



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE QUÉRETARO
FACULTAD DE INGENIERÍA

ECUACIONES DE LA BIOLOGÍA MATEMÁTICA EN FEMLAB

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADA EN MATEMÁTICAS APLICADAS

PRESENTA:

EDITH DE SANTIAGO MONTOYA

DIRIGIDA POR:

DR. JOSÉ LUIS ARAGÓN VERA

SANTIAGO DE QUERÉTARO, QRO. JUNIO DE 2007

No. Adq. H71658

No. Título _____

Clas. TS

515.35

S235c

DEDICATORIA

Dedico a esta tesis **A TI**, que me has dado la fuerza para lograrlo.

AGRADECIMIENTOS

A mis distinguidos Maestros:

Modelos de valor y sabiduría, por su desinteresada y generosa transmisión del conocimiento, su inagotable entusiasmo, sus acertados consejos y sugerencias. En especial a mi asesor el Dr. José Luis Aragón Vera por su infinita paciencia.

A mis amigos y compañeros de trabajo

Porque sin su ayuda incondicional y desinteresada no hubiera podido llevar a cabo mis aspiraciones. En especial a J. Jesús por su amistad.

A mis padres

Que me han dado la oportunidad de existir, por sus consejos, su confianza y su apoyo incondicional en mis años de estudios.

A mi hermana

Por su apoyo y su incesante aliento en momentos de dificultad.

Al Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada

Por brindarme el apoyo para la realización de esta tesis.

RESUMEN

El objetivo de este trabajo es implementar en el programa FEMLAB ecuaciones matemáticas que encontramos en biología, en especial las que se conocen como ecuaciones de Turing o de reacción difusión, que son ecuaciones diferenciales parciales no lineales que describen un mecanismo de formación de patrones semejantes a los que podemos observar en la naturaleza.

Primeramente se presentan los aspectos básicos de la teoría de las ecuaciones de Turing, incluyendo el análisis lineal de estabilidad asintótica de las ecuaciones para obtener los diferentes parámetros que dan lugar a la formación de un patrón.

En segundo lugar implementamos y resolvemos algunas de estas ecuaciones con el programa FEMLAB, el cual está diseñado para modelar y simular fenómenos físicos fácilmente; nos permite introducir ecuaciones diferenciales parciales de manera independiente y personalizada o el uso de modelos ya determinados. Una gran ventaja que observaremos es que con el uso de este programa podemos utilizar diferentes geometrías en el dominio, combinarlas en los sistemas y utilizar distintas dimensiones del espacio en el mismo problema.

Finalmente, exploramos soluciones de algunas ecuaciones de Turing en dominios complejos.

Índice

RESUMEN	i
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. GENERALIDADES	1
1.2. ECUACIONES DE TURING	2
1.2.1. EJEMPLOS DE ECUACIONES DE TURING	3
1.3. OTROS SISTEMAS DE ECUACIONES QUE FORMAN PATRONES	4
1.4. ANALISIS LINEAL DE LAS ECUACIONES DE TURING ..	8
1.4.1. CONDICIONES DE ESTABILIDAD LINEAL	9
1.4.2. CONDICIONES DE INESTABILIDAD	12
1.5. PARÁMETROS DE LOS EJEMPLOS DE LA SECCION 1.2.1	16
2. LA ECUACIÓN DE BVAM	17
2.1. ANALISIS LINEAL	18
2.2. ACOPLAMIENTO DE ECUACIONES	20
3. EL PROGRAMA FEMLAB	22
3.1. MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO	22
3.1.1. FORMA DÉBIL O VARIACIONAL	23
3.1.2. MALLA DE ELEMENTOS FINITOS	25
3.1.3. NODOS O PUNTOS NODALES	25
3.1.4. FUNCIONES BASE	26
3.1.5. SOLUCIÓN APROXIMADA DEL PROBLEMA DÉBIL	27
3.2. PASOS PARA RESOLVER UNA ECUACIÓN EN FEMLAB	28
3.2.1. DIMENSION DEL ESPACIO	28
3.2.2. TIPO DE MÓDULOS	29
3.2.3. CREAR LA GEOMETRÍA	33
3.2.4. DEFINIR LOS PARÁMETROS FÍSICOS	35
3.2.5. INICIALIZAR EL MALLADO DE ELEMENTOS FINITOS	39
3.2.6. RESOLVER LA ECUACIÓN	39
3.2.7. RESULTADOS Y VISUALIZACIÓN	41

4. IMPLEMENTACIÓN	42
4.1. ECUACIÓN DE BVAM EN FORMA DE COEFICIENTE	42
4.2. ECUACIÓN DE BVAM ACOPLADA EN FORMA DE COEFICIENTE	49
4.3. ECUACIÓN DE BVAM EN FORMA DÉBIL	51
4.4. CONDICIONES INICIALES	53
5. RESULTADOS	55
5.1. DOMINIOS SENCILLOS	55
5.2. DOMINIOS COMPLEJOS	64
6. CONCLUSIONES	73
7. BIBLIOGRAFÍA	74

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1. GENERALIDADES

En todo nuestro alrededor podemos observar una diversidad de formas y patrones biológicos, sin embargo, saber como toma forma la materia viva es una de las grandes interrogantes de la biología. Cuando una célula es fertilizada y da lugar a un embrión en vías de desarrollo, el problema crucial es cómo la masa homogénea de las células es espacialmente organizada a fin de que el proceso de desarrollo progrese. Es importante también el hecho de que cada conjunto de células tienen una función ya determinada, es decir, cada una va a formar una parte del individuo, si bien los genes juegan un papel importante, un estudio de genética no es suficiente para ayudarnos a entender cómo las características fisicoquímicas del material embrionario interactúan, formando complejos patrones espacio-temporales. En biología el hecho de saber como toma forma y se desarrolla la materia viva, es un fenómeno que se le conoce como morfogénesis,

En un intento de establecer una teoría de la morfogénesis, los biólogos desarrollaron la idea de que un embrión estaba sujeto a un "campo embriológico" que dictaba el patrón al que tenía que evolucionar, sin embargo no se especifica el origen de ese campo. El matemático inglés Alan M. Turing, fue quien en 1952, propuso que el origen de este campo embriológico se encontraba en una variación de concentraciones químicas. Turing propuso un sistema de dos ecuaciones de reacción-difusión no lineales, para modelar el movimiento espacio-temporal de la concentración de dos diferentes sustancias químicas, a las cuales se les denomina morfógenos. Turing mostró que el equilibrio estable de un sistema puede ser perturbado con difusión, a este proceso se le conoce como inestabilidad controlada por difusión. En este caso uno de los morfógenos juega el papel de activador, mientras el otro juega el papel de inhibidor y lo que sucede es que cuando el activador incrementa, el inhibidor se difunde más rápidamente que

el activador. Esto crea regiones de concentración del inhibidor en medio de una región donde la concentración del activador es más alta. Para entender mejor este mecanismo, Murray[18] nos da un ejemplo: Un campo seco que se está quemando, pero que además contiene saltamontes. En este modelo, los saltamontes sudan en la presencia de calor, y a la vez con el sudor de los saltamontes el campo se humedece. El fuego representa "el activador" y los saltamontes "el inhibidor". Si se prende fuego aleatoriamente en varias partes el campo seco y este se desplaza por el campo, los saltamontes se moverán más rápidamente que el fuego e inhibirán pequeñas regiones donde el fuego no pueda quemar debido a su sudor, que mojó el pasto. Por consiguiente el resultado será un campo donde habrá de manera inhomogénea manchas donde el fuego no quemó.

Para ilustrar este suceso tenemos la siguiente figura

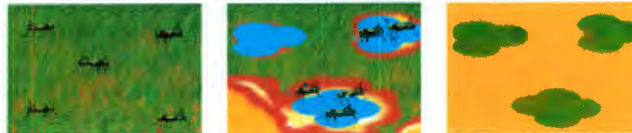


Figura 1

El problema de la morfogenesis es muy complejo y de largo alcance, a pesar de esto, las ecuaciones de Turing o ecuaciones de reacción-difusión constituyen un importante avance en el estudio de dicho problema, ya que describen por primera vez un mecanismo capaz de generar patrones espaciales.

1.2. ECUACIONES DE TURING

Uno de los patrones espaciales más complicados, puede ser el que resulta de la interacción de dos químicos. Turing, mostró que las reacciones químicas, especialmente estando combinadas con difusión, pueden producir patrones espacio-temporales muy complejos. El estudio de formación de un patrón en los sistemas de reacción-difusión se basan en estudios analíticos o numéricos de modelos matemáticos y sistemas químicos experimentales. Estos modelos son expresados en términos de ecuaciones diferenciales parciales.

De manera general, el modelo de Turing que describe la variación de dos concentraciones químicas U y V , debido a un mecanismo de reacción-difusión, tiene la siguiente forma

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= D_U \nabla^2 U + f(U, V) \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= D_V \nabla^2 V + g(U, V)\end{aligned}\quad (1.1)$$

donde $U(\mathbf{x}, t)$ y $V(\mathbf{x}, t)$ son dos concentraciones de sustancias químicas, llamadas morfogenos, en la posición espacial \mathbf{x} y en el tiempo t . D_U, D_V son los coeficientes de difusión para U y V respectivamente. f y g definen la cinética de la reacción, que es no lineal.

El estado estacionario uniforme es aquel en el que para U_0 y V_0 tenemos $f(U_0, V_0) = g(U_0, V_0) = 0$ y que U_0, V_0 cumplan las condiciones de frontera. Turing mostró que, en ausencia de difusión, es decir cuando $D_U = D_V = 0$, el estado estacionario uniforme tiende a ser linealmente estable bajo ciertas condiciones, y se vuelve inestable en presencia de difusión. En los sistemas de Turing, la formación de patrones se debe a la perturbación del estado estacionario por la difusión y a esto se le llama inestabilidad controlada por difusión.

Para poder modelar este tipo de ecuaciones, vamos a considerar nuestro dominio Ω , condiciones de frontera de flujo cero y condiciones iniciales aleatorias. Las condiciones de frontera son de flujo cero, para evitar que la formación del patrón sea impuesta por estas condiciones.

1.2.1. EJEMPLOS DE ECUACIONES DE TURING

Los términos f y g en (1,1) definen la cinética química del proceso y se han propuesto diferentes modelos para la forma no lineal de estas funciones. Algunos de ellos son:

1. Modelo de Bruselator

Fue desarrollado por Ilya Prigogine[10], en los años sesenta en la universidad de Bruselas y esta dado por las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}U_t &= D_u \nabla^2 U + A - (B + 1)U + U^2 V \\ V_t &= D_v \nabla^2 V + BU - U^2 V,\end{aligned}\quad (1.2)$$

donde A denota el valor de la fuente y B es el parámetro de la bifurcación. U y V son las sustancias químicas involucradas, U es el activador y V es el inhibidor, D_u, D_v son los coeficientes de difusión, y $D_u < D_v$.

2. Modelo de Gray-Scott

Este modelo fue desarrollado por P. Gray y S. K.[10], en la Universidad de Leeds en los años ochenta. El modelo fue de mucha importancia dado que describe una reacción auto-catalítica en un flujo continuo isotérmico de un tanque y lo describen las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned} U_t &= D_u \nabla^2 U + -UV^2 + F(1 - U) \\ V_t &= D_v \nabla^2 V + U^2V - (F + K)V \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde U y V son los productos químicos, D_u y D_v son los coeficientes de difusión de U y V respectivamente F y K son los parámetros de reacción.

3. Modelo de Lengyel -Epstein

Después de la primera observación experimental de un patrón Turing en 1989 en la reacción química CIMA (chlorite-iodide malonic acid), Istvan Lengyel e Irving Epstein[10] mostraron que el fenómeno de formación de patrón en el sistema CIMA podrían ser aproximado por sólo dos ecuaciones normalizadas de movimiento y son

$$\begin{aligned} U_t &= \frac{1}{\sigma} \nabla^2 U + \frac{1}{\sigma} a - \frac{1}{\sigma} U - \frac{4}{\sigma} \frac{UV}{1+U^2} \\ V_t &= d \nabla^2 V + bU - b \frac{UV}{1+U^2} \end{aligned} \quad (1.4)$$

donde a, b, d y s son parámetros, los cuales pueden ser ajustados, basándose en la reacción experimental. U es la concentración normalizada del ión iodide y V es la concentración normalizada del ión chlorite, es decir, son las sustancias involucradas en la reacción.

1.3. OTROS SISTEMAS DE ECUACIONES QUE FORMAN PATRONES

1. Modelos fenomenológicos

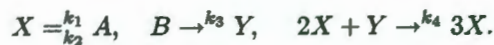
En este tipo de modelos, los términos cinéticos son tomados tal que uno de los químicos es un activador y el otro un inhibidor. Un ejemplo es el modelo de Gierer-Meinhardt[14], cuyo sistema de reacción difusión esta dado por:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla^2 u + \gamma \left(a - bu + \frac{u^2}{v(1 + ku^2)} \right) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d\nabla^2 v + \gamma(u^2 - v),\end{aligned}\tag{1.5}$$

donde $u(x, y, t)$ es la concentración de el activador y $v(x, y, t)$ es la concentración del inhibidor, a, b, d y γ , son parámetros positivos y k es la medida de saturación de las concentraciones.

2. Modelos hipotéticos

Se derivan de una propuesta hipotética de series de reacciones químicas. Por ejemplo, Schnakenberg[14] propuso una serie de reacciones autocatalíticas trimoleculares envolviendo dos químicos.



Usando las leyes de acción de masa y denotando a las concentraciones de X, Y, A y B por u, v, a y b , respectivamente, tenemos

$$\begin{aligned}f(u, v) &= k_2 a - k_1 u + k_4 u^2 v \\ g(u, v) &= k_3 b - k_4 u^2 v,\end{aligned}$$

donde k_1, \dots, k_4 son constantes. Asumiendo que hay una abundancia de A y B , a y b pueden ser consideradas aproximadamente constantes.

En una dimensión la forma de este sistema es:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla^2 u + \gamma(a - u + u^2 v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d\nabla^2 v + \gamma(b - u^2 v),\end{aligned}\tag{1.6}$$

donde a, b, d y γ son parámetros positivos.

3. Modelos Empíricos

a). Modelo de Thomas

Esta basado en un mecanismo de inhibicion-sustracción, involucrando la reacción de ácido urico (concentración u) con oxígeno (concentración v), los cuales reaccionan en la presencia de la enzima Uricase, con proporción empírica $\frac{V_m uv}{K_m + u + \frac{u^2}{K_s}}$. Las cinéticas que se proponen son:

$$\begin{aligned} f(u, v) &= \alpha(u_0 - u) - \frac{V_m uv}{K_m + u + \frac{u^2}{K_s}} \\ g(u, v) &= \beta(v_0 - v) - \frac{V_m uv}{K_m + u + \frac{u^2}{K_s}}, \end{aligned}$$

donde α, β, V_m, K_m y K_s son constantes positivas.

Podemos escribir este sistema en una dimensión como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \nabla^2 u + \gamma \left(a - u + \frac{\rho uv}{1 + u + Ku^2} \right) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d\nabla^2 v + \gamma \left(\alpha b - \alpha v - \frac{\rho uv}{1 + u + Ku^2} \right), \end{aligned} \quad (1.7)$$

donde $a, b, d, \gamma, \alpha, \rho$ y K son parámetros positivos[14].

b). Modelo BVAM

El modelo Barrio-Varea-Aragón-Maini (BVAM)[10], es un modelo de Turing, pero no esta basado en reacciones químicas, y tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= D\delta\nabla^2 u + \alpha u(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \delta\nabla^2 v + \beta v \left(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} uv \right) + u(\gamma + r_2 v), \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde α, β, γ , son parámetros, δ es el radio entre los coeficientes de difusión r_1, r_2 , corresponden al término cúbico y cuadrático. En el capítulo 2 estudiaremos en detalle este modelo.

4. Modelos de movimientos celulares

Estos modelos involucran reaccion y difusion, e incluyen un término advectivo introducido por la Quimotaxis. El modelo típico tiene esta forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= D_n \nabla^2 n - \nabla \cdot (X(u)n \nabla u) + f(n, u) \\ \frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \nabla^2 u + g(n, u), \end{aligned} \quad (1.9)$$

donde $n(x, t), u(x, t)$ denotan la densidad celular y la concentración de la reacción química respectivamente en la posición x y el tiempo t . D_n, D_u son coeficientes de difusión f y g son terminos que incorporan la producción y degradación y $X(u)$ es la sensibilidad quimotáctica.

5. Agregación de las células en moldes de cal

Se basa en el modelo continuo de Höfer[14]. El modelo no dimensionalizado toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mu \nabla n - \chi(v)n \nabla u) \\ \frac{\partial u}{\partial t} &= \lambda [\phi(n)f_1(u, v) - (\phi(n) + \delta)f_2(u)] + \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= -g_1(u)v + g_2(u)(1 - v)\end{aligned}\tag{1.10}$$

donde n, u y v denotan la densidad celular, la concentración extracelular CAMP y la fracción de los receptores activos de CAMP respectivamente.

6. Sistema de reacción difusión acoplado a un movimiento celular

A diferencia de los patrones en la piel de los mamíferos, los cuales simplemente aumentan con el crecimiento del cuerpo, los patrones de ciertos peces cambia cualitativamente con el crecimiento del dominio, un claro ejemplo de esto es el patrón en las rayas del pez Angel (*Pomacanthus Imperator*). Ya que conforme el pez crece, las rayas se separan, hasta que llegan a estar dos veces mas separadas que cuando son jóvenes. Sin embargo, aparecen nuevas rayas entre las existentes, de tal manera que se restaura el espaciamiento original del interrayado. Las nuevas rayas son más delgadas que las rayas existentes pero ellas gradualmente se ensanchan.

Kondo y Asai (1995) consideraron un modelo de reacción difusión sobre un dominio de crecimiento unidimensional, y mostraron que este exhibía un modo-doble de comportamiento similar al que observaron en el *Pomacanthus*, pero hubo un pequeño inconveniente: este modelo predecía que las rayas que surgen para que la separación entre las rayas se conserve tenían la misma anchura que las que ya existían.

Recientemente, Painter (1999), consideró un modelo de Turing generalizado para este fenómeno sobre un dominio de dos dimensiones el cual representa la superficie del

pez. En este modelo, el patrón de pigmentación se asume al surgimiento del movimiento celular. Se considera un típico sistema de reacción difusión acoplado a un movimiento celular, cuya ecuación es de la siguiente forma:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot nv = D_n \nabla^2 n - \nabla \cdot [\chi_u(u)n \nabla u + \chi_v(v)n \nabla v] + n(r_x + r_y) \quad (1.11)$$

donde $v = (r_x xi + r_y yj)$ (i, j vectores canónicos) es el campo de velocidades uniforme generado por el crecimiento, r_x y r_y son los rangos de crecimiento en la dirección x y y respectivamente, u y v son las concentraciones de los químicos en el sistema de reacción difusión, n es la densidad de pigmentación de las celula y $\chi_u(u)$ y $\chi_v(v)$ son la sensibilidad quimotactica.

Este sistema puede producir el modo doble observado en el pomacanthus, con las rayas insertadas mas estrechas que las ya existentes.

1.4. ANALISIS LINEAL DE LAS ECUACIONES DE TURING

Como ya se mencionó anteriormente, las ecuaciones de Turing son sistemas de reacción-difusión. Se dice que estos sistemas tienen inestabilidad controlada por difusión, o también llamada inestabilidad de Turing, si el estado estacionario homogéneo es estable a pequeñas perturbaciones en ausencia de difusión, pero inestable a pequeñas perturbaciones espaciales en presencia de difusión.

La inestabilidad de Turing es lo que, de manera espontánea, da origen a los patrones estacionarios, teniendo una condición inicial aleatoria. Un rasgo notable de los sistemas de Turing es que las características de los patrones resultantes no dependen de factores externos.

Ahora bien, el análisis lineal se realiza debido a que las ecuaciones de Turing no se pueden resolver de manera exacta, por lo que necesitamos encontrar las condiciones necesarias y suficientes para que se de la inestabilidad controlada por difusión de el estado estacionario, y así podamos obtener nuestro modelo.

Para plantear el problema, consideramos un dominio Ω , condiciones de frontera de flujo cero(condiciones de Neumann) y condiciones iniciales dadas. Así el problema lo escribimos como:

$$\begin{aligned} U_t &= D_U \nabla^2 u + \gamma f(U, V) \\ V_t &= D_V \nabla^2 u + \gamma g(U, V) \end{aligned}$$

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0 \quad (1.12)$$

$$U(r, 0) \text{ y } V(r, 0) \text{ dadas; } r \in \partial B,$$

donde ∂B es cerrada y acotada, B es el dominio de reacción-difusión, y \mathbf{n} es el vector normal a la frontera.

La razón de tomar condiciones de frontera de flujo cero es, principalmente, que estamos interesados en auto-organización de patrones; las condiciones de cero flujo permite que no haya influencia externa. Si nosotros impusieramos condiciones de frontera fijas sobre U y V el patrón espacial podría ser una consecuencia directa de las condiciones de frontera.

1.4.1. CONDICIONES DE ESTABILIDAD LINEAL

Dado que hablamos de inestabilidad controlada por difusión, nos interesa la inestabilidad lineal del estado estacionario que es solamente espacialmente dependiente. En ausencia de cualquier variación espacial el estado estacionario homogéneo debe ser linealmente estable, y encontraremos las condiciones para que esto suceda.

Sin variación espacial tenemos que (1,12) toma la siguiente forma.

$$\begin{aligned} U_t &= \gamma f(U, V) \\ V_t &= \gamma g(U, V). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Ahora tomamos (U_0, V_0) como el estado estacionario, entonces

$$\begin{aligned} f(U_0, V_0) &= 0 \\ g(U_0, V_0) &= 0, \end{aligned} \quad (1.14)$$

y definimos

$$\begin{aligned} \mu &= U - U_0 \\ v &= V - V_0. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Con esto la función f en (1,13) puede escribirse como:

$$f(U, V) = f(\mu + U_0, v + V_0).$$

Usando el teorema de Taylor para tener una aproximación de primer orden:

$$\begin{aligned}
 f(\mu + U_0, v + V_0) &= f(U_0, V_0) + \sum_{i=1}^2 h_i \frac{\partial}{\partial x_i} f(U_0, V_0) + R_1 [(U_0, V_0), (\mu, v)] \\
 &= f(U_0, V_0) + \mu \frac{\partial f}{\partial \mu} \Big|_{(U_0, V_0)} + v \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(U_0, V_0)} + R_1 [(U_0, V_0), (\mu, v)],
 \end{aligned}$$

se tiene que

$$f(U, V) = \mu \frac{\partial f}{\partial \mu} \Big|_{(U_0, V_0)} + v \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(U_0, V_0)} + R_1 [(U_0, V_0), (\mu, v)]. \quad (1.16)$$

De la misma manera para la función g en (1,13) :

$$g(U, V) = \mu \frac{\partial g}{\partial \mu} \Big|_{(U_0, V_0)} + v \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(U_0, V_0)} + R_1 [(U_0, V_0), (\mu, v)]. \quad (1.17)$$

Ahora calculamos U_t y V_t :

$$\begin{aligned}
 U_t &= \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial(\mu + U_0)}{\partial t} = \frac{\partial \mu}{\partial t} \\
 V_t &= \frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial(v + V_0)}{\partial t} = \frac{\partial v}{\partial t}.
 \end{aligned} \quad (1.18)$$

Sustituyendo (1,16), (1,17) y (1,18) en (1,13) se obtiene el sistema linealizado

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \mu}{\partial t} &= \gamma \left(\mu \frac{\partial f}{\partial \mu} \Big|_{(U_0, V_0)} + v \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_{(U_0, V_0)} \right) \\
 \frac{\partial v}{\partial t} &= \gamma \left(\mu \frac{\partial g}{\partial \mu} \Big|_{(u_0, v_0)} + v \frac{\partial g}{\partial v} \Big|_{(u_0, v_0)} \right),
 \end{aligned} \quad (1.19)$$

que, en forma matricial, queda como

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mu}{\partial t} \\ \frac{\partial v}{\partial t} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \mu} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial \mu} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix}_{(u_0, v_0)} \begin{pmatrix} \mu \\ v \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

Sean ahora

$$w = \begin{pmatrix} \mu \\ v \end{pmatrix}$$

y

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \mu} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial \mu} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix}_{(u_0, v_0)}.$$

Entonces (1,20) se puede escribir como

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \gamma A w. \quad (1.21)$$

La solución de esta ecuación es de la forma $\alpha e^{\lambda t}$, es decir

$$w = \alpha e^{\lambda t}, \quad (1.22)$$

donde λ es el eigenvalor de la matriz A .

Si separamos a λ en su parte real y en su parte imaginaria tenemos

$$w = \alpha e^{(\text{Re } \lambda + i \text{Im } \lambda)t} = \alpha [e^{(\text{Re } \lambda)t} e^{i(\text{Im } \lambda)t}]$$

$e^{i(\text{Im } \lambda)t}$ es un término oscilatorio, entonces, para que el estado estacionario, $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, sea linealmente estable necesitamos que $\text{Re } \lambda < 0$, para que cuando $t \rightarrow \infty$ $w \rightarrow 0$. Como sabemos por (1,22) que $w = \alpha e^{\lambda t}$, entonces

$$w_t = \alpha \lambda e^{\lambda t}. \quad (1.23)$$

Al sustituir (1,22) y (1,23) en (1,21) nos queda

$$\alpha \lambda e^{\lambda t} = \gamma A \alpha e^{\lambda t}, \quad (1.24)$$

por lo tanto

$$\lambda - \gamma A = 0. \quad (1.25)$$

Los eigenvalores λ son soluciones de

$$\begin{aligned} |\lambda I - \gamma A| &= \left| \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \gamma f_\mu & \gamma f_\nu \\ \gamma g_\mu & \gamma g_\nu \end{pmatrix} \right| \\ &= \begin{vmatrix} \lambda - \gamma f_\mu & -\gamma f_\nu \\ -\gamma g_\mu & \lambda - \gamma g_\nu \end{vmatrix} \\ &= \lambda^2 - \lambda \gamma g_\nu - \gamma f_\mu \lambda + \gamma^2 f_\mu g_\nu - \gamma^2 f_\nu g_\mu = 0. \end{aligned}$$

Resolviendo

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{\gamma(g_\nu + f_\mu) \pm \sqrt{\gamma^2(g_\nu + f_\mu)^2 - 4\gamma^2(f_\mu g_\nu - f_\nu g_\mu)}}{2} \\ \lambda &= \frac{\gamma}{2} \left[(g_\nu + f_\mu) \pm \sqrt{(g_\nu + f_\mu)^2 - 4(f_\mu g_\nu - f_\nu g_\mu)} \right]. \end{aligned}$$

Para tener estabilidad lineal concluimos arriba que $\text{Re } \lambda < 0$, entonces $g_v + f_\mu < 0$ y $f_\mu g_v - f_v g_\mu > 0$.

Por lo tanto, tenemos que las condiciones para estabilidad lineal son

$$\text{tr } A = g_v + f_\mu < 0 \quad \text{y} \quad |A| = f_\mu g_v - f_v g_\mu > 0. \quad (1.26)$$

1.4.2. CONDICIONES DE INESTABILIDAD

Ya vimos que cuando no existe dependencia espacial tenemos la estabilidad. Ahora vamos a considerar el sistema completo de reacción difusión

$$\begin{aligned} U_t &= D_U \nabla^2 u + \gamma f(U, V) \\ V_t &= D_V \nabla^2 v + \gamma g(U, V) \end{aligned} \quad (1.27)$$

linealizando alrededor del estado estacionario

$$w = \begin{pmatrix} U - U_0 \\ V - V_0 \end{pmatrix},$$

tenemos

$$w_t = \gamma A w + D \nabla^2 w, \quad (1.28)$$

$$\text{con } D = \begin{pmatrix} D_U & 0 \\ 0 & D_V \end{pmatrix}.$$

Para resolver este sistema de ecuaciones, usamos separación de variables. Primero definimos $W(r)$ como la solución independiente del tiempo del eigenvalor, problema conocido como la ecuación de Helmholtz.

$$\begin{cases} \nabla^2 W + k^2 W = 0, & r \in \Omega \\ (\mathbf{n} \cdot \nabla) W = 0, & r \in \partial\Omega \end{cases} \quad (1.29)$$

donde k es el eigenvalor y representa el número de onda para el dominio Ω . La solución para la parte que depende del tiempo de la ecuación de primer orden es $e^{\lambda t}$.

Por lo tanto, buscamos soluciones para el sistema (1,28) de la forma

$$w(r, t) = \sum_k c_k e^{\lambda t} W_k(r), \quad (1.30)$$

donde $W_k(r)$ es la eigenfunción correspondiente al número de onda k , y cada eigenfunción W_k satisface las condiciones de flujo cero. Cada c_k es determinada por la expansión

de Fourier de las condiciones iniciales en terminos de $W_k(r)$. λ es el eigenvalor el cual determina el crecimiento temporal.

Sustituyendo (1,30) en (1,28) tenemos que

$$\begin{aligned}\sum_k \lambda c_k e^{\lambda t} W_k &= \gamma A \sum_k c_k e^{\lambda t} W_k + D \nabla^2 \sum_k c_k e^{\lambda t} W_k \\ \lambda W_k &= \gamma A W_k + D \nabla^2 W_k.\end{aligned}$$

La cual, por (1,29), la escribimos como

$$\lambda W_k = \gamma A W_k - D k^2 W_k \quad (1.31)$$

Las soluciones no triviales de (1,31) ocurren solo si

$$|\lambda I - \gamma A + D k^2| = 0. \quad (1.32)$$

Sustituyendo A y D tenemos:

$$\begin{aligned}|\lambda I - \gamma A + D k^2| &= \left| \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \gamma f_\mu & \gamma f_\nu \\ \gamma g_\mu & \gamma g_\nu \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D_U k^2 & 0 \\ 0 & D_V k^2 \end{pmatrix} \right| \\ &= \left| \begin{pmatrix} \lambda - \gamma f_\mu + D_U k^2 & -\gamma f_\nu \\ -\gamma g_\mu & \lambda - \gamma g_\nu + D_V k^2 \end{pmatrix} \right| = 0.\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(D_U + D_V) - \gamma(g_\nu + f_\mu)] + k^4 D_U D_V - \gamma(f_\mu D_V + D_U g_\nu)k^2 + \gamma^2 |A| = 0. \quad (1.33)$$

Sea ahora

$$h(k^2) = k^4 D_U D_V - \gamma(f_\mu D_V + D_U g_\nu)k^2 + \gamma^2 |A|,$$

sustituyendo en (1,33) tenemos:

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(D_U + D_V) - \gamma(g_\nu + f_\mu)] + h(k^2) = 0. \quad (1.34)$$

Resolviendo para λ , obtenemos que

$$\lambda_{1,2} = \frac{-[k^2(D_U + D_V) - \gamma(g_\nu + f_\mu)] \pm \sqrt{[k^2(D_U + D_V) - \gamma(g_\nu + f_\mu)]^2 - 4h(k^2)}}{2}. \quad (1.35)$$

Entonces, para que el estado estacionario se vuelva inestable al momento de que tenemos perturbaciones espaciales necesitamos que

$$\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$$

para $k \neq 0$ y esto sucede si el coeficiente de λ es negativo, o si $h(k^2) < 0$. Pero sabemos que

$$k^2(D_U + D_V) > 0, \quad \text{para todo } k \neq 0,$$

y de las condiciones de estabilidad tenemos que $g_v + f_\mu < 0$, por lo que

$$k^2(D_U + D_V) - \gamma(g_v + f_\mu) > 0.$$

Entonces, de (1,30) vemos que para tener inestabilidad, necesitamos que $\operatorname{Re} \lambda(k) > 0$. Para esto, $h(k^2)$ debe ser negativo. Ahora, se tiene que

$$h(k^2) = k^4 D_U D_V - \gamma(f_\mu D_V + D_U g_v) k^2 + \gamma^2 |A|.$$

Sabemos, por condiciones de estabilidad que $|A| > 0$ y, dado que, $k^4 D_U D_V$ es positivo, la única posibilidad para que $h(k^2) < 0$ es que $\gamma(f_\mu D_V + D_U g_v) k^2$ sea positivo. Es decir la condición buscada es

$$f_\mu D_V + D_U g_v > 0. \quad (1.36)$$

Pero $f_\mu + g_v < 0$, lo que implica que D_V o $D_U \neq 1$. Además f_μ y g_v deben ser de signos opuestos.

Ahora la condición (1,36) es necesaria pero no suficiente, porque también debemos pedir que el mínimo de $h(k^2)$, el cual denotaremos como h_{\min} sea negativo, es decir que $h_{\min} < 0$.

Para obtener el mínimo, derivamos h con respecto a k^2 y obtenemos:

$$\begin{aligned} h_{\min} &= \gamma^2 \left[|A| - \frac{1}{4} \frac{(f_\mu D_V + D_U g_v)^2}{D_U D_V} \right], \\ k^2 &= \frac{\gamma(f_\mu D_V + D_U g_v)}{2D_U D_V} = k_{\min}^2, \end{aligned}$$

entonces la condición para que $h(k^2) < 0$ es

$$|A| < \frac{1}{4} \frac{(D_V f_\mu + D_U g_v)^2}{D_U D_V}. \quad (1.37)$$

En conclusión, para que el estado estacionario se vuelva inestable a pequeñas perturbaciones se deben cumplir las siguientes condiciones.

$$f_{\mu}D_V + D_Ug_v > 0,$$

$$\frac{1}{4} \frac{(D_Vf_{\mu} + D_Ug_v)^2}{D_UD_V} > |A|.$$

También podemos obtener una estimación del número de onda más inestable y el valor crítico del parámetro de bifurcación considerando $h_{\min} = 0$.

Como consecuencia, el número de onda crítico está dado por[10]:

$$k_c^2 = \gamma \left(\frac{D_Vf_u + D_Ug_v}{2D_UD_V} \right) = \gamma \sqrt{\frac{f_Ug_V - f_Vg_U}{D_UD_V}}, \quad (1.38)$$

y la longitud de onda del patrón está definida por

$$\omega = \frac{2\pi}{k_c}. \quad (1.39)$$

1.5 RESUMEN DEL ANÁLISIS

Después de haber realizado un análisis de estabilidad lineal estándar, mostramos que la inestabilidad controlada por difusión de un estado estacionario uniforme del sistema (1,12) ocurre si las siguientes condiciones se cumplen:

$$g_v + f_{\mu} < 0, \quad (\text{I})$$

$$f_{\mu}g_v - f_vg_{\mu} > 0, \quad (\text{II})$$

$$f_{\mu}D_V + D_Ug_v > 0, \quad (\text{III})$$

$$\frac{1}{4} \frac{(D_Vf_{\mu} + D_Ug_v)^2}{D_UD_V} > |A|, \quad (\text{IV})$$

donde las derivadas parciales son evaluadas en el estado estacionario (U_0, V_0) . Las desigualdades I – IV definen un dominio de parámetros, que llamamos espacio de Turing.

En este espacio se busca el valor de los parámetros que vamos a utilizar para la simulación de patrones.

1.5. PARÁMETROS DE LOS EJEMPLOS DE LA SECCION 1.2.1

En seguida damos los parámetros que satisfacen las condiciones de inestabilidad controlada por difusión de algunos ejemplos de ecuaciones de reacción-difusión. Para mayores detalles en la deducción, consultar Ref[10].

1. Modelo de Brusselator

El estado estacionario de este modelo es dada por $(U_0, V_0) = (A, \frac{B}{A})$. el valor crítico para la bifurcación de Turing esta dado por $B_c^T = \left[1 + A\sqrt{\frac{D_u}{D_v}}\right]^2$ y el numero de onda, para que halla inestabilidad es $k_c^2 = \frac{A}{\sqrt{D_u D_v}}$.

2. Modelo de Gray-Scott

El estado estacionario del modelo esta dado por $(U_0, V_0) = \left(\frac{1 \pm \sqrt{1 - 4(F+K)^2/F}}{2}, \frac{F(1-U_0)}{F+K}\right)$.

3. Modelo de Lengyel -Epstein

El estado estacionario esta dado por $(U_0, V_0) = \left(\frac{a}{5}, 1 + \frac{a^2}{25}\right)$.

Capítulo 2

LA ECUACIÓN DE BVAM

En esta sección nos concretaremos a describir el modelo Barrio-Varea-Aragón-Maini (BVAM)[13], que no está basado en reacciones químicas. Fue introducido como un modelo general, para imitar la formación de patrones en la piel de varias especies de peces.

El modelo BVAM, se obtiene del modelo general

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= D_U \nabla^2 U + f(U, V), \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= D_V \nabla^2 V + g(U, V),\end{aligned}\tag{2.1}$$

mediante una expansión de las funciones f y g en series de Taylor, alrededor del estado estacionario, despreciando los términos de orden mayor al cúbico. El modelo tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\delta \nabla^2 u + \alpha u(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \delta \nabla^2 v + \beta v(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} uv) + u(\gamma + r_2 v),\end{aligned}\tag{2.2}$$

donde $u = U - U_0$ y $v = V - V_0$, siendo (U_0, V_0) el estado estacionario; δ es el radio entre los coeficientes de difusión de los dos químicos; α, β, γ son parámetros controlados por las reacciones entre los químicos; r_1 y r_2 corresponden al término cúbico y cuadrático, los cuales favorecen la formación de franjas en el caso cúbico y puntos en el caso cuadrático[25]. Como u es el activador y v es el inhibidor, debemos de tener que $D \neq 1$, para que la inestabilidad de Turing ocurra[11]

2.1. ANALISIS LINEAL

Primeramente vamos a encontrar el estado estacionario (U_0, V_0) , que se obtiene de:

$$\begin{aligned} f(u_0, v_0) &= 0, \\ g(u_0, v_0) &= 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

De (2,2) tenemos que

$$\begin{aligned} \alpha u_0(1 - r_1 v_0^2) + v_0(1 - r_2 u_0) &= 0, \\ \beta v_0(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} u_0 v_0) + u_0(\gamma + r_2 v_0) &= 0. \end{aligned}$$

Resolviendo el sistema, obtenemos tres estados estacionarios, los cuales listamos en seguida:

$$\begin{aligned} U_0 &= 0, \\ V_0 &= 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{r_2 + \beta r_2 + \sqrt{1 + \beta} \sqrt{r_2^2 + \beta r_2^2 + 4\alpha^2 \beta r_1 - 4\alpha \gamma r_1}}{2\alpha^2 r_1 + 2\alpha \gamma r_1}, \\ V_0 &= \frac{r_2 + \beta r_2 + \sqrt{1 + \beta} \sqrt{r_2^2 + \beta r_2^2 + 4\alpha^2 \beta r_1 - 4\alpha \gamma r_1}}{-2\alpha r_1 - 2\alpha \beta r_1}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} U_0 &= \frac{r_2 + \beta r_2 - \sqrt{1 + \beta} \sqrt{r_2^2 + \beta r_2^2 + 4\alpha^2 \beta r_1 - 4\alpha \gamma r_1}}{2\alpha^2 r_1 + 2\alpha \gamma r_1}, \\ V_0 &= \frac{r_2 + \beta r_2 - \sqrt{1 + \beta} \sqrt{r_2^2 + \beta r_2^2 + 4\alpha^2 \beta r_1 - 4\alpha \gamma r_1}}{-2\alpha r_1 - 2\alpha \beta r_1}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Por simplicidad, vamos a considerar el estado estacionario $(U_0, V_0) = (0, 0)$.

Como segundo paso, vamos a obtener las condiciones que satisfagan las cuatro condiciones de inestabilidad de Turing, que tenemos en la sección 1,5, es decir, las ecuaciones de (I)-(IV).

Condición I: $g_V + f_U < 0$.

Como

$$g_V + f_U = \beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u + \alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v,$$

se debe cumplir que:

$$\beta + 2\alpha r_1 u_0 v_0 + r_2 u_0 + \alpha - \alpha r_1 v_0^2 - r_2 v_0 < 0,$$

donde, ya evaluando en el estado estacionario $(U_0, V_0) = (0, 0)$, nos queda:

$$\beta + \alpha < 0.$$

Por lo tanto

$$\beta < -\alpha. \quad (2.9)$$

Condición II: $f_{UgV} - f_{VgU} > 0$.

Tenemos que

$$f_{UgV} - f_{VgU} = (\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v)(\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u) - (2\alpha r_1 v + 1 - r_2 u)(\alpha r_1 v^2 + \gamma + r_2 v),$$

luego se debe cumplir que:

$$(\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v)(\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u) - (2\alpha r_1 v + 1 - r_2 u)(\alpha r_1 v^2 + \gamma + r_2 v) > 0,$$

evaluando en el estado estacionario $(U_0, V_0) = (0, 0)$ tenemos

$$\alpha\beta - \gamma > 0,$$

entonces

$$\alpha\beta < \gamma. \quad (2.10)$$

Condición III: $f_U D_V + D_U g_V > 0$.

Sustituyendo

$$f_U D_V + D_U g_V = (\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v)\delta + (\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u)D\delta.$$

Entonces

$$(\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v)\delta + (\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u)D\delta > 0,$$

que, evaluado en $(U_0, V_0) = (0, 0)$, es:

$$\delta(\alpha + \beta D) > 0.$$

Si $\delta > 0$, entonces:

$$\alpha + \beta D > 0.$$

Por lo tanto:

$$\beta D > -\alpha. \quad (2.11)$$

$$\text{Condición IV : } \frac{1}{4} \frac{(D_V f_U + D_U g_V)^2}{D_U D_V} > f_U g_V - f_V g_U .$$

Tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \frac{(D_V f_U + D_U g_V)^2}{D_U D_V} &= \frac{1}{4} \frac{[\delta(\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v) + D\delta(\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u)]^2}{D\delta^2}, \\ f_U g_V - f_V g_U &= (\alpha - \alpha r_1 v^2 - r_2 v)(\beta + 2\alpha r_1 uv + r_2 u) - (2\alpha u r_1 v + 1 - r_2 u)(\alpha r_1 v^2 + \gamma + r_2 v). \end{aligned}$$

Evaluando en $(U_0, V_0) = (0, 0)$ obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \frac{(D_V f_U + D_U g_V)^2}{D_U D_V} &= \frac{1}{4} \frac{(\alpha\delta + \beta D\delta)^2}{D\delta^2}, \\ f_U g_V - f_V g_U &= \alpha\beta - \gamma. \end{aligned}$$

Por tanto:

$$\frac{1}{4} \frac{(\alpha\delta + \beta D\delta)^2}{D\delta^2} > \alpha\beta - \gamma. \quad (2.12)$$

En resumen, las ecuaciones (2,9), (2,10), (2,11) y (2,12) nos dan las condiciones para la inestabilidad de Turing, para el estado estacionario $(0, 0)$ del modelo de BVAM.

Aquí presentamos dos conjuntos de parámetros que satisfacen estas cuatro condiciones.

$$1^\circ \quad D = 0,516, \alpha = 0,899, \beta = -0,91, \delta = 2.$$

$$2^\circ \quad D = 0,122, \alpha = 0,398, \beta = -0,4, \delta = 2.$$

2.2. ACOPLAMIENTO DE ECUACIONES

Si bien es cierto que un modelo de Turing simple, que involucra unicamente dos morfógenos, como en (2,2), nos genera patrones de rayas o puntos. En la realidad encontramos estructuras más complicadas, por lo que es necesario involucrar modelos diferentes, ya sea con mas morfogenos o con distintas interacciones. Para tratar de simular adecuadamente, algunas de estas estructuras complejas, surge la idea de acoplar dos sistemas de Turing.

Un ejemplo se obtiene acoplando el modelo de BVAM[2] y en este caso tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} &= D_1 \delta_1 \nabla^2 u_1 + \alpha u_1 (1 - r_1 v_1^2) + v_1 (1 - r_2 u_1) + q_1 u_2 + q_2 u_2 v_1 + q_3 u_2 v_1^2, \\ \frac{\partial v_1}{\partial t} &= \delta_1 \nabla^2 v_1 + \beta v_1 \left(1 + \frac{\alpha_1 r_1}{\beta_1} u_1 v_1\right) + u_1 (\gamma_1 + r_2 v_1) - q_2 v_2 u_1 - q_3 v_1^2 u_2, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= D_2 \delta_2 \nabla^2 u_2 + \alpha_2 u_2 (1 - r_1 v_2^2) + v_2 (1 - r_2 u_2), \\ \frac{\partial v_2}{\partial t} &= \delta_2 \nabla^2 v_2 + \beta_2 v_2 \left(1 + \frac{\alpha_2 r_1}{\beta_2} u_2 v_2\right) + u_2 (\gamma_2 + r_2 v_2).\end{aligned}$$

Este sistema ha permitido obtener una mayor variedad de patrones de pigmentación que se comparan notablemente con una gran variedad de peces marinos.

Sin embargo, no es el único modelo acoplado que existe, ya que se puede aplicar a otras dinámicas como las del modelo del Bruselador, el modelo de Oregonator o el modelo de Lengyel-Epstein[10]. Como resultado de estos acoplamientos podemos obtener puntos con rayas, puntos y rayas de diferentes longitudes, en general variedad de patrones complejos.

Capítulo 3

EL PROGRAMA FEMLAB

En esta sección se presentan los aspectos generales del programa FEMLAB, con la idea de que el lector tenga una perspectiva completa de las capacidades y la metodología del programa.

FEMLAB, es un paquete para modelar y simular cualquier proceso físico que pueda describirse mediante ecuaciones diferenciales parciales (PDEs), es aplicable en cualquier área de la ciencia y la ingeniería. Para resolver las ecuaciones FEMLAB, utiliza el Método del Elemento Finito (FEM).

FEMLAB, nos permite modelar a través del uso de ecuaciones ya predefinidas o con la aplicación de módulos, los cuales podemos modificar para casos específicos, así como trabajar con sistemas de fenómenos físicos acoplados. También podemos elegir el dominio ya sea en una, dos o tres dimensiones, definir el tipo de mallado, además de que tiene herramientas para visualizar posteriormente el proceso, lo cual lo convierte en un ambiente gráfico flexible, rápido y versátil para el modelado multifísico.

3.1. MÉTODO DEL ELEMENTO FINITO

El método del elemento finito es un método numérico para la resolución de ecuaciones diferenciales. Se basa en dividir el dominio, de la ecuación diferencial que caracterizan el comportamiento físico del problema en una serie de subdominios ajenos denominados elementos finitos. El método del elemento finito transforma la realidad de la naturaleza continua en un modelo discreto aproximado. Los pasos básicos del FEM, son:

1. Formulación débil o variacional
2. Construir una malla de elementos finitos
3. Definir puntos nodales
3. Construir las funciones base

4. Construir la solución aproximada por el método de Galerkin.

3.1.1. FORMA DÉBIL O VARIACIONAL

El FEM resuelve, de forma aproximada, la formulación débil o variacional de la ecuación diferencial. Para poder dar una formulación débil de problemas con valores en el contorno necesitamos algunos conocimientos previos.

Definición: El conjunto $C^\infty(\Omega)$ está conformado por las funciones infinitamente diferenciables.

Definición: La norma de Sobolev se define como:

$$\|\cdot\|_{m,p} = \int_{\Omega} \sum_{|\alpha| \leq m} (D^\alpha u)^2 dx$$

Definición: Una función ϕ definida en $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, se llama *función de prueba* si ϕ tiene soporte compacto y $\phi \in C^\infty(\Omega)$. Al conjunto de todas las funciones de prueba se denota por

$$D(\Omega) = C_0^\infty(\Omega)$$

Definición: Un espacio de Sobolev $W^{m,p}$ es un espacio vectorial con la norma de Sobolev $\|\cdot\|_{m,p}$ definido como

$$W^{m,p}(\Omega) = \{\mu \in L^p(\Omega) \mid D^\alpha \mu \in L^p(\Omega) \text{ para } 0 \leq |\alpha| \leq m\}$$

Para cualquier entero positivo m y $1 \leq p \leq \infty$, donde D^α es la derivada parcial débil.[4]

Definición: Los espacios $H^m(\Omega)$, son los espacios de Sobolev con $p = 2$, $m \geq 0$, es decir

$$H^m(\Omega) = W^{m,2}(\Omega).$$

También es útil definir $H_0^m(\Omega)$, que tiene la propiedad de que sus derivadas, hasta orden $m - 1$, valen cero en la frontera, es decir contiene funciones tales que algunas de sus derivadas se anulan en la frontera.

Los espacios de Sobolev $H^m(\Omega)$, son los más importantes para ecuaciones diferenciales parciales. Los que más frecuentemente aparecen en EDP's son los $H_0^m(\Omega)$, debido a que los miembros de este espacio, junto con sus derivadas (hasta orden $m - 1$), valen cero en la frontera, y esto se relaciona con condiciones de Dirichlet homogéneas. Puede probarse que cualquier condición no homogénea puede transformarse en una homogénea mediante un cambio de variable. Es importante señalar que $H_0^m(\Omega)$ es la completación de $C_0^\infty(\Omega)$, y es un espacio de Hilbert.

Como en esta tesis estamos trabajando con ecuaciones de reacción-difusión, ilustraremos el proceso de hallar la formulación débil con este problema.

Consideremos entonces la ecuación:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \mathbf{D} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F} \quad \text{en } \Omega \\ (\mathbf{n} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= 0. \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}$, $\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_u \\ D_v \end{pmatrix}$, $\mathbf{F} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$.

Primeramente suponemos que \mathbf{u} es una solución clásica de (3,1) y $\phi \in D(\Omega)$. Multiplicando ambos lados de la ecuación por ϕ e integramos sobre todo el dominio tenemos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \phi dA = \int_{\Omega} (\mathbf{D} \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}) \phi dA, \quad (3.2)$$

integrando por partes, y aplicando la identidad de Green, tenemos:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \phi dA = \mathbf{D} \int_{\partial \Omega} (\phi \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ds - \mathbf{D} \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \phi - \mathbf{F} \phi) dA. \quad (3.3)$$

Como una aproximación, podemos remplazar, $\phi \in D(\Omega)$, por una función $\mathbf{v} \in H_0^m(\Omega)$, porque $H_0^m(\Omega)$ es la completación de $D(\Omega)$, con lo que el problema débil es:

$$\begin{aligned} \text{Hallar } \mathbf{u} &\in H_0^m(\Omega), \text{ tal que} \\ \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \mathbf{v} dA &= \mathbf{D} \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ds - \mathbf{D} \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{F} \mathbf{v}) dA \quad \forall \mathbf{v} \in H_0^m(\Omega) \end{aligned} \quad (3.4)$$

El hecho de que una solución \mathbf{u} , satisfaga la ecuación (3,4), para toda $\mathbf{v} \in H^m(\Omega)$, significa que \mathbf{u} resuelve el problema excepto por un conjunto de medida cero.

En este caso nuestro espacio de funciones admisibles es

$$V = \{ H^m(\Omega) \mid \text{satisface las condiciones esenciales de frontera} \}$$

3.1.2. MALLA DE ELEMENTOS FINITOS

Dividimos el dominio en un número finito E de subdominios $\Omega_1, \Omega_2, \dots, \Omega_E$ llamados elementos finitos, tales que

$$\bar{\Omega} = \sum_{e=1}^E \Omega_e.$$

El resultado es una malla que debe tener las siguientes propiedades

- Cada Ω_e es un poliedro con $\Omega \neq \phi$
- $\Omega_e \cap \Omega_f = \phi$ si $m \neq n$
- Si $F = \Omega_e \cap \Omega_f$ y $e \neq f$, entonces F es una cara en común (en $3D$), un lado en común (en $2D$) o un vértice en común (en $1D$) de Ω_e y Ω_f .

Para ilustrar lo anterior tenemos en la figura 3,1 un mallado que satisface las propiedades anteriores, por lo que se denomina mallado admisible.

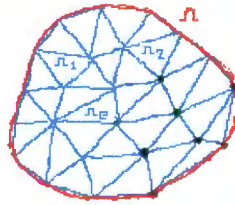


Figura 3.1

En $1D$, el elemento Ω_e es un intervalo, en $2D$, los elementos más comunes son triángulos o cuadriláteros, en $3D$, tetraedros o hexaedros.

3.1.3. NODOS O PUNTOS NODALES.

Dentro de cada elemento Ω_e , existen ciertos puntos que se llaman nodos, y se localizan al menos en los vértices del elemento, pero para mejorar la aproximación, pueden añadirse nodos en otras posiciones. En cualquier caso, hay un total de G nodos, numerados como $1, 2, \dots, G$ con vectores de posición x_1, x_2, \dots, x_G .



Mínimo de nodos Mejor aproximacion

figura 3.2

3.1.4. FUNCIONES BASE

Una vez constuida la malla de elementos finitos, se procede a construir las funciones base, usando los siguientes criterios:

1. Las funciones base se generan usando funciones simples definidas a trozos, elemento por elemento, sobre toda la malla de elementos finitos. Por este criterio inferimos que las funciones base φ_i de Ω se obtienen pegando funciones base locales definidas sobre cada elemento. La restricción de φ_i al elemento Ω_e se denota por $\varphi_i^{(e)}$ y se le llama función base local.
2. Las funciones base deben ser lo suficientemente suaves como para pertenecer a $H^1(\Omega)$ (para problemas con $m = 1$). La función más trivial es:

$$\varphi_i^{(e)} \in P_k(\Omega_e), \quad k \geq 1$$

donde P_k es el espacio de polinomios de grado mayor o igual a uno.

3. Las funciones base se eligen de tal manera que los coeficientes c_i de la solución aproximada

$$\mu_h = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i$$

sean precisamente los valores de $\mu_h(x)$ en los puntos nodales. Entonces para cada nodo x_j

$$\varphi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde cada i y j recorren todos los nodos de la malla. La función $\varphi_i^{(e)}$, también cumple ésta propiedad.

3.1.5. SOLUCIÓN APROXIMADA DEL PROBLEMA DÉBIL

Después de que ya se tienen las funciones base, el método del elemento finito, utiliza el método de Galerkin para dar una solución aproximada. Es decir, el FEM, ofrece un mecanismo sistemático para encontrar las funciones base $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$

El método de Galerkin parte de la formulación débil del problema. Hallar $\mu \in V$ tal que

$$B(\mu, v) = \langle l, v \rangle \quad \forall v \in V. \quad (3.5)$$

donde $B(,)$ es una forma bilineal.

Consideremos un subespacio $V^h \subset V$, $\dim(V^h) = N$ y supongamos que $V^h = \text{gen} \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$.

Ahora planteamos el siguiente problema:

Halla $\mu_h \in V^h$ tal que

$$B(\mu_h, v_h) = \langle l, v_h \rangle \quad \forall v_h \in V^h. \quad (3.6)$$

Esto es lo esencial de el método de Galerkin, con lo que podemos establecer un método de solución.

Sea $\mu_h, v_h \in V^h$

$$\mu_h = \sum_{i=1}^N c_i \phi_i \quad y \quad v_h = \sum_{j=1}^N d_j \phi_j. \quad (3.7)$$

Sustituyendo (3,7) en (3,6) obtenemos el conjunto de ecuaciones lineales

$$\sum_{i=1}^N K_{ij} C_i = F_j \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

que en forma matricial es

$$\mathbf{k}^T \mathbf{C} = \mathcal{F}$$

donde $K_{ij} = B(\phi_i, \phi_j)$, $\mathcal{F}_j = \langle l, \phi_j \rangle$.

El problema del método de Galerkin es que no hay un mecanismo sistemático para proponer las funciones base $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$, El FEM resuelve este problema.

En el contexto del método del Elemento Finito \mathbf{k} se llama **Matriz de rigidez** y \mathcal{F} se llama **vector de carga**

Entoces la matriz de rigidez \mathcal{K} y el vector de carga \mathcal{F} puede expresarse como:

$$\mathcal{K} = \sum_{e=1}^E K^{(e)}, \quad \mathcal{F} = \sum_{e=1}^E F^{(e)}.$$

Así la evaluación de \mathcal{K} y \mathcal{F} se reduce a evaluar $K^{(e)}$ y $F^{(e)}$ para cada elemento de la malla y después sumar sobre todos los elementos. A este proceso se le conoce como **ensamble**.

El proceso de ensamble se simplifica por el hecho de que $\varphi_i = 0$ en todos los elementos que no comparten el nodo i , de manera que $K_{ij}^{(e)} = 0$ si i y j no pertenecen al elemento Ω_e .

3.2. PASOS PARA RESOLVER UNA ECUACIÓN EN FEMLAB.

1. Especificar la dimensión del espacio en el que se desea trabajar. (1D, 2D, 3D)
2. Elegir el Módulo. (ecuaciones para procesos específicos o módulos especializados)
3. Crear la geometría de nuestro dominio.
4. Definir los parámetros físicos del problema
5. Inicializar el mallado de elementos finitos.
6. Resolver la ecuación.
7. Mostrar resultados

3.2.1. DIMENSION DEL ESPACIO

Al inicio el programa nos muestra la siguiente ventana:

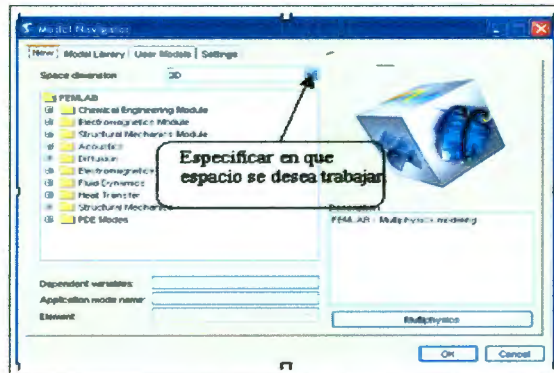


Figura 3.3

donde especificamos el espacio en que deseamos trabajar, El cual puede ser, en una, dos o tres dimensiones.

3.2.2. TIPO DE MÓDULOS

El programa FEMLAB, cuenta con las siguientes librerías:

Modulo de ingeniería química

Modulo de electromagnetica

Modulo de mecanismos estructurales

Acustica

Difusión

Electromagnética

Dinámica de fluidos

Transferencia de calor

Mecanismos estructurales

Modo PDE.

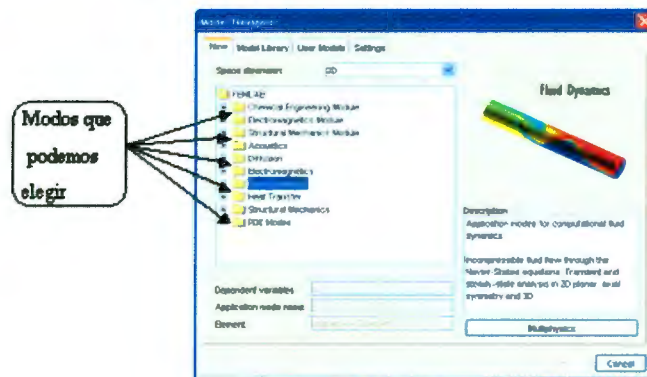


Figura 3.4

Las primeras nueve librerías, sirven para procesos específicos. La opción de modos especializados (PDE Modes), se divide en: ecuaciones clásicas, forma de coeficiente, forma general y forma débil, como se muestra en la figura 3,5

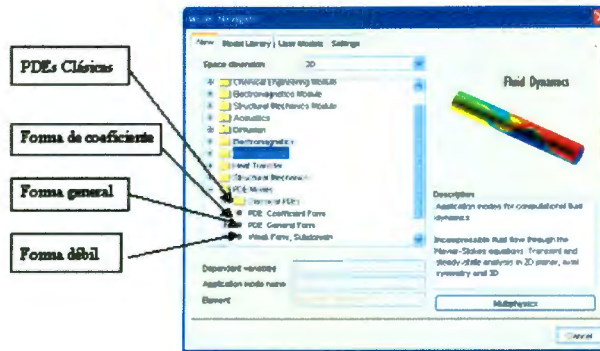


Figura 3.5

En Ecuaciones Clásicas (Classical PDEs), encontramos las siguientes ecuaciones: de convección-difusión, de calor, de onda, de Laplace, de Poisson, de Helmholtz, de Schrödinger, etc. Esto se aprecia en la figura 3.6:

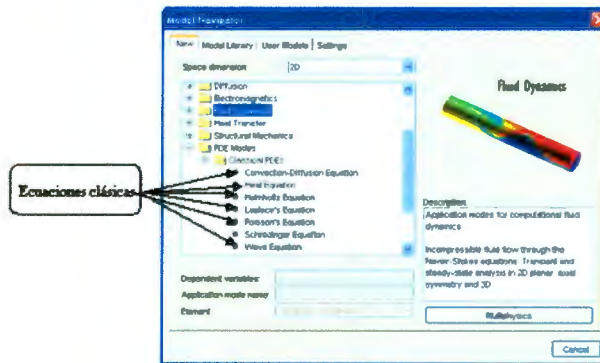


Figura 3.6

Si la ecuación que nos interesa no es una de estas ya predeterminadas, el programa proporciona otras tres formas para personalizar las ecuaciones de acuerdo a las

necesidades del usuario. Estas se muestran en la figura 3,7

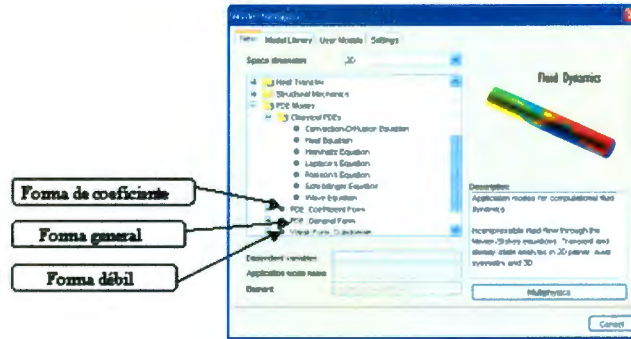


Figura 3.7

La **Forma de Coeficiente**, permite solucionar PDEs que usan problemas lineales o casi lineales. Al elegir esta opción, la ecuación de manera general es:

$$d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + \alpha u = f.$$

ya la ventana que nos muestra el programa es la siguiente:

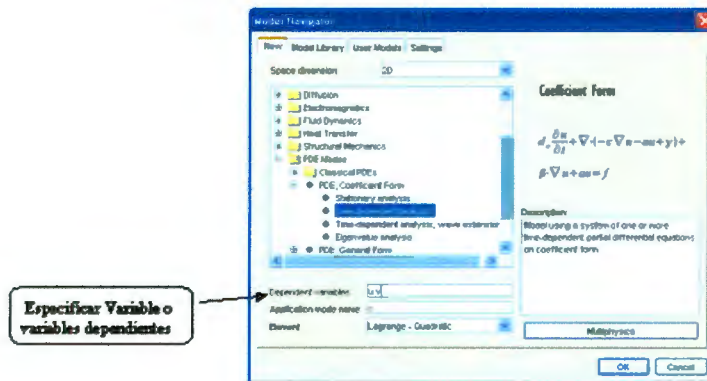


Figura 3.8

Debemos de especificar si es un problema estacionario, dependiente del tiempo o de valores propios, además de definir nuestras variables dependientes las cuales se escriben separadas por un espacio.

Un ejemplo de como implementar una ecuación utilizando esta forma se dara en el siguiente capítulo.

La **Forma General**, Provee un armazón computacional especializado para los problemas altamente no lineales, y la ecuación general es

$$d_a \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma = \mathbf{F}$$

Cuando elegimos esta forma tenemos la siguiente ventana

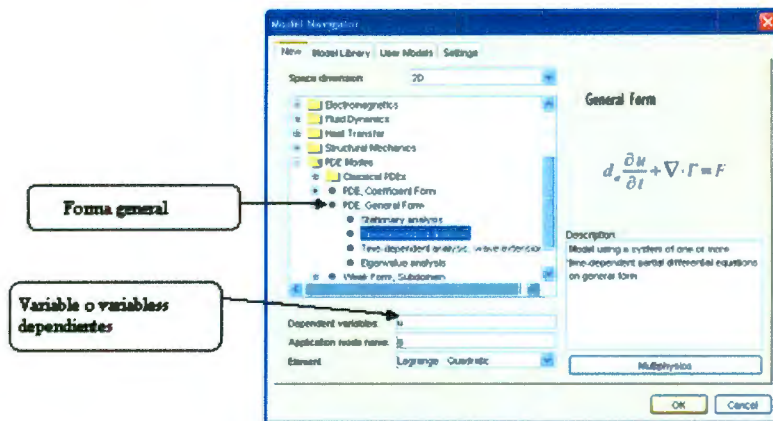


Figura 3.9

Debemos especificar si es un problema estacionario, dependiente del tiempo o de valores propios, además de la variable o las variables dependientes, las cuales van separadas por un espacio.

LaForma débil: Permite introducir directamente la forma débil, ahorrando un paso. Su forma general es:

$$\int_{\Omega} (\nabla v \cdot \Gamma + v F) dA + \int_{\partial\Omega} v \left(G + \frac{\partial R}{\partial u} \mu \right) ds = 0,$$

y el programa nos muestra la ventana de la figura 3,10

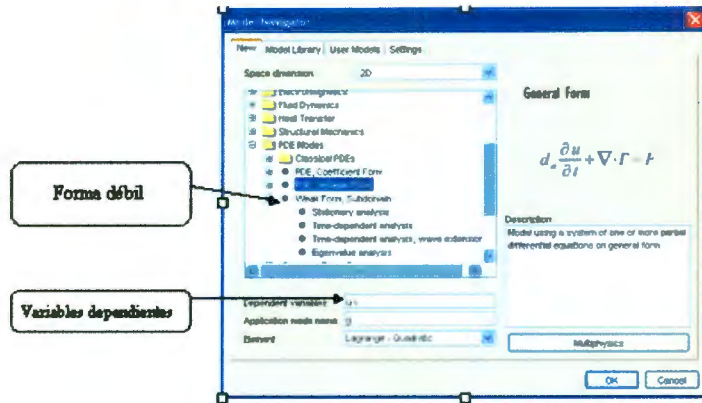


Figura 3.10

Debemos especificar si es un problema estacionario, dependiente del tiempo o de valores propios, además de las variable o variables dependientes, si son más de una, estas se escriben separadas por un espacio.

3.2.3. CREAR LA GEOMETRÍA

Una vez que hemos definido completamente el problema, ya sea definiendo la PDE o adoptando un modelo particular, procedemos a establecer el dominio del problema.

La geometría se define de acuerdo al tipo de dominio que requerimos para resolver nuestro problema, puede ser en una, dos o tres dimensiones. Una de las ventajas de este programa es que tiene una interfaz muy eficiente para crear un dominio; podemos unir, restar e intersectar diferentes geometrías, así como también importarlas de otros programas, lo que nos permite tener una variedad de dominios, tan sencillos o complejos como sea necesario.

Si elegimos trabajar en 1D, nuestro dominio pueden ser líneas rectas o curvas y puntos, si elegimos 2D, tenemos la opción de cuadrado, rectángulo, círculo, elipse. En general, cuenta con la opción de curvas de Bezier para definir un dominio arbitrario. Para poder realizar este tipo de dominios FEMLAB cuenta con una barra de

herramientas, que mostramos en la figura 3,11

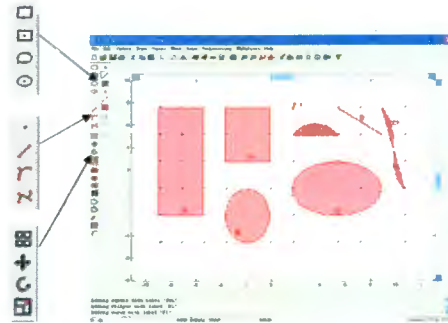


Figura 3.11

Además cuenta con la barra, para poder unir, intersectar y restar dominios, con lo que obtenemos más variedad de dominios como los que se muestran en la figura 3,12

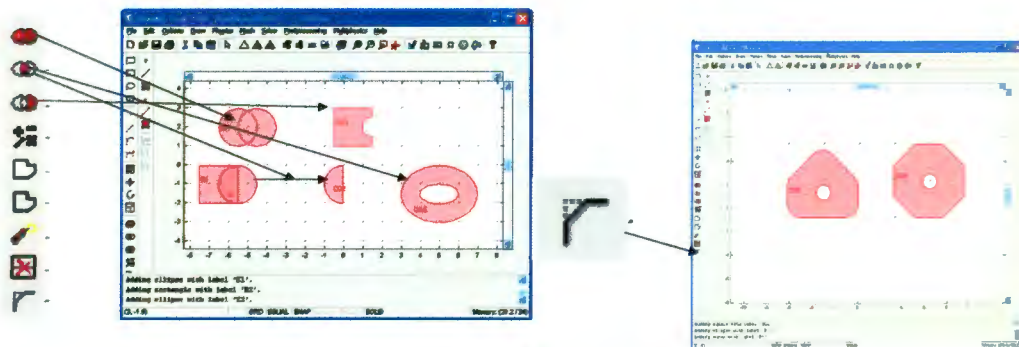


figura 3.12

También existen diversas opciones cuando trabajamos en 3D, como las que podemos

apreciar en la figura 3,13

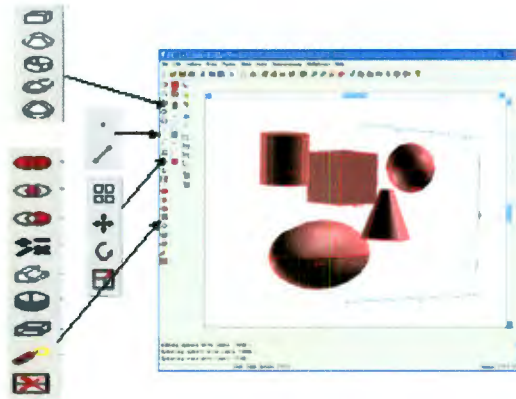


Figura 3.13

Al igual que en 2D podemos combinar estas posibilidades para obtener una gran variedad de dominios como los que mostramos en la figura 3,14

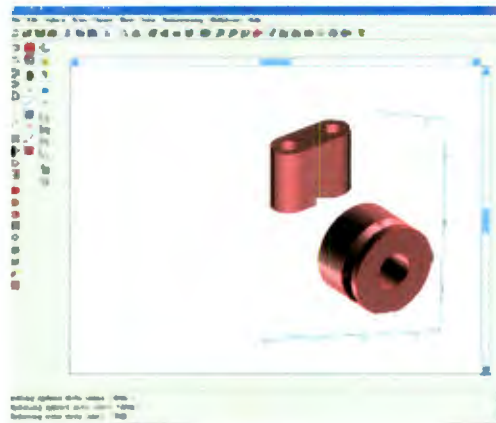


Figura 3.14

3.2.4. DEFINIR LOS PARÁMETROS FÍSICOS

Una vez definido el problema y el dominio, el siguiente paso consiste en establecer los parámetros físicos del problema y las condiciones de frontera.

Cuando realizamos este paso, tenemos acceso a todo lo necesario para poner las propiedades del material y las condiciones de frontera. Las expresiones que podemos

utilizar son: valores numéricos, variables que indiquen coordenadas, tiempo y las variables dependientes. La forma en que se introducen las ecuaciones depende del módulo elegido, sin embargo, existen tres pasos básicos.

1. Definir los parámetros físicos de la ecuación. Los pasos se muestran en la figura 3,15

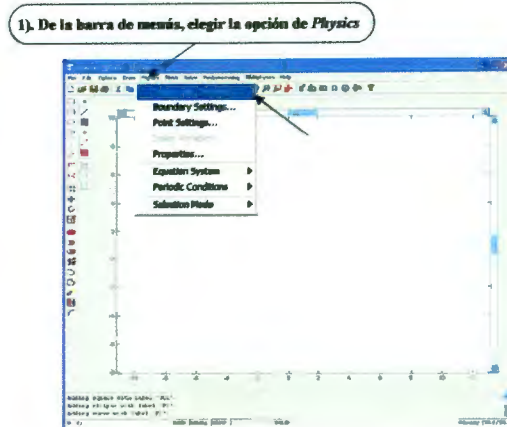


figura 3.15

Si elegimos la forma de coeficiente tendremos la figura 3,16:

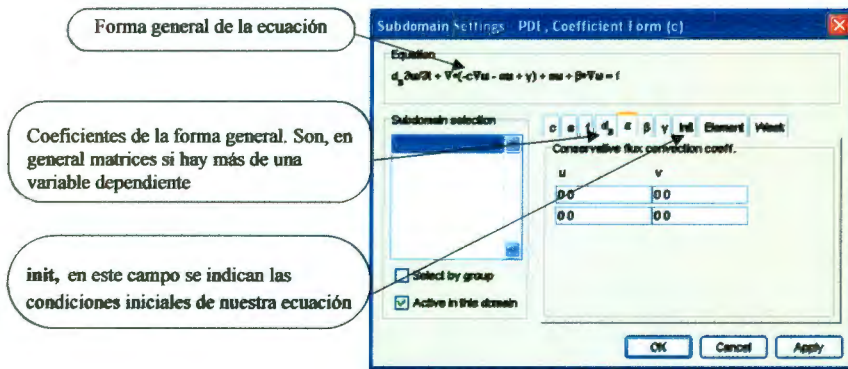


figura 3.16

2. Definir las condiciones de frontera. Tenemos dos tipos de condiciones de frontera: de Neumann y Dirichlet, las cuales tienen una forma general que depende del módulo elegido:

a) Forma de coeficiente

$$\mathbf{n} \cdot (c \nabla \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} - \gamma) + q \mathbf{u} = \mathbf{g} - \mathbf{h}^T \mu \quad (\text{Dirichlet})$$

$$\mathbf{n} \cdot (c \nabla \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} - \gamma) + q \mathbf{u} = \mathbf{g} \quad (\text{Neumann})$$

b) Forma General

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma} = G + \left(\frac{\partial R}{\partial \mathbf{u}} \right)_{\mu}^T \quad (\text{Dirichlet})$$

$$-\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma} = G \quad (\text{Neumann})$$

c) Forma débil

$$\mathbf{n} \cdot (c \nabla \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} - \gamma) + d_q \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + q \mathbf{u} = \mathbf{g} - \mathbf{h}^T \mu \quad (\text{Dirichlet})$$

$$\mathbf{n} \cdot (c \nabla \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} - \gamma) + d_q \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + q \mathbf{u} = \mathbf{g} \quad (\text{Neumann})$$

Los pasos para fijar las condiciones de frontera los ilustramos en la figura 3,17

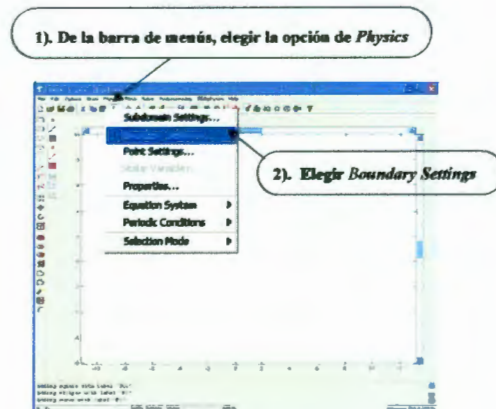


Figura 3.17

Si elegimos la forma de coeficiente tendremos la figura 3,18

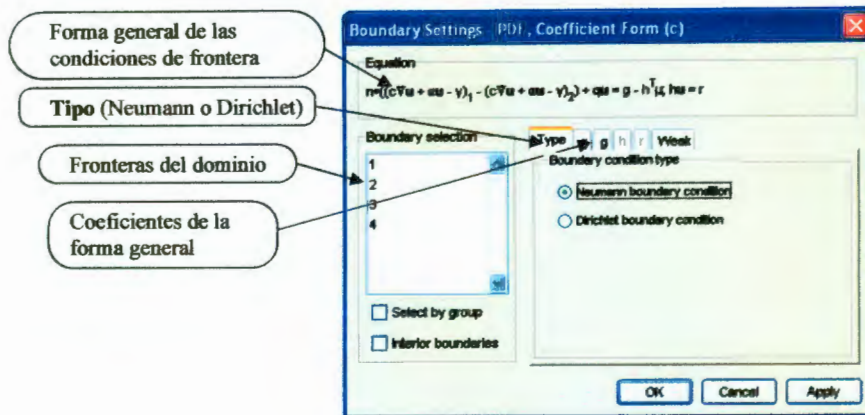


figura 3.18

3. **Definir constantes.** Las constantes son globales, es decir, son las mismas para todas las geometrías y subdominios. Las constantes pueden depender de otras constantes y pueden contener cualquier función matemática. Para definir las constantes elegimos de la barra de menus *Options*, después *Constants* y las definimos. Este procedimiento lo podemos ver en la figura 3,19:

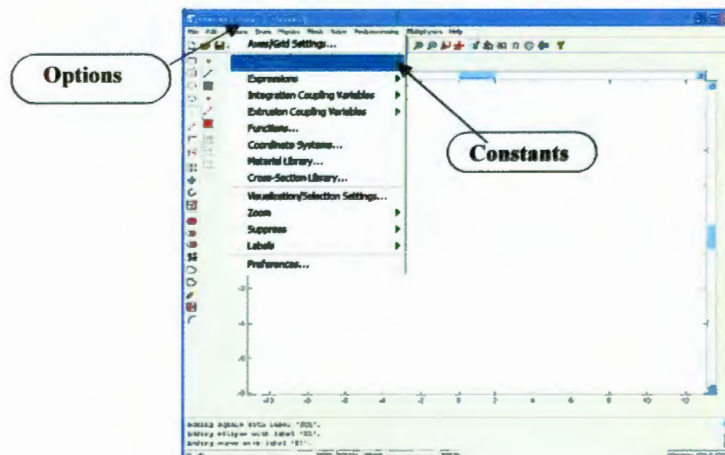


Figura 3.19

Con estos pasos queda definida la PDE de acuerdo a las necesidades del usuario.

3.2.5. INICIALIZAR EL MALLADO DE ELEMENTOS FINITOS

FEMLAB genera de forma automática una malla de elementos finitos triangulares, aunque también tiene la opción de generar mallas rectangulares. Además tenemos la opción de refinar la malla si así lo deseamos. Para generar el mallado (*mesh*), elegimos en la barra de menús *Mesh* después *Initialize Mesh* (inicializar malla). Si requerimos un mallado más fino *Refine Mesh* (refinar malla). Esto lo ilustramos en la figura 3,20

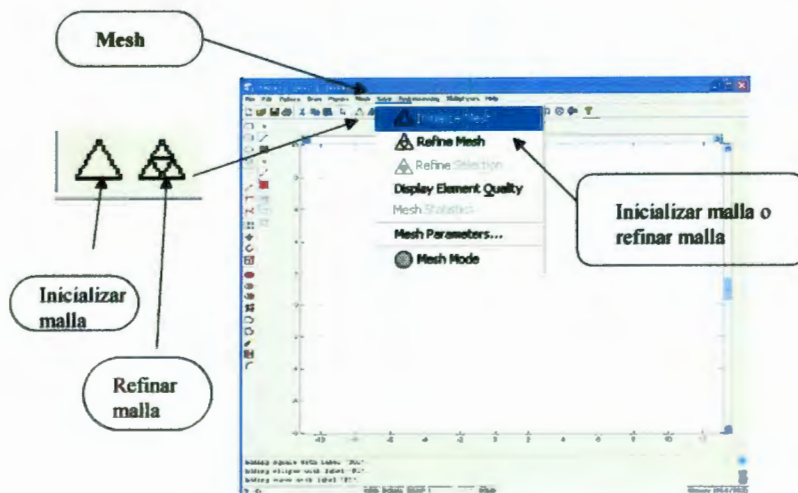


Figura 3.20

3.2.6. RESOLVER LA ECUACIÓN

El tipo de análisis varía de acuerdo al modelo que elegimos, es decir, dependiente del tiempo, estacionario, o problema de valores propios. En el caso de un problema dependiente del tiempo, antes de resolver la PDE o las PDEs, necesitamos definir el tiempo al cual queremos la solución, por lo que de la barra de menús elegimos *Solve*, después *Solver Parameters* y especificamos el tiempo. Este proceso se ilustra en la

figura 3,21

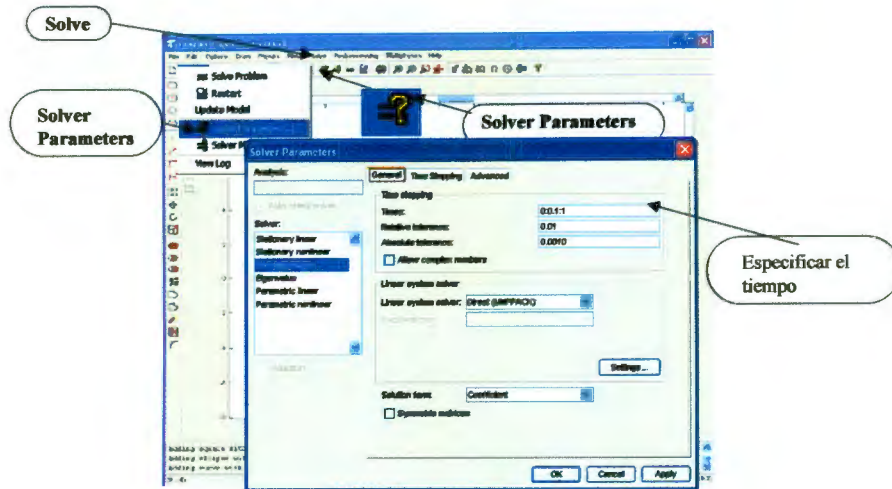


Figura 3.21

Después de especificar el tiempo, resolvemos el problema. De la barra de menús elegimos **Solve**, después **Solve Problem**. Podemos ver este paso en la figura 3,22

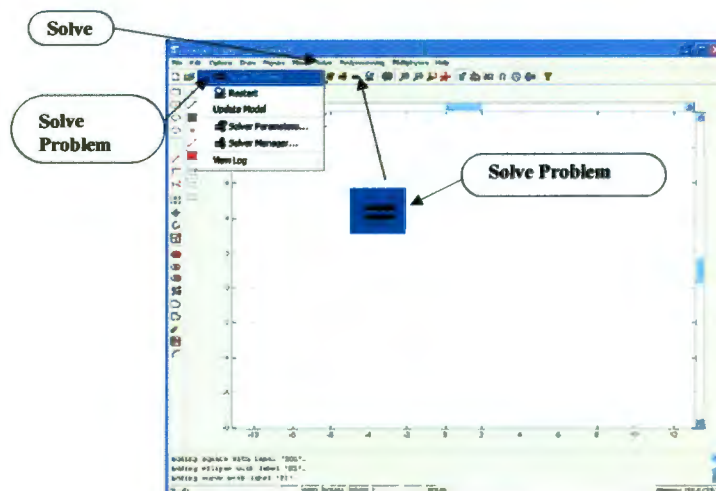


Figura 3.22

3.2.7. RESULTADOS Y VISUALIZACIÓN

Las diferentes formas en que podemos visualizar el resultado son; gráfica de la superficie en 2D o 3D (Surface Plot), gráfica por secciones (Slice Plots), gráfica del contorno (Contour Plot), gráfica de las fronteras (Boundary Plot), gráfica de líneas aerodinámicas (Streamline Plot), gráfica del campo vectorial (Arrow Plot) y animación del proceso (Animate). Para esto utilizamos las herramientas con las que cuenta Femlab, las cuales describimos en la figura 3,23

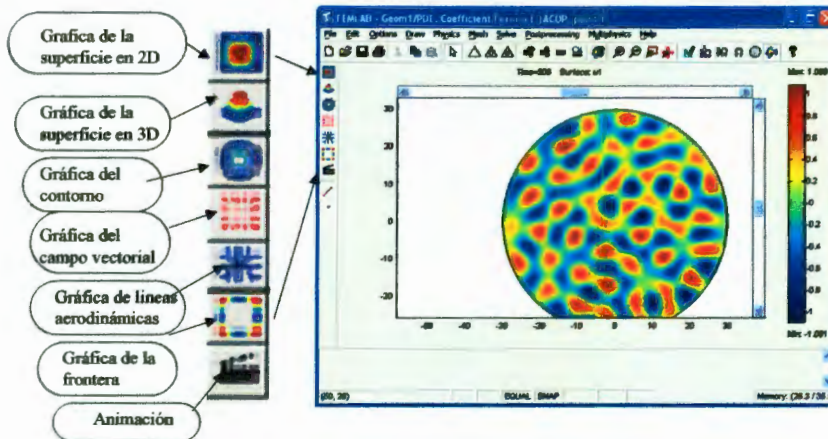


Figura 3.23

Capítulo 4

IMPLEMENTACIÓN

Después de dar una breve introducción del programa FEMLAB, y de haber obtenido los valores de los parámetros con los cuales tenemos inestabilidad de Turing en la ecuación BVAM y en el sistema acoplado, implementamos estos modelos en el programa FEMLAB de dos maneras: forma de coeficiente y Forma débil.

4.1. ECUACIÓN DE BVAM EN FORMA DE COEFICIENTE

El procedimiento para resolver las PDEs, en particular la del modelo de BVAM son:

1. Elegir el espacio, como lo mostramos en el capítulo 3, sección 3,2,1, figura 3,2. los espacios que utilizamos son: $2D$ y $3D$.
2. Elegir el módulo forma de coeficiente, de la manera que se mostró en el capítulo 3, sección 3,2,2, figura 3,7. Especificar que se trata de un problema dependiente del tiempo y definir las variables dependientes, que son: u_1 y u_2 .
3. Crear la geometría del dominio, capítulo 3, sección 3,2,3, figura 3,10, 3,11, 3,12. Sobre este punto, usaremos dominios que describiremos en detalle en el siguiente capítulo. Por ahora, sólo queremos ilustrar como vamos a definir las PDEs.
4. Definir los parámetros físicos y las condiciones de frontera. El modelo BVAM es un sistema de ecuaciones de la forma:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} &= D\delta\nabla^2 u_1 + \alpha u_1(1 - r_1 u_1^2) + u_2(1 - r_2 u_1) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} &= \delta\nabla^2 u_2 + \beta u_2\left(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} u_1 u_2\right) + u_1(\gamma + r_2 u_2),\end{aligned}\quad (4.1)$$

y de manera general la forma de coeficiente nos muestra la ecuación en forma matricial

$$\mathbf{d}_a \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (-\mathbf{c} \nabla \mathbf{u} - \boldsymbol{\alpha} \mathbf{u} + \boldsymbol{\gamma}) + \boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \mathbf{u} + \mathbf{a} \mathbf{u} = \mathbf{f}. \quad (4.2)$$

Los coeficientes son:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\mathbf{d}_a = \begin{bmatrix} d_{a11}, & d_{a12}, & \dots & d_{a1n} \\ d_{a21} & d_{a22} & \dots & d_{a2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ d_{an1} & d_{an2} & \dots & d_{ann} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{11}, & c_{12}, & \dots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \vdots \\ \alpha_{11n} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \vdots \\ \alpha_{12n} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} \alpha_{1n1} \\ \alpha_{1n2} \\ \vdots \\ \alpha_{1nn} \end{bmatrix} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \begin{bmatrix} \alpha_{n11} \\ \alpha_{n12} \\ \vdots \\ \alpha_{n1n} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} \alpha_{n21} \\ \alpha_{n22} \\ \vdots \\ \alpha_{n2n} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} \alpha_{nn1} \\ \alpha_{nn2} \\ \vdots \\ \alpha_{nnn} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\gamma = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \vdots \\ \gamma_{1n} \end{bmatrix} \\ \vdots \\ \begin{bmatrix} \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \\ \vdots \\ \gamma_{2n} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_{111} \\ \beta_{112} \\ \vdots \\ \beta_{11n} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} \beta_{1n1} \\ \beta_{1n2} \\ \vdots \\ \beta_{1nn} \end{bmatrix} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \begin{bmatrix} \beta_{n11} \\ \beta_{n12} \\ \vdots \\ \beta_{n1n} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} \beta_{nn1} \\ \beta_{nn2} \\ \vdots \\ \beta_{n nn} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad \text{para } n = 1, 2, \dots$$

Para ilustrar un poco más la forma de la ecuación general (4,2), vamos a restringirnos al caso de un sistema de dos ecuaciones diferenciales. En este caso $\mathbf{u} = (u_1, u_2)$, $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$ y

$$\mathbf{d}_a \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \begin{bmatrix} d_{a11} & d_{a12} \\ d_{a21} & d_{a22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{a11} \frac{\partial u_1}{\partial t} + d_{a12} \frac{\partial u_2}{\partial t} \\ d_{a21} \frac{\partial u_1}{\partial t} + d_{a22} \frac{\partial u_2}{\partial t} \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

$$\mathbf{c}\nabla\mathbf{u} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} \nabla \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11}\nabla u_1 + c_{12}\nabla u_2 \\ c_{21}\nabla u_1 + c_{22}\nabla u_2 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

$\nabla \cdot (\mathbf{c}\nabla\mathbf{u})$ es entonces

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \begin{bmatrix} c_{11}\nabla u_1 + c_{12}\nabla u_2 \\ c_{21}\nabla u_1 + c_{22}\nabla u_2 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \nabla \cdot (c_{11}\nabla u_1) + \nabla \cdot (c_{12}\nabla u_2) \\ \nabla \cdot (c_{21}\nabla u_1) + \nabla \cdot (c_{22}\nabla u_2) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla^2 u_1 \\ \nabla^2 u_2 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (4.5)$$

si los coeficientes c_{ij} son constantes.

Para materiales anisotrópicos, cada una de las componentes c_{ij} pueden ser matrices.

En este caso tenemos:

$$\begin{aligned} \mathbf{c}\nabla\mathbf{u} &= \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla u_1 \\ \nabla u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1111} & c_{1112} \\ c_{1121} & c_{1122} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} c_{1211} & c_{1212} \\ c_{1221} & c_{1222} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} c_{2111} & c_{2112} \\ c_{2121} & c_{2122} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} c_{2211} & c_{2212} \\ c_{2221} & c_{2222} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla u_1 \\ \nabla u_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1111} & c_{1112} \\ c_{1121} & c_{1122} \end{bmatrix} \nabla u_1 + \begin{bmatrix} c_{1211} & c_{1212} \\ c_{1221} & c_{1222} \end{bmatrix} \nabla u_2 \\ \begin{bmatrix} c_{2111} & c_{2112} \\ c_{2121} & c_{2122} \end{bmatrix} \nabla u_1 + \begin{bmatrix} c_{2211} & c_{2212} \\ c_{2221} & c_{2222} \end{bmatrix} \nabla u_2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{1111} & c_{1112} \\ c_{1121} & c_{1122} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ \frac{\partial u_1}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{1211} & c_{1212} \\ c_{1221} & c_{1222} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_2}{\partial x} \\ \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} c_{2111} & c_{2112} \\ c_{2121} & c_{2122} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} \\ \frac{\partial u_1}{\partial y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_{2211} & c_{2212} \\ c_{2221} & c_{2222} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial u_2}{\partial x} \\ \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} c_{1111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{1121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

entonces

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (c \nabla \mathbf{u}) &= \nabla \cdot \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} c_{1111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{1121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{array} \right] \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} c_{1111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{1121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{1122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{1221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{1222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2111} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2112} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2211} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2212} \frac{\partial u_2}{\partial y} \\ c_{2121} \frac{\partial u_1}{\partial x} + c_{2122} \frac{\partial u_1}{\partial y} + c_{2221} \frac{\partial u_2}{\partial x} + c_{2222} \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{array} \right] \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} (c_{1111} \frac{\partial u_1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{1112} \frac{\partial u_1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{1211} \frac{\partial u_2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{1212} \frac{\partial u_2}{\partial y}) + \\ \frac{\partial}{\partial y} (c_{1121} \frac{\partial u_1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{1122} \frac{\partial u_1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{1221} \frac{\partial u_2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{1222} \frac{\partial u_2}{\partial y}) \\ \frac{\partial}{\partial x} (c_{2111} \frac{\partial u_1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{2112} \frac{\partial u_1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{2211} \frac{\partial u_2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (c_{2212} \frac{\partial u_2}{\partial y}) + \\ \frac{\partial}{\partial y} (c_{2121} \frac{\partial u_1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{2122} \frac{\partial u_1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{2221} \frac{\partial u_2}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (c_{2222} \frac{\partial u_2}{\partial y}) \end{bmatrix} \quad (4.6)
\end{aligned}$$

Ahora tenemos:

$$\mathbf{c} \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] u_1 + \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] u_2 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{c} \mathbf{u} = \nabla \cdot \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] u_1 + \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] u_2 \\ \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] u_1 + \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla \cdot \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] u_1 + \nabla \cdot \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] u_2 \\ \nabla \cdot \left[\begin{array}{l} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{array} \right] u_1 + \nabla \cdot \left[\begin{array}{l} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{array} \right] u_2 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\gamma} = \nabla \cdot \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{array} \right] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla \cdot \left[\begin{array}{l} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{array} \right] \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

$$\boldsymbol{\beta} \cdot \nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \beta_{111} \\ \beta_{112} \\ \beta_{n11} \\ \beta_{n12} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \beta_{1n1} \\ \beta_{1n2} \\ \beta_{nn1} \\ \beta_{nn2} \end{array} \right] \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \nabla u_1 \\ \nabla u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \left[\begin{array}{l} \beta_{111} \\ \beta_{112} \\ \beta_{n11} \\ \beta_{n12} \end{array} \right] \cdot \nabla u_1 + \left[\begin{array}{l} \beta_{1n1} \\ \beta_{1n2} \\ \beta_{nn1} \\ \beta_{nn2} \end{array} \right] \cdot \nabla u_2 \\ \left[\begin{array}{l} \beta_{111} \\ \beta_{112} \\ \beta_{n11} \\ \beta_{n12} \end{array} \right] \cdot \nabla u_1 + \left[\begin{array}{l} \beta_{1n1} \\ \beta_{1n2} \\ \beta_{nn1} \\ \beta_{nn2} \end{array} \right] \cdot \nabla u_2 \end{bmatrix} \quad (4.10)$$

$$\mathbf{a} \mathbf{u} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} u_1 + a_{12} u_2 \\ a_{21} u_1 + a_{22} u_2 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}. \quad (4.12)$$

Ahora el modelo BVAM, en forma matricial es:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial t} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} D\delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u_1 \\ \nabla u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha u_1(1 - r_1 u_2^2) + u_2(1 - r_2 u_1) \\ \beta u_2(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} u_1 u_2) + u_1(\gamma + r_2 u_2) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

de donde se infiere que:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{d}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} D * \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{bmatrix}$$

$$\alpha = \left[\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \right]$$

$$\gamma = \left[\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \right]$$

$$\beta = \left[\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \right]$$

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \alpha u_1(1 - r_1 u_2^2) + u_2(1 - r_2 u_1) \\ \beta u_2(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} u_1 u_2) + u_1(\gamma + r_2 u_2) \end{bmatrix}$$

5. Definimos las condiciones de frontera, para resolver la ecuación BVAM ocupamos condiciones de Neumann, ya que nuestro sistema requiere condiciones de flujo cero, para que nuestro patrón no tenga perturbaciones externas.(ver ecuación 3.1)

Entonces, cuando elegimos esta opción el programa nos muestra la siguiente ecuación:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{c} \nabla \mathbf{u} + \alpha \mathbf{u} - \gamma) + \mathbf{q} \mathbf{u} = \mathbf{g} \quad (4.14)$$

donde \mathbf{n} es el vector normal, \mathbf{q} y \mathbf{g} , son matrices de $n \times n$ es decir:

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1n} \\ q_{21} & q_{22} & \dots & q_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ q_{n1} & q_{n2} & \dots & q_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ g_n \end{bmatrix},$$

Para mayor detalle consideremos un sistema de dos ecuaciones. En este caso $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ y

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{c} \nabla \mathbf{u} = \mathbf{n} \cdot \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla u_1 \\ \nabla u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot (c_{11} \nabla u_1 + c_{12} \nabla u_2) \\ \mathbf{n} \cdot (c_{21} \nabla u_1 + c_{22} \nabla u_2) \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

como ya conocemos $\alpha \mathbf{u}$ de (4,7) entonces

$$\mathbf{n} \cdot \alpha \mathbf{u} = \mathbf{n} \cdot \left[\begin{bmatrix} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{bmatrix} u_1 + \begin{bmatrix} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{bmatrix} u_2 \right] = \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot \left(\begin{bmatrix} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{bmatrix} u_1 + \begin{bmatrix} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{bmatrix} u_2 \right) \\ \mathbf{n} \cdot \left(\begin{bmatrix} \alpha_{111} \\ \alpha_{112} \\ \alpha_{211} \\ \alpha_{212} \end{bmatrix} u_1 + \begin{bmatrix} \alpha_{121} \\ \alpha_{122} \\ \alpha_{221} \\ \alpha_{222} \end{bmatrix} u_2 \right) \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

$$\mathbf{n} \cdot \gamma = \mathbf{n} \cdot \begin{bmatrix} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot \begin{bmatrix} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{bmatrix} \\ \mathbf{n} \cdot \begin{bmatrix} \gamma_{11} \\ \gamma_{12} \\ \gamma_{21} \\ \gamma_{22} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

$$\mathbf{q} \mathbf{u} = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{11} u_1 + q_{12} u_2 \\ q_{21} u_1 + q_{22} u_2 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \end{bmatrix}.$$

En particular para el modelo BVAM las matrices son:

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

y lo escribimos en la ventana que se muestra en el capítulo 3, sección 3,2,4, figura 3,17

6. Los valores de los parámetros del sistema los introduciremos, siguiendo los pasos del capítulo 3, sección 3,2,4, figura 3,18. En este caso, estos parámetros son: α , β , δ , γ , D , r_1 y r_2 .

4.2. ECUACIÓN DE BVAM ACOPLADA EN FORMA DE COEFICIENTE

Aquí mostraremos cómo implementar el sistema acoplado que discutimos en la sección 2,2. La única diferencia con la ecuación de BVAM, que mostramos en la sección 4,1 es que en el modelo de BVAM acoplado tenemos un sistema de cuatro ecuaciones, por lo que nuestras variables dependientes las definiremos como u_1 u_2 u_3 u_4 , y es de la forma:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \delta_1 \nabla^2 u_1 + \alpha_1 u_1 (1 - r_1 u_1^2) + u_2 (1 - r_2 u_1) + q_1 u_2 + q_2 u_3 u_2 + q_3 u_3 u_2^2$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \delta_1 \nabla^2 u_2 + \beta_1 u_2 (1 + \frac{\alpha_1 r_1}{\beta_1} u_1 u_2) + u_1 (\gamma_1 + r_2 u_2) - q_2 u_4 u_1 - q_3 u_2^2 u_3$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} = D_2 \delta_2 \nabla^2 u_3 + \alpha_2 u_3 (1 - r_1 u_4^2) + u_4 (1 - r_2 u_3)$$

$$\frac{\partial u_4}{\partial t} = \delta_2 \nabla^2 u_4 + \beta_2 u_4 (1 + \frac{\alpha_2 r_1}{\beta_2} u_3 u_4) + u_3 (\gamma_2 + r_2 u_4),$$

Para este caso, entonces, $n = 4$, y las matrices son:

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{d}_a = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} D_1\delta_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \delta_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_2\delta_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{\alpha} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{\gamma} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{\beta} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \alpha_1 u_1 (1 - r_1 u_1^2) + u_2 (1 - r_2 u_1) + q_1 u_2 + q_2 u_3 u_2 + q_3 u_3 u_2^2 \\ \beta_1 u_2 (1 + \frac{\alpha_1 r_1}{\beta_1} u_1 u_2) + u_1 (\gamma_1 + r_2 v_2) - q_2 u_4 u_1 - q_3 u_2^2 u_3 \\ \alpha_2 u_3 (1 - r_1 u_1^2) + u_4 (1 - r_2 u_3) \\ \beta_2 u_4 (1 + \frac{\alpha_2 r_1}{\beta_2} u_3 u_4) + u_3 (\gamma_2 + r_2 v_4) \end{bmatrix}$$

Al igual que en el modelo de BVAM, las condiciones de frontera para la ecuación de BVAM acoplada son Neumann, solo que las matrices son:

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

y lo escribimos en la ventana que se muestra en el capítulo 3, sección 3,2,4, figura 3,17.

También definimos las constantes que necesitamos, siguiendo los pasos del capítulo 3, sección 3,2,4, figura 3,18. Estas son: $\alpha_1, \beta_1, \delta_1, \gamma_1, D_1, \alpha_2, \beta_2, \delta_2, \gamma_2, D_2, q_1, q_2, q_3, r_1$ y r_2 .

4.3. ECUACIÓN DE BVAM EN FORMA DÉBIL

Discutimos en la sección 3,2,2 que FEMLAB permite introducir directamente la forma débil, lo que resulta muy ventajoso. Los pasos para introducir el modelo BVAM en forma débil (Ec. 3,4) son:

1. Elegimos el espacio, como lo mostramos en el capítulo 3, sección 3,2,1, figura 3,2. El espacio con que trabajamos son: $2D$ y $3D$.
2. Elegimos el módulo, forma débil, de la manera que se mostró en el capítulo 3, sección 3,2,2, figura 3,9. Especificamos que se trata de un problema dependiente del tiempo y definimos las variables dependientes u_1 y u_2 .
3. Creamos la geometría del dominio, como se mostro en el capítulo 3, sección 3,2,3, figura 3,10.
4. Para definir los parametros físicos de la ecuación de BVAM, utilizando forma débil, tenemos del capítulo 3, sección 3,1,1 que la forma débil de la ecuación de reacción difusión tiene la forma general

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \mathbf{v} dA = \mathbf{D} \int_{\partial \Omega} (\mathbf{v} \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) ds - \mathbf{D} \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{F} \mathbf{v}) dA \quad \forall \mathbf{v} \in H^m(\Omega) \quad (4.3)$$

Como la ecuación BVAM es un sistema de dos ecuaciones $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ y $\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \alpha u_1(1 - r_1 u_2^2) + u_2(1 - r_2 u_1) \\ \beta u_2(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} u_1 u_2) + u_1(\gamma + r_2 u_2) \end{pmatrix}$. Los Campos que hay que llenar

son: **weak**, **dweak**, **constr**, **init**, esto lo apreciamos la figura 4,3

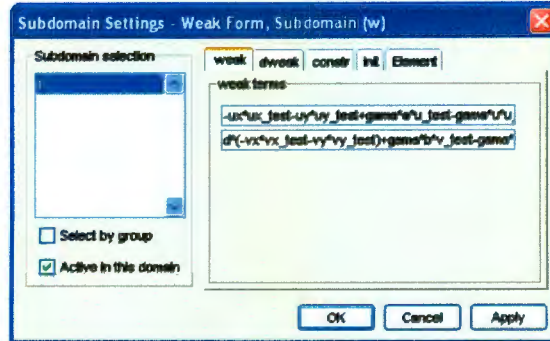


Figura 4.3

Entonces tenemos:

- a) **weak**: En este campo escribimos el integrando de $-D \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v} - \mathbf{F} \mathbf{v}) dA$.

Es decir:

$$(\nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{v}) - \mathbf{F} \mathbf{v} = \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} - \mathbf{F} \mathbf{v}.$$

De acuerdo a la notación de FEMLAB $\frac{\partial u}{\partial x} = \mathbf{ux}$, $\frac{\partial v}{\partial x} = \mathbf{ux_test}$, $\frac{\partial u}{\partial y} = \mathbf{uy}$, $\frac{\partial v}{\partial y} = \mathbf{uy_test}$, $\mathbf{v} = \mathbf{u_test}$, entonces lo que introducimos en este campo es:

$$\mathbf{ux} * \mathbf{ux_test} + \mathbf{uy} * \mathbf{uy_test} - \mathbf{F} * \mathbf{u_test}.$$

Sustituyendo los valores de \mathbf{u} , \mathbf{v} y \mathbf{F} para el caso particular de la ecuación de BVAM, tenemos

$$\begin{aligned} & -D * \text{delta}(u_1x * u_1x_test + u_1y * u_1y_test - ((\text{alpha} * u_1(1 - r_1u_2^2) + u_2(1 - r_2u_1)) * u \\ & - \text{delta}(u_2x * u_2x_test + u_2y * u_2y_test - ((\text{beta} * u_2(1 + \frac{\text{alpha} * r_1}{\text{beta}}u_1u_2) + u_1(\text{gama} + : \end{aligned}$$

- b) **dweak**: Aquí se introduce el integrando de $\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \mathbf{v} dA$. De acuerdo a la notación de FEMLAB $\mathbf{v} = \mathbf{u_test}$, $\frac{\partial u}{\partial t} = \mathbf{u_time}$, entonces la entrada de este campo es; en general

$$\mathbf{u_time} * \mathbf{u_test}$$

En particular para la ecuación BVAM tenemos:

$$u_1_time * u_1_test$$

$$u_2_time * u_2_test$$

- c) **constr**: Aquí se introduce el término restante, es decir el integrando de $\mathbf{D} \int_{\partial\Omega} (\mathbf{v}(\nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n})) ds$. Que, dada la notación del programa es:

$$\mathbf{D} * (\mathbf{u_test} * (\mathbf{ux} * n_1 + \mathbf{uy} * n_2))$$

En particular para la ecuación BVAM, en este campo llenamos con ceros, debido a que ocupamos condiciones de frontera de flujo cero.

5. Los campos que debemos llenar son: **weak**, **dweak**, **constr**. En este caso las condiciones de frontera son esenciales, es decir ya están incluidas en el espacio $H_0^1(\Omega)$. De manera que completaremos los campos con ceros, como se muestra en la figura 4,4

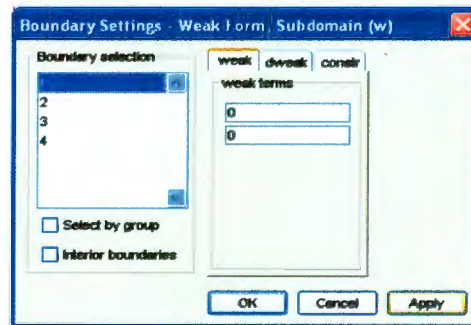


Figura 4.4

como utilizamos condiciones de frontera de flujo cero debemos llenar los tres campos con ceros.

6. En seguida definimos las constantes que necesitamos, siguiendo los pasos del capítulo 3, sección 3,2,4, figura 3,18, las cuales son: α , β , δ , γ , D , r_1 y r_2 .
7. Ya que definimos nuestros parámetros físicos y constantes inicializamos el mal-lado, como se muestra en el capítulo 3, sección 3,2,5, figura 3,19.
8. Como nuestro problema es dependiente del tiempo, especificamos el tiempo al cual queremos la solución siguiendo los pasos que dimos en el capítulo 3, sección 3,2,6 y como último paso resolvemos la ecuación.

4.4. CONDICIONES INICIALES

El papel que juegan las condiciones iniciales es muy importante, ya que es la forma de perturbar el estado estacionario, lo que da lugar a la formación del patrón. Dichas

condiciones deben ser aleatorias, y precisamente uno de los problemas a los que nos enfrentamos cuando decidimos utilizar el programa FEMLAB, fue como hacer que las condiciones iniciales fueran aleatorias, ya que este programa no cuenta con esta posibilidad. Para resolver este problema optamos por utilizar la función *coseno*, ya que es una función oscilatoria y al calcular el *coseno* de números grandes la oscilación es mayor, ahora para que este número no sea fijo utilizamos la variable espacial x , que depende del dominio en que estemos trabajando, con este procedimiento simulamos tener condiciones aleatorias.

En el programa FEMLAB, cuando definimos los parámetros físicos de la ecuación, ya sea en forma débil o de coeficiente, hay un campo en donde se especifican las condiciones iniciales, en particular para la ecuación BVAM escribimos

$$\cos(1000000 * x).$$

Utilizando esta expresión obtuvimos los resultados que mostramos en el siguiente capítulo.

Capítulo 5

RESULTADOS

En este capítulo, se muestran los resultados obtenidos al implementar en el programa FEMLAB, los sistemas de ecuaciones del modelo de BVAM y del modelo de BVAM acoplado. Consideramos diferentes dominios, para lo cual utilizamos los conjuntos de parámetros que obtuvimos al realizar el análisis lineal (capítulo 2) de estos sistemas de ecuaciones. En todos los casos corresponden a un número de onda $k = 0,42$ y $k = 0,84$, por lo que tienen una longitud de onda $\lambda = 14.96$ y $\lambda = 7.48$.

Los parámetros que controlan si el patrón es de puntos o de rayas son r_1 y r_2 , que se discutieron en el capítulo 2, nosotros utilizamos valores tanto para rayas como para puntos.

En todos los casos se asignó una aproximación de Lagrange y un mallado de elementos triangulares.

Para mostrar nuestros resultados los dividimos de acuerdo al tipo de dominio.

5.1. DOMINIOS SENCILLOS

1.- MODELO BVAM EN DOMINIOS CUADRADOS:

Las siguientes figuras muestran los patrones en dominios cuadrados, que se obtuvieron al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB, calculadas con los parámetros que se indican al pie de cada una de ellas.

En la figura 1 consideramos un dominio de $100 \times 100m$. Los valores de r_1 y r_2 los tomamos para obtener patrones de líneas. En ambos casos usamos un mallado de 978 elementos. El tiempo en el que se logró un patrón estacionario fue de 3000 s en (a) y de , 7000 s en (b)

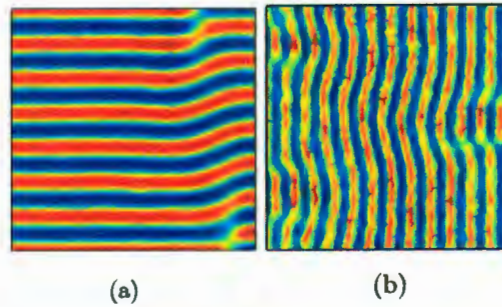


Figura 1

Parámetros: (a) $D=0.516$, $\delta=2$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=3.5$, $r_2=0$,
 (b) $D=0.122$, $\delta=2$, $\alpha=0.398$, $\gamma=-0.398$, $\beta=-0.4$, $r_1=3.5$, $r_2=0$.

En la figura 2 consideramos un dominio de $100 \times 100 m$, y tomamos r_1 y r_2 de manera que obtuvieramos patrones de puntos. Se considero un mallado triangular de 960 elementos. El tiempo necesario para que el patron se estabilizara fué de 800 s, en ambos casos.

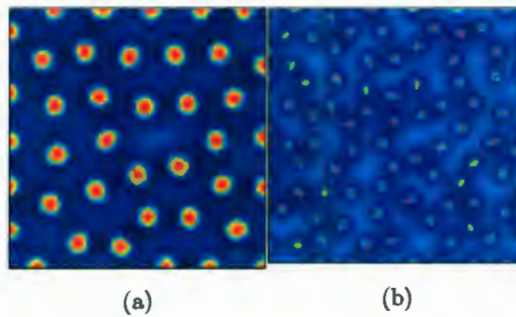


Figura 2

Parámetros: (a) $D=0.516$, $\delta=2$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=0.02$, $r_2=0.2$,
 (b) $D=0.122$, $\delta=2$, $\alpha=0.398$, $\gamma=-0.398$, $\beta=-0.4$, $r_1=0.02$, $r_2=0.2$

En la Figura 3 se muestran dos patrones que obtuvimos con conjuntos diferentes de parámetros, que también satisfacen las condiciones de estabilidad. En (a) tomamos un dominio de $30 \times 30 m$, un mallado de 960 elementos. El patrón de puntos estacionario se obtuvo a los 500 s. A (b) le corresponde un dominio de $100 \times 100 m$, y un mallado de 984 elementos. Como se observa, el patrón es mixto: de puntos y de rayas, desde 800s, este patrón ya era estacionario, como se verificó extendiendo el tiempo hasta los 7000s, sin observar cambio alguno.

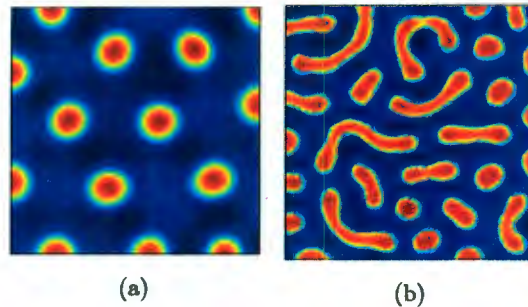


Figura 3

Parámetros $D=0.182$, $\delta=2$, $\alpha=0.5$, $\beta=-0.578$, $\gamma=-0.5$, $r_1=0.5$, $r_2=0.47$.
 (b) $D=0.5$, $\delta=2$, $\alpha=0.9$, $\beta=-1$, $\gamma=-0.95$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$.

2.-MODELO DE BVAM EN UN DISCO:

Las siguientes figuras muestran los resultados en dominios circulares, que se obtuvieron al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB, calculadas con los parámetros que se indican al pie de cada una de ellas.

En la figura 4 se muestran los patrones obtenidos con los conjuntos de parámetros de la sección 2.1; con $\delta = 0,01011$, en lugar de $\delta = 2$, (este parámetro sólo controla el tamaño del sistema). Utilizamos valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de puntos. Tomando un dominio de radio $1m$, un mallado triangular de 732 elementos, se consiguieron patrones estacionarios en un tiempo de 200s en (a) y de 800s en (b).

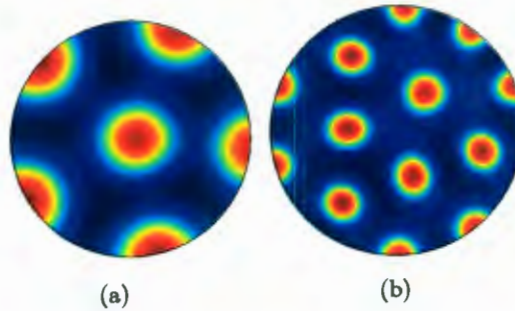


Figura 4

Parámetros: (a) $D=0.51$, $\delta=0.01011$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$.
 (b) $D=0.122$, $\delta=0.01011$, $\alpha=0.398$, $\gamma=-0.398$, $\beta=-0.4$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$

En la figura 5 ocupamos los parámetros de la sección 2,1, que corresponden a $k = 0,42$ y $k = 0,84$, con $\delta = 0,0075$ en lugar de $\delta = 2$. Para ambos casos tomamos un dominio de $1m$ de radio, un mallado triangular de 732 elementos, en un tiempo de $200s$ para (a) y $1000s$ en (b), para obtener un patrón estacionario.

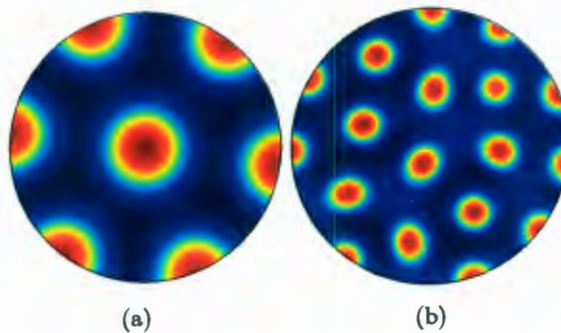


Figura 5

Parámetros: (a) $D=0.516$, $\delta=0.0075$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$.
 (b) $D=0.122$, $\delta=0.0075$, $\alpha=0.398$, $\gamma=-0.398$, $\beta=-0.4$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$

En la figura 6 resolvimos con los parámetros de la sección 2,1, con $\delta = 0,0065$ en lugar de $\delta = 2$, y utilizamos valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de puntos. Tomamos un dominio de $1m$ de radio, un mallado triangular de 732 elementos, con un tiempo de $200s$ para (a) y de $1000s$ en (b) para obtener un patrón estacionario.

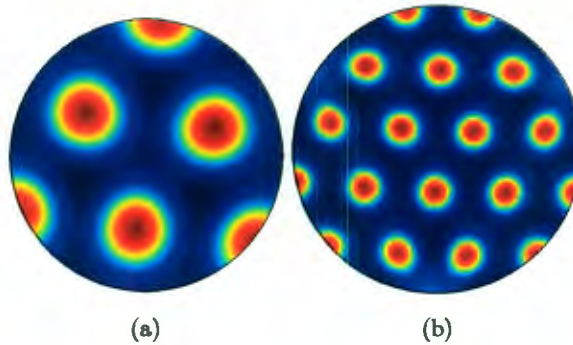


Figura 6

Parámetros: (a) $D=0.516$, $\delta=0.0065$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$.
 (b) los valores $D=0.122$, $\delta=0.0065$, $\alpha=0.398$, $\gamma=-0.398$, $\beta=-0.4$, $r_1=0.2$, $r_2=0.2$.

En la figura 7 se muestran los patrones obtenidos con uno de los conjuntos de parámetros de la sección 2,1. Modificamos el valor de δ como sigue: en (a) $\delta = 0,010111$, en (b) $\delta = 0,0075$ y en (c) $\delta = 0,0065$. Consideramos un dominio de radio $4m$, un mallado de 738 elementos y utilizamos valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de rayas con un tiempo de $20000s$ se lograrón patrones estacionarios.

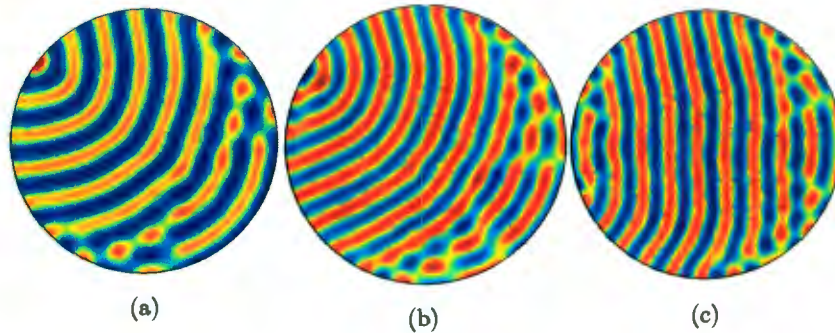


Figura 7

Parámetros en los tres casos: $D=0.516$, $\delta=0.01011$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=3.5$, $r_2=0$.
 Los valores de δ son: (a) $\delta = 0,010111$, en (b) $\delta = 0,0075$ y en (c) $\delta = 0,006$.

3.-MODELO BVAM ACOPLADO EN UN CUADRADO

En las siguientes figuras podemos apreciar los patrones que resultan de implementar en el programa FEMLAB, el modelo de BVAM acoplado (discutido en la sección 2,2), en dominios cuadrados. Los parámetros se indican al pie de cada una de ellas.

Para este sistema de cuatro ecuaciones utilizamos los dos conjuntos de parámetros de la sección 2,1, tomamos para el sistema (u, v) los correspondientes a $k = 0,42$ y para el sistema (u', v') los de $k = 0,84$. A diferencia del modelo BVAM, tenemos un término q_i para $i = 1, 2, 3$, al cual le asignamos un valor de $0,55$ ó 0 .

En la figura 8 consideramos $q_1 = 0,55$ y $q_2 = q_3 = 0$. En (a) consideramos un dominio de $60 \times 60m$, con un mallado de 972 elementos. Los valores de r_1 y r_2 se escogieron de manera que se obtuvieran patrones de rayas. En un tiempo de $3500s$ se consiguió un patrón estacionario. En (b) el dominio es de $100 \times 100m$, con un mallado de 978 elementos. Los parámetros r_1 y r_2 se escogieron de manera que obtuvieramos patrones de puntos, que llevó un tiempo de $1000s$.

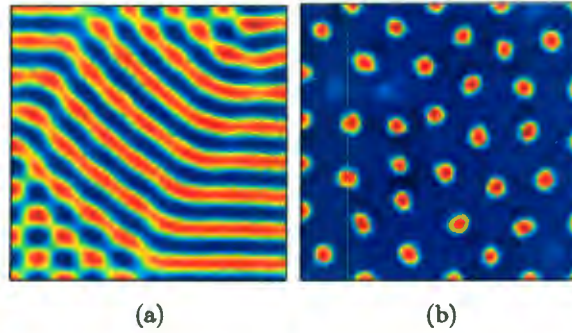


Figura 8

Parámetros para ambos casos: $D_1=0.516$, $\alpha_1=0.899$, $\beta_1=-0.91$, $\gamma_1=-0.899$, $\delta_1=2$,
 $D_2=0.122$, $\alpha_2=0.398$, $\beta_2=-0.4$, $\gamma_2=-0.398$, $\delta_2=2$, $q_1=0.55$, $q_2=0$, $q_3=0$.
 Los valores de r_1 y r_2 son: $r_1=3.5$, $r_2=0$ en (a) y $r_1=0.02$, $r_2=0.2$ en (b).

En la figura 9 consideramos $q_2 = 0,55$ y $q_1 = q_3 = 0$. En (a) consideramos un dominio de $60 \times 60m$, con un mallado de 972 elementos. Utilizamos r_1 y r_2 de manera que se obtuvieran patrones de rayas, y en un tiempo de $2000s$ se consiguió un patrón estacionario. En (b) el dominio es de $100 \times 100m$, con un mallado de 978 elementos. r_1 y r_2 se escogieron de manera que obtuvieramos patrones de puntos y un tiempo de $1000s$.

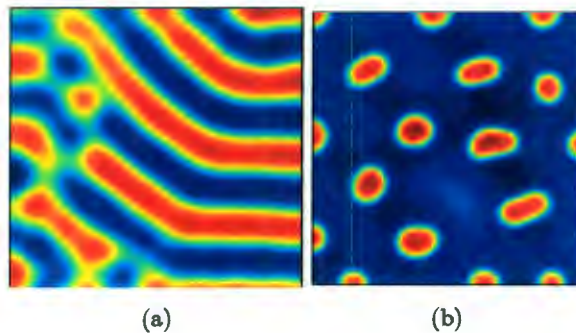


Figura 9

Parámetros para ambos casos: $D_1=0.516$, $\alpha_1=0.899$, $\beta_1=-0.91$, $\gamma_1=-0.899$, $\delta_1=2$,
 $D_2=0.122$, $\alpha_2=0.398$, $\beta_2=-0.4$, $D_2=-0.398$, $\delta_2=2$, $q_1=0$, $q_2=0.55$, $q_3=0$.
 Los valores de r_1 y r_2 son: $r_1=3.5$, $r_2=0$. en (a) y $r_1=0.02$, $r_2=0.2$

En la figura 10 usamos $q_3 = 0,55$ y $q_1 = q_2 = 0$. En (a) consideramos un dominio de $60 \times 60m$, con un mallado de 972 elementos. Utilizamos r_1 y r_2 de manera que se obtuviera un patrón de rayas. En un tiempo de $3500s$ se consiguió un patrón estacionario. En (b) el dominio es de $100 \times 100m$, con un mallado de 978 elementos, r_1 y r_2 se escogieron de manera que obtuvieramos un patrón de puntos. En un tiempo de $1000s$ se obtuvo un patrón estacionario.

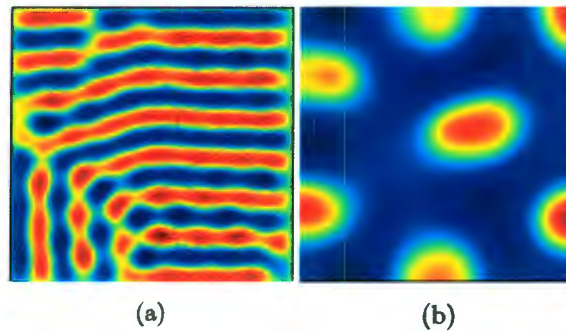


Figura 10

Parámetros $D_1=0.516$, $\alpha_1=0.899$, $\beta_1=-0.91$, $\gamma_1=-0.899$, $\delta_1=2$ $D_2=0.122$,
 $\alpha_2=0.398$, $\beta_2=-0.4$, $\gamma_2=-0.398$, $\delta_2=2$, $q_1=0$, $q_2=0$, $q_3=0.55$. Los valores
de r_1 y r_2 usados fueron: (a) $r_1=3.5$, $r_2=0$ y (b) $r_1=0.02$, $r_2=0.2$.

4.-MODELO BVAM ACOPLADO EN UN CIRCULO

En las siguientes figuras podemos apreciar los patrones resultantes, después de implementar en el programa FEMLAB, el modelo de BVAM acoplado, en dominios circulares. Los parámetros se indican al pie de cada una de ellas.

Para este sistema de cuatro ecuaciones utilizamos los dos conjuntos de parámetros de la sección 2,1, tomando para el sistema (u, v) los correspondientes a $k = 0,42$ y para el sistema (u', v') los de $k = 0,84$. Al término q_i para $i = 1, 2, 3$, les asignamos un valor de 0,55 ó 0

En la figura 11 consideramos un dominio circular de 30m de radio con un mallado de 768 elementos, con r_1 y r_2 de manera que se genere un patrón de rayas. En (a) $q_1 = 0,55$, $q_2 = q_3 = 0$, en (b) $q_2 = 0,55$, $q_1 = q_3 = 0$ y en (c) $q_3 = 0,55$ y $q_1 = q_2 = 0$, con un tiempo de 10 000s para obtener un patrón estacionario.

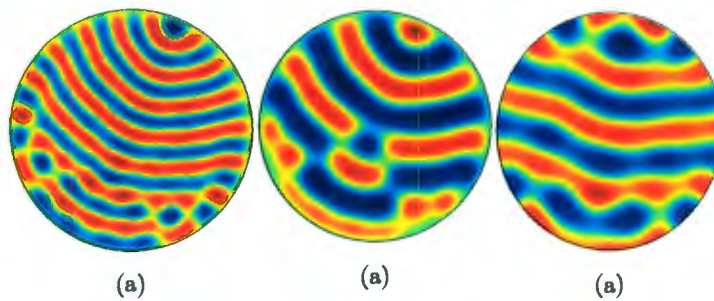


Figura 11

Parámetros para los tres casos: $D_1=0.516$, $\alpha_1=0.899$, $\beta_1=-0.91$, $\gamma_1=-0.899$, $\delta_1=2$, $D_2=0.122$, $\alpha_2=0.398$, $\beta_2=-0.4$, $\gamma_2=-0.398$, $\delta_2=2$, $r_1=3.5$, $r_2=0$.

Ahora: $q_1=0.55$, $q_2=0$, $q_3=0$, (b) $q_1=0$, $q_2=0.55$, $q_3=0$ y (c) $q_1=0$, $q_2=0$, $q_3=0.55$.

5.2. DOMINIOS COMPLEJOS

1.- MODELO BVAM EN UNA ESFERA:

En las siguientes figuras se muestran los resultados obtenidos, al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB, tomando como dominio la superficie de una esfera. Los parámetros se indican al pie de página de cada figura.

En la figura 12, Consideramos los conjuntos de parámetros de la sección 2,1; con $\delta = 0,01011$, en lugar de $\delta = 2$. Utilizamos valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de puntos. Tomando un dominio esférico de radio $1m$, con un mallado de 9349 elementos. En un tiempo de $2000s$ se consiguieron patrones estacionarios.

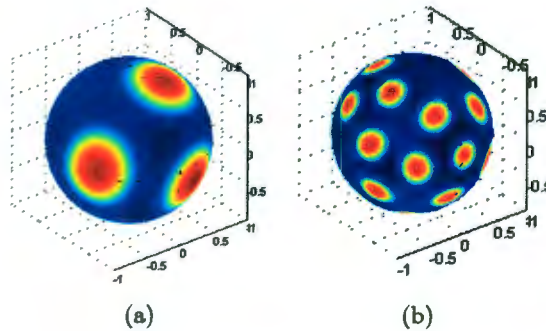


Figura 12

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.01011, \gamma=-0.899, r_1=0.2, r_2=0.2$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.01011, \gamma=-0.398, r_1=0.2, r_2=0.2$.

En la figura 13, Consideramos los parámetros que obtuvimos en la sección 2,1, con $\delta = 0,0075$ en lugar de $\delta = 2$. Utilizamos r_1 y r_2 para obtener un patrones de puntos. Tomando un dominio esférico de radio $1m$, con un mallado de 9349 elementos. En un tiempo de $2000s$ se consiguieron patrones estacionarios.

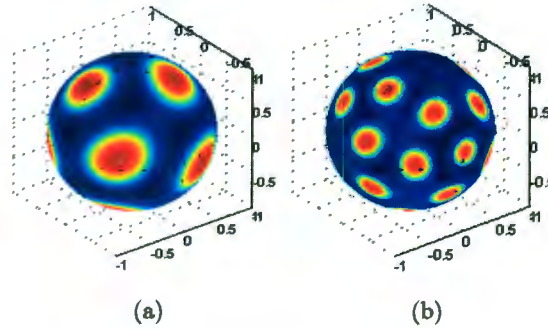


Figura 13

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.0075, \gamma=-0.899, r_1=0.2, r_2=0.2$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.0075, \gamma=-0.398, r_1=0.2, r_2=0.2$.

En la figura 14, Consideramos un dominio esférico de radio $1m$, un mallado de 9349 elementos. Utilizamos los parámetros que obtuvimos en la sección 2,1, con $\delta = 0,0065$, en lugar de $\delta = 2$ y r_1 y r_2 de manera que los patrones fueran de puntos. En un tiempo de $2000s$ se obtuvo un patrón estacionario.

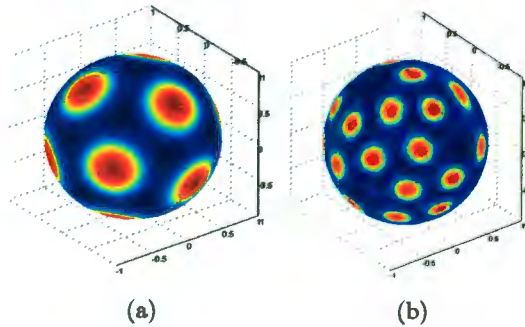


Figura 14

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.0065, \gamma=-0.899, r_1=0.2, r_2=0.2$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.0065, \gamma=-0.398, r_1=0.2, r_2=0.2$.

En la figura 15, Consideramos un dominio esférico de radio $1m$, un mallado de 9349 elementos. Tomando los parámetros que obtuvimos en la sección 2,1, con $\delta =$

0,01011, en lugar de $\delta = 2$. Los valores r_1 y r_2 para obtener patrones de rayas. En un tiempo de 2000s se consiguió un patrón estacionario.

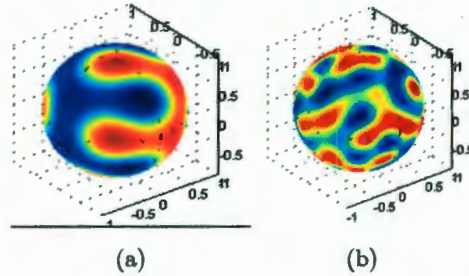


Figura 15

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.01011, \gamma=-0.899, r_1=3.5, r_2=0$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.01011, \gamma=-0.398, r_1=3.5, r_2=0$.

En la figura 16, Utilizamos los parámetros que obtuvimos en la sección 2,1, con $\delta = 0,0075$ en lugar de $\delta = 2$. Consideramos un dominio esférico de radio $1m$, un mallado de 9349 elementos. Los valores r_1 y r_2 de manera que el patrón fuera de rayas. En un tiempo de 5000s se consiguió un patrón estacionario.

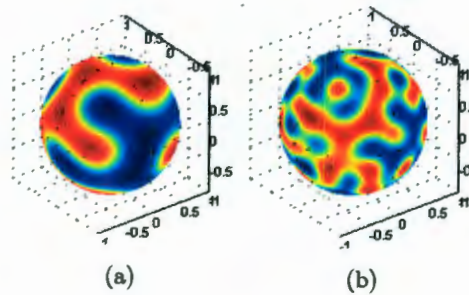


Figura 16

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.0075, \gamma=-0.899, r_1=3.5, r_2=0$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.0075, \gamma=-0.398, r_1=3.5, r_2=0$.

En la figura 17, resolvimos con los parámetros de la sección 2,1, con $\delta = 0,0065$ en lugar de $\delta = 2$, y utilizamos valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de rayas.

Tomamos un dominio esférico de radio $1m$, un mallado de 9349 elementos. En un tiempo de $3500s$ se consiguió un patrón estacionario.

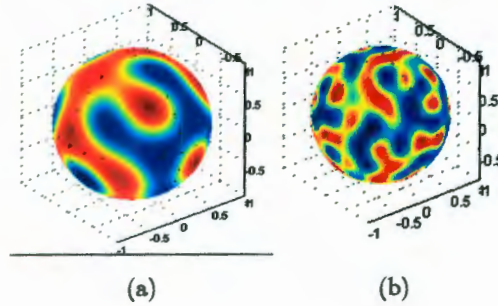


Figura 17

Parámetros: (a) $D=0,516, \alpha=0.899, \beta=-0.91, \delta=0.0065, \gamma=-0.899, r_1=3.5, r_1=0$. (b) $D=0,122, \alpha=0.398, \beta=-0.4, \delta=0.0065, \gamma=-0.398, r_1=3.5, r_1=0$.

La posibilidad de resolver ecuaciones de la biología matemática en la superficie de una esfera ha sido de interés porque es la forma de varios sistemas biológicos como virus, radiolarias, granos de polen, membranas de células, etc... [24]. Un estudio sistemático de las diferentes simetrías de patrones que se obtienen en la esfera es muy factible y razonablemente simple usando FEMLAB, aunque esto sale del objetivo de este trabajo. Aparte de los problemas de origen biológico, existen muchos otros problemas de interés que se han resuelto en la superficie de una esfera, son el problema de Saffman-Taylor (miscibilidad de fluidos viscosos) [20] y el auto-ensamble de copolímeros [12].

2.- MODELO BVAM EN UN CUBO:

Es muy poco lo que se ha hecho con respecto a la obtención de patrones de Turing en tres dimensiones, debido a las complicaciones de la programación y el tiempo de cómputo requerido. Con el programa FEMLAB es muy sencillo plantear el problema tridimensional aunque no se resuelve el problema del tiempo de cómputo, que sigue siendo costoso. Aquí mostraremos un ejemplo muy simple, un cubo, que muestra las características generales de los patrones tridimensionales.

En la figura 18 observamos los resultados obtenidos al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB. Utilizamos los parámetros de la sección 2.1. Consideramos un cubo de $30m \times 30m \times 30m$, un mallado de 17744 elementos. Tomando valores de r_1 y r_2 para obtener patrones de puntos. En un tiempo de $1000s$ logramos

un patrón estacionario. En (a) mostramos el resultado sobre la superficie del cubo y en (b) sobre la isosuperficie del cubo.

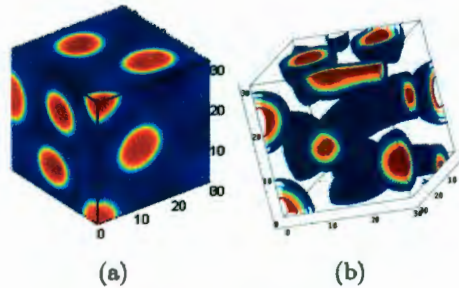


figura 18

Parámetros: $D=0.516$, $\delta=2$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$, $r_1=0.02$, $r_2=0.2$

3.- MODELO BVAM EN UN PENTÁGONO

La forma del dominio y las condiciones de frontera son de gran importancia, ya que los sistemas biológicos, tales como los patrones observados en la piel de algunos peces marinos tienen formas muy complejas[23]. Aquí consideraremos un dominio más complejo, que asemeja la concha de un erizo de mar.

En las siguientes figuras se muestran los resultados obtenidos, al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB.

En la figura 19 consideramos los parámetros de la sección 2,1 que se indican al pie de página. Tomando como dominio un pentágono con las esquinas curvas. Utilizamos un mallado de 960 elementos. En (a) los valores de r_1 y r_2 se asignaron para obtener un patrón de puntos y en (b) para obtener un patrón de rayas. En ambos casos el

tiempo que llevo conseguir un patrón estacionario fue de 3000s.

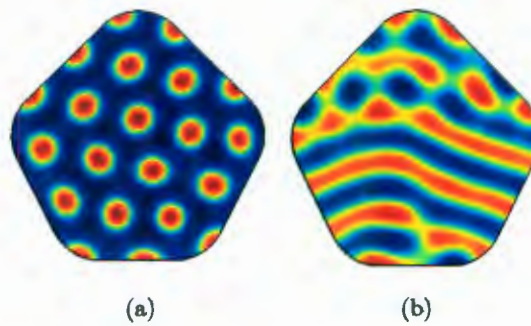


Figura 19

Parámetros: $D=0.516$, $\delta=2$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$.
 Ahora (a) $r_1=0.2$, $r_2=0.2$, y (b) $r_1=3.5$, $r_2=0$.

En la figura 20 consideramos los parámetros de la sección 2,1 que se indican al pie de página. Tomando como dominio un pentágono con las esquinas curvas y un hueco en el centro. Utilizamos un mallado de 960 elementos. En (a) los valores de r_1 y r_2 se asignaron para obtener un patrón de puntos y en (b) para obtener un patrón de rayas. En ambos casos el tiempo que llevo conseguir un patrón estacionario fue de 5000s.

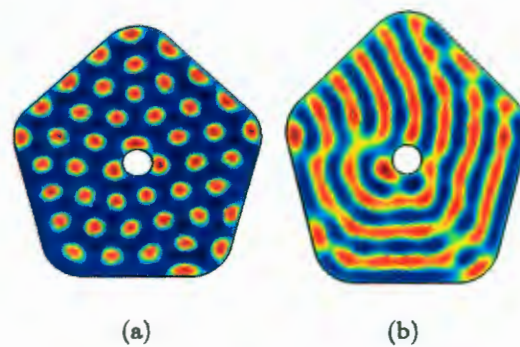


Figura 20

Parámetros: $D=0.516$, $\delta=2$, $\alpha=0.899$, $\gamma=-0.899$, $\beta=-0.91$.
 Ahora (a) $r_1=0.2$, $r_2=0.2$, y (b) $r_1=3.5$, $r_2=0$.

4.-MODELO BVAM EN DOMINIOS COMBINADOS

En las siguientes figuras se muestran los resultados obtenidos al implementar el modelo de BVAM en el programa FEMLAB, consideramos dominios mixtos. Utilizamos los dos conjuntos de parámetros, uno en cada dominio, los cuales se especifican al pie de pagina de cada una de ellas.

En la Figura 21 Consideramos dos dominios: primero un cuadrado de $60 \times 60 m$, segundo un círculo de radio $10 m$. Un mallado de 1004 elementos. En (a) los parámetros r_1 y r_2 de manera que obtuvieramos un patrón de rayas y en (b) para obtener un patrón de puntos. En ambos casos el tiempo en que se logró un patrón estacionario fué de $1000s$

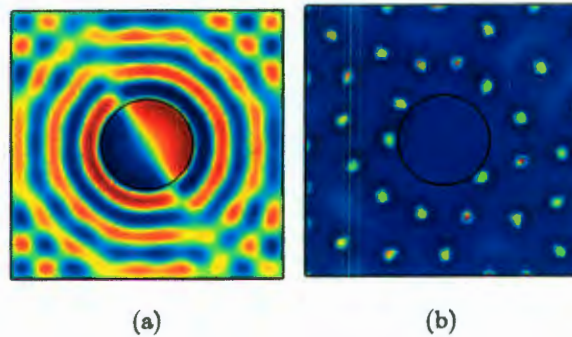


figura 21

Parámetros en el dominio circular: $D_1=0.516$, $\delta=2$, $\alpha_1=0.899$, $\gamma_1=-0.899$, $\beta_1=-0.91$.

Parámetros en el dominio cuadrado $D_2=0.122$, $\delta=2$, $\alpha_2=0.398$, $\gamma_2=-0.398$, $\beta_2=-0.4$.

En ambos casos $r_1=3.5$, $r_2=0$.

Una observación importante que resulta de este ejemplo, al combinar dos dominios con diferente coeficiente de difusión, es que las líneas en el dominio exterior se alinean a la forma del dominio interior. Este es un resultado interesante porque las líneas de los patrones de Turing, al resultar de un fenómeno no lineal, no tienen una alineación preferencial. Esto no se observa, sin embargo, en la naturaleza; las rayas en la piel de muchos animales, por ejemplo, son horizontales o verticales. Se han formulado varias posibilidades para generar una orientación preferencial de las líneas de los patrones. Por ejemplo, la existencia de fuentes de morfógenos en ciertas regiones [23] o la modificación de las ecuaciones para generar una dirección de crecimiento [16]. El resultado que obtenemos aquí ofrece otra explicación, biológicamente plausible, que puede ser

explorada con más profundidad. Enseguida mostramos más ejemplos, considerando dominios más complejos.

En la Figura 22 Consideramos dos dominios: El primero un pentágono con vértices curvos, el segundo un círculo de 5 m de radio, Un mallado de 883 elementos. En (a) utilizamos r_1 y r_2 para obtener un patrón de rayas. y en (b) para obtener un patrón de puntos. El tiempo que tomó obtener un patrón estacionario, en ambos casos fué de 3000s.

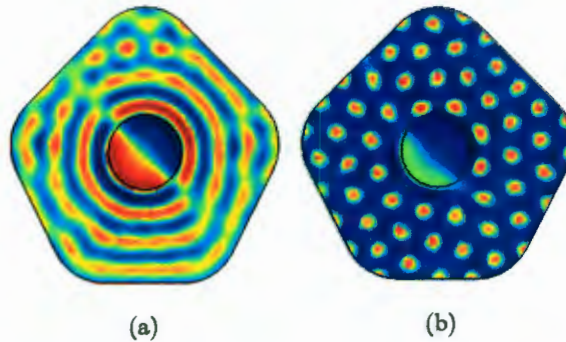


figura 22

En el dominio circular consideramos $D_1=0.516$, $\delta=2$, $\alpha_1=0.899$, $\gamma_1=-0.899$, $\beta_1=-0.91$.

En el dominio pentagonal consideramos $D_2=0.122$, $\delta=2$, $\alpha_2=0.398$, $\gamma_2=-0.398$, $\beta_2=-0.4$

Y en ambos casos $r_1=3.5$, $r_2=0$.

En la Figura 23 Consideramos dos dominios pentagonales: un grande y un pequeño como centro. Un mallado de 1068 elementos y el tiempo al que se consiguió un patrón estacionario fué de 10000s. En (a) utilizamos los parámetros r_1 y r_2 para obtener un

patrón de rayas y en (b) para obtener un patrón de puntos

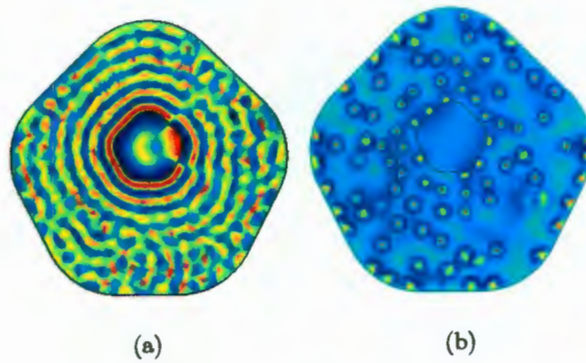


figura 23

Parámetros en el pentagono pequeño: $D_1=0.516$, $\delta=2$, $\alpha_1=0.899$, $\gamma_1=-0.899$, $\beta_1=-0.91$.

Parámetros en el pentagono grande: $D_2=0.122$, $\delta=2$, $\alpha_2=0.398$, $\gamma_2=-0.398$, $\beta_2=-0.4$.

(a) $r_1=3.5$, $r_2=0$ en ambos pentágonos. (b) $r_1=0.02$, $r_2=0.2$ en ambos pentagonos.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis mostramos que las ecuaciones de reacción-difusión, o de Turing, de la biología matemática pueden ser implementadas y resueltas con el programa FEMLAB(ahora COMSOL), obteniendo varias ventajas. Además de que la implementación es relativamente simple, además este programa ofrece herramientas para construir dominios tan complejos como se requieran, lo cual resulta muy complicado cuando se trabaja con un programa en algún lenguaje (FORTRAN o C), debido a que el cambio de dominio implica modificar el código fuente.

Podemos mencionar también aportaciones de este trabajo que van más allá de la implementación misma de las ecuaciones. En el capítulo 4, por ejemplo, se discute con mucho detalle la notación que usa FEMLAB para entender la forma general de las ecuaciones diferenciales que el programa puede resolver. La exposición se lleva hasta desarrollar con mucho detalle las expresiones, y lo que resulta puede ser útil a cualquier interesado en implementar en FEMLAB alguna ecuación poco convencional. Estos detalles están ausentes en los manuales del programa y no son fáciles de deducir dada la arbitrariedad, desde el punto de vista matemático, que se usa en los manuales. También se analiza la opción de introducir una ecuación diferencial parcial en forma débil, con lo cual optimizamos el tiempo, que se tarda el programa en resolver una ecuación, debido a que el primer paso que realiza es llevar la ecuación a su forma débil. Otro punto importante es también que los resultados obtenidos en el Capítulo 5 abren nuevas posibilidades de estudio para trabajos posteriores que salen del objetivo de esta tesis. Por ejemplo, la facilidad para resolver problemas en dominios tridimensionales puede permitir atacar problemas sobre lo que se ha hecho poco dada la complejidad de programar la solución de las ecuaciones en dominios tridimensionales (podemos mencionar, por ejemplo, el problema de la inestabilidad muscular en la superficie del corazón durante los infartos, para lo que existen modelos). En este mismo sentido, podemos mencionar también el resultado obtenido en la Figura 21, al mezclar dos dominios con diferente coeficiente de difusión, que nos produjo una orientación preferencial de las líneas del patrón. Para este problema hay varias hipótesis y, como resultado de nuestros experimentos numéricos, encontramos otra más que requerirá un estudio más detallado.

Bibliografía

- [1] J. L. Aragón, M. Torres, D. Gil, R. A. Barrio and P. K. Maini, "Turing pattern with pentagonal symmetry", *Phys. Rev. E* **65** (2002) 051913-(1-9)
- [2] R. A. Barrio, C. Varea, J. L. Aragón and P. K. Maini, "Two-dimensional Numerical Study of Spatial Pattern Formation in Interacting Turing Systems", *Bull. Math. Biol.* **61** (1999) 483-505
- [3] S. Bhattacharya, "Galerkin model for Turing patterns on a sphere", *Phys. Rev. E* **72**, (2001) 036208-(1-6).
- [4] B. Daya Reddy "Introductory Functional Analysis with Applications to Boundary Value Problems and Finite Elements". Ed. Springer 1998.
- [5] FEMLAB User's Guide". COMSOL AB. 1994.
- [6] FEMLAB "Modeling Guide". COMSOL AB. 1994.
- [7] J. Gjorgjieva "Turing Pattern Dynamics for Spatiotemporal Models with Growth and Curvature" May, 2006.
- [8] A. Hunding and R. Engelhardt, "Early Biological Morphogenesis and Nonlinear Dynamics", *J. theor. Biol.* **173** (1995), 401-413.
- [9] A. J. Koch and H. Meinhardt, "Biological pattern formation: from basic mechanisms to complex structures", *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994) 1481-1507.
- [10] T. Leppänen, "Computational studies of pattern formation in Turing systems", Helsinki University of Computational Engineering, Finlandia 2004.
- [11] T. Leppänen, "The theory of Turing pattern formation", Helsinki University of Computational Engineering. Finlandia 2004.
- [12] J.F. Li, J. Fan, H.D. Zhang, F. Qiu, P. Tang and Y.L. Yang, "Self-assembled pattern formation of block copolymers on the surface of the sphere using self-consistent field theory", *Eur. Phys. J. E* **20** (2006) 449-457.
- [13] A. Madzvamuse, A. J. Wathen and P. K. Maini, "Moving grid of Technology, P.O. Box 9203, FIN-02015 HUT, FINLAND, 2004. finite element method applied to a model biological pattern generator", *Journal of Computational Physics* **190** (2003) 478-500.

- [14] P.K Maini, "Some Mathematical Models for Biological Pattern Formation", Ed. John Wiley & Sons Ltd. Oxford, 1999.
- [15] P.K. Maini, K. J. Painter and H. N. Phong, "Saptial pattern formation in chemical and biological systems", *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, **93** (1997) 3601-3610.
- [16] D.G. Miguez, A.P. Muñozuri, On the orientation of stripes in fish skin patterns, *Biophys. Chem.* **124** (2006) 161-167.
- [17] A. Mukherjee, "The Turing Instability as an Example of Non Equilibrium Symmetry Breaking", Departament of Physics, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2005.
- [18] J.D Murray, *Mathematical Biology*, third edition, *Spatial Models and Biomedical Applications*, vol. II, Springer-Verlag, 2002
- [19] K.J. Painter, P.K. Maini and H.G. Othmer, "Stripe formation in juvenil *Pomacanthus* explained by a generalized Turing Mechanism with chemotaxis", *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **19** (1999), 5549-5554.
- [20] F. Parisio, F. Moraes, J.A. Miranda and M. Widom, "Saffman-Taylor problem on a sphere", *Phys. Rev. E* **63** (2001) Art. No. 036307.
- [21] M.I. Rabinovich, A. B. Ezersky, P. D. Weidman "The Dynamics of Patterns".^{Ed.} World Scientific. Singapur, 2000.
- [22] A.M. Turing, "The chemical basis of morphogenesis", *Phil. Trans. R. Soc. Lond. B* **273** (1952) 37-72.
- [23] C. Varea, J.L. Aragón and R.A. Barrio, "Confined Turing patterns in growing sytems", *Phys. Rev. E* **56** (1997) 1250-1253.
- [24] C. Varea, J.L. Aragón and R.A. Barrio, "Turing patterns on a sphere", *Phys. Rev. E* **60** (1999) 4588-4592.
- [25] C. Varea, J. L. Aragón, R. A. Barrio, "Formación de patrones biológicos", *Rev. C. Quim. Biol.* Vol. **2** (199) 59-68.