

# Experimentos numéricos sobre ecuaciones de reacción convección difusión con divergencia nula del campo de velocidad

Diego A. Garzón-Alvarado, Carlos H. Galeano, Juan M. Mantilla

Recibido: Diciembre 2009, Aceptado: Mayo 2010  
©Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, España 2010

**Resumen** El presente artículo estudia el efecto de incorporar el término de transporte en las ecuaciones de reacción-difusión de dominio fijo, a través de campos de velocidad toroidal. Se estudia específicamente la formación de patrones de Turing en problemas de difusión-advección-reacción, considerando los modelos de cinética de reacción de Schnackenberg y de glucólisis. Se analizan cuatro casos que se solucionan numéricamente empleando la técnica de elementos finitos. Se encuentra que, para los modelos de glucólisis, el efecto advectivo modifica totalmente la forma de los patrones de Turing obtenidos con difusión-reacción; mientras que para los problemas de Schnackenberg, los patrones originales se distorsionan levemente, haciéndolos rotar en el sentido del campo de velocidades. Además, se determinó, en cada caso, la velocidad límite para la cual el efecto advectivo supera el difusivo y se elimina la formación de patrones. Por otro lado para valores muy bajos en el campo de velocidad, el efecto advectivo no es considerable y no hay modificación en los patrones de Turing originales.

## NUMERICAL EXPERIMENTS ON REACTION ADVECTION DIFFUSIÓN WITH NULL DIVERGENTE OF VELOCITY FIELD

**Summary** This article studies the effect of the inclusion of the transport term in the reaction-diffusion equations, through toroidal velocity fields. The formation of Turing patterns in diffusion-advection-reaction problems is studied specifically, considering the Schnackenberg reaction kinetics and glycolysis models. Four cases are analyzed and solved numerically using finite elements. It is found that, for the glycolysis models, the advective effect totally modifies the form of the obtained Turing patterns with diffusion-reaction; whereas for the problems of Schnackenberg, the original patterns distort themselves slightly, making them to rotate in the direction of the velocity field. Also this work was able to determine, that for high values of velocity, the advective effect surpasses the diffusive one and the instability by diffusion is eliminated. On the other hand for very low values in the velocity field, the advective effect is not considerable and there is no modification in the original Turing pattern.

### 1. Introducción

Muchos problemas físicos pueden ser modelados analizando el balance de tres fenómenos: la *difusión*, la *advección* y la *reacción* [1]. El primero se define como la dispersión de las especies involucradas en el proceso a lo largo del dominio físico del problema. La *advección* se relaciona con el transporte de especies debido a la presencia de campos de velocidad. Y por último, la *reacción* es el proceso de interacción mediante la cual se generan o se consumen las especies involucradas en el fenómeno.

---

Diego A. Garzón-Alvarado,  
Carlos H. Galeano, Juan M. Mantilla  
Universidad Nacional de Colombia  
Kr. 30 No. 45-03  
Edificio 453 Oficina 401  
Bogotá, Colombia  
Tel.: 57 1 316 5320; Fax: 57 1 165333  
e-mail: dagarzona@bt.unal.edu.co

La ecuación diferencial de difusión-advección-reacción involucra estos términos, tal como se expresa en (1) para un fenómeno con una sola especie [1]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot k \nabla u + a \nabla u + f(u), \quad (1)$$

donde  $u$  es la concentración de la especie estudiada,  $a$  es la velocidad asociada al fenómeno advectivo y  $f(u)$  la función que define el proceso de reacción. Esta ecuación, y más comúnmente sistemas de ecuaciones diferenciales, han sido empleados para el estudio de problemas en campos como la dinámica de fluidos [2], transferencia de calor [3–5], física de semiconductores [6], ingeniería de materiales [7], química [8], biología [9–12], dinámica de poblaciones [13–15], astrofísica [16], ingeniería biomédica [17–19] y matemáticas financieras entre otros.

Un fenómeno particular que se rige por los procesos de reacción y difusión, se caracteriza por la presencia de distribuciones espacio-temporales de las especies involucradas, esta distribución se denomina comúnmente *patrón*. Turing [20] define las condiciones para las cuales un proceso reactivo en equilibrio puede ser inestabilizado por la presencia de un término difusivo, generándose así unos patrones espaciales heterogéneos, denominados *inestabilidades por difusión* o *inestabilidades de Turing*.

De acuerdo con Turing [20], Madzvamuse [11,12,17,21–25,27,28] y Garzón-Alvarado [29], han propuesto simulaciones numéricas bajo condiciones de crecimiento de dominio y geometrías particulares que modifican los patrones de distribución de las concentraciones, respectivamente. Dichos artículos tienen en común que el modelo de ecuaciones diferenciales es un sistema de reacción-difusión, de dos especies, como el definido en (2),

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot \nabla u + \gamma \cdot f(u, v) \quad (2)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d \nabla \cdot \nabla v + \gamma \cdot g(u, v)$$

modelo que presentará inestabilidad espacial en los patrones de concentración de las especies  $u$  y  $v$ , si se cumplen cada una de las condiciones enunciadas en (3) [20,21,26].

$$\begin{aligned} f_u g_v - f_v g_u &> 0 \\ f_u + g_v &< 0 \\ df_u + g_v &< 0 \\ (df_u + g_v)^2 &> 4d(f_u g_v - f_v g_u) \end{aligned} \quad (3)$$

Donde  $f_u$  y  $g_u$  indican las derivadas de las funciones de reacción con respecto a las variables de concentración, por ejemplo  $f_u = \frac{\partial f}{\partial u}$ . En las expresiones (2) y (3)  $d = \frac{D^u}{D^v}$  es la relación entre los coeficientes de difusión de las dos especies  $D^u$  y  $D^v$ , en tanto que  $\gamma$  es un coeficiente de adimensionalización asociado con los procesos reactivos  $f$  y  $g$ .

El trabajo de Turing, permitió simular la formación de patrones en diversos procesos físicos y químicos, tales como la formación las manchas en la piel de algunos animales [10–12,30–33], la formación de hueso, tejidos y tumores [17–19,34], la distribución de poblaciones animales [13,14], entre otras muchas aplicaciones.

La dinámica de la formación de estos patrones, modelada a través de las ecuaciones de reacción-difusión, es estudiada normalmente empleando diversas técnicas numéricas. Estas soluciones de naturaleza numérica se hacen necesarias y útiles, debido a las formas geométricas complejas de los dominios que comúnmente se tratan, así como también a las no linealidades que se introducen en las ecuaciones diferenciales dentro de los términos de cinética de reacción clásicos, tales como modelos de reacción de Gierer–Meinhardt, Thomas, Schnakenberg, Gray & Scott, entre otros [11]. Se han implementado soluciones al problema de reacción-difusión empleando diferente técnicas numéricas, tales como: diferencias finitas, como por ejemplo en los trabajos de Murray [31], Kondo [32], Barrio [35] y Crampin [36]; elementos finitos, como en Chaplain [34], Sekimura [22] y Madzvamuse [11,23–25]; y elementos espectrales, como en Kassam [37]. Muchos de los estudios inicialmente desarrollados en el tema de formación de patrones de Turing se han dedicado al trabajo con mallas fijas. No obstante dado que muchos de los problemas físicos simulados empleando las ecuaciones de difusión-reacción implican crecimiento, algunos autores como Madzvamuse [11], han estudiado la incidencia del crecimiento de malla en la formación de patrones de difusión. En su trabajo de 2003, Madzvamuse [11], plantea un algoritmo para la solución de problemas bidimensionales de difusión-reacción empleando un dominio Euleriano continuamente creciente. Por ejemplo, en [23] se presenta una aplicación de una técnica de elementos finitos con crecimiento de malla a problemas biológicos. En 2007 Madzvamuse [27] presenta, mediante un enfoque Lagrangiano, el efecto de una malla estructurada creciente en la formación de patrones de Turing, analizando dos técnicas específicas: un método de diferencias finitas implícito y un planteamiento de elementos finitos con una discretización temporal de segundo orden semi-implícita (2-SBDF). Este último trabajo se complementa con [28], en donde se comparan los resultados de la técnica 2-SBDF, con una implementación en elementos finitos que linealiza los términos de reacción.

Es de resaltar que, en los trabajos anteriormente mencionados, los cuales incorporan el efecto del crecimiento del dominio en la formación de patrones de Turing, se introduce un término advectivo en la ecuación diferencial. No obstante, en muchos de ellos el papel de este fenómeno de transporte no es evidente, debi-

do a que el enfoque Lagrangiano empleado elimina este término de la ecuación diferencial.

El presente artículo se enfoca en el estudio de la formación de patrones de Turing, sin crecimiento de malla, incluyendo términos advectivos con campos de velocidad toroidal. Se implementó en lenguaje Fortran, una solución numérica de la ecuación de reacción-advención-difusión empleando elementos finitos, con una discretización temporal Backward-Euler. Los resultados alcanzados muestran no solo la influencia de los términos convectivos analizados con el tipo de patrón formado, sino la relación entre la magnitud del término de advención y la aparición o no de las inestabilidades por difusión. Se presentan cinco casos de estudios, tres de estos incorporan términos de reacción de Schnackenberg, mientras que los dos casos restantes se analizaron tomando un modelo de reacción de glucólisis. Los resultados presentados muestran que los modelos con reacción de glucólisis son mucho más sensibles a la presencia de campos advectivos, pues aún para pequeños valores de velocidad se reportan alteraciones en el patrón de Turing resultante. Por el contrario, los modelos con reacción de Schnackenberg, muestran variaciones en los patrones de Turing que son proporcionales a la magnitud del campo de velocidad toroidal empleado, de modo que para pequeños campos las variaciones en los patrones no son considerables.

La estructura del artículo presentado consta de cuatro secciones: en la primera parte del texto se plantea la formulación de la ecuación de reacción-convección-difusión, en tanto que la solución numérica de la misma se presenta en la segunda sección, a través de una formulación por elementos finitos. En una tercera sección se definen los modelos de cinética de reacción de Schnackenberg y glucólisis, mientras que en la cuarta sección se presentan los resultados de diferentes experimentos numéricos desarrollados para dos especies, incorporando el término de transporte con campos de velocidad toroidales y los términos reactivos anteriormente mencionados. En la parte final del artículo se presentan las conclusiones.

## 2. Formulación por elementos finitos de la solución de la ecuación de reacción-advención-difusión

Este artículo se enfocará en el estudio del sistema de ecuaciones diferenciales de reacción-advención-difusión (4):

$$\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{a} \cdot \nabla \underline{u} - \nabla \cdot D(\nabla \underline{u}) - \underline{f}(\underline{u}) = 0 \quad (4)$$

en donde  $\underline{u} = [u, v]^T$  es el vector de concentración de las especies  $u$  y  $v$ ,  $\underline{a} = [a_x, a_y]^T$  es el vector de velocidades asociado con el término de transportes, en tanto que  $\underline{f}(\underline{u}) = [f(u, v), g(u, v)]^T$  son las funciones que definen los modelos de reacción entre las especies.

Aplicando el método de los residuos ponderados a la expresión (4) se obtiene la ecuación (5):

$$\int_{\Omega} W \cdot \left( \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{a} \cdot \nabla \underline{u} - \nabla \cdot D(\nabla \underline{u}) - \underline{f} \right) d\Omega = 0 \quad (5)$$

en donde  $W$  es una función de ponderación. Ahora, operando cada uno de los términos por separado e integrando por partes se obtiene la expresión (6):

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} W \cdot \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} W \cdot (\underline{a} \cdot \nabla \underline{u}) d\Omega + \\ & + \int_{\Omega} \nabla W \cdot (D \nabla \underline{u}) d\Omega - \int_{\Omega} W \cdot \underline{f} d\Omega \\ & - \int_{\Gamma} W \cdot D \nabla \underline{u} d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Empleando el método de Galerkin y aproximaciones polinomiales discretas para cada elemento como en (7), la ecuación de residuos ponderados puede escribirse para cada elemento como se muestra en (8) [38].

$$\underline{u}^e = \sum_m N_m u_m \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} W_l \cdot N_m \frac{\partial u_m}{\partial t} d\Omega^e + \\ & + \left( \int_{\Omega^e} W_l \cdot (\underline{a} \cdot \nabla N_m) d\Omega^e + \int_{\Omega^e} \nabla W_l \cdot (D \nabla N_m) d\Omega^e \right) u_m \\ & - \int_{\Omega^e} W_l \cdot \underline{f} d\Omega^e - \int_{\Gamma^e} W_l \cdot J d\Gamma^e = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

Desde el punto de vista temporal, la derivada del primer término de la expresión (8) se puede aproximar mediante un planteamiento totalmente implícito *Backward-Euler*, tal como se muestra en (9).

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega^e} W_l \cdot N_m d\Omega^e \left( \frac{u_m^i - u_m^{i-1}}{\Delta t} \right) + \\ & \left( \int_{\Omega^e} W_l \cdot (\underline{a} \cdot \nabla N_m) d\Omega^e + \int_{\Omega^e} \nabla W_l \cdot (D \nabla N_m) d\Omega^e \right) u_m^i \\ & - \int_{\Omega^e} W_l \cdot \underline{f} d\Omega^e - \int_{\Gamma^e} W_l \cdot J d\Gamma^e = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Donde  $u_m^i$  y  $u_m^{i-1}$  son los vectores de valores nodales para el instante de tiempo  $i$  e  $i-1$  respectivamente, en tanto que  $\Delta t$  es el intervalo de tiempo.

En forma simplificada, la expresión (9) se puede escribir como (10):

$$\frac{u_m^i - u_m^{i-1}}{\Delta t} \underline{M} + (\underline{C} + \underline{K}) \cdot u_m^i = \underline{f}_l \quad (10)$$

donde

$$\underline{M} = \int_{\Omega^e} W_l \cdot N_m d\Omega^e \quad (11)$$

$$\underline{C} = \int_{\Omega^e} W_l \cdot (\underline{a} \cdot \nabla N_m) d\Omega^e \quad (12)$$

$$\underline{K} = \int_{\Omega^e} \nabla W_l \cdot (D \nabla N_m) d\Omega^e \quad (13)$$

$$\underline{f}_l = \int_{\Omega^e} W_l \cdot f d\Omega^e + \int_{\Gamma^e} W_l \cdot J d\Gamma^e \quad (14)$$

### 3. Modelo de reacción de Schnakenberg

Schnakenberg [39] consideró un conjunto de dos especies en una reacción trimolecular que admite reacciones periódicas. Este mecanismo químico ha sido utilizado por un gran número de autores para explicar diversos fenómenos naturales [1,25,30,40,41,43] Los términos de reacción de Schnakenberg pueden ser introducidos en un sistema de reacción-advección-difusión, que en su forma adimensional se muestra en la expresión (15)[39]

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma(\alpha - u + u^2 v) + \nabla \cdot \nabla u - \underline{a} \cdot \nabla u \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \gamma(\beta - u^2 v) + \nabla \cdot \underline{d} \nabla v - \underline{a} \cdot \nabla v \end{aligned} \quad (15)$$

en donde las constantes positivas  $\alpha$  y  $\beta$  representan la producción de  $u$  y  $v$  respectivamente, mientras que el término de catálisis no lineal  $u^2 v$  define la activación de  $u$  y el consumo de  $v$ . La constante  $d$  define la relación entre los coeficientes de difusión de cada especie.

Este modelo resulta especialmente interesante debido a que su empleo en las ecuaciones de reacción-difusión permite la generación de patrones particulares generados por inestabilidades de Turing. En este proceso de formación de patrones, las pequeñas perturbaciones iniciales se amplifican y se propagan, lo que lleva a la formación de manchas que avanzan lentamente e interactúan entre sí [42]. Debido a lo anterior, el modelo del Schnakenberg es ampliamente empleado para la simulación de regeneración ósea, como en [43] en donde las especies estudiadas son las hormonas PTHrP (Hormona Paratiroidea Péptida Relacionada) y Ihh (Hormona Indian Hedgehog).

### 4. Modelo de reacción de glucólisis

La glucólisis o glicólisis es el proceso de síntesis (oxidación) 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, unidad de intercambio metabólico en el organismo vivo. Este modelo de reacción, caracterizado porque las dos especies relacionadas (piruvato y ATP), se emplea comúnmente para modelar los procesos de coagulación y morfogénesis [44],[45] Las ecuaciones de reacción-advección-difusión adimensionales para el modelo de glucólisis se muestran en (16).

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \delta - ku - uv^2 + \nabla \cdot \nabla u - \underline{a} \cdot \nabla u \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= ku + uv^2 - v + \nabla \cdot \underline{d} \nabla v - \underline{a} \cdot \nabla v \end{aligned} \quad (16)$$

### 5. Caso 1: Modelo de difusión, advección y reacción de Schnackenberg #1

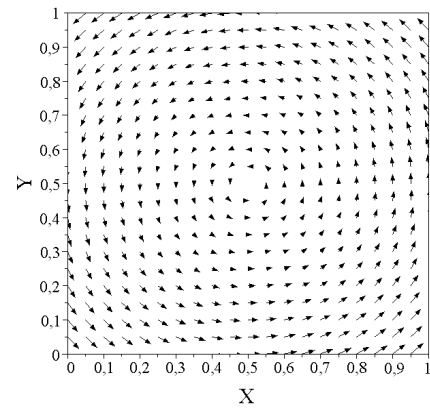
Para este modelo se definió un dominio cuadrado en coordenadas adimensionales una constante de difusión igual a  $d = 8,6676$ , así como unas constantes de reacción de Schnackenberg definidas por los valores:

$$\gamma = 230,82 \quad \alpha = 0,1 \quad \beta = 0,9 \quad (17)$$

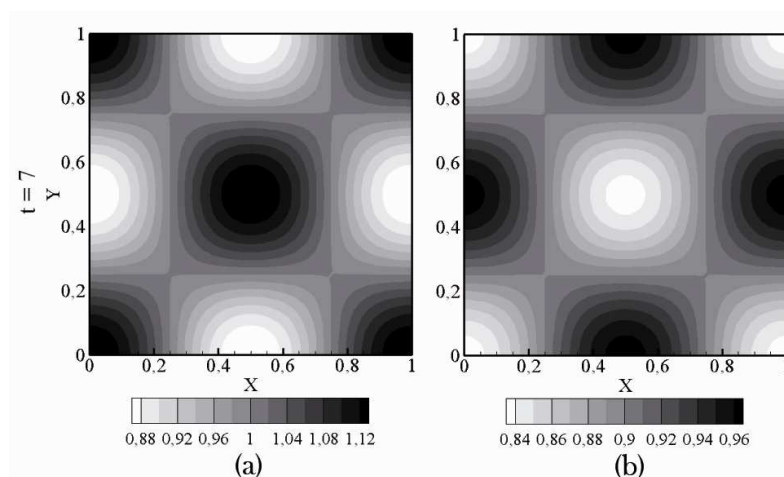
Desde el punto de vista advectivo el campo de velocidades empleado para este problema esta definido por las funciones del vector  $\underline{a}$  de la ecuación (18) e ilustrado en la Figura 1

$$\underline{a} = [a_x \ a_y] = [-0,6(y-0,5) \ 0,6(x-0,5)] \quad (18)$$

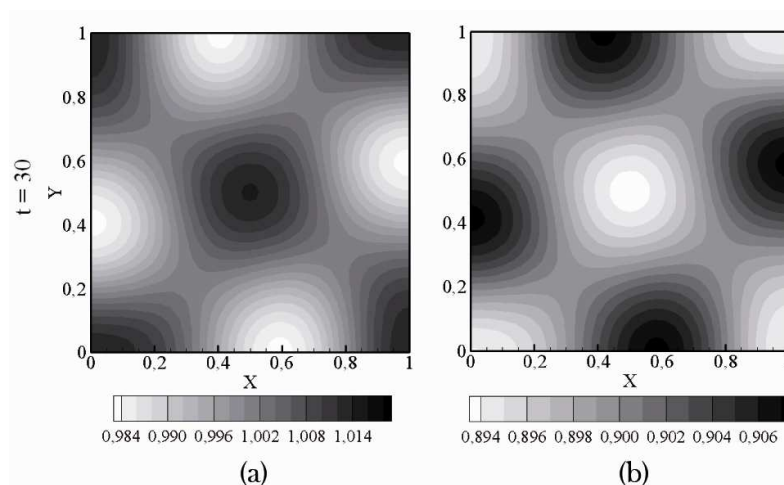
La simulación por elementos finitos realizada para este problema, utilizó una malla estructurada de 2500 elementos (2601 nodos) cuadrados de primer orden y



**Figura 1.** Campo de velocidad empleado para el Caso 1



**Figura 2.** Distribución espacio-temporal de la concentración de los reactivos  $u$  (a) y  $v$  (b) obtenida para el Caso 1 empleando un campo de velocidad nulo (Referencia)



**Figura 3.** Distribución espacio-temporal de la concentración de los reactivos  $u$  (a) y  $v$  (b) obtenida para el Caso 1 empleando el campo de velocidad definido en (18)

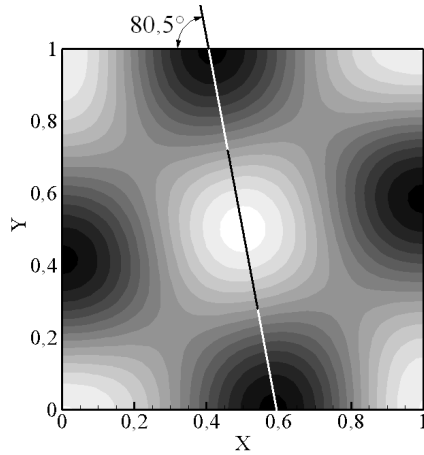
un tiempo de simulación igual a 30, con incrementos de 001 unidades adimensionales. La condición inicial se tomo como una variación aleatoria del  $\pm 10\%$  de la concentración de cada una de las especies alrededor del caso estable sin difusión.

### 5.1. Resultados obtenidos para el Caso 1

En la Figura 2 se muestra los resultados de referencia obtenidos para este caso empleando un campo de velocidad  $\underline{u}$  nulo; mientras que en la Figura 3 se grafican los resultados alcanzados empleando el campo de velocidad definido en (18). Para el caso de referencia,

se observa la formación de un patrón de Turing semejante a un tablero de ajedrez cuyas casillas se encuentran alineadas con los bordes del dominio. Debido a los parámetros y la verificación de las condiciones de estabilidad dadas en (3), tal como se define en [1,21], el tipo de patrón espacial, de estado estable en términos temporales, que se presenta está determinado por el número de onda (2,2) [23,29], como se ve en la Figura 2. Además se observa que el tiempo de estabilización es de aproximadamente 7 unidades adimensionales de tiempo. Por otro lado, en los resultados alcanzados adicionando el efecto de advección, se observa la formación de un patrón similar al anterior, aunque ligeramente distorsionado (rotado) en la dirección de giro del campo de velocidad. Esta distorsión, medida como la rotación de los puntos de más alta concentración de especie la

$v$ , es cercana a  $9,5^\circ$  (ver Figura 4) Sin embargo este ángulo cambia para diferentes intensidades de rotación del campo de velocidad toroidal, siendo  $9,5^\circ$  el máximo ángulo de distorsión, pues para magnitudes de velocidad de rotación superiores a  $0,6$  la componente advectiva supera los efectos difusivos y no se presenta formación de un patrón de Turing. Se encuentra adicionalmente que el fenómeno de transporte introducido con el campo de velocidad retarda el tiempo de estabilización del problema, hasta un tiempo cercano a las 30 unidades y no modifica los niveles de concentración de las dos especies  $u$  y  $v$ .



**Figura 4.** Rotación del patrón de Turing obtenida para el Caso 1

## 6. Caso 2: Modelo de difusión, advección y reacción de Schanckenberg #2

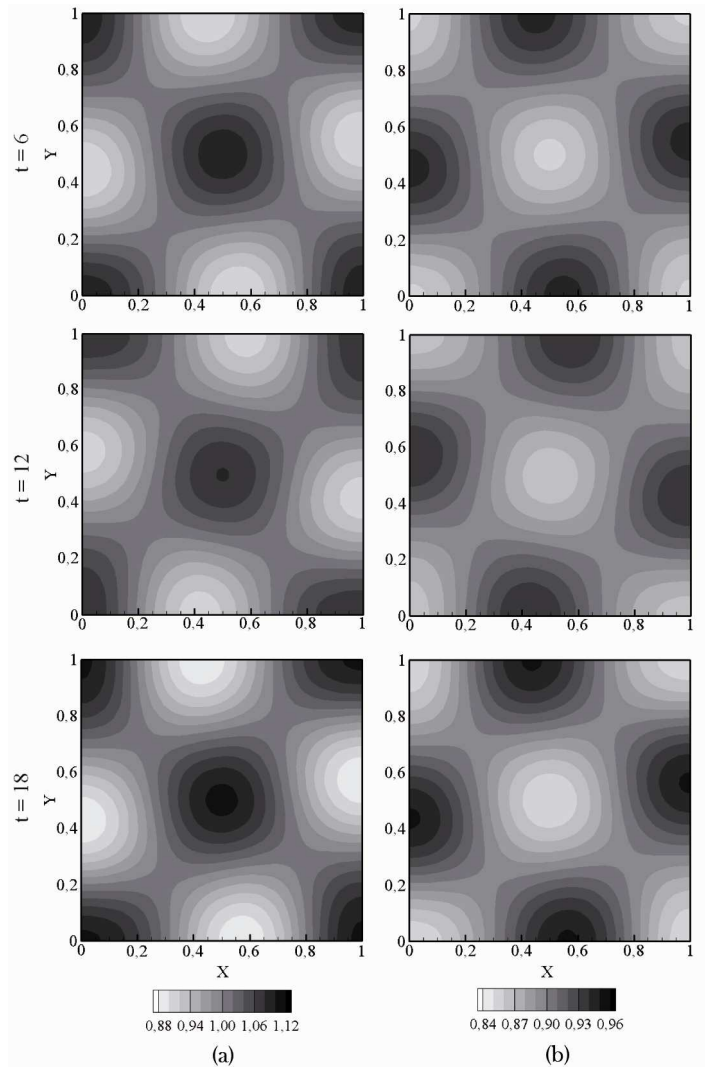
Para la solución numérica de este caso se empleó la misma malla utilizada en el Caso 1, así como los mismos valores para las constantes definidas en (17), y se consideró un campo de velocidad toroidal oscilatorio, el cual se define en (19). En cuanto a la condición inicial, se empleó la solución del caso estable del problema reactivo.

$$\underline{a} = [a_x a_y] = \left[ -0,6(y - 0,5) \sin\left(\frac{2\pi t}{15}\right) \quad 0,6(x - 0,5) \sin\left(\frac{2\pi t}{15}\right) \right] \quad (19)$$

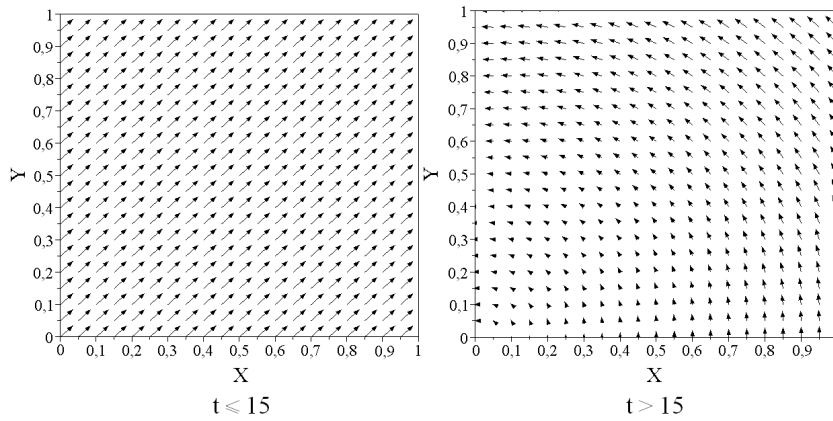
### 6.1. Resultados obtenidos para el Caso 2

La solución obtenida, mostrada en la Figura 5, presenta formación de patrones de Turing en forma de

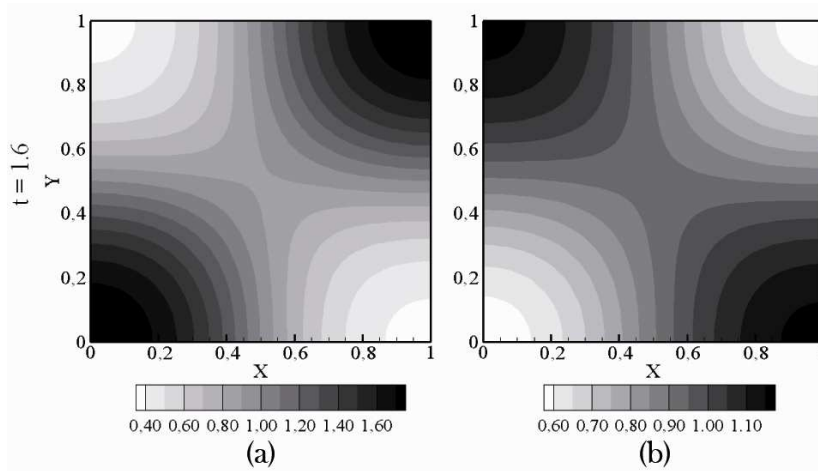
tablero de ajedrez, el cual se ve distorsionado por el sentido de giro del campo de velocidad toroidal, obteniéndose un patrón oscilatorio alrededor de la solución de referencia (no advectiva). Dado que la amplitud de la velocidad empleada fue la misma que para el Caso 1, la amplitud de oscilación del patrón resulta ser cercana también a  $9,5^\circ$ . No se encontró, que por efecto de este campo de velocidad oscilatorio, los niveles de concentración de alguna de las dos especies cambien con respecto al problema de referencia. Es importante notar que la oscilación permite la continua re-construcción de los patrones en  $\pm 9,5^\circ$ , sin generar cambios apreciables en la apariencia de los mismos en comparación con el patrón referente.



**Figura 5.** Distribución espacio-temporal de la concentración de los reactivos  $u$  (a) y  $v$  (b) obtenida para el Caso 2



**Figura 6.** Campo de velocidad empleado para el Caso 3



**Figura 7.** Distribución espacio-temporal de la concentración de los reactivos  $u$  (a) y  $v$  (b) obtenida para el Caso 3 empleando un campo de velocidad nulo (Referencia)

### 7. Caso 3: Modelo de difusión, advección y reacción de Schanckenberg #3

Para este modelo se definió un dominio cuadrado en coordenadas adimensionales, discretizado con 2500 elementos cuadriláteros de primer orden. La constante de difusión  $d$  y las constantes de reacción de Schnackenberg son definidas en (20).

$$d = 11,5776 \quad \gamma = 70,6 \quad \alpha = 0,1 \quad \beta = 0,9 \quad (20)$$

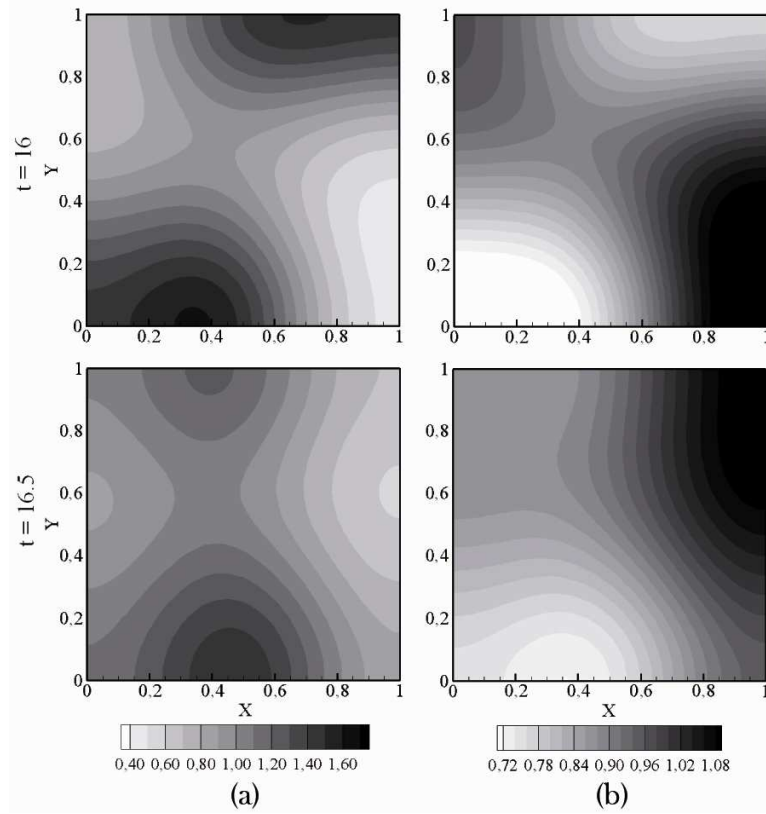
Los anteriores datos predicen la formación de un patrón de estado temporal estable e inestable espacial del tipo (1,1), tal como se referencia en [1,21]. Al igual que en el Caso 2 se empleó un campo de velocidad toroidal variable en el tiempo, el cual se define en (21) y se ilustra en la Figura 6

$$a_x = \begin{cases} 0,001 & t \leq 15 \\ -1,8y & t > 15 \end{cases} \quad a_y = \begin{cases} 0,001 & t \leq 15 \\ 1,8x & t > 15 \end{cases} \quad (21)$$

La condición inicial se tomo como una variación aleatoria del  $\pm 10\%$  de la concentración de cada una de las especies para el caso estable sin difusión. El tiempo de simulación es de 30 unidades, con incrementos iguales a 001.

#### 7.1. Resultados obtenidos para el Caso 3

En la Figura 7 se muestran los resultados de referencia obtenidos para este caso empleando un campo de velocidad nulo, es decir, para un fenómeno difusivo-reactivo. Se observa un corto tiempo de estabilización cercano a 16 unidades de tiempo y un patrón caracterizado por la formación de cuatro zonas o cuadrantes con concentraciones máximas y mínimas alternadas. En la Figura 8 se muestran los resultados de la simulación del problema difusivo-advectivo-reactivo. Se observa que para el campo de velocidad inicial ( $t \leq 15$ ) la distribución de concentraciones de las dos especies evoluciona hasta estabilizar y formar un patrón idénti-



**Figura 8.** Distribución espacio-temporal de la concentración de los reactivos  $u$  (a) y  $v$  (b) obtenida para el Caso 3 empleando el campo de velocidad definido en (21)

co al encontrado en el caso de referencia (problema no advectivo) Esta similitud en los dos patrones se explica por la pequeña magnitud de la velocidad empleada en esta fase de la simulación. Sin embargo, para tiempos superiores a 15 unidades, cambia radicalmente el campo de velocidad y se presenta una modificación en el patrón obtenido hasta el momento. Efectivamente, después de 15 unidades de tiempo el patrón comienza un periodo de evolución, el cual dura aproximadamente 2 unidades adimensionales de tiempo, al final del cual se obtiene una nueva distribución, que es claramente asociable a la dirección de giro del campo toroidal de velocidad. Esta distribución de concentraciones se asemeja al patrón obtenido en la Figura 7 con una rotación de  $90^\circ$  en la dirección de giro del campo de velocidad (sentido antihorario).

Nótese que dado que el campo de velocidad toroidal no gira entorno al centro del dominio ( $x = 0, 5y = 0, 5$ ), el patrón final no conserva las características simétricas que exhibía en el problema de referencia

En este ejemplo se observa como para pequeños valores en el campo de velocidad, el efecto advectivo no logra afectar considerablemente la componente difusiva-reactiva, no así para valores de velocidad intermedios, en donde el transporte de las especies logra modificar

los patrones de Turing originales, cambiando de manera importante la distribución de las concentraciones de las especies. Para velocidades altas, el efecto advectivo supera el difusivo y no se presenta formación de patrones, es decir, se elimina la inestabilidad difusiva en la reacción de las especies.

#### 8. Caso 4: Modelo de difusión, advección y reacción de glucólisis – primer caso

En este caso se analiza el efecto del fenómeno advectivo en la formación de patrones de Turing, dentro de un problema con un mecanismo de reacción de glucólisis. El dominio del problema se define como un cuadrado de longitud  $\pi$ , discretizado con 2500 elementos cuadriláteros lineales. El campo de velocidad toroidal empleado, con centro en  $(x = \frac{\pi}{2}, y = \frac{\pi}{2})$ , se encuentra descrito por medio de la expresión (22) (ver Figura 9), en tanto que las constantes de reacción se definen en (23)

$$\underline{a} = [a_x \ a_y] = [-\kappa(y - \frac{\pi}{2}) \ \kappa(x - \frac{\pi}{2})] \quad (22)$$

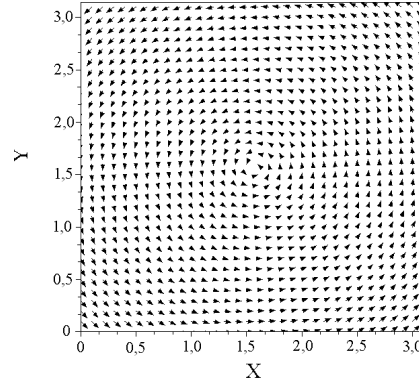
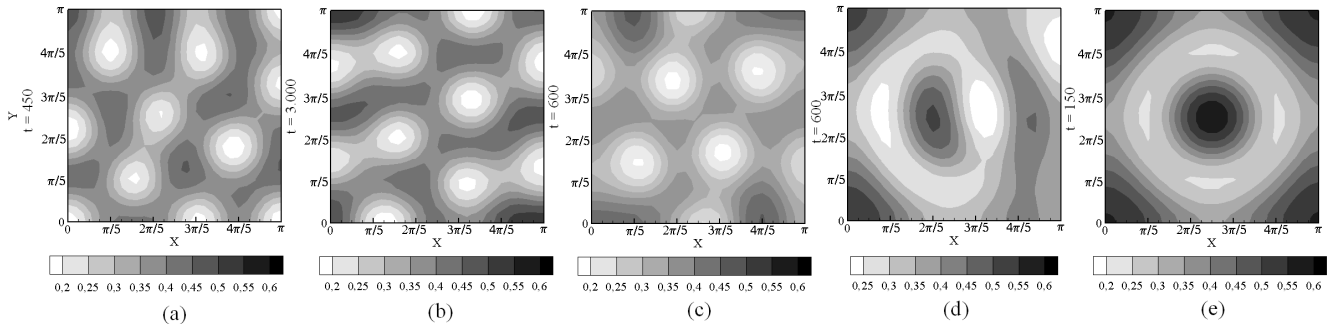
$$d = 0,0125 \quad k = 0,06 \quad \delta = 2,8 \quad (23)$$

Para mostrar la influencia del término advectivo, se simuló para las mismas condiciones difusivas-reactivas,



**Tabla 1.** Valores del parámetro  $\kappa$  para los campos de velocidad empleados en el Caso 41

Caso	Caso 4-0	Caso 4-1	Caso 4-2	Caso 4-3	Caso 4-4
$\kappa$	0	0,005	0,2	0,4	0,7


**Figura 9.** Campo de velocidad empleado para el Caso 4

**Figura 10.** Distribución espacio-temporal de la concentración del reactivo  $u$  obtenida para el Caso 4 empleando campos de velocidad toroidal de diferente magnitud

cuatro casos con diferentes magnitudes en el campo de velocidad, las cuales se presentan en la Tabla 1.

El tiempo final de simulación empleado fue de 3000 unidades de tiempo con incrementos iguales a 01. La condición inicial utilizada está definida por una variación aleatoria del 10% alrededor de los valores estables del proceso reactivo.

### 8.1. Resultados obtenidos para el Caso 4

En la secuencia de imágenes (a) de la Figura 10, se muestra el patrón de Turing obtenido para el problema de referencia difusivo-reactivo (Caso 4-0). Este patrón se caracteriza por la presencia de puntos en una distribución más o menos regular, la cual se estabiliza en un tiempo cercano a las 450 unidades. Al adicionar un pequeño campo advectivo, como en el Caso 4-1, el patrón muestra una dinámica en la cual los puntos interactúan entre ellos uniéndose y separándose permanentemente mientras rotan alrededor del centro del dominio del

problema, tal como se ilustra en la secuencia (b) de la Figura 10. Este caso no exhibe una solución estable, el comportamiento dinámico de continua rotación del sistema se mantiene aún al final del tiempo de simulación igual a 3.000 unidades.

Al aumentar la magnitud en el campo de velocidad, como en el Caso 4-2 (secuencia (c) de la Figura 10), se observa un retardo en el tiempo de formación del patrón. Dicha distribución, que queda definida casi inmediatamente para los Casos 4-0 y 4-1 (en la referencia) ahora toma forma solo después de 450 unidades de tiempo. El patrón ahora formado muestra un menor número de puntos que en los dos casos anteriores, y aunque al igual que en el Caso 4-1, el arreglo alcanzado rota permanentemente alrededor del centro, se observa que los puntos no interactúan unos con otros tal como si sucedió previamente.

Para el Caso 4-3 el patrón formado muestra un efecto mucho más notorio de la componente advectiva. Los puntos circulares en rotación obtenidos en los casos pre-

vios, se fusionan por el efecto del campo de velocidad, reduciendo la cantidad de puntos formados. Este patrón se mantiene en rotación alrededor del centro, tal como se observa en la secuencia (d) de la Figura 10. Un aumento en la velocidad vortical, como en el Caso4-4, termina de fusionar los puntos creando zonas anulares regulares con diferentes intensidades de concentración. A diferencia de los casos anteriores, este patrón obtenido se estabiliza después de 150 unidades de tiempo aproximadamente, tal como se muestra en la secuencia (e) de la Figura 10.

### 9. Caso 5: Modelo de difusión, advección y reacción de glucólisis – segundo caso

En este caso se analiza el efecto del fenómeno advectivo en la formación de patrones de Turing, dentro de un problema con un mecanismo de reacción de glucólisis. El dominio del problema se define como un cuadrado de longitud igual a  $5\pi$ , el cual es discretizado con 2.500 elementos cuadriláteros lineales. El campo de velocidad toroidal empleado, con centro en  $(x = 0, y = 0)$ , se encuentra descrito por medio de la expresión (24) (ver Figura 11), en tanto que las constantes de reacción se definen en (25).

$$\underline{a} = [a_x \ a_y] = [-\zeta y \ \zeta x] \quad (24)$$

$$d = 0,08 \quad k = 0,06 \quad \delta = 1,2 \quad (25)$$

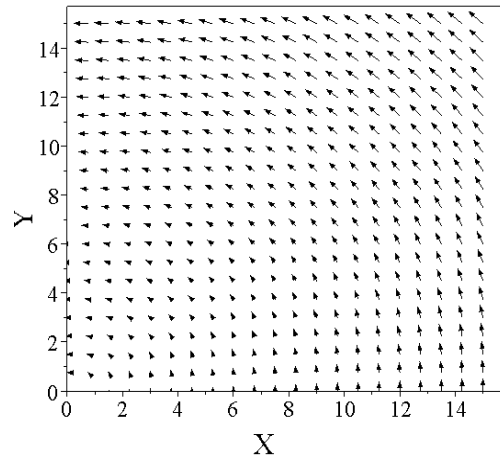
Para mostrar la influencia de del término advectivo, se simularon para las mismas condiciones difusivas-reactivas cuatro casos con diferentes magnitudes en la velocidad angular  $\zeta$ , las cuales se presentan en la Tabla 2. El tiempo final de simulación empleado fue de 6.000 unidades de tiempo con incrementos iguales a 0,1. La condición inicial utilizada está definida por una variación aleatoria del 10% alrededor de los valores estables del proceso reactivo.

**Tabla 2.** Valores del parámetro de velocidad angular  $\zeta$  para los campos de velocidad de Caso 5

Caso	Caso 5-0	Caso 5-1	Caso 5-2	Caso 5-3
$\zeta$	0	0,05	0,1	0,7

#### 9.1. Resultados obtenidos para el Caso 5

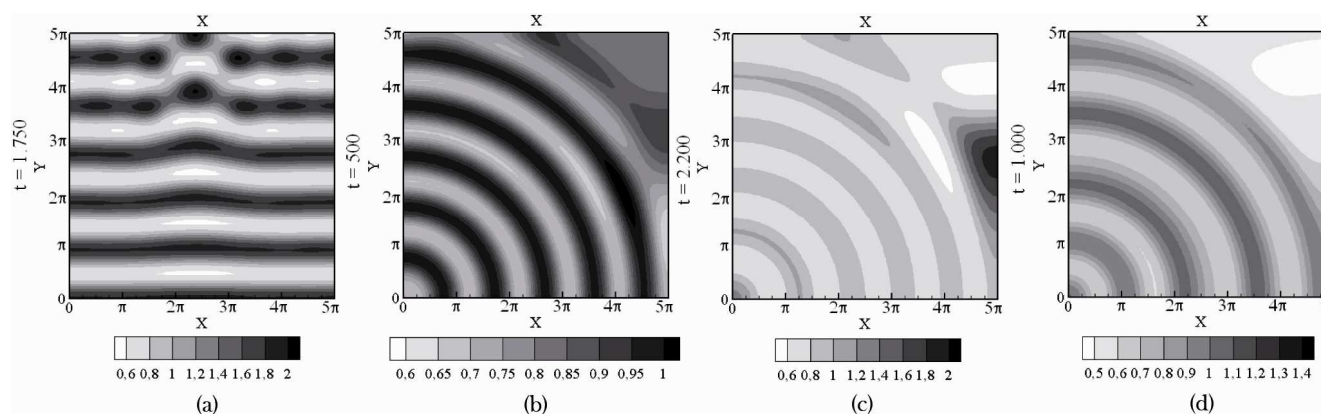
En la secuencia de imágenes (a) de la Figura 12, se muestra el patrón de Turing obtenido para el problema de referencia difusivo-reactivo. En estas imágenes se observa como se forman una serie de puntos, los cuales



**Figura 11.** Campo de velocidad empleado para el Caso 5

interactúan entre sí a lo largo del tiempo, hasta formar un patrón de líneas horizontales, más o menos definido después de 1.750 unidades de tiempo. La aplicación de un pequeño campo de velocidad toroidal, como el inducido en el Caso 5-1, lleva a la formación de un patrón de líneas concéntricas alrededor del centro del campo de velocidad, las cuales se estabilizan rápidamente aproximadamente después de 500 unidades de tiempo y que muestran una relación con el campo advectivo aplicado en el problema. En la secuencia (b) de la Figura 12 se puede observar la evolución del patrón obtenido para el Caso 5-1. En el Caso 5-2 se analiza el efecto del aumento en la magnitud del campo de velocidad sobre la distribución de los patrones. Al igual que en el Caso 5-1, para este caso se presenta la formación de zonas de concentración circulares centradas en  $(0,0)$ . Este patrón se forma y se estabiliza muy rápidamente después de 500 unidades de tiempo. Sin embargo, transcurridas 1.750 unidades de tiempo se alcanza una bifurcación y el patrón comienza a cambiar nuevamente, para estabilizarse finalmente después de 2.200 unidades de tiempo, tal como se muestra en la secuencia (c) de la Figura 12.

Finalmente, para una problema con un campo advectivo mayor, como el planteado en el Caso 5-3, se observa que el patrón formado no es estable como en los casos anteriores, sino que se trata de un patrón oscilatorio, tal como se ilustra en la secuencia (d) de la Figura 12. En este caso, al igual que en los anteriores, se presenta también la formación de unas líneas circulares centradas en el origen del sistema coordenado; sin embargo las intensidades de las líneas del patrón varían durante el tiempo de forma oscilatoria, de modo que el patrón cambia tal como un frente de onda expandiéndose desde el vértice inferior del dominio hacia los bordes del mismo.



**Figura 12.** Distribución espacio-temporal de la concentración del reactivo  $u$  obtenida para el Caso 5 empleando campos de velocidad toroidal de diferente magnitud

## 10. Conclusiones

Se analizaron cinco problemas de difusión-advección-reacción, empleando los modelos de cinética de reacción de Schnackenberg y de glucólisis. En todos los casos se compararon los resultados de los patrones de Turing obtenidos del problema de difusión-reacción de dominio fijo y sin advección, con la distribución resultante al introducir un término de transporte por medio de un campo de velocidad toroidal. Se encontró que para los casos con cinética de reacción de Schnackenberg, en ciertos rangos de velocidad los patrones de Turing originales se distorsionan, generándose patrones similares al inicial pero con cierto ángulo de desviación, el cual es proporcional a la magnitud del campo de velocidad aplicado. Para velocidades superiores, el efecto advectivo supera el difusivo, eliminándose la inestabilidad por difusión y por tanto los patrones de Turing. En caso de emplear velocidades inferiores al rango mencionado, el efecto del transporte no es significativo y las variaciones sobre los patrones de Turing no son apreciables.

Para los casos que emplearon el modelo de cinética de reacción de glucólisis, se encontró que aún los términos convectivos menores modifican considerablemente los patrones de Turing formados. Pequeños valores en los campos de velocidad generan patrones de forma parecida a los difusivo-reactivos (patrones de referencia), pero con una tendencia permanente a la rotación. En tanto que con campos advectivos más fuertes, se produce un transporte y combinación (arrastre) de los patrones obtenidos previamente, formándose nuevos patrones, los cuales guardan formas geométricas muy relacionadas con la naturaleza del campo de velocidad aplicado.

Por último, es importante resaltar que los resultados obtenidos en los casos numéricos no han sido comprobados experimentalmente. En este sentido, se han hecho

comprobaciones experimentales como [46] en donde se relata la formación de patrones en reacciones químicas complejas. En este sentido, éste artículo deja abierta la posibilidad de realizar nuevos experimentos sobre sistemas reactivos complejos bajo la acción de campos de velocidad que modifican el patrón de formación de Turing. Por tanto, este artículo señala una nueva posibilidad de experimentación en problemas de reacción-convección-difusión que se ha predicho mediante la simulación numérica.

## Agradecimientos

El presente proyecto fue financiado por la DIB (División de Investigación de Bogota, Universidad Nacional de Colombia) mediante el apoyo al proyecto "Modelado Matemático y Simulación de Procesos en Ingeniería Mecánica y Biomédica: Segunda Fase". Código DIB 8008170.

## Referencias

1. D. Garzón. (2007) Simulación de procesos de reacción-difusión: Aplicación a la morfogénesis del tejido óseo. Ph.D. Thesis . Universidad de Zaragoza.
2. D. White. (1988) The planforms and onset of convection with a temperature dependent viscosity. *J. Fluid Mech* 191 247–286.
3. O. Hirayama, R. Takaki. (1988) Thermal convection of a fluid with temperature-dependent viscosity. *Fluid Dynamics Research*. 12-1:35-47.
4. M. Ardes, F. Busse, J. Wicht. (1997) Thermal convection in rotating spherical shells. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 99:55-67.
5. J. Lir, T. Lin. (2001) Visualization of roll patterns in Rayleigh-Bénard convection of air in rectangular sha-

- low cavity. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 44: 2889-2902.
6. Y. Balkarei, A. GrigorYants, Y. Rhzanov, M. Elinson. (1988) Regenerative oscillations, spatial-temporal single pulses and static inhomogeneous structures in optically bistable semiconductors. *Opt. Commun.* 66:161–166.
  7. V.I. Krinsky. (1984) *Self-organisation: Auto-Waves and structures far from equilibrium* Ed. Springer.
  8. L. Zhang, S. Liu. Stability and pattern formation in a coupled arbitrary order of autocatalysis system. *Applied Mathematical Modelling* 33:884–896.
  9. F. Crauste, M. Lhassan, A. Kacha. (2008) A delay reaction-diffusion model of the dynamics of botulinum in fish. *Mathematical Biosciences.* 216:17–29.
  10. F. Rossi, S. Ristori, M. Rustici, N. Marchettini, E. Tiezzi. (2008) Dynamics of pattern formation in biomimetic systems. *Journal of Theoretical Biology.* 255:404–412.
  11. A. Madzvamuse, A. Wathen, P. Maini. (2003) A moving grid finite element method applied to a model biological pattern generator. *Journal of Computational Physics.* 190:478–500.
  12. H. Frederik, P. Maini, A. Madzvamuse, A. Wathen, T. Sekimura. (2003) Pigmentation pattern formation in butterflies: experiments and models. *C. R. Biologies.* 326:717–727.
  13. F. Yi, J. Wei, J. Shi, Bifurcation and spatiotemporal patterns in a homogeneous diffusive predator–prey system. *Journal of Differential Equations.* Article in Press.
  14. M. Baurmanna, T. Gross, U. Feudel. (2007) Instabilities in spatially extended predator–prey systems: Spatiotemporal patterns in the neighborhood of Turing–Hopf bifurcations. *Journal of Theoretical Biology* 245:220–229.
  15. B. Rothschild, J. Ault. (1996) Population-dynamic instability as a cause of patch structure. *Ecological Modelling* 93:237-239.
  16. T. Nozakura, S. Ikeuchi. (1984) Formation of dissipative structures in galaxies. *Astrophys. J.* 279:40–52.
  17. A. Madzvamuse (2002) A Numerical Approach to the Study of Spatial Pattern Formation in the Ligaments of Arcoid Bivalves. *Bulletin of Mathematical Biology* 64:501–530.
  18. J. García-Aznar, J. Kuiper, M. Gómez-Benito, M. Doblaré, J. Richardson. (2007) Computational simulation of fracture healing: Influence of interfragmentary movement on the callus growth. *Journal of Biomechanics.* 40 (7):1467-1476.
  19. S. Ferreira, M. Martins, M. Vilela. (2002) Reaction-diffusion model for the growth of avascular tumor. *Physical Review.* 65(2):21–907.
  20. A. Turing. (1952) The chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond.* 237:37–72.
  21. A. Madzvamuse. (2000) A numerical approach to the study of spatial pattern formation. Ph.D. Thesis. University of Oxford.
  22. T. Sekimura, A. Madzvamuse, A. Wathen, P. Maini. (2000) A model for colour pattern formation in the butterfly wing of *Papilio dardanus*. *Proc. Roy. Soc. London. Series B* 26:851–859.
  23. A. Madzvamuse, A. Wathen, P. Maini. (2005) A moving grid finite element method for the simulation of pattern generation by Turing models on growing domains. *J. Sci. Comp.* 24 (2):247–262.
  24. A. Madzvamuse, R. Thomas, P. Maini, A. Wathen. (2002) A numerical approach to the study of spatial pattern formation in the ligaments of arcoid bivalves. *Bull. Math. Biol.* 64:501–530.
  25. A. Madzvamuse, T. Sekimura, A. Wathen, P. Maini. (2002) A predictive model for colour pattern formation in the butterfly wing of *Papilio dardanus*. *Hiroshima Math J.* 32:325–336.
  26. E. Crampin. (2000) *Reaction and diffusion on growing domains*. Ph.D. Thesis. University of Oxford.
  27. A. Madzvamuse, P. Maini. (2007) Velocity-induced numerical solution of reaction–diffusion systems on continuously growing domains. *Journal of computational physics.* 225:100–119.
  28. A. Madzvamuse. (2006) Time-stepping schemes for moving grid finite element applied to reaction-diffusion systems on fixed and growing domains. *Journal of computational physics.* 214:239–263.
  29. D. Garzón. (2007) Simulación de procesos de reacción-difusión: Aplicación a la morfogénesis del tejido óseo. Ph.D. Thesis. Universidad de Zaragoza.
  30. H. Meinhardt. (1982) *Models of Biological Pattern Formation* Ed. Academic Press.
  31. J. Murray. (1981) A prepattern formation mechanism for animal coat markings. *J. Theor. Biol.* 88:161–199.
  32. S. Kondo, R. Asai. (1995) A reaction-diffusion wave on the skin of the marine angelfish, *Pomacanthus*. *Nature* 376:765–768.
  33. T. Sekimura, A. Madzvamuse, A. Wathen, P. Maini. (2000) A model for colour pattern formation in the butterfly wing of *Papilio dardanus*. *Proc. Roy. Soc. London. Series B* 26:851–859.
  34. M. Chaplain, A. Ganesh, I. Graham. (/2001) Spatiotemporal pattern formation on spherical surfaces: Numerical simulation and application to solid tumor growth. *J. Math. Biol.* 42:387–423.
  35. R. Barrio, C. Varea, J. Aragón, P. Maini. (1999) A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting systems. *Bull. Math. Biol.* 61:483–505.
  36. E. Crampin, E. Gaffney, P. Maini. (1999) Reaction and diffusion on growing domains: Scenarios for robust pattern formation. *Bull. Math. Biol.* 61:1093–1120.
  37. A. Kassam, L. Trefethen (2003) Solving reaction-diffusion equations 10 times faster. Oxford University: Numerical Analysis Group Research Report No. 16.

38. O. Zienkiewicz, R. Taylor. (2004) Problemas de convección dominante: Aproximaciones de elementos finitos a la ecuación de difusión-advección. En: *El Método de los elementos finitos*. 3:16–78 Ed. Centro Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería. Traducido de *The Finite Element Method 5<sup>th</sup> Edition*.(2000) Butterworth-Heinemann College. 3:5-150.
39. J. Schnakenberg. (1979) Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *J. Theor Biol.* 81(3):389-400.
40. R. Chaturvedi, C. Huang, J. Izaguirre, S. Newman, J. Glazier, M. Alber. (2004) *A Hybrid Discrete-Continuum Model for 3-D Skeletogenesis of the Vertebrate Limb*. Ed. Springer.
41. R. Chaturvedi, C. Huang B. Kazmierczak, T. Schneider J. Izaguirre, T. Glimm, H. Hentschel J. Glazier, S. Newman, M. Alber. (2005) On multiscale approaches to three-dimensional modelling of morphogenesis. *J. R. Soc. Interface.* 2:237-253.
42. R. Revelli, L. Ridolfi. (2008) Generalized collocation method for two-dimensional reaction-diffusion problems with homogeneous Neumann boundary conditions. *Computers and Mathematics with Applications.* 56:2360–2370.
43. D. Garzón-Alvarado, J. García-Aznar, M. Doblare. A reaction-diffusion model for long bones growth. *Bio-mechanics and modeling in mechanobiology*. Article in Press.
44. D. Garzón-Alvarado, J. García-Aznar, M. Doblare. Appearance and location of secondary ossification centres may be explained by a reaction-diffusion mechanism. *Computers in biology and medicine*. Article in press.
45. J. Vanegas, N. Landinez, D. Garzón-Alvarado. (2009) Análisis de Inestabilidad de Turing en Modelos Biológicos. *Revista DYNA.* 47. Article in press.
46. J. Stavek, M. Sipek, J. Sestak. (2002) The application of the principle of least action to some self-organized chemical reactions. *Thermochimica Acta.* 388(1-2):441-450.