

Modelos de Reacción-Difusión

Unai Gurbindo y Aitor Ayape

Noviembre 2022

Índice

1. Modelo de dispersión genética: La ecuación de Fisher	1
1.1. Estructura de la matriz de coeficientes, comparación con la del trabajo 3 e implementación en <i>matlab</i>	1
1.2. Comparación de diferentes variaciones del modelo	2
1.2.1. Difusión pura: $k = 0$ y $D = 1$;	2
1.2.2. Reacción pura: $k = 0,65$ y $D = 0$;	4
1.2.3. Reacción-difusión con ventaja adaptativa permanente: $k = 0,65$ y $D = 1$;	6
1.2.4. Reacción-difusión con ventaja adaptativa temporal: $k(t) = 0,1625(1-\tanh(t-5))^2$ y $D = 1$;	7
1.2.5. Reacción-difusión con desventaja adaptativa: $k = 0,65$ y $D = 1$	9
1.3. Estudio de la estabilidad del método de Euler explícito de paso fijo según el número de nodos espaciales y temporales.	10
1.3.1. $(N,M)=(11,300)$	10
1.3.2. $(N,M)=(11,380)$	10
1.3.3. $(N,M)=(23,1400)$	11
1.3.4. $(N,M)=(23,1450)$	11
2. Modelo de formación de patrones: El sistema de Turing	13
2.1. Selección del método <i>ode</i> según la eficiencia	13
2.2. Soluciones numéricas modelo Gierer-Meinhardt	15
2.3. Soluciones numéricas modelo Schnakenberg	19
2.4. Diferencias entre los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt	23
2.5. Soluciones numéricas sobre el rectángulo	24
2.5.1. Soluciones numéricas modelo Gierer-Meinhardt	24
2.5.2. Soluciones numéricas modelo Schnakenberg	26
2.5.3. Diferencias entre los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt	28
2.6. Diferencias entre las soluciones numéricas del cuadrado y el rectángulo	28
3. Breve comentario sobre los <i>scripts</i> utilizados	29

1. Modelo de dispersión genética: La ecuación de Fisher

En esta primera parte del trabajo se va a resolver el modelo de Fisher con diferentes términos de reacción y usando diferentes métodos. Para simplificar el problema se asume un dominio cuadrado.

El modelo de Fisher sirve para describir la dispersión de un gen mutante en una determinada población.

1.1. Estructura de la matriz de coeficientes, comparación con la del trabajo 3 e implementación en matlab.

Si observamos las diferencias en las condiciones de contorno entre el problema del proyecto 3 y este, observamos que la única diferencia se da en la frontera sur. Donde antes teníamos que la función $u(x, y)$ valía 0 en esta frontera, ahora tenemos que es su derivada normal la que vale 0, igual que ocurre en la frontera norte.

Por la manera en la que hemos ordenado las incógnitas en el vector $\mathbf{u}_h(t)$, la primera fila de la matriz A es la que multiplica a las incógnitas de la frontera sur y por tanto es ahí donde debemos realizar los cambios respecto a la matriz A del proyecto 3.

Como ahora tenemos en la frontera sur las mismas condiciones de contorno que en la norte, es fácil ver que las filas de la matriz A correspondientes a estas fronteras han de ser análogas. Por tanto, donde antes teníamos un bloque identidad seguido de bloques de ceros, ahora tendremos un bloque S seguido de uno 2I y después los bloques de ceros.

$$A = \begin{pmatrix} S & 2I & & \\ I & S & I & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & I & S & I \\ & & & 2I & S \end{pmatrix}$$

Como vimos en el proyecto 3, los bloques S se corresponden con las aportaciones que hacen los nodos de los lados al cálculo del valor de $u(x, y)$ en un determinado punto y con el coeficiente del propio nodo, mientras que los blo-

ques identidad están ligados a las aportaciones de los nodos que tiene arriba y abajo. En el caso de las fronteras norte y sur, vimos que el *stencil* se pliega y la aportación del nodo inferior o superior se duplica.

Así, al multiplicar esta matriz por el vector de incógnitas, cada $u_{i,j}$ aparecerá con el coeficiente que le corresponde por el empleo de la fórmula central de tres puntos para aproximar las derivadas.

En cuanto a la implementación en *matlab*, la única diferencia con respecto al proyecto 3 es que debemos eliminar las dos líneas de código en las que modificábamos la primera fila de bloques.

1.2. Comparación de diferentes variaciones del modelo

En este apartado resolvemos diferentes variantes del problema (diferentes parámetros D y k) estudiando qué método es más eficiente en cada caso así como el comportamiento de la solución en cada caso.

Se dará también la interpretación biológica de la aplicación del modelo a la descripción de la dispersión de un gen mutante, teniendo siempre en cuenta que un modelo con solo dos parámetros como este puede no recoger toda la complejidad del fenómeno.

En cualquier caso, la utilidad de los modelos biológicos reside precisamente en que son capaces de dar una visión precisa a la vez que simplificada del sistema que describen. Un modelo que recoja toda la complejidad del sistema sería por tanto tan poco útil como uno demasiado simplificador.

1.2.1. Difusión pura: $k = 0$ y $D = 1$;

En cuanto al método más eficiente para este problema, en el proyecto 3 vimos que los problemas de difusión pura son de tipo *stiff* por el transitorio que provoca el gran gradiente de concentración inicial. Es por ello que en este caso el método *ode15s* será mucho más eficiente.

Ejecutando el *script* con $N=47$ comprobamos que efectivamente, para el método *ode45* son necesarias más de 22000 evaluaciones de función y casi 3500 pasos, mientras que para el *ode15s* basta con 2600 evaluaciones y 145 pasos.

Una vez elegido el método podemos pasar a calcular las soluciones numéricas para los diferentes instantes de tiempo (Figura 1).

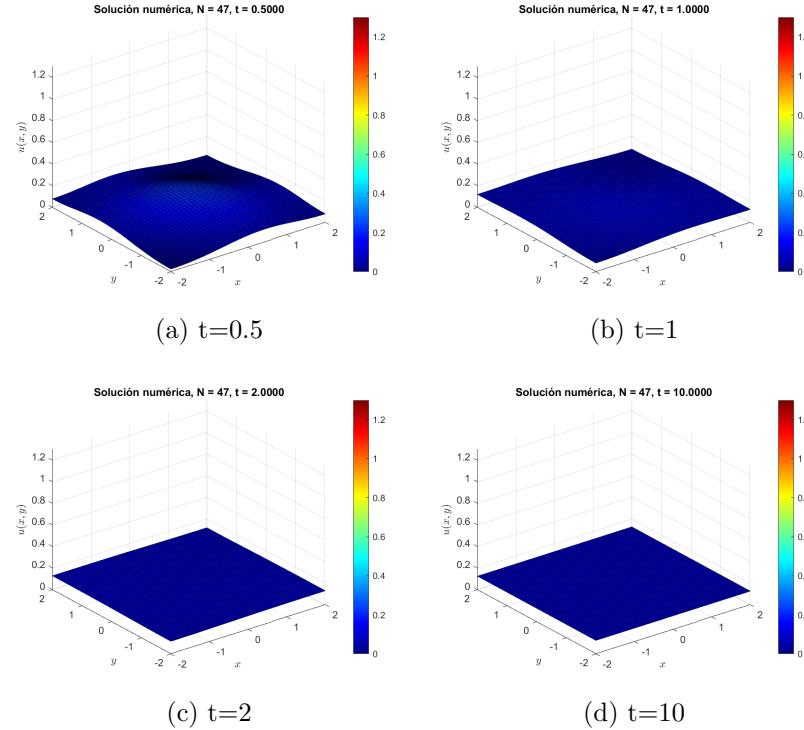


Figura 1: Solución numérica para el caso de difusión pura para $t=0.5$, $t=1$, $t=2$ y $t=10$.

Si usamos la animación que va hasta el instante final para observar la evolución de la solución a lo largo del tiempo observamos lo que ya vimos en el trabajo 3; al comienzo tenemos dos picos de concentración que se corresponden con las condiciones iniciales, y por efecto de la difusión esta concentración se homogeneiza y llega a ser la misma en todo el dominio.

En cuanto a la aplicación del modelo para describir la dinámica de dispersión de un gen mutante, la difusión pura modela una situación en la que el alelo mutante no proporciona ni ventajas ni desventajas adaptativas ($k = 0$). Así, vemos que pasamos de tener el gen concentrado en una zona del ecosistema (o dominio) a tener el gen repartido por todo el dominio por efecto de la dispersión genética ($D = 1$). Sin embargo, dado que portar este gen no tiene importancia adaptativa, el número de individuos portadores (la integral de superficie de la función $u(x, y)$ en el dominio) se mantiene constante.

En esta interpretación, podríamos considerar que cada instante de tiempo se corresponde con una generación, de tal manera que a medida que estas se suceden la presencia del gen se homogeneiza a lo largo del espacio ocupado por la población, y que el valor de $u(x, y)$ se corresponde con la frecuencia alélica del alelo mutante, valiendo 0 en las zonas del dominio en el que el gen no está presente y 1 en las zonas en las que el alelo mutante a eliminado al original.

1.2.2. Reacción pura: $k = 0,65$ y $D = 0$;

Si estudiamos la eficiencia de los dos métodos, vemos que en este caso ocurre lo contrario que en el caso anterior. Con estos parámetros, no tenemos ningún transitorio y el problema deja de ser *stiff*, por tanto, el uso de métodos para este tipo de problemas supone un gasto computacional innecesario.

Así lo comprobamos si hacemos las ejecuciones, viendo que son necesarios tan solo 20 pasos y 121 evaluaciones de función para el método *ode45* mientras que llegamos hasta los 73 pasos y 2500 evaluaciones para el *ode15s* además de 10 descomposiciones LU.

Hacemos por tanto las simulaciones con el método *ode45*. (Figura 2)

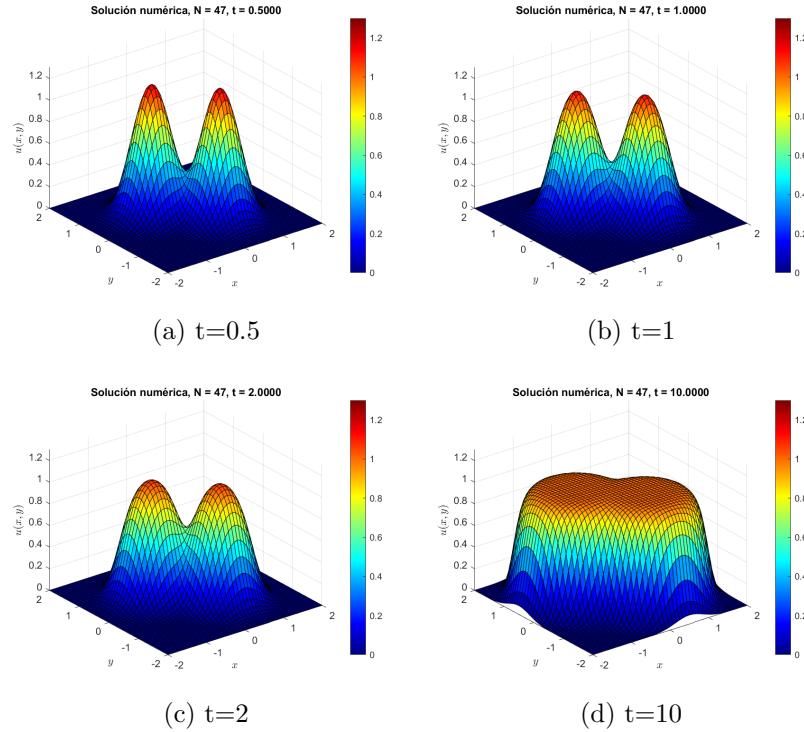


Figura 2: Solución numérica para el caso de reacción pura para $t=0.5$, $t=1$, $t=2$ y $t=10$.

En cuanto a la evolución a lo largo del tiempo, vemos que en este caso, el pico no disminuye sino que es en el resto del dominio, a excepción de las zonas cercanas a la frontera, en las que el valor de la función aumenta.

Se llega así a un estado de campana final en el que en casi todo el dominio tenemos el mismo valor de $u(x,y)$ y solo cerca de los bordes vemos un gran descenso, que es obligado por las condiciones de contorno.

Si reparamos en la interpretación biológica para la dispersión de un gen mutante, esta variante del modelo describe una situación en la que no existe la dispersión genética ($D=0$), pero el éxito adaptativo del alelo mutante es total frente al original, de tal manera que con el paso del tiempo, en las zonas del dominio en el que este gen estaba presente lo seguirá estando, y además lo estará también en el resto de zonas. Sin embargo, dado que no existe difusión, no es posible que la frecuencia llegue a ser la misma en todo el dominio, por lo que esta disminuye cerca de los bordes.

1.2.3. Reacción-difusión con ventaja adaptativa permanente: $k = 0,65$ y $D = 1$;

En esta versión del modelo y en las sucesivas volvemos a una situación similar a la primera debido a que es el término de difusión el que domina sobre el de reacción en los primeros instantes.

Esto provoca un transitorio típico de problemas *stiff* y que nos sugiere que el método *ode15s* va a ser más eficiente.

Hacemos las correspondientes ejecuciones y comprobamos que mientras que el *ode15s* solo precisa de 154 pasos y 2600 evaluaciones de función, el *ode45* llega a los 3470 pasos y más de 22000 evaluaciones.

Pasamos a obtener las soluciones numéricas en los diferentes tiempos para estudiar su comportamiento (Figura 3).

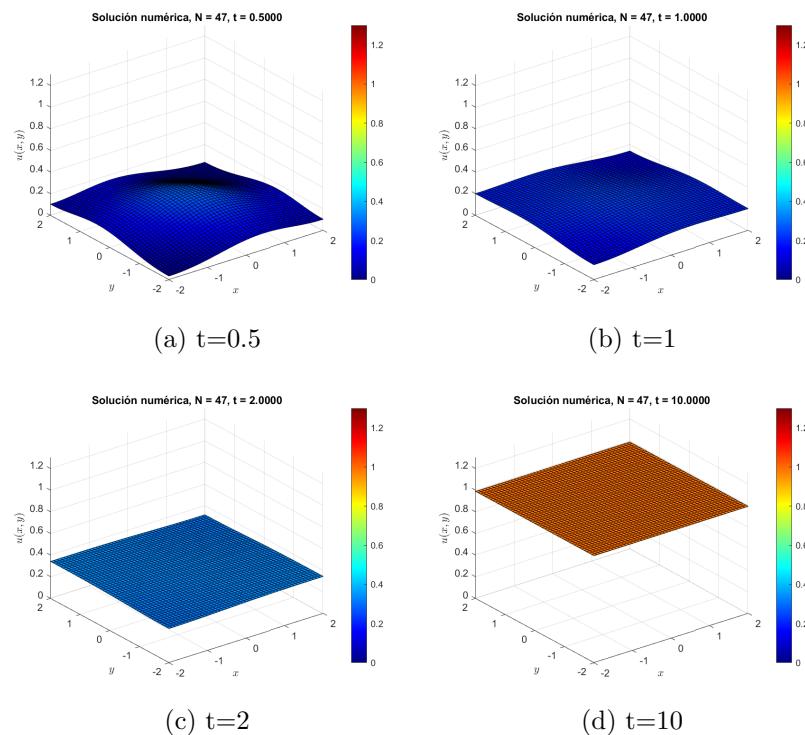


Figura 3: Solución numérica para el caso con ventaja adaptativa permanente para $t=0.5$, $t=1$, $t=2$ y $t=10$.

La situación que se modela con estos parámetros es una combinación de las

dos anteriores. Así, tenemos una situación inicial en la que por efecto del término de difusión, la frecuencia alélica se homogeneiza a lo largo del dominio, de tal manera que el gen pasa de estar presente en una sola zona a estarlo en todas.

Después de este transitorio, pasamos a un periodo en el que una vez homogeneizada la frecuencia, el término de reacción se hace dominante y esta comienza a aumentar dada la ventaja adaptativa que proporciona el nuevo alelo. Si esta ventaja no desaparece (k se mantiene constante), vemos que la frecuencia aumenta hasta alcanzar su máximo de $u = 1$ en todo el dominio.

1.2.4. Reacción-difusión con ventaja adaptativa temporal: $k(t) = 0,1625(1-\tanh(t-5))^2$ y $D = 1$;

En cuanto a la eficiencia de los métodos volvemos a estar en la misma situación que en el caso anterior: Más de 22000 evaluaciones y casi 3500 pasos para el *ode45*; y 2600 evaluaciones y 167 pasos para el *ode15s*.

Obtengamos las gráficas de la solución (Figura 4).

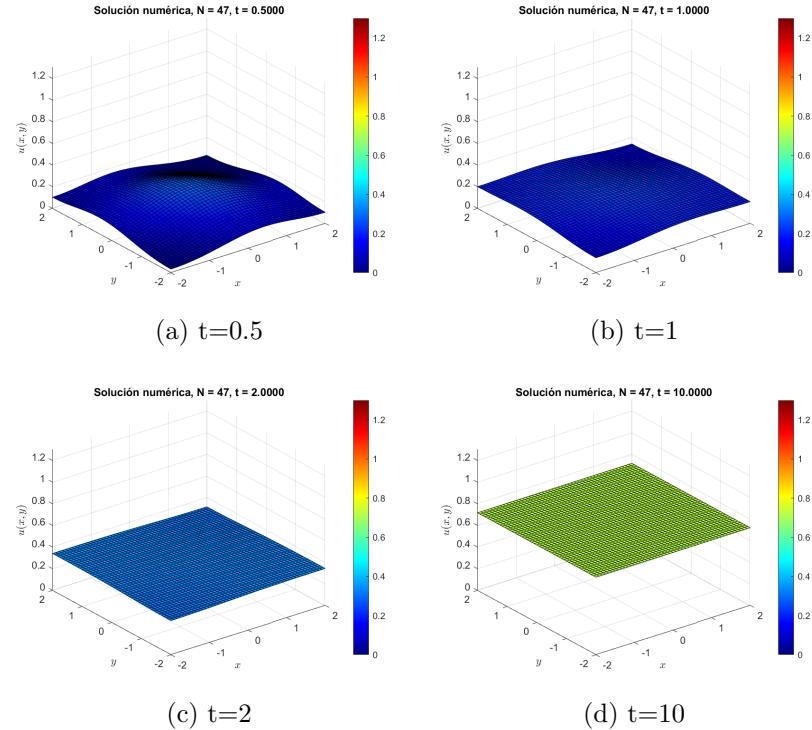


Figura 4: Solución numérica para el caso de ventaja adaptativa temporal para $t=0.5$, $t=1$, $t=2$ y $t=10$.

Si nos fijamos en la animación que muestra la solución hasta el instante $t = 10$, vemos en primer lugar que el valor de $u(x, y)$ se homogeneiza, lo que se correspondería con una dispersión aleatoria del alelo mutante en la población, pasando de estar presente en una sola zona a estarlo en todas. Al igual que en el caso anterior, es el término de difusión el que tiene mayor efecto en estos primeros instantes.

Después, durante el periodo en el que la función $k(t)$ toma valores cercanos a su máximo, vemos que el valor que toma $u(x, y)$ aumenta en todo el dominio, lo que se correspondería con una situación en la que portar el alelo mutante supone una ventaja adaptativa y por lo tanto su frecuencia alélica aumenta.

Finalmente, la función $k(t)$ pasa por su punto de inflexión y comienza a tomar valores cercanos a 0, lo que hace que el valor de la función $u(x, y)$ frene su aumento y termine por ser constante en todo el dominio pero sin llegar a su valor máximo (en lugar de llegar a 1 se queda en 0.7 aproximadamente). Esto describe la situación en la que, por un cambio ambiental, el gen mutante

deja de suponer una ventaja adaptativa y por lo tanto su frecuencia deja de aumentar.

1.2.5. Reacción-difusión con desventaja adaptativa: $k = 0,65$ y $D = 1$.

Volvemos a estar en la misma situación en cuanto a eficiencia con más de 22000 evaluaciones y casi 3500 pasos para el *ode45* y 2582 evaluaciones y 144 pasos para el *ode15s*.

Ahora representamos la soluciones numéricas para estudiar su comportamiento (Figura 5).

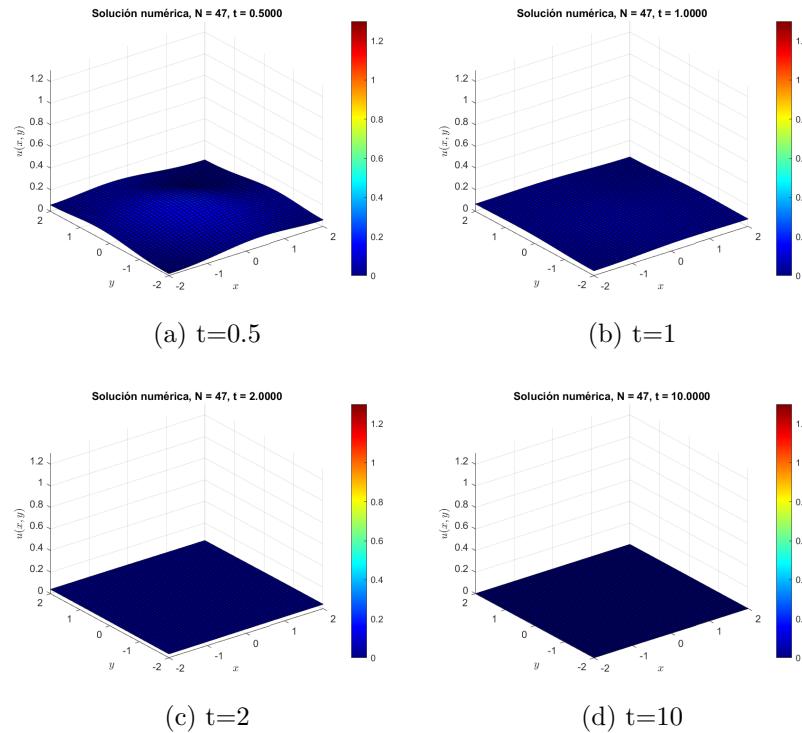


Figura 5: Solución numérica para el caso con destrucción de biomasa para $t=0.5$, $t=1$, $t=2$ y $t=10$.

Esta última situación comparte con las anteriores la primera etapa en la que la presencia del gen se homogeneiza a lo largo y ancho del modelo.

Sin embargo, en la segunda etapa aquí vemos que el valor de $u(x, y)$ va disminuyendo hasta que llega a 0 en todo el dominio. Esta variante del problema modela una situación en la que el alelo mutante supone una desventaja y por lo tanto tiende a desaparecer por efecto de la selección natural.

1.3. Estudio de la estabilidad del método de Euler explícito de paso fijo según el número de nodos espaciales y temporales.

Para este último apartado nos centramos en la tercera versión del problema de difusión-reacción, la que modelaba una ventaja adaptativa permanente, y al igual que en el apartado 2 del proyecto sobre difusión evolutiva, lo resolvemos con el método de Euler explícito de paso fijo y diferentes valores de N y M.

1.3.1. (N,M)=(11,300)

Ejecutamos el script para un intervalo temporal $[0,10]$ y vemos que, aunque hasta el primer segundo la aproximación parece buena, en seguida se instabiliza y comienzan a aparecer grandes oscilaciones. Esto llega a tal punto que a partir del segundo 1.6 aproximadamente, *Matlab* no es capaz de graficar la solución y no vemos ninguna solución. Observamos por tanto que para estos tamaños de paso espacial y temporal el método no es estable.

1.3.2. (N,M)=(11,380)

Nota: *Graficamos hasta el instante final para comprobar que no hay problemas de estabilidad en ningún momento y guardamos la imagen final como prueba.*

Con estos valores de N y M, no se nos presenta ningún problema de estabilidad y el método aproxima la solución de forma correcta. Los errores en la aproximación que cometería este método vendrían dados por el grosor de la malla, que puede no ser suficientemente fina para recoger la forma de las superficies en los instantes iniciales cuando hay picos de concentración muy agudos.

Comprobamos que la solución numérica coincide con la que obteníamos con el método *ode15s*. (Figura 6)

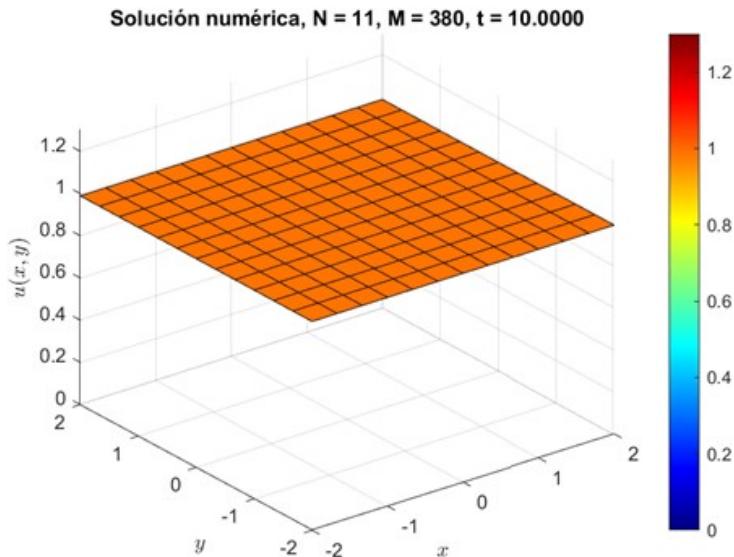


Figura 6: Solución numérica para $N=11$ y $M=380$.

1.3.3. $(N,M)=(23,1400)$

En este caso ocurre algo similar a lo que pasaba en el primer caso. Tenemos una aproximación estable hasta el instante 2.5 aproximadamente, pero después comienza a inestabilizarse hasta el punto de que a partir del instante 3.7 ni siquiera se grafica la solución.

1.3.4. $(N,M)=(23,1450)$

En este último caso volvemos a tener una buena aproximación sin problemas de inestabilidad. Además, frente al segundo caso, tenemos la ventaja de que un mallado más fino nos aporta aproximaciones más precisas, aunque con mayor gasto computacional.

Comprobamos de nuevo que la solución numérica coincide con la que obteníamos con el método *ode15s*. (Figura 6)

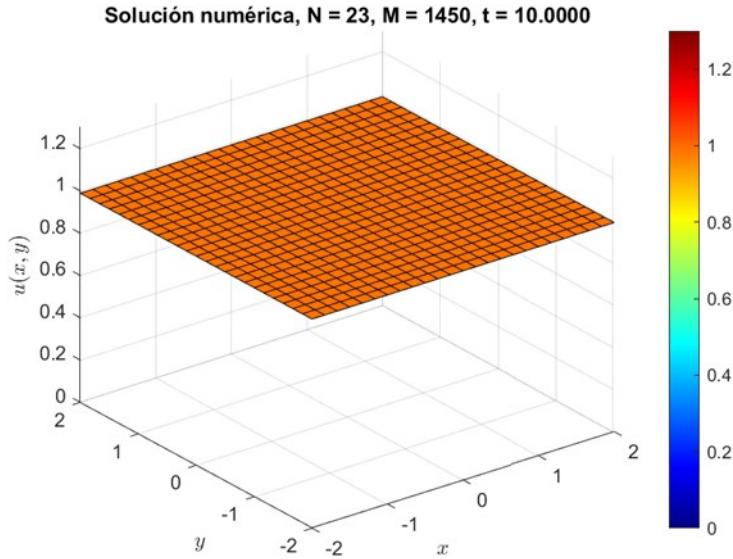


Figura 7: Solución numérica para $N=23$ y $M=1450$.

Podemos resumir los resultados sobre estabilidad obtenidos en la siguiente tabla, teniendo en cuenta para el cálculo de λ que $a = -2$, $b = 2$ y $t_f = 10$. (Cuadro 1)

N	M	λ	Estabilidad
11	300	0,3	No
11	380	0,24	Sí
23	1400	0,26	No
23	1450	0,248	Sí

Cuadro 1: Estabilidad para diferentes N y M

A la vista de estos cuatro resultados, podemos observar que para aquellos valores de N y M que dan λ superior a 0.25 tenemos problemas de inestabilidad, cosa que no ocurre para λ menor a 0.25. Podemos deducir por tanto que para este problema la condición de estabilidad del método de Euler explícito es que:

$$\lambda = \Delta t / h^2 \leq C = 0,25$$

En la práctica, esta condición implica que cuando aumentamos el número de nodos espaciales en busca de un mallado más fino, debemos aumentar todavía más el número de nodos temporales, aumentando por tanto considerablemente el gasto computacional. Esto resulta de vital importancia a

la hora de buscar un compromiso entre disminución del error y tiempo de ejecución.

2. Modelo de formación de patrones: El sistema de Turing

En esta segunda sección del trabajo trataremos la eficiencia de los métodos *ode* proporcionados por Matlab frente al modelo de Turing. Además, evaluaremos las soluciones numéricas de los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt en diversos tiempos y dominios. Asimismo, analizaremos las diferencias observadas entre los dos modelos y los dominios planteados.

2.1. Selección del método *ode* según la eficiencia

Comenzamos analizando qué método *ode* es el más eficiente para resolver este tipo de problemas. Planteamos los métodos *ode45* y *ode15s* para resolver los problemas propuestos.

Antes de empezar con la evaluación de los métodos numéricos, cabe mencionar que consideramos que el método *ode15s* será más eficiente ya que estamos ante un problema con características *stiff*. El modelo de Turing contiene un término de difusión, el cual provoca que el problema sea de tipo *stiff*, ya que, tal y como hemos visto con el modelo de Fisher, los modelos de reacción y difusión dejan de ser de tipo *stiff* cuando la difusión es igual a cero, hecho que no se da en el modelo de Turing.

Luego, si tratamos de resolver el modelo de Turing sobre el cuadrado unidad, ya sea para el modelo de Schnakenberg o el de Gierer-Meinhardt, podemos observar que el coste computacional siempre es mayor a la hora de utilizar el método *ode45*, es más, a medida que aumentamos el tiempo de integración del problema la diferencia entre los costes computacionales se hace más evidente (Tablas 2 y 3). El método *ode45* debe cumplir unas condiciones de estabilidad en la que se obligan a dar pasos de tamaño muy reducido debido al mallado con tantos puntos que hemos definido, por lo tanto, esto conlleva un mayor número de ejecuciones tal y como se ve en las tablas mencionadas, estos hechos coinciden con nuestras suposiciones anteriores en las que se podía esperar que el método *ode15s* fuese una mejor opción.

Método <i>ode45</i>		
Nº de evaluaciones		
tiempo	con Schnakenberg	con Gierer-Meinhardt
0.5	17827	17815
1	35803	35683
2	71749	71431
10	359101	357337

Cuadro 2: Número de evaluaciones con el método *ode45*

Método <i>ode15s</i>		
Nº de evaluaciones		
tiempo	con Schnakenberg	con Gierer-Meinhardt
0.5	5067	4897
1	10081	5066
2	19840	10009
10	34456	19733

Cuadro 3: Número de evaluaciones con el método *ode15s*

Por último, si con la información anterior no es suficiente para demostrar que el método *ode15s* es el más eficiente, si intentamos replicar el procedimiento anterior sobre el dominio del rectángulo obtenemos que nuestras computadoras no son capaces de resolver el problema si hacemos uso del método *ode45* (Figura 8).

```
Error using horzcat
Requested 4802x439070 (15.7GB) array exceeds maximum array size preference (15.7GB). This might cause MATLAB to become unresponsive.

Error in ode45 (line 476)
    yout = [yout, zeros(neq,chunk,dataType)]; %#ok<AGROW>

Related documentation
```

Figura 8: Error computacional.

Por consiguiente, dejamos en evidencia que el método más eficiente es el *ode15s* y por lo tanto nuestras suposiciones sobre el tipo de problema al que nos enfrentamos son ciertas, dado que los métodos *ode15s* trabajan mejor con problemas tipo *stiff* que los métodos *ode45*, los cuales oscilan sobre la

solución y conllevan un mayor coste computacional para alcanzar la solución final, tal y como hemos mostrado.

A partir de este apartado todas las soluciones que iremos mostrando serán obtenidas con el método más eficiente comentado en este apartado, es decir, el método *ode15s*.

2.2. Soluciones numéricas modelo Gierer-Meinhardt

En este apartado resolveremos el modelo de Gierer-Meinhardt sobre el cuadrado unidad en los tiempos $t = 0,5, 1, 2, 10$. En este caso la componente u hace referencia al activador de la reacción y la componente v al sustrato. A continuación, mostramos las soluciones numéricas obtenidas en cada caso, exponiendo en la izquierda la componente u del problema y a la derecha la componente v .

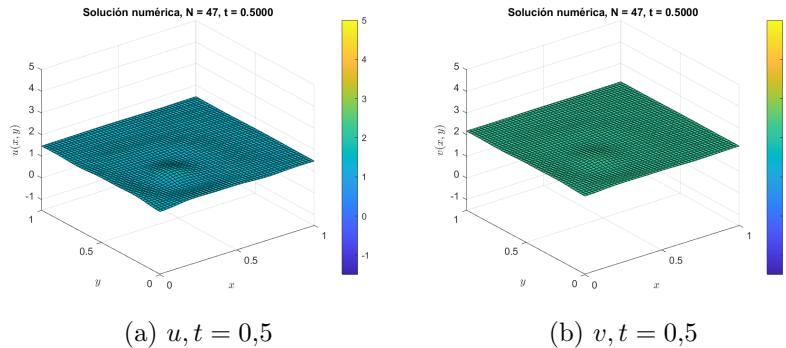


Figura 9: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 0,5$.

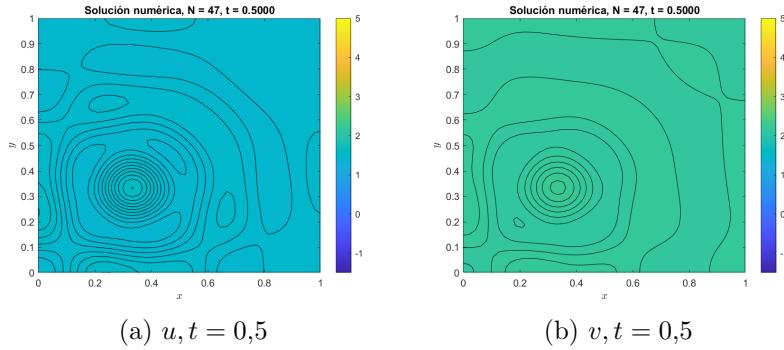


Figura 10: Curvas de nivel, solución con Gierer-Meinhardt para $t = 0,5$.

Comenzamos con una superficie en la que se puede percibir una zona en la que se dará algún tipo de patrón, es comprensible que los patrones no se muestren de manera evidente debido a que el tiempo de integración es muy reducido.

No obstante, tal y como mostramos en las siguientes figuras, en el tiempo igual a 1 los patrones ya se expresan de manera evidente a pesar de haber avanzado poco en el tiempo de integración. Esto se debe a que el problema tal y como hemos comentado es de tipo *stiff* y tenemos eventos transitorios de gran velocidad. Además, observamos que una vez que el modelo se ha aproximado a los patrones finales (como sucede en $t = 1$) las siguientes soluciones numéricas no muestran grandes diferencias, ya que las concentraciones se homogenizan y el efecto de la reacción sobre el problema desciende. Este último efecto se puede observar con las soluciones numéricas obtenidas en $t = 2$ y en $t = 10$, donde los patrones se acentúan pero no muestran grandes diferencias con las soluciones obtenidas en $t = 1$.

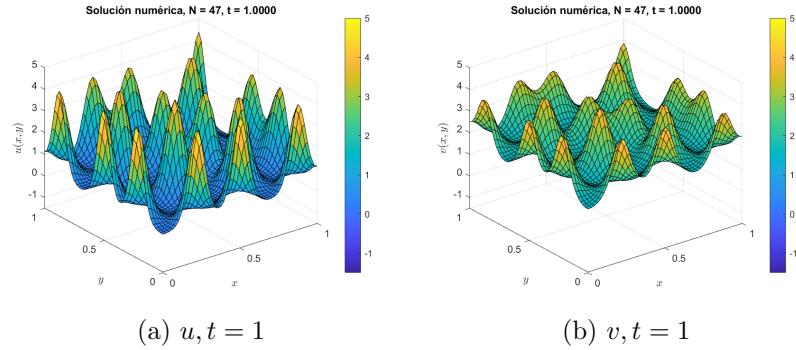


Figura 11: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 1$.

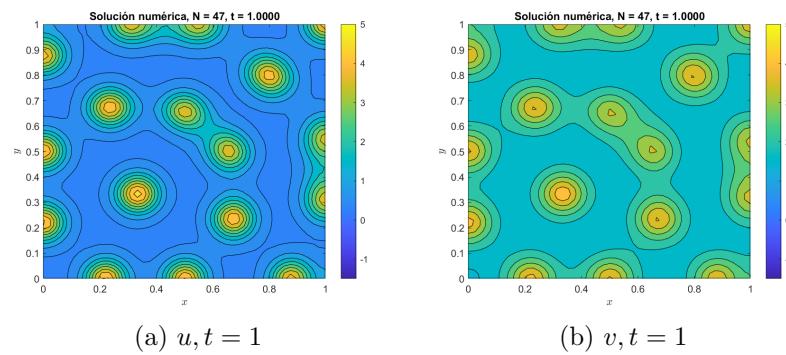


Figura 12: Curvas de nivel, solución con Gierer-Meinhardt para $t = 1$.

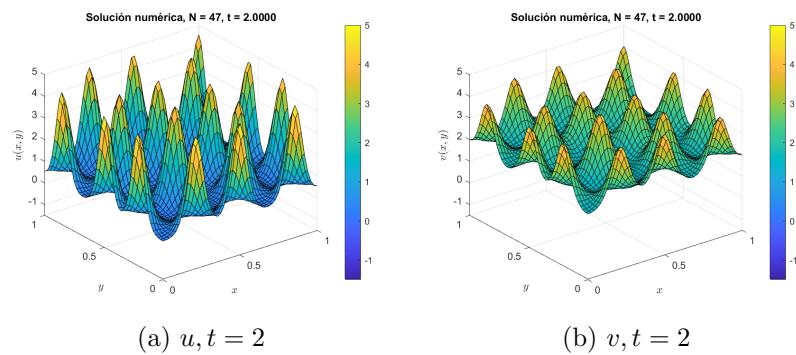


Figura 13: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 2$.

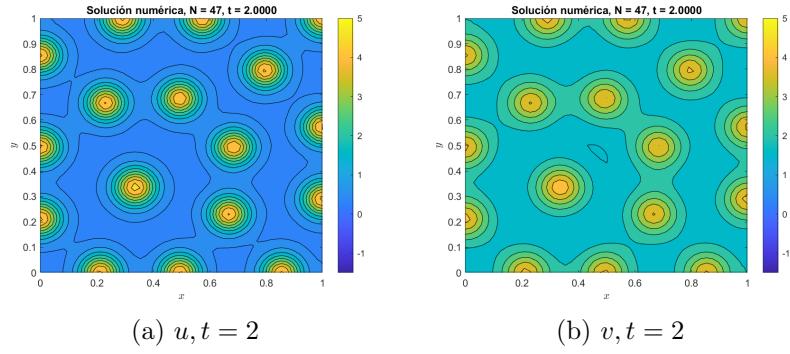


Figura 14: Curvas de nivel, solución con Gierer-Meinhardt para $t = 2$.

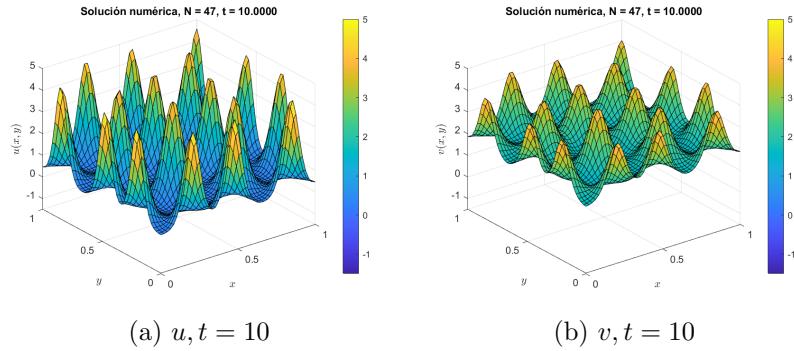


Figura 15: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 10$.

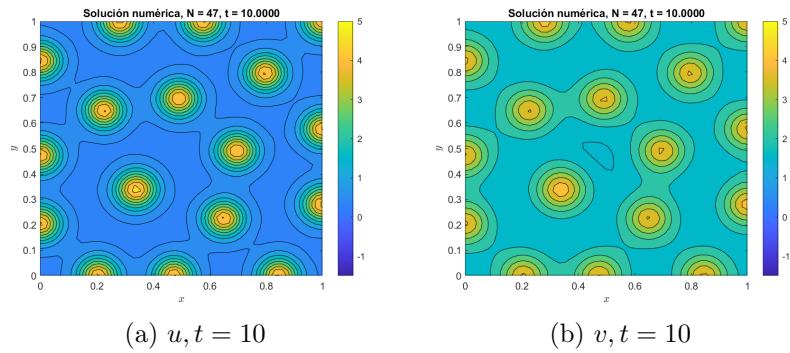


Figura 16: Curvas de nivel, solución con Gierer-Meinhardt para $t = 10$.

Por último, cabe mencionar que las soluciones que hemos obtenido en ambas componentes coinciden con las soluciones esperadas en el modelo de Gierer-Meinhardt.

Meinhardt, ya que se trata de un modelo de activador-sustrato y por lo tanto las dos componentes están en fase, siendo el sustrato el que crece en menor medida. Si analizamos el comportamiento de las componentes en nuestras soluciones numéricas, en todas las figuras podemos observar como la componente u , correspondiente al activador, muestra patrones más evidentes que los correspondientes a la componente del sustrato. Por consiguiente, podemos concluir que nuestras soluciones son coherentes al modelo planteado debido a que ambas componentes están en fase en todos los tiempos y el activador al nutrirse del sustrato siempre ofrece unos niveles de concentración mayores (cuando más activador hay también se da el máximo en el sustrato pero siempre se observa una mayor concentración en el activador).

Si analizamos las soluciones numéricas desde una interpretación biológica, podemos plantear el problema como una simulación de los patrones que se generan en las pieles de los guepardos. Estos animales al nacer muestran unos leves patrones en la piel los cuales se han formado cuando eran embriones. Una vez nacen, ya no se generan tantos patrones y los existentes se van definiendo de manera pausada a lo largo de la existencia del leopardo.

La primera etapa donde el animal se encuentra en fase embrionaria corresponde a las soluciones obtenidas en $t = 0,5$ y $t = 1$, ya que es en esta primera fase donde se generan los patrones principales del animal, luego, la segunda etapa coincide con los tiempos $t = 2$ y $t = 10$, donde los patrones ya están definidos y estos sufren leves alteraciones.

2.3. Soluciones numéricas modelo Schnakenberg

En este apartado, reproducimos el procedimiento anterior pero planteando el modelo de Schnakenberg. A diferencia del modelo de Gierer-Meinhardt, las funciones cinéticas de reacción del modelo de Schnakenberg corresponden a un modelo de activador-inhibidor, donde la componente u corresponde al activador y la componente v al inhibidor. Por lo tanto, podemos esperar que las soluciones numéricas nos muestren que las componentes están en oposición en el espacio de integración. A continuación, mostramos las soluciones numéricas obtenidas.

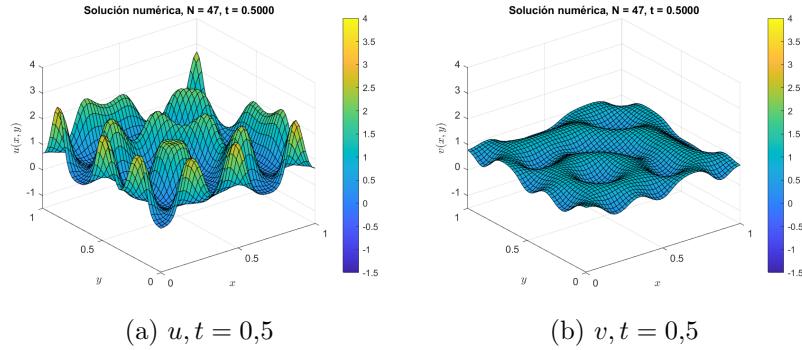


Figura 17: Solución numérica Schnakenberg para $t = 0,5$.

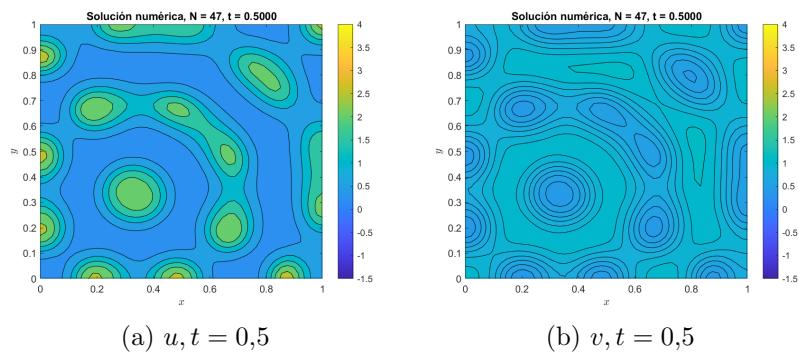


Figura 18: Curvas de nivel, solución con Schnakenberg para $t = 0,5$.

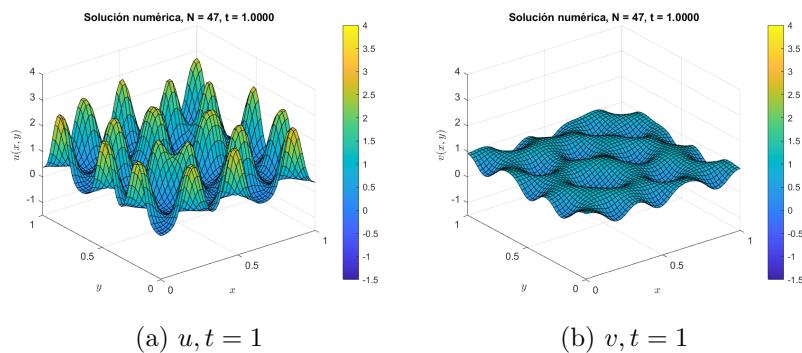


Figura 19: Solución numérica Schnakenberg para $t = 1$.

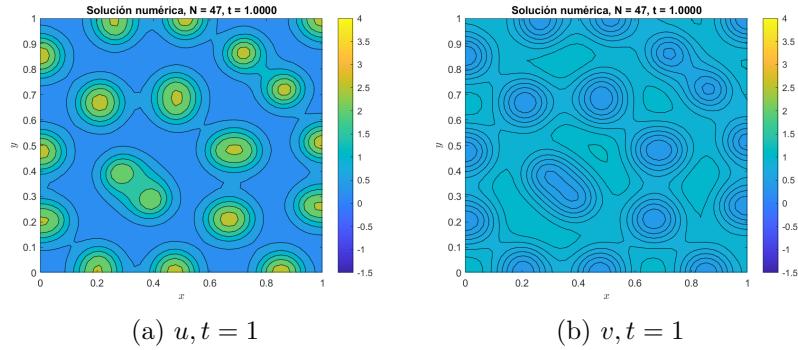


Figura 20: Curvas de nivel, solución con Schnakenberg para $t = 1$.

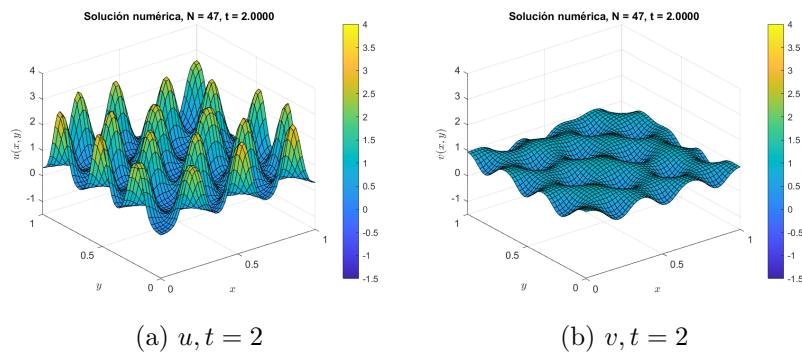


Figura 21: Solución numérica Schnakenberg para $t = 2$.

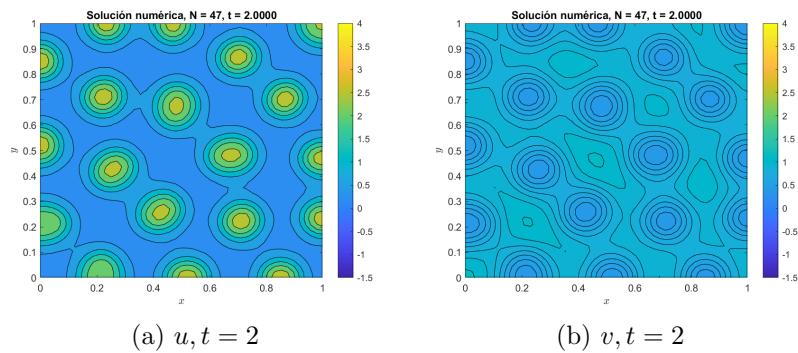


Figura 22: Curvas de nivel, solución con Schnakenberg para $t = 2$.

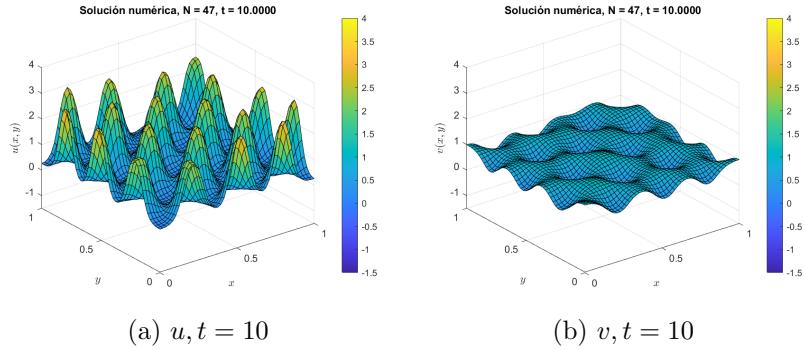


Figura 23: Solución numérica Schnakenberg para $t = 10$.

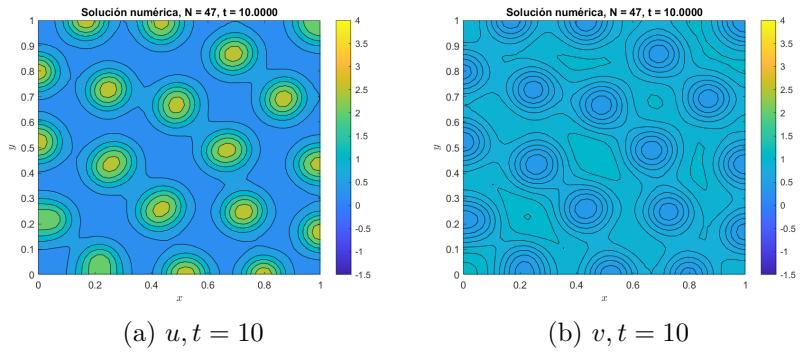


Figura 24: Curvas de nivel, solución con Schnakenberg para $t = 10$.

Mencionar que en este caso volvemos a observar el mismo comportamiento en la generación de patrones que en el caso anterior, ya que en los primeros instantes se generan de manera veloz los patrones, pero, una vez estos han sido definidos, a medida que el tiempo avanza las concentraciones se homogenizan y ya no se dan grandes modificaciones en los patrones.

Por otro lado, volvemos a tener una soluciones coherentes con el modelo planteado, ya que las componentes deben estar en oposición en todos los momentos en los que evaluamos nuestro modelo y observamos que esto sucede en todas nuestras soluciones obtenidas ya que cuando tenemos picos en la componente u encontramos perforaciones, o también denominados valles, en la superficie correspondiente a la componente v .

Por último, tal y como hemos hecho en el anterior apartado, podemos plantear el problema desde una perspectiva biológica. En esta ocasión los patro-

nes en la piel de los animales no serían tan visuales, ya que en las gráficas podemos ver que en las zonas próximas a los picos de la componente u , la concentración del activador crece a mayor velocidad de lo que el inhibidor decrece su concentración, por lo tanto, en esas zonas tendremos una concentración mayor de inhibidor de lo que sería necesario para tener un patrón perfectamente definido y en consecuencia la frontera del patrón es degradada y no está tan bien definida como en el caso anterior con Gierer-Meinhardt.

2.4. Diferencias entre los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt

Si analizamos las diferencias entre los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt, podemos observar que la gran diferencia es el planteamiento en el comportamiento de las componentes de la reacción, donde en Schnakenberg se propone la oposición entre componentes y en Gierer-Meinhardt se propone que ambos estén en la misma fase.

Además, gracias a la gráficas que hemos obtenido, es evidente que los picos que representan los patrones en Gierer-Meinhardt son más puntiagudos que los obtenidos en Schnakenberg, esto hace que en las curvas de nivel se observen los patrones con una mayor intensidad en los resultados obtenidos con Gierer-Meinhardt. Asimismo, en relación a lo anterior, podemos esperar que en el modelo de Gierer-Meinhardt obtengamos unos patrones mejor definidos que con el modelo de Schnakenberg donde los patrones se formarían de una forma más suave.

Por otro lado, si volvemos a observar la Tabla 3 en la que hemos mostrado el número de ejecuciones necesarias para alcanzar el resultado, observamos que el modelo de Schnakenberg necesita de un mayor número de ejecuciones, por lo que podemos concluir que ejecutar el modelo de Gierer-Meinhardt lleva un menor coste computacional. Esto se debe a que la no linealidad de las ecuaciones cinéticas de reacción del modelo de Schnakenberg llevan un mayor coste computacional, por ello, sería interesante hacer un estudio sobre cómo se altera este coste computacional en función de los valores que definimos en las parámetros, con el objetivo de estudiar cómo varía el coste computacional de los modelos según los parámetros establecidos.

Por último, también podemos observar similitudes entre los modelos, ya que ambos modelos logran simular posibles patrones dentro del dominio definido.

2.5. Soluciones numéricas sobre el rectángulo

En la siguiente sección reproduciremos los resultados anteriores modificando el dominio de integración, pasaremos de resolver el problema sobre el cuadrado unidad a resolverlo para el rectángulo de $0,05 \times 1$.

No obstante, al tener un rango de valores tan reducido en una de las dimensiones del dominio sobre los que estamos integrando no estamos permitiendo tener una gran diversidad en el eje correspondiente a la concentración de las componentes, por ello, tomamos la decisión de mostrar la soluciones numéricas únicamente con las curvas de nivel con la función *contourf*.

A continuación, mostramos las soluciones numéricas con los modelos de Gierer-Meinhardt y de Schnakenberg en el dominio definido, aunque en nuestra consideración cabe esperar que se lleguen a resultados parecidos a los obtenidos con el dominio cuadrado.

2.5.1. Soluciones numéricas modelo Gierer-Meinhardt

Comenzamos mostrando las soluciones numéricas correspondientes al modelo Gierer-Meinhardt en los tiempos $t = 0,5, 1, 2, 10$. A diferencia de los resultados obtenidos con el anterior dominio, en el caso actual podemos observar como los patrones tardan más en mostrarse, ya que para $t = 0,5$ no observamos patrones y en $t = 1$ se empiezan a percibir algunas zonas aunque no de manera evidente, no es hasta $t = 2$ donde los patrones se exponen de manera evidente (con $t = 10$ sucede lo comentado en los anteriores resultados, la reacción pierde fuerza y los patrones no sufren grandes modificaciones).

Si que es cierto que el resto de conclusiones que hemos obtenido a la hora de trabajar con el modelo Gierer-Meinhardt sobre el cuadrado unidad siguen siendo las mismas con las siguientes figuras.

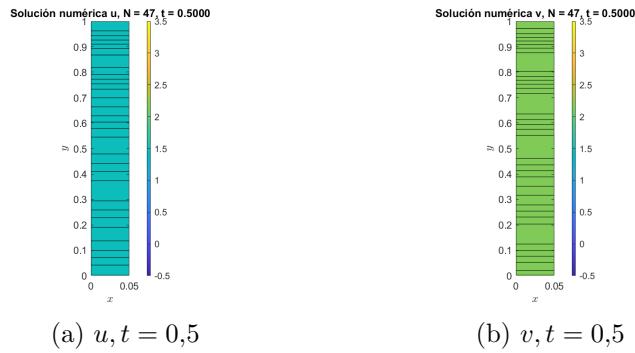


Figura 25: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 0,5$.

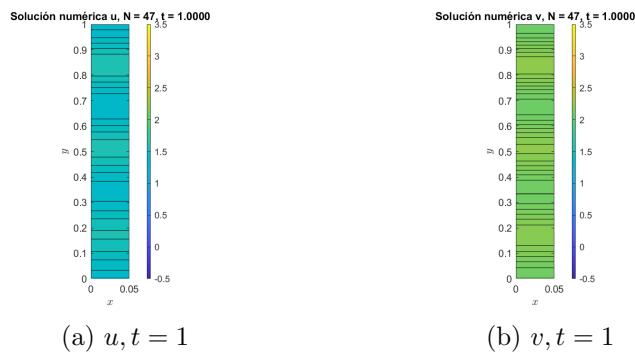


Figura 26: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 1$.

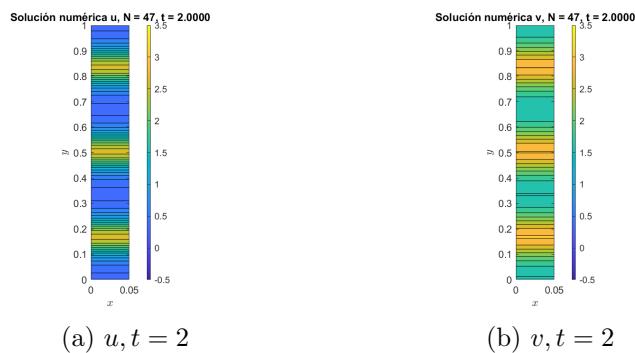


Figura 27: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 2$.

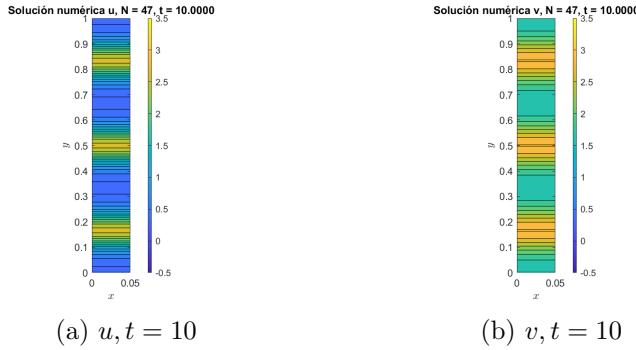


Figura 28: Solución numérica Gierer-Meinhardt para $t = 10$.

2.5.2. Soluciones numéricas modelo Schnakenberg

Ahora, mostramos las soluciones numéricas sobre el rectángulo del modelo de Schnakenberg y volvemos a percibir que los patrones sobre este dominio se expresan tras cumplir un periodo de integración temporal mayor a los resultados que obtenemos al resolver los problemas sobre el cuadrado unidad, tal y como hemos comentado con los resultados de Gierer-Meinhardt sobre el rectángulo.

Por otro lado, el resto de razonamientos obtenidos al analizar los resultados del modelo de Schnakenberg sobre el cuadrado unidad se mantienen en las soluciones actuales.

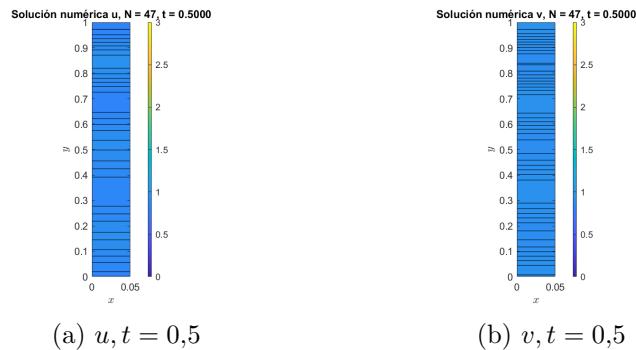


Figura 29: Solución numérica Schnakenberg para $t = 0,5$.

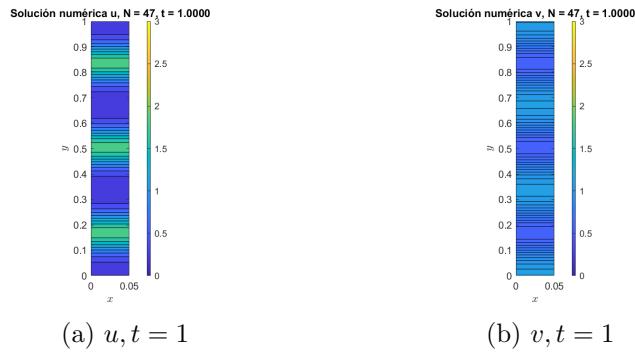


Figura 30: Solución numérica Schnakenberg para $t = 1$.

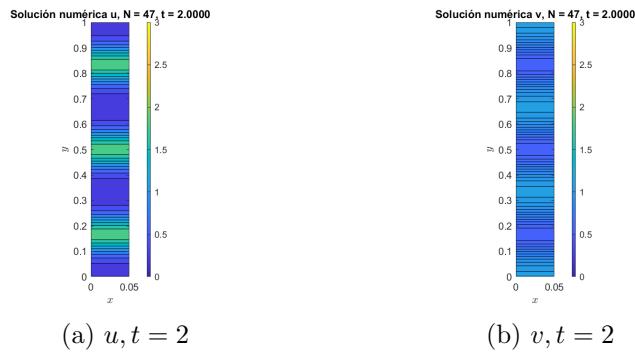


Figura 31: Solución numérica Schnakenberg para $t = 2$.

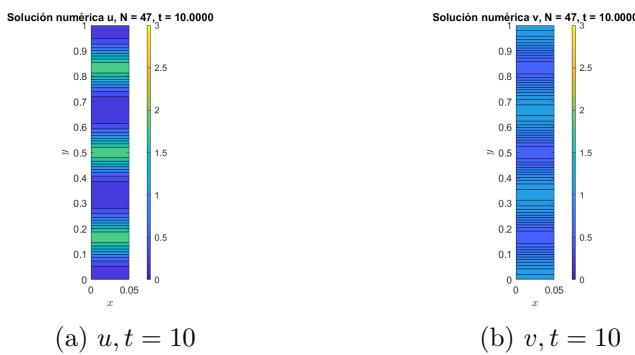


Figura 32: Solución numérica Schnakenberg para $t = 10$.

2.5.3. Diferencias entre los modelos de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt

Volvemos a comentar las diferencias obtenidas entre los dos modelos planteados pero esta vez aplicando el dominio del rectángulo, no obstante, alcanzamos los mismos razonamientos donde la gran diferencia se da en la oposición de las componentes en Schnakenberg debido a que es un modelo activador-inhibidor y que las componentes siempre se mantienen en fase en Gierer-Meinhardt al ser un modelo activador-sustrato.

2.6. Diferencias entre las soluciones numéricas del cuadrado y el rectángulo

En esta sección trataremos las diferencias de trabajar con el dominio cuadrado y el rectángulo. La principal diferencia se basa en que en el rectángulo tenemos una dimensión con tamaño tan reducido que no se llegan a observar picos, debido a que en esa dimensión no dan diferencias de tendencias en la concentración de las componentes, es decir, no se muestran curvas de nivel en ese eje, como sí sucede en el dominio cuadrado donde la amplitud de las dimensiones permite que se creen picos, es decir, se dan curvas de nivel en ambas dimensiones. Esto se debe a que en este tipo de modelos los dominios sobre los que se aplican suelen tener una *longitud crítica*, esto es, si en alguna de las dimensiones no se supera esa longitud mínima el modelo no será capaz de mostrar distintas curvas de nivel en esa dimensión. Gracias a esta diferencia que observamos, podemos interpretar desde una perspectiva biológica que el dominio del cuadrado correspondería a la piel general del guepardo y el dominio del rectángulo a la punta de la cola, donde el dominio sobre el que se da la reacción se deduce que no cumple con las condiciones de longitud de dimensiones y por ello en la cola del leopardo se observa un patrón linear y no el circular que tiene por el resto del cuerpo (Figura 33).

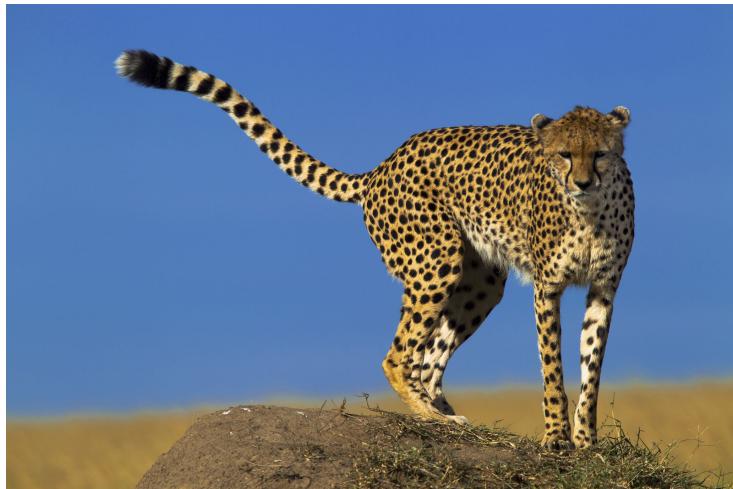


Figura 33: Guepardo (*Acinonyx jubatus*).

Por último, al trabajar con el dominio del rectángulo hemos observado que es necesario aplicar un mayor periodo de integración para que los patrones se expresen en el dominio, esto puede deberse a que en el dominio cuadrado las dimensiones tienen la suficiente amplitud para proyectar los cambios de tendencia de concentración y no requieren de tanto tiempo para mostrar los picos y los patrones, pero, en el rectángulo al solo poder mostrar estos cambios de reacción en la dimensión y probablemente el modelo necesita de un periodo más extenso para mostrar los patrones en el dominio. Además, esta idea se ve reforzada si se analiza desde la perspectiva del término de difusión del problema, ya que, en el rectángulo los términos de difusión no disponen de una gran presencia al tener una dimensión en el dominio que no cumple con la longitud crítica del modelo, por lo que la inestabilidad de Turing se ve afectada y requiere de un periodo de integración más amplio para poder mostrar los patrones en el dominio.

3. Breve comentario sobre los *scripts* utilizados

Por último, en cuanto a los *scripts* utilizados para la primera parte, se hizo una versión que permite resolver cada variante de una en una y una segunda versión que ejecuta todas y guarda los resultados.

Del mismo modo, para resolver la segunda sección del documento hemos utilizado el fichero *turingC1C2.m*, el cual genera una carpeta con los resul-

tados según el modelo y el dominio que se ha utilizado. Además, de manera complementaria hemos añadido la resolución de los modelos con el método numérico *ode45* en el *script* (el apartado del rectángulo y el método *ode45* ha sido comentada por problemas de coste computacional), a pesar de que las conclusiones han sido obtenidas a través del método *ode15s*. Gracias a esto hemos contrastado la eficiencia de ambos modelos y hemos resuelto la segunda cuestión del proyecto.