



Aproximación numérica basada en diferencias finitas para el modelo de la melanogénesis de Schnakenberg usado en el estudio de la formación de patrones

César Augusto Zambrano Benjumea

Oscar Andrés Castrillón Barahona



Universidad del Quindío

FACULTAD DE CIENCIAS DE LA EDUCACIÓN

LICENCIATURA EN MATEMÁTICAS

APROXIMACIÓN NUMÉRICA BASADA EN DIFERENCIAS
FINITAS PARA EL MODELO DE LA MELANOGÉNESIS DE
SCHNAKENBERG USADO EN EL ESTUDIO DE LA
FORMACIÓN DE PATRONES

Informe escrito de trabajo de Grado

César Augusto Zambrano Benjumea y Oscar Andrés Castrillón
Barahona

Director: Ph.D., César Augusto Acosta Minoli

Modalidad: Trabajo de investigación

Área de profundización: Matemática aplicada

Abril 2022

1

Índice

1. Estado del arte	9
2. Marco conceptual	13
2.1. Sistemas dinámicos	13
2.1.1. Sistemas dinámicos en tiempo discreto	14
2.1.2. Sistemas dinámicos en tiempo continuo	14
2.2. Introducción a las ecuaciones diferenciales ordinarias	15
2.2.1. Teoría de estabilidad	15
2.2.2. Sistemas autónomos	16
2.2.3. Sistemas en el plano	18
2.3. Modelos matemáticos	23
2.4. Ecuaciones diferenciales parciales	23
2.4.1. EDP de primer orden	24
2.4.2. Ecuación diferencial parcial lineal	25
2.5. Método de diferencias finitas	25
2.5.1. Diferencias finitas	26
2.5.2. Discretización del tiempo	29
2.6. Inestabilidades de Turing en sistemas de reacción-difusión	30
2.6.1. Inestabilidad de Turing-Hopf	31
2.7. Sistema de reacción-difusión	31
2.7.1. Adimensionalización	33
2.8. Patrones de Turing	34
2.9. Estabilidad y condiciones para estados no homogéneos	37
2.9.1. Estabilidad en ausencia de difusión	38
2.9.2. Inestabilidad en presencia de difusión	39
3. Metodología	43

4. Resultados	45
4.1. Discretización del modelo	45
4.2. Estabilidad en ausencia de difusión	46
4.3. Inestabilidad en presencia de difusión	50
5. Conclusiones	55
Apéndice A	66
Apéndice B	69
Apéndice C	74

Resumen

La formación de patrones espacio-temporales es una característica muy importante a la hora de estudiar los sistemas biológicos, esto debido a que pueden ser decisivos tanto en la supervivencia como en la función y desarrollo del organismo en determinado medio ambiente. Originalmente la explicación de este fenómeno se le atribuía a fuerzas sobrenaturales, pero gracias a los diferentes estudios químicos y matemáticos de los modelos biológicos se ha logrado dar una mejor explicación a este tipo de sucesos. Una de las teorías más aceptadas propone que la formación de estos patrones surge cuando una sustancia química que puede depender de algunas condiciones (externas), es la que se encarga de que las células sigan determinadas rutas que las llevan a la formación de patrones, por ejemplo, patrones que podemos observar en la piel.

En términos matemáticos esta situación se puede representar por medio de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales más conocido como sistema de reacción-difusión. Este sistema de ecuaciones ayuda a entender cuantitativamente el proceso de transporte y de reacciones químicas necesario para la formación de patrones. En este trabajo se estudiaron los conceptos químicos y matemáticos planteados originalmente por Turing, que permiten establecer el sistema de reacción-difusión y por último fijar las condiciones matemáticas para producir patrones espaciales. Después, se especifica el método de aproximación en diferencias finitas que permite resolver las ecuaciones de reacción-difusión numéricamente en MATLAB (R2020b) de un modelo de la melanogénesis bastante conocido: Modelo de Schnakenberg. El objetivo fue derivar e implementar un algoritmo en diferencias finitas para el modelo de Schnakenberg en el estudio de la formación de patrones. Los resultados mostraron que las condiciones halladas mediante el estudio matemático cumplen las restricciones de Turing y permitieron la formación de patrones espacio-temporales. Se concluye que, el estado de equilibrio se determina únicamente de la parte reactiva del sistema y también de la rapidez de la reacción; además, la incorporación de la parte difusiva en la reacción

es la que ocasiona formas espaciales que no se desvanecen con el tiempo. **Palabras clave:** Diferencias finitas, ecuación de reacción-difusión, formación de patrones, inestabilidad de Turing, modelo de Schnakenberg.

Abstract

The formation of spatio-temporal patterns is a very important characteristic when studying biological systems because they can be decisive both in the survival and in the function and development of the organism in a given environment. Originally the explanation of this phenomenon was attributed to God, but thanks to different chemical and mathematical studies of biological models it has been possible to give a better explanation to this type of event. One of the most accepted theories propose that the formation of these patterns occurs when a chemical substance that may depend on some conditions (external), it is responsible for the cells to follow certain paths that lead to the formation of patterns, for example, patterns that we can observe in the skin.

In mathematical terms this situation can be represented by a system of partial differential equations better known as the reaction-diffusion system. This system of equations helps us to understand quantitatively the process of transport and chemical reactions necessary for the formation of patterns. In this paper we will study the chemical and mathematical concepts originally proposed by Turing, to then establish the reaction-diffusion system and finally fix the mathematical conditions to produce spatial patterns. Next, we will specify the method of approximation in finite differences that will allow us to solve the reaction-diffusion equations numerically in MATLAB (R2020b) of a well-known model of melanogenesis: Schnakenberg's Model. The objective was to derive and implement a finite difference algorithm for the Schnakenberg model in the study of pattern formation. The results show that the conditions found by mathematical study meet the Turing constraints and allow the formation of spatio-temporal patterns. We concluded that the steady state

is determined only by the reactive part of the system and also by the speed of the reaction; in addition, the incorporation of the diffusive part in the reaction is what causes spatial forms that do not fade away over time. **Keywords:** Finite differences, pattern formation, reaction-diffusion equation, Schnakenberg's Model, Turing instability.

Introducción

Durante mucho tiempo e incluso en la actualidad, los científicos continúan discutiendo sobre cuál es el origen de las formas más complejas que se aprecian en la naturaleza ya que estas formas suelen atribuirse a la misma naturaleza o a fuerzas sobrenaturales. Todo aquello que representa la vida, es decir, sus formas, sus diseños, colores, entre otras cosas, estaban fuera del alcance del hombre y no sólo debido a la gran complejidad que representaban estas formas sino también porque se pensaba que la esencia de todo esto estaba más allá de lo que un científico podría obtener mediante sus modelos físicos o químicos. Un ejemplo es la piel manchada de un jaguar ver (Figura 1), fenómeno explicado desde un pensamiento evolutivo, donde la selección evolutiva prefirió este tipo de manchas; así el jaguar podría camuflarse de mejor manera y así acechar a sus presas sin ser detectado, y aunque esto es cierto, no explica en su totalidad cómo la selección natural conforma ese tipo de patrón.

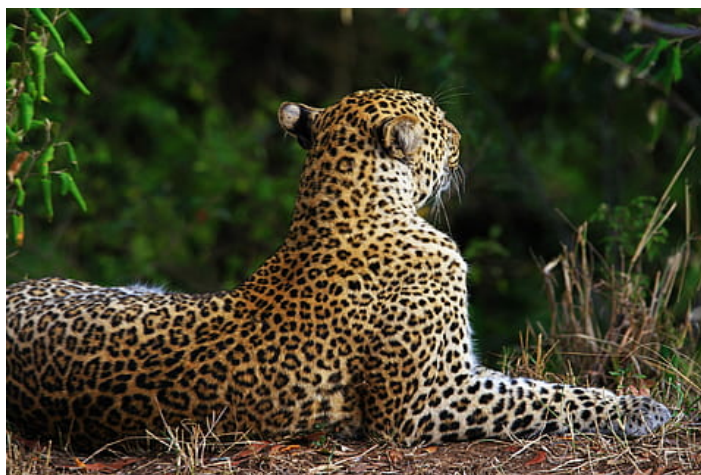


Figura 1: *Patrones en la piel de un jaguar. Imagen de uso libre.*

“Los seres vivos somos sistemas complejos, es decir sistemas termodinámicos formados por muchas celdas llamadas células. Evidentemente somos sistemas abiertos que intercambian materia y energía con su entorno, mismas que le ayudan a gestarse, desarrollarse y reproducirse. El comer, respirar, asolearse, beber, representan la fuente que nos proveen de lo

necesario para vivir. Todos estos intercambios son reacciones químicas, lo cual nos hace pensar en éstas como la fuerza termodinámica que permite a las células diferenciarse en órganos bien identificados y en patrones, es decir, generar un orden.” (Wolpert, 2008, como se citó en Durán, 2012)

La formación de patrones espacio-temporales ha sido analizada por diversos modelos matemáticos; pero desde un punto de vista biológico estos patrones se pueden clasificar en dos principales categorías: Patrones químicos y patrones de movimiento celular (Vanegas, 2009, p. 123). Los patrones químicos se pueden dividir en dos modelos, **modelos de gradiente**, aquellos que generan patrones mediante la interacción de sustancias químicas con diferente concentración; y los **modelos de reacción-difusión**, que describen las interacciones químicas que forman patrones complejos en el espacio y/o el tiempo, debido a la presencia de condiciones de transporte y descomposición que dependen de todas las sustancias químicas presentes en el dominio analítico. Por otra parte, los modelos de movimiento celular analizan la formación de patrones espaciales teniendo en cuenta su densidad celular y las interacciones químicas determinadas.

Turing en 1952 con su artículo “the chemical basis of morphogenesis”, logra establecer: ¿cómo se pueden formar patrones químicos espaciales? y segundo, ¿cómo relacionar dichos patrones con aquellos que se pueden observar en la naturaleza? Adicionalmente, estudió las soluciones de los modelos biológicos descritos por ecuaciones de reacción-difusión, allí encontró tres tipos de inestabilidades: Oscilatorias en el tiempo y uniformes en el espacio, estacionarias en el tiempo y periódicas en el espacio, y oscilatorias en el tiempo y espacio, (Chaidez (2010); Durán (2012); Turing (1952); Vanegas (2009)). También demostró que un sistema de reacción-difusión puede evolucionar a patrones heterogéneos al someterlo a pequeñas perturbaciones, es decir, la difusión puede llevar un sistema a la inestabilidad, induciendo a la formación de patrones. Este proceso es mejor conocido como inestabilidad de Turing.

“El uso de los sistemas de reacción-difusión con inestabilidades de Turing han sido primordiales para lograr representar diferentes fenómenos biológicos que puedan involucrar el crecimiento de órganos o tejidos de diferentes especies” (González, 2009, p. 145). Existe una gran variedad de fenómenos biológicos que involucran la dispersión, como lo son el crecimiento de poblaciones o la regeneración de tejidos; gracias a esto se ha logrado avanzar en los sistemas de reacción-difusión y aunque se han encontrado expresiones matemáticas que son complejas a la hora de resolver, estas han ayudado a la explicación en la formación de determinadas estructuras biológicas. Debido a la alta complejidad de las diferentes expresiones matemáticas que se pueden presentar a la hora de analizar los modelos de reacción-difusión, en específico el **modelo de Schnakenberg**, es necesario la implementación de algún método numérico como el método de diferencias finitas para así obtener una simulación que permita observar si el modelo estudiado se acerca a los patrones biológicos.

Todo esto nos lleva a preguntarnos: *¿Cómo construir un algoritmo computacional basado en diferencias finitas que permita aproximar soluciones al modelo de la melanogénesis de Schnakenberg en el estudio de la formación de patrones?*

El estudio de estos diferentes algoritmos que permiten calcular aproximaciones de las soluciones de los sistemas de ecuaciones para el estudio de la formación de patrones es de gran ayuda e importancia debido a que:

- Permite que las personas puedan entender un poco más el comportamiento del fenómeno que representan las ecuaciones diferenciales parciales y además de esto, se podría responder de forma muy particular la pregunta que siempre se hacen las personas: ¿Para qué sirven las matemáticas? Se responde de forma muy visual para mayor entendimiento.
- Desde hace muchos años se vienen usando aproximaciones de soluciones de ecuaciones diferenciales que describen sistemas que están relacionados con la creación de patrones

por medio de ecuaciones diferenciales parciales. Gracias a la teoría de ecuaciones diferenciales se pueden establecer datos que apoyan el avance para la explicación de patrones biológicos.

El objetivo principal de este trabajo fue derivar e implementar un algoritmo basado en diferencias finitas para calcular soluciones aproximadas de un modelo de la melanogénesis: el modelo de Schnakenberg en el estudio de la formación de patrones. Esto lo cumplimos al realizar un proceso de discretización del modelo a objeto de estudio, después implementando en el entorno de MATLAB (R2020b) un algoritmo computacional que nos permitió obtener las aproximaciones de las soluciones del modelo de la melanogénesis el cual está basado en ecuaciones de reacción-difusión; y por último, realizamos un proceso de validación de las diferentes soluciones numéricas obtenidas de la implementación del algoritmo computacional en el modelo de la melanogénesis planteado, este proceso de validación se realizó al observar si las diferentes soluciones que se obtenían cumplían con las condiciones establecidas en la teoría de patrones de Turing.

Para lograr cumplir estos diferentes objetivos realizamos la recopilación de diferentes fuentes bibliográficas sobre patrones de Turing, ecuaciones diferenciales parciales, sistemas de reacción-difusión, inestabilidad de sistemas dinámicos y el método numérico de diferencias finitas, los cuales son el principal sustento para lograr obtener la simulación con los diferentes patrones biológicos. En segunda instancia, la construcción e implementación del código en MATLAB (R2020b) nos facilitó generar las soluciones aproximadas al modelo de la melanogénesis el cual nos permitió reproducir los diferentes patrones biológicos. Por último, después de realizar toda la consulta bibliográfica y la verificación de las soluciones numéricas obtenidas, se procedió a validar el modelo de la melanogénesis mediante los datos arrojados en la simulación comparándolos con resultados de estudios previos.

El contenido se divide de la siguiente manera: en el primer capítulo realizamos una revisión bibliográfica sobre la teoría de patrones de Turing y los resultados que se han obtenido

más recientemente. En el segundo capítulo veremos algunos conceptos básicos sobre sistemas dinámicos, ecuaciones diferenciales ordinarias, ecuaciones diferenciales parciales, los sistemas de reacción-difusión y sobre los patrones de Turing, en específico en el fenómeno de la melanogénesis. Posteriormente, en el capítulo tres abordaremos la metodología que se utilizó para realizar el trabajo de investigación. Luego, en el capítulo cuatro aplicamos la teoría de ecuaciones diferenciales al modelo de la melanogénesis implementado: El modelo de Schnakenberg. Estudiamos el mecanismo de Turing que nos permitió encontrar las condiciones suficientes y necesarias para la formación de patrones; aplicamos dichas condiciones al modelo propuesto y simulamos el modelo en dos dimensiones. Es de subrayar que en dos dimensiones solo estudiamos el caso cuando el dominio es rectangular. Finalmente, discutimos los resultados obtenidos con las simulaciones y presentamos las conclusiones.

1. Estado del arte

Una de las características de los sistemas biológicos es la capacidad que tienen para producir y mantener patrones espaciales y espacio-temporales. Para muchos científicos, el dar a conocer por qué se presentan estos fenómenos, ha sido uno de sus objetivos más importantes; Turing fue el primero que planteó la hipótesis de que las células responden a la concentración de ciertos químicos y como consecuencia se diferencian. Es por eso que debemos tener en cuenta que, los modelos de formación de patrones biológicos combinan distintos conceptos de tiempo, espacio e interacción. Además de que la formación de estos patrones surge de la interacción del movimiento celular, sin importar si es activo o pasivo, y la interacción mecano/química de las células (Deutsch, 2017; Maini, 2004).

Es gracias al análisis matemático de algunos modelos biológicos descritos por ecuaciones de reacción-difusión que se logra dar lugar al concepto de inestabilidad de Turing (Vanegas, 2009). Los estudios de (Durán, 2012; Vanegas, 2009) afirman que la formación de patrones espacio temporales también son muy importantes a la hora de estudiar sistemas de reacción-difusión, a la misma vez que es una característica significativa de los sistemas biológicos ya que pueden ser concluyentes en el desarrollo o la supervivencia del organismo en el medio ambiente. Y uno de los casos particulares que más ha llamado la atención, consiste en la formación de patrones espaciales en la piel de algunos animales.

Se estudia los patrones de Turing a través de difusión-advección-reacción, considerando los modelos de cinética de Schnackenberg o modelo de morfogénesis y de glucólisis utilizado para explicar la síntesis de glucosa en energía celular. Para los modelos de glucólisis, el efecto advectivo modifica totalmente los patrones de Turing que se obtuvieron con difusión-reacción (Galeano, 2010).

El modelo de Schnackenberg. Este modelo es uno de las más conocidos y sencillo de usar en la morfogénesis, este modelo explica el comportamiento de un químico activador en presencia de un químico inhibidor. El modelo de glucólisis o glicólisis es el proceso de

síntesis de la molécula de glucosa para proporcionar energía al metabolismo celular. A través de una secuencia de reacciones, la glucosa es transformada en piruvato y en ATP (Galeano, 2010; Vanegas, 2009). Cuando se estudió el mecanismo generador de patrones basados en un modelo generalizado de Gierer–Meinhardt con difusiones (Gonzalo, 2013), se logra mostrar la existencia y estabilidad de la bifurcación de Turing-Hopf para el sistema bajo ciertas condiciones, pero con difusiones espaciales la solución estable de Hopf puede volverse inestable dando como resultado una inestabilidad de Turing. Simulaciones numéricas lograron también mostrar que los patrones de Turing son comúnmente en forma de rayas y puntos.

Como se muestra en (Zhao, 2014) mientras se investigaba un modelo para una red de neuronas basados en un sistema de reacción-difusión, se logra obtener una bifurcación de Hopf y además condiciones para la inestabilidad de Turing. Gracias a los resultados obtenidos por medio de simulaciones se logra determinar la estabilidad de diferentes patrones como un enriquecimiento para la dinámica de sistemas de redes neuronales.

El modelo FitzHugh–Nagumo es un famoso modelo de sistema de reacción-difusión principalmente utilizado para la conducción de impulsos eléctricos a lo largo de una fibra nerviosa. En (Zhang, 2019; Zheng, 2015) se estudia el efecto de la difusión en la formación de patrones en el modelo FitzHugh–Nagumo y por medio del análisis de estabilidad lineal se logra obtener condiciones de como surge la bifurcación de Turing, la bifurcación de Hopf y los límites de inestabilidad oscilatoria.

En el análisis de este modelo se logra encontrar comportamientos muy dinámicos, como patrones manchados, de rayas y hexágonos. Cuando se analiza el modelo basado en la dinámica de respuestas neuronales con difusión y acoplamiento surgen dos casos: Con difusión el sistema proporciona un ejemplo canónico de la bifurcación de Turing-Hopf. En el segundo caso ocurre una bifurcación de tipo Turing-Hopf-Turing.

Otro modelo planteado por Turing que también sirve para tratar problemas sobre patrones

espaciales en sistemas biológicos y físicos. El modelo BVAM surge como un intento de unificar los modelos que se usaban hace tiempo para tratar la aparición de patrones en sistemas de morfogénesis. Este modelo se creó principalmente para estudiar el comportamiento de las cinéticas químicas en presencia de difusión (Barrio, 2010).

Gracias a las bases que dejó Turing, durante los últimos años se han logrado realizar diferentes investigaciones que han contribuido al desarrollo de la ciencia y las matemáticas. Gracias a las bases que dejó Turing, durante los últimos años se han logrado realizar diferentes investigaciones que han contribuido al desarrollo de la ciencia y las matemáticas. En 1992 se realizó una investigación con referencia a la formación de patrones donde (Bentil, 1992) se usaron técnicas de perturbación a escala múltiple para estudiar la evolución de las soluciones, también se discutieron algunas aplicaciones biológicas como: la formación de patrones de cresta, dermatoglifos y la curación de heridas. Aún en este año se desconocía cuales eran los mecanismos responsables del desarrollo de patrones espaciales repetidos o periódicos. Los biólogos y matemáticos de esta época sugerían que los mecanismos de prepatrones eran la causa principal de los patrones repetidos o periódicos; se sugirió un sistema de reacción-difusión que genera patrones similares a ondas como un posible mecanismo de prepatrones durante el desarrollo de los folículos pilosos y los patrones de pigmentación (Nagorcka, 1992).

Luego en 2009, se estudió si un sistema de depredador presa con canibalismo depredador podría tener influencia en la formación del patrón espacial. Los resultados que se obtuvieron mostraron que, en efecto, el canibalismo depredador tiene una gran influencia en la formación del patrón espacial, además se descubrió que, aunque el entorno es heterogéneo, el sistema sigue presentando el patrón de Turing, lo que significa que el patrón es autoorganizado (Sun, 2009).

En 2011, se logró mostrar que la inclusión de ruido intrínseco en los modelos de Turing conduce a la formación de “cuasipatrones” en regiones genéricas del espacio y que son

distinguibles experimentalmente de los patrones de Turing estándar (Butler, 2011). Y en 2012, gracias a los modelos de reacción-difusión se lograron describir tres estudios que han sido útiles para comprender fenómenos específicos: Un modelo de reacción-difusión que ayudó a explicar los diversos patrones en el pelaje de algunos animales; modelo básico para cuantificar el crecimiento de tumores cerebrales de glioblastoma, se utiliza para estimar la esperanza de vida de las personas y explicar algunas anomalías de los tumores cerebrales; por último, un modelo que cuantifica la interacción marital para predecir el divorcio (Murray, 2021).

Y en 2021 se realizó un estudio sobre formación de patrones con sistemas de reacción-difusión donde ya no se consideraron condiciones de frontera sin flujo, sino condiciones de contorno mixta, estas condiciones también pueden surgir de manera natural si algunas propiedades del medio varían en el espacio. El uso de estas condiciones permitió demostrar que se puede capturar una gama más amplia de patrones en una, dos y tres dimensiones, además de que conducen a patrones más simétricos en el interior del dominio, (Krause, 2021).

Algunos métodos utilizados para aproximar soluciones de estos tipos de problemas en computador son: Método de análisis estándar de escalas múltiples (Zhao, 2014), Método de elementos finitos en dominios unidimensionales y bidimensionales (González, 2009b) y el método de diferencias finitas (Durán, 2012). Como el problema tiene una característica técnica de presentarse en un dominio rectangular, se ha considerado el método de diferencias finitas por su cómoda implementación y su eficiencia computacional.

2. Marco conceptual

2.1. Sistemas dinámicos

Los problemas en sistemas dinámicos siempre han fascinado a los científicos, principalmente aquellos que tienen que ver con el estudio de cuerpos celestes que están dentro del sistema solar. Debido a los intentos de Newton por entender estos movimientos, teniendo en cuenta las leyes de Kepler, es que surgen los primeros problemas dinámicos relacionados con las ecuaciones diferenciales ordinarias.

Un sistema dinámico consiste en un conjunto de diferentes magnitudes medibles las cuales evolucionan con el tiempo. En las aplicaciones científicas los diferentes métodos comienzan por simular el sistema dinámico por un modelo de ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, y se pueden presentar dos casos (Zadunaisky, 2009):

- Problema directo, el modelo matemático de simulación se aplica para propósitos de predicción, apreciación de resultados y/o programación de un sistema de control del proceso evolutivo.
- Problema inverso, el modelo matemático contiene, además de las magnitudes que evolucionan, parámetros que se determinan para que los resultados del modelo y datos medidos de la evolución difieran mínimamente.

Los sistemas dinámicos los podemos clasificar en:

- Discretos y continuos.
- Autónomos y no autónomos.
- Lineales y no lineales.

2.1.1. Sistemas dinámicos en tiempo discreto

El concepto de sistemas dinámicos en tiempo discreto cobra fuerza debido al uso de las computadoras, las cuales almacenan información, como señales de imágenes y sonidos, a intervalos discretos de tiempo. Uno de los modelos más clásico dentro de este tipo de sistemas dinámicos, es el de crecimiento geométrico. (Gonzalo, 2013, p. 13.) afirma, “El supuesto básico es que el valor de una variable x en un período determinado, o periodo k , es igual al valor de dicha variable en el período anterior multiplicado por un factor “ a ”. Esto es:

$$x(k + 1) = ax(k), \quad (1)$$

esto significa que:

$$\begin{aligned} x(1) &= ax(0), \\ x(2) &= ax(1) = a^2x(0), \\ x(3) &= ax(2) = a^3x(0), \end{aligned}$$

en general,

$$x(k) = a^k x(0).$$

2.1.2. Sistemas dinámicos en tiempo continuo

En este tipo de sistemas, los valores de las variables involucradas son funciones continuas en el tiempo. De manera general, los hechos que suceden en el mundo real ocurren en una escala continua del tiempo; un ejemplo puede ser la posición de determinado objeto en el espacio. Los sistemas dinámicos en tiempo continuo se modelan a través de ecuaciones diferenciales ordinarias o ecuaciones diferenciales parciales.

La diferencia entre los sistemas dinámicos autónomos y no autónomos radica en que el primero no contiene estímulos externos al sistema, mientras que el segundo sí.

Por último, un sistema dinámico es lineal si cumple que la función F que relacione la tasa de crecimiento de las variables de estado cumple con el principio de superposición ($\dot{x} = F(ax + by) = aF(x) + bF(y)$). (Loaiza Ramírez, 2006., pp. 16-17)

2.2. Introducción a las ecuaciones diferenciales ordinarias

Una ecuación diferencial ordinaria por sus siglas EDO, es una relación entre una función $x(t)$ y sus derivadas con respecto a t , es decir

$$F\left(x, \frac{dx}{dt}, \dots, \frac{d^n x}{dt^n}\right) = 0,$$

en esta sección consideraremos ecuaciones diferenciales de la forma

$$\frac{dx}{dt} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}.$$

En general $x \in \mathbb{R}^n$ y $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, lo que representa un sistema de ecuaciones diferenciales.

Definición. “Una función vectorial $\omega : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ se dice que es una solución del sistema $\dot{x} = f(x)$, si” (Chaidez Félix, 2010, p.10)

$$\frac{d\omega}{dt} = f(\omega(t)) \quad \forall t \in I.$$

Al introducir la condición inicial $x(t_0) = x_0$, entonces la solución $\omega(t)$ deberá satisfacer $\omega(t_0) = x_0$

2.2.1. Teoría de estabilidad

En el estudio de ecuaciones diferenciales, se ha centrado en el problema de obtener soluciones mediante algunos métodos de resolución de algunos tipos de ecuaciones. Con esta teoría se le da otro enfoque al estudio de las ecuaciones diferenciales, obteniendo información cualitativa sobre el comportamiento de las soluciones sin necesidad de solucionar explícitamente la ecuación diferencial.

2.2.2. Sistemas autónomos

Un sistema autónomo es un sistema de ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= F(x, y), \\ \frac{dy}{dt} &= G(x, y),\end{aligned}\tag{2}$$

donde F y G son continuas y tienen primeras derivadas parciales continuas en todo el plano. Se denomina **sistema autónomo** debido a que las funciones F y G , no dependen explícitamente de la variable independiente t .

Cada solución del sistema (2) es un par de funciones $x(t)$ e $y(t)$ que definen una curva $C = [x(t), y(t)]$ en el plano xy . Cada una de estas curvas determinan el estado del sistema en un instante t correspondiente a las condiciones iniciales determinadas, este tipo de curvas se suelen llamar **trayectorias u órbitas**.

Definición de punto crítico

“Considere la ecuación diferencial $\dot{x} = f(x)$ con $x \in \mathbb{R}^n$ y $f: V \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Diremos que el punto $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ es un punto de equilibrio o punto fijo si $f(\tilde{x}) = 0$.” (Chaidez Félix, 2010, p.13)

Definición de estabilidad

- I. Sean $\dot{x} = f(x)$ una ecuación diferencial (sistema de ecuaciones diferenciales) y \tilde{x} su punto de equilibrio, $x \in \mathbb{R}^n$ y $f: V \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Diremos que \tilde{x} es un punto de equilibrio estable del sistema $\dot{x} = f(x)$ si para cada vecindad U de \tilde{x} , con $U \subset V$, existe una vecindad U_1 de \tilde{x} , con $U_1 \subset U$ tal que toda solución $\omega(t, x)$, con $x_1 \in U_1$, está definida y pertenece en U para todo $t > 0$.
- II. Diremos que el equilibrio es asintóticamente estable si es estable y si es posible esco-

ger U_1 tal que, para todo $x_1 \in U_1, \omega(t, x_1) \rightarrow \tilde{x}$ cuando $t \rightarrow \infty$.

El equilibrio es inestable cuando no es estable. (Chaidez Félix, 2010, p.13)

Si consideramos una ecuación diferencial escalar

$$\dot{x} = f(x), \quad (3)$$

con \tilde{x} como punto fijo es sencillo determinar la estabilidad del punto fijo. Introducimos una pequeña perturbación alrededor del punto fijo: $\eta(t) = x(t) - \tilde{x}$ al derivar η con respecto al tiempo, se tiene

$$\frac{d\eta}{dt} = \frac{d(x(t) - \tilde{x})}{dt} = \dot{x},$$

esto debido a que \tilde{x} es una constante. Ahora, tenemos que $\dot{\eta} = \dot{x} = f(x) = f(\tilde{x} + \eta)$ si aplicamos expansión en series de Taylor alrededor del punto fijo obtenemos

$$f(\tilde{x} + \eta) = f(\tilde{x}) + \eta f'(\tilde{x}) + O(\eta^2),$$

por ser \tilde{x} punto fijo de la ec. (3), se tiene

$$\dot{\eta} = \eta f'(\tilde{x}) + O(\eta^2),$$

los términos $O(\eta^2)$ se pueden despreciar si $f'(\tilde{x}) \neq 0$. Entonces, aproximando tenemos

$$\dot{\eta} \approx \eta f'(\tilde{x}).$$

Este procedimiento es la linealización alrededor de \tilde{x} . Ahora, si $f'(\tilde{x}) < 0$, la perturbación convergerá a cero, por lo que \tilde{x} sería un punto fijo **estable**. Por otro lado, si $f'(\tilde{x}) > 0$ indicaría **inestabilidad** en el punto fijo \tilde{x} .

2.2.3. Sistemas en el plano

Considere el sistema lineal

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= a_{11}x_1, \\ \frac{dx_2}{dt} &= a_{22}x_2,\end{aligned}\tag{4}$$

el cual se puede reescribir de la forma

$$\dot{x} = Ax \quad \text{donde} \quad x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix},$$

cada ecuación del sistema (4) tiene como solución $x_i(t) = e^{a_{ii}t}$, pues

$$\frac{d}{dt}e^{a_{ii}t} = a_{ii}e^{a_{ii}t},$$

entonces, si se toma el vector $e^{a_{11}t}v_1 = e^{a_{11}t}(1, 0)^T$ o $e^{a_{22}t}v_2 = e^{a_{22}t}(0, 1)^T$. Se satisface el sistema (4). En particular, con $e^{a_{11}t}v_1$ se tiene

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}e^{a_{11}t}v_1 &= \begin{pmatrix} \frac{d}{dt}e^{a_{11}t} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}e^{a_{11}t} \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= a_{11}e^{a_{11}t}v_1 = Ae^{a_{11}t}v_1,\end{aligned}$$

así, de manera general se tiene que

$$\frac{d}{dt}e^{a_{ii}t}v_i = a_{ii}e^{a_{ii}t}v_i = Ae^{a_{ii}t}v_i,$$

al dividir la ecuación anterior entre $e^{a_{ii}t}$, resulta

$$a_{ii}v_i = Av_i.$$

Entonces, $x(t) = e^{a_{ii}t}v_i$ será solución de (4) si y sólo si, a_{ii} y v_i satisfacen la siguiente relación con respecto a la matriz A .

Definición

Un vector $v \in \mathbb{R}^n$ (o \mathbb{C}^n) diferente de cero, se dice vector característico, vector propio o eigenvector de una matriz $A \in \mathbb{M}_{n \times n}$, si existe un escalar $\lambda \in \mathbb{R}$ (o \mathbb{C}), tal que $Av = \lambda v$. A dicho escalar se le conoce como valor característico, valor propio o eigenvalor de A , (Chaidez Félix, 2010, p.15).

Ahora, si la matriz A no es diagonal, supongamos

$$\dot{x} = Ax \quad \text{donde} \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad (5)$$

con $a_{ij} \neq 0$. Si suponemos que el sistema (5) tiene solución de la forma $x(t) = e^{\lambda t}v$. Entonces

$$\frac{d}{dt}e^{\lambda t}v = \lambda(e^{\lambda t}v) = A(e^{\lambda t}v), \quad (6)$$

para que esto tenga lugar es necesario que v y λ sean eigenvector y eigenvalor correspondientes a la matriz A . Para encontrar los vectores v , escribimos la ecuación (6) de la forma

$$Av = \lambda v,$$

esto implica que

$$(A - \lambda I)v = 0. \quad (7)$$

La anterior ecuación tiene solución diferente de cero (0), si $\det(A - \lambda I) = 0$. Así, los valores característicos de A son las raíces de la ecuación:

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \text{tr}A + \det A, \quad (8)$$

por tanto, $x_i(t) = e^{\lambda_i t}v_i$ son soluciones del sistema (4).

Para determinar la estabilidad del punto de equilibrio $\tilde{x} = 0$, se utiliza el siguiente teorema:

Teorema 1

Sea $\dot{x} = Ax$, donde A es una matriz de 2×2 con entradas reales. Sean λ_1 y λ_2 los valores propios de A . Entonces (Chaidez Félix, 2010, p.16)

El equilibrio es estable si:

- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ y $\lambda_1 < 0$ y $\lambda_2 < 0$. Es un nodo estable.
- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ y $Re(\lambda_1) < 0$ y $Re(\lambda_2) < 0$. Es un foco estable.
- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ y $Re(\lambda_1) = Re(\lambda_2) = 0$. Es un centro.

El equilibrio es inestable si:

- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ y $\lambda_1 > 0$ y $\lambda_2 > 0$. Es un nodo inestable
- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ y $Re(\lambda_1) > 0$ y $Re(\lambda_2) > 0$. Es un foco inestable
- $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ y $\lambda_1 \lambda_2 < 0$. Es un punto de silla

De la ecuación (8) se obtiene el siguiente resultado

$$\lambda_{1,2} = \frac{trA \pm \sqrt{(trA)^2 - 4detA}}{2}.$$

Del teorema 1 y la ecuación anterior (8) sigue el siguiente colorario

Colorario 1

Sea $\dot{x} = Ax$ un sistema lineal en \mathbb{R}^2 (Chaidez Félix, 2010, p.17)

- si $detA > 0$, $trA < 0$ y $(trA)^2 - 4detA \geq 0$ entonces el origen es un nodo estable.
- si $detA > 0$, $trA > 0$ y $(trA)^2 - 4detA \geq 0$ entonces el origen es un nodo inestable.
- si $detA > 0$, $trA < 0$ y $(trA)^2 - 4detA < 0$. entonces el origen es un foco estable.

- si $\det A > 0$, $\text{tr} A > 0$ y $(\text{tr} A)^2 - 4\det A < 0$ entonces el origen es un foco inestable.
- si $\det A < 0$ entonces el origen es un punto de silla.
- si $\det > 0$, $\text{tr} A = 0$ entonces el origen es un centro.

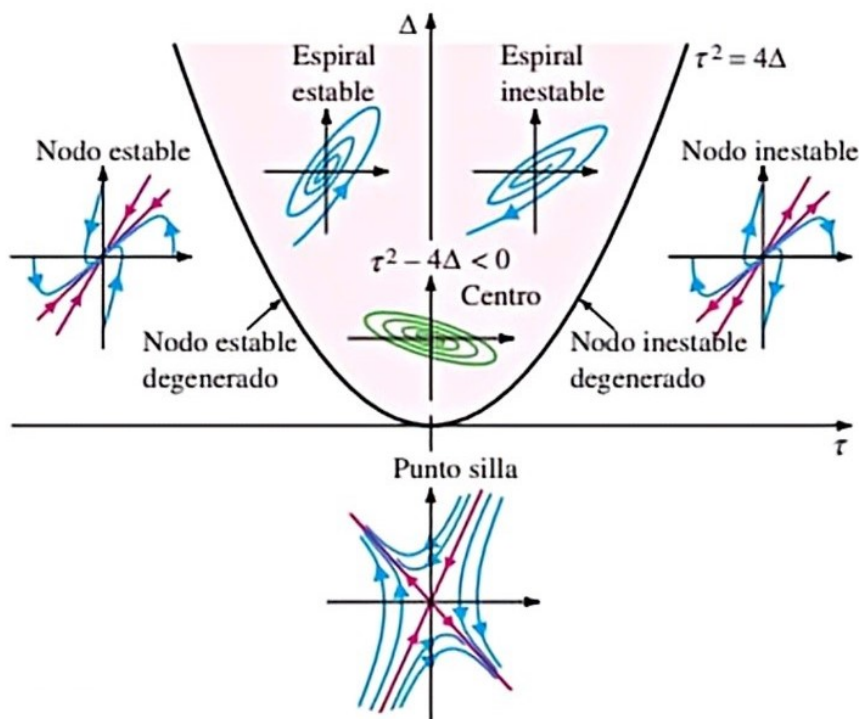


Figura 2: Resumen geométrico de los casos I, II y III. (Zill, 2015, p.389.)

Ahora, considerando el siguiente sistema no-lineal

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x, y) \\ g(x, y) \end{pmatrix} = F(x, y), \quad (9)$$

con punto fijo $\tilde{x} = (\tilde{x}, \tilde{y})^T$. Cuando las curvas $f(x, y) = 0$, $g(x, y) = 0$ (llamadas ceroclinas) se cruzan, determinan los puntos de equilibrio del sistema. Debido a que en los sistemas no-lineales es complejo encontrar soluciones explícitas. Se puede hacer un estudio del com-

portamiento de las trayectorias de las soluciones cercanas al punto fijo. Esto, expandiendo el sistema (9) en series de Taylor alrededor de \tilde{x} .

$$\dot{x} = DF(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{1}{2}(x - \tilde{x})^T D^2F(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \dots,$$

así, el sistema lineal

$$\dot{x} = DF(\tilde{x})(x - \tilde{x}),$$

es una buena aproximación alrededor de X_0 . Haciendo un cambio de variable, se obtiene:

$$\dot{\eta} = DF(\tilde{x})\eta. \quad (10)$$

La ecuación (10) se conoce como una linealización del sistema no-lineal. Ahora, para lograr aplicar el teorema 1 al sistema no-lineal, es preciso mencionar el teorema de *Hartman-Grobman*.

Definición

Sean $\dot{x} = f(x)$ y $\dot{x} = g(x)$ dos sistemas no lineales. Se dice que son topológicamente equivalentes si existe un homeomorfismo que manda órbitas de un sistema a otro, y que preserva el sentido de las mismas. Si también preserva la parametrización del tiempo, entonces se dice que son topológicamente conjugados. (Chaidez Félix, 2010, p.21)

Definición

Sean $\dot{x} = f(x)$ un campo vectorial y \tilde{x} su punto de equilibrio. Se dice que \tilde{x} es un equilibrio hiperbólico si $Df(\tilde{x})$ no tiene valores propios con parte real cero. (Chaidez Félix, 2010, p.21)

Teorema 2

Sea \tilde{x} un punto de equilibrio hiperbólico del campo vectorial f . Entonces el sistema no-lineal $\dot{x} = f(x)$ y su linealización $\dot{\eta} = Df(\tilde{x})\eta$ son topológicamente conjugados. (Chaidez Félix,

2010, p.21)

2.3. Modelos matemáticos

Un modelo matemático es una herramienta que ayuda a organizar las ideas del medio a través de la matemática, así explicando fenómenos naturales, sociales, físicos, entre otros. Estos también ayudan a predecir situaciones que pueden pasar a futuro y poder modificar el espacio modelado. La modelación se puede ver como ciencia y arte, ciencia porque usa procesos lógicos y como arte porque se puede apreciar la realidad de forma que no es unívoca siempre (“Modelos matemáticos”, 2009). Para formular un modelo debemos seguir los siguientes pasos

1. Identificación del problema.
2. Identificación de variables y parámetros.
3. Especificación matemática y formulación.
4. Resolución.
5. Verificación, validación y refinamiento.
6. Interpretación y análisis de los resultados.
7. Implantación, documentación y mantenimiento.

2.4. Ecuaciones diferenciales parciales

Una ecuación diferencial parcial (EDP) puede describirse como una relación donde tenemos una o varias funciones incógnitas u con al menos una derivada parcial, donde u depende de dos o más variables independientes. Una EDP es una relación de la forma: (Garza, 2013)

$$G\left(x_1, x_2, \dots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \frac{\partial u}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_N}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_N^2}\right) = 0, \quad (11)$$

en la relación aparece un número finito de derivadas parciales con respecto a cualquiera de las variables x_1, \dots, x_n de una función incógnita $u = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$

2.4.1. EDP de primer orden

Ecuaciones diferenciales parciales de primer orden con dos variables independientes:

El estudio de la EDP de primer orden empezó en la segunda mitad del siglo XVIII a raíz de los trabajos realizados por Clairaut, Lagrange, Charpit, Monge y Cauchy. El método de las características puede extenderse a fin de tratar el caso de una EDP general de primer orden en $u(x, y)$ cuya expresión general es: (Giordano, 2016)

$$F(x, y, u, u_x, u_y), \quad (12)$$

donde

$$u_x = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad u_y = \frac{\partial u}{\partial y}, \quad (13)$$

el conjunto de soluciones de las EDP es una familia de superficies en el espacio tridimensional.

Ecuación general de primer orden para una función de n variables independientes:

Sea

$$F(x_1, \dots, x_n, u, p_1, \dots, p_n) = 0, \quad (14)$$

una EDP para una función $u = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, de n variables independientes (x_1, x_2, \dots, x_n) y con derivadas parciales (Giordano, 2016)

$$p_i = u_{x_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (15)$$

2.4.2. Ecuación diferencial parcial lineal

Si hacemos que u denote la variable dependiente y que x y y denoten las variables independientes, entonces la forma general de una **ecuación diferencial parcial de segundo orden** esta dada por:

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G, \quad (16)$$

donde los coeficientes A, B, C, \dots, G son funciones de x y y . Cuando $G(x, y) = 0$, la ecuación (16) se llama **homogénea**; en cualquier otro caso se dice que es **no homogénea**.

Clasificación de las ecuaciones: Una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden con dos variables independientes y con coeficientes constantes se puede clasificar en uno de los tres tipos. Esta clasificación sólo depende de los coeficientes de las derivadas de segundo orden. Por supuesto, suponemos que al menos uno de los coeficientes A, B y C es distinto de cero.

La ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden:

$$Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G$$

donde A, B, C, D, E, F y G son constantes reales, se dice que es

- **Hiperbólica** si $B^2 - 4AC > 0$,
- **Elíptica** si $B^2 - 4AC < 0$,
- **Parabólica** si $B^2 - 4AC = 0$,

2.5. Método de diferencias finitas

En el cómputo, diferencias finitas ayuda a calcular numéricamente soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales usando expresiones algebraicas con los valores de la variable

dependiente en un número limitado de puntos seleccionados como herramienta de aproximación de las derivadas parciales. Para lograr esto, primero se debe hacer una discretización temporal y espacial del problema, es decir, se necesita plantear la ecuación aproximada en términos de las diferencias finitas, para finalmente lograr incluir las condiciones iniciales y de frontera. Como resultado de esta aproximación, la ecuación diferencial parcial que describe el problema es reemplazada por un número finito de ecuaciones algebraicas en términos de los valores de la variable dependiente en puntos seleccionados; los valores de estos puntos seleccionados se convierten en incógnitas. En pocas palabras, las derivadas son reemplazadas por aproximaciones en diferencias finitas, convirtiendo el problema de ecuaciones diferenciales en un problema algebraico de la forma $Ax = b$.

2.5.1. Diferencias finitas

El objetivo del método numérico es encontrar una función o aproximación discreta a esta función, que satisfaga la relación de sus derivadas o derivada (según el caso) en alguna región del espacio y/o tiempo.

Aproximaciones polinómicas

(Mendoza Bernal, 2016, p. 19) afirma que: “La técnica para los cálculos de diferencias finitas se basan en aproximaciones polinómicas a una función $f(x)$ cerca de un punto $x = x_0$.” También nos dice que una aproximación a dicha función $f(x)$ se puede obtener mediante una recta tangente en $x = x_0$.

Error de truncamiento

En las aproximaciones polinómicas obtenemos una fórmula del error a partir de la siguiente expresión conocido como *serie de Taylor*:

$$f(x) = f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} f^{(n)}(x_0) + R_n \quad (17)$$

El error de truncamiento tiene una fórmula similar al término $n + 1$ de la serie, con la diferencia que se evalúa en un punto intermedio que a menudo es desconocido,

$$R_n = \frac{\Delta x^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_{n+1}),$$

donde $x_0 < \xi_{n+1} < x_0 + \Delta x$.

Aproximación a las derivadas bidimensionales

Se pueden obtener aproximaciones en diferencias finitas de derivadas unidimensionales y de mayor rango a las bidimensionales, pero no es de nuestro interés. En esta parte se desarrollará las derivadas de orden dos con diferencias regresivas, centradas y progresivas en dos dimensiones.

(Espinoza, 2001), si se quiere resolver una EDP para la cual $u(x, y)$ es la variable dependiente en el dominio $0 \leq x \leq 1$, $0 \leq y \leq 1$. Y teniendo en cuenta que la posición $u_{i,j}$ corresponde a $u(x_0, y_0)$ se puede escribir:

$$\begin{aligned} u_{i+1,j} &= u(x_0 + \Delta x, y_0), & u_{i-1,j} &= u(x_0 - \Delta x, y_0), \\ u_{i,j+1} &= u(x_0, y_0 + \Delta y), & u_{i,j-1} &= u(x_0, y_0 - \Delta y), \end{aligned}$$

la idea de una representación de diferencias finitas para una derivada puede ser introducida recordando la definición de la derivada de la función $u(x, y)$ en la posición $x = x_0$ y $y = y_0$:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} = \lim_{\Delta x \rightarrow \infty} \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)}{\Delta x}, \quad (18)$$

Al desarrollar una expansión en series de Taylor para $u(x_0 + \Delta x, y_0)$ en torno a (x_0, y_0) se obtiene:

$$\begin{aligned} u(x_0 + \Delta x, y_0) &= u(x_0, y_0) + \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \\ &+ \frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}} \Big|_{x_0, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n u}{\partial x^n} \Big|_{\xi, y_0} \cdot \frac{(\Delta x)^n}{n!}, \end{aligned} \quad (19)$$

De esta manera, logramos formar la **diferencia progresiva** reordenando la ecuación (19):

$$\frac{\partial u}{\partial x}|_{x_0, y_0} = \frac{u(x_0 + \Delta x, y_0) - u(x_0, y_0)}{\Delta x} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}|_{x_0, y_0} \cdot \frac{\Delta x}{2!}, \dots \quad (20)$$

cambiando a una notación indicial tenemos:

$$\frac{\partial u}{\partial x}|_{i, j} = \frac{u_{i+1, j} - u_{i, j}}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (21)$$

donde $O(\Delta x)$ es el *error de truncamiento (E.T)* y se halla mediante la diferencia entre la derivada parcial y su representación como diferencia finita.

De manera análoga, al desarrollar la expansión en series de Taylor para $u(x_0 - \Delta x, y_0)$:

$$u(x_0 - \Delta x, y_0) = u(x_0, y_0) - \frac{\partial u}{\partial x}|_0 \cdot \Delta x + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}|_0 \cdot \frac{(\Delta x)^2}{2!} + \dots + \frac{\partial^{n-1} u}{\partial x^{n-1}}|_0 \cdot \frac{(\Delta x)^{n-1}}{(n-1)!} + \frac{\partial^n u}{\partial x^n}|_{\xi} \cdot \frac{(\Delta x)^n}{n!}, \quad (22)$$

logramos obtener la representación de **diferencias regresivas**:

$$\frac{\partial u}{\partial x}|_{i, j} = \frac{u_{i, j} - u_{i-1, j}}{\Delta x} + O(\Delta x), \quad (23)$$

si restamos las ecuaciones (19) y (22) podemos obtener la **diferencia centrada**. (Espinoza, 2001; Mendoza Bernal, 2016)

$$\frac{\partial u}{\partial x}|_{i, j} = \frac{u_{i+1, j} - u_{i-1, j}}{\Delta 2x} + O(\Delta x)^2, \quad (24)$$

al sumar las ecuaciones (19) y (22) podemos obtener una **aproximación central para la segunda derivada**:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}|_{i, j} = \frac{u_{i+1, j} - 2 \cdot u_{i, j} + u_{i-1, j}}{(\Delta x)^2} + O(\Delta x)^2. \quad (25)$$

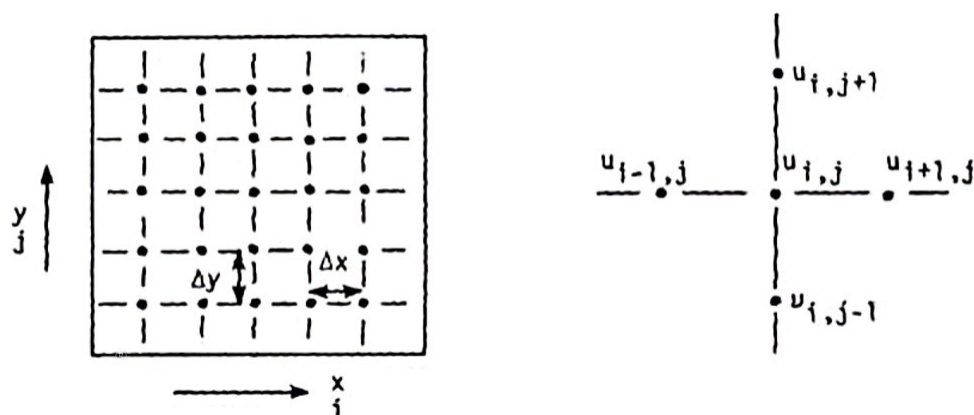


Figura 3: Típica grilla de diferencias finitas (Espinoza, 2001).

2.5.2. Discretización del tiempo

Hasta el momento hemos visto como discretizar la parte espacial de las ecuaciones diferenciales lo que nos permite encontrar la solución estática del problema. Para ecuaciones del tipo parabólico e hiperbólico, ecuaciones que dependen del tiempo, se necesita introducir una discretización en las derivadas respecto al tiempo. De igual manera que en las discretizaciones espaciales, se puede introducir algún esquema en diferencias finitas para la discretización temporal. (Mendoza Bernal, 2016)

Para las ecuaciones diferenciales con derivada temporal (u_t), se emplean diferentes esquemas en diferencias finitas para la discretización del tiempo. Según (Mendoza Bernal, 2016) estos esquemas son conocidos como *esquemas theta* (θ).

Diferentes casos para el esquema theta:

- Para $\theta = 0$ se obtiene un esquema de diferencias finitas hacia adelante en el tiempo, conocido como esquema completamente explícito.
- Para $\theta = 1$ se obtiene un esquema de diferencias finitas hacia atrás en el tiempo, conocido como esquema completamente implícito.

- Para $\theta = \frac{1}{2}$ se obtiene un esquema de diferencias finitas centradas en el tiempo, conocido como esquema Crank-Nicolson.

Así, si consideramos la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

utilizando un esquema de diferencias progresivas para la derivada temporal y un esquema de diferencias centradas para la derivada espacial, podemos escribir la ecuación anterior como:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\Delta x)^2}.$$

Las condiciones para lograr la estabilidad del método numérico se encuentran en el apéndice A.

2.6. Inestabilidades de Turing en sistemas de reacción-difusión

(Kapral & Showalter, 1995; Epstein & Showalter, 1996, como se citó en Peña Pellicer, 2002, p. 1) afirma que, durante los últimos años las diferentes investigaciones químicas fuera del equilibrio han tomado muy buen desarrollo logrando una gran cantidad de descubrimientos en cuanto a comportamientos espacio-temporales como, por ejemplo, duplicación de puntos; flores químicas; etc. También el descubrimiento de estructuras en forma de bandas o hexágonos. Estas últimas constituyen la confirmación experimental de la *inestabilidad de Turing*.

Fue Turing quien demostró que la unión entre la difusión y la reacción puede surgir un sistema de reactivos uniformemente distribuidos, conocidos como *estructura o patrón de Turing*. Sin importar el caso, para que se logre producir la inestabilidad se necesita de la interacción entre dos sistemas: uno de activación (por ejemplo, autocatálisis) y otro de saturación, puede ser mediante una especie que difunda más rápido que el activador. Se debe señalar que la inestabilidad de Turing no es exclusiva de los sistemas químicos, también puede verse en otro tipo de sistemas descritos por reacción-difusión.

Un sistema de reacción-difusión, dependiendo de las condiciones en que se encuentre, puede generar tres tipos diferentes de inestabilidad: oscilatorias en el tiempo y uniformes en el espacio relacionadas por las inestabilidades de Hopf, estacionarias en el tiempo y periódicas en el espacio asociadas con la bifurcación de Turing, y oscilatorias en el tiempo y espacio. (Chaidez (2010); Durán (2012); Turing (1952); Vanegas (2009))

2.6.1. Inestabilidad de Turing-Hopf

Después del artículo de Turing en 1952, se han realizado muchas investigaciones y trabajos buscando las condiciones para la inestabilidad de sistemas de reacción-difusión y sus conexiones con la formación de patrones en diferentes áreas, como sistemas químicos, pero donde más se ha desarrollado es en el modelo matemático de la morfogénesis. Cuando se presenta la aparición repentina de un ciclo límite que rodea el estado estacionario cuando varía un parámetro en el sistema, más allá de cierto umbral, se llama punto Turing-Hopf.

Las inestabilidades difusivas generadas por el ciclo límite a menudo se llama inestabilidad de Turing-Hopf o bifurcación, lo cual finalmente resulta, a menudo, en patrones oscilatorios no homogéneos.

2.7. Sistema de reacción-difusión

Hay una variedad muy grande de fenómenos biológicos donde se ve la fuerte interacción, entre dos tipos o más de células, individuos y/o especies químicas dentro de un lugar o región determinada. Un ejemplo sobre esto, sería el crecimiento de poblaciones, (Peña Escobar, 2012, p.2) afirma, los sistemas de reacción-difusión son modelos matemáticos que describen cómo una o más sustancias distribuidas en el espacio cambian bajo la influencia de dos procesos:

- Difusión (movimiento local).
- Reacción (crecimiento, interacciones, cambios de estado).

Por difusión podemos citar un ejemplo claro, el agua con la tinta donde una gota de tinta se diluye conforme avanza el tiempo en un recipiente con agua.

Por reacción cuando dos o más sustancias se encuentran en un medio cualquiera, se puede producir una reacción entre las mismas caracterizada por procesos de consumo, destrucción o transformación.

Generalmente, los modelos matemáticos de los fenómenos antes mencionados utilizan sistemas de reacción-difusión donde la parte difusiva ($d\nabla^2u$) representa la dispersión; y la parte reactiva ($\gamma f(u, v)$) la interacción de las especies involucradas, ya sean individuos o células.

Un sistema de reacción-difusión puede ser estudiado observando la evolución de la distribución de los diferentes tipos especies en el dominio en que se encuentran, o teniendo en cuenta sus patrones espacio-temporales, estos patrones pueden presentar comportamientos estables o inestables dependiendo las características de cada sistema. Bajo ciertas condiciones, los sistemas químicos de reacción-difusión pueden generar espontáneamente patrones espaciales heterogéneos desde un estado estacionario uniforme en respuesta a pequeñas perturbaciones. (González, 2009a; Turing, 1952)

Las ecuaciones diferenciales de un sistema de reacción-difusión de dos sustancias u y v pueden ser escritas de forma adimensional como:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla(\tilde{a}u) = \nabla^2u + \gamma f(u, v), \quad (26)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \nabla(\tilde{a}v) = d\nabla^2v + \gamma g(u, v),$$

en el dominio $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^n$, donde f y g son las funciones que definen el término reactivo, ∇^2 es el laplaciano y $d = \frac{D_u}{D_v}$ es la relación de difusividades D_u y D_v , coeficientes de los que depende la velocidad de difusión de cada sustancia en el dominio. Por otra parte, \tilde{a} representa el campo de velocidad de flujo, que en dos dimensiones es definido por $\tilde{a} = \left[\frac{\partial x}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial t} \right]$ y γ es un parámetro de escala del sistema. (González, 2009a)

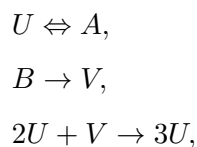
2.7.1. Adimensionalización

La adimensionalización es una técnica matemática que se emplea en las ecuaciones donde se ven involucradas variables con dimensión. Para llevar a cabo este proceso, se consideran valores característicos tanto de las variables dependientes como independientes, y se aplica un cambio de variable tal que todas las sustancias o cantidades involucradas sean relativas a dichos valores característicos.

Para este trabajo se busca adimensionar un sistema de ecuaciones diferenciales parciales; al hacerlo se obtendrá un sistema sin dimensiones y más sencillo de estudiar debido a que el número de parámetros disminuye.

Reacción de Schnakenberg

Schnakenberg, consideró un conjunto de dos especies en una reacción trimolecular que admite reacciones periódicas. Este modelo involucra 4 sustancias, A, B, U y V . El modelo consiste en: (Galeano et al., 2010; Charó, 2013; Chaidez Félix, 2010)



Lo que conduce a:

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

donde k_i con $i = (1, 2, 3, 4)$ son las velocidades de las reacciones. Las sustancias A y B son de concentración constante. Definiremos: $K_4a = k_1$, $K_1 = k_2$, $K_3 = k_3$ y $K_2b = k_4$. Además, introduciendo difusión a las cinéticas del modelo, nos queda:

$$\begin{aligned}u_t &= k_1 - k_2u + k_3u^2v + D_u\Delta^2u, \\v_t &= k_4 - k_3u^2v + D_v\Delta^2v,\end{aligned}$$

adimensionalizando nos queda:

$$\begin{cases} u_t = \Delta^2 u + \sqrt{\frac{k_3}{k_2}} k_1 \frac{L^2}{D_u} - k_2 \frac{L^2}{D_u} u + k_2 \frac{L^2}{D_u} u^2 v \\ v_t = \frac{D_v}{D_u} \Delta^2 v + \sqrt{\frac{k_3}{k_2}} k_4 \frac{L^2}{D_u} - k_2 \frac{L^2}{D_u} u^2 v. \end{cases}$$

Definiendo $\gamma = k_2 \frac{L^2}{D_u}$, $d = \frac{D_v}{D_u}$, $a = \sqrt{\frac{k_3}{k_2}} \frac{k_1}{k_2}$ y $b = \sqrt{\frac{k_3}{k_2}} \frac{k_4}{k_2}$ tenemos que el modelo de Schnakenberg en su forma adimensional es:

$$\begin{aligned} u_t &= \gamma(a - u + u^2 v) + \Delta^2 u, \\ v_t &= \gamma(b - u^2 v) + d \Delta^2 v. \end{aligned} \tag{27}$$

2.8. Patrones de Turing

Alan Turing estableció que, si los procesos de reacción química y la difusión molecular son homogeneizadores por separado, juntos tienen la posibilidad de generar patrones estacionarios combinándolos bajo circunstancias especiales.

“La morfogénesis (del griego morphê, forma, y génesis, creación) es el proceso por el cual se van desarrollando en un embrión los órganos diferenciados de un adulto a partir de estructuras indiferenciadas. Conjuntamente con el control del crecimiento celular y de la diferenciación celular, constituye uno de los aspectos fundamentales de la biología del desarrollo.” (Durán, 2012, p.6)

Según Turing, un patrón químico puede lograr formar un patrón biológico mediante los morfógenos, los cuales ayudan a las células a diferenciar un color de otro, ver (Figura 4). En un lenguaje químico, Turing representa la competencia entre la activación de un compuesto A y la inhibición de un compuesto B. Entonces, para que este proceso de lugar a patrones, el inhibidor debe difundirse más rápidamente que el activador, de otro modo, el inhibidor acabaría totalmente con el compuesto A en la región y no habría reacción.

Uno de los principales fenómenos dónde se aplica la teoría de formación de patrones es:



Figura 4: *Manchas en la piel de una jirafa. La formación de patrones en los mamíferos requiere diferenciación en las fases de desarrollo, entre las regiones que contienen células productoras de pigmentación y las que no. En las figuras se aprecian los dos tipos distintos de marcas en la piel. Murray atribuye la formación de los dos patrones a la diferencia de umbral de concentración de morfógeno dedicado a la actividad de los melanocitos. (Sánchez Colmenarejo, 2009, p.22)*

La melanogénesis

La morfogénesis es el proceso por el cual, en un embrión, se van desarrollando los órganos diferenciados de un adulto a partir de estructuras indiferenciadas; se describe el desarrollo de la estructura, el patrón o la forma en un organismo. Los procesos implícitos son bastante complejos y abarcan niveles subcelulares a multicelulares en el individuo.

Turing logró exponer un resultado poco conocido que predijo el potencial de difusión para conducir a “morfogénesis química”.

A lo largo de los años, se ha asociado la difusión con una influencia homogeneizadora que conduce a distribuciones espaciales uniformes. Pero, resulta sorprendente cuando se dice que la difusión puede tener un efecto opuesto, engendrando gradientes químicos y fomentando “patrones” químicos no uniformes. Esto último, es lo que en verdad predice la teoría.

(Edelstein-Keshet, 1988; Turing, 1952) propone tres elementos necesarios para la formación

de patrones químicos:

- I. Dos o más especies químicas.
- II. Diferentes tasas de difusión para los participantes.
- III. Interacciones químicas.

Turing sugirió que durante las etapas del desarrollo de un organismo, los componentes químicos generan un pre-patrón que luego se interpreta como una señal para la diferenciación celular. En su artículo, las sustancias que juegan un papel en la diferenciación celular han recibido el nombre de *morfógeno*. Si la concentración de estas sustancias sobrepasa cierto valor, la célula expresa un rasgo (como el color rojo), y si no sobrepasa ese valor, entonces puede expresar otro rasgo (se torna color azul). Para ello, es necesario establecer las condiciones en las que se puede establecer el pre-patrón químico mediante algún mecanismo. El mecanismo que él encontró fue del tipo **reacción-difusión**. Este proceso se puede evidenciar en la (Figura 5)

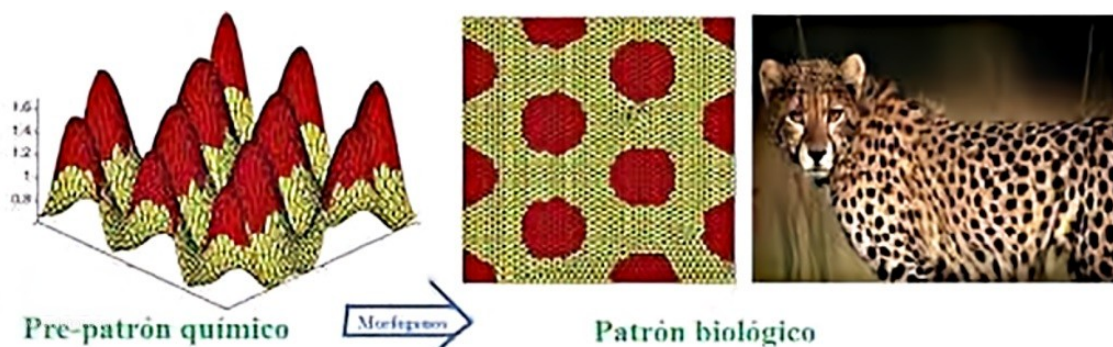


Figura 5: Según Turing un patrón químico puede generar un patrón biológico mediante los llamados morfógenos que ayudan a la célula a diferenciarse de un color o de otro. (Durán, 2012, p.7)

Uno de los mecanismos que cumplen las características propuestas por Turing es el llamado *activador-inhibidor*. Este sistema propone la interacción entre morfógenos llamados

activador e inhibidor. Un compuesto A lleva a cabo una reacción de autocatálisis generando más de ella misma. Pero al mismo tiempo, este compuesto A activa la formación de un compuesto B que inhibe la producción de A . Dependiendo la velocidad de difusión en el medio de ambas sustancias o compuestos, sus rangos de influencia pueden variar, ver (Figura 6).

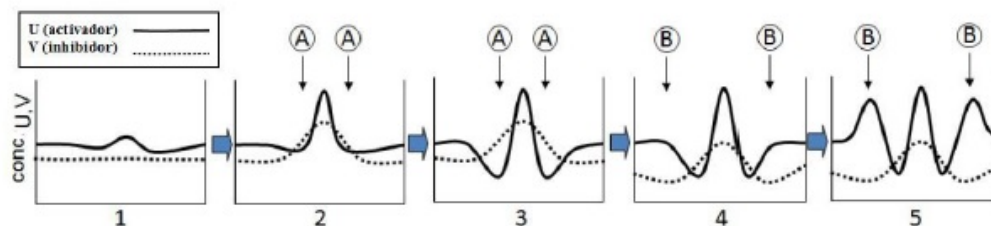


Figura 6: Mecanismo reacción-difusión de Turing. Si en el proceso competitivo entre activador e inhibidor el primero se difunde más lento, se da lugar a irregularidades locales que forman un patrón. (Durán, 2012, p.7)

(Murray, 1981, citado en Edelstein-Keshet, 1988) afirma que, la melanogénesis es la síntesis y deposición de gránulos de melanina, que son responsables de la pigmentación oscura de la piel y el pelaje de los mamíferos.

2.9. Estabilidad y condiciones para estados no homogéneos

En un sistema de reacción-difusión presenta *inestabilidad de Turing* si el punto fijo o crítico del sistema presenta estabilidad en ausencia del término difusivo, pero presenta inestabilidad debido a perturbaciones espaciales cuando se introduce el término difusivo; todo esto induce a la formación de patrones en el espacio. Esto aplica para un sistema de reacción-difusión de dos químicos u y v , (Vanegas, 2009).

Para encontrar estas condiciones necesarias para la formación de patrones en un sistema de reacción-difusión se necesita considerar condiciones de cero flujo en la frontera y una

condición inicial. La condición de cero flujo garantiza que el patrón espacial será formado únicamente por los químicos involucrados y no por agentes externos (Chaidez Félix, 2010; González, 2009a). El sistema ha considerar es:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma f(u, v) + \nabla^2 u, \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v,\end{aligned}\tag{28}$$

Las condiciones de contorno se tomaron como homogéneas de Neumann (de flujo nulo) sobre todo el contorno para lograr considerar únicamente el efecto de las reacciones en el interior del dominio:

$$\begin{aligned}n \cdot \nabla u &= 0, \\ n \cdot \nabla v &= 0,\end{aligned}\tag{29}$$

en $\partial\Omega(t)$. $\partial\Omega(t)$ representa la frontera del dominio $\Omega(t)$. n representa el vector normal unitario. Las condiciones iniciales se tomaron como concentraciones perturbadas alrededor del punto fijo (\tilde{x}, \tilde{y}) .

Para lograr encontrar *inestabilidad de Turing* primero deduciremos las condiciones para las cuales el sistema (28) presenta estabilidad en el punto fijo en ausencia del término difusivo. Después en presencia del término difusivo las que permitan inestabilidad dando lugar a la formación de patrones.

2.9.1. Estabilidad en ausencia de difusión

Consideremos el sistema (28) sin difusión:

$$\begin{aligned}u_t &= \gamma f(u, v), \\ v_t &= \gamma g(u, v),\end{aligned}\tag{30}$$

el sistema lineal asociado a (30) alrededor del punto fijo está dado por

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \gamma A \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \text{donde } A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{(\tilde{u}, \tilde{v})}. \quad (31)$$

Así, por el teorema de Hartman y Grobman tenemos que el punto fijo es estable en el sistema (30) si es estable en (31). Por lo tanto, el punto fijo (\tilde{u}, \tilde{v}) es estable si

$$\text{tr}A < 0, \quad \det A > 0, \quad (32)$$

donde $\text{tr}A = f_u + g_v$ y $\det A = f_u g_v - f_v g_u$

2.9.2. Inestabilidad en presencia de difusión

La difusión juega un papel importante dentro del sistema, ya que ésta permite la generación de patrones en el espacio al modificar la estabilidad del punto fijo estable. Para esto consideraremos pequeñas perturbaciones en el estado estable e introduciremos las siguientes matrices y vectores

$$w = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}, \quad (33)$$

donde D es la llamada matriz de difusión. Ahora, el sistema (27) junto con las condiciones de frontera (29) queda expresado como

$$\frac{\partial w}{\partial t} = Aw + D\nabla^2 w. \quad (34)$$

Para hallar la solución del sistema anterior también es necesario resolver el problema de valores propios k^2 denotado por la siguiente ecuación:

$$\nabla^2 W + k^2 W = 0, \quad (35)$$

La solución de este problema depende únicamente de la geometría del sistema. Comúnmente estas soluciones son funciones oscilatorias y k representa el modo de oscilación de la solución, por esto es llamado *número de onda*.

Luego, se puede proponer una solución para la ecuación (34) de la forma

$$\sum_{m,n} C_{mn} e^{\lambda_{mn} t} W_k(r), \quad (36)$$

donde C_{mn} son constantes; m, n pares de enteros y $W_k(r)$ son las soluciones del problema de valores propios (Murray, 2012)

$$W_k(r) = \sum_{m,n} A_{mn} \cos \frac{n\pi}{a} x \cos \frac{m\pi}{b} y,$$

donde A_{mn} son constantes.

Luego, considerando las condiciones de cero flujo en la frontera tenemos que para dos dimensiones la solución tiene la forma (Chaidez Félix, 2010; Murray, 2012.)

$$w(x, y, t) = \sum_{m,n} C_{mn} e^{\lambda_{mn} t} \cos \frac{n\pi}{a} x \cos \frac{m\pi}{b} y. \quad (37)$$

Ahora para hallar los valores de λ necesitamos usar (34), (35), para obtener una ecuación la cual al resolverla nos permitirá establecer los diferentes valores de λ

$$|A - k^2 D - \lambda I| = 0,$$

desarrollando esta ecuación

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1 + d) - (f_u + g_v)] + h(k^2) = 0, \quad (38)$$

donde: $h(k^2) = dk^4 - (df_u + g_v)k^2 + \det A,$

(Chaidez Félix, 2010; Murray, 2012.) afirman que la estabilidad del punto perturbado depende del signo de λ , si $Re(\lambda) > 0$ se tendrá inestabilidad, y estabilidad cuando sea menor que cero ($Re(\lambda) < 0$). Si tomamos $k = 0$, en la Ec. (38), entonces $h(0) = \det A$. Por lo tanto, estaríamos analizando un sistema dinámico. No una ecuación de reacción-difusión. Se tiene que recordar que se necesitan condiciones que cambien la estabilidad del punto fijo cuando se agrega el término difusivo, por ello además de respetar las condiciones (32) también debemos encontrar ciertas condiciones que permitan obtener inestabilidad en

presencia del término difusivo, es decir, se requiere que $Re(\lambda) > 0$ para algún $k \neq 0$.

La única manera de que $Re(\lambda) > 0$ es si $h(k^2) < 0$ en la Ec. (38) y esto solo puede suceder si $df_u + g_v > 0$. Dado que de (32), $f_u + g_v < 0$ significa que se tiene que $d \neq 0$, es decir, u y v deben tener diferentes coeficientes de difusión (Murray, 2012).

Ahora solo necesitamos hallar los valores de k^2 para los cuales $h(k^2) < 0$

$$h(k^2) = dk^4 - (df_u + g_v)k^2 + detA < 0, \quad (39)$$

al igualar $h(k^2) = 0$ obtenemos una función cuadrática, y la existencia de dos raíces reales nos asegura la Ec. (39). Así solo es necesario que el discriminante $(df_u + g_v)^2 - 4d|A| > 0$.

$$h(k^2) = 0 \Rightarrow |A| = \frac{(df_u + g_v)^2}{4d_c},$$

el valor d_c es el valor de d para el cual se cumple la igualdad. Este valor se halla al resolver

$$d_c^2 f_u^2 + (2f_u g_v - 4|A|)d_c + g_v^2 = 0, \quad (40)$$

(Chaidez Félix, 2010; Murray, 2012; Durán, 2012) aseguran que, para que $h(k^2)$ sea negativo para algun valor de k , es necesario que el mínimo de la función h sea negativo. La función $h(k^2)$ en (38) es una función cuadrática. Su mínimo se encuentra en k_{min}^2 y sus valores son negativos en el rango que está entre las raíces de $h(k^2)$:

$$\frac{\gamma}{2d}(df_u + g_v) - [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}} < k^2 < \frac{\gamma}{2d}(df_u + g_v) + [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}},$$

donde:

$$\frac{\gamma}{2d}(df_u + g_v) - [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}} = k_{min}^2,$$

$$\frac{\gamma}{2d}(df_u + g_v) + [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}} = k_{max}^2.$$

Así, la desigualdad queda de la siguiente manera:

$$k_{min}^2 < k^2 < k_{max}^2. \quad (41)$$

Por lo tanto, buscamos estabilidad en el punto fijo sin considerar difusión e inestabilidad en éste con difusión, para lograr la inestabilidad de Turing. Así, las condiciones necesarias y suficientes para que surja este suceso y que dan lugar al *espacio de Turing* son

$$f_u + g_v < 0,$$

$$f_u g_v - f_v g_u > 0,$$

(42)

$$df_u + g_v > 0,$$

$$(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0.$$

3. Metodología

La realización del trabajo planteado se soportó principalmente en la creación de un algoritmo computacional que logró generar aproximaciones de soluciones de un modelo matemático aplicado a la reproducción de patrones biológicos. Consideramos el tema de sistemas dinámicos, en particular los relacionados con puntos de equilibrio y estabilidad, porque estos se utilizaron como parte del problema a resolver.

La investigación la tomamos principalmente en tres fases:

La primera fase fue la recopilación de bibliografía; la segunda fase, la formulación del algoritmo computacional para la aproximación de soluciones del modelo de la melanogénesis; y la tercera fase, la validación de las soluciones obtenidas en la implementación del algoritmo al modelo planteado.

También cabe resaltar que la investigación fue de tipo cuantitativa debido a que se realizó un análisis matemático de los diferentes datos recopilados para lograr describir y explicar un fenómeno biológico mediante estudios y simulaciones numéricas.

Fase 1: Recopilación de bibliografía. En esta fase realizamos una consulta bibliográfica sobre los fenómenos, patrones de Turing, ecuaciones diferenciales parciales, sistemas de reacción-difusión, inestabilidad de sistemas dinámicos, método de diferencias finitas. Posteriormente estudiamos el modelo de la melanogénesis planteado en la ecuación (27)

Fase 2: Implementación del algoritmo en MATLAB. Se propuso la construcción de un código en MATLAB (R2020b) que nos permitió generar las aproximaciones de las soluciones al modelo de la melanogénesis planteado en la ecuación (27) y que logró la reproducción de patrones biológicos.

Fase 3: Validación de los métodos. En esta fase, después de que realizamos toda la consulta bibliográfica y la verificación de las soluciones numéricas obtenidas del modelo de

la melanogénesis, procedimos a validar este modelo estudiando los datos arrojados mediante la simulación.

- Análisis de error numérico: Estudio de convergencia
- Comparación de resultados con estudios previos

4. Resultados

Como vimos en el capítulo de los fundamentos teóricos, el sistema de reacción-difusión del modelo de Schnakenberg está expresado por:

$$\underbrace{u_t}_1 = \gamma(\underbrace{a}_2 - \underbrace{u}_3 + \underbrace{u^2v}_4) + \underbrace{\nabla^2 u}_5, \quad (43a)$$

$$\underbrace{v_t}_1 = \gamma(\underbrace{b}_2 - \underbrace{u^2v}_4) + \underbrace{d\nabla^2 v}_5, \quad (43b)$$

donde las constantes a, b, d y γ son parámetros positivos, con a y b valores adimensionales de producción, γ la constante adimensional y d la relación entre los coeficientes de difusión. En la ecuación (45) el término 1 representa flujo, 2 representa producción, 3 representa consumo, 4 representa catálisis lineal y 5 difusión. La reacción es tal, que en la ecuación (43a) el término 4 representa producción de u en presencia de v , mientras que en la ecuación (43b) el mismo término representa el consumo de v en la presencia de u . (González, 2009b; Vanegas et al., 2009a; Vanegas Acosta et al., 2009b)

4.1. Discretización del modelo

El modelo de Schnakenberg está dado por

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

para discretizar este modelo utilizaremos un esquema de diferencias progresivas para la derivada temporal y un esquema de diferencias centradas para el operador Laplaciano.

Para la primera parte del sistema

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} = \gamma(a - u_{i,j} + u_{i,j}^2 v_{i,j}) + \frac{u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2},$$

resolviendo para $u_{i,j}^{n+1}$, se tiene

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n + \gamma\Delta t(a - u_{i,j} + u_{i,j}^2 v_{i,j}) + r_1(u_{i+1,j}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i-1,j}^n) + r_2(u_{i,j+1}^n - 2u_{i,j}^n + u_{i,j-1}^n),$$

con $r_1 = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, $r_2 = \frac{\Delta t}{(\Delta y)^2}$.

De manera análoga para la segunda parte

$$v_{i,j}^{n+1} = v_{i,j}^n + \gamma \Delta t (b - u_{i,j}^2 v_{i,j}) + p_1 (v_{i+1,j}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i-1,j}^n) + p_2 (v_{i,j+1}^n - 2v_{i,j}^n + v_{i,j-1}^n),$$

con $p_1 = \frac{d\Delta t}{(\Delta x)^2}$, $p_2 = \frac{d\Delta t}{(\Delta y)^2}$ y d es el coeficiente de difusión.

4.2. Estabilidad en ausencia de difusión

Para lograr generar la inestabilidad de Turing, necesitamos encontrar estabilidad en ausencia de difusión e inestabilidad debido a perturbaciones en presencia de está.

Primero encontraremos los puntos fijos del sistema, más específicamente de la parte reactiva, y la estabilidad de éstos.

El sistema a considerar es:

$$\frac{du}{dt} = a - u + u^2v = f(u, v), \tag{44}$$

$$\frac{dv}{dt} = b - u^2v = g(u, v),$$

con a y b constantes positivas.

Luego, para encontrar los puntos fijos del sistema es necesario igualar a cero y despejar

$$f(u, v) = 0 \Rightarrow a - u + u^2v = 0,$$

$$g(u, v) = 0 \Rightarrow b - u^2v = 0.$$

Así, el punto fijo (u_0, v_0) está dado por

$$(u_0, v_0) = \left(a + b, \frac{b}{(a + b)^2} \right),$$

ahora, necesitamos analizar si este punto fijo cumple las condiciones vistas en la sección

3.9; para ello evaluamos el Jacobiano.

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

el punto fijo es estable si los valores propios de la matriz A tienen parte real negativa. Estos valores se determinan al hallar las raíces de la ecuación siguiente

$$\lambda^2 - trA + detA = 0,$$

es decir, si se cumplen las desigualdades (32) el punto fijo es estable.

Reemplazando el punto fijo en la matriz Jacobiana tenemos que

$$\begin{aligned} f_u &= \frac{b-a}{a+b}, & f_v &= (a+b)^2, \\ g_u &= \frac{-2b}{a+b}, & g_v &= -(a+b)^2, \end{aligned} \quad (45)$$

ahora, evaluando en las condiciones (32)

$$trA = f_u + g_v < 0 \quad \Rightarrow \quad b - a < (a + b)^3, \quad (46)$$

$$detA = f_u g_v - f_v g_u > 0 \quad \Rightarrow \quad (a + b)^2 > 0.$$

Así, para asegurar la estabilidad los parámetros deben cumplir las condiciones anteriores.

Al utilizar $a = 0,56$ y $b = 0,5$ como parámetros iniciales, se puede verificar que cumplen las desigualdades (32). Es evidente que $detA$ siempre será mayor que cero para valores positivos de a y b .

$$\begin{aligned} trA &= 0,5 - 0,56 < (0,56 + 0,5)^3 \\ &= -0,06 < 1,1910. \end{aligned}$$

En la (Figura 7) se muestra el punto crítico definido por la intersección de las ceroclinas utilizando los parámetros $a = 0,56$ y $b = 0,5$. Y en la (Figura 8), se muestra el campo

vectorial del sistema 44 con diferentes condiciones iniciales.

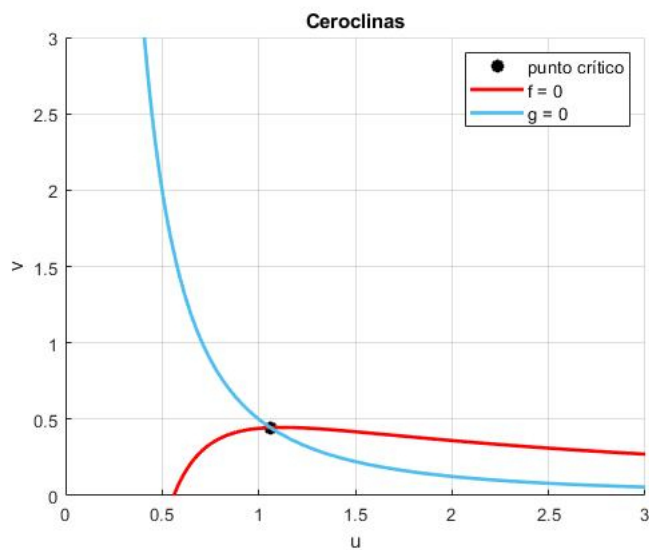


Figura 7: Punto crítico del sistema (44) definido por la intersección de las ceroclinas para valores de $a = 0,56$ y $b = 0,5$.

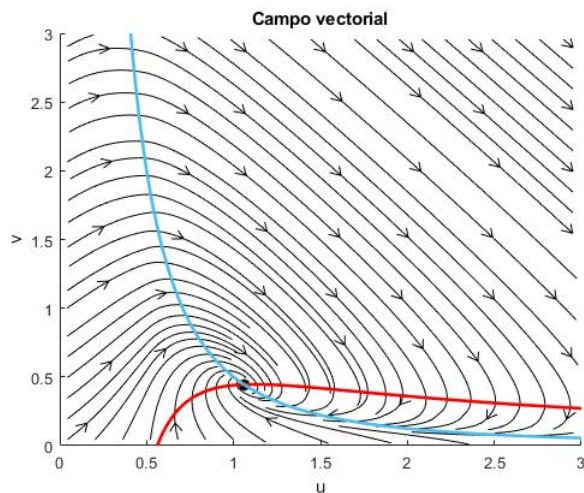


Figura 8: *Campo vectorial del sistema (44) con distintas condiciones iniciales y donde las soluciones convergen al punto crítico. Se utilizaron los mismos valores para a y b .*

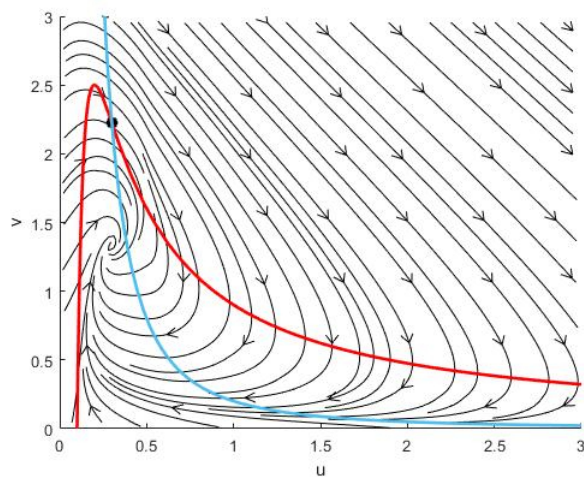


Figura 9: *Campo vectorial del sistema (44) donde las diferentes soluciones del sistema se aproximan al punto crítico pero no convergen a él. Se utilizaron valores de $a=0,1$ y $b=0,2$. En este caso, no ocurre la convergencia debido a que a la hora de reemplazar los valores de a y b en las condiciones (32): $\text{tr}A < 0$ y $\text{det}A > 0$; no cumplen con estas condiciones.*

4.3. Inestabilidad en presencia de difusión

El modelo de Schnakenberg de reacción-difusión en su forma adimensional es

$$\begin{aligned}u_t &= \gamma(a - u + u^2v) + \nabla^2 u, \\v_t &= \gamma(b - u^2v) + d\nabla^2 v.\end{aligned}$$

Necesitamos aplicar las condiciones (42) al sistema anterior para lograr encontrar la formación de patrones espacio-temporales. Como vimos en la sección anterior, el sistema tiene como punto crítico $(\tilde{u}, \tilde{v}) = \left(a + b, \frac{b}{(a + b)^2}\right)$. Ahora, debemos escoger a y b de tal manera que el punto crítico cumpla con las condiciones de estabilidad en ausencia de difusión. Para ello y con el fin de realizar algunas simulaciones, usaremos valores para a y b de 0,2 y 0,5 respectivamente. Se puede verificar que cumplen con las condiciones (32) y por tanto el punto crítico es estable, como se muestra en la (Figura 10). Los valores necesarios para los cálculos son

$$f_u(\tilde{u}, \tilde{v}) = 0,428,$$

$$f_v(\tilde{u}, \tilde{v}) = 0,49,$$

$$g_u(\tilde{u}, \tilde{v}) = -1,428,$$

$$g_v(\tilde{u}, \tilde{v}) = -0,49.$$

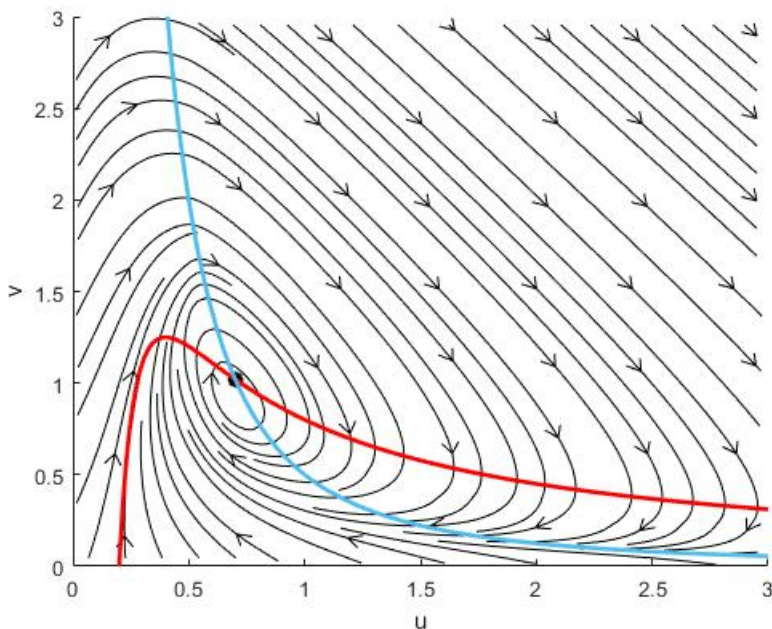


Figura 10: Campo vectorial para valores de $a = 0,2$ y $b = 0,5$ donde las soluciones convergen al punto crítico. El punto crítico es estable.

Ahora, necesitamos encontrar los valores de k y d para los cuales surgirán los patrones. Para el valor de d usaremos la ecuación (40)

$$0,183d_c^2 - 2,379d_c + 0,240 = 0, \quad (47)$$

al resolver la anterior ecuación, obtenemos las raíces $d_{c1} = 0,1016$ y $d_{c2} = 12,8983$.

Como estamos trabajando en dos dimensiones, necesitamos encontrar valores m y n tal que $k^2 = \pi^2(n^2 + m^2)$ con $m, n \in \mathbb{Z}$.

Así, tomando $d = 14$ únicamente resta buscar los valores m y n que permitan la formación de patrones. Calculando k_{min}^2 y k_{max}^2 de la ecuación (41)

$$k_{min}^2 = 0,136\gamma,$$

$$k_{max}^2 = 0,256\gamma,$$

luego, tenemos que $k_{min}^2 < k^2 < k_{max}^2$, donde $k^2 = \pi^2(n^2 + m^2)$ con $m, n \in \mathbb{Z}$. Para $\gamma = 200$

$$2,756 < n^2 + m^2 < 5,228,$$

de donde podemos encontrar ciertos puntos satisfacen la desigualdad, estos puntos son

$$(n, m) = \{(-2, 0), (-2, 1), (-2, -1), (-1, -2), (-1, 2), (0, -2), (0, 2), (1, -2), (1, 2), (2, -1), (2, 0), (2, 1)\}.$$

Estos valores satisfacen la desigualdad cuando $\gamma = 200$. Si utilizamos distintos valores de γ , se obtienen distintos valores para n y m . Si ahora hacemos que k^2 solo dependa de n o m , teniendo en cuenta que debe satisfacer (41), se obtendrán otro tipo de patrones. Para ello es necesario que $n = 0$ o $m = 0$.

Cuando tenemos que $n = 0$ la simulación se verá en una sola dirección, en este caso en dirección y ; y cuando $m = 0$ la simulación ocurre en dirección x . En las siguientes simulaciones para ilustrar la concentración de cada químico se utilizaron diferentes colores, el color rojo muestra que existe máxima concentración, mientras que el color azul concentración casi nula.

El código en MATLAB (R2020b) utilizado para generar las siguientes simulaciones se encuentra en el apéndice C.

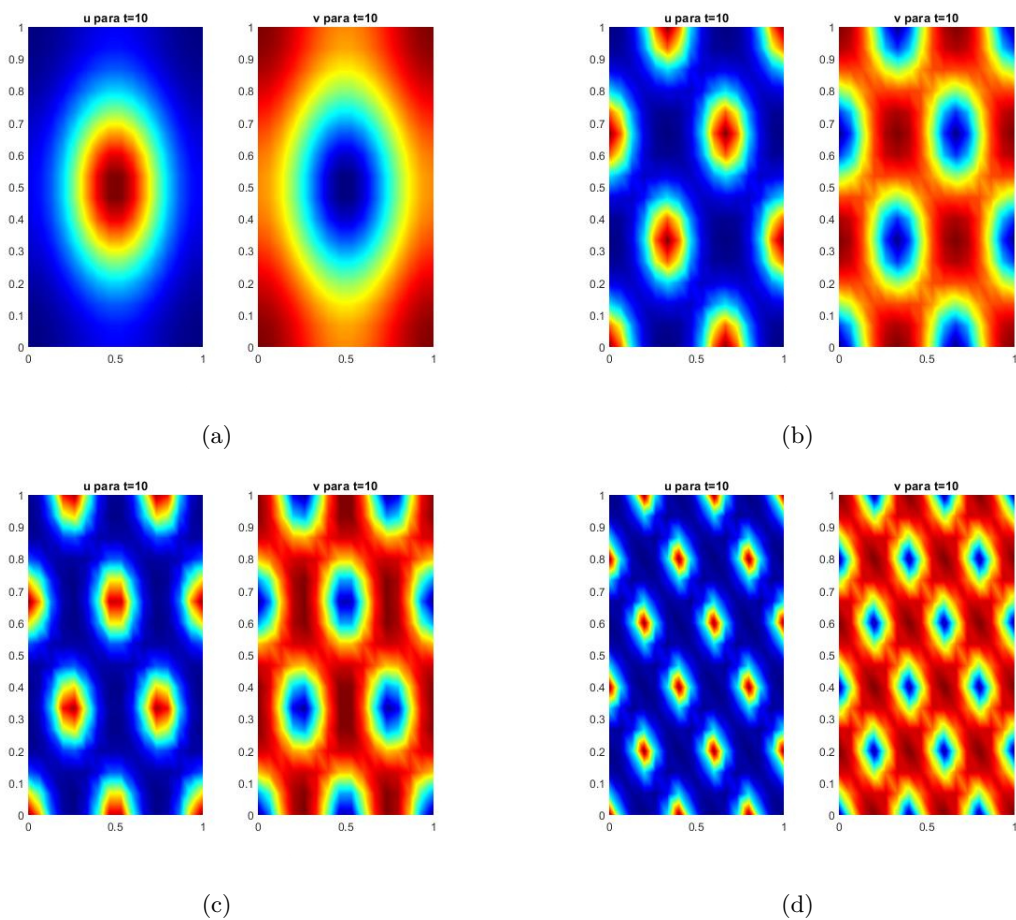


Figura 11: *Diferentes simulaciones del modelo con difusión de Schnakenberg en dos dimensiones, para valores de $a = 0,2$, $b = 0,5$ y $d = 14$ variando el valor de γ . En (a) se utilizó $\gamma = 200$, $n = 1$ y $m = 2$; en (b) $\gamma = 1000$, $n = 3$ y $m = 3$; en (c) $\gamma = 1200$, $n = 4$ y $m = 3$; en (d) $\gamma = 2000$, $n = 5$ y $m = 5$.*

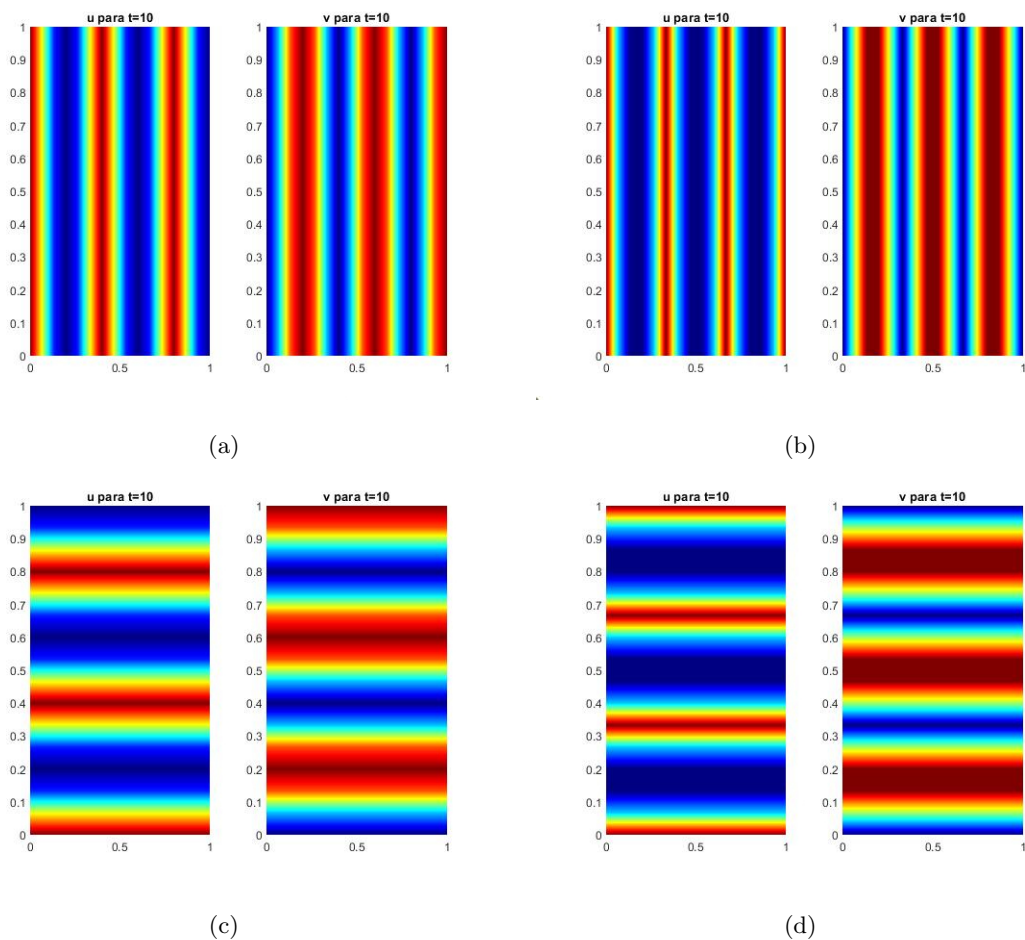


Figura 12: Diferentes simulaciones del modelo con difusión de Schnakenberg en dos dimensiones, para valores de $a = 0,2$, $b = 0,5$ y $d = 14$ variando el valor de γ . En (a) se utilizó $\gamma = 1200$, $n = 5$ y $m = 0$; en (b) $\gamma = 2000$, $n = 6$ y $m = 0$; en (c) $\gamma = 1200$, $n = 0$ y $m = 5$; en (d) $\gamma = 2000$, $n = 0$ y $m = 6$.

5. Conclusiones

- En este trabajo se estudió el mecanismo de Turing propuesto por Alan Turing en su artículo en 1952 y se aplicó a un sistema de reacción-difusión muy conocido: el modelo de Schnakenberg. En primera instancia se buscaron las diferentes condiciones para cumplir la estabilidad del punto crítico cuando en el sistema no se encuentra el término difusivo; después al sistema se le integró el término difusivo y se buscaron las condiciones necesarias para que el proceso de difusión (considerado un proceso estabilizante) desestabilizara el sistema dando paso así a la generación de patrones espacio-temporales. Para el modelo estudiado se encontró el *Espacio de Turing*, que consta del conjunto de puntos que satisfacen estabilidad en el punto crítico e inestabilidad en el sistema completo, es decir, satisface las condiciones (42).
- En las simulaciones se logra observar los diferentes patrones espacio-temporales en dos dimensiones para el modelo de Schnakenberg donde se pueden apreciar las concentraciones máximas y mínimas que alcanzaban los químicos involucrados en el proceso. En las simulaciones se puede ver dos tipos de patrones: manchas circulares y algunas rectas horizontales y verticales, esto se debe al tipo de perturbación utilizada. También se estudió el papel que juega γ en el sistema de reacción-difusión observando como afecta en la simulación el aumento o disminución de este valor. Para los patrones circulares podemos observar que a medida que aumenta el valor de γ obtenemos diferentes valores para m y n , los círculos pasan de verse grandes a más pequeños, además de aumentar la cantidad de estos. De manera análoga sucede para los patrones de franjas horizontales y verticales. El papel de γ es muy importante ya que si no se escogen valores adecuados de m y n para γ la simulación puede verse erróneamente o estabilizarse; si ocurre esto último no se podrán observar patrones en la simulación solo una imagen de color sólido.
- Para lograr la formación de patrones es necesario encontrar las condiciones para

cumplir la estabilidad del punto crítico en ausencia de difusión; después al considerar el término difusivo, es decir, el sistema de reacción-difusión completo, encontrar las condiciones necesarias para que el proceso difusivo desestabilice el sistema. Estas condiciones se pueden apreciar en las desigualdades (32) y (42) respectivamente. Estas condiciones también conforman el llamado: espacio de Turing. El estado de equilibrio se determina únicamente de la parte reactiva del sistema y también de la rapidez de la reacción; además, la incorporación de la parte difusiva en la reacción es la que ocasiona formas espaciales que no se desvanecen con el tiempo. Además, γ juega un papel muy importante en la simulación ya que se utiliza como un valor de reescalamiento del sistema, además de las consecuencias que conlleva el aumento o disminución del valor de γ .

- En las simulaciones no se consideraron otro tipo de geometrías realistas, solo simulaciones en un dominio de forma cuadrada. Aunque es posible extenderse a otro tipo de dominios o geometrías realistas y otro tipo de dominios como los dominios móviles así como se muestra en (Charó, 2013). Pero este tipo de trabajo se deja para un futuro.
- En general, el mecanismo de Turing estudiado en este trabajo no asegura que las manchas que se ven en algunos animales surjan o se lleven a cabo de esta manera debido a la alta complejidad de la estructura genética de los seres vivos. Según Turing, el patrón biológico puede aparecer a consecuencia de un pre-patrón químico. Los resultados obtenidos se pueden comparar con los patrones encontrados en algunos animales como lo podemos apreciar en la (Figura 13).

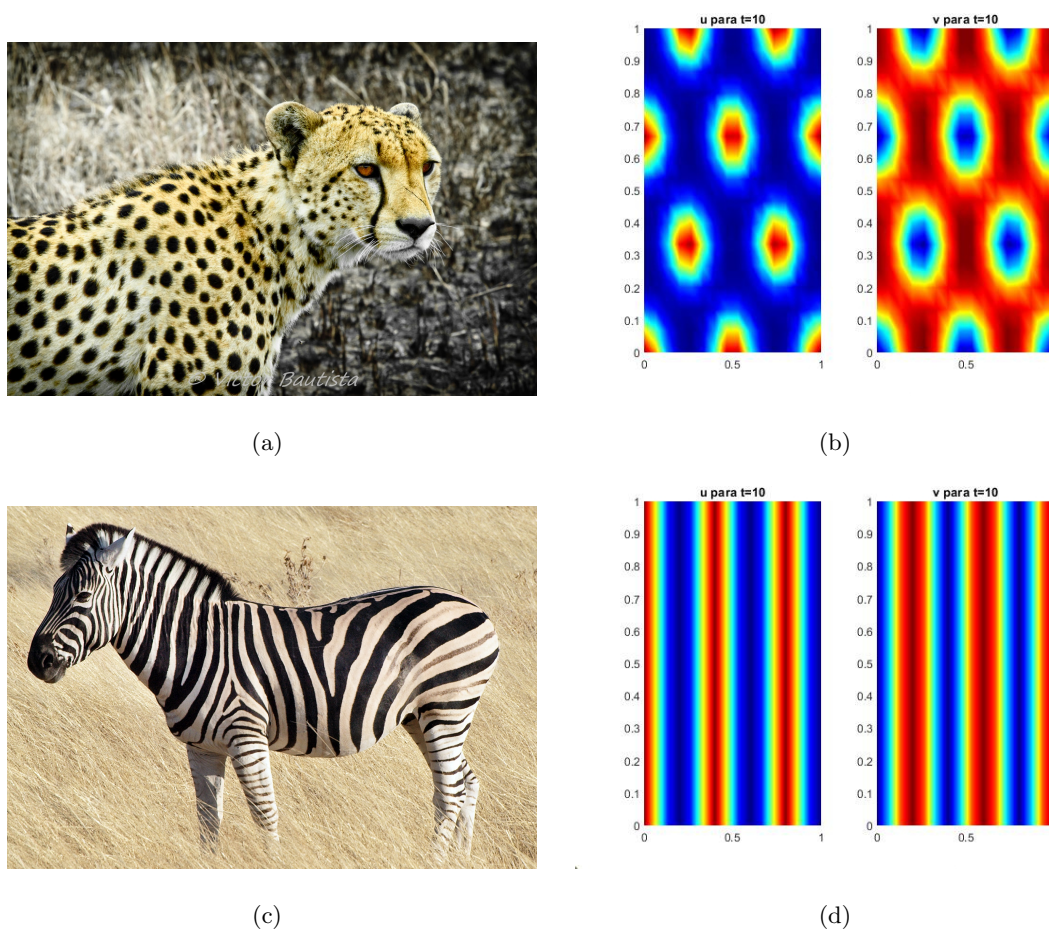


Figura 13: En (a) se aprecia la imagen de un cheetah o guepardo, en (c) la imagen de una zebra. En (b) y (d) se muestran aplicaciones del mecanismo de Turing en un sistema de reacción-difusión.

- Debido a la complejidad de las ecuaciones de reacción-difusión, es necesario resolverlas mediante métodos numéricos. Los métodos más comunes para lograr resolver este tipo de ecuaciones son: el método de diferencias finitas y el de elementos finitos. En este trabajo se confirma que el método de diferencias finitas es eficaz para resolver problemas unidimensionales y bidimensionales de este tipo de ecuaciones.
- Desde un punto de vista biológico, las simulaciones vistas en las (Figuras 11) y (12) se pueden interpretar cómo: las zonas de color rojo dónde la concentración es máxima quiere decir que, es una zona en la cual la concentración de proteínas y/o melanina es mucha y ayuda a tornar la piel de cierto color. Mientras que las zonas azules nos muestra una zona donde las concentraciones de proteínas son pocas, casi nulas. En pocas palabras, vemos que en ciertas zonas la melanina o proteínas tienden a acumularse más que en otros lugares.
- En la (Figura 14) se puede apreciar una comparación entre la simulación realizada en este trabajo y la simulación realizada por Chaidez Félix en su trabajo de grado. Podemos apreciar gran similitud entre ambas simulaciones, la principal diferencia radica en las zonas donde tiende a acumularse más concentración de melanina y/o proteínas.

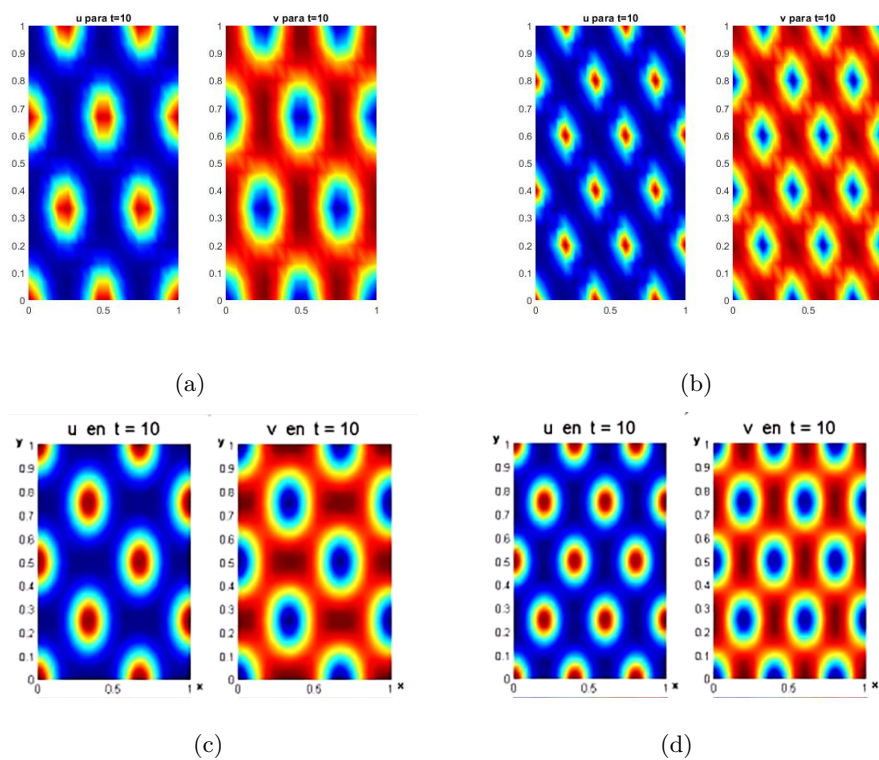


Figura 14: En (a) y (b) se aprecia la simulación realizada en este trabajo para valores de $a = 0,2$, $b = 0,5$, $d = 14$, $\gamma = 1200$ y 2000 , $n = 4$ y $m = 3$, $n = 4$ y $m = 5$ respectivamente. En (c) y (d) se observa la simulación realizada por (Chaidez Félix, 2010) para los mismos valores de a , b , d , γ , n y m respectivamente.

Referencias

- [1] BARRIO, R. A. (2010). Aplicaciones del modelo BVAM a sistemas complejos. *Revista digital universitaria*, vol. 11, no. 6, pp. 1-17. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <http://www.revista.unam.mx/vol.11/num6/art55/art55.pdf>
- [2] BENTIL, D.E., MURRAY, J.D. (1992). A perturbation analysis of a mechanical model for stable spatial patterning in embryology. *J Nonlinear Sci* vol. 2, pp. 453-480. Recuperado el 10 de septiembre del 2021 de: <https://doi.org/10.1007/BF01209529>
- [3] BUTLER, T., GOLDENFELD, N. (2011). Fluctuation-driven Turing patterns. *Phys. Rev.*, vol. 84, no. 1, pp. 011112. Recuperado el 12 de julio del 2021 de: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.84.011112>
- [4] CHAIDEZ FÉLIX, M. J. (2010). *Formación de patrones mediante el mecanismo de Turing* [Tesis de licenciatura, Universidad de Sonora]. Repositorio UNISON. <http://www.repositorioinstitucional.uson.mx/handle/unison/1103>
- [5] CHARÓ, G. D. (2013). *Simulación de patrones de Turing por elementos finitos* [Tesis de licenciatura. Universidad de Buenos Aires]. Recuperado el 26 de enero del 2021 de: http://cms.dm.uba.ar/academico/carreras/licenciatura/tesis/2013/Gisela_Charo.pdf
- [6] DEUTSCH, A. & DORMANN, S. (2017). Mathematical Modeling of Biological Pattern Formation. *Cellular Automaton Modeling of Biological Pattern Formation*. Second Edition. Boston. Birkhäuser, cap. 3, pp. 49-61. Recuperado el 12 de junio del 2020 de <https://doi.org/10.1007/978-1-4899-7980-3>
- [7] DURÁN, A. L. (2012). *Patrones de Turing en sistemas Biológicos*. Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, México. Recuperado el 2 de abril del 2020 de: <http://mat.izt.uam.mx/mcmai/documentos/tesis/Gen.10-O/Ledesma-DA-Tesis.pdf>

- [8] EDELSTEIN-KESHET, L.(1988).*Mathematical Models in Biology*. New York, NY. Recuperado el 28 de marzo del 2020.
- [9] ESPINOZA, C. & NIÑO, Y. (2001). Métodos de diferencias finitas. Recuperado de: <http://materias.fi.uba.ar/7538/material/Otros/Espinoza&Ni%F1oMetodo%20de%20Diferencias%20Finitas.pdf>
- [10] GALEANO, C. H., GARZÓN, D. A., & MANTILLA, J. M. (2010). Formación de patrones de turing para sistemas de reacción-convección-difusión en dominios fijos sometidos a campos de velocidad toroidal.”*Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, no. 53 pp. 75-87. Recuperado el 13 de mayo del 2020 de: <https://revistas.udea.edu.co/index.php/ingenieria/article/view/14735>
- [11] GARZA, G. L. & MARTÍNEZ ORTIZ, F. H. (2013). *Ecuaciones Diferenciales Parciales*. Primera edición. México. Recuperado el 1 de abril del 2020 de: http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/hect/Ecuaciones_en_Derivadas_Parciales/libro_Gabrile.pdf
- [12] GIORDANO, C. M. (2016). *Ecuaciones diferenciales parciales*. Argentina: Editorial de la Universidad de la Plata. Recuperado el 1 de abril del 2020 de: <https://libros.unlp.edu.ar/index.php/unlp/catalog/book/714>
- [13] GONZÁLEZ, A. L., VANEGAS, C. J., & GARZÓN, A. D. (2009a). Formación de patrones en sistemas de reacción-difusión en dominios crecientes. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y diseño de ingeniería*, vol. 25, no. 2 pp. 145-161. Recuperado el 1 abril del 2020 de: <https://upcommons.upc.edu/bitstream/handle/2099/11235/RR252D.pdf>
- [14] GONZÁLEZ, L. A., VANEGAS, J. C. & GARZÓN, D. A. (2009b). Solución numérica de modelos biológicos de reacción difusión en dominios fijos mediante el método de los elementos finitos. *Revista Facul-*

- tad de Ingenieria*, no. 48, pp. 65-75. Recuperado el 13 de junio del 2020 de: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-62302009000200007
- [15] GONZALO, E. G. (2013). Introducción al análisis de sistemas dinámicos. Chile: Universidad católica de Chile. Recuperado el 26 de marzo del 2020 de: <https://dokumen.pub/qdownload/introduccion-al-analisis-de-sistemas-dinamicos-segundanbsped-9789561413313.html>
- [16] KRAUSE, A.L., KLIKA, V., MAINI, P.K., & ET AL. (2021). Isolating Patterns in Open Reaction–Diffusion Systems. *Bull Math Biol* vol. 83, no. 82. Recuperado el 12 de julio del 2021 de: <https://doi.org/10.1007/s11538-021-00913-4>
- [17] MAINI, P. K. (2004). Using mathematical models to help understand biological pattern formation. *Comptes Rendus - Biologies*, vol. 327, no. 3, pp. 225–234. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <https://doi.org/10.1016/j.crv.2003.05.006>
- [18] MENDOZA BERNAL, O. (2016). *Resolución de Ecuaciones Diferenciales Parciales Mediante el Método de Diferencias Finitas y su Paralelización* [Tesis de licenciatura, Universidad Nacional Autónoma de México]. Repositorio institucional de la UNAM. https://repositorio.unam.mx/contenidos/resolucion-de-ecuaciones-diferenciales-parciales-mediante-el-metodo-de-diferencias-finitas-y-su-paralelizacion-183380?c=B11g0N&d=false&q=*&i=11&v=1&t=search_0&as=2
- [19] MURRAY, J.D. (1981). A Pre-pattern formation mechanism for animal coat markings. *Journal of theoretical biology*. Vol. 8, pp. 161-199. Recuperado el 5 de octubre del 2021 de: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/0022519381903349>
- [20] MURRAY, J.D. (2012). After Turing: Mathematical Modelling in the Biomedical and Social Sciences. *Springer, Berlin, Heidelberg*, vol. 7318, pp. 517-527. Recuperado el 12 de julio del 2021 de: https://dl.acm.org/doi/10.1007/978-3-642-30870-3_52

- [21] MURRAY, J.D. (1993). *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Third Edition. California: Springer-Verlag. Recuperado el 13 de junio del 2020 de: <http://poleon.if.ufrgs.br/pub/listas-sistdin/MurrayII.pdf>
- [22] Modelos matemáticos en biología. (2009). Modelos matemáticos. Universidad de Jaén. *Modelos matemáticos en biología*. pp. 1-12. Recuperado el 3 de marzo del 2022 de: https://matema.ujaen.es/jnavas/web_modelos/pdf_mmb08_09/introduccion.pdf
- [23] NAGORCKA, B. N., MOONEY, J. R. (1992). From stripes to spots: Prepatterns which can be produced in the skin by a reaction-diffusion system. *Mathematical Medicine and Biology: A Journal of the IMA*, Vol. 9, no. 4, pp. 249–267. Recuperado el 12 de julio del 2021 de: <https://doi.org/10.1093/imammb/9.4.249>
- [24] PEÑA ESCOBAR, P. R. (2012). Ecuaciones de Reacción-Difusión. *Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.* Recuperado el 1 de abril del 2020 de: https://jaerazcuammx.files.wordpress.com/2013/01/penia_rosa_proyecto_final.pdf
- [25] PEÑA PELLICER, B. (2002). *Inestabilidades de Turing en sistemas de reacción-difusión*. Universidad de Navarra. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <https://www.unav.edu/documents/14434042/26089409/pena-begona-tesis.pdf>
- [26] ROCA ARROYO, D.C., VALBUENA DUARTE, S. (2014). Simulación numérica por MDF para la solución de la ecuación diferencial parcial que modela el flujo de contaminantes de un acuífero. *Revista matemática de la universidad del Atlántico*, vol. 1, no. 1, pp. 40-51. Recuperado el 13 de julio del 2021 de: <http://investigaciones.uniatlantico.edu.co/revistas/index.php/MATUA/article/view/1037>
- [27] SÁNCHEZ COLMENAREJO, J. A. (2009). Formación de patrones biológicos: sistemas de Reacción-Difusión. pp. 19-23. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: https://www2.coitt.es/res/revistas/08a_Rep_Patrones_MN3.pdf

- [28] LOAIZA RAMÍREZ, M. (2006). Sistemas dinámicos. *Diseño y simulación de un criptosistema caótico para comunicaciones seguras*. [Tesis de licenciatura]. Universidad de las Américas Puebla. http://catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lem/loaiza_r_m/
- [29] SUN, G.-Q., ZHANG, G., JIN, Z., & LI, L. (2009). Predator cannibalism can give rise to regular spatial pattern in a predator-prey system. *Nonlinear Dynamics*, vol. 58, no. 1-2, pp. 75-84. Recuperado el 12 de julio del 2021 de: [10.1007/s11071-008-9462-z](https://doi.org/10.1007/s11071-008-9462-z).
- [30] TURING, A. M. (1952). The chemical basis of morphogenesis. Pp. 37-72. Recuperado el 5 de abril del 2021 de: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF02459572>
- [31] VANEGAS, J., LANDINEZ N., & GARZÓN, D. (2009a). ANALYSIS OF TURING INSTABILITY IN BIOLOGICAL MODELS. *Dyna*, vol. 76, no. 158, pp. 123-134. Recuperado el 13 de mayo del 2020 de: http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0012-73532009000200012
- [32] VANEGAS ACOSTA, J., LANDINEZ PARRA, N., & GARZÓN-ALVARADO, D. (2009b). Implementación de modelos biológicos de reacción-difusión mediante el método de los elementos finitos. *Revista Cubana de Investigaciones Biomédicas*, 28(4) Recuperado en 29 de mayo de 2021, de http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0864-03002009000400005&lng=es&tlng=es
- [33] WOLPERT, L. (2008). *The triumph of Embryo*. Dover Pub. Inc.
- [34] ZADUNAISKY, P. E. (2009). *Sistemas Dinámicos, teorías y métodos numéricos computacionales*. Buneos Aires: FCEyN. Recuperado el 28 de marzo del 2020 de: <http://cms.dm.uba.ar/depto/public/fascB5>
- [35] ZILL, D.G., WRIGHT, W.S. (2015). Sistemas autónomos planos. *Ecuaciones diferenciales con problemas con valores en la frontera*. Octava edición. pp. 376-401. Recupe-

rado el 15 de abril del 2020.

- [36] ZHANG, C., KE, A., & ZHENG, B. (2019). Patterns of interaction of coupled reaction–diffusion systems of the FitzHugh–Nagumo type. *Nonlinear Dynamics*, vol. 97, no. 2, pp. 1451–1476. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <https://doi.org/10.1007/s11071-019-05065-8>
- [37] ZHAO, H., HUANG, X., & ZHANG, X. (2014). Turing instability and pattern formation of neural networks with reaction–diffusion terms. *Nonlinear Dynamics.*, vol. 76, no. 1, pp. 115–124. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <https://doi.org/10.1007/s11071-013-1114-2>
- [38] ZHENG, Q. & SHEN, J. (2015). Pattern formation in the FitzHugh-Nagumo model. *Computers and Mathematics with Applications*, vol, 70, no. 5, pp. 1082–1097. Recuperado el 12 de junio del 2020 de: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2015.06.031>

Apéndice A. Estabilidad del método de diferencias finitas

Teniendo en cuenta una ecuación de difusión en una dimensión

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}.$$

La aproximación de diferencias finitas de primer orden explícita es

$$\frac{W_i^{n+1} - W_i^n}{\Delta t} = \frac{D}{(\Delta x)^2} (W_{i+1}^n - 2W_i^n + W_{i-1}^n),$$

y definiendo $\lambda = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}$,

$$W_i^{n+1} = \lambda(W_{i+1}^n - 2W_i^n + W_{i-1}^n). \quad (48)$$

Análisis de estabilidad de Fourier

(Roca Arroyo y Valbuena Duarte, 2014) La condición de estabilidad de un esquema en diferencias finitas será satisfecho si la amplitud de cualquier error ξ^n no aumenta con el tiempo, es decir

$$|G| \equiv \left| \frac{\xi^{n+1}}{\xi^n} \right| \leq 1, \quad (49)$$

donde la cantidad G , definida:

$$G = \frac{\xi^{n+1}}{\xi^n}$$

es denominado el factor de amplificación del error y está definida en función del intervalo de tiempo y de las particiones espaciales.

Teorema. El método explícito es estable para $\lambda \leq \frac{1}{2}$.

Demostración

(Roca Arroyo y Valbuena Duarte, 2014; Durán, 2012) Cualquier condición de estabilidad

para el caso del esquema de diferencias finitas explícito puede ser determinado mediante la siguiente expresión

$$E_{i,j,n} = \xi^n e^{i\beta ik}, \quad (50)$$

al sustituir (50) en (48) se obtiene

$$\xi = 1 - 4\lambda \sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right),$$

como $\sin^2(\theta) \leq 1$, se tiene

$$\xi \leq 1 - 4\lambda,$$

por la condición de estabilidad dada en (49) y la definición del factor de amplificación, se debe cumplir que

$$-1 \leq 1 - 4\lambda,$$

finalmente,

$$\lambda \leq \frac{1}{2}.$$

Así, el método explícito es estable para $\lambda \leq \frac{1}{2}$.

Para un caso bidimensional

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right) \quad (51)$$

la demostración del teorema es la siguiente:

Demostración 2

$$E_{i,j,n} = \xi^n e^{i\beta ik} e^{j\beta jk_2}. \quad (52)$$

(Roca Arroyo y Valbuena Duarte, 2014) Este factor representa el comportamiento del error en un nodo arbitrario (i, j) para un tiempo discreto t . Como (52) debe resolver el esquema explícito de diferencias finitas de la ecuación (51), al sustituir se tiene

$$\xi = 1 - 4 \left[\lambda_1 \sin^2 \frac{\beta \Delta x}{2} - \lambda_2 \sin^2 \frac{\beta \Delta y}{2} \right],$$

como $\sin^2(\theta) \leq 1$, se tiene

$$\xi \leq 1 - 4[\lambda_1 - \lambda_2],$$

ahora por la condición de estabilidad (49) y la definición del factor de amplificación, se debe cumplir que

$$-1 \leq 1 - 4[\lambda_1 - \lambda_2],$$

luego,

$$(\lambda_1 + \lambda_2) \leq \frac{1}{2}.$$

De modo que si hacemos $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2$, entonces $\lambda \leq \frac{1}{2}$, $\lambda_1 \leq \frac{1}{2}$, $\lambda_2 \leq \frac{1}{2}$. La cual es la condición de estabilidad del método explícito.

Apéndice B. Estudio de convergencia numérica del operador de difusión en el dominio de referencia bidimensional

Este ejemplo tiene por objetivo presentar un estudio de la convergencia numérica del operador de difusión implementado en MATLAB (R2020b) en el contexto bidimensional. Para poner a prueba el código implementado se propone la solución del siguiente problema en dos dimensiones.

$$\begin{cases} u_t = k(u_{xx} + u_{yy}), & \Omega = [-1, 1] \times [-1, 1], \\ u(x, y, 0) = \varphi(x, y, 0), \\ u(x, y, t)|_{\tilde{\Omega}} = \varphi(x, y, t)|_{\tilde{\Omega}}, \end{cases} \quad (1)$$

donde

$$\varphi(x, y, t) = \frac{1}{4t + 1} e^{-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{\kappa(4t+1)}} \quad (2)$$

κ es el coeficiente de difusión, (x_0, y_0) la coordenada del punto máximo de la concentración inicial. Es de resaltar que φ es solución analítica del sistema (1).

Considere el dominio $\Omega = [-1, 1]^2$ tal y como se muestra en la (Figura 1). El análisis solo tiene en cuenta la ecuación de difusión con condición inicial centrada en el dominio, $x_0 = 0,5$, $y_0 = 0,5$, coeficiente de difusión $\kappa = 0,05$ y tiempo final de $Tf = 1,5$ lo demás datos pueden ser apreciados en la (Tabla 1). En la (Figura 2) se aprecia el resultado de la simulación comparado con la solución exacta.

Como el problema planteado tiene solución analítica (2), es posible estimar el error asociado al proceso de discretización obtenido por el método de diferencias finitas, al utilizar el método de diferencias centradas y progresivas es de esperar que el error se comporte de la forma $(\Delta t, \Delta x^2, \Delta y^2)$ conforme $\Delta t = 0$ y $\Delta x = \Delta y \rightarrow 0$. El error de la solución obtenida mediante el método numérico con respecto a la solución analítica se calculó con la máxima diferencia en valor absoluto en cada nodo de la malla

$$Error = \max_{i,j} |u_{i,j}^n - \varphi(x_i, y_j, t^n)|$$

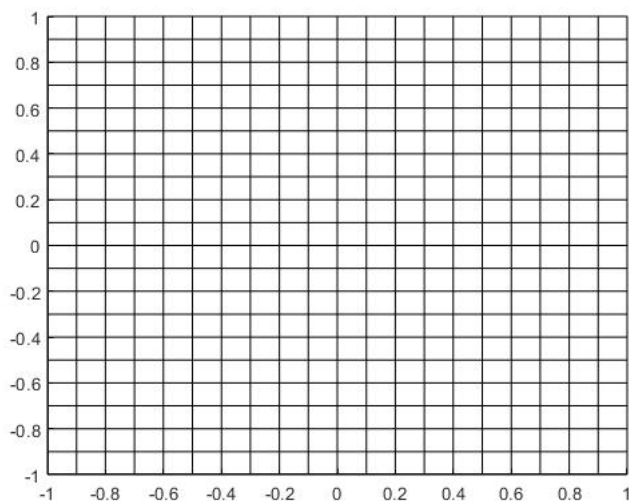


Figura 1: Dominio $\Omega = [-1, 1]^2$

La (Tabla 1) muestra el comportamiento del error conforme se disminuye Δt y Δx a la mitad de manera sucesiva. Se observa que cuando Δx se disminuye a la mitad el error se disminuye en una cuarta parte $(\frac{\Delta x}{2})^2$.

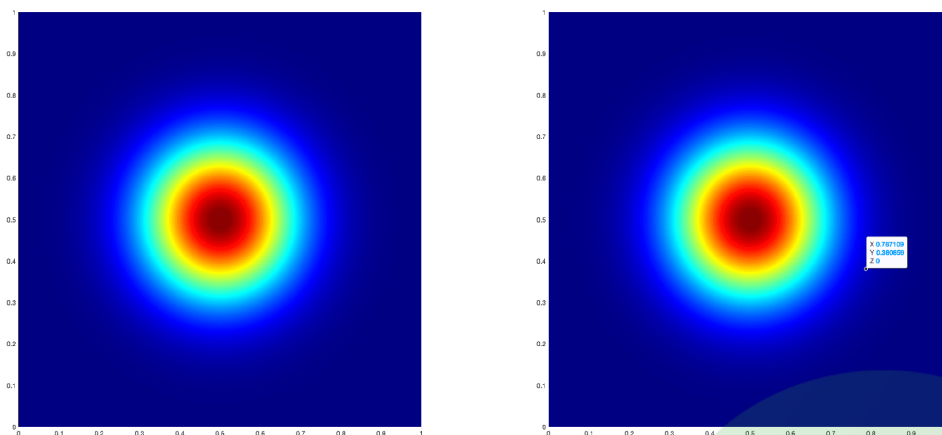


Figura 2: Comparación entre el análisis del error (lado izquierdo) y la solución exacta (lado derecho).

Tabla 1: Comportamiento del error

M	DeltaT	Nsize	DeltaX	Condicion 2	Error
25	0.06000000	4	0.25000000	0.0192	0.49092700
25	0.06000000	8	0.12500000	0.0768	0.09323329
25	0.06000000	16	0.06250000	0.3072	0.00309741
50	0.03000000	4	0.25000000	0.0096	0.49245489
50	0.03000000	8	0.12500000	0.0384	0.09742103
50	0.03000000	16	0.06250000	0.1536	0.00544410
50	0.03000000	32	0.03125000	0.6144	0.00038397
100	0.01500000	4	0.25000000	0.0048	0.49321161
100	0.01500000	8	0.12500000	0.0192	0.09950540
100	0.01500000	16	0.06250000	0.0768	0.00663877
100	0.01500000	32	0.03125000	0.3072	0.00068231
200	0.00750000	4	0.25000000	0.0024	0.49358819
200	0.00750000	8	0.12500000	0.0096	0.10054503
200	0.00750000	16	0.06250000	0.0384	0.00724139
200	0.00750000	32	0.03125000	0.1536	0.00121956
200	0.00750000	64	0.01562500	0.6144	0.00011678
400	0.00375000	4	0.25000000	0.0012	0.49377604
400	0.00375000	8	0.12500000	0.0048	0.10106418
400	0.00375000	16	0.06250000	0.0192	0.00754402
400	0.00375000	32	0.03125000	0.0768	0.00148921
400	0.00375000	64	0.01562500	0.3072	0.00016610

M	DeltaT	Nsize	DeltaX	Condicion 2	Error
800	0.00187500	4	0.25000000	0.0006	0.49386986
800	0.00187500	8	0.12500000	0.0024	0.10132359
800	0.00187500	16	0.06250000	0.0096	0.00769566
800	0.00187500	32	0.03125000	0.0384	0.00162429
800	0.00187500	64	0.01562500	0.1536	0.00029805
800	0.00187500	128	0.00781250	0.6144	0.00011389
1.600	0.00093750	4	0.25000000	0.0003	0.49391674
1.600	0.00093750	8	0.12500000	0.0012	0.10145325
1.600	0.00093750	16	0.06250000	0.0048	0.00777156
1.600	0.00093750	32	0.03125000	0.0192	0.00169189
1.600	0.00093750	64	0.01562500	0.0768	0.00036408
1.600	0.00093750	128	0.00781250	0.3072	0.00011516
3.200	0.00046875	4	0.25000000	0.0001	0.49394017
3.200	0.00046875	8	0.12500000	0.0006	0.10151807
3.200	0.00046875	16	0.06250000	0.0024	0.00780953
3.200	0.00046875	32	0.03125000	0.0096	0.00172571
3.200	0.00046875	64	0.01562500	0.0384	0.00039711
3.200	0.00046875	128	0.00781250	0.1536	0.00011579
3.200	0.00046875	256	0.00390625	0.6144	0.00011317
6.400	0.00023437	4	0.25000000	0.0001	0.49395188
6.400	0.00023437	8	0.12500000	0.0003	0.10155048
6.400	0.00023437	16	0.06250000	0.0012	0.00782852
6.400	0.00023437	32	0.03125000	0.0048	0.00174262
6.400	0.00023437	64	0.01562500	0.0192	0.00041363
6.400	0.00023437	128	0.00781250	0.0768	0.00011611
6.400	0.00023437	256	0.00390625	0.3072	0.00011348

M	DeltaT	Nsize	DeltaX	Condicion 2	Error
12.800	0.00011719	4	0.25000000	0.0000	0.49395774
12.800	0.00011719	8	0.12500000	0.0001	0.10156668
12.800	0.00011719	16	0.06250000	0.0006	0.00783802
12.800	0.00011719	32	0.03125000	0.0024	0.00175108
12.800	0.00011719	64	0.01562500	0.0096	0.00042189
12.800	0.00011719	128	0.00781250	0.0384	0.00011627
12.800	0.00011719	256	0.00390625	0.1536	0.00011364
12.800	0.00011719	512	0.00195312	0.6144	0.00011299
25.600	0.00005859	4	0.25000000	0.0000	0.49396067
25.600	0.00005859	8	0.12500000	0.0001	0.10157479
25.600	0.00005859	16	0.06250000	0.0003	0.00784277
25.600	0.00005859	32	0.03125000	0.0012	0.00175531
25.600	0.00005859	64	0.01562500	0.0048	0.00042602
25.600	0.00005859	128	0.00781250	0.0192	0.00011634
25.600	0.00005859	256	0.00390625	0.0768	0.00011372
25.600	0.00005859	512	0.00195312	0.3072	0.00011307

Apéndice C. Código en MATLAB para el esquema explícito

```

% Esquema de diferencias finitas para la ecuacion de reaccion—difusion
%
% Reaccion de Schnackenberg
%
%
%
%
%
% setup
clear ;
clc ;

%
%
%Discretizacion

NSize=15;
MSize=15;

NumberofSnapShots=5000.0;
M=160000.0;
T=10;

Xin=0.0;
Xf =1.0;

Yin=0.0;
Yf =1.0;

deltaX=(Xf-Xin)/NSize;
deltaY=(Yf-Yin)/MSize;

```

```

%
%
%Enmallado

X=linspace(Xin,Xf,NSize+1);
Y=linspace(Yin,Yf,MSize+1);
[XX,YY]=meshgrid(X,Y);
S =zeros(NSize+1,MSize+1);
A =zeros(NSize+1,MSize+1);
dS=zeros(NSize+1,MSize+1);
dA=zeros(NSize+1,MSize+1);

%
%
% Condiciones iniciales

R=0.01;
eps=0.05;
R=eps.*R;
THETA=pi*XX;

%
%
%Valores iniciales, punto critico y perturbacion

a=0.2;
b=0.5;
beta=14.0;
gamma=1200.0;

S_Star=a+b;
A_Star=b/((a+b)*(a+b));

```

```

m=3;
n=4;
S= R.*cos((n*pi/Xf).*XX).*cos((m*pi/Yf).*YY) - S_Star;
A= R.*cos((n*pi/Xf).*XX).*cos((m*pi/Yf).*YY) - A_Star;

%
%
%Iteraciones en el tiempo
Flag1=1;
Flag2=0;
dt=T/M;
Snapshot=NumberofSnapShots;
SnapShotCounter=11;
tn=0.0;

%
%
% Estabilidad del metodo: diferencias finitas

condnumber1 =2*dt*(1.0/(deltaX*deltaX)+1.0/(deltaY*deltaY));
condnumber2 =2*beta*dt*(1.0/(deltaX*deltaX)+1.0/(deltaY*deltaY));
formatSpec = 'Condition_number_1_is_%.4f_and_Condition_number_2_is_%.4f_\n';
fprintf (formatSpec,condnumber1,condnumber2);
if ((condnumber1<1)&(condnumber2<1))

%
%
% Discretizacion del modelo
%

for k=0:M

% Derivacion en Y - Abajo
%
```



```

for i=2:NSize
Sxx = ( S(i+1,1) -2*S(i,1) + S(i-1,1))/(deltaX*deltaX);
Syy = (2*S(i,2) -2*S(i,1) )/(deltaY*deltaY);
Axx = ( A(i+1,1) -2*A(i,1) + A(i-1,1))/(deltaX*deltaX);
Ayy = (2*A(i,2) -2*A(i,1) )/(deltaY*deltaY);
S.e = S(i,1);
A.f = A(i,1);

```

```

dS(i,1)= gamma*(a-S.e+S.e*S.e*A.f)+(Sxx+Syy);
dA(i,1)= gamma*(b-S.e*S.e*A.f)+beta*(Axx+Ayy);

```

```
end
```

```
%
```

```
%Derivacion en X - Izquierda
```

```

for j=2:MSize
Sxx = (2*S(2,j) -2*S(1,j) )/(deltaX*deltaX);
Syy = ( S(1,j+1) -2*S(1,j) + S(1,j-1) )/(deltaY*deltaY);
Axx = (2*A(2,j) -2*A(1,j) )/(deltaX*deltaX);
Ayy = ( A(1,j+1) -2*A(1,j) + A(1,j-1) )/(deltaY*deltaY);

S.e = S(1,j);
A.f = A(1,j);

```

```

dS(1,j)= gamma*(a-S.e+S.e*S.e*A.f)+(Sxx+Syy);
dA(1,j)= gamma*(b-S.e*S.e*A.f)+beta*(Axx+Ayy);

```

```
end
```

```
%
```

```
%Derivacion en Y - Arriba
```

```

for i=2:NSize
Sxx = ( S(i+1,MSize+1) -2*S(i,MSize+1) + S(i-1,MSize+1) )/(deltaX*deltaX);
Syy = (2.0*S(i, MSize) -2*S(i,MSize+1) )/(deltaY*deltaY);
Axx = ( A(i+1,MSize+1) -2*A(i,MSize+1) + A(i-1,MSize+1) )/(deltaX*deltaX);

```

$$A_{yy} = (2.0 * A(i, MSize) - 2 * A(i, MSize + 1)) / (\Delta Y * \Delta Y);$$

$$S_e = S(i, MSize + 1);$$

$$A_f = A(i, MSize + 1);$$

$$dS(i, MSize + 1) = \gamma * (a - S_e + S_e * S_e * A_f) + (S_{xx} + S_{yy});$$

$$dA(i, MSize + 1) = \gamma * (b - S_e * S_e * A_f) + \beta * (A_{xx} + A_{yy});$$

end

%

%Derivacion en X - Derecha

for j=2:MSize

$$S_{xx} = (2 * S(NSize, j) - 2 * S(NSize + 1, j)) / (\Delta X * \Delta X);$$

$$S_{yy} = (S(NSize + 1, j + 1) - 2 * S(NSize + 1, j) + S(NSize + 1, j - 1)) / (\Delta Y * \Delta Y);$$

$$A_{xx} = (2 * A(NSize, j) - 2 * A(NSize + 1, j)) / (\Delta X * \Delta X);$$

$$A_{yy} = (A(NSize + 1, j + 1) - 2 * A(NSize + 1, j) + A(NSize + 1, j - 1)) / (\Delta Y * \Delta Y);$$

$$S_e = S(NSize + 1, j);$$

$$A_f = A(NSize + 1, j);$$

$$dS(NSize + 1, j) = \gamma * (a - S_e + S_e * S_e * A_f) + (S_{xx} + S_{yy});$$

$$dA(NSize + 1, j) = \gamma * (b - S_e * S_e * A_f) + \beta * (A_{xx} + A_{yy});$$

end

%

%Discretizacion de las esquinas

%

%Abajo-Izquierda

$$S_{xx} = (2 * S(2, 1) - 2 * S(1, 1)) / (\Delta X * \Delta X);$$

$$S_{yy} = (2 * S(1, 2) - 2 * S(1, 1)) / (\Delta Y * \Delta Y);$$

$$A_{xx} = (2 * A(2, 1) - 2 * A(1, 1)) / (\Delta X * \Delta X);$$

$$A_{yy} = (2 * A(1, 2) - 2 * A(1, 1)) / (\Delta Y * \Delta Y);$$

$$S.e = S(1,1);$$

$$A.f = A(1,1);$$

$$dS(1,1) = \text{gamma} * (a - S.e + S.e * S.e * A.f) + (Sxx + Syy);$$

$$dA(1,1) = \text{gamma} * (b - S.e * S.e * A.f) + \text{beta} * (Axx + Ayy);$$

%

%Abajo—derecha

$$Sxx = (2 * S(NSize,1) - 2 * S(NSize+1,1)) / (\text{deltaX} * \text{deltaX});$$

$$Syy = (2 * S(NSize+1,2) - 2 * S(NSize+1,1)) / (\text{deltaY} * \text{deltaY});$$

$$Axx = (2 * A(NSize,1) - 2 * A(NSize+1,1)) / (\text{deltaX} * \text{deltaX});$$

$$Ayy = (2 * A(NSize+1,2) - 2 * A(NSize+1,1)) / (\text{deltaY} * \text{deltaY});$$

$$S.e = S(NSize+1,1);$$

$$A.f = A(NSize+1,1);$$

$$dS(NSize+1,1) = \text{gamma} * (a - S.e + S.e * S.e * A.f) + (Sxx + Syy);$$

$$dA(NSize+1,1) = \text{gamma} * (b - S.e * S.e * A.f) + \text{beta} * (Axx + Ayy);$$

%

%Arriba—derecha

$$Sxx = (2.0 * S(NSize,MSize+1) - 2 * S(NSize+1,MSize+1)) / (\text{deltaX} * \text{deltaX});$$

$$Syy = (2.0 * S(NSize+1,MSize) - 2 * S(NSize+1,MSize+1)) / (\text{deltaY} * \text{deltaY});$$

$$Axx = (2.0 * A(NSize,MSize+1) - 2 * A(NSize+1,MSize+1)) / (\text{deltaX} * \text{deltaX});$$

$$Ayy = (2.0 * A(NSize+1,MSize) - 2 * A(NSize+1,MSize+1)) / (\text{deltaY} * \text{deltaY});$$

$$S.e = S(NSize+1,MSize+1);$$

$$A.f = A(NSize+1,MSize+1);$$

```
dS(NSize+1,MSize+1)= gamma*(a-S.e+S.e*S.e*A.f)+(Sxx+Syy);
dA(NSize+1,MSize+1)= gamma*(b-S.e*S.e*A.f)+beta*(Axx+Ayy);
```

```
%
```

```
%Arriba-izquierda
```

```
Sxx = ( 2.0*S(2,MSize+1) -2*S(1,MSize+1) )/(deltaX*deltaX);
Syy = ( 2.0*S(1,MSize) -2*S(1,MSize+1) )/(deltaY*deltaY);
Axx = ( 2.0*A(2,MSize+1) -2*A(1,MSize+1) )/(deltaX*deltaX);
Ayy = ( 2.0*A(1,MSize) -2*A(1,MSize+1) )/(deltaY*deltaY);
```

```
S.e = S(1,MSize+1);
```

```
A.f = A(1,MSize+1);
```

```
dS(1,MSize+1)= gamma*(a-S.e+S.e*S.e*A.f)+(Sxx+Syy);
dA(1,MSize+1)= gamma*(b-S.e*S.e*A.f)+beta*(Axx+Ayy);
```

```
%Discretizacion de la region interior
```

```
for j=2:MSize
```

```
for i=2:NSize
```

```
Sxx= ( S(i+1,j) -2.0*S(i,j) + S(i-1,j) )/(deltaX*deltaX);
```

```
Syy= ( S(i,j+1) -2.0*S(i,j) + S(i,j-1) )/(deltaY*deltaY);
```

```
Axx= ( A(i+1,j) -2.0*A(i,j) + A(i-1,j) )/(deltaX*deltaX);
```

```
Ayy= ( A(i,j+1) -2.0*A(i,j) + A(i,j-1) )/(deltaY*deltaY);
```

```
S.e = S(i,j);
```

```
A.f = A(i,j);
```

```

dS(i,j)= gamma*(a-S_e+S_e*S_e*A_f)+(Sxx+Syy);
dA(i,j)= gamma*(b-S_e*S_e*A_f)+beta*(Axx+Ayy);
%      dS(i,j)= D1*(Sxx+Syy);
%      dI(i,j)= D2*(Ixx+Iyy);

end
end
%

S=S+dt.*dS;
A=A+dt.*dA;
%
%

%

%Graficas resultantes
%
if (mod(k,1000)==0)
tn=(k+1)*dt;
maxnorm=max(max(S))+max(max(A));
mass=sum(sum(S))/(deltaX*deltaY)+sum(sum(A))/(deltaX*deltaY);
formatSpec = 'time_ %4.4f, _norm_ %4.4f, _mass_ %4.4f_\n';
fprintf (formatSpec,tn, maxnorm, mass);

if maxnorm> 1000
break
end

figure (2)
subplot (1,2,1)
pcolor(XX,YY,S),grid on,

```

```
shading interp;  
colormap jet;  
title ('u_para_t=10')  
subplot(1,2,2)  
pcolor(XX,YY,A),grid on,  
shading interp;  
colormap jet;  
title ('v_para_t=10')  
  
end  
end  
end
```