mathcal{N}}_n\}$ naturalmente es una base de \mathcal{P} , cuyos elementos se llaman funciones nodales.

Observación 2.1.3. Por abuso de notación suele llamarse elemento finito al conjunto T si está claro el contexto.

En nuestro caso vamos a considerar elementos finitos de Lagrange de grado 1. Esto significa que tomamos el triple formado por $(T, \mathcal{P}_1, \mathcal{N})$. Donde:

- T : es un triángulo en el plano.
- \mathcal{P}_1 : son los polinomios de grado 1.
- $\mathcal{N} = \{\mathcal{N}_i^T\}_{1 \leq i \leq 3}$ son evaluaciones en los vértices $\{p_i^T\}_{1 \leq i \leq 3}$ de T . Su base dual $\{\phi_j^T\}_{1 \leq j \leq 3}$ verifica que $\mathcal{N}_i^T(\phi_j^T) = \phi_j^T(p_i) = \delta_{ij}$.

Los elementos finitos individuales permiten construir los espacios de elementos finitos utilizando triangulaciones admisibles. En nuestro caso definimos:

$$H_h = \{\phi_j, 1 \leq j \leq N, \text{ continuas en } \Omega \text{ tales que } \phi_j \text{ es lineal en cada } T\}.$$

Es fácil ver que $H_h \subset H^1(\Omega)$.

Sea $V = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ el conjunto de vértices dados por una triangulación admisible de Ω . Por abuso de notación llamamos también ϕ_i a las funciones $\phi_j \in H_h$, que verifican $\phi_j(v_i) = \delta_{ij} \forall i, i = 1, \dots, N^1$. En realidad sobre cada T la ϕ_j es o bien nula, o bien coincide con alguna de las ϕ_j^T definidas antes. Por construcción es fácil ver que las ϕ_j son una base de H_h y en particular resultará que si

$$w_h = \sum_{j=1}^N a_j \phi_j,$$

entonces $w_h(v_i) = a_i$.

Los índices $1 \leq i \leq N$ en ϕ_i , suelen denominarse índices globales, mientras que los índices $1 \leq j \leq 3$ de cada ϕ_j^T se conocen con índices locales.

Con la intención de introducir el método numérico procederemos de modo estándar:

Sea $\varphi \in H^1(\Omega)$, una función test, multiplicando miembro a miembro en (1.10) por φ e integrando en Ω , obtenemos:

$$\begin{cases} \int_{\Omega} u_t \varphi \, d\Omega &= \int_{\Omega} \Delta u \varphi \, d\Omega + \gamma \int_{\Omega} f \varphi \, d\Omega \\ \int_{\Omega} v_t \varphi \, d\Omega &= d \int_{\Omega} \Delta v \varphi \, d\Omega + \gamma \int_{\Omega} g \varphi \, d\Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

Integrando por partes y usando las condiciones de borde homogéneas:

$$\int_{\Omega} \Delta u \varphi \, d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla u \nabla \varphi \, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \underbrace{\nabla u \cdot \vec{\eta}}_{\frac{\partial u}{\partial \eta} = 0} \varphi \, d\partial\Omega$$

Entonces tenemos que, en caso de existir solución, suficientemente regular, del problema (1.10), entonces debe valer que

$$\begin{cases} \int_{\Omega} u_t \varphi \, d\Omega + \int_{\Omega} \nabla u \nabla \varphi \, d\Omega &= \gamma \int_{\Omega} f \varphi \, d\Omega \\ \int_{\Omega} v_t \varphi \, d\Omega + d \int_{\Omega} \nabla v \nabla \varphi \, d\Omega &= \gamma \int_{\Omega} g \varphi \, d\Omega. \end{cases} \quad (2.2)$$

para cualquier $\varphi \in C^\infty(\bar{\Omega})$. Para simplificar la notación recordemos el producto interno en $L^2(\Omega)$:

$$(f, g) = \int_{\Omega} f g \, d\Omega$$

¹Las ϕ_i suelen llamarse funciones de forma

El método que usaremos propone resolver el problema (2.2) de forma aproximada: para ello suponemos que existen soluciones ² de la forma:

$$u_h(x, y, t) = \sum_{i=1}^N U_i(t) \phi_i(x, y) \quad v_h(x, y, t) = \sum_{i=1}^N V_i(t) \phi_i(x, y), \quad (2.3)$$

con U_k y V_k de clase $C^1(0, T) \cap C^0([0, T])$, para el siguiente problema:

Hallar u_h y v_h de la forma dada en (2.3) tal que $\forall w_h \in H_h^1(\Omega)$ cumpla:

$$\begin{cases} ((u_h)_t, w_h) + (\nabla u_h, \nabla w_h) = \gamma(f, w_h) \\ ((v_h)_t, w_h) + d(\nabla v_h, \nabla w_h) = \gamma(g, w_h) \end{cases} \quad (2.4)$$

procedimiento que es en esencia el llamado método de líneas y que conduce, en primera instancia, a un problema semidiscreto (pues sólo se ha discretizado en el espacio).

Utilizando ahora las expresiones para u_h y v_h , vemos que esto equivale a resolver:

Hallar $U_k, V_k \in C^1(0, T) \cap C^0([0, T])$ tal que $\forall w_h \in H_h^1(\Omega)$ y $\forall t \in (0, T)$ se cumpla:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N U'_i(\phi_i, w_h) + \sum_{i=1}^N U_i(\nabla \phi_i, \nabla w_h) = \gamma(f, w_h) \\ \sum_{i=1}^N V'_i(\phi_i, w_h) + d \sum_{i=1}^N V_i(\nabla \phi_i, \nabla w_h) = \gamma(g, w_h) \end{cases} \quad (2.5)$$

lo que equivale a pedir:

Hallar $U_k, V_k \in C^1(0, T) \cap C^0([0, T])$ tal que $\forall \phi_j \ 1 \leq j \leq N$ y para todo $t \in (0, T)$ se cumpla:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N U'_i(\phi_i, \phi_j) + \sum_{i=1}^N U_i(t)(\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) = \gamma(f, \phi_j) \\ \sum_{i=1}^N V'_i(\phi_i, \phi_j) + d \sum_{i=1}^N V_i(t)(\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) = \gamma(g, \phi_j) \end{cases} \quad (2.6)$$

Donde para no recargar la escritura no hemos escrito la dependencia de f y g en términos de u_h y v_h .

2.2. Tratamiento numérico del problema

Antes de avanzar aclaramos el siguiente aspecto referido a la notación:

- En lo que sigue utilizaremos ocasionalmente la notación de Matlab dada por el operador “:”. Así, dado un arreglo $A \in R^{N \times M}$, escribimos $A(:, k)$ para hacer referencia a la columna k y análogamente con las filas.
- Dados dos arreglos A y B de idénticas dimensiones, usaremos la notación estándar $A.*B$ para denotar producto elemento a elemento, y en general el símbolo “.” seguido de una operación denotará esa operación elemento a elemento.
- También usaremos $ones(n, m)$ para referirnos a un arreglo de unos de tamaño $n \times m$.

En esta parte seguimos el enfoque general dado en [ACF]. Notemos ante todo que (2.6) puede escribirse matricialmente como un sistema de ecuaciones ordinarias de primer orden

$$\begin{cases} BU' + AU = \gamma F \\ BV' + dAV = \gamma G \end{cases} \quad (2.7)$$

²Como se verá en breve, este problema conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con parámetros de discretización fijo. La existencia local de soluciones para el mismo se sigue de la teoría clásica de ecuaciones ordinarias. En este trabajo no se desarrollarán estos aspectos.

Las matrices simétricas $B, A \in \mathbb{R}^{N \times N}$, con

$$B_{i,j} = (\phi_i, \phi_j) = \int_{\Omega} \phi_i \phi_j d\Omega \quad A_{i,j} = (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j) = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \nabla \phi_j,$$

son las denominadas matrices de masa y de rigidez respectivamente las cuales calcularemos en breve. Por lo pronto notemos que si discretizaremos el tiempo $[0, T_f]$ en M intervalos de tamaño Δt , llamando $t_n = (n - 1)\Delta t$ con $n = \{1, \dots, M\}$, podemos proponer un esquema de la forma

$$\begin{cases} BU(:, n+1) - BU(:, n) + \Delta t AU(:, n+1) = \gamma \Delta t F(:, n) \\ BV(:, n+1) - BV(:, n) + d \Delta t AV(:, n+1) = \gamma \Delta t G(:, n) \end{cases} \quad (2.8)$$

donde $U(:, n), V(:, n), F(:, n), G(:, n) \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ son aproximaciones para las variables $U, V, (f, \phi_j)$ y (g, ϕ_j) respectivamente, en tiempo t_n . Los términos en los que aparece la matriz de rigidez se evaluaron en tiempo t_{n+1} explotando así la estabilidad de los métodos implícitos. Los términos no lineales que estén involucrados en F y G se los escribió en tiempo t_n , para facilitar la implementación. De todos modos, en ocasiones, es viable la alternativa completamente implícita o semi implícita usando algunas iteraciones de Picard.

Reescribiendo (2.8), podemos tomar

$$\begin{cases} (B + \Delta t A) U(:, n+1) = \gamma \Delta t F(:, n) + BU(:, n) \\ (B + d \Delta t A) V(:, n+1) = \gamma \Delta t G(:, n) + BV(:, n) \end{cases}$$

sistema que debe resolverse para cada n y que es la base de método numérico que hemos utilizado.

Nota 2 (Almacenamiento de datos de la malla). De aquí en más suponemos que los elementos de la malla se han almacenado en un arreglo $E \in \mathbb{R}^{L \times 3}$. En este contexto $E(k, :) = [i_1, i_2, i_3]$ representará los índices globales de los vértices (y por ende de las funciones de forma) de T , es decir que T posee vértices $v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3}$. Más aún, suponemos que $v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3}$ se guardan respetando una orientación positiva.

Observemos entonces que si T es un elemento finito triangular con vértices locales $p_1 = (x_1, y_1)$, $p_2 = (x_2, y_2)$ y $p_3 = (x_3, y_3)$, el área de éste, la obtenemos calculando un determinante. En efecto, es fácil ver³ que

$$\text{area}(T) = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} x_j & x_{j+1} & x_{j+2} \\ y_j & y_{j+1} & y_{j+2} \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

donde los índices deben entenderse módulo 3.

Entonces las funciones nodales pueden escribirse como:

$$\phi_j^T(x, y) = \begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_{j+1} & y_{j+1} \\ 1 & x_{j+2} & y_{j+2} \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_{j+1} & y_{j+1} \\ 1 & x_{j+2} & y_{j+2} \end{vmatrix} \quad (2.9)$$

³En efecto, por propiedades del determinante

$$\begin{vmatrix} x_j & x_{j+1} & x_{j+2} \\ y_j & y_{j+1} & y_{j+2} \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_j & x_{j+1} - x_j & x_{j+2} - x_j \\ y_j & y_{j+1} - y_j & y_{j+2} - y_j \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_{j+1} - x_j & x_{j+2} - x_j \\ y_{j+1} - y_j & y_{j+2} - y_j \end{vmatrix}$$

que es el área del paralelogramo de lados $p_{j+1} - p_j, p_{j+2} - p_j$. Es importante destacar que la orientación positiva de los vértices garantiza signo positivo al determinante.

entendiendo nuevamente los índices locales en módulo 3. Efectivamente es trivial verificar que $\phi_j^T(p_i) = \delta_{ij} \forall i, j = 1, 2, 3$.

2.2.1. Matriz de masa

Dado que $B_{i,j} = (\phi_i, \phi_j) = \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \phi_i \phi_j \, dx dy$, precisamos integrar: $\int_T \phi_i \phi_j \, dx dy$. Sean p_1, p_2 y p_3 los vértices de T y $m_{12} = \frac{p_1 + p_2}{2}$, $m_{23} = \frac{p_2 + p_3}{2}$ y $m_{13} = \frac{p_1 + p_3}{2}$ los puntos medios de los lados de T . Se tiene que

$$\int_T \phi_i \phi_j \, dx dy = \frac{\text{area}(T)}{3} \left(\phi_i(m_{12}) \phi_j(m_{12}) + \phi_i(m_{23}) \phi_j(m_{23}) + \phi_i(m_{13}) \phi_j(m_{13}) \right), \quad (2.10)$$

gracias a la regla de integración generada por evaluaciones en los puntos medios de los lados de T que es exacta para polinomios cuadráticos y en particular para $\phi_i \phi_j$.

En lo que al algoritmo respecta conviene hacer un ciclo sobre los triángulos y explotar el uso de los índices locales. En particular en la contribución a B por parte de cada T sólo influye en los índices globales $[i_1, i_2, i_3]$ si T posee vértices $v_{i_1}, v_{i_2}, v_{i_3}$. Esta contribución puede escribirse, en índices locales⁴

$$\begin{pmatrix} \int_T \phi_1^T \phi_1^T & \int_T \phi_2^T \phi_1^T & \int_T \phi_3^T \phi_1^T \\ \int_T \phi_1^T \phi_2^T & \int_T \phi_2^T \phi_2^T & \int_T \phi_3^T \phi_2^T \\ \int_T \phi_1^T \phi_3^T & \int_T \phi_2^T \phi_3^T & \int_T \phi_3^T \phi_3^T \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Ahora bien, como cada ϕ_j^T es lineal y verifica $\phi_j^T(p_i) = \delta_{ij}$, podemos concluir que $\phi_j(m_{ij}) = \frac{1}{2}$ y $\phi_j(m_{il}) = 0$ con $i \neq j \neq l$.

Luego tenemos de (2.10), por ejemplo, que

$$\begin{aligned} \int_T \phi_1^T \phi_1^T \, dx dy &= \frac{\text{area}(T)}{3} \left(\frac{1}{4} + 0 + \frac{1}{4} \right) = \frac{|T|}{6} \\ \int_T \phi_2^T \phi_1^T \, dx dy &= \frac{\text{area}(T)}{3} \left(\frac{1}{4} + 0 + 0 \right) = \frac{|T|}{12} \\ \int_T \phi_3^T \phi_1^T \, dx dy &= \frac{\text{area}(T)}{3} \left(0 + 0 + \frac{1}{4} \right) = \frac{|T|}{12} \end{aligned}$$

siendo análogo el cálculo para los índices restantes. Finalmente, la matriz (2.11) resulta:

$$\begin{pmatrix} \frac{\text{area}(T)}{6} & \frac{\text{area}(T)}{12} & \frac{\text{area}(T)}{12} \\ \frac{\text{area}(T)}{12} & \frac{\text{area}(T)}{6} & \frac{\text{area}(T)}{12} \\ \frac{\text{area}(T)}{12} & \frac{\text{area}(T)}{12} & \frac{\text{area}(T)}{6} \end{pmatrix} = \frac{\text{area}(T)}{12} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

⁴Con esto queremos decir que el ensamblado de la matriz B debería ser:

- Inicializar B esparsa $B = 0$.
- for $k=1:L$
 $B(E(k,:), E(k,:)) = B(E(k,:), E(k,:)) + M;$
end
donde M es la matriz (2.11), asociada al T de vértices $[v_{E(k,1)}, v_{E(k,2)}, v_{E(k,3)}]$.

2.2.2. Matriz de rígidez

Veamos como se construye $A_{ij} = (\nabla\phi_i, \nabla\phi_j) = \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \nabla\phi_i \nabla\phi_j dx dy$. Derivando (2.9), se obtiene

$$\nabla\phi_j^T(x, y) = \frac{1}{2\text{area}(T)}(y_{j+1} - y_{j+2}, x_{j+2} - x_{j+1}) \quad (2.13)$$

Como sucedía con la matriz de masa, teniendo en cuenta la numeración local de los vértices de T , tenemos que para las contribuciones a A la matriz correspondiente al elemento T es:

$$\begin{pmatrix} \int_T \nabla\phi_1^T \nabla\phi_1^T & \int_T \nabla\phi_2^T \nabla\phi_1^T & \int_T \nabla\phi_3^T \nabla\phi_1^T \\ \int_T \nabla\phi_1^T \nabla\phi_2^T & \int_T \nabla\phi_2^T \nabla\phi_2^T & \int_T \nabla\phi_3^T \nabla\phi_2^T \\ \int_T \nabla\phi_1^T \nabla\phi_3^T & \int_T \nabla\phi_2^T \nabla\phi_3^T & \int_T \nabla\phi_3^T \nabla\phi_3^T \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Desde la expresión (2.13):

$$\begin{aligned} \nabla\phi_1 \nabla\phi_1 &= (y_2 - y_3)^2 + (x_3 - x_2)^2 \\ \nabla\phi_2 \nabla\phi_1 &= (y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) \\ \nabla\phi_3 \nabla\phi_1 &= (y_2 - y_3)(y_1 - y_2) + (x_3 - x_2)(x_2 - x_1) \\ \nabla\phi_2 \nabla\phi_2 &= (y_3 - y_1)^2 + (x_1 - x_3)^2 \\ \nabla\phi_2 \nabla\phi_3 &= (y_3 - y_1)(y_1 - y_2) + (x_1 - x_3)(x_2 - x_1) \\ \nabla\phi_3 \nabla\phi_3 &= (y_1 - y_2)^2 + (x_2 - x_1)^2 \end{aligned}$$

Y entonces la matriz (2.14) queda

$$\frac{1}{4\text{area}(T)} \begin{pmatrix} (y_2 - y_3)^2 + (x_3 - x_2)^2 & (y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) & (y_2 - y_3)(y_1 - y_2) + (x_3 - x_2)(x_2 - x_1) \\ (y_2 - y_3)(y_3 - y_1) + (x_3 - x_2)(x_1 - x_3) & (y_3 - y_1)^2 + (x_1 - x_3)^2 & (y_3 - y_1)(y_1 - y_2) + (x_1 - x_3)(x_2 - x_1) \\ (y_2 - y_3)(y_1 - y_2) + (x_3 - x_2)(x_2 - x_1) & (y_3 - y_1)(y_1 - y_2) + (x_1 - x_3)(x_2 - x_1) & (y_1 - y_2)^2 + (x_2 - x_1)^2 \end{pmatrix}$$

2.2.3. Términos de reacción

Necesitamos calcular los vectores F y G de (2.7), es decir

$$F(j, n) = (f(u_h, v_h), \phi_j) = \int_{\Omega} f \phi_j d\Omega \quad G(j, n) = (g(u_h, v_h), \phi_j) = \int_{\Omega} g \phi_j d\Omega$$

Para escribir el formato final, y como ejemplo, nos concentraremos en el caso particular de las ecuaciones de Schnackenberg (1.24) descriptas en la Subsección 1.3.4. Teniendo en cuenta que en ese caso $f(u, v) = a - u + u^2v$ y $g(u, v) = b - u^2v$ podemos escribir

$$(f, \phi_j) = \int_{\Omega} a \phi_j d\Omega - \int_{\Omega} u_h \phi_j d\Omega + \int_{\Omega} u_h^2 v_h \phi_j d\Omega$$

Los dos primeros términos se aproximan de modo directo. El primero se integra exactamente por ser a constante, en efecto

$$\int_{\Omega} a \phi_j d\Omega = \sum_{T \in \mathcal{T}} a \int_T \phi_j dx dy,$$

y basta notar que usando la regla de los puntos medios $\int_T \phi_k^T = 1/6|T|$. También puede calcularse utilizando la matriz de masa, puesto que $a = (\sum_{i=1}^N \phi_i)a$, por ser uno la sumatoria. Luego

$$\int_{\Omega} a \phi_j d\Omega = a \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} \phi_j \phi_j dx dy,$$

Por ende la contribución a $F(:, n)$ dada por ese término puede escribirse

$$a * B * \text{ones}(N, 1).$$

Para el segundo basta notar que

$$\int_{\Omega} u_h \phi_j \, d\Omega = \sum_{i=1}^N U(i, n) \sum_{T \in \mathcal{T}} \int_T \phi_i \phi_j \, dx dy,$$

que se escribe una vez mas usando la matriz B , siendo la contribucion total a F el producto $BU(:, n)$. Con respecto al término $\int_{\Omega} u_h^2 v_h \phi_j \, d\Omega$, hay varias posibilidades de aproximación. Una forma, que es la que se usará con el objetivo de incrementar la velocidad de cálculo, usa sólo evaluaciones de $u^2 v$ en los nodos.⁵ Así tenemos algunas opciones. Por ejemplo reemplazar $u_h^2 v_h$ por su interpolada en los nodos, lo que conduce a

$$\int_{\Omega} u_h^2 v_h \phi_j \, d\Omega \sim \sum_{i=1}^N U(i, n)^2 V(i, n) \int_{\Omega} \phi_i \phi_j,$$

que es una variante que puede escribirse en términos de la matriz B de masa. En efecto la contribucion a F debida a este término sería en este caso

$$B(U^2(:, n) .* V(:, n)). \quad (2.15)$$

También se puede aproximar $\int_{\Omega} u_h^2 v_h \phi_j$ aprovechando el ciclo del programa sobre los elementos. En ese caso sobre el elemento $T = E(k, :) = [i_1, i_2, i_3]$, la contribución a $F(E(k, :))$ se puede calcular como

$$\frac{\text{area}(T)}{3} [U^2(i_1, n)V(i_1, n), U^2(i_2, n)V(i_2, n), U^2(i_3, n)V(i_3, n)], \quad (2.16)$$

que es como haber hecho mass-lumping en (2.15). Con estas mismas ideas se implementa el cálculo de G .

⁵Notar que, por ejemplo, para evaluaciones de la función $u^2 v$, se puede usar la forma vectorizada $U(:, n) .^{\wedge} 2 .* V(:, n)$, que es mucho más veloz que ciclar sobre los índices

Capítulo 3

Patrones en dominios que evolucionan en el tiempo

En este capítulo estudiaremos la formación de patrones en dominios que crecen en el tiempo. Repasaremos algunos aspectos necesarios para trabajar con dominios móviles y luego aplicaremos el método de elementos finitos para resolver el sistema describiendo como se hizo la implementación de esta resolución.

3.1. Notación y lemas previos

Para cada $t \in [0, T_f]$ con $T_f > 0$, sea $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^2$ conexo y acotado $\forall t$ y $\partial\Omega(t)$ su borde. Sea $\Omega_0 = \Omega(0)$, consideraremos dominios $\Omega(t)$ en los cuales cualquier punto material P localizado en $\mathbf{x}_P(t) \in \Omega(t)$ evoluciona con un campo de velocidades \mathbf{w} . Con esto queremos decir que existe un mapa

$$\Phi(\cdot, t) : \Omega_0 \longrightarrow \Omega(t), \quad (3.1)$$

de modo tal que $\Phi(\cdot, t)$ es un difeomorfismo de Ω_0 en $\Omega(t)$ para cada $t \in [0, T_f]$ que resuelve la ecuación:

$$\begin{cases} \Phi(\cdot, t)_t = \mathbf{w}(\Phi(\cdot, t), t) \\ \Phi(x, 0) = x \end{cases} \quad (3.2)$$

En particular si $\mathbf{x}_P(0) = P \in \Omega_0$ tenemos que $\mathbf{x}_P(t) = \Phi(P, t) \in \Omega(t)$, donde Φ es el flujo.

Observemos algunos hechos elementales asociados al flujo Φ : de (3.2) se obtiene de manera estándar que:

$$\begin{cases} (D_x \Phi(x, t))_t = D\mathbf{w} D_x \Phi(x, t) \\ D_x \Phi(x, 0) = Id \in \mathbb{R}^{2 \times 2}. \end{cases} \quad (3.3)$$

Dado que $\det D_x \Phi(x, 0) = 1$ se obtiene (por teoría clásica de ecuaciones ordinarias) que

$$J(t) = \det D_x \Phi(x, t) > 0$$

Por otro lado, notemos que este es precisamente el jacobiano de la transformación (3.1). En particular, se tiene para funciones definidas en $\mathcal{D}_{Tf} = \cup_{t \in [0, Tf]} \Omega(t) \times \{t\}$ si $\tilde{x} \in \Omega_0$ es tal que $\Phi(\tilde{x}, t) = x$,

$$\int_{\Omega(t)} f(x, t) d\Omega(t) = \int_{\Omega_0} f(\Phi(\tilde{x}, t)) J(t) d\Omega_0 \quad (3.4)$$

La cual será una fórmula útil a la hora de derivar expresiones del tipo $\int_{\Omega(t)} f d\Omega(t)$. Supondremos de aquí en más que f es suficientemente regular, entonces tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega(t)} f(x, t) d\Omega(t) \right) &= \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega_0} f(\Phi(\tilde{x}, t) J(t) d\Omega_0 \right) \\ &= \int_{\Omega_0} \left(\frac{d(f(\Phi(\tilde{x}, t)))}{dt} J(t) + f(\Phi(\tilde{x}, t), t) \frac{dJ(t)}{dt} \right) d\Omega_0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

Introduciremos la definición de *Derivada Material*,

Definición 3.1.1. *Derivada Material:* Sea $f(\mathbf{x}, t)$ una función con valores reales de \mathbf{x} y t , definamos *derivada material* de f respecto al campo de velocidades \mathbf{w} como

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w}.$$

En particular, observemos que $\frac{Df}{Dt} = \frac{d(f(\Phi(\cdot, t), t))}{dt}$.

De la expresión (3.5) se tiene que para calcular $\frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega(t)} f d\Omega(t) \right)$ será necesario obtener una expresión para $\frac{dJ(t)}{dt}$.

El siguiente lema, de demostración elemental, nos proporcionará la manera de derivar un determinante.

Lema 3.1.2. *Sea $X, Y : [0, T_f] \rightarrow \mathbb{R}^2$ de clase C^1 y $A(t) = \det(M(t))$ donde $M(t) = [X(t)|Y(t)]$ es una matriz cuya primera y segunda columna coinciden con $X(t)$ e $Y(t)$ respectivamente, entonces:*

$$\frac{d(A(t))}{dt} = \det \left[\frac{dX}{dt} | Y \right] + \det \left[X | \frac{dY}{dt} \right]$$

Demostración. Escribimos

$$\det M(t+h) - \det M(t) = \det[X(t+h)|Y(t+h)] - \det[X(t)|Y(t)]$$

usando propiedades del determinante tenemos que:

$$\det M(t+h) - \det M(t) = \det[X(t+h) - X(t)|Y(t+h)] + \det[X(t)|Y(t+h) - Y(t)]$$

Luego, diviendo por h , usando las propiedades y la continuidad del determinante y tomando límite $h \rightarrow 0$ se sigue el lema. \square

Aplicando el lema previo a $J(t)$ y sea $\mathbf{x} = (x, y)$

$$\frac{dJ(t)}{dt} = \det[(\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_1)_t, \nabla_{\mathbf{x}}\Phi_2] + \det[\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_1, (\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_2)_t]$$

y gracias a (3.3)

$$\frac{dJ(t)}{dt} = \det[\mathbf{w}_{1x}\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_1 + \mathbf{w}_{1y}\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_2, \nabla_{\mathbf{x}}\Phi_2] + \det[\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_1, \mathbf{w}_{2x}\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_1 + \mathbf{w}_{2y}\nabla_{\mathbf{x}}\Phi_2],$$

Luego, usando propiedades del determinante se tiene que:

$$\frac{dJ(t)}{dt} = \operatorname{div}(\mathbf{w})J(t)$$

Con esta identidad y (3.4) resulta inmediato el siguiente Lema,

Lema 3.1.3. (Fórmula de Leibnitz) *Consideremos $\Omega(t)$ y f una función definida en \mathcal{D}_{Tf} . Supongamos que f , \mathbf{w} y el flujo Φ son suficientemente regulares. Entonces valen las expresiones:*

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{\Omega(t)} f d\Omega(t) \right) &= \int_{\Omega(t)} \left(\frac{Df}{Dt} + f \operatorname{div}(\mathbf{w}) \right) d\Omega(t) \\ &= \int_{\Omega(t)} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{w} + f \operatorname{div}(\mathbf{w}) \right) d\Omega(t) \\ &= \int_{\Omega(t)} \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \operatorname{div}(f \cdot \mathbf{w}) \right) d\Omega(t) \end{aligned}$$

3.2. La ecuación de reacción-difusión en dominios móviles

Sea $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^2$ conexo y acotado $\forall t \geq 0$ y $\partial\Omega$ su borde y sean $u(x, y, t)$ y $v(x, y, t)$ las concentraciones de dos sustancias en la posición $(x, y) \in \Omega(t)$.

Siguiendo la misma idea que desarrollamos en el Capítulo 1, consideremos la tasa de cambio de la concentración u en un abierto arbitrario $\tilde{\Omega}(t) \subset \Omega(t)$. Suponiendo que el coeficiente de difusión es constante en todo $\Omega(t) \forall t \geq 0$. Entonces tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{\tilde{\Omega}(t)} u(x, y, t) d\Omega(t) \right) &= D_1 \int_{\tilde{\Omega}(t)} \Delta u(x, y, t) d\Omega(t) \\ &\quad + \int_{\tilde{\Omega}(t)} f(u, v) d\Omega(t) \end{aligned} \tag{3.6}$$

Notar que la diferencia con la ecuación (1.5) es que la integración se realiza en dominios que dependen del tiempo. En consecuencia al derivar el lado izquierdo recurrimos al Lema 3.1.3 y obtenemos:

$$\int_{\tilde{\Omega}(t)} \left(u_t + \operatorname{div}(u \cdot \mathbf{w}) \right) d\Omega(t) = D_1 \int_{\tilde{\Omega}(t)} \Delta u d\Omega(t) + \int_{\tilde{\Omega}(t)} f(u, v) d\Omega(t). \tag{3.7}$$

Considerando que $\tilde{\Omega}(t)$ es arbitrario, obtenemos la forma fuerte de la ecuación

$$u_t + \operatorname{div}(u \cdot \mathbf{w}) = D_1 \Delta u + f(u, v).$$

Si tomamos en cuenta las dos concentraciones y reescalamos únicamente en el tiempo, usando el cambio de variables

$$(\hat{x}, \hat{y}, \hat{t}) = (x, y, D_1 t)$$

tenemos que:

$$\begin{aligned} u_t + \frac{1}{D_1} \operatorname{div}(u \cdot \mathbf{w}) &= \Delta u + \frac{1}{D_1} f(u, v) \\ v_t + \frac{1}{D_1} \operatorname{div}(v \cdot \mathbf{w}) &= \frac{D_2}{D_1} \Delta v + \frac{1}{D_1} g(u, v) \end{aligned}$$

En el segundo término del lado derecho podemos incluir la constante $\frac{1}{D_1}$ dentro de la divergencia en el campo de velocidad, y abusando de la notación podemos llamar $\mathbf{w} = \frac{1}{D_1}\mathbf{w}$, $d = \frac{D_2}{D_1}$ y $\gamma = \frac{1}{D_1}$. Por lo tanto, nos queda el siguiente sistema con las condiciones iniciales y de borde, tal como lo hicimos en el Capítulo 1, donde el sistema es similar al caso del dominio fijo, salvo por el término que involucra el crecimiento:

$$\begin{cases} u_t + \operatorname{div}(u \cdot \mathbf{w}) = \Delta u + \gamma f(u, v) \\ v_t + \operatorname{div}(v \cdot \mathbf{w}) = d\Delta v + \gamma g(u, v) \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\partial v}{\partial \eta} = 0 \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y) \\ v(x, y, 0) = v_0(x, y) \end{cases} \quad (3.8)$$

A partir de acá podemos tomar dos caminos para resolver numéricamente este sistema: El primero [MM], dado que tenemos un dominio móvil, consiste en utilizar el flujo para cambiar variables del dominio móvil al dominio fijo original. Sea ξ y η las coordenadas en el dominio fijo, tendremos utilizando el flujo que:

$$(x(t), y(t)) = \Phi(\xi, \eta, t)$$

$$x = \Phi_1(\xi, \eta, t) \quad y = \Phi_2(\xi, \eta, t) \quad (3.9)$$

Cuando t varía, también lo hacen las coordenadas x e y , entonces aplicando la transformación, éstas son mapeadas a coordenadas ξ y η que pertenecen al dominio fijo. Como lo hacemos sobre las coordenadas, las concentraciones u y v también serán afectadas.

$$u(x, y, t) = \hat{u}(\xi, \eta, t) \quad v(x, y, t) = \hat{v}(\xi, \eta, t) \quad (3.10)$$

Ahora haremos las derivadas de u en términos de las concentraciones en el domino fijo:

$$\begin{aligned} u_x &= \hat{u}_\xi \xi_x + \hat{u}_\eta \eta_x \\ u_y &= \hat{u}_\xi \xi_y + \hat{u}_\eta \eta_y \\ u_{xx} &= \hat{u}_{\xi\xi} \xi_x^2 + \hat{u}_{\eta\xi} \eta_{xx} + \hat{u}_{\eta\eta} \eta_x^2 + \hat{u}_\xi \xi_{xx} + 2\hat{u}_\eta \eta_x \xi_x \\ u_{yy} &= \hat{u}_{\xi\xi} \xi_y^2 + \hat{u}_{\eta\xi} \eta_{yy} + \hat{u}_{\eta\eta} \eta_y^2 + \hat{u}_\xi \xi_{yy} + 2\hat{u}_\eta \eta_y \xi_y. \end{aligned}$$

análogamente se obtiene la siguiente relación:

$$\hat{u}_t = u_t + u_x \frac{dx}{dt} + u_y \frac{dy}{dt} = u_t + \mathbf{w} \cdot \nabla u,$$

con $\mathbf{w} = (\frac{dx}{dt}, \frac{dy}{dt})^T$, el campo de velocidades asociado al flujo.

Entonces la ecuación de u (3.8) conduce en las nuevas variables y concentraciones a:

$$\begin{aligned} \hat{u}_t + \operatorname{div}(\mathbf{w})\hat{u} &= \left(\hat{u}_{\xi\xi}(\xi_x^2 + \xi_y^2) + \hat{u}_\eta(\eta_{xx} + \eta_{yy}) + \hat{u}_{\eta\eta}(\eta_x^2 + \eta_y^2) + \hat{u}_\xi(\xi_{xx} + \xi_{yy}) \right. \\ &\quad \left. + 2\hat{u}_\eta \xi(\eta_x \xi_x + \eta_y \xi_y) \right) + \gamma f(\hat{u}, \hat{v}) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Argumento que también vale para v , entonces tenemos:

$$\begin{aligned} \hat{v}_t + \operatorname{div}(\mathbf{w})\hat{v} &= \left(\hat{v}_{\xi\xi}(\xi_x^2 + \xi_y^2) + \hat{v}_\eta(\eta_{xx} + \eta_{yy}) + \hat{v}_{\eta\eta}(\eta_x^2 + \eta_y^2) + \hat{v}_\xi(\xi_{xx} + \xi_{yy}) \right. \\ &\quad \left. + 2\hat{v}_\eta \xi(\eta_x \xi_x + \eta_y \xi_y) \right) + \gamma g(\hat{u}, \hat{v}) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Resolver numéricamente este sistema no es inmediato pues involucra el conocimiento explícito (o aproximado numéricamente) del flujo. Además cabe mencionar el hecho de que las condiciones de borde, en este caso $\frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\partial v}{\partial \eta} = 0$, no necesariamente se conservan al pasar a un dominio fijo. Sin embargo, en caso de *crecimiento isotrópico*, estas ecuaciones adoptan una forma muy sencilla.

Observación 3.2.1 (Crecimiento isotrópico). En este tipo de crecimiento, cada coordenada del espacio en el tiempo t será dilatada en un factor $\mu(t)$, con $\mu(0) = 1$.

Sea $(\xi, \eta) \in \Omega_0$

$$\begin{cases} x = \Phi_1(\xi, \eta, t) = \mu(t)\xi \\ y = \Phi_2(\xi, \eta, t) = \mu(t)\eta \end{cases} \quad (3.13)$$

Tenemos que la ecuación del flujo (3.2) es:

$$(\Phi_1)_t = \frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}\Phi_1 \quad (\Phi_2)_t = \frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}\Phi_2 \quad (3.14)$$

por lo cual

$$\operatorname{div}(\mathbf{w}) = 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}.$$

Por (3.13) tenemos que:

$$\begin{cases} \xi = \frac{1}{\mu(t)}x \\ \eta = \frac{1}{\mu(t)}y \end{cases}$$

$$\begin{array}{llll} \xi_x = \frac{1}{\mu(t)} & \xi_{xx} = 0 & \xi_y = 0 & \xi_{yy} = 0 \\ \eta_y = \frac{1}{\mu(t)} & \eta_{yy} = 0 & \eta_x = 0 & \eta_{xx} = 0 \end{array}$$

Entonces, las ecuaciones para \hat{u} y \hat{v} quedan en este caso isotrópico:

$$\begin{cases} \hat{u}_\tau + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}\hat{u} = \frac{1}{\mu(t)^2}\Delta\hat{u} + \gamma f(\hat{u}, \hat{v}) \\ \hat{v}_\tau + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}\hat{v} = d\frac{1}{\mu(t)^2}\Delta\hat{v} + \gamma g(\hat{u}, \hat{v}) \end{cases} \quad (3.15)$$

Esta es una forma de resolver el problema en un dominio móvil pasando a uno fijo $(\xi, \eta) \in \Omega_0$. La segunda forma es trabajar en el dominio móvil directamente. Esto implica resolverlo a partir del sistema original (3.8). Para ello se seguirán los pasos realizados en el caso sin crecimiento.

3.3. Formulación débil del problema

Escribiremos la forma débil de (3.8). Sea $\varphi \in H^1(\Omega(t))$ una función test, multiplicando miembro a miembro por φ e integrando en $\Omega(t)$, obtenemos :

$$\int_{\Omega(t)} u_t \varphi \, d\Omega(t) + \int_{\Omega(t)} \operatorname{div}(u\mathbf{w}) \varphi \, d\Omega(t) = \int_{\Omega(t)} \Delta u \varphi \, d\Omega(t) + \gamma \int_{\Omega(t)} f \varphi \, d\Omega(t)$$

Integrando por partes, usando las condiciones de borde, y simplificando la notación con el uso del producto interno en $L^2(\Omega(t))$ tenemos:

$$(u_t, \varphi) + (\operatorname{div}(u\mathbf{w}), \varphi) = -(\nabla u, \nabla \varphi) + \gamma(f, \varphi)$$

Dado que $\operatorname{div}(u\mathbf{w}) = \mathbf{w} \cdot \nabla u + \operatorname{div}(\mathbf{w})u$ y haciendo un razonamiento análogo para v se tiene

$$\begin{cases} (u_t, \varphi) + (\mathbf{w} \cdot \nabla u, \varphi) + (\operatorname{div}(\mathbf{w})u, \varphi) &= -(\nabla u, \nabla \varphi) + \gamma(f, \varphi) \\ (v_t, \varphi) + (\mathbf{w} \cdot \nabla v, \varphi) + (\operatorname{div}(\mathbf{w})v, \varphi) &= -d(\nabla v, \nabla \varphi) + \gamma(g, \varphi), \end{cases}$$

que debe valer para funciones test arbitrarias. Sea $H_h^1(\Omega(t))$, una familia de espacios asociados al dominio móvil $\Omega(t)$, y consideremos $\forall t \geq 0$ una base $\{\phi_1(t), \dots, \phi_N(t)\}$. Proponemos ahora:

$$u_h(t) = \sum_{i=1}^N U_i(t) \phi_i(x, y, t) \quad v_h(t) = \sum_{i=1}^N V_i(t) \phi_i(x, y, t) \quad (3.16)$$

soluciones del problema. De ahora en más para simplificar la notación escribiremos sólo la dependencia en t de la función nodal, $\phi_j(x, y, t) = \phi_j(t)$

$$\begin{cases} ((u_h)_t, \phi_j(t)) + (\mathbf{w} \cdot \nabla u_h, \phi_j(t)) + (\operatorname{div}(\mathbf{w})u_h, \phi_j(t)) &= -(\nabla u_h, \nabla \phi_j(t)) + \gamma(f, \phi_j(t)) \\ ((v_h)_t, \phi_j(t)) + (\mathbf{w} \cdot \nabla v_h, \phi_j(t)) + (\operatorname{div}(\mathbf{w})v_h, \phi_j(t)) &= -d(\nabla v_h, \nabla \phi_j(t)) + \gamma(g, \phi_j(t)), \end{cases} \quad (3.17)$$

$\forall \phi_j$, con $1 \leq j \leq N$.

3.4. Desarrollo numérico del problema

Para cada t , los elementos finitos que consideraremos son el triple formado por $(T(t), \mathcal{P}_1, \mathcal{N})_t$. Donde, a diferencia del problema en dominios fijos, como $\Omega(t)$ crece en el tiempo, las funciones nódales móviles serán $\{\phi_1^T(t), \phi_2^T(t), \phi_3^T(t)\}$.

Sea K un triángulo con vértices $\{p_j\}_{1 \leq j \leq 3}$, de coordenadas (a_{1j}, a_{2j}) . Recordando la Sección 2.2 tenemos que la matriz:

$$P = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

resulta invertible gracias a que su determinante coincide con el de

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} - a_{11} & a_{13} - a_{11} \\ a_{21} & a_{22} - a_{21} & a_{23} - a_{21} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

que claramente no es nulo pues los puntos v_j no son colineales.

Luego, cualquier punto $x = (x_1, x_2)$, está caracterizado por 3 escalares $\lambda_j = \lambda_j(x)$, $1 \leq j \leq 3$, definidos como la solución del sistema

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^3 a_{ij} \lambda_j = x_i, & 1 \leq i \leq 2 \\ \sum_{j=1}^3 \lambda_j = 1 \end{cases} \quad (3.18)$$

cuya matriz es precisamente P .

3.4.1. La propiedad de transporte de las funciones nodales

Definición 3.4.1. *Coordenadas baricéntricas en el triángulo.* Sea K un triángulo con vértices p_1 , p_2 y p_3 . Los escalares $\lambda_j(x)$ definidos por (3.18) son llamados las *coordenadas baricéntricas* del punto x con respecto a los p_j , $1 \leq j \leq 3$. En particular cualquier $(x, y) \in K$ puede ser representado por:

$$(x, y) = \lambda_1 p_1 + \lambda_2 p_2 + \lambda_3 p_3$$

con $0 \leq \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \leq 1$.

Observación 3.4.2. Notemos que $\lambda_i(p_j) = \delta_i^j$, lo cual indica que $\lambda_i = \phi_i^T$. Esto es: pensado como una función lineal coincide con las funciones nodales.

Cada triángulo $T(0)$ con vértices locales $p_1(0)$, $p_2(0)$ y $p_3(0)$ en $\Omega(0)$ puede ser parametrizado usando las coordenadas baricéntricas sobre el triángulo $T(0)$. Sea $\mathbf{x} \in T(0)$ vale que:

$$\mathbf{x}^{T(0)}(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \tilde{\lambda}_3) = \tilde{\lambda}_1 p_1(0) + \tilde{\lambda}_2 p_2(0) + \tilde{\lambda}_3 p_3(0) \quad (3.19)$$

donde $\mathbf{x} \in T(0)$ y $\tilde{\lambda} = \tilde{\lambda}_i(\mathbf{x}^{T(0)})$, con $i = 1, 2, 3$.

Luego, usando estas coordenadas baricéntricas, se puede proponer un nuevo flujo discreto numérico para cada triángulo $T(t)$ con vértices locales $p_1(t)$, $p_2(t)$ y $p_3(t)$ en $\Omega(t)$:

$$\mathbf{x}^T(\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, \tilde{\lambda}_3, t) = \tilde{\lambda}_1(\mathbf{x}^{T(0)}) p_1(t)^T + \tilde{\lambda}_2(\mathbf{x}^{T(0)}) p_2(t)^T + \tilde{\lambda}_3(\mathbf{x}^{T(0)}) p_3(t)^T \quad (3.20)$$

donde $\mathbf{x}^T \in T(t)$. Ésta mapea puntos de $T(0)$ en puntos de $T(t)$ como lo hace el flujo con los puntos de $\Omega(0)$ y $\Omega(t)$ ¹. Sin embargo usa sólo la información dada por el flujo en los vértices, y en ese sentido funciona como una aproximación del mismo.

Siguiendo las ideas del dominio fijo, para cada $t \in [0, T_f]$, se definen las funciones de forma $\{\phi_1(t), \dots, \phi_N(t)\}$ (en este caso móviles) que son lineales en cada $T(t)$ y continuas en $\Omega(t)$ tales que $\phi_j(v_i(t), t) = \delta_{ij}$, donde $\{v_i(t)\}_{1 \leq i \leq N}$ son los nodos móviles de la malla según la ley de movimiento dada por el flujo (3.20).

Ahora bien, dado $1 \leq i \leq N$, existe un índice local $1 \leq j \leq 3$, tal que

$$\phi_i|_T = \phi_j^T = \tilde{\lambda}_j \quad (3.21)$$

La identidad (3.20) nos dice que las coordenadas baricéntricas de un punto móvil \mathbf{x}^T con trayectoria dada por el flujo discreto son *constantes*. Este hecho y la Observación 3.4.2 conducen a la propiedad notable:

$$\frac{D\phi_j}{Dt}|_T = \frac{d\phi_j(\mathbf{x}^T, t)}{dt} = \frac{d}{dt} \tilde{\lambda}_k(T, j) = 0,$$

con $1 \leq k \leq 3$, donde la derivada material es calculada respecto del flujo discreto (3.20).

Sea $\tilde{\mathbf{w}} = \sum_{1 \leq j \leq 3} \mathbf{w}(p_j) \phi_j^T$, la velocidad de la partícula, $\frac{d\mathbf{x}^T}{dt}$, dada por (3.20). Notemos que $\tilde{\mathbf{w}}$ coincide con la interpolada de la velocidad \mathbf{w} , que es la velocidad a la que se mueve $\Omega(t)$ en $T(t)$ para cada t . Es así como enunciaremos la *Propiedad de transporte de las funciones nodales móviles*.

Proposición 3.4.3. (Propiedad de transporte) *Para cada $i = 1, \dots, N$ y $x \in T(t)$ vale que:*

$$\frac{D\phi_j}{Dt} = (\phi_i)_t + \tilde{\mathbf{w}} \cdot \nabla \phi_i = 0,$$

Entonces para las funciones nodales móviles podemos escribir la siguiente propiedad de transporte:

En cada triángulo $T(t)$, para cada t vale que $(\phi_i)_t = -\tilde{\mathbf{w}} \cdot \nabla \phi_i$.

¹En realidad el flujo no necesariamente mapea un triángulo en el otro.

Tenemos $V = \{v_1(t), v_2(t), \dots, v_N(t)\}$, el conjunto de vértices definidos por la triangulación admisible de $\Omega(t)$, donde N es la cantidad de vértices que no varía en el tiempo, es decir que para cada t , buscaremos triangulaciones que mantengan fija la cantidad de vértices como así la topología de la malla².

Por un lado, de (3.16) tenemos

$$\nabla u_h(t) = \sum_{i=1}^N U_i(t) \nabla \phi_i(t) \quad \nabla v_h(t) = \sum_{i=1}^N V_i(t) \nabla \phi_i(t)$$

por el otro,

$$(u_h)_t = \sum_{i=1}^N (U'_i(t) \phi_i(t) + U_i(t) (\phi_i(t))_t),$$

y usando la propiedad de transporte se tiene

$$(u_h)_t = \sum_{i=1}^N (U'_i(t) \phi_i(t) - U_i(t) \tilde{\mathbf{w}} \nabla \phi_i(t)) = \sum_{i=1}^N U'_i \phi_i(t) - \tilde{\mathbf{w}} \nabla u_h(t) \quad (3.22)$$

donde en la última identidad llamamos $\tilde{\mathbf{w}}$ a la interpolada global (i.e. la interpolada en todo $\Omega(t)$) de \mathbf{w} .

Retomamos ahora el cálculo desde (3.16) y (3.17). De esta última ecuación tenemos que u_h y v_h deben verificar $\forall \phi_j \ 1 \leq j \leq N$:

$$\begin{cases} ((u_h)_t, \phi_j(t)) + (\mathbf{w} \cdot \nabla u_h(t), \phi_j(t)) + (\operatorname{div}(\mathbf{w}) u_h(t), \phi_j(t)) & = -(\nabla u_h(t), \nabla \phi_j(t)) + \gamma(f, \phi_j(t)) \\ ((v_h)_t, \phi_j(t)) + (\mathbf{w} \cdot \nabla v_h(t), \phi_j(t)) + (\operatorname{div}(\mathbf{w}) v_h(t), \phi_j(t)) & = -d(\nabla v_h(t), \nabla \phi_j(t)) + \gamma(g, \phi_j(t)), \end{cases} \quad (3.23)$$

Luego, de la expresión de u_h , v_h y de (3.22) nuestro problema ahora consiste en: *Hallar U_i y $V_i \in C^1(0, T_f) \cap C^0[0, T_f]$ tal que $\forall \phi_j \ 1 \leq j \leq N$ cumpla:*

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N U'_i(\phi_i(t), \phi_j(t)) + \sum_{i=1}^N U_i((\mathbf{w} - \tilde{\mathbf{w}}) \cdot \nabla \phi_i(t) + \operatorname{div}(\mathbf{w}) \phi_i(t), \phi_j(t)) & = -\sum_{i=1}^N U_i(\nabla \phi_i(t), \nabla \phi_j(t)) \\ & + \gamma(f, \phi_j(t)) \\ \sum_{i=1}^N V'_i(\phi_i(t), \phi_j(t)) + \sum_{i=1}^N V_i((\mathbf{w} - \tilde{\mathbf{w}}) \cdot \nabla \phi_i(t) + \operatorname{div}(\mathbf{w}) \phi_i(t), \phi_j(t)) & = -d \sum_{i=1}^N V_i(\nabla \phi_i(t), \nabla \phi_j(t)) \\ & + \gamma(g, \phi_j(t)) \end{cases}$$

Como es de esperar, el término que involucra a $(\mathbf{w} - \tilde{\mathbf{w}})$ es, típicamente, de orden superior al término de $\operatorname{div}(\mathbf{w})$, sin embargo valen aclarar algunos aspectos que hacemos en las siguientes observaciones,

Observación 3.4.4 (Crecimiento del dominio en forma isotrópica). En el caso de crecimiento isotrópico, los considerados numéricamente en este trabajo, el término $(\mathbf{w} - \tilde{\mathbf{w}})$ desaparece.

En efecto: si volvemos a considerar un flujo isotrópico dado por las condiciones (3.13), entonces el campo de velocidades es de la forma (3.14)

$$\mathbf{w} = \frac{\mu'(t)}{\mu(t)}(x, y), \quad (3.24)$$

²Desde un punto de vista computacional es cómodo porque sólo se mueven los vértices y la matriz de incidencia del grafo dado por la malla permanece fija. En nuestras simulaciones hemos simplificado más aún la situación tomando crecimiento isotrópico para el dominio y por ende para los vértices de la malla.

lo que en particular dice que para cada t es *lineal* en (x, y) y por ende

$$\mathbf{w} = \tilde{\mathbf{w}},$$

puesto que el miembro de la derecha es la interpolada lineal del miembro de la izquierda.

Observación 3.4.5 (Integración numérica). Si el crecimiento no es isotrópico pero se utiliza una regla de integración que solo considere los vértices de los triángulos de la malla entonces en el esquema numérico también desaparece la integral que involucra a $\mathbf{w} - \tilde{\mathbf{w}}$.

3.5. Crecimiento del dominio en forma isotrópica

Gracias a las Observaciones 3.4.4 y 3.2.1, nuestro problema con crecimiento isotrópico quedaría de la siguiente manera: *Hallar U_i y $V_i \in C^1(0, T_f) \cap C^0[0, T_f]$ tal que $\forall \phi_j(t) \ 1 \leq j \leq N$ cumpla:*

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^N U'_i(t)(\phi_i(t), \phi_j(t)) + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)} \sum_{i=1}^N U_i(t)(\phi_i(t), \phi_j(t)) = -\sum_{i=1}^N U_i(t)(\nabla \phi_i(t), \nabla \phi_j(t)) \\ \quad + \gamma(f, \phi_j(t)) \\ \sum_{i=1}^N V'_i(t)(\phi_i(t), \phi_j(t)) + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)} \sum_{i=1}^N V_i(t)(\phi_i(t), \phi_j(t)) = -d \sum_{i=1}^N V_i(t)(\nabla \phi_i(t), \nabla \phi_j(t)) \\ \quad + \gamma(g, \phi_j(t)) \end{cases} \quad (3.25)$$

3.6. Tratamiento numérico del problema

Podemos escribir (3.25) como un sistema de ecuaciones ordinarias, que difiere del sistema del Capítulo 2, no sólo por el término debido al movimiento, sino por las matrices de masa B y rigidez A que ahora dependen del tiempo,

$$\begin{cases} B(t)U'(t) + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}B(t)U(t) + A(t)U(t) = \gamma F(t) \\ B(t)V'(t) + 2\frac{\dot{\mu}(t)}{\mu(t)}B(t)V(t) + A(t)V(t) = \gamma G(t). \end{cases} \quad (3.26)$$

Donde,

$$B_{i,j}(t) = (\phi_i(t), \phi_j(t)) = \int_{\Omega(t)} \phi_i(t) \phi_j(t) d\Omega(t)$$

$$A_{i,j}(t) = (\nabla \phi_i(t), \nabla \phi_j(t)) = \int_{\Omega(t)} \nabla \phi_i(t) \nabla \phi_j(t) d\Omega(t)$$

Si discretizamos el tiempo $[0, T_f]$ en M intervalos de tamaño Δt , llamando $t_n = (n-1)\Delta t$ con $n = \{1, \dots, M\}$, podemos proponemos el siguiente esquema numérico, que necesita resolverse para cada n :

$$\begin{cases} \left(B(n+1) \left(1 + 2\frac{\dot{\mu}(n+1)}{\mu(n+1)} \Delta t \right) + \Delta t A(n+1) \right) U(:, n+1) = \gamma \Delta t F(:, n) + B(n)U(:, n) \\ \left(B(n+1) \left(1 + 2\frac{\dot{\mu}(n+1)}{\mu(n+1)} \Delta t \right) + d \Delta t A(n+1) \right) V(:, n+1) = \gamma \Delta t G(:, n) + B(n)V(:, n) \end{cases} \quad (3.27)$$

donde $U(:, n)$, $V(:, n)$, $F(:, n)$, $G(:, n) \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ son aproximaciones para las variables U , V , $(f, \phi_j(t))$, y $(g, \phi_j(t))$, respectivamente, en tiempo t_n , y $\dot{\mu}(n)$, $\mu(n)$, son las evaluaciones en tiempo t_n de las funciones $\dot{\mu}(t)$ y $\mu(t)$.

3.7. Funciones nodales

Sea $T(t)$ un elemento finito triangular de vértices $p_1(t) = (x_1(t), y_1(t))$, $p_2(t) = (x_2(t), y_2(t))$ y $p_3(t) = (x_3(t), y_3(t))$, las funciones nodales pueden escribirse como:

$$\phi_j^T(x, y, t) = \frac{\begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_{j+1}(t) & y_{j+1}(t) \\ 1 & x_{j+2}(t) & y_{j+2}(t) \\ 1 & x_j(t) & y_j(t) \\ 1 & x_{j+1}(t) & y_{j+1}(t) \\ 1 & x_{j+2}(t) & y_{j+2}(t) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_{j+1}(t) & y_{j+1}(t) \\ 1 & x_{j+2}(t) & y_{j+2}(t) \end{vmatrix}} \quad (3.28)$$

Donde los índices deben ser entendidos en módulo 3.

3.8. Construcción de las matrices del problema

Tomando en cuenta el crecimiento isotrópico referido en la Observación 3.2.1 se sigue lo siguiente:

Observación 3.8.1 (Matriz de masa). $B(t) = \mu^2(t)B(0) \forall t \in [0, T_f]$.

En efecto: sea $\mathcal{F} = Mx + p$ una transformación lineal que manda los vértices del triángulo $T(0)$, en los vértices del triángulo $T(t)$, respetando la numeración local, es decir: $\mathcal{F}(v_i(0)) = v_i(t)$ con $1 \leq i \leq 3$. Tenemos que $\phi_j^{T(t)} o \mathcal{F} = \phi_j^{T(0)}$ con $1 \leq j \leq 3$. Gracias al teorema de cambio de variables,

$$\int_{T(t)} \phi_i^{T(t)} \phi_j^{T(t)} dT(t) = \int_{T(0)} \phi_i^{T(0)} \phi_j^{T(0)} J(\mathcal{F}) dT(0)$$

donde $J(\mathcal{F})$, es el jacobiano de la transformación, que en este caso es el $|\det M|$.

En el caso del crecimiento isotrópico el $|\det M| = \mu^2(t)$ y dado que $B_{i,j}(t) = \int_{\Omega(t)} \phi_i(t) \phi_j(t) d\Omega(t)$. Tenemos

$$B_{i,j}(t) = \mu^2(t) B_{i,j}(0)$$

Análogamente

Observación 3.8.2 (Área de $T(t)$). $\text{area}(T(t)) = \mu^2(t) \text{area}(T(0))$

En tanto que para la matriz de rigidez se sigue que

Observación 3.8.3 (Matriz de rigidez). $A(t) = A(0) \forall t \in [0, T_f]$

3.8.1. Términos de reacción

En el caso de un flujo general, para calcular los vectores F y G de (3.27) se procede análogamente al Capítulo 2, donde se utiliza la malla correspondiente al paso n . Sin embargo para el flujo isotrópico se advierte que todos los términos involucrados escalan con $\mu(t)^2$ (como lo hace la matriz $B(t)$) lo cual permite hacer los cálculos sobre la malla inicial fija y multiplicar luego por $\mu(t)^2$.

3.9. Comentarios finales

Hemos de observar algunas cuestiones en casos de crecimiento isotrópico:

- Llevar el sistema de resolución a uno cuyas matrices se puedan escribir dependiendo sólo de la malla en $t = 0$, nos permite una mayor rapidez en los cálculos computacionales.
- Notar que discretizar (3.15), da lo mismo que (3.26) y dividir el esquema por $\mu^2(t)$. En efecto, por las observaciones anteriores, esto último conduce a

$$\begin{cases} B(0)U'(t) + 2\frac{\mu(t)}{\mu^2(t)}B(0)U(t) + \frac{1}{\mu^2(t)}A(0)U(t) = \gamma\tilde{F}(t) \\ B(0)V'(t) + 2\frac{\mu(t)}{\mu^2(t)}B(0)V(t) + \frac{1}{\mu^2(t)}A(0)V(t) = \gamma\tilde{G}(t) \end{cases} \quad (3.29)$$

siendo $\tilde{F}(t) = \frac{F(t)}{\mu^2(t)}$ y $\tilde{G}(t) = \frac{G(t)}{\mu^2(t)}$.

3.10. Crecimiento no isotrópico

Si el crecimiento es no isotrópico cada punto del dominio se regirá con una velocidad de crecimiento distinta, la dada por (3.2). Aunque no hemos implementado este caso ya que implica un enorme costo computacional, comentamos brevemente como podría tratarse.

La dificultad principal que se presenta al resolver con elementos finitos un problema en dominios móviles es el mallado del dominio. A medida que pasa el tiempo se debería, en principio, mallar en cada iteración, pues si movemos los nodos de la malla inicial podría pasar que el movimiento finalmente termine generando una malla de pobre calidad, o peor aún una malla no admisible. Naturalmente esto es muy costoso a nivel computacional.

Una forma de evitar mallar en todas las iteraciones, es pensar que como las velocidades de crecimiento, en nuestro problema, son lentas. Los nodos de la malla se moverán muy poco y por tanto podríamos, por un cierto período de tiempo, suponer que las mallas se mantendrán admisibles. Pasado este período no se podrá usar la misma malla. En ese punto podemos mallar nuevamente o regularizar la malla. La primera variante tiene dos problemas: 1) no asegura que la cantidad de nodos se mantenga constante y 2) el borde tiene que volver a ser reconstruido de algún modo para pasarlo al mallador. La segunda variante, que explicaremos brevemente debajo, será la de usar algún método de regularización de mallas, el cual sí nos permite mantener fija la cantidad de nodos y dado que le pedimos que mantenga los nodos del borde fijos, nos ahorraremos de generar el borde con el flujo.

Luego de tener la nueva malla regularizada, necesitaremos saber los valores que toman las funciones U y V en cada uno de los nuevos nodos, esto se hará interpolando las funciones U y V de la malla anterior, a la nueva malla. Teniendo en cuenta lo anterior tendremos el siguiente algoritmo de resolución:

- (1) Mallar $\Omega(0)$. Ir al paso (2).
- (2) Calcular A, B, F, G . Hallar $U(t)$ y $V(t)$. Mover los nodos según el flujo dado por (3.20). Mientras el desplazamiento total sea menor que cierta tolerancia por el tamaño de los elementos, iterar este paso. En caso contrario ir al paso (3).
- (3) Testear la calidad de la malla, básicamente midiendo ángulos mínimos. Si la calidad es buena, ir al paso (2), sino ir al paso (4).
- (4) Regularizar la malla, interpolar U y V . Ir al paso (2)

Como se puede ver este algoritmo es costoso computacionalmente.

3.10.1. Métodos de regularización de mallas. Spring Analogy

Describimos debajo una heurística bastante difundida de regularización (para más detalles y generalizaciones ver [B]).

Spring analogy (analogía de los resortes) es una técnica que consiste en considerar a los lados del triángulo (que llamaremos segmentos) como resortes y mover los nodos de manera que dentro de la malla triangular se obtengan triángulos equiláteros. Los segmentos, al ser considerados como resortes, deben tener una longitud de equilibrio, depende de cómo se considere esta última resultan dos tipos distintos de spring analogy: vertex springs y segment springs.

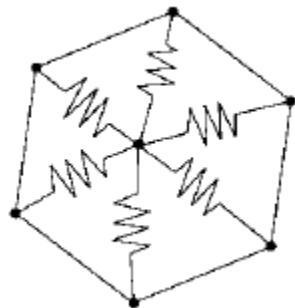


Figura 3.1: Representación física del método spring analogy.

Vertex springs

Esta técnica es generalmente utilizada cuando se quiere suavizar una malla luego de haberla originado o refinado. La longitud de equilibrio considerada para los segmentos es 0 y los resortes son tomados como lineales. Por lo tanto la ley de Hooke determina la fuerza ejercida en cada nodo i por parte de cada nodo j , que son los que están conectados a i ,

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij} (\vec{x}_j - \vec{x}_i) \quad (3.30)$$

donde N_i es la cantidad de nodos vecinos al nodo i , α_{ij} es el coeficiente de rígidez del resorte que conecta i con j y \vec{x}_j es la posición del nodo j .

Para que el sistema esté en equilibrio se requiere que $\vec{F}_i = 0$, de donde aparece naturalmente el método iterativo:

$$\vec{x}_i^{k+1} = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij} \vec{x}_j^k}{\sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij}} \quad (3.31)$$

que aplicado para cada nodo i que pertenezca al interior de la malla. Por lo que en cada iteración tendremos que cada nueva posición del nodo \vec{x}_i será calculado como el promedio pesado entre sus nodos vecinos, donde los pesos serán dados por los coeficientes de rígidez α_{ij} . En este tipo de spring analogy, se tomarán los $\alpha_{ij} = 1 \forall i, j$.

Luego, tendremos que la posición de los nuevos nodos de la malla será calculada como la distancia promedio entre sus vecinos.

En general, la ecuación (3.31) convergerá al equilibrio y lo hará en una cantidad razonable de iteraciones.

Segment springs

Esta técnica es utilizada para deformar la malla original en un dominio en movimiento. La diferencia con la técnica anterior es que la longitud de equilibrio de los resortes es tomada como la longitud original de los segmentos. Luego, se aplica la ley de Hooke al desplazamiento de los nodos.

$$\vec{F}_i = \sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij} (\vec{\delta}_j - \vec{\delta}_i) \quad (3.32)$$

Donde $\delta_i = \vec{x}_i(n) - \vec{x}_i(0)$ es el desplazamiento del nodo i , y $\vec{x}_i(n)$ representa la posición del nodo i en el tiempo n .

Análogo a la técnica anterior, resulta en:

$$\vec{\delta}_i^{k+1} = \frac{\sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij} \vec{\delta}_j^k}{\sum_{j=1}^{N_i} \alpha_{ij}}. \quad (3.33)$$

Se propone en este caso, que los coeficientes de rígidez α_{ij} sean proporcionales a la inversa de la longitud de los segmentos, es decir

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}} \quad (3.34)$$

Luego la posición del nuevo nodo i será la posición anterior que tenía desplazada con el $\tilde{\delta}_i$ que se obtiene luego de iterar (3.34) una cantidad razonable de veces para que converja.

Capítulo 4

Simulaciones numéricas. Patrones de Turing

En este capítulo mostraremos los resultados de los experimentos realizados en dominios fijos, así como también los diferentes patrones encontrados.

Para realizar las simulaciones, principalmente se utilizó la reacción de Schnackenberg, otra reacción utilizada fue la reacción de Thomas (1975) [MI], la que se basa en una reacción específica que involucra dos sustancias : oxígeno (v) y ácido uríco (u), ésta puede ser escrita como:

$$\begin{cases} f(u, v) = a - u - \rho R(u, v) \\ g(u, v) = \alpha(b - v) - \rho R(u, v) \end{cases}$$

Donde $R(u, v) = \frac{uv}{1+u+Ku^2}$ y $a, b, \alpha, \rho \geq 0$.

En general usaremos una forma particular de colorear los gráficos de las concentraciones, propuesta en [MWM], en la cual usaremos solo dos colores, rojo y azul. Esta forma de coloreo tiene un sentido biológico, se basa en definir los umbrales \bar{u} y \bar{v} para la concentraciones u y v , respectivamente. Estos umbrales determinarán la coloración roja o azul de las concentraciones. En nuestro caso, \bar{u} y \bar{v} serán la medias de la concentraciones y se aplicará la siguiente regla de coloreo: si $u(x) \leq \bar{u}$, entonces $u(x)$ será coloreada de azul, caso contrario de rojo. Lo mismo se hará con la concentración v .

4.1. Sobre las condiciones iniciales y valores de los parámetros usados

Se tomará como concentración inicial de cada sustancia, una perturbación del estado de equilibrio de la reacción (u_0, v_0) . Tendremos que las condiciones iniciales en el cuadrado unitario serán:

$$\begin{cases} U_0 = u_0 - 0,001\cos(n\pi x) \\ V_0 = v_0 + 0,001\cos(n\pi x) \end{cases} \quad (4.1)$$

donde $n \in \mathbb{N}$. Es decir tomamos una perturbación múltiplo de una autofunción del laplaciano. En dominios como discos o anillos tomamos el mismo tipo de dato inicial por comodidad, aunque se pueden calcular las autofunciones correspondientes. En dominios generales, calculamos las autofunciones mediante aproximaciones numéricas. Los parámetros usados en este trabajo fueron elegidos de tal manera que cumplieran los requisitos establecidos para alcanzar la inestabilidad de Turing y

así formar patrones. Algunos de ellos fueron extraídos de la literatura [MM], [MW]. Mostraremos un ejemplo de los cálculos para asegurarnos la formación de patrones en el caso: $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Tenemos que para estos valores: $f_u(u_0, v_0) = 0,8$; $f_v(u_0, v_0) = 1$; $g_u(u_0, v_0) = -1,6$ y $g_v(u_0, v_0) = -1$. Veamos que se cumplen las condiciones de la Sección 1.3.5 para que se dé la inestabilidad de Turing:

- $\text{tr}(A) < 0 \iff b - a < (a + b)^3 \iff 0,8 < 1$.
- $\det(A) > 0 \iff (a + b)^2 > 0$, trivial.
- $d \neq 1, 100 \neq 1$.
- f_u y g_v tienen distinto signo.
- $d > d_c$, donde d_c es el valor que hace que $\forall d > d_c c(d) > 0$.
En este caso, $c(d) = 0,64d^2 - 4,8d + 1$ y tiene raíces : $c_1 = 0,215$ y $c_2 = 7,285$. Tomamos $d_c = 7,285$, entonces vale que $\forall d > d_c c(d) > 0$, es así como elegimos $d = 100$.
- $df_u + g_v > 0, 79 > 0$.

Luego, para la elección del dato inicial calculamos $p(z)$ en (1.17), que para estos parámetros es $p(z) = 100z^2 - 2370z + 900$, el cual tiene raíces positivas, que son: $z_1 = 0,3$ y $z_2 = 23,39$. Finalmente: $\forall d > 7,285$, tenemos que para cada $z = \lambda_k \in (0,3; 23,39)$ tendremos soluciones $\beta_k > 0$ de (1.15), que nos aseguren la inestabilidad de Turing.

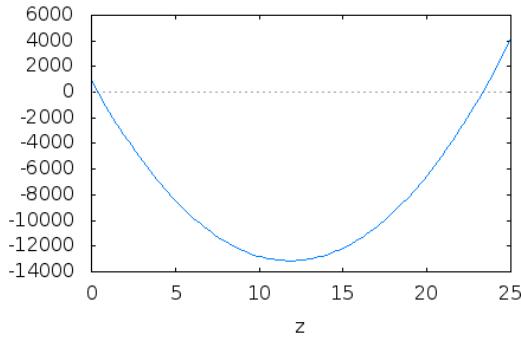


Figura 4.1: Gráfico de $p(z)$

Para definir las condiciones iniciales buscaremos las autofunciones que pertenezcan al intervalo $(0,3; 23,39)$.

Como ejemplo numérico se eligió un dominio que aproxima al fractal de Koch, al cual se le calcularon numéricamente las autofunciones. En la Figura 4.2 se puede observar este dominio mallado

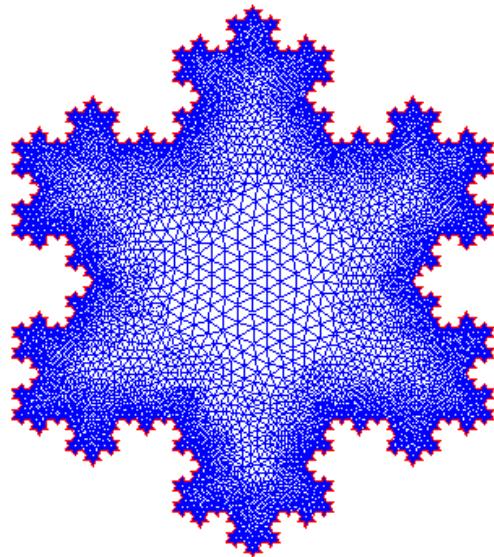


Figura 4.2: Dominio que aproxima al fractal de Koch

Gracias a las aproximaciones n\'umericas, hemos calculado los autovalores del problema del laplaciano para este dominio donde los primeros 17 autovalores son: {0.0000; 12.0860; 12.0862; 23.6961; 23.6967; 28.2762; 53.1779; 87.3188; 87.3215; 115.1209; 115.1298; 122.5314; 146.2718; 146.2802; 146.6642; 150.8760; 157.2085}. Por lo tanto, debido a nuestros c\'alculos anteriores, tomamos la autofunci\'on correspondiente al autovalor 12,0862; la cual es graficada en la Figura 4.3

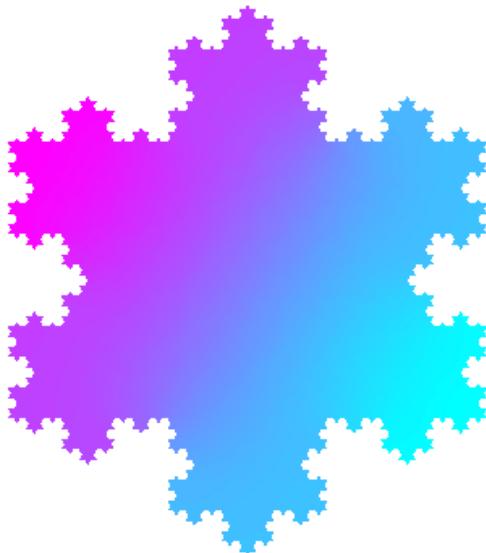


Figura 4.3: Gr\'afico de la aproximaci\'on n\'umerica de la autofunci\'on correspondiente al autovalor $\lambda = 12,0862$

Luego tomaremos como condiciones iniciales, la perturbaci\'on dada por esta autofunci\'on.

4.2. Sobre el mallado del dominio

El mallado utilizado en los ejemplos fue básicamente de dos tipos: *estructurado*, generado por un código ad hoc (esto en general lo utilizamos en cuadrados, anillos y discos) y *no estructurado* generado por la dupla initmesh-refinemesh de MATLAB.

4.3. Simulaciones con la reacción de Schnackenberg

En las siguientes figuras se mostrarán los estados estacionarios y el patrón final que alcanzan las concentraciones u y v .

En la Figura 4.4, la última imagen de cada fila representará el estado de equilibrio final, podemos ver como las coloraciones se intercambian en u y en v . Esto sucede, en ambas reacciones (Schnackenberg y Thomas), es por ello que presentaremos los patrones de formación de una sola de las concentraciones y no de ambas.

En este caso el dominio es un cuadrado de lado $L = 1$, al cual se le realizó un mallado estructurado, donde la cantidad de elementos que forman el dominio es de 5000. Se pudo observar que a partir de $t = 0,9$ y $t = 1,2$ (en u y v respectivamente) se llegó a un patrón que se mantuvo constante en el tiempo.

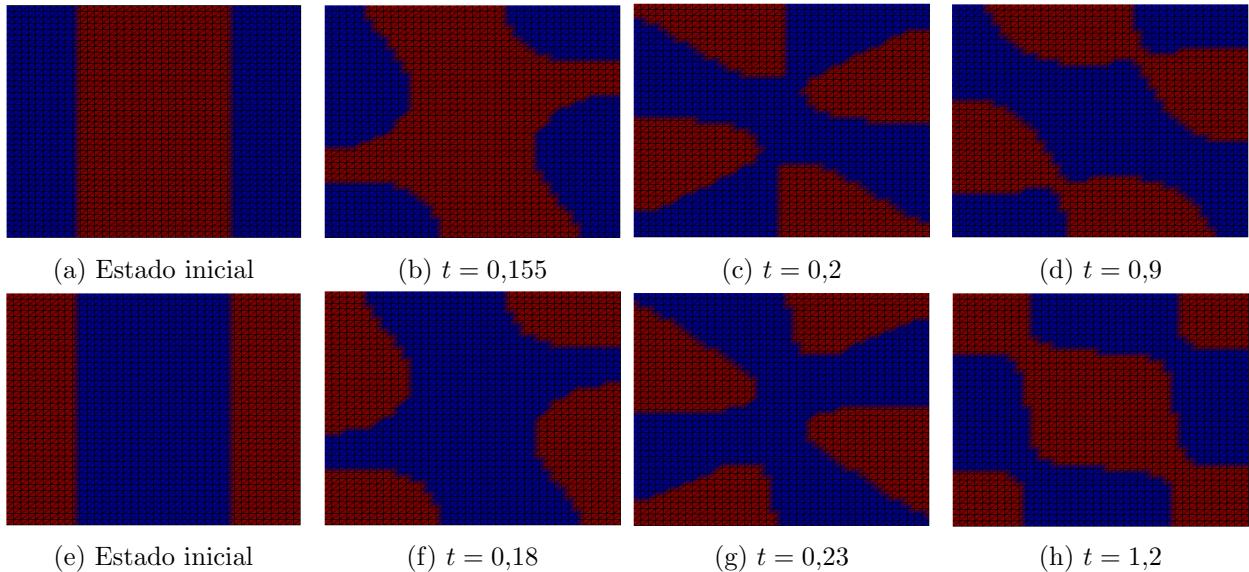


Figura 4.4: Reacción de Schnackenberg para la concentración u (primera fila) y para la concentración v (segunda fila). Con parámetros $L = 1$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$. En el dominio se utilizó una malla estructurada de 1681 nodos.

4.3.1. Más simulaciones con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$

Experimentos teniendo en cuenta el tipo de malla y el tamaño del dominio

Se realizaron experimentos sobre dominios cuadrados $[0, L] \times [0, L]$. En la primera fila de la Figura 4.5 podemos observar 3 gráficos, el primero corresponde al estado inicial de la concentración u (sólo se muestra el estado inicial con una malla estructurada, pues con una malla no estructurada es análogo). El segundo y tercer gráfico corresponden al estado final que se alcanza con un tipo de malla estructurada y no estructurada, respectivamente, sobre dominios de tamaño $L = 1$. Se

puede observar que los patrones que se alcanzan difieren, por lo que se puede inferir que el tipo de mallado influye en los patrones. Se puede observar lo mismo en la segunda fila de imágenes, las cuales poseen un dominio cuadrado de tamaño $L = 2$. Más aún, si comparamos ambos casos podemos observar que el tamaño del dominio también interviene en el tipo de patrones alcanzados. Claramente se puede observar que cuando se usa un malla no estructurada en cuadrados de tamaño $L = 1$ los patrones que se forman son rectangulares, mientras que en el caso de $L = 2$ los patrones son spots.

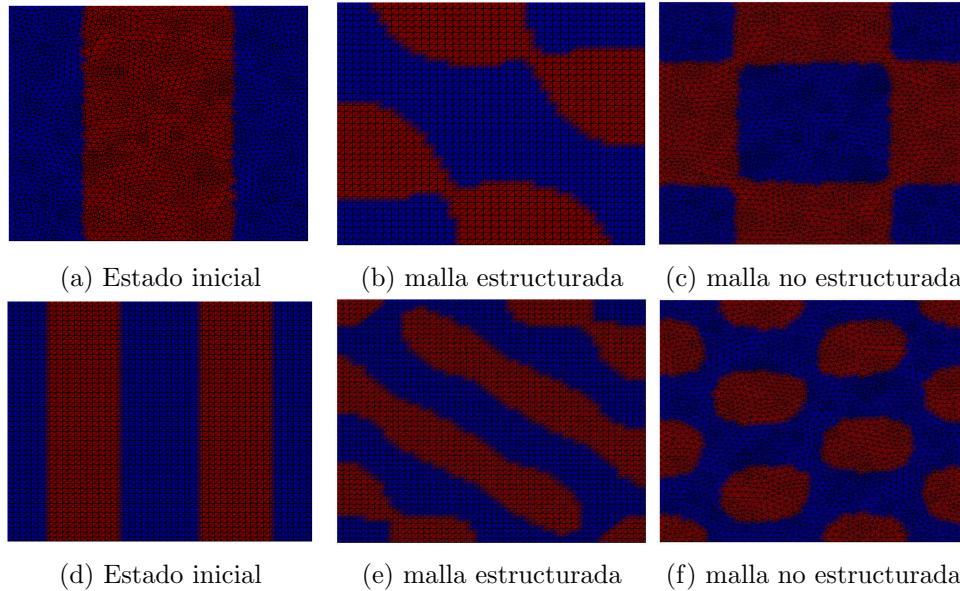


Figura 4.5: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$. La primera fila corresponde a cuadrados con lado $L = 1$, donde la malla estructurada consta de 1681 nodos, mientras que la no estructurada está formada por 2813 nodos. La segunda fila corresponde a un cuadrado con lado $L = 2$, la malla estructurada consta de 2601 nodos, mientras que la no estructurada está formada por 2813 nodos.

Experimentos cambiando el parámetro γ

Se realizaron simulaciones en un dominio cuadrado de tamaño $L = 1$, manteniendo el valor de los parámetros, excepto que se varió γ , el cual tomó los valores 100; 230,82; 500 y 1000. Los patrones originados se pueden observar en la Figura 4.6, los cuales se alcanzaron en $t = 3$. Se observa que a medida que aumenta el valor de γ los patrones que se forman se componen de una cantidad mayor de formas alargadas.

Cabe aclarar que en todas las simulaciones se dejó correr el algoritmo un tiempo considerable hasta asegurar que el patrón formado se encontraba en estado de equilibrio y además las modificaciones en cuanto a la manera de perturbar al estado de equilibrio, no modificaron los patrones formados. Este hecho es debido a que toda perturbación tiene alguna componente (su proyección) sobre las autofunciones inestables, lo que genera la desestabilidad que permite la formación de patrones.

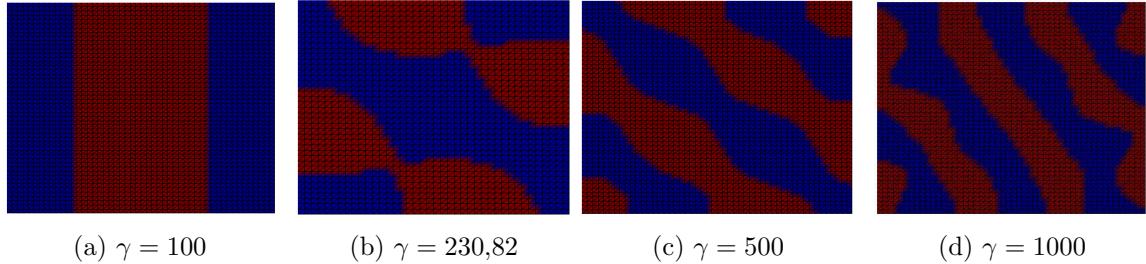


Figura 4.6: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $L = 1$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $d = 8,6676$. Se utilizó una malla estructurada formada por 2601 nodos.

Experimentos con diferentes geometrías del dominio

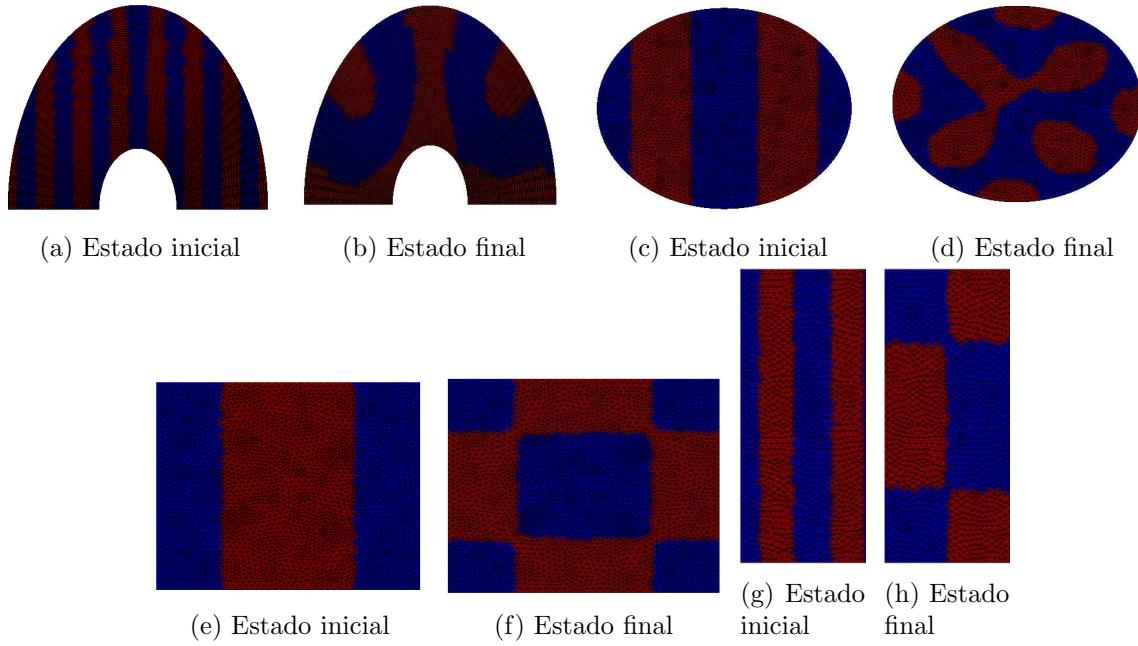


Figura 4.7: El arco tiene una malla estructurada de 3009 nodos y en el círculo, rectángulo y cuadrado se usó una malla no estructurada de 2689 nodos, 1381 nodos y 2813 nodos, respectivamente.

En la Figura 4.7 se mantuvieron constantes los valores de los parámetros pero se cambió la geometría del dominio. En el arco (radio interior $R_0 = 0,3$ y radio exterior $R_1 = 1$) se utilizó una malla estructurada de 3009 nodos, mientras que en el círculo ($R = 1$) se usó una malla no estructurada de 2689 nodos. Se observó una clara diferencia en las formas de los patrones. El cuadrado tiene un tamaño de $L = 1$, mientras que el rectángulo tiene medidas: base $b = 0,5$ y altura $H = 1,5$. En ambos dominios se usó una malla no estructurada, en el rectángulo esta malla consta de 1381 nodos, mientras que la del cuadrado está formada por 2813 nodos. En este caso los patrones resultantes son parecidos.

Entonces podríamos decir, que en casos donde la geometría difiere significativamente (círculo, anillo, cuadrado) es notable la diferencia en los patrones, mientras en el caso del cuadrado y rectángulo los patrones resultan similares, lo cual puede explicarse por argumentos de simetría. Luego, podemos decir que la diferencia de patrones encontrados no sólo depende el tipo de mallado, sino que también influye la geometría del dominio.

Cabe aclarar que se realizaron varios experimentos, en los cuales se pudo observar que en los casos de uso de mallas no estructuradas se necesitó disminuir el paso de tiempo, pues si no se hacía esto el sistema se desestabilizaba, mientras que al usar mallas estructuradas los pasos de tiempo que se podían utilizar eran 10 veces menores o hasta a veces 100 veces menores.

Podemos observar en la Figura 4.8 un ejemplo de los estados de transición que se manifiestan en un dominio circular hasta llegar al estado de equilibrio.

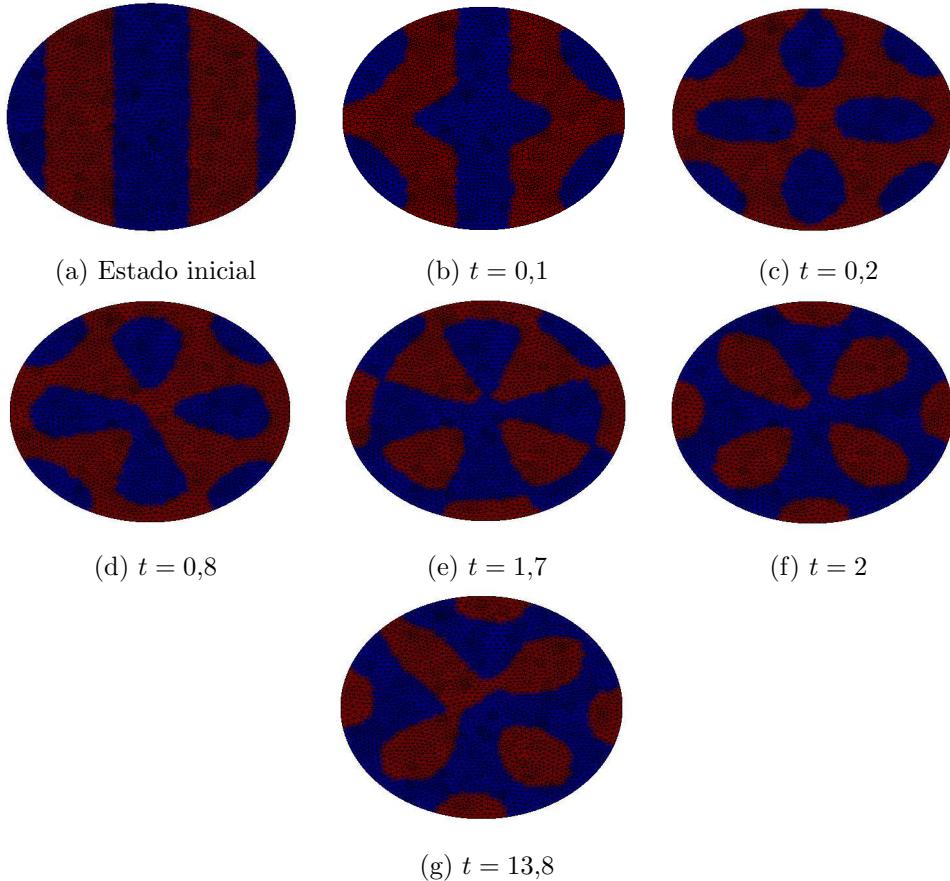


Figura 4.8: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $R = 1$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$. Se utilizó un malla no estructurada de 2689 nodos.

Se realizaron más ejemplos con otros parámetros:

4.3.2. Simulaciones con parámetros $a = 0,25$; $b = 0,8$; $\gamma = 60$; $d = 23$

En el anillo de la Figura 4.9, se utilizó una malla no estructurada de 2540 nodos, mientras que en el cuadrado se usó una malla estructurada de 2601 nodos.

Se puede observar un cambio en los patrones alcanzados, con respecto a los obtenidos con los parámetros anteriores. En este ejemplo sólo se llega a formar, en uno de los vértices del cuadrado, un semicírculo rojo, mientras que en el anillo estos semicírculos se triplican.

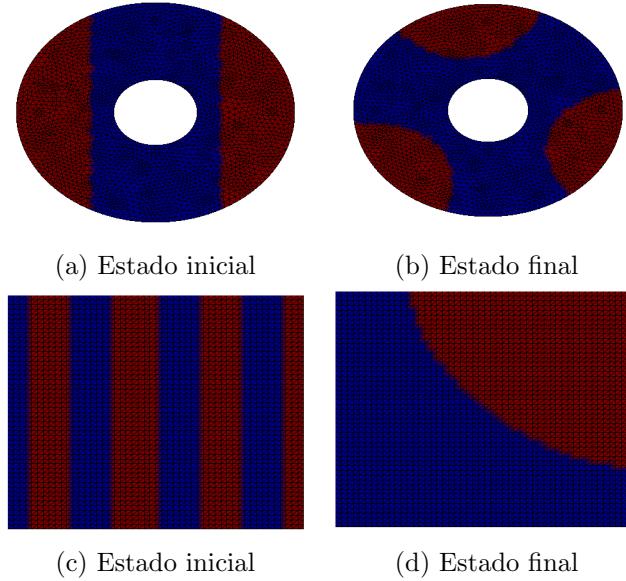


Figura 4.9: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $a = 0,25$; $b = 0,8$; $\gamma = 60$; $d = 23$. El anillo tiene radio interior $R_0 = 0,3$ y radio exterior $R_1 = 1$ con una malla estructurada de 2601 nodos. El cuadrado tiene tamaño $L = 1$, al cual se le aplicó un mallado estructurado compuesto por 2601 nodos.

4.3.3. Simulaciones con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$

En este caso, se puede observar que en el dominio aproximado al fractal de Koch de la Figura 4.10 no se llegan a formar patrones interesantes, se forma un mancha circular en una de las puntas del dominio, como en el ejemplo anterior del cuadrado.

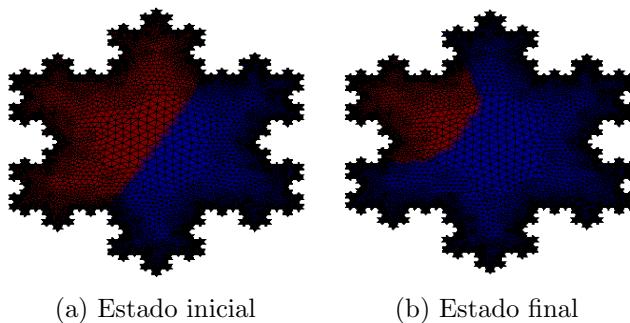


Figura 4.10: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. El dominio que aproxima al fractal de Koch tiene una mallado no estructurado compuesto por 8397 nodos.

Como conclusión podemos decir que en dominios fijos, los patrones dependen de: la geometría del dominio, del tamaño de este y de los parámetros del sistema (a , b , γ , d).

Para ver otro ejemplo de reacción, hicimos una simulación para la reacción de Thomas.

4.4. Simulaciones para la reacción de Thomas

En la Figura 4.11 se realizó un experimento en un dominio circular con $R = 1$, utilizando la reacción de Thomas con parámetros $a = 92$; $b = 64$; $\gamma = 9$; $D_1 = 1$; $D_2 = 10$; $\alpha = 1,5$; $\phi = 18,5$; $K = 0,1$. La malla utilizada fue una no estructurada de 2689 nodos, las condiciones iniciales fueron perturbaciones del equilibrio $(u_0, v_0) = (9,9338; 9,2892)$. Se observa que el patrón final se empieza a formar a partir de $t = 25$, y a partir de ese momento el patrón empieza a rotar y finalmente queda estacionado a partir de $t = 1500$.

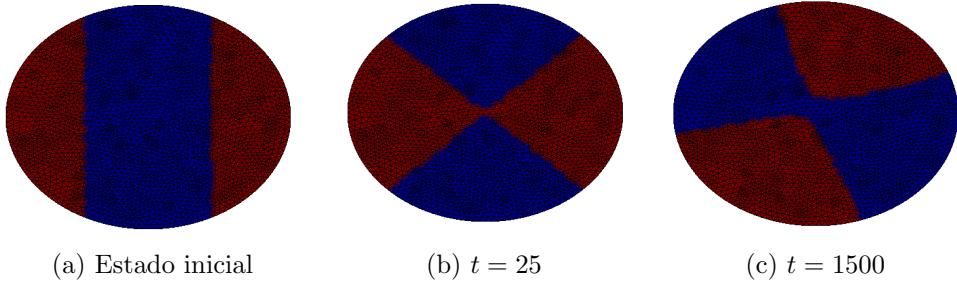


Figura 4.11: Reacción de Thomas. $R = 1$; $a = 92$; $b = 64$; $\gamma = 9$; $d = 10$; $\alpha = 1,5$; $\phi = 18,5$; $K = 0,1$; $u_0 = 9,9338$; $v_0 = 9,2892$. Se utilizó una malla no estructurada de 2689 nodos.

Capítulo 5

Simulaciones numéricas. Patrones en dominios móviles

En este capítulo mostraremos los experimentos realizados sobre dominios que se expanden isotrópicamente con una velocidad dada por (3.13). Hemos tomado $\mu(t) = e^{\rho t}$, con $\rho > 0$ un parámetro fijo lo que conduce a que la $\operatorname{div}(\mathbf{w}) = 2\rho$, por tanto (3.27) queda:

$$\begin{cases} \left(B(n+1)(1 + 2\rho\Delta t) + \Delta t A(n+1) \right) U(:, n+1) = \gamma \Delta t F(:, n) + B(n)U(:, n) \\ \left(B(n+1)(1 + 2\rho\Delta t) + d\Delta t A(n+1) \right) V(:, n+1) = \gamma \Delta t G(:, n) + B(n)V(:, n) \end{cases} \quad (5.1)$$

5.1. Reacción de Schnackenberg

5.1.1. Simulaciones con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$; $d = 100$

Se realizaron simulaciones en dominios cuadrados ($L_0 = 1$), a los cuales se le aplicó un mallado estructurado compuesto por 5000 triángulos. Se realizaron experimentos con factor de crecimiento $\rho = 0,002$ y variando γ tal que $\gamma \leq 50$. Se pudo observar que a medida que crece el dominio se va formando una mancha circular (spot) en el centro del cuadrado, que a lo largo del tiempo se duplica, luego cada spot se divide en dos formándose 4 spots. A partir de ese momento algunos spots se duplican y otros quedan igual llegándose a formar siempre una cantidad par de manchas circulares. La Figura 5.1 muestra un caso particular con $\gamma = 30$ y se utiliza el coloreo por default de MATLAB.

En el Cuadro 5.1 se puede observar cómo a medida que aumenta el valor de γ se van formando los spots más rápido, es decir en dominios cuadrados de menor tamaño.

Se realizó un experimento usando los mismos valores de parámetros que en la Figura 5.1, excepto que el mallado estructurado se afinó, partiendo al dominio original en 9800 triángulos obteniéndose resultados similares, pero a partir de $L = 6,20$ los spots aparecen en diferentes ubicaciones, como se observa en la Figura 5.2, en la que se muestran los estados a partir de $L = 2$, pues los anteriores no difieren significativamente entre ellos.

γ	1 spot	2 spots	4 spots	8 spots
0,5	$L = 18,17$	$L = 33,1$	$L = 38,47$	$L = 54,59$
2	$L = 9,02$	$L = 14,15$	$L = 18,17$	$L = 25,78$
4	$L = 6,35$	$L = 9,97$	$L = 12,8$	$L = 17,28$
9	$L = 4,05$	$L = 6,35$	$L = 8,16$	$L = 12,8$
14	$L = 3,32$	$L = 5,20$	$L = 6,68$	$L = 10,48$
25	$L = 2,45$	$L = 3,66$	$L = 4,95$	$L = 7,38$
30	$L = 2,13$	$L = 3,32$	$L = 4,26$	$L = 6,55$

Cuadro 5.1: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Experimentos realizados en los cuales se varió γ y se dejaron constantes los demás parámetros ($\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $d = 100$)

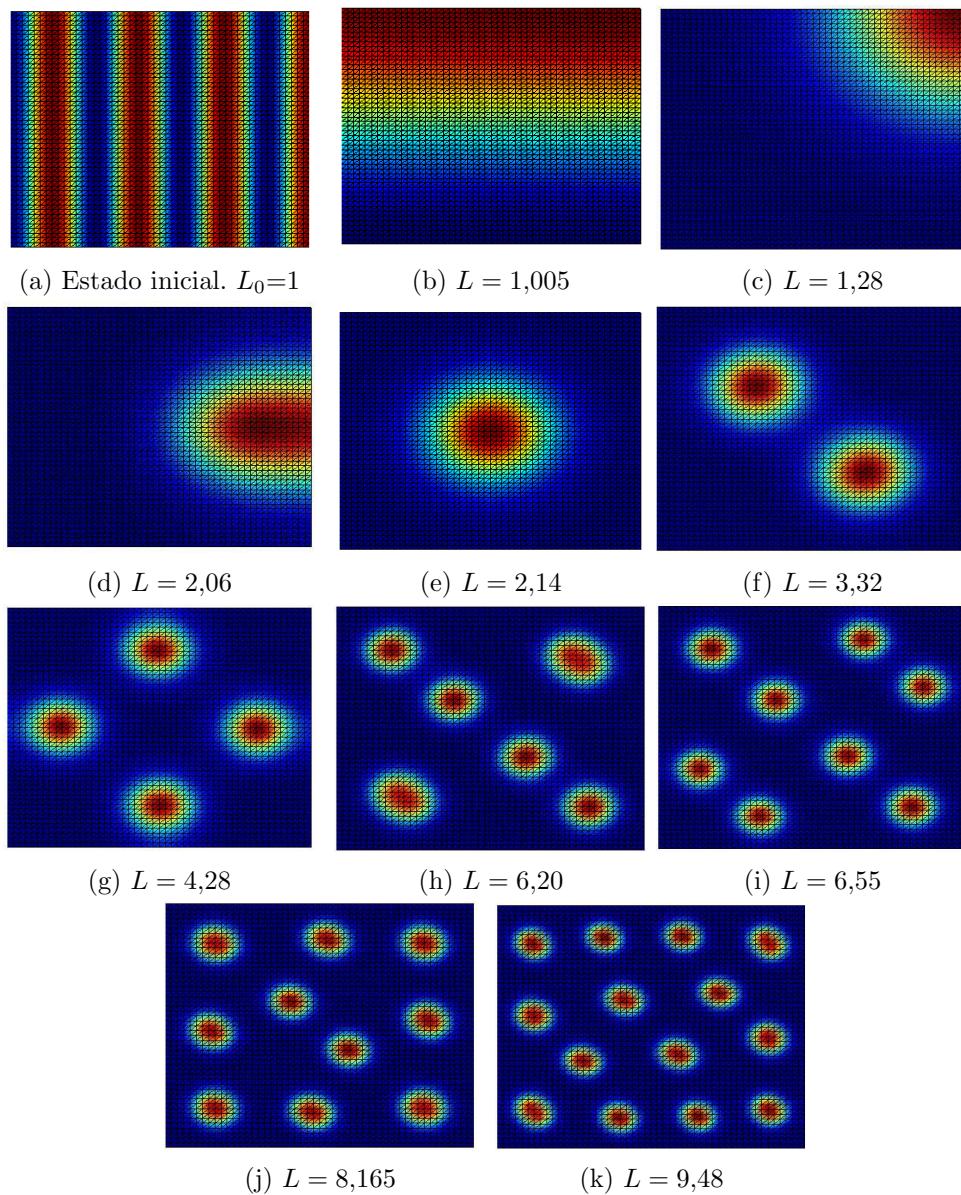


Figura 5.1: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Se utilizó una malla estructurada de 2601 nodos.

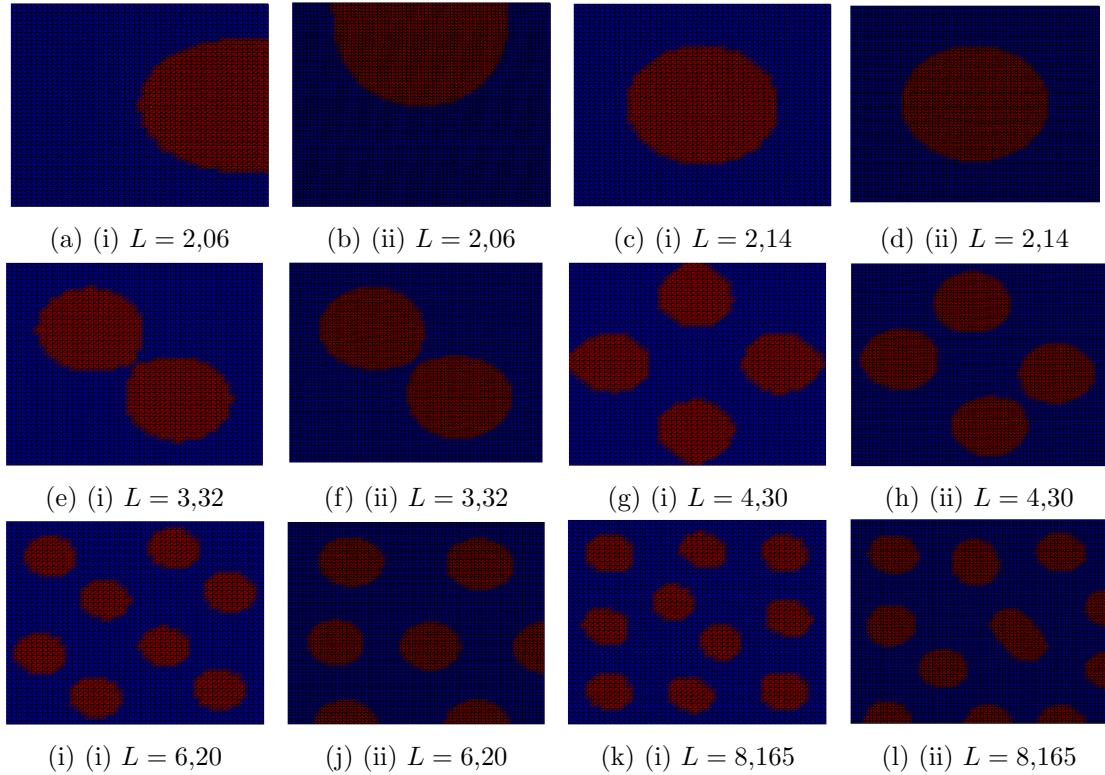


Figura 5.2: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$, $d = 100$. Se utilizó en ambos experimentos una malla estructurada, compuesta por 2601 nodos (i) y 5041 nodos (ii).

Sea realizaron otros experimentos, sea el Experimento A la simulación de la Figura 5.1, cuyo dominio está formado por 5000 triángulos. El Experimento B será análogo al A excepto que el dominio tendrá una malla más gruesa compuesta por 3200 triángulos, mientras que el Experimento C tendrá, al igual que A , una malla compuesta por 5000 triángulos, pero el paso de tiempo usado en este experimento será 10 veces menor.

Se observó que los patrones formados resultaron ser spots, al igual que en la Figura 5.1, pero en el Experimento B se formaron en dominios más pequeños, mientras que en el Experimento C lo hicieron en dominios más grandes. Tal como se muestra en el Cuadro 5.2.

Experimento	1 spot	2 spots	4 spots	6 spots	8 spots
A	$L = 2,14$	$L = 3,32$	$L = 4,28$	$L = 6,20$	$L = 6,55$
B	$L = 2,11$	$L = 3,32$	$L = 4,26$	$L = 6,05$	$L = 6,52$
C	$L = 2,16$	$L = 3,40$	$L = 4,41$	$L = 6,25$	$L = 6,88$

Cuadro 5.2: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $d = 100$. Experimento A con malla estructurada compuesta por 5000 triángulos. Experimento B con malla estructurada compuesta por 3200 triángulos. Experimento C con malla estructurada compuesta por 5000 triángulos

También se realizó una simulación en la cual se cambiaron las condiciones iniciales del sistema (se perturbó el punto de equilibrio de otra manera) y se observó que en las primeras iteraciones los patrones eran distintos pero a partir de cierto momento, en particular cuando se forma un spot

central, las dos simulaciones generan los mismos patrones al mismo tiempo.

Experimentos usando mallas no estructuradas en un dominio cuadrado

Se realizaron simulaciones con mallado no estructurado manteniendo constantes los parámetros de la Figura 5.1. En éstos se observó primero, como en el caso de dominios fijos, que para que la solución numérica no se desestabilice se necesitó disminuir el paso de tiempo. Como se puede observar en la Figura 5.3, cuyo dominio inicial tiene $L_0 = 2$, los patrones que se forman son también spots, apareciendo cantidades impares de ellos, lo que no resultó visible en mallados estructurados. Similarmente se forma lo mismo si el dominio inicial tiene lado 1, con diferencia que los spots, en el caso de $L_0 = 2$, se alcanzan en tamaño menor comparados con el caso $L_0 = 1$.

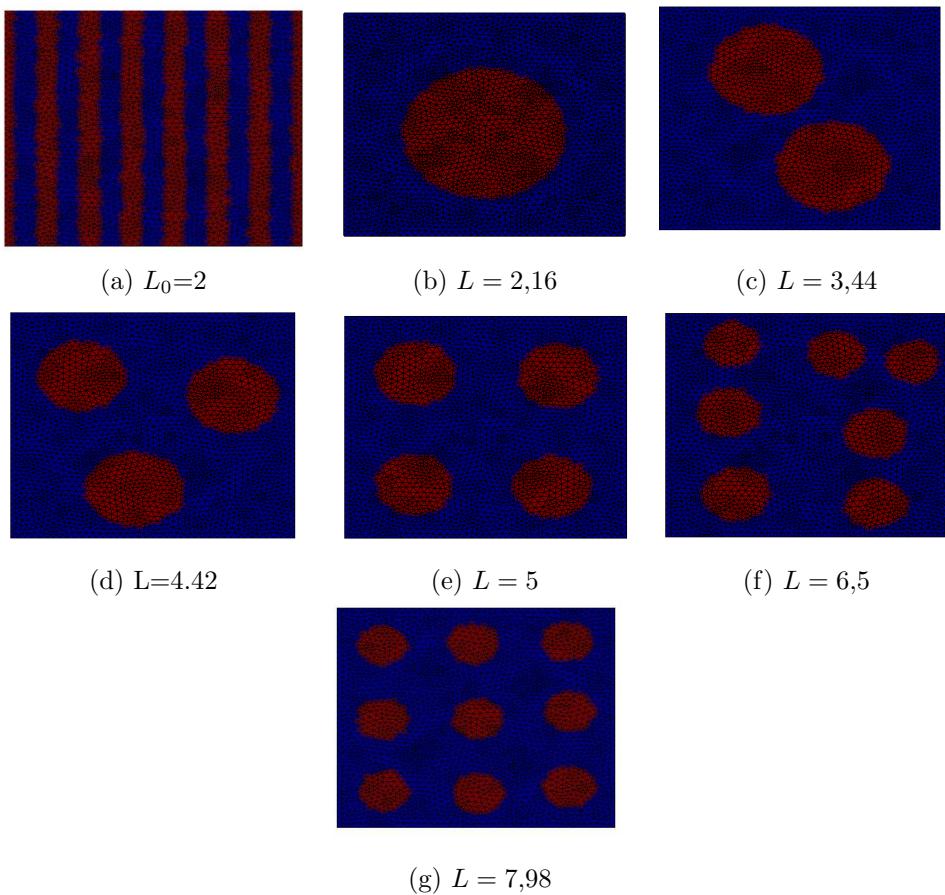


Figura 5.3: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Se utilizó una malla no estructurada de 2813 nodos.

Experimentos con diferentes geometrías

En la Figura 5.4, Figura 5.5, Figura 5.7 y Figura 5.6 se puede observar que la geometría del dominio, no influye en el patrón a formarse, como sucedía en los dominios fijos.

Podríamos decir que en dominios móviles, con estos parámetros, los patrones no dependen del mallado, ni de la geometría y tamaño del dominio, ni de variaciones significativas de γ , ni de cambios en el paso de tiempo.

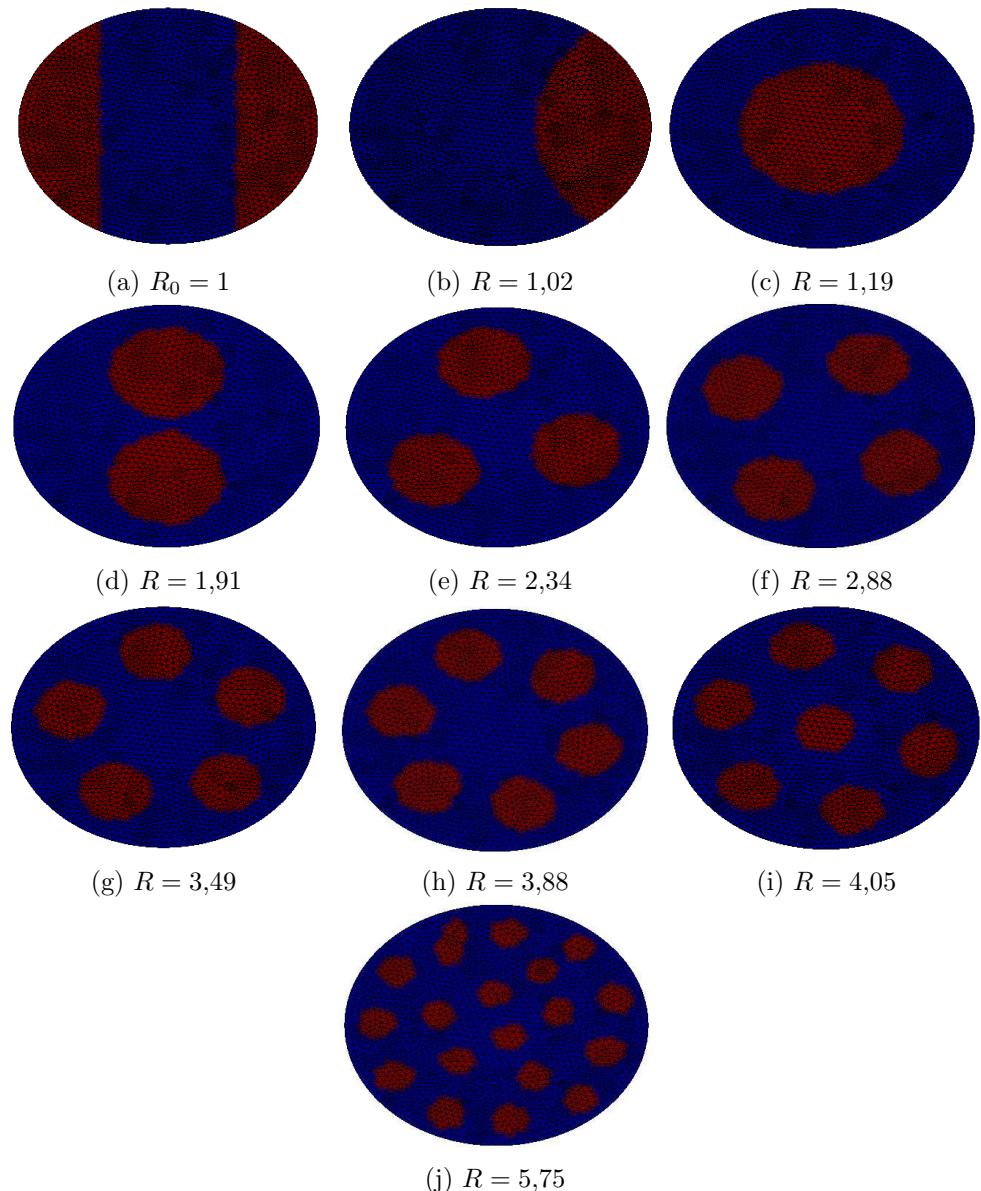


Figura 5.4: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,001$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Se utilizó una malla no estructurada de 2601 nodos.

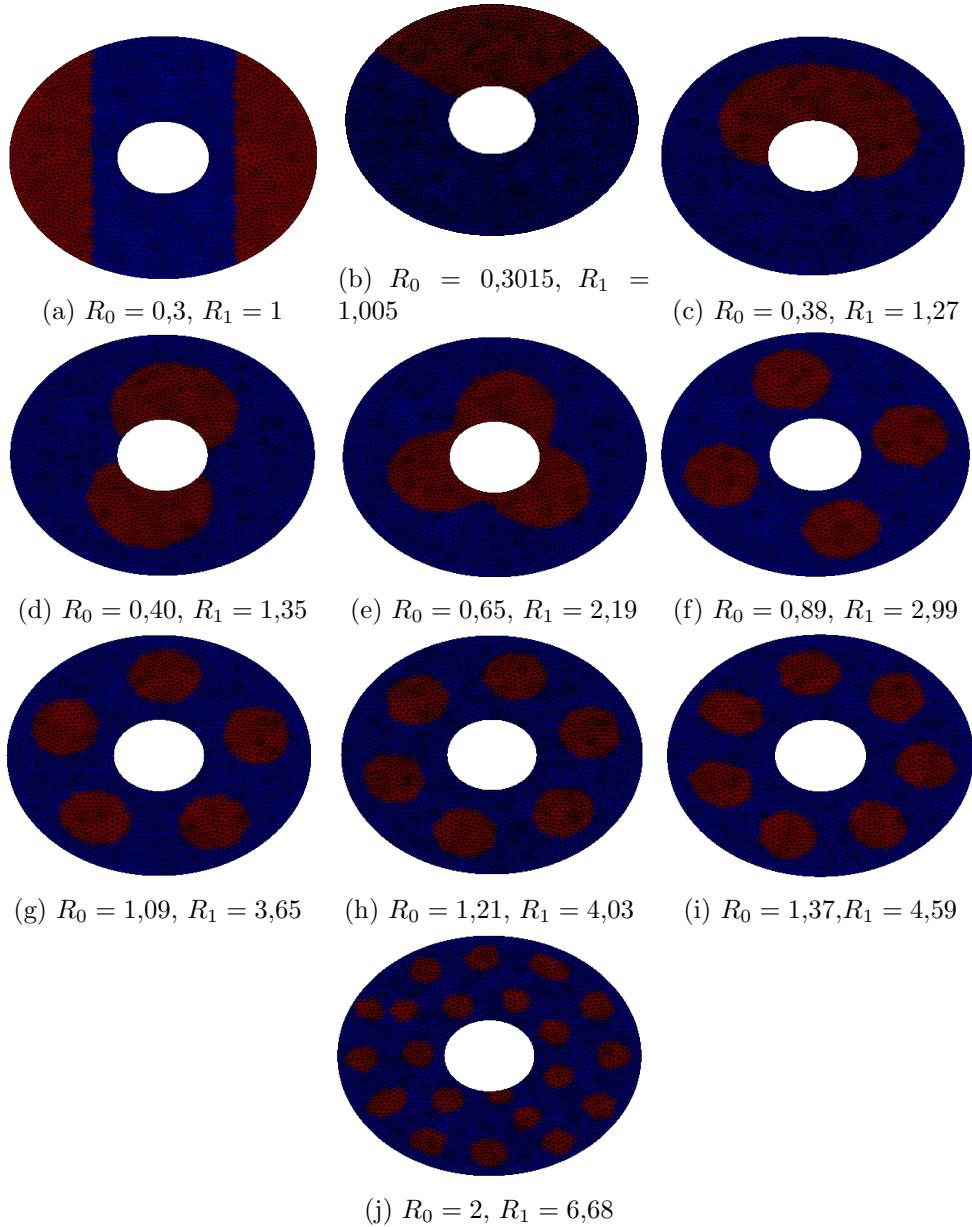


Figura 5.5: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . $\rho = 0,002; a = 0,1; b = 0,9; \gamma = 30, d = 100$. Se utilizó una malla no estructurada de 3048 nodos.

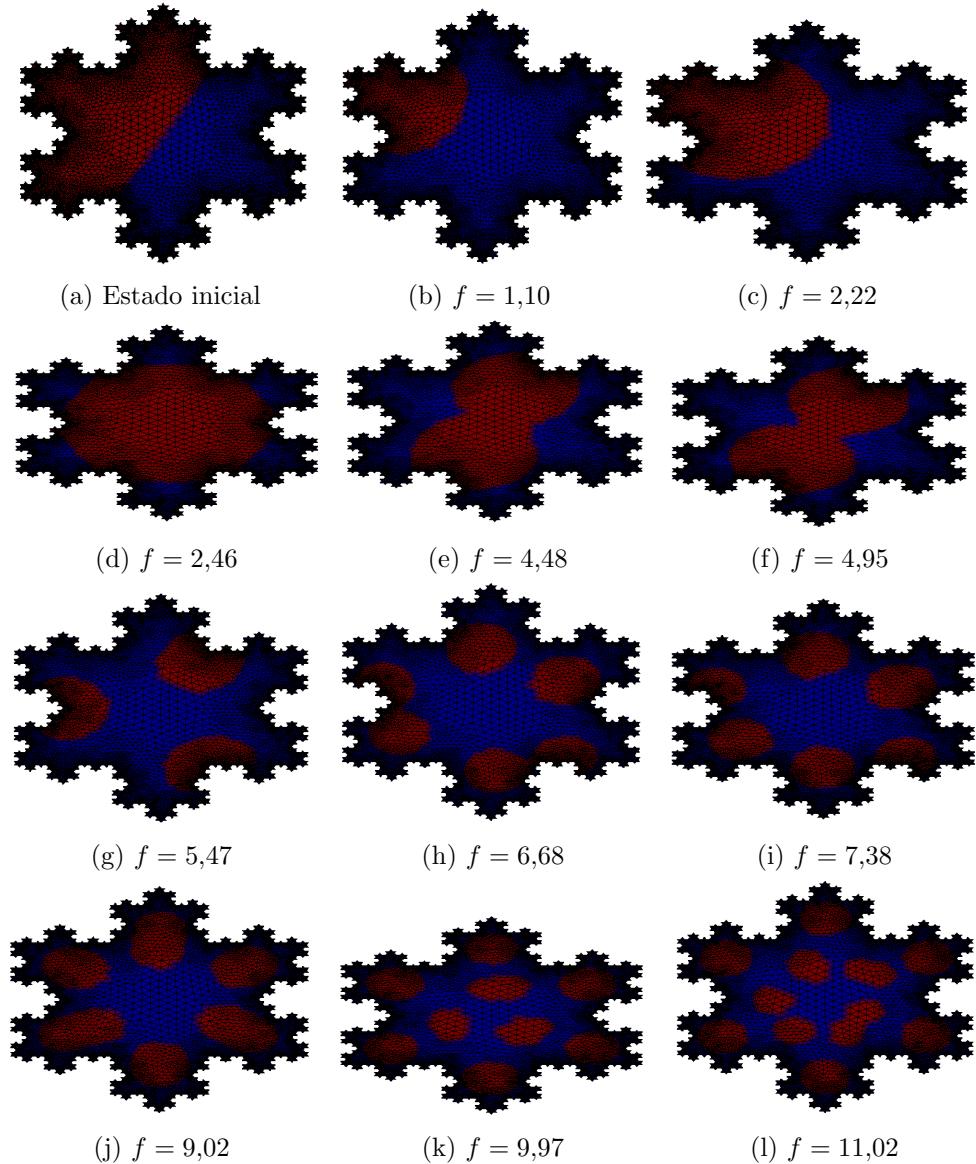


Figura 5.6: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . f es el factor de crecimiento; $\rho = 0,02$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Se utilizó una malla no estructurada de 8397 nodos.

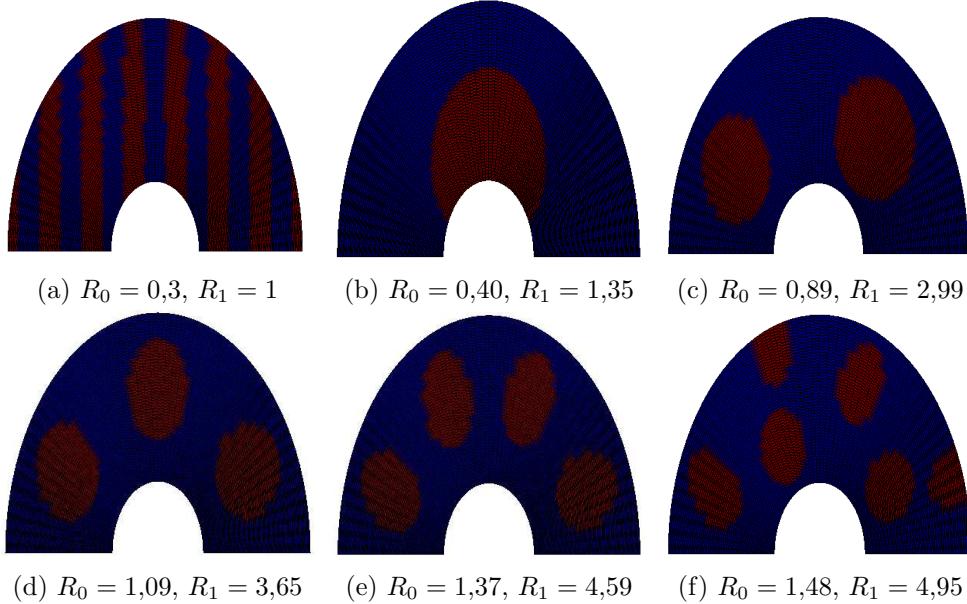


Figura 5.7: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 30$; $d = 100$. Se utilizó una malla estructurada de 3009 nodos.

5.1.2. Simulaciones con parámetros $a = 0,1$; $b = 0,9$, $\gamma = 10$; $d = 10$

Experimentos en dominios cuadrados

Se realizaron dos experimentos a los que llamaremos Experimento D y Experimento E los cuales se detallan a continuación:

Experimento	Tipo de malla	ρ	cantidad de nodos	L_0
D	estructurada	0,001	1681	1
E	no estructurada	0,002	2813	2

Cuadro 5.3: Características de los Experimentos D y E

En las Figura 5.8 y Figura 5.9 se muestran los experimentos D y E , respectivamente. Se puede observar que en el Experimento D , los patrones evolucionan hasta llegar a $L = 2$ (subfigura 5.8 (d)) donde comienzan a ser parecidos a los patrones del Experimento E , esto sigue así hasta que a partir de la subfigura 5.8 (l) empiezan a mostrar diferencias los patrones de ambos experimentos. En el Experimento E aparece un patrón rayado, mientras que en el otro experimento se forman rayas oblicuas, sin pasar previamente a patrón a rayas. Luego, para tamaños de dominios $L > 14$ en el Experimento E los patrones que se forman son spots, mientras que en el Experimento D los patrones son rayados. También podemos observar que en ambas figuras los patrones rayas y spots se alternan. Hemos graficado la Figura 5.9 con la paleta de colores que MATLAB usa por default.

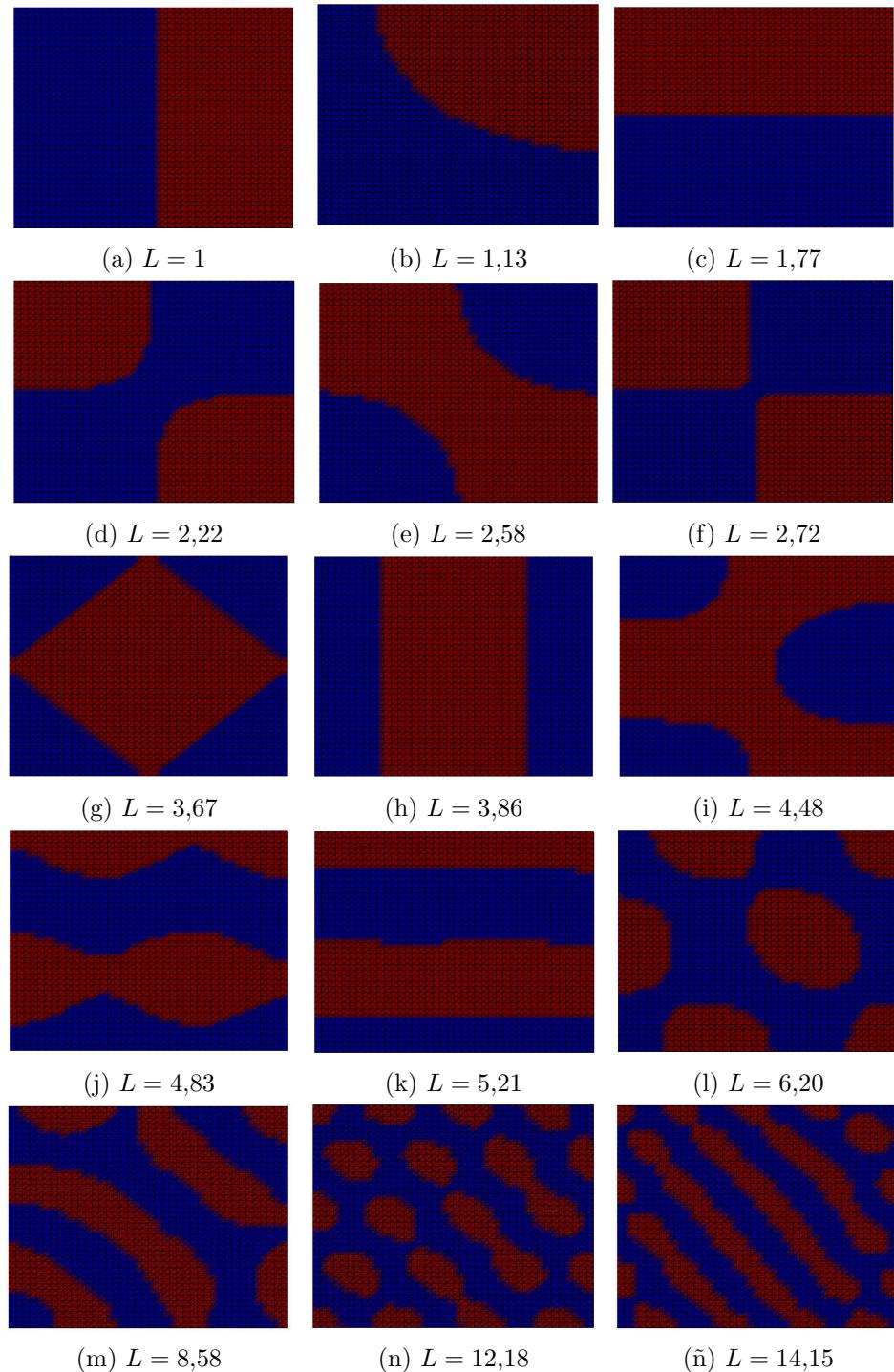


Figura 5.8: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,001$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 10$; $d = 10$. Se utilizó una malla estructurada de 1681 nodos.

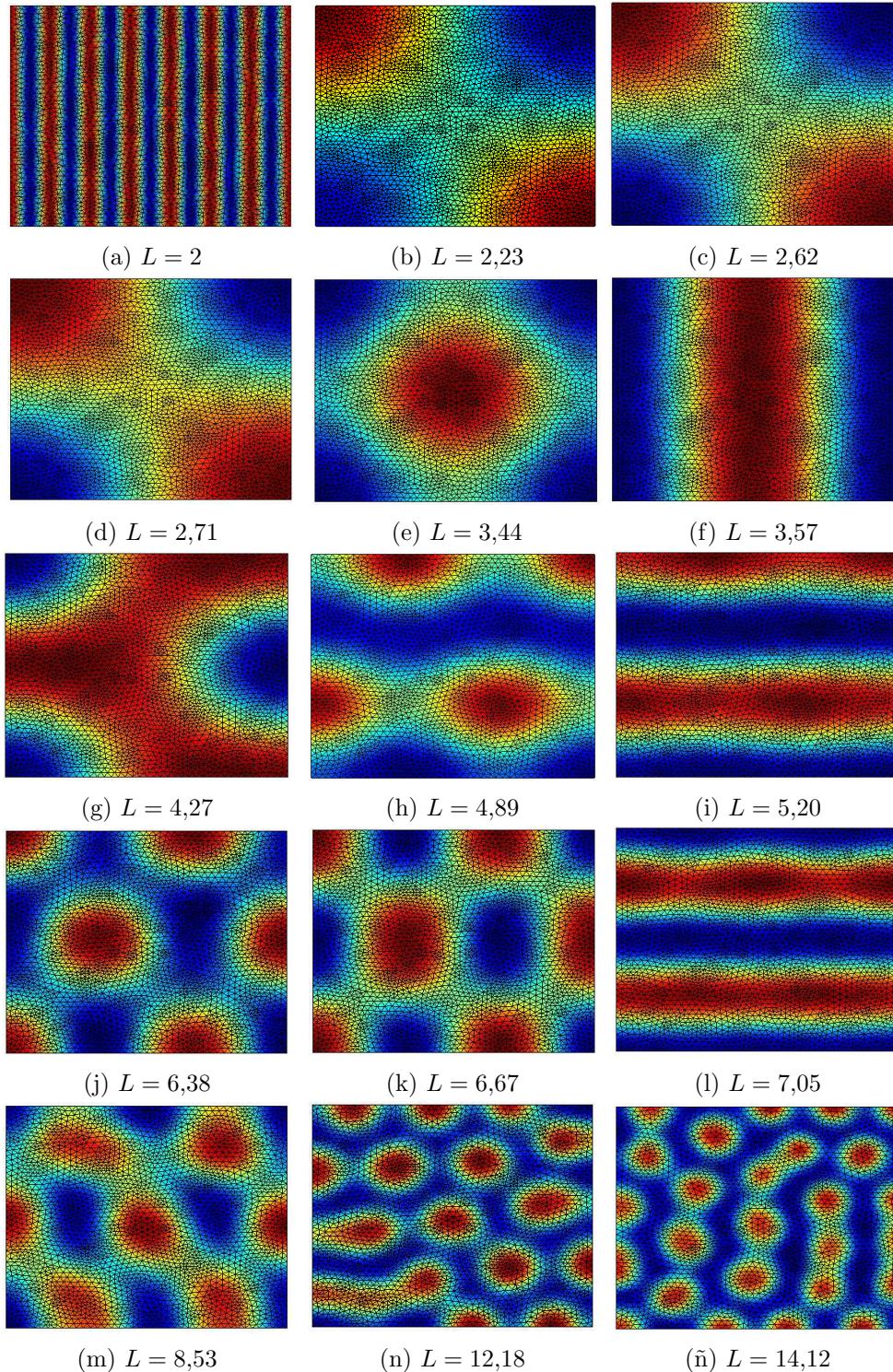


Figura 5.9: Reacción de Schnackenberg para la concentración u con el coloreo aplicado por default en MATLAB. Con parámetros $\rho = 0,002$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 10$; $d = 10$. Se utilizó una malla no estructurada de 2813 nodos.

Experimento en un dominio circular

En la Figura 5.10 se cambió la geometría del dominio y se usaron los mismos parámetros que en la Figura 5.8 y es así como se observó, que en el caso del dominio circular, prevalece la formación de spots mientras que en el dominio cuadrado lo hace el patrón rayado.

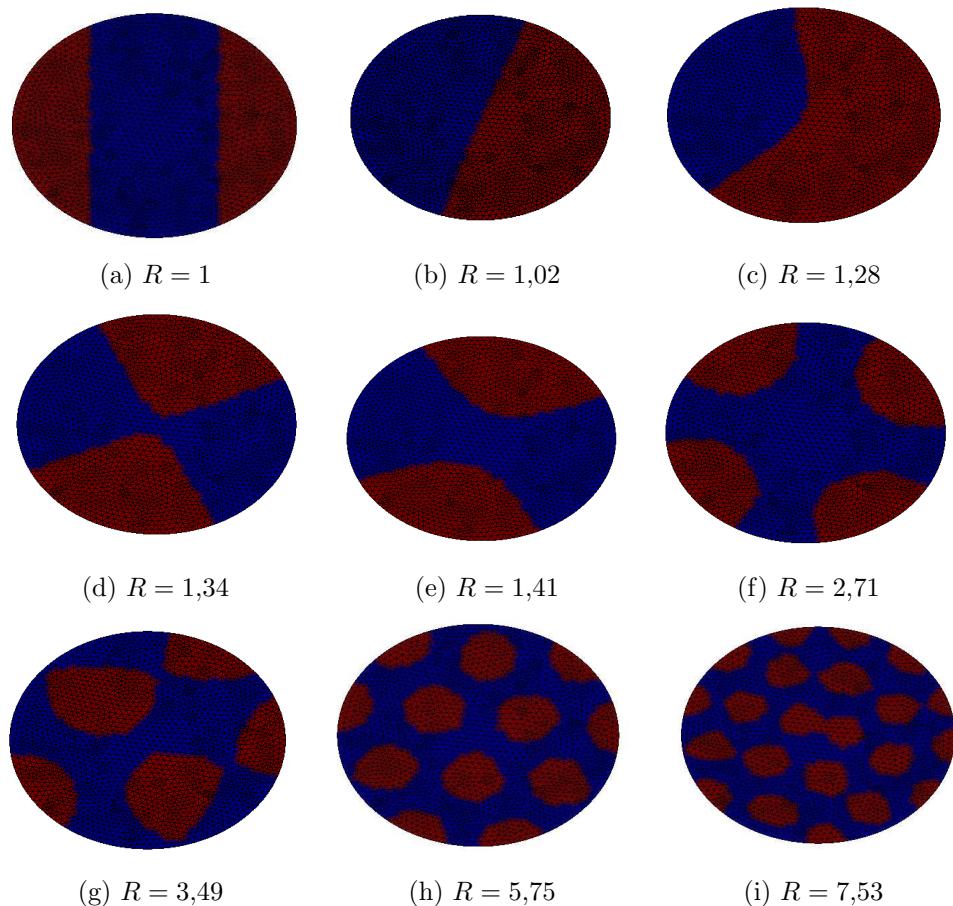


Figura 5.10: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . $\rho = 0,001$; $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 10$; $d = 10$. Se utilizó una malla no estructurada de 2109 nodos.

5.1.3. Simulaciones con parámetros $a = 0.25$; $b = 0.8$; $\gamma = 60$; $d = 23$

En las Figura 5.11, Figura 5.12 y Figura 5.13 se usó el factor de crecimiento $\rho = 0,001$. En estos casos se pudo observar que sin importar la geometría y el mallado del dominio los patrones que se formaron fueron siempre spots.

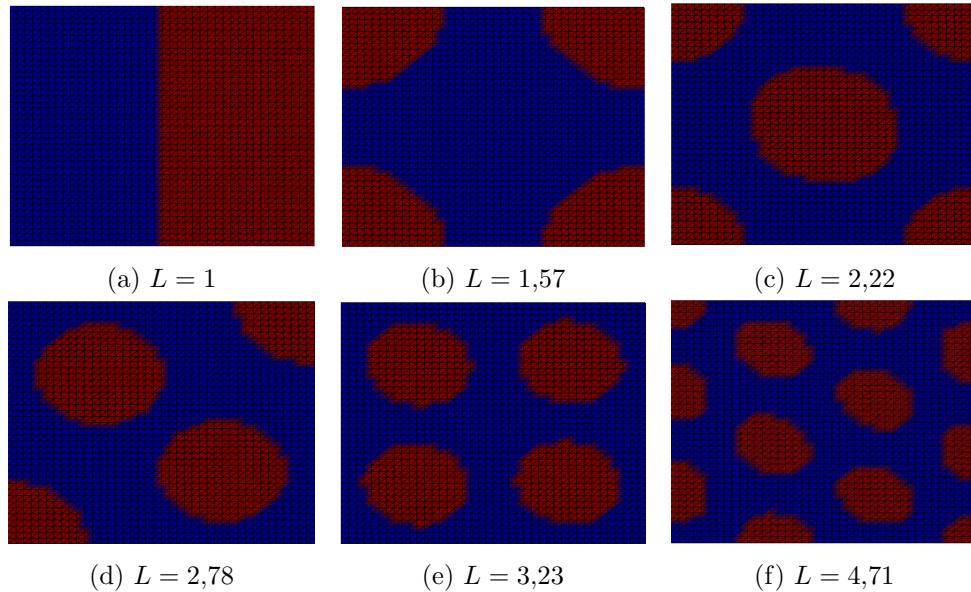


Figura 5.11: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,001$; $a = 0,25$; $b = 0,8$, $\gamma = 60$, $d = 23$. Se utilizó una malla estructurada de 1681 nodos.

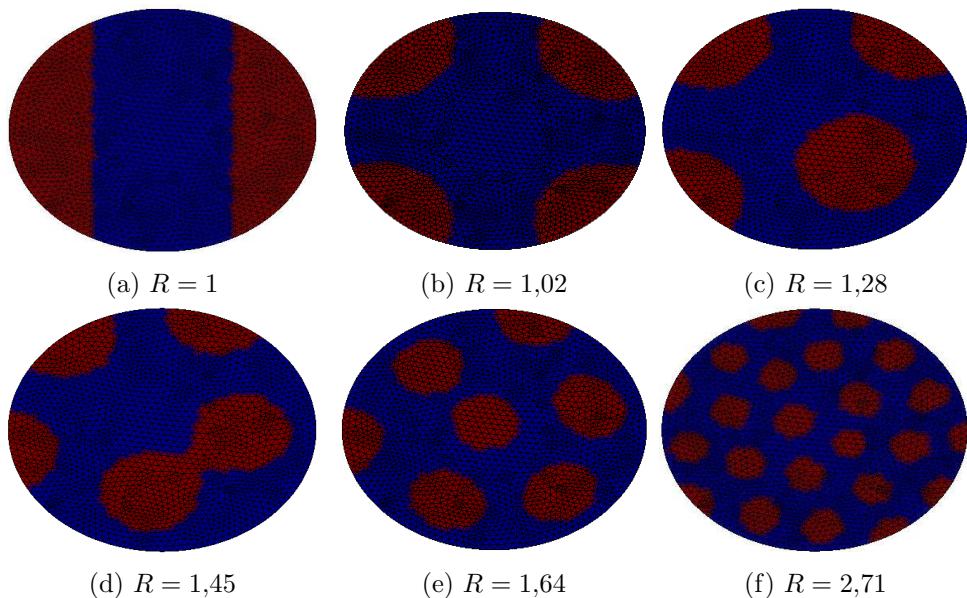


Figura 5.12: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . $\rho = 0,001$; $a = 0,25$; $b = 0,8$; $\gamma = 60$; $d = 23$. Se utilizó una malla no estructurada de 2109 nodos.

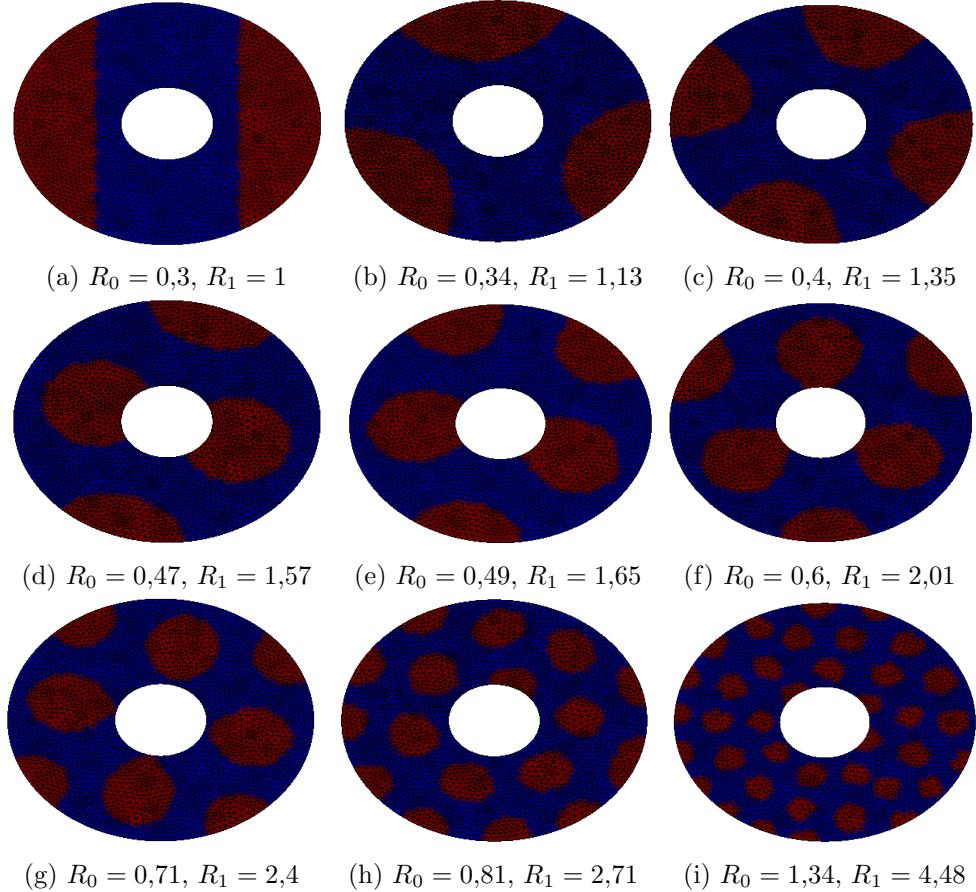


Figura 5.13: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . $\rho = 0,001$; $a = 0,25$; $b = 0,8$; $\gamma = 60$; $d = 23$. Se utilizó una malla no estructurada de 2540 nodos.

5.2. Comparación entre los experimentos con dominio móvil y fijo

En esta sección discutiremos las semejanzas entre los experimentos en dominios móviles y fijos con la reacción de Schnackenberg. Realizamos una simulación con los valores empleados en la sección 4.3.1, los cuales eran: $a = 0,1$, $b = 0,9$ $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$ y se agregó el parámetro que tiene que ver con el crecimiento $\rho = 0,001$. Por otro lado, hicimos varios experimentos en dominios fijos (con los mismos parámetros) cambiando el tamaño del dominio original y se guardaron los patrones finales alcanzados. Aclaramos que en todos los casos se usó un dominio cuadrado, al cual se le aplicó un mallado estructurado compuesto por 5000 triángulos (2601 nodos).

Se observó que en los experimentos en dominios fijos, el estado de equilibrio final era similar al alcanzado en el experimento con dominio móvil (Figura 5.14). Como ejemplo tenemos el caso de la Figura 4.5e que es similar a la Figura 5.14k. Pero hemos de aclarar que probablemente esto se debe a que la divergencia del campo tiene un valor muy pequeño (nuestros experimentos usan factores de crecimiento del orden de 10^{-3}).

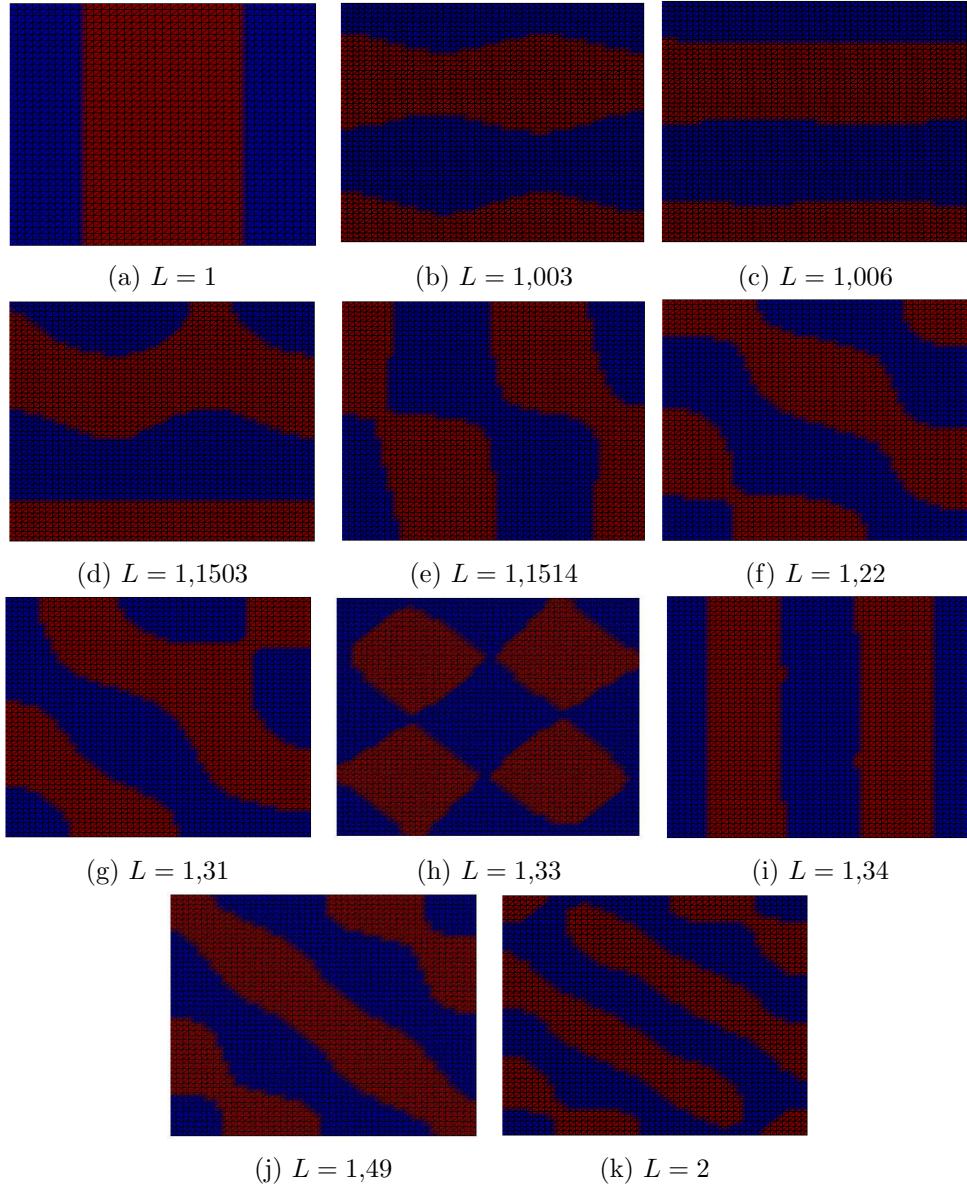


Figura 5.14: Reacción de Schnackenberg para la concentración u . $a = 0,1$; $b = 0,9$; $\gamma = 230,82$; $d = 8,6676$; $\rho = 0,001$ con malla estructurada formada por 2601 nodos.

5.3. Reacción de Thomas

Finalmente se realizaron algunas simulaciones con la reacción de Thomas con los siguientes parámetros: $\rho = 0,001$; $a = 92$; $b = 64$; $\gamma = 9$; $d = 10$; $\alpha = 1,5$; $\phi = 18,5$; $K = 0,1$; $u_0 = 9,9338$; $v_0 = 9,2892$. La Figura 5.15 es el experimento en un dominio circular y Figura 5.16 es en un dominio cuadrado. En la primera figura se puede observar que los patrones generados incluyen spots y rayas en forma de arco, mientras que en la segunda figura además de generarse spots se forman rayas verticales y oblicuas.

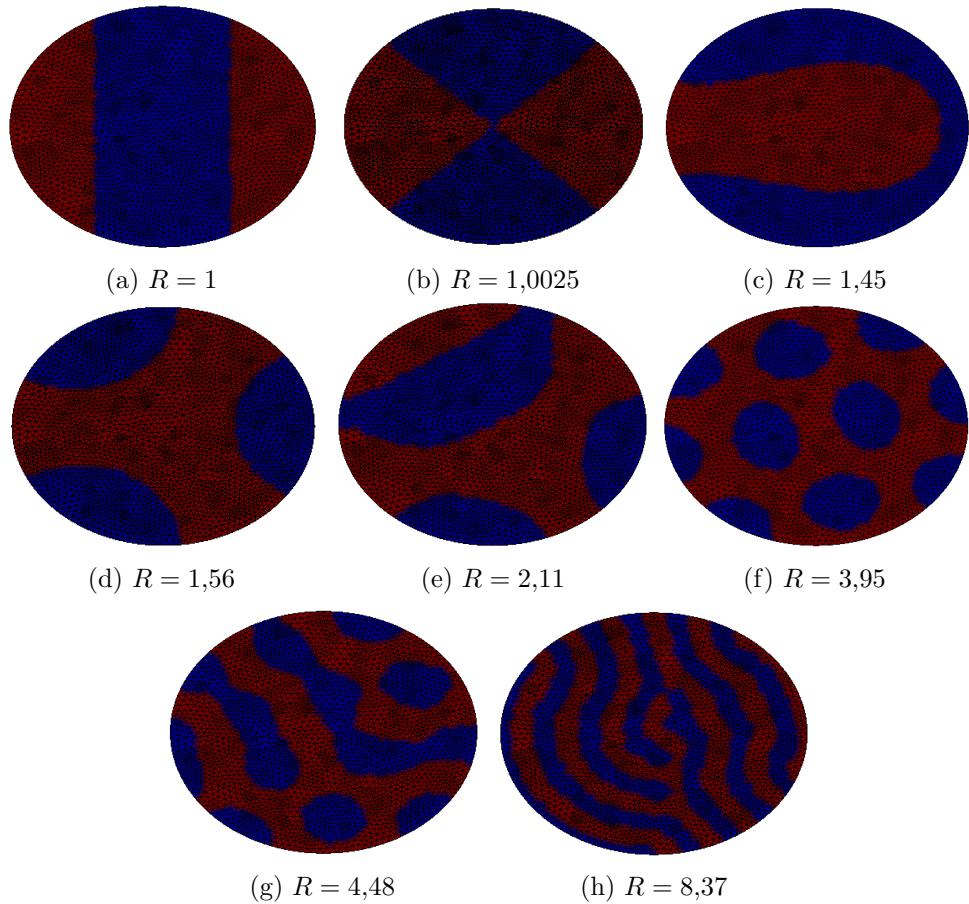


Figura 5.15: Reacción de Thomas para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,001$; $a = 92$; $b = 64$; $\gamma = 9$; $d = 10$; $\alpha = 1,5$; $\phi = 18,5$; $K = 0,1$; $u_0 = 9,9338$; $v_0 = 9,2892$. Se utilizó un malla no estructurada de 2689 nodos.

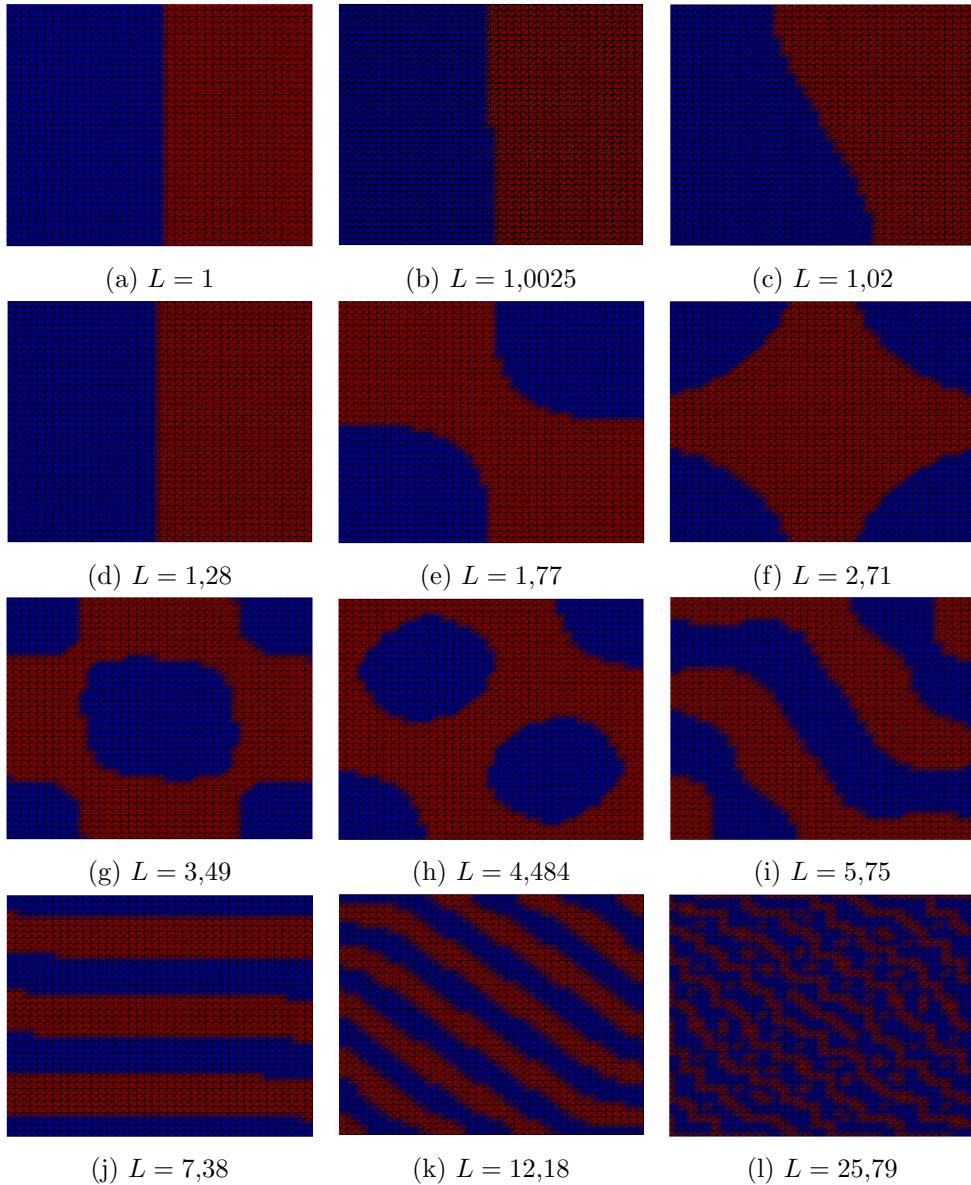


Figura 5.16: Reacción de Thomas para la concentración u . Con parámetros $\rho = 0,001$; $a = 92$; $b = 64$; $\gamma = 9$; $d = 10$; $\alpha = 1,5$; $\phi = 18,5$; $K = 0,1$; $u_0 = 9,9338$; $v_0 = 9,2892$. Se utilizó una malla estructurada de 1681 nodos.

Capítulo 6

Patrones en la naturaleza

En este anexo nos ocuparemos de mostrar ejemplos de patrones encontrados en la naturaleza. En la Figura 6.1, podemos observar algunos tipos de patrones que se manifiestan en los peces de la Familia Scatophagidae¹, nativos del océano Indo-Pacífico. Los patrones involucran spots, rayas y combinaciones de éstos.



(a) *Scatophagus argus* (Linnaeus, 1766)



(b) *Scatophagus tetracanthus* (Leopardi, 1973)



(c) *Selenotoca multifasciata* (Richardson, 1846)

Figura 6.1: Peces que pertenecen a la Familia Scatophagidae, (a) y (b) pertenecen al Género *Scatophagus*, mientras que (c) pertenece al Género *Selenotoca*

En la Figura 6.2, tenemos la imagen del pez ángel emperador *Pomacanthus imperator* (Bloch, 1787),² en su etapa juvenil y su etapa adulta. En este caso podemos apreciar que cuando el pez llega a su etapa adulta los patrones de su cuerpo pasan de ser rayas concéntricas a ser rayas horizontales, estos peces viven en los arrecifes coralinos del Océano Indo-Pacífico.

¹En la nomenclatura zoológica: Orden Perciforme, Familia Scatophagidae

²En la nomenclatura zoológica: Orden Perciforme, Familia Pomacanthidae, Género Pomacanthus



(a) Etapa juvenil

(b) Etapa adulto

Figura 6.2: El pez ángel emperador en su etapa juvenil (a) y su etapa adulta (b).

En la Figura 6.3, podemos observar algunos tipos de patrones que se manifiestan en los escarabajos de la subfamilia Lamiinae³, notemos que los patrones que aparecen tienen simetría bilateral, se puede observar también que cada ala es la imagen especular de la otra.

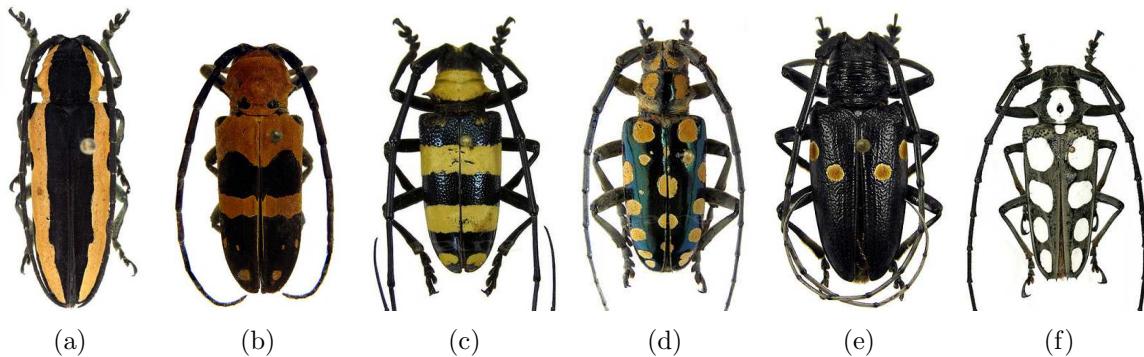


Figura 6.3: En esta figura se pueden observar los diferentes patrones que aparecen en los escarabajos de la Familia Lamiinae.(a) *Tragocephala univittipennis* (Breuning, 1974),(b)*Tragocephala jucunda* (Gory, 1835), (c)*Nemophas bicinctus* (Lansberge,1880), (d)*Anoplophora mamaea* (Schultze, 1923), (e)*Cylindrothorax balteatus* (Heath, 1903), (f)*Batocera saundersi* (Pascoe, 1866)

³En la nomenclatura zoológica: Orden Coleoptera, Familia Cerambycidae, Subfamilia Lamiinae

Agradecimientos

Esta tesis está dedicada a mis padres, que siempre me dieron más de lo que pudieron, me apoyaron y alentaron en todo momento y gracias a ellos pude hacer lo que me gusta, y por eso y por todo lo que me dan estoy muy agradecida. También quiero dedicar este trabajo a mis hermanas, que son mis compañeras y mejores amigas, y que me aguantaron siempre.

Quiero agradecer a toda la gente que me acompañó a lo largo de todos estos años, mi familia, mis amigas del colegio, mis amigas las biológas, mis amigos los matemáticos y mis amigos de la vida. Significan mucho para mí, gracias por estar siempre y por todos los momentos compartidos juntos. También quiero agradecer a mis compañeros de trabajo por apoyarme en este tiempo de tesis, a los docentes de la facultad y a todos mis compañeros.

En particular quiero agradecer a mi director de tesis, Gabriel, por la infinita paciencia que me tuvo, la buena predisposición que siempre tiene y por el apoyo que me dió en esta tesis. Muchas Gracias por todo!!!

Gracias a todos por formar parte de mi vida y haberme acompañado en todo momento. Siempre voy a estar muy agradecida. GRACIAS!!!

Bibliografía

- [T] Turing A. M. *The chemical theory of morphogenesis*. Phil. Trans. Roy. Soc 13 (1952).
- [SR] Sheth, Rushikesh, et al. *Hox genes regulate digit patterning by controlling the wavelength of a Turing-type mechanism*. Science 338.6113 (2012): 1476-1480.
- [PAO] Pao C.V. *Nonlinear parabolic and elliptic equations*. Plenum Publishing Corporation, 1992.
- [MM] Anotida M., Maini P.. *Velocity-induced numerical solutions of reaction-diffusion systems on continuously growing domains*. Journal of computational physics 225.1 (2007): 100-119.
- [MW] Anotida M., Maini P., Wathen A. *A moving grid finite element method for the simulation of pattern generation by Turing models on growing domains*. Journal of Scientific Computing 24.2 (2005): 247-262.
- [MWM] Anotida M., Maini P., Wathen A. *A moving grid finite element method applied to a model biological pattern generator*. Journal of computational physics 190.2 (2003): 478-500.
- [DE] Dziuk G., Elliott C. *Finite elements on evolving surfaces*. IMA journal of numerical analysis 27.2 (2007): 262-292.
- [JW] Jimack, P. K., Wathen A. J. *Temporal derivatives in the finite-element method on continuously deforming grids*. SIAM Journal on Numerical Analysis 28.4 (1991): 990-1003.
- [ACF] Alberty J, Carstensen C., Funken S.. *Remarks around 50 lines of Matlab: short finite element implementation*. Numerical Algorithms 20.2 (1999): 117-137.
- [MI] Murray, J. *Mathematical biology: I. An introduction*. Vol. 2. Springer, 2002.
- [MII] Murray, J. *Mathematical biology II: spatial models and biomedical applications, Interdisciplinary Applied Mathematics*. Vol. 18. Springer, 2003.
- [BR] Brenner, S., Scott R. *The mathematical theory of finite element methods*. Vol. 15. Springer, 2007.
- [EG] Ellner, S., Guckenheimer J. *Dynamic models in biology*. Princeton University Press, 2006.
- [B] Blom F. *Considerations on the spring analogy*. International Journal for Numerical Methods in Fluids 32.6 (2000): 647-668.