
ANÁLISIS NUMÉRICO

Segundo Cuatrimestre 2018

TP N° 2 - A: Patrones de Turing

1 El problema:

Considerar el siguiente sistema de reacción-difusión:

$$\begin{aligned} u_t(x, t) &= \Delta_x u(x, t) + \gamma F(u, v) \\ v_t(x, t) &= d\Delta_x v(x, t) + \gamma G(u, v) \end{aligned} \quad x \in \Omega, \quad t \in [0, T] \quad (1)$$

u y v pueden interpretarse como las concentraciones de dos sustancias químicas difundiéndose y reaccionando entre sí. La reacción viene dada por los términos de acople: $F(u, v)$ y $G(u, v)$.

Las condiciones de contorno naturales para este problema son:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial \eta} \right|_{\partial \Omega} = 0, \quad \left. \frac{\partial v}{\partial \eta} \right|_{\partial \Omega} = 0$$

De este modo se garantiza que no haya flujo saliente ni entrante de ninguna de las dos sustancias.

Alan Turing estudió este tipo de problemas en sus trabajos sobre matemática biológica, y observó que bajo determinadas condiciones tienden a formarse patrones. Es decir: u y v se modifican con el paso del tiempo pero tienden a un equilibrio en el cual la sustancia de concentración u predomina en ciertas regiones y la correspondiente a v , en las regiones complementarias. Estos patrones dependen de las reacciones F y G , del parámetro d y de las concentraciones iniciales de u y v .

Este trabajo consiste en implementar un algoritmo de elementos finitos para resolver este problema, con el objetivo de observar qué patrones se forman. Tomaremos $\Omega = B(0, 1)$

2 Reacciones

En particular, se quiere estudiar un caso particular de la llamada reacción de Schnackenberg, dado por:

$$\begin{aligned} F(u, v) &= a - u + u^2 v \\ G(u, v) &= b - u^2 v \end{aligned}$$

Un ejemplo interesante es tomar $a = 0.1$, $b = 1$, $d = 10$ $\gamma = 200$

3 Formulación Discreta

Dada una triangulación $\mathcal{T}_h$ de Ω , considerar el espacio V_h de funciones continuas y lineales en cada triángulo. Llamemos $\{\phi_i\}_i$ a la base nodal de V_h . La discretización de la formulación débil del problema conduce a la necesidad de calcular la matriz de masa A y de rigidez B , dadas por:

$$A_{i,j} = \int_{\Omega} \phi_i \phi_j \quad B_{i,j} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \nabla \phi_j$$

Con esta notación el problema discreto es:

$$\begin{aligned} (A + dtB)U^{n+1} &= AU^n + dt\gamma A[a - U^n + (U^n)^2 V^n] \\ (A + d \cdot dtB)V^{n+1} &= AV^n + dt\gamma A[b - (U^n)^2 V^n] \end{aligned}$$

donde dt es el paso temporal y U^n, V^n son los coeficientes de u_h y v_h a tiempo n .

Es conveniente hacer un programa auxiliar que, dados los datos de la triangulación, calcule las matrices A y B . El algoritmo principal deberá llamar a este programa y luego ensamblar las matrices del siguiente modo:

$$R = \begin{bmatrix} A + dtB & 0 \\ 0 & A + d \cdot dtB \end{bmatrix}$$

Luego deberá implementarse un ciclo temporal que tome:

$$q = \begin{bmatrix} Au(:,n) + dt\gamma A(a - u(:,n) + (u(:,n))^2 v(:,n)) \\ Av(:,n) + dt\gamma A(b - (u(:,n))^2 v(:,n)) \end{bmatrix}$$

Y resuelva:

$$R \cdot \begin{bmatrix} u(:,n+1) \\ v(:,n+1) \end{bmatrix} = q$$

Este enfoque es muy sensible al tamaño del paso temporal. Si luego de algunas iteraciones los valores de u y v dan NaN, la solución será seguramente achicar el paso temporal.

4 Gráficos

Es conveniente mirar las funciones u y v como si fueran discretas. Para ello puede tomarse $\bar{u}$ el promedio de u y graficar la función que vale 1 cuando $u > \bar{u}$ y 0 en caso contrario. Para simplificar el dibujo es conveniente agregar la sentencia: `view([0,-90])` que muestra el gráfico desde arriba, convirtiéndolo en un gráfico plano, a dos colores.

5 Datos iniciales

Algunas distribuciones iniciales que pueden resultar de interés:

$$\begin{aligned} u(x,y,0) &= \begin{cases} 1 & \text{si } x < y \\ 0 & \text{si no} \end{cases} & u(x,y,0) &= \begin{cases} 1 & \text{si } x < 0 \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \\ u(x,y,0) &= \begin{cases} 1 & \text{si } \frac{1}{4} < x < \frac{3}{4} \\ 0 & \text{si no} \end{cases} & u(x,y,0) &= \begin{cases} 1 & \text{si } x^2 + y^2 < \frac{1}{4} \\ 0 & \text{si no} \end{cases} \end{aligned}$$

En todos los casos, $v(x,y,0) = 1 - u(x,y,0)$.