

# UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA



UNIVERSIDAD  
AUTÓNOMA  
METROPOLITANA

UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Posgrado en Matemáticas Aplicadas

## “Patrones de Turing sobre superficies tridimensionales”

Tesis para obtener el grado de:

Maestro en Ciencias (Matemáticas Aplicadas e Industriales)

### Presenta:

Lic. David Israel González Mena

Matrícula: 2222800073

Correo: davmatuam@gmail.com

### Director de tesis

Dr. Lorenzo Héctor Juárez Valencia

### Jurado

Presidente: Dr. Joaquín Delgado Fernández

Secretaria: Dra. María Luisa Sandoval Solís

Vocal: Dr. Lorenzo Héctor Juárez Valencia

Vocal: Dra. Diana Assaely León Velasco

Iztapalapa, Ciudad de México a 16 de Diciembre de 2024.



## **Datos del Jurado**

Presidente: **Dr. Joaquín Delgado Fernández**

Secretario: **Dra. María Luisa Sandoval Solís**

Vocal: **Dra. Diana Assaely León Velasco**

Vocal: **Dr. Lorenzo Héctor Juárez Valencia**



*A mi familia*



# Resumen

Este trabajo aborda el estudio de patrones de Turing, estructuras espaciales autoorganizadas generadas por sistemas de reacción-difusión, con énfasis en su formación sobre superficies tridimensionales. Se parte de una introducción al concepto de difusión, las leyes de Fick y los sistemas de reacción-difusión como base para modelar la dinámica de estos patrones.

En la sección sobre mecanismos para la creación de patrones, se presentan las condiciones matemáticas necesarias para la generación de patrones de Turing en regiones planas. Estas condiciones, derivadas del análisis de estabilidad espacial y temporal, establecen los criterios fundamentales para la aparición de patrones y se utilizan como base para extender el estudio hacia superficies tridimensionales mediante la introducción del operador de Laplace-Beltrami. A partir de estas condiciones, se desarrollan modelos de Turing capaces de cumplirlas, como los modelos Turing lineal y exponencial, lo que permite generar una gran variedad de patrones según el tipo de sistema considerado. Además, se realiza un análisis de convergencia para verificar la confiabilidad de los resultados numéricos obtenidos mediante el método de los elementos finitos.

En las formulaciones sobre superficies, el uso de la ecuación de Laplace-Beltrami es central para definir los problemas de reacción-difusión en geometrías tridimensionales. Esto incluye la formulación variacional del problema, la construcción de funciones base y el ensamblaje de las matrices de masa y rigidez necesarias para resolver las ecuaciones resultantes.

En la sección de simulaciones numéricas, se presentan una gran variedad de patrones obtenidos sobre superficies tridimensionales a partir de los distintos modelos presentados, tales como el modelo de Schnakenberg y el modelo de Gray-Scott. Además, se comparan estos resultados con los patrones generados en regiones planas, analizando las similitudes entre ellos. Este análisis permite evaluar el éxito de la estrategia utilizada para extender la generación de patrones en regiones planas a superficies tridimensionales.

Finalmente, las conclusiones resaltan la importancia del enfoque numérico para explorar la formación de patrones de Turing en superficies tridimensionales y plantean perspectivas futuras, como la exploración de nuevos modelos y aplicaciones en biología, física matemática y otras áreas.





# Agradecimientos

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi asesor, el Dr. L. Héctor Juárez Valencia, quien ha sido un pilar fundamental en mi formación académica y profesional. Su compromiso, dedicación y enseñanzas han dejado una huella imborrable en mi desarrollo, no solo como estudiante, sino también como persona.

Durante el proceso de esta tesis, su guía constante y su atención al detalle me ayudaron a mejorar significativamente la calidad y la forma de mi trabajo. Más allá de su papel como mentor, siempre mostró una actitud de apoyo, lo que me motivó a superar los desafíos y alcanzar los objetivos que nos propusimos juntos.

Admiro profundamente su profesionalismo, su pasión por la enseñanza y su capacidad de inspirar a quienes lo rodean. Le tengo un gran aprecio y estima, no solo por su conocimiento, sino también por la calidad humana con la que siempre me ha tratado. Estoy profundamente agradecido por haber contado con su guía en este camino.

Quiero expresar mi sincero agradecimiento a la Dra. María Luisa Sandoval Solís, cuya contribución fue clave para el mejoramiento de esta tesis. Su minuciosa revisión y atención al detalle resultaron invaluable, permitiendo que aspectos específicos de este trabajo alcanzaran mayor formalidad y claridad.

Aprecio profundamente los comentarios y observaciones que me brindó, ya que no solo enriquecieron el contenido de la tesis, sino que también me ayudaron a mejorar mi capacidad para expresar y exponer conceptos de manera más efectiva. Su tiempo y dedicación para compartir consejos prácticos y constructivos reflejan su compromiso con mi formación.

Le tengo un gran aprecio y estima, no solo por su profesionalismo, sino también por la forma en que se involucró con mi trabajo, contribuyendo significativamente al desarrollo de este proyecto.

Agradezco profundamente a la Dra. Diana Assaely León Velasco por tomarse el tiempo de revisar mi tesis y ofrecerme valiosas observaciones y comentarios que han sido clave para mejorarla. La comunicación y el entendimiento mutuo con la doctora fueron especialmente fluidos, dado que su experiencia en temas similares a los que se tratan en esta investigación facilitó un enriquecedor intercambio de ideas que han contribuido significativamente al desarrollo de este trabajo.

Quiero expresar mi sincero agradecimiento al Dr. Joaquín Delgado Fernández, por sus comentarios positivos hacia mi trabajo, los cuales me ayudaron a reconocer la importan-

cia de la investigación que se presenta en esta tesis. También quiero agradecerle por su amabilidad y disposición para recibir mis consultas, siempre de manera cordial y accesible. Su trato amable y amigable fue fundamental para mantener una comunicación fluida y enriquecedora durante todo el proceso.

Quiero expresar un agradecimiento especial al Dr. José Luis Cosme Álvarez, del Departamento de Matemáticas, por sugerirme la idea de utilizar el Algoritmo de Grado Mínimo para resolver sistemas de ecuaciones lineales de gran tamaño, donde la matriz asociada es rala o sparse. Este método fue crucial para optimizar significativamente el tiempo de cómputo en las simulaciones realizadas en esta investigación. Esta valiosa sugerencia surgió durante mi experiencia como ayudante de profesor en la materia de Optimización Lineal, impartida por él a estudiantes de la Licenciatura en Matemáticas. Su orientación y conocimientos fueron determinantes en el desarrollo de este trabajo.

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mi familia: a mi madre María, mi padre Salomón, mis tres queridísimas hermanas, Nallely, Abigail e Isi, y a mi hermano Jonathan. Cada uno de ustedes ha sido un pilar fundamental durante este camino. En especial, quiero resaltar el apoyo invaluable que recibí de mis hermanas y mi madre, quienes estuvieron a mi lado en los momentos más complicados, brindándome todo su apoyo durante las dificultades que enfrenté en este proyecto. Sin su respaldo, este logro no habría sido posible.

También quiero dedicar un agradecimiento muy especial a Belén Mora, quien ha sido mi compañera de vida durante ocho años extraordinarios, y es quien me acompañó durante todo este proceso. Juntos enfrentamos muchas situaciones diversas a lo largo de la maestría, y su apoyo, cariño, amor incondicional y fortaleza fueron esenciales para superar cada desafío. Estoy profundamente agradecido por haber contado con su presencia en este camino.

Finalmente, quiero agradecer de corazón a mis compañeros de generación: Brenda Michelle Domínguez Cruz, Gilberto García Padilla, Hiber Iván Ocaña Rivera y Omar Antúnez Jiménez. Fue un verdadero privilegio cursar la maestría junto a todos ustedes. Compartimos experiencias inolvidables, desde estupendas convivencias hasta momentos de esfuerzo y sacrificio al enfrentar juntos las materias. Aprendimos mucho unos de otros y nos apoyamos tanto personal como académicamente en las dificultades que surgieron. Este periodo, marcado por el trabajo y la camaradería que tuvimos, fue, sin duda, el que más disfruté de toda la maestría.

Quiero dedicar un agradecimiento muy especial a Luis Fernando Sánchez Chávez, cuya amistad y apoyo fueron fundamentales para mí en momentos particularmente complicados. Además, tuve el honor de compartir con él experiencias significativas, como la asistencia a congresos y eventos académicos, que fortalecieron aún más nuestra amistad y enriquecieron mi formación durante este tiempo.

Este proyecto fue llevado a cabo con el apoyo de la beca CONAHCyT con el número 1235842. Agradezco a esta institución, ya que, sin su generosa contribución, este proyecto no hubiera sido posible.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>7</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>9</b>
<b>Índice general</b>	<b>11</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>13</b>
1.1. Antecedentes y descripción general del problema . . . . .	13
1.2. Panorama general sobre patrones de Turing . . . . .	14
1.3. ¿Qué es un patrón de Turing? . . . . .	16
1.4. Objetivos de esta tesis . . . . .	18
<b>2. Preliminares</b>	<b>19</b>
2.1. Concepto de difusión . . . . .	19
2.2. Estudio cuantitativo de la difusión . . . . .	20
2.2.1. Flujo y gradiente de concentración . . . . .	20
2.2.2. Leyes de Fick . . . . .	21
2.2.3. Sistemas reacción-difusión . . . . .	22
<b>3. Mecanismos para la creación de patrones</b>	<b>25</b>
3.1. Presentación del modelo . . . . .	25
3.2. Estabilidad temporal en ausencia de difusión . . . . .	26
3.3. Inestabilidad espacial en presencia de difusión . . . . .	27
3.4. Construcción de algunos Modelos de Turing . . . . .	33
3.4.1. Creación de pulsos en condiciones iniciales . . . . .	35
3.5. Modelos de Turing en el plano . . . . .	36
3.5.1. Modelo de Turing lineal . . . . .	36
3.5.2. Modelo de Turing-exponencial . . . . .	40
3.6. Modelo de Schnakenberg en el plano . . . . .	46
3.7. Modelo de Gray-Scott en el plano . . . . .	53
<b>4. La Ecuación de Laplace-Beltrami y el método de los elementos finitos</b>	<b>61</b>
4.1. Operador Laplace-Beltrami (LBO) . . . . .	61
4.2. Formulación parabólica . . . . .	67
4.2.1. Aproximación del problema variacional . . . . .	68

4.2.2.	Construcción de las funciones base en cada elemento . . . . .	70
4.2.3.	Ensamble de la matriz $\mathbf{A} = \alpha \mathbf{M} + \mathbf{D}_{\Sigma} \mathbf{K}$ utilizando el elemento de referencia . . . . .	75
4.2.4.	Cálculo de los coeficientes $F_j$ del vector de carga $\mathbf{F}$ . . . . .	77
4.3.	Solución del caso elíptico y análisis de convergencia . . . . .	79
4.3.1.	Utilización del Algoritmo de Grado Mínimo para matrices sparse . . . . .	82
<b>5.</b>	<b>Simulaciones numéricas sobre superficies tridimensionales</b>	<b>89</b>
5.1.	Generación de mallas . . . . .	89
5.1.1.	Mallas triangulares bidimensionales . . . . .	90
5.1.2.	Mallas para regiones en coordenadas polares . . . . .	92
5.1.3.	Mallas 2D obtenidas mediante ecuaciones dadas de manera implícita . . . . .	93
5.2.	Generación de mallas triangulares sobre superficies . . . . .	94
5.2.1.	Mallas sobre superficies de la forma $z = f(x, y)$ . . . . .	95
5.2.2.	Mallas 3D obtenidas mediante ecuaciones dadas de manera implícita . . . . .	97
5.2.3.	Malla del toroide y algunas variaciones . . . . .	100
5.3.	Análisis de calidad de mallas triangulares . . . . .	102
5.4.	Simulaciones 3D . . . . .	104
5.4.1.	Modelo Turing-exponencial . . . . .	105
5.4.2.	Modelo de Schnakenberg . . . . .	113
5.4.3.	Modelo de Gray-Scott . . . . .	123
5.5.	Análisis del factor de escala $\gamma$ . . . . .	130
<b>6.</b>	<b>Conclusiones y perspectivas</b>	<b>133</b>
6.1.	Conclusiones . . . . .	133
6.2.	Perspectivas . . . . .	134
	<b>Bibliografía</b>	<b>137</b>
	<b>Apéndices</b>	<b>141</b>
A.	Programas en MATLAB . . . . .	141
A.1.	Programa para la implementación del Algoritmo de grado mínimo . . . . .	141
A.2.	<b>Programa para generar malla triangular de un anillo elíptico</b>	<b>141</b>
A.3.	<b>Programa para generar una malla triangular graduada para un círculo de radio <math>R &gt; 0</math></b> . . . . .	<b>143</b>

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Antecedentes y descripción general del problema

En distintos ámbitos de la ciencia, en muchas de sus diversas aplicaciones surge comúnmente la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales parciales sobre superficies, como por ejemplo, en la dinámica de fluidos, la ciencia de materiales, los gráficos por computadora, procesamiento de imágenes, formación de patrones, etcétera. En nuestro caso, es de principal interés el estudio de patrones espaciales sobre superficies tridimensionales.

Como punto de partida podemos comenzar citando el artículo original de Alan Turing [1], "The Chemical Basis of Morphogenesis", en el cual Alan Turing propone un modelo teórico para explicar cómo los patrones espaciales y las formas en organismos biológicos podrían surgir a partir de interacciones químicas simples. Utilizó un sistema de ecuaciones de reacción-difusión para mostrar cómo la difusión de sustancias químicas y su reacción mutua podrían generar patrones complejos en un medio. Turing argumentó que esta interacción entre difusión y reacción podría ser el mecanismo subyacente responsable de la morfogénesis en organismos vivos, y sugirió que esta teoría podría aplicarse a una variedad de contextos biológicos, como la formación de piel, la morfogénesis de órganos y la generación de patrones en animales y plantas. Su trabajo sentó las bases para la comprensión moderna de cómo los procesos químicos pueden dar forma a la estructura y función de los seres vivos durante su desarrollo.

A partir del trabajo de Turing, han surgido problemas asociados a la formación de patrones, la mayoría de ellos sin una respuesta clara aún [24]. Para modelar la difusión en superficies y dominios curvos arbitrarios es necesario utilizar la geometría diferencial. El modelo clásico de la difusión de Fick se puede extender a una variedad riemanniana orientable compacta general (por ejemplo, una superficie bidimensional lisa) reemplazando el operador de Laplace con el operador de Laplace–Beltrami, que se puede escribir en coordenadas en la variedad en términos de un tensor métrico. Esto recupera exactamente el Laplaciano en la superficie de esferas, cilindros y otros sistemas de coordenadas curvilíneas, pero permite que los modelos se coloquen en superficies y dominios más generales, incluso en aquellos en los que un solo sistema de coordenadas global puede no ser posible

[25].

Si bien el análisis básico de inestabilidad no cambia para los operadores de Laplace–Beltrami, en comparación con el Laplaciano estándar, la curvatura puede influir en la selección del modo, así como en la estructura de los estados modelados. A medida que aumenta el tamaño relativo del dominio (o disminuyen los parámetros de difusión), la estructura de los patrones observados se vuelve similar a la de los grandes dominios euclidianos, debido al tamaño relativo de la curvatura en comparación con la escala de los patrones localizados. Tales efectos de curvatura de tamaño finito pueden desempeñar un papel importante en entornos celulares y de desarrollo donde solo emergen unos pocos elementos localizados [26]. Sin embargo, más allá de predecir cuándo podríamos esperar tales efectos de tamaño finito, al parecer el análisis lineal no ha sido explotado con éxito hasta la fecha para describir cómo la curvatura deforma los patrones localizados.

El análisis de estabilidad lineal de equilibrios homogéneos para sistemas de reacción–difusión en variedades curvas es una extensión leve del análisis en dominios unidimensionales. Sin embargo, muchas de las herramientas para analizar la formación de patrones lejos del estado estacionario homogéneo no tienen extensiones directas a las variedades. Como ejemplo, un valor propio espacial particular en la esfera tendrá, en general, muchas funciones propias distintas, a menudo denominadas degeneradas, debido a su multiplicidad. Esto hace que sea imposible predecir la estructura del patrón a partir del modo de crecimiento más rápido y complica el análisis utilizado para comprender la competencia del modo y la estabilidad del patrón [24]. Más allá de los problemas de degeneración, hay muchas preguntas abiertas sobre la influencia de la curvatura y la geometría múltiple en general en la aparición y estabilidad de patrones alejados del equilibrio, especialmente en el caso de estructuras poco localizadas, como las rayas [24].

En este sentido, este trabajo tiene como uno de sus objetivos obtener soluciones numéricas utilizando aproximaciones mediante el método de los elementos finitos, debido a que tiene un sustento teórico sólido [28]. La generalización de códigos computacionales para resolver problemas de difusión sobre superficies generales requiere tomar en cuenta las características de la geometría y su discretización, así como la proyección de los operadores diferenciales estándar sobre el plano tangente a la superficie [27]. Finalmente, los resultados numéricos nos permitirán desarrollar una buena intuición acerca de las distintas problemáticas relacionadas con la aparición de patrones en dominios curvos: efectos de curvatura, efectos de tamaño finito, selección de patrón por curvatura, entre otros.

## 1.2. Panorama general sobre patrones de Turing

La naturaleza siempre ha sido una fuente inagotable de inspiración y maravilla. Desde tiempos antiguos, hemos observado cómo los seres vivos, ya sean animales, plantas u otros organismos, exhiben patrones sorprendentes en su apariencia y comportamiento. Estos patrones no solo son estéticamente hermosos, sino que también desempeñan un papel crucial en la supervivencia y adaptación de estas especies en sus entornos.



Figura 1.2.1: Patrones en la naturaleza.

Más allá de la belleza que caracteriza los patrones en la naturaleza, una pregunta inquietante desde el punto de vista científico, es conocer el origen y la causa de dichos patrones. Uno de los primeros estudiosos en observar y analizar estos patrones en la naturaleza fue el matemático y biólogo británico Alan Turing, en su ya citado y mencionado escrito publicado en 1952 que lleva por título "The Chemical Basis of Morphogenesis" [1], surgieron como una solución a la pregunta fundamental de cómo los organismos biológicos pueden generar estructuras complejas y formas específicas a partir de procesos químicos simples y uniformes.

Antes de profundizar en las contribuciones revolucionarias de Turing, es importante destacar que otros científicos, aunque en menor medida, tales como Thompson [2] e I. Prigogine [3], entre otros, también aportaron a la comprensión de los patrones en la naturaleza, desde los patrones en las escamas de los peces hasta la simetría en las hojas de las plantas, cada observación ha contribuido a nuestro entendimiento del mundo natural que nos rodea.

Turing propuso que ciertos mecanismos de reacción-difusión podrían explicar cómo se forman los patrones durante el desarrollo de organismos, como la distribución de pigmentos en la piel de los animales o la disposición de células en estructuras como las plumas de las aves. Los sistemas de reacción-difusión, propuestos por Turing, ofrecen un marco teórico para comprender cómo pequeñas fluctuaciones en la concentración de sustancias químicas pueden desencadenar la formación de estructuras ordenadas y complejas. Estos sistemas consisten en un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que modelan la evolución temporal y espacial de las concentraciones de diferentes sustancias químicas.

En los capítulos posteriores, nos sumergiremos en las condiciones matemáticas y los principios fundamentales propuestos por Turing, explorando cómo sus ideas han transformado nuestra comprensión de los patrones en la naturaleza y han abierto nuevas perspectivas en campos como la biología del desarrollo y la ciencia de los sistemas complejos.

### 1.3. ¿Qué es un patrón de Turing?

En el contexto del modelo propuesto por Alan Turing, un patrón de Turing se refiere a la formación de estructuras espaciales regulares y complejas en un sistema dinámico, especialmente en sistemas biológicos, a partir de la interacción entre un activador y un inhibidor.

**Activador.** El activador es una sustancia química que promueve la formación de un patrón específico. Su presencia estimula una reacción autocatalítica<sup>1</sup>, lo que significa que cuanto más activador hay en una región, más activador se produce en esa misma región. Esto conduce a la amplificación local de la concentración del activador. Así mismo, el activador es el encargado de producir al inhibidor mediante autocatálisis.

**Inhibidor.** El inhibidor es una sustancia química que suprime la formación del patrón. A pesar de que su producción depende del activador, este actúa de manera opuesta al activador, limitando su actividad en ciertas regiones y evitando que el patrón se extienda de manera ilimitada.

El mecanismo de formación de patrones de Turing se basa en la interacción entre el activador y el inhibidor, junto con la difusión de estas sustancias en el espacio. En términos químicos, el mecanismo de Turing para la creación de patrones consiste en una competencia entre la *activación* de cierto compuesto  $X$  y la *inhibición* de cierto compuesto  $Y$ . Entonces, para que este mecanismo pueda dar lugar a la generación de patrones espaciales, es necesario que el inhibidor  $Y$  se difunda más rápido que el activador, ya que, de otra manera, el activador  $X$  se difundirá más rápido en el medio provocando así la prevalencia del inhibidor  $Y$  en el medio, sin la generación de algún patrón espacial en el mismo.

Cuando se establecen ciertas condiciones, como tasas de difusión y parámetros específicos del sistema, se produce un fenómeno de autoorganización que lleva a la formación de patrones espaciales regulares.

Este proceso puede resumirse de la siguiente manera:

**Inicialización:** Se inicia con una distribución homogénea de activador e inhibidor en el sistema.

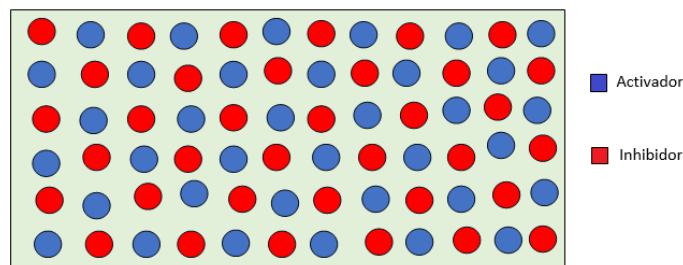


Figura 1.3.1: Distribución inicial.

**Autocatálisis y supresión:** El activador promueve su propia formación y la del

<sup>1</sup>Significa que el activador tiene la capacidad de promover su propia producción.



inhibidor a través de una reacción autocatalítica, mientras que el inhibidor suprime esta actividad en ciertas regiones. El tipo de supresión ejercida del inhibidor sobre el activador depende en gran medida a las reacciones involucradas.

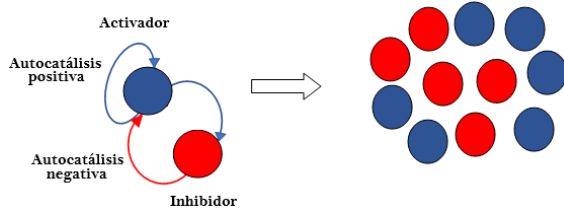


Figura 1.3.2: Reacción autocatalítica.

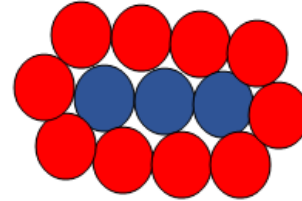


Figura 1.3.3: Supresión del inhibidor sobre el activador.

**Difusión:** Ambas sustancias se difunden en el espacio, permitiendo que sus concentraciones varíen en diferentes partes del sistema.

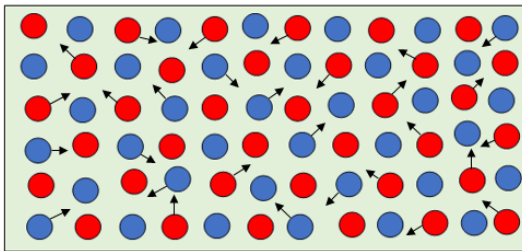


Figura 1.3.4: Difusión.

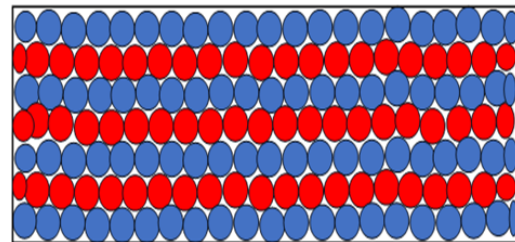


Figura 1.3.5: Reacción.

**Patrón emergente:** Debido a la interacción entre el activador y el inhibidor, junto con la difusión, se producen gradientes de concentración que eventualmente conducen a la formación de patrones regulares, como rayas, manchas o celdas hexagonales.



Figura 1.3.6: Patrón generado.

En resumen, un patrón de Turing surge de la interacción compleja entre un activador y un inhibidor, donde el activador promueve la formación del patrón y el inhibidor lo limita. Esta dinámica, combinada con la difusión, da lugar a la autoorganización y la formación de patrones espaciales regulares en sistemas biológicos y otros sistemas dinámicos.

## 1.4. Objetivos de esta tesis

Al inicio de la parte introductoria se establecieron los objetivos generales del presente trabajo, sin embargo, tales objetivos no fueron expresados de manera específica; así que, enseguida enunciaremos, de manera más clara y precisa los objetivos a cumplir en esta tesis:

- **Capítulo 1.** Dar una descripción general del problema y proporcionar un panorama general sobre los patrones de Turing.
- **Capítulo 2.** Proporcionar los conceptos, definiciones y resultados requeridos, que permitan una comprensión más rápida en capítulos posteriores.
- **Capítulo 3.** Establecer las condiciones matemáticas para la generación de patrones de Turing sobre regiones planas y presentar algunos modelos para los cuales se realicen simulaciones computacionales teniendo como base teórica el Método de Elemento Finito y como software computacional el programa MATLAB.
- **Capítulo 4.** Presentar el operador de Laplace-Beltrami como herramienta que nos permita resolver numéricamente problemas de difusión sobre superficies tridimensionales. Acto seguido, generalizar para dominios superficiales mediante este operador los sistemas reacción-difusión estudiados en el capítulo 3. El objetivo es resolver la ecuación Laplace-Beltrami en su forma *parabólica* (dependiente del tiempo) y cómo un caso particular, resolver dicha ecuación en su forma *elíptica* (no dependiente del tiempo) con su respectivo análisis de convergencia del programa computacional utilizado para resolver dichas ecuaciones.
- **Capítulo 5.** Se procederá a presentar las simulaciones computacionales realizadas para superficies tridimensionales, no sin antes presentar el método de solución numérica a utilizar y proporcionar un estudio detallado de la generación de mallas triangulares tanto para regiones planas como para superficies y analizar su calidad.
- **Capítulo 6.** Conclusiones y perspectivas.

Es importante mencionar que varios de los resultados obtenidos en esta tesis fueron publicados en un artículo titulado "*Numerical Turing Patterns Formation on 3D Surfaces with a Linear Finite Element Method*", el cual fue publicado el 25 de noviembre de 2024 en el Boletín de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones (SMC-CA). En dicho artículo, además, se consideran algunos modelos de reacción-difusión para la generación de patrones de Turing que no se abordan en esta tesis, pero que pueden ser consultados para complementar y ampliar los temas tratados en esta tesis (ver [42]).

# Capítulo 2

## Preliminares

### 2.1. Concepto de difusión

La difusión molecular es un fenómeno fundamental que abarca diversos campos científicos y aspectos de la vida cotidiana. Este proceso, presente en la física, química, biología, medicina y más, implica el movimiento de partículas desde regiones de alta concentración hacia regiones de baja concentración en un medio continuo.

Para lo que nos ocupa, es necesario suponer que siempre se estará trabajando sobre un **medio continuo** o simplemente **medio**, ya que es muy común utilizar esta percepción cuando tratamos de describir fenómenos físicos, en nuestro caso, *difusión molecular*. En consecuencia, cuando estemos trabajando con sistemas reacción-difusión, podremos suponer que nuestro dominio de definición para dichos sistemas, ya sea un dominio bidimensional  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  o un dominio tridimensional  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  (para nuestro caso serán superficies), tales dominios puedan ser representados como la imagen de una función continua  $f_n : \mathbf{U} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$  ( $n = 1, 2$ ) de clase  $\mathcal{C}^1(\mathbf{U})$ .

**Definición 2.1.1** (*Difusión molecular*). La **difusión molecular** o simplemente **difusión** es el transporte neto de partículas en un medio, moviéndose desde zonas de alta concentración hacia zonas de baja concentración hasta alcanzar una distribución homogénea en todo el medio.

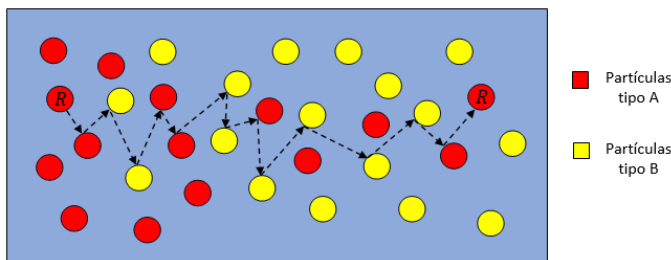


Figura 2.1.1: Difusión molecular.

Este proceso conduce a la mezcla gradual de sustancias y es esencial para entender

fenómenos como la dispersión de olores, la absorción de nutrientes en células biológicas o la difusión de gases en el aire, etcétera. La difusión es provocada por el movimiento molecular aleatorio, el cual está íntimamente relacionado con las *caminatas aleatorias* y el *movimiento browniano* ([4], [5]).

A través de la difusión, las sustancias se entrelazan y se distribuyen de manera uniforme, desempeñando un papel crucial en la dinámica de sistemas naturales y artificiales.

¡La difusión es la clave para comprender cómo el mundo a nuestro alrededor se mezcla y se equilibra constantemente!

## 2.2. Estudio cuantitativo de la difusión

El análisis o estudio cuantitativo de la difusión molecular es fundamental para comprender cómo se propaga el movimiento de partículas en un medio. Este análisis se realiza típicamente mediante la solución de las ecuaciones de difusión utilizando métodos analíticos o numéricos, dependiendo de la complejidad del problema y las condiciones de contorno específicas.

### 2.2.1. Flujo y gradiente de concentración

Para abordar el fenómeno de difusión es importante tener en cuenta el concepto de gradiente de concentración, el cual se da enseguida.

**Definición 2.2.1** (*Gradiente de concentración*). El **gradiente de concentración** en un medio se refiere a la variación espacial de la concentración de una sustancia específica en relación a la posición en el medio. Indica cómo cambia la concentración a medida que nos desplazamos en una dirección específica en el medio.

Para entender matemáticamente este concepto, consideremos la figura 2.2.1. Supongamos que  $C(x, t)$  representa la concentración para el caso unidimensional de una sustancia en un medio para cierta posición  $x$  al instante  $t$ .

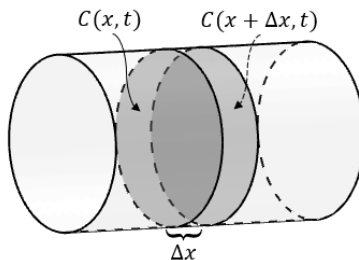


Figura 2.2.1: Gradiente de concentración.

En este caso, la diferencia de concentración está dada por  $\Delta C(x) = C(x + \Delta x, t) - C(x, t)$ . Luego, al dividir entre  $\Delta x$  tal diferencia, obtenemos la concentración media  $C_m(x, t)$ ,

esto es

$$C_m(x, t) = \frac{C(x + \Delta x, t) - C(x, t)}{\Delta x}$$

y al hacer tender a cero  $\Delta x$ , obtenemos el gradiente de concentración  $\nabla C(x)$

$$\nabla C(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} C_m(x, t) = \frac{\partial C}{\partial x}(x, t).$$

Este gradiente de concentración juega un papel central en la determinación del flujo neto de partículas en un sistema, ya que las partículas tienden a moverse de regiones de alta concentración hacia regiones de baja concentración en busca de equilibrio.

**Definición 2.2.2.** El **flujo** de un fluido denotado por  $\mathbf{J}$  se define como la cantidad de masa del fluido que atraviesa un elemento de superficie (perpendicular a  $\mathbf{J}$ ) por unidad de área y tiempo.

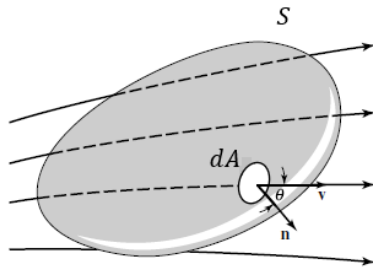


Figura 2.2.2: Flujo de un fluido que atraviesa una superficie S.

Si el fluido tiene densidad volumétrica  $\rho$  (masa por unidad de volumen), entonces al considerar el campo de velocidades  $\mathbf{v}$  del flujo se tiene que

$$\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$$

Las magnitudes físicas que componen el flujo  $\mathbf{J}$  son:

$$\frac{\text{masa}}{(\text{longitud})^2 \times \text{tiempo}}.$$

De manera similar podemos pensar el flujo de una sustancia sobre una región, debido a gradientes de concentración de la misma. Generalmente se introduce este concepto mediante las llamadas Leyes de Fick, como se hace a continuación.

## 2.2.2. Leyes de Fick

Las leyes de Fick son fundamentales para comprender y describir fenómenos relacionados con difusión en diversos contextos, desde la biología hasta la ingeniería. Estas leyes establecen relaciones cuantitativas entre el flujo de una sustancia a través de un medio y los gradientes de concentración. Enseguida mostramos dichas leyes.

**Primera Ley de Fick.** Esta ley establece la relación entre el flujo difusivo y el gradiente de concentración. Establece que el flujo va de regiones de alta concentración a regiones de baja concentración. La magnitud del flujo es proporcional al gradiente de concentración, es decir

$$\mathbf{J} = -D\nabla C \tag{2.2.1}$$

donde

- $\mathbf{J}$  es el flujo difusivo, y se mide en unidades de  $\frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}}$ .
- $D$  es el *coeficiente de difusión* y se mide en  $\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ .
- $C$  es la concentración medida en  $\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$ .

El coeficiente de difusión  $D$  es proporcional al promedio del cuadrado de la velocidad con que las partículas se difunden, de acuerdo a la relación de Stokes-Einstein ([5], pág. 32).

**Segunda ley de Fick.** La segunda ley de Fick nos permite saber cómo la concentración de una sustancia varía respecto al tiempo. La expresión matemática para esta ley es la siguiente

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C). \quad (2.2.2)$$

El coeficiente de difusión puede variar respecto a la posición, es decir,  $D = D(\mathbf{x})$  y cuando  $D$  es constante simplemente expresamos

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (2.2.3)$$

donde  $\nabla^2$  es el *operador Laplaciano*.

Sin las leyes de Fick, sería difícil o incluso imposible predecir cómo se distribuyen y se mueven las sustancias en sistemas donde la difusión es un factor clave. Por lo tanto, estas leyes son esenciales para analizar y resolver problemas relacionados con la difusión de manera precisa y eficiente.

### 2.2.3. Sistemas reacción-difusión

Como se ha mencionado en el capítulo anterior, Turing propuso que ciertos mecanismos de reacción-difusión podrían explicar cómo se forman los patrones durante el desarrollo de organismos, de manera que, es necesario introducir los denominados sistemas reacción-difusión. Tales sistemas nos van a permitir modelar los fenómenos de difusión que nos interesan. Por tal motivo es importante conocer su estructura y los términos que las componen.

Un **sistema reacción-difusión** es un modelo matemático que describe la dinámica en un medio entre dos o más sustancias, cuya concentración varía en el tiempo y el espacio, bajo la influencia de dos términos principales: **reacción**, en el cual la concentración incrementa o disminuye por la interacción local en el medio, y la **difusión** que hace que las sustancias se dispersen en el medio.

La descripción matemática de un sistema reacción-difusión es la siguiente:

Supongamos que tenemos  $m$  especies interactuando en un medio  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 1, 2$ ). Supongamos que  $C_i(\mathbf{x}, t)$  con  $i = 1, 2, \dots, m$ , representa la concentración de la  $i$ -ésima

especie en la posición  $\mathbf{x} \in \Gamma$  al tiempo  $t > 0$ . Si  $D_i$  representa el coeficiente de difusión de la  $i$ -ésima especie y además suponemos la presencia de fuentes en el sistema, es decir, una función  $\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{C})$  que describe las interacciones entre la  $m$  especies, entonces el sistema reacción-difusión se expresa de la siguiente manera

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbb{D} \nabla \mathbf{C}) + \mathbf{R}(\mathbf{C}). \quad (2.2.4)$$

Para el caso que se tengan dos sustancias mezclándose en un medio contenido en el plano  $\mathbb{R}^2$  con concentraciones respectivas  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  y  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  y términos reactivos  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  y  $g(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  correspondientemente, la ecuación (2.2.4) se expresa como

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mathbb{D}_u \nabla \mathbf{u}) + f(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mathbb{D}_v \nabla \mathbf{v}) + g(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \end{aligned}$$

donde  $\mathbb{D}_u$  y  $\mathbb{D}_v$  representan los coeficientes de difusión de las sustancias  $\mathbf{u}$  y  $\mathbf{v}$ , respectivamente. Si suponemos a  $\mathbb{D}_u$  y  $\mathbb{D}_v$  constantes, lo anterior puede ser reescrito matricialmente de la siguiente manera

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \mathbb{D} \nabla^2 \mathbf{C} + \mathbf{R}(\mathbf{C}),$$

con  $\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \end{pmatrix}$ ,  $\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \mathbb{D}_u & 0 \\ 0 & \mathbb{D}_v \end{pmatrix}$ ,  $\nabla^2 \mathbf{C} = \begin{pmatrix} \nabla^2 \mathbf{u} \\ \nabla^2 \mathbf{v} \end{pmatrix}$  y  $\mathbf{R}(\mathbf{C}) = \begin{pmatrix} f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}$ . A la matriz  $\mathbb{D}$  se le denomina **matriz de difusividades**, la cual es una matriz diagonal. Cuando esta matriz de difusividades  $\mathbb{D}$  es diagonal, el tipo de difusión que ocurre en el sistema se conoce como **difusión isotrópica**<sup>1</sup>. Sí, en cambio, los coeficientes de  $\mathbb{D}$  fuera de la diagonal no son cero, se estaría hablando de **difusión cruzada** o **difusión anisotrópica**, donde los coeficientes de difusión dependen de las interacciones entre las diferentes especies involucradas en el medio. En este trabajo trabajaremos únicamente con difusión isotrópica. Si se está interesado en la difusión cruzada o anisotrópica, pueden consultarse [9], [10].

Los sistemas de principal interés serán aquellos que tengan condiciones Neumann homogéneas y condiciones iniciales. Un sistema con esas características se expresa como sigue

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mathbb{D}_u \nabla \mathbf{u}) + f(\mathbf{u}, \mathbf{v}), & \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= \nabla \cdot (\mathbb{D}_v \nabla \mathbf{v}) + g(\mathbf{u}, \mathbf{v}), & \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} &= (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, & \forall \mathbf{x} \in \partial \Omega \times (0, \infty), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) &= \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), & \forall \mathbf{x} \in \Omega, \end{aligned}$$

con  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 2, 3$ ). Las funciones  $\mathbf{u}, \mathbf{v} : \Omega \mapsto \mathbb{R}$  son funciones escalares, y las funciones de reacción también lo son, pero definidas sobre el conjunto  $\mathbf{u}(\Omega) \times \mathbf{v}(\Omega)$  donde  $\mathbf{u}(\Omega)$  y  $\mathbf{v}(\Omega)$  son las imágenes respectivas de  $\mathbf{u}$  y  $\mathbf{v}$ .

---

<sup>1</sup>Los coeficientes de difusión de las sustancias  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  y  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  tienen sus propios coeficientes de difusión independientes entre sí, es decir, no existe interacción difusiva entre las diferentes sustancias involucradas en el medio.

Para el caso tridimensional ( $n = 3$ ) trabajaremos con dos tipos de superficies : *cerradas* y *no cerradas*. La definición que adoptaremos es la siguiente :

**Definición 2.2.3.** Sea  $\emptyset \neq \Sigma \subset \mathbb{R}^3$ . Diremos que  $\Sigma$  es una **superficie cerrada** si  $\Sigma$  es una superficie compacta y sin frontera, esto es,  $\partial\Sigma = \emptyset$ . En caso contrario, es decir, cuando  $\partial\Sigma \neq \emptyset$ , diremos que  $\Sigma$  es una **superficie no cerrada**.

Las siguientes figuras ilustran la definición anterior para ambos casos:

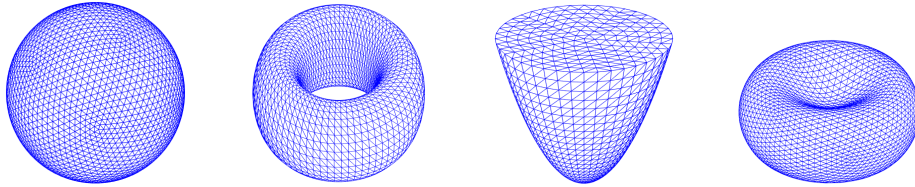


Figura 2.2.3: Superficies cerradas.

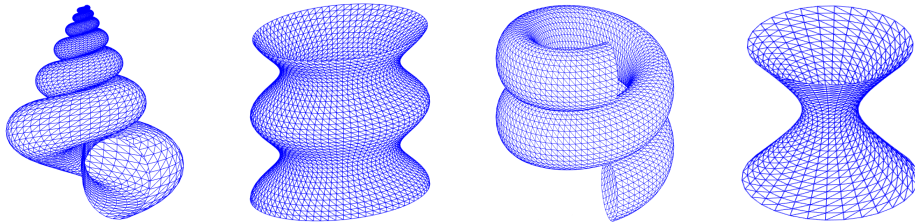


Figura 2.2.4: Superficies no cerradas.



# Capítulo 3

## Mecanismos para la creación de patrones

En este capítulo se establecerán las condiciones matemáticas que deben satisfacer ciertos sistemas de reacción-difusión que garanticen la formación de patrones espaciales a partir de sus soluciones temporales. Es importante mencionar que gran parte de lo desarrollado en este capítulo está basado en [6], [7], [8] y [12], con ciertas aportaciones de nuestra parte.

### 3.1. Presentación del modelo

Como se estableció en la sección (1.3) el modelo matemático que propuso Alan Turing para describir patrones en la naturaleza fue un sistema reacción-difusión. La idea principal de Turing radica en lo siguiente :

*"Un sistema en estado estable puede guiarse a un estado inestable a través de la difusión y, en ese estado, aparecerán los patrones".*

Enseguida mostramos el sistema reacción-difusión que nos permitirá establecer las condiciones matemáticas para la generación de patrones espaciales, mismas que serán utilizadas en capítulos posteriores para superficies tridimensionales utilizando el *Operador de Laplace-Beltrami*.

Considérese el siguiente sistema reacción-difusión bidimensional, con condiciones de frontera tipo Neumann homogéneas y condiciones iniciales :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_{\mathbf{u}} \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma f(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \quad (3.1.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_{\mathbf{v}} \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma g(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \quad (3.1.2)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega \times (0, \infty), \quad (3.1.3)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.1.4)$$

donde  $\gamma > 0$  es conocido como **factor de escala** y más adelante se verá que este factor determinará el tamaño y la complejidad de los patrones generados por las condiciones de Turing. Las funciones  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  representan las concentraciones de dos sustancias mezclándose en un medio  $\Omega$  al tiempo  $t$  cuyas concentraciones iniciales están dadas por (3.1.4), respectivamente. Más precisamente, la función  $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$  jugará el papel del **activador** y  $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$  el del **inhibidor**. Los coeficientes de difusión están dados por  $D_u, D_v > 0$  y  $\hat{\mathbf{n}}$  es el vector normal unitario a la frontera de  $\Omega$ , representada por  $\partial\Omega$ .

Siguiendo la idea planteada al inicio, el mecanismo encargado de la generación de patrones en un sistema como en (3.1.1-3.1.4) se debe principalmente a la **inestabilidad de Turing**. La inestabilidad de Turing tiene lugar cuando en ausencia de difusión (i.e.,  $D_u = D_v = 0$ ) se tiene un punto de equilibrio estable  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  tal que al incorporar nuevamente los términos difusivos en (3.1.1-3.1.2) el punto de equilibrio  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  se hace inestable.

El análisis matemático de la inestabilidad de Turing nos permite predecir el tipo y la forma de los patrones que surgen de la solución temporal de (3.1.1-3.1.2). La razón por la que se asumen condiciones de flujo nulo (3.1.3) en la frontera, es para asegurar que los patrones formados se deban únicamente a la auto-organización en  $\Omega$  y no a flujos externos.

## 3.2. Estabilidad temporal en ausencia de difusión

El primer paso para determinar el valor de los parámetros que dan origen a la inestabilidad de Turing en (3.1.1-3.1.2) es estudiar en ausencia de difusión dicho sistema. En este caso tenemos

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \gamma \mathbf{f}(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (3.2.5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \gamma \mathbf{g}(\mathbf{u}, \mathbf{v}). \quad (3.2.6)$$

Supongamos que existe un punto de equilibrio estable  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$ , entonces se satisface

$$\mathbf{f}(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) = \mathbf{g}(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) = \mathbf{0} \quad (3.2.7)$$

Denotamos  $\mathbf{w} = (\mathbf{u}, \mathbf{v})^\top$  y  $\mathbf{R}(\mathbf{w}) = (\mathbf{f}(\mathbf{w}), \mathbf{g}(\mathbf{w}))^\top$ . Al linealizar (3.2.5-3.2.6), utilizando la expansión de Taylor de primer orden alrededor de  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^\top$ , se tiene que

$$\dot{\mathbf{w}} = \mathbf{R}(\mathbf{w}) \approx \mathbf{R}(\mathbf{w}^*) + \gamma \mathbb{J}(\mathbf{w} - \mathbf{w}^*), \quad \text{donde} \quad \mathbb{J} = \begin{pmatrix} f_u(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) & f_v(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \\ g_u(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) & g_v(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \end{pmatrix},$$

y al hacer  $\mathbf{z} = \mathbf{w} - \mathbf{w}^*$  obtenemos

$$\dot{\mathbf{z}} = \gamma \mathbb{J} \mathbf{z}. \quad (3.2.8)$$

Es muy común proponer soluciones de la forma  $\mathbf{z} = \mathbf{K}e^{\lambda t}$ , en donde  $\lambda$  es un valor propio de la matriz  $\mathbb{J}$  y  $\mathbf{K}$  es el vector propio asociado a  $\lambda$ . Sustituyendo esta expresión para  $\mathbf{z}$  en (3.2.8) se tiene

$$(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}) \mathbf{K}e^{\lambda t} = \mathbf{0}. \quad (3.2.9)$$

Puesto que buscamos soluciones no triviales, de (3.2.9) se tiene que  $\lambda$  debe ser raíz del polinomio característico

$$p(\lambda) = \det(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}),$$

es decir,

$$\det(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}) = 0. \quad (3.2.10)$$

Como

$$\det(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}) = \det \begin{pmatrix} \gamma f_{\mathbf{u}} - \lambda & f_{\mathbf{v}} \\ g_{\mathbf{u}} & \gamma g_{\mathbf{v}} - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \lambda \gamma \operatorname{Tr}(\mathbb{J}) + \gamma^2 \det(\mathbb{J}),$$

entonces,

$$\lambda = \frac{\gamma}{2} \left[ \operatorname{Tr}(\mathbb{J}) \pm \sqrt{[\operatorname{Tr}(\mathbb{J})]^2 - 4 \det(\mathbb{J})} \right]. \quad (3.2.11)$$

Finalmente, como queremos que en el sistema linealizado (3.2.5-3.2.6) el punto  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  sea estable, entonces por el teorema de Hartman-Grobman ([15], pág. 120), ([16], pág. 155) debemos suponer que  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  es un *punto de equilibrio hiperbólico*, es decir,  $\operatorname{Re}(\lambda) \neq 0$  y además para garantizar la estabilidad se debe cumplir que

$$\operatorname{Tr}(\mathbb{J}) < 0, \quad (3.2.12)$$

$$\det(\mathbb{J}) > 0. \quad (3.2.13)$$

Hemos así establecido las primeras condiciones para la generación de patrones.

### 3.3. Inestabilidad espacial en presencia de difusión

El segundo paso para establecer las condiciones matemáticas que nos garanticen la aparición de patrones generados por la solución del sistema (3.1.1-3.1.2) es suponer que en tal sistema  $D_{\mathbf{u}}, D_{\mathbf{v}} > 0$ , es decir, hay presencia de difusión. En este caso, el estado de equilibrio  $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  dependerá de la difusión y estará dado por la solución del sistema

$$D_{\mathbf{u}} \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0, \quad (3.3.14)$$

$$D_{\mathbf{v}} \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0. \quad (3.3.15)$$

Es decir,  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  debe satisfacer  $\nabla^2 \mathbf{u}^* = \nabla^2 \mathbf{v}^* = 0$ . De esta manera la difusión no afecta a la existencia de puntos o estados de equilibrio, pero que sí afecta a su estabilidad. Por lo tanto, buscamos un punto de equilibrio  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)$  que sea estable en (3.2.5-3.2.6), pero al activar la difusión, cambie de estable a inestable por medio de pequeñas perturbaciones espaciales no uniformes.

Nuevamente, linealizando el sistema en el estado de equilibrio  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$ , y usando la notación introducida previamente, se tiene

$$\dot{\mathbf{z}} = \gamma \mathbb{J} \mathbf{z} + \mathbb{D} \nabla^2 \mathbf{z}, \quad (3.3.16)$$

donde  $\nabla^2 \mathbf{z} = \nabla^2(\mathbf{w} - \mathbf{w}^*)$  y  $\mathbb{D}$  la matriz diagonal con las difusividades  $D_u$  y  $D_v$ . Para resolver (3.3.16) proponemos una solución de la forma (separación de variables):

$$\mathbf{z}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{Z}(\mathbf{x}) \mathbb{T}(t), \quad (3.3.17)$$

donde  $\mathbf{Z}(\mathbf{x}) = (Z_1(\mathbf{x}), Z_2(\mathbf{x}))^\top$  es una función vectorial en  $\mathbb{R}^2$  y  $\mathbb{T}(t)$  es una función real. Sustituyendo (3.3.17) en (3.3.16) se obtiene

$$\mathbf{Z}(\mathbf{x}) \dot{\mathbb{T}}(t) = \gamma \mathbb{J} \mathbf{Z}(\mathbf{x}) \mathbb{T}(t) + \mathbb{D} \mathbb{T}(t) \nabla^2 \mathbf{Z}. \quad (3.3.18)$$

Equivalentemente,

$$\begin{pmatrix} Z_1 \dot{\mathbb{T}} \\ Z_2 \dot{\mathbb{T}} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_1 \mathbb{T} \\ Z_2 \mathbb{T} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{T} \nabla^2 Z_1 \\ \mathbb{T} \nabla^2 Z_2 \end{pmatrix},$$

es decir

$$\begin{aligned} Z_1 \dot{\mathbb{T}} &= \gamma (f_u Z_1 + f_v Z_2) \mathbb{T} + D_u \mathbb{T} \nabla^2 Z_1, \\ Z_2 \dot{\mathbb{T}} &= \gamma (g_u Z_1 + g_v Z_2) \mathbb{T} + D_v \mathbb{T} \nabla^2 Z_2, \end{aligned}$$

y suponiendo  $Z_1 \neq 0$ ,  $Z_2 \neq 0$ , se sigue que

$$\frac{\dot{\mathbb{T}}}{\mathbb{T}} = \frac{1}{Z_1} \gamma (f_u Z_1 + f_v Z_2) + D_u \frac{\nabla^2 Z_1}{Z_1}, \quad (3.3.19)$$

$$\frac{\dot{\mathbb{T}}}{\mathbb{T}} = \frac{1}{Z_2} \gamma (g_u Z_1 + g_v Z_2) + D_v \frac{\nabla^2 Z_2}{Z_2}. \quad (3.3.20)$$

Las ecuaciones (3.3.19-3.3.20) se satisfacen si  $\frac{\dot{\mathbb{T}}}{\mathbb{T}} = \lambda$  para cierta constante  $\lambda$ . Cabe mencionar que esta constante  $\lambda$  no es la misma  $\lambda$  de (3.2.9-3.2.11), pero juega un papel equivalente, como se verá más adelante, en (3.3.35). De esta manera obtenemos

$$\dot{\mathbb{T}} = \lambda \mathbb{T}, \quad (3.3.21)$$

$$\lambda Z_1 = \gamma (f_u Z_1 + f_v Z_2) + D_u \nabla^2 Z_1, \quad (3.3.22)$$

$$\lambda Z_2 = \gamma (g_u Z_1 + g_v Z_2) + D_v \nabla^2 Z_2. \quad (3.3.23)$$

De (3.3.21) se tiene que

$$\mathbb{T}(t) = C e^{\lambda t} \quad (3.3.24)$$

y reescribiendo en forma vectorial (3.3.22-3.3.23) se obtiene

$$\mathbb{D} \nabla^2 \mathbf{Z} + \gamma \mathbb{J} \mathbf{Z} = \lambda \mathbf{Z}. \quad (3.3.25)$$

Como  $\mathbb{D}$  es una matriz definida positiva y, por tanto, invertible, la ecuación (3.3.25) equivale a

$$\nabla^2 \mathbf{Z} + \mathbb{D}^{-1}(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}) \mathbf{Z} = \mathbf{0}. \quad (3.3.26)$$

Para resolver esta última ecuación hay que considerar los valores propios <sup>1</sup>  $k^2$  de la matriz  $\mathbb{A} = \mathbb{D}^{-1}(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I})$ , es decir, los valores  $k^2$  tales que  $\mathbb{A}\mathbf{Z} = k^2\mathbf{Z}$ . Por lo tanto, se tiene la ecuación

$$\nabla^2\mathbf{Z} + k^2\mathbf{Z} = \mathbf{0}, \quad (3.3.27)$$

denominada *ecuación de Helmholtz* con condiciones de flujo nulo  $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla)\mathbf{Z} = \mathbf{0}$  en la frontera. Es bien conocido que las soluciones de esta ecuación son oscilatorias con respecto a las variables espaciales y dependen únicamente del dominio  $\Omega$  y de las condiciones de frontera. Además, debemos notar que el valor propio  $k^2$  es también valor propio asociado al operador Laplaciano negativo  $-\nabla^2$ . Adicionalmente, el valor de  $k$  representa la frecuencia de la oscilación y se denomina el modo de onda de la función propia asociada. Las frecuencias  $k$  generalmente toman valores discretos y se pueden enumerar.

Sea  $\mathbf{Z}_k(\mathbf{x})$  la función propia asociada al valor propio  $k^2$ . Cada función  $\mathbf{Z}_k$  satisface la ecuación (3.3.27), es decir

$$\nabla^2\mathbf{Z}_k + k^2\mathbf{Z}_k = \mathbf{0} \quad (3.3.28)$$

y además satisfacen las condiciones de flujo nulo en la frontera  $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla)\mathbf{Z}_k = \mathbf{0}$ . De acuerdo a (3.3.28) y suponiendo que hemos encontrado el conjunto de los posibles valores para  $k$ , proponemos como solución para (3.3.16) a la función

$$\mathbf{z}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}} e^{\lambda_{\mathbf{k}} t} \mathbf{Z}_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}), \quad (3.3.29)$$

donde los  $C_{\mathbf{k}}$  son los coeficientes de Fourier,  $\lambda$  es el valor propio determinado en la solución temporal (3.3.24) y determina el crecimiento temporal (a diferencia de  $k^2$ , el cual está asociado a la parte espacial). El símbolo  $\lambda_{\mathbf{k}}$  en (3.3.29) hace énfasis en que el valor  $\lambda$  depende del valor de  $k$ . Al sustituir (3.3.29) en el sistema linealizado (3.3.16) se obtiene

$$\mathbb{D}\nabla^2\mathbf{Z}_k + \gamma \mathbb{J}\mathbf{Z}_k = \lambda_k \mathbf{Z}_k. \quad (3.3.30)$$

Utilizando (3.3.28), se obtiene

$$(\lambda_k \mathbb{I} - \gamma \mathbb{J} + k^2 \mathbb{D})\mathbf{Z}_k = \mathbf{0}, \quad (3.3.31)$$

y puesto que estamos buscando soluciones no triviales, utilizamos el polinomio característico

$$p_k(\lambda_k) = \det(\lambda_k \mathbb{I} - \gamma \mathbb{J} + k^2 \mathbb{D}) = 0, \quad (3.3.32)$$

es decir

$$\lambda_k^2 + (k^2 \text{Tr}(\mathbb{D}) - \gamma \text{Tr}(\mathbb{J})) \lambda_k + h(k^2) = 0, \quad (3.3.33)$$

donde  $h(k^2)$  es la siguiente función cuadrática en la variable  $k^2$ :

$$h(k^2) = \det(\mathbb{D})k^4 - \gamma(D_v f_u + D_u g_v)k^2 + \gamma^2 \det(\mathbb{J}). \quad (3.3.34)$$

Las raíces de  $p_k(\lambda_k)$  están dadas por

$$\lambda_k = \frac{[\gamma \text{Tr}(\mathbb{J}) - k^2 \text{Tr}(\mathbb{D})] \pm \sqrt{[k^2 \text{Tr}(\mathbb{D}) - \gamma \text{Tr}(\mathbb{J})]^2 - 4h(k^2)}}{2}. \quad (3.3.35)$$

---

<sup>1</sup>El exponente al cuadrado es por conveniencia algebraica al momento de realizar cálculos.

**Nota.** Obsérvese que para el caso  $k = 0$  y  $\text{Re}[\lambda_k] < 0$  recuperamos las condiciones (3.2.12-3.2.13) obtenidas para el caso en donde no hay difusión en el sistema.

Por otro lado, para que el estado de equilibrio  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^\top$  sea inestable en presencia de difusión se requiere que  $\text{Re}[\lambda_k] > 0$  para al menos un  $k^2 > 0$ . Sabemos que  $\text{Tr}(\mathbb{J}) < 0$  por (3.2.12) y, en consecuencia,  $\gamma \text{Tr}(\mathbb{J}) - k^2 \text{Tr}(\mathbb{D}) < 0$ . Por lo tanto la única manera que  $\text{Re}[\lambda_k] > 0$  en (3.3.35) es que  $h(k^2) < 0$  para al menos un valor de  $k^2$ . Observando la función cuadrática (3.3.34) vemos que es una función convexa de  $k^2$  que se puede representar mediante una parábola, como se ilustra en la figura 3.3.1. Por lo tanto para que tome valores negativos basta con que  $h(k_{\min}^2)$  sea negativo. El mínimo  $k_{\min}^2$  se obtiene igualando a cero la derivada de  $h$  con respecto a  $k^2$ , y es igual a

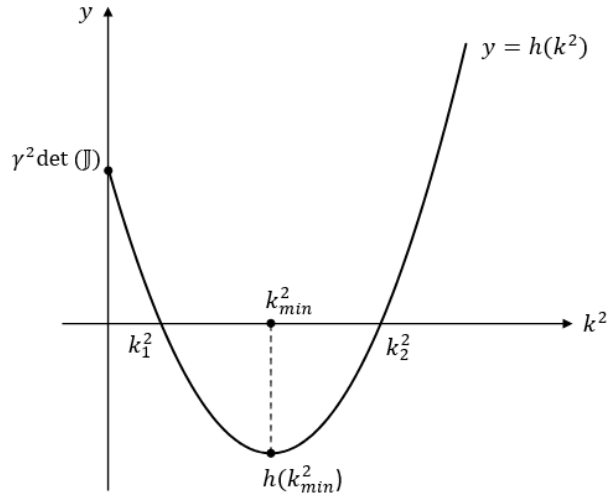


Figura 3.3.1:  $h(k^2) = \det(\mathbb{D})k^4 - \gamma(D_v f_u + D_u g_v)k^2 + \gamma^2 \det(\mathbb{J})$ .

$$k_{\min}^2 = \gamma \frac{D_v f_u + D_u g_v}{2 \det(\mathbb{D})} > 0. \quad (3.3.36)$$

El valor de  $h$  en este modo  $k_{\min}^2$  es

$$h_{\min} := h(k_{\min}^2) = \gamma^2 \left[ \det(\mathbb{J}) - \frac{(D_v f_u + D_u g_v)^2}{4 \det(\mathbb{D})} \right] < 0, \quad (3.3.37)$$

de modo que las dos raíces de  $h(k^2)$  están dadas por

$$k_1^2, k_2^2 = \frac{\gamma}{2 \det(\mathbb{D})} \left[ (D_v f_u + D_u g_v) \mp \sqrt{(D_v f_u + D_u g_v)^2 - 4 \det(\mathbb{D}) \det(\mathbb{J})} \right], \quad (3.3.38)$$

en donde el discriminante (dentro del radical) es positivo por (3.3.37). Por lo tanto, los modos que desestabilizan el punto de equilibrio  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^\top$  por difusión, son aquellos que se encuentran dentro del intervalo  $(k_1^2, k_2^2)$ .

Cuando se trabaja con ecuaciones adimensionalizadas se acostumbra a utilizar la razón de difusividades:

$$d := \frac{D_v}{D_u} > 0, \quad (3.3.39)$$

obteniendo las condiciones equivalentes a (3.3.36), (3.3.37) y (3.3.38) siguientes:

$$k_{\min}^2 = \gamma \frac{d f_u + g_v}{2 D_v} > 0, \quad (3.3.40)$$

$$h_{\min} = \gamma^2 \left[ \det(\mathbb{J}) - \frac{(d f_u + g_v)^2}{4 d} \right] < 0, \quad (3.3.41)$$

$$k_1^2, k_2^2 = \frac{\gamma}{2 D_v} \left[ (d f_u + g_v) \mp \sqrt{(d f_u + g_v)^2 - 4 d \det(\mathbb{J})} \right]. \quad (3.3.42)$$

**Nota.** Es claro que si el discriminante en (3.3.38) o en (3.3.42) es igual cero, entonces

$$k_1^2 = k_2^2 = k_c^2, \quad (3.3.43)$$

donde

$$k_c^2 := \gamma \frac{D_v f_u + D_u g_v}{2 \det(\mathbb{D})} = \gamma \frac{d f_u + g_v}{2 D_v}. \quad (3.3.44)$$

El valor de  $d$  para el cual esto ocurre se denomina **coeficiente de difusión crítico** y se denota por  $d_c$ . Al modo asociado  $k_c$  se le denomina el **modo crítico**. Por lo tanto, el valor límite de  $k^2$  para el cual  $h(k^2) < 0$  se obtiene en  $k_c$ .

En conclusión, las ecuaciones (3.2.12-3.2.13) y (3.3.40-3.3.41) proporcionan las condiciones que garantizan la generación de patrones espaciales, denominadas **condiciones de Turing**. Estas condiciones se resumen en:

$$f_u + g_v < 0, \quad (3.3.45)$$

$$f_u g_v - f_v g_u > 0, \quad (3.3.46)$$

$$d f_u + g_v > 0, \quad (3.3.47)$$

$$(d f_u + g_v)^2 - 4 d \det(\mathbb{J}) > 0, \quad (3.3.48)$$

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2. \quad (3.3.49)$$

Finalmente, por medio de éstas ecuaciones podemos adicionar unas pequeñas restricciones respecto a  $d$ ,  $f_u$  y  $g_v$ :

1. El coeficiente  $d = D_v/D_u$  satisface  $d > 1$  y además los coeficientes de la matriz  $\mathbb{J}$  satisfacen

$$f_u > 0, \quad g_v < 0 \text{ y } f_v g_u < 0. \quad (3.3.50)$$

2. El valor de  $d_c$  se obtiene a partir de la expresión

$$d_c = \frac{(2 \det(\mathbb{J}) - f_u g_v) + \sqrt{(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2}}{f_u^2} \quad (3.3.51)$$

3. Si  $d = d_c$  entonces no habrá generación de patrones espaciales, pues en este caso se tiene que  $h(k^2) \geq 0$  para todo valor de  $k$ . Lo mismo ocurre cuando  $d < d_c$ .
4. Si  $d > d_c$  entonces habrá generación de patrones espaciales ya que esto implica  $h(k^2) < 0$  y los modos de onda de interés serán aquellos que satisfagan (3.3.49).

Las primeras dos propiedades no son tan evidentes como las dos últimas. Pero se pueden demostrar en forma sencilla con algunos cálculos algebraicos como sigue:

**Demostración de la propiedad 1.** De (3.3.45) y (3.3.47) se obtiene  $(d - 1)f_u > 0$ , y entonces hay dos posibilidades, ambos factores son positivos o ambos son negativos. El segundo caso no es posible, ya que (3.3.47) implicaría que  $f_u + g_v > d f_u + g_v > 0$ , lo cual contradice (3.3.45). Por otro lado, si ambos factores son positivos, de (3.3.45) se tiene que  $g_v < -f_u < 0$ . Esto es,  $f_u > 0$  y  $g_v < 0$ . Finalmente, dado que  $f_u g_v < 0$  por lo acabado de demostrar se sigue de (3.3.46) que  $f_v g_u < f_u g_v < 0$ .

**Demostración de la propiedad 2.** El valor de  $d_c$  se da cuando  $h_{\min} = 0$ , así de (3.3.41) se tiene que  $d_c$  debe satisfacer la ecuación

$$4d_c \det(\mathbb{J}) - (d_c f_u + g_v)^2 = 0,$$

es decir,

$$f_u^2 d_c^2 + 2(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))d_c + g_v^2 = 0.$$

De donde se obtienen las dos raíces  $d_{c_1}$ ,  $d_{c_2}$ :

$$d_{c_1}, d_{c_2} = \frac{(2 \det(\mathbb{J}) - f_u g_v) \mp \sqrt{(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2}}{f_u^2} \quad (3.3.52)$$

Primeramente de (3.3.46) hay que notar que  $-2 \det(\mathbb{J}) < 0$  de donde  $f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}) < f_u g_v < 0$ , por lo cual  $(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 > f_u^2 g_v^2 > 0$  y así,  $(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2 > 0$ .

Ahora, de acuerdo a la propiedad 1 anterior el valor crítico  $d_c$  debe satisfacer que  $d_c > 1$  y además que cumpla las condiciones de Turing anteriormente establecidas. Siguiendo esto, veremos que el valor  $d_{c_1}$  no satisface la condición (3.3.47). Suponiendo que  $d_{c_1}$  satisface dicha relación, se tiene que  $d_{c_1} > -g_v/f_u$  y así

$$\begin{aligned} d_{c_1} > -\frac{g_v}{f_u} &\implies \frac{1}{f_u^2} \left[ (2 \det(\mathbb{J}) - f_u g_v) - \sqrt{(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2} \right] > -\frac{g_v}{f_u} \\ &\implies (f_u g_v - 2 f_v g_u) - \sqrt{(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2} > -f_u g_v \\ &\implies 2(f_u g_v - f_v g_u) > \sqrt{(f_u g_v - 2 \det(\mathbb{J}))^2 - f_u^2 g_v^2} \\ &\implies 4(f_u g_v - f_v g_u)^2 > (2 f_v g_u - f_u g_v)^2 - f_u^2 g_v^2 \\ &\implies f_u^2 g_v^2 > f_u f_v g_u g_v \\ &\implies f_u g_v < f_v g_u \quad (\text{porque } f_u g_v < 0). \end{aligned}$$

Esto es,  $f_u g_v - f_v g_u < 0$ , lo cual no es posible ya que esto contradice (3.3.46). Por lo tanto, la única opción posible para  $d_c$  es  $d_{c_2}$ , es decir,  $d_c = d_{c_2}$ .

Como complemento a las propiedades (1-4) descritas anteriormente, y la ecuación (3.3.43) para calcular el modo de onda crítico  $k_c^2$  se tiene la siguiente gráfica para  $h(k^2)$ :



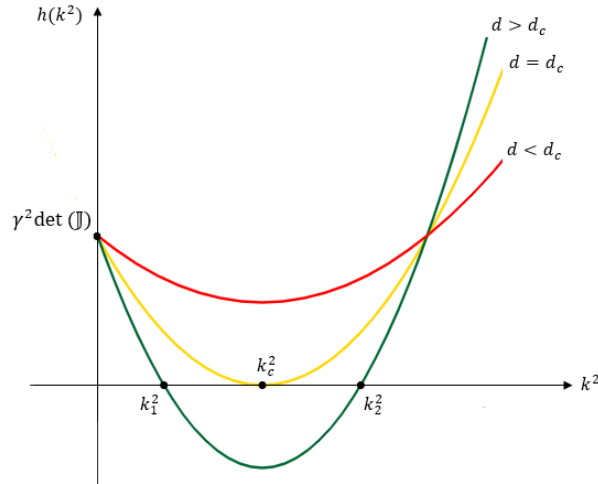


Figura 3.3.2: Gráfica de  $h(k^2)$ . Condiciones para la generación de patrones espaciales por medio de  $d_c$  y  $k_c^2$ .

Es importante mencionar que la propiedad 1 de que  $d > 1$ , es la manera de expresar matemáticamente lo mencionado en la sección (1.3) respecto a la generación de patrones espaciales, ya que si  $d < 1$  lo cual no es posible como ya se vio anteriormente, implica que el coeficiente de difusión  $D_u$  del activador es mayor al coeficiente de difusión  $D_v$  del inhibidor y, de esta manera el inhibidor terminaría por suprimir por completo al activador y la reacción terminaría sin la obtención de algún patrón espacial.

Matemáticamente, a aquellos patrones espaciales que surjan a partir de las soluciones del sistema (3.1.1-3.1.4) que satisfaga las condiciones (3.3.45-3.3.49) serán llamados **patrones de Turing**.

## 3.4. Construcción de algunos Modelos de Turing

En las secciones pasadas, para el caso bidimensional, se estudiaron y analizaron las condiciones matemáticas que deben cumplir los sistemas reacción-difusión que garanticen la generación de patrones espaciales en el medio. En esta sección presentaremos algunos modelos que generen patrones de Turing basándonos en un modelo un tanto general.

Consideremos el siguiente sistema reacción-difusión con condiciones de frontera tipo Neumann homogéneas y condiciones iniciales :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{D}_u \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma(\alpha \mathbf{u} f_1(\mathbf{v}) + \beta \mathbf{v} f_2(\mathbf{u})), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \quad (3.4.53)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{D}_v \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma(\delta \mathbf{u} f_3(\mathbf{v}) - \epsilon \mathbf{v} f_4(\mathbf{u})), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \quad (3.4.54)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \partial \Omega \times (0, \infty), \quad (3.4.55)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (3.4.56)$$

donde  $f_1, f_2, f_3$  y  $f_4$  son funciones escalares definidas en un intervalo  $I \subset \mathbb{R}$  que contiene a 0 tales que  $f_1(0), f_2(0), f_3(0), f_4(0) \neq 0$ . Este sistema tiene al menos como punto de equilibrio al punto  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T = (0, 0)^T$  en ausencia de difusión. Al hacer  $\mathcal{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \alpha \mathbf{u} f_1(\mathbf{v}) + \beta \mathbf{v} f_2(\mathbf{u})$  y  $\mathcal{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \delta \mathbf{u} f_3(\mathbf{v}) - \epsilon \mathbf{v} f_4(\mathbf{u})$  se tiene que la matriz Jacobiana de este sistema sin difusión en el punto  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T = (0, 0)^T$  está dada por

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}_u(0, 0) & \mathcal{F}_v(0, 0) \\ \mathcal{G}_u(0, 0) & \mathcal{G}_v(0, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha f_1(0) & \beta f_2(0) \\ \delta f_3(0) & -\epsilon f_4(0) \end{pmatrix}. \quad (3.4.57)$$

Así, al hacer  $\mathbf{d} = \frac{\mathbf{D}_v}{\mathbf{D}_u} > 1$ , las condiciones (3.3.45-3.3.48) para la formación de patrones espaciales se traducen en

1.  $\alpha f_1(0) - \epsilon f_4(0) < 0$ ,
2.  $\alpha \epsilon f_1(0) f_4(0) + \beta \delta f_2(0) f_3(0) < 0$ ,
3.  $\mathbf{d} \alpha f_1(0) - \epsilon f_4(0) > 0$ ,
4.  $[\mathbf{d} \alpha f_1(0) - \epsilon f_4(0)]^2 > -4\mathbf{d} [\alpha \epsilon f_1(0) f_4(0) + \beta \delta f_2(0) f_3(0)]$ .

Adicionalmente, se debe satisfacer  $\alpha f_1(0) > 0$ ,  $-\epsilon f_4(0) < 0$  y  $\beta \delta f_2(0) f_3(0) < 0$ . Como un caso particular de esto, consideramos  $f_1(0) = f_2(0) = f_3(0) = f_4(0) = 1$ . En tal situación, la matriz Jacobiana del sistema queda expresada como

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \delta & -\epsilon \end{pmatrix} \quad (3.4.58)$$

y las condiciones de inestabilidad de Turing quedan expresadas de la siguiente forma :

- 1'.  $\alpha - \epsilon < 0$ ,
- 2'.  $\alpha \epsilon + \beta \delta < 0$ ,
- 3'.  $\mathbf{d} \alpha - \epsilon > 0$ ,
- 4'.  $(\mathbf{d} \alpha - \epsilon)^2 > -4\mathbf{d} (\alpha \epsilon + \beta \delta)$ ,

y además  $\alpha > 0$ ,  $\epsilon > 0$  y  $\beta \delta < 0$ . Los coeficientes  $\alpha, \beta, \delta, \epsilon$  y  $\mathbf{d}$  junto con las desigualdades (1' - 4') anteriores, determinan sobre el espacio  $\mathbb{R}^5$  la denominada **región** o **espacio de Turing**. Por ejemplo, fijando  $\delta = 2$  y  $\mathbf{d} = 6$ , la región de Turing para la terna  $(\alpha, \beta, \epsilon) \in \mathbb{R}^3$  es la siguiente :

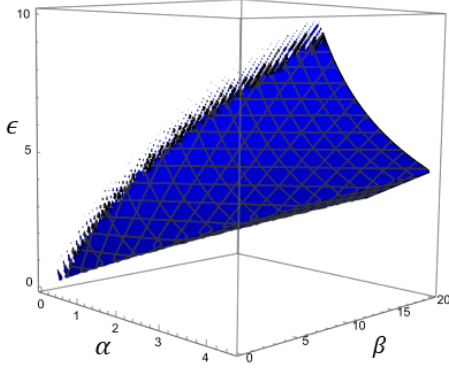


Figura 3.4.1: Región de Turing generada por las condiciones (1' - 4').

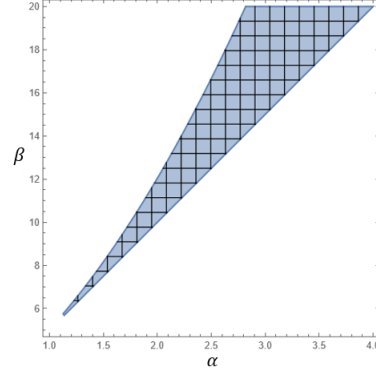


Figura 3.4.2: Proyección de la región de Turing sobre el plano  $\alpha$ - $\beta$  cuando  $\epsilon = 5$ .

la cual es una región no acotada. En la imagen de la derecha se muestra los posibles valores que pueden tomar los coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$  cuando  $\epsilon = 5$ .

### 3.4.1. Creación de pulsos en condiciones iniciales

Consideremos un sistema como en (3.4.53-3.4.56). Supongamos que  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 2, 3$ ) es el dominio de definición de las concentraciones  $\mathbf{u}(\mathbf{x})$  y  $\mathbf{v}(\mathbf{x})$  de dicho sistema. Sea  $\mathcal{O} \subset \Omega$  cierta subregión del medio  $\Omega$ , y supongamos que  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$  es un punto de equilibrio del sistema en ausencia de difusión y  $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$  las concentraciones iniciales ( $t = 0$ ). Supongamos que en cierto contexto de un problema, el cual es modelado por el sistema (3.4.53-3.4.56), se tiene que las concentraciones iniciales  $\mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{v}_0(\mathbf{x})$  toman un valor  $(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \mathbf{v}(\mathbf{x}))^T = (\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{v}})^T$  para todo  $\mathbf{x} \in \mathcal{O}$  y  $(\mathbf{u}(\mathbf{x}), \mathbf{v}(\mathbf{x}))^T = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$  para todo  $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{O}$ , esto es,

$$(\mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \mathbf{v}_0(\mathbf{x}))^T = \begin{cases} (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T + \epsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{O}, \\ (\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{v}})^T + \epsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{O}, \end{cases}$$

donde  $0 < \epsilon < 1$  representa el porcentaje de ruido aleatorio que se agrega alrededor del punto de equilibrio  $(\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$ , y  $\mathbf{r}$  es precisamente el ruido aleatorio, el cual, en realidad, es una variable aleatoria con distribución uniforme (o normal) multivariada. Cuando apliquemos esto a las condiciones iniciales de un sistema reacción-difusión dado, diremos que hemos agregado un **pulso** a dicho sistema.

Los pulsos son de gran utilidad para la generación de patrones espaciales ya que como se verá más adelante en algunos resultados obtenidos mediante simulaciones computacionales, al aplicar un pulso o más a las condiciones iniciales del sistema, se obtienen gran variedad de patrones muy interesantes. En las secciones posteriores se mostrará la aplicación de esto para algunos modelos en particular, y se generarán patrones sobre regiones planas mediante simulaciones computacionales utilizando el método de elemento finito.

## 3.5. Modelos de Turing en el plano

En esta sección mostraremos algunos modelos construidos mediante lo presentado en la sección 3.4. Cabe mencionar que los nombres otorgados a cada modelo, no es que se llamen así como tal o que Alan Turing los haya nombrado de esa manera. Simplemente, había que asignar un nombre a cada modelo y se decidió nombrarlos de acuerdo a la naturaleza de las reacciones utilizadas en los mismos.

### 3.5.1. Modelo de Turing lineal

El siguiente sistema reacción-difusión tomado de [23] con una ligera modificación, fue uno de los primeros sistemas desarrollados a principios de la década de 1950:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_u \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma(\alpha \mathbf{u} + \beta \mathbf{v}), \quad (3.5.59)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_v \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma(\delta \mathbf{u} - \epsilon \mathbf{v}), \quad (3.5.60)$$

donde  $\alpha, \beta, \delta, \epsilon$  son parámetros que determinan el comportamiento de los términos reactivos y  $D_u, D_v > 0$  son los coeficientes de difusión. Para este modelo se tiene  $\mathcal{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \alpha \mathbf{u} + \beta \mathbf{v}$  y  $\mathcal{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \delta \mathbf{u} - \epsilon \mathbf{v}$ . El punto de equilibrio del sistema es  $\mathbf{w}^* = (0, 0)^T$ . De acuerdo a lo presentado en la sección anterior, por medio de las restricciones (1' - 4') que garantizan la generación de patrones espaciales por medio de las soluciones temporales de este sistema, debe cumplirse  $\alpha, \epsilon > 0$  y  $\beta\delta < 0$ . Al fijar  $\delta = 2$ , la región de Turing para la terna  $(\alpha, \beta, \epsilon) \in \mathbb{R}^3$  y su proyección sobre el plano  $\alpha$ - $\beta$  cuando  $\epsilon = 1.5$  son:

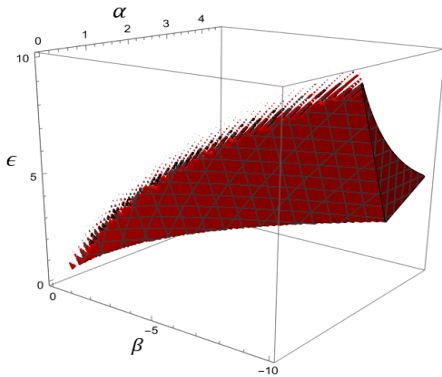


Figura 3.5.1: Región de Turing generada por las condiciones (1' - 4').

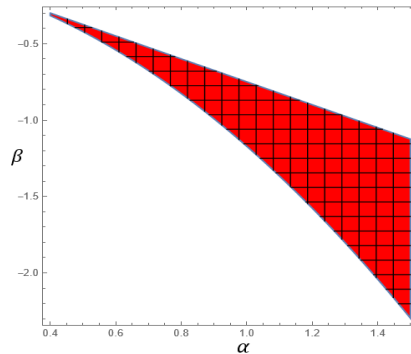


Figura 3.5.2: Proyección de la región de Turing sobre el plano  $\alpha$ - $\beta$  para  $\epsilon = 1.5$ .

Para mostrar la generación de patrones de patrones mediante simulación numérica, consideramos  $\Omega = [0, L] \times [0, L]$  con  $L = 1$ . Del problema espacial de valores propios (3.3.28), sus soluciones escalares (cada componente de  $\mathbf{Z}_{m,n}$ ) son de la forma

$$\mathbf{Z}_{m,n}(x, y) = \mathbf{c}_{m,n} \cos\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{L}y\right), \quad k^2 = \pi^2 \left(\frac{m^2 + n^2}{L^2}\right), \quad (3.5.61)$$

donde  $\mathbf{m}, \mathbf{n}$  son enteros positivos y los  $\mathbf{c}_{\mathbf{m},\mathbf{n}}$  son constantes que dependen de las condiciones iniciales. Obsérvese que estas funciones propias satisfacen las condiciones de frontera  $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{Z}_{\mathbf{m},\mathbf{n}} = \mathbf{0}$  para todo  $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \partial\Omega$ . La solución inestable con patrones espaciales está determinada por (3.3.29) y (3.6.70) como

$$\mathbf{z}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \sum_{\mathbf{m}=1}^{\infty} \sum_{\mathbf{n}=1}^{\infty} \mathbf{c}_{\mathbf{m},\mathbf{n}} e^{\lambda_{\mathbf{k}} t} \cos\left(\frac{\mathbf{m}\pi}{L} \mathbf{x}\right) \cos\left(\frac{\mathbf{n}\pi}{L} \mathbf{y}\right), \quad (3.5.62)$$

con  $k_1^2 < k^2 < k_2^2$ . Esta desigualdad y (3.6.70), implican que, una vez seleccionados los parámetros  $\alpha, \beta, \delta, \epsilon$  y  $\mathbf{d}$ , debe elegirse  $\gamma$  de tal manera que se satisfaga la desigualdad

$$\frac{L^2 k_1^2}{\pi^2} < \mathbf{m}^2 + \mathbf{n}^2 < \frac{L^2 k_2^2}{\pi^2}, \quad (3.5.63)$$

para garantizar la aparición de patrones espaciales. Consideramos  $\alpha = 1, \beta = -1, \delta = 2$  y  $\epsilon = 1.5$ . De acuerdo con (3.3.51) el coeficiente de difusión crítico está dado por

$$\mathbf{d}_c = \frac{-(\alpha\epsilon + 2\beta\delta) + \sqrt{(2\beta\delta + \alpha\epsilon)^2 - \alpha^2\epsilon^2}}{\alpha^2} = 4.5.$$

Esto quiere decir que debemos considerar un valor de  $\mathbf{d}$  mayor a 4.5 para garantizar la generación de patrones espaciales. Al considerar  $\mathbf{D}_u = 1 \times 10^{-2}$  y  $\mathbf{D}_v = 6 \times 10^{-2}$  se obtiene  $\mathbf{d} = 6 > \mathbf{d}_c$ . Ahora calculamos el nodo de onda crítico  $k_c^2$  :

$$k_c^2 = \gamma \frac{\mathbf{d}_c \alpha + \epsilon}{2\mathbf{D}_v} = 37.5 \gamma, \quad (3.5.64)$$

el cuál depende del factor de escala  $\gamma$  elegido. A partir de (3.3.42) tenemos

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \frac{\gamma}{2\mathbf{D}_v} \left[ (\mathbf{d} \alpha - \epsilon) - \sqrt{(\mathbf{d} \alpha - \epsilon)^2 + 4 \mathbf{d}(\alpha\epsilon + \beta\delta)} \right] = 13.5643 \gamma, \\ k_2^2 &= \frac{\gamma}{2\mathbf{D}_v} \left[ (\mathbf{d} \alpha - \epsilon) + \sqrt{(\mathbf{d} \alpha - \epsilon)^2 + 4 \mathbf{d}(\alpha\epsilon + \beta\delta)} \right] = 61.4357 \gamma. \end{aligned}$$

Así, de (3.5.63) se tiene que habrá aparición de patrones espaciales siempre y cuando existan enteros no negativos  $\mathbf{m}$  y  $\mathbf{n}$  que cumplan la desigualdad

$$1.3744 \gamma < \mathbf{m}^2 + \mathbf{n}^2 < 6.2247 \gamma.$$

Elegimos  $\gamma = 10$ . Para las condiciones iniciales se considerará el pulso

$$(\mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \mathbf{v}_0(\mathbf{x}))^T = \begin{cases} (0, 0)^T + \epsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{O}, \\ (1/2, 1/4)^T + \epsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{O}, \end{cases}$$

con  $\epsilon = 0.1$ , es decir, se perturbará el sistema con ruido aleatorio con una intensidad del 10 %. Para este caso  $\mathcal{O}$  es un cuadrado inscrito en  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ , con aproximadamente el 10 % de las dimensiones de  $\Omega$ . Se consideró un tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$  y una malla de  $145 \times 145$ . Para el cuadrado se realizaron un total de 35000 iteraciones

y para el círculo se realizaron 10 000 iteraciones. Las simulaciones se realizaron con el programa de MATLAB y los programas utilizados fueron desarrollados durante un curso de Tópicos selectos, en donde se vio la solución de ecuaciones elípticas y parabólicas en el plano mediante el método de elemento finito. Se obtuvieron los siguientes resultados :

**Cuadrado :**

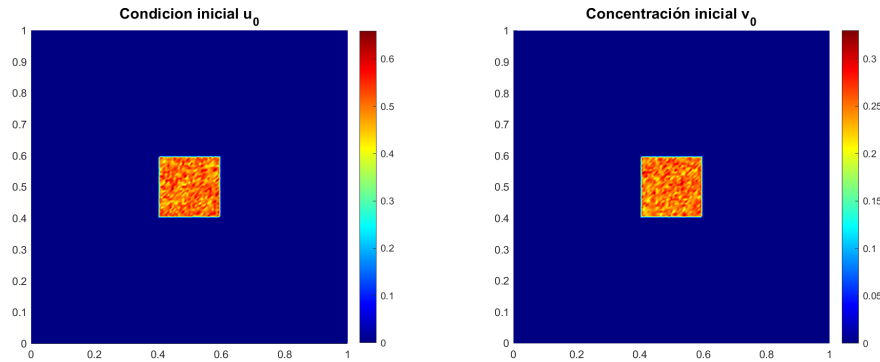


Figura 3.5.3: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

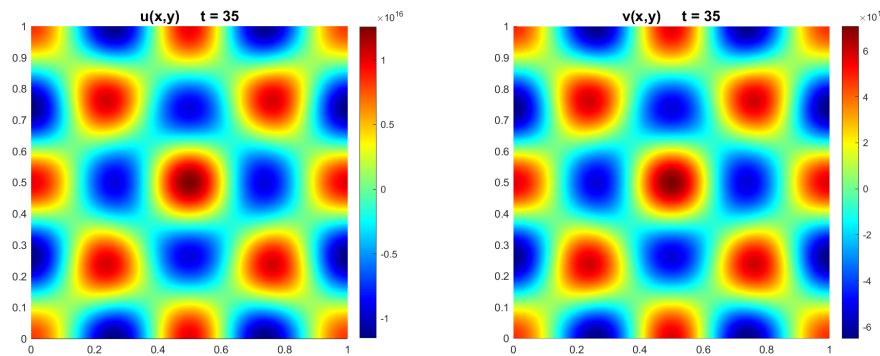


Figura 3.5.4: Concentraciones al tiempo  $t = 35$ .

Mostramos la gráfica de la solución  $u(x, y)$  con dos perspectivas diferentes para mostrar que los patrones generados en el cuadrado unitario corresponden a la proyección de la superficie  $u(x, y)$  sobre el plano  $xy$  :

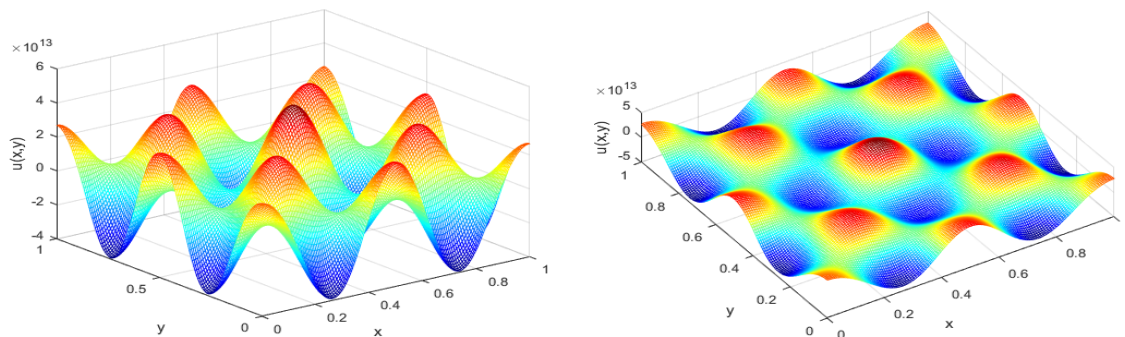


Figura 3.5.5: Solución  $u(x, y)$ .

**Círculo :** Radio del círculo  $R = 1$ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la simulación anterior incluyendo el pulso. Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

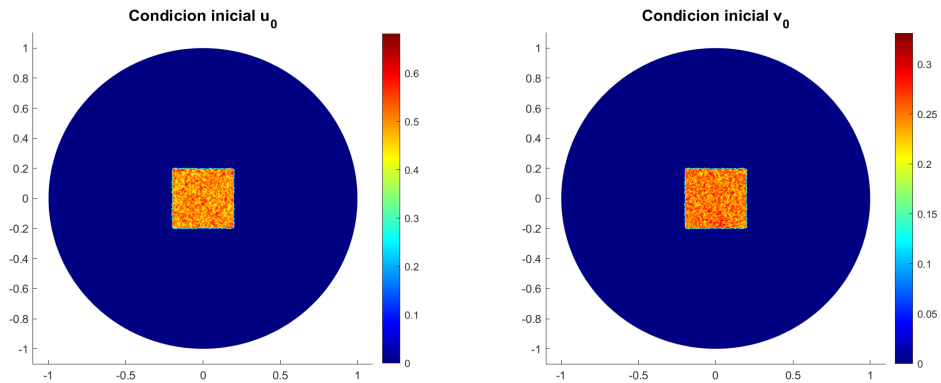


Figura 3.5.6: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

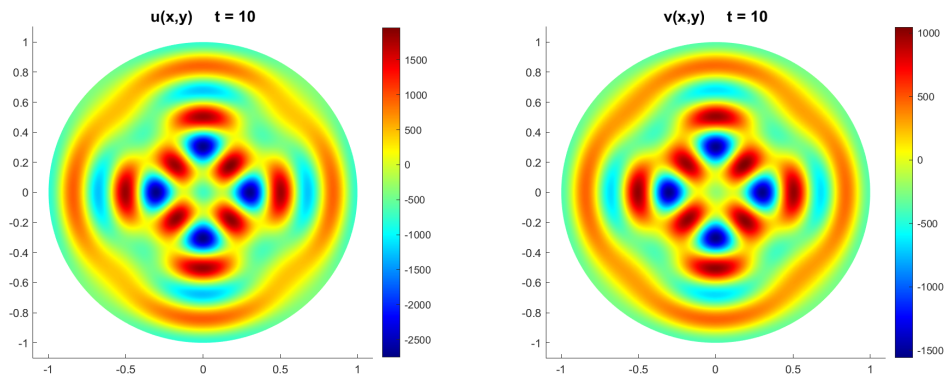


Figura 3.5.7: Concentraciones al tiempo  $t = 10$ .

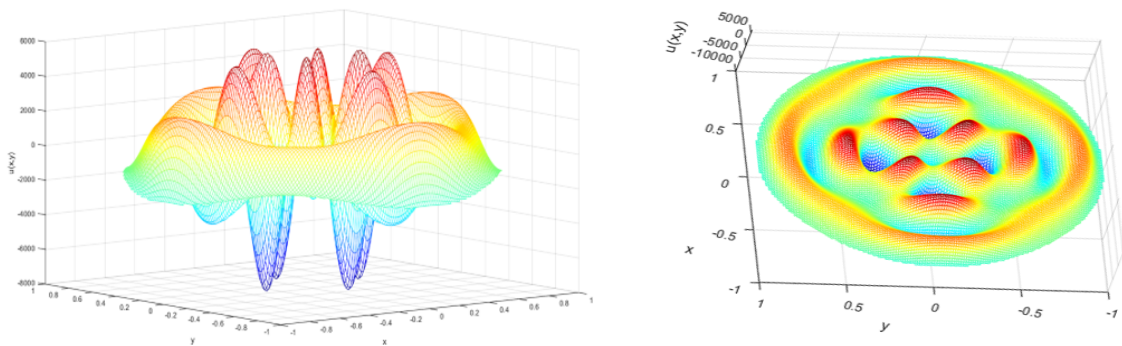


Figura 3.5.8: Solución  $u(x, y)$ .

Ahora se muestra el resultado de la simulación realizada en el círculo unitario, solo que esta vez, fueron agregados 4 pulsos en las condiciones iniciales. El resultado obtenido es el siguiente :

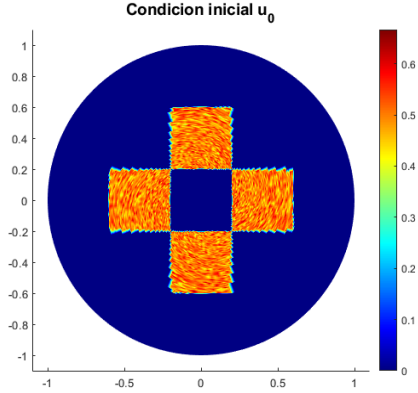


Figura 3.5.9: Concentración inicial  $u(x, t = 0)$ .

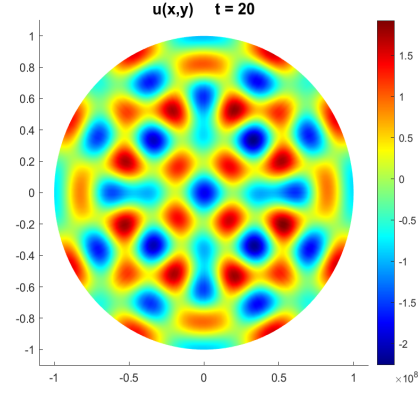


Figura 3.5.10: Concentración  $u$  al tiempo  $t = 20$ .

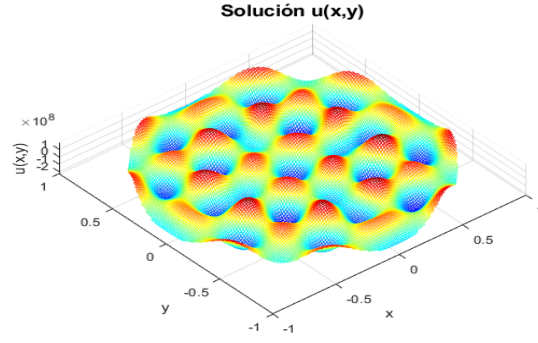
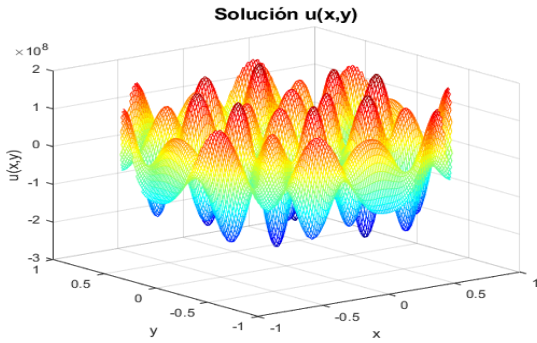


Figura 3.5.11: Solución  $u(x, y)$ .

Notamos que hay un cambio significativo en los patrones generados, dependiendo el número de pulsos utilizados.

Es importante mencionar que las funciones propias y los valores propios para el Laplaciano negativo ya no son los mismos en el círculo de radio  $R = 1$ , pero el modelo sigue produciendo patrones con los mismos parámetros.

### 3.5.2. Modelo de Turing-exponencial

El modelo que denominamos Turing-exponencial tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + \gamma(\alpha u e^v + v e^u), \quad (3.5.65)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + \gamma(\delta u e^v - \epsilon v e^u). \quad (3.5.66)$$

El punto de equilibrio de este sistema es  $\mathbf{w}^* = (0, 0)^T$  y las condiciones para generar patrones son exactamente las mismas que en el sistema Turing-lineal presentado anteriormente. Se llevaron a cabo simulaciones de este modelo considerando casos con la aplicación de uno o más pulsos, así como otros sin ellos, con el propósito de comparar los patrones



generados. En cada simulación, se emplearon los siguientes parámetros: coeficientes de difusión  $D_u = 10^{-2}$ ,  $D_v = 6 \times 10^{-2}$ , un tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 10^{-3}$  y valores parametrales de las reacciones:  $\alpha = 1$ ,  $\beta = -1$ ,  $\delta = 2$ ,  $\epsilon = 1.5$  y  $\gamma = 10$ .

**Cuadrado:** Las dimensiones del cuadrado utilizado son  $[0, 10] \times [0, 10]$  y se generó una malla de  $150 \times 150$  que consta de 22801 nodos y 45000 elementos o triángulos. Se realizaron un total de 20 000 iteraciones.

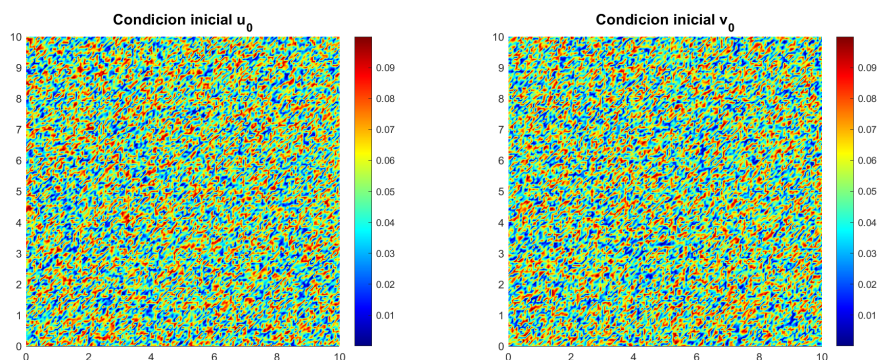


Figura 3.5.12: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

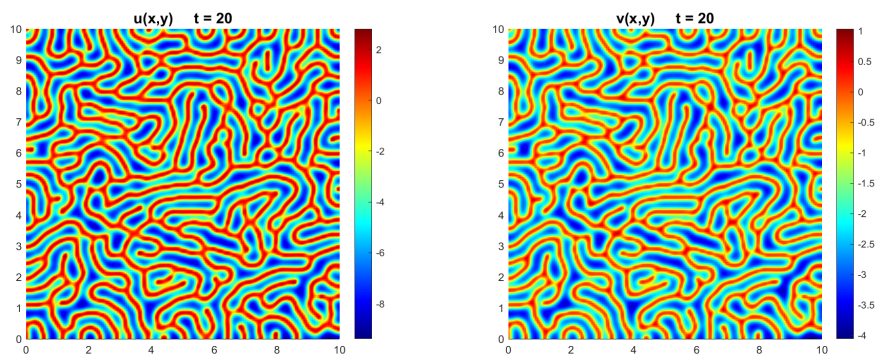


Figura 3.5.13: Concentraciones al tiempo  $t = 20$ .

**Cuadrado con hexágono inscrito:** Mismos parámetros que en la simulación anterior. Se realizaron un total de 20 000 iteraciones.

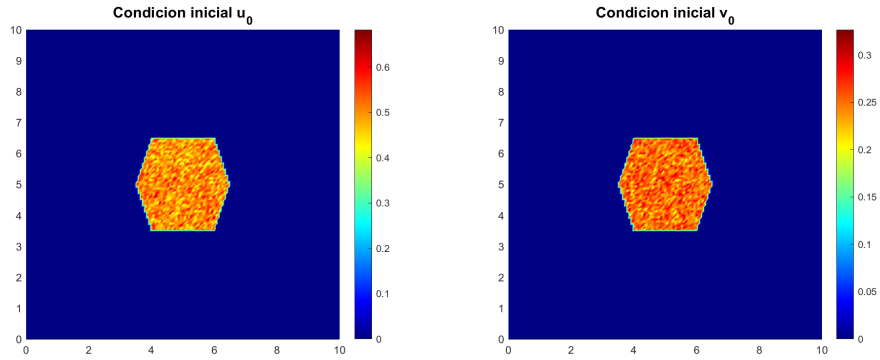


Figura 3.5.14: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

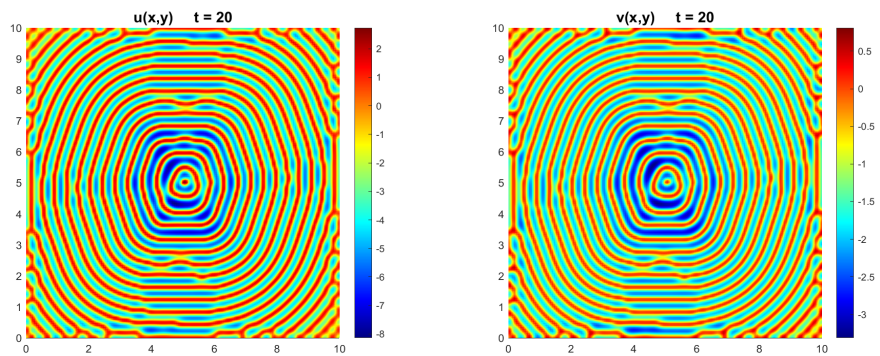


Figura 3.5.15: Concentraciones al tiempo  $t = 20$ .

Para las siguientes simulaciones se consideró un círculo de radio  $R = 5$ . Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 elementos. Se consideraron los mismos parámetros que en la simulaciones anteriores.

**Círculo** : Se realizaron un total de 15 000 iteraciones.

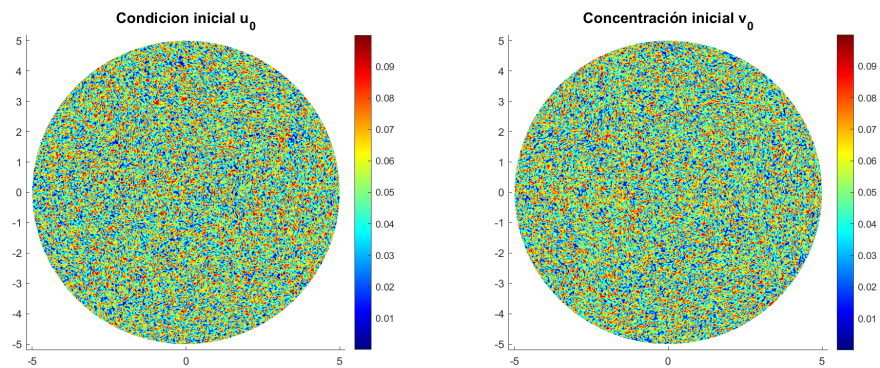


Figura 3.5.16: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

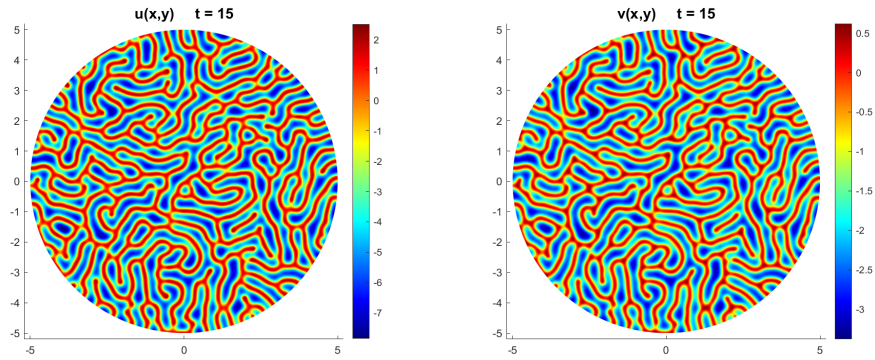


Figura 3.5.17: Concentraciones al tiempo  $t = 15$ .

**Círculo con hexágono inscrito :** Se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

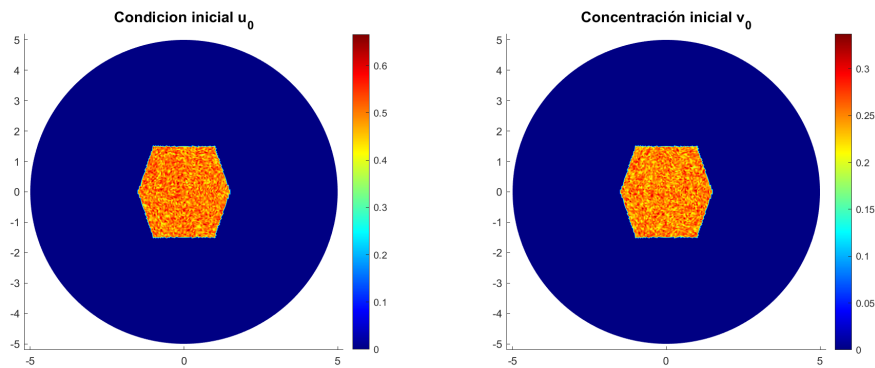


Figura 3.5.18: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

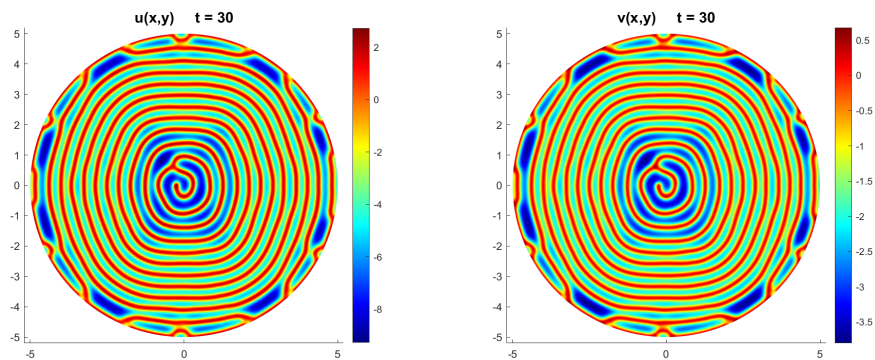


Figura 3.5.19: Concentraciones al tiempo  $t = 30$ .

**Círculo con 4 cuadrados inscritos :** Se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

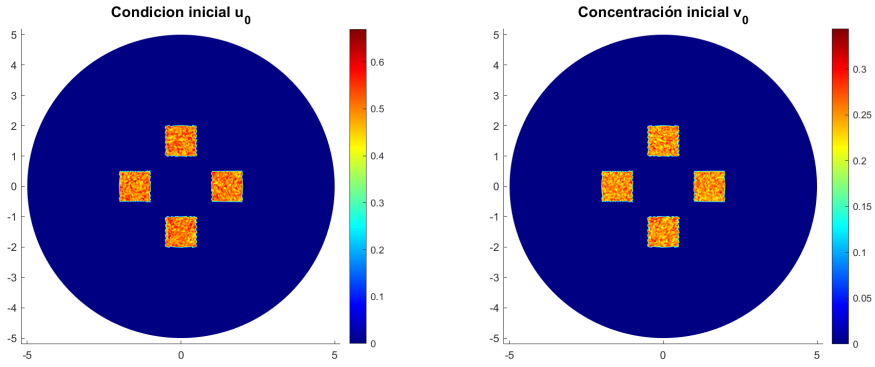


Figura 3.5.20: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

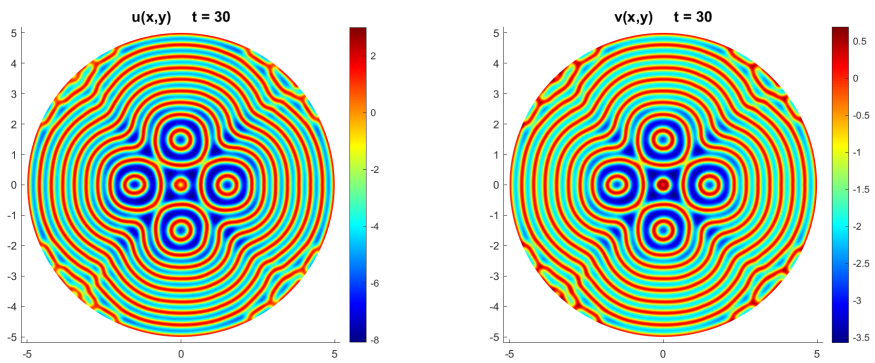


Figura 3.5.21: Concentraciones al tiempo  $t = 30$ .

**Cardioide  $r = 2 + 2 \cos \theta$**  : Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 elementos. Se utilizaron los mismos valores de los parámetros de las simulaciones anteriores con un factor de escala  $\gamma = 20$ . Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

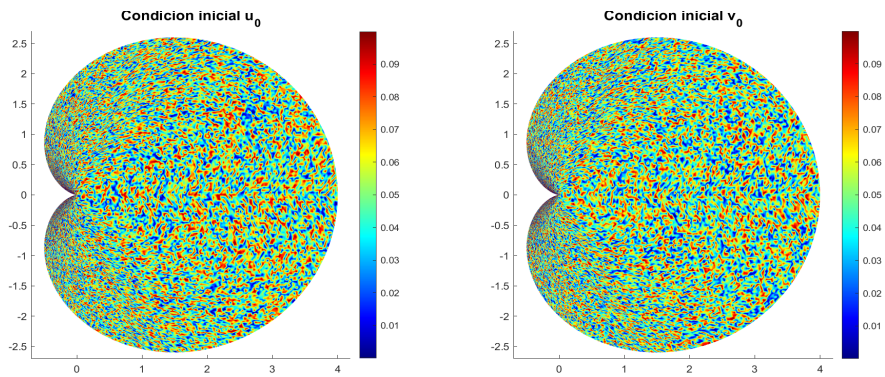


Figura 3.5.22: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

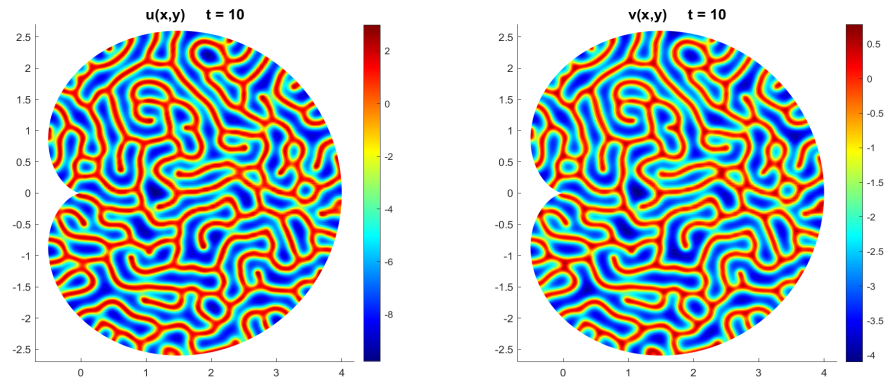


Figura 3.5.23: Concentraciones al tiempo  $t = 10$ .

**Cardioide  $r = 2 + 2 \cos \theta$  con pulso :** El pulso utilizado se estableció sobre la región delimitada por la curva  $[x - (2 + 0.2 \sin 10y + 0.3 \cos 3y)]^2 + y^2 = 1$ . Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 elementos. Se utilizaron los mismos valores de los parámetros de las simulaciones anteriores con un factor de escala  $\gamma = 20$ . Se realizaron un total de 20000 iteraciones.

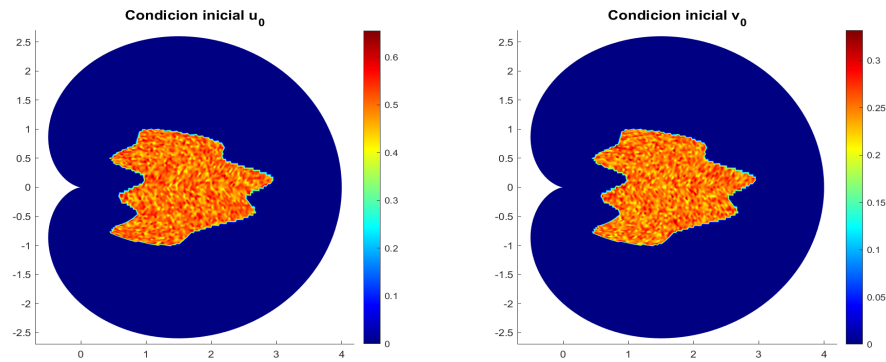


Figura 3.5.24: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

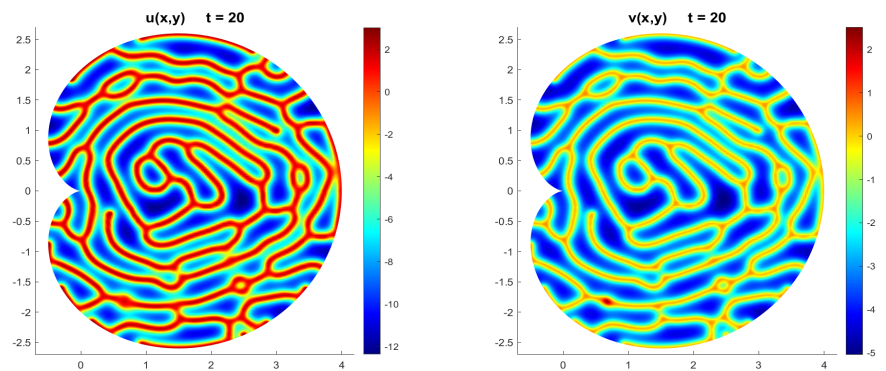


Figura 3.5.25: Concentraciones al tiempo  $t = 20$ .

Es evidente el cambio en los patrones generados cuando se le agrega uno o más pulsos a las condiciones iniciales en comparación a cuando no. Aunque en todos los casos, los patrones obtenidos resultan ser muy interesantes.

### 3.6. Modelo de Schnakenberg en el plano

El modelo de Schnakenberg es un modelo clásico para el estudio de patrones de Turing, y es uno de los modelos más sencillos de reacción-difusión utilizado en morfogénesis<sup>2</sup>. En su forma bidimensional, el modelo está descrito por

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{a} - \mathbf{u} + \mathbf{u}^2 \mathbf{v}) + \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (3.6.67)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{b} - \mathbf{u}^2 \mathbf{v}) + d \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (3.6.68)$$

donde  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\gamma$  son constantes positivas y  $d$  es el coeficiente de difusión. En este caso el punto de equilibrio del sistema sin difusión, está dado por

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{b}}{(\mathbf{a} + \mathbf{b})^2}. \quad (3.6.69)$$

Tomando  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{a} - \mathbf{u} + \mathbf{u}^2 \mathbf{v}$  y  $g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{b} - \mathbf{u}^2 \mathbf{v}$  se tiene que la matriz Jacobiana del sistema sin difusión en el punto de equilibrio (3.6.69) está dada por

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{\mathbf{a} + \mathbf{b}} & (\mathbf{a} + \mathbf{b})^2 \\ -\frac{2\mathbf{b}}{\mathbf{a} + \mathbf{b}} & -(\mathbf{a} + \mathbf{b})^2 \end{pmatrix}. \quad (3.6.70)$$

Considerando  $\mathbf{a} < \mathbf{b}$  las condiciones (3.3.45-3.3.48) para la formación de patrones, se traducen en

1.  $0 < \mathbf{b} - \mathbf{a} < (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3$ ,
2.  $d(\mathbf{b} - \mathbf{a}) > (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3$ ,
3.  $[d(\mathbf{b} - \mathbf{a}) - (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3]^2 > 4d(\mathbf{a} + \mathbf{b})^4$ .

El espacio de Turing  $\mathcal{E} \subset \mathbb{R}^3$  para la terna  $(\mathbf{a}, \mathbf{b}, d)$  generado por el modelo de Schnakenberg para  $\mathbf{a} < \mathbf{b}$  y la proyección sobre el plano  $\mathbf{a}$ - $\mathbf{b}$  se muestra enseguida para el valor de  $d = 10$ :

---

<sup>2</sup>Parte de la Embriología que se encarga de estudiar los procesos biológicos que llevan a que un organismo desarrolle su forma.

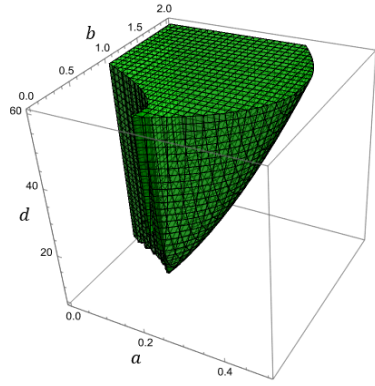


Figura 3.6.1: Región de Turing generada por las condiciones (1-3).

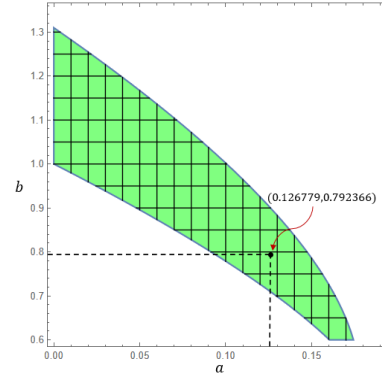


Figura 3.6.2: Proyección de la región de Turing sobre el plano  $ab$  cuando  $d = 10$ .

Escogiendo  $L = 1$  consideramos los valores  $a = 0.126779$  y  $b = 0.792366$ . Para este modelo y este valor de parámetros, los valores críticos son

$$d_c = 8.6199 \quad \text{y} \quad k_c^2 = 0.3198.$$

De acuerdo con (3.5.63) para garantizar la generación de patrones espaciales se requiere que existan enteros positivos  $m, n$  tales que

$$0.1864\gamma < m^2 + n^2 < 0.4533.$$

Para la simulación numérica sobre el cuadrado se consideró un valor de  $\gamma = 1000$  y una malla de  $40 \times 40$  para discretizar el cuadrado unitario. El intervalo de tiempo considerado fue  $[0, 1]$ , con un paso de tiempo de  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  para el cual se realizaron un total de 10 000 iteraciones. El resultado se muestran gráficamente en las siguientes figuras.

**Cuadrado :**

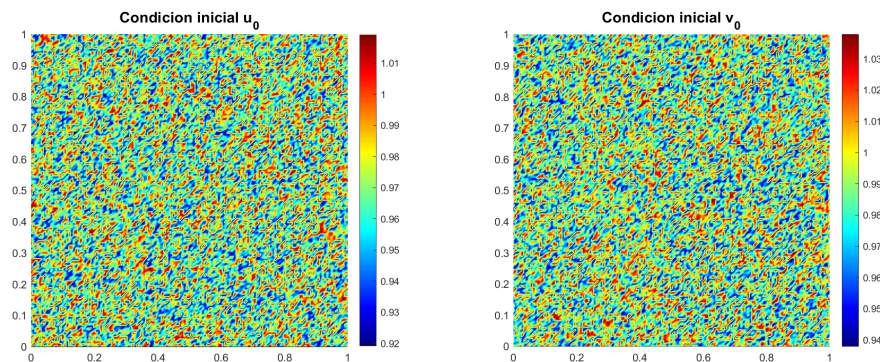


Figura 3.6.3: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

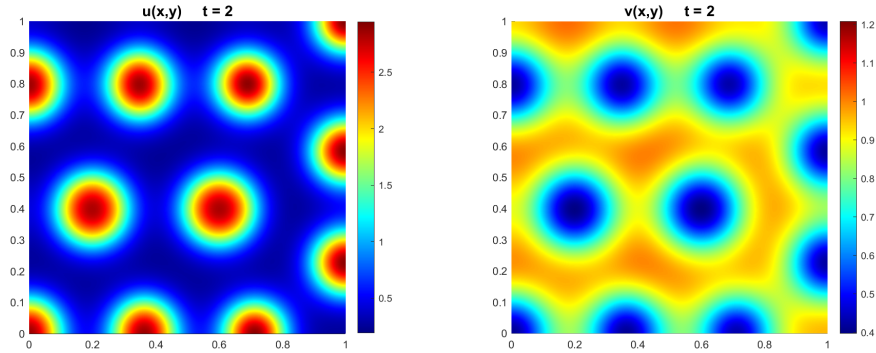


Figura 3.6.4: Concentraciones al tiempo  $t = 2$ .

Adicionalmente se realizaron otras simulaciones con distintos parámetros, tomando como dominio  $\Omega$  las regiones acotadas por la circunferencia unitaria, el cardioide  $r = 1 + \cos \theta$  y otras curvas. Los resultados obtenidos se muestran en las siguientes imágenes.

**Círculo :** Radio del círculo  $R = 2$ . Se utilizó una malla que consta de 32401 nodos y 64620 elementos. Parámetros:  $a = 0.126779$ ,  $b = 0.792366$ ,  $\gamma = 2000$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y  $d = 30$ . Se realizaron un total de 20 000 iteraciones.

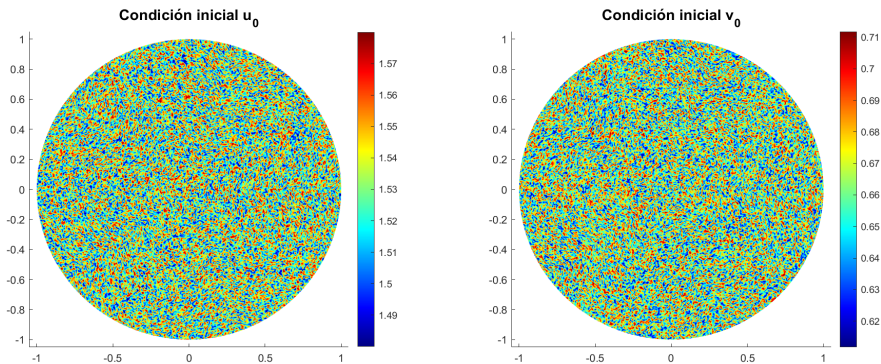


Figura 3.6.5: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

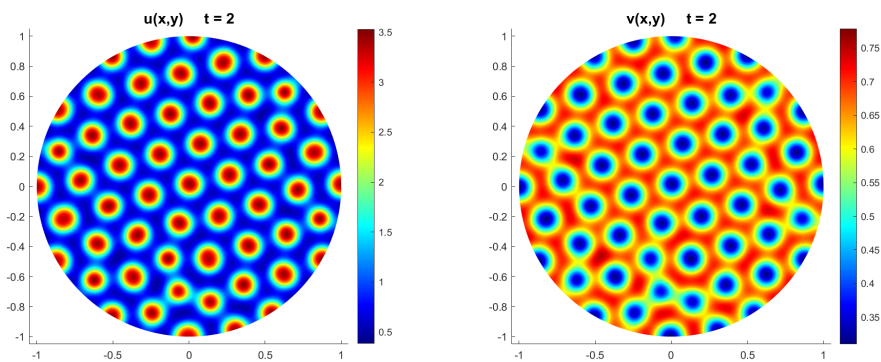


Figura 3.6.6: Concentraciones al tiempo  $t = 2$ .



**Cardioide** : Se utilizó una malla que consta de 32401 nodos o vértices y 64620 triángulos o elementos. Parámetros:  $\mathbf{a} = 0.126779$ ,  $\mathbf{b} = 0.792366$ ,  $\gamma = 1000$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y  $\mathbf{d} = 60$ . Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

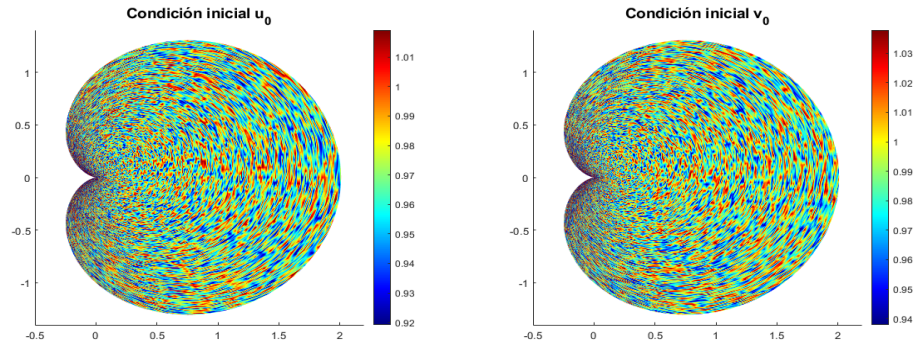


Figura 3.6.7: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

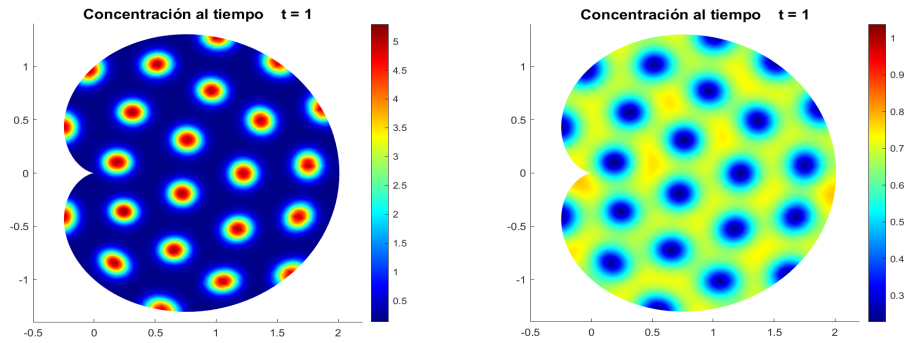


Figura 3.6.8: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Curva  $(x - y^3)^2 + y^2 = 1$**  : Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 elementos. Parámetros:  $\mathbf{a} = 0.126779$ ,  $\mathbf{b} = 0.792366$ ,  $\gamma = 5000$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y  $\mathbf{d} = 30$ . Se realizaron un total de 50 000 iteraciones.

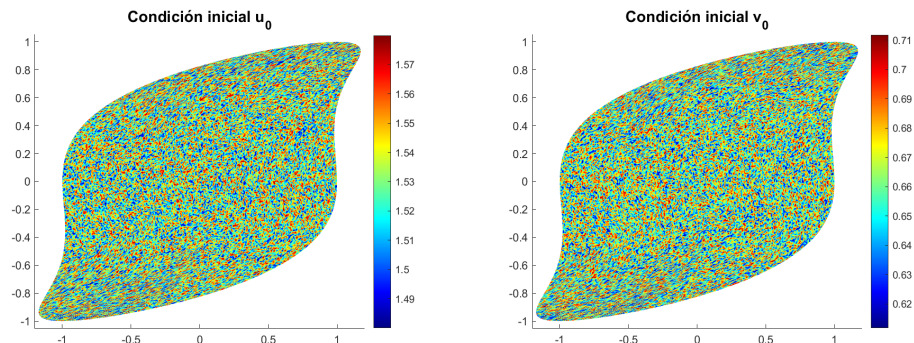


Figura 3.6.9: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

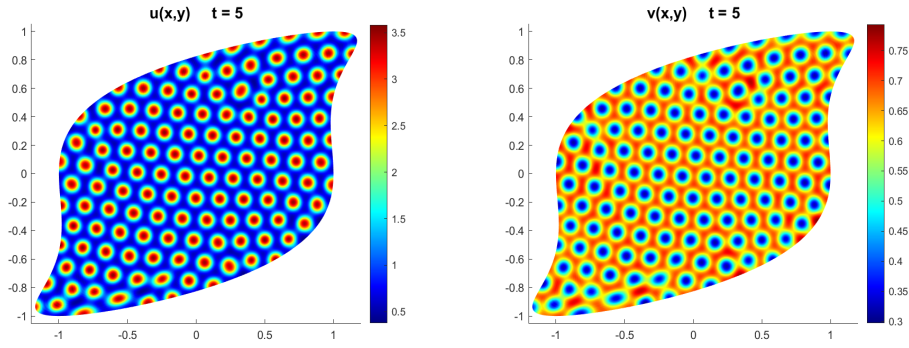


Figura 3.6.10: Concentraciones al tiempo  $t = 5$ .

**Curva  $(x - 0.2 \sin 10y - 0.3 \cos 3y)^2 + y^2 = 1$** : Se utilizó una malla que consta de 33025 nodos y 65536 elementos. Parámetros:  $\mathbf{a} = 0.126779$ ,  $\mathbf{b} = 0.792366$ ,  $\gamma = 2000$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y  $\mathbf{d} = 80$ . Se realizaron un total de 50 000 iteraciones.

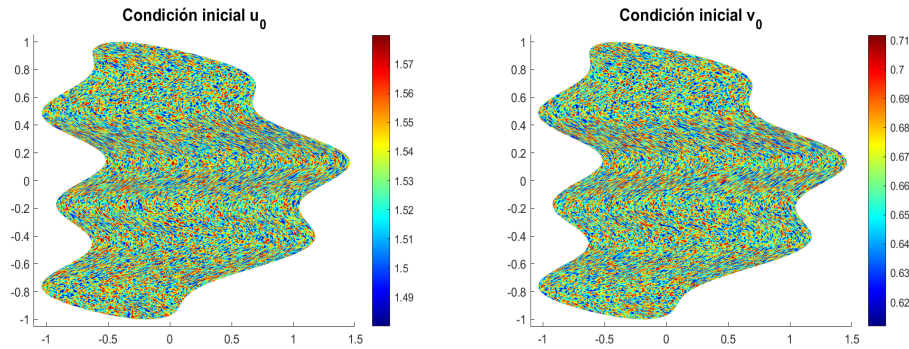


Figura 3.6.11: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

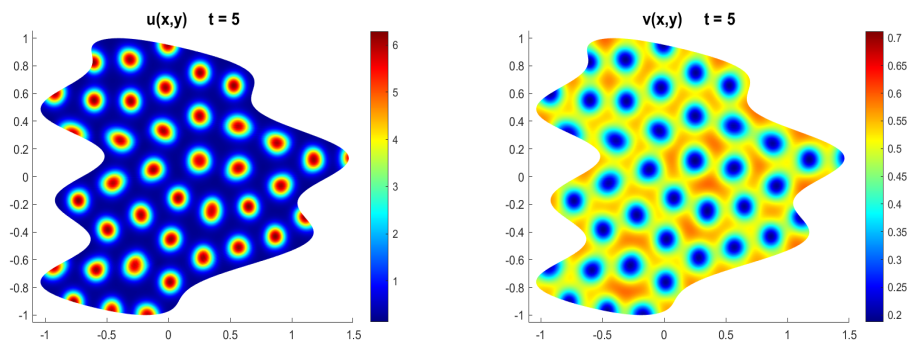


Figura 3.6.12: Concentraciones al tiempo  $t = 3$ .

**Anillo circular  $\mathbf{An}(r_1; r_2)$** :  $\mathbf{An}(r_1; r_2) = \{(r, \theta) \in \mathbb{R}^2 : r_1 \leq r \leq r_2, 0 \leq \theta \leq 2\pi\}$  con  $r_1 = 1$  y  $r_2 = 4$ . Se utilizó una malla que consta de 30880 nodos y 60795 elementos. Parámetros:  $\mathbf{a} = 0.126779$ ,  $\mathbf{b} = 0.792366$ ,  $\gamma = 1000$ ,  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y  $\mathbf{d} = 20$ . Se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

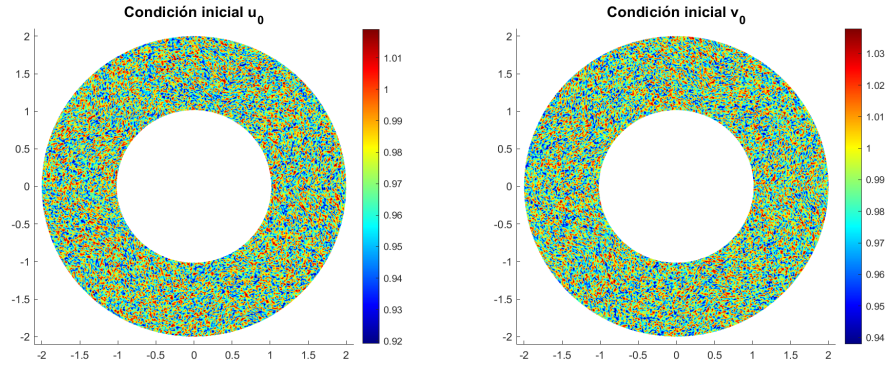


Figura 3.6.13: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

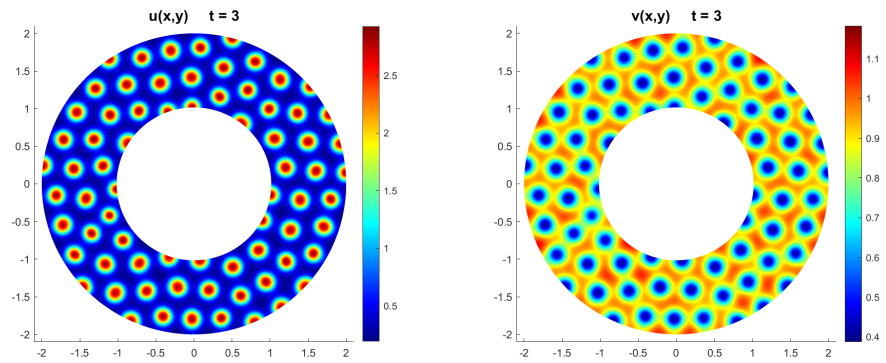


Figura 3.6.14: Concentraciones al tiempo  $t = 3$ .

Del artículo Dufiet [18] y de [8] según cambios en los valores de  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  se obtienen variedades de patrones espaciales como se muestra enseguida.

**Cuadrado :** Se utilizó una malla de  $110 \times 110$  sobre un cuadrado de dimensiones  $[0, 1.1] \times [0, 1.1]$ , que generó 12321 nodos y 24200 triángulos. Parámetros:  $\mathbf{a} = 0.07$ ,  $\mathbf{b} = 1.61$ ,  $D_u = 1$ ,  $D_v = 20$ ,  $\gamma = 10\,000$  y  $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ . Se realizaron un total de 70 000 iteraciones.

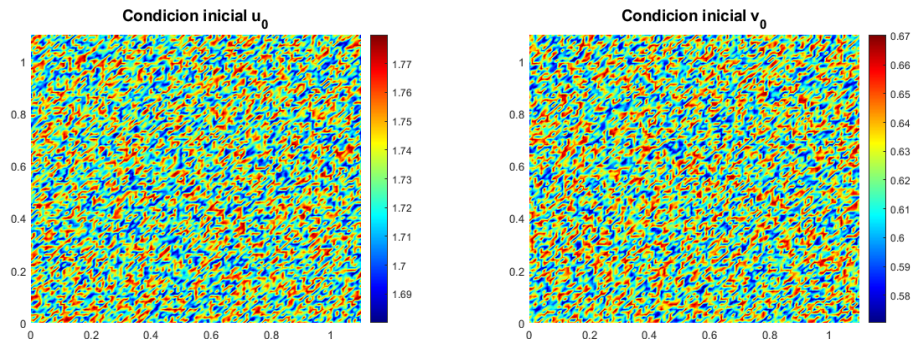


Figura 3.6.15: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

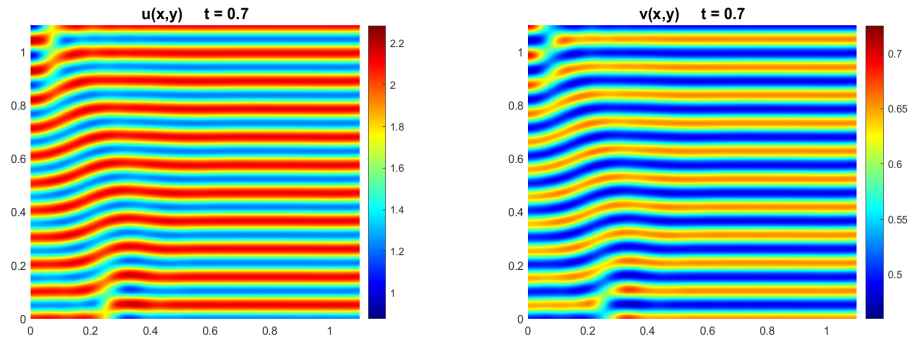


Figura 3.6.16: Concentraciones al tiempo  $t = 0.7$ .

**Cardioide:** Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 triángulos. Parámetros:  $\alpha = 0.14$ ,  $\mathbf{b} = 1.34$ ,  $D_u = 1$ ,  $D_v = 20$ ,  $\gamma = 10\,000$  y  $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ . Se realizaron un total de 100 000 iteraciones.

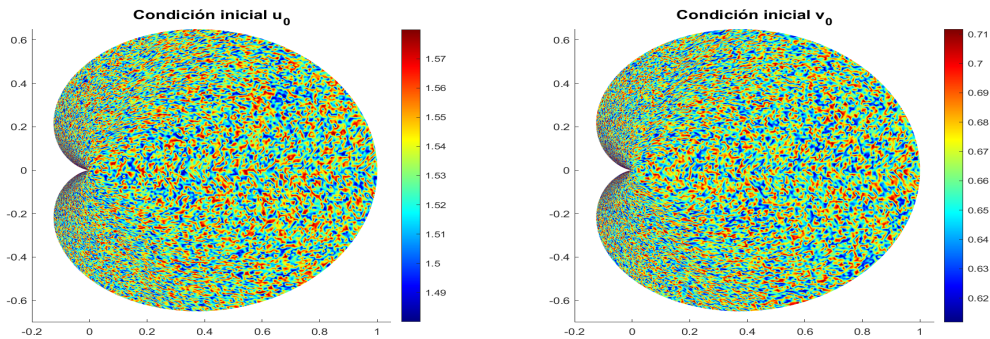


Figura 3.6.17: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

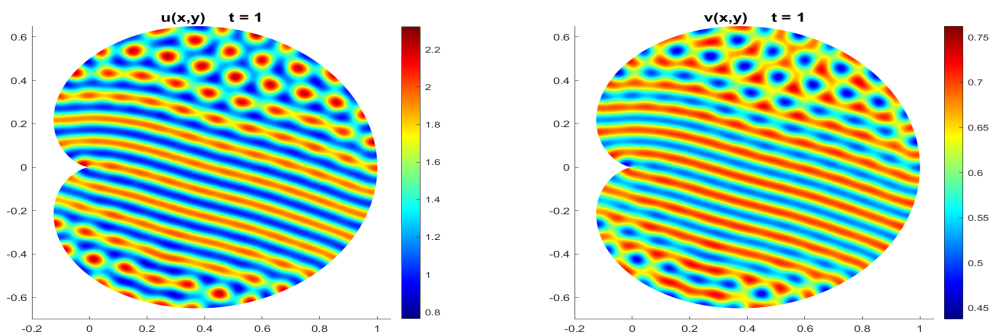


Figura 3.6.18: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Curva  $(x - 0.2 \sin 10y - 0.3 \cos 3y)^2 + y^2 = 1$ :** Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 triángulos. Parámetros:  $\alpha = 0.14$ ,  $\mathbf{b} = 1.34$ ,  $D_u = 1$ ,  $D_v = 20$ ,  $\gamma = 5\,000$  y  $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ . Se realizaron un total de 150 000 iteraciones.

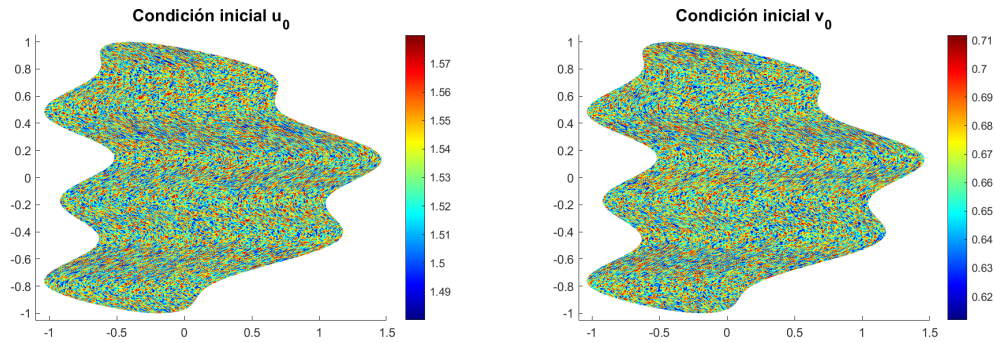


Figura 3.6.19: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

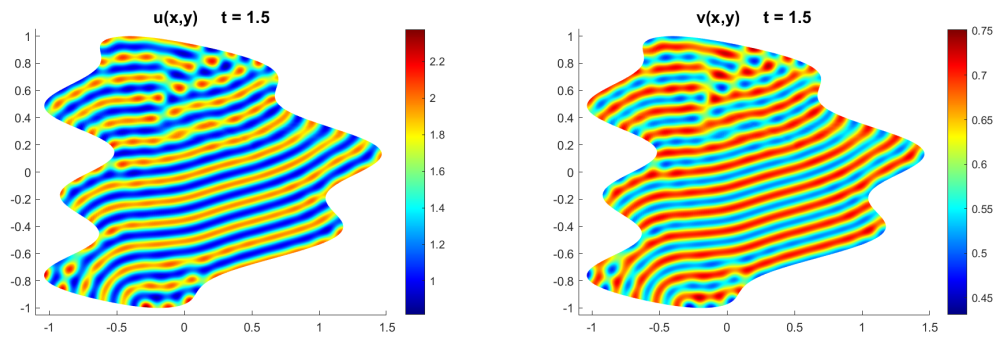


Figura 3.6.20: Concentraciones al tiempo  $t = 1.5$ .

De acuerdo con los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas para diferentes regiones del plano, observamos que la geometría de la región puede influir significativamente en la formación de los patrones esperados. Por ejemplo, en las dos últimas simulaciones presentadas, los parámetros utilizados para generar rayas sobre un cuadrado (ver figura 3.6.16) se aplicaron de manera similar. Sin embargo, los patrones resultantes mostraron rayas en algunas partes de las regiones, mientras que en otras áreas el patrón generado no correspondió necesariamente a la forma de rayas.

### 3.7. Modelo de Gray-Scott en el plano

El modelo de reacción-difusión de Gray-Scott proporciona información sobre patrones y dinámica observada en diversos fenómenos naturales, como los patrones del pelaje de los animales, las reacciones químicas e incluso la formación de patrones intrincados en las

conchas marinas. Su expresión matemática ligeramente modificada <sup>3</sup> es la siguiente

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_u \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma(F(1 - \mathbf{u}) - \mathbf{u}\mathbf{v}^2), \quad (3.7.71)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_v \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma(\mathbf{u}\mathbf{v}^2 - (F + \kappa)\mathbf{v}), \quad (3.7.72)$$

donde  $F, \kappa > 0$  son parámetros de la reacción,  $D_u, D_v > 0$  son los coeficientes de difusión y  $\gamma > 0$  es el factor de escala. Tomando  $f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = F(1 - \mathbf{u}) - \mathbf{u}\mathbf{v}^2$  y  $g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{u}\mathbf{v}^2 - (F + \kappa)\mathbf{v}$ , se tiene que los puntos de equilibrio de este sistema, bajo ciertas condiciones, en ausencia de difusión ( $D_u = D_v = 0$ ) son :

$$(\mathbf{u}_1^*, \mathbf{v}_1^*)^T = (1, 0)^T, \quad (3.7.73)$$

$$(\mathbf{u}_2^*, \mathbf{v}_2^*)^T = \left( \frac{1}{2} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{4(F + \kappa)^2}{F}} \right), \frac{F}{2(F + \kappa)} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{4(F + \kappa)^2}{F}} \right) \right)^T, \quad (3.7.74)$$

$$(\mathbf{u}_3^*, \mathbf{v}_3^*)^T = \left( \frac{1}{2} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{4(F + \kappa)^2}{F}} \right), \frac{F}{2(F + \kappa)} \left( 1 + \sqrt{1 - \frac{4(F + \kappa)^2}{F}} \right) \right)^T. \quad (3.7.75)$$

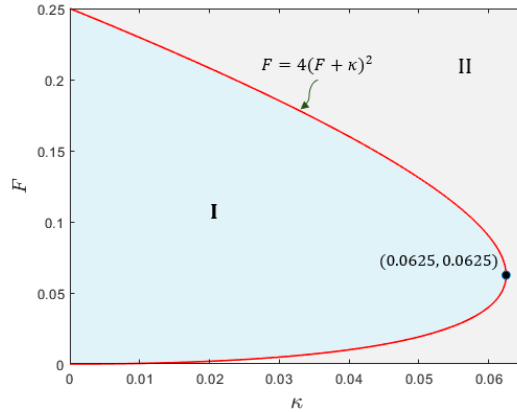


Figura 3.7.1: Región parametral para puntos de equilibrio en la reacción de Gray-Scott.

Auxiliándonos de la figura 3.7.1 y por medio de las ecuaciones (3.7.73-3.7.74) se tiene que el sistema (3.7.71-3.7.72) tendrá como único punto de equilibrio el punto  $(\mathbf{u}_1^*, \mathbf{v}_1^*)^T = (1, 0)^T$  cuando los valores  $\kappa$  y  $F$  de la reacción se encuentren en el área II de la figura 3.7.1. Esto corresponde a la desigualdad  $F > 4(F + \kappa)^2$ . El sistema tendrá dos puntos de equilibrio

$$(\mathbf{u}_1^*, \mathbf{v}_1^*)^T = (1, 0)^T \quad \text{y} \quad (\mathbf{u}_2^*, \mathbf{v}_2^*)^T = \left( \frac{1}{2}, \frac{F}{2(F + \kappa)} \right)^T. \quad (3.7.76)$$

Esto ocurrirá cuando se cumpla la igualdad  $F = 4(F + \kappa)^2$ , curva que corresponde en la figura 3.7.1 a la trazada en color rojo. Finalmente, para que se dé la existencia de los tres

<sup>3</sup>Únicamente se les multiplicó por  $\gamma$  a cada una de las reacciones respecto al modelo original.

puntos de equilibrio (3.7.73-3.7.74) en el sistema (3.7.71-3.7.72) es necesario se satisfaga la desigualdad  $F < 4(F + \kappa)^2$  cuya gráfica corresponde a la región I de la figura 3.7.1.

Realizando un análisis de estabilidad y por medio de [20] se tiene que el punto de equilibrio  $(\mathbf{u}_1^*, \mathbf{v}_1^*)^\top = (1, 0)^\top$  es estable en ausencia de difusión independientemente de los valores que puedan tomar  $F$  y  $\kappa$ , es decir, siempre es estable. Sin embargo, los otros puntos de equilibrio resultan ser inestables en ausencia de difusión. En consecuencia, los patrones generados por este sistema reacción-difusión no se presenta debido al mecanismo de inestabilidad de Turing, descrito por las ecuaciones (3.3.45-3.3.48) y esto se debe a que los patrones espaciales generados por las soluciones del sistema se deben principalmente a los términos de reacción y no de difusión como es el caso de los patrones de Turing. Así que, en sentido estricto, podemos decir que los patrones generados por el modelo de Gray-Scott *"No son patrones de Turing"*. Sin embargo, como se mencionó al principio, los patrones que genera este modelo aparecen frecuentemente en la naturaleza con una gran diversidad de formas.

Para realizar simulaciones numéricas correspondientes a este modelo, tomaremos la idea utilizada en [8] y [21] de crear un pulso para las condiciones iniciales

$$(\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0)^\top = \begin{cases} (1, 0)^\top + \varepsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}), & \text{si } \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{O}, \\ (1/2, 1/4)^\top + \varepsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}), & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{O}, \end{cases} \quad (3.7.77)$$

con  $\varepsilon = 0.1$ , es decir, consideraremos ruido aleatorio al 10%. Podemos considerar a  $\mathcal{O}$  como un rectángulo, hexágono, círculo,..., etcétera, que se encuentre inscrito en el dominio  $\Omega$ , según sea conveniente.

A manera de guía, enseguida proporcionamos una tabla de valores para el modelo de Gray-Scott, obtenida de [22], para los parámetros  $F$  y  $\kappa$  junto con el patrón que generan :

Tipo de patrón	F	$\kappa$
Ondas	0.014	0.045
Caos	0.026	0.051
Puntos y bucles	0.018	0.051
Puntos en movimiento	0.014	0.054
Caos y agujeros	0.034	0.056
Laberintos	0.029	0.057
Agujeros	0.039	0.058
Solitones pulsantes	0.025	0.060
Gusanos	0.078	0.061
Solitones	0.030	0.062

Cuadro 3.1: Tabla de valores para la reacción de Gray-Scott.

Cabe mencionar que la razón de difusividades  $\mathbf{d} = D_u/D_v$  para el modelo de Gray-Scott debe satisfacer que  $\mathbf{d} > 1$  a diferencia de los sistemas que generan patrones de Turing, pues para tales sistemas se tiene que  $\mathbf{d} < 1$ . Ésta es otra razón más, para decir que los patrones generados por este modelo no son patrones de Turing. Ahora mostramos algunas simulaciones realizadas para ciertas regiones del espacio  $\mathbb{R}^2$  :

**Cuadrado con hexágono inscrito.** Se utilizó una malla de  $160 \times 160$  que generó 25921 nodos y 51200 triángulos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.029$ ,  $\kappa = 0.057$ ,  $\gamma = 1$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 20 000 iteraciones.

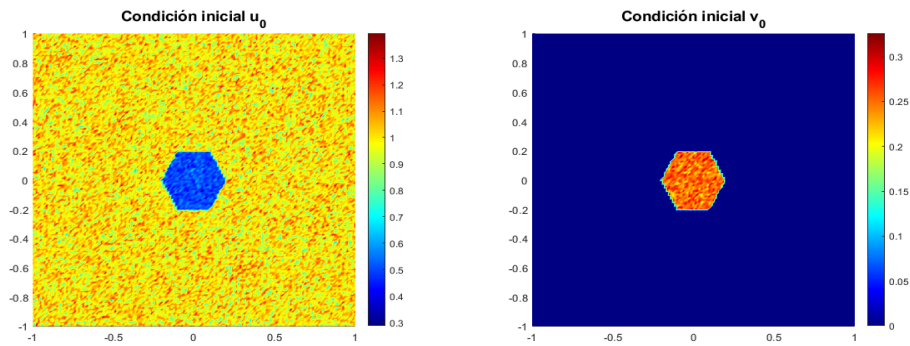


Figura 3.7.2: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

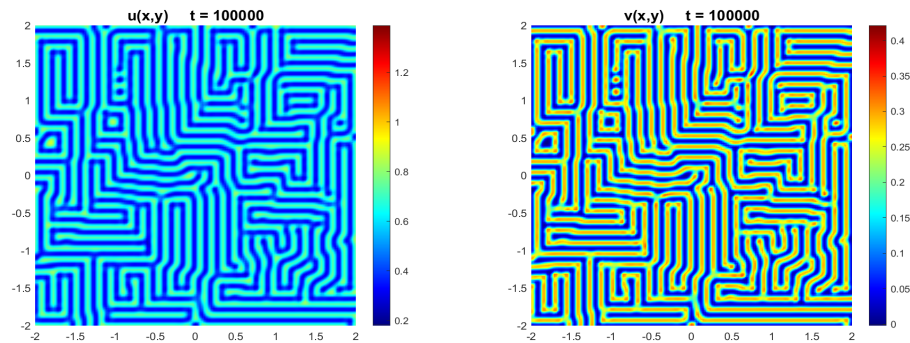


Figura 3.7.3: Concentraciones al tiempo  $t = 100\,000$ .

**Circulo con hexágono inscrito.** Se utilizó una malla que consta de 41281 nodos y 81920 elementos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.05$ ,  $\kappa = 0.063$ ,  $\gamma = 1$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 24 000 iteraciones.

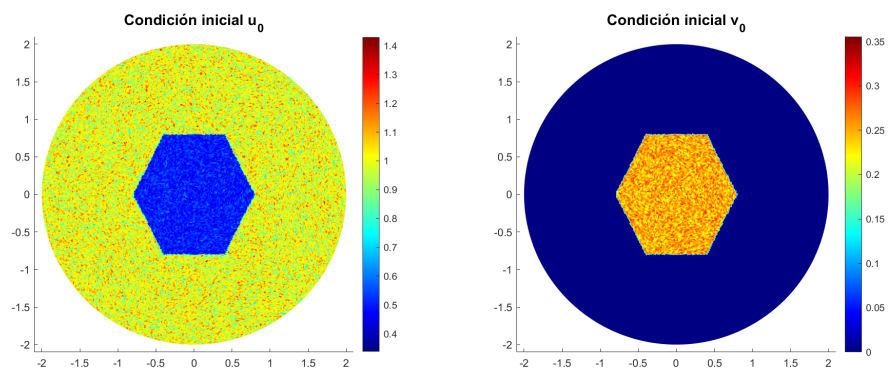


Figura 3.7.4: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).



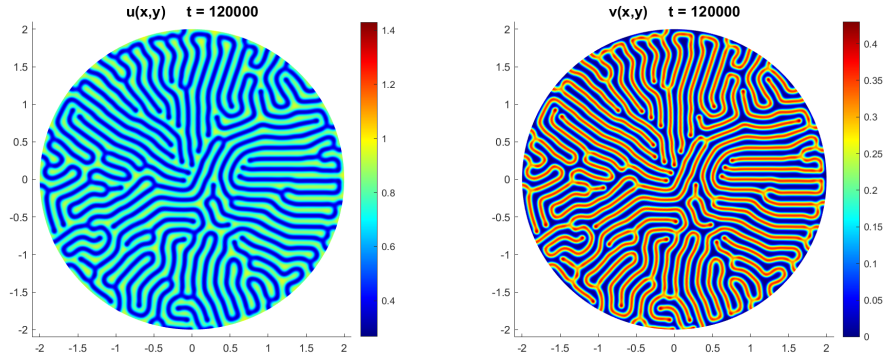


Figura 3.7.5: Concentraciones al tiempo  $t = 120\,000$ .

**Elipse rotada con hexágono inscrito.** Se utilizó una malla que consta de 41281 vértices y 81920 triángulos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.025$ ,  $\kappa = 0.060$ ,  $\gamma = 1$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

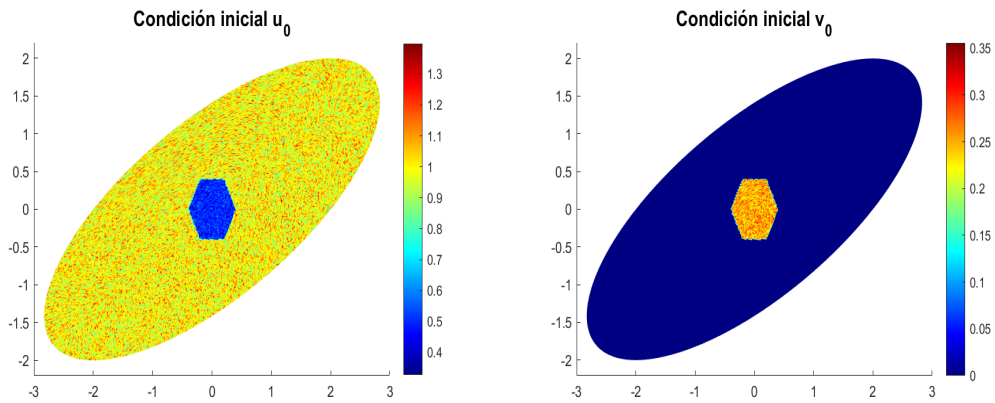


Figura 3.7.6: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

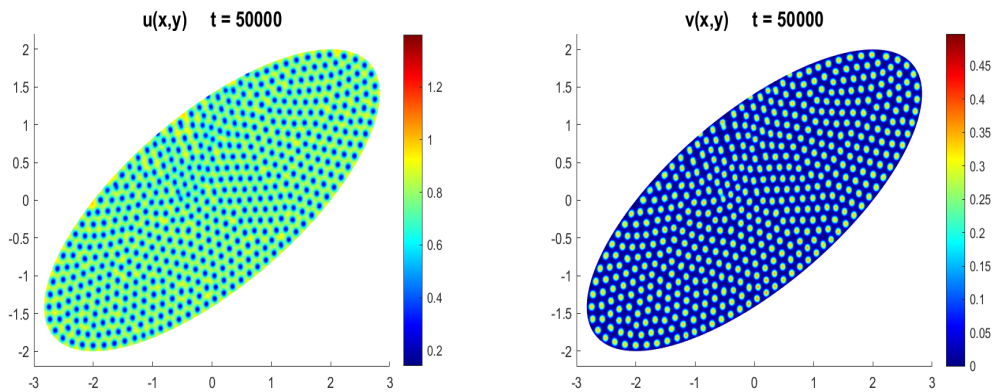


Figura 3.7.7: Concentraciones al tiempo  $t = 50\,000$ .

**Nonecágono con círculo inscrito.** Se utilizó una malla que consta de 18721 nodos y 36864 triángulos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.029$ ,  $\kappa = 0.057$ ,  $\gamma = 1$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 20 000 iteraciones.

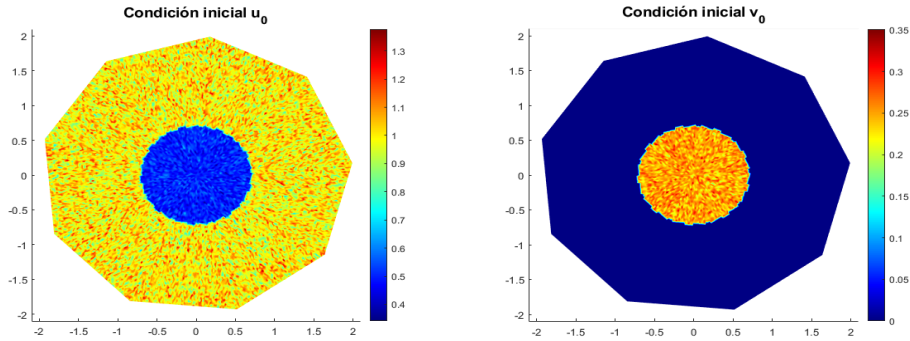


Figura 3.7.8: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

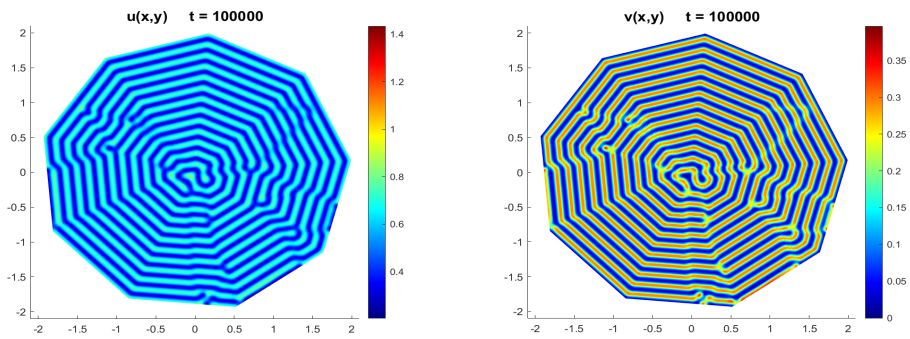


Figura 3.7.9: Concentraciones al tiempo  $t = 100\ 000$ .

**Curva  $(x - y^3)^2 + y^2 = 1$ .** Se utilizó una malla que consta de 28901 nodos y 57630 triángulos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.039$ ,  $\kappa = 0.058$ ,  $\gamma = 0,5$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 6 000 iteraciones.

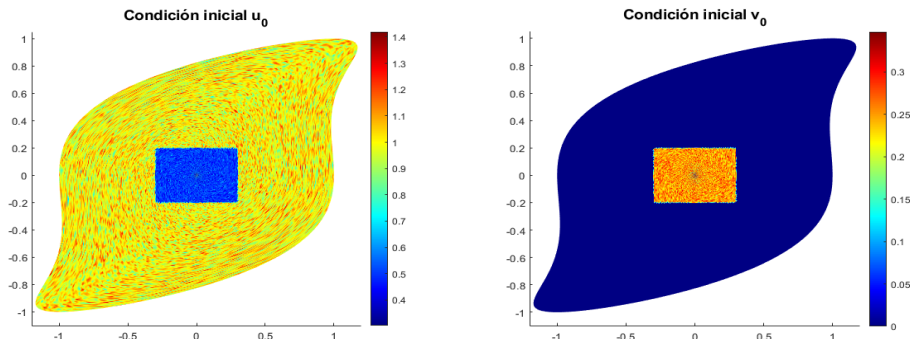


Figura 3.7.10: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

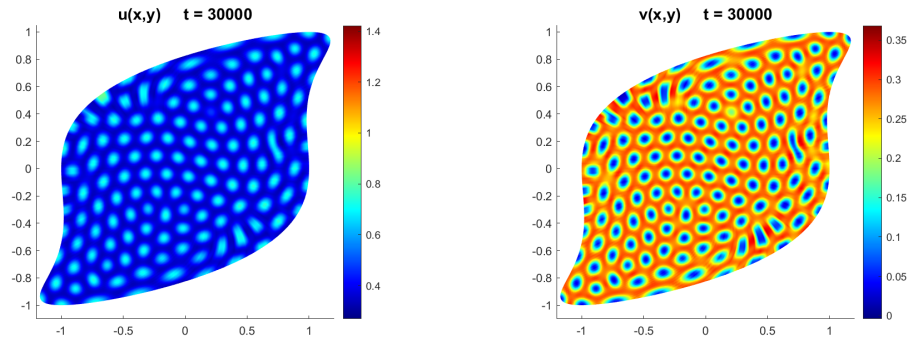


Figura 3.7.11: Concentraciones al tiempo  $t = 30\,000$ .

Curva  $(\mathbf{x} - 0.2 \sin 10\mathbf{y} - 0.3 \cos 3\mathbf{y})^2 + \mathbf{y}^2 = 1$ . Se utilizó una malla que consta de 32401 vértices y 64620 triángulos. Parámetros:  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ ,  $F = 0.05$ ,  $\kappa = 0.063$ ,  $\gamma = 1$  y  $\Delta t = 5$ . Se realizaron un total de 4000 iteraciones.

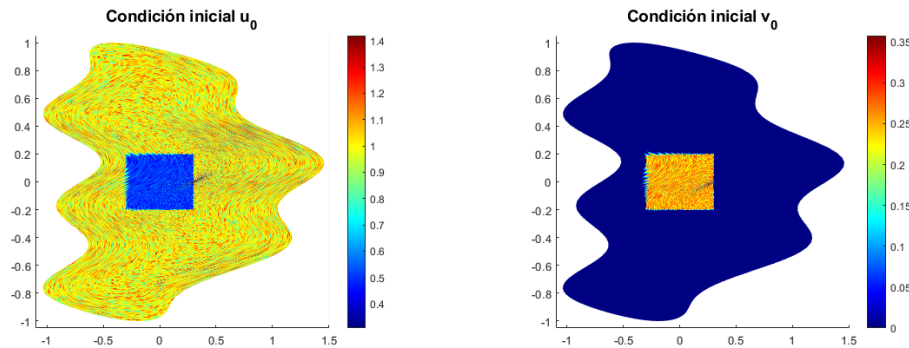


Figura 3.7.12: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

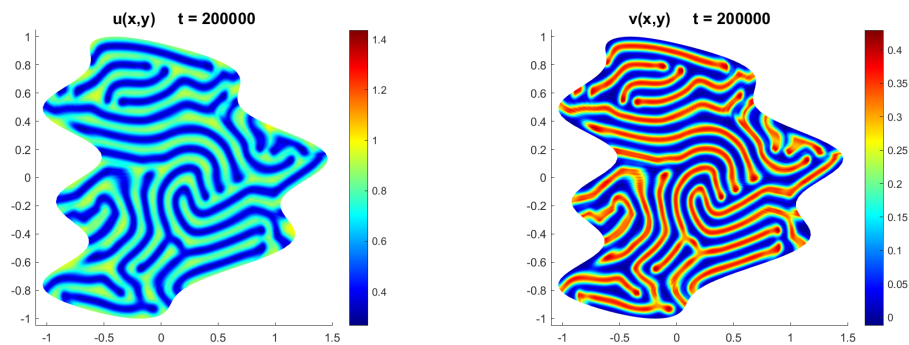


Figura 3.7.13: Concentraciones al tiempo  $t = 20\,000$ .

Para este modelo, los patrones obtenidos para diferentes valores de los parámetros de reacción fueron consistentes con las formas esperadas, tal como se establece en la tabla 3.1 Además, se observó que la implementación de pulsos en las condiciones iniciales no alteró significativamente la forma de los patrones generados en cada simulación en la que se aplicaron dichas condiciones.



# Capítulo 4

## La Ecuación de Laplace-Beltrami y el método de los elementos finitos

En este capítulo nos centraremos en dar los fundamentos para resolver de manera numérica mediante el método de elemento finito las ecuaciones de la forma

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi = f, \quad (4.0.1)$$

$$\alpha \phi - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi = f, \quad (4.0.2)$$

denominadas **ecuaciones Laplace-Beltrami** en su forma **parabólica** y **elíptica**, respectivamente. Esta metodología será la base, mediante algunas adecuaciones mínimas, que nos permitirá resolver de manera numérica los sistemas reacción-difusión que nos interesan para la generación de patrones de Turing, pero ahora sobre dominios superficiales.

Antes de presentar los fundamentos matemáticos para resolver tales ecuaciones, es necesario introducir el *operador de Laplace-Beltrami* ya que dichas ecuaciones se expresan en términos de este operador.

### 4.1. Operador Laplace-Beltrami (LBO)

El operador de Laplace-Beltrami es una generalización del operador de Laplace común, para funciones definidas sobre superficies en el espacio euclidiano y, de manera aún más general sobre superficies y variedades Riemannianas. En nuestro caso lo utilizaremos para funciones definidas sobre superficies tridimensionales en el espacio euclidiano.

**Definición 4.1.1.** Sea  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  una superficie suave,  $\hat{\mathbf{n}}$  un vector normal unitario exterior a  $\Sigma$  y  $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$  una función definida sobre  $\Sigma$  de clase  $\mathcal{C}^1$ . Se define el **gradiente tangencial** de  $\phi$  en  $\mathbf{x} \in \Sigma$  denotado por  $\nabla_{\Sigma} \phi(\mathbf{x})$ , mediante

$$\nabla_{\Sigma} \phi(\mathbf{x}) = \nabla \phi(\mathbf{x}) - \langle \nabla \phi(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{n}} \rangle \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.1.3)$$

donde  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  denota el producto interior en  $\mathbb{R}^3$ .

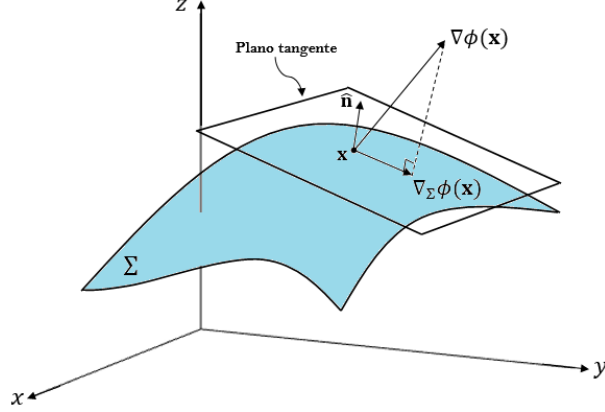


Figura 4.1.1: Gradiente tangencial  $\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x})$ .

Geoméricamente, el gradiente tangencial es la proyección ortogonal del vector gradiente  $\nabla\phi(\mathbf{x})$  sobre el plano que tiene por vector normal al vector  $\hat{\mathbf{n}}$  como lo muestra la figura 4.1.1. De esta manera, al considerar la *matriz de proyección*, dada por el producto externo  $\mathbb{P} = \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}^T$ , se tiene que  $\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x})$  también puede expresarse de la siguiente manera:

$$\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x}) = (\mathbb{I} - \mathbb{P})\nabla\phi(\mathbf{x}), \quad (4.1.4)$$

donde  $\mathbb{I}$  representa a la matriz identidad de tamaño  $3 \times 3$  e  $\mathbb{I} - \mathbb{P}$  es la *proyección ortogonal complementaria* a  $\mathbb{P}$ .

**Definición 4.1.2.** Sea  $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$  de clase  $\mathcal{C}^2$ , y

$$\nabla_{\Sigma}\phi = (D_x\phi, D_y\phi, D_z\phi)^T.$$

Se define la **divergencia tangencial** de  $\phi$  denotada por  $\text{div}_{\Sigma}\phi$ , mediante

$$\text{div}_{\Sigma}\phi = \nabla_{\Sigma} \cdot \phi = D_x\phi + D_y\phi + D_z\phi.$$

**Definición 4.1.3.** Sea  $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$  de clase  $\mathcal{C}^2$ . Definimos el **operador de Laplace-Beltrami** de  $\phi$  denotado por  $\nabla_{\Sigma}^2\phi$ , mediante

$$\nabla_{\Sigma}^2\phi = \nabla_{\Sigma} \cdot \nabla_{\Sigma}\phi,$$

o equivalentemente,  $\nabla_{\Sigma}^2\phi = \text{div}_{\Sigma}(\nabla_{\Sigma}\phi)$ . En muchos textos, se denota a este operador por  $\Delta_{\Sigma}\phi$ .

Cabe notar que cuando  $\Sigma$  es una superficie plana, el operador de Laplace-Beltrami  $\nabla_{\Sigma}^2$  es el operador de Laplace estándar  $\nabla^2$ .

Continuando con nuestros objetivos, sabemos que por medio de la segunda ley de Fick (2.2.3) podemos analizar la variación de la concentración  $\phi$  de una sustancia que se difunde "a través" de una superficie que encierra cierto volumen. La expresión matemática para esta ley, como ya se sabe es

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = D_{\Sigma}\nabla^2\phi. \quad (4.1.5)$$

Sin embargo, está ecuación que sirve para describir tal fenómeno difusivo por medio del operador de Laplace  $\nabla^2$  es útil cuando se desea estudiar dicho fenómeno, como ya se dijo, a través de la superficie, es decir, se analiza el proceso difusivo en la parte del volumen encerrado por la misma. No obstante, en nuestro caso, necesitamos estudiar dicha variación de la concentración  $\phi$  sobre la superficie  $\Sigma$  y no en su interior. Por esta razón es necesario proyectar el gradiente  $\nabla\phi$  sobre la superficie  $\Sigma$ , es decir, usar el gradiente tangencial  $\nabla_{\Sigma}\phi$  para después por medio de este, utilizar el operador de Laplace-Beltrami  $\nabla_{\Sigma}^2\phi$ , el cual actúa solamente sobre la superficie dada.

Ahora procedemos a dar algunos ejemplos de dicho operador sobre algunas superficies en específico.

**Ejemplo 4.1.1** (LBO sobre la esfera unitaria). Supongamos que  $\Sigma = \mathbb{S}^2$  es la esfera unitaria y  $\Psi$  una función de clase  $\mathcal{C}^2(\mathbb{S}^2)$ . Un vector normal unitario a  $\mathbb{S}^2$  está dado por  $\hat{\mathbf{n}} = [x \ y \ z]^T$ ; luego, la matriz de proyección ortogonal  $\mathbb{P}$  se determina mediante

$$\mathbb{P} = \hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}^T = \begin{bmatrix} x^2 & xy & xz \\ xy & y^2 & yz \\ xz & yz & z^2 \end{bmatrix}. \quad (4.1.6)$$

De esta manera, el gradiente tangencial  $\nabla_{\mathbb{S}^2}\Psi$  de  $\Psi$  es

$$\nabla_{\mathbb{S}^2}\Psi = (\mathbb{I} - \mathbb{P})\nabla\Psi = \begin{bmatrix} 1 - x^2 & -xy & -xz \\ -xy & 1 - y^2 & -yz \\ -xz & -yz & 1 - z^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial\Psi}{\partial x} \\ \frac{\partial\Psi}{\partial y} \\ \frac{\partial\Psi}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (y^2 + z^2)\frac{\partial\Psi}{\partial x} - xy\frac{\partial\Psi}{\partial y} - xz\frac{\partial\Psi}{\partial z} \\ -xy\frac{\partial\Psi}{\partial x} + (x^2 + z^2)\frac{\partial\Psi}{\partial y} - yz\frac{\partial\Psi}{\partial z} \\ -xz\frac{\partial\Psi}{\partial x} - yz\frac{\partial\Psi}{\partial y} + (x^2 + y^2)\frac{\partial\Psi}{\partial z} \end{bmatrix}$$

y, finalmente, para calcular el operador de Laplace-Beltrami  $\nabla_{\mathbb{S}^2}^2\Psi$ , aplicamos el operador nabla  $\nabla = \left[ \frac{\partial}{\partial x} \ \frac{\partial}{\partial y} \ \frac{\partial}{\partial z} \right]$  al gradiente tangencial  $\nabla_{\mathbb{S}^2}\Psi$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( (y^2 + z^2)\frac{\partial\Psi}{\partial x} - xy\frac{\partial\Psi}{\partial y} - xz\frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) = (y^2 + z^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - y\frac{\partial\Psi}{\partial y} - xy\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} - z\frac{\partial\Psi}{\partial z} - xz\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( -xy\frac{\partial\Psi}{\partial x} + (x^2 + z^2)\frac{\partial\Psi}{\partial y} - yz\frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) = -x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - xy\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial x} + (x^2 + z^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} - z\frac{\partial\Psi}{\partial z} - yz\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( -xz\frac{\partial\Psi}{\partial x} - yz\frac{\partial\Psi}{\partial y} + (x^2 + y^2)\frac{\partial\Psi}{\partial z} \right) = -x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - xz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial x} - y\frac{\partial\Psi}{\partial y} - yz\frac{\partial^2\Psi}{\partial z\partial y} + (x^2 + y^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}.$$

Entonces, debido que  $\Psi$  es de clase  $\mathcal{C}^2(\mathbb{S}^2)$ , se tiene la igualdad de derivadas parciales cruzadas; así que, al sumar estas igualdades anteriores se obtiene

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbb{S}^2}^2\Psi &= (y^2 + z^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + (x^2 + z^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + (x^2 + y^2)\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} - 2xy\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial y} - 2xz\frac{\partial^2\Psi}{\partial x\partial z} \\ &\quad - 2yz\frac{\partial^2\Psi}{\partial y\partial z} - 2x\frac{\partial\Psi}{\partial x} - 2y\frac{\partial\Psi}{\partial y} - 2z\frac{\partial\Psi}{\partial z}. \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

Ahora, proporcionamos una definición alternativa para el operador de Laplace-Beltrami, la cual, en gran variedad de textos que tratan dicho operador, parten de esta misma. A diferencia de la definición 4.1.3 en este caso el operador de Laplace-Beltrami dependerá de las coordenadas locales en las que este expresada la superficie  $\Sigma$ . La definición es la siguiente

**Definición 4.1.4** (LBO en coordenadas locales). Sea  $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$  de clase  $\mathcal{C}^2$ , con  $\Sigma$  una superficie  $\mathbf{r}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$  con parámetros  $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}$ ,  $\mathbf{u}_2 = \mathbf{v}$  y tensor métrico (matriz)  $(g_{ij}) = (\partial \mathbf{r} / \partial \mathbf{u}_i \cdot \partial \mathbf{r} / \partial \mathbf{u}_j)$  para  $i, j = 1, 2$ . Denotamos  $g = \det(g_{ij})$ ,  $(g^{ij}) = (g_{ij})^{-1}$ . El **operador de Laplace-Beltrami** de una función  $\phi$  actuando sobre la superficie  $\Sigma$  se define como:

$$\nabla_{\Sigma}^2 \phi = \sum_{i,j=1}^2 \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} \left( \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}_j} \right). \quad (4.1.8)$$

Utilizando la notación de Einstein para la suma reescribimos este operador como

$$\nabla_{\Sigma}^2 \phi = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}_i} \left( \sqrt{g} g^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}_j} \right). \quad (4.1.9)$$

En [36] (secc. 1.4) se hace un estudio detallado del operador de Laplace y simultáneamente del operador de Laplace-Beltrami partiendo de la definición 4.1.3. A través de una serie de resultados se demuestra que el LBO calculado en 4.1.3 también se puede calcular mediante 4.1.4 utilizando coordenadas locales de  $\Sigma$ .

**Ejemplo 4.1.2** (LBO sobre la esfera unitaria en coordenadas esféricas). Calcularemos el LBO de una función  $\Psi$  de clase  $\mathcal{C}^2(\mathbb{S}^2)$  en donde  $\mathbb{S}^2$  está dada en coordenadas esféricas:

$$x = \cos \phi \sin \theta, \quad (4.1.10)$$

$$y = \sin \phi \sin \theta, \quad (4.1.11)$$

$$z = \cos \theta, \quad 0 < \theta < \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi. \quad (4.1.12)$$

Tenemos

$$\mathbf{r}(\theta, \phi) = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)^T, \quad (4.1.13)$$

con

$$\mathbf{r}_{\theta} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = (\cos \phi \cos \theta, \sin \phi \cos \theta, -\sin \theta)^T,$$

$$\mathbf{r}_{\phi} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = (-\sin \phi \sin \theta, \cos \phi \sin \theta, 0)^T.$$

Luego,

$$g_{\theta\theta} = \mathbf{r}_{\theta}^T \mathbf{r}_{\theta} = 1, \quad g_{\phi\phi} = \mathbf{r}_{\phi}^T \mathbf{r}_{\phi} = \sin^2 \theta, \quad g_{\theta\phi} = g_{\phi\theta} = \mathbf{r}_{\theta}^T \mathbf{r}_{\phi} = 0.$$

Entonces,

$$(g_{ij}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2 \theta \end{bmatrix}, \quad (g^{ij}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sin^2 \theta} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad g = \sin^2 \theta, \quad \text{con } i, j = \theta, \phi.$$



Por lo tanto, de acuerdo a (4.1.8) se tiene que

$$\nabla_{\mathbb{S}^2}^2 \Psi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2}. \quad (4.1.14)$$

**Ejemplo 4.1.3.** Ahora utilizaremos las ecuaciones (4.1.7) y (4.1.14) para el operador de Laplace-Beltrami para mostrar que la función  $u(x, y, z) = xyz$  es solución exacta del problema elíptico

$$-\nabla_{\Sigma}^2 u = 12xyz \quad (4.1.15)$$

con dominio  $\Sigma = \mathbb{S}^2$  la esfera unitaria. Las derivadas parciales de  $u$  son :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= yz, & \frac{\partial u}{\partial y} &= xz, & \frac{\partial u}{\partial z} &= xy, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} &= z, & \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} &= y, & \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial z} &= x, \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = 0. \end{aligned}$$

Por lo tanto, de (4.1.7) se tiene que  $\nabla_{\Sigma}^2 u = -12xyz$  y, en consecuencia,  $-\nabla_{\Sigma}^2 u = 12xyz$ .

Ahora, para (4.1.14) expresamos  $u$  en coordenadas esféricas por medio de las relaciones (4.1.10-4.1.12). Tenemos  $u(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta \cos \theta \sin 2\phi$ , entonces

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial \theta} &= \frac{1}{2} \sin \theta \sin 2\phi (3\cos^2 \theta - 1), & \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) &= \cos \theta \sin 2\phi (3\cos 2\theta - 1), \\ \frac{\partial u}{\partial \phi} &= \sin^2 \theta \cos \theta \cos 2\phi, & \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} &= -2\cos \theta \sin 2\phi. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \nabla_{\Sigma}^2 u &= 3 \cos \theta \sin 2\phi (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta - 1) = 12 \cos \theta \sin \phi \cos \phi (\cos^2 \theta - 1) \\ &= -\frac{12xyz}{z^2 - 1} (z^2 - 1) = -12xyz. \end{aligned}$$

Esto es,  $-\nabla_{\Sigma}^2 u = 12xyz$ . Notamos además que para ambos métodos los resultados coinciden.

El siguiente ejemplo se basa en [38], para el cual se proporcionan soluciones exactas de la ecuación Laplace-Beltrami en su forma elíptica sobre una superficie toroidal y un cilindro circular recto sin tapas.

**Ejemplo 4.1.4** (LBO sobre un toroide). Vamos a obtener la fórmula del operador de Laplace-Beltrami para una función  $\Psi$  de clase  $\mathcal{C}^2(\Sigma)$  con  $\Sigma = \mathbb{T}$  un toroide de radios mayor y menor,  $R > 0$  y  $r > 0$ , respectivamente, cuya parametrización está dada por

$$x = (R + r \cos \theta) \cos \phi, \quad (4.1.16)$$

$$y = (R + r \cos \theta) \sin \phi, \quad (4.1.17)$$

$$z = r \sin \theta, \quad (4.1.18)$$

donde  $\theta, \phi \in [0, 2\pi)$ .

Hacemos

$$\mathbf{r}(\theta, \phi) = ((R + r \cos \theta) \cos \phi, (R + r \cos \theta) \sin \phi, r \sin \theta)^\top, \quad (4.1.19)$$

con

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_\theta &= \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \theta} = (-r \sin \theta \cos \phi, -r \sin \theta \sin \phi, r \cos \theta)^\top, \\ \mathbf{r}_\phi &= \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \phi} = (-(R + r \cos \theta) \sin \phi, (R + r \cos \theta) \cos \phi, 0)^\top. \end{aligned}$$

Luego,

$$g_{\theta\theta} = \mathbf{r}_\theta^\top \mathbf{r}_\theta = r^2, \quad g_{\phi\phi} = \mathbf{r}_\phi^\top \mathbf{r}_\phi = (R + r \cos \theta)^2, \quad g_{\theta\phi} = g_{\phi\theta} = \mathbf{r}_\theta^\top \mathbf{r}_\phi = 0.$$

Entonces,

$$(g_{ij}) = \begin{bmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & (R + r \cos \theta)^2 \end{bmatrix}, \quad (g^{ij}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{(R + r \cos \theta)^2} \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad g = r^2 (R + r \cos \theta)^2,$$

con  $i, j = \theta, \phi$ . Por lo tanto, de acuerdo a (4.1.8) se tiene que

$$\nabla_{\mathbb{T}}^2 \Psi = \frac{1}{r^2 (R + r \cos \theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( (R + r \cos \theta) \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{(R + r \cos \theta)^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2}. \quad (4.1.20)$$

Expandiendo las derivadas parciales, obtenemos

$$\nabla_{\mathbb{T}}^2 \Psi = -\frac{\sin \theta}{r(R + r \cos \theta)} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} + \frac{1}{(R + r \cos \theta)^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2}. \quad (4.1.21)$$

• Ahora, mostraremos que la función  $\mathbf{u}(x, y, z) = z$  es solución exacta de la ecuación

$$-\nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u} = \frac{z}{r^2} (2 - R(x^2 + y^2)^{-1/2}), \quad (4.1.22)$$

con  $\Sigma = \mathbb{T}$  la superficie toroidal considerada anteriormente. En términos de los ángulos  $\phi$  y  $\theta$  se tiene que  $\mathbf{u}(\phi, \theta) = r \cos \theta$ ; luego, de acuerdo a (4.1.21) se tiene que

$$\begin{aligned} \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u} &= -\frac{\sin \theta}{r(R + r \cos \theta)} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} \\ &= -\frac{\sin \theta}{r} \left[ \frac{2r \cos \theta + R}{R + r \cos \theta} + \frac{R}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right] = -\frac{z}{r^2} \left[ 2 - \frac{R}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right], \end{aligned}$$

ya que por medio de (4.1.16-4.1.18) se tiene que  $\frac{2r \cos \theta + R}{R + r \cos \theta} = 2 - \frac{2R}{\sqrt{x^2 + y^2}}$ ,  $R + r \cos \theta = \sqrt{x^2 + y^2}$  y  $\sin \theta = z/r$ .

## 4.2. Formulación parabólica

Sea  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  una superficie. Supongamos que  $\phi(\mathbf{x}, t)$  representa la concentración de una sustancia que se difunde en un medio a través de  $\Sigma$  al tiempo  $t$ . Se requiere resolver

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi = f, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \times (0, T), \quad (4.2.23)$$

$$\phi(\mathbf{x}, 0) = \phi_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma, \quad (4.2.24)$$

$$(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})\phi = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Sigma, \quad (4.2.25)$$

con  $\rho, T > 0$  y  $\phi_0(\mathbf{x})$  es la condición inicial.  $D_{\Sigma} > 0$  es el coeficiente de difusión y  $\nabla_{\Sigma}^2$  es el operador de *Laplace-Beltrami* definido en la sección anterior.

Para obtener una solución mediante aproximación numérica de este problema, procedemos primero a realizar la discretización del mismo por medio del método de Euler implícito.

Discretizamos el intervalo  $[0, T]$  mediante  $t_n = n \Delta t$  con  $\Delta t > 0$  la longitud de cada subintervalo temporal y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Dada la condición inicial  $\phi_0(\mathbf{x})$ , suponiendo que  $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x})$ ,  $\phi^1(\mathbf{x}) \approx \phi(\mathbf{x}, \Delta t)$ ,  $\phi^2(\mathbf{x}) \approx \phi(\mathbf{x}, 2\Delta t)$ ,  $\dots$ ,  $\phi^n(\mathbf{x}) \approx \phi(\mathbf{x}, n\Delta t)$ , podemos calcular una aproximación para  $\phi^{n+1}(\mathbf{x})$  resolviendo el sistema

$$\rho \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi^{n+1} = f^n, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (4.2.26)$$

y condición inicial  $\phi^0(\mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x})$ . Entonces, al hacer  $\phi = \phi^{n+1}$ ,  $\alpha = \rho/\Delta t$  y  $f = f^n + \alpha \phi^n$  se tiene que en cada paso de tiempo  $t \geq 1$  debemos resolver un problema de la forma

$$\alpha \phi - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi = f, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (4.2.27)$$

$$(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})\phi = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Sigma. \quad (4.2.28)$$

denominado **sistema elíptico** sobre la superficie  $\Sigma$ .

Para resolver (4.2.27-4.2.28) consideramos el problema en su forma variacional: encontrar  $\phi \in \mathcal{H}^1(\Sigma)$  tal que para todo  $v \in \mathcal{H}^1(\Sigma)$  se cumple

$$\alpha \int_{\Sigma} \phi v \, d\Sigma + D_{\Sigma} \int_{\Sigma} \nabla_{\Sigma} \phi \cdot \nabla_{\Sigma} v \, d\Sigma = \int_{\Sigma} f v \, d\Sigma, \quad (4.2.29)$$

donde

$$\mathcal{H}^1(\Sigma) = \left\{ v \in \mathcal{L}^2(\Sigma) : \int_{\Sigma} |\nabla_{\Sigma} v|^2 \, d\Sigma < \infty \right\} \quad (4.2.30)$$

y  $d\Sigma$  representa la diferencial de superficie.

**Observación 4.2.1.** Si la superficie  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  es cerrada (i.e.,  $\partial\Sigma = \emptyset$ ) o no cerrada (i.e.,  $\partial\Sigma \neq \emptyset$ ) siempre trataremos con la formulación variacional (4.2.29) debido a que, para el caso en el cual  $\Sigma$  sea no cerrada, se aplicarán condiciones tipo Neumann homogéneas a la frontera  $\partial\Sigma$ .

**Nota.** La función  $f$  en (4.2.23-4.2.25) debe pertenecer al espacio  $\mathcal{H}^1(\Sigma)$  y cuando  $\rho = 0$ , cumplir la condición de compatibilidad con el dominio  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ , es decir:

$$\int_{\Sigma} f \, d\Sigma = 0. \quad (4.2.31)$$

Esta condición es necesaria porque en este caso se tiene un problema elíptico del tipo Neumann puro. Dicho problema tiene solución si, y solo si, se satisface la condición de compatibilidad anterior. Además, es importante señalar que la solución no es única, ya que si  $\phi$  es una solución del problema, entonces  $\phi + c$  con  $c \in \mathbb{R}$  también lo es. Sin embargo, podemos pensar que la solución es única salvo constantes considerando que la solución  $\phi$  pertenece al espacio cociente  $\mathcal{H}^1(\Sigma)/\mathbb{R}$ . Para más detalles, puede consultarse [19].

### 4.2.1. Aproximación del problema variacional

En el capítulo 5 daremos un breve desarrollo para la generación de mallas triangulares sobre superficies y las características que deben satisfacer. Denotamos con  $\mathbb{P}_1$  al conjunto de polinomios en dos variables de grado 1. Dada una malla triangular  $\mathcal{T}_h$  que aproxima a la superficie  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ , es decir,

$$\Sigma \approx \bigcup_{e=1}^{N_e} T_e,$$

donde  $T_e$  denota e-ésimo triángulo o elemento en  $\mathcal{T}_h$  y  $N_e$  el número total de ellos, aproximamos  $\mathcal{H}^1(\Sigma)$  mediante el espacio finito-dimensional de funciones lineales por tramos:

$$\mathcal{V}_h = \left\{ v \in \mathcal{C}^0(\widehat{\Sigma}) : v|_{T_e} \in \mathbb{P}_1, \forall T_e \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (4.2.32)$$

donde  $\widehat{\Sigma}$  es la discretización de  $\Sigma$  mediante la triangularización  $\mathcal{T}_h$ . Denotamos con  $\mathcal{V}_h$  el conjunto de vértices de  $\mathcal{T}_h$ .

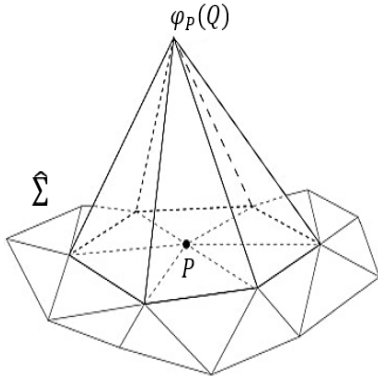


Figura 4.2.1: Funciones piramidales.

Para cada  $P \in \mathcal{V}_h$  consideraremos la función piramidal  $\varphi_P$  perteneciente a  $\mathcal{V}_h$  que cumple la siguiente propiedad básica para cada vértice  $Q \in \mathcal{V}_h$

$$\varphi_P(Q) = \begin{cases} 1 & \text{si } Q = P, \\ 0 & \text{si } Q \neq P. \end{cases}$$

Estas funciones piramidales  $\varphi_P$  con  $P \in \mathcal{V}_h$  forman una base del espacio de funciones  $\mathcal{V}_h$  que aproxima a  $\mathcal{H}^1(\Sigma)$ .

Es decir,

$$\beta_h = \{\varphi_P : P \in \mathcal{V}_h\},$$

es una base de  $V_h$ . Denotamos con

$$N_I = \dim V_h = \#(\mathcal{V}_h) = \text{Número de vértices en la triangulación } \mathcal{T}_h.$$

Ahora podemos discretizar el problema variacional (4.2.29) de la siguiente manera :

Encontrar  $\phi_h \in V_h$  tal que

$$\alpha \int_{\hat{\Sigma}} \phi_h v_h d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \phi_h \cdot \nabla_\Sigma v_h d\Sigma = \int_{\hat{\Sigma}} f v_h d\Sigma, \quad \forall v_h \in V_h. \quad (4.2.33)$$

Como esta formulación es válida para cada  $v_h \in V_h$ , en particular, lo es también para cada función piramidal  $\varphi_P$  de la base. Además, al expresar  $\phi_h \in V_h$  como combinación lineal de las funciones piramidales

$$\phi_h(\mathbf{x}) = \sum_{P \in \mathcal{V}_h} \phi_h(P) \varphi_P(\mathbf{x}), \quad (4.2.34)$$

se tiene la reformulación de (4.2.33) en términos de las funciones piramidales  $\varphi_P$  :

$$\sum_{P \in \mathcal{V}_h} \left( \alpha \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_P \varphi_Q d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_P \cdot \nabla_\Sigma \varphi_Q d\Sigma \right) \phi_h(P) = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_Q d\Sigma, \quad \forall Q \in \mathcal{V}_h. \quad (4.2.35)$$

El problema variacional también se puede expresar en la siguiente forma. Encontrar los valores  $\phi_i = \phi_h(P_i)$ ,  $i = 1, 2, \dots, N_I$  tales que

$$\sum_{i=1}^{N_I} \left( \alpha \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_i \cdot \nabla_\Sigma \varphi_j d\Sigma \right) \phi_i = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_j d\Sigma, \quad \forall j = 1, 2, \dots, N_I. \quad (4.2.36)$$

Expresado en forma matricial se obtiene

$$(\alpha \mathbb{M} + D_\Sigma \mathbb{K}) \boldsymbol{\Phi} = \mathbf{F}, \quad (4.2.37)$$

donde  $\boldsymbol{\Phi}$  es el vector de incógnitas  $\{\phi_i\}$ ,  $\mathbb{M} = (M_{ij})$ ,  $\mathbb{K} = (K_{ij})$  y  $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_{N_I})^T$ , con

$$M_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma, \quad (4.2.38)$$

$$K_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_i \cdot \nabla_\Sigma \varphi_j d\Sigma, \quad (4.2.39)$$

$$F_j = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_j d\Sigma, \quad (4.2.40)$$

donde  $\mathbb{M}$  y  $\mathbb{K}$  corresponden a la **matriz de masa** y la **matriz de rigidez**, respectivamente y a  $\mathbf{F}$  se le conoce como **vector de carga**. Utilizando la **propiedad de sumabilidad de las integrales**, obtenemos

$$M_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{T_e} \varphi_i \varphi_j dT_e, \quad (4.2.41)$$

$$K_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_i \cdot \nabla_\Sigma \varphi_j d\Sigma = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{T_e} \nabla_{T_e} \varphi_i \cdot \nabla_{T_e} \varphi_j dT_e, \quad (4.2.42)$$

donde  $\mathcal{T}_h^{ij}$  representa a los elementos triangulares que contienen a los vértices adyacentes  $P_i, P_j$  y  $\nabla_{T_e}$  es el gradiente tangencial sobre el triángulo  $T_e$ .

#### 4.2.2. Construcción de las funciones base en cada elemento

Para cada  $e = 1, 2, \dots, N_e$ , con  $N_e$  el número de elementos triangulares en la malla  $\mathcal{T}_h$ , el triángulo  $T_e \in \mathcal{T}_h$  tiene por vértices los puntos  $P_1^e, P_2^e$  y  $P_3^e$  cuyas coordenadas están dadas por  $(x_1^e, y_1^e, z_1^e)$ ,  $(x_2^e, y_2^e, z_2^e)$  y  $(x_3^e, y_3^e, z_3^e)$ , respectivamente. Consideramos la **matriz de conectividades**  $\{g(e, \lambda)\}$  para  $1 \leq e \leq N_e$  y  $1 \leq \lambda \leq 3$  que relaciona la numeración global de los nodos  $\mathcal{V}_h$  de  $\mathcal{T}_h$  con la numeración local  $\lambda = 1, 2, 3$  de los vértices de cada  $T_e$ , en donde  $i = g(e, 1)$ ,  $j = g(e, 2)$  y  $k = g(e, 3)$ . De esta manera una función piramidal  $\varphi_i$  restringida al elemento  $T_e$  la podemos denotar mediante

$$\varphi_\lambda^e(\mathbf{x}) = \varphi_i(\mathbf{x})|_{T_e}, \quad \text{si } i = g(e, \lambda),$$

denominada **función de forma**.

**Propiedades de las funciones de forma** Enseguida mostramos algunas propiedades que destacan a las funciones de forma.

**Proposición 4.2.1.** Para cada  $e = 1, 2, \dots, N_e$  y para todo  $\lambda = 1, 2, 3$ , la función de forma  $\varphi_\lambda^e$  sobre el triángulo  $T_e$  satisface :

- (a)  $\varphi_\lambda^e$  es un polinomio en las variables  $x, y, z$  de grado  $\leq 1$  sobre  $T_e$ .
- (b)  $\varphi_\lambda^e(x_\mu^e, y_\mu^e, z_\mu^e) = \delta_{\lambda\mu}$ , con  $1 \leq \lambda, \mu \leq 3$  y  $\delta_{\lambda\mu}$  es la delta de Kronecker.
- (c) Para todo punto  $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$  se tiene que

$$\varphi_1^e(\mathbf{x}) + \varphi_2^e(\mathbf{x}) + \varphi_3^e(\mathbf{x}) = 1. \quad (4.2.43)$$

Si además,  $\mathbf{x} \in T_e$  entonces,  $\mathbf{x}$  se puede expresar como promedio ponderado de los vértices del triángulo con pesos determinados por la funciones de forma. Es decir,

$$(x, y, z)^T = \varphi_1^e(\mathbf{x})P_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x})P_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x})P_3^e. \quad (4.2.44)$$

*Demostración.* Los incisos (a) y (b) son consecuencia inmediata de la definición de las funciones de forma. Para demostrar (c) consideremos

$$\varphi_\lambda^e(x, y, z) = \mathbf{a}_{\lambda,0} + \mathbf{a}_{\lambda,1}x + \mathbf{a}_{\lambda,2}y + \mathbf{a}_{\lambda,3}z. \quad (4.2.45)$$

Para cada  $\lambda, \mu = 1, 2, 3$  se tiene que  $\varphi_\lambda^e(P_\mu^e) = \delta_{\lambda\mu}$ , de donde obtenemos el sistema lineal de  $3 \times 4$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_{\lambda,0} + \mathbf{a}_{\lambda,1}x_1^e + \mathbf{a}_{\lambda,2}y_1^e + \mathbf{a}_{\lambda,3}z_1^e &= 1 \\ \mathbf{a}_{\lambda,0} + \mathbf{a}_{\lambda,1}x_2^e + \mathbf{a}_{\lambda,2}y_2^e + \mathbf{a}_{\lambda,3}z_2^e &= 1 \\ \mathbf{a}_{\lambda,0} + \mathbf{a}_{\lambda,1}x_3^e + \mathbf{a}_{\lambda,2}y_3^e + \mathbf{a}_{\lambda,3}z_3^e &= 1 \end{aligned}$$

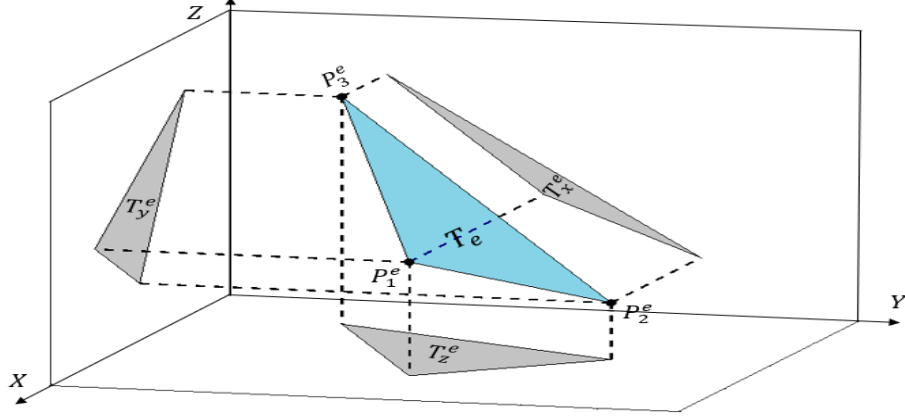


Figura 4.2.2: Triángulo  $T_e$  y sus proyecciones triangulares.

Resolvemos el sistema en términos de  $\alpha_{\lambda,0}$ , es decir, los coeficientes  $\alpha_{\lambda,1}$ ,  $\alpha_{\lambda,2}$ ,  $\alpha_{\lambda,3}$  van a depender del valor de  $\alpha_{\lambda,0}$ . Se tiene que

$$\begin{aligned} \Delta^e &= \begin{vmatrix} x_1^e & y_1^e & z_1^e \\ x_2^e & y_2^e & z_2^e \\ x_3^e & y_3^e & z_3^e \end{vmatrix} = x_1^e(y_2^e z_3^e - y_3^e z_2^e) + y_1^e(x_3^e z_2^e - x_2^e z_3^e) + z_1^e(x_2^e y_3^e - x_3^e y_2^e) \\ &= 2(x_1^e A_x^e + y_1^e A_y^e + z_1^e A_z^e), \end{aligned} \quad (4.2.46)$$

donde  $A_x^e$ ,  $A_y^e$ ,  $A_z^e$  son las áreas respectivas (ver [17], pág. 365) de los triángulos  $T_x^e$ ,  $T_y^e$ ,  $T_z^e$  mostrados en la figura 4.2.2. Tales triángulos corresponden a las proyecciones del triángulo  $T_e$  sobre los planos  $YZ$ ,  $XZ$  y  $XY$ , respectivamente. Por otro lado, tenemos

$$\begin{aligned} \Delta a_{1,1} &= \begin{vmatrix} 1 - a_{1,0} & y_1^e & z_1^e \\ -a_{1,0} & y_2^e & z_2^e \\ -a_{1,0} & y_3^e & z_3^e \end{vmatrix} = (y_2^e z_3^e - y_3^e z_2^e) - 2a_{1,0} A_x^e, \\ \Delta a_{1,2} &= \begin{vmatrix} x_1^e & 1 - a_{1,0} & z_1^e \\ x_2^e & -a_{1,0} & z_2^e \\ x_3^e & -a_{1,0} & z_3^e \end{vmatrix} = (x_3^e z_2^e - x_2^e z_3^e) - 2a_{1,0} A_y^e, \\ \Delta a_{1,3} &= \begin{vmatrix} x_1^e & y_1^e & 1 - a_{1,0} \\ x_2^e & y_2^e & -a_{1,0} \\ x_3^e & y_3^e & -a_{1,0} \end{vmatrix} = (x_2^e y_3^e - x_3^e y_2^e) - 2a_{1,0} A_z^e. \end{aligned}$$

Similarmente, se tiene que

$$\begin{aligned} \Delta a_{2,1} &= (y_3^e z_1^e - y_1^e z_3^e) - 2a_{2,0} A_x^e, & \Delta a_{2,2} &= (x_1^e z_3^e - x_3^e z_1^e) - 2a_{2,0} A_y^e, \\ \Delta a_{2,3} &= (x_3^e y_1^e - x_1^e y_3^e) - 2a_{2,0} A_z^e, & \Delta a_{3,1} &= (y_1^e z_2^e - y_2^e z_1^e) - 2a_{3,0} A_x^e, \\ \Delta a_{3,2} &= (x_2^e z_1^e - x_1^e z_2^e) - 2a_{3,0} A_y^e, & \Delta a_{3,3} &= (x_1^e y_2^e - x_2^e y_1^e) - 2a_{3,0} A_z^e. \end{aligned}$$

Entonces,

$$\begin{aligned}\varphi_1^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) &= \mathbf{a}_{1,0} + \frac{1}{\Delta^e} \{ [(y_2^e z_3^e - y_3^e z_2^e) - 2\mathbf{a}_{1,0} \mathcal{A}_x^e] x + [(x_3^e z_2^e - x_2^e z_3^e) - 2\mathbf{a}_{1,0} \mathcal{A}_y^e] y \\ &\quad + [(x_2^e y_3^e - x_3^e y_2^e) - 2\mathbf{a}_{1,0} \mathcal{A}_z^e] z \}, \\ \varphi_2^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) &= \mathbf{a}_{2,0} + \frac{1}{\Delta^e} \{ [(y_3^e z_1^e - y_1^e z_3^e) - 2\mathbf{a}_{2,0} \mathcal{A}_x^e] x + [(x_1^e z_3^e - x_3^e z_1^e) - 2\mathbf{a}_{2,0} \mathcal{A}_y^e] y \\ &\quad + [(x_3^e y_1^e - x_1^e y_3^e) - 2\mathbf{a}_{2,0} \mathcal{A}_z^e] z \}, \\ \varphi_3^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) &= \mathbf{a}_{3,0} + \frac{1}{\Delta^e} \{ [(y_1^e z_2^e - y_2^e z_1^e) - 2\mathbf{a}_{3,0} \mathcal{A}_x^e] x + [(x_2^e z_1^e - x_1^e z_2^e) - 2\mathbf{a}_{3,0} \mathcal{A}_y^e] y \\ &\quad + [(x_1^e y_2^e - x_2^e y_1^e) - 2\mathbf{a}_{3,0} \mathcal{A}_z^e] z \}.\end{aligned}$$

Vemos que hay una infinidad de funciones de forma que satisfacen las condiciones requeridas ya que  $\mathbf{a}_{\lambda,0} \in \mathbb{R}$  por ser variable libre para cada  $\lambda = 1, 2, 3$ . Entonces, restringiremos un poco los valores para los coeficientes  $\mathbf{a}_{\lambda,0}$  y consideramos a aquellos que cumplan la condición  $\mathbf{a}_{1,0} + \mathbf{a}_{2,0} + \mathbf{a}_{3,0} = 1$ . Por lo tanto, al suponer tal igualdad se tiene que

$$\begin{aligned}\varphi_1^e(\mathbf{x}) + \varphi_2^e(\mathbf{x}) + \varphi_3^e(\mathbf{x}) &= (\mathbf{a}_{1,0} + \mathbf{a}_{2,0} + \mathbf{a}_{3,0}) + \frac{1}{\Delta^e} \{ 2\mathcal{A}_x^e - 2(\mathbf{a}_{1,0} + \mathbf{a}_{2,0} + \mathbf{a}_{3,0})\mathcal{A}_x^e \} \\ &\quad + \frac{1}{\Delta^e} \{ 2\mathcal{A}_y^e - 2(\mathbf{a}_{1,0} + \mathbf{a}_{2,0} + \mathbf{a}_{3,0})\mathcal{A}_y^e \} \\ &\quad + \frac{1}{\Delta^e} \{ 2\mathcal{A}_z^e - 2(\mathbf{a}_{1,0} + \mathbf{a}_{2,0} + \mathbf{a}_{3,0})\mathcal{A}_z^e \} \\ &= 1.\end{aligned}$$

Adicionalmente, puesto que las funciones de forma  $\varphi_\lambda^e$  son funciones afines, entonces son funciones cóncavas y convexas a la vez y, por lo tanto, sus valores mínimo y máximos absolutos se encuentran en algún vértice del triángulo  $\mathcal{T}_e$ , pues  $\mathcal{T}_e$  es una región convexa. En consecuencia, se tiene que  $\varphi_\lambda^e(\mathbf{x}) \in [0, 1]$  para todo  $\lambda = 1, 2, 3$  y  $\mathbf{x} \in \mathcal{T}_e$ . De esta manera, las funciones de forma  $\varphi_\lambda^e$  actúan como las *coordenadas baricéntricas* del triángulo  $\mathcal{T}_e$ . Por lo tanto, cada  $\mathbf{x} \in \mathcal{T}_e$  puede ser expresado como promedio ponderado de las funciones de forma, es decir,

$$\mathbf{x} = \varphi_1^e(\mathbf{x})\mathbf{P}_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x})\mathbf{P}_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x})\mathbf{P}_3^e,$$

como se quería demostrar. □

**Elemento de referencia y transformación afín.** Consideremos el triángulo rectángulo unitario  $\widehat{\mathcal{T}}$  (denominado **triángulo** o **elemento de referencia**) en las coordenadas  $\xi$ - $\eta$  y un elemento triangular  $\mathcal{T}_e \in \mathcal{T}_h$  en el sistema cartesiano  $\mathbf{x}$ - $\mathbf{y}$ - $\mathbf{z}$  cuyos vértices son  $\mathbf{P}_1^e = (x_1^e, y_1^e, z_1^e)^\top$ ,  $\mathbf{P}_2^e = (x_2^e, y_2^e, z_2^e)^\top$  y  $\mathbf{P}_3^e = (x_3^e, y_3^e, z_3^e)^\top$  como en la figura 4.2.3



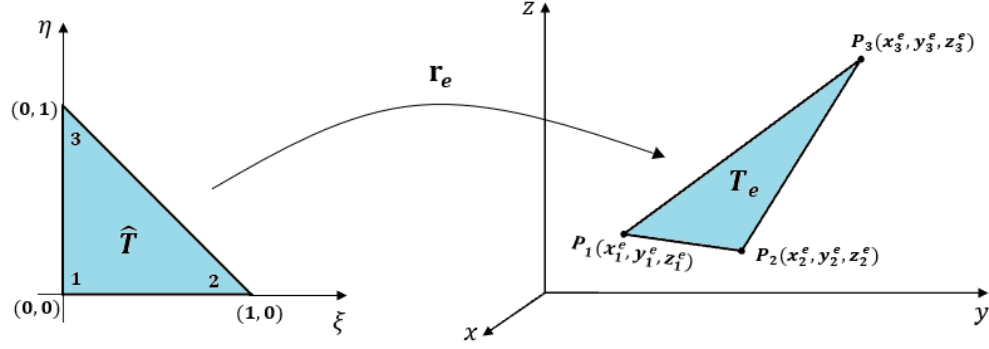


Figura 4.2.3: Transformación del elemento de referencia  $\hat{T}$  al elemento físico  $T_e$ .

Cuidando que la numeración de los nodos vayan en el mismo sentido (antihorario), la transformación afín  $\mathbf{r}_e : \hat{T} \rightarrow T_e$  que se requiere está dada por

$$\mathbf{r}_e(\xi, \eta) = \hat{\varphi}_1(\xi, \eta)(\mathbf{x}_1^e, \mathbf{y}_1^e, \mathbf{z}_1^e)^T + \hat{\varphi}_2(\xi, \eta)(\mathbf{x}_2^e, \mathbf{y}_2^e, \mathbf{z}_2^e)^T + \hat{\varphi}_3(\xi, \eta)(\mathbf{x}_3^e, \mathbf{y}_3^e, \mathbf{z}_3^e)^T, \quad (4.2.47)$$

donde

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_1(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta, \\ \hat{\varphi}_2(\xi, \eta) &= \xi, \\ \hat{\varphi}_3(\xi, \eta) &= \eta. \end{aligned}$$

Notamos que se tiene la correspondencia

$$\begin{aligned} (0, 0)^T &\mapsto (\mathbf{x}_1^e, \mathbf{y}_1^e, \mathbf{z}_1^e)^T, \\ (1, 0)^T &\mapsto (\mathbf{x}_2^e, \mathbf{y}_2^e, \mathbf{z}_2^e)^T, \\ (0, 1)^T &\mapsto (\mathbf{x}_3^e, \mathbf{y}_3^e, \mathbf{z}_3^e)^T, \end{aligned}$$

en donde el superíndice T denota la transpuesta, es decir, los vectores son columna, y además se respeta el sentido antihorario en el que van los nodos o vértices. Al escribir  $\mathbf{r}_e(\xi, \eta) = (x, y, z)^T$ , la transformación (4.2.47) anterior puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} x &= x_1^e \hat{\varphi}_1(\xi, \eta) + x_2^e \hat{\varphi}_2(\xi, \eta) + x_3^e \hat{\varphi}_3(\xi, \eta) = x_1^e + (x_2^e - x_1^e) \xi + (x_3^e - x_1^e) \eta, \\ y &= y_1^e \hat{\varphi}_1(\xi, \eta) + y_2^e \hat{\varphi}_2(\xi, \eta) + y_3^e \hat{\varphi}_3(\xi, \eta) = y_1^e + (y_2^e - y_1^e) \xi + (y_3^e - y_1^e) \eta, \\ z &= z_1^e \hat{\varphi}_1(\xi, \eta) + z_2^e \hat{\varphi}_2(\xi, \eta) + z_3^e \hat{\varphi}_3(\xi, \eta) = z_1^e + (z_2^e - z_1^e) \xi + (z_3^e - z_1^e) \eta. \end{aligned}$$

Luego, la matriz Jacobiana  $\mathbb{J}_e$  de la transformación afín (4.2.47) es

$$\mathbb{J}_e = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_2^e - x_1^e & x_3^e - x_1^e \\ y_2^e - y_1^e & y_3^e - y_1^e \\ z_2^e - z_1^e & z_3^e - z_1^e \end{bmatrix}. \quad (4.2.48)$$

Los vectores columna de esta matriz son los vectores fundamentales  $\mathbf{r}_\xi^e$  y  $\mathbf{r}_\eta^e$  de la transformación de coordenadas

$$\mathbf{r}_\xi^e = \begin{pmatrix} x_2^e - x_1^e \\ y_2^e - y_1^e \\ z_2^e - z_1^e \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{r}_\eta^e = \begin{pmatrix} x_3^e - x_1^e \\ y_3^e - y_1^e \\ z_3^e - z_1^e \end{pmatrix} \quad (4.2.49)$$

y tienen asociado el vector normal siguiente

$$\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e = \begin{pmatrix} (y_2^e - y_1^e)(z_3^e - z_1^e) - (y_3^e - y_1^e)(z_2^e - z_1^e) \\ (x_3^e - x_1^e)(z_2^e - z_1^e) - (x_2^e - x_1^e)(z_3^e - z_1^e) \\ (x_2^e - x_1^e)(y_3^e - y_1^e) - (x_3^e - x_1^e)(y_2^e - y_1^e) \end{pmatrix}, \quad (4.2.50)$$

cuya norma cuantifica la deformación de área del elemento de referencia  $\hat{T}$  bajo la transformación.

Una propiedad muy importante de la transformación  $\mathbf{r}_e$  se establece en el siguiente resultado:

**Teorema 4.2.1.** Para cada  $e = 1, 2, \dots, N_e$ , la transformación afín  $\mathbf{r}_e : \hat{T} \rightarrow T_e$  cuya regla de correspondencia está dada por (4.2.47) es biyectiva.

*Demostración. Inyectividad:* Sean  $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta)^T$ ,  $\boldsymbol{\xi}' = (\xi', \eta')^T \in \hat{T}$  tales que  $\boldsymbol{\xi} \neq \boldsymbol{\xi}'$ . Por ser  $\mathbb{J}_e$  una matriz de rango completo (rango 2) se tiene que  $\mathbf{P}_1^e + \mathbb{J}_e \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{P}_1^e + \mathbb{J}_e \boldsymbol{\xi}'$ , de donde  $\mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}) \neq \mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}')$ .

*Suprayectividad:* Debemos probar que para todo  $\mathbf{x} = (x, y, z)^T \in T_e$ , existe algún  $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta)^T \in \hat{T}$  tal que  $\mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{x}$ , es decir,  $\mathbf{P}_1^e + \mathbb{J}_e \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}$ . En efecto, la matriz Jacobiana  $\mathbb{J}_e$  es de rango completo, entonces  $\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e$  es una matriz invertible de tamaño  $2 \times 2$ , dada por:

$$\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e = \begin{bmatrix} \|\mathbf{r}_\xi^e\|^2 & (\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e \\ (\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e & \|\mathbf{r}_\eta^e\|^2 \end{bmatrix},$$

con  $(\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)} \begin{bmatrix} \|\mathbf{r}_\eta^e\|^2 & -(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e \\ -(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e & \|\mathbf{r}_\xi^e\|^2 \end{bmatrix}$ , donde  $\det(\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e) = \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\|^2 = 4[\text{Área}(T_e)]^2$ . Luego, para cada  $\mathbf{x} = (x, y, z)^T \in T_e$  consideramos la igualdad  $\mathbf{P}_1^e + \mathbb{J}_e \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}$ . El sistema  $\mathbb{J}_e \boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e$  es un sistema sobredeterminado, cuya solución de mínimos cuadrados se obtiene utilizando la pseudoinversa izquierda de Moore-Penrose para  $\mathbb{J}_e$ :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} &= (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \mathbb{J}_e^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) \\ &= \frac{1}{\det(\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)} \begin{bmatrix} \|\mathbf{r}_\eta^e\|^2 & -(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e \\ -(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e & \|\mathbf{r}_\xi^e\|^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\mathbf{r}_\xi^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) \\ (\mathbf{r}_\eta^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{\|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\|^2} \begin{bmatrix} \|\mathbf{r}_\eta^e\|^2 (\mathbf{r}_\xi^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) - [(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e] (\mathbf{r}_\eta^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) \\ - [(\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e] (\mathbf{r}_\xi^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) + \|\mathbf{r}_\xi^e\|^2 (\mathbf{r}_\eta^e)^T (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Ahora, de la proposición (4.2.1) se sigue que el vector  $\mathbf{x} \in T_e$  puede ser expresado como

$$\mathbf{x} = \varphi_1^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_3^e,$$

con  $\varphi_1^e(\mathbf{x}) + \varphi_2^e(\mathbf{x}) + \varphi_3^e(\mathbf{x}) = 1$ . Por lo tanto, al utilizar la igualdad, obtenemos

$$\begin{aligned} & \|\mathbf{r}_\eta^e\|^2 (\mathbf{r}_\xi^e)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) - [(\mathbf{r}_\xi^e)^\top \mathbf{r}_\eta^e] (\mathbf{r}_\eta^e)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) = \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\|^2 \varphi_2^e(\mathbf{x}) \\ & - [(\mathbf{r}_\xi^e)^\top \mathbf{r}_\eta^e] (\mathbf{r}_\xi^e)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) + \|\mathbf{r}_\xi^e\|^2 (\mathbf{r}_\eta^e)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{P}_1^e) = \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\|^2 \varphi_3^e(\mathbf{x}), \end{aligned}$$

de donde  $\boldsymbol{\xi} = (\varphi_2^e(\mathbf{x}), \varphi_3^e(\mathbf{x}))^\top$ , con  $0 \leq \varphi_2^e(\mathbf{x}) \leq 1$  y  $\varphi_3^e(\mathbf{x}) \leq 1 - \varphi_2^e(\mathbf{x})$ . Por lo tanto,  $\boldsymbol{\xi} \in \hat{\mathbb{T}}$ . Verificamos

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}) &= \mathbf{r}_e(\varphi_2^e(\mathbf{x}), \varphi_3^e(\mathbf{x})) \\ &= [1 - \varphi_2^e(\mathbf{x}) - \varphi_3^e(\mathbf{x})] \mathbf{P}_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_3^e \\ &= \varphi_1^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x}) \mathbf{P}_3^e \\ &= \mathbf{x}. \end{aligned}$$

□

**Corolario 4.2.1.** Para todo  $e = 1, 2, \dots, N_e$  y  $\lambda = 1, 2, 3$  se tiene que  $\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{\xi}) = \varphi_\lambda^e(\mathbf{x})$  si y sólo si  $\mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{x}$ .

*Demostración.* Es inmediato, ya que la función  $\mathbf{r}_e$  manda a cada  $\boldsymbol{\xi} = (\xi, \eta)^\top \in \hat{\mathbb{T}}$  a las coordenadas baricéntricas del punto  $\mathbf{x} = (x, y, z)^\top \in \mathbb{T}_e$ , las cuales tienen representación única, por lo cual  $\hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{\xi}) = \varphi_\lambda^e(\mathbf{x})$  siempre que  $\mathbf{r}_e(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{x}$ . □

### 4.2.3. Ensamble de la matriz $\mathbb{A} = \alpha \mathbb{M} + \mathbf{D}_\Sigma \mathbb{K}$ utilizando el elemento de referencia

**Ensamble de la matriz de masa  $\mathbb{M}$ .** De la ecuación (4.2.41), suponiendo  $i = g(e, \lambda)$  y  $j = g(e, \mu)$ , se tiene que

$$M_{ij} = \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{\mathbb{T}_e} \varphi_\lambda^e \varphi_\mu^e d\mathbb{T}_e.$$

Utilizando la transformación  $\mathbf{r}_e$  dada en (4.2.47) y el corolario 4.2.1 se obtiene lo siguiente

$$M_{ij} = \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \iint_{\hat{\mathbb{T}}} \hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{\xi}, \eta) \hat{\varphi}_\mu(\boldsymbol{\xi}, \eta) \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| d\xi d\eta = \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \widehat{M}_{\lambda\mu}, \quad (4.2.51)$$

donde  $\widehat{M}_{\lambda\mu} = \iint_{\hat{\mathbb{T}}} \hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{\xi}, \eta) \hat{\varphi}_\mu(\boldsymbol{\xi}, \eta) d\xi d\eta$ . La matriz  $\widehat{M}_{\lambda\mu}$  es la **matriz de masa local** y es de tamaño  $3 \times 3$ , es decir  $1 \leq \lambda, \mu \leq 3$  y se ha utilizado la notación de integración doble para enfatizar que son integrales de área o superficie. Esta integral puede calcularse utilizando la regla de Simpson, es decir el promedio ponderado del integrando sobre los puntos medios de las aristas del elemento de referencia  $\hat{\mathbb{T}}$ :

$$\begin{aligned} \widehat{M}_{\lambda\mu} &= \iint_{\hat{\mathbb{T}}} \hat{\varphi}_\lambda(\boldsymbol{\xi}, \eta) \hat{\varphi}_\mu(\boldsymbol{\xi}, \eta) d\xi d\eta \approx \frac{|\hat{\mathbb{T}}|}{3} \{ \hat{\varphi}_\lambda \hat{\varphi}_\mu |_{(1/2, 1/2)} + \hat{\varphi}_\lambda \hat{\varphi}_\mu |_{(1/2, 0)} + \hat{\varphi}_\lambda \hat{\varphi}_\mu |_{(0, 1/2)} \} \\ &= \frac{1}{6} \begin{cases} 1/2 & \text{si } \lambda = \mu \\ 1/4 & \text{si } \lambda \neq \mu \end{cases} = \frac{1}{24} \begin{cases} 2 & \text{si } \lambda = \mu \\ 1 & \text{si } \lambda \neq \mu \end{cases} \end{aligned} \quad (4.2.52)$$

donde  $|\widehat{\mathbb{T}}| = \frac{1}{2}$  representa el área del triángulo  $\widehat{\mathbb{T}}$ . Estos nueve coeficientes se pueden almacenar en una matriz de  $3 \times 3$

$$\widehat{\mathbb{M}} = \frac{1}{24} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (4.2.53)$$

Por lo tanto,

$$\mathbb{M}_{ij} \approx \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \widehat{\mathbb{M}}_{\lambda\mu}. \quad (4.2.54)$$

**Ensamble de la matriz de rigidez  $\mathbb{K}$ .** Los coeficientes (4.2.42) de esta matriz, suponiendo que  $i = g(e, \lambda)$ ,  $j = g(e, \mu)$ , se pueden expresar como

$$\mathbb{K}_{ij} = \int_{\widehat{\Sigma}} \nabla_{\Sigma} \varphi_i \cdot \nabla_{\Sigma} \varphi_j \, d\Sigma = \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{\mathbb{T}_e} \nabla_{\mathbb{T}_e} \varphi_\lambda^e \cdot \nabla_{\mathbb{T}_e} \varphi_\mu^e \, d\mathbb{T}_e, \quad (4.2.55)$$

con  $\nabla_{\mathbb{T}_e} \varphi_\lambda^e = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e$ , siendo  $\mathbb{P}_e$  la proyección sobre la normal al elemento triangular  $\mathbb{T}_e$ . Por lo tanto,

$$\mathbb{K}_{ij} = \sum_{\mathbb{T}_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{\mathbb{T}_e} (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e \cdot (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\mu^e \, d\mathbb{T}_e. \quad (4.2.56)$$

Como  $\widehat{\varphi}_\lambda(\xi, \eta) = \varphi_\lambda^e(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta), z(\xi, \eta))$ , entonces

$$\nabla \widehat{\varphi}_\lambda = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial x} \\ \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial y} \\ \frac{\partial \varphi_\lambda^e}{\partial z} \end{bmatrix} = \mathbb{J}_e^T \nabla \varphi_\lambda^e \quad (4.2.57)$$

Además,  $\nabla \varphi_\lambda^e$  es combinación lineal de  $\mathbf{r}_\xi^e$ ,  $\mathbf{r}_\eta^e$  y  $\widehat{\mathbf{n}}^e$ , es decir

$$\nabla \varphi_\lambda^e = \mathbf{a}_\lambda^e \mathbf{r}_\xi^e + \mathbf{b}_\lambda^e \mathbf{r}_\eta^e + \mathbf{c}_\lambda^e \widehat{\mathbf{n}}^e, \quad \text{con} \quad \widehat{\mathbf{n}}^e = \frac{\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e}{\|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\|}, \quad (4.2.58)$$

y multiplicando escalarmente por  $\nabla \varphi_\lambda^e$  por  $\mathbf{r}_\xi^e$ ,  $\mathbf{r}_\eta^e$  y  $\widehat{\mathbf{n}}^e$ , obtenemos respectivamente

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_\xi^e)^T \nabla \varphi_\lambda^e &= \mathbf{a}_\lambda^e (\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\xi^e + \mathbf{b}_\lambda^e (\mathbf{r}_\xi^e)^T \mathbf{r}_\eta^e, \\ (\mathbf{r}_\eta^e)^T \nabla \varphi_\lambda^e &= \mathbf{a}_\lambda^e (\mathbf{r}_\eta^e)^T \mathbf{r}_\xi^e + \mathbf{b}_\lambda^e (\mathbf{r}_\eta^e)^T \mathbf{r}_\eta^e, \\ (\widehat{\mathbf{n}}^e)^T \nabla \varphi_\lambda^e &= \mathbf{c}_\lambda^e. \end{aligned} \quad (4.2.59)$$

Es decir, se obtiene directamente el coeficiente  $\mathbf{c}_\lambda^e$ . Para obtener los otros dos coeficientes, formamos el vector incógnita  $\boldsymbol{\alpha}_\lambda^e = (\mathbf{a}_\lambda^e, \mathbf{b}_\lambda^e)^T$  y reescribimos en forma vectorial las primeras dos ecuaciones en (4.2.59). Obtenemos

$$\mathbb{J}_e^T \nabla \varphi_\lambda^e = \mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e \boldsymbol{\alpha}_\lambda^e. \quad (4.2.60)$$

Utilizando la ecuación (4.2.57) obtenemos la solución para  $\alpha_\lambda^e$  en términos de los gradientes de las funciones base en el elemento de referencia  $\hat{T}$

$$\alpha_\lambda^e = (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\lambda \quad (4.2.61)$$

Sustituyendo los coeficientes  $\alpha_\lambda^e$  y  $c_\lambda^e$  en (4.2.58), obtenemos

$$\nabla \varphi_\lambda^e = \mathbb{J}_e \alpha_\lambda^e + \hat{\mathbf{n}}^e (\hat{\mathbf{n}}^e)^T \nabla \varphi_\lambda^e = \mathbb{J}_e (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\lambda + \mathbb{P}_e \nabla \varphi_\lambda^e \quad (4.2.62)$$

Así que,

$$(\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e = \mathbb{J}_e (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\lambda, \quad \lambda = 1, 2, 3, \quad (4.2.63)$$

y el producto escalar en el integrando de (4.2.56) se reduce a  $(\nabla \hat{\phi}_\lambda)^T (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\mu$ . Por lo tanto, se concluye que

$$K_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \iint_{\hat{T}} (\nabla \hat{\phi}_\lambda)^T (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\mu \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\mu^e\| d\xi d\eta = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\mu^e\| \hat{K}_{\lambda\mu}^e, \quad (4.2.64)$$

con

$$\hat{K}_{\lambda\mu}^e = \frac{1}{2} (\nabla \hat{\phi}_\lambda)^T (\mathbb{J}_e^T \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\phi}_\mu, \quad 1 \leq \lambda, \mu \leq 3, \quad (4.2.65)$$

y los gradientes son los vectores constantes

$$\nabla \hat{\phi}_1(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \nabla \hat{\phi}_2(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla \hat{\phi}_3(\xi, \eta) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.2.66)$$

En resumen, los coeficientes de la matriz  $\mathbb{A} = \alpha \mathbb{M} + D_\Sigma \mathbb{K}$ , se generan por medio de la fórmula:

$$\alpha_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \left( \alpha \hat{M}_{\lambda\mu} + D_\Sigma \hat{K}_{\lambda\mu}^e \right) \quad \text{con} \quad i = g(e, \lambda), \quad j = g(e, \mu). \quad (4.2.67)$$

#### 4.2.4. Cálculo de los coeficientes $F_j$ del vector de carga $\mathbf{F}$

Utilizando nuevamente la relación entre el índice global y el índice local de cierto elemento  $T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}$  que nos proporciona la matriz de conectividades  $\mathbf{g}$  mediante  $i = g(e, \lambda)$  y  $j = g(e, \mu)$ , utilizando la aproximación

$$f(x, y, z) \approx \sum_{\lambda=1}^3 f(x_\lambda^e, y_\lambda^e, z_\lambda^e) \varphi_\lambda^e(x, y, z) \quad (4.2.68)$$

la integral de (4.2.40) se calcula de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
F_j &= \int_{\Sigma} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \varphi_j(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \, d\Sigma \\
&= \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \iint_{T_e} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \varphi_{\mu}^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \, d\Sigma \\
&\approx \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \sum_{\lambda=1}^3 f(\mathbf{x}_{\lambda}^e, \mathbf{y}_{\lambda}^e, z_{\lambda}^e) \iint_{T_e} \varphi_{\lambda}^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \varphi_{\mu}^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \, d\Sigma \\
&= \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \sum_{\lambda=1}^3 f(\mathbf{x}_{\lambda}^e, \mathbf{y}_{\lambda}^e, z_{\lambda}^e) \iint_{\hat{T}} \hat{\varphi}_{\lambda}(\xi, \eta) \hat{\varphi}_{\mu}(\xi, \eta) \|\mathbf{r}_{\xi}^e \times \mathbf{r}_{\eta}^e\| \, d\xi \, d\eta \\
&= \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_{\xi}^e \times \mathbf{r}_{\eta}^e\| \sum_{\lambda=1}^3 f(\mathbf{x}_{\lambda}^e, \mathbf{y}_{\lambda}^e, z_{\lambda}^e) \widehat{M}_{\lambda\mu}.
\end{aligned}$$

### 4.3. Solución del caso elíptico y análisis de convergencia

Nuestro objetivo principal es resolver (4.2.23-4.2.24) de la cual ya desarrollamos lo necesario para hacerlo numéricamente, sin embargo, antes de esto, resolveremos el caso particular (4.2.27-4.2.28) y hacer un análisis de convergencia para tener garantía que la solución que obtengamos para (4.2.23-4.2.24) en cada instante de tiempo  $t_n = n\Delta t > 0$ , los resultados obtenidos sean confiables y precisos.

Para la ecuación (4.2.27-4.2.28) consideraremos  $\alpha = 0$ ,  $D_\Sigma = 1$ ,  $f(x, y, z) = 12xyz$ , problema del cual se mostró en la sección 4.1 que tiene solución exacta  $\phi(x, y, z) = xyz$ . Para realizar la simulación computacional se utilizó una malla triangular sobre la esfera unitaria obtenida mediante el método de subdivisión de un icosaedro inscrito en una esfera de radio  $R > 0$ . Denotamos con  $N$  el número de subdivisiones realizadas al icosaedro inscrito. Enseguida se muestran las mallas para los valores de  $N = 0, 3, 4, 5$ , respectivamente.

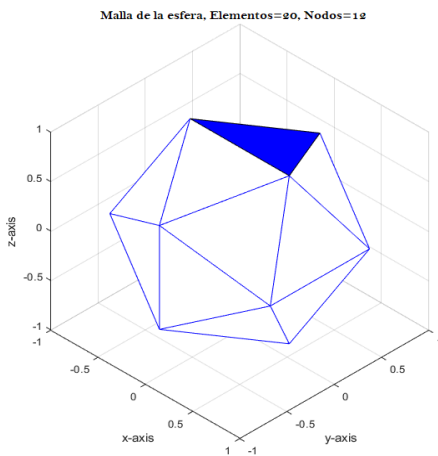


Figura 4.3.1: Icosaedro inscrito  $N = 0$ .

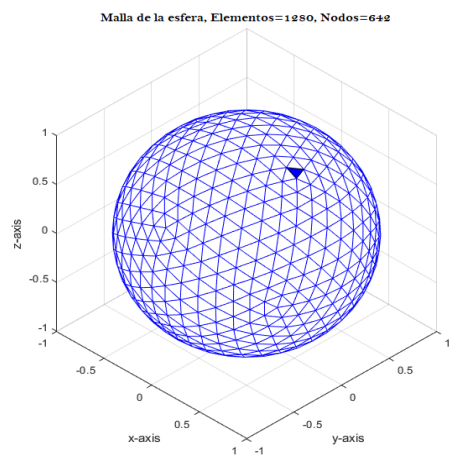


Figura 4.3.2: Malla triangular para  $N = 3$ .

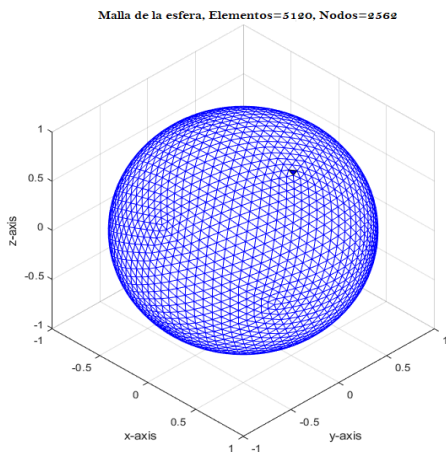


Figura 4.3.3: Icosaedro inscrito  $N = 4$ .

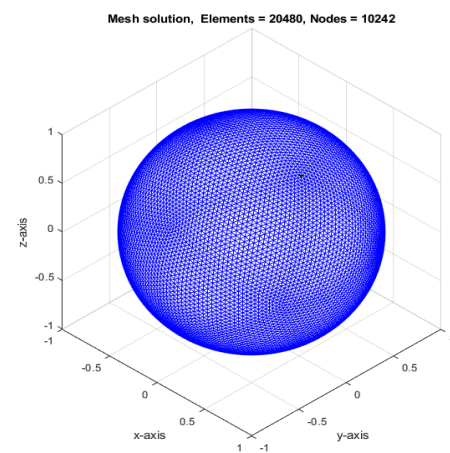


Figura 4.3.4: Malla triangular para  $N = 5$ .

Analizaremos la convergencia de la solución aproximada  $\phi_h$  a la solución exacta  $\phi$ , obtenida por medio del método de los elementos finitos, de los problemas elípticos, verificando la desigualdad, con  $r > 0$

$$\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)} \leq C \|\phi\|_{L^2(\Sigma)} h^r, \quad (4.3.69)$$

para valores de  $h$ ,  $h/2$  y  $h/4$ .  $C$  y  $r$  son constantes positivas. El valor de  $h$  es una medida del tamaño de los elementos en la malla, que decidimos obtenerlo como promedio de las longitudes de los lados de cada uno de los elementos en la malla triangular. Si el valor de  $r$  es aproximado a dos, entonces quiere decir que nuestro algoritmo converge óptimamente. Se sabe que cuando se utilizan elementos lineales (polinomios lineales en cada elemento), el análisis teórico arroja  $r = 2$  en la norma  $L^2$ , asegurando que  $\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}$  converge a cero cuando  $h$  tiende a cero y la velocidad (orden) de convergencia está dada por el exponente  $r$ .

Dado que  $\phi(\mathbf{x}) \approx \sum_{i=1}^{N_I} \phi(P_i) \varphi_i(\mathbf{x})$  se tiene entonces que

$$\begin{aligned} \|\phi\|_{L^2(\Sigma)}^2 &= \int_{\Sigma} \phi(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \, d\Sigma \approx \int_{\Sigma} \sum_{i=1}^{N_I} \phi(P_i)\varphi_i(\mathbf{x}) \sum_{j=1}^{N_I} \phi(P_j)\varphi_j(\mathbf{x}) \, d\Sigma \\ &= \sum_{i=1}^{N_I} \sum_{j=1}^{N_I} \phi(P_i) M_{ij} \phi(P_j) = \mathbf{U}^T \mathbf{M} \mathbf{U}, \end{aligned}$$

con  $\mathbf{U} = (\phi(P_1), \dots, \phi(P_{N_I}))^T$ . Análogamente se estima  $\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}^2$ .

Para determinar el valor de  $r$  utilizaremos los valores de  $h$ ,  $h/2$  y  $h/4$  y aplicamos la fórmula (4.3.69), obteniendo:

Para  $h$  y  $h/2$

$$\begin{aligned} \|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)} &\approx C \|\phi\|_{L^2(\Sigma)} h^r \quad \text{y} \quad \|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)} \approx C \|\phi\|_{L^2(\Sigma)} \left(\frac{h}{2}\right)^r \\ \implies \frac{\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}} &\approx 2^r \quad \implies \quad r \approx \ln \left[ \frac{\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}} \right] / \ln(2). \end{aligned}$$

Similarmente para  $h/2$  y  $h/4$ , se obtiene

$$\frac{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/4}\|_{L^2(\Sigma)}} \approx 2^r \quad \implies \quad r \approx \ln \left[ \frac{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/4}\|_{L^2(\Sigma)}} \right] / \ln(2)$$

Utilizando estas fórmulas, podemos calcular el orden de convergencia al resolver numéricamente la ecuación (4.2.27) con  $\alpha = 0$ ,  $f(x, y, z) = 12xyz$  y  $\phi(x, y, z) = xyz$ . Los resultados obtenidos para los valores de  $h$ ,  $h/2$  y  $h/4$  que corresponden a los valores respectivos de  $N = 3$ ,  $N = 4$  y  $N = 5$  utilizados para las mallas triangulares, son:

$$\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)} = 0.0107, \quad \|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)} = 0.0028, \quad \|\phi - \phi_{h/4}\|_{L^2(\Sigma)} = 6.9252 \times 10^{-4},$$



y los valores estimados para el orden de convergencia son respectivamente:

$$r \approx \ln \left[ \frac{\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}} \right] / \ln(2) = 1.9341 \quad \text{y} \quad r \approx \ln \left[ \frac{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/4}\|_{L^2(\Sigma)}} \right] / \ln(2) = 2.0155,$$

lo cual indica que la malla construida con  $N = 5$  subdivisiones (ver figura 4.3.2) proporciona una buena solución aproximada para el problema elíptico dado.

Enseguida mostramos gráficamente la comparación entre la solución aproximada obtenida y la solución exacta.

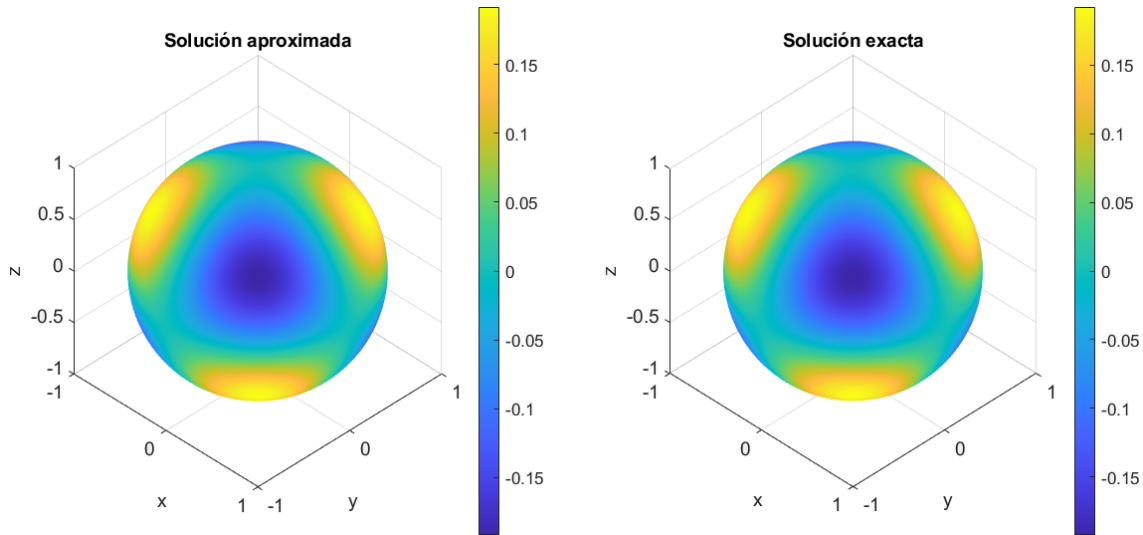


Figura 4.3.5: Comparación entre la solución exacta y la solución aproximada del problema elíptico ( $\alpha = 0$ ).

El error relativo  $\epsilon_r$  en la norma  $L_2$  de dicha aproximación fue  $\epsilon_r = 2 \times 10^{-3}$ , correspondiente al valor  $N = 5$  del refinamiento de la malla triangular de la esfera unitaria.

De [37] consideramos  $\alpha = 1$ ,  $D_\Sigma = 1$  y  $f(x, y, z) = 7z^3 - 6z(x^2 + y^2)$  para la ecuación (4.2.27-4.2.28) cuya solución exacta está dada por  $\phi(x, y, z) = z^3$ . Se puede hacer un análisis similar al acabado de hacer, para verificar que el algoritmo también converge óptimamente en este caso. A continuación mostramos la comparación entre la solución exacta dada y la solución aproximada obtenida

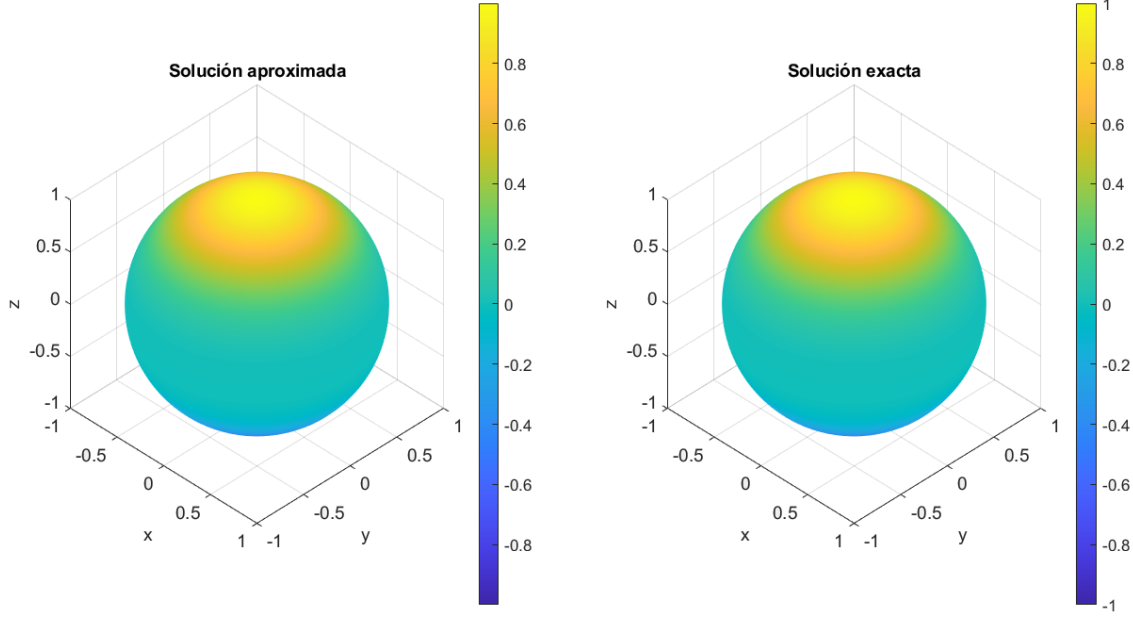


Figura 4.3.6: Comparación entre la solución exacta y la solución aproximada del problema elíptico ( $\alpha = 1$ ).

El error relativo  $\varepsilon_r$  en la norma  $L_2$  de dicha aproximación fue  $\varepsilon_r = 1.9858 \times 10^{-4}$ , correspondiente al valor  $N = 6$  del refinamiento de la malla triangular de la esfera unitaria.

### 4.3.1. Utilización del Algoritmo de Grado Mínimo para matrices sparse

Como se ha visto anteriormente, para resolver (4.2.23-4.2.24) se requiere que en cada paso de tiempo  $t_n = n\Delta t > 0$  se resuelva un sistema de la forma (4.2.27-4.2.28). Esto implica que, para cada instante de tiempo  $t_n$  se resuelva un sistema lineal

$$(\alpha \mathbb{M} + D_\Sigma \mathbb{K}) \boldsymbol{\phi} = \mathbf{F},$$

en donde la matriz  $\mathbb{A} = \alpha \mathbb{M} + D_\Sigma \mathbb{K}$  además de ser simétrica definida positiva, tiene la propiedad, como veremos más adelante, de ser *rala* o *sparse*. La definición que daremos enseguida, está basada en [30].

**Definición 4.3.1.** Una matriz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  se dice que es *rala* o *sparse* si la mayoría de sus entradas son cero.

Una parámetro que permite determinar si una matriz  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  es rala o no, es por medio de la densidad de la matriz  $A$ . La **densidad**  $\delta_A$  de una matriz  $A$  se define como el cociente entre el número de elementos no nulos de la matriz  $A$ , denotado por  $\mathcal{N}_z(A)$ , y el número total de entradas de la matriz. Esto es,

$$\delta_A = \frac{\mathcal{N}_z(A)}{m n}. \quad (4.3.70)$$

La densidad de una matriz es una cantidad porcentual cuando se multiplica por 100. Un rango de valores aceptable para  $\delta_A$  se encuentra en el intervalo  $[0.01, 0.05]$ , es decir,  $A$  se considerará una matriz rala o sparse cuando el número de elementos distintos de cero en  $A$  oscile entre un 1 y 5% respecto al número total de entradas de dicha matriz.

De acuerdo a (4.2.38) se tiene que

$$M_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma \quad y \quad K_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_{\Sigma} \varphi_i \cdot \nabla_{\Sigma} \varphi_j d\Sigma, \quad (4.3.71)$$

donde  $i, j$  son los nodos adyacentes en la malla  $\mathcal{T}_h$ . Ahora, por ejemplo, en las mallas (4.3.1-4.3.4) utilizadas anteriormente, hay sólo 5 o 6 nodos adyacentes a cualquier nodo. Así, el número máximo de coeficientes distintos de cero de  $M$  será menor a  $6N_I$ . Por lo tanto,

$$\delta_M < \frac{6N_I}{N_I^2} = \frac{6}{N_I} \leq 0.05, \quad \text{cuando } N_I \geq 120. \quad (4.3.72)$$

Análogamente para  $\delta_K$  se tiene que  $\delta_K \leq 0.05$  cuando  $N_I \geq 120$ . Por lo tanto, tenemos que las matrices  $M$  y  $K$  son matrices sparse, para un valor adecuado de  $N_I$  y, en consecuencia, la matriz  $A$  dada por  $A = \alpha M + D_{\Sigma} K$  es también una matriz rala o sparse.

Ahora, como ya se dijo anteriormente, cuando resolvemos numéricamente el sistema parabólico (4.2.23-4.2.24), para cada instante de tiempo  $t_n > 0$  resolvemos un sistema de ecuaciones lineales

$$A\phi = F, \quad (4.3.73)$$

para el cual, es necesario aplicar factorización de Cholesky  $A = LL^T$  a la matriz  $A$  que nos permita resolver dicho sistema sin la necesidad de calcular  $A^{-1}$ . Sin embargo, el hecho que  $A$  sea una matriz rala, conlleva a ciertas complicaciones y consideraciones importantes:

### 1. Llenado (Fill-in):

- Durante la factorización de Cholesky, algunos ceros en la matriz  $A$  pueden convertirse en elementos no ceros en  $L$  (factor de Cholesky). Estas entradas son conocidas como *fill* o *fill-in*. Esto es,  $L_{ij} \neq 0$  aunque  $A_{ij} = 0$ .
- El fill-in incrementa el número de elementos no nulos en la matriz, lo que conlleva un aumento en los requerimientos de almacenamiento, un mayor número de operaciones y, por ende, un incremento en los errores de redondeo. Estos factores, en conjunto, provocan un aumento significativo en el tiempo de cómputo.
- El fill-in también puede aumentar el ancho de banda de la matriz resultante. El *ancho de banda* de una matriz es la diferencia máxima entre los índices de las filas y columnas de los elementos no cero más alejados de la diagonal. Es decir,

$$\text{Ancho de banda}(A) = \max_{i,j} \{|i - j| : a_{ij} \neq 0\}.$$

Incrementar el ancho de banda, hace que las operaciones sean menos eficientes debido al acceso menos localizado a la memoria.

## 2. Costo computacional.

- El costo computacional de la factorización Cholesky para matrices densas es  $\mathcal{O}(N_1^3/6)$ , pero para matrices rala, el costo depende del patrón de dispersión y del fill-in.
- Si el fill-in es significativo, el tiempo de cómputo y la memoria necesaria pueden aumentar drásticamente.
- Un ancho de banda grande también implica un mayor costo computacional durante la factorización, ya que más elementos fuera de la banda principal deben ser considerados en las operaciones. Esto puede llevar a un uso menos eficiente de la memoria y un incremento en el tiempo de acceso a la misma.

Para realizar una factorización eficiente, empleamos el **Algoritmo de Grado Mínimo**. Este algoritmo busca reordenar las filas y columnas de la matriz  $\mathbf{A}$  por medio una matriz de permutación  $\mathbf{P}$  (matriz ortogonal), antes de realizar la factorización de Cholesky  $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ , con el objetivo de minimizar el llenado. Por lo tanto, si  $\mathbf{P}$  es una matriz de permutación, el objetivo es encontrar  $\mathbf{P}$  tal que  $\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^T = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$  y el factor de Cholesky resultante  $\mathbf{L}$  tenga el mínimo número de elementos no nulos, es decir,  $\mathcal{N}_z(\mathbf{L})$  es minimizado.

Los principales beneficios al usar esta técnica son:

- **Reducción del llenado:** Al minimizar el llenado, la matriz  $\mathbf{L}$  resultante será más dispersa, lo que reduce los requerimientos de memoria.
- **Reducción del costo computacional:** Al tener una matriz  $\mathbf{L}$  más dispersa, el número de operaciones necesarias para resolver  $(\mathbf{L}\mathbf{L}^T)\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$  se reduce significativamente.
- **Optimización del tiempo de cómputo:** El disminuir el número de operaciones y la cantidad de elementos no nulos en la matriz  $\mathbf{L}$ , implica una reducción significativa en el tiempo de cómputo.
- **Mejor utilización de la memoria caché:** Al reducir el llenado, el algoritmo favorece la agrupación de operaciones en áreas de memoria contiguas, lo que mejora la eficiencia del acceso a la memoria caché y disminuye los tiempos de acceso a la memoria.
- **Mejora en la estabilidad numérica:** Con una matriz más dispersa y menos elementos no nulos en  $\mathbf{L}$ , se reduce la propagación de errores de redondeo, lo que contribuye a una mayor estabilidad numérica durante las operaciones subsiguientes.

A continuación presentamos la implementación del Algoritmo de grado mínimo para resolver sistemas de ecuaciones lineales  $\mathbf{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$ .

**Algoritmo de Grado Mínimo.** Dado el sistema lineal

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$$

con  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  una matriz sparse simétrica definida positiva y  $\boldsymbol{\phi}, \mathbf{F} \in \mathbb{R}^n$ .

1. **Calcular la matriz P.** Calcular la matriz permutación  $\mathbf{P}$  de tamaño  $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$  tal que la matriz  $\mathbf{PAP}^T$  tenga menos llenado al aplicar la factorización Cholesky. Hacemos

$$\mathbb{A}_P = \mathbf{PAP}^T$$

denominada *matriz permutada*.

2. **Factorización de Cholesky.** Se realiza la factorización Cholesky sobre la matriz permutada  $\mathbb{A}_P$ , es decir,  $\mathbb{A}_P = \mathbf{L L}^T$  con  $\mathbf{L}$  una matriz triangular inferior.

3. **Resolución del sistema lineal.**

- a) Permutar los vectores  $\boldsymbol{\phi}$  y  $\mathbf{F}$  de acuerdo a  $\mathbf{P}$ :  $\boldsymbol{\phi}_P = \mathbf{P}\boldsymbol{\phi}$  y  $\mathbf{F}_P = \mathbf{P}\mathbf{F}$ .
- b) Obtener el sistema equivalente  $(\mathbf{L L}^T)\boldsymbol{\phi}_P = \mathbf{F}_P$ .
- c) Resolver el sistema triangular inferior:  $\mathbf{L}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}_P$  (resolver para  $\boldsymbol{\phi} = \mathbf{L}^T\boldsymbol{\phi}_P$ ).
- d) Resolver el sistema triangular superior:  $\mathbf{L}^T\boldsymbol{\phi}_P = \boldsymbol{\phi}$  (resolver para  $\boldsymbol{\phi}_P$ ).
- e) Aplicar la permutación inversa para obtener  $\boldsymbol{\phi}$ :  $\boldsymbol{\phi} = \mathbf{P}^T\boldsymbol{\phi}_P$ .

La solución obtenida  $\boldsymbol{\phi} = \mathbf{P}^T\boldsymbol{\phi}_P$  resuelve  $\mathbb{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$  debido a que estamos trabajando con un sistema de ecuaciones lineales equivalente al original:

$$\begin{aligned} \mathbb{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F} &\iff \mathbb{A}\mathbb{I}_n\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F} \\ &\iff \mathbb{A}(\mathbf{P}^T\mathbf{P})\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F} \quad (\text{porque } \mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T) \\ &\iff (\mathbf{P}\mathbb{A}\mathbf{P}^T)\mathbf{P}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{P}\mathbf{F} \\ &\iff \mathbb{A}_P\boldsymbol{\phi}_P = \mathbf{F}_P. \end{aligned}$$

El programa de MATLAB tiene el comando `amd(A)` que calcula un vector permutación  $\mathbf{p}$  de tamaño  $\mathbf{n} \times 1$ , a partir del cual se puede construir la matriz de permutación  $\mathbf{P}$  mediante la siguiente asignación:

$$\mathbf{P}(i, j) = \begin{cases} 1 & \text{si } j = \mathbf{p}(i), \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Sin embargo, en MATLAB se puede determinar la matriz  $\mathbf{P}$  y a su vez calcular  $\mathbb{A}_P = \mathbf{PAP}^T$  mediante la instrucción `A(p, p)`, donde  $\mathbf{p} = \mathbf{amd}(A)$ . En el apéndice A se proporciona el código para dicho programa que nos permita resolver sistemas lineales  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  para matrices ralas simétricas definidas positivas. Adicionalmente el comando `spy(A)` en matlab nos permite obtener la visualización gráfica de la estructura de la matriz  $\mathbf{A}$  y `bandwidth(A)` nos proporciona el ancho de banda de dicha matriz.

Si se desea profundizar en este tipo de técnicas para sistemas que involucran matrices ralas y otras más, se puede consultar [31], [32], [33], [34], [35].

A manera de ilustración consideremos la matriz  $\mathbb{A} = \alpha\mathbb{M} + \mathbf{D}_\Sigma\mathbb{K}$  para  $\alpha = 1$  y  $\mathbf{D}_\Sigma = 20$ , en donde  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  corresponde a la esfera unitaria. Discretizamos  $\Sigma$  mediante una malla triangular que corresponde a un valor  $\mathbf{N} = 5$  de refinamiento y que consta de 10242 nodos y 20480 elementos. En consecuencia, el tamaño de la matriz  $\mathbb{A}$  será de  $10242 \times 10242$ .

Enseguida mostramos las gráficas generadas mediante el comando `spy` en matlab para la matriz  $\mathbb{A}$  junto con su correspondiente factorización Cholesky en ambos casos.

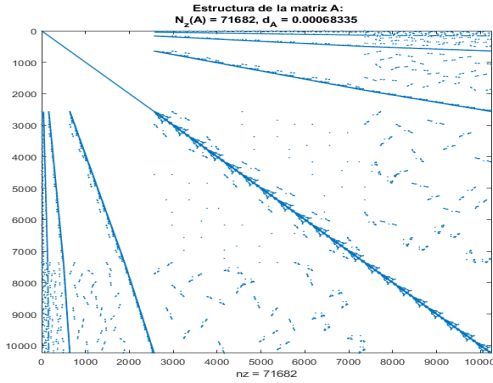


Figura 4.3.7: Estructura de la matriz  $\mathbb{A}$ .

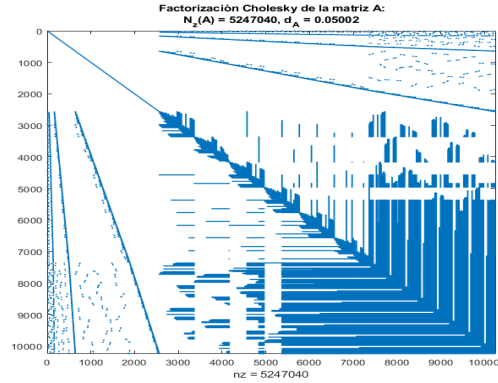


Figura 4.3.8: Factorización Cholesky de la matriz  $\mathbb{A}$ .

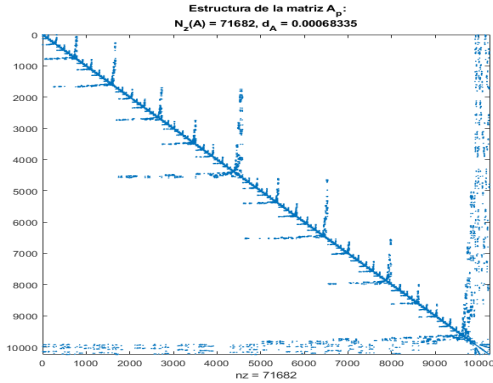


Figura 4.3.9: Estructura de la matriz  $\mathbb{A}$  permutada.

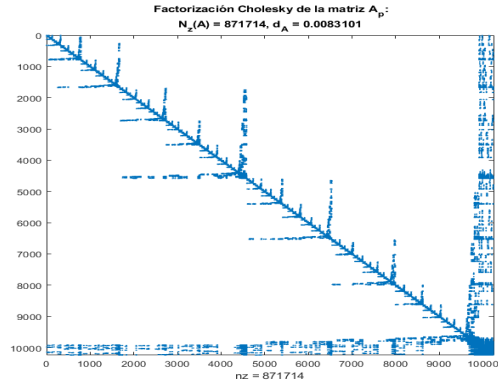


Figura 4.3.10: Factorización Cholesky de la matriz  $\mathbb{A}$  permutada.

Observamos un aumento significativo en la densidad de la matriz  $\mathbb{A}$  en ambos casos. Para el primer caso, en donde no se permuta la matriz  $\mathbb{A}$ , se tiene una densidad inicial  $\delta_{\mathbb{A}} = 6.8335 \times 10^{-4}$ , la cual aumenta a  $\delta_{\mathbb{A}} = 5.002 \times 10^{-2}$  al aplicar la factorización Cholesky  $\mathbb{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ . De la misma manera, al considerar  $\mathbb{A}_p$  obtenida de permutar la matriz  $\mathbb{A}$  cuya densidad inicial  $\delta_{\mathbb{A}_p}$  es la misma que  $\mathbb{A}$  cambia a una densidad de  $\delta_{\mathbb{A}_p} = 8.3101 \times 10^{-3}$  al aplicar la factorización Cholesky  $\mathbb{A}_p = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ . Por lo tanto, vemos que es más conveniente trabajar con la factorización Cholesky de  $\mathbb{A}_p$  en lugar de la factorización de  $\mathbb{A}$ , al momento de resolver el sistema  $\mathbb{A}\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$ , debido a la gran diferencia entre sus respectivas densidades.

Para terminar de convencerse de qué es mucho mejor resolver los sistemas lineales resultantes mediante el método de grado mínimo, realizamos simulaciones numéricas por computadora <sup>1</sup> para el sistema (5.4.32-5.4.33) que corresponde al modelo de Schnakenberg para superficies tridimensionales. Los parámetros utilizados en la reacción son:  $\alpha = 0.126779$ ,

<sup>1</sup>Se utilizó un procesador intel(R) Core(TM) i5-6200U CPU 2.30 GHz 2.40 GHz. Memoria RAM: 15.7 GB.

$b = 0.792366$ ,  $D_\Sigma = 20$ ,  $\gamma = 1000$ , un tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 1 \times 10^{-4}$  y un tiempo final  $T = 0.1$ , es decir, se realizaron un total de 1000 iteraciones para cada dominio superficial considerado.

La tabla siguiente muestra los resultados obtenidos:

<b>Superficie</b>	Tamaño de la malla	$T_1$ (seg) sin P	$T_2$ (seg) con P	$T_1/T_2$
Esfera ( $R = 1$ )	# Nodos = 40962 # Elementos = 81920	12568.446300	285.226158	44.064844
Toroide ( $R = 3, r = 1$ )	# Nodos = 30000 # Elementos = 60000	634.278239	171.920037	3.689379
Cilindro c/tapas ( $R = 1, h = 2$ )	# Nodos = 31902 # Elementos = 63800	1265.213245	173.818299	7.278941

Cuadro 4.1: Comparación de tiempos a 1000 iteraciones.

Vemos que, para las superficies consideradas el tiempo de cómputo se optimiza significativamente cuando utilizamos el método de permutación de grado mínimo en la solución de los sistemas de ecuaciones lineales resultantes para cada instante de tiempo. Notamos que para el caso de la esfera, el tiempo total utilizado para realizar las 1000 iteraciones fue 44 veces menor en comparación a cuando no se utilizó la permutación de grado mínimo. Para el caso del toroide, la realización de las 1000 iteraciones se hizo 3.68 veces más rápido y 7.27 para el caso del cilindro con tapas.

En conclusión, resulta mejor utilizar el método de permutación de grado mínimo pues el ahorro en el tiempo de cómputo resultó ser significativo para cada caso.





# Capítulo 5

## Simulaciones numéricas sobre superficies tridimensionales

### 5.1. Generación de mallas

En las secciones (3.5-3.7) se realizaron simulaciones numéricas para generar patrones sobre regiones planas, cuyos programas computacionales están fundamentados por medio del método del elemento finito. De esta manera, ya sea para el caso bidimensional o el caso tridimensional, se requiere la generación de una malla que discretice el dominio de definición del sistema. Dado un dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  ( $n = 2, 3$ ), existen muchas formas de subdividirlo en subdominios o elementos. Para nuestro caso, lo realizamos en subdominios triangulares. la figura 5.1.1 ilustra el dominio y una triangulación del mismo.

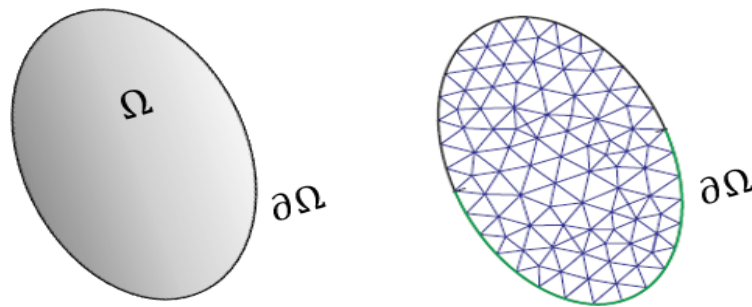


Figura 5.1.1: Dominio  $\Omega$  con frontera  $\partial\Omega$  y su triangulación.

Denotamos con  $\mathcal{T}_h$  a la triangulación de  $\Omega$ , es decir

$$\mathcal{T}_h = \text{conjunto de triángulos en la discretización de } \Omega.$$

El parámetro de discretización  $h$ , es una medida de la malla, y se refiere al diámetro máximo de los triángulos o elementos de  $\mathcal{T}_h$ . Ahora, puesto que las mallas generadas han sido y serán utilizadas en la implementación computacional del método del elemento finito,

es necesario mencionar que condiciones o características deben satisfacer dichas mallas, para poder implementar dicho método.

La triangulación  $\mathcal{T}_h$  debe satisfacer las siguientes propiedades :

- a) El conjunto de todos los triángulos en  $\mathcal{T}_h$  aproximan el dominio  $\Omega$  y su frontera  $\partial\Omega$ , es decir,  $\overline{\Omega} \approx \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$ , aunque teóricamente suponemos que se tiene la igualdad.
- b) Para cada dos triángulos  $T, T' \in \mathcal{T}_h$  se satisface :
  - a) No se intersectan en sus interiores, es decir,  $\text{int}(T) \cap \text{int}(T') = \emptyset$ .
  - b) Cuando  $T$  y  $T'$  se intersectan, es decir, cuando  $T \cap T' \neq \emptyset$ , lo hacen en un vértice o nodo en común, o bien, en una arista en común.

Una vez obtenida la malla triangular  $\mathcal{T}_h$  se construye la aproximación al espacio de Sobolev  $H^1(\Omega)$  donde se encuentran las soluciones a nuestro sistema en cuestión, mediante el subespacio de dimensión finita

$$V_h = \{v \in \mathcal{C}^0(\Omega) : v|_T \in \mathbb{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_h\}, \quad (5.1.1)$$

con  $\mathcal{C}^0(\Omega)$  el espacio de funciones continuas en  $\Omega$  y  $\mathbb{P}_1$  el conjunto de polinomios lineales en  $\mathbb{R}^2$ .

### 5.1.1. Mallas triangulares bidimensionales

Con base en lo establecido anteriormente, ahora se procede a la creación o generación de mallas triangulares que satisfagan las características de una malla de elemento finito. Comenzamos con la generación de mallas bidimensionales y, en secciones posteriores, las mallas para superficies tridimensionales. Para el caso bidimensional, principalmente generamos mallas para el rectángulo y el círculo de radio arbitrario  $R > 0$ . Éstas mallas nos serán de gran utilidad para crear otras mallas para distintas regiones en el plano. En el Apéndice A.2 se proporciona el código en MATLAB para la generación de la malla triangular de un anillo elíptico; dicho programa también es útil para obtener las mallas triangulares de anillos circulares, elipses y, en particular, la malla de un círculo de radio  $R > 0$ . Enseguida mostramos la malla para el cuadrado unitario y algunas mallas generadas con dicho programa :

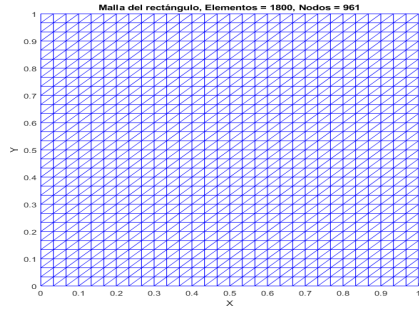


Figura 5.1.2: Malla triangular sobre el cuadrado unitario.

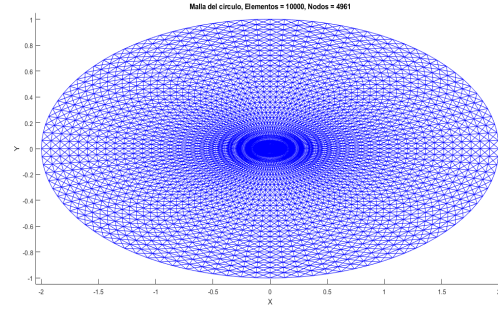


Figura 5.1.3: Malla triangular de la elipse.

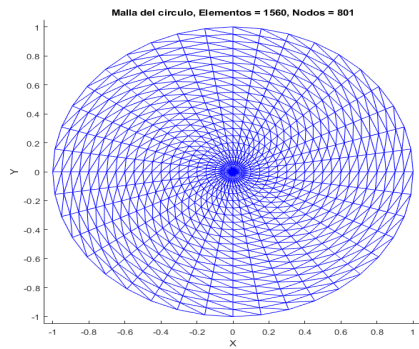


Figura 5.1.4: Malla triangular sobre el círculo unitario.

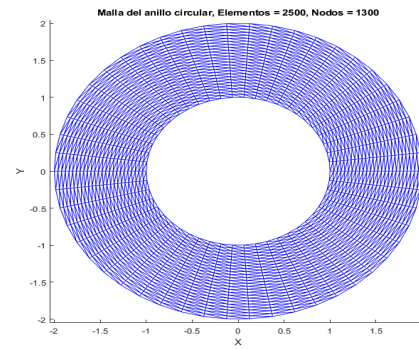


Figura 5.1.5: Malla triangular del anillo circular.

Un aspecto importante de las mallas en las figuras (5.1.3-5.1.4) es que pueden no ser óptimas para simulaciones computacionales, sin embargo nos serán de utilidad para generar mallas triangulares para algunas superficies. Esto se debe a que, en el centro de ambos lugares geométricos, hay una alta concentración de triángulos que podría introducir errores numéricos durante los cálculos. Es preferible utilizar una malla triangular graduada que distribuya mejor los triángulos y evite esta concentración en el centro, garantizando así resultados numéricos más precisos. Además, reducir la acumulación de triángulos en el centro es crucial, ya que no hacerlo, puede afectar a la formación de los patrones generados por los sistemas de reacción-difusión que estamos estudiando.

La generación de esta malla graduada para la región delimitada por el círculo de radio  $R > 0$  se realizará mediante la creación de un número finito de puntos o nodos en la región. Posteriormente, se aplicará el algoritmo de Delaunay para construir la matriz de conectividades. MATLAB ofrece un comando predeterminado para generar dicha matriz, denotada por  $\mathbf{g}$ , a partir de una matriz de nodos  $\mathbf{x}$  del dominio  $\Omega$ . En el apéndice A.3 se incluye el código en MATLAB para generar esta malla triangular graduada mediante este algoritmo.

El algoritmo de Delaunay es ampliamente utilizado para la generación de mallas triangulares debido a sus propiedades geométricas favorables, como la maximización del ángulo mínimo entre los triángulos. Aunque en este trabajo no se incluyen los detalles técnicos

del algoritmo, los lectores interesados pueden encontrar una descripción detallada en [39] y [40], donde se aborda tanto su fundamento teórico como su implementación práctica.

Enseguida mostramos una malla triangular graduada generada para la región delimitada por el círculo unitario, utilizando el algoritmo de Delaunay a partir de un conjunto finito de puntos de dicha región.

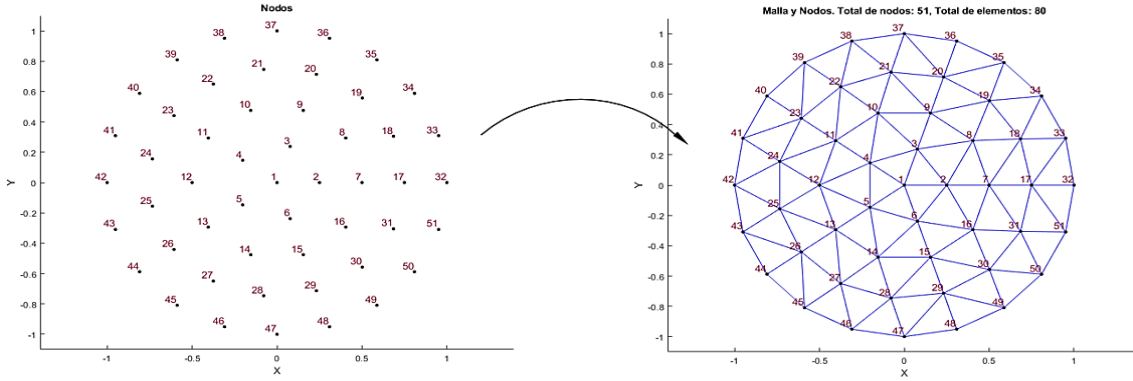


Figura 5.1.6: Malla obtenida mediante triangulación de Delaunay.

### 5.1.2. Mallas para regiones en coordenadas polares

Consideremos la curva polar cerrada  $r = f(\theta)$  que delimita una región  $\Omega$  del plano  $\mathbb{R}^2$ , y consideremos el círculo de radio  $R = 1$ , denotado por  $C_1$ . Se sigue que para cualquier punto  $(x_c, y_c) \in C_1$  se tiene que

$$x_c = \cos \theta \quad y \quad y_c = \sin \theta. \quad (5.1.2)$$

Luego, a partir de la relación  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  se satisface

$$x^2 + y^2 = f(\theta)^2 \quad (5.1.3)$$

de donde, al hacer  $x = f(\theta) \cos \theta$  y  $y = f(\theta) \sin \theta$ , y a partir de (5.1.2) obtenemos las expresiones en coordenadas polares para  $r = f(\theta)$  en función de las coordenadas  $(x_c, y_c) \in C_1$ :

$$x = f(\theta) x_c \quad y \quad y = f(\theta) y_c, \quad (5.1.4)$$

obteniendo así, las expresiones algebraicas que nos permitan generar una malla para la región  $\Omega$ . Ahora mostramos las mallas generadas a partir de una malla triangular del círculo unitario para las regiones en coordenadas polares acotadas por las curvas polares  $r = 2(1 + \cos \theta)$  y  $r = e^{\sin \theta} - 2 \cos 4\theta$ , respectivamente, obtenidas mediante esta metodología.

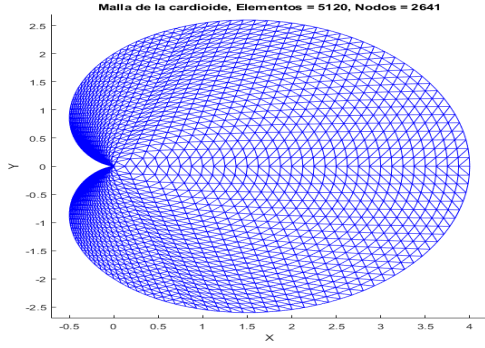


Figura 5.1.7: Malla triangular para el cardioide  $r = 2(1 + \cos \theta)$ .

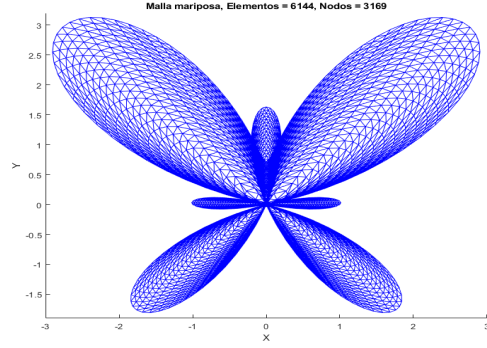


Figura 5.1.8: Malla triangular para  $r = e^{\sin \theta} - 2 \cos 4\theta$ .

**Nota.** Si se tiene la curva polar cerrada  $r_1 = f(\theta)$ , y  $r_2 = g(\theta)$  es tal que  $g(\theta) = \rho \cdot f(\theta)$  ( $\rho > 0$ ) para todo  $\theta \in [0, 2\pi]$ , entonces si se obtiene la malla triangular de la región polar  $\Omega_1 \subset \mathbb{R}^2$  acotada por  $f(\theta)$  mediante la malla del círculo unitario  $C_1$ , se tiene que la malla triangular de la región polar  $\Omega_2 \subset \mathbb{R}^2$  acotada por  $g(\theta)$  se puede obtener mediante la misma malla de  $C_1$ , o bien, generar la malla de  $\Omega_1$  mediante la malla del círculo de radio  $\rho > 0$ .

### 5.1.3. Mallas 2D obtenidas mediante ecuaciones dadas de manera implícita

Obtendremos las mallas de ciertas regiones cuya frontera está determinada por una curva cerrada cuya ecuación está dada de manera implícita. Consideremos nuevamente el círculo unitario  $C_1$ . Para cualquier punto  $(x_c, y_c) \in C_1$ , sean  $g(x)$ ,  $f(y)$  funciones escalares continuas en  $x = x_c$  y  $y = y_c$ , respectivamente. Consideremos la curva de nivel  $\mathcal{C} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : F(x, y) = k^2, k > 0\}$  donde  $F(x, y)$  está dada por

$$F(x, y) = \left( \frac{x - f(y_c)}{a} \right)^2 + \left( \frac{y - g(x_c)}{b} \right)^2, \quad a, b \neq 0. \quad (5.1.5)$$

Entonces, al hacer  $\frac{x - f(y_c)}{a} = k \cos \theta$ ,  $\frac{y - g(x_c)}{b} = k \sin \theta$  y de la ecuación (5.1.2) obtenemos

$$x = f(y_c) + a k \cos \theta, \quad y = g(x_c) + b k \sin \theta, \quad (5.1.6)$$

las ecuaciones algebraicas que nos permitan generar una malla triangular para la región  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  acotada por la curva  $\mathcal{C}$ . Similarmente si la curva de nivel  $\mathcal{C}$  está dada por  $\mathcal{C} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : G(x, y) = k^2, k > 0\}$  donde  $G(x, y)$  está dada por

$$G(x, y) = \left( \frac{x - f(y)}{a} \right)^2 + \left( \frac{y - g(x_c)}{b} \right)^2, \quad a, b \neq 0, \quad (5.1.7)$$

entonces las ecuaciones algebraicas que nos permitirán generar la malla triangular de la región  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  acotada por  $\mathcal{C}$  están determinadas por las expresiones

$$x = f(y) + a k \cos \theta, \quad y = g(x_c) + b k \sin \theta. \quad (5.1.8)$$

A continuación mostramos las mallas triangulares de las regiones en el plano acotadas por la elipse rotada  $(x - y)^2 + y^2 = 4$ , y las curvas  $x^2 + (y - x^2)^2 = 4$ ,  $(x - 0.2 \sin 10y - 0.3 \cos 3y)^2 + y^2 = 1$  y  $(x - y^3)^2 + y^2 = 1$ , respectivamente, a partir de una malla triangular del círculo unitario.

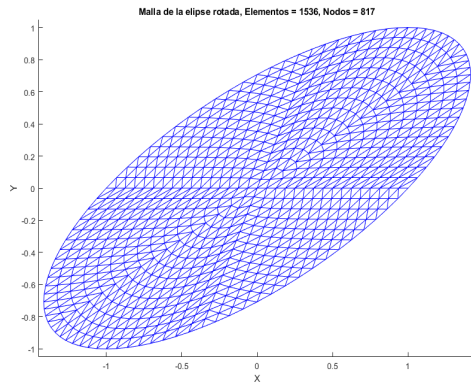


Figura 5.1.9: Malla triangular para la elipse rotada  $(x - y)^2 + y^2 = 4$ .

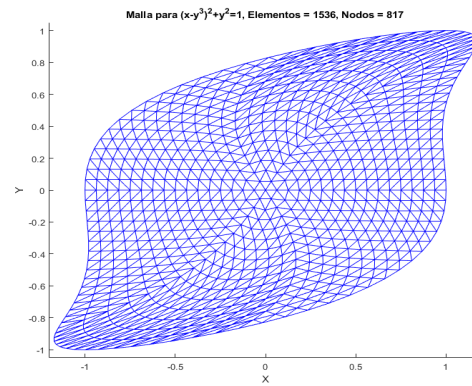


Figura 5.1.10: Malla triangular para la curva  $(x - y^3)^2 + y^2 = 1$ .

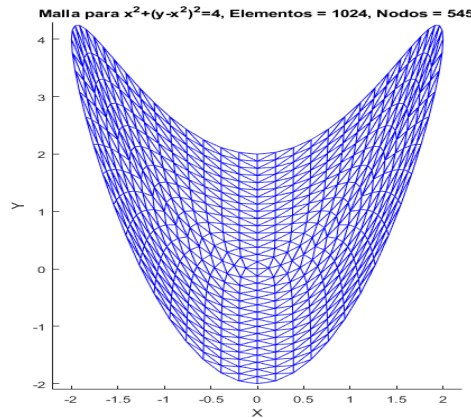


Figura 5.1.11: Malla triangular para la curva  $x^2 + (y - x^2)^2 = 4$ .

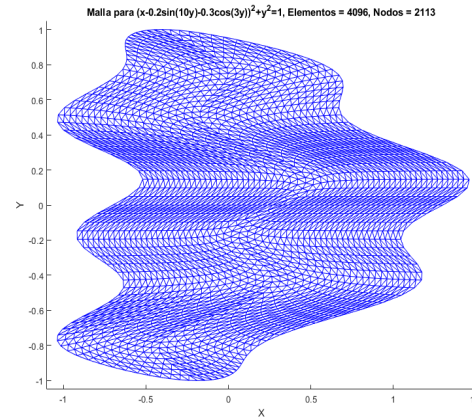


Figura 5.1.12: Malla triangular para la curva  $(x - 0.2 \sin 10y - 0.3 \cos 3y)^2 + y^2 = 1$ .

## 5.2. Generación de mallas triangulares sobre superficies

En esta sección se procederá a lo ya anunciado anteriormente, la generación de mallas triangulares para superficies tridimensionales. Dichas mallas las generaremos a partir de mallas triangulares de regiones en el plano tales como círculos y cuadrados.

### 5.2.1. Mallas sobre superficies de la forma $z = f(x, y)$ .

Para generar una malla triangular de una superficie de la forma  $z = f(x, y)$ , la idea es muy sencilla. Supongamos que  $\mathcal{V}_h$  es una malla triangular de una región cerrada en el plano, entonces al evaluar cada nodo  $(x_c, y_c) \in \mathcal{V}_h$  en la expresión  $z = f(x, y)$ , se obtiene una malla triangular  $\mathcal{V}'_h$  para la superficie  $z = f(x, y)$ .

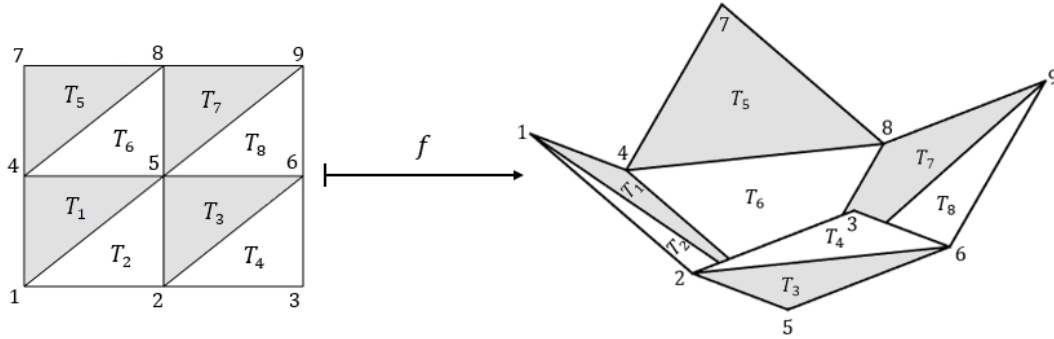


Figura 5.2.1: Generación de una malla triangular para una superficie  $z = f(x, y)$ .

Lo anterior se visualiza en la figura 5.2.1. Sea  $\mathbf{g}$  la matriz de conectividades que nos da la relación entre nodos o vértices y los triángulos o elementos que conforman la malla  $\mathcal{V}_h$ . Cada renglón  $\mathbf{R}_j$  de  $\mathbf{g}$  está conformado por los correspondientes nodos del elemento  $T_j$ , para cada  $j = 1, 2, \dots, ne$ , donde  $ne$  es el número de elementos o triángulos. De esta manera,  $\mathbf{g}$  es una matriz de tamaño  $ne \times 3$ . Para el caso de la figura (5.2.1) la matriz  $\mathbf{g}$  está conformada por

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 1 & 2 & 5 \\ 6 & 5 & 2 \\ 2 & 3 & 6 \\ 8 & 7 & 4 \\ 4 & 5 & 8 \\ 9 & 8 & 5 \\ 5 & 6 & 9 \end{pmatrix}.$$

Vemos que al evaluar cada uno de los nodos  $(x_c, y_c) \in \mathcal{V}_h$  en  $z = f(x, y)$  la matriz  $\mathbf{g}$  no se ve afectada en ninguna forma, es decir, es *invariante* bajo esta evaluación. Por lo tanto, el conjunto

$$\mathcal{V}'_h = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x = x_c, y = y_c, z = f(x_c, y_c); (x_c, y_c) \in \mathcal{V}_c\} \subset \mathbb{R}^3$$

constituye una malla triangular para la superficie  $z = f(x, y)$  con la misma matriz de conectividades  $\mathbf{g}$ .

El argumento que acabamos de dar para este tipo de mallas, también justifica las mallas generadas en las subsecciones (5.1.2-5.1.3) para ciertas regiones en el plano. Ahora mostramos algunas mallas de algunas superficies obtenidas mediante este método.

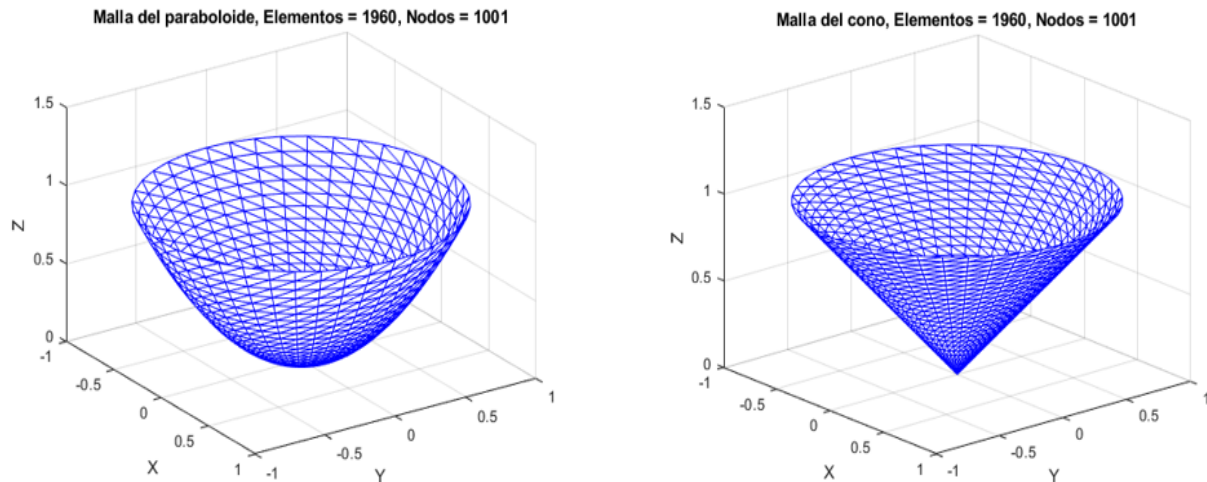


Figura 5.2.2: Mallas generadas a partir de una malla triangular del círculo unitario.

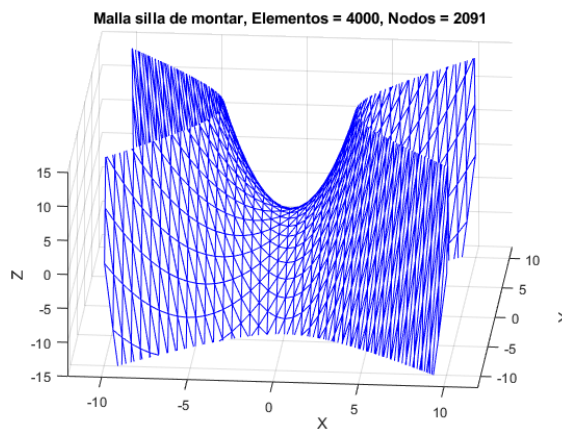


Figura 5.2.3: Malla generada a partir de una malla triangular de un rectángulo.

Aprovechando nuevamente la malla triangular del círculo de radio  $r > 0$ , que ya hemos utilizado para generar las mallas triangulares del cono y el paraboloido, podemos extender su uso para incluir las "tapas" en dichas mallas. Esto implica añadir la malla del círculo en la base del cono y en la sección correspondiente del paraboloido, completando así su geometría. También se generó la malla triangular de un cilindro circular recto de radio  $r > 0$  y altura  $h > 0$ , al que fueron añadidas las tapas superior e inferior para completar la superficie.

Por otro lado, para generar la malla de un cubo de lado  $L > 0$ , basta con crear las mallas triangulares de sus seis caras y unir las adecuadamente. A continuación, presentamos las mallas obtenidas.



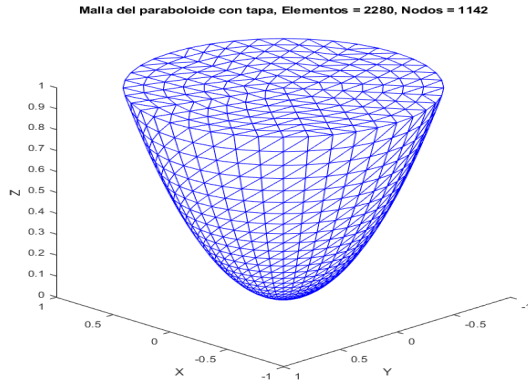


Figura 5.2.4: Malla del paraboloido con tapa.

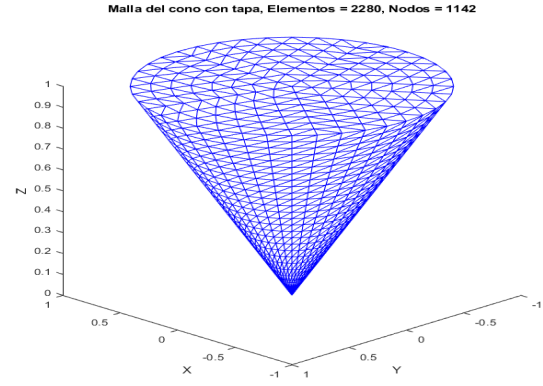


Figura 5.2.5: Malla del cono con tapa.

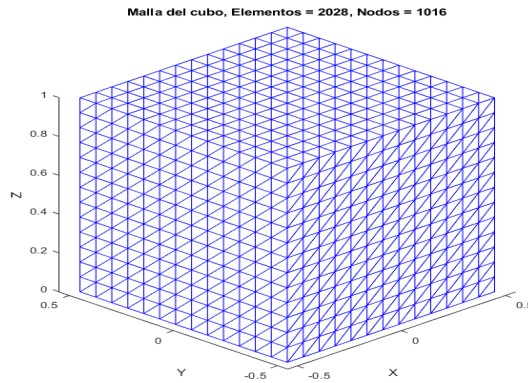


Figura 5.2.6: Malla del cubo generada a partir de una malla triangular de un cuadrado.

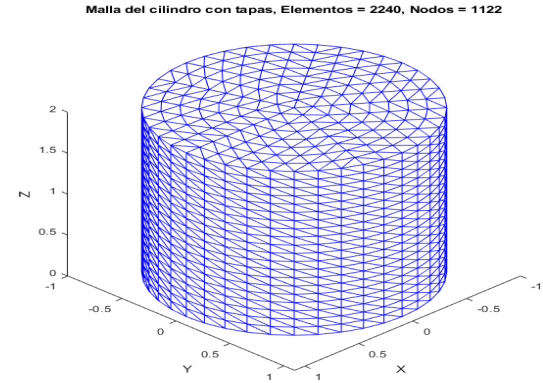


Figura 5.2.7: Malla del cilindro con tapas.

## 5.2.2. Mallas 3D obtenidas mediante ecuaciones dadas de manera implícita

En la sección (4.3) resolvimos la ecuación de Laplace-Beltrami en su forma elíptica y, para realizar la simulación numérica se discretizó el dominio mediante una malla triangular sobre la esfera unitaria. Podemos aprovechar dicha malla generada y aplicarla en la obtención de mallas triangulares para otras superficies. Por ejemplo, consideremos un elipsoide  $E$  cuya ecuación está dada por:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (5.2.9)$$

Podemos obtener la discretización de este elipsoide a partir de la malla triangular de una

esfera  $S$  de radio  $R > 0$ , utilizando las expresiones en coordenadas esféricas:

$$S : \begin{cases} x_s = R \cos \phi \sin \theta, \\ y_s = R \sin \phi \sin \theta, \\ z_s = R \cos \theta \end{cases} \quad \text{y} \quad E : \begin{cases} x_e = a \cos \phi \sin \theta, \\ y_e = b \sin \phi \sin \theta, \\ z_e = c \cos \theta. \end{cases} \quad (5.2.10)$$

para  $0 \leq \theta \leq \pi$  y  $0 \leq \phi < 2\pi$ . Observamos que las expresiones para  $E$  se pueden expresar en términos de las coordenadas de  $S$ :

$$E : \begin{cases} x_e = (a/R)x_s, \\ y_e = (b/R)y_s, \\ z_e = (c/R)z_s. \end{cases} \quad (5.2.11)$$

De esta manera, podemos aprovechar la malla triangular de  $S$  para obtener una discretización para  $E$ . Enseguida mostramos una representación gráfica de esta transformación:

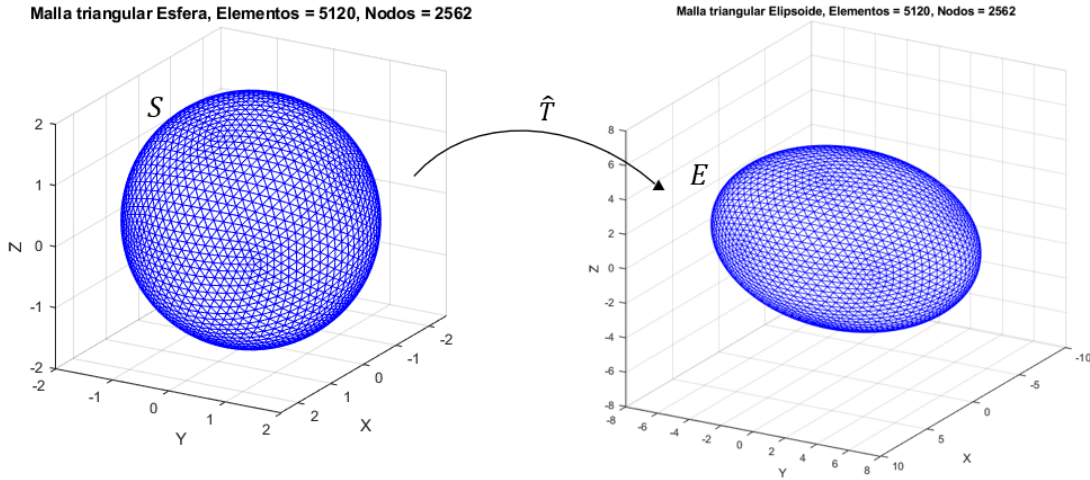


Figura 5.2.8: Discretización de  $E$  a partir de la triangularización de  $S$ .

Podemos generalizar un poco esta idea considerando los vértices  $\mathcal{V}_h$  de la malla en una esfera de radio  $R > 0$  representada por  $S_R$ . Para  $(x_s, y_s, z_s) \in \mathcal{V}_h$  un nodo arbitrario, sean  $h(x, y)$ ,  $g(x, z)$  y  $f(y, z)$  funciones continuas en  $(x_s, y_s)$ ,  $(x_s, z_s)$  y  $(y_s, z_s)$ , respectivamente. Consideremos la superficie de nivel  $S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : \mathcal{F}(x, y, z) = \rho^2, \rho > 0\}$  donde  $\mathcal{F}(x, y, z)$  está dada por

$$\mathcal{F}(x, y, z) = \left( \frac{x - f(y_s, z_s)}{a} \right)^2 + \left( \frac{y - g(x_s, z_s)}{b} \right)^2 + \left( \frac{z - h(x_s, y_s)}{c} \right)^2,$$

con  $a, b, c \neq 0$ . Entonces, al hacer

$$\frac{x - f(y_s, z_s)}{a} = \rho \cos \phi \sin \theta, \quad \frac{y - g(x_s, z_s)}{b} = \rho \sin \phi \sin \theta, \quad \frac{z - h(x_s, y_s)}{c} = \rho \cos \theta$$

y de las expresiones para los nodos de la malla de la esfera  $S_R$  en (5.2.10) obtenemos

$$x = f(y_s, z_s) + \frac{a \rho}{R} x_s, \quad y = g(x_s, z_s) + \frac{b \rho}{R} y_s, \quad z = h(x_s, y_s) + \frac{c \rho}{R} z_s,$$

las ecuaciones algebraicas que nos permitirán generar una malla triangular para la superficie de nivel  $\mathcal{S}$ . Ahora mostramos algunas discretizaciones de superficies obtenidas mediante este método a partir de una malla triangular de la esfera unitaria :

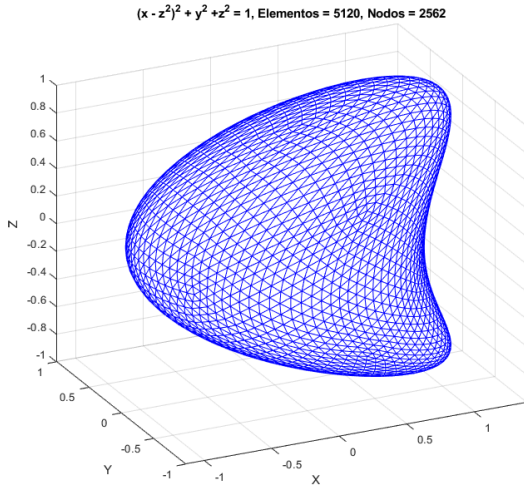


Figura 5.2.9:  $(x - z^2)^2 + y^2 + z^2 = 1$ .

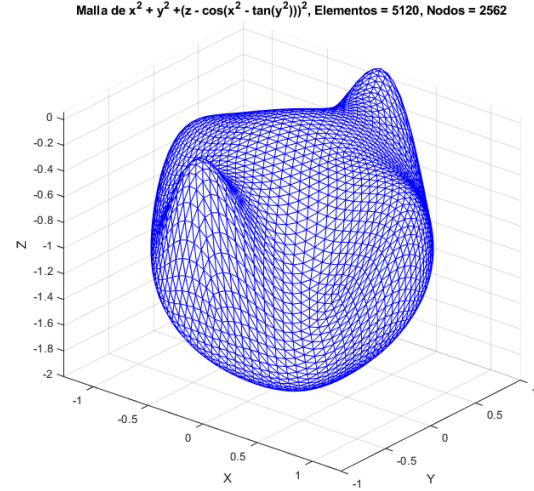


Figura 5.2.10:  $x^2 + y^2 + (z - \cos(x^2 + \tan(y^2)))^2 = 1$ .

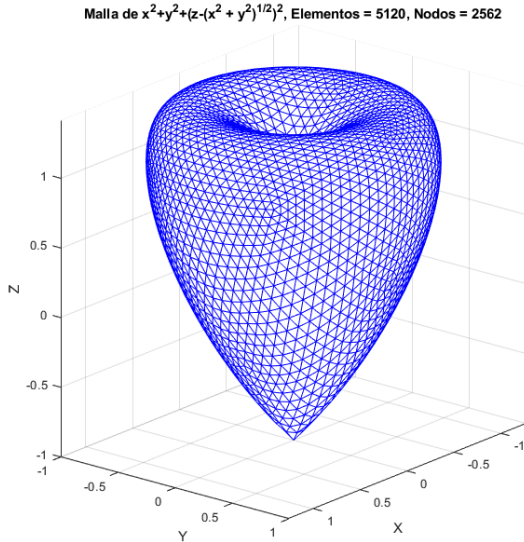


Figura 5.2.11:  $x^2 + y^2 + (z - \sqrt{x^2 + y^2})^2 = 1$ .

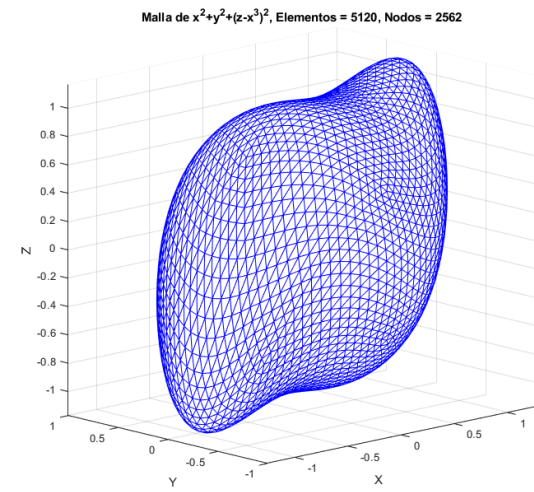


Figura 5.2.12:  $x^2 + y^2 + (z - x^3)^2 = 1$ .

**Nota.** Las superficies de nivel que se desean mallar mediante este método deben ser superficies cerradas.

### 5.2.3. Malla del toroide y algunas variaciones

A partir de una malla triangular de un cuadrado en el plano, es posible obtener la correspondiente malla para un toroide cuyas ecuaciones paramétricas están determinadas por las expresiones

$$x = (R + r \cos \theta) \cos \phi \quad (5.2.12)$$

$$y = (R + r \cos \theta) \sin \phi \quad (5.2.13)$$

$$z = r \sin \theta \quad (5.2.14)$$

donde  $r > 0$ ,  $R > 0$  son los radios menor y mayor del toroide, respectivamente, y  $0 \leq \theta, \phi \leq 2\pi$ . La idea intuitiva para formar un toroide a partir de un cuadrado de lado  $L > 0$ , en nuestro caso, es pegar o juntar las orillas derecha e izquierda del cuadrado, formando un tubo cilíndrico de altura  $L$  y después unir o juntar la frontera superior de dicho cilindro con la frontera inferior del mismo. Computacionalmente, esta es la idea detrás de la programación para la generación de la malla de un toroide a partir de una malla triangular de un cuadrado.

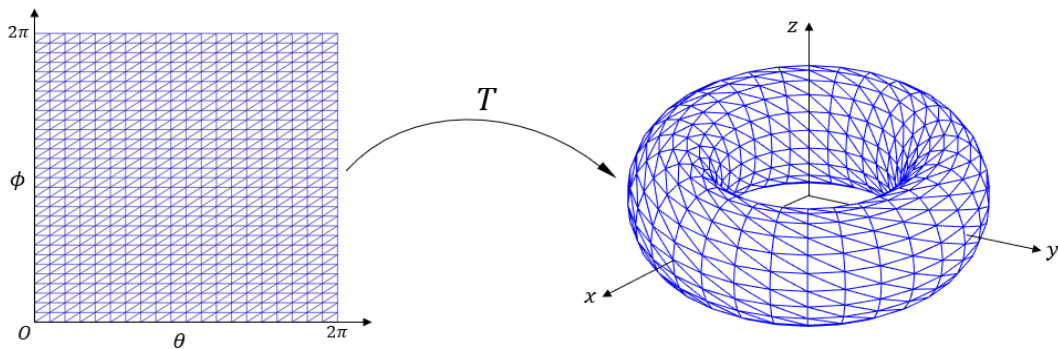


Figura 5.2.13: Generación de la malla de un toroide.

**Variaciones del toroide.** Como primera variación inmediata, consideramos el radio menor  $r$  no constante, es decir,  $r = r(\phi)$  con  $r(\phi) \geq 0$  para todo  $\phi \in [0, 2\pi]$ . Esto producirá una malla triangular del *toroide deformado*. Enseguida mostramos una ejemplo al considerar  $R = 3$  y  $r(\phi) = \frac{1}{2} |a \cos(b \phi) - a \sin(c \phi) + (a + 1)|$ , con  $a = 0.5$ ,  $b = 5$  y  $c = 10$ :

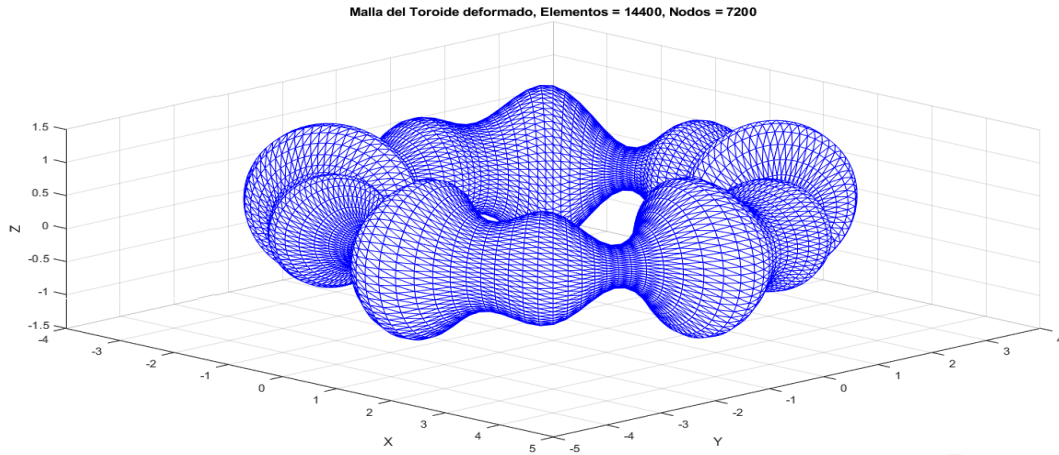


Figura 5.2.14: Malla de un toroide deformado.

Se puede hacer algo similar considerando  $r$  constante y  $R = R(\theta)$  variable. Ahora, basándonos en [29] podemos hacer ciertas modificaciones a las ecuaciones (5.2.12-5.2.14) para obtener otras superficies con formas interesantes y, por medio de la malla del toroide obtener las mallas triangulares para dichas superficies. Por ejemplo, al considerar  $R = 3$ ,  $r = 1$ ,  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ,  $0 \leq \phi \leq 4\pi$  y modificar la componente en  $z$  de las ecuaciones del toroide obtenemos

$$x = (3 + \cos \theta) \cos \phi \quad (5.2.15)$$

$$y = (3 + \cos \theta) \sin \phi \quad (5.2.16)$$

$$z = \sin \theta - 0.325 \phi \quad (5.2.17)$$

De esta manera al utilizar el código de la malla del toroide con dichas adecuaciones, obtenemos la siguiente malla triangular :

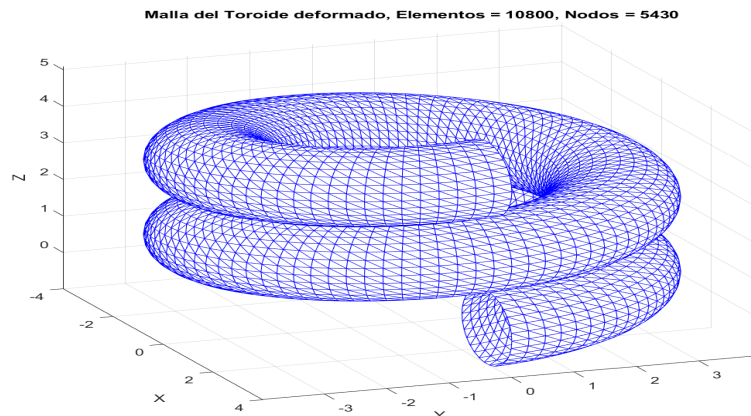


Figura 5.2.15: Malla del toroide enrollado.

### 5.3. Análisis de calidad de mallas triangulares

La generación de una malla triangular de alta calidad es fundamental para asegurar la fiabilidad de los resultados obtenidos mediante el método de elementos finitos y además juega un papel crucial en la eficiencia global del proceso de simulación numérica. Como tal, el análisis y la mejora de la calidad de la malla deben considerarse como pasos indispensables en cualquier proyecto de simulación basado en FEM. Este análisis implica evaluar métricas como el tamaño de los elementos, la uniformidad de la malla, la ortogonalidad y la relación de aspecto de los triángulos. El objetivo es asegurar que la malla generada sea adecuada para capturar las características del problema físico a resolver, minimizando errores y optimizando la eficiencia del cálculo.

**Factores que influyen en la calidad de una malla triangular :**

- **Tamaño del triángulo:** Triángulos con tamaños uniformes son deseables.
- **Relación de aspecto:** Esta es la relación entre el lado más largo y el más corto del triángulo. Un valor cercano a 1 indica un triángulo de buena calidad.
- **Ángulos internos:** Ángulos cercanos a 60 grados son ideales, mientras que ángulos demasiado pequeños o demasiado grandes pueden ser problemáticos.

En [41] se puede encontrar varias formas para evaluar la calidad de un triángulo en una malla. Aquí solo presentamos la medida determinada por el denominado **coeficiente de forma** dado por :

$$q = \frac{4\sqrt{3}A}{a^2 + b^2 + c^2} \quad (5.3.18)$$

donde  $A$  es el área del triángulo y  $a$ ,  $b$  y  $c$  son las longitudes de los lados. Un valor de  $q$  cercano a 1 indica un triángulo de alta calidad.

Consideremos el problema Laplace-Beltrami tomado de [38] con condiciones de frontera tipo Neumann homogéneas :

$$\begin{aligned} -\nabla_{\Sigma}^2 u &= ((4 + \pi^2)x^2 - 2) \cos(\pi z), \quad \forall (x, y, z) \in \Sigma, \\ \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} &= 0, \quad \forall (x, y, z) \in \partial \Sigma. \end{aligned}$$

Donde  $\Sigma$  es el cilindro circular recto dado por

$$\Sigma = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 = 1 \text{ y } 0 \leq z \leq 2\}. \quad (5.3.19)$$

Este problema del tipo elíptico tiene solución exacta  $u(x, y, z) = x^2 \cos(\pi z)$ . Ahora, vamos a obtener la aproximación numérica mediante de dicho problema utilizando dos mallas triangulares distintas para el cilindro  $\Sigma$ . Enseguida mostramos la calidad de cada una de las mallas utilizadas para discretizar  $\Sigma$ , para las cuales se consideró como parámetro de calidad el coeficiente expresado en (5.3.18) :

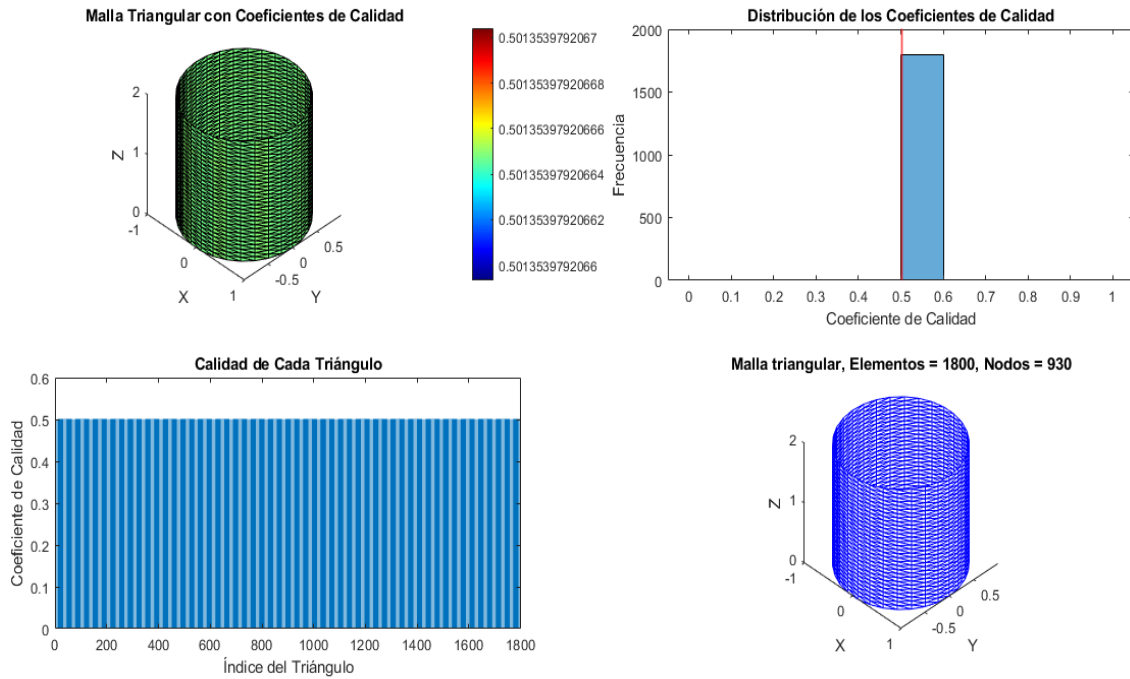


Figura 5.3.1: Calidad de malla triangular 1.

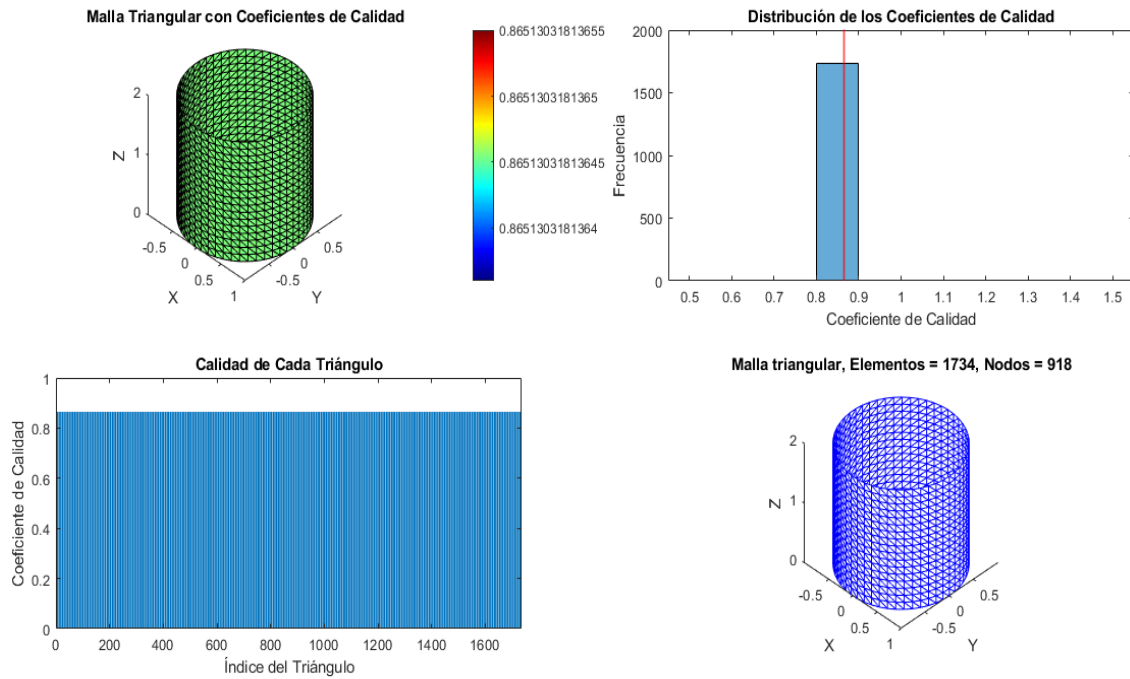


Figura 5.3.2: Calidad de malla triangular 2.

Para la primera malla triangular se tiene un coeficiente de calidad promedio  $q_1 = 0.5014$  y para la segunda malla triangular se obtuvo  $q_2 = 0.8651$ . Entonces, de acuerdo a lo mencionado anteriormente, la segunda malla presenta mejor calidad en cada uno de sus triángulos en comparación con la primera, de modo que, para la segunda malla se espera

obtener una mejor aproximación numérica a la solución exacta dada.

Al resolver numéricamente el problema (5.3.19) considerando cada una de las mallas, respectivamente, se obtuvo un error relativo  $\varepsilon_{r_1}$  en norma  $L_2$  para la primera malla de  $\varepsilon_{r_1} = 0.3817$ , y para la segunda malla se obtuvo un error relativo  $\varepsilon_{r_2} = 0.0636$ , mostrando así, que una mejor calidad en la malla triangular utilizada, nos proporciona mejor aproximación numérica. Finalmente, para completar este ejemplo, mostramos la solución exacta y la solución aproximada de dicho problema.

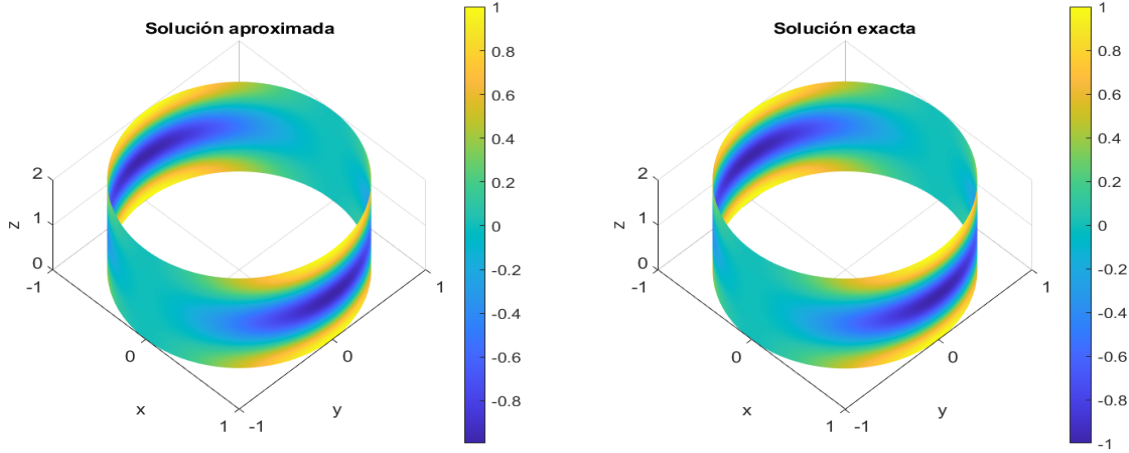


Figura 5.3.3: Solución exacta y aproximada del problema (5.3.19).

## 5.4. Simulaciones 3D

Esta sección corresponde a la parte de simulaciones numéricas sobre superficies tridimensionales. En el capítulo 3 se hizo un análisis detallado de las condiciones matemáticas que deben satisfacer los sistemas reacción difusión del tipo (3.1.1-3.1.4) para que generen patrones espaciales a partir de sus soluciones temporales. Un análisis similar se puede hacer para el **sistema Laplace-Beltrami**:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_u \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u} + \gamma f(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \times (0, T) \quad (5.4.20)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_v \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{v} + \gamma g(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \times (0, T) \quad (5.4.21)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad \forall (\mathbf{x}, t) \in \partial \Sigma \times (0, T) \quad (5.4.22)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5.4.23)$$

y establecer las condiciones matemáticas que garanticen la generación de patrones espaciales sobre el dominio  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  de dicho sistema a partir de sus soluciones temporales. Sin embargo, la ruta que seguiremos es aprovechar lo realizado para regiones planas y utilizar las condiciones de Turing establecidas en cada modelo y realizar simulaciones numéricas sobre superficies, utilizando el mismo valor de los parámetros o ligeras variaciones de los



mismos. La diferencia en este caso es que para regiones planas, la difusión se modeló mediante el operador de Laplace común y para el sistema (5.4.20-5.4.23) la difusión está modelada matemáticamente mediante el operador de Laplace-Beltrami para superficies tridimensionales.

El esquema que se empleará para realizar las simulaciones computacionales será mediante un esquema **semi-implícito**, el cual describimos a continuación:

Discretizamos el intervalo  $[0, T]$  mediante  $t_n = n \Delta t$  con  $\Delta t > 0$  la longitud de cada subintervalo temporal y  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Dadas las condiciones iniciales, suponiendo que  $(\mathbf{u}^0(\mathbf{x}), \mathbf{v}^0(\mathbf{x}))^T = (\mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \mathbf{v}_0(\mathbf{x}))^T$ ,  $(\mathbf{u}^1(\mathbf{x}), \mathbf{v}^1(\mathbf{x}))^T \approx (\mathbf{u}(\mathbf{x}, \Delta t), \mathbf{v}(\mathbf{x}, \Delta t))^T, \dots, (\mathbf{u}^n(\mathbf{x}), \mathbf{v}^n(\mathbf{x}))^T \approx (\mathbf{u}(\mathbf{x}, n\Delta t), \mathbf{v}(\mathbf{x}, n\Delta t))^T$ , para  $n = 1, 2, \dots, T$ , podemos calcular una aproximación para  $(\mathbf{u}^{n+1}(\mathbf{x}), \mathbf{v}^{n+1}(\mathbf{x}))^T$  resolviendo el sistema

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} - D_u \nabla_\Sigma^2 \mathbf{u}^{n+1} = \gamma \mathbf{f}^n, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5.4.24)$$

$$\frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} - D_v \nabla_\Sigma^2 \mathbf{v}^{n+1} = \gamma \mathbf{g}^n, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5.4.25)$$

donde  $\mathbf{f}^n = \mathbf{f}(\mathbf{u}^n, \mathbf{v}^n)$  y  $\mathbf{g}^n = \mathbf{g}(\mathbf{u}^n, \mathbf{v}^n)$ . Entonces, al hacer  $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{n+1}$ ,  $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{n+1}$ ,  $\alpha = 1/\Delta t$  y  $\mathbf{f} = \gamma \mathbf{f}^n + \alpha \mathbf{u}^n$ ,  $\mathbf{g} = \gamma \mathbf{g}^n + \alpha \mathbf{v}^n$ , se tiene que en cada paso de tiempo  $t_n = n\Delta t > 0$  debemos resolver un problema de la forma

$$\alpha \mathbf{u} - D_u \nabla_\Sigma^2 \mathbf{u} = \mathbf{f}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5.4.26)$$

$$\alpha \mathbf{v} - D_v \nabla_\Sigma^2 \mathbf{v} = \mathbf{g}, \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma \quad (5.4.27)$$

$$(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})\mathbf{u} = (\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})\mathbf{v} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial\Sigma. \quad (5.4.28)$$

El esquema se denomina *semi-implícito* porque las aproximaciones a  $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$  y  $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$  se obtienen mediante el método de Euler implícito y las funciones  $\mathbf{f}^n$  y  $\mathbf{g}^n$  quedan expresadas de manera explícita. De esta manera, al reescribir el sistema (5.4.20-5.4.23) discretizado y en forma vectorial se tiene que en cada instante de tiempo  $t_n = n\Delta$  se está resolviendo:

$$\alpha \mathbf{w} - \mathbb{D} \nabla^2 \mathbf{w} = \hat{\mathbf{f}} \quad (5.4.29)$$

donde  $\mathbf{w} = (\mathbf{u}(\mathbf{x}), \mathbf{v}(\mathbf{x}))^T$ ,  $\nabla^2 \mathbf{w} = (\nabla^2 \mathbf{u}(\mathbf{x}), \nabla^2 \mathbf{v}(\mathbf{x}))^T$ ,  $\mathbb{D} = \begin{bmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{bmatrix}$  y  $\hat{\mathbf{f}} = (\mathbf{f}, \mathbf{g})^T$ .

### 5.4.1. Modelo Turing-exponencial

La generalización a superficies tridimensionales del modelo Turing exponencial visto en el capítulo 3, utilizando el operador Laplace-Beltrami, se expresa de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_u \nabla_\Sigma^2 \mathbf{u} + \gamma(\alpha \mathbf{u} e^v + \beta \mathbf{v} e^u), \quad (5.4.30)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_v \nabla_\Sigma^2 \mathbf{v} + \gamma(\delta \mathbf{u} e^v - \epsilon \mathbf{v} e^u), \quad (5.4.31)$$

donde  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\delta$ ,  $\epsilon$  son los parámetros de las reacciones,  $D_u$ ,  $D_v > 0$  son los coeficientes de difusión y  $\gamma > 0$  es el factor de escala.

Comenzamos con dos simulaciones realizadas sobre un elipsoide: la primera sin un pulso agregado a la superficie y la segunda con un pulso añadido, con el objetivo de comparar los patrones resultantes. En ambos casos, se utilizó una malla triangular con 10,242 nodos (vértices) y 20,480 elementos (triángulos). Los coeficientes de difusión empleados fueron  $D_u = 1 \times 10^{-2}$  y  $D_v = 6 \times 10^{-2}$ , con un factor de escala  $\gamma = 20$  y un tamaño de paso de tiempo de  $\Delta t = 10^{-3}$ . Para ambas simulaciones, los parámetros considerados fueron:  $\alpha = 1$ ,  $\beta = -1$ ,  $\delta = 2$  y  $\epsilon = 1.5$ .

A continuación, se presentan los resultados obtenidos :

**Elipsoide sin pulso :** Se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

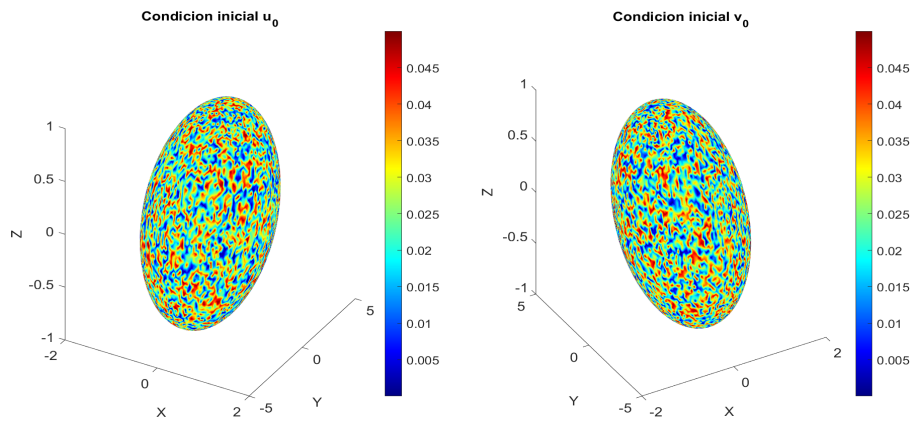


Figura 5.4.1: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

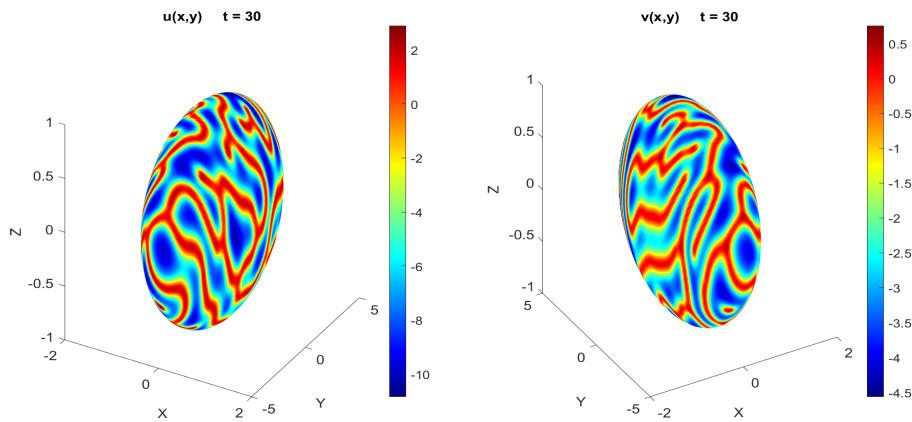


Figura 5.4.2: Concentraciones al tiempo  $t = 30$ .

**Elipsoide con pulso :** Se realizaron un total de 36 000 iteraciones.

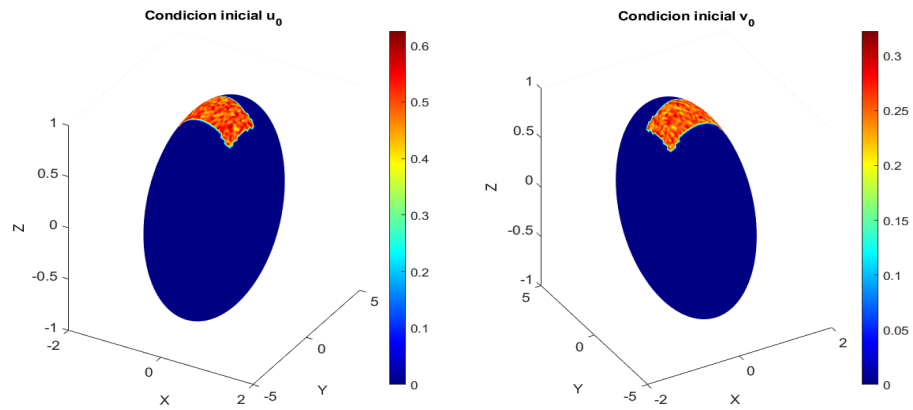


Figura 5.4.3: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

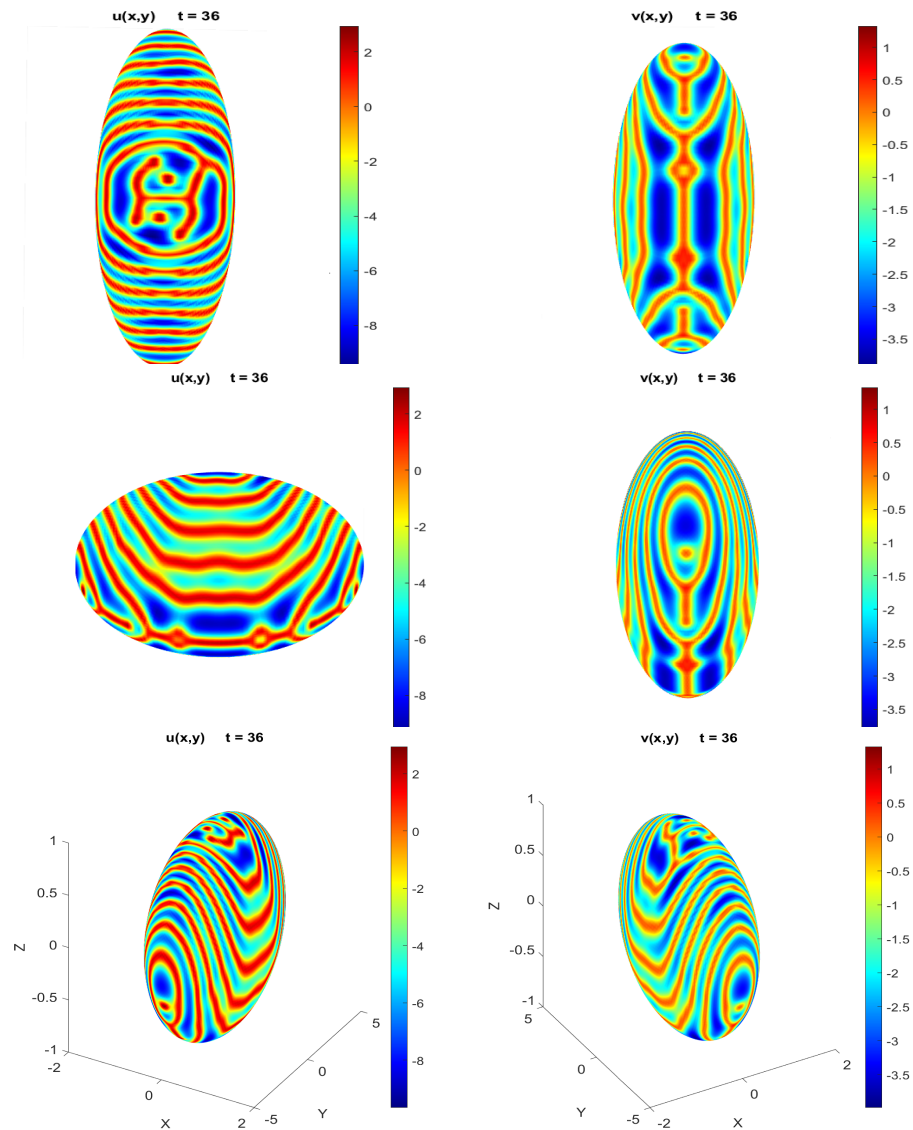


Figura 5.4.4: Concentraciones al tiempo  $t = 36$ .

**Esfera unitaria:** Se utilizó una malla triangular que consta de 40962 nodos y 81920 elementos. Se utilizó el mismo valor en los parámetros para el caso del elipsoide. Se realizaron un total de 20000 iteraciones. Se muestra el resultado para ambas concentraciones  $u(\mathbf{x})$ ,  $v(\mathbf{x})$  en distintas perspectivas.

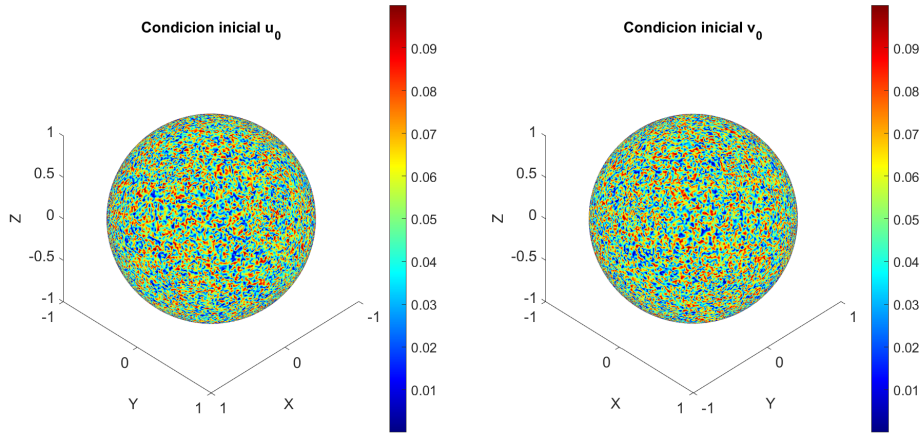


Figura 5.4.5: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

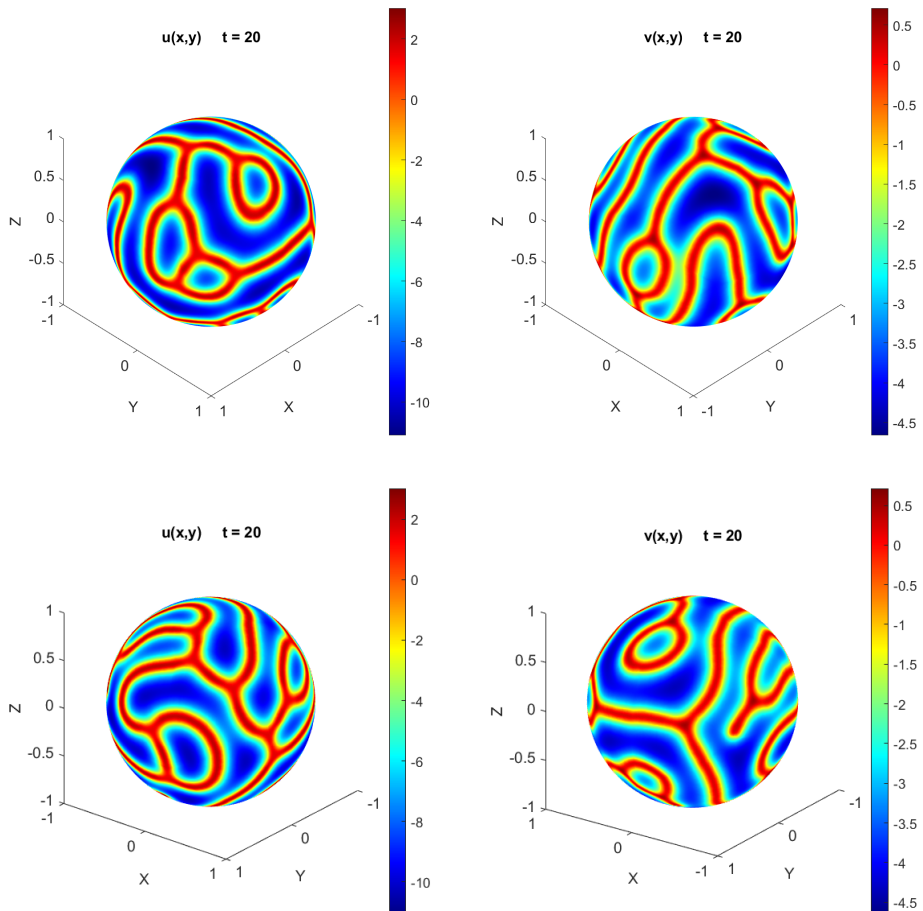


Figura 5.4.6: Concentraciones al tiempo  $t = 15$ .

**Esfera unitaria con 4 pulsos :** Mismos parámetros anteriores. Se realizaron un total de 15000 iteraciones. Se muestran distintas perspectivas de los resultados obtenidos en la simulación.

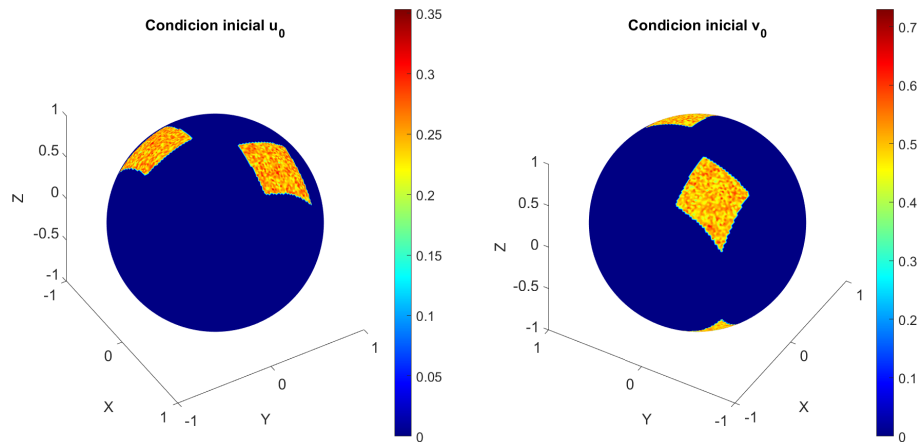


Figura 5.4.7: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

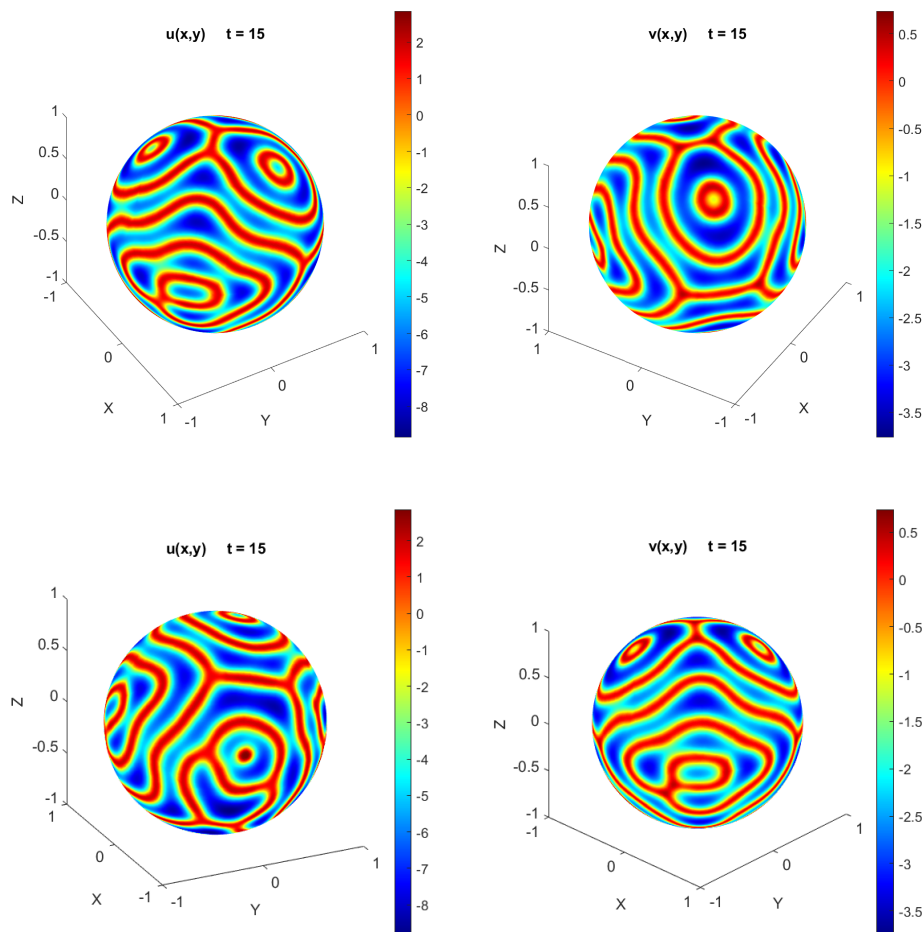


Figura 5.4.8: Concentraciones al tiempo  $t = 15$ .

**Toroide :** Radio mayor  $R = 3$ , radio menor  $r = 1$ . Se utilizó una malla que consta de 38400 nodos y 76800 elementos. Se realizaron un total de 25 000 iteraciones.

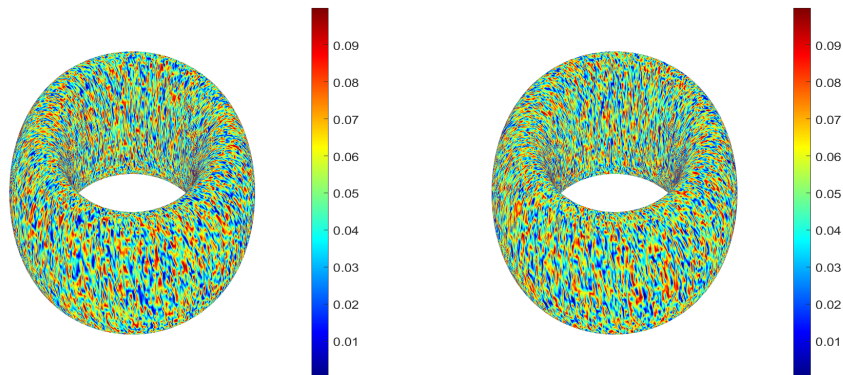


Figura 5.4.9: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

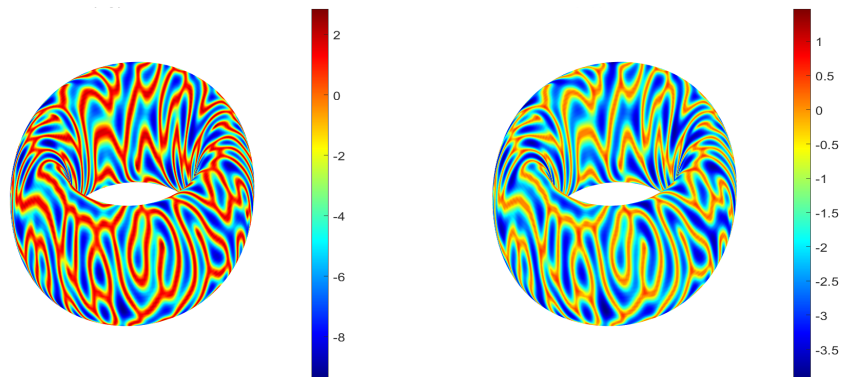


Figura 5.4.10: Concentraciones al tiempo  $t = 25$ .

**Toroide con 8 pulsos :** Radio mayor  $R = 3$ , radio menor  $r = 1$ . Se utilizó una malla que consta de 38400 nodos y 76800 elementos. Se realizaron un total de 40 000 iteraciones.

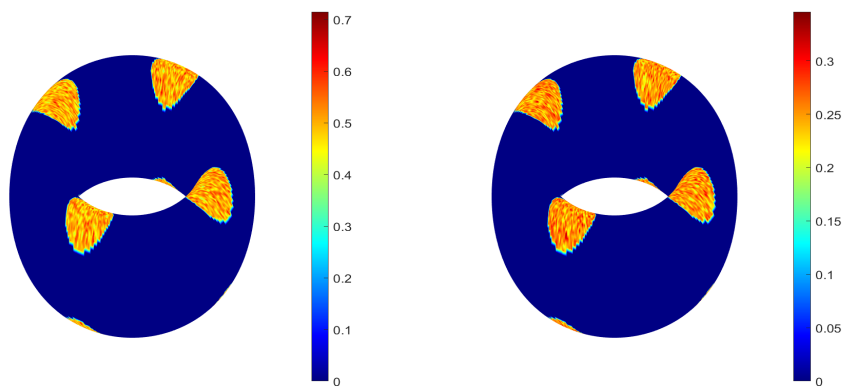


Figura 5.4.11: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

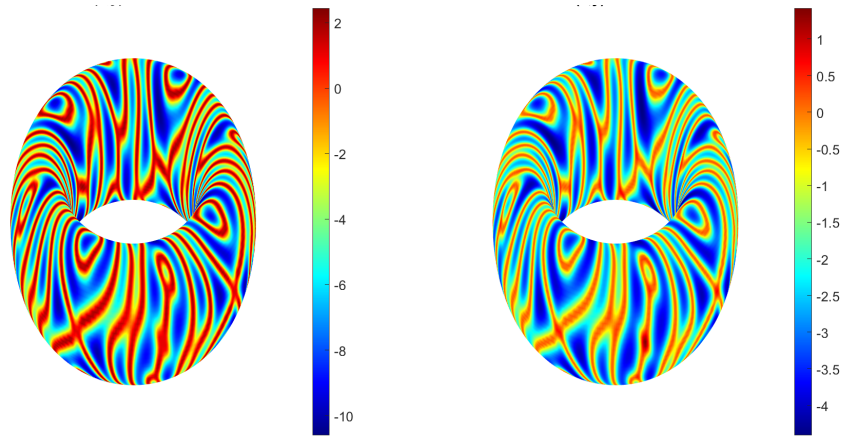


Figura 5.4.12: Concentraciones al tiempo  $t = 40$ .

**Toroide enrollado :** Radio mayor  $R = 1$ , radio menor  $r = 1/3$ ,  $0 \leq \theta \leq 4\pi$ . Se utilizó una malla que consta de 48690 nodos y 97200 elementos. Se realizaron un total de 40 000 iteraciones.

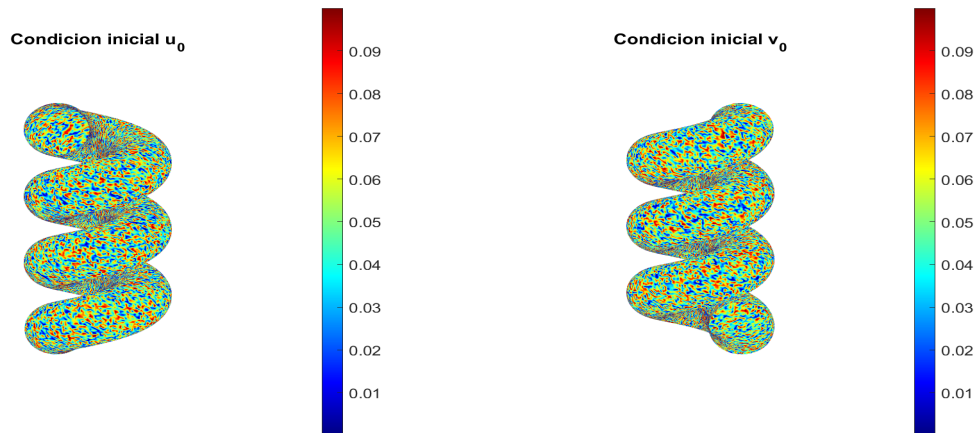


Figura 5.4.13: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

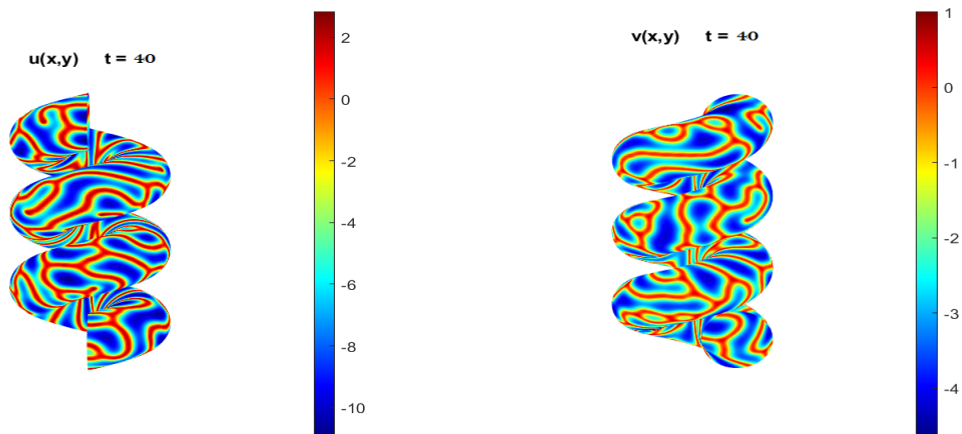


Figura 5.4.14: Concentraciones al tiempo  $t = 40$ .

**Toroide enrollado con 16 pulsos :** Radio mayor  $R = 1$ , radio menor  $r = 4/5$ ,  $0 \leq \theta \leq 4\pi$ . Se utilizó una malla que consta de 48690 nodos y 97200 elementos. Se realizaron un total de 40 000 iteraciones.

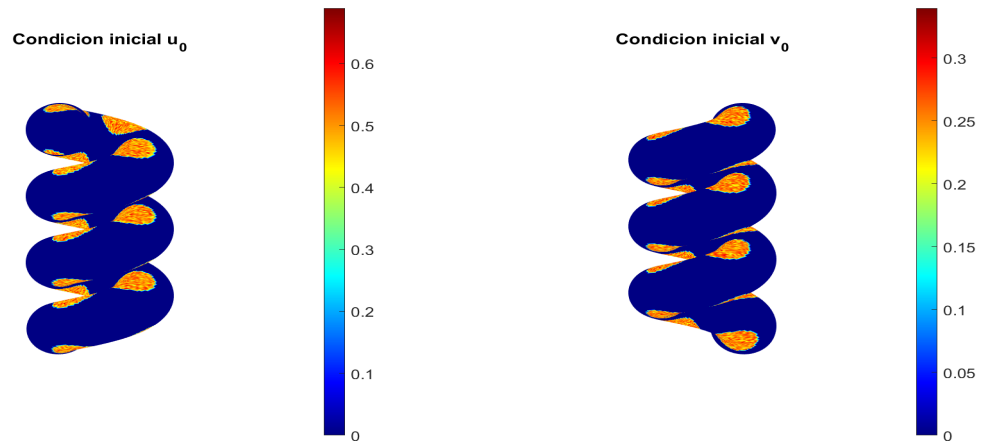


Figura 5.4.15: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

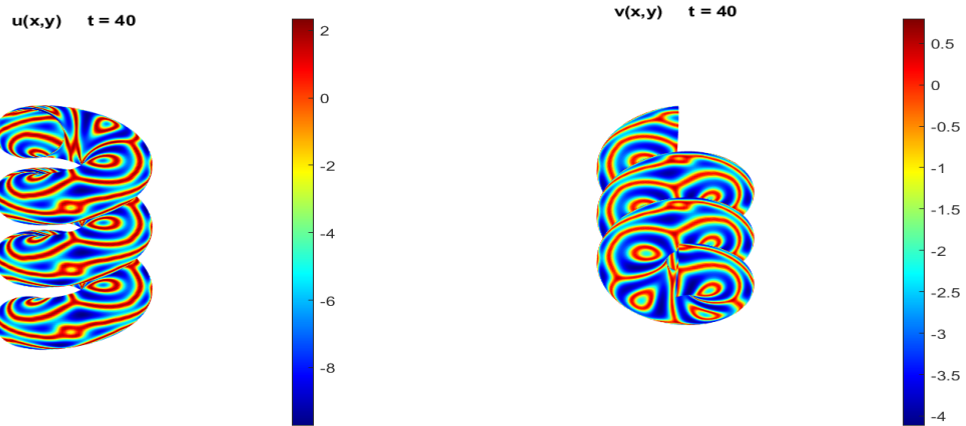


Figura 5.4.16: Concentraciones al tiempo  $t = 40$ .

En todas las simulaciones presentadas para este modelo Turing-exponencial, se utilizaron los mismos valores de los parámetros utilizados para regiones planas, salvo algunas variaciones del factor de escala  $\gamma > 0$ . Vemos que sin insertar pulsos en las condiciones iniciales, los patrones generados sobre superficies son muy parecidos a los generados sobre regiones en  $\mathbb{R}^2$  como puede observarse en las figuras 3.5.15 y 3.5.17. Sin embargo, cuando se crearon pulsos en las condiciones iniciales, los patrones generados sobre superficies cambiaron en gran medida respecto a los patrones generados para regiones en el plano. Aquí es, en donde la geometría y la curvatura de las superficies juega un papel importante, ya que por lo general, en regiones de las superficies donde se presente una mayor curvatura, o bien, se presente curvatura negativa, como lo es para el caso del toroide, los patrones tienden a alargarse. Cabe recalcar, que la forma de los patrones generados tanto en regiones en el plano, así como para superficies tridimensionales se vieron modificados de manera importante al insertar pulsos en las condiciones iniciales.



Enseguida mostramos los resultados obtenidos de las simulaciones realizadas para este modelo Turing-exponencial, tanto para regiones planas, así como para superficies, para poder compararlos visualmente.

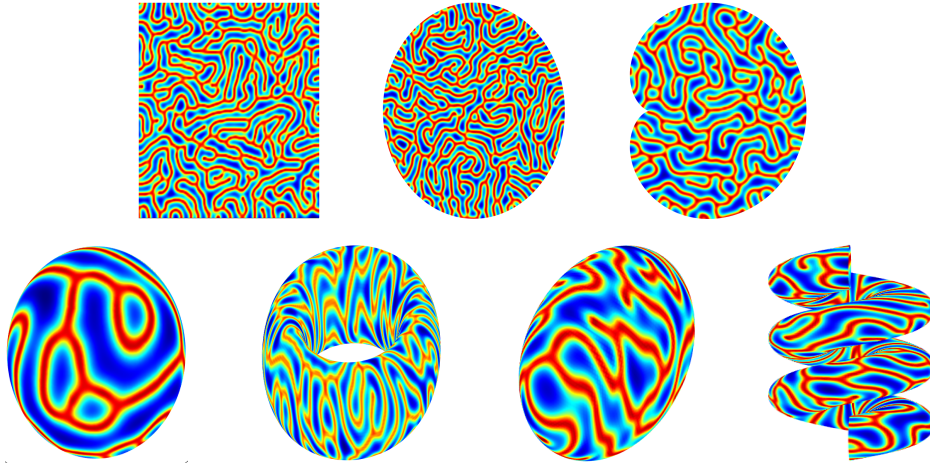


Figura 5.4.17: Simulaciones del modelo Turing-exponencial sin pulsos en las condiciones iniciales.

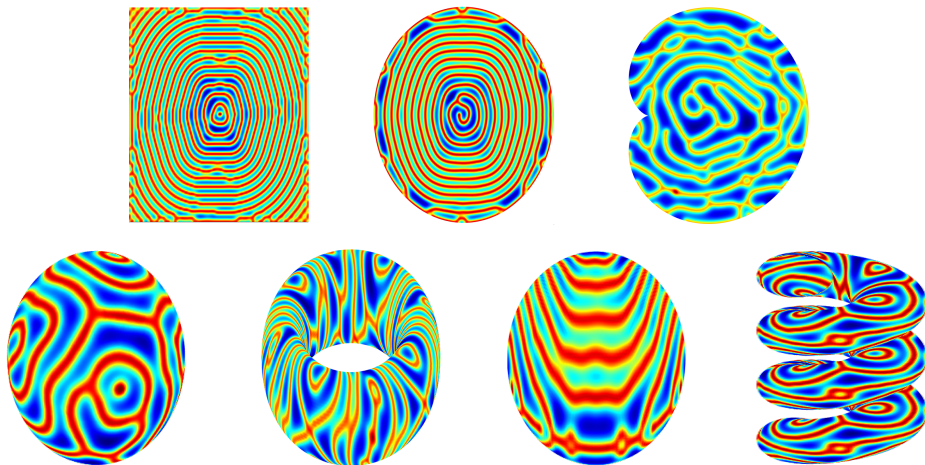


Figura 5.4.18: Simulaciones del modelo Turing-exponencial con pulsos en las condiciones iniciales.

### 5.4.2. Modelo de Schnakenberg

A partir del modelo de Schnakenberg bidimensional, mediante el operador de Laplace-Beltrami  $\nabla_{\Sigma}^2$  definido sobre una superficie  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ , lo extendemos a superficies para poder analizar patrones de Turing generados sobre las mismas, por medio del sistema :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{a} - \mathbf{u} + \mathbf{u}^2 \mathbf{v}) + \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u}, \quad (5.4.32)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \gamma(\mathbf{b} - \mathbf{u}^2 \mathbf{v}) + D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{v}, \quad (5.4.33)$$

con  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \gamma$  constantes positivas y  $D_\Sigma = D_v/D_u > 0$  es la razón de difusividades. Como ya sabemos los puntos de equilibrio en ausencia de difusión se encuentran en

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{b}}{(\mathbf{a} + \mathbf{b})^2}. \quad (5.4.34)$$

Para las simulaciones numéricas se consideraron como parámetros los valores:  $\mathbf{a} = 0.126779$ ,  $\mathbf{b} = 0.792366$ ,  $\gamma = 1000$ ,  $D_\Sigma = 20$  con un tamaño de paso tiempo  $\Delta t = 10^{-4}$ . Se perturbó el punto de equilibrio  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$  generando ruido blanco al 10 % alrededor de él mediante una distribución uniforme.

**Esfera unitaria:** Se utilizó un valor de  $N = 6$  para obtener la malla triangular que consta de 81920 elementos triangulares y 40962 nodos o vértices. Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

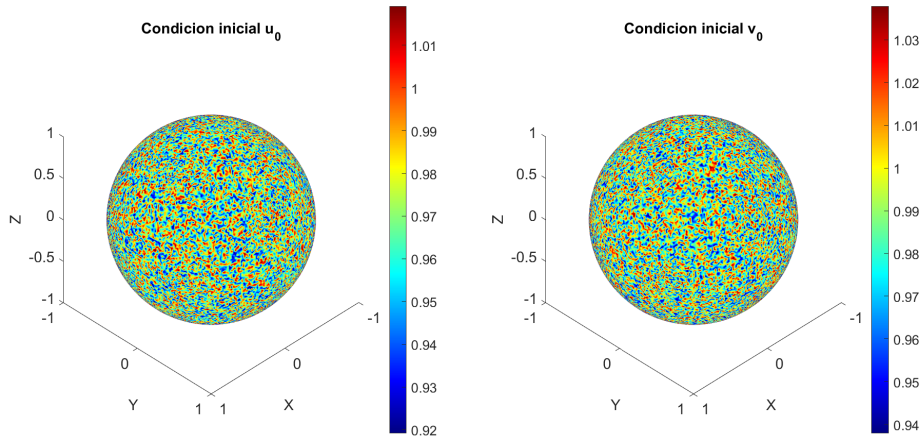


Figura 5.4.19: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

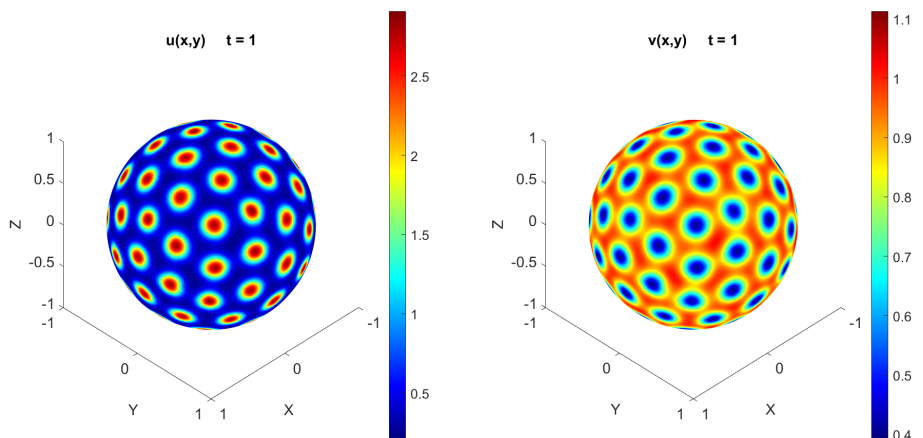


Figura 5.4.20: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Paraboloide sin tapa:** Se utilizó una malla que consta de 22501 nodos o vértices y 44850 elementos o triángulos. Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

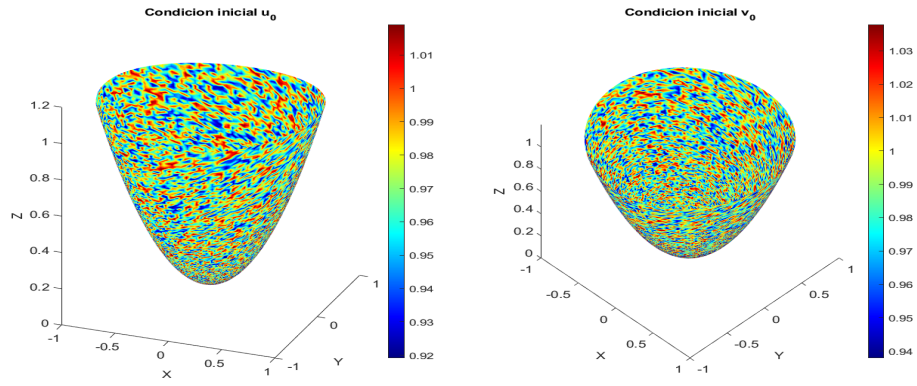


Figura 5.4.21: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

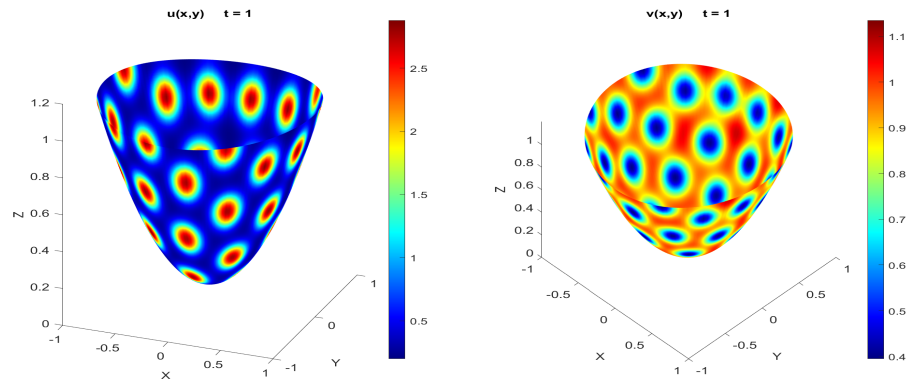


Figura 5.4.22: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Paraboloide con tapa:** Se utilizó una malla que consta de 19902 nodos y 39800 elementos. Se realizaron un total de 10 000 iteraciones.

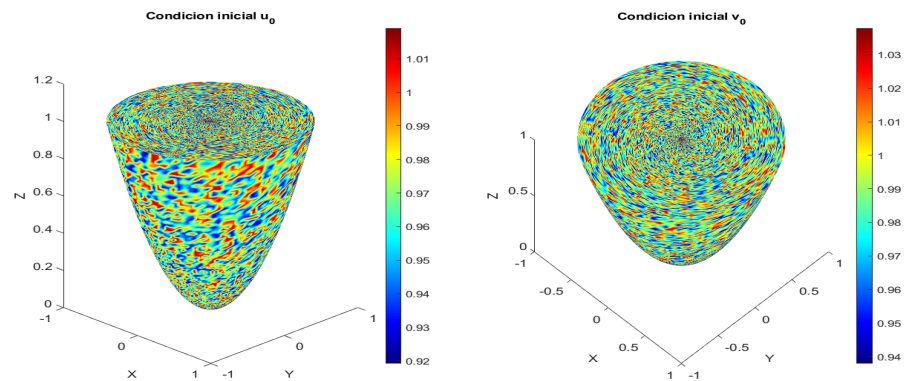


Figura 5.4.23: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

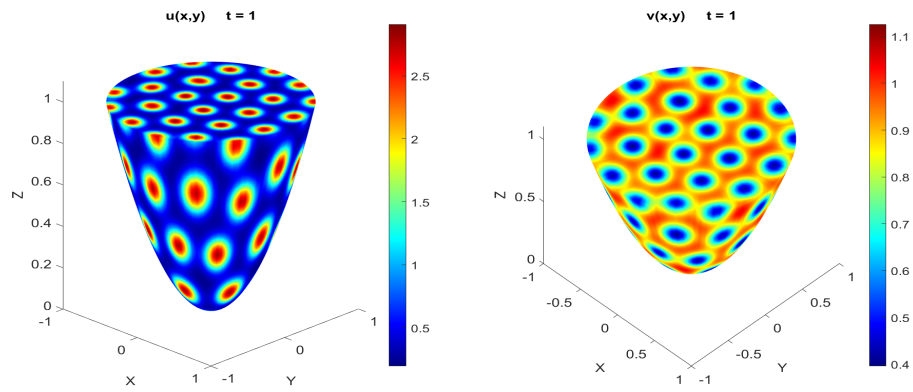


Figura 5.4.24: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Cono sin tapa :** Se utilizó una malla que consta de 22501 nodos y 44850 elementos. Se realizaron un total de 13 000 iteraciones.

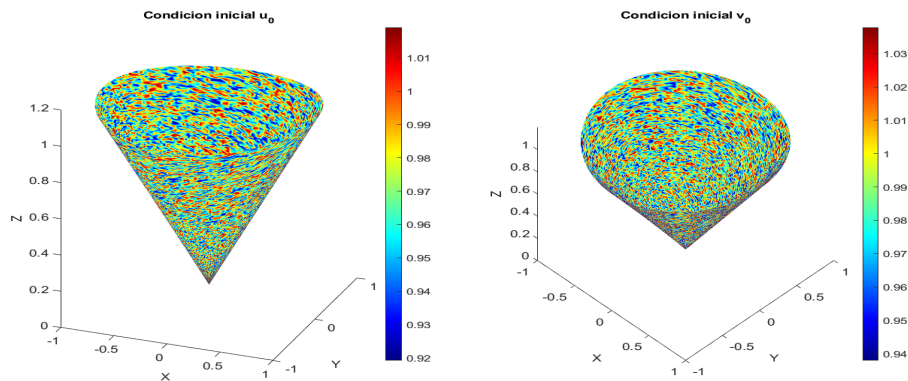


Figura 5.4.25: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

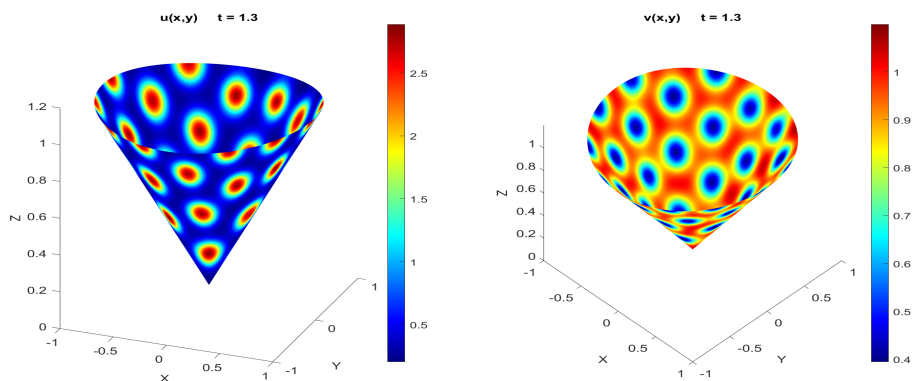


Figura 5.4.26: Concentraciones al tiempo  $t = 1.3$ .

**Cono con tapa :** Se utilizó una malla que consta de 19902 nodos y 39800 elementos. Se realizaron un total de 6 000 iteraciones.

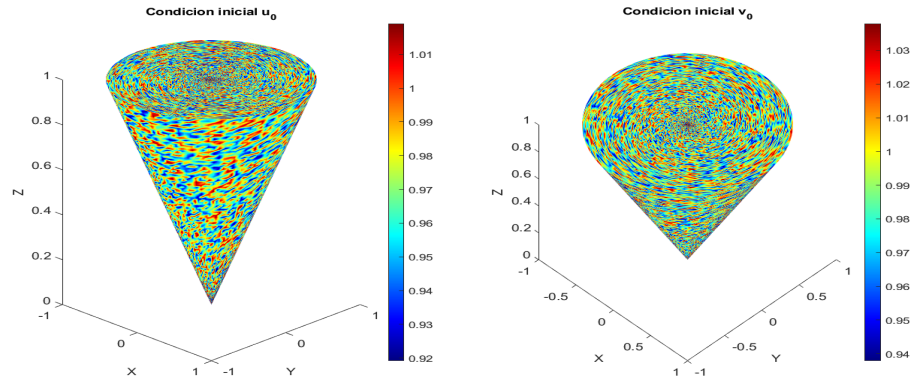


Figura 5.4.27: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

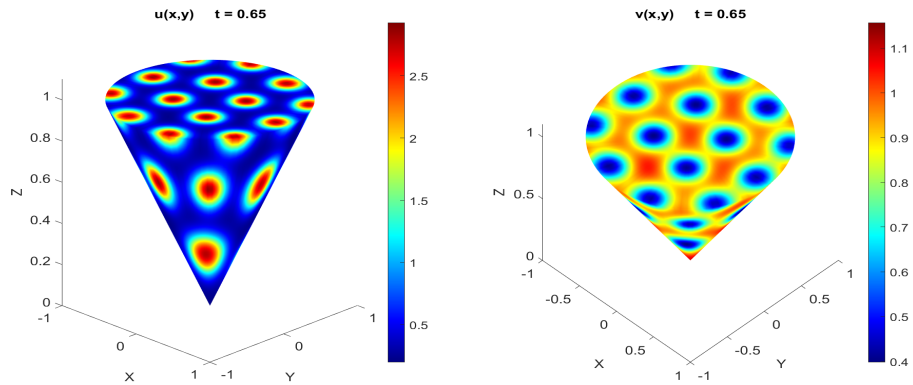


Figura 5.4.28: Concentraciones al tiempo  $t = 0.65$ .

**Silla de montar :** Se utilizó una malla que consta de 19881 nodos y 39200 elementos, se consideró  $\gamma = 10$  y una razón de difusividades  $D_{\Sigma} = 40$ . Se realizaron un total de 120 000 iteraciones.

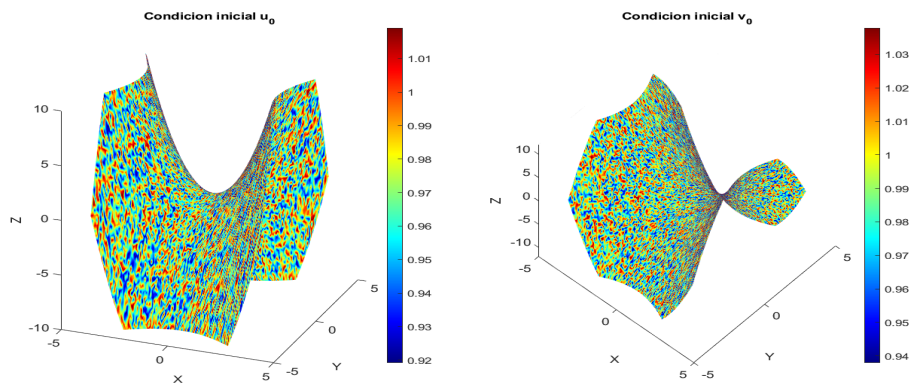


Figura 5.4.29: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

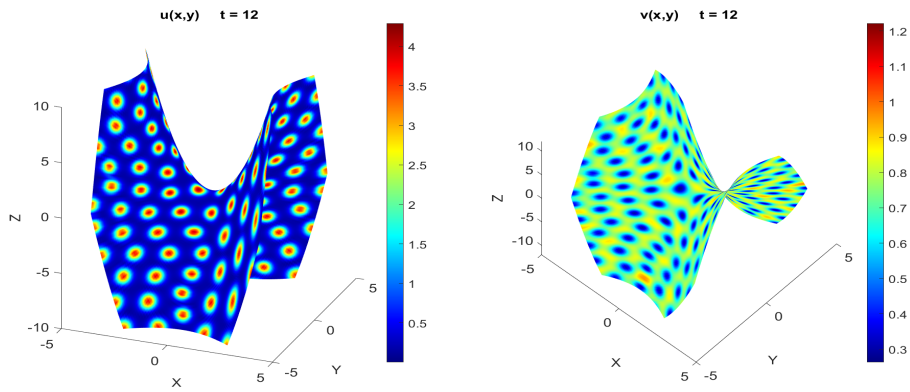


Figura 5.4.30: Concentraciones al tiempo  $t = 12$ .

**Cilindro circular recto sin tapas.** Se utilizó una malla que consta de 10110 nodos y 20000 elementos. Se realizaron un total de 5000 iteraciones. Se utilizó un valor de  $\gamma = 500$ .

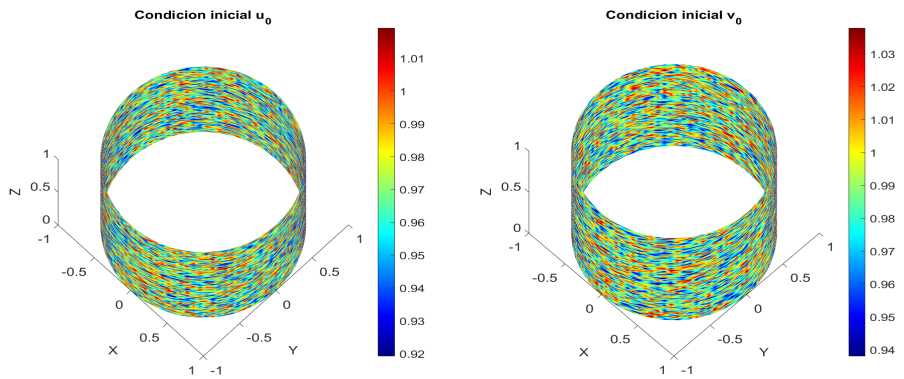


Figura 5.4.31: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

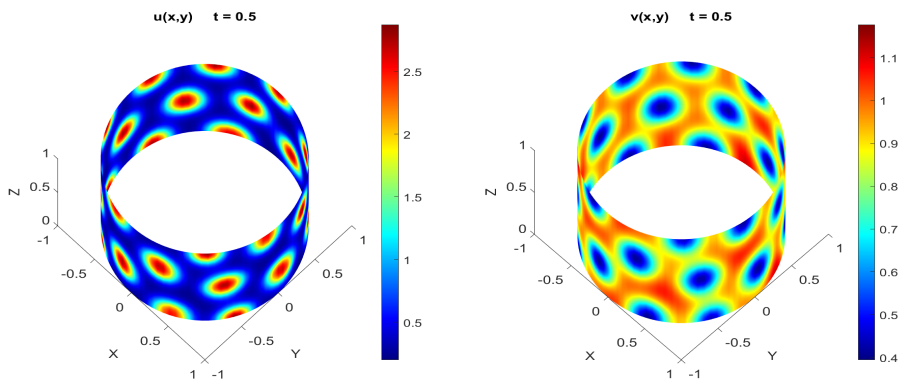


Figura 5.4.32: Concentraciones al tiempo  $t = 0.5$ .

**Cilindro circular recto con tapas.** Radio  $R = 1$ , altura  $h = 2$ . Se utilizó una malla que consta de 10110 nodos y 20000 elementos. Se realizaron un total de 10000 iteraciones.

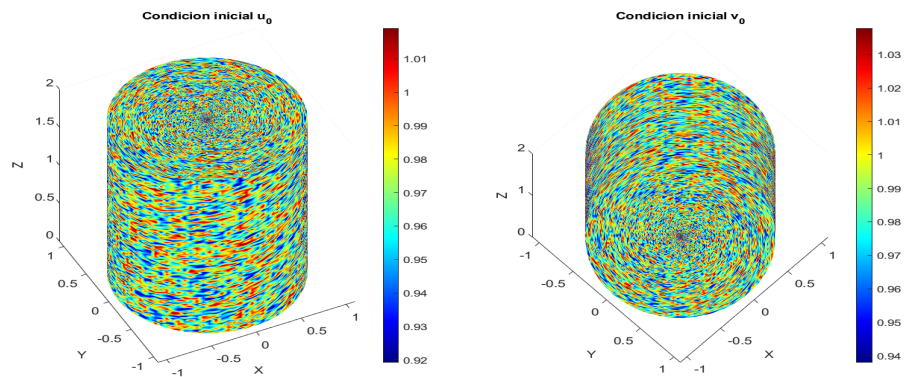


Figura 5.4.33: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

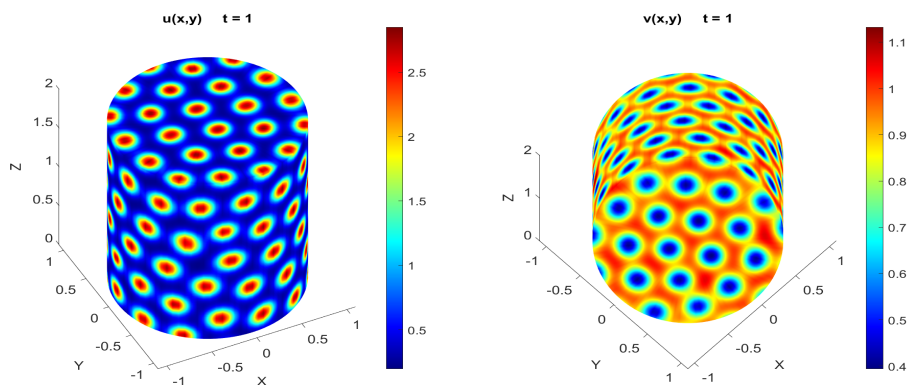


Figura 5.4.34: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Hiperboloide de una hoja con tapas.** Se utilizó una malla que consta de 39562 nodos y 79120 elementos. Para esta simulación se consideró  $\gamma = 100$  y  $D_\Sigma = 40$ . Se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

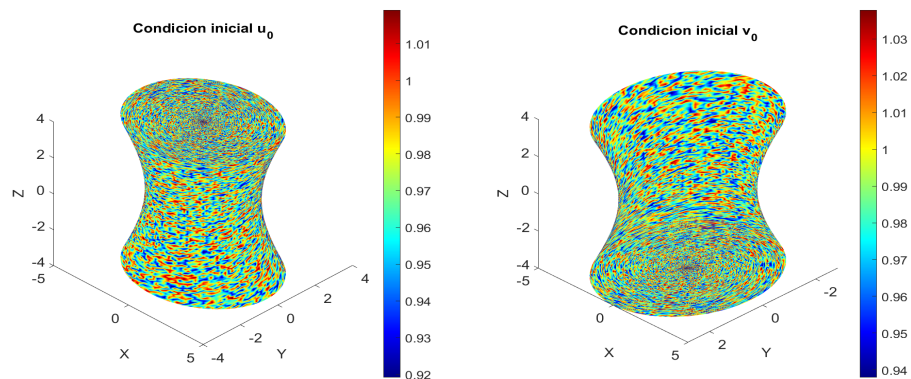


Figura 5.4.35: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

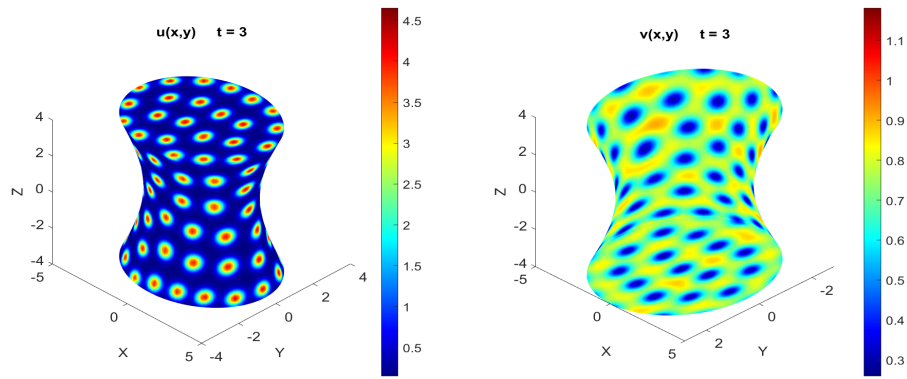


Figura 5.4.36: Concentraciones al tiempo  $t = 3$ .

**Cubo.** Lado  $L = 1$ . Se utilizó una malla que consta de 29402 vértices y 58800 triángulos.

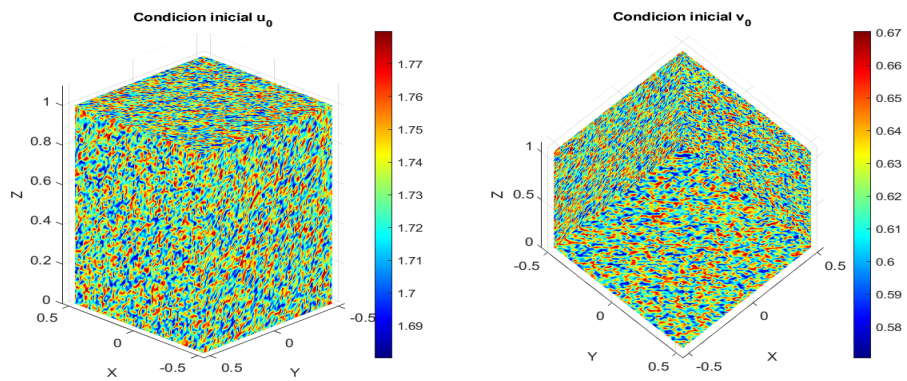


Figura 5.4.37: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

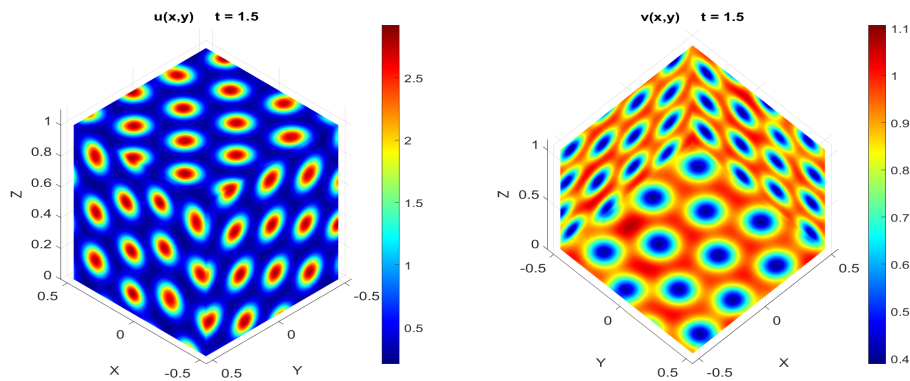


Figura 5.4.38: Concentraciones al tiempo  $t = 1.5$ .  
Se realizaron 150 000 iteraciones.



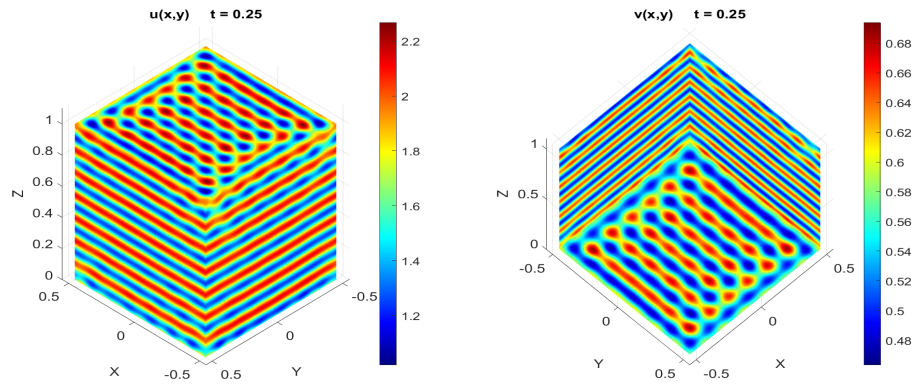


Figura 5.4.39: Concentraciones al tiempo  $t = 0.25$ .  
 Parámetros:  $\alpha = 0.07$ ,  $b = 1.61$  y  $\gamma = 500$ .  
 Se realizaron 25 000 iteraciones.

**Toroide deformado.** Radio mayor  $R = 1$ ,  $r = |0.25 \cos(5\phi) - 0.25 \sin(10\phi) + 0.75|$ .  
 Se utilizó una malla que consta de 48600 nodos y 97200 elementos. Se realizaron un total de 10 000 iteraciones. Se utilizó un valor de  $\gamma = 500$  y una razón de difusividades  $D_{\Sigma} = 20$ .

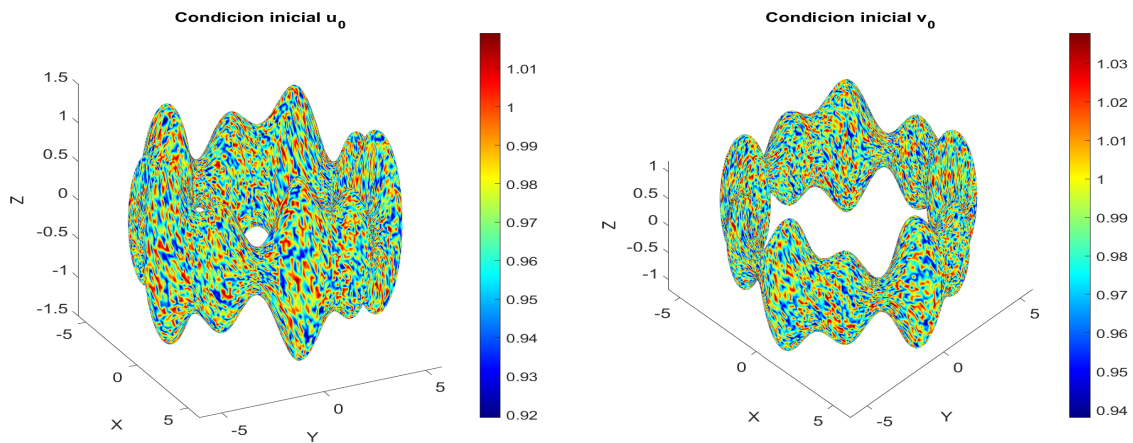


Figura 5.4.40: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

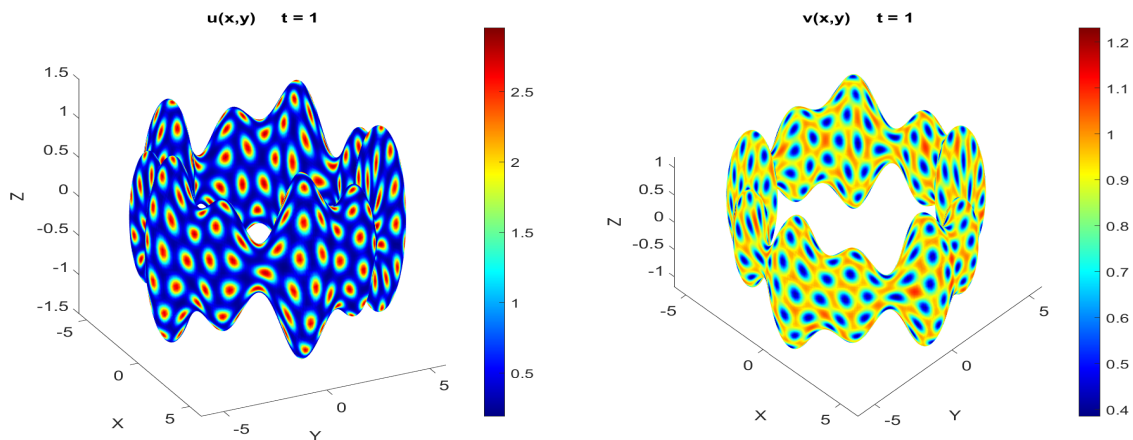


Figura 5.4.41: Concentraciones al tiempo  $t = 1$ .

**Superficie  $x^2 + y^2 + (z - \cos(x^2 + \tan y^2))^2 = 1$ :** Se utilizó una malla que consta de 40962 nodos y 81920 elementos, se consideró un factor de escala  $\gamma = 1000$  y se realizaron un total de 30 000 iteraciones.

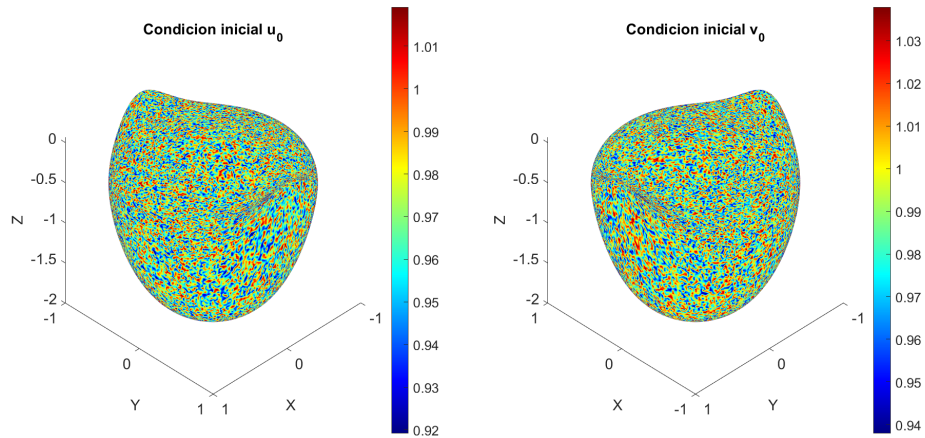


Figura 5.4.42: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

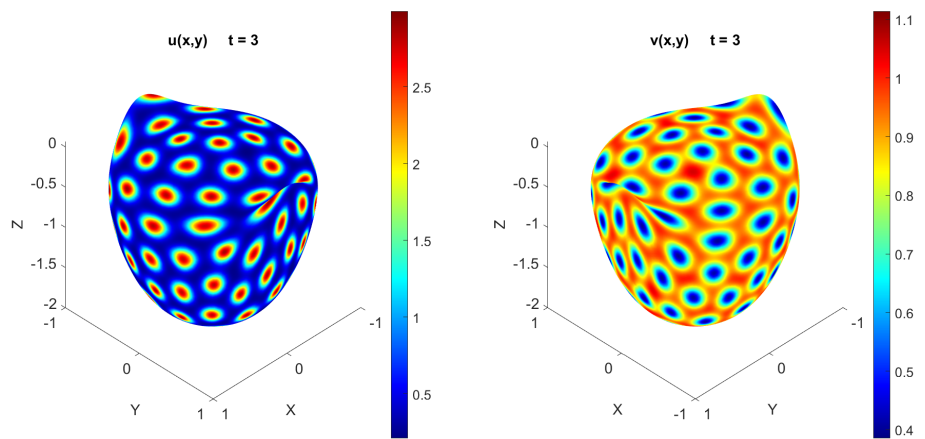
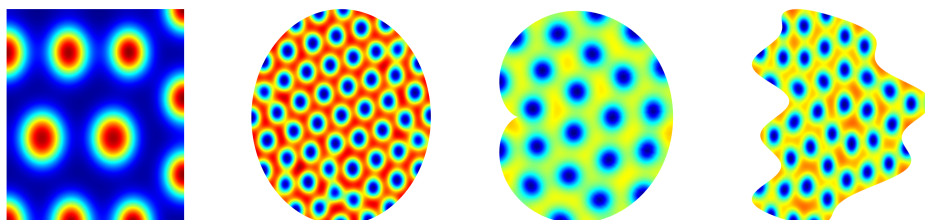


Figura 5.4.43: Concentraciones al tiempo  $t = 30$ .

Observamos que los valores de los parámetros utilizados para generar patrones en regiones planas también fueron efectivos para producir patrones en las superficies consideradas en cada simulación. De hecho, los patrones obtenidos sobre las superficies muestran una notable similitud con los generados en regiones planas. A continuación, se presenta una recopilación de resultados en ambos contextos para facilitar una comparación visual.



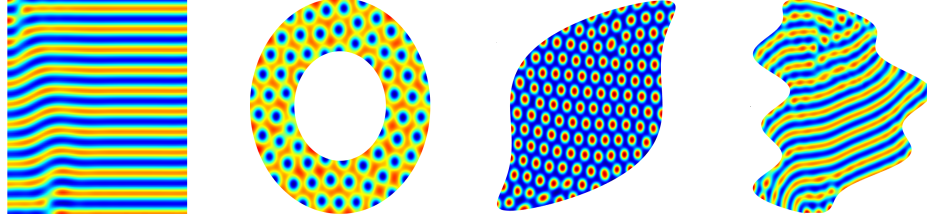


Figura 5.4.44: Simulaciones sobre regiones planas del modelo Schnakenberg.

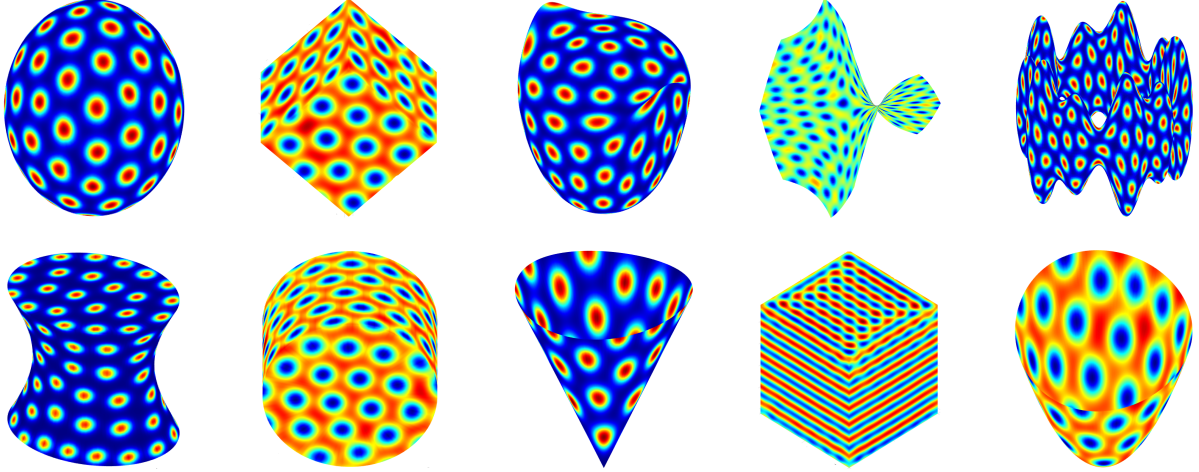


Figura 5.4.45: Simulaciones sobre superficies del modelo de Schnakenberg.

### 5.4.3. Modelo de Gray-Scott

Similarmente a como se generalizó el modelo de Schnakenberg bidimensional a superficies tridimensionales, también acoplamos el modelo de Gray-Scott en el plano, para superficies. El sistema es el siguiente

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u} + \gamma(F(1 - \mathbf{u}) - \mathbf{u}v^2), \quad (5.4.35)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \nabla_{\Sigma}^2 v + \gamma(\mathbf{u}v^2 - (F + \kappa)v), \quad (5.4.36)$$

con  $F, \kappa > 0, \gamma > 0$  y  $D_{\Sigma} = D_u/D_v > 1$  es la razón de difusividades. De la misma manera que en el caso bidimensional, consideraremos el punto crítico  $(\mathbf{u}_1^*, v_1^*)^T = (1, 0)^T$ . Sea  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  el dominio del sistema y consideramos  $\mathcal{R} \subset \Sigma$ , una subregión de  $\Sigma$  para considerar las condiciones iniciales

$$(\mathbf{u}_0, v_0)^T = \begin{cases} (1, 0)^T + \varepsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \Sigma \setminus \mathcal{R}, \\ (1/2, 1/4)^T + \varepsilon \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \text{si } \mathbf{x} \in \mathcal{R}, \end{cases} \quad (5.4.37)$$

con  $0 < \varepsilon < 1$  la intensidad del ruido aleatorio y  $\mathbf{r}$  una variable aleatoria con distribución uniforme (o normal) multivariada que nos proporciona dicho ruido.

Enseguida mostramos distintas simulaciones realizadas y diversas superficies para distintos valores de los parámetros en el modelo. En cada caso se consideró  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ , un tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 5$  y las mismas condiciones iniciales. Para estos resultados es necesario introducir  $N_{iter} =$  Número total de iteraciones realizadas.

**Esfera unitaria:** Para cada variación en los parámetros se utilizó una malla que consta de 20480 nodos y 10242 elementos.

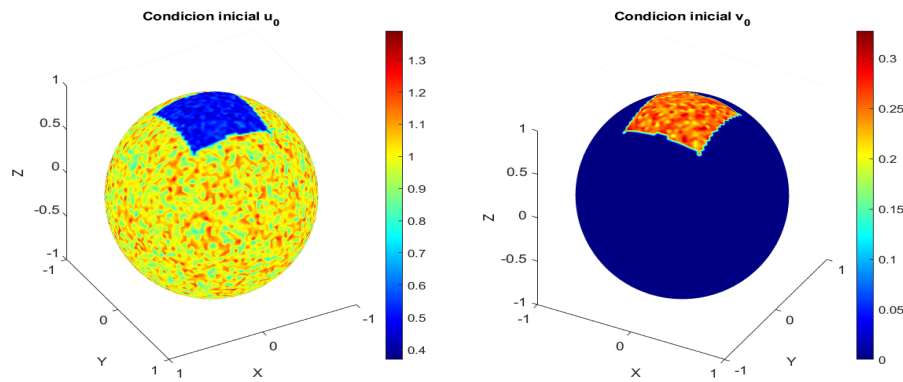


Figura 5.4.46: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

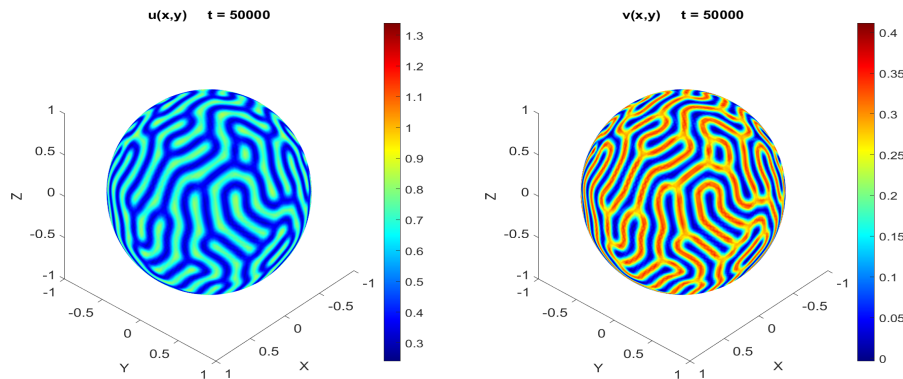


Figura 5.4.47: Concentraciones al tiempo  $t = 50\,000$ .  
Parámetros:  $F = 0.04$ ,  $\kappa = 0.060$  y  $\gamma = 0.5$ .

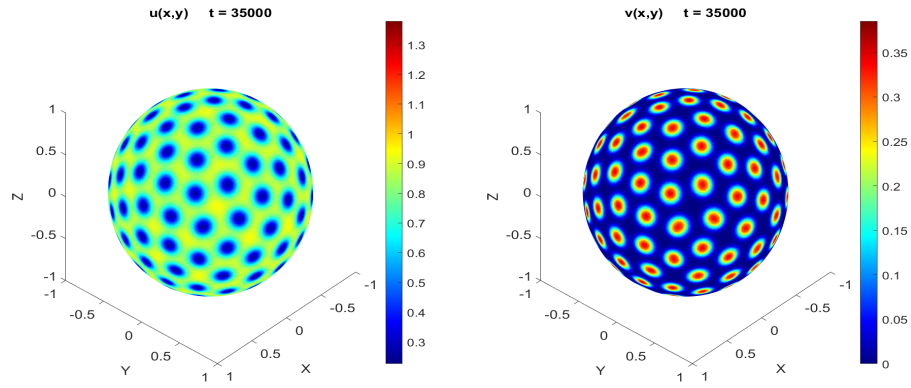


Figura 5.4.48: Concentraciones al tiempo  $t = 35\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.025$ ,  $\kappa = 0.060$ ,  $\gamma = 0.5$  y  $N_{iter} = 7\,000$ .

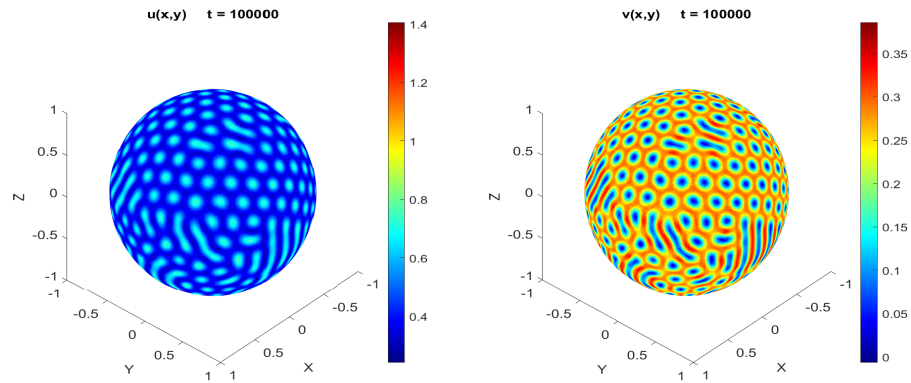


Figura 5.4.49: Concentraciones al tiempo  $t = 100\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.039$ ,  $\kappa = 0.058$ ,  $\gamma = 0.7$  y  $N_{iter} = 20\,000$ .

**Paraboloide con tapa y un hexágono inscrito :** Se utilizó una malla que consta de 20480 nodos y 10242 elementos. En todos los casos se consideraron las mismas condiciones iniciales.

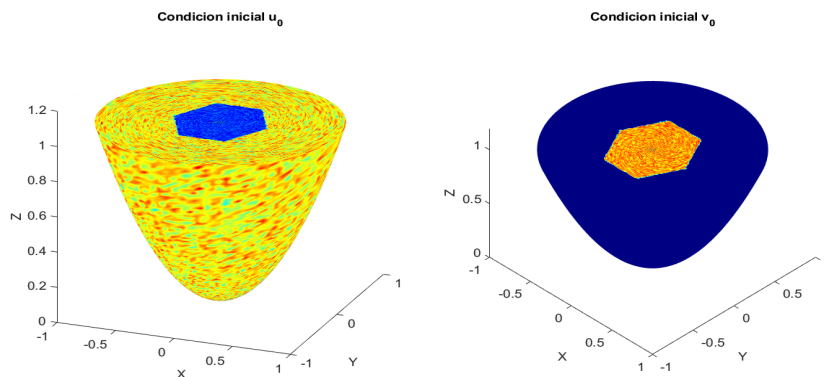


Figura 5.4.50: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

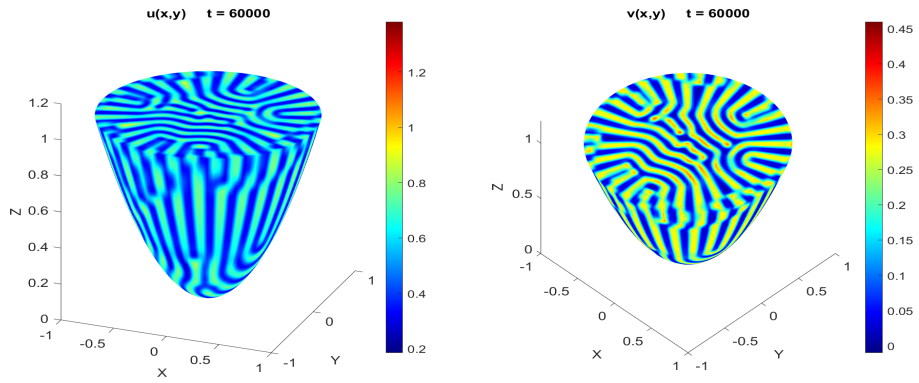


Figura 5.4.51: Concentraciones al tiempo  $t = 60\,000$ .  
 Parámetros:  $F = 0.04$ ,  $\kappa = 0.060$ ,  $\gamma = 0.5$  y  $N_{iter} = 110\,000$ .

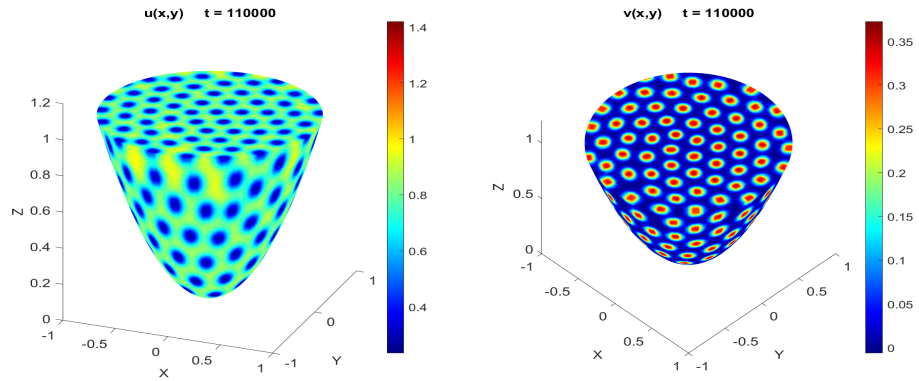


Figura 5.4.52: Concentraciones al tiempo  $t = 110\,000$ .  
 Parámetros:  $F = 0.025$ ,  $\kappa = 0.060$ ,  $\gamma = 0.5$  y  $N_{iter} = 22\,000$ .

**Superficie  $x^2 + y^2 + (z + \cos(x^2 + \tan y^2))^2 = 1$ :** Se utilizó una malla que consta de 10242 nodos y 20480 elementos obtenida a partir de una malla de la esfera unitaria.

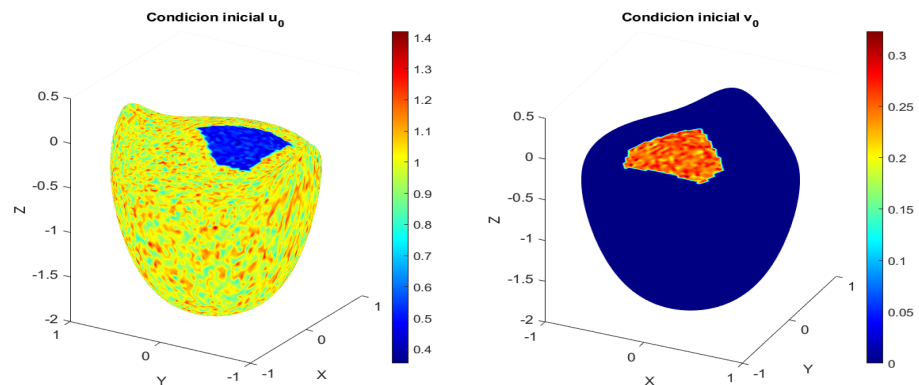


Figura 5.4.53: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

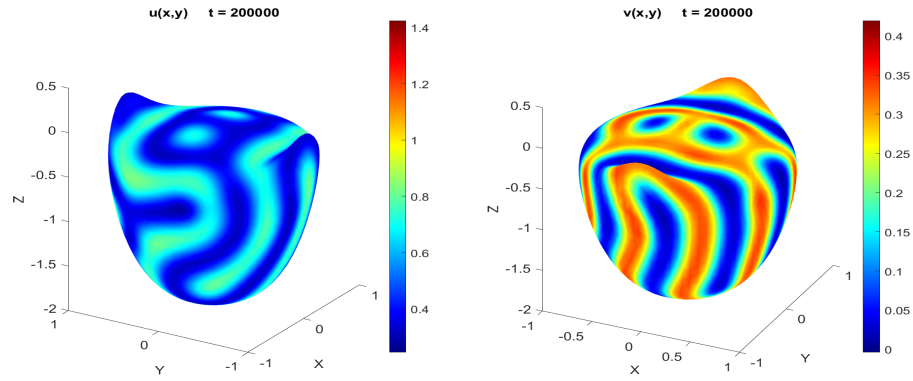


Figura 5.4.54: Concentraciones al tiempo  $t = 200\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.05$ ,  $\kappa = 0.063$ ,  $\gamma = 0.05$  y  $N_{iter} = 40\,000$ .

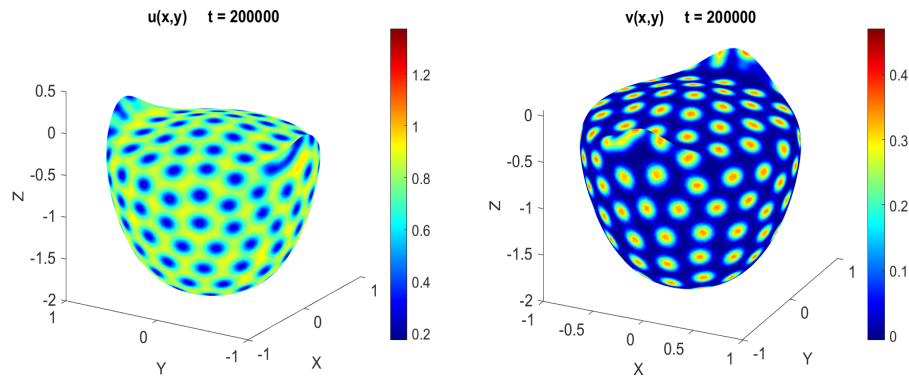


Figura 5.4.55: Concentraciones al tiempo  $t = 200\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.025$ ,  $\kappa = 0.060$ ,  $\gamma = 0.3$  y  $N_{iter} = 40\,000$ .

**Superficie**  $(x - z^2)^2 + y^2 + z^2 = 1$ : Se utilizó una malla que consta de 40962 nodos y 81920 elementos obtenida a partir de una malla de la esfera de radio  $R = 1$ . En cada caso se consideró  $D_u = 2 \times 10^{-5}$ ,  $D_v = 1 \times 10^{-5}$ , y un tamaño de paso de tiempo  $\Delta t = 5$ .

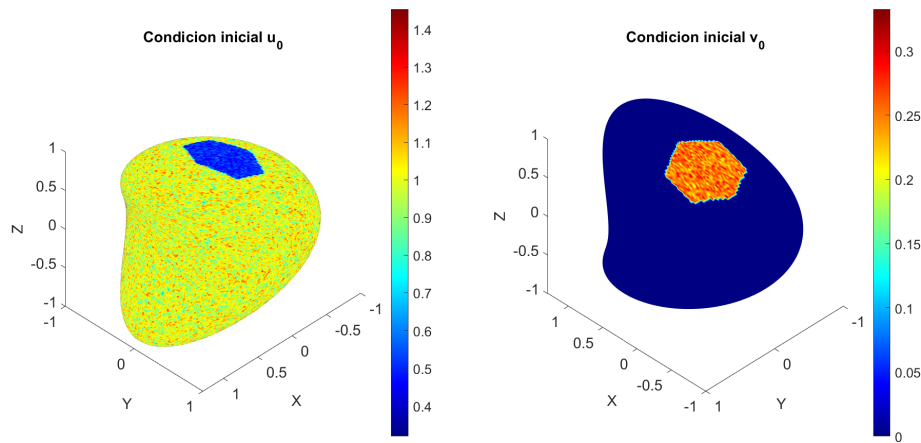


Figura 5.4.56: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

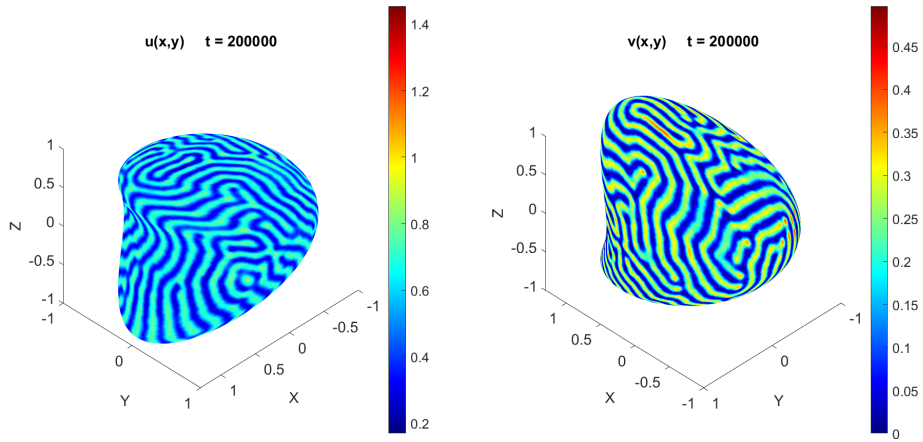


Figura 5.4.57: Concentraciones al tiempo  $t = 200\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.029$ ,  $\kappa = 0.057$ ,  $\gamma = 1$  y  $N_{iter} = 40\,000$ .

**Toroide** : Se utilizó una malla que consta de 38400 nodos y 76800 elementos.

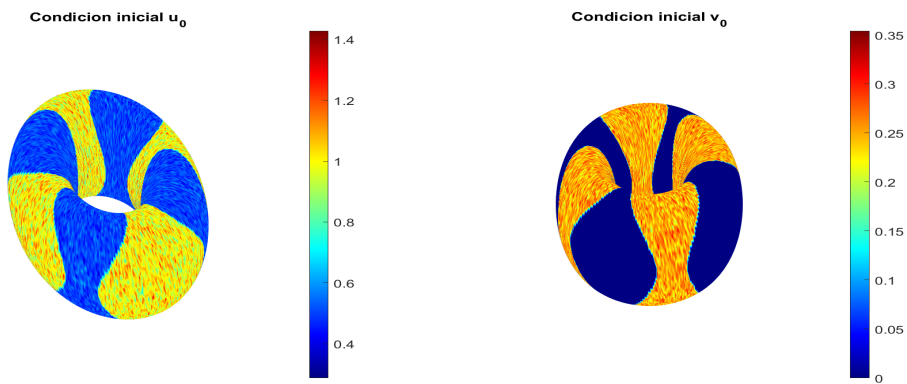


Figura 5.4.58: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

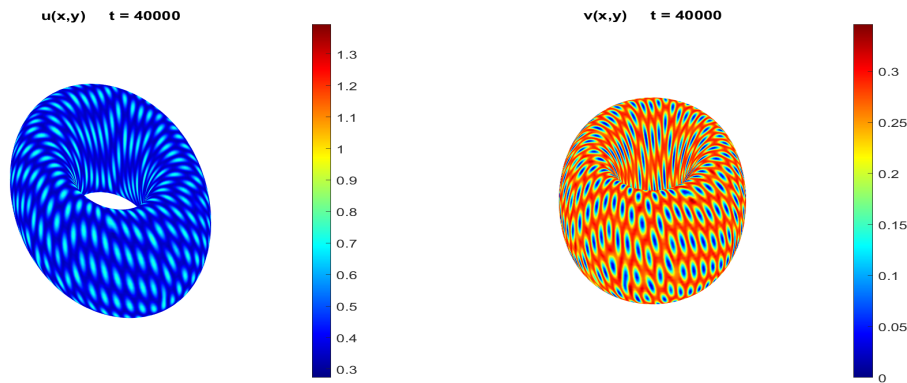


Figura 5.4.59: Concentraciones al tiempo  $t = 40\,000$ .  
 Parámetros :  $F = 0.039$ ,  $\kappa = 0.058$ ,  $\gamma = 0.7$  y  $N_{iter} = 8\,000$ .

**Toroide enrollado** : Se utilizó una malla que consta de 48690 nodos y 97200 elemen-



tos.

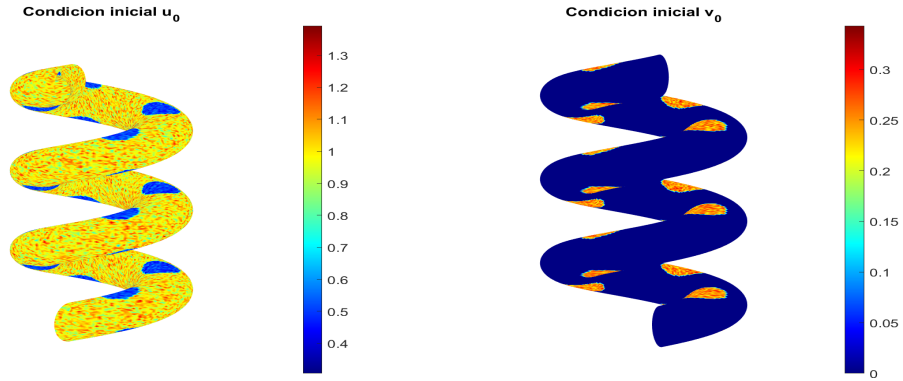


Figura 5.4.60: Concentraciones iniciales ( $t = 0$ ).

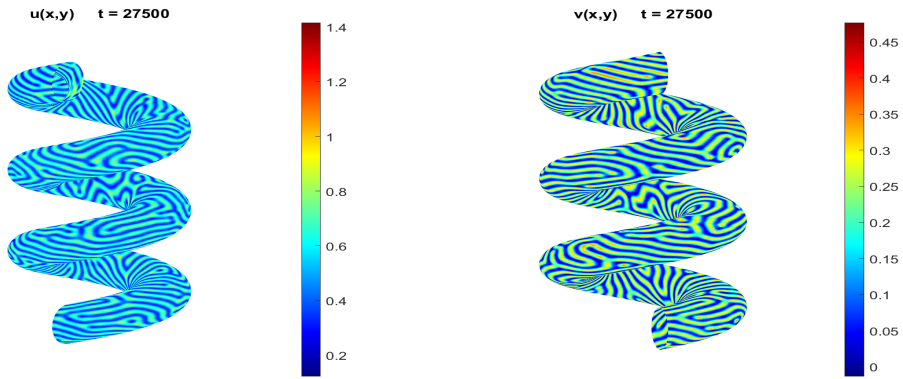


Figura 5.4.61: Concentraciones al tiempo  $t = 27\,500$ .  
 Parámetros :  $F = 0.029$ ,  $\kappa = 0.057$ ,  $\gamma = 0.7$  y  $N_{iter} = 5\,500$ .

Los resultados obtenidos en simulaciones realizadas para este modelo sobre superficies tridimensionales son muy similares a los obtenidos en regiones planas, considerando los mismos valores en los parámetros de reacción. Sin embargo, para generar patrones en las superficies, fue necesario ajustar el valor del factor de escala  $\gamma > 0$ . Es muy interesante ver que, para este modelo de Gray-Scott, los valores de  $\gamma$  que permitieron la formación de patrones espaciales satisfacen  $0 < \gamma \leq 1$ . Además, es muy importante mencionar que para este modelo, en muchos de los casos, es indispensable insertar pulsos en las condiciones iniciales, ya que en los dominios de las simulaciones presentadas, no hubo generación de patrones espaciales cuando no se incluyeron pulsos en las condiciones iniciales. Esto ocurrió tanto en regiones planas, así como en superficies. En gran parte, considerar valores de  $\gamma$  mayores a 1 no resultó en la aparición de patrones espaciales sobre el dominio superficial  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  considerado.

A continuación, se presenta una recopilación de las simulaciones realizadas para este modelo, tanto en regiones planas como en superficies tridimensionales, con el propósito de facilitar una comparación visual de los patrones obtenidos en cada caso.

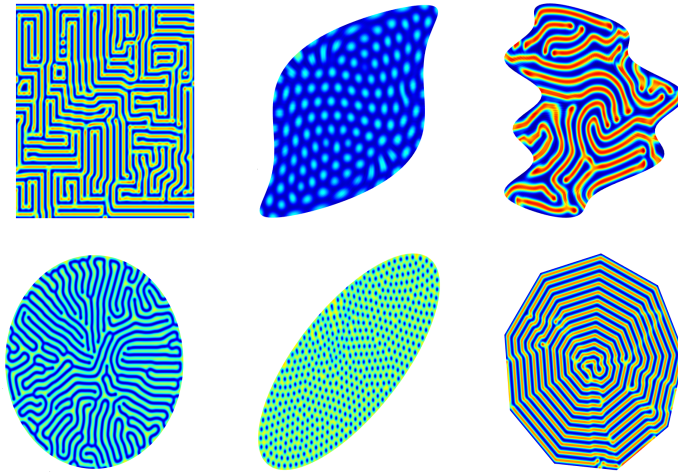


Figura 5.4.62: Simulaciones sobre regiones planas del modelo de Gray-Scott.

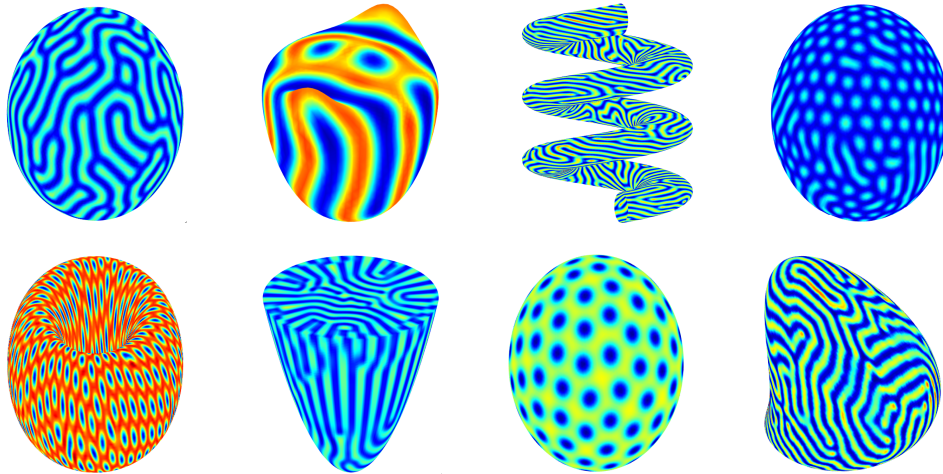


Figura 5.4.63: Simulaciones sobre superficies del modelo de Gray-Scott.

**Nota.** Es importante destacar que los patrones generados en cada superficie, para los distintos modelos empleados, corresponden a las proyecciones sobre el dominio superficial  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$  de las soluciones  $u(\mathbf{x})$  y  $v(\mathbf{x})$ , respectivamente. Esto se debe a que las gráficas de dichas soluciones están definidas en el espacio  $\mathbb{R}^4$ .

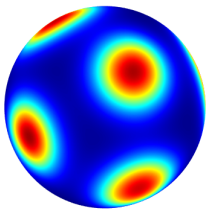
## 5.5. Análisis del factor de escala $\gamma$

Como parte final de este trabajo, resta hacer un análisis de cómo el factor de escala  $\gamma > 0$  influye en la formación y características de los patrones espaciales tanto en regiones planas como en superficies, basándonos en las correspondientes simulaciones computacionales realizadas.

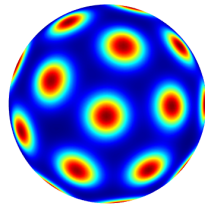
Como se ha visto el factor de escala  $\gamma$  influye directamente en el cálculo del modo de onda crítico  $k_c^2$  dado en (3.3.44), el cual determina una cota para los modos de onda  $k_1^2$ ,  $k_2^2$  dados en (3.3.42) para la cual la función  $h(k^2)$  dada en (3.3.34) sea negativa y así, garantizar la inestabilidad del punto de equilibrio  $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*)^T$  del sistema determinado por el modelo que se esté trabajando. Al lograr se cumpla que  $h(k^2) < 0$ , se está garantizando la generación de patrones espaciales mediante la inestabilidad de Turing. Entonces, tiene coherencia y sentido pensar que al variar los valores del factor de escala  $\gamma > 0$ , se obtendrán modificaciones en los patrones generados, o bien, no habrá generación de los mismos. Otra característica importante del factor de escala que nos asegura este hecho, es a partir de la ecuación (3.5.63), en donde  $\gamma$  determina la existencia de los modos de onda  $\mathbf{m}$ ,  $\mathbf{n}$  de la solución inestable (3.5.62). Si los modos de onda  $\mathbf{m}$ ,  $\mathbf{n}$  existen, habrá generación de patrones y, en caso contrario, no se generará patrón alguno en la solución temporal del sistema. Por lo tanto, queda claro que del factor de escala  $\gamma$  depende fuertemente la generación de los patrones espaciales.

Ahora, a manera de ilustración, presentamos los resultados de distintas simulaciones computacionales realizadas para el modelo de Schnakenberg (5.4.32-5.4.33) para tres distintas superficies: esfera unitaria, toroide y el cubo, para las cuales se utilizaron distintos valores de  $\gamma$ :

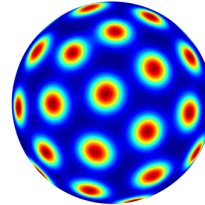
**Esfera :**



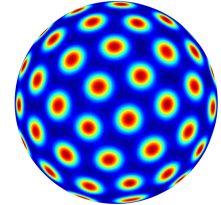
$\gamma = 100$



$\gamma = 300$

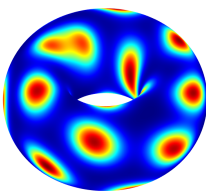


$\gamma = 500$

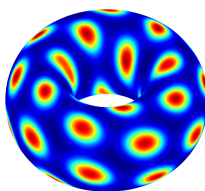


$\gamma = 1000$

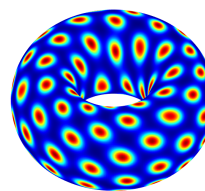
**Toroide :**



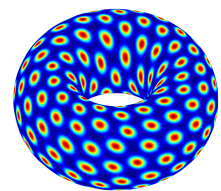
$\gamma = 50$



$\gamma = 100$

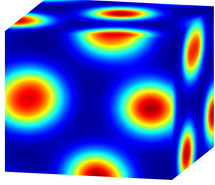


$\gamma = 250$

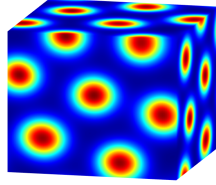


$\gamma = 500$

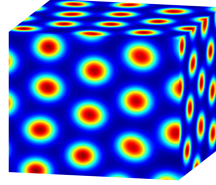
Cubo :



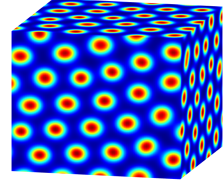
$\gamma = 100$



$\gamma = 200$



$\gamma = 500$



$\gamma = 1000$

Observamos que valores mayores de  $\gamma$  producen patrones de menor tamaño, y valores menores de  $\gamma$  producen patrones de mayor tamaño. Este hecho ocurre generalmente para los patrones de Turing debido al mecanismo matemático mediante los cuales se producen. Esto también ocurre para la reacción de Gray-Scott (5.4.35-5.4.36) aunque los patrones que genera este modelo no son propiamente patrones de Turing y, como ya se mencionó anteriormente, por lo general valores de  $\gamma$  mayores a 1 no producen patrón alguno sobre el dominio superficial con el que se esté trabajando. En la mayoría de los casos los patrones generados corresponden a valores de  $\gamma$  entre 0 y 1. Basta volver a ver las simulaciones computacionales realizadas para ese modelo, en este trabajo.

# Capítulo 6

## Conclusiones y perspectivas

### 6.1. Conclusiones

Las conclusiones para este trabajo son:

- Se obtuvieron las condiciones matemáticas necesarias para la generación de patrones espaciales en sistemas de reacción-difusión en regiones planas, utilizando el operador de Laplace. Estas condiciones permitieron crear modelos capaces de generar patrones de Turing, y asimismo generar patrones de modelos conocidos como lo es el modelo de Schnakenberg. Sin embargo, para el modelo de Gray-Scott, los patrones no son generados exclusivamente por los términos de difusión, sino también por los términos de reacción, concluyendo así que éstos, no resultaron ser patrones de Turing.
- Las simulaciones mostraron que la modificación de las condiciones iniciales, especialmente mediante la introducción de pulsos, tuvo un impacto significativo en la generación de patrones espaciales. Por lo general, estos cambios alteraron la estructura y distribución de los patrones resultantes.
- Al trasladar las condiciones matemáticas para la generación de patrones desde regiones planas a superficies, utilizando el operador de Laplace-Beltrami, se observaron patrones espaciales similares. La modelación matemática, realizada mediante el método de elementos finitos y utilizando mallas triangulares, permitió discretizar tanto las regiones planas como las superficies.
- El análisis realizado para resolver numéricamente la ecuación Laplace-Beltrami para la generación de patrones de Turing, mediante el método de elementos finitos, permitió desarrollar una nueva forma de calcular las matrices de masa  $\mathbb{M}$ , la matriz de rigidez  $\mathbb{K}$  y el vector de carga  $\mathbf{F}$ , lo cual resultó en la creación de un nuevo programa en el cual no se necesita la parametrización del dominio superficial  $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ , para realizar las simulaciones computacionales.
- Aunque los valores de los parámetros que generaron patrones en regiones planas también produjeron patrones en superficies, en algunos casos fue necesario ajustar

el valor del factor de escala  $\gamma$ . Este factor está relacionado con los modos de onda de la solución analítica y su ajuste fue crucial para obtener patrones en superficies.

- Se realizó un análisis de la calidad de las mallas triangulares utilizadas para la discretización, tanto en 2D para regiones planas como en 3D para superficies. Se destacó el uso del coeficiente de forma  $q$  como indicador de la calidad de la malla, concluyendo que un valor de  $q$  cercano a 1 es ideal para obtener resultados numéricos precisos. Mediante el Algoritmo de triangulación de Delaunay se lograron obtener mallas de mejor calidad para regiones planas que nos puedan garantizar mejores resultados numéricos al momento de realizar las simulaciones computacionales.
- Se observó que mallas de alta calidad produjeron mejores resultados numéricos en comparación con mallas de baja calidad, tanto en regiones planas como en superficies. Este hallazgo subraya la importancia de utilizar mallas bien construidas en simulaciones numéricas. Es importante mencionar que, aunque para algunas simulaciones se utilizaron mallas de no muy buena calidad, esto no afectó significativamente la generación de los patrones, tanto en regiones planas como en superficies. Sin embargo, lo que sí se vio afectado fue el valor de las concentraciones para cada una de las soluciones  $u(\mathbf{x})$  y  $v(\mathbf{x})$  obtenidas.
- La utilización del Algoritmo de Grado Mínimo para resolver el sistema  $\mathbb{A}\phi = \mathbf{F}$ , donde  $\mathbb{A} = \alpha\mathbb{M} + \mathbb{D}_{\Sigma}\mathbb{K}$  es una matriz rala o sparse de tamaño  $nnt \times nnt$ , donde  $nnt$  es el número de nodos de la malla triangular, contribuyó en gran medida a la optimización del tiempo de cómputo. Como se observó en varios ejemplos, la implementación de este método permitió realizar simulaciones hasta 44 veces más rápidas, como lo fue para el caso de la esfera unitaria en el modelo de Schnakenberg, en comparación con la simulación realizada sin dicho método.
- Finalmente, se exploró el impacto del factor de escala  $\gamma$  en la generación de patrones. Se encontró que valores más grandes de  $\gamma$  tienden a generar patrones más pequeños y complejos, mientras que valores más pequeños producen patrones de mayor tamaño. En el caso del modelo de Gray-Scott aplicado a superficies, el factor de escala  $\gamma$  debía estar entre 0 y 1, donde valores cercanos a 0 producían patrones grandes y valores cercanos a 1 generaban patrones más pequeños.

## 6.2. Perspectivas

Aunque se obtuvieron resultados satisfactorios en este trabajo, aún queda mucho por hacer y muchos aspectos que mejorar. Algunos de éstos son :

- Desarrollar teóricamente las condiciones matemáticas que garanticen la generación de patrones espaciales en sistema del tipo Laplace-Beltrami como (5.4.20-5.4.23).
- Se requiere trabajar bastante en la creación de mallas triangulares óptimas para más superficies que nos garanticen resultados numéricos más precisos y, en general, crear un mallador que nos proporcione la malla triangular de una superficie arbitraria y

que sea de buena calidad. También se espera mejorar la calidad de las mallas ya obtenidas, priorizando las mallas triangulares para superficies tridimensionales.

- Una vez garantizada la obtención de mallas triangulares de buena calidad, dar el salto y comenzar a trabajar con mallas adaptativas que nos permitan trabajar estos mismos sistemas de reacción-difusión pero ahora sobre dominios crecientes, es decir, el dominio en consideración va aumentando o disminuyendo su tamaño conforme va avanzando el tiempo. En este trabajo únicamente se trabajo con dominios constantes.
- Buscar otros métodos para la resolución de (4.2.23-4.2.24). En nuestro caso se estuvo trabajando con un esquema semi-implícito, pero se pueden buscar otras alternativas como por ejemplo utilizar un método Runge-Kutta para resolver dicho sistema, o bien, utilizar un esquema completamente implícito y realizar las adecuaciones necesarias para implementar el mismo.
- Adentrarnos en otros modelos que generen patrones de Turing distintos a los mostrados en este trabajo, o bien, desarrollar otros modelos de Turing por cuenta propia que nos generen patrones espaciales, especialmente sobre superficies tridimensionales.
- Utilizar la mayor parte de lo desarrollado en este trabajo y poderlo aplicar a problemas más elaborados como por ejemplo: tumores cancerígenos, enfermedades de la piel como el vitíligo, fenómenos naturales, etcétera.





# Bibliografía

- [1] TURING, ALAN M., *The Chemical Basis of Morphogenesis*, "Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences", Volume 237, Issue 641 (Aug. 14, 1952), 37-72.
- [2] D'ARCY W. THOMPSON, *On Growth and Form*, Cambridge University Press, 1992.
- [3] G. NICOLIS, I. PRIGOGINE, *Self-organization in non-equilibrium systems: from dissipative structures to order through fluctuations*, Wiley & Sons, 1977.
- [4] DIEGO BRICIO HERNÁNDEZ C., *Caminatas Aleatorias y Movimiento Browniano*, UAM-I, 1978.
- [5] L. HÉCTOR JUÁREZ VALENCIA, *Modelos y problemas de difusión*, UAM-I, 2021.
- [6] SHADAY GUERRERO FLORES, *Interacción presa-depredador en sistemas reacción-difusión*, Tesis de maestría, UMSNH-UNAM, Morelia, Michoacán, 2017.
- [7] DANIEL ANDRÉS FIGUEROA PÉREZ, *Una Introducción al estudio de la formación de patrones de Turing*, Tesis de licenciatura, Universidad Industrial de Santander, Facultad de Ciencias, Escuela de Matemáticas Bucaramanga, 2023.
- [8] ALDO LEDESMA DURÁN, *Patrones de Turing en sistemas biológicos*, Tesis de maestría, UAM-I, 2012.
- [9] YANG, R. (2022), *Cross-diffusion induced spatiotemporal patterns in Schnakenberg reaction-diffusion model*, *Nonlinear Dynamics*, 110(2), 1753-1766.
- [10] MADZVAMUSE, A., & BARREIRA, R. (2014), *Exhibiting cross-diffusion-induced patterns for reaction-diffusion systems on evolving domains and surfaces.*, *Physical Review E*, 90(4), 043307.
- [11] J.D. MURRAY, *Mathematical Biology: I*, Third edition, "Interdisciplinary Applied Mathematics", Volume 17, Springer, 2003.
- [12] J.D. MURRAY, *Mathematical Biology: II*, Spatial Models and Biomedical Applications, Third edition, "Interdisciplinary Applied Mathematics", Volume 18, Springer, 2003.

- [13] JUAN VANEGAS, NANCY LANDINEZ & DIEGO GARZÓN (2009), *Análisis de la inestabilidad de Turing en modelos biológicos*, Departamento de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica. Universidad Nacional de Colombia.
- [14] LIBARDO ANDRÉS GONZÁLEZ, JUAN CARLOS VANEGAS & DIEGO ALEXANDER GARZÓN (2009), *Solución numérica de modelos biológicos de reacción-difusión en dominios fijos mediante el método de los elementos finitos*, Grupo de Modelamiento Matemático y Métodos Numéricos (GNUM). Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional de Colombia.
- [15] LAWRENCE PERKO, *Differential Equations and Dynamical Systems*, Third edition, Springer, 2000.
- [16] STEVEN H. STROGATZ, *Nonlinear Dynamics and Chaos with Application to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*, First edition, 1994.
- [17] LEHMANN, C. H. (1959), *Geometría analítica*. México: Unión Tipográfica Edition Hispano Americana.
- [18] V. DUFIET AND J. BOISSONADE, *Numerical studies of Turing patterns selection in a two-dimensional system*, *Physica A*, **188**, pág. 158-172, 1994.
- [19] L. HÉCTOR JUÁREZ VALENCIA, *Notas Método del Elemento Finito*, UAM-I, 2023.
- [20] ISHTIAQ ALI & MALIHA TEHSEEN SALEEM, *Spatiotemporal Dynamics of Reaction-Diffusion System and Its Application to Turing Pattern Formation in a Gray-Scott Model*, *Mathematics* **2023**, 11, 1459. <https://doi.org/10.3390/math11061459>
- [21] JOHN E. PEARSON, *Complex Patterns in a Simple System*, *Science*, **261**, págs. 189-192, 1993.
- [22] LICHUAN ZHENG, *Pattern formation in reaction-diffusion systems using the Gray-Scott model*, URL: [https://itp.uni-frankfurt.de/~gros/StudentProjects/Projects\\_2020/projekt\\_lichuan\\_zheng/](https://itp.uni-frankfurt.de/~gros/StudentProjects/Projects_2020/projekt_lichuan_zheng/), Junio 2020.
- [23] HIROKI SAYAMA, *Sistemas de Reacción-Difusión*, URL: [https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Computacion\\_Cientifica\\_Simulaciones\\_y\\_Modelado/Libro%3A\\_Introducci%C3%B3n\\_al\\_Modelado\\_y\\_An%C3%A1lisis\\_de\\_Sistemas\\_Complejos\\_\(Sayama\)/13%3A\\_Modelos\\_de\\_Campo\\_Continuo\\_I\\_-\\_Modelado/13.06%3A\\_Sistemas\\_de\\_Reacci%C3%B3n-Difusi%C3%B3n](https://espanol.libretexts.org/Matematicas/Computacion_Cientifica_Simulaciones_y_Modelado/Libro%3A_Introducci%C3%B3n_al_Modelado_y_An%C3%A1lisis_de_Sistemas_Complejos_(Sayama)/13%3A_Modelos_de_Campo_Continuo_I_-_Modelado/13.06%3A_Sistemas_de_Reacci%C3%B3n-Difusi%C3%B3n), Binghamton University, State University of New York vía OpenSUNY.
- [24] KRAUSE, A. L., GAFFNEY, E. A., MAINI, P. K., & KLIKA, V. (2021), *Modern perspectives on near-equilibrium analysis of Turing systems*, *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 379(2213), 20200268.
- [25] PLAZA, R. G., SANCHEZ-GARDUÑO, F., PADILLA, P., BARRIO, R. A., & MAINI, P. K. (2004), *The effect of growth and curvature on pattern formation*, *Journal of dynamics and differential equations*, 16, 1093–1121.

- [26] VANDIN, G., MARENDUZZO, D., GORYACHEV, A. B., & ORLANDINI, E. (2016), *Curvature-driven positioning of Turing patterns in phase-separating curved membranes*, *Soft Matter*, **12**(17), 3888–3896.
- [27] LEÓN-VELASCO D. A. , GLOWINSKI, R., & JUÁREZ-VALENCIA, L. H. (2016), *On the controllability of diffusion processes on a sphere: a numerical study*, *ESAIM: Control, Optimization and Calculus of Variations*, vol. 22, No. 4, pp. 1054–1077.
- [28] BONITO, A., DEMLOW, A., & NOCHETTO, R. H. (2020), *Finite element methods for the Laplace–Beltrami operator*, In *Handbook of Numerical Analysis* (Vol. 21, pp. 1–103). Elsevier.
- [29] PAPAS JL, MILLER DJ (2013), *A generalized Approach to the Modeling and Analysis of 3D Surface Morphology in Organisms*, *PLoS ONE* 8(10): e77551. doi:10.1371/journal.pone.0077551
- [30] HERRERA, J. F. A. (1995), *Algoritmo de Karmarkar y matrices ralas*, *Revista de Matemática: Teoría y aplicaciones*, 2(2), 35-48.
- [31] DE LA FUENTE O’CONNOR, J. L., *Técnicas de Cálculo para Sistemas de Ecuaciones, Programación lineal y Programación entera*, Reverté, Barcelona, 1993.
- [32] TIMOTHY A. DAVIS, *Direct Methods for Sparse Linear Systems, Fundamentals of Algorithms*, SIAM,2006.
- [33] I. S. DUFF, A. M. ERISMAN, & J. K. REID, *Direct Methods for Sparse Matrices, Numerical Mathematics and Scientific Computation*, Second Edition, Oxford Science Publications, 2017.
- [34] ALAN GEORGE & JOSEPH W. LIU (1981), *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems* Prentice Hall Series in Computational Mathematica, *Cleve Moler, advisor*.
- [35] MASSIMO FRITTELLI & IVONNE SGURA (2018), *Minimum degree algorithm*, Wikipedia, URL: [https://en.wikipedia.org/wiki/Minimum\\_degree\\_algorithm](https://en.wikipedia.org/wiki/Minimum_degree_algorithm).
- [36] SERENA DIPIERRO & ENRICO VALDINOCI (2023), *Elliptic partial differential equations from an elementary viewpoint*, University of Western Australia, 35 Stirling Highway, Crawley WA 6009, Australia. [serena.dipierro@uwa.edu.au](mailto:serena.dipierro@uwa.edu.au), [enrico.valdinoci@uwa.edu.au](mailto:enrico.valdinoci@uwa.edu.au)
- [37] T. D. PHAM, T. TRAN & A. CHERNOV , *Pseudodifferential equations on the sphere with spherical splines*.
- [38] MASSIMO FRITTELLI & IVONNE SGURA (2018), *Virtual Element Method for the Laplace-Beltrami Equation on Surfaces*, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, URL: <https://doi.org/10.1051/m2an/2017040>.
- [39] SHEWCHUK, J. R. (1997), *Delaunay refinement mesh generation*. Carnegie Mellon University.

- [40] DÍAZ, A. (2000), *Métodos de mallado y algoritmos adaptativos en dos y tres dimensiones para la resolución de problemas electromagnéticos cerrados mediante el método de los elementos finitos*. Publicaciones de la Universidad de Valencia.
- [41] J. SARRATE, J. PALAU & A. HUERTA, *Numerical representation of the quality measures of triangles and triangular meshes*, COMMUNICATIONS IN NUMERICAL METHODS IN ENGINEERING. *Commun. Numer. Meth. Engng 2003*; **19**:551-561 (DOI: 10.1002/cnm.585)
- [42] GONZÁLEZ MENA D. ISRAEL & L. HÉCTOR JUÁREZ VALENCIA (2024), *Numerical Turing Patterns Formation on 3D Surfaces with a Linear Finite Element Method*. Boletín de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones (SMC-CA).

## Apéndice A Programas en MATLAB

### A.1. Programa para la implementación del Algoritmo de grado mínimo

```
function uh = perm_min(A, F)

% Funcion para resolver un sistema de ecuaciones lineales
%           Au = F
% con A una matriz sparse, simetrica definida positiva, utilizando el
% Algoritmo de grado minimo y la descomposicion de Cholesky.
%
% Parametros de entrada:
% - A: Matriz de coeficientes del sistema.
% - F: Vector de terminos independientes.
%
% Parametros de salida:
% - uh: Solucion del sistema de ecuaciones.

% Calcular el vector de permutacion de grado minimo utilizando amd
p = amd(A);

% Calcular la matriz de permutacion P y calcular Ap = P^T*A*P
Ap = A(p,p);
Fp = F(p);    % Permutar el vector F de acuerdo a p

% Aplicar la descomposicion de Cholesky a la matriz reordenada A
L = chol(Ap, 'lower');

% Resolver el sistema de ecuaciones mediante sustitucion hacia adelante y
% hacia atras utilizando la descomposicion de Cholesky
y = L \ Fp;    % Solucion del sistema Ly = Fp
up = L' \ y;   % Solucion del sistema L'up = y

% Volver a aplicar la permutacion inversa a la solucion up
uh = zeros(size(up));
uh(p) = up;

end
```

Listing 1: Programa algoritmo de grado mínimo para sistemas lineales.

### A.2. Programa para generar malla triangular de un anillo elíptico

```
function [x, g, nnt, ne] = Mesh_elliptical_ring(a1, b1, a2, b2, Nx, Ny)

% a1, b1 son los semi-ejes mayor y menor de la elipse interior
% a2, b2 son los semi-ejes mayor y menor de la elipse exterior
% Nx es el numero de divisiones en la direccion radial
% Ny es el numero de divisiones en la direccion angular

hx = (a2 - a1) / Nx;
hy = 1 / Ny;

% Generar coordenadas de los nodos en el anillo eliptico
n = 0;
for j = 1:Ny+1
    for i = 1:Nx+1
        n = n + 1;
```

```

        w(n,1) = a1 + (i-1) * hx; % Coordenada radial (semi-eje mayor variable)
        w(n,2) = (j-1) * hy;      % Coordenada angular
    end
end

m = length(w(:,1));
x = zeros(m,2);

% Calcular coordenadas cartesianas de los nodos en el elipse
for i = 1:m
    a = w(i,1); % Coordenada radial (semi-eje mayor en este punto)
    theta = 2 * pi * w(i,2); % Angulo en radianes
    b = b1 + (b2 - b1) * (a - a1) / (a2 - a1); % Interpolacion lineal de los semi-ejes
        menores
    x(i,1) = a * cos(theta); % Coordenada x
    x(i,2) = b * sin(theta); % Coordenada y
end

% Localizacion de los nodos repetidos
for i = 1:Nx+1
    k = (Nx+1)*Ny + i;
    x(k,:) = x(i,:);
end

% Eliminar nodos duplicados (por cierre del anillo)
[~, unique_idx, idx_map] = unique(x, 'rows', 'stable');
x = x(unique_idx, :);

% Construir la matriz de conectividades
g = [];
for j = 1:Ny
    for i = 1:Nx
        n1 = (j-1) * (Nx+1) + i;
        n2 = n1 + 1;
        n3 = n1 + (Nx+1);
        n4 = n3 + 1;

        g = [g; idx_map(n1), idx_map(n2), idx_map(n4)];
        g = [g; idx_map(n1), idx_map(n4), idx_map(n3)];
    end
end

if a1 == 0 && b1 == 0

    % Quitar los elementos repeditas
    k = sum(g == 1, 2) == 2;

    % Eliminar esas filas de la matriz de conectividades g
    g = g(~k, :);
end

% Numero de nodos y elementos
nnt = size(x, 1);
ne = size(g, 1);

% Obtener la grafica de la malla

A1 = a2 + 0.15;
B1 = b2 + 0.15;

figure
hold on
patch('Vertices', x, 'Faces', g, 'FaceColor', 'white', 'EdgeColor', 'b');
axis([-A1 A1 -B1 B1])
axis square % Para el circulo y el anillo circular
xlabel('X');
ylabel('Y');
title(['Malla del anillo eliptico , Elementos = ', num2str(nne), ', Nodos = ', num2str(

```

```

nnt]);

% Para visualizar la numeracion de los nodos se agrega:
% for i = 1:nnt
%     text(x(i,1), x(i,2), num2str(i), 'Color', 'black', 'FontSize', 14); % Numeracion
%         de nodos en color negro
% end

end

```

Listing 2: Programa malla triangular para un anillo elíptico.

### A.3. Programa para generar una malla triangular graduada para un círculo de radio $R > 0$

```

function [x, g, nnt, ne] = Trimesh_circle(N, R, L)

% Esta funcion genera una malla triangular para un circulo utilizando el metodo de
% Delaunay
% Entrada:
% N - Numero de divisiones radiales (define el refinamiento de la malla)
% R - Radio del circulo.
% L - Numero base de divisiones angulares (define la densidad angular)
% Salida:
% x - Coordenadas de los nodos
% g - Matriz de conectividades
% nnt - Numero total de nodos
% ne - Numero total de elementos triangulares

% Inicializa la matriz de nodos como vacia
x = [];

% Vector para almacenar las divisiones radiales
r = zeros(2^N,1);

% Incremento radial entre divisiones
rx = R / (2^N);

% Llena el vector 'r' con los radios correspondientes de cada division radial.
% Cada valor representa la distancia de una circunferencia concentrica al centro.
for j = 1:2^N
    r(j) = j*rx;
end

% Inicializa un contador para los nodos.
n = 1;

% Coordenadas del primer nodo.
x(:,n) = [0, 0];

for j = 1:length(r)
    m = j * L; % Numero de nodos en la circunferencia de radio 'r(j)'

    for i = 0:m-1
        n = n + 1; % Incrementa el contador de nodos
        theta = i * (2 * pi / m); % Angulo polar correspondiente a la posicion del nodo

        % Calcula las coordenadas cartesianas del nodo y las almacena en 'x'
        x(n, 1) = r(j) * cos(theta);
        x(n, 2) = r(j) * sin(theta);
    end
end
end

```

```
% Obtencion de la matriz de conectividades utilizando la triangulacion de Delaunay.  
g = delaunay(x(:,1), x(:,2));  
  
% Numero total de nodos o vertices  
nnt = size(x, 1);  
  
% Numero total de elementos o triangulos  
ne = size(g, 1);  
  
end
```

Listing 3: Programa malla triangular graduada para un círculo.





Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

# ACTA DE EXAMEN DE GRADO

No. 00242

Matrícula: 2222800073

Patrones de Turing sobre superficies tridimensionales.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 14:00 horas del día 16 del mes de diciembre del año 2024 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. JOAQUIN DELGADO FERNANDEZ
- DR. LORENZO HECTOR JUAREZ VALENCIA
- DR. DIANA ASSAELY LEON VELASCO
- DRA. MARIA LUISA SANDOVAL SOLIS

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretaria la última, se reunieron para proceder al Examen de Grado cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

MAESTRO EN CIENCIAS (MATEMÁTICAS APLICADAS E INDUSTRIALES)

DE: DAVID ISRAEL GONZALEZ MENA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción III del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

**APROBAR**

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.



DAVID ISRAEL GONZALEZ MENA  
ALUMNO

REVISÓ

MTRA. ROSALIA SERRANO DE LA PAZ  
DIRECTORA DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

  
DR. ROMAN LINARES ROMERO

PRESIDENTE

  
DR. JOAQUIN DELGADO FERNANDEZ

VOCAL

  
DR. LORENZO HECTOR JUAREZ VALENCIA

VOCAL

  
DR. DIANA ASSAELY LEON VELASCO

SECRETARIA

  
DRA. MARIA LUISA SANDOVAL SOLIS