



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS  
MATEMÁTICAS Y DE LA ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA  
APLICADA**

**ECUACIONES DE REACCIÓN-DIFUSIÓN CON DIFUSIÓN NO  
HOMOGÉNEA EN CURVAS DEFORMABLES**

**TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS**

**PRESENTA:  
CAMILO EDUARDO GUZMÁN PÉREZ**

**DIRECTOR  
DR. JOSÉ LUIS ARAGÓN VERA  
CENTRO DE FÍSICA APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA**

**CIUDAD DE MÉXICO, OCTUBRE DE 2024**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



# Ecuaciones de reacción-difusión con difusión no homogénea en curvas deformables

Camilo Eduardo Guzmán Pérez

Tesis para optar por el título de:  
**Maestro en Ciencias Matemáticas**

Director:  
Dr. José Luis Aragón Vera

Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada

Universidad Nacional Autónoma de México  
Maestría en Ciencias Matemáticas  
Juriquilla, Querétaro, México  
2024



# Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a la Universidad Nacional Autónoma de México por brindarme la oportunidad de pertenecer a esta universidad de tan alto prestigio. Esto me permitió conocer una nueva cultura y así mismo conocer, trabajar y compartir con diferentes académicos e investigadores de tan alto nivel que hacen parte de esta institución.

Quiero agradecer enormemente al Dr. José Luis Aragón Vera, mi tutor y reconocido investigador por su ayuda y guía para con esta tesis. Su ayuda en diferentes ámbitos como académicos y personales han sido invaluable para mi y siempre estaré agradecido por ello. Su estímulo y consejos me han permitido formarme estupendamente en el área de las matemáticas y adentrarme en este mundo de los patrones de Turing y agradezco eso sinceramente.

Agradezco a mis sinodales, la Dra. Elisa Domínguez Hüttinger, el Dr. Pedro Eduardo Miramontes Vidal, el Dr. Marco Tulio Angulo Ballesteros, el Dr. Gerardo Hernández Dueñas y el Dr. Pablo Padilla Longoria por su apoyo y disposición con esta tesis. Sus comentarios y opiniones fueron invaluable para la culminación de este trabajo de forma exitosa.

Un agradecimiento muy especial para mi pareja, Sara Cuartas Ramírez, quien ha sido la persona que más me ha apoyado durante este proceso. Su cariño, compañía y apoyo durante este tiempo han sido fundamentales para lo que soy ahora.

Quiero finalizar agradeciendo a toda mi familia, quienes desde la lejanía han expresado su emoción y apoyo durante el desarrollo de esta Maestría. Mi madre, padre, tía y hermanos, quienes con sus ánimos me han ayudado a seguir adelante cada vez.



---

# Resumen

Los patrones espaciales que aparecen en la naturaleza ha sido un tema ampliamente estudiado, desde diferentes enfoques. Desde un punto de vista matemático, se han propuesto diversos mecanismos y modelos, dentro de los que destaca el modelo de reacción-difusión desarrollado por el matemático británico Alan M. Turing. Tomando como base este modelo, en este trabajo se estudia un sistema de reacción-difusión, en una dimensión, en un dominio que consiste de una curva encajada en el espacio, bajo un régimen de difusión no homogéneo, es decir, que el coeficiente de difusión depende de la variable espacial. El estudio consta de las siguientes etapas:

1. Se plantea la ecuación de reacción-difusión para un dominio que consiste de una curva encajada en  $\mathbb{R}^3$ , con difusión no homogénea. Esto implica encontrar el operador de Laplace-Beltrami con coeficiente de difusión que depende de la coordenada espacial, para una curva arbitraria.
2. El análisis lineal de Turing se generaliza para la ecuación encontrada en el punto anterior, tanto para curvas dependientes como independientes del tiempo, empleando para ello diferentes consideraciones. Esto permite conocer un conjunto de condiciones para los parámetros de las cinéticas de reacción que son necesarias para el surgimiento de patrones. El resultado más importante que encontramos en esta sección es que el análisis lineal en dominios estacionarios para cualquier curva encajada en el espacio y el análisis lineal propuesto inicialmente por Turing generan las mismas condiciones.
3. Con el fin de verificar los resultados obtenidos por medio de simulaciones numéricas, se implementa el método de elementos espectrales, para resolver numéricamente el sistema de reacción-difusión en curvas encajadas con coeficientes de difusión variable.
4. Se aplica el método de elementos espectrales al modelo de reacción-difusión con cinéticas BVAM, que ha sido ampliamente estudiado, en varias curvas con y sin crecimiento y bajo condiciones de difusión homogénea y no homogénea.

Este trabajo ofrece un nuevo enfoque para el estudio de los patrones de Turing, tanto analíticamente, incluyendo el análisis lineal, como numéricamente al implementar el método de elementos espectrales, permitiendo el estudio de sistemas de reacción-difusión en curvas con condiciones de difusión no homogénea o dependiente de las variables espaciales. También propone nuevas ideas que pueden enriquecer este campo de investigación apuntando a la generalización al análisis débilmente no lineal, así como a superficies, tema que es ampliamente estudiado hoy en día.

Palabras clave: Patrones de Turing, difusión no homogénea, método de elementos espectrales, análisis lineal de Turing en curvas.

# Índice

<b>Resumen</b>	<b>VII</b>
<b>Notación</b>	<b>XI</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>XIII</b>
<b>Lista de Tablas</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. Marco teórico</b>	<b>6</b>
2.1. Análisis lineal de Turing . . . . .	6
2.2. Parametrización de curvas en $\mathbb{R}^3$ que se transforman en el tiempo . . . . .	9
2.3. Polinomios interpoladores de Lagrange . . . . .	11
2.4. Polinomios de Legendre . . . . .	11
2.5. Cuadratura de Legendre-Gauss-Lobatto . . . . .	12
2.6. Integración numérica . . . . .	13
2.7. El modelo Barrio-Varea-Aragón-Maini (BVAM) . . . . .	14
<b>3. Formación de patrones en curvas</b>	<b>17</b>
3.1. Planteamiento del problema . . . . .	17
3.1.1. Deducción del operador de Laplace-Beltrami con difusión variable . . . . .	18
3.1.2. Sistema de Reacción-Difusión con difusión no homogénea en curvas . . . . .	20
3.2. Análisis lineal e inestabilidad de Turing . . . . .	21
3.2.1. Análisis lineal en sistema con difusión constante en curvas estáticas . . . . .	21
3.2.2. Análisis lineal en sistemas con difusión variable en curvas estáticas . . . . .	26
3.2.3. Análisis lineal del sistema en curvas que se transforman en el tiempo . . . . .	28
<b>4. Metodología numérica</b>	<b>32</b>
4.1. Método de elementos espectrales . . . . .	32
4.1.1. Derivación del método de elementos espectrales . . . . .	33
4.1.2. Resumen de MEE para el sistema de reacción-difusión . . . . .	39
4.1.3. Implementación . . . . .	39
<b>5. Ejemplos numéricos</b>	<b>40</b>
5.1. Curvas estáticas . . . . .	40
5.1.1. Parábola con difusión constante . . . . .	41
5.1.2. Elipse con difusión constante . . . . .	43

---

5.1.3. Hélice con difusión variable . . . . .	44
5.2. Sistema de reacción-difusión con crecimiento y deformación del dominio bajo difusión homogénea . . . . .	46
5.2.1. Dominio lineal que crece isotrópicamente en el tiempo . . . . .	47
5.2.2. Espiral hiperbólica que crece isotrópicamente en el tiempo . . . . .	51
5.3. Sistema de reacción-difusión con crecimiento y deformación del dominio bajo difusión no homogénea . . . . .	54
5.3.1. Dominio lineal que crece isotrópicamente en el tiempo con difusión variable . . . . .	54
5.3.2. Espiral con difusión variable. . . . .	56
<b>6. Conclusiones</b>	<b>59</b>
<b>A. Deducción del operador de Laplace-Beltrami en una superficie encajada en <math>\mathbb{R}^3</math></b>	<b>61</b>
<b>Referencias</b>	<b>64</b>

# Notación

Símbolo	Definición
$(\cdot)_t$	Derivada con respecto a la variable $t$ .
$\Delta(\cdot)$	Operador Laplaciano
$\nabla(\cdot)$	Gradiente
$div(\cdot)$	Divergencia
$\mathbf{n}$	Vector normal a $\partial\Omega$
$\partial\Omega$	Frontera del dominio $\Omega$
$\mathbf{J}$	Matriz Jacobiana
$\mathbf{D}$	Matriz de difusión
$tr(\cdot)$	Traza
$ \cdot $	Determinante
$\Delta_M$	Operador de Laplace-Beltrami con difusión constante en la variedad $M$
$\mathcal{D}_M$	Operador de Laplace-Beltrami con difusión variable en la variedad $M$
$\ \cdot\ $	Norma euclidiana
$\langle \cdot, \cdot \rangle_\omega$	Producto interno en $L^2(\Omega)$ con peso $\omega$
$\ \cdot\ _\omega$	Norma $L^2(\Omega)$ con peso $\omega$



# Lista de Figuras

<b>2-1.</b>	Folium de Descartes. . . . .	10
<b>2-2.</b>	Curva $X(s, t)$ para diferentes tiempos, $t = 0$ curva azul, $t = 1$ curva roja y $t = 2$ curva amarilla. . . . .	10
<b>2-3.</b>	Conjunto $(B, C)$ donde se obtiene una solución (Azul), dos soluciones (Amarillo) y tres soluciones (Rojo) para el sistema $f(u, v) = g(u, v) = 0$ en (2-27). Con $A = -1$ y $H = 3$ . . . . .	15
<b>2-4.</b>	Mapa de Turing para los parámetros $B$ y $AH$ de (2-30) con $d_v = 1$ y diferentes valores de $d_u$ . . . . .	16
<b>3-1.</b>	Gráfica de $Re(\lambda(k^2))$ vs $k^2$ . . . . .	26
<b>4-1.</b>	División del dominio en $K$ subintervalos. $\Phi$ denota las soluciones en cada subintervalo, los puntos representan los valores nodales de la solución y la línea continua es la curva de interpolación de los valores nodales. . . . .	32
<b>5-1.</b>	Relación de dispersión (2-11), para el conjunto de parámetros dado en la Tabla <b>5-2</b> . . . . .	41
<b>5-2.</b>	Comparación de la solución usando el MEE (curva negra) con solución de <i>COMSOL</i> (curva roja) y función propia $W_6(s)$ (curva azul) multiplicada por un factor de 0.41197. $t = 500$ . . . . .	43
<b>5-3.</b>	Comparación de la solución usando el MEE (curva negra) y la solución de <i>COMSOL</i> (curva roja), para el tiempo $t = 500$ , con la función propia $W_6(s)$ (curva azul), del análisis lineal, multiplicada por un factor de 0.42301. . . . .	44
<b>5-4.</b>	Gráfica de la hélice generada por la parametrización (5-8). . . . .	45
<b>5-5.</b>	$Re(\lambda(\rho_n))$ vs. $\rho_n$ , obtenido a partir de la solución a la relación de dispersión (3-43) para el conjunto de parámetros de la Tabla <b>5-2</b> . . . . .	45
<b>5-6.</b>	Comparación de la solución por el MEE (curva negra), por el MEF (curva roja), y la función propia $W_n(s)$ (curva azul), para $n = 12$ , $t = 500$ y con difusión variable de la forma $D(s) = 1 - s^2$ . . . . .	46
<b>5-7.</b>	Solución de (3-45) en el espacio fase. $CI$ es la condición inicial y $PE$ el punto de equilibrio. . . . .	48
<b>5-8.</b>	Solución normalizada de (3-58), con $a_0 = 0.003$ y $q_n$ dado en (5-14), para el morfógeno con concentración $u$ , para diferentes valores de $m$ . . . . .	48
<b>5-9.</b>	Solución con el MEE del sistema (3-44) en una línea con crecimiento isotrópico exponencial (5-13), usando los parámetros de la Tabla <b>5-3</b> . . . . .	49

<b>5-10.</b> (a) Comparación de las soluciones de (3-44), con crecimiento exponencial (5-13), y usando los parámetros de la Tabla <b>5-3</b> , por medio del MEE (curva negra), y del MEF (curva azul con marcadores circulares), para $t = 500$ , (b) función propia $W_4(s)$ , (c) comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares), en $t = 1000$ , y (d) función propia $W_{16}(s)$ . . . . .	50
<b>5-11.</b> Espiral hiperbólica (5-17) en $t = 0$ . . . . .	51
<b>5-12.</b> Solución de (3-45) en el espacio fase para crecimiento isotrópico lineal (5-18). $CI$ es la condición inicial y $PE$ el punto de equilibrio. . . . .	52
<b>5-13.</b> Solución normalizada de (3-51), para diferentes valores de $m$ en la hélice hiperbólica, usando (5-18) y (5-19). . . . .	52
<b>5-14.</b> Soluciones numérica de (3-44) con el MEE y funciones propias $W_m(s)$ : (a) $t = 500$ , (b) $W_4(s)$ , (c) $t = 1500$ , (d) $W_6(s)$ , (e) $t = 3000$ , (f) $W_8(s)$ . . . . .	53
<b>5-15.</b> Solución normalizada de (3-51), con los parámetros de la Tabla <b>5-3</b> y los valores propios (5-21). . . . .	54
<b>5-16.</b> Solución con el MEE del sistema (3-44), en una línea con crecimiento isotrópico exponencial (5-13), difusión no homogénea de la forma (5-9), y los parámetros de la Tabla <b>5-3</b> . . . . .	55
<b>5-17.</b> (a) Comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares) en $t = 500$ , (b) Función propia $W_6(s)$ , (c) Comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares) en $t = 1000$ , (d) Función propia $W_{21}(s)$ . . . . .	55
<b>5-18.</b> (a) Espiral (5-24) en $t = 0$ , (b) Espiral (5-24) en $t = 3000$ . . . . .	57
<b>5-19.</b> En la primer columna se muestran las soluciones numérica, mediante el MEE, del sistema (3-18), con (5-25), (5-26), sobre la espiral (5-24) ((a), (c) y (e)). En la segunda columna se muestran los patrones resepectivos ((b), (d) y (f)), para tres diferentes tiempos, de arriba a abajo: $t = 1000$ , $t = 2000$ , y $t = 3000$ . La coloración amarilla indica la máxima concentración del morfógeno $u$ y la coloración azul indica la mínima concentración. . . . .	58

# Lista de Tablas

<b>5-1.</b> Valores de los parámetros usados para el MEE; $a$ y $b$ son los valores extremos del parámetro $s$ con el que se generan las curvas que serán estudiadas. . . . .	40
<b>5-2.</b> Valores de los parámetros para el sistema de RD de los ejemplos desarrollados en la Sección 5.1. . . . .	41
<b>5-3.</b> Datos para los ejemplos con crecimiento isotrópico y difusión constante. . . . .	47

# 1. Introducción

Los patrones espaciales en la naturaleza han sido ampliamente estudiados desde el punto de vista matemático y han sido propuestos diferentes modelos para este fin. Un modelo importante y destacado es el propuesto por Alan M. Turing en el año 1952 [1], denominado modelo de reacción-difusión (RD). Turing planteó que la interacción de dos o más sustancias químicas, las cuales denominó morfógenos, que se difunden y reaccionan en un medio da lugar a la formación de patrones espaciales heterogéneos. Esta idea en su época parecía contraintuitiva para la comunidad científica pues, la difusión era considerada como un agente estabilizador y no daba lugar a la formación de patrones heterogéneos o inestables y así mismo, la reacción química con un equilibrio estable conduce también a patrones espaciales homogéneos, sin embargo, la combinación de ambos mecanismos da origen a patrones espaciales no homogéneos estables. A pesar de esto, estudios posteriores mostraron la relevancia del modelo propuesto por Turing y los tipos de patrones que se producen actualmente reciben el nombre de patrones de Turing [2, 3, 4, 5].

En un sistema de reacción-difusión, hay dos o más sustancias químicas que interactúan entre sí y se difunden en un medio. Las reacciones químicas pueden generar gradientes de concentración que, combinados con la difusión, dan lugar a patrones espaciales complejos. Estos patrones pueden ser rayas, manchas, espirales o cualquier otra forma geométrica, dependiendo de parámetros y configuraciones del sistema.

El modelo y análisis desarrollados inicialmente por Turing [1] fueron realizados: 1) en un dominio estacionario, es decir, un dominio  $\Omega$  constante en el tiempo y 2) considerando que los coeficientes de difusión son constantes en todo el dominio (difusión homogénea). Sin embargo, estos dos supuestos en el modelo de Turing no siempre son adecuados en algunos modelos biológicos; un ejemplo se muestra en la Ref. [6], donde se modela el crecimiento pulmonar temprano mediante un sistema de reacción-difusión, allí se muestra la importancia de la geometría en el modelo y como su evolución en el tiempo refleja cambios en las concentraciones de las sustancias analizadas. Así mismo, en [2] se hizo un estudio comparativo entre el modelo mediante ecuaciones RD y los patrones desarrollados durante el crecimiento de una especie de pez ángel, allí se muestra la veracidad del modelo matemático y cómo la aparición de nuevas rayas se determina por el tamaño del pez ángel en el tiempo. Por otro lado, en [7] se formula un modelo de reacción-difusión para el crecimiento de gliomas bajo un régimen de difusión variable, en donde el coeficiente de difusión refleja la heterogeneidad del tejido cerebral, esto es, cambia cuando la región cerebral es de tejido gris o tejido blanco. Finalmente, en [8] se emplea un coeficiente de difusión dependiente de la curvatura (por ende dependiente del dominio) para modelar la formación de manchas en la piel de las cebras, encontrando que este supuesto produce patrones muy cercanos a los observados en este tipo de animales en la naturaleza.

El estudio del modelo de RD en dominios que crecen ha sido estudiado ampliamente por

diversos autores. En la Ref. [9] este modelo se estudió en un dominio lineal creciente para diferentes funciones de crecimiento, y se encontró que con tasas de crecimiento lento se produce un fenómeno de doblamiento de la frecuencia en los patrones de Turing. En la Ref. [10], fue derivado el modelo de RD en variedades de dimensión 1 y 2 que evolucionan en el tiempo, mostrando el efecto que presenta el crecimiento y la curvatura en la formación de patrones espaciales. Un acercamiento a generalizar las condiciones de Turing en un dominio que crece, viene dado en la Ref. [11], donde derivan las condiciones de Turing para un dominio lineal que crece, mostrando la dependencia temporal de las condiciones de Turing. Con una derivación similar se encontraron las condiciones de Turing en variedades de dimensión 2 que crecen exponencialmente, evidenciando formación de patrones no estacionarios [12]. También se ha estudiado la bifurcación de Turing-Hopf en variedades de dimensión 2 que crecen, dando lugar a patrones no estacionarios [13]. Para este problema de patrones de Turing en dominios que crecen es también importante el estudio de los métodos numéricos, como el método de diferencias finitas generalizado [14] y la propuesta de un nuevo esquema explícito [15], para la solución de un sistema de RD en superficies que cambian en el tiempo. En un estudio alternativo de las condiciones de Turing en variedades que evolucionan se emplea el principio de comparación para determinar la estabilidad del sistema sin difusión, dando lugar a un sistema dinámico no autónomo, que se vuelve inestable al superar un valor límite en la velocidad de crecimiento del dominio, en donde no se producen patrones de Turing [16]. Así mismo en este trabajo se hizo el análisis para diferentes funciones de crecimiento, como exponencial, lineal y sinusoidal (expansión y contracción periódica del dominio).

Con respecto a la segunda generalización, sistemas RD con difusión dependiente de las variables espaciales, en la Ref. [17], se derivaron las condiciones de Turing para el sistema RD con difusión y cinéticas de reacción variables, encontrando que las condiciones de Turing para difusión variable con cinéticas de reacción independientes de la variable espacial no cambian con respecto a las deducidas para difusión constante, es decir, las condiciones de Turing no se ven alteradas para difusión variable. El caso particular de un coeficiente de difusión de la forma  $D(x) = 1 - x^2$ , se estudió en la Ref. [18], incluyendo una generalización del análisis no lineal, utilizando los polinomios de Legendre, con lo que se encontraron las condiciones para la formación de distintos patrones como manchas y franjas. También se encontró que al incorporar difusión no homogénea en el modelo, la longitud de onda es variable en el dominio, a diferencia del análisis realizado por Turing. Finalmente este problema de la difusión no homogénea ha sido abordado utilizando el método de homogenización, que transforma el problema con difusión variable de tipo periódica en un problema con difusión homogénea encontrando un coeficiente de difusión “efectivo” [19].

Los trabajos anteriormente mencionados han sido de gran relevancia en sistemas de reacción-difusión y los patrones de Turing. Sin embargo, los supuestos de difusión variable en curvas o superficies encajadas en  $\mathbb{R}^3$  (esto es, variedades para las cuales existe una función continua de la variedad en  $\mathbb{R}^3$  cuya función inversa también es continua, es decir un encaje) y dominio dependiente del tiempo no han sido abordados de forma simultánea. Así mismo, la existencia de soluciones al problema de Sturm-Liouville generado es en general supuesta (sin hallar una expresión analítica) para la derivación de las condiciones de Turing. Es por esto que el presente trabajo ha sido desarrollado, realizando el estudio de sistemas RD en curvas que se transforman en el tiempo y bajo un régimen de difusión variable sobre el dominio, encontrando que la solución al problema de Sturm-

Liouville generado existe y puede encontrarse analíticamente en algunos casos. De igual forma se desarrolla el método de elementos espectrales para la discretización espacial y el método Euler IMEX para la discretización temporal del sistema RD con la finalidad de validar numéricamente las predicciones encontradas mediante el análisis lineal derivado.

Ambos enfoques, analítico y numérico, son importantes para el estudio de los patrones de Turing, pues por un lado el enfoque analítico dado por el análisis lineal de Turing brinda información cualitativa de la solución del sistema como la forma de la onda, pero presenta imprecisiones en la amplitud de onda debido a la aproximación lineal de las cinéticas. Además, permite determinar de antemano los valores de los parámetros en las cinéticas que producen la inestabilidad impulsada por difusión y por ende alcanzar patrones de Turing. Por otro lado, el enfoque numérico representa una aproximación mucho más precisa que el enfoque analítico que requiere conocer los parámetros de las cinéticas para su funcionamiento, evidenciando la relevancia del enfoque analítico, pues sin esta información la determinación de los parámetros conllevaría a una actividad de ensayo-error hasta alcanzar un patrón, lo que constituye una labor extensa y compleja. De aquí la relevancia y limitaciones de ambos enfoques y la razón por la cual se desarrollan conjuntamente.

Si bien las ecuaciones de reacción-difusión en curvas se trata de un sistema con dimensiones reducidas, las aplicaciones se limitan a la descripción de efectos cualitativos. Un ejemplo notable de esto es el artículo que despertó e impulsó en interés de los patrones de Turing en sistemas biológicos, que se fundamenta en la solución de sistemas unidimensionales [2]. Sin embargo, es importante recalcar que las ecuaciones de reacción-difusión en una dimensión espacial han sido un laboratorio sumamente útil para comprender aspectos fundamentales del proceso de formación de patrones por medio de ecuaciones de reacción-difusión como, por ejemplo, sensibilidad a las condiciones de frontera e iniciales [20, 21], dominios que crecen [9], robustez y efectos del ruido [22], patrones oscilatorios y caos [23] y otros.

Con esto presente, a continuación se detallarán los objetivos del trabajo, así como las contribuciones originales del mismo y la estructura del documento.

## Objetivos del presente trabajo

### Objetivo general

Analizar y resolver numéricamente ecuaciones de reacción-difusión en curvas que se transforman en el tiempo, incrementando su longitud y deformándose, bajo el régimen de difusión homogénea y no homogénea.

### Objetivos específicos

1. Analizar las condiciones para la formación de patrones espaciales, con ecuaciones de reacción-difusión, sobre curvas unidimensionales.
2. Implementar el método de elementos espectrales para resolver numéricamente las ecuaciones de reacción-difusión sobre curvas.
3. Presentar ejemplos numéricos.

## Contribuciones originales del trabajo

1. Expresión del sistema de reacción-difusión sobre variedades de dimensión 1 y 2, con término difusivo dependiente de las variables espaciales, mediante la deducción de los respectivos operadores de Laplace Beltrami: Sec. 3.1.1, para dimensión 1, y Apéndice A, para dimensión 2.
2. Solución explícita del problema de Sturm-Louville generado por el operador de Laplace-Beltrami: Propositiones 1 y 2.
3. Aplicación del resultado anterior para proponer una generalización del análisis lineal de Turing para sistemas cuyo dominio es una curva encajada en el espacio.
4. Implementación en lenguaje Python del Método de Elementos Espectrales para la solución numérica de sistemas de reacción-difusión sobre curvas encajadas en  $\mathbb{R}^3$ .

## Estructura del documento

**Capítulo 1:** Introducción.

**Capítulo 2:** Se presenta el marco teórico, que incluye una serie de conceptos básicos requeridos para el estudio de sistemas de reacción-difusión en curvas tanto numéricamente como de forma analítica.

**Capítulo 3:** Se plantea el modelo de reacción-difusión para curvas encajadas en  $\mathbb{R}^3$  que crecen en el tiempo, para lo cual se realiza la deducción del operador de Laplace-Beltrami en variedades de dimensión 1. Finalmente se desarrolla el análisis lineal del sistema RD propuesto para diferentes casos, difusión constante en curvas independientes del tiempo, difusión variable en curvas independientes del tiempo y análisis lineal en curvas que dependen del tiempo.

**Capítulo 4:** Se desarrolla la metodología numérica del método de elementos espectrales, empleado para la discretización espacial del sistema de reacción-difusión en curvas que dependen del tiempo. Como resultado se genera un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden para los valores nodales de la solución a lo largo del dominio y se plantea el método Euler Implícito-Explícito para la solución de dicho sistema.

**Capítulo 5:** Se presentan los ejemplos numéricos del trabajo, mediante diversos sistemas de RD en curvas y su solución con el método de elementos espectrales desarrollado. Así mismo se realiza la comparación de esta solución con la solución obtenida mediante el análisis lineal, mostrando que la solución numérica conserva características cualitativas de la solución lineal (derivada del análisis lineal) y de igual forma se compara dicha solución con métodos numéricos comerciales ampliamente utilizados.

**Capítulo 6:** Conclusiones.

**Capítulo A:** Apéndice. Deducción del operador de Laplace-Beltrami con difusión variable para variedades de dimensión 2 encajadas en  $\mathbb{R}^3$ .

## 2. Marco teórico

En este capítulo serán expuestas algunas nociones básicas requeridas para los enfoques analítico y numérico de este trabajo. Inicialmente es expuesto el análisis lineal desarrollado por Turing y expuesto en [24], seguido de unas nociones básicas correspondientes a los polinomios interpoladores de Lagrange, polinomios de Legendre, cuadratura de Legendre-Gauss-Lobatto y el método Euler IMEX, útiles para el desarrollo del método de elementos espectrales. Finalmente, es expuesto el modelo BVAM, el cual define unas cinéticas de reacción que serán empleadas en los diferentes ejemplos numéricos.

### 2.1. Análisis lineal de Turing

El modelo de RD para dos morfógenos con concentraciones  $u$  y  $v$ , en un dominio  $\Omega$ , planteado por Turing es

$$(2-1) \quad \begin{aligned} \mathbf{U}_t &= \mathbf{D}\Delta\mathbf{U} + \eta\mathbf{F}(\mathbf{U}) && \text{en } \Omega, \\ \mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{U} &= 0 && \text{en } \partial\Omega, \\ \mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) &&& \text{dada,} \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{U} = (u, v)^T$  ( $T$  denota la matriz transpuesta),  $\mathbf{D} = \text{diag}(d_u, d_v)$ ,  $d_u$  el coeficiente de difusión del morfógeno con concentración  $u$ ,  $d_v$  el coeficiente de difusión del morfógeno con concentración  $v$ ,  $\eta$  un factor de escala y  $\mathbf{F} = [f(u, v) \ g(u, v)]^T$  las cinéticas de reacción, las cuales generalmente vienen dadas por funciones no lineales en términos de las concentraciones  $u$  y  $v$ .

Si  $\mathbf{U}_0 = (u_0, v_0)$  es un estado estacionario, es decir, la solución al sistema  $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = 0$ , asintóticamente estable, entonces las condiciones iniciales  $\mathbf{U}(\mathbf{x}, 0)$  son valores aleatorios de amplitud pequeña alrededor de  $\mathbf{U}_0$ , y la elección de las condiciones de frontera de Neumann (donde la derivada normal  $\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{U}$  es cero en la frontera del dominio), tienen la finalidad de proveer más libertad al sistema para la formación de patrones y no condicionar la formación del patrón como puede suceder en el caso de condiciones de frontera Dirichlet, donde se conoce el valor de la variable dependiente en la frontera del dominio.

Turing planteó que un estado estacionario  $\mathbf{U}_0$  inicialmente estable sin difusión, tiende a ser inestable con la adición de difusión al sistema, para lo cual derivó condiciones necesarias para que el sistema (2-1) cumpla esto. Para revisar estas condiciones, consideremos en primer lugar el sistema (2-1), sin difusión:

$$(2-2) \quad \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_t = \eta \begin{pmatrix} f(u, v) \\ g(u, v) \end{pmatrix}.$$

La estabilidad del sistema se puede determinar a partir de su linealización alrededor del punto de equilibrio  $\mathbf{U}_0$ , esto es

$$(2-3) \quad \mathbf{w}_t = \eta \mathbf{J}(u_0, v_0) \mathbf{w},$$

donde

$$(2-4) \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix},$$

y

$$(2-5) \quad \mathbf{J} = \mathbf{J}(u_0, v_0) = \begin{pmatrix} f_u(u_0, v_0) & f_v(u_0, v_0) \\ g_u(u_0, v_0) & g_v(u_0, v_0) \end{pmatrix}.$$

Los subíndices al interior de la matriz Jacobiana  $\mathbf{J}$  indican la derivada parcial con respecto a la variable indicada. Ahora, para que el sistema (2-2) sea estable, basta con que los eigenvalores del Jacobiano en el sistema (2-3) tengan parte real negativa, lo cual proporciona las siguientes condiciones [24]

$$(2-6) \quad \text{Tr}(\mathbf{J}) = f_u + g_v < 0,$$

$$(2-7) \quad |\mathbf{J}| = f_u g_v - f_v g_u > 0.$$

Ahora, en segundo lugar, introduciendo la difusión en el sistema linealizado, se obtiene

$$(2-8) \quad \mathbf{w}_t = \eta \mathbf{J} \mathbf{w} + \mathbf{D} \Delta \mathbf{w}.$$

Si  $W_k(r)$  son las funciones propias del operador de Laplace, es decir,  $\Delta W_k = -k^2 W_k$ , entonces es razonable proponer una solución a (2-8) de la forma  $\mathbf{w}(r, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k e^{\lambda t} W_k(r)$ . Reemplazando esta propuesta en (2-8), se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k \lambda e^{\lambda t} W_k &= \mathbf{D} \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k e^{\lambda t} \Delta W_k + \eta \mathbf{J} \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k e^{\lambda t} W_k \\ &= -k^2 \mathbf{D} \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k e^{\lambda t} W_k + \eta \mathbf{J} \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{c}_k e^{\lambda t} W_k, \end{aligned}$$

de donde se sigue

$$(2-9) \quad (\lambda \mathbf{I} - \eta \mathbf{J} + k^2 \mathbf{D}) \mathbf{w}_k = \mathbf{0},$$

donde  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad de  $2 \times 2$ . Soluciones no triviales de (2-9) se obtienen si

$$(2-10) \quad |\lambda \mathbf{I} - \eta \mathbf{J} + k^2 \mathbf{D}| = 0.$$

Evaluando el determinante se obtiene

$$(2-11) \quad \lambda^2 + \lambda [k^2(d_u + d_v) - \eta \text{Tr}(\mathbf{J})] + h(k^2) = 0,$$

con

$$(2-12) \quad h(k^2) = d_u d_v k^4 - \eta(f_u d_v + d_u g_v) k^2 + \eta^2 |\mathbf{J}|.$$

La expresión (2-11) establece una relación entre los valores propios temporales  $\lambda$  y espaciales  $k$ , que es conocida como la relación de dispersión de (2-8). Esta expresión es de gran importancia para el análisis lineal de Turing, ya que permite conocer cuándo un conjunto de modos  $k$  tienden a ser estables o inestables para un conjunto de parámetros dado. De la ecuación (2-11), los valores propios del sistema (2-8) vienen dados por

$$(2-13) \quad \lambda = \frac{-k^2(d_u + d_v) + \eta \text{Tr}(\mathbf{J}) \pm \sqrt{[k^2(d_u + d_v) - \eta \text{Tr}(\mathbf{J})]^2 - 4h(k^2)}}{2}.$$

Ahora, el segundo paso del análisis de Turing es que, una vez que se tienen las condiciones para que  $\mathbf{U}_0$  sea asintóticamente estable, en ausencia de difusión, ahora debe ser inestable ante perturbaciones espaciales. Dado que las variables espaciales aparecen cuando se introduce la difusión, a este tipo de inestabilidad también se le conoce como *inestabilidad impulsada por difusión*. Para que esto suceda, se requiere que  $\text{Re}(\lambda(k^2)) > 0$ , para algún  $k \neq 0$ . De (2-13) podemos concluir que esta condición implica

$$k^2(d_u + d_v) - \eta \text{Tr}(\mathbf{J}) < 0.$$

Sin embargo, tomando en cuenta (2-6) y que  $k^2(d_u + d_v) > 0$ , es claro que la condición anterior no puede satisfacerse. Aún así, existe otra posible condición para la cual se puede alcanzar la inestabilidad del sistema:  $h(k^2) < 0$ . Para lograrlo requerimos que alguno de los coeficientes del polinomio  $h(k^2)$  sean negativo, esto es, ya sea que  $|\mathbf{J}| < 0$  o que  $f_u d_v + d_u g_v > 0$ , pero tomando en cuenta (2-7), sólo es posible la condición

$$(2-14) \quad f_u d_v + d_u g_v > 0, \quad d_u \neq d_v.$$

Aquí se impuso una restricción para los coeficientes de difusión, pues para  $d_u = d_v$  se tiene la condición  $f_u + g_v > 0$ , la cual contradice (2-6). Esto, desde un punto de vista físico, indica que los coeficientes de difusión de ambos morfógenos deben ser distintos para dar lugar a la formación de patrones espaciales, es decir, un morfógeno debe difundirse a una velocidad mayor que el otro.

Ahora, la condición (2-14) es necesaria pero no suficiente para garantizar  $\text{Re}(\lambda) > 0$  para algún  $k \neq 0$ , para lograrlo se debe garantizar  $h_{min} < 0$ , entonces derivando  $h(k^2)$  con respecto a  $k^2$  y realizando algunos procesos algebraicos se tiene que

$$h_{min} = \eta^2 \left[ |\mathbf{J}| - \frac{(f_u d_v + d_u g_v)^2}{4d_u d_v} \right], \quad k_m^2 = \eta \frac{f_u d_v + d_u g_v}{2d_u d_v}.$$

Con esto, se obtiene la última condición de Turing

$$(2-15) \quad (f_u d_v + d_u g_v)^2 > 4d_u d_v |\mathbf{J}|.$$

En resumen, las condiciones de Turing para inestabilidad impulsada por difusión, que da lugar a la formación de patrones espaciales en un sistema de 2 morfógenos con concentraciones  $u$  y

$v$ , que se difunden con coeficientes  $d_u$  y  $d_v$ , respectivamente, vienen dadas por

$$(2-16) \quad \begin{aligned} f_u + g_v &< 0, \\ f_u g_v - f_v g_u &> 0, \\ f_u d_v + d_u g_v &> 0, \\ (f_u d_v + d_u g_v)^2 &> 4d_u d_v |\mathbf{J}|. \end{aligned}$$

Las condiciones (2-16) son de gran relevancia para el estudio de los patrones de Turing, pues determinan un conjunto de valores de los parámetros con lo que es posible generar patrones espaciales heterogéneos. La gráfica que describe este conjunto de parámetros es conocida como el mapa de Turing y un ejemplo es mostrado en la Fig. 2-4. Aunque con (2-16) se puede determinar el valor de los parámetros que guían a la inestabilidad de antemano, no garantizan la formación de patrones, pues este efecto también depende en gran medida del tamaño del dominio, es decir, aunque se garanticen las condiciones de Turing, si el dominio no presenta un tamaño adecuado (un tamaño tal que algún modo  $k$  en la relación de dispersión sea inestable), el sistema no presentará patrones.

## 2.2. Parametrización de curvas en $\mathbb{R}^3$ que se transforman en el tiempo

En esta sección se estudia la parametrización de curvas que se transforman en el tiempo y que serán de utilidad para el estudio de ecuaciones de reacción-difusión cuyo dominio es una curva encajada en  $\mathbb{R}^3$ .

En primer lugar, definimos a la curva  $X$  independiente del tiempo como el mapeo  $X : I \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$  dado por

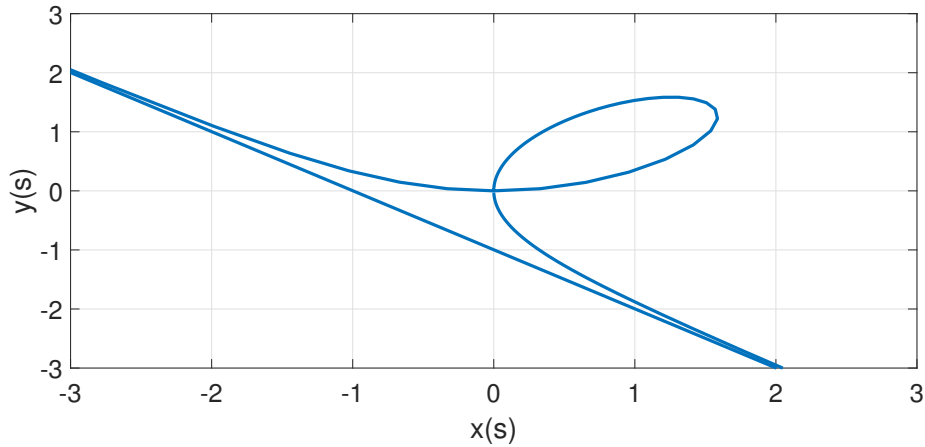
$$(2-17) \quad X(s) = (x(s), y(s), z(s)), \quad s \in I,$$

con  $x$ ,  $y$  y  $z$  funciones en términos del parámetro  $s$  que determinan la forma de la curva. La expresión (2-17) es conocida generalmente como la parametrización de la curva  $X$  y  $s$  es conocido como el parámetro de la curva.

Un ejemplo para la expresión (2-17) es el folium de Descartes definido por la expresión

$$X(s) = \left( 3\frac{s}{s^3+1}, 3\frac{s^2}{s^3+1}, 0 \right), \quad s \in \mathbb{R},$$

cuya gráfica puede verse en la figura 2-1

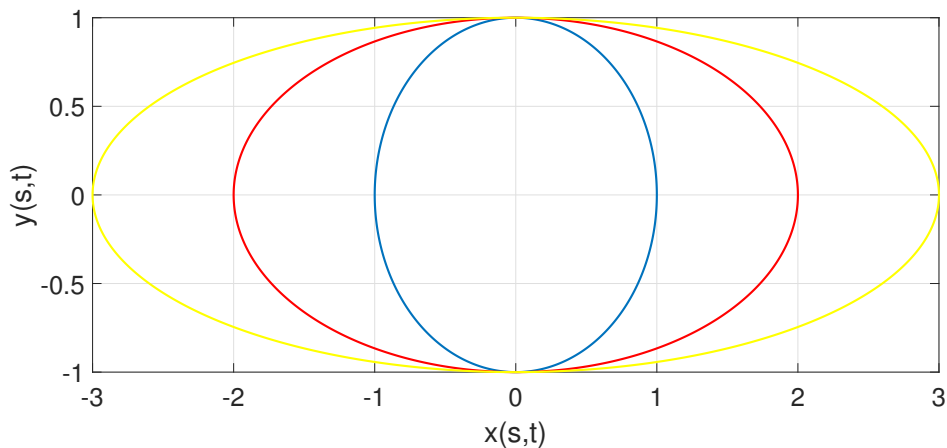


**Figura 2-1.:** Folium de Descartes.

Por otro lado, definimos a la curva  $X$  dependiente del tiempo como el mapeo  $X : I \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$  dado por

$$(2-18) \quad X(s, t) = (x(s, t), y(s, t), z(s, t)), \quad (s, t) \in I \times [0, \infty),$$

con  $x$ ,  $y$  y  $z$  funciones que definen la forma de la curva en el tiempo. En este caso el parámetro  $s$  define la forma inicial de la curva y la variable  $t$  su transformación en el tiempo. Aunque para un tiempo fijo  $t_1$  la expresión (2-18) es una expresión únicamente dependiente de  $s$ , esto es,  $X(s, t_1) = X^*(s)$ , con  $X^*$  una curva parametrizada por  $s$ , con la finalidad de evitar confusiones en la notación  $X(s)$  se empleará solamente para curvas sin crecimiento (2-17).



**Figura 2-2.:** Curva  $X(s, t)$  para diferentes tiempos,  $t = 0$  curva azul,  $t = 1$  curva roja y  $t = 2$  curva amarilla.

Un ejemplo que ayuda a visualizar la definición de una curva que se transforma en el tiempo (2-18) viene dado por la expresión

$$X(s, t) = ((t + 1)\cos(s), \sin(s), 0), \quad (s, t) \in [0, 2\pi] \times [0, \infty),$$

cuya gráfica para diferentes tiempos se muestra en la figura **2-2**. De la expresión  $X(s, t)$  es posible notar que para  $t = 0$ , la curva corresponde a una circunferencia de radio 1, mientras que para  $t > 0$  la curva corresponde a una elipse cuyos semiejes mayor y menor tienen longitudes  $t + 1$  y 1 respectivamente.

Lo anterior muestra el uso de la notación que se empleará en el presente trabajo y la definición de curvas  $X$  que se transforman en el tiempo (2-18), así como también curvas  $X$  estacionarias o independientes del tiempo (2-17).

## 2.3. Polinomios interpoladores de Lagrange

Los polinomios de Lagrange son polinomios usados para interpolar un conjunto de puntos  $(x_k, y_k)$  dados, donde  $k = 0, 1, 2, \dots, N$ , y se definen como [25]:

$$(2-19) \quad l_j(x) = \prod_{i=0, i \neq j}^N \frac{x - x_i}{x_j - x_i}.$$

Una propiedad muy útil de los polinomios de Lagrange, la cual puede derivarse fácilmente de su definición es  $l_j(x_i) = \delta_{i,j}$ , con  $\delta_{i,j}$  la función delta de Kronecker. Con (2-19), es posible definir un polinomio de grado  $N$  que pase a través de  $N + 1$  puntos  $\{(x_0, y_0), \dots, (x_N, y_N)\}$ , así:

$$I_N(x) = \sum_{k=0}^N y_k l_k(x),$$

donde  $I_N(x_k) = y_k$ . Más aún, si cada término  $y_k$  es la imagen de una función  $f$  para cada  $x_k$ , esto es,  $y_k = f(x_k)$ , entonces la función  $f$  puede ser aproximada mediante

$$f(x) \approx \sum_{k=0}^N f(x_k) l_k(x).$$

Esta aproximación mejora cuando el número de puntos se incrementa, sin embargo, esto incrementa el grado del polinomio y por ende hace más complejo el computo de (2-19).

## 2.4. Polinomios de Legendre

Éstos son un conjunto de polinomios ortogonales, nombrados así en honor de Adrien-Marie Legendre. Los polinomios de Legendre son soluciones de la ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{d}{dx} \left[ (1 - x^2) \frac{dy}{dx} \right] + n(n + 1)y = 0,$$

y el polinomio de grado  $n$  se define como [26]:

$$(2-20) \quad P_n(x) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{(2n - 2j)!}{2^n j! (n - j)! (n - 2j)!} x^{n-2j}.$$

Una propiedad importante de estos polinomios es su ortogonalidad en el intervalo  $[-1, 1]$ , esto es

$$(2-21) \quad \int_{-1}^1 P_n(x)P_m(x) = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n, \end{cases}$$

además de que satisfacen las fórmulas recursivas [25]

$$(2-22) \quad P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x),$$

y

$$(2-23) \quad (2n+1)P_n(x) = P'_{n+1}(x) - P'_{n-1}(x).$$

Estas dos formulas recursivas serán de utilidad para la implementación computacional del método y el cálculo de las raíces de los polinomios de Legendre, requeridas para la aproximación de integrales por cuadraturas.

## 2.5. Cuadratura de Legendre-Gauss-Lobatto

Las cuadraturas son empleadas para aproximar integrales en un dominio. Así mismo, pueden ser empleadas para hallar productos internos discretos para los cuales las funciones base polinomiales permanecen ortogonales [25]. La aproximación de una integral en el intervalo  $[-1, 1]$  con peso  $\omega(x)$  mediante una cuadratura de Gauss viene dada por la expresión

$$\int_{-1}^1 f(x)\omega(x)dx \approx Q_G[f] = \sum_{j=0}^n f(x_j)\omega_j,$$

donde  $\omega(x)$  es una función peso que garantiza la ortogonalidad de los polinomios base de la cuadratura. Dado que los polinomios de Legendre son ortogonales en el intervalo  $[-1, 1]$  con peso  $\omega(x) = 1$ , entonces la cuadratura de Legendre Gauss se define como

$$(2-24) \quad \int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{j=0}^n f(x_j)\omega_j,$$

donde  $x_j$  son las raíces del polinomio de Legendre (2-20), de grado  $n+1$ , y  $\omega_j$  está dada por [25]

$$\omega_j = \frac{2}{(1-x_j^2)[P'_{n+1}(x_j)]^2},$$

donde  $P'_{n+1}$  denota la derivada del polinomio de Legendre de grado  $n+1$ . Ahora, en este caso las raíces del polinomio de Legendre pertenecen al intervalo  $(-1, 1)$ , es decir, no incluyen los puntos extremos del intervalo. Las cuadraturas de Gauss que incluyen estos puntos extremos  $x = \pm 1$  se conocen como las reglas de cuadratura Gauss-Lobatto. Entonces, la cuadratura de Legendre Gauss-Lobatto es similar a la cuadratura de Legendre Gauss dada por la ecuación (2-24), con la diferencia de la inclusión de los puntos extremos del intervalo en los puntos  $x_j$ , esto es,  $x_j = \{\pm 1, x_k\}$  con  $x_k$  siendo las raíces de  $P_{n+1}$ . Estos puntos  $x_j = \{\pm 1, x_k\}$  son conocidos comúnmente como los nodos de Legendre Gauss-Lobatto.

## 2.6. Integración numérica

En esta sección se deriva el método de integración numérica denominado Euler IMEX, que es un método implícito-explicito del esquema de Euler, útil para integrar numéricamente sistemas de ecuaciones diferenciales, como el que nos ocupa en (4-20) y (4-22). Este método es muy usado, dada su precisión y su facilidad de implementación, con respecto a métodos implícitos conocidos [27, 28]. Así mismo, este tipo de esquema no es el único método IMEX existente, pues se han desarrollado distintos esquemas implícitos-explicitos con base en diferentes métodos de integración numérica conocidos, como métodos IMEX BDF (Backward Differentiation Formula) [29], métodos IMEX multipaso [30] y método IMEX Runge-Kutta [31, 32].

Con estos métodos se resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma

$$(2-25) \quad \frac{d\mathbf{V}}{dt} = \mathbf{A}(t, \mathbf{V}) + \mathbf{B}(t, \mathbf{V}),$$

donde  $\mathbf{A}(t, \mathbf{V})$  y  $\mathbf{B}(t, \mathbf{V})$  son términos conocidos que dependen del tiempo y la variable dependiente. La separación en dos términos  $\mathbf{A}(t, \mathbf{V})$  y  $\mathbf{B}(t, \mathbf{V})$  se realiza con la finalidad de apartar los términos 'rígidos' o *stiff* de los que no lo son, de tal manera que los términos rígidos son integrados de forma implícita y los demás se integran de forma explícita. Así mismo, en ocasiones también es utilizada para separar los términos lineales (con respecto a la variable dependiente) de aquellos que no lo son, integrando explícitamente los términos no lineales y de forma implícita los términos lineales, evitando de esta manera la utilización de métodos de solución de ecuaciones algebraicas no lineales (como el método de Newton). Esto trae consigo algunas implicaciones, como la facilidad de implementación con respecto a métodos completamente implícitos, pues se evita la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. Con esto, se obtiene una mejora en la estabilidad del método con respecto a métodos puramente explícitos, lo que permite utilizar pasos de tiempo mayores (sin superar los pasos de tiempo de métodos implícitos), disminuyendo el tiempo de cómputo y alcanzando errores de un orden cercano a los métodos implícitos.

Antes de continuar enunciando algunas ventajas del método Euler IMEX es necesario aclarar algunos conceptos en el área de métodos numéricos, entre ellos tenemos:

- *Métodos adaptativos*: Son métodos numéricos cuyo paso de tiempo se modifica durante el desarrollo siguiendo algún criterio para hacerlo, es decir, son métodos numéricos cuyo  $\bar{\Delta}t$  se modifica durante el cómputo.
- *Métodos de un sólo paso*: Son métodos numéricos que requieren conocer la solución (valor numérico de la variable dependiente) en un único paso de tiempo anterior  $t_n$  para el cálculo de la nueva solución en  $t_{n+1}$ .
- *Métodos multipaso*: Son métodos numéricos que requieren conocer la solución en múltiples pasos de tiempo anteriores ( $t_n, t_{n-1}, \dots$ ) para el cálculo de una nueva solución en  $t_{n+1}$ .

Con esto en mente, otra ventaja de emplear el método Euler IMEX, con respecto a otros métodos IMEX, es su capacidad para ser empleado como un método adaptativo (método con  $\bar{\Delta}t$  variable) bajo algún criterio, pues los métodos de un sólo paso (como Euler IMEX), a diferencia de métodos multipaso, presentan mayor versatilidad en este aspecto [33], así mismo al ser un

método de un sólo paso su implementación computacional es menos compleja, pues no requiere la implementación de otros métodos para el cálculo de los primeros pasos temporales como los métodos multipaso [33]. Sin embargo, el método Euler IMEX presenta la desventaja de poseer un mayor orden de error con respecto a otros métodos IMEX de multiples pasos, así como también con respecto a métodos puramente implícitos.

De acuerdo a lo anterior, la expresión (2-25) se integra mediante el método Euler IMEX, obteniendo

$$(2-26) \quad \mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^n + \bar{\Delta}t \mathbf{A}(t_{n+1}, \mathbf{V}^{n+1}) + \bar{\Delta}t \mathbf{B}(t_n, \mathbf{V}^n),$$

donde  $\mathbf{A}$  es el término rígido (o, en ocasiones, el término lineal) y  $\mathbf{B}$  el término no rígido (o en ocasiones el término no lineal). Los superíndices indican el tiempo de evaluación de cada función, esto es,  $\mathbf{V}^n = \mathbf{V}(t_n)$ , con  $t_n = t_0 + n\bar{\Delta}t$ , siendo  $\bar{\Delta}t$  el paso de tiempo y  $t_0$  el tiempo inicial.

## 2.7. El modelo Barrio-Varea-Aragón-Maini (BVAM)

A continuación se expone la cinética de reacción Barrio-Varea-Aragón Maini (BVAM) [34] que será empleada en los diferentes ejemplos numéricos desarrollados en el Cap. 5. Este modelo fue propuesto en 1999 y contiene una gran riqueza en bifurcaciones (como Hopf subcrítica y supercrítica, homoclinica, heteroclinica, entre otras), por lo que ha servido como un laboratorio para el estudio de la formación de patrones en sistemas biológicos [35, 23].

La cinética del modelo BVAM se define como:

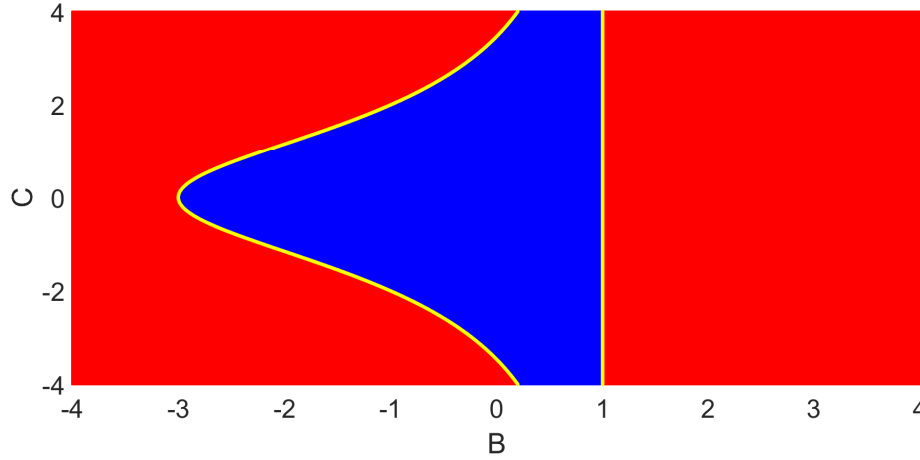
$$(2-27) \quad \begin{aligned} f(u, v) &= u + Av - Cuv - uv^2, \\ g(u, v) &= Bv + Hu + Cuv + uv^2, \end{aligned}$$

donde  $A, B, C, H \in \mathbb{R}$  son los parámetros de la cinética. El sistema dinámico formado por las funciones (2-27) tiene tres soluciones estacionarias, es decir tres soluciones a  $f(u, v) = g(u, v) = 0$ , dadas por

$$(2-28) \quad \begin{aligned} (u_0, v_0) &= (0, 0), \\ (u_1, v_1) &= \left( \frac{C(A+B) - \sqrt{\tau}}{2(1+H)}, \frac{-C(1+B) + \sqrt{\tau}}{2(A+B)} \right), \\ (u_2, v_2) &= \left( \frac{C(A+B) + \sqrt{\tau}}{2(1+H)}, \frac{-C(1+B) - \sqrt{\tau}}{2(A+B)} \right), \end{aligned}$$

donde  $\tau = C^2(A+B)^2 - 4(A+B)(AH-B)$ ; si  $\tau < 0$  el sistema tiene una única solución real  $(u_0, v_0)$ , si  $\tau = 0$  se tienen dos soluciones reales y si  $\tau > 0$  se obtienen tres soluciones reales.

Como un ejemplo, si fijamos  $A = -1$  y  $H = 3$  [23], entonces  $B$  y  $C$  son parámetros libres y el conjunto de parámetros donde (2-27) tiene una, dos, o tres soluciones se muestra en la Fig. 2-3



**Figura 2-3.:** Conjunto  $(B, C)$  donde se obtiene una solución (Azul), dos soluciones (Amarillo) y tres soluciones (Rojo) para el sistema  $f(u, v) = g(u, v) = 0$  en (2-27). Con  $A = -1$  y  $H = 3$ .

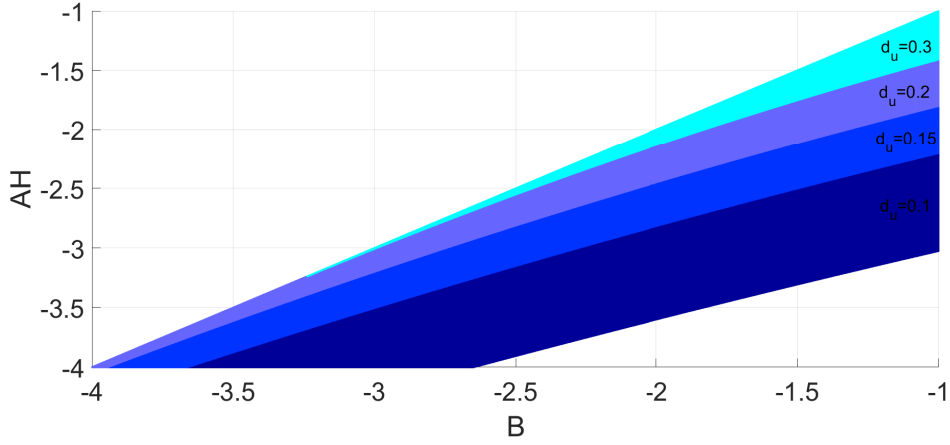
Para el estudio de los patrones que se forman con el sistema de RD y la cinética de BVAM, las soluciones mostradas en la figura **2-3** son muy importantes pues en muchos casos estas soluciones son puntos de equilibrio o soluciones estacionarias del sistema RD sin difusión e incluso soluciones estacionarias al sistema RD con difusión. Para propósitos de este trabajo los resultados serán desarrollados alrededor del punto de equilibrio  $(u_0, v_0) = (0, 0)$ , con lo cual la matriz jacobiana  $\mathbf{J}$  requerida en el análisis lineal presentado en la sección 2.1 y el desarrollado en el Cap. 3, es

$$(2-29) \quad \mathbf{J}(0, 0) = \begin{pmatrix} f_u(0, 0) & f_v(0, 0) \\ g_u(0, 0) & g_v(0, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & A \\ H & B \end{pmatrix}.$$

Siguiendo el procedimiento descrito en la sección 2.1, se obtiene que las condiciones de Turing (2-16) son

$$(2-30) \quad \begin{aligned} 1 + B &< 0, \\ B - AH &> 0, \\ d_v + Bd_u &> 0, \\ (d_v + Bd_u)^2 &> 4d_u d_v (B - AH). \end{aligned}$$

Es importante observar que para este punto de equilibrio,  $(0, 0)$ , las condiciones de Turing no dependen del parámetro  $C$ , lo que supondría que independientemente de su elección se cumplen las cuatro condiciones (2-30). Como se ha mencionado previamente, el sistema (2-30) genera un conjunto de parámetros que satisfacen dichas condiciones, cuya gráfica es conocida como el mapa de Turing. En la figura **2-4** se muestra el mapa de Turing para diferentes valores del coeficiente de difusión  $d_u$ , manteniendo fijo  $d_v$ . Debido a la forma que tienen las condiciones (2-30), se encontró que una manera útil de representar este mapa es considerando  $AH$  vs  $B$ .



**Figura 2-4.:** Mapa de Turing para los parámetros  $B$  y  $AH$  de (2-30) con  $d_v = 1$  y diferentes valores de  $d_u$ .

De la figura **2-4** es posible observar que el conjunto de parámetros cambia con la elección de  $d_u$ ; a medida que  $d_u$  se incrementa, el tamaño de la región de Turing disminuye. Por otro lado, otra posible alternativa para determinar el surgimiento de patrones es considerar al conjunto de parámetros fijo y fijar alguno de los coeficientes de difusión ( $d_u$  o  $d_v$ ), lo cual conlleva a determinar un coeficiente de difusión crítico, que se define como el coeficiente de difusión con el cual se consigue al menos un modo inestable (como en la figura **3-1**) o el menor (o mayor dependiendo de cuál coeficiente de difusión se fije) coeficiente de difusión para el cual se satisfacen las condiciones de Turing. Fijando  $d_v = 1$ , el coeficiente de difusión crítico  $d_{uc}$  se determina como la solución a  $h_{min} = 0$ , esto es

$$h_{min} = |\mathbf{J}| - \frac{(f_u d_v + d_u g_v)^2}{4d_u d_v} = 0,$$

de donde

$$(f_u + d_{uc} g_v)^2 - 4d_u |\mathbf{J}| = 0.$$

Este sistema genera dos soluciones para  $d_{uc}$ , sin embargo el coeficiente de difusión para  $u$  debe satisfacer la condición  $0 < d_u < d_v$ , lo que permite determinar un único coeficiente de difusión crítico y para que la formación de patrones tenga lugar se debe tomar algún  $d_u < d_{uc}$  en el sistema RD. Este proceso puede realizarse de manera análoga fijando  $d_u$  en lugar de  $d_v$ , esto genera dos soluciones para  $d_{vc}$  dadas por  $h_{min} = 0$  que debe cumplir la condición de  $d_v > d_u > 0$  y para que la formación de patrones tenga lugar debe seleccionarse algún  $d_v > d_{vc}$ .

## 3. Formación de patrones en curvas

En esta sección deduciremos el sistema RD con difusión no homogénea en una curva encajada en  $\mathbb{R}^3$ . Para ello emplearemos el operador de Laplace-Beltrami, que es una generalización del operador de Laplace o Laplaciano para funciones definidas sobre una variedad. Un ejemplo ampliamente conocido del operador de Laplace-Beltrami es la transformación del operador Laplaciano mediante coordenadas polares  $(r, \theta)$ , cuando se presentan dominios bidimensionales circulares o discos, y en coordenadas esféricas  $(r, \theta, \phi)$  en el caso de dominios tridimensionales esféricos, que dan lugar a las siguientes transformaciones

$$(3-1) \quad \Delta_M f = \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2},$$

$$(3-2) \quad \Delta_M f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}.$$

La ecuación (3-1) es comúnmente conocida como el Laplaciano en coordenadas polares y representa el operador de Laplace-Beltrami en la variedad  $M$ , donde  $M$  es un disco en dos dimensiones. Por otro lado, (3-2) es el Laplaciano en coordenadas esféricas y representa al operador de Laplace-Beltrami en la variedad  $M$ , donde  $M$  es una bola cerrada en  $\mathbb{R}^3$ . Aunque los ejemplos anteriormente mostrados fueron para dos variedades específicas conocidas, esto puede generalizarse a cualquier variedad  $M$  encajada en el espacio como veremos posteriormente.

### 3.1. Planteamiento del problema

En este trabajo deduciremos el modelo de RD para curvas encajadas en  $\mathbb{R}^3$ , teniendo en cuenta difusión no homogénea. Además, se desarrollará el método de elementos espectrales para la solución numérica del sistema obtenido (Cap. 4).

Consideremos una curva  $X \subset \mathbb{R}^3$  dada por

$$(3-3) \quad X(s, t) = (x(s, t), y(s, t), z(s, t)), \quad a < s < b,$$

donde  $s$  es un parámetro real que define la curva inicial ( $t = 0$ ),  $t$  es la variable temporal que determina el cambio o deformación de la curva en el tiempo y  $x$ ,  $y$  y  $z$  son las coordenadas de la curva en términos de  $s$  y en el instante  $t$ .

El sistema RD en la curva  $X(s, t)$  que crece en el tiempo, con coeficiente de difusión constante, fue derivado de manera general en [10], y tiene la forma

$$(3-4) \quad \begin{aligned} u_t &= d_u \Delta_X u - (\ln \sigma_s)_t u + f(u, v), \\ v_t &= d_v \Delta_X v - (\ln \sigma_s)_t v + g(u, v). \end{aligned}$$

Donde  $d_u, d_v$ , son los coeficientes de difusión de los morfógenos con concentraciones  $u$  y  $v$ , respectivamente,  $\Delta_X$  es el operador de Laplace-Beltrami con difusión constante en la curva  $X$ ,  $(\ln \sigma_s)_t u$  es el término de dilución,  $f$  y  $g$  son la cinéticas de reacción y  $\sigma(s, t)$  es la longitud de la curva  $X$  en el tiempo  $t$ , definida como

$$\sigma(s, t) = \int_0^s \sqrt{x_s^2(s', t) + y_s^2(s', t) + z_s^2(s', t)} ds',$$

y el operador de Laplace-Beltrami en (3-4) viene dado por

$$(3-5) \quad \Delta_X u = \frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\sigma_s} \frac{\partial u}{\partial s} \right).$$

Con  $\sigma_s$  la derivada de  $\sigma$  con respecto a  $s$ . El término de dilución surge debido a la dependencia temporal de la curva  $X$ , pues si  $X(s, t) = X(s)$  para todo  $t$ , entonces el término  $\ln \sigma_s$  es independiente de  $t$  y por tanto el término de dilución es cero.

En este trabajo estamos interesados en el caso de que el coeficiente de difusión dependa de las variables espaciales (difusión no homogénea), por lo que queremos derivar un sistema RD de la forma

$$(3-6) \quad \begin{aligned} u_t &= d_u \mathcal{D}_X u - (\ln \sigma_s)_t u + f(u, v), \\ v_t &= d_v \mathcal{D}_X v - (\ln \sigma_s)_t v + g(u, v), \end{aligned}$$

donde  $\mathcal{D}_X$  es el operador de Laplace-Beltrami en la curva  $X$ , con coeficiente de difusión variable, es decir, dependiente de las variables espaciales. A continuación obtenemos su expresión.

### 3.1.1. Deducción del operador de Laplace-Beltrami con difusión variable

Consideremos la curva  $X \subset \mathbb{R}^3$  definida en (3-3). El operador de Laplace-Beltrami con difusión variable en esta curva, aplicado a una función  $f$  es

$$(3-7) \quad \mathcal{D}_X f = \operatorname{div}(D(s) \nabla f).$$

Para esta deducción emplearemos algunos conceptos de geometría diferencial; en primer lugar consideremos los vectores  $X_s$  tangentes a la curva, dados por

$$(3-8) \quad X_s(s, t) = (x_s(s, t), y_s(s, t), z_s(s, t)).$$

Dado que las curvas son una variedad de dimensión 1, entonces existe un único vector tangente  $X_s$  a cada punto de la curva y de esta manera el tensor métrico asociado posee una única componente  $\mathbf{g} = g_{11}$ , la cual puede ser calculada en términos de la métrica estándar de  $\mathbb{R}^3$ :

$$(3-9) \quad \begin{aligned} \mathbf{g} &= \langle X_s, X_s \rangle, \\ &= dx^2(X_s, X_s) + dy^2(X_s, X_s) + dz^2(X_s, X_s), \\ &= x_s^2 + y_s^2 + z_s^2, \\ &= \|X_s\|^2. \end{aligned}$$

$\|X_s\|$  es la norma euclidiana de los vectores tangentes. Ahora, para la deducción de (3-7), emplearemos la definición de divergencia y gradiente en una variedad  $M$  de dimensión  $m$  [36]:

$$(3-10) \quad \nabla f = \sum_{i,j=1}^m g^{ij} \frac{\partial f}{\partial x^i} \partial_j,$$

$$(3-11) \quad \text{div}(V) = \sum_{i=1}^m \left\{ \frac{\partial V^i}{\partial x^i} + \sum_{j=1}^m \Gamma_{ij}^i V^j \right\},$$

donde  $g^{ij}$  es el elemento  $ij$  de la matriz inversa del tensor métrico  $\mathbf{g}$ ,  $x_i$  es el  $i$ -ésimo sistema coordenado en la variedad,  $V$  es un campo vectorial con  $m$  componentes,  $V^j$  es la  $j$ -ésima componente de  $V$  y  $\Gamma_{ij}^i$  son los símbolos de Christoffel definidos por

$$(3-12) \quad \Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^m g^{kn} \left\{ \frac{\partial g_{jn}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{in}}{\partial x^j} + \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^n} \right\}.$$

Para el caso de una variedad unidimensional. las ecuaciones (3-10) y (3-11), se reducen a

$$(3-13) \quad \nabla f = g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \partial_s,$$

$$(3-14) \quad \text{div}(V) = \frac{\partial V^1}{\partial s} + \Gamma_{11}^1 V^1.$$

En este caso, el único sistema coordenado  $x_i$  viene dado por  $s$ . Ahora, dado que la matriz  $\mathbf{g}$  cuenta con un único elemento  $g_{11}$ , su inversa viene dada por  $\mathbf{g}^{-1} = \frac{1}{\mathbf{g}}$  y la componente  $\Gamma_{11}^1$  en (3-14) se calcula mediante

$$(3-15) \quad \Gamma_{11}^1 = \frac{1}{2} g^{11} \left\{ \frac{\partial g_{11}}{\partial s} + \frac{\partial g_{11}}{\partial s} - \frac{\partial g_{11}}{\partial s} \right\} = \frac{1}{2} g^{11} \frac{\partial g_{11}}{\partial s}.$$

Entonces, para encontrar (3-7), multiplicamos (3-13) por  $D(s)$  y se calcula su divergencia, es decir

$$(3-16) \quad \mathcal{D}_X f = \text{div}(D(s)\nabla f) = \text{div} \left( D(s)g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \partial_s \right).$$

Usando (3-14) y (3-15), se obtiene

$$\mathcal{D}_X f = \frac{\partial}{\partial s} \left( D(s)g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{1}{2} g^{11} \frac{\partial g_{11}}{\partial s} \left( D(s)g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \right).$$

Dado que  $\mathbf{g}^{-1} = g^{11} = \frac{1}{\mathbf{g}}$ , reescribiendo se tiene

$$\mathcal{D}_X f = \frac{\partial}{\partial s} \left( D(s) \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{\mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial s} \left( D(s) \frac{1}{\mathbf{g}} \frac{\partial f}{\partial s} \right).$$

Expandiendo el primer término

$$\mathcal{D}_X f = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} D(s) \frac{\partial f}{\partial s} \right) - \frac{1}{2} \mathbf{g}^{-\frac{3}{2}} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial s} \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} D(s) \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{2} \frac{1}{\mathbf{g}^2} \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial s} D(s) \frac{\partial f}{\partial s},$$

$$\mathcal{D}_X f = \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\sqrt{\mathbf{g}}} D(s) \frac{\partial f}{\partial s} \right).$$

Reemplazando (3-9) en la expresión anterior, se obtiene el operador de Laplace-Beltrami en la curva  $X$  con difusión variable dado por

$$(3-17) \quad \mathcal{D}_X f = \frac{1}{\|X_s\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\|X_s\|} D(s) \frac{\partial f}{\partial s} \right).$$

En el caso particular de  $D(s)$  una constante, (3-17) coincide con la expresión obtenida en la Ref. [10] para el operador de Laplace-Beltrami con difusión constante. Aunque lo expuesto anteriormente fue desarrollado para una curva encajada en  $\mathbb{R}^3$ , como una generalización se puede encontrar el operador de Laplace-Beltrami para una superficie (variedad de dimensión 2) encajada en el espacio, con difusión no homogénea. Esto se presenta en el Apéndice.

### 3.1.2. Sistema de Reacción-Difusión con difusión no homogénea en curvas

De acuerdo con lo anterior, el problema general de RD (3-6) con operador de Laplace-Beltrami (3-17), se plantea así

$$(3-18) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{d_u}{\|X_s(s, t)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\|X_s(s, t)\|} D(s) \frac{\partial u}{\partial s} \right) - (\ln \sigma_s)_t u + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{d_v}{\|X_s(s, t)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\|X_s(s, t)\|} D(s) \frac{\partial v}{\partial s} \right) - (\ln \sigma_s)_t v + g(u, v), \end{aligned}$$

en un dominio  $\Omega = (a, b)$ , con las condiciones de frontera

$$(3-19) \quad \begin{aligned} D(s) \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{s=a} &= D(s) \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{s=b} = 0, \\ D(s) \frac{\partial v}{\partial s} \Big|_{s=a} &= D(s) \frac{\partial v}{\partial s} \Big|_{s=b} = 0, \end{aligned}$$

y las condiciones iniciales son perturbaciones aleatorias del punto de equilibrio  $(u_0(s), v_0(s))$ .  $\|X_s(s, t)\|$  es la norma euclidiana del vector tangente a la curva en la posición dada por  $s$  e instante  $t$  y  $D(s)$  es una función que define la difusión a lo largo de la curva.

Un aspecto importante de emplear el operador de Laplace Beltrami en lugar del laplaciano, es el cambio de dominio que conlleva, pues, emplear el laplaciano (o operador de Laplace) requiere definir un dominio ‘complejo’(en este caso la curva), mientras que, usando el operador de Laplace-Beltrami la variable independiente espacial viene dada por  $s$  y con esto el dominio del problema se transforma en un intervalo  $[a, b]$  donde está definido  $s$ .

El propósito de este trabajo es el análisis y solución del sistema (3-18) tanto en curvas estáticas como en curvas que crecen en el tiempo. Para este último caso se consideran dos tipos de crecimiento de la curva  $X$ .

$$(3-20) \quad \text{Isotrópico: } X(s, t) = \rho(t) (x(s), y(s), z(s)),$$

$$(3-21) \quad \text{Anisotrópico: } X(s, t) = (\rho_1(t)x(s), \rho_2(t)y(s), \rho_3(t)z(s)).$$

Donde  $\rho(t)$ ,  $\rho_1(t)$ ,  $\rho_2(t)$  y  $\rho_3(t)$  representan funciones de crecimiento. Con un crecimiento isotrópico todas las componentes de la curva crecen a la misma tasa  $\rho(t)$  y, por tanto, la curva en el instante  $t$  es proporcional a la curva inicial  $X(s, 0)$ , esto es,  $X(s, t) = \rho(t)X(s, 0)$  y de igual forma los vectores tangentes a la curva satisfacen  $X_s(s, t) = \rho(t)X_s(s, 0)$ . Por otro lado, para crecimiento anisotrópico cada componente crece a una tasa diferente y la curva  $X(s, t)$  es generalmente una expresión implícita de la curva inicial  $X(s, 0)$ , es decir, las componentes temporales y espaciales de la curva no pueden ser separadas explícitamente como en el caso de crecimiento isotrópico. De igual forma sucede con los vectores tangentes  $X_s(s, t)$ .

En la literatura [9, 10, 11, 16] se han empleado diferentes funciones  $\rho(t)$  para definir el crecimiento del dominio, bajo la condición  $\rho(0) = 1$ , entre ellas se encuentran, crecimiento exponencial  $\rho(t) = e^{a_0 t}$ , crecimiento lineal  $\rho(t) = 1 + a_0 t$  y crecimiento logístico

$$\rho(t) = \frac{e^{a_0 t}}{1 + \frac{1}{m}(e^{a_0 t} - 1)},$$

donde  $a_0 \in \mathbb{R}$  es la velocidad de crecimiento y  $m \in \mathbb{R}$ .

## 3.2. Análisis lineal e inestabilidad de Turing

En esta sección se realizará el análisis lineal de Turing para diversas suposiciones en el sistema (3-18), tales como difusión constante, difusión variable y dominios que evolucionan en el tiempo. Como mencionamos en el capítulo anterior, este análisis es necesario para conocer el conjunto de valores de los parámetros de la reacción química, con los que se generan patrones espaciales, sin esto, el proceso de encontrar un patrón de Turing bajo un enfoque numérico supondría una tarea de ensayo-error en la elección de parámetros.

Otro aspecto importante del análisis lineal es la deducción de la relación de dispersión, la cual permite conocer el conjunto de modos inestables del sistema (dados por la solución al problema de Sturm-Liouville generado por el operador de Laplace-Beltrami) y, con esto, obtener una aproximación lineal del patrón que se va a generar. La importancia de este patrón resultante del análisis lineal (cuya amplitud crecerá en el tiempo sin límite) es que conserva algunas características del patrón final, como la longitud de onda. Esto será ejemplificado de una manera más precisa en el Cap. 5.

### 3.2.1. Análisis lineal en sistema con difusión constante en curvas estáticas

En el caso de curvas que no crecen en el tiempo, se tiene  $X(s, t) = X(s, 0) = X(s)$  para todo  $t$ . Además, el sistema (3-18) con difusión constante  $D(s) = 1$  en el dominio, se reduce a

$$(3-22) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{d_u}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial u}{\partial s} \right) + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{d_v}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial v}{\partial s} \right) + g(u, v), \end{aligned}$$

donde  $d_u$  y  $d_v$  son los coeficientes de difusión de los morfógenos con concentraciones  $u$  y  $v$ , respectivamente. Las condiciones de frontera para este problema se reducen a

$$(3-23) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{s=a} &= \frac{\partial u}{\partial s} \Big|_{s=b} = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial s} \Big|_{s=a} &= \frac{\partial v}{\partial s} \Big|_{s=b} = 0. \end{aligned}$$

De manera análoga al análisis lineal presentado en la Sección 2.1, en ausencia de difusión, el sistema (3-22) es igual a (2-2), con  $\eta = 1$  y, por lo tanto, las primeras condiciones de Turing se mantienen sin cambios y vienen dadas por las ecuaciones (2-6) y (2-7). Ahora, linealizando (3-22) alrededor del punto de equilibrio  $(u_0, v_0)$ , se obtiene

$$(3-24) \quad \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{D} \Delta_X \mathbf{w} + \mathbf{J} \mathbf{w},$$

donde  $\Delta_X$  está dado en (3-5) (tomando en cuenta que  $\sigma_s = \|X_s(s)\|$ ),  $\mathbf{w} = (u - u_0, v - v_0)^T$  y  $\mathbf{J}$  la matriz jacobiana evaluada en  $(u_0, v_0)$ .

Ahora, si  $W_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$  son soluciones al problema de Sturm-Liouville

$$(3-25) \quad \Delta_X W_n + k^2(n) W_n = 0,$$

con condiciones Neumann en  $a$  y  $b$  de la forma (3-23), entonces es razonable proponer una solución a (3-24) de la forma

$$(3-26) \quad \mathbf{w}(s, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{c}_n(t) W_n(s).$$

Este Ansatz se aplica cuando  $\Delta_X = \Delta$ , porque en ese caso las funciones propias son  $\cos(kx)$  y (3-26) es una expansión de Fourier. Para poder usarlo con (3-22), es necesario garantizar la existencia de las soluciones  $W_n$  de (3-25). Esto se garantiza con las siguientes proposiciones, que consideran un caso más general:

**Proposición 1** *Sea  $f$  continua en  $[a, b]$ , el problema*

$$(3-27) \quad f(s) \frac{d}{ds} \left( f(s) \frac{du}{ds} \right) + k^2 u = 0,$$

$$(3-28) \quad f(s) \frac{du}{ds} \Big|_{s=a} = f(s) \frac{du}{ds} \Big|_{s=b} = 0,$$

*tiene soluciones no triviales para toda  $f \neq 0$  y  $k = \frac{n\pi}{\int_a^b \frac{1}{f(y)} dy}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ .*

*Prueba:* Definamos  $v = f(s) \frac{du}{ds}$ , con lo cual (3-27) se transforma en el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden

$$(3-29) \quad \begin{aligned} f(s) \frac{du}{ds} &= v, \\ f(s) \frac{dv}{ds} &= -k^2 u. \end{aligned}$$

Dividiendo la segunda ecuación entre la primera se obtiene

$$-k^2 u \frac{du}{ds} = v \frac{dv}{ds},$$

es decir

$$\frac{d}{ds}(k^2 u^2 + v^2) = 0.$$

Integrando con respecto a  $s$  se tiene

$$(3-30) \quad k^2 u^2 + v^2 = c,$$

donde  $c \in \mathbb{R}$ . Tomando en cuenta el lado izquierdo de la igualdad, se infiere que  $c > 0$ , digamos  $c = c_0^2$ . Despejando  $v$  de (3-30) y reemplazando en la primera ecuación de (3-29) tenemos

$$f(s) \frac{du}{ds} = \sqrt{c_0^2 - k^2 u^2},$$

que tiene solución

$$(3-31) \quad u = \frac{c_0}{k} \sin \left( k \int \frac{ds}{f(s)} + k C_1 \right).$$

Aplicando la condición de frontera en  $s = a$ , se tiene

$$f(s) \frac{du}{ds} \Big|_{s=a} = c_0 \cos \left( k \int \frac{ds}{f(s)} \Big|_{s=a} + k C_1 \right) = 0.$$

Soluciones no triviales se obtienen si  $c_0 \neq 0$ , por lo que

$$\cos \left( k \int \frac{ds}{f(s)} \Big|_{s=a} + k C_1 \right) = 0 \implies k \int \frac{ds}{f(s)} \Big|_{s=a} + k C_1 = \frac{2m+1}{2} \pi, \quad m \in \mathbb{N},$$

entonces

$$C_1 = \frac{2m+1}{2k} \pi - \int \frac{ds}{f(s)} \Big|_{s=a}.$$

Reemplazando  $C_1$  en (3-31) se obtiene

$$u = \frac{c_0}{k} \sin \left( \frac{2m+1}{2} \pi + k \int_a^s \frac{dy}{f(y)} \right) = \frac{c_0}{k} (-1)^m \cos \left( k \int_a^s \frac{dy}{f(y)} \right).$$

Aplicando la condición de frontera en  $s = b$

$$f(s) \frac{du}{ds} \Big|_{s=b} = -c_0 (-1)^m \sin \left( k \int_a^b \frac{dy}{f(y)} \right) = 0.$$

Como  $c_0 \neq 0$ , entonces

$$k \int_a^b \frac{dy}{f(y)} = n\pi, \quad n \in \mathbb{N},$$

de donde finalmente se obtiene

$$(3-32) \quad k_n = \frac{n\pi}{\int_a^b \frac{dy}{f(y)}}.$$

Por lo que la solución al problema (3-27) es

$$(3-33) \quad u_n(s) = C_n \cos \left( \frac{n\pi}{\int_a^b \frac{dy}{f(y)}} \int_a^s \frac{dy}{f(y)} \right), \quad n \in \mathbb{N}. \quad \blacksquare$$

Entonces, (3-33) son las soluciones de problema de Sturm-Liouville (3-27) y (3-28), asociadas a los respectivos eigenvalores (3-32). Para el caso particular  $f(s) = \frac{1}{\|X_s(s)\|}$ , la función  $u_n(s)$  es solución al problema de Sturm-Liouville requerido en el análisis lineal (3-24) del sistema RD con difusión constante.

El conjunto de funciones propias  $\{u_n(s)\}_{n=0}^\infty$  obtenido como solución al problema de Sturm-Liouville en la Proposición 1, en general no es ortogonal con el producto interno usual de  $L^2([a, b])$ . Sin embargo mostraremos que resulta ser ortogonal bajo un producto interno con peso  $\omega(x)$  en  $(a, b)$  adecuado. Consideremos

$$(3-34) \quad \langle h, g \rangle_\omega = \int_a^b h(x)g(x)\omega(x)dx,$$

con  $h, g \in L_\omega^2([a, b])$ , esto es,  $h$  y  $g$  pertenecen al espacio de funciones cuadrado integrables con respecto al peso  $\omega(x)$ . Se puede probar que (3-34) es un producto interno en  $L_\omega^2([a, b])$  siempre que  $\omega(x) > 0$ . Con este producto interno, tenemos la siguiente

**Proposición 2** *El conjunto  $\{u_n(s)\}_{n=0}^\infty$  dado por (3-33) es un conjunto ortogonal con el producto interno (3-34) con peso  $\omega(s) = \frac{1}{f(s)}$ .*

*Prueba:* De (3-34), se tiene

$$\begin{aligned} \langle u_n, u_m \rangle_{\omega(s)} &= \int_a^b u_n(s)u_m(s) \frac{1}{f(s)} ds, \\ &= \int_a^b \cos \left( \frac{n\pi}{\int_a^b \frac{dy}{f(y)}} \int_a^s \frac{dy}{f(y)} \right) \cos \left( \frac{m\pi}{\int_a^b \frac{dy}{f(y)}} \int_a^s \frac{dy}{f(y)} \right) \frac{1}{f(s)} ds. \end{aligned}$$

Con el cambio de variable

$$z = \frac{\pi \int_a^s \frac{dy}{f(y)}}{\int_a^b \frac{dy}{f(y)}},$$

se obtiene

$$\langle u_n, u_m \rangle_\omega = \frac{\int_a^b \frac{1}{f(y)} dy}{\pi} \int_0^\pi \cos(nz) \cos(mz) dz.$$

Por la ortogonalidad del conjunto  $\{\cos(nz)\}_{n=0}^\infty$  en el intervalo  $[0, \pi]$  se obtiene finalmente

$$(3-35) \quad \langle u_n, u_m \rangle_\omega = \begin{cases} \int_a^b \frac{dy}{f(y)}, & m = n = 0, \\ \frac{1}{2} \int_a^b \frac{dy}{f(y)}, & m = n, \quad m, n \neq 0, \\ 0, & m \neq n, \end{cases}$$

con lo que se demuestra la ortogonalidad del conjunto  $\{u_n(s)\}_{n=0}^{\infty}$ . ■

Este resultado tiene algunas implicaciones importantes, pues el conjunto ortogonal (3-33) forma una base para el espacio de funciones  $L_{\omega}^2([a, b])$  que satisfacen las mismas condiciones de frontera que  $u_n$  [37], o en otras palabras, es un conjunto ortogonal completo en  $L_{\omega}^2([a, b])$  para funciones que satisfacen las condiciones de Neumann propuestas, por lo que cualquier función  $g$  en este espacio puede representarse en términos de una serie de la forma [37]

$$(3-36) \quad g(s) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u_n(s),$$

con

$$a_n = \frac{\langle g, u_n \rangle_{\omega}}{\|u_n\|_{\omega}^2}.$$

La convergencia de esta serie se garantiza siempre que  $\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2$  converja [26], lo cual siempre ocurre y se puede verificar usando la desigualdad de Bessel.

Con estas dos Proposiciones, es razonable, entonces, proponer una solución a (3-24) de la forma (3-26). Sustituyendo (3-26) en (3-24) se tiene

$$(3-37) \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\mathbf{c}_n}{dt} W_n = -\mathbf{D} \sum_{n=0}^{\infty} k^2(n) \mathbf{c}_n(t) W_n + \mathbf{J} \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{c}_n(t) W_n.$$

Multiplicando (3-37) por  $\|X_s(s)\|W_m(s)$  e integrando en el intervalo  $[a, b]$  se obtiene

$$\|W_m\|_{\omega}^2 \frac{d\mathbf{c}_m}{dt} = -k^2(m) \mathbf{D} \|W_m\|_{\omega}^2 \mathbf{c}_m + \mathbf{J} \|W_m\|_{\omega}^2 \mathbf{c}_m,$$

entonces

$$(3-38) \quad \frac{d\mathbf{c}_m}{dt} = (-k^2(m) \mathbf{D} + \mathbf{J}) \mathbf{c}_m, \quad m = 0, 1, \dots,$$

que es un sistema autónomo de ecuaciones diferenciales de primer orden, para los coeficientes  $\mathbf{c}_m$ , que tiene solución de la forma

$$(3-39) \quad \mathbf{c}_m = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} e^{\lambda t}.$$

Los valores propios temporales  $\lambda$  se obtienen de la relación de dispersión

$$(3-40) \quad |\lambda \mathbf{I} - \mathbf{J} + k^2(m) \mathbf{D}| = 0.$$

Es importante resaltar que se obtuvo la misma expresión (2-11), para el caso de difusión constante, por lo que las dos últimas condiciones de Turing (2-14) y (2-15), se conservan. Como las dos primeras condiciones (2-6) y (2-7) se obtuvieron en el caso sin difusión, la conclusión es que todas las condiciones halladas por Turing mediante un análisis lineal se preservan para el caso del problema (3-22), lo que constituye un resultado importante de este trabajo. La diferencia con el caso de dominios lineales sin crecimiento es que para el problema (3-22) la longitud de onda de

los patrones resultantes no es constante, pues las eigenfunciones  $W_n$ , dadas por (3-33), no poseen longitud de onda constante a diferencia de las eigenfunciones del problema original de Turing para el caso 1D (con  $f(s) = 1$  en (3-33)), que son  $W_n = \cos(\frac{n\pi}{b-a}(s-a))$ .

En la figura 3-1 se esquematizan las tres posibilidades que existen para la gráfica de la parte real de  $\lambda$  vs  $k^2$  obtenidas resolviendo la relación de dispersión (3-40). El primer caso (curva azul) representa un sistema RD cuyos parámetros de las cinéticas de reacción y términos de difusión cumplen las condiciones de Turing y por lo tanto existe un rango de modos  $k$  inestables en el intervalo  $[k_1^2, k_2^2]$ , el segundo caso (curva amarilla) representa un sistema que cumple las condiciones de Turing pero se encuentra en el umbral de la inestabilidad, por lo que existe un único modo inestable  $k_c$  y, finalmente, el tercer caso (curva roja) representa un sistema RD que no satisface todas las condiciones de Turing, por lo que no posee ningún modo  $k$  inestable y el sistema se mantiene estable en el tiempo.

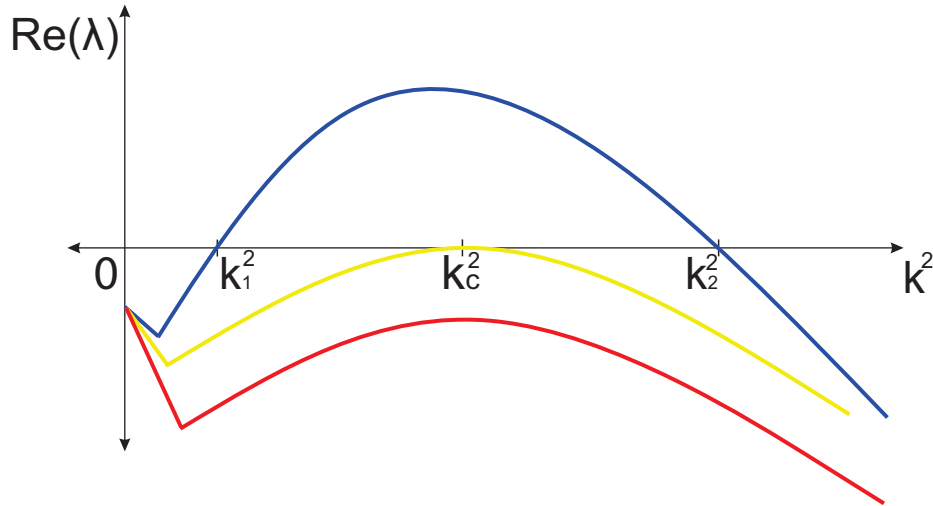


Figura 3-1.: Gráfica de  $Re(\lambda(k^2))$  vs  $k^2$ .

Un aspecto importante a considerar es que aunque un sistema RD satisfaga las condiciones de Turing y exista un rango de modos inestables como en la figura 3-1 esto no garantiza la formación de patrones de Turing si el dominio no posee un tamaño adecuado. Para observar esto consideremos el problema de Sturm-Liouville (3-27) con  $f(s) = 1$ ,  $a = 0$  y  $b = L$ , cuyas eigenfunciones vienen dadas por  $\cos(\frac{n\pi}{L}x)$ , para este caso los términos  $k$  tienen la forma  $k = \frac{n\pi}{L}$ . Entonces, si el dominio  $[0, L]$  no permite la existencia de al menos un  $n \in \mathbb{N}$  tal que  $k^2(n) \in [k_1^2, k_2^2]$  no se formará patrón alguno.

### 3.2.2. Análisis lineal en sistemas con difusión variable en curvas estáticas

En esta sección consideraremos el sistema (3-18), con las condiciones (3-19), para algunas curvas particulares que no crecen en el tiempo y algunas funciones para el término de difusión  $D(s)$ . De acuerdo con el procedimiento de linealización descrito en la Sección 3.2.1, hay que considerar el

problema de Sturm-Liouville de la forma  $\mathcal{D}_X u + \rho_n u = 0$  que, usando (3-17), es:

$$(3-41) \quad \frac{1}{\|X_s\|} \frac{d}{ds} \left( \frac{1}{\|X_s\|} D(s) \frac{du}{ds} \right) + \rho_n u = 0, \quad D(s) \frac{du}{ds} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega.$$

Aunque existen algunos casos para expresiones de  $D(s)$  y  $\|X_s(s)\|$ , con los cuales el problema anterior tiene solución analítica, el problema principal surge cuando la solución explícita de (3-41) se desconoce.

Consideremos el caso  $\|X_s(s)\| = p \in \mathbb{R}$ , con lo que (3-41) se reduce a

$$(3-42) \quad \frac{d}{ds} \left( D(s) \frac{du}{ds} \right) + p^2 \rho_n u = 0, \quad D(s) \frac{du}{ds} = 0 \quad \text{en } \partial\Omega,$$

que es el problema asociado con polinomios ortogonales [37]. Consideremos, como ejemplo, los tres casos que han sido estudiados en el contexto de patrones de Turing en planos o líneas:

- $D(s) = 1 - s^2$  en  $\Omega = [-1, 1]$ . En este caso las funciones propias de (3-42) son  $u_n(s) = P_n(s)$ , los polinomios de Legendre de grado  $n$  ( $= 1, 2, \dots$ ), y los valores propios son  $\rho_n = \frac{n(n+1)}{p^2}$  [18].
- $D(s) = s$  en  $\Omega = [0, 1]$ . En este caso  $u_n(s) = J_0(j_{1,n}\sqrt{s})$ ,  $\rho_n = \frac{j_{1,n}^2}{4p^2}$ , con  $J_l$  la función de Bessel de primer tipo y  $j_{l,n}$  la  $n$ -ésima raíz de  $J_l$  [17].
- $D(s) = s(1 - s)$  en  $\Omega = [0, 1]$ . Con estos valores,  $u_n(s) = P_n(2s - 1)$ ,  $\rho_n = \frac{n(n+1)}{p^2}$ , con  $P_n$  nuevamente el polinomio de Legendre de grado  $n$  [17].

Por otro lado, existen algunos casos de interés para curvas tales que la suposición  $\|X_s(s)\| = p \in \mathbb{R}$  es adecuada, por ejemplo:

- Recta en el  $\mathbb{R}^3$ , parametrizada como

$$X(s) = (as, bs, cs), \quad a, b, c \in \mathbb{R}.$$

En este caso,  $X_s$ , los vectores tangentes a la curva en cada punto  $s$  son constantes y vienen dados por  $X_s = (a, b, c)$ , de donde se obtiene  $\|X_s\| = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2} = cte$ .

- Circunferencia en  $\mathbb{R}^3$ , parametrizada como

$$X_s(s) = (r \sin(s), r \cos(s), 0), \quad r \in \mathbb{R}.$$

En este caso la norma de los vectores tangentes viene dada por  $\|X_s\| = \sqrt{r^2 \cos^2(s) + r^2 \sin^2(s)} = r$ .

- Hélice en  $\mathbb{R}^3$ , parametrizada como

$$X_s(s) = (r \sin(s), r \cos(s), hs), \quad r, h \in \mathbb{R}.$$

Donde se tiene  $\|X_s\| = \sqrt{r^2 \cos^2(s) + r^2 \sin^2(s) + h^2} = \sqrt{r^2 + h^2} = cte$ .

En resumen, para una curva estática el análisis lineal del sistema (3-18) produce que las condiciones para la formación de un patrón estacionario son las mismas que para el caso de la difusión constante (2-16). Respecto a la difusión no homogénea, en el caso de que sea posible obtener las funciones y valores propios de (3-42), se pueden encontrar las características del patrón que se forma, y en este caso, de forma análoga a lo expuesto en el análisis de Turing descrito en la Sección 2.1, la relación de dispersión para el caso de un coeficiente de difusión variable  $D(s)$  viene dada de forma similar a (2-11), que en este caso es

$$(3-43) \quad \lambda^2 + \lambda\{\rho_n(d_u + d_v) - \text{Tr}(\mathbf{J})\} + h(\rho_n) = 0,$$

donde

$$h(\rho_n) = d_u d_v \rho_n^2 - (f_u d_v + d_u g_v) \rho_n + |\mathbf{J}|.$$

Aquí,  $\rho_n$  son los valores propios del operador en el problema de Sturm-Liouville (3-42), los demás parámetros fueron definidos en la Sección 1.

### 3.2.3. Análisis lineal del sistema en curvas que se transforman en el tiempo

En esta sección estudiaremos el caso de las ecuaciones de RD en curvas que cambian en el tiempo, y nos restringiremos al caso de crecimiento isotrópico (3-20). Es importante aclarar que incluso el caso de crecimiento isotrópico conlleva complicaciones que no permiten realizar un análisis lineal similar al realizado en secciones anteriores, pues las expresiones resultantes son, en general, explícitamente dependientes del tiempo, lo que produce sistemas de ecuaciones diferenciales no autónomos, cuya estabilidad es difícil de determinar analíticamente y el enfoque de eigenvalores no es adecuado para este tipo de problemas (con la excepción de un crecimiento exponencial, como discutiremos más adelante). Un ejemplo de esto es mostrado en [38], donde se propone un sistema de ecuaciones diferenciales no autónomo cuyos eigenvalores de la matriz tienen parte real negativa pero las soluciones crecen exponencialmente, lo cual comprueba que un enfoque de eigenvalores no es del todo adecuado para problemas dependientes explícitamente del tiempo.

Consideremos el sistema RD (3-18) con crecimiento isotrópico (3-20):

$$(3-44) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{d_u}{\rho^2(t)\|X_s(s)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s)}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial u}{\partial s} \right) - \frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} u + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{d_v}{\rho^2(t)\|X_s(s)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s)}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial v}{\partial s} \right) - \frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} v + g(u, v), \end{aligned}$$

donde  $\rho(t)$  es la función de crecimiento de la curva y  $\dot{\rho}(t)$  su derivada con respecto al tiempo.

El sistema sin difusión viene dado por

$$(3-45) \quad \begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -\frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} u + f(u, v), \\ \frac{dv}{dt} &= -\frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)} v + g(u, v), \end{aligned}$$

con condiciones iniciales que discutiremos enseguida.

Lo primero que es importante señalar es que el punto de equilibrio  $(u_0, v_0)$ , que se ha obtenido resolviendo  $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$ , no es necesariamente un punto de equilibrio de (3-45) salvo en el caso  $(u_0, v_0) = (0, 0)$ . A pesar de esto, es conveniente establecer las condiciones iniciales del sistema (3-45) así [16]:

$$\begin{aligned} u(0) &= u_0, \\ v(0) &= v_0. \end{aligned}$$

Esta elección se hace con la finalidad de que si no hay crecimiento ( $\dot{\rho}(t) = 0$ ), entonces una solución a (3-45) es  $u(t) = u_0, v(t) = v_0$ , es decir, una solución estacionaria.

En las siguientes dos secciones se presentan las generalidades del análisis lineal, siguiendo el enfoque de la Ref. [16], y se exponen las principales dificultades. Se muestra que sólo en el caso de un crecimiento exponencial, el análisis se simplifica.

Como resultado de lo anterior, para los casos generales, en este trabajo usaremos un enfoque numérico para determinar la estabilidad de (3-45) dada la dependencia temporal de la ecuación.

### Crecimiento isotrópico general

Vamos a comenzar suponiendo que el sistema (3-45) tiene una solución  $\mathbf{u}^*(t) = (u^*(t), v^*(t))$ , que es estable para un conjunto de valores de  $t$ . Siguiendo la metodología establecida en las Refs. [16, 17], suponemos perturbaciones a esa solución, de la forma

$$(3-46) \quad \mathbf{u}(s, t) = \mathbf{u}^*(t) + \epsilon \tilde{\mathbf{v}}(s, t),$$

donde  $\mathbf{u}(s, t) = (u(s, t), v(s, t))$  y  $0 < \epsilon \ll 1$ . Reemplazando (3-46) en (3-44) y agrupando en potencias de  $\epsilon$ , se obtiene que la perturbación  $\tilde{\mathbf{v}}(s, t)$  satisface:

$$(3-47) \quad \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial t} = \frac{\mathbf{D}}{\rho^2(t) \|X_s(s)\|} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s)}{\|X_s(s)\|} \frac{\partial \tilde{\mathbf{v}}}{\partial s} \right) + (\mathbf{J}(\mathbf{u}^*(t)) - h(t)\mathbf{I}) \tilde{\mathbf{v}},$$

donde  $h(t) = \frac{\dot{\rho}(t)}{\rho(t)}$ .

Si  $W_n(s)$  son funciones propias del problema de Sturm-Liouville

$$(3-48) \quad \frac{1}{\rho^2(t) \|X_s(s)\|} \frac{d}{ds} \left( \frac{D(s)}{\|X_s(s)\|} \frac{dW_n}{ds} \right) + q_n(t) W_n = 0,$$

con condiciones de Neumann en  $a$  y  $b$ , entonces es razonable suponer que la solución de (3-47) puede expresarse así

$$(3-49) \quad \tilde{\mathbf{v}}(s, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{c}_n(t) W_n(s).$$

En este punto es interesante señalar que si definimos  $q_n(t)$  en (3-48) como  $q_n(t) = \bar{q}_n / \rho^2(t)$ , con  $\bar{q}_n \in \mathbb{R}$ , entonces (3-48) se vuelve un problema de Sturm-Liouville de la forma  $\mathcal{D}_X W_n + \bar{q}_n W_n = 0$ , cuyas soluciones fueron analizadas en la Sección 3.2.1, para el caso  $D(s) = cte$ , y en la Sección 3.2.2, para el caso  $\|X_s\| = p \in \mathbb{R}$  y difusión  $D(s)$  variable. A diferencia de los resultados obtenidos en esas secciones, en este caso los valores propios  $q_n$  son dependientes del tiempo.

Ahora, sustituyendo (3-49) en (3-47), y tomando en cuenta (3-48), se obtiene

$$(3-50) \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\mathbf{c}_n}{dt} W_n(s) = -\frac{\mathbf{D}}{\rho^2(t)} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{q}_n \mathbf{c}_n W_n(s) + (\mathbf{J}(\mathbf{u}^*(t)) - h(t)\mathbf{I}) \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{c}_n W_n(s).$$

Recordemos que las funciones  $W_n(s)$  (dadas como solución al problema de Sturm-Liouville  $\mathcal{D}_X W_n + \bar{q}_n W_n = 0$ ) son ortogonales con respecto a un peso  $\omega(s)$  como se aclaró en las secciones anteriores. Para el caso de difusión constante se encontró que  $\omega(s) = \|X_s(s)\|$ , mientras que para el caso con difusión variable con  $\|X_s(s)\| = p \in \mathbb{R}$  las funciones propias son ortogonales con respecto al peso  $\omega(s) = 1$ , pues el operador asociado es autoadjunto bajo el producto interno usual de  $L^2([a, b])$ . Ahora multiplicando (3-50) por  $\omega(s)W_m(s)$ , con  $\omega(s)$  el peso correspondiente a  $W_n(s)$ , e integrando en el dominio  $[a, b]$  se tiene

$$(3-51) \quad \frac{d\mathbf{c}_m}{dt} = \left[ -\frac{\mathbf{D}}{\rho^2(t)} \bar{q}_m + \mathbf{J}(\mathbf{u}^*(t)) - h(t)\mathbf{I} \right] \mathbf{c}_m, \quad m = 1, 2, \dots$$

Esta es la ecuación para las incógnitas  $\mathbf{c}_m$ , que son las amplitudes de la expansión (3-49). Entonces del comportamiento asintótico para tiempos grandes de estas amplitudes depende la estabilidad o inestabilidad de la perturbación  $\tilde{\mathbf{v}}(s, t)$ . Es decir, si  $|\mathbf{c}_m| \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow \infty$ , para un  $m \in \mathbb{N}$ , entonces la perturbación  $\tilde{\mathbf{v}}(s, t)$  es asintóticamente estable para ese valor de  $m$ . Por el contrario si  $|\mathbf{c}_m| \rightarrow \infty$  cuando  $t \rightarrow \infty$ , para un  $m \in \mathbb{N}$ , entonces la perturbación es asintóticamente inestable.

El sistema (3-51) será resuelto numéricamente para algunos valores de  $m$  y con ello buscaremos determinar el comportamiento asintótico de los coeficientes  $\mathbf{c}_m(t)$  y por consiguiente la estabilidad de la perturbación  $\tilde{\mathbf{v}}(s, t)$ .

### Crecimiento exponencial

Para el caso de un crecimiento exponencial, esto es,  $\rho(t) = e^{a_0 t}$ ,  $a_0 \in \mathbb{R}$ , al sustituir esta expresión en (3-45), el sistema se vuelve autónomo:

$$(3-52) \quad \begin{aligned} \frac{du}{dt} &= -a_0 u + f(u, v), \\ \frac{dv}{dt} &= -a_0 v + g(u, v). \end{aligned}$$

Con este tipo de crecimiento el punto de equilibrio  $(u^*, v^*)$  viene dado por la solución de  $-a_0 u^* + f(u^*, v^*) = -a_0 v^* + g(u^*, v^*) = 0$  y dado que se trata de un sistema autónomo, se puede linealizar alrededor de este punto de equilibrio, siguiendo la metodología estándar del enfoque de valores propios. Entonces linealizando alrededor de  $(u^*, v^*)$  se tiene

$$(3-53) \quad \frac{d\mathbf{w}}{dt} = \mathbf{J}(u^*, v^*) \mathbf{w},$$

donde

$$(3-54) \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} u - u^* \\ v - v^* \end{pmatrix},$$

y

$$(3-55) \quad \mathbf{J}(u^*, v^*) = \begin{pmatrix} -a_0 + f_u(u^*, v^*) & f_v(u^*, v^*) \\ g_u(u^*, v^*) & -a_0 + g_v(u^*, v^*) \end{pmatrix}.$$

Dado que (3-53) es análogo a (2-3), entonces las condiciones para la estabilidad de (3-53) vienen dadas por

$$(3-56) \quad \text{Tr}(\mathbf{J}) = -2a_0 + f_u(u^*, v^*) + g_v(u^*, v^*) < 0,$$

$$(3-57) \quad |\mathbf{J}| = a_0^2 - a_0[f_u(u^*, v^*) + g_v(u^*, v^*)] + f_u(u^*, v^*)g_v(u^*, v^*) - f_v(u^*, v^*)g_u(u^*, v^*) > 0.$$

En el caso en el que no hay crecimiento,  $a_0 = 0$ , las condiciones anteriores coinciden con las condiciones (2-6) y (2-7).

Para el sistema con difusión seguimos el mismo procedimiento presentado en el caso general de la sección anterior y se llega que los coeficientes del desarrollo de la perturbación (3-49) son solución de la ecuación:

$$(3-58) \quad \frac{d\mathbf{c}_m}{dt} = [-e^{-2a_0 t} \mathbf{D} \bar{q}_m + \mathbf{J}(\mathbf{u}^*) - h(t) \mathbf{I}] \mathbf{c}_m, \quad m = 1, 2, \dots$$

Si bien en este caso fue posible determinar condiciones para la estabilidad del sistema sin difusión, al introducir la difusión, el procedimiento de linealización produce nuevamente un sistema no autónomo, con la única diferencia de que  $\mathbf{J}$  es constante en el tiempo. Se tienen, entonces, las mismas dificultades que en el caso general por lo que el comportamiento asintótico de los coeficientes  $\mathbf{c}_m(t)$  se determinará numéricamente.

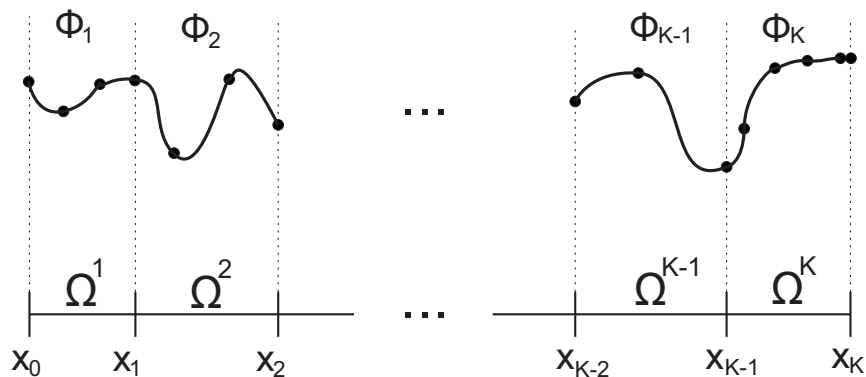
## 4. Metodología numérica

En esta sección se presenta el método de elementos espectrales, así como su aplicación para resolver sistemas de reacción-difusión con difusión no homogénea. Para presentar el método, seguiremos la metodología de D.A. Korpiva [25], quien lo aplica a la ecuación de calor, con coeficiente de difusión constante, aunque en este caso lo adaptaremos para resolver (3-18).

Algunas nociones básicas para el desarrollo del método de elementos espectrales fueron expuestas en el Cap. 2 y serán empleadas a continuación.

### 4.1. Método de elementos espectrales

El método de elementos espectrales (MEE) es una formulación similar al método de elementos finitos (conocido ampliamente en la actualidad), sin embargo, a diferencia de este último, el MEE usa polinomios de alto orden (generalmente  $n \geq 3$ ) como funciones base para su desarrollo. De igual forma que en el método de elementos finitos, el MEE también realiza una división del dominio, resolviendo el problema en cada división de forma independiente y obteniendo un sistema de ecuaciones algebraicas acoplado, de donde se obtienen soluciones numéricas nodales, es decir, solución numérica del problema en elementos puntuales a lo largo del dominio y cuyos valores intermedios son interpolados con ayuda del polinomio de alto orden, como se muestra en la figura 4-1 .



**Figura 4-1.:** División del dominio en  $K$  subintervalos.  $\Phi$  denota las soluciones en cada subintervalo, los puntos representan los valores nodales de la solución y la línea continua es la curva de interpolación de los valores nodales.

A continuación será derivado el método de elementos espectrales para un problema general y a partir de ahí, se obtendrá la solución al sistema deseado (3-18).

### 4.1.1. Derivación del método de elementos espectrales

Consideremos el siguiente sistema en un dominio  $\Omega = (a, b)$

$$(4-1) \quad \mathbf{U}_t = \mathbf{D}g(s, t) \frac{\partial}{\partial s} \left( h(s, t) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \right) - a(s, t)\mathbf{U} + \gamma \mathbf{F}(\mathbf{U}),$$

y condiciones de frontera e inicial:

$$(4-2) \quad \begin{aligned} h(s, t) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \Big|_{\partial \Omega} &= 0, \\ \mathbf{U}(s, 0) &= U_0(s), \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{U} = [u \ v]^T$ ,  $\mathbf{D}$  una matriz de coeficientes de  $2 \times 2$ ,  $g(s, t)$ ,  $h(s, t)$  y  $a(s, t)$  son funciones dadas en términos de  $s$  y  $t$ ,  $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = [f_1(u, v) \ f_2(u, v)]^T$  son funciones conocidas, usualmente no lineales y  $\gamma \in \mathbb{R}$ .

Ahora consideremos una función de prueba  $\phi$ , lo suficientemente suave, que satisface las condiciones de frontera (4-2), continua y con derivadas de orden 1 y 2 cuadrado integrables, es decir,  $\phi, \phi_{ss} \in L^2([a, b])$ . Multiplicando la expresión (4-1) por  $\phi$  e integrando sobre el dominio se tiene

$$(4-3) \quad \int_a^b \mathbf{U}_t \phi ds = \int_a^b \mathbf{D}g(s, t) \frac{\partial}{\partial s} \left( h(s, t) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \right) \phi ds - \int_a^b a(s, t)\mathbf{U} \phi ds + \gamma \int_a^b \mathbf{F}(\mathbf{U}) \phi ds.$$

Integrando por partes la primera integral del lado derecho se tiene

$$\int_a^b \mathbf{U}_t \phi ds = \mathbf{D}g(s, t)h(s, t)\phi \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} \Big|_a^b - \mathbf{D} \int_a^b \frac{\partial(g(s, t)\phi)}{\partial s} h(s, t) \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} ds - \int_a^b a(s, t)\mathbf{U} \phi ds + \gamma \int_a^b \mathbf{F}(\mathbf{U}) \phi ds.$$

Aplicando las condiciones de frontera el sistema se reduce a

$$(4-4) \quad \begin{aligned} \int_a^b \mathbf{U}_t \phi ds &= -\mathbf{D} \int_a^b g(s, t)h(s, t) \frac{\partial \phi}{\partial s} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} ds - \mathbf{D} \int_a^b h(s, t) \frac{\partial g}{\partial s} \phi \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial s} ds - \int_a^b a(s, t)\mathbf{U} \phi ds \\ &\quad + \gamma \int_a^b \mathbf{F}(\mathbf{U}) \phi ds, \end{aligned}$$

que es conocida como la forma débil de (4-1). Ahora para derivar el método de elementos espectrales se divide el dominio  $[a, b]$  en  $K$  subintervalos  $\Omega^k = [x_{k-1}, x_k]$ , los cuales no necesitan ser de igual tamaño. Realizando esta división es posible separar las integrales de (4-4) como suma de integrales sobre los dominios de los elementos, obteniendo

$$(4-5) \quad \begin{aligned} \sum_{k=1}^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} \mathbf{U}_t^k \phi^k ds &= -\mathbf{D} \sum_{k=1}^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} g^k(s, t)h^k(s, t) \frac{\partial \phi^k}{\partial s} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial s} ds \\ &\quad - \mathbf{D} \sum_{k=1}^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} h^k(s, t) \frac{\partial g^k}{\partial s} \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial s} ds \\ &\quad - \sum_{k=1}^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} a^k(s, t)\mathbf{U}^k \phi^k ds + \gamma \sum_{k=1}^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} \mathbf{F}(\mathbf{U}^k) \phi^k ds. \end{aligned}$$

Los superíndices  $k$  indican la restricción de las funciones al  $k$ -ésimo subintervalo del dominio. Entonces, en cada elemento se satisface

$$(4-6) \quad \int_{x_{k-1}}^{x_k} \mathbf{U}_t^k \phi^k ds = -\mathbf{D} \int_{x_{k-1}}^{x_k} g^k(s, t) h^k(s, t) \frac{\partial \phi^k}{\partial s} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial s} ds - \mathbf{D} \int_{x_{k-1}}^{x_k} h^k(s, t) \frac{\partial g^k}{\partial s} \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial s} ds \\ - \int_{x_{k-1}}^{x_k} a^k(s, t) \mathbf{U}^k \phi^k ds + \gamma \int_{x_{k-1}}^{x_k} \mathbf{F}(\mathbf{U}^k) \phi^k ds.$$

Ahora, con la finalidad de usar las cuadraturas de Legendre Gauss-Lobatto se realiza un cambio de variable para que el dominio de integración en cada elemento sea  $[-1, 1]$ , pues los nodos de Legendre Gauss-Lobatto y su cuadratura se encuentran definidos en este intervalo. Para ello, definimos en cada elemento el mapeo

$$s = s_{k-1} + \frac{\xi + 1}{2} \bar{\Delta} s_k,$$

donde  $\xi \in [-1, 1]$  y  $\bar{\Delta} s_k = s_k - s_{k-1}$ . Se observa que cuando  $\xi = -1$  entonces  $s = s_{k-1}$ , y cuando  $\xi = 1$  entonces  $s = s_k$ . Con este cambio de variable se puede mostrar que

$$(4-7) \quad ds = \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} d\xi, \quad \frac{\partial}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial s} = \frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \frac{\partial}{\partial \xi}.$$

Reemplazando en (4-6) se tiene

$$(4-8) \quad \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_t^k \phi^k d\xi = -\frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \mathbf{D} \int_{-1}^1 g^k(s(\xi), t) h^k(s(\xi), t) \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \\ - \mathbf{D} \int_{-1}^1 h^k(s(\xi), t) \frac{\partial g^k}{\partial s}(s(\xi), t) \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \\ - \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \int_{-1}^1 a^k(s(\xi), t) \mathbf{U}^k \phi^k d\xi + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma \int_{-1}^1 \mathbf{F}(\mathbf{U}^k) \phi^k d\xi.$$

El término  $\frac{\partial g^k}{\partial s}(s(\xi), t)$  en la segunda integral a la derecha indica que primero se deriva la función  $g$  con respecto a  $s$  y luego se evalúa en  $s(\xi)$ . Ahora, de las posibilidades que existen [25], aplicaremos el método de elementos espectrales de Galerkin para aproximar la solución por un polinomio continuo a trozos, es decir, en cada elemento planteamos un polinomio continuo en forma de polinomio de Lagrange de grado  $N$ , con nodos en los puntos de Legendre Gauss-Lobatto, esto es

$$(4-9) \quad \mathbf{U}^k(\xi, t) = \sum_{j=0}^N \Phi_j^k(t) l_j(\xi),$$

donde  $\Phi_j^k(t)$  es la solución en el  $j$ -ésimo nodo de Legendre Gauss-Lobatto del elemento  $k$  para cada tiempo  $t$ , y  $l_j(\xi)$  son los polinomios de Lagrange de grado  $N$  con nodos  $\xi_j$  de Legendre Gauss-Lobatto (definidos en el Cap. 2). Para este problema emplearemos polinomios del mismo grado en cada uno de los  $K$  elementos, aunque esta condición es opcional, pues el grado del polinomio no es necesario que sea igual en todas las divisiones del dominio. Dado que buscamos soluciones continuas y con primeras derivadas pertenecientes a  $L^2([a, b])$ , entonces requerimos que

$$(4-10) \quad \Phi_0^k = \Phi_N^{k-1},$$

esto es, el valor en el nodo  $N$ -ésimo del elemento  $k-1$  debe ser igual al valor del nodo 0 del elemento  $k$  (Ver figura 4-1). Lo anterior puede ser derivado de forma análoga para la función de prueba  $\phi$ , obteniendo

$$(4-11) \quad \phi^k(\xi) = \sum_{j=0}^N \phi_j^k l_j(\xi), \quad \phi_0^k = \phi_N^{k-1},$$

donde  $\phi_j^k$  son representados los valores nodales de la función de prueba a lo largo del dominio del elemento  $k$ .

Reemplazando (4-9) y (4-11) en cada integral de (4-8) y aproximando las integrales por la cuadratura de Legendre Gauss-Lobatto se tiene

$$\frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_t^k \phi^k d\xi \approx \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \sum_{j=0}^N w_j \left( \sum_{n=0}^N \dot{\Phi}_n^k(t) l_n(\xi_j) \right) \left( \sum_{m=0}^N \phi_m^k l_m(\xi_j) \right),$$

donde  $w_j$  es el peso asociado a la cuadratura de Legendre Gauss-Lobatto (definido en la Sección 2.5) y  $\dot{\Phi}_n^k$  denotando la derivada de  $\Phi_n^k$  con respecto al tiempo. Ahora, dado que los polinomios de Lagrange cumplen  $l_k(\xi_j) = \delta_{kj}$  entonces la expresión anterior se reduce a

$$(4-12) \quad \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{U}_t^k \phi^k d\xi \approx \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \sum_{j=0}^N w_j \dot{\Phi}_j^k(t) \phi_j^k.$$

Ahora para la primera integral del lado derecho de (4-8), se tiene

$$(4-13) \quad -\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \int_{-1}^1 g^k(s(\xi), t) h^k(s(\xi), t) \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx \\ -\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \sum_{j=0}^N w_j g_j^k(t) h_j^k(t) \left( \sum_{n=0}^N \phi_n^k l'_n(\xi_j) \right) \left( \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) l'_m(\xi_j) \right),$$

donde  $g_j^k(t)$  y  $h_j^k(t)$  son los valores nodales en cada  $s(\xi_j)$  del elemento  $k$  y en el tiempo  $t$  de las funciones  $g$  y  $h$ , respectivamente. Dado que los polinomios  $l'_k(\xi_j) \neq \delta_{kj}$ , entonces la expresión no puede reducirse como en (4-12). Sin embargo podemos reescribir la expresión anterior de la forma

$$-\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \int_{-1}^1 g^k(\xi, t) h^k(\xi, t) \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx \\ -\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \sum_{n=0}^N \phi_n^k \left\{ \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \left( \sum_{j=0}^N w_j g_j^k(t) h_j^k(t) l'_n(\xi_j) l'_m(\xi_j) \right) \right\}.$$

Cambiando los índices  $n$  y  $j$  por  $j$  y  $l$ , respectivamente, esto es,  $n \rightarrow j$  y  $j \rightarrow l$  y haciendo el cambio  $\mathbf{G}_{jm}^k(t) = \sum_{l=0}^N w_l g_l^k(t) h_l^k(t) l'_j(\xi_l) l'_m(\xi_l)$ , se obtiene

$$(4-14) \quad -\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \int_{-1}^1 g^k(\xi, t) h^k(\xi, t) \frac{\partial \phi^k}{\partial \xi} \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx -\frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \sum_{j=0}^N \left( \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{jm}^k(t) \right) \phi_j^k.$$

En este caso  $\mathbf{G}_{jm}^k(t) = \mathbf{G}_{mj}^k(t)$  es una matriz simétrica y dependiente de la posición (debido a las funciones  $g$  y  $h$ ), por lo que cambia en cada elemento  $k$  y debe recalcularse. Ahora para la segunda integral del lado derecho de (4-8), se tiene

$$-\mathbf{D} \int_{-1}^1 h^k(\xi, t) \frac{\partial g^k}{\partial s}(\xi, t) \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx -\mathbf{D} \sum_{j=0}^N w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \left( \sum_{n=0}^N \phi_n^k l_n(\xi_j) \right) \left( \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) l'_m(\xi_j) \right).$$

Dado que  $l_n(\xi_j) = \delta_{nj}$ , entonces

$$-\mathbf{D} \int_{-1}^1 h^k(\xi, t) \frac{\partial g^k}{\partial s}(\xi, t) \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx -\mathbf{D} \sum_{j=0}^N w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \phi_j^k \left( \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) l'_m(\xi_j) \right),$$

obteniendo finalmente

$$(4-15) \quad -\mathbf{D} \int_{-1}^1 h^k(\xi, t) \frac{\partial g^k}{\partial s}(\xi, t) \phi^k \frac{\partial \mathbf{U}^k}{\partial \xi} d\xi \approx -\mathbf{D} \sum_{j=0}^N \left\{ w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) l'_m(\xi_j) \right\} \phi_j^k.$$

Para las dos últimas integrales del lado derecho de (4-8), se puede deducir de manera análoga que

$$(4-16) \quad -\frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \int_{-1}^1 a^k(\xi, t) \mathbf{U}^k \phi^k d\xi \approx -\frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \sum_{j=0}^N w_j a_j^k(t) \Phi_j^k(t) \phi_j^k,$$

y

$$(4-17) \quad \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma \int_{-1}^1 \mathbf{F}(\mathbf{U}^k) \phi^k d\xi \approx \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma \sum_{j=0}^N w_j \mathbf{F}(\Phi_j^k(t)) \phi_j^k.$$

Reemplazando (4-12), (4-14), (4-15), (4-16) y (4-17) en (4-8) se obtiene

$$(4-18) \quad \sum_{j=0}^N \left\{ \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j \dot{\Phi}_j^k(t) + \frac{2}{\Delta s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{jm}^k(t) + \mathbf{D} w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{jm} + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j a_j^k(t) \Phi_j^k(t) - \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma w_j \mathbf{F}(\Phi_j^k(t)) \right\} \phi_j^k = 0,$$

donde  $D_{jm} = l'_m(\xi_j)$  una matriz cuyos elementos son las derivadas de los polinomios de Lagrange de grado  $n$ , evaluadas en los nodos de Legendre Gauss-Lobatto  $\xi_j$ . Dado que los polinomios de Lagrange y los nodos  $\xi_j$  no cambian entre elementos (salvo que se consideren distintos grados de polinomio para cada elemento  $k$ ), la matriz  $D_{jm}$  es igual para todo elemento  $k$ . Se observa que  $\mathbf{G}_{jm}^k(t)$  también puede expresarse en términos de la matriz  $D_{jm}$  de la siguiente forma

$$\mathbf{G}_{jm}^k = \sum_{l=0}^N w_l g_l^k(t) h_l^k(t) D_{lj} D_{lm}.$$

Toda la derivación anterior fue realizada para el elemento  $k$ , entonces por (4-5), la solución global se obtiene sumando sobre todos los  $K$  elementos, es decir:

$$(4-19) \quad \sum_{k=1}^K \sum_{j=0}^N \left\{ \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j \dot{\Phi}_j^k(t) + \frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{jm}^k(t) + \mathbf{D} w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{jm} \right. \\ \left. + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j a_j^k(t) \Phi_j^k(t) - \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma w_j \mathbf{F}(\Phi_j^k(t)) \right\} \phi_j^k = 0.$$

Dado que los valores de  $\phi_j^k$  son independientes, excepto en la frontera de los elementos, entonces las ecuaciones para las soluciones nodales dependen solamente de los otros términos al interior del mismo elemento, entonces, si tomamos la función de prueba  $\phi_j^k$  igual a 1 en el nodo interior  $\xi_j$  y 0 en los demás, de (4-19) se puede deducir que en cada nodo se satisface

$$(4-20) \quad \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j \dot{\Phi}_j^k(t) + \frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{jm}^k(t) + \mathbf{D} w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{jm} \\ + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_j a_j^k(t) \Phi_j^k(t) - \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma w_j \mathbf{F}(\Phi_j^k(t)) = 0,$$

donde  $j = 1, 2, \dots, N-1$  y  $k = 1, 2, \dots, K$ .

Ahora, para garantizar la continuidad de la solución y de las funciones de prueba, para los puntos de unión entre elementos, elegimos  $\phi_j^k$  en (4-19) igual a 1 en el nodo que comparten los elementos  $k-1$  y  $k$  (nodo  $N$  del elemento  $k-1$  y nodo 0 del elemento  $k$ ), y 0 en los demás, obteniendo

$$(4-21) \quad \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} w_N \dot{\Phi}_N^{k-1}(t) + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_0 \dot{\Phi}_0^k(t) + \frac{2}{\bar{\Delta} s_{k-1}} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) \mathbf{G}_{Nm}^{k-1}(t) \\ + \frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{0m}^k(t) + \mathbf{D} w_N (g')_N^{k-1}(t) h_N^{k-1}(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) D_{Nm} \\ + \mathbf{D} w_0 (g')_0^k(t) h_0^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{0m} + \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} w_N a_N^{k-1}(t) \Phi_N^{k-1}(t) + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_0 a_0^k(t) \Phi_0^k(t) \\ - \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} \gamma w_N \mathbf{F}(\Phi_N^{k-1}(t)) - \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma w_0 \mathbf{F}(\Phi_0^k(t)) = 0,$$

donde  $k = 2, 3, \dots, K-1$ .

Si imponemos la restricción de continuidad, esto es,  $\Phi_N^{k-1} = \Phi_0^k = \Phi_*^k$ , se tiene

$$(4-22) \quad \left[ \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} w_N + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_0 \right] \dot{\Phi}_*^k(t) + \frac{2}{\bar{\Delta} s_{k-1}} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) \mathbf{G}_{Nm}^{k-1}(t) + \frac{2}{\bar{\Delta} s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{0m}^k(t) \\ + \mathbf{D} w_N (g')_N^{k-1}(t) h_N^{k-1}(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) D_{Nm} + \mathbf{D} w_0 (g')_0^k(t) h_0^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{0m} \\ + \left[ \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} w_N a_N^{k-1}(t) + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} w_0 a_0^k(t) \right] \Phi_*^k(t) - \left[ \frac{\bar{\Delta} s_{k-1}}{2} \gamma w_N + \frac{\bar{\Delta} s_k}{2} \gamma w_0 \right] \mathbf{F}(\Phi_*^k(t)) = 0,$$

donde  $k = 2, 3, \dots, K$ .

Las ecuaciones (4-20) y (4-22), son un sistema acoplado de  $KN - 1$  ecuaciones diferenciales ordinarias para las variables  $\Phi_j^k$ , que representan los valores nodales de la solución en diferentes puntos del dominio. Aunque esta derivación fue realizada para condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas, se obtiene el mismo resultado para condiciones Dirichlet homogéneas, en donde estas condiciones implican  $\Phi_0^1 = \Phi_N^K = 0$ , lo cual da un total de  $KN + 1$  ecuaciones para  $KN + 1$  incógnitas. Ahora, para el caso de condiciones de Neumann, el número de  $KN - 1$  ecuaciones obtenidas en (4-20) y (4-22) no es suficiente para la cantidad de incógnitas del problema ( $KN + 1$ ). Sin embargo, la ecuación (4-20) puede usarse para el nodo  $j = 0$  en el elemento 1 y para el nodo  $j = N$  en el elemento  $K$ , logrando de esta manera igualar el número de ecuaciones e incógnitas.

Para encontrar los valores nodales de la solución a lo largo del dominio, es necesario resolver los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (4-20) y (4-22), para ello se utilizará como integrador temporal el método Euler IMEX discutido en el Cap. 1.

La expresión (2-26) puede aplicarse a las ecuaciones (4-20) y (4-22); para ello, ordenando (4-20) de la forma (2-25), se obtiene

$$(4-23) \quad \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_j \dot{\Phi}_j^k(t) = \mathbf{A}_1(t, \Phi) + \mathbf{B}_1(t, \Phi_j^k),$$

donde  $j = 1, 2, \dots, N - 1$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ , y

$$\begin{aligned} -\mathbf{A}_1(t, \Phi(t)) &= \frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{jm}^k(t) + \mathbf{D} w_j (g')_j^k(t) h_j^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{jm} + \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_j a_j^k(t) \Phi_j^k(t), \\ \mathbf{B}_1(t, \Phi_j^k(t)) &= \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \gamma w_j \mathbf{F}(\Phi_j^k(t)). \end{aligned}$$

Ahora, integrando numéricamente con el método Euler IMEX (2-26) se obtiene

$$(4-24) \quad \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_j \Phi_j^k(t_{n+1}) = \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_j \Phi_j^k(t_n) + \bar{\Delta}t \mathbf{A}_1(t_{n+1}, \Phi(t_{n+1})) + \bar{\Delta}t \mathbf{B}_1(t_n, \Phi_j^k(t_n)),$$

donde  $j = 1, 2, \dots, N - 1$  y  $k = 1, 2, \dots, K$ .

De forma análoga para la ecuación (4-22) se obtiene

$$(4-25) \quad \left[ \frac{\bar{\Delta}s_{k-1}}{2} w_N + \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_0 \right] \Phi_*^k(t_{n+1}) = \left[ \frac{\bar{\Delta}s_{k-1}}{2} w_N + \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_0 \right] \Phi_*^k(t_n) + \bar{\Delta}t \mathbf{A}_2(t_{n+1}, \Phi(t_{n+1})) + \bar{\Delta}t \mathbf{B}_2(t_n, \Phi_j^k(t_n)),$$

( $k = 2, 3, \dots, K$ ), donde

$$(4-26) \quad \begin{aligned} -\mathbf{A}_2(t, \Phi) &= \frac{2}{\bar{\Delta}s_{k-1}} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) \mathbf{G}_{Nm}^{k-1}(t) + \frac{2}{\bar{\Delta}s_k} \mathbf{D} \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) \mathbf{G}_{0m}^k(t) \\ &+ \mathbf{D} w_N (g')_N^{k-1}(t) h_N^{k-1}(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^{k-1}(t) D_{Nm} + \mathbf{D} w_0 (g')_0^k(t) h_0^k(t) \sum_{m=0}^N \Phi_m^k(t) D_{0m} \\ &+ \left[ \frac{\bar{\Delta}s_{k-1}}{2} w_N a_N^{k-1}(t) + \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} w_0 a_0^k(t) \right] \Phi_*^k(t), \end{aligned}$$

y

$$(4-27) \quad \mathbf{B}_2(t, \Phi_j^k(t)) = \left[ \frac{\bar{\Delta}s_{k-1}}{2} \gamma w_N + \frac{\bar{\Delta}s_k}{2} \gamma w_0 \right] \mathbf{F}(\Phi_*^k(t)).$$

El sistema conformado por las ecuaciones (4-24) y (4-25), y su inclusión en los nodos  $j = 0$  del elemento 1 y  $j = N$  del elemento  $K$ , es un sistema algebraico lineal de  $KN + 1$  ecuaciones para  $\Phi_j^k(t)$  ( $j = 1, \dots, N$ ,  $k = 1, \dots, K$ ) y  $\Phi_0^1$ . Este sistema debe ser resuelto para cada instante de tiempo, encontrando los valores nodales de la solución  $\mathbf{U}$  en los nodos de Legendre Gauss-Lobatto para cada tiempo  $t_n$ .

### 4.1.2. Resumen de MEE para el sistema de reacción-difusión

En resumen, para resolver numéricamente el sistema (3-18), las funciones  $g$ ,  $h$  y  $a$  en (4-1) son

$$(4-28) \quad \begin{aligned} g(s, t) &= \frac{1}{\|X_s(s, t)\|}, \\ h(s, t) &= \frac{D(s)}{\|X_s(s, t)\|}, \\ a(s, t) &= \frac{\|X_s(s, t)\|_t}{\|X_s(s, t)\|}. \end{aligned}$$

Con estas definiciones es posible usar las ecuaciones (4-24) y (4-25) para obtener las soluciones  $\mathbf{U} = (u, v)^T$  en los  $KN + 1$  nodos a lo largo del dominio. Dado que los nodos de Legendre Gauss-Lobatto se definieron en cada elemento  $k$ , es necesario hacer un mapeo del dominio local (dominio  $[-1, 1]$  en cada elemento) al dominio global del problema  $[a, b]$  y de esta manera se obtiene la solución a lo largo de  $[a, b]$  para cada tiempo  $t$ .

### 4.1.3. Implementación

Los códigos fuente para el desarrollo del método de elementos espectrales fueron desarrollados en Python<sup>TM</sup> y se pueden encontrar en <https://github.com/jlaragonvera/ReactionDiffusion>.

## 5. Ejemplos numéricos

A continuación se resolverá el sistema general de RD (3-18), con las condiciones de cero flujo (3-19) y la cinética del modelo BVAM (2-27), sobre curvas encajadas en  $\mathbb{R}^3$ , por medio del método de elementos espectrales desarrollado en el Cap. 4, para diferentes escenarios.

Para todos los resultados mostrados en este capítulo, los parámetros del MEE que se consideran, se muestran en la Tabla 5-1.

$K$	$N$	$\bar{\Delta}s_k$	$\bar{\Delta}t$
100	3	$(b - a)/K$	0.00001

**Tabla 5-1.:** Valores de los parámetros usados para el MEE;  $a$  y  $b$  son los valores extremos del parámetro  $s$  con el que se generan las curvas que serán estudiadas.

Además, para el cómputo del error en los distintos ejemplos será empleado el error cuadrático medio (MSE, por sus siglas en inglés) definido para un conjunto de  $n$  puntos como

$$(5-1) \quad MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2,$$

donde  $Y_i, \hat{Y}_i$  son las coordenadas en  $y$  del  $i$ -ésimo punto de la solución exacta y aproximada respectivamente. Para efectos del presente trabajo consideraremos las soluciones recolectadas mediante *COMSOL Multiphysics*  $\text{\textcircled{R}}$  [39] como la solución exacta en (5-1) y las soluciones mediante el método de elementos espectrales como la solución aproximada.

### 5.1. Curvas estáticas

En esta sección se muestran las soluciones del sistema general (3-18), usando la cinética del modelo BVAM, con difusión constante y difusión no homogénea, sobre curvas estáticas. Así mismo se comparará la aproximación lineal (derivada del análisis lineal) con la solución numérica del sistema no lineal, encontrada usando el MEE.

Con respecto al sistema RD, con la cinética del modelo BVAM, los parámetros usados dependerán del ejemplo, a excepción del punto de equilibrio que se considerará es  $(u_0, v_0) = (0, 0)$ , y las condiciones iniciales  $\mathbf{U}_0(s) = \text{rnd}(s)$ , donde  $\text{rnd}(s)$  es una función que genera un valor aleatorio en el intervalo  $[-0.1, 0.1]$  a cada valor de  $s$ .

### 5.1.1. Parábola con difusión constante

Como una primera aplicación, consideremos la parábola dada por la parametrización

$$X(s) = (s, s^2, 0), \quad s \in [0, 3],$$

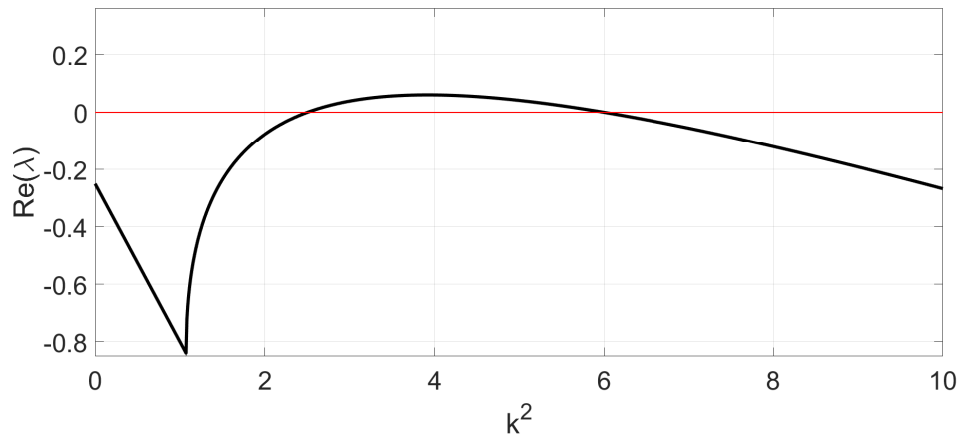
con la que la norma de los vectores tangentes es  $\|X_s(s)\| = \sqrt{4s^2 + 1}$ .

Para el sistema de RD, fijamos  $d_u = 0.1$  y  $d_v = 1$ , y de la Fig. 2-4 escogemos valores de  $AH$  y  $B$  dentro de una región que produzca una inestabilidad de Turing. Los valores de los parámetros que consideramos, se muestran en la Tabla 5-2.

$d_u$	$d_v$	$A$	$B$	$C$	$H$
0.1	1	-1	-1.5	0	3

**Tabla 5-2.:** Valores de los parámetros para el sistema de RD de los ejemplos desarrollados en la Sección 5.1.

En la Fig. 5-1 se muestra la relación de dispersión (2-11) para los parámetros de la Tabla 5-2. Ahora, de acuerdo a la teoría de Turing [24], se tiene que el sistema no lineal conserva características cualitativas del sistema lineal, como la longitud de onda correspondiente al modo  $\bar{k}$  más inestable, esto es, el modo  $\bar{k}(n)$  tal que  $\max\{\text{Re}(\lambda)\} - \text{Re}(\lambda(\bar{k}))$  es mínimo. Este modo, si existe, ayudará a encontrar la forma aproximada de la solución numérica del sistema RD dada por la función propia correspondiente a ese modo. Para encontrar este modo, es necesario, en primer lugar, hallar los valores y las funciones propias del problema de Sturm-Liouville asociado. Entonces de (3-33), con  $f(s) = \frac{1}{\sqrt{4s^2+1}}$ , se tiene que estas funciones y valores propios son



**Figura 5-1.:** Relación de dispersión (2-11), para el conjunto de parámetros dado en la Tabla 5-2.

$$(5-2) \quad W_n(s) = \cos \left( \frac{n\pi}{\int_0^3 \sqrt{4y^2 + 1} dy} \int_0^s \sqrt{4y^2 + 1} dy \right),$$

$$(5-3) \quad k(n) = \frac{n\pi}{\int_0^3 \sqrt{4y^2 + 1} dy}.$$

Con esto, el problema de encontrar el modo más inestable del sistema de RD, se convierte en encontrar el valor de  $n$  tal que  $k(n)$  sea el modo más inestable, y entonces la función propia correspondiente,  $W_n(s)$ , aproximará la forma de la solución al sistema RD no lineal. En otras palabras el problema de encontrar el modo más inestable se reduce a encontrar el valor  $k$  que produce el valor más cercano al máximo en la relación de dispersión (Fig. 5-1) Para esto, usamos los valores propios temporales (2-13), derivando esta expresión con respecto a  $k^2$ , igualando a cero y realizando algunos cálculos algebraicos se obtiene

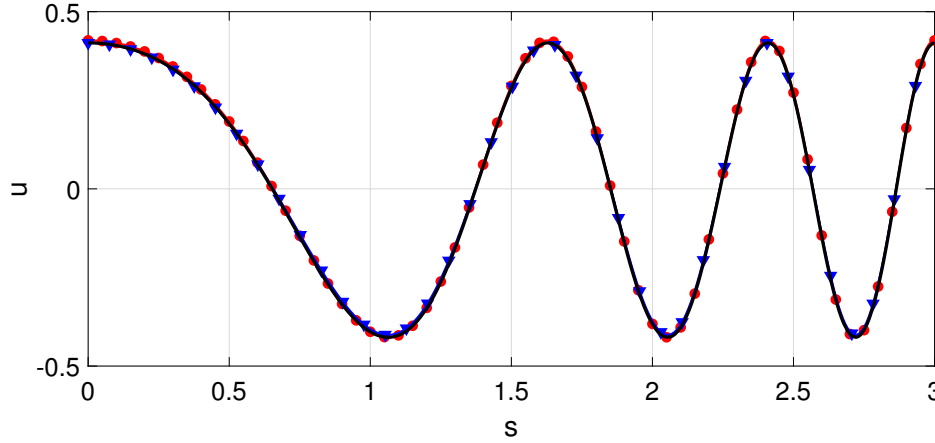
$$(5-4) \quad k_{max}^2 = \frac{1}{d_v - d_u} \left\{ g_v - f_u + (d_u + d_v) \sqrt{\frac{-f_v g_u}{d_u d_v}} \right\},$$

$$(5-5) \quad Re(\lambda(k_{max}^2)) = \frac{1}{d_v - d_u} \left\{ -2d_u d_v \sqrt{\frac{-f_v g_u}{d_u d_v}} + d_v f_u - d_u g_v \right\}.$$

Es decir,  $k_{max}^2$  es el cuadrado del valor del modo donde se alcanza el máximo valor de  $Re(\lambda)$  en la Fig. 5-1 y  $Re(\lambda(k_{max}^2))$  el máximo correspondiente. Con los parámetros de la tabla 5-2 y la matriz jacobiana (2-29) se obtiene  $k_{max}^2 \approx 3.9166$  y  $Re(\lambda(k_{max}^2)) \approx 0.0606$ . Dado que  $k(n)$  es un conjunto discreto, entonces no necesariamente existe un  $n$  tal que  $k(n) = k_{max}$ , sin embargo existe un valor de  $n$  que produce que la parte real de los valores propios  $Re(\lambda)$  es la más cercana a (5-5). Calculando (5-3) para diferentes valores de  $n$ , se encuentra que  $k(6)$  es el modo más inestable, lo que permite predecir que la solución al sistema RD no lineal se asemeja cualitativamente a la función propia  $W_6(s)$  obtenida del análisis lineal.

La figura 5-2 muestra la comparación de la aproximación lineal  $W_6(s)$ , de (5-2), con la solución numérica en  $t = 500$  obtenida con el MEE y el método de elementos finitos mediante *COMSOL*. Para poder visualizar mejor la comparación,  $W_6(s)$  se multiplicó por un factor numérico para que el máximo de ambas soluciones coincidiera (en este caso, el factor es 0.41197). En la figura 5-2 se puede notar que la solución por MEE conserva características cualitativas de la función propia  $W_6(s)$  como su forma, la longitud de onda variable y la ubicación de máximos y mínimos en el intervalo. Así mismo, para confirmar la fiabilidad del MEE, implementado en este trabajo, el resultado se comparó con el obtenido por el método de elementos finitos (MEF), para lo que se usó el software *COMSOL Multiphysics* <sup>®</sup> [39]. Como puede observarse, la solución por el MEE presenta una buena aproximación a la solución por MEF, demostrando su precisión comparada con un programa comercial. De forma cuantitativa es posible calcular el error cuadrático medio (5-1) entre estas soluciones en el tiempo  $t = 500$ , encontrando que tal error es

$$MSE = 2.5241 \times 10^{-5}.$$



**Figura 5-2.:** Comparación de la solución usando el MEE (curva negra) con solución de *COMSOL* (curva roja) y función propia  $W_6(s)$  (curva azul) multiplicada por un factor de 0.41197.  $t = 500$

Esto nuevamente verifica la precisión del método de elementos espectrales comparado con *COMSOL Multiphysics*. Dicho valor puede ser reducido ya sea empleando una mayor cantidad de elementos, un mayor grado de polinomio o un menor paso de tiempo en el MEE.

### 5.1.2. Elipse con difusión constante

Para este ejemplo consideremos una elipse determinada por la parametrización

$$X(s) = (2 \cos(s), \sin(s), 0), \quad s \in [0, 2\pi],$$

con lo que la norma de los vectores tangentes viene dada por  $\|X_s(s)\| = \sqrt{4 \sin^2(s) + \cos^2(s)}$ . Para el desarrollo de este ejemplo usaremos los parámetros de la Tabla 5-2, lo que produce la relación de dispersión mostrada en la Fig. 5-1. Así mismo las funciones y valores propios para el problema de Sturm-Liouville generado, con  $f(s) = \frac{1}{\sqrt{4 \cos^2(s) + \sin^2(s)}}$  en (3-33) vienen dados por

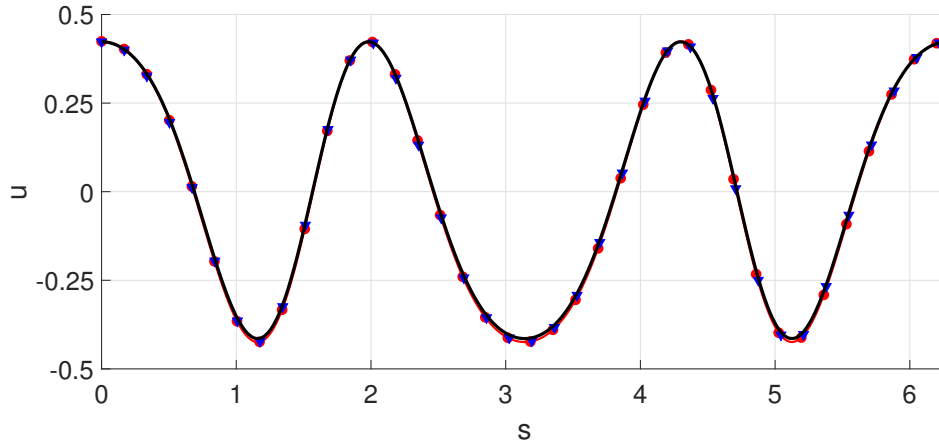
$$(5-6) \quad W_n(s) = \cos \left( \frac{n\pi}{\int_0^{2\pi} \sqrt{4 \sin^2(y) + \cos^2(y)} dy} \int_0^s \sqrt{4 \sin^2(y) + \cos^2(y)} dy \right),$$

$$(5-7) \quad k(n) = \frac{n\pi}{\int_0^{2\pi} \sqrt{4 \sin^2(y) + \cos^2(y)} dy}.$$

Aunque el integrando no tiene antiderivada elemental o primitiva, en nuestro caso es posible determinar esta integral numéricamente y de esa manera obtener la forma de la función propia  $W_n$ . De forma análoga al ejemplo anterior se puede determinar que el valor de  $n$  que produce el modo  $k$  más inestable es  $n = 6$ , con lo cual  $W_6(s)$  es aquella que se asemeja a la forma de la solución numérica del sistema no lineal.

En la figura 5-3 se muestra la comparación entre la solución numérica con el MEE, el MEF y la función propia  $W_6(s)$ . El error cuadrático medio obtenido en este caso es

$$MSE = 5.6415 \times 10^{-5}.$$



**Figura 5-3.:** Comparación de la solución usando el MEE (curva negra) y la solución de *COMSOL* (curva roja), para el tiempo  $t = 500$ , con la función propia  $W_6(s)$  (curva azul), del análisis lineal, multiplicada por un factor de 0.42301.

### 5.1.3. Hélice con difusión variable

Para este ejemplo consideraremos como dominio la hélice definida por la parametrización

$$(5-8) \quad X(s) = (\cos(2\pi s), \sin(2\pi s), s), \quad s \in [-1, 1],$$

con la que los vectores tangentes son constantes (independientes de  $s$ ) y se encuentran dados por  $\|X_s(s)\| = p = \sqrt{4\pi^2 + 1}$ . La hélice se muestra en la Fig. 5-4.

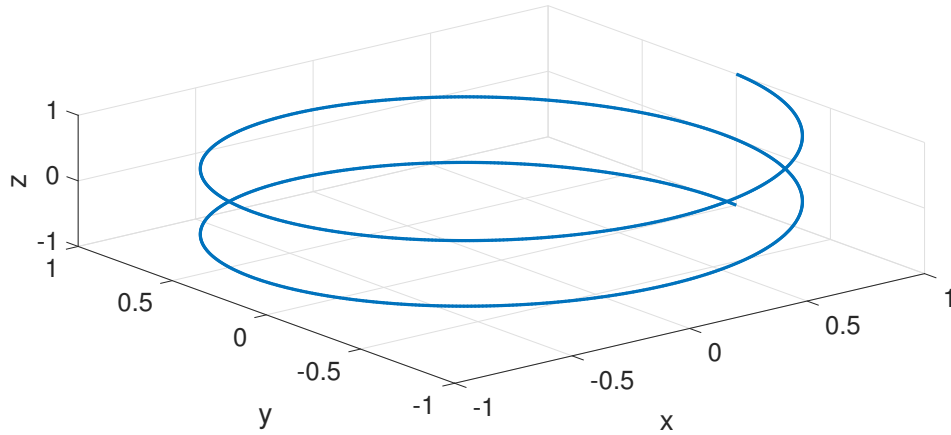
En este caso consideraremos un coeficiente de difusión que depende de la variable  $s$  como

$$(5-9) \quad D(s) = 1 - s^2.$$

Este, y otros ejemplos de coeficientes de difusión variable, fueron discutidos en la Sección 3.2.2. De acuerdo con lo obtenido en esa sección, las funciones y los valores propios del problema de Sturm-Liouville (3-41), con (5-9), son:

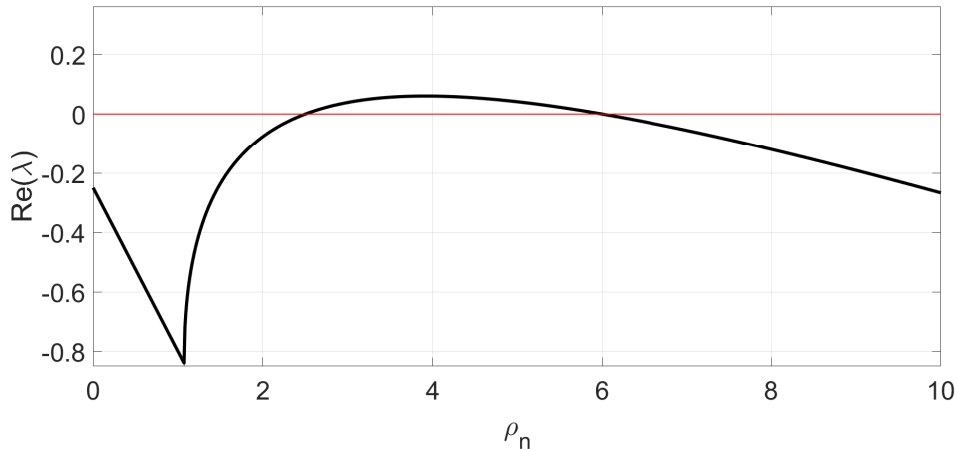
$$(5-10) \quad \begin{aligned} W_n(s) &= P_n(s), \\ \rho_n &= \frac{n(n+1)}{4\pi^2 + 1}. \end{aligned}$$

donde  $P_n$  el polinomio de Legendre de grado  $n$ . En este caso  $\rho_n = n(n+1)/p^2$ , pero como  $\|X_s(s)\| = p = \sqrt{4\pi^2 + 1}$ , entonces se obtiene (5-10).



**Figura 5-4.:** Gráfica de la hélice generada por la parametrización (5-8).

La relación de dispersión obtenida con los parámetros de la Tabla 5-2 se muestra en la figura 5-5 .



**Figura 5-5.:**  $Re(\lambda(\rho_n))$  vs.  $\rho_n$ , obtenido a partir de la solución a la relación de dispersión (3-43) para el conjunto de parámetros de la Tabla 5-2.

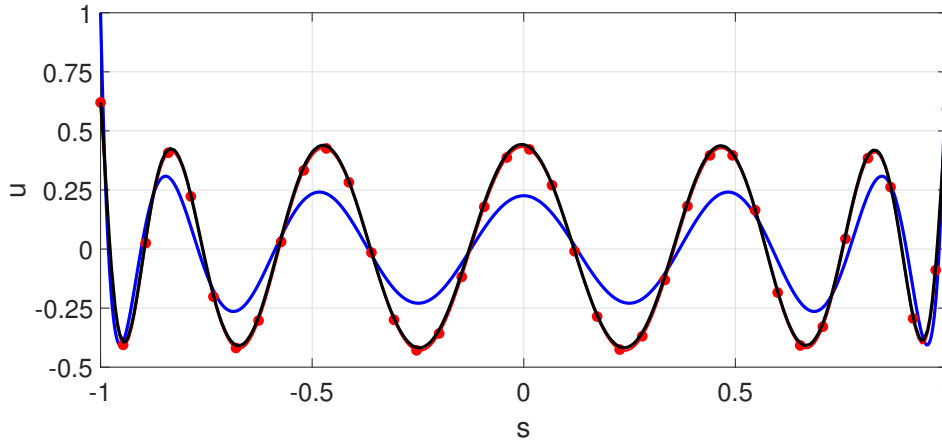
Para este caso, como se hizo en los anteriores, es necesario determinar el valor de  $n$  tal que  $\rho_n$  sea el valor propio más inestable, es decir, el  $n$  tal que  $Re(\lambda(\rho_n))$  sea el más cercano al máximo en la Fig. 5-5. De igual forma que en las expresiones (5-4) y (5-5), se pueden obtener expresiones análogas para  $\rho_{max}$  y  $Re(\lambda(\rho_{max}))$ :

$$(5-11) \quad \rho_{max} = \frac{1}{d_v - d_u} \left\{ g_v - f_u + (d_u + d_v) \sqrt{\frac{-f_v g_u}{d_u d_v}} \right\},$$

$$(5-12) \quad Re(\lambda(\rho_{max})) = \frac{1}{d_v - d_u} \left\{ -2d_u d_v \sqrt{\frac{-f_v g_u}{d_u d_v}} + d_v f_u - d_u g_v \right\}.$$

Con lo cual, usando los datos de la tabla 5-2 y la matriz Jacobiana (2-29), el modo más inestable que produce un valor de  $\text{Re}(\lambda)$  más cercano a (5-12) es  $\rho_{12}$ . Entonces, de (5-10), la función propia correspondiente es  $W_{12}(s)$ .

En la figura 5-6 se muestran las comparaciones entre las soluciones numéricas, por el MEE y por MEF, con la aproximación lineal  $W_{12}(s)$ .



**Figura 5-6.:** Comparación de la solución por el MEE (curva negra), por el MEF (curva roja), y la función propia  $W_n(s)$  (curva azul), para  $n = 12$ ,  $t = 500$  y con difusión variable de la forma  $D(s) = 1 - s^2$ .

Al igual que en los casos anteriores, la aproximación lineal dada por la función propia  $W_{12}(s)$  predice la forma de la onda obtenida por medio de la solución numérica, así como la ubicación de máximos y mínimos y la longitud de onda. Así mismo la solución numérica por el MEE se asemeja esquemáticamente a la solución por el método de elementos finitos y el error cuadrático medio obtenido para este ejemplo es

$$MSE = 1.3468 \times 10^{-4}.$$

Los tres ejemplos desarrollados para el caso de curvas estáticas encajadas en  $\mathbb{R}^3$ , muestran que el análisis lineal desarrollado en el Capítulo 3, produce los resultados esperados, tanto para difusión constante como para difusión variable. Así mismo, también muestran la precisión del método de elementos espectrales desarrollado en el Capítulo 4.

## 5.2. Sistema de reacción-difusión con crecimiento y deformación del dominio bajo difusión homogénea

En esta sección se resuelve numéricamente el sistema (3-44), obtenido bajo la consideración de un crecimiento isotrópico, y se aplica el análisis lineal desarrollado en la Sección 3.2.3, para sistemas de RD cuyo dominio es una curva que crece en el tiempo, bajo la suposición de difusión homogénea, considerando crecimiento lineal y exponencial.

### 5.2.1. Dominio lineal que crece isotrópicamente en el tiempo

Consideremos una línea que se expande en el tiempo de forma isotrópica como en (3-20):

$$X(s, t) = (\rho(t)s, 0, 0), \quad s \in [-1, 1],$$

Con la cual los vectores tangentes vienen dados por  $\|X_s(s, t)\| = \rho(t)\|X_s(s, 0)\| = \rho(t)$ .

Supongamos que el crecimiento de la curva es exponencial, de la forma:

$$(5-13) \quad \rho(t) = e^{0.003t},$$

y consideremos el conjunto de parámetros dado en la tabla 5-3.

$d_u$	$d_v$	$A$	$B$	$C$	$H$
0.15	1	1	-2	1	-2.5

**Tabla 5-3.:** Datos para los ejemplos con crecimiento isotrópico y difusión constante.

Para este caso, dado que la curva crece, no es posible usar la Fig. 2-4 para determinar si se van a formar patrones de Turing (aunque puede considerarse como una aproximación inicial), pues el comportamiento de los sistemas no autónomos (3-45) y (3-51) será determinado numéricamente. Para esto requerimos en primer lugar los valores y funciones propias del problema de Sturm-Liouville analizado en la Sección 3.2.3, que en este caso son

$$(5-14) \quad \bar{q}_n = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2,$$

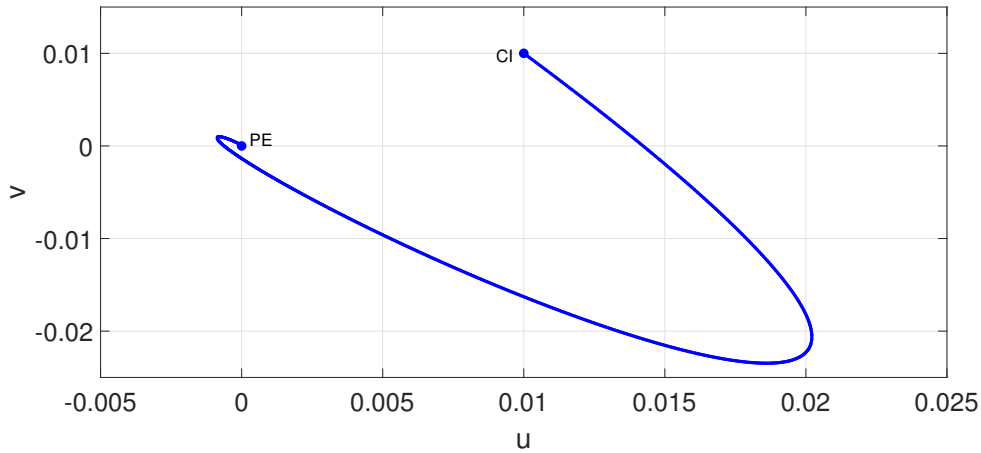
$$(5-15) \quad W_n(s) = \cos\left(\frac{n\pi}{2}(s+1)\right).$$

Es necesario recordar que al hacer  $q_n(t) = \frac{\bar{q}_n}{\rho^2(t)}$  en (3-48), dicho problema de Sturm-Liouville dependiente del tiempo se transforma en un problema de Sturm-Liouville independiente de la variable temporal de la forma  $\mathcal{D}_X W_n + \bar{q}_n W_n = 0$ . Ahora, dado que la variedad es una línea que crece bajo la suposición de difusión homogénea entonces el operador de Laplace-Beltrami  $\mathcal{D}_X$  coincide con el operador Laplaciano  $\Delta$ , pues, si  $D(s) = 1$  entonces  $\mathcal{D}_X = \Delta_X$  y puesto que los vectores tangentes a la curva inicial cumplen que  $\|X_s(s, 0)\| = 1$ , entonces de (3-22) se tiene que  $\Delta_X = \Delta$ . Por lo tanto, los valores propios  $\bar{q}_n$  en (5-14) y las funciones propias  $W_n$  en (5-15) son las mismas que para el operador Laplaciano en un dominio  $[-1, 1]$ , que pueden obtenerse mediante la expresión (3-33) con  $f(s) = 1$ .

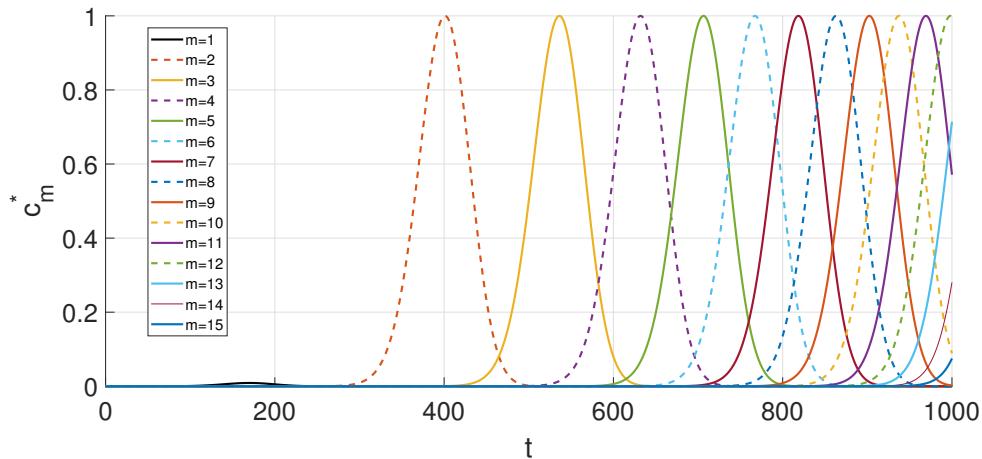
Por otro lado, consideremos que un punto de equilibrio en el modelo BVAM es el  $(u_0, v_0) = (0, 0)$ . Este punto de equilibrio, como se mencionó en la Sección 3.2.3, es punto de equilibrio del sistema (3-45) y por tanto es solución estacionaria del mismo. Sin embargo, esto no ayuda a determinar su estabilidad, para ello consideremos (3-45), con la condición inicial  $(u(0), v(0)) = (u_0 + \delta, v_0 + \delta)$ , donde  $\delta$  es una pequeña perturbación alrededor de  $(u_0, v_0)$ , que fijamos a  $\delta = 0.01$ .

Con esto, el sistema (3-45) se integra numéricamente empleando el método Euler IMEX, con un paso de tiempo  $\bar{\Delta}t = 0.01$ . En este caso no es necesario usar el mismo  $\bar{\Delta}t$  que en la Tabla 5-1 pues no se está empleando el MEE, sino sólo el método Euler IMEX como integrador temporal

del sistema no autónomo (3-45). En la Fig. 5-7 se muestra la solución en el espacio fase  $(u, v)$ , en donde se verifica que el punto de equilibrio  $(0, 0)$  del sistema (3-45) es estable; parte de la condición inicial  $(CI)$  y tiende al punto de equilibrio  $(PE)$ . Esto coincide con lo que predice el análisis lineal para el sistema sin difusión con crecimiento exponencial (3-52), es decir, con estos parámetros las condiciones de Turing (3-56) y (3-57) se satisfacen, lo que indica estabilidad del sistema sin difusión.



**Figura 5-7.:** Solución de (3-45) en el espacio fase.  $CI$  es la condición inicial y  $PE$  el punto de equilibrio.



**Figura 5-8.:** Solución normalizada de (3-58), con  $a_0 = 0.003$  y  $q_n$  dado en (5-14), para el morfógeno con concentración  $u$ , para diferentes valores de  $m$ .

Ahora, para el sistema con difusión (3-44), en la Sección 3.2.3 se derivó la expresión (3-58), para determinar los coeficientes  $c_m$ , esto permite conocer el número de coeficientes inestables en el tiempo y más aún permite saber en qué intervalo de tiempo cada coeficiente es inestable, como puede verse en la Fig. 5-8. Para este cálculo, se tomó en cuenta que  $a_0 = 0.003$ ,  $\bar{q}_n$  está dado en

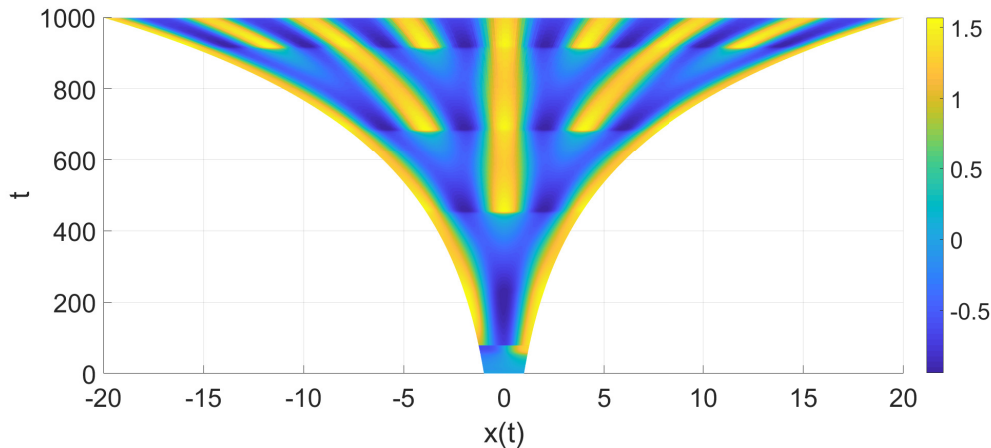
(5-14) y una pequeña perturbación alrededor del  $(0, 0)$  como condición inicial para cada coeficiente  $c_m$ .

El eje de las abscisas es  $c_m^*$ , el valor normalizado de los coeficientes  $c_m$  del morfógeno  $u$ , en la expansión (3-49). Estos se encuentran normalizados con respecto al máximo valor en el tiempo que toma el coeficiente de mayor crecimiento en el intervalo analizado, esto es

$$c_m^* = \frac{c_m}{\max\{c_1(t), c_2(t), \dots\}}.$$

En la Fig. 5-8 se observa también que diferentes coeficientes  $c_m$  del morfógeno  $u$  se vuelven inestables en distintos intervalos de tiempo, como se espera para dominios que crecen y también muestra que el intervalo de tiempo de inestabilidad para cada  $c_m$  es finito, es decir, no existe ningún coeficiente que se mantenga inestable para todo tiempo  $t$ . Por otro lado, es posible notar que en algunos intervalos de tiempo (principalmente para  $t > 600$ ) más de un coeficiente es inestable al mismo tiempo, lo que en cierto modo afecta la forma del patrón y no es predecible su aspecto tan fácilmente como para el caso sin crecimiento.

La Fig. 5-9 muestra la solución numérica del sistema de reacción-difusión (3-44) con condiciones de Neumann en una escala de colores, donde el color amarillo representa una mayor concentración del morfógeno  $u$  y el color azul una menor concentración, en otras palabras, las tonalidades amarillas representan los máximos mientras que las tonalidades azules representan los mínimos de la solución. Además muestra la evolución del dominio lineal en el tiempo, partiendo de un dominio inicial  $x \in [-1, 1]$  y finalizando con un dominio  $x \in [-20.08, 20.08]$ , así como también muestra el surgimiento de nuevos modos inestables (que se manifiestan con la aparición de nuevos máximos y mínimos) en el tiempo.

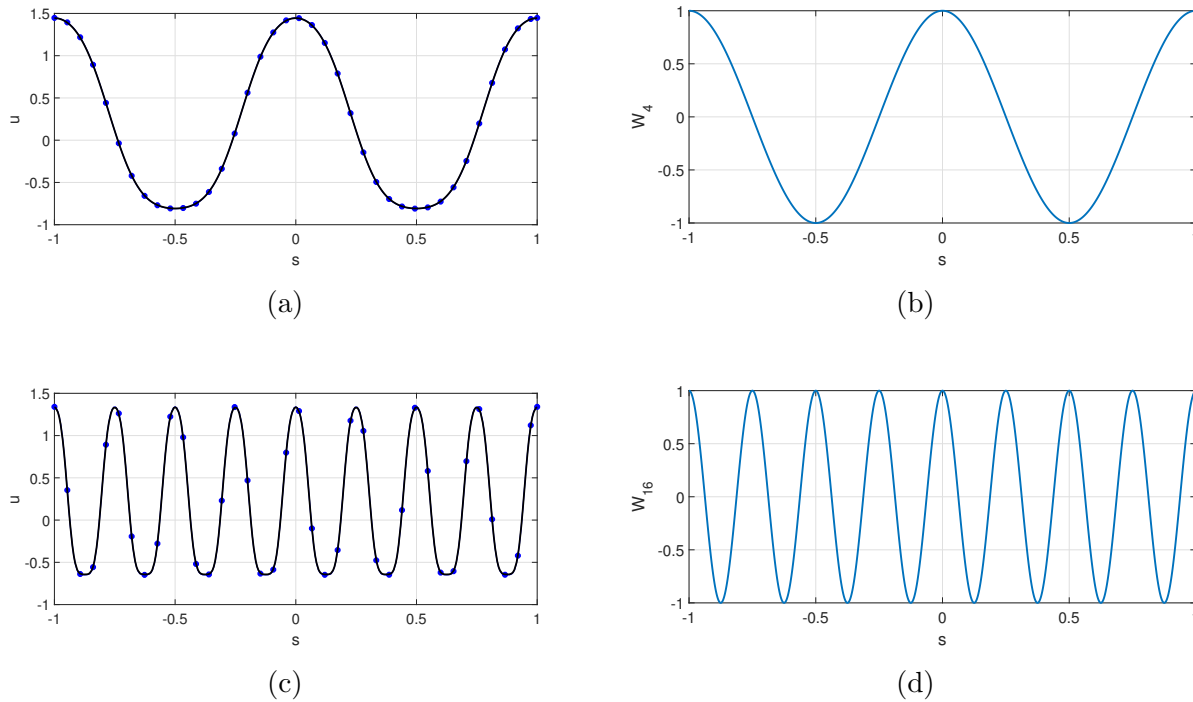


**Figura 5-9.:** Solución con el MEE del sistema (3-44) en una línea con crecimiento isotrópico exponencial (5-13), usando los parámetros de la Tabla 5-3.

La figura 5-10 muestra la comparación entre la solución con el MEE y con el MEF, así como las funciones propias que se asemejan a la solución numérica en  $t = 500$  y  $t = 1000$ . Se observa que para  $t = 500$ , la solución numérica (a) presenta características cualitativas de la función propia  $W_4(s) = \cos(2\pi s)$ , correspondiente a  $\bar{q}_4 = (2\pi)^2$  en el problema de Sturm-Liouville estudiado en la

Sección 3.2.3. Además puede observarse que para  $t = 500$ , hay 2 coeficientes inestables,  $c_3$  y  $c_4$ , pero aunque parezca que el coeficiente  $c_3$  es el que presenta mayor inestabilidad la solución numérica se asemeja a la función propia  $W_4$  correspondiente al coeficiente  $c_4$ . Por otro lado la solución numérica (c) para  $t = 1000$  presenta características cualitativas de  $W_{16}(s)$ , correspondiente al coeficiente  $c_{16}$ , el cual inicia su intervalo de inestabilidad alrededor del tiempo  $t = 1000$ . El error cuadrático medio (5-1) entre las soluciones con *COMSOL* y mediante el MEE para los tiempos  $t = 500$  y  $t = 1000$  viene dado por

$$(5-16) \quad \begin{aligned} MSE_{t=500} &= 1.1248 \times 10^{-4}, \\ MSE_{t=1000} &= 1.9823 \times 10^{-5}. \end{aligned}$$



**Figura 5-10.:** (a) Comparación de las soluciones de (3-44), con crecimiento exponencial (5-13), y usando los parámetros de la Tabla 5-3, por medio del MEE (curva negra), y del MEF (curva azul con marcadores circulares), para  $t = 500$ , (b) función propia  $W_4(s)$ , (c) comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares), en  $t = 1000$ , y (d) función propia  $W_{16}(s)$

De lo anterior, tenemos conclusiones importantes. En primer lugar, en dominios que crecen no es trivial determinar la forma de la solución numérica para todo intervalo de tiempo, pues la interacción de distintos modos inestables en un mismo intervalo afecta la forma del patrón. En segundo lugar, el coeficiente con mayor inestabilidad no siempre garantiza la forma de la solución

numérica (correspondiente a la función propia dada por el coeficiente más inestable en el tiempo  $t$ ), sin embargo da una idea sobre las posibles formas que puede tener dicha solución.

### 5.2.2. Espiral hiperbólica que crece isotrópicamente en el tiempo

Consideremos una espiral hiperbólica con crecimiento isotrópico lineal dada por la parametrización

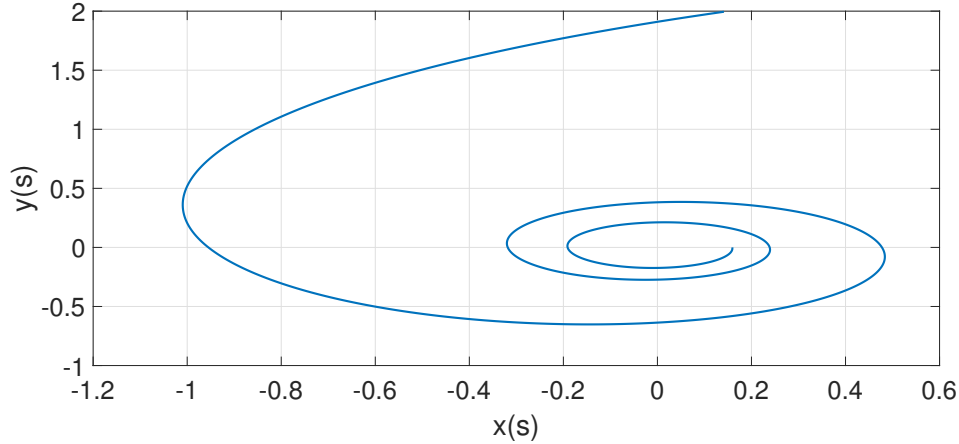
$$(5-17) \quad X(s, t) = \left( \rho(t) \frac{\cos(3s)}{s}, \rho(t) \frac{\sin(3s)}{s}, 0 \right), \quad s \in [0.5, 2\pi],$$

con lo que se obtiene que los vectores tangentes a la curva son

$$\|X_s(s, t)\| = \rho(t) \frac{\sqrt{9s^2 + 1}}{s^2}.$$

En la Fig. 5-11 se muestra una gráfica de esta curva, y en lo que sigue del ejemplo consideraremos que el crecimiento lineal es

$$(5-18) \quad \rho(t) = 1 + 0.0006t.$$



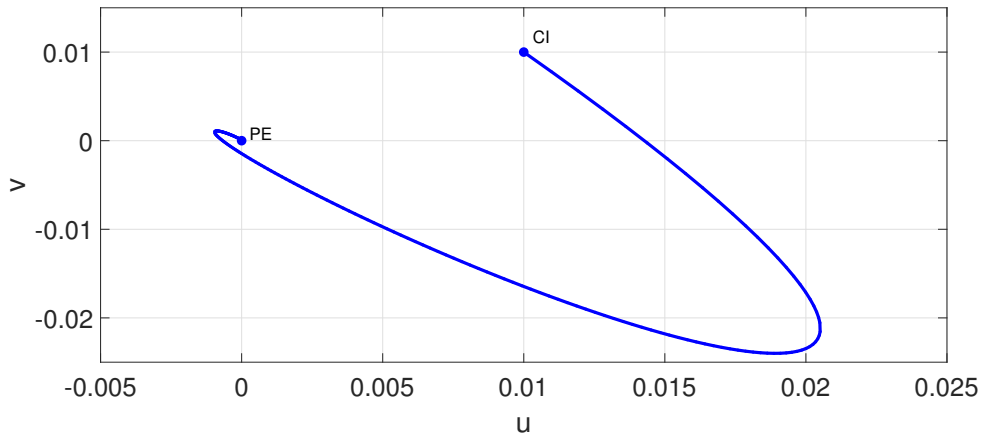
**Figura 5-11.:** Espiral hiperbólica (5-17) en  $t = 0$ .

La determinación de la estabilidad del sistema sin difusión con los parámetros de la Tabla 5-3 es realizada de manera análoga que en el ejemplo anterior (Sección 5.2.1), salvo el tipo de crecimiento lineal (5-18) y puede corroborarse en la Fig. 5-12, de allí es claro que el punto de equilibrio  $(0,0)$  en el sistema sin difusión es estable. Con respecto a los coeficientes  $c_m$ , de la expansión (3-26) propuesta para la solución del sistema con difusión (3-44), obtenidos resolviendo (3-51), su comportamiento en el tiempo se muestra en la Fig. 5-13. En este caso cada coeficiente fue normalizado con respecto al máximo que alcanza dicho coeficiente en el tiempo, a diferencia de otros ejemplos donde la normalización se realizó respecto al máximo valor que alcanza el coeficiente de mayor crecimiento en el tiempo, pues en este ejemplo con crecimiento lento la escala de valores de los diferentes coeficientes no es comparable como en otros casos.

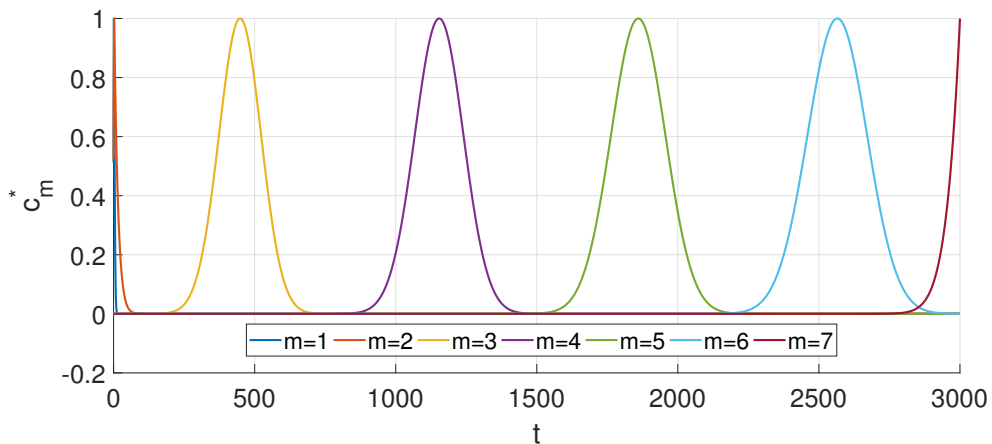
Para este ejemplo, de la Proposición 1, usando (3-32) y (3-33), se tiene que

$$(5-19) \quad \bar{q}_m = \left( \frac{m\pi}{\int_{0.5}^{2\pi} y^2 (9y^2 + 1)^{-\frac{1}{2}} dy} \right)^2,$$

$$(5-20) \quad W_m(s) = \cos \left( \frac{m\pi}{\int_{0.5}^{2\pi} y^2 (9y^2 + 1)^{-\frac{1}{2}} dy} \int_{0.5}^s y^2 (9y^2 + 1)^{-\frac{1}{2}} dy \right).$$



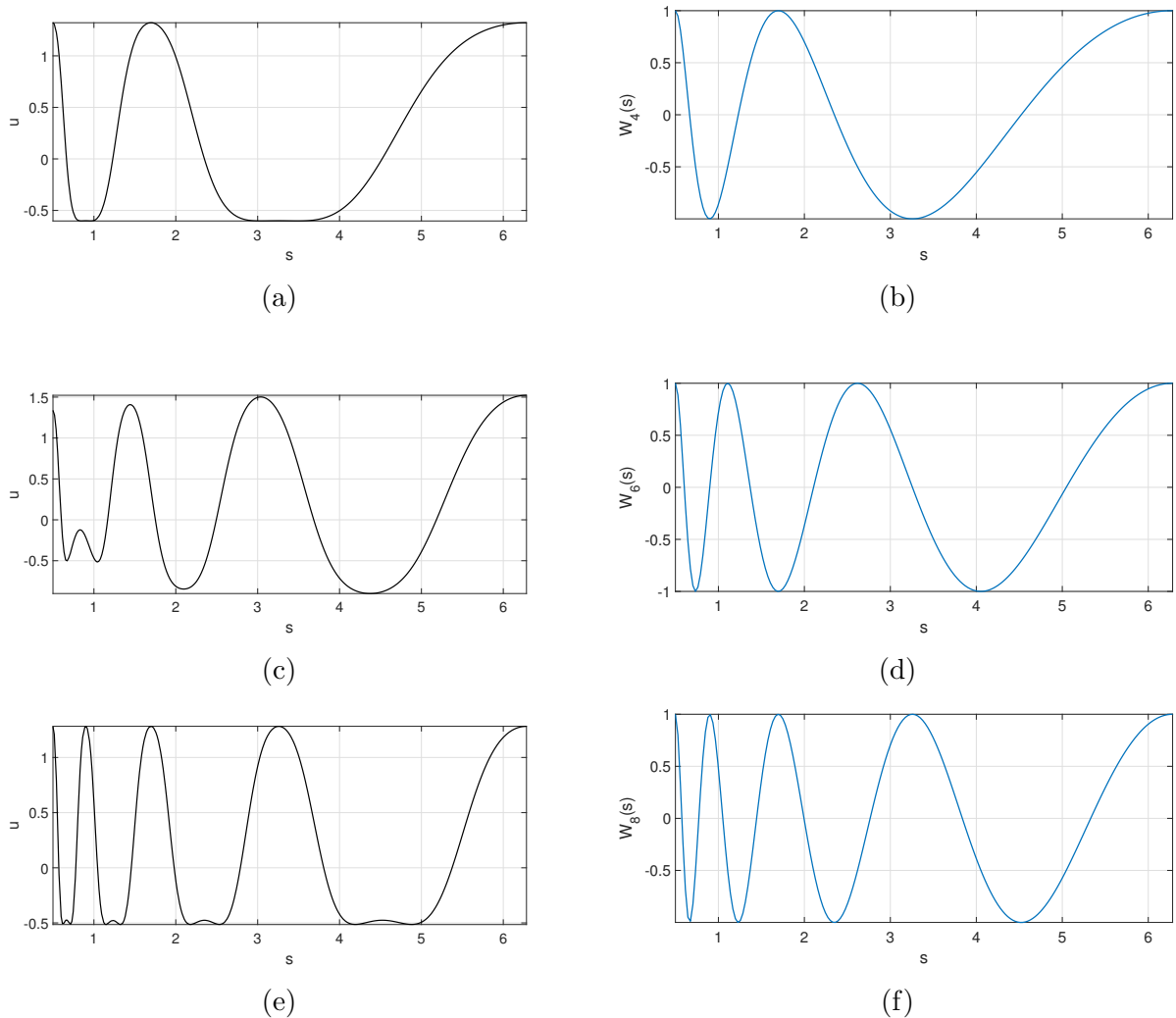
**Figura 5-12.:** Solución de (3-45) en el espacio fase para crecimiento isotrópico lineal (5-18). *CI* es la condición inicial y *PE* el punto de equilibrio.



**Figura 5-13.:** Solución normalizada de (3-51), para diferentes valores de  $m$  en la hélice hiperbólica, usando (5-18) y (5-19).

La figura 5-14 muestra la comparación entre la solución numérica de (3-44) con el MEE en diferentes tiempos y con la aproximación lineal dada por las funciones propias (5-20). La elección de la función propia más adecuada no es evidente de la Fig. 5-13, pues dado que cada  $c_m$  fue

normalizado con respecto al valor máximo que él mismo alcanza, entonces se pierde la información de la escala de cada coeficiente con respecto a los demás. Sin embargo, mediante experimentos numéricos se determinó que las diferentes funciones propias en la Fig. 5-14 en realidad corresponden al valor de  $m$  cuyo  $c_m$  es más inestable en el tiempo o el coeficiente correspondiente al  $m$  más grande cuya inestabilidad es comparable con los demás coeficientes. Esto nos indica que el análisis lineal si ayuda a predecir de cierta manera la solución numérica, pero no con gran precisión como para dominios estacionarios, pues en dominios que crecen la influencia de los diferentes coeficientes inestables en el intervalo de tiempo analizado afectan la forma del patrón, modificando levemente su longitud de onda, ubicación de máximos y mínimos y la adición de nuevos modos con respecto a las funciones propias que predice el análisis lineal.



**Figura 5-14.:** Soluciones numérica de (3-44) con el MEE y funciones propias  $W_m(s)$ : (a)  $t = 500$ , (b)  $W_4(s)$ , (c)  $t = 1500$ , (d)  $W_6(s)$ , (e)  $t = 3000$ , (f)  $W_8(s)$

## 5.3. Sistema de reacción-difusión con crecimiento y deformación del dominio bajo difusión no homogénea

### 5.3.1. Dominio lineal que crece isotrópicamente en el tiempo con difusión variable

Retomando el ejemplo de la Sección 5.2.1, consideremos una línea que crece en el tiempo de forma isotrópica exponencial dada por (5-13), pero con difusión no homogénea de la forma (5-9), y parametrizada como

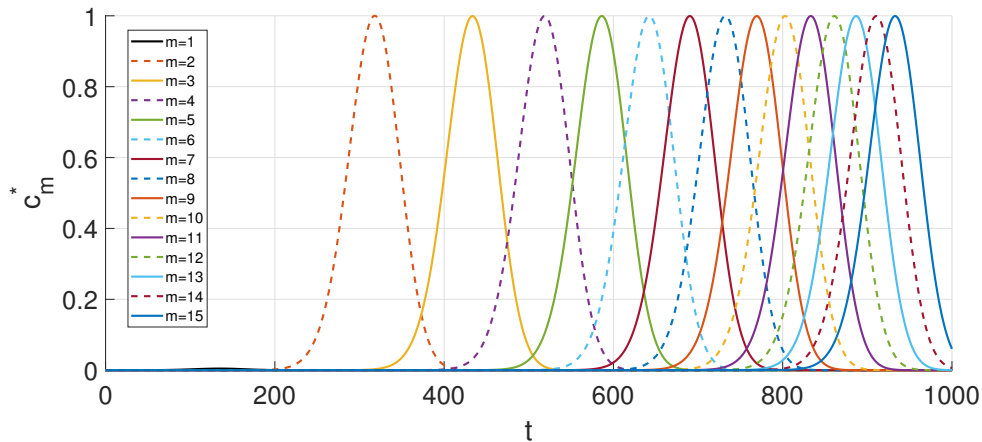
$$X(s, t) = (\rho(t)s, 0, 0), \quad s \in [-1, 1].$$

Con esa parametrización, los vectores tangentes vienen dados por  $\|X_s(s, t)\| = \rho(t)$  que, son independientes de la variable  $s$  por lo que es posible aplicar el análisis lineal de la Sección 3.2.3 para el caso de difusión variable. Considerando el coeficiente de difusión (5-9), y que  $p = \rho(t)$ , los valores propios y sus respectivas funciones propias para este ejemplo son:

$$(5-21) \quad \bar{q}_m = m(m+1),$$

$$(5-22) \quad W_m(s) = P_m(s).$$

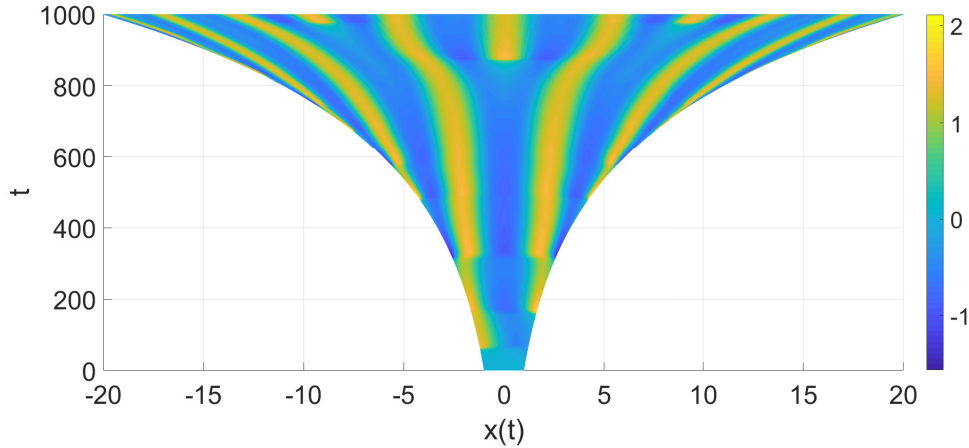
Los cuales corresponden a los valores y funciones propias del problema de Sturm-Liouville  $\mathcal{D}_X W_n + \bar{q}_n W_n = 0$  generado en la Sección 3.2.3 y cuyas soluciones fueron analizadas en la Sección 3.2.2. Considerando los parámetros de la Tabla 5-3, la estabilidad del sistema sin difusión (3-45) se muestra en la Fig. 5-7, mientras que la estabilidad del sistema con difusión (3-47) se determina a partir de los coeficientes  $c_m$  de la expresión (3-58) con (5-21). Esta solución se muestra en la Fig. 5-15



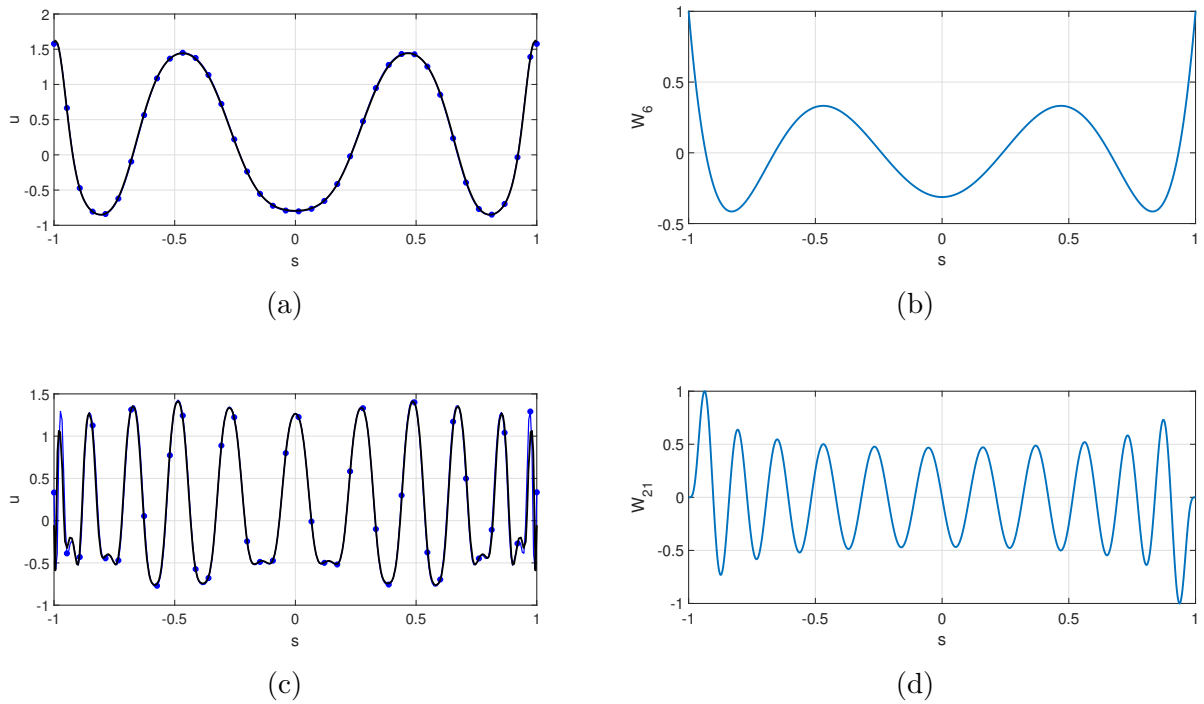
**Figura 5-15.:** Solución normalizada de (3-51), con los parámetros de la Tabla 5-3 y los valores propios (5-21).

De igual forma que para una línea que crece con difusión constante, los coeficientes  $c_m$  del morfógeno  $u$  presentan un intervalo finito de inestabilidad y esto muestra que el sistema RD linealizado es inestable en todo tiempo  $t$ , bajo diferentes modos  $\bar{q}_m$  de inestabilidad. Así mismo la

normalización  $c_m^*$  de los coeficientes  $c_m$  del morfógeno  $u$  fue realizada de forma análoga que en la Sección 5.2.1.



**Figura 5-16.:** Solución con el MEE del sistema (3-44), en una línea con crecimiento isotrópico exponencial (5-13), difusión no homogénea de la forma (5-9), y los parámetros de la Tabla 5-3.



**Figura 5-17.:** (a) Comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares) en  $t = 500$ , (b) Función propia  $W_6(s)$ , (c) Comparación del MEE (curva negra) con el MEF (curva azul con marcadores circulares) en  $t = 1000$ , (d) Función propia  $W_{21}(s)$ .

La Fig. 5-16 muestra la solución numérica mediante el MEE del sistema (3-44), en una línea con crecimiento isotrópico exponencial (5-13), difusión no homogénea de la forma (5-9), y los parámetros de la Tabla 5-3. Se observa que en este caso se conserva la longitud de onda variable a lo largo del tiempo, pues el espaciamento entre máximos (regiones amarillas) no se mantiene constante en un tiempo  $t$  fijo, a diferencia de la Fig. 5-9. Por otro lado la Fig. 5-17 muestra la comparación entre los enfoques numéricos y la aproximación lineal, en donde se evidencia que la aproximación lineal  $W_6(s)$  se asemeja a la solución numérica en  $t = 500$  y su coeficiente correspondiente  $c_6$ , en la Fig. 5-15, inicia su periodo de inestabilidad en ese tiempo. Sin embargo, puede apreciarse en Fig. 5-17(d) que la aproximación lineal  $W_{21}$  no se aproxima a la solución numérica, dado que para dicho tiempo  $t$  existen varios coeficientes inestables que afectan en cierta medida la forma del patrón numérico y por ende su aproximación lineal no coincide tan claramente. Finalmente el MSE entre las soluciones de *COMSOL* y mediante el MEE en los tiempos  $t = 500$  y  $t = 1000$  son

$$(5-23) \quad \begin{aligned} MSE_{t=500} &= 4.4346 \times 10^{-4}, \\ MSE_{t=1000} &= 0.0476. \end{aligned}$$

### 5.3.2. Espiral con difusión variable.

Consideremos la espiral determinada por la parametrización

$$(5-24) \quad X(s, t) = \left( s \cos \left( \rho(t) \frac{s}{5} \right), s \sin \left( \rho(t) \frac{s}{5} \right), 0 \right), \quad s \in [0, \pi],$$

que se muestra en la Fig. 5-18.

Para esta parametrización, los vectores tangentes y el término de dilución en (3-18) vienen dados por

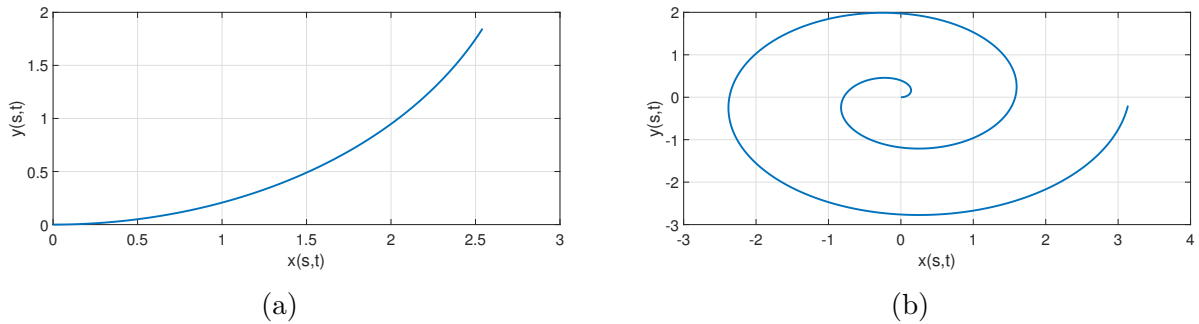
$$\begin{aligned} \|X_s(s, t)\| &= \sqrt{1 + \left( \rho(t) \frac{s}{5} \right)^2}, \\ (\ln(\sigma_s))_t &= (\ln(\|X_s(s, t)\|))_t = \frac{\rho(t)\dot{\rho}(t)s^2}{25 + (\rho(t)s)^2}. \end{aligned}$$

Es importante mencionar que este caso particular no se consideró en ninguno de los análisis lineales desarrollados en el Capítulo 3, pues no es un caso de crecimiento isotrópico, más aún tampoco es un caso con crecimiento anisotrópico. El análisis lineal para este problema, cuando los vectores tangentes son funciones implícitas de  $t$  y  $s$ , no se ha desarrollado aún sin embargo, es un ejemplo útil para emplear desde un enfoque numérico.

Consideremos la función  $\rho(t)$  dada por

$$(5-25) \quad \rho(t) = 1 + 0.0063t,$$

con lo que la parametrización (5-24) tiene dos efectos sobre la curva inicial ( $t = 0$ ); en primer lugar, la curva incrementa su longitud con el tiempo y en segundo lugar cambia su forma o se deforma con respecto a la espiral inicial, ya que cuando  $\rho(t)$  toma un valor cada vez mayor entonces la espiral genera más vueltas alrededor del origen. Esto se muestra en la Fig. 5-18.



**Figura 5-18.:** (a) Espiral (5-24) en  $t = 0$ , (b) Espiral (5-24) en  $t = 3000$

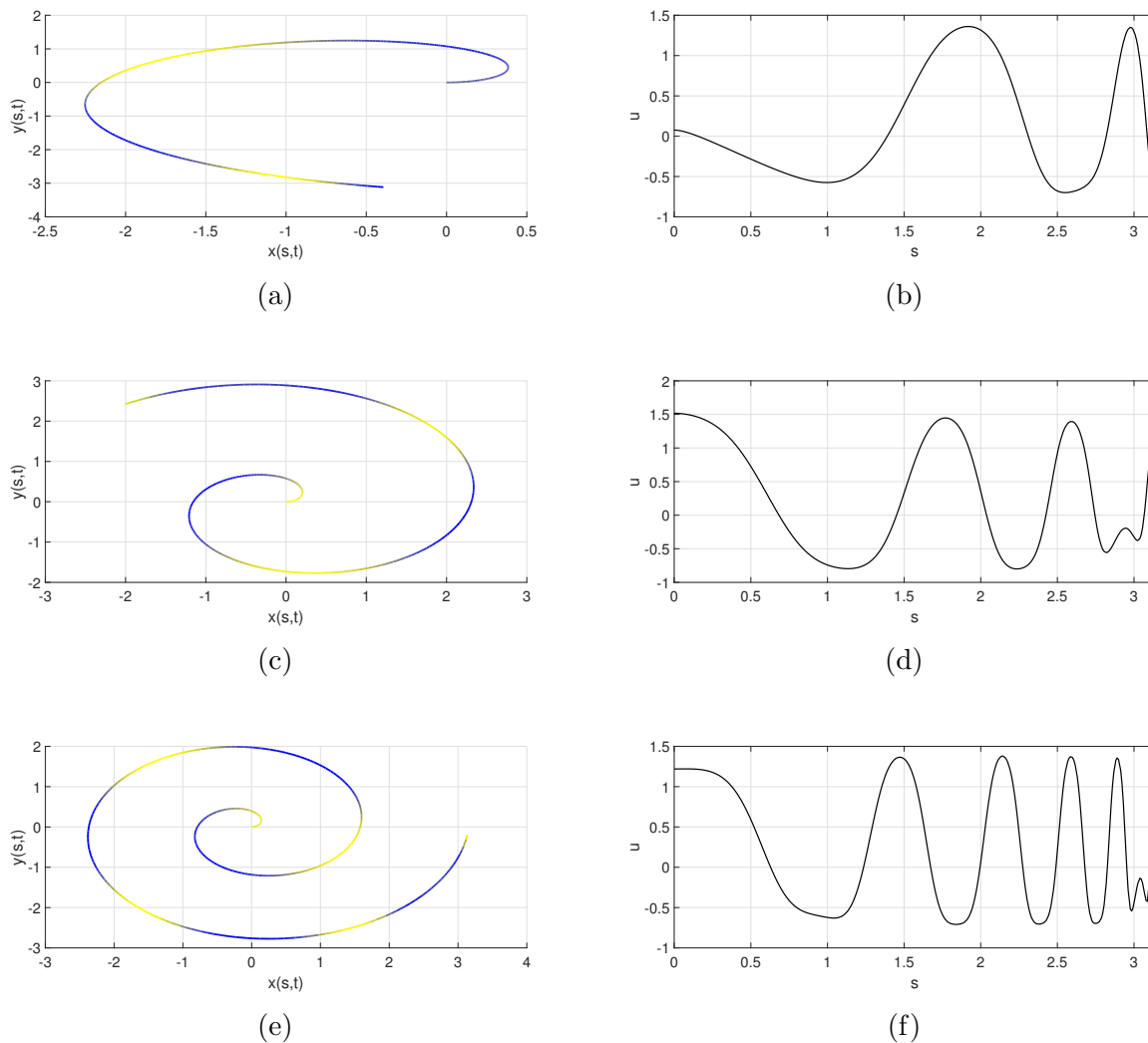
Supongamos ahora un régimen de difusión variable, de la forma

$$(5-26) \quad D(s) = |0.1 + \sin(s)|,$$

que es un tipo de problema más general que los analizados anteriormente, por esa razón sólo será analizado de forma numérica. En la Fig. 5-19 se muestra la solución del sistema RD (3-18) para diferentes tiempos, con parámetros dados en la Tabla 5-3, empleando el MEE para su solución numérica. Debido a la imposibilidad de realizar un análisis lineal para este caso, los parámetros empleados se obtuvieron por ensayo y error, obteniendo la coincidencia de que son los mismos que los de la Tabla 5-3.

Las Figs. 5-19(a), (c) y (e) muestran el patrón de Turing sobre la espiral en  $t = 1000$ ,  $t = 2000$  y  $t = 3000$ , respectivamente, donde la coloración amarilla indica la máxima concentración del morfógeno  $u$  y la coloración azul indica la mínima concentración. Por otro lado las Figs. 5-19(b), (d) y (f) muestran las soluciones  $u$  vs  $s$  para  $t = 1000$ ,  $t = 2000$  y  $t = 3000$ , respectivamente. Aunque no se incluyó algún tipo de crecimiento usual (isotrópico o anisotrópico), se evidencia el crecimiento del dominio, además del surgimiento de nuevos modos a lo largo del tiempo (generación de nuevos máximos y mínimos).

Los ejemplos desarrollados en este capítulo muestran que aún hay retos por abordar teóricamente en sistemas RD cuyo dominio es una curva encajada en  $\mathbb{R}^3$ , dependiente o independiente de la variable temporal. Por otro lado, se evidencia la utilidad del MEE desarrollado, así como también su precisión para sistemas RD con dominio dependiente del tiempo (incluso independiente del tiempo). Así mismo la determinación de parámetros que permite el análisis lineal para dominios estacionarios fue de gran utilidad en los diferentes ejemplos desarrollados, tanto dominios estacionarios como no estacionarios, pues como se observó, para tasas de crecimiento lento algunos de estos parámetros siguen cumpliendo las condiciones de Turing y por tanto la formación de patrones tuvo lugar.



**Figura 5-19.:** En la primer columna se muestran las soluciones numérica, mediante el MEE, del sistema (3-18), con (5-25), (5-26), sobre la espiral (5-24) ((a), (c) y (e)). En la segunda columna se muestran los patrones resepectivos ((b), (d) y (f)), para tres diferentes tiempos, de arriba a abajo:  $t = 1000$ ,  $t = 2000$ , y  $t = 3000$ . La coloración amarilla indica la máxima concentración del morfógeno  $u$  y la coloración azul indica la mínima concentración.

## 6. Conclusiones

En este trabajo se presentan algunos aportes al estudio de sistemas de reacción-difusión y formación de patrones de Turing. En primer lugar, se dedujo el sistema de reacción-difusión sobre variedades de dimensión 1 y 2, con término difusivo dependiente de las variables espaciales, lo cual fue realizado mediante el hallazgo del respectivo operador de Laplace Beltrami (Sec. 3.1.1, para dimensión 1, y Apéndice A, para dimensión 2). También se desarrolló una generalización del análisis lineal de Turing para sistemas cuyo dominio es una curva encajada en el espacio; esto fue posible gracias a la determinación de una solución explícita para el problema de Sturm-Liouville generado por el operador de Laplace-Beltrami (Proposiciones 1 y 2). Estas proposiciones son relevantes porque se han desarrollado enfoques similares para diferentes operadores [16, 17] donde siempre se supone la existencia de una solución al problema de Sturm-Liouville, sin embargo para el caso de sistemas RD con difusión constante y dominio independiente del tiempo, aquí se muestra que dicha solución siempre existe para cualquier curva suave. Para el caso de difusión variable, se determinaron las condiciones que aseguran el conocimiento de una solución explícita para el problema de Sturm-Liouville generado tanto para dominios dependientes como independientes del tiempo, obteniendo que las condiciones de Turing, y por ende el mapa de Turing, encontrados para dominios estacionarios, se mantienen sin cambios con lo obtenido inicialmente por Turing [1], de igual forma las condiciones derivadas del análisis lineal realizado para curvas con crecimiento isotrópico se mantienen igual a las planteadas en [16, 17].

Finalmente se implementó en lenguaje Python el método de elementos espectrales para la solución al sistema de reacción-difusión (3-18), utilizando el método IMEX para la discretización temporal. Al comparar los resultados obtenidos mediante el software comercial de elementos finitos *COMSOL Multiphysics* <sup>®</sup>, se mostró que el MEE desarrollado es preciso, además de que presenta la versatilidad de ser de acceso libre a diferencia del software comercial, permitiendo su uso ilimitado para el desarrollo de diferentes problemas de reacción-difusión y puede ser generalizado para aplicaciones más complejas.

Se presentaron diversos ejemplos, mediante los cuales se corroboraron los resultados del análisis lineal derivado en la Sección 3, reforzando el hecho de que el análisis de Turing ayuda para predecir la forma cualitativa de las soluciones numéricas y permite determinar el mapa de Turing o conjunto de parámetros para las cinéticas que dan lugar a la formación de patrones, lo que ayuda a encontrar de manera más directa las condiciones para la formación de patrones de Turing, sin incurrir a una actividad de ensayo y error. Sin embargo, también se mostró que los patrones de Turing para curvas dependientes del tiempo en algunos casos no son tan fácilmente predecibles pues la inestabilidad de varios coeficientes en el mismo intervalo de tiempo producen cambios en la forma final del patrón e impide predecirlo fácilmente mediante el análisis lineal.

A pesar de que propusimos una generalización del análisis lineal de Turing en curvas, aún

quedan algunos problemas para abordar en investigaciones futuras. El primero de ellos es una mayor generalización del análisis lineal, ya sea determinando soluciones al problema de Sturm-Liouville con coeficiente de difusión variable sin la imposición de restricciones, o generalizando el análisis lineal a curvas con crecimiento anisotrópico, en curvas que dependen implícitamente del tiempo (lo cual no ha sido analizado hasta ahora). Un segundo problema a investigar es la generalización de este trabajo a problemas en superficies con coeficiente de difusión dependiente de las variables espaciales, haciendo uso del operador de Laplace-Beltrami deducido en el Apéndice A. Y finalmente, la optimización y mejora del código desarrollado para la solución numérica de sistemas RD en curvas, pues aunque es un método que proporciona resultados adecuados para los sistemas, aún requiere mejoras en el tiempo de cómputo, lo cual puede ser mejorado mediante procesos de paralelización o programación en códigos de más bajo nivel, para de esta manera contar con un desarrollo comparable con el de programas comerciales.

# A. Deducción del operador de Laplace-Beltrami en una superficie encajada en $\mathbb{R}^3$

Sea  $X(s, \xi, t)$  una superficie encajada en  $\mathbb{R}^3$ , que es función del tiempo  $t$  y de los parámetros  $s$  y  $\xi$ , definida como

$$(A-1) \quad X(s, \xi, t) = (x(s, \xi, t), y(s, \xi, t), z(s, \xi, t)).$$

Al igual que para el caso en una dimensión desarrollado en la Sección 3.1.1, consideremos los vectores tangentes a la superficie  $X$ , denotados como  $X_s$  y  $X_\xi$ , y definidos como

$$(A-2) \quad \begin{aligned} X_s(s, \xi, t) &= (x_s(s, \xi, t), y_s(s, \xi, t), z_s(s, \xi, t)), \\ X_\xi(s, \xi, t) &= (x_\xi(s, \xi, t), y_\xi(s, \xi, t), z_\xi(s, \xi, t)), \end{aligned}$$

donde los subíndices  $s$  y  $\xi$  denotan las derivadas con respecto a las variables  $x$  y  $\xi$ , respectivamente. Dado que la superficie  $X$  es una variedad de dimensión 2, el tensor métrico puede expresarse como una matriz de  $2 \times 2$  dada por

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \langle X_s, X_s \rangle & \langle X_s, X_\xi \rangle \\ \langle X_\xi, X_s \rangle & \langle X_\xi, X_\xi \rangle \end{pmatrix}.$$

Si elegimos una parametrización de la variedad tal que los vectores tangentes sean ortogonales, entonces el tensor métrico se reduce a

$$(A-3) \quad \mathbf{g} = \begin{pmatrix} \|X_s\|^2 & 0 \\ 0 & \|X_\xi\|^2 \end{pmatrix},$$

y su inverso viene dado por

$$(A-4) \quad \mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{g_{11}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{g_{22}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\|X_s\|^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\|X_\xi\|^2} \end{pmatrix}.$$

Ahora, para la deducción del operador de Laplace-Beltrami en la superficie  $X(s, \xi, t)$ , usaremos las definiciones de gradiente y divergencia (3-10) y (3-11), respectivamente. Éstas ecuaciones pueden reducirse para una variedad de dimensión  $m = 2$ , considerando el tensor métrico (A-3), como

$$(A-5) \quad \nabla f = g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \partial_s + g^{22} \frac{\partial f}{\partial \xi} \partial_\xi,$$

y

$$(A-6) \quad \text{div}(V) = \frac{\partial V^1}{\partial s} + \frac{\partial V^2}{\partial s} + \Gamma_{11}^1 V^1 + \Gamma_{12}^1 V^2 + \Gamma_{21}^2 V^1 + \Gamma_{22}^2 V^2.$$

Para  $m = 2$  y usando (3-12), se pueden calcular las componentes de (A-6):

$$(A-7) \quad \begin{aligned} \Gamma_{11}^1 &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 g^{1n} \left\{ \frac{\partial g_{1n}}{\partial s} + \frac{\partial g_{1n}}{\partial s} - \frac{\partial g_{11}}{\partial x^n} \right\} = \frac{1}{2} g^{11} \frac{\partial g_{11}}{\partial s}, \\ \Gamma_{12}^1 &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 g^{1n} \left\{ \frac{\partial g_{2n}}{\partial s} + \frac{\partial g_{1n}}{\partial \xi} - \frac{\partial g_{12}}{\partial x^n} \right\} = \frac{1}{2} g^{11} \frac{\partial g_{11}}{\partial \xi}, \\ \Gamma_{21}^2 &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 g^{2n} \left\{ \frac{\partial g_{1n}}{\partial \xi} + \frac{\partial g_{2n}}{\partial s} - \frac{\partial g_{21}}{\partial x^n} \right\} = \frac{1}{2} g^{22} \frac{\partial g_{22}}{\partial s}, \\ \Gamma_{22}^2 &= \frac{1}{2} \sum_{n=1}^2 g^{2n} \left\{ \frac{\partial g_{2n}}{\partial \xi} + \frac{\partial g_{2n}}{\partial \xi} - \frac{\partial g_{22}}{\partial x^n} \right\} = \frac{1}{2} g^{22} \frac{\partial g_{22}}{\partial \xi}, \end{aligned}$$

donde  $x^1 = s$  y  $x^2 = \xi$ , los términos  $g_{ij}$  son las componentes de la métrica  $\mathbf{g}$  y  $g^{ij}$  son las componentes de la inversa de la métrica  $\mathbf{g}^{-1}$ .

Ahora, el operador de Laplace-Beltrami con difusión variable por definición viene dado por

$$\mathcal{D}_X f = \text{div}(D(s, \xi) \nabla f),$$

que depende de dos parámetros,  $s$  y  $\xi$ , a diferencia del caso analizado en la Sección 3.1.1. Reemplazando (A-6) en la expresión anterior se obtiene

$$\mathcal{D}_X f = \frac{\partial}{\partial s} \left( D(s, \xi) g^{11} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( D(s, \xi) g^{22} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + K + H,$$

donde

$$K = \frac{1}{2} (g^{11})^2 \frac{\partial g_{11}}{\partial s} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{2} g^{11} g^{22} \frac{\partial g_{11}}{\partial \xi} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi},$$

y

$$H = \frac{1}{2} g^{11} g^{22} \frac{\partial g_{22}}{\partial s} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{2} (g^{22})^2 \frac{\partial g_{22}}{\partial \xi} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi}.$$

Reemplazando los valores de  $g^{11}$  y  $g^{22}$  dados en (A-4), se obtiene

$$(A-8) \quad \mathcal{D}_X f = \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s, \xi)}{g_{11}} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{D(s, \xi)}{g_{22}} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + K + H,$$

con

$$K = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{g_{11}^2} \frac{\partial g_{11}}{\partial s} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{2} \frac{1}{g_{11} g_{22}} \frac{\partial g_{11}}{\partial \xi} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \right),$$

y

$$H = \frac{1}{2} \frac{1}{g_{11} g_{22}} \frac{\partial g_{22}}{\partial s} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} + \frac{1}{2} \frac{1}{g_{22}^2} \frac{\partial g_{22}}{\partial \xi} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi}.$$

Aplicando la regla del producto en los primeros términos de (A-8), y agrupando términos semejantes, se tiene que

$$(A-9) \quad \begin{aligned} \mathcal{D}_X f &= -\frac{1}{2} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} \frac{1}{g_{11}^2} \frac{\partial g_{11}}{\partial s} + \frac{1}{g_{11}} \frac{\partial}{\partial s} \left( D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} \right) - \frac{1}{2} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{1}{g_{22}^2} \frac{\partial g_{22}}{\partial s} \\ &+ \frac{1}{g_{22}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{2} \frac{1}{g_{11} g_{22}} \frac{\partial g_{11}}{\partial \xi} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \frac{1}{g_{11} g_{22}} \frac{\partial g_{22}}{\partial s} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s}, \end{aligned}$$

que puede reescribirse como

$$(A-10) \quad \begin{aligned} \mathcal{D}_X f &= \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial f}{\partial s} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{1}{\sqrt{g_{11}}} \right) + \frac{1}{g_{11}} \frac{\partial}{\partial s} \left( D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \right) \\ &+ \frac{1}{g_{22}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\sqrt{g_{11} g_{22}}} \frac{\partial}{\partial \xi} (\sqrt{g_{11}}) D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} + \frac{1}{g_{11} \sqrt{g_{22}}} \frac{\partial}{\partial s} (\sqrt{g_{22}}) D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s}, \end{aligned}$$

o bien

$$(A-11) \quad \begin{aligned} \mathcal{D}_X f &= \frac{1}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{1}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\sqrt{g_{11} g_{22}}} \frac{\partial}{\partial \xi} (\sqrt{g_{11}}) D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \\ &+ \frac{1}{g_{11} \sqrt{g_{22}}} \frac{\partial}{\partial s} (\sqrt{g_{22}}) D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s}. \end{aligned}$$

Agrupando términos

$$(A-12) \quad \begin{aligned} \mathcal{D}_X f &= \frac{1}{\sqrt{g_{11} g_{22}}} \left\{ \sqrt{g_{22}} \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{11}}} \frac{\partial}{\partial s} (\sqrt{g_{22}}) \frac{\partial f}{\partial s} \right. \\ &\left. + \sqrt{g_{11}} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) + \frac{D(s, \xi)}{\sqrt{g_{22}}} \frac{\partial}{\partial \xi} (\sqrt{g_{11}}) \frac{\partial f}{\partial \xi} \right\}, \end{aligned}$$

con lo que obtenemos que el operador de Laplace-Beltrami en la superficie  $X$  con difusión variable es

$$(A-13) \quad \mathcal{D}_X f = \frac{1}{\sqrt{g_{11} g_{22}}} \left\{ \frac{\partial}{\partial s} \left( \frac{\sqrt{g_{22}}}{\sqrt{g_{11}}} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial s} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\sqrt{g_{11}}}{\sqrt{g_{22}}} D(s, \xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \right) \right\}$$

# Referencias

- [1] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Philos Trans R Soc Lond Ser B Biol Sci*, 237:37–72, 1952.
- [2] Shigeru Kondo and Rihito Asai. A reaction–diffusion wave on the skin of the marine angelfish *Pomacanthus*. *Nature*, 376(6543):765–768, 1995.
- [3] Shigeru Kondo and Takashi Miura. Reaction-Diffusion Model as a Framework for Understanding Biological Pattern Formation. *Science*, 329:1616 – 1620, 09 2010.
- [4] Nathan Tompkins, Ning Li, Camille Girabawe, Michael Heymann, G Bard Ermentrout, Irving R Epstein, and Seth Fraden. Testing Turing’s theory of morphogenesis in chemical cells. *Proc.Nat.Acad.Sci.*, page 201322005, 03 2014.
- [5] Editorial. Turing patterns, 70 years later. *Nature Computational Science*, 2(8):463–464, 8 2022.
- [6] D. Menshykau, P. Blanc, E. Unal, Sapin V., and D. Iber. An interplay of geometry and signaling enables robust lung branching morphogenesis. *Development*, 141(23):4526–4536, 2014.
- [7] K R Swanson, E C Alvord, and Murray J D. A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter. *Cell Prolif.*, 33:317 – 329, 2000.
- [8] M F Staddon. How the zebra got its stripes: Curvature-dependent diffusion orients turing patterns on three dimensional surfaces. *Physical Review*, 110(034402):1 – 6, 2024.
- [9] E. Crampin, E. Gaffney, and K. Maini. Reaction and diffusion on growing domains: Scenarios for robust pattern formation. *Bull. Math. Biol.*, 61:1093–1120, 1999.
- [10] R. Plaza, F. Sanchez-Garduño, P. Padilla, R. Barrio, and P. Maini. The effect of growth and curvature on pattern formation. *J. Dyn. Differ. Equ.*, 16:1093–1121, 2004.
- [11] A. Madzvamuse, E. Gaffney, and P. Maini. Stability analysis of non-autonomous reaction-diffusion systems: the effects of growing domains. *J. Math. Biol.*, 61:133–164, 2010.
- [12] G. Toole and M. Hurdal. Pattern formation in turing systems on domains with exponentially growing structures. *J. Dyn. Differ. Equ.*, 26:315–332, 2014.
- [13] J. Castillo, F. Sánchez-Garduño, and P. Padilla. A turing-hopf bifurcation scenario for pattern formation on growing domains. *Bull. Math. Biol.*, 78:1410–1449, 2016.

- 
- [14] Z. Tang, Z. Fu, M. Chen, and L. Ling. A localized extrinsic collocation method for turing pattern formations on surfaces. *Appl. Math. Lett.*, 122:1–7, 2021.
- [15] H. Kim, Ana. Yun, S. Yoon, C. Lee, J. Park, and J. Kim. Pattern formation in reaction-diffusion systems on evolving surfaces. *Comput. Math. Appl.*, 80:2019–2028, 2020.
- [16] R. Van Gorder, V. Klika, and A. Krause. Turing conditions for pattern forming systems on evolving manifolds. *J. Math. Biol.*, 82:1–61, 2021.
- [17] R. Van Gorder. Pattern formation from spatially heterogeneous reaction-diffusion systems. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A-Math. Phys. Eng. Sci.*, 379:20210001, 2021.
- [18] E. Calderón-Barreto and José L. Aragón. Turing patterns with space varying diffusion coefficients: Eigenfunctions satisfying the legendre equation. *Chaos Solitons Fractals*, 165:112869, 2022.
- [19] Elkin A. Calderón-Barreto, Julián Bravo-Castillero, and José L. Aragón. Turing patterns in domains with periodic inhomogeneities; a homogenization approach. *Chaos Solitons Fractals*, 179:114433, 2024.
- [20] P. Arcury and J.D Murray. Pattern sensitivity to boundary and initial conditions in reaction-diffusion models. *J. Math. Biol.*, 24:141–165, 1986.
- [21] T. E Woolley. Boundary conditions cause different generic bifurcation structures in turing systems. *Bull. Math. Biol.*, 84:84–101, 2022.
- [22] P. K. Maini, T.K. Woolley, R.E. Baker, E.A. Gaffney, and S.S. Lee. Turing’s model for biological pattern formation and the robustness problem. *Interface Focus*, 2:487–496, 2012.
- [23] J.L. Aragón, R. A. Barrio, T. E. Woolley, R. E. Baker, and P. K. Maini. Nonlinear effects on turing patterns: Time oscillations and chaos. *Phys. Rev. E*, 86:026201, 2012.
- [24] J. D. Murray. *Mathematical Biology vol. II. Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer, New York, third edition, 2003.
- [25] David Kopriva. *Implementing Spectral Methods for Partial Differential Equations*. Springer, 2009.
- [26] Erwin Kreyszig. *Introductory functional analysis with applications*. John Wiley & Sons, 1978.
- [27] A. Cardone, R. D’Ambrosio, and B. Paternoster. Exponentially fitted imex methods for advection-diffusion problems. *J. Comput. Appl. Math.*, 316:100–108, 2017.
- [28] R. D’Ambrosio, M. Moccaldi, and B. Paternoster. Parameter estimation in imex-trigonometrically fitted methods for the numerical solution of reaction-diffusion problems. *Comput. Phys. Commun.*, 226:55–66, 2018.
- [29] Jingwei Hu and Ruiwen Shu. On the uniform accuracy of implicit-explicit backward differentiation formulas (imex-bdf) for stiff hyperbolic relaxation systems and kinetic equations. *Math. Comput.*, 90:641–670, 2021.

- 
- [30] J. Chaudhry, D. Estep, V. Ginting, J. Shadid, and S. Tavener. A posteriori error analysis of imex multi-step time integration methods for advection-diffusion-reaction equations. *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 285:730–751, 2015.
- [31] Toshiyuki Koto. Imex runge-kutta schemes for reaction-diffusion equations. *J. Comput. Appl. Math.*, 215:182–195, 2008.
- [32] Daniele Cavaglieri and Thomas Bewley. Low-storage implicit/explicit runge-kutta schemes for the simulation of stiff high-dimensional ode systems. *J. Comput. Phys.*, 286:172–193, 2015.
- [33] R. Leveque. *Finite Difference Methods for Differential Equations*. University of Washington, 2005.
- [34] C Varea, R A Barrio, J L Aragón, and P K Maini. A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting Turing systems. *Bull. Math. Biol.*, 61(3):483 – 505, 1999.
- [35] T. Woolley and R. Baker. Analysis of stationary droplets in a generic turing reaction-diffusion system. *Phys. Rev. E*, 82:051929, 2010.
- [36] Barrett O’Neill. *Semi-Riemannian geometry with applications to relativity*, volume 103. Academic Press, 1983.
- [37] M.A. Al-Gwaiz. *Sturm-Liouville Theory and its applications*. Springer-Verlag, 2008.
- [38] K. Josic and R. Rosenbaum. Unstable solutions of nonautonomous linear differential equations. *SIAM Review*, 50:570–584, 2008.
- [39] Sweden. COMSOL AB, Stockholm. Comsol multiphysics® v.6.0. [www.comsol.com](http://www.comsol.com), 2022.