

UNIVERSIDAD DE SEVILLA

FACULTAD DE MATEMÁTICAS



APROXIMACIONES NUMÉRICAS
DESCENTRADAS PARA SISTEMAS DE
EDP CON QUIMIOTAXIS

Autor:

Marcos Romero Madroñal

Tutor:

Francisco Guillén González

Trabajo Fin de Grado

Doble Grado en Física y Matemáticas

Departamento de Ecuaciones Diferenciales y Análisis Numérico

Sevilla, 2022

Abstract

In this work, the phenomenon of chemotaxis is modeled, mainly by focusing on the Keller-Segel model, as well as other variants of it. Furthermore, we carry out approximations of finite differences in time and different schemes in space, such as: finite differences (FD), finite elements (FE) and finite volumes (FV). Subsequently, the schemes are particularized to a one-dimensional spatial domain and numerical simulations are performed. Analyzing the results, spurious oscillations are observed in the centered approximations and upwind schemes are proposed in each of the approximations in space: FD, FE and FV. It is proved that the three upwind schemes are equivalent in 1D and they correct the numerical oscillations of the centered schemes. In addition, the upwind scheme is proven to be solvable, and preserves the properties of conservation of total cell number, and non-negativity of cells and chemical substance, these properties are corroborated with numerical simulations. Finally, the discretization techniques developed in this work are applied to other models with chemotaxis.

Resumen

En este Trabajo de Fin de Grado se modeliza el fenómeno de la quimiotaxis principalmente centrándonos en el modelo de Keller-Segel, además de otras variantes del mismo. A su vez, realizamos aproximaciones numéricas del tipo diferencias finitas en tiempo y distintos esquemas en espacio, tales como: diferencias finitas (DF), elementos finitos (EF) y volúmenes finitos (VF). Posteriormente, se particularizan los esquemas a un dominio espacial unidimensional y se realizan simulaciones numéricas. Analizando los resultados, se observan oscilaciones espúreas en las aproximaciones centradas, y se proponen esquemas descentrados en cada una de las aproximaciones en espacio: DF, EF y VF. Se prueba que los tres esquemas descentrados son equivalentes en 1D y corrigen las oscilaciones numéricas de los esquemas centrados. Además, se prueba que el esquema descentrado tiene solución, y preserva las propiedades de conservación de la cantidad total de células y de no negatividad de células y química, estas propiedades se corroboran con las simulaciones numéricas. Finalmente se aplican las técnicas de discretización desarrolladas en este trabajo a otros modelos con quimiotaxis.

Índice

1. El modelo de Keller-Segel	8
1.1. Desarrollo matemático del modelo	8
1.2. Propiedades	12
2. La aproximación en tiempo	17
2.1. Presentación del esquema	17
2.2. Conservación de las propiedades	18
3. Aproximación en espacio por elementos finitos y diferencias finitas	22
3.1. Diferencias finitas centradas	22
3.2. Método de elementos finitos	26
3.3. Simulación y análisis de los resultados. Oscilaciones espúreas	33
4. Diferencias finitas descentradas	40
4.1. La técnica del descentrado	40
4.2. Análisis numérico del esquema descentrado (I)	42
4.3. Simulaciones y análisis de resultados	44
5. Volúmenes finitos descentrados	50
6. Elementos finitos descentrados	54
6.1. Análisis numérico del esquema descentrado (II)	57

7. Otros modelos con quimiotaxis	61
7.1. Keller-Segel con reacción logística	61
7.1.1. Simulación y análisis de los resultados	62
7.2. Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio líquido. . .	65
7.2.1. Simulación y análisis de los resultados	67
7.3. Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio semi-sólido.	69
7.3.1. Simulación y análisis de los resultados	70
A. Mass lumping	75
B. Códigos de simulación	77
Bibliografía	92

Introducción

Motivación

Hace ya más de 300 años, en el año 1676, el neerlandés Anton van Leeuwenhoek observaba detenidamente a las pequeñas entidades que acababa de descubrir en un preparado de agua con pimienta, mientras trataba de encontrar el origen del picor que esta producía en la lengua humana. Fue entonces cuando, en completo asombro, observó que estas eran capaces de moverse por sí mismas y al intuir estaban dotadas de vida, las bautizó como “animáculos” (se cree que eran bacterias). Poco después, observó cómo su movimiento no era totalmente estocástico, sino que parecía estar dirigido por ciertas sustancias, su hipótesis quedó reforzada al verlos desplazarse hacia conchas abiertas de mejillones y devorarlos. Esta es la primera observación registrada de microorganismos moviéndose de acuerdo a la concentración de sustancias químicas en su medio ambiente, el fenómeno que contempla esta dinámica, cuando se habla de seres vivos, recibe el nombre de quimiotaxis. [3]

La manifestación de la quimiotaxis no es para nada anecdótica en la naturaleza, existen multitud de ejemplos que atienden a este fenómeno, como pudieran ser: la migración de células del sistema inmune hacia tejidos dañados o inflamados, atraídas por proteínas como las quimiocinas; el movimiento de bacterias hacia sustancias nutritivas como la glucosa, o en contra de sustancias venenosas como el fenol; la atracción que generan los óvulos de los helechos, los cuales poseen ácido málico que motiva el movimiento de los espermatozoides; el proceso de formación de vasos sanguíneos (angiogénesis) incentivado por químicos producidos por células tumorales, etc.

Debido a la gran cantidad de procesos mediados por el fenómeno de la quimiotaxis, resulta de gran interés matemático tratar de modelizar este suceso. El primer modelo matemático de la quimiotaxis data de los años 1950s presentado por el matemático Clifford S. Patlak. Posteriormente en los años 70s, este modelo fue mejorado por la física Evelyn Fox Keller y el matemático Lee Aaron Segel tratando de modelar el comportamiento de un tipo de ameba capaz de agregarse con otras de su misma especie, conformando un único ser conocido como moho del fango (*Dictyostelium discoideum*), esta atracción se lleva a cabo mediante una sustancia química atrayente, el adenosín monofosfato cíclico (AMFc).

Descripción del trabajo

En el Capítulo 1, nos centraremos en modelizar el fenómeno de quimiotaxis deduciendo las ecuaciones que constituyen el modelo de Keller-Segel e interpretando físicamente los términos que las componen. Asimismo, se deducen varias propiedades del modelo, como son: la conservación de la cantidad total de células, la no negatividad de las densidades de células y química, y una ley de energía donde en particular el funcional de energía es decreciente.

En el Capítulo 2, proponemos un esquema de discretización en tiempo mediante DF. Posteriormente, se estudia si nuestro esquema en tiempo conserva las propiedades del problema continuo, manteniéndose la conservación, la no negatividad y el decrecimiento de la energía. Además el esquema introduce un término de disipación extra, que podemos entender como disipación numérica.

En el Capítulo 3, se lleva a cabo una aproximación centrada en espacio en un dominio unidimensional mediante DF y EF, y se demuestra que estos dos enfoques son equivalentes, se prueba además para el esquema centrado la propiedad de conservación. Más adelante, se realizan simulaciones numéricas donde se observan oscilaciones espúreas y se corrobora el hecho de que estas se producen por la discretización espacial centrada. Asimismo, se comprueba mediante las simulaciones si el nuevo esquema completamente discretizado mantiene las propiedades, teniéndose únicamente la propiedad de conservación.

En el Capítulo 4, con vistas a eliminar las oscilaciones espúreas, proponemos un nuevo método de descentrado para la aproximación en espacio en el caso de las DF. A su vez, aprovechando esta formulación, se demuestra que el esquema descentrado impide la negatividad de las variables. Posteriormente, se realizan aproximaciones numéricas para corroborar estos nuevos resultados, observándose asimismo que el esquema parece conservar la cantidad total de células. Finalmente, se demuestra que el esquema descentrado introduce un tipo de disipación numérica que produce un amortiguamiento en la aproximación de máximos crecientes y mínimos decrecientes.

En el Capítulo 5, realizamos una aproximación descentrada en espacio mediante un método de VF. Se concluye que, en el caso de dominios 1D, el esquema resultante de la aproximación centrada coincide con el esquema centrado de DF y EF, mientras que la aproximación descentrada da lugar al mismo esquema descentrado del caso de DF.

En el Capítulo 6, se realiza una aproximación descentrada en espacio mediante un método de EF descentrado. Se concluye que dicho esquema descentrado es equivalente al caso de DF y VF descentrado en dominios 1D. Asimismo, se aprovecha esta nueva formulación para demostrar la propiedad de conservación y se prueba la existencia de solución del esquema descentrado completamente discretizado.

En el Capítulo 7, se introducen nuevos modelos continuos con quimiotaxis, que se discretizan de forma descentrada teniendo en cuenta los resultados de los demás

capítulos. Además, se realizan simulaciones numéricas y se analiza el comportamiento de las aproximaciones de sus soluciones con respecto al caso de Keller-Segel, tratando de explicar las dinámicas observadas.

Para concluir, cabe decir que el análisis y simulación numérica en modelos de quimiotaxis tiene una extensa literatura con muy diversos enfoques; sin embargo, en lo que se refiere al objetivo principal del trabajo, que es la comparación de los esquemas numéricos más conocidos en el caso unidimensional, no hemos encontrado referencias en la literatura, con lo que gran parte del desarrollo del trabajo es original.

Capítulo 1

El modelo de Keller-Segel

1.1. Desarrollo matemático del modelo

En primer lugar, será necesario especificar nuestro marco de trabajo. El medio material sobre el que se trabaja se modela de forma aproximada como un dominio abierto y conexo $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, donde cada punto $x \in \Omega$, al tomar un sistema de referencia, se corresponde con un punto espacial fijo. Asimismo, los valores de la variable temporal se consideran reales desde el instante presente $t = 0$ hasta un momento futuro $t = T$ con $T > 0$. Por tanto $t \in (0, T) \subset \mathbb{R}$.

Sea $u(x, t)$ la densidad de células y $v(x, t)$ la concentración de sustancia química en un punto del espacio x y en el instante de tiempo t . Sea $\mathcal{O} \subset \Omega$ un volumen de control. El balance de la cantidad total de células implica la siguiente ecuación

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{O}} u(x, t) dx = P^{(u)}(\mathcal{O}, t) - \int_{\partial\mathcal{O}} (J^{(u)}(x, t) \cdot n(x)) dS(x), \quad \forall \mathcal{O} \subset \Omega, \quad (1.1)$$

donde $n(x)$ es el vector normal exterior a la frontera de \mathcal{O} en el punto x y (\cdot) denota al producto escalar correspondiente.

Primeramente, $\int_{\mathcal{O}} u_t(x, t) dx := \frac{d}{dt} \int_{\mathcal{O}} u(x, t) dx$ denota la variación temporal de la cantidad total de células contenidas en el volumen \mathcal{O} . Estudiemos ahora cada uno de los dos sumandos de la derecha de la ecuación (1.1) por separado.

En primer lugar, si anulamos el segundo sumando, obtenemos $\int_{\mathcal{O}} u_t(x, t) dx = P^{(u)}(\mathcal{O}, t)$, lo cual indica que la función $P^{(u)}(\mathcal{O}, t)$, rige la variación de la cantidad total de u en el tiempo t . Por tanto, dependiendo de su signo, se encarga de crear (+) y destruir (-) células directamente. Al depender del volumen de control, escribiremos

$$P^{(u)}(\mathcal{O}, t) = \int_{\mathcal{O}} s^{(u)}(x, t) dx, \quad (1.2)$$

siendo $s^{(u)}(x, t)$ la densidad de variación de células en el instante t . Llamaremos a

$s^{(u)}(x, t)$ término de reacción.

Por otro lado, al anular $P^{(u)}$ se tiene $\int_{\mathcal{O}} u_t(x, t) dx = - \int_{\partial\mathcal{O}} (J^{(u)}(x, t) \cdot n(x)) dS$, en este caso $J^{(u)}(x, t)$ es una función vectorial que se corresponde con el flujo de células a través de la frontera. Si $J^{(u)}(x, t) \cdot n(x)$ es positivo (negativo), el vector de flujo apunta hacia el exterior (interior) del volumen, lo cual indica que la cantidad de células en \mathcal{O} disminuye (aumenta). Esto nos dice que las células se mueven en la dirección y sentido del flujo. Asimismo usando el teorema de la divergencia, escribiremos

$$\int_{\partial\mathcal{O}} (J^{(u)}(x, t) \cdot n(x)) dS = \int_{\mathcal{O}} \nabla \cdot J^{(u)}(x, t) dx. \quad (1.3)$$

Todo esto, conjuntamente hace ver que la ecuación (1.1) nos está indicando que la cantidad total de células en el volumen \mathcal{O} variará, ya sea porque se creen o destruyan por la función $s^{(u)}(x, t)$, o porque se introduzcan o escapen del volumen a causa del vector $J^{(u)}(x, t)$.

Por tanto, la ecuación (1.1), la reescribiremos de la siguiente manera

$$\int_{\mathcal{O}} (u_t(x, t) + \nabla \cdot J^{(u)}(x, t) dx - s^{(u)}(x, t)) dx = 0. \quad \forall \mathcal{O} \subset \Omega. \quad (1.4)$$

Esta nueva forma (1.4) es equivalente a la siguiente

$$\int_{\Omega} (u_t(x, t) + \nabla \cdot J^{(u)}(x, t) dx - s^{(u)}(x, t)) \mathbb{1}_{\mathcal{O}} dx = 0, \quad \forall \mathcal{O} \subset \Omega, \quad (1.5)$$

donde $\mathbb{1}_{\mathcal{O}}$ denota a la función indicador del volumen \mathcal{O} .

En general al ser (1.5) válida para todos los $\mathcal{O} \subset \Omega$ que conformen una partición de Ω , se satisfará que la integral es nula no solo para las funciones indicadoras, sino para una combinación lineal arbitraria de estas; es decir, para funciones simples.

$$\int_{\Omega} (u_t(x, t) + \nabla \cdot J^{(u)}(x, t) dx - s^{(u)}(x, t)) \sum_i c_i \mathbb{1}_{\mathcal{O}_i} dx = 0. \quad (1.6)$$

Este hecho, usando la densidad de las funciones simples en las funciones regulares, dará lugar a la siguiente EDP

$$u_t(x, t) + \nabla \cdot J^{(u)}(x, t) = s^{(u)}(x, t). \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \quad (1.7)$$

Como se puede intuir, un análisis similar es valido para la variable v , por tanto tendremos otra ecuación similar

$$v_t(x, t) + \nabla \cdot J^{(v)}(x, t) = s^{(v)}(x, t). \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \quad (1.8)$$

Hay que resaltar que aún no se ha tenido en cuenta ninguna suposición sobre el modelo más allá del balance de masa, por tanto las ecuaciones (1.7) y (1.8) son

válidas en contextos mucho más generales donde se imponga la conservación de una cierta magnitud, se pueden encontrar ejemplos en diversos campos: la ecuación del calor que expresa la ley de conservación de la energía calorífica; las ecuaciones de continuidad en electromagnetismo, dinámica de fluidos y física cuántica, que establecen respectivamente la conservación de la carga, masa y la densidad de probabilidad; el teorema de Poynting, el cual describe la conservación de energía electromagnética, etc.

Empezaremos a partir de ahora a considerar efectos más específicos de nuestro modelo con quimiotaxis.

En primer lugar, como nuestro estudio se basará sobre todo en observar la agregación celular y sus efectos, debido a la velocidad a la que esta se produce, parece sensato considerar que el nacimiento y muerte de las células será despreciable en nuestro modelo, esto nos lleva a que

$$s^{(u)}(x, t) = 0. \quad (1.9)$$

Seguidamente, de la observación empírica es sabido que cada célula es capaz de producir la sustancia quimioatrayente, por tanto es sensato admitir un término de la forma αu para $s^{(v)}$. Por otro lado, también es sabido que la sustancia química se degrada por sí misma, esto nos lleva admitir otro término de la forma $-\beta v$ para $s^{(v)}$. Esto se traduce en

$$s^{(v)} = \alpha u - \beta v, \quad (1.10)$$

donde los dos parámetros $\alpha > 0$ y $\beta > 0$ se obtienen empíricamente.

Por otro lado, en el caso de la sustancia química, se produce un fenómeno de difusión (autodifusión) pura. Aplicando las leyes de Fick obtendremos las ecuaciones constitutivas de difusión, esto es

$$J^{(v)} = -D_v \nabla v. \quad (1.11)$$

La ecuación (1.11) indica que la sustancia química se mueve en la dirección y sentido de máxima disminución local de esta a una velocidad empírica $D_v > 0$, por tanto trata de homogeneizarla.

En lo referente a u , se observan dos fenómenos claramente diferenciados, el de difusión y el de quimiotaxis, esto nos permite descomponer el flujo de u en dos sumandos

$$J^{(u)} = J_{dif}^{(u)} + J_{qui}^{(u)}. \quad (1.12)$$

Del mismo modo, ya que la autodifusión de v implicaba (1.11), se sigue un resultado análogo para u

$$J_{dif}^{(u)} = -D_u \nabla u, \quad (1.13)$$

donde $D_u > 0$ es un coeficiente de difusión empírico.

En lo relacionado al flujo de quimiotaxis $J_{qui}^{(u)}$, de forma absolutamente empírica se modela como

$$J_{qui}^{(u)} = \lambda u \nabla v, \quad (1.14)$$

donde $\lambda > 0$ es un coeficiente empírico que influye en la velocidad quimiotáctica.

La ecuación (1.14), impone que las células quieren moverse en la dirección de máximo ascenso local de v , con una velocidad proporcional a u .

Por tanto, introduciendo (1.13) y (1.14) en (1.12), se sigue

$$J^{(u)} = -D_u \nabla u + \lambda u \nabla v. \quad (1.15)$$

Por tanto, la expresión del flujo (1.15), indica que las células se mueven en la dirección y sentido que representa la combinación lineal $-D_u \nabla u + \lambda u \nabla v$.

Otra consideración que debemos hacer será el aislamiento de nuestro dominio del medio externo, lo cual indica que los flujos en la frontera de Ω son perpendiculares al vector normal exterior. Esto es

$$\begin{cases} J^{(u)} \cdot n = 0, \\ J^{(v)} \cdot n = 0. \end{cases} \quad \text{en } \partial\Omega \times (0, T). \quad (1.16)$$

Teniendo en cuenta las expresiones de los flujos (1.15) y (1.11), podremos reescribir (1.16) de una forma más compacta

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \\ \frac{\partial v}{\partial n} = 0. \end{cases} \quad \text{en } \partial\Omega \times (0, T). \quad (1.17)$$

Ya por último, solo nos queda asumir que en $t = 0$, conocemos las funciones

$$\begin{cases} u(x, 0) = u_0(x), \\ v(x, 0) = v_0(x). \end{cases} \quad (1.18)$$

Ya tenemos todos los ingredientes necesarios para presentar nuestro modelo. Bajo la elección que hemos hecho de u como velocidad quimiotáctica obtenemos el denominado Keller-Segel. Se presenta a continuación

$$\begin{cases} u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot (u \nabla v) = 0. & \text{en } \Omega \times (0, T). & (1.19a) \\ v_t - D_v \Delta v - \alpha u + \beta v = 0. & \text{en } \Omega \times (0, T). & (1.19b) \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0. & \text{en } \partial\Omega \times (0, T). & (1.19c) \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x). & \text{en } \Omega. & (1.19d) \end{cases}$$

Proposición 1.1.1. *El modelo (1.19a)-(1.19d) admite la siguiente formulación variacional:*

$$(FV) \begin{cases} \int_{\Omega} u_t \varphi \, dx + \int_{\Omega} (D_u \nabla u - \lambda u \nabla v) \cdot \nabla \varphi \, dx = 0. \\ \int_{\Omega} (v_t - \alpha u + \beta v) \varphi \, dx + \int_{\Omega} D_v \nabla v \cdot \nabla \varphi \, dx = 0. & \varphi \in H^1(\Omega). \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x) \quad \text{en } \Omega. \end{cases} \quad (1.20)$$

Demostración. Esta la podemos obtener a partir de (1.6) y su respectiva ecuación para v sustituyendo los flujos y funciones de reacción como se dedujeron anteriormente, además de tener en cuenta la densidad de funciones simples en $L^1(\Omega)$.

$$\begin{cases} \int_{\Omega} (u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot (u \nabla v)) \varphi \, dx = 0. \\ \int_{\Omega} (v_t - D_v \Delta v - \alpha u + \beta v) \varphi \, dx = 0. & \varphi \in L^1(\Omega). \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x) \quad \text{en } \Omega. \end{cases} \quad (1.21)$$

A partir de esto, considerando funciones φ más regulares y la fórmula de integración por partes

$$- \int_{\Omega} \Delta u \varphi \, dx = - \int_{\partial \Omega} (\nabla u \cdot \vec{n}) \varphi \, dS + \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \varphi \, dx, \quad (1.22)$$

Se llega finalmente a la FV aplicando (1.22) al término de quimiotaxis y a los de autodifusión. \square

1.2. Propiedades

Resulta de gran interés tras presentar el modelo conocer algunas de las propiedades de este. En esta sección trataremos de deducir las propiedades de una forma meramente formal asumiendo la regularidad suficiente para que todas las operaciones realizadas sean justificables. En particular nos centraremos en tres propiedades fundamentales: la conservación de la cantidad total de células, el mantenimiento de la no negatividad de las variables u y v , y una ley de energía que disipa en las soluciones.

Es fundamental conocer que en dominios unidimensionales, la solución clásica es única, global en tiempo y acotada en el sentido que describe el siguiente teorema (véase [6]):

Teorema 1.2.1. *Sea $\Omega \subset \mathbb{R}$ un intervalo, tal que $u_0 \in C^0(\overline{\Omega})$ y $v_0 \in \cup_{q>1} W^{1,q}(\Omega)$ son no negativas. Entonces existe una única solución clásica de (1.19a)-(1.19d)*

$$\begin{cases} u \in C^0(\overline{\Omega} \times [0, +\infty)) \cap C^{2,1}(\overline{\Omega} \times (0, +\infty)), \\ v \in C^0(\overline{\Omega} \times [0, +\infty)) \cap C^{2,1}(\overline{\Omega} \times (0, +\infty)) \cap L_{loc}^{\infty}([0, T_{max}); W^{1,q}(\Omega)), \end{cases}$$

global y acotada en el sentido de que existe un $C > 0$ tal que:

$$\|u(\cdot, x)\|_{L^\infty(\Omega)} + \|v(\cdot, x)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \quad \text{para todo } t > 0. \quad (1.23)$$

Es interesante señalar que para dimensiones superiores existen otros teoremas que garantizan o bien la explosión en tiempo finito, o bien existencia global de la solución en función de la cantidad total inicial de células, de la forma de Ω y del parámetro de quimiotaxis λ .

En lo que respecta a la cantidad total de u , obtenemos el siguiente resultado

Proposición 1.2.1. *Se conserva la cantidad total de u , esto es*

$$(u, 1) = (u_0, 1), \quad (1.24)$$

donde (u, v) denota el producto escalar usual de $L^2(\Omega)$, $(u, v) = \int_{\Omega} uv \, dx$.

Demostración. En primer lugar se precisa del Teorema de la Divergencia

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot (\nabla u) \, dx = \int_{\partial\Omega} \nabla u \cdot n \, dS. \quad (1.25)$$

Integrando la ecuación (1.19a) en Ω tendremos

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} (u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot (u \nabla v)) \, dx \stackrel{(1.25)}{=} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u \, dx + \int_{\partial\Omega} (-D_u \nabla u + \lambda u \nabla v) \cdot n \, dS \\ &\stackrel{(1.19c)}{=} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} u \, dx + \int_{\partial\Omega} \left(-D_u \frac{\partial u}{\partial n} + \lambda u \frac{\partial v}{\partial n} \right) dS, \end{aligned}$$

lo que implica que

$$\int_{\Omega} u \, dx = \text{Const.} = \int_{\Omega} u_0 \, dx,$$

□

Corolario 1.2.1. *Si $u \geq 0$ se tiene que*

$$\|u\|_{L^1(\Omega)} = \|u_0\|_{L^1(\Omega)}. \quad (1.26)$$

Para la cantidad total de v obtenemos un resultado distinto.

Proposición 1.2.2. *Si denotamos $V = (v, 1)$ y $U_0 = (u_0, 1)$ se tiene que*

$$V(t) = V_0 e^{-\beta t} + \frac{\alpha}{\beta} U_0 (1 - e^{-\beta t}). \quad (1.27)$$

En particular,

$$V(t) \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \frac{\alpha}{\beta} U_0. \quad (1.28)$$

Demostración. Con la misma idea que en la propiedad anterior integramos ahora (1.19b) en Ω y resulta

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} (v_t - D_v \Delta v - \alpha u + \beta v) dx \\ &\stackrel{(1.25)}{=} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} v dx - \int_{\partial\Omega} D_v \nabla v \cdot n dS - \alpha \int_{\Omega} u dx + \beta \int_{\Omega} v dx \\ &\stackrel{(1.19c)}{=} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} v dx + (-D_v \int_{\partial\Omega} \frac{\partial \psi}{\partial n} dS) - \alpha \int_{\Omega} u dx + \beta \int_{\Omega} v dx \end{aligned}$$

Por tanto, del cálculo anterior y recordando la Proposición 1.2.1, se sigue que

$$V'(t) + \beta V(t) - \alpha U(0) = 0. \quad (1.29)$$

Obtenemos por tanto una EDO para la cantidad total de v , al resolverla obtendremos su evolución temporal. Al ser una EDO lineal de primer orden, multiplicándola por el factor integrante $e^{\beta t}$, es fácil obtener la siguiente solución

$$V(t) = V_0 e^{-\beta t} + \frac{\alpha}{\beta} U_0 (1 - e^{-\beta t}), \quad (1.30)$$

donde es fácil ver que $V(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\beta} U_0$. \square

Corolario 1.2.2. *Si $u, v \geq 0$ se tiene*

$$\|v\|_{L^1(\Omega)}(t) = \|v_0\|_{L^1(\Omega)} e^{-\beta t} + \frac{\alpha}{\beta} \|u_0\|_{L^1(\Omega)} (1 - e^{-\beta t}). \quad (1.31)$$

En particular,

$$\|v\|_{L^1(\Omega)}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\alpha}{\beta} \|u_0\|_{L^1(\Omega)}. \quad (1.32)$$

A continuación se tiene un importante resultado sobre el signo de las variables.

Proposición 1.2.3. *Consideremos la formulación variacional (1.20) truncando la velocidad quimiotáctica u por su parte positiva*

$$\begin{cases} \int_{\Omega} u_t \varphi dx + \int_{\Omega} (D_u \nabla u - \lambda u^+ \nabla v) \cdot \nabla \varphi dx = 0. \\ \int_{\Omega} (v_t - \alpha u + \beta v) \varphi dx + \int_{\Omega} D_v \nabla v \cdot \nabla \varphi dx = 0. \\ u(x, 0) = u_0(x), v(x, 0) = v_0(x) \quad \text{en } \Omega. \end{cases} \quad \forall \varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad \varphi \in H^1(\Omega), \quad (1.33)$$

donde $u^+ = \max\{u, 0\}$.

Entonces se tiene que las soluciones (u, v) de (1.33) son no negativas.

Demostración. En primer lugar sustituimos en la primera ecuación de (1.33) la función test φ por la parte negativa de u , esto es $u^- = \min\{u, 0\}$.

$$\int_{\Omega} u_t u^- dx + \int_{\Omega} D_u \nabla u \cdot \nabla u^- dx - \int_{\Omega} \lambda u^+ \nabla v \cdot \nabla u^- dx = 0. \quad (1.34)$$

Desarrollando (1.34) y considerando las derivadas el sentido de las “derivadas generalizadas” tenemos

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} u_t u^- dx + \int_{\Omega} D_u \nabla u \cdot \nabla u^- dx - \int_{\Omega} \lambda u^+ \nabla v \cdot \nabla u^- dx &= 0 \\ \Rightarrow \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (u^-)^2 dx &= - \int_{\Omega} D_u |\nabla u^-|^2 dx, \end{aligned} \quad (1.35)$$

donde se ha tenido en cuenta que u^+ y ∇u^- tienen soportes disjuntos.

Por tanto es evidente que se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (u^-)^2 dx \leq 0. \quad (1.36)$$

Sabiendo que $u^-(x, 0) = 0$, por (1.36) tendremos que $\int_{\Omega} (u^-)^2 = 0$ para $t > 0$ y por tanto, $u^-(x, t) = 0$ en $\Omega \times (0, T)$, lo que equivale a que $u \geq 0$.

Consideramos ahora la segunda ecuación de (1.33) sustituyendo la función test por v^- , se tendrá

$$\int_{\Omega} v_t v^- dx + \int_{\Omega} D_v \nabla v \cdot \nabla v^- dx = \int_{\Omega} \alpha u v^- dx - \int_{\Omega} \beta v v^- dx. \quad (1.37)$$

De forma análoga a como hicimos para u , desarrollamos la ecuación (1.37).

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (v^-)^2 dx = \int_{\Omega} \alpha u v^- dx - \int_{\Omega} \beta (v^-)^2 dx - \int_{\Omega} D_v |\nabla v^-|^2 dx.$$

Teniendo en cuenta que, como se dedujo antes $u \geq 0$, se tiene

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} (v^-)^2 dx \leq 0. \quad (1.38)$$

Con un razonamiento equivalente al del caso de u^- se deduce que $v^-(x, t) = 0$ en $\Omega \times (0, T)$. \square

Corolario 1.2.3. *Suponiendo que (1.33) tiene solución, entonces existe una solución no negativa de Keller-Segel (formulación variacional (1.20)).*

Otra característica fundamental de este modelo es que presenta la siguiente ley de energía disipativa

Proposición 1.2.4. *Suponiendo que (u, v) es solución de la formulación variacional (1.20), se tendrá la siguiente relación:*

$$\frac{d}{dt}E(u, v) = -D(u, v) \leq 0, \quad (1.39)$$

siendo

$$E(u, v) = \int_{\Omega} (F(u) + \lambda D_v \frac{|\nabla v|^2}{2} + \beta \lambda \frac{v^2}{2} - \alpha \lambda uv) dx, \quad (1.40)$$

un funcional al que denominaremos energía, con $F(u) = \alpha D_u(u \log u - u)$. Y además

$$D(u, v) = \int_{\Omega} (\alpha u |\nabla(D_u \log u - \lambda v)|^2 + \lambda v_t^2) dx, \quad (1.41)$$

es un funcional no negativo, al que llamaremos disipación.

Demostración. En primer lugar, se hace notar que la EDP (1.19a), se escribe de forma equivalente como

$$u_t - \nabla \cdot (u \nabla (D_u \log u - \lambda v)) = 0, \quad (1.42)$$

donde hemos usado que $u \nabla \log u = \nabla u$.

Multiplicamos la ecuación (1.42) por $\alpha(D_u \log u - \lambda v)$ y (1.19b) por λv_t , integremos en Ω y sumamos las ecuaciones. En las integrales siguientes se sobreentienden los dx y se omiten por no sobrecargar las ecuaciones.

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\Omega} \underbrace{\alpha D_u \log u}_{F'(u)} u_t - \int_{\Omega} \alpha \lambda u_t v - \int_{\Omega} \nabla \cdot (u \nabla (D_u \log u - \lambda v)) \alpha (D_u \log u - \lambda v) \\ &\quad + \int_{\Omega} \lambda v_t^2 - \int_{\Omega} \lambda D_v \Delta v v_t - \int_{\Omega} \alpha \lambda u v_t + \int_{\Omega} \beta \lambda v v_t \\ &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} F(u) - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \alpha \lambda u v + \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \beta \lambda \frac{v^2}{2} + \int_{\Omega} \lambda D_v \nabla v \cdot \nabla v_t - \int_{\partial \Omega} (\nabla v \cdot \mathbf{n}) v_t \\ &\quad + \int_{\Omega} \alpha u |\nabla(D_u \log u - \lambda v)|^2 - \int_{\partial \Omega} u (\nabla(D_u \log u - \lambda v)) \cdot \mathbf{n} \alpha (D_u \log u - \lambda v) \\ &\quad + \int_{\Omega} \lambda v_t^2 \\ &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} (F(u) + \lambda D_v \frac{|\nabla v|^2}{2} + \beta \lambda \frac{v^2}{2} - \alpha \lambda uv) + \int_{\Omega} (\alpha u |\nabla(D_u \log u - \lambda v)|^2 + \lambda v_t^2), \end{aligned}$$

donde $F(u) = \alpha D_u(u \log u - u)$ es una integral del logaritmo con sus constantes correspondientes. Finalmente, identificando los términos con sus definiciones se tiene el resultado. \square

Capítulo 2

La aproximación en tiempo

En este capítulo se trata de obtener una discretización temporal para nuestro modelo que preserve en la medida de lo posible las propiedades del problema continuo deducidas en la Sección 1.2.

2.1. Presentación del esquema

En primer lugar se divide el intervalo espacial $(0, T)$ en nodos equiespaciados $\{t_n\}_{n=0}^{N_t}$ de paso $dt = T/N_t$, entonces $t_k = kdt$ y llamaremos $u^k \approx u(\cdot, t_k)$.

Definimos el siguiente esquema en tiempo:

$$\begin{cases} \delta_t u^k - D_u \Delta u^k + \lambda \nabla \cdot (u^k \nabla v^k) = 0. & \text{en } \Omega, \forall k = 1, \dots, N_t. & (2.1a) \\ \delta_t v^k - D_v \Delta v^k - \alpha u^{k-1} + \beta v^k = 0. & \text{en } \Omega, \forall k = 1, \dots, N_t. & (2.1b) \\ \frac{\partial u^k}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v^k}{\partial n} = 0. & \text{en } \partial\Omega, \forall k = 1, \dots, N_t. & (2.1c) \\ u^0 = u_0(x), \quad v^0 = v_0(x). & \text{en } \Omega. & (2.1d) \end{cases}$$

Se hace notar que los problemas (2.1a) y (2.1b) son lineales y desacoplados.

Hemos utilizado el método de Euler implícito para la ecuación de u (1.19a) como se representa en (2.2).

$$u_t(t_k) \approx \delta_t u^k := \frac{u^k - u^{k-1}}{dt}. \quad (2.2)$$

Sin embargo, para la ecuación de v (1.19b) se toma una aproximación semi-implícita donde se explicita el término de producción de v debida a la variable u . Esta última consideración nos permitirá desacoplar las ecuaciones simplificando así nuestro esquema y además se comprueba en este capítulo que es una elección adecuada para tener conservación, no negatividad y una energía discreta decreciente.

El algoritmo de un paso para la resolución del esquema (2.1a)-(2.1d) es el siguiente:

```

1: Begin
2:   dados  $u^0, v^0$  de (2.1d)
3:   for  $k = 1$  to  $N_t$  do
4:     calcular  $v^k$  de (2.1b)
5:     calcular  $u^k$  de (2.1a)
6:   end for
7: End

```

2.2. Conservación de las propiedades

En esta sección tratamos de comprobar si la aproximación resultante de la aplicación de nuestro esquema en tiempo conserva las propiedades de la solución del problema continuo.

En primer lugar se mantiene la conservación de la cantidad total de u .

Proposición 2.2.1. *El esquema en tiempo conserva la cantidad total de u . Esto es, $(u^k, 1) = (u_0, 1)$ para todo $k = 1, \dots, N_t$.*

Demostración. Para comprobar esta propiedad, integramos la ecuación (2.1a) en Ω y tendremos

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{\Omega} \left(\frac{u^k - u^{k-1}}{dt} - D_u \Delta u^k + \lambda \nabla \cdot (u^k \nabla v^k) \right) dx \\
&\stackrel{(1.25)}{=} \int_{\Omega} \frac{u^k - u^{k-1}}{dt} dx + \int_{\partial\Omega} (-D_u \nabla u^k + \lambda u^k \nabla v^k) \cdot n dS \\
&\stackrel{(2.1c)}{=} \int_{\Omega} \frac{u^k - u^{k-1}}{dt} dx + \int_{\partial\Omega} \left(-D_u \frac{\delta_t u^k}{\partial n} + \lambda u^k \frac{\delta_t v^k}{\partial n} \right) dS = 0, \quad \forall k = 1, \dots, N_t,
\end{aligned}$$

de esto se sigue que

$$\int_{\Omega} u^k dx = \int_{\Omega} u^{k-1} dx, \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \tag{2.3}$$

De las ecuaciones (2.3) fácilmente se sigue el resultado. \square

Corolario 2.2.1. *Si $u^k \geq 0$, se tendrá*

$$\|u^k\|_{L^1(\Omega)} = \|u^0\|_{L^1(\Omega)}. \tag{2.4}$$

Para la cantidad de v , que hemos llamado $V(t) = \int_{\Omega} v(\cdot, t) dx$, tenemos el siguiente resultado:

Proposición 2.2.2. *El esquema en tiempo conduce al esquema de Euler implícito para la EDO que satisface V en (2.1b). Esto es:*

$$\delta_t V^k + \beta V^k - \alpha U^0 = 0, \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \quad (2.5)$$

Demostración. Integramos la ecuación (2.1b) en Ω se tiene

$$\int_{\Omega} \left(\frac{v^k - v^{k-1}}{dt} - D_v \Delta v^k - \alpha u^{k-1} + \beta v^k \right) dx$$

$$\stackrel{(1.25), (2.1c)}{=} \frac{V^k - V^{k-1}}{dt} - \int_{\partial\Omega} D_v \frac{\delta_t v^k}{\partial n} dS - \alpha U^{k-1} + \beta V^k \quad \forall k = 1, \dots, N_t.$$

Recordando la Proposición 2.2.1, se sigue que $U^{k-1} = U^0$ y se tiene el resultado. \square

Veremos ahora si el esquema en tiempo impide la negatividad de las variables.

En primer lugar análogamente al caso continuo, necesitamos la formulación variacional para nuestro esquema en tiempo (2.1a)-(2.1d). Esta se puede obtener directamente traduciendo (1.20) al esquema en tiempo. Asimismo truncaremos la velocidad quimiotáctica u^k por su parte positiva $(u^k)^+$.

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \delta_t u^k \varphi dx + \int_{\Omega} (D_u \nabla u^k - \lambda(u^k)^+ \nabla v^k) \cdot \nabla \varphi dx = 0. \\ \int_{\Omega} (\delta_t v^k - \alpha u^{k-1} + \beta v^k) \varphi dx + \int_{\Omega} D_v \nabla v^k \cdot \nabla \varphi dx = 0. & \varphi \in H^1(\Omega). \\ u^0 = u_0(x), v^0 = v_0(x) \quad \text{en } \Omega. \end{cases} \quad (2.6)$$

Proposición 2.2.3. *Supongamos para el esquema truncado (2.6) que $u^{k-1}, v^{k-1} \geq 0$, entonces se tiene que $u^k, v^k \geq 0$.*

Demostración. Centrándonos en la primera ecuación de (2.6) tomamos como función test su parte negativa $(u^k)^-$, se tiene entonces

$$\int_{\Omega} \frac{u^k - u^{k-1}}{dt} (u^k)^- dx + \int_{\Omega} D_u \nabla u^k \cdot \nabla (u^k)^- dx - \int_{\Omega} \lambda(u^k)^+ \nabla v^k \cdot \nabla (u^k)^- dx = 0$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} ((u^k)^-)^2 dx = \underbrace{\int_{\Omega} u^{k-1} (u^k)^- dx}_{\leq 0} - dt \underbrace{\int_{\Omega} D_u |\nabla (u^k)^-|^2 dx}_{\leq 0}.$$

Teniendo en cuenta la igualdad anterior, se tendrá que

$$\int_{\Omega} ((u^k)^-)^2 dx \leq 0$$

$$\Rightarrow (u^k)^- = 0. \quad (2.7)$$

Se tendrá finalmente que $u^k \geq 0$ en Ω .

Veamos ahora la no negatividad de v^k . Para ello procederemos de forma similar a la demostración de la propiedad del problema continuo y por tanto, tomando $(v^k)^-$ como función test se sigue

$$\int_{\Omega} \frac{v^k - v^{k-1}}{dt} (v^k)^- dx + \int_{\Omega} D_v \nabla v^k \cdot \nabla (v^k)^- dx = \int_{\Omega} \alpha u^{k-1} (v^k)^- dx - \int_{\Omega} \beta v^k (v^k)^- dx,$$

donde reordenando los términos tenemos

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} ((v^k)^-)^2 dx &= \underbrace{\int_{\Omega} v^{k-1} (v^k)^- dx}_{\leq 0} \\ &+ dt \left(\underbrace{\int_{\Omega} \alpha u^{k-1} (v^k)^- dx}_{\leq 0} - \underbrace{\int_{\Omega} \beta ((v^k)^-)^2 dx}_{\leq 0} - \underbrace{\int_{\Omega} D_v |\nabla (v^k)^-|^2 dx}_{\leq 0} \right). \end{aligned}$$

Se sigue que $(v^k)^- = 0$ y en consecuencia $v^k \geq 0$ en Ω . \square

Corolario 2.2.2. *Suponiendo que el esquema truncado (2.6) tiene solución, entonces el esquema sin truncar (2.1a)-(2.1d) posee solución no negativa.*

Finalmente, en lo referente a la ley de energía veremos que aparece un nuevo término; sin embargo, este término promueve la disipación de energía, lo que implica que la energía discreta en tiempo sigue siendo disipativa.

Proposición 2.2.4. *Si (u^k, v^k) son soluciones de (2.1a)-(2.1d), se tiene la siguiente relación:*

$$\delta_t E^k = -D^k - D_{num}^k \leq 0, \quad (2.8)$$

con

$$E^k = \int_{\Omega} (F(u^k) + \lambda D_v \frac{|\nabla v^k|^2}{2} + \beta \lambda \frac{(v^k)^2}{2} - \alpha \lambda u^k v^k) dx, \quad (2.9)$$

y

$$D^k = \int_{\Omega} (\alpha u^k |\nabla (D_u \log u^k - \lambda v^k)|^2 + \lambda (\delta_t v^k)^2) dx, \quad (2.10)$$

las traducciones discretas de los funcionales de energía y disipación continuos. Pero además con otro nuevo término no negativo

$$D_{num}^k = \frac{dt}{2} \int_{\Omega} (F''(\xi(x)) (\delta_t u^k)^2 + \lambda D_v |\delta_t \nabla v^k|^2 + \beta \lambda (\delta_t v^k)^2) dx, \quad (2.11)$$

donde $\xi(x) \in (u^{k-1}(x), u^k(x))$ para cada $x \in \Omega$.

Demostración. Multiplicamos (2.1a) por $\alpha(D_u \log u^k - \lambda v^k)$ y (2.1b) por $\lambda \delta_t v^k$, integramos en Ω y sumamos las ecuaciones. En lo sucesivo omitimos los dx por no sobrecargar la notación.

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{\Omega} \underbrace{\alpha D_u \log u^k}_{F'(u^k)} \delta_t u^k - \int_{\Omega} \alpha \lambda \delta_t u^k v^k + \int_{\Omega} \lambda (\delta_t v^k)^2 - \int_{\Omega} \lambda D_v \Delta v^k \delta_t v^k - \int_{\Omega} \alpha \lambda u^{k-1} \delta_t v^k \\
&\quad - \int_{\Omega} \nabla \cdot (u^k \nabla (D_u \log u^k - \lambda v^k)) \alpha (D_u \log u^k - \lambda v^k) + \int_{\Omega} \beta \lambda v^k \delta_t v^k \\
&= \int_{\Omega} F'(u^k) \delta_t u^k - \delta_t \int_{\Omega} \alpha \lambda u^k v^k + \int_{\Omega} \alpha u^k |\nabla (D_u \log u^k - \lambda v^k)|^2 + \int_{\Omega} \lambda (\delta_t v^k)^2 \\
&\quad + \delta_t \int_{\Omega} \lambda D_v \frac{|\nabla v^k|^2}{2} + dt \int_{\Omega} \lambda D_v \frac{|\delta_t \nabla v^k|^2}{2} + \delta_t \int_{\Omega} \beta \lambda \frac{(v^k)^2}{2} + dt \int_{\Omega} \beta \lambda \frac{(\delta_t v^k)^2}{2},
\end{aligned}$$

donde hemos usado las siguientes propiedades de la derivada discreta:

- (1) $\delta_t u^k v^k + u^{k-1} \delta_t v^k = \delta_t (u^k v^k)$.
- (2) $\delta_t v^k v^k = \frac{1}{2} (\delta_t (v^k)^2 + dt (\delta_t v^k)^2)$.

Es interesante señalar que para el uso de (1) ha sido imprescindible haber tomado el término de producción de v^k como u^{k-1} . Es aquí donde verdaderamente se justifica esta elección

Finalmente, para relacionar $F'(u^k) \delta_t u^k$ con $\delta_t F(u^k)$ realizamos una expansión en serie de Taylor hasta segundo orden de $F(u^{k-1})$ con centro u^k para cada $x \in \Omega$:

$$F(u^{k-1}) = F(u^k) - F'(u^k)(u^k - u^{k-1}) + \frac{F''(\xi(x))}{2}(u^k - u^{k-1})^2, \quad (2.12)$$

donde $\xi(x) \in (u^{k-1}(x), u^k(x))$ para cada $x \in \Omega$.

Reordenando los términos de (2.12), se obtiene fácilmente

$$F'(u^k) \delta_t u^k = \delta_t F(u^k) + dt \frac{F''(\xi)}{2} (\delta_t u^k)^2. \quad (2.13)$$

Con todo esto, identificando los sumandos se tiene fácilmente el resultado. \square

Es importante notar que el término de disipación numérica D_{num}^k que introduce el esquema en tiempo es de orden dt al igual que el orden de la aproximación de dicho esquema.

Capítulo 3

Aproximación en espacio por elementos finitos y diferencias finitas

En este capítulo se aborda el primer intento de discretizar en espacio guiados por la idea de obtener una discretización total de nuestro problema, en vistas de resolverlo numéricamente. Trabajaremos sobre un dominio espacial unidimensional y resolveremos el problema de forma numérica aplicando el método de elementos finitos. No se ha programado el método de diferencias finitas centradas como primer intento de discretización espacial ya que, como se demuestra en este capítulo, los dos métodos sobre nuestro modelo de Keller-Segel en 1D, son equivalentes. Para la realización de este capítulo nos ha sido útil [1].

3.1. Diferencias finitas centradas

Consideramos el problema de Keller Segel unidimensional con la discretización en tiempo. Para cada $k = 1, \dots, N_t$ se tiene

$$(PCo) \begin{cases} \delta_t u^k - u_{xx}^k + ((uv_x))^k = 0 \\ \delta_t v^k - v_{xx}^k + v^k - u^{k-1} = 0, \quad + \text{CC. Neumann.} \\ u^0 = u_0(x), \quad v^0 = v_0(x). \end{cases} \quad (3.1)$$

Para la aproximación en diferencias finitas del esquema en tiempo (3.1), tomaremos una partición del intervalo de espacio Ω con nodos $\{x_n\}_{n=1}^N$ tal que $x_i = x_1 + (i-1)h$ y se trata de definir u_j como aproximación de $u(x_j, \cdot)$.

En primer lugar la aproximación de la derivada segunda se lleva a cabo de esta forma

$$v_{xx}^k(x_j) \approx \frac{v_x^k(x_{j+1/2}) - v_x^k(x_{j-1/2})}{h}. \quad (3.2)$$

Para evaluar (3.2), se precisa de las derivadas aproximadas en los puntos medios de nuestros nodos, estas se aproximan

$$v_x^k(x_{j+1/2}) \approx \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h}. \quad (3.3)$$

Con esta aproximación, (3.2) queda:

$$v_{xx}^k(x_j) \approx \frac{v_{j+1}^k - 2v_j^k + v_{j-1}^k}{h^2}. \quad (3.4)$$

Se tiene entonces la discretización completa de la ecuación para v^k de (3.1)

$$\delta_t v_j^k - \frac{v_{j+1}^k - 2v_j^k + v_{j-1}^k}{h^2} + v_j^k - u_j^{k-1} = 0, \quad (3.5)$$

llevando los términos de conocidos al segundo término tenemos

$$-\frac{1}{h^2}v_{j-1}^k + \left(\frac{1}{dt} + \frac{2}{h^2} + 1\right)v_j^k - \frac{1}{h^2}v_{j+1}^k = \frac{1}{dt}v_j^{k-1} + u_j^{k-1}. \quad (3.6)$$

Para los nodos frontera, consideramos las condiciones de contorno,

$$\begin{cases} u_x^k(x_1) = u_x^k(x_N) = 0, \\ v_x^k(x_1) = v_x^k(x_N) = 0. \end{cases} \quad (3.7)$$

Para tenerlas en cuenta, utilizaremos las derivadas primeras centradas con puntos auxiliares $x_0 = x_1 - h$ y $x_{N+1} = x_N + h$. La aportación de estos nodos, más allá de permitirnos imponer las condiciones de contorno, será nula ya que los valores que toman las variables sobre ellos quedarán ligados a los valores de estas en los puntos interiores mediante las condiciones de contorno. Por tanto, el número de grados de libertad no aumentará y seguirá siendo N (ver Figura 3.1).

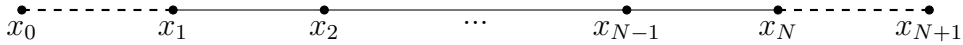


Figura 3.1: Intervalo espacial.

Las derivadas primeras centradas serán por tanto

$$v_x^k(x_j) \approx \frac{v_{j+1}^k - v_{j-1}^k}{2h}. \quad (3.8)$$

Aplicando (3.8) a (3.7) junto con las condiciones de contorno, tendremos para el caso de $j = 1, N$,

$$\begin{aligned} 0 = v_x^k(x_1) &= \frac{v_2^k - v_0^k}{2h} \Rightarrow v_0^k = v_2^k, \\ 0 = v_x^k(x_N) &= \frac{v_{N+1}^k - v_{N-1}^k}{2h} \Rightarrow v_{N+1}^k = v_{N-1}^k. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Por tanto, introduciendo (3.9) en (3.2), obtenemos

$$\begin{aligned} v_{xx}^k(x_1) &= \frac{v_2^k - 2v_1^k + v_0^k}{h^2} = \frac{2v_2^k - 2v_1^k}{h^2}, \\ v_{xx}^k(x_N) &= \frac{v_{N+1}^k - 2v_N^k + v_{N-1}^k}{h^2} = \frac{-2v_N^k + 2v_{N-1}^k}{h^2}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Con lo que la ecuaciones de la discretización de los nodos frontera ya despejadas quedarán

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{dt} + \frac{2}{h^2} + 1\right)v_1^k - \frac{2}{h^2}v_2^k &= u_1^{k-1} + \frac{1}{dt}v_1^{k-1}, \\ -\frac{2}{h^2}v_{N-1}^k + \left(\frac{1}{dt} + \frac{2}{h^2} + 1\right)v_N^k &= u_N^{k-1} + \frac{1}{dt}v_N^{k-1}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Escribiremos matricialmente el sistema de ecuaciones (3.6) ya que nos será útil posteriormente para comparar este esquema con el de elementos finitos.

$$A_v \mathbf{v}^k = B_v, \quad (3.12)$$

siendo

$$\mathbf{v}^k := (v_1^k, \dots, v_N^k)^T, \quad (3.13)$$

el vector de los valores de las aproximaciones de v^k en los nodos. Además con

$$A_v = \left(\frac{1}{dt} + 1\right)I + A_{diff}, \quad (3.14)$$

la matriz de coeficientes, compuesta por la identidad I y

$$A_{diff} = \begin{pmatrix} \frac{2}{h^2} & -\frac{2}{h^2} & & & \\ -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} & -\frac{1}{h^2} \\ & & & & -\frac{2}{h^2} & \frac{2}{h^2} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

la matriz que se corresponde con el término de autodifusión. Y finalmente

$$B_v = \frac{1}{dt} \mathbf{v}^{k-1} + \mathbf{u}^{k-1}, \quad (3.16)$$

el segundo miembro.

Seguidamente obtendremos el sistema de ecuaciones procedentes de la discretización de la primera ecuación de la variable u . Cabe señalar que los dos primeros términos son los mismos que los de la ecuación de v , el término de la derivada temporal y el de difusión. Por tanto únicamente nos ocuparemos del término de quimiotaxis.

$$(uv_x)_x(x_j) \approx \frac{(uv_x)_{j+1/2}^k - (uv_x)_{j-1/2}^k}{h}, \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \quad (3.17)$$

Para aproximar el valor de u^k en un punto intermedio, utilizaremos su valor medio ya que la partición es uniforme.

$$u_{j+1/2}^k \approx \frac{u_{j+1}^k + u_j^k}{2}, \quad (3.18)$$

Por tanto combinando (3.17) y (3.18) tendremos para los nodos x_j

$$(uv_x)_x(x_j) = \frac{1}{h} \left(\frac{u_{j+1}^k + u_j^k}{2} \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} - \frac{u_j^k + u_{j-1}^k}{2} \frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right), \quad (3.19)$$

reordenando los términos de una forma más clara tendremos

$$(uv_x)_x(x_j) = -\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{2h^2} u_{j-1}^k + \frac{v_{j+1}^k - 2v_j^k + v_{j-1}^k}{2h^2} u_j^k + \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{2h^2} u_{j+1}^k. \quad (3.20)$$

Con todo esto, resta particularizar nuestro estudio para los nodos frontera. Al igual que se dedujo en (3.9) para v , se cumplirán para u las mismas ecuaciones ya que la condición en la frontera es la misma, teniéndose entonces

$$\begin{aligned} u_0^k &= u_2^k \\ u_{N+1}^k &= u_{N-1}^k \end{aligned} \quad (3.21)$$

Aplicando por tanto (3.9) y (3.21) a (3.20) para $j = 1, N$, se tendrán las aproximaciones de los valores en los nodos frontera.

$$\begin{aligned} (uv_x)_x(x_1) &= \frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} u_1^k + \frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} u_2^k \\ (uv_x)_x(x_N) &= -\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} u_{N-1}^k - \frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} u_N^k \end{aligned} \quad (3.22)$$

Una vez discretizado el término de quimiotaxis se introduce la discretización del laplaciano que se dedujo para el caso de v . Lo volvemos a escribir en forma matricial.

$$A_u^k \mathbf{u}^k = B_u, \quad (3.23)$$

con

$$A_u^k = \frac{1}{dt} I + A_{diff} + A_{chem}^k, \quad (3.24)$$

la matriz de coeficientes. Entre sus componentes está la identidad I , la matriz de autodifusión y

$$A_{chem}^k = \begin{pmatrix} \frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} & \frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} & & & \\ & \frac{v_2^k - v_1^k}{2h^2} & \frac{v_3^k - 2v_2^k + v_1^k}{2h^2} & \frac{v_3^k - v_2^k}{2h^2} & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \frac{v_{N-1}^k - v_{N-2}^k}{2h^2} & \frac{v_N^k - 2v_{N-1}^k + v_{N-2}^k}{2h^2} & \frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{2h^2} \\ & & & & & \frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} & -\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

la matriz que tiene en cuenta el término de difusión cruzada por quimiotaxis. Finalmente

$$B_u = \frac{1}{dt} \mathbf{u}^{k-1}, \quad (3.26)$$

es el segundo miembro.

El esquema completamente discretizado tiene la siguiente forma:

$$\begin{cases} \delta_t u_j^k - D_u \Delta_h u_j^k + chem_j = 0, \\ \delta_t v_j^k - D_v \Delta_h v_j^k - \alpha u_j^{k-1} + \beta v_j^k = 0, & \forall j = 1, \dots, N, \\ u_j^0 = u_0(x_j), & v_j^0 = v_0(x_j). \end{cases} \quad (3.27)$$

donde $\Delta_h v_j^k$ es aproximación discreta del laplaciano

$$\Delta_h v_j^k = \frac{v_{j+1}^k - 2v_j^k + v_{j-1}^k}{h^2}, \quad (3.28)$$

y donde

$$chem_j^k = \frac{1}{h} \left(\frac{u_{j+1}^k + u_j^k}{2} \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} - \frac{u_j^k + u_{j-1}^k}{2} \frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right). \quad (3.29)$$

es la aproximación discreta del término de quimiotaxis.

3.2. Método de elementos finitos

Para realizar la aproximación mediante el método de elementos finitos, se precisa de la formulación variacional del esquema en tiempo (3.1).

$$(FV) \begin{cases} (\delta_t u^k, \bar{u}) + (u_x^k, \bar{u}_x) - ((uv_x)^k, \bar{u}_x) = 0. \\ (\delta_t v^k, \bar{u}) + (v_x^k, \bar{u}_x) + (v^k, \bar{u}) - (u^{k-1}, \bar{u}) = 0. & \forall \bar{u} \in H^1(\Omega). \\ u^0 = u_0(x), & v^0 = v_0(x). \end{cases} \quad (3.30)$$

Usando nuestra partición espacial definida para método anterior $\{x_n\}_{n=1}^N$, definiremos entonces nuestros elementos (intervalos)

$$I_k = (x_k, x_{k+1}), \quad (3.31)$$

y nuestro espacio para la reducción a dimensión finita

$$V_h = \{v \in C^0(\bar{\Omega}) : v|_{I_k} \in \mathbb{P}_1(I_k) \forall k = 1, \dots, N-1\}, \quad (3.32)$$

tomaremos además las funciones $\{\varphi_n\}_{n=1}^N$ como base de V_h que cumplan

$$\varphi_i(x_j) = \delta_{ij} \quad (3.33)$$

donde δ_{ij} denota la delta de Kronecker. Esta es una definición suficiente ya que quedan determinadas unívocamente

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{k-1}}{h} & \text{si } x \in I_{k-1}. \\ \frac{x_{k+1} - x}{h} & \text{si } x \in I_k. \end{cases} \quad (3.34)$$

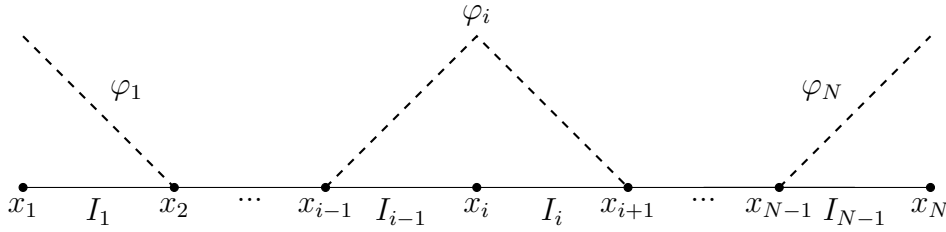


Figura 3.2: Gráfica de las funciones de base.

Aproximaremos nuestras variables $u^k \approx u_h^k \in V_h$ y $v \approx v_h^k \in V_h$, entonces es claro que

$$u_h^k = \sum_{j=1}^N u_j^k \varphi_j, \quad v_h^k = \sum_{j=1}^N v_j^k \varphi_j, \quad (3.35)$$

por constituir las funciones $\{\varphi_n\}_{n=1}^N$ una base de V_h .

Finalmente, se toman como condiciones iniciales para el esquema totalmente discreto la interpolación nodal de los datos iniciales (u_0, v_0) del esquema en tiempo (2.1d).

Con todo lo anterior, se tiene el siguiente esquema completamente discretizado. Para $k = 1, \dots, Nt$,

$$(FV) \begin{cases} (\delta_t u_h^k, \bar{u}) + ((u_h^k)_x, \bar{u}_x) - (u_h^k (v_h^k)_x, \bar{u}_x) = 0. \\ (\delta_t u_h^k, \bar{u}) + ((v_h^k)_x, \bar{u}_x) + (v_h^k, \bar{u}) - (u_h^{k-1}, \bar{u}) = 0. \\ u_h^0 = \sum_{j=1}^N u_0(x_j) \varphi_j(x), \quad v_h^0 = \sum_{j=1}^N v_0(x_j) \varphi_j(x). \end{cases} \quad \forall \bar{u} \in V_h. \quad (3.36)$$

Consecuencia directa de esta formulación se obtiene el siguiente resultado:

Proposición 3.2.1. *El esquema (3.36) conserva la cantidad total de u^k .*

Demostración. Basta tomar $\bar{u} = 1$ y se tendrá

$$(\delta_t u^k, 1) = 0 \Rightarrow \int_{\Omega} u_h^k dx = \int_{\Omega} u_h^{k-1} dx. \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \quad (3.37)$$

□

Además, (3.36) es equivalente a tomar solo como funciones test \bar{u} , las funciones base φ_i , con lo que (3.36) se puede reescribir como sistemas algebraicos, lo que nos permitirá visualizar equivalencia con el método de diferencias finitas.

Realicemos en primer lugar la aproximación de v , partiendo de su ecuación en (3.36).

Tomamos $\bar{u} = \varphi_i$, $i = 1, \dots, N$. Hay que tener en cuenta que gracias a nuestra partición se tiene que

$$\int_{\Omega} a(x) dx = \sum_{k=1}^N \int_{I_k} a(x) dx, \quad (3.38)$$

con esto podremos obtener entonces el siguiente sistema de ecuaciones

$$A_v \mathbf{v}^k = B_v, \quad (3.39)$$

donde

$$A_v = \left(\frac{1}{dt} + 1\right)M + K. \quad (3.40)$$

K se denomina matriz de rigidez, de elementos

$$k_{ij} = ((\varphi_i)_x, (\varphi_j)_x) = \sum_{I_k} \int_{I_k} (\varphi_i)_x (\varphi_j)_x dx. \quad (3.41)$$

M se denomina matriz de masa, cuyos elementos son

$$m_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j) = \sum_{I_k} \int_{I_k} \varphi_i \varphi_j dx. \quad (3.42)$$

y

$$B_v = M\left(\frac{1}{dt} \mathbf{v}^{k-1} + \mathbf{u}^{k-1}\right). \quad (3.43)$$

el segundo miembro.

Evaluemos los elementos de la matriz K para $i \neq 1, N$. A priori se observan distintas propiedades de la matriz:

- Debido a que la intersección de los soportes de los gradientes es no nula únicamente para funciones de base con índices iguales o consecutivos, la matriz será tridiagonal.
- La definición de las funciones de base y la partición uniforme hacen que los elementos opuestos respecto de la diagonal sean iguales. Es decir, $k_{ii-1} = k_{ii+1}$ (idem con la matriz de masa).
- La matriz es simétrica por la simetría del producto escalar.

Estos dos últimos puntos implican que todos los elementos sobre la superdiagonal y la subdiagonal son iguales. Para los nodos interiores se tiene

$$k_{ii} = ((\varphi_i)_x, (\varphi_i)_x) = \sum_{I_k} \int_{I_k} (\varphi_i)_x^2 dx = \int_{I_{i-1}} \left(\frac{1}{h}\right)^2 dx + \int_{I_i} \left(-\frac{1}{h}\right)^2 dx = \frac{2}{h}.$$

$$k_{ii-1} = k_{ii+1} = ((\varphi_i)_x, (\varphi_{i+1})_x) = \sum_{I_k} \int_{I_k} (\varphi_i)_x (\varphi_{i+1})_x dx = \int_{I_i} -\frac{1}{h} \frac{1}{h} dx = -\frac{1}{h}.$$

Por otro lado, para el caso de $i = 1, N$, tendremos 4 elementos de matriz no nulos, de los cuales los 2 que no yacen sobre la diagonal son iguales a $-1/h$ como se discutió anteriormente. Por tanto veremos únicamente los elementos sobre la diagonal.

$$k_{11} = ((\varphi_1)_x, (\varphi_1)_x) = \sum_{I_k} \int_{I_k} (\varphi_1)_x^2 dx = \int_{I_1} \left(-\frac{1}{h}\right)^2 dx = \frac{1}{h}.$$

$$k_{NN} = ((\varphi_N)_x, (\varphi_N)_x) = \sum_{I_k} \int_{I_k} (\varphi_N)_x^2 dx = \int_{I_{N-1}} \left(\frac{1}{h}\right)^2 dx = \frac{1}{h}.$$

Por tanto la matriz de rigidez resulta

$$K = \begin{pmatrix} \frac{1}{h} & & & & \\ -\frac{1}{h} & \frac{2}{h} & & & \\ & -\frac{1}{h} & \frac{2}{h} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -\frac{1}{h} & \frac{2}{h} & -\frac{1}{h} \\ & & & & -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

Estudiaremos ahora la matriz de masa M . Para ella aplicaremos la técnica del “Mass lumping”, que consiste en transformarla en una matriz donde sus elementos se

corresponden con la integral de la interpolación lineal del producto de las funciones de base. Sea $I_h : C_0(\bar{\Omega}) \rightarrow V_h$ la aplicación llamada interpolación nodal que a una función le asocia su interpolación lineal, la cual cumple que $I_h(\varphi_i^2)(x_j) = \varphi_i^2(x_j)$ para todo $i, j = 1, \dots, N$. En general

$$(u, v)_h = \int_{\Omega} I_h(uv) dx, \quad (3.45)$$

es un producto escalar discreto en V_h .

Estos serán los elementos de la matriz de masa con “Mass lumping”

$$\tilde{m}_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j)_h \quad (3.46)$$

que se puede calcular por la regla de los trapecios. El uso de esta técnica viene justificado más adelante, donde nos brindará equivalencias entre distintos métodos como se ve en las Proposiciones (3.2.2) y (6.0.1).

Como $\varphi_i \varphi_j = 0$ en todos los vértices si $i \neq j$, entonces $\tilde{m}_{ij} \neq 0$ solo si $i = j$. Por tanto se tendrá para $i = 1, N$

$$\tilde{m}_{ii} = \frac{|I_{i-1}| + |I_i|}{2} = h. \quad (3.47)$$

Y para $i = 1, N$ resultan los siguientes coeficientes

$$\begin{aligned} \tilde{m}_{11} &= \frac{|I_1|}{2} = \frac{h}{2}, \\ \tilde{m}_{NN} &= \frac{|I_{N-1}|}{2} = \frac{h}{2}. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Y finalmente se presenta la matriz M con “Mass lumping”, que es la matriz diagonal

$$M = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} & & & & \\ & h & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & h & \\ & & & & \frac{h}{2} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

Otra interpretación sobre a qué corresponden los elementos de la matriz con “Mass lumping” y por qué esta recibe este nombre, está recogida en el Apéndice A

Procederemos ahora de forma similar para la ecuación de u^k que recuperaremos de (3.36).

Llegaremos a un sistema de ecuaciones con ciertas similitudes al de v^k , donde el término de la derivada temporal quedará ligado a la matriz de masa M y el término

de difusión se corresponderá con la matriz de rigidez K . Ahora bien, aparecerá el nuevo término de quimiotaxis cuya matriz resultante tendremos que estudiar como en casos anteriores.

Por tanto el sistema para u^k resulta

$$A_u^k \mathbf{u}^k = B_u, \quad (3.50)$$

siendo

$$A_u^k = \frac{1}{dt} M + K - Q^k, \quad (3.51)$$

la matriz de coeficientes y K y M las matrices de rigidez y masa descritas anteriormente.

Q^k es la matriz que tiene en cuenta el término de quimiotaxis, los elementos de esta matriz serán

$$q_{ij}^k = ((\varphi_i)_x, \varphi_j \left(\sum_{l=1}^N v_l^k (\varphi_l)_x \right)) = \sum_{I_k} \sum_{l=1}^N v_l^k \int_{I_k} (\varphi_i)_x \varphi_j (\varphi_l)_x dx. \quad (3.52)$$

Por otro lado, el segundo miembro será

$$B_u = \frac{1}{dt} M \mathbf{u}^{k-1}. \quad (3.53)$$

Evaluemos entonces los elementos de la matriz Q . Es evidente que la matriz es tridiagonal, ya que si las funciones de base no tienen índices consecutivos o iguales, sus soportes son disjuntos. Esta reflexión nos lleva a que dado un i , los elementos no nulos se dan para $j, l \in \{i-1, i, i+1\}$. Se calculan entonces los términos de la matriz para $i \neq 1, N$.

$$\begin{aligned} q_{ii}^k &= \sum_{l=i-1}^i v_l^k \int_{I_{i-1}} (\varphi_i)_x \varphi_i (\varphi_l)_x dx + \sum_{l=i}^{i+1} v_l^k \int_{I_i} (\varphi_i)_x \varphi_i (\varphi_l)_x dx \\ &= \frac{1}{h} \sum_{l=i-1}^i v_l^k \int_{I_{i-1}} \varphi_i (\varphi_l)_x dx - \frac{1}{h} \sum_{l=i}^{i+1} v_l^k \int_{I_i} \varphi_i (\varphi_l)_x dx \\ &= \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_{i-1}^k \int_{I_{i-1}} \varphi_i dx + \frac{1}{h} v_i^k \int_{I_{i-1}} \varphi_i dx \right) - \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_i^k \int_{I_i} \varphi_i dx + \frac{1}{h} v_{i+1}^k \int_{I_i} \varphi_i dx \right) \\ &= \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_{i-1}^k \frac{h}{2} + \frac{1}{h} v_i^k \frac{h}{2} \right) - \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_i^k \frac{h}{2} + \frac{1}{h} v_{i+1}^k \frac{h}{2} \right) = -\frac{v_{i+1}^k - 2v_i^k + v_{i-1}^k}{2h}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} q_{ii-1}^k &= \sum_{l=i-1}^i v_l^k \int_{I_{i-1}} (\varphi_i)_x \varphi_{i-1} (\varphi_l)_x dx = \frac{1}{h} \sum_{l=i-1}^i v_l^k \int_{I_{i-1}} \varphi_{i-1} (\varphi_l)_x dx \\ &= \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_{i-1}^k \int_{I_{i-1}} \varphi_{i-1} dx + \frac{1}{h} v_i^k \int_{I_{i-1}} \varphi_{i-1} dx \right) = \frac{1}{h} \left(-\frac{1}{h} v_{i-1}^k \frac{h}{2} + \frac{1}{h} v_i^k \frac{h}{2} \right) \\ &= \frac{v_i^k - v_{i-1}^k}{2h}. \end{aligned}$$

Demostración. Se ve fácilmente cumplen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} M &= M I, \\ K &= M A_{diff}, \\ Q^k &= -M A_{chem}. \end{aligned} \tag{3.55}$$

Las igualdades (3.55) indican que las ecuaciones resultantes de los dos métodos son equivalentes. A la vista de estas, las ecuaciones del método de elementos finitos son las de diferencias finitas multiplicadas por h para los nodos interiores y por $h/2$ para los nodos frontera. Cabe destacar que el “Mass lumping” ha sido crucial para tener esta equivalencia. \square

3.3. Simulación y análisis de los resultados. Oscilaciones espúreas

El código que se ha utilizado para conseguir las aproximaciones, se ha hecho con la metodología de elementos finitos, realizando un barrido por elementos para construir las diferentes matrices. El script de MATLAB en el que se ha implementado el método se encuentra en el Apéndice B

Para el intervalo espacial tomamos $\Omega = (-1, 1)$ y para el temporal $(0, 0, 5)$. Tomamos los valores de los parámetros como $D_u = D_v = \beta = 1$, $\lambda = 10$ y $\alpha = 50$. Asimismo como valores iniciales tomaremos $u_0(x) = 10(x+1)^2(x-1)^2$ y $v_0(x) = 10 \sin^2(2\pi x)$.

Para un primer cálculo tomamos los valores de paso espacial $h = 0,001$ y paso temporal $dt = 0,002$.

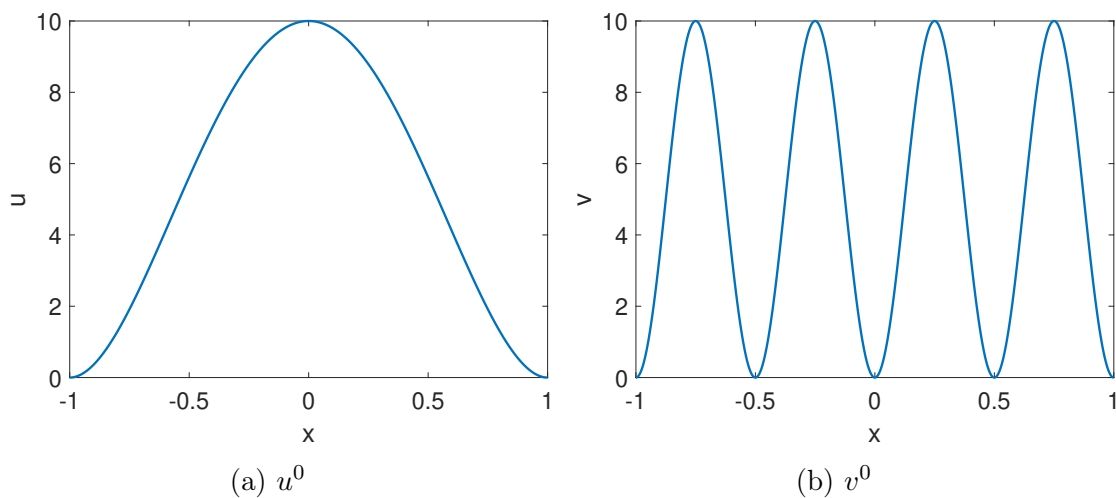


Figura 3.3: Condiciones iniciales.

Esta solución evolucionará en el tiempo sin errores apreciables a simple vista pero como ilustra la Figura 3.4, llega un punto en el que la aproximación empieza a tomar valores negativos. Aún así, estos son pocos y prácticamente inapreciables en la imagen. Además la escasez de estos permite al programa continuar aproximando la solución y volviendo incluso a eliminar la negatividad para siguientes pasos de tiempo.

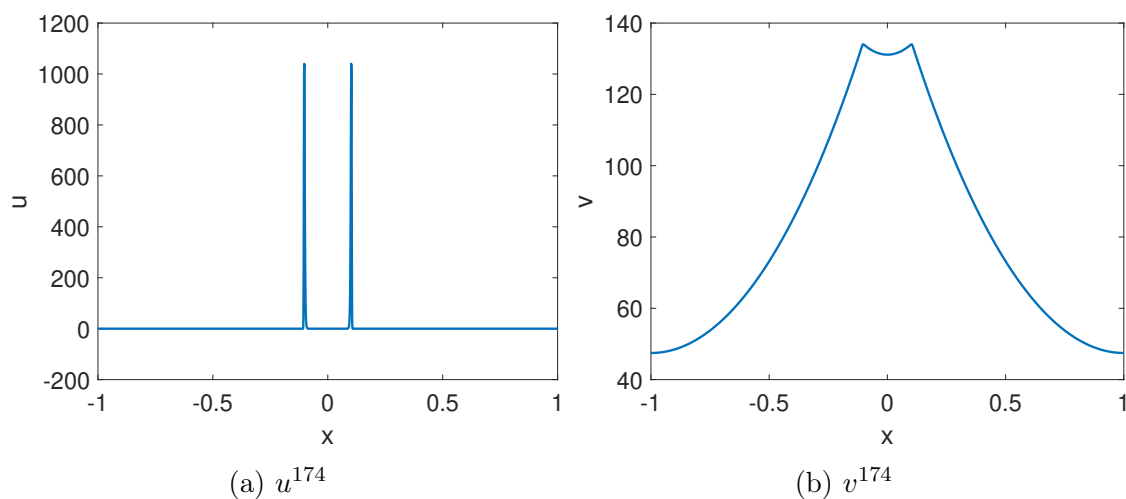


Figura 3.4: Aproximación para $t_{174} \approx 0,3$.

Posteriormente, en la Figura 3.5 se aprecia cómo el método empieza a aproximar la solución cometiendo grandes errores, los cuales se van acumulando y magnificando a media que se obtienen las aproximaciones para siguientes etapas de tiempo. Todo esto acaba dando lugar a aproximaciones erróneas, las cuales presentan oscilaciones espúreas e impropias de la solución exacta.

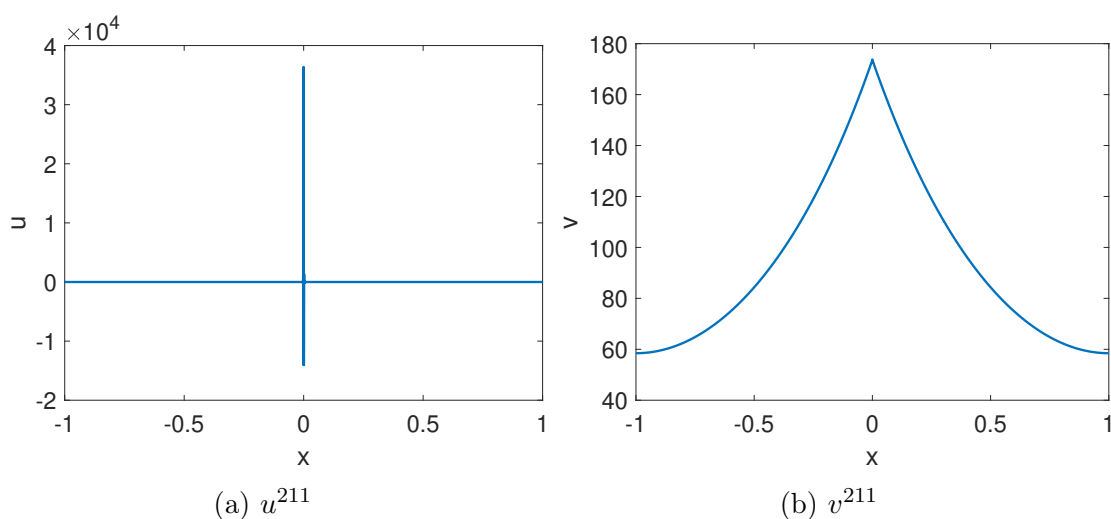


Figura 3.5: Aproximación para $t_{211} \approx 0,4$.

Además de las gráficas de las propias funciones u y v , es interesante estudiar cómo nuestro modelo aproxima las demás propiedades del problema continuo, los cuales nos servirán como indicadores adicionales de la bondad de la aproximación. Con este objetivo, se muestran las gráficas de la cantidad total de células y sustancia química, y las de la energía. Evidentemente, será necesario definir estos conceptos para nuestra aproximación.

En primer lugar, como cada $u^k, v^k \in V_h$, denotaremos a la cantidad total de u (v) en el tiempo t_k como $C_u^k = \int_{\Omega} u^k dx$ ($C_v^k = \int_{\Omega} v^k dx$). Como u^k y v^k son localmente segmentos y globalmente continuas, la integral se puede calcular con la regla de los trapecios

$$C_u^k = \frac{h}{2}(u_1 + u_N) + h \sum_{j=2}^{N-1} u_j. \quad (3.56)$$

Representaremos entonces la cantidad total de u y v en función del tiempo

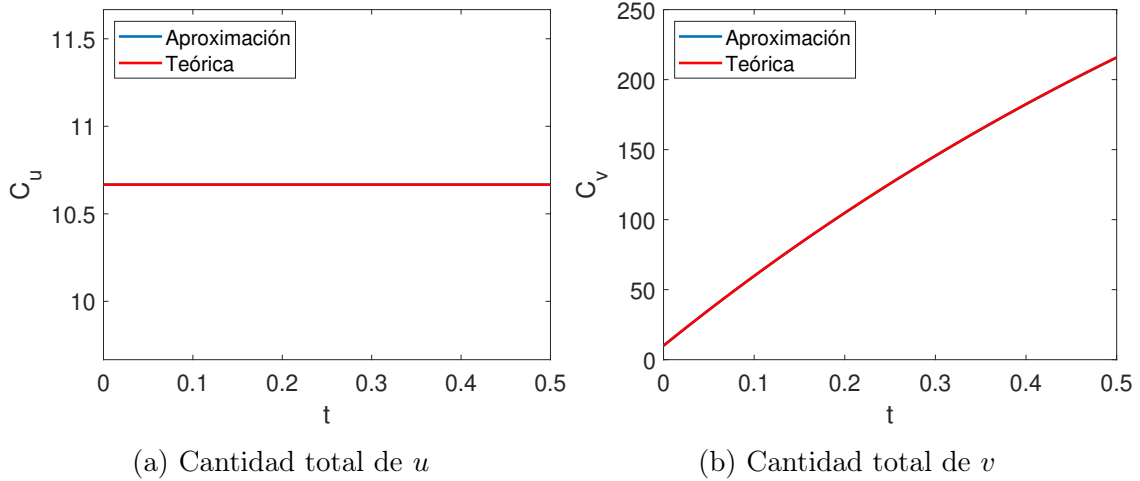


Figura 3.6: Cantidad total.

Como se aprecia en la Figura 3.6, el esquema reproduce correctamente la conservación de la cantidad total de u , como se demostró en la Proposición 3.2.1 y a su vez, parece aproximar correctamente la dinámica que sigue la cantidad total de v , al menos con estos datos.

Por otro lado, con una filosofía similar a la de la cantidad total, calcularemos la energía discreta E^k de la energía asociada al problema que se definió en (2.9). Para calcularla, encontramos un problema adicional, el valor de $(v_x^k)^2$ no está definido en los nodos. Para ello, se aproxima v_x^k en cada nodo de forma centrada como se

presentó en (3.8). Con esto, podemos aplicar la fórmula de los trapecios.

$$\begin{aligned}
 E^k &= \frac{h}{2}(F(u_1) + F(u_N) + \beta\lambda\frac{v_1^2 + v_N^2}{2}) - \alpha\lambda(u_1^k v_1^k + u_N^k v_N^k) \\
 &+ h \sum_{j=2}^{N-1} (F(u_j) + \lambda D_v \frac{1}{2} \left(\frac{v_{j+1} - v_{j-1}}{2h} \right)^2 + \beta\lambda\frac{v_j^2}{2} - \alpha\lambda u_j^k v_j^k)
 \end{aligned} \tag{3.57}$$

Asimismo aproximaremos la disipación de un modo similar:

$$\begin{aligned}
 D^k &= \frac{h}{2}\lambda((\delta_t v_1^k)^2 + (\delta_t v_N^k)^2) \\
 &+ h \sum_{j=2}^{N-1} \alpha u_j^k \left(D_u \frac{\log(u_{j+1}^k) - \log(u_{j-1}^k)}{2h} - \lambda \frac{(v_{j+1}^k) - (v_{j-1}^k)}{2h} \right)^2 + \lambda(\delta_t v_j^k)^2.
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

Representaremos dos gráficas en una se representan en función del tiempo la aproximación de la energía E^k , y en la otra, una aproximación de la ley de energía, que llamaremos $LE^k = \delta_t E^k + D^k$ para $k > 0$. Idealmente la primera deberá ser decreciente y la segunda no positiva, ya que como vimos, el esquema en tiempo introducía disipación numérica. Se toma un intervalo de tiempo donde la aproximación aún no toma valores negativos, ya que para estos, ni el término de energía ni el de disipación están definidos.

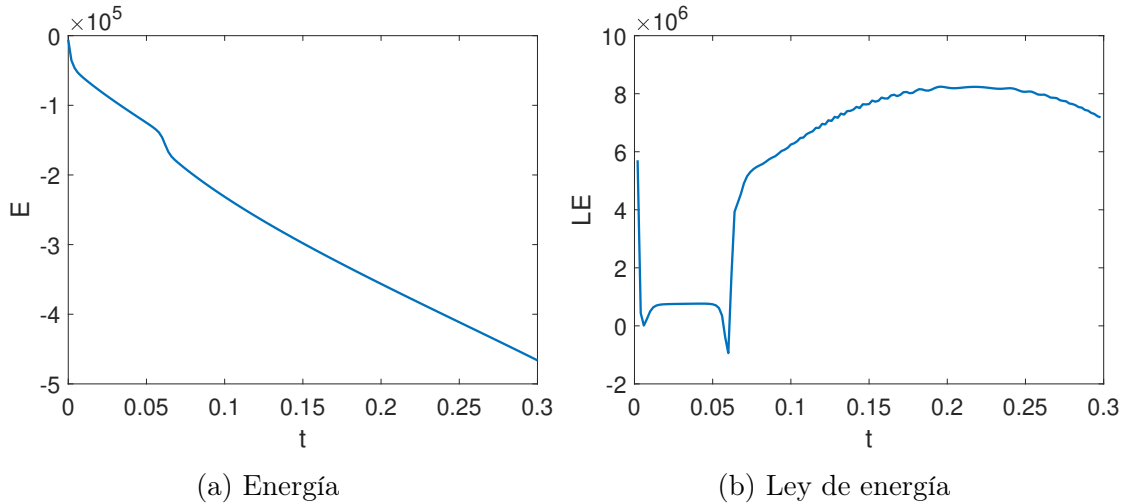


Figura 3.7: Gráficas de la energía.

En la gráfica 3.7a se observa cómo a priori sí se tiene que la energía es decreciente en las etapas anteriores a alcanzar valores negativos. Sin embargo, la gráfica 3.7b nos dice que la dinámica que representa la ley de energía discreta, está tomando valores positivos en algunos tiempos. Este hecho nos está indicando que el esquema en espacio está introduciendo fuente numérica respecto de la ley de energía. Si la fuente numérica que es capaz de introducir el esquema en espacio superase a nuestros dos

términos de disipación D^k , ocurriría que la energía aproximada no sería decreciente, aunque este efecto en nuestro ejemplo no se observa y tampoco se ha demostrado que pueda o no pueda ocurrir.

En el Capítulo 2 vimos que la aproximación en tiempo impedía la negatividad, entonces es interesante comprobar numéricamente si el responsable de esta es, efectivamente, la aproximación en espacio. Para ello, observaremos la solución calculada cambiando el valor de h .

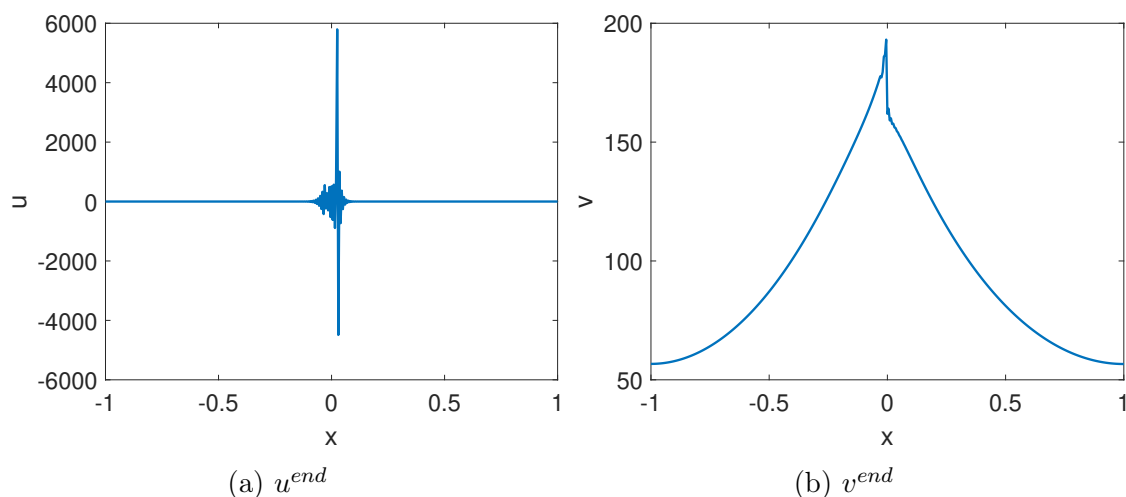


Figura 3.8: Aproximación en tiempo final para $h' = 5h$.

Al tomar un h mayor, como se aprecia en la Figura 3.8, se pone de manifiesto que la aproximación en espacio es la culpable de la negatividad, ya que esta presenta un comportamiento totalmente caótico.

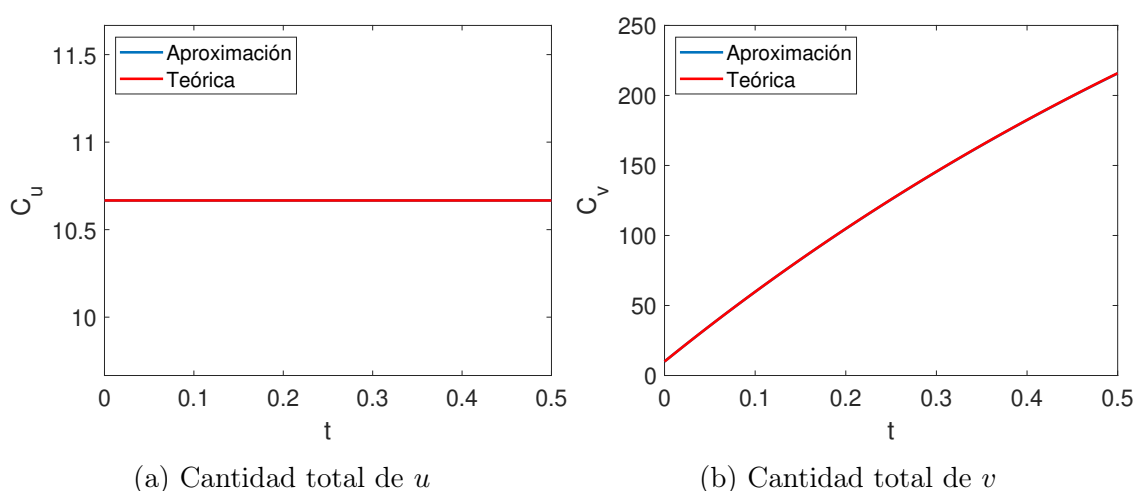


Figura 3.9: Cantidad total para $h' = 5h$.

Es interesante señalar tal y como se aprecia en la Figura 3.9, que incluso dando

lugar a soluciones sin sentido, el esquema sigue reproduciendo la conservación de la cantidad total de u . Esto es, como se vio en Proposición 3.2.1 fruto de la propia naturaleza del esquema de elementos finitos. Asimismo, un comportamiento regular de la cantidad total de v también se reproduce.

Para este caso, las gráficas de la energía no se representan ya que, para este valor de h , las variables son negativas en tiempos bastante cercanos al inicial.

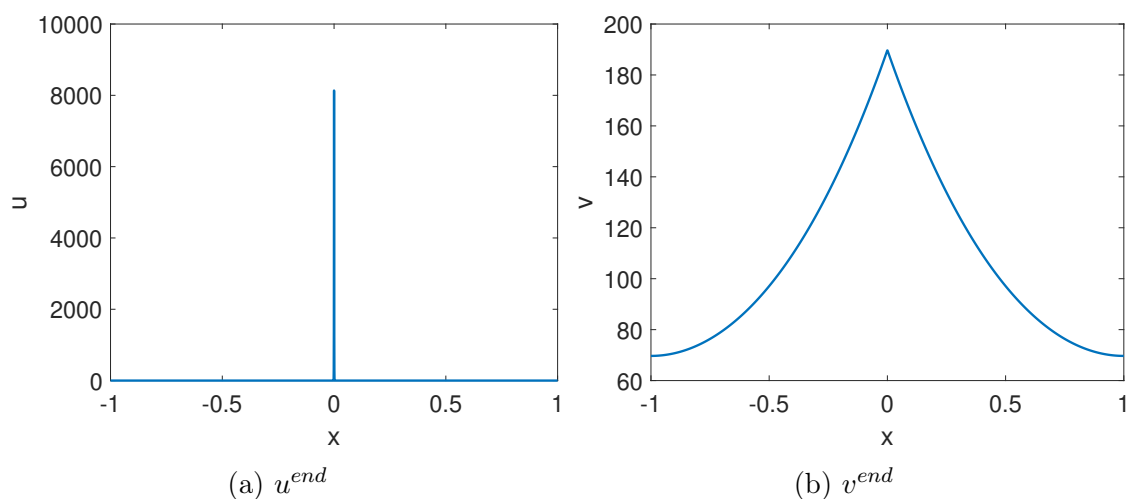


Figura 3.10: Aproximación en tiempo final para $h' = h/2$.

Tomando ahora un h menor, como se ve en la Figura 3.10, ya no se observan valores negativos y se corrobora el hecho de que el causante de la negatividad es la aproximación en espacio.

Las cantidades totales aproximadas siguen cumpliendo correctamente lo esperado para la solución del problema continuo, por lo que se omiten las gráficas ya que son similares al caso anterior.

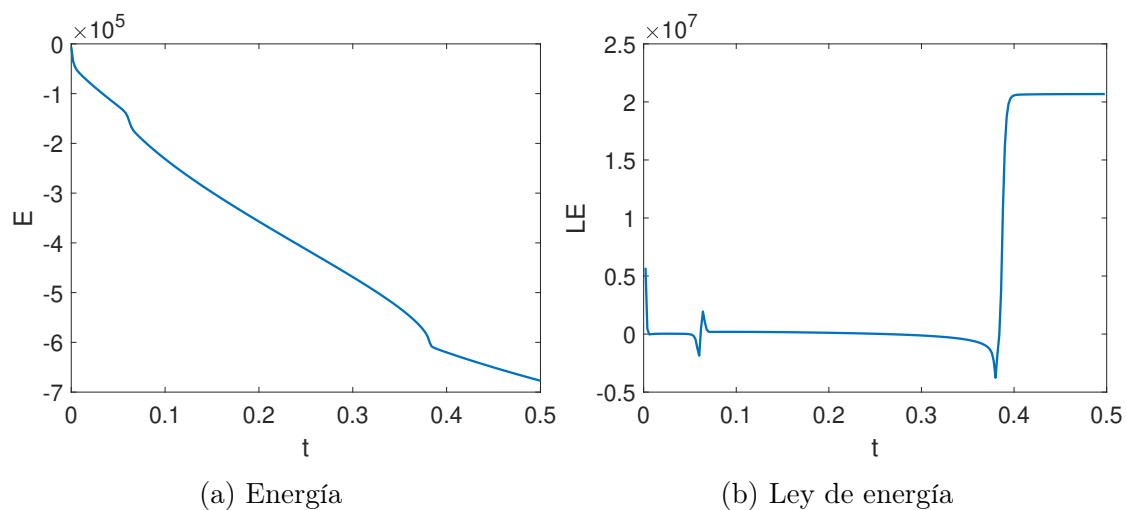


Figura 3.11: Gráficas de la energía.

Finalmente, como se aprecia en la Figura 3.11, se sigue teniendo que la energía es decreciente y que el esquema en espacio es capaz de introducir fuente numérica en algunos tiempos.

Capítulo 4

Diferencias finitas descentradas

Para lograr unas soluciones no negativas, salta a la vista por los resultados obtenidos en la Sección 3.3 que necesitamos modificar la aproximación en espacio de forma adecuada.

4.1. La técnica del descentrado

Se propone una aproximación descentrada para el término de quimiotaxis. Este primer intento de descentrado se realiza en el caso de las diferencias finitas; esto es, sobre la misma partición del dominio introducida en la Sección 3.1 y considerando una partición uniforme con nodos auxiliares, ilustrada en la Figura 3.1. Asimismo, se considerarán las mismas ligaduras impuestas por las condiciones de contorno sobre las variables auxiliares, las cuales están recogidas en las ecuaciones (3.9) y (3.21).

Por tanto, nuestra misión consiste en estimar de forma distinta el valor de $(uv_x)_x(x_j)$. Comenzando del mismo modo que en el caso anterior, haremos uso de la ecuación (3.17). Ya con esto, el trabajo se reduce a conseguir una nueva aproximación descentrada del flujo $(uv_x)_{j\pm 1/2}^k$.

Ya con todo esto se considera la siguiente aproximación descentrada

$$(uv_x)_{j+1/2}^k \approx \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^+ u_j + \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^- u_{j+1}. \quad (4.1)$$

Para el caso de $((uv_x)^k)_{j-1/2}$ basta con considerar la ecuación anterior reemplazando j por $j - 1$.

$$(uv_x)_{j-1/2}^k \approx \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^+ u_{j-1} + \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^- u_j. \quad (4.2)$$

Esta elección para el descentrado da nombre al método de discretización, que se denomina “Upwind”. La justificación física de este nombre proviene de que un valor $v_x^k > 0$ (< 0) entre nodos indica que la variable u^k es arrastrada hacia la derecha (izquierda), y nosotros siempre aproximaremos u^k en el punto intermedio como el valor que toma en el nodo que queda en sentido contrario al arrastre, el de la izquierda (derecha). Este método de aproximación, en principio puede parecer un poco arbitrario, por ello lo justificaremos matemáticamente en la Sección 4.2.

Con esto, podremos obtener la aproximación descentrada para $((uv_x)_x)^k(x_j)$.

$$\begin{aligned} (uv_x)_x^k(x_j) &\approx \frac{(uv_x)_{j+1/2}^k - (uv_x)_{j-1/2}^k}{h} \approx \\ &\frac{1}{h} \left(\left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^+ u_j + \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^- u_{j+1} - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^+ u_{j-1} - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^- u_j^k \right) \\ &- \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h^2} \right)^+ u_{j-1}^k + \left(\left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h^2} \right)^+ - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h^2} \right)^- \right) u_j^k + \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h^2} \right)^- u_{j+1}^k. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Veamos ahora la aproximación para los nodos frontera teniendo en cuenta las condiciones de contorno (3.9) y (3.21). Lo haremos para $j = 1$ ya que el tratamiento para $j = N$ es análogo. Sustituyendo $j = 1$ en la ecuación (4.3) se tiene

$$\begin{aligned} (uv_x)_x^k(x_1) &\approx - \left(\frac{v_1^k - v_0^k}{h^2} \right)^+ u_0^k + \left(\left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^+ - \left(\frac{v_1^k - v_0^k}{h^2} \right)^- \right) u_1^k + \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^- u_2^k \\ &\stackrel{(3.9),(3.21)}{=} \left(\left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^+ - \left(-\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^- \right) u_1^k + \left(\left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^- - \left(-\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^+ \right) u_2^k \\ &\stackrel{(4.5)}{=} 2 \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^+ u_1^k + 2 \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^- u_2^k, \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde hemos usado una propiedad de las partes positiva y negativa

$$(-a)^\pm = -a^\mp. \quad (4.5)$$

Equivalentemente para $j = N$

$$(uv_x)_x^k(x_N) \approx -2 \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} \right)^+ u_{N-1}^k - 2 \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h^2} \right)^- u_N^k. \quad (4.6)$$

El esquema completamente discretizado de diferencias finitas descentradas para la quimiotaxis queda

$$\begin{cases} \delta_t u_j^k - D_u \Delta u_j^k + \text{quim}_j^{upw} = 0, \\ \delta_t v_j^k - D_v \Delta v_j^k - \alpha u_j^{k-1} + \beta v_j^k = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \\ u_j^0 = u_0(x_j), \quad v_j^0 = v_0(x_j), \end{cases} \quad (4.7)$$

donde el término de quimiotaxis descentrado es

$$\text{quim}_j^{upw} = -\frac{((v_x^k)_{j-1/2})^+}{h^2}u_{j-1}^k + \frac{(((v_x^k)_{j+1/2})^+ - ((v_x^k)_{j-1/2})^-)}{h^2}u_j^k + \frac{((v_x^k)_{j+1/2})^-}{h^2}u_{j+1}^k. \quad (4.8)$$

4.2. Análisis numérico del esquema descentrado (I)

Esta formulación descentrada en diferencias finitas nos permitirá obtener aproximaciones no negativas.

En primer lugar estudiaremos la ecuación de v^k , la cual proviene de una aproximación centrada en espacio. Fijado un $j = 1, \dots, N$ consideramos la ecuación para v_j de nuestro esquema centrado en cada etapa de tiempo k .

$$\frac{v_j^k - v_j^{k-1}}{dt} - \frac{1}{h} \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} + \frac{v_{j-1}^k - v_j^k}{h} \right) + v_j^k = u_j^{k-1}. \quad (4.9)$$

Proposición 4.2.1. *Supongamos que $u^{k-1}, v^{k-1} \geq 0$, entonces se tiene que $v^k \geq 0$. Si además la desigualdad se da de forma estricta para u_j^{k-1} o v_j^{k-1} entonces $v^k > 0$.*

Demostración. En primer lugar reordenaremos (4.9) y se tendrá que

$$v_j^k = \underbrace{\left(\frac{1}{dt} + 1 \right)^{-1}}_{>0} \left(\underbrace{u_j^{k-1}}_{\geq 0} + \underbrace{\frac{v_j^{k-1}}{dt}}_{\geq 0} + \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h^2} - \frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h^2} \right). \quad (4.10)$$

Queda solo estudiar el signo de nuestra derivada segunda discreta. Supongamos ahora que $v_r^k = \min_{j=1, \dots, N} v_j^k$, por tanto la condición de mínimo implica que

$$\begin{cases} v_{r+1}^k - v_r^k \geq 0, \\ v_{r-1}^k - v_r^k \geq 0. \end{cases} \quad (4.11)$$

Y se tendrá finalmente recordando (4.10) que $v_r^k \geq 0$ y por tanto $v_j^k \geq 0$ para todo $j = 1, \dots, N$.

Si el mínimo se diese para un nodo frontera, sería necesario aplicar las condiciones de contorno (3.9), pero el resultado es el mismo.

Finalmente, si se diese la desigualdad estricta para u_j^{k-1} o v_j^{k-1} , es claro viendo (4.10) que al menos uno de los sumandos del numerador será no nulo y por tanto $v^k > 0$. Esto último indica que la aproximación de v^k no presentaría “núcleos muertos”; es decir, zonas con aproximación de v igual a 0.

□

Asimismo es interesante comentar que en la ecuación (4.9) se observa fácilmente que en el caso de que en vez de mínimo, v_r^k fuera el máximo, las desigualdades en (4.11) cambiarían de sentido y el término del laplaciano discreto tendría signo positivo. Esto nos indica que, en este caso, dicho término tendería a disminuir $\delta_t v_r^k$, o lo que es lo mismo, trata de disminuir el valor de v_r^k . En resumen, se observa que la aproximación centrada del laplaciano trata de homogeneizar la solución como hace el término del laplaciano continuo.

Es importante señalar que ha sido imprescindible el uso de la técnica de “Mass lumping” en el método de elementos finitos para obtener la equivalencia de la ecuación de v^k con su análoga de diferencias finitas, y por tanto esta propiedad.

Ya tras este estudio, se observa que ni el tratamiento centrado del término de autodifusión, ni nuestra elección implícita para el término de autodegradación, y explícita para el término de producción por u^k , producen para v^k resultados negativos siempre y cuando u^k se mantenga positiva. Por tanto, se pone de manifiesto que la única fuente de negatividad en nuestro esquema centrado provenía de aproximar el término de quimiotaxis de forma centrada.

Veamos ahora que esta nueva aproximación descentrada del término de quimiotaxis es una elección que impide la negatividad de la aproximación de u^k .

En este punto, con la misma idea con la que se demostró la no negatividad para el problema continuo y el discretizado únicamente en tiempo, procedemos a truncar la velocidad quimiotáctica u^k por su parte positiva $(u^k)^+$, y demostraremos la no negatividad para el esquema truncado de (4.7).

Proposición 4.2.2. *Supongamos sobre el esquema descentrado y truncado (no lineal) que se tiene $u^{k-1} \geq 0$ (> 0), entonces $u^k \geq 0$ (> 0).*

Demostración. Asumimos por reducción al absurdo que $0 > u_r^k = \min_{j=1,\dots,N} u_j^k$. Considerando que $u_j^{k-1} \geq 0$ para $j = 1, \dots, N$, tendremos

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{u_r^k - u_r^{k-1}}{dt} - \frac{1}{h} \left(\frac{u_{r+1}^k - u_r^k}{h} - \frac{u_r^k - u_{r-1}^k}{h} \right) - \left(\frac{v_r^k - v_{r-1}^k}{h^2} \right)^+ (u_{r-1}^k)^+ \\ &+ \left(\left(\frac{v_{r+1}^k - v_r^k}{h^2} \right)^+ - \left(\frac{v_r^k - v_{r-1}^k}{h^2} \right)^- \right) \cancel{(u_r^k)^+} + \left(\frac{v_{r+1}^k - v_r^k}{h^2} \right)^- (u_{r+1}^k)^+. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Reordenando (4.12) obtenemos

$$\begin{aligned}
 u_r^k &= \underbrace{u_r^{k-1}}_{\geq 0} + dt \underbrace{\left(\frac{u_{r+1}^k - u_r^k}{h^2} - \frac{u_r^k - u_{r-1}^k}{h^2} \right)}_{\geq 0} \\
 &+ \underbrace{dt}_{\geq 0} \left(\underbrace{\left(\frac{v_r^k - v_{r-1}^k}{h^2} \right)^+}_{\geq 0} (u_{r-1}^k)^+ - \underbrace{\left(\frac{v_{r+1}^k - v_r^k}{h^2} \right)^-}_{\geq 0} (u_{r+1}^k)^+ \right) \geq 0.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

Y se tendría por tanto que $u_j^k \geq 0$ para todo $j = 1, \dots, N$.

Si se diese el caso de que el mínimo se alcanzase en alguno de los nodos frontera, procedemos a obtener un resultado similar aplicando las condiciones de contorno (3.21). Supongamos que se da en la frontera izquierda sin pérdida de generalidad, ya para la frontera derecha el razonamiento es análogo. Entonces suponiendo por reducción al absurdo que u_1^k es mínimo y negativo, y asumiendo que $u_1^{k-1} \geq 0$. Procedemos igual que antes

$$u_r^k = \underbrace{u_r^{k-1}}_{\geq 0} + dt \underbrace{\frac{2v_2^k - 2v_1^k}{h^2}}_{\geq 0} + \underbrace{dt}_{\geq 0} \left(2 \left(-\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^+ \underbrace{(u_1^k)^+}_{\geq 0} - 2 \underbrace{\left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h^2} \right)^-}_{\geq 0} (u_2^k)^+ \right) \geq 0. \tag{4.14}$$

Por tanto, acabamos de demostrar que $u_j^k \geq 0$ para todo $j = 1, \dots, N$ y todo $k = 0, \dots, N_t$ para el problema truncado.

En el caso de que $u_j^{k-1} > 0$ para todo $j = 1, \dots, N$, bastaría repetir la demostración asumiendo por reducción al absurdo que $u_r^k \leq 0$ y se tendría finalmente que $u_j^k > 0$. Esto es, la aproximación de u fruto del esquema no presentaría “núcleos muertos”. \square

Corolario 4.2.1. *Si sobre el esquema descentrado y truncado $u^0, v^0 \geq 0$, entonces $u^k, v^k \geq 0$ para todo $k = 1, \dots, N_t$.*

Corolario 4.2.2. *Si el esquema descentrado y truncado tiene solución, entonces existe una solución no negativa del esquema descentrado sin truncar.*

4.3. Simulaciones y análisis de resultados

En esta sección compararemos numéricamente las aproximaciones que producen el esquema descentrado (4.7) con las del esquema centrado de la Sección 3.3. Para ello, tomaremos el mismo dominio espacio-temporal, los mismos valores de los

parámetros y de las condiciones iniciales. El script de MATLAB en el que se ha implementado el método en encuentra en el Apéndice B.

En primer lugar, la diferencia más importante respecto del caso centrado (ver Figura 3.5) es que el esquema descentrado goza de no negatividad incondicional, como se demostró en 4.2. Este hecho se aprecia en la Figura 4.1.

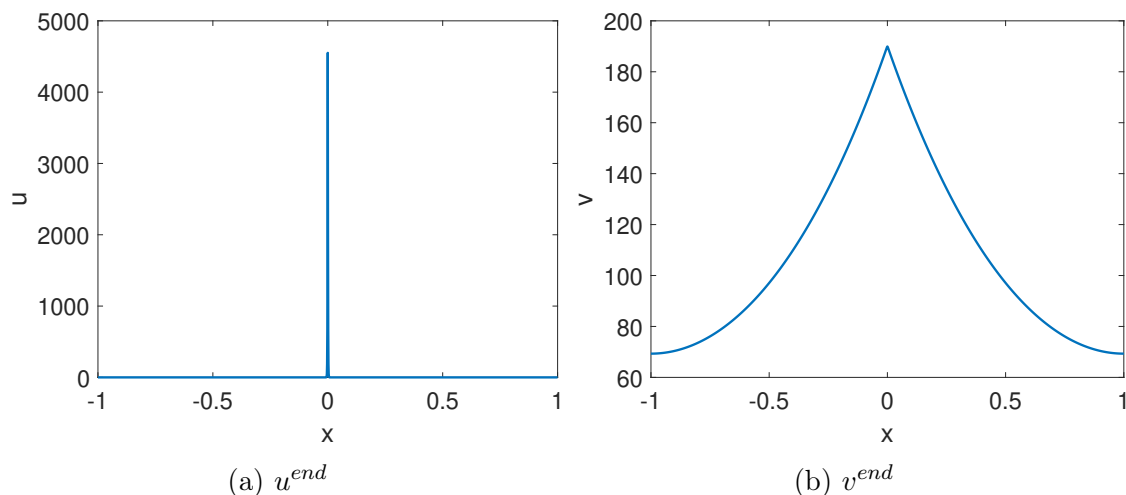


Figura 4.1: Aproximación en tiempo final.

Asimismo, es interesante comprobar cómo el esquema aproxima las demás propiedades del modelo.

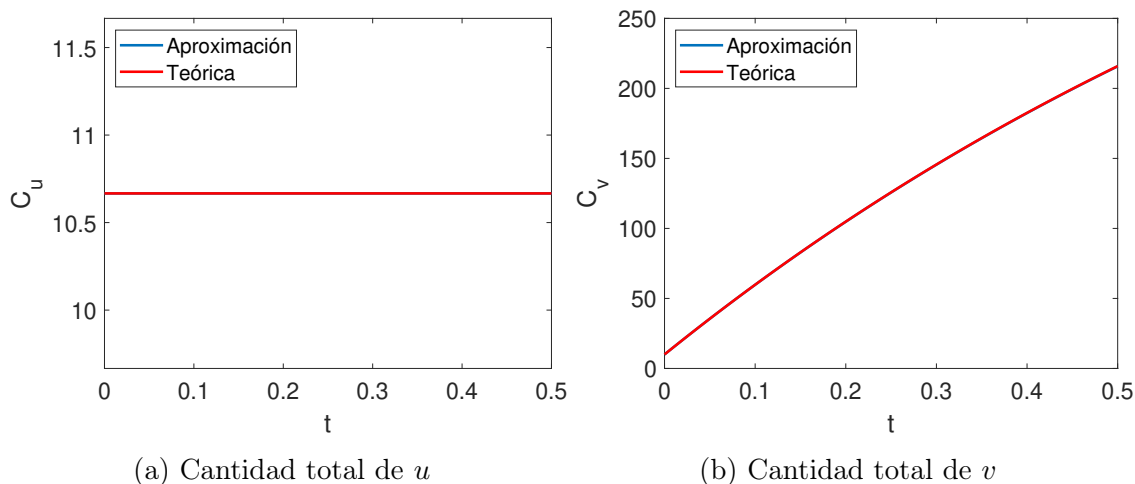


Figura 4.2: Cantidad total.

La Figura 4.2 sugiere que el esquema descentrado sigue reproduciendo correctamente la conservación de la cantidad total de u y la evolución de la cantidad total de v . De hecho, la conservación de la cantidad total de u es una propiedad demostrable de este esquema que se prueba posteriormente en la Sección 6.1.

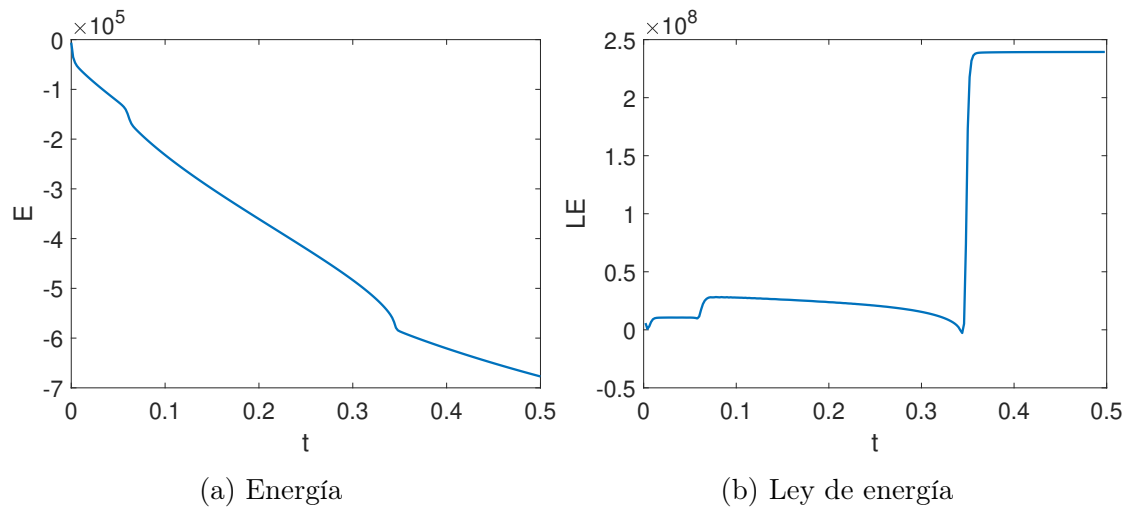


Figura 4.3: Gráficas de la energía.

En la Figura 4.3, observamos que la aproximación de la energía es decreciente en este caso y que la aproximación introduce fuente numérica en algunos tiempos.

Finalmente, es interesante comparar la aproximación que se obtuvo con el esquema centrado disminuyendo h con su análoga en el esquema descentrado.

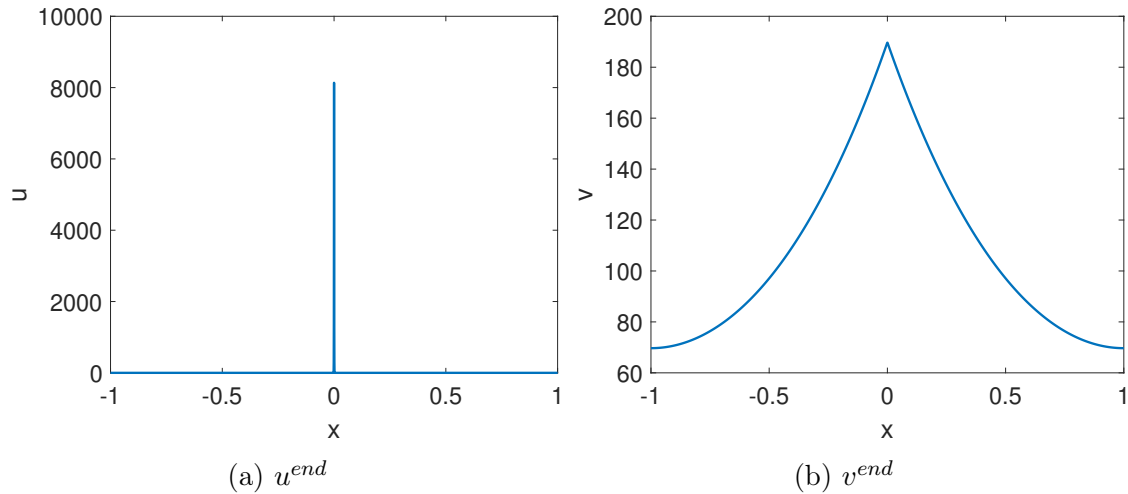


Figura 4.4: Aproximación centrada en tiempo final para $h' = h/2$.

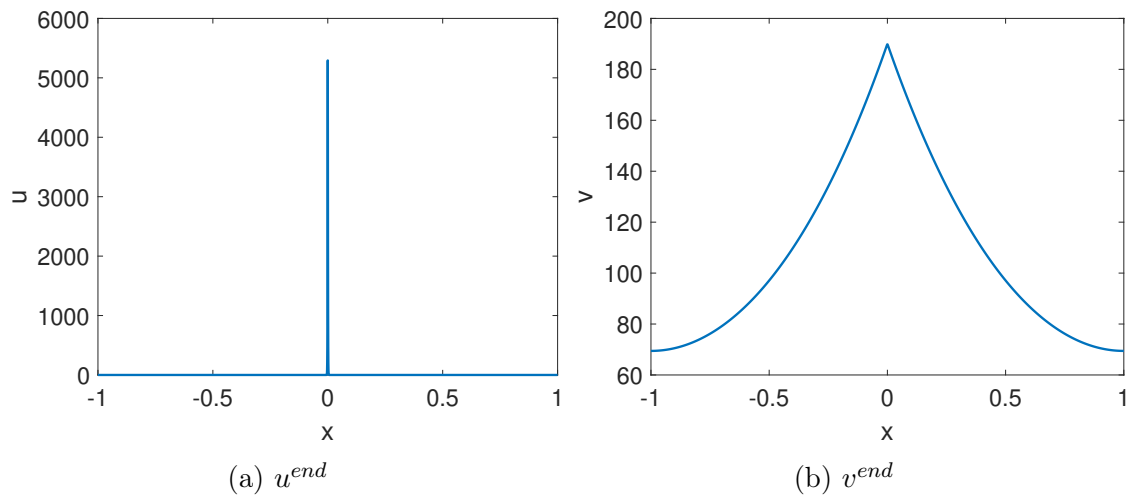


Figura 4.5: Aproximación descentrada en tiempo final para $h' = h/2$.

En las Figuras 4.4 y 4.5, podemos observar que los máximos de las aproximaciones de u son claramente distintos. A continuación se desarrolla una idea de por qué el descentrado está ocasionando este efecto. Dado una etapa de tiempo $k - 1$, supongamos que tenemos la configuración de la Figura 4.6

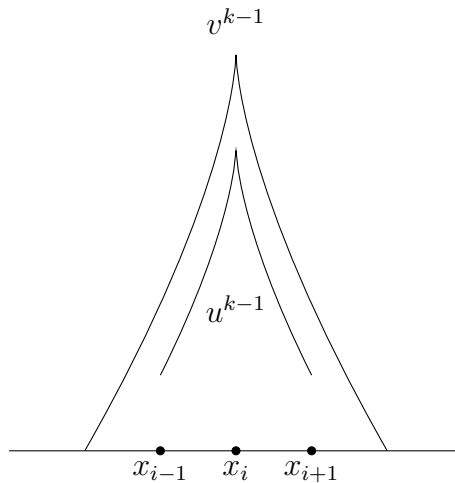


Figura 4.6: Configuración en t_{k-1} .

Supongamos, por simplicidad en la argumentación que aproximásemos la quimiotaxis de forma explícita y que además únicamente tenemos este término, ya que el término de autodifusión es el mismo en las dos aproximaciones. Se hace notar que en esta configuración se tiene que $(v_x^{k-1})_{j-1/2} > 0$ y $(v_x^{k-1})_{j+1/2} < 0$. Con esto, para

la aproximación centrada, el valor de u_j^k se obtiene de

$$(\delta_t u^k)_{cen} = \frac{(v_x^{k-1})_{j-1/2} u_j^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{h} - \frac{(v_x^{k-1})_{j+1/2} u_{j+1}^{k-1} + u_j^{k-1}}{2h}, \quad (4.15)$$

mientras que en el descentrado se tiene de

$$(\delta_t u^k)_{upw} = \frac{(v_x^{k-1})_{j-1/2}^+ u_{j-1}^{k-1}}{h} - \frac{(v_x^{k-1})_{j+1/2}^- u_{j+1}^{k-1}}{h}. \quad (4.16)$$

Se ve claramente que:

$$\begin{aligned} (\delta_t u^k)_{upw} &= \frac{(v_x^{k-1})_{j-1/2}^+ u_{j-1}^{k-1}}{h} - \frac{(v_x^{k-1})_{j+1/2}^- u_{j+1}^{k-1}}{h} \\ &< \frac{(v_x^{k-1})_{j-1/2}^+ u_{j-1}^{k-1} + u_{j-1}^{k-1}}{2h} - \frac{(v_x^{k-1})_{j+1/2}^- u_{j+1}^{k-1} + u_j^{k-1}}{2h} = (\delta_t u^k)_{cen}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Esto repercute en la aproximación de u^k de una forma parecida a la que se observa en la Figura 4.7

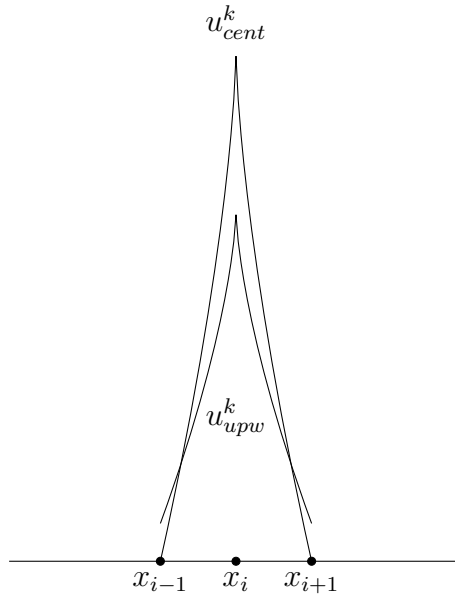


Figura 4.7: Aproximación de u^k durante la agregación.

Con esta idea, es fácil ver que en el caso de la formación de un valle ocurre lo que se representa en la Figura 4.8

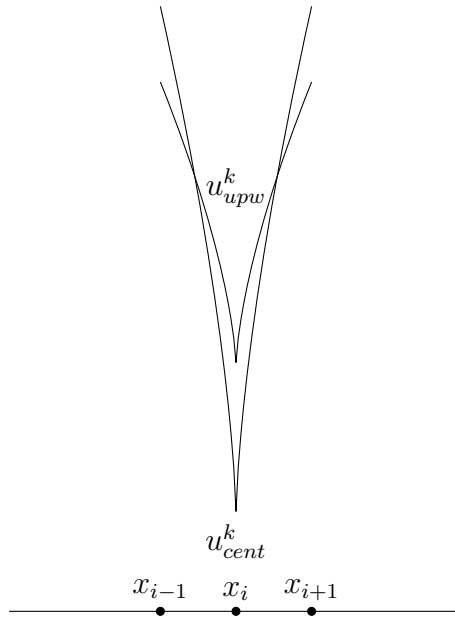


Figura 4.8: Aproximación de u^k en un valle.

A la vista de las Figuras 4.7 y 4.8, se ve que el descentrado produce en la solución una especie de “amortiguamiento” en la aproximación de máximos crecientes y mínimos decrecientes, esto es otra disipación numérica en un sentido distinto al caso de la ley de energía. Esta es la principal justificación de lo que se aprecia en las gráficas de u en las Figuras 4.4 y 4.5.

Capítulo 5

Volúmenes finitos descentrados

En este capítulo, se lleva a cabo un nuevo enfoque para la aproximación en espacio. Esta se basa en la adaptación a dimensión 1 del esquema de volúmenes finitos presentado en [9].

Consideramos junto con nuestra malla habitual $\{x_i\}_{i=1}^N$ de equiespaciado h , una malla dual $\{y_i\}_{i=1}^{N+1}$ cuyos nodos interiores se corresponderán con los puntos medios de los nodos de la malla principal y en la frontera coincidirán las dos mallas, esto es

$$\begin{cases} y_i = \frac{x_i + x_{i-1}}{2} & \text{para } i = 2, \dots, N. \\ y_1 = x_1, \quad y_{N+1} = x_N. \end{cases} \quad (5.1)$$

Además de esto, definimos nuestros “volúmenes” como

$$D_i = (y_i, y_{i+1}), \quad (5.2)$$

que se corresponden con los intervalos que unen a nuestros nuevos nodos y_i (ver Figura 5.1).

Esta es la reducción a dimensión 1 de la idea de obtener una malla de volúmenes de Voronoi a partir de una malla triangular.

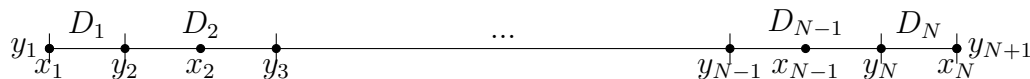


Figura 5.1: Dominio espacial y volúmenes.

Como se puede observar fácilmente en la Figura 5.1, cada volumen D_i está asociado al nodo x_i . Por este motivo aproximaremos las soluciones de nuestro problema en los nodos principales x_j integrando las ecuaciones de 3.1 en los diferentes volúmenes, en los que se considera que la aproximación es constante para cada uno de ellos.

Comenzaremos como es habitual con la ecuación correspondiente a la variable v^k y la integraremos en el volumen D_j con $j \neq 1, N$. Aproximando por constantes v_j en cada volumen D_j tendremos

$$\begin{aligned} \int_{D_j} (\delta_t v^k - v_{xx}^k + v^k - u^k) &= 0 \Rightarrow \\ h(\delta_t v_j^k + v_j^k - u_j^k) - \int_{D_j} v_{xx}^k &= 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Es por tanto necesario evaluar la integral $\int_{D_j} v_{xx}^k$. Resulta conveniente, sabiendo que $v_{xx}^k = (v_x^k)_x$, aplicar la regla de Barrow.

$$\int_{D_j} v_{xx}^k = v_x^k(y_{j+1}) - v_x^k(y_j). \quad (5.4)$$

Esto plantea un nuevo problema, deberemos entonces aproximar el valor de v_x en los puntos medios de nuestra malla principal. Una buena aproximación es tomar la derivada centrada

$$v_x^k(y_j) \approx \frac{v^k(x_j) - v^k(x_{j-1}))}{h} = \frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h}. \quad (5.5)$$

Introduciendo entonces 5.5 en 5.4 y esta a su vez en 5.3, tendremos

$$\begin{aligned} h(\delta_t v_j^k + v_j^k - u_j^k) - \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} - \frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right) &= 0 \Rightarrow \\ h(\delta_t v_j^k + v_j^k - u_j^k) + \frac{-v_{j+1}^k + 2v_j^k - v_{j-1}^k}{h} &= 0, \end{aligned} \quad (5.6)$$

que es el esquema de volúmenes finitos centrados.

Resta por tanto comprobar qué ocurre para los volúmenes frontera D_1 y D_N , teniendo en cuenta que la longitud de estos es $h/2$. Comencemos con D_1

$$\begin{aligned} \int_{D_1} (\delta_t v^k - v_{xx}^k + v^k - u^k) &= 0 \Rightarrow \frac{h}{2}(\delta_t v_1^k + v_1^k - u_1^k) - \int_{D_1} v_{xx}^k = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{h}{2}(\delta_t v_1^k + v_1^k - u_1^k) + v_x^k(y_1) - v_x^k(y_2) &= 0. \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la condición de contorno de la frontera izquierda para v , se tendrá que $v_x(y_1) = 0$.

$$\frac{h}{2}(\delta_t v_1^k + v_1^k - u_1^k) + \cancel{v_x^k(y_1)}^0 - v_x^k(y_2) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{h}{2}(\delta_t v_1^k + v_1^k - u_1^k) - \frac{v_2^k - v_1^k}{h} = 0. \quad (5.7)$$

Con la misma idea se tiene para el volumen D_N

$$\frac{h}{2}(\delta_t v_N^k + v_N^k - u_N^k) + \frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h} = 0. \quad (5.8)$$

A la vista de los desarrollos, se llega al siguiente resultado:

Proposición 5.0.1. *El esquema de volúmenes finitos centrados para aproximar v^k coincide con el de elementos finitos y con el de diferencias finitas en 1D.*

Procederemos ahora con la ecuación de u . En primer lugar, es evidente que la aproximación del término de autodifusión es análoga al caso de v . Por tanto, nuestra única labor será aproximar el término de quimiotaxis. Empecemos con $j \neq 1, N$. Con la misma idea que antes

$$\int_{D_j} ((uv_x))_x^k = (uv_x)^k(y_{j+1}) - (uv_x)^k(y_j). \quad (5.9)$$

Necesitamos entonces aproximar, $(uv_x)^k(y_j)$, para ello utilizaremos la técnica del descentrado “upwind”

$$(uv_x)(y_j) \approx v_x^k(y_j)^+ u_{j-1}^k + v_x^k(y_j)^- u_j^k = \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^+ u_{j-1}^k + \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^- u_j^k. \quad (5.10)$$

Introduciendo por tanto (5.10) en (5.9), se tiene

$$\begin{aligned} \int_{D_j} ((uv_x))_x^k &= (uv_x)^k(y_{j+1}) - (uv_x)^k(y_j) = \\ & \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^+ u_j^k + \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^- u_{j+1}^k - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^+ u_{j-1}^k - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^- u_j^k = \\ & - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^+ u_{j-1}^k + \left(\left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^+ - \left(\frac{v_j^k - v_{j-1}^k}{h} \right)^- \right) u_j^k + \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^- u_{j+1}^k. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Se comprueba ahora el caso para $j = 1$, donde se tiene en cuenta la condición de contorno en la frontera izquierda ya que $y_1 = x_1$, y por tanto $v_x(y_1) = v_x(x_1) = 0$.

$$\int_{D_1} ((uv_x))_x^k = (uv_x)^k(y_2) - \cancel{(uv_x)^k(y_1)} \stackrel{0}{=} \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h} \right)^+ u_1^k + \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h} \right)^- u_2^k. \quad (5.12)$$

Considerando ahora la condición de contorno de la frontera derecha, se tendrá de forma análoga

$$\int_{D_N} ((uv_x))_x^k = - \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h} \right)^+ u_{N-1}^k - \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h} \right)^- u_N^k. \quad (5.13)$$

Proposición 5.0.2. *El esquema de volúmenes finitos descentrados para aproximar u^k es equivalente al de diferencias finitas descentradas en 1D.*

Demostración. El sentido de esta equivalencia es el mismo que el de la Proposición 3.2.2, las ecuaciones de los nodos frontera están multiplicados por $h/2$ y las de los nodos interiores por h . \square

Capítulo 6

Elementos finitos descentrados

En este capítulo se comenta y particulariza a dimensión 1 en espacio el esquema presentado en [7]. La obtención de dicho esquema se lleva a cabo mediante un enfoque distinto a los casos anteriores. Comprobaremos si este nuevo esquema equivale al esquema anterior.

En primer lugar partimos de la formulación débil de nuestro sistema presentada en (3.36). Y todos los elementos presentados para el método de elementos finitos (ver Figura 3.2), así como V_h el espacio generado por $\{\varphi_n\}_{n=1}^N$.

Con esto en cuenta definimos una malla dual, la cual, casualmente, en contraposición al caso de dimensiones superiores, coincide con la de volúmenes finitos en 1D (ver Figura (5.1)).

Consideramos ahora $\mathbb{1}_{D_i}$ la función característica de D_i . Asimismo, introducimos el espacio de Hilbert $\overline{V}_h \subset L^2(\Omega)$ el espacio generado por $\{\mathbb{1}_{D_n}\}_{n=1}^N$; es decir, las funciones constantes a trozos en la malla dual. Con todo esto introducimos el operador $M_h : V_h \rightarrow \overline{V}_h$ definido como

$$M_h v_h = \sum_{i=1}^N v_h(x_i) \mathbb{1}_{D_i}, \quad (6.1)$$

el cual es llamado operador de “lumping”. Y se define

$$(u_h, v_h)_h = (M_h u_h, M_h v_h), \quad (6.2)$$

un nuevo producto escalar sobre V_h .

Por tanto, con estas definiciones aproximaremos la ecuación para v de (3.36) como

$$(\delta_t v_h^k, \bar{u})_h + ((v_h^k)_x, \bar{u}_x) + (v_h^k, \bar{u})_h - (u_h^{k-1}, \bar{u})_h = 0, \quad \forall \bar{u} \in V_h. \quad (6.3)$$

A partir de aquí, tomando como funciones test las φ_i , obtenemos un sistema de ecuaciones igual al presentado en (3.39).

En primer lugar matriz de rigidez K es la misma que en FEM (3.44), ya que esta surge del término $((v_h)_x, \bar{u}_x)$, el cual es idéntico al que se tiene en el método de elementos finitos.

Por otro lado, los elementos de la nueva matriz de masa M provienen de los términos de la forma $(a_h, \varphi_h)_h$ y como $M_h \varphi_j = \mathbb{1}_{D_j}$, se tiene que

$$m_{ij} = (M_h \varphi_j, M_h \varphi_i) = (\mathbb{1}_{D_j}, \mathbb{1}_{D_i}) = |D_i| \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Como $|D_1| = |D_N| = h/2$ y $|D_i| = h$ para $i \neq 1, N$, se tendrá que la matriz de masa que obtenemos es la misma que la que se obtiene con la técnica de “Mass lumping”.

Con todo esto, la discretización espacial de v^k por este método de elementos finitos es la misma que aplicando los demás métodos. En definitiva, este método para la solución v^k presenta una manera diferente de realizar la técnica del “Mass lumping”.

Procedemos ahora para u , su ecuación en (3.36) aplicamos el “Mass lumping” en el sumando de la derivada temporal

$$(\delta_t u_h^k, \bar{u})_h + ((u_h^k)_x, \bar{u}_x) - (u_h^k (v_h^k)_x, \bar{u}_x) = 0, \quad \forall \bar{u} \in V_h. \quad (6.5)$$

Cuando tomemos como funciones test las φ_i , se consiguen términos vistos en el sistema de ecuaciones (3.50). La matrices de masa M y rigidez K serán las mismas que para el caso anterior para v^k , ya que sus elementos se calculan de la misma forma. Lo interesante es por tanto aproximar el término de quimiotaxis.

$$\begin{aligned} -(u_h^k (v_h^k)_x, \bar{u}_x) &= \int_{\Omega} (u_h^k (v_h^k)_x)_x \bar{u} \, dx && \text{(Integración por partes)} \\ &\approx \sum_{j=1}^N \bar{u}(x_j) \int_{D_j} (u_h^k (v_h^k)_x)_x \, dx && (\bar{u} \approx M_h \bar{u}) \\ &= \sum_{j=1}^N \bar{u}(x_j) ((u_h^k (v_h^k)_x)_{j+1/2} - (u_h^k (v_h^k)_x)_{j-1/2}), && \text{(Regla de Barrow)} \end{aligned} \quad (6.6)$$

donde para los nodos frontera se tiene que

$$\begin{aligned} (u_h^k (v_h^k)_x)_{1/2} &= (u_h^k (v_h^k)_x)_1 \\ (u_h^k (v_h^k)_x)_{N+1/2} &= (u_h^k (v_h^k)_x)_N. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Ahora es cuando aplicamos nuestro descentrado “upwind”

$$(u_h^k (v_h^k)_x)_{j+1/2}^{upw} \approx (u_h^k)_j ((v_h^k)_x)_{j+1/2}^+ + (u_h^k)_{j+1} ((v_h^k)_x)_{j+1/2}^-. \quad (6.8)$$

Podemos evaluar los términos de (6.8) como elementos del espacio V_h . Por tanto, dado un $j \neq 1, N$ se tendrá que:

$$\begin{aligned} ((v_h^k)_x)_{j+1/2} &= (v_h^k)_x \left(\frac{x_j + x_{j+1}}{2} \right) \\ &= v_j^k (\varphi_j)_x + v_{j+1}^k (\varphi_{j+1})_x = v_j^k \left(\frac{-1}{h} \right) + v_{j+1}^k \left(\frac{1}{h} \right) \\ &= \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

en los nodos frontera, aplicando las condiciones de contorno $(v_h^k)_x = 0$. Finalmente tenemos

$$(u_h^k(v_h^k)_x)_{j+1/2}^{upw} = u_j \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^+ + u_{j+1}^k \left(\frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{h} \right)^-. \quad (6.10)$$

En este momento es cuando sustituimos \bar{u} por $\varphi_i \in V_h$ para $i = 1, \dots, N$ en (6.6), y vamos obteniendo los elementos de la matriz Q_{upw} de quimiotaxis. Tomando φ_i como función test e al introduciendo (6.10) en (6.6), se tiene

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^N \delta_{ij} \left((u_h^k(v_h^k)_x)_{j+1/2}^{upw} - (u_h^k(v_h^k)_x)_{j-1/2}^{upw} \right) \\ &= - \left(\frac{v_i^k - v_{i-1}^k}{h} \right)^+ u_{i-1}^k + \left(\left(\frac{v_{i+1}^k - v_i^k}{h} \right)^+ - \left(\frac{v_i^k - v_{i-1}^k}{h} \right)^- \right) u_i^k + \left(\frac{v_{i+1}^k - v_i^k}{h} \right)^- u_{i+1}^k. \end{aligned} \quad (6.11)$$

Esto se desarrolla a continuación. Introduciendo φ_1 como función test en (6.6) se tiene

$$\begin{aligned} &\left((u_h^k(v_h^k)_x)_{3/2}^{upw} - (u_h^k(v_h^k)_x)_1^{upw} \right) \stackrel{CC}{=} (u_h^k(v_h^k)_x)_{3/2}^{upw} \\ &\stackrel{(6.9)}{=} \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h} \right)^+ u_1^k + \left(\frac{v_2^k - v_1^k}{h} \right)^- u_2^k, \end{aligned} \quad (6.12)$$

y para φ_N se tiene

$$- \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h} \right)^+ u_{N-1}^k - \left(\frac{v_N^k - v_{N-1}^k}{h} \right)^- u_N^k. \quad (6.13)$$

Con todo esto, el esquema completamente discretizado de elementos finitos descentrado para la quimiotaxis queda

$$\begin{cases} (\delta_t u_h^k, \bar{u})_h + ((u_h^k)_x, \bar{u}_x) + a_h^{upw}(v_h^k, u_h^k, \bar{u}) = 0, \\ (\delta_t v_h^k, \bar{u})_h + ((v_h^k)_x, \bar{u}_x) + (v_h^k, \bar{u})_h - (u_h^{k-1}, \bar{u})_h = 0, \quad \forall \bar{u} \in V_h. \\ u_h^0 = \sum_{j=1}^N u_0(x_j) \varphi_j(x), \quad v_h^0 = \sum_{j=1}^N v_0(x_j) \varphi_j(x). \end{cases} \quad (6.14)$$

donde el término de quimiotaxis es

$$a_h^{\text{upw}}(v^k, u^k, \bar{u}) = \sum_{j=1}^N \bar{u}(x_j) \left((u_h^k(v_h^k)_x)_{j+1/2}^{\text{upw}} - (u_h^k(v_h^k)_x)_{j-1/2}^{\text{upw}} \right), \quad (6.15)$$

y donde el descentrado está aplicado como en (6.10).

Proposición 6.0.1. *El esquema de elementos finitos descentrado es equivalente al de volúmenes finitos descentrados y el de diferencias finitas descentradas en 1D.*

Demostración. Se ve claramente que el operador de “lumping” aplica el “Mass lumping”. Este es el motivo que hace que coincida el esquema centrado de v^k y el término de la derivada discreta en tiempo de u^k en los dos métodos. Asimismo, el descentrado resulta en los mismos términos para los métodos (5.11) y (6.11). \square

6.1. Análisis numérico del esquema descentrado (II)

En esta sección se aprovecha la formulación del esquema descentrado en el caso de elementos finitos para deducir algunas de sus propiedades de forma mas clara.

En primer lugar, se tiene la siguiente proposición

Proposición 6.1.1. *El esquema (6.14) conserva la cantidad total de u , se tiene que*

$$\int_{\Omega} u_h^k dx = \int_{\Omega} u_h^0 dx \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \quad (6.16)$$

Demostración. La conservación se sigue de tomar en la ecuación de u^k de (6.14), la función constante $\bar{u} = 1$ como función test. Con esto tendremos

$$(\delta_t u_h^k, 1)_h + a_h^{\text{upw}}(v^k, u^k, 1) = 0. \quad (6.17)$$

Evaluemos por tanto $a_h^{\text{upw}}(v^k, u^k, 1)$.

$$a_h^{\text{upw}}(v_h^k, u_h^k, 1) = \sum_{j=1}^N \left((u_h^k(v_h^k)_x)_{j+1/2}^{\text{upw}} - (u_h^k(v_h^k)_x)_{j-1/2}^{\text{upw}} \right), \quad (6.18)$$

se observa fácilmente que (6.18) es una suma telescópica y por tanto

$$a_h^{\text{upw}}(v_h^k, u_h^k, 1) = (u_h^k(v_h^k)_x)_N^{\text{upw}} - (u_h^k(v_h^k)_x)_1^{\text{upw}} = 0, \quad (6.19)$$

donde los dos términos son nulos a causa de las condiciones de contorno. Es interesante notar que no ha sido necesario explicitar el descentrado para esta demostración. Por tanto la conservación proviene exclusivamente de este tipo de formulación y no de cómo se ha aplicado el descentrado.

Finalmente tendremos que

$$(\delta_t u_h^k, 1)_h = 0 \Rightarrow \int_{\Omega} u_h^k dx = \int_{\Omega} u_h^{k-1} dx \quad \forall k = 1, \dots, N_t. \quad (6.20)$$

Considerando los distintos valores de k en (6.20), se tiene el resultado. \square

Corolario 6.1.1. *Suponiendo que $u_h^k \geq 0$ se tendrá*

$$\|u_h^k\|_{L^1(\Omega)} = \|u_h^0\|_{L^1(\Omega)}. \quad (6.21)$$

En lo relacionado a la existencia de solución del esquema descentrado, se tienen los siguientes resultados

Proposición 6.1.2. *Dados u_h^{k-1} y v_h^{k-1} , la ecuación de v_h^k de (6.14) posee solución única.*

Demostración. Se hace un esbozo de la demostración.

Esta pasa por definir la forma bilineal en V_h (equivalente a \mathbb{R}^N).

$$a(v, w) = \left(\frac{v}{dt}, w\right)_h + (v_x, w_x) + (v, w)_h, \quad (6.22)$$

y la forma lineal

$$\langle f, w \rangle = (u_h^{k-1}, w)_h + \left(\frac{v_h^{k-1}}{dt}, w\right)_h, \quad (6.23)$$

y tras comprobar las hipótesis se podrá aplicar el Teorema de Lax-Milgram y se tendrá la existencia y unicidad de v_h^k , solución de (6.3). \square

Para demostrar la existencia de solución de la ecuación de u^k , se precisa del siguiente teorema:

Teorema 6.1.1 (Teorema de punto fijo de Leray-Schauder). *Sea \mathcal{X} un espacio de Banach y sea $T : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$ un operador continuo y compacto. Si el conjunto*

$$\{x \in \mathcal{X} : x = \alpha T(x) \quad \text{con} \quad 0 \leq \alpha \leq 1\}$$

está acotado (con respecto a α), entonces T tiene al menos un punto fijo.

Podremos entonces demostrar la siguiente proposición

Proposición 6.1.3. *Si $u^{k-1} \geq 0$, entonces la ecuación descentrada de u_h^k posee solución no negativa.*

Demostración. Probaremos la existencia de solución de la ecuación de u^k del esquema descentrado y truncado (no lineal),

$$(\delta_t u_h^k, \bar{u})_h + ((u_h^k)_x, \bar{u}_x) + a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((u_h^k)^+), \bar{u}) = 0, \quad \forall \bar{u} \in V_h, \quad (6.24)$$

Necesitamos en primer lugar identificar el espacio V_h con \mathbb{R}^N , donde a cada función $u_h \in V_h$ se le asocian sus coordenadas respecto de los elementos de la base $\{\varphi_n\}_{n=1}^N$. Esto es:

$$u_h = \sum_{j=1}^N u_j \varphi_j \leftrightarrow (u_1, \dots, u_N), \quad (6.25)$$

nos referiremos indistintamente por tanto a $u_h \in V_h$ como elemento de V_h o a $u_h \in \mathbb{R}^N$ como vector de \mathbb{R}^N . En el caso del problema truncado, como $(u_h)^+ \notin V_h$, en realidad el esquema truncado en el sentido de elementos finitos se corresponde con el de diferencias finitas si tomamos lo que en \mathbb{R}^N era $(u_h)^+$, como su interpolación lineal $I_h((u_h)^+) \in V_h$.

Escojamos $\mathcal{X} = V_h$ y sea $T : V_h \rightarrow V_h$ el operador que dado un $\hat{u} \in V_h$, resuelve el problema:

Hallar $u \in V_h$ tal que

$$\begin{cases} \left(\frac{u - u_h^{k-1}}{dt}, \bar{u} \right)_h + (u_x, \bar{u}_x) = -a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((\hat{u})^+), \bar{u}), & \forall \bar{u} \in V_h, \\ u_h^{k-1}, v_h^k \geq 0 \quad \text{dado.} \end{cases} \quad (6.26)$$

esto es, $u = T(\hat{u})$. Nótese que la solución de (6.24), será por tanto un punto fijo de T .

Nuestro trabajo se reduce entonces a demostrar que T tiene al menos un punto fijo.

En primer lugar, debemos asegurarnos que T está bien definido, esto se tiene ya que sabido que (6.26) posee solución única aplicando el Teorema de Lax-Milgram, ya que u_h^k es conocido.

Veamos que T es continuo y por tanto compacto por ser $\mathcal{X} = V_h$ un espacio de dimensión finita.

Consideremos la sucesión $\hat{u}_\varepsilon \rightarrow \hat{u}$ en \mathbb{R}^N . Veamos que $T(\hat{u}_\varepsilon) \rightarrow T(\hat{u})$ en \mathbb{R}^N .

En primer lugar, es claro que si $u = T(\hat{u})$, se tiene que

$$u = (M/dt + K)^{-1} b, \quad (6.27)$$

con

$$b_n = -a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((\hat{u})^+), \varphi_n) + (M/dt)u_n^{k-1} \quad (6.28)$$

Al tenerse $a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((\widehat{u}_\varepsilon)^+), \varphi_n) \rightarrow a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((\widehat{u})^+), \varphi_n)$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, se tendrá que $T(\widehat{u}_\varepsilon) \rightarrow T(\widehat{u})$, y por tanto T es continua.

Resta probar que el conjunto

$$C = \{u \in V_h : u = \alpha T(u) \quad \text{con} \quad 0 \leq \alpha \leq 1\}$$

está acotado.

Es caso $\alpha = 0$ es trivial, se demuestra entonces para el caso $\alpha \in (0, 1]$. Si $u \in C$, entonces u es solución de

$$\begin{cases} \frac{1}{\alpha} u - u_h^{k-1} \\ (\frac{\alpha}{dt} u, \bar{u})_h + (\frac{1}{\alpha} u_x, \bar{u}_x) = -a_h^{\text{upw}}(v_h^k, I_h((u)^+), \bar{u}), & \forall \bar{u} \in V_h, \\ u_h^{k-1}, v^k \geq 0 \quad \text{dado.} \end{cases} \quad (6.29)$$

Tomando como función test $\bar{u} = 1$, se ve fácilmente con los argumentos de conservación discreta de la Proposición 6.1.1 que

$$\int_{\Omega} u \, dx = \alpha \int_{\Omega} u_h^{k-1} \, dx \quad (6.30)$$

Y usando la no negatividad de u fruto de la Proposición 4.2.2, al ser $0 < \alpha \leq 1$ se tiene que

$$\|u\|_{L^1(\Omega)} \leq \|u^{k-1}\|_{L^1(\Omega)} \quad (6.31)$$

Aplicando por tanto el Teorema de Leray-Schauder, se tiene que el esquema truncado (6.24) posee solución. Ya solo hace falta recordar que por el Corolario 4.2.2 se tiene la existencia de solución positiva del esquema sin truncar. \square

Capítulo 7

Otros modelos con quimiotaxis

En este capítulo se trata de aplicar los conocimientos adquiridos para aproximar las soluciones del modelo de Keller-Segel a otros modelos que presenten quimiotaxis. Varios de los modelos que aquí se presentan se han tomado de [8]. Los scripts de MATLAB de todas las simulaciones están en el Apéndice B.

7.1. Keller-Segel con reacción logística

El primer modelo que consideramos es el modelo habitual de Keller-Segel con el que hemos estado trabajando añadiéndole a la ecuación de u , un término logístico de la forma

$$ru(\delta - u) \tag{7.1}$$

donde r es la tasa de crecimiento logístico y δ se corresponde con la capacidad de carga del medio.

Nuestro nuevo modelo tiene la siguiente forma

$$\begin{cases} u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot (u \nabla v) - ru(\delta - u) = 0. & \text{en } \Omega \times (0, T). \\ v_t - D_v \Delta v - \alpha u + \beta v = 0. & \text{en } \Omega \times (0, T). \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0. & \text{en } \partial\Omega \times (0, T). \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x). & \text{en } \Omega. \end{cases} \tag{7.2}$$

En primer lugar, para la ecuación de v aplicaremos una aproximación centrada en espacio y una aproximación en tiempo considerando los términos de autodifusión y autodegradación implícitos y el de producción por u explícito. Como hemos visto en la Sección 4.2, esta elección nos otorga positividad incondicional para la

aproximación v^k . El sistema de ecuaciones del que se obtiene v^k es el siguiente

$$\frac{v_j^k - v_j^{k-1}}{dt} - D_v \Delta_h v_j^k + -\alpha u_j^{k-1} + \beta v_j^k = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad (7.3)$$

Posteriormente, para el caso de la ecuación de u , tomaremos el término de autodifusión centrado y el término de quimiotaxis descentrado en espacio. En lo relacionado con la aproximación en tiempo, tomaremos la difusión y la quimiotaxis implícita como hemos hecho en el caso de Keller-Segel.

Lo realmente interesante en este esquema es tomar una aproximación en tiempo adecuada para el término de reacción logística. Considerando las mismas ideas con las que se demuestra la positividad de u^k en (4.13), es conveniente tomar una aproximación semi-implícita de la forma

$$-ru^{k-1}(\delta - u^k). \quad (7.4)$$

La justificación de esta elección para (7.4) radica en que, de esta forma, podríamos demostrar la positividad incondicional usando un argumento análogo al de (4.13). En este caso, tendríamos en la parte derecha de la igualdad $r\delta u^{k-1} \geq 0$ y en la parte izquierda multiplicando a u^k tendríamos otro término positivo $ru^{k-1} \geq 0$. Esto llevaría a que $u^k \geq (>) 0$ siempre que $u^{k-1} \geq (>) 0$. Estas son el tipo de ideas que principalmente se siguen en este capítulo.

En definitiva para calcular u^k basta resolver el problema lineal

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{dt} - D_u \Delta_h u_j^k + \lambda \text{quim}_j^{upw} - ru_j^{k-1}(\delta - u_j^k) = 0 \quad \forall j = 1, \dots, N. \quad (7.5)$$

Una vez dados u^{k-1} y v^{k-1} procedemos a resolver (7.3) y obtener v^k , posteriormente sustituir v^k en (7.5) y calcular u^k .

7.1.1. Simulación y análisis de los resultados

Es interesante comparar la aproximación numérica que produce este esquema con las que se calcularon para su equivalente sin reacción logística en la Sección (4.3). Para esto, deberemos conservar la misma configuración de parámetros y condiciones iniciales. Adicionalmente escogeremos $r = 1$ y $\delta = 5$, con lo que la capacidad de carga será el valor medio entre el máximo y el mínimo de $u_0(x)$.

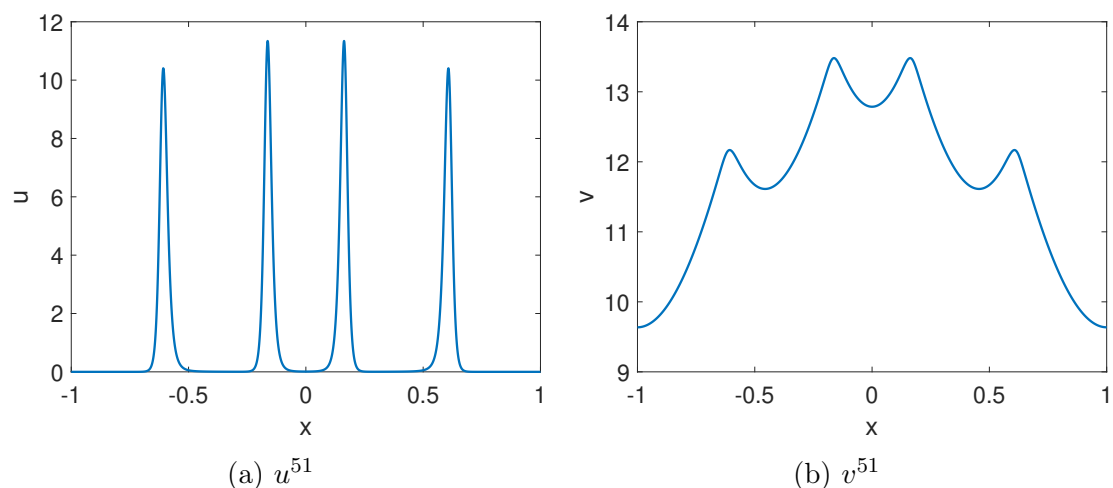


Figura 7.1: Aproximación en $t_{51} = 0, 1$.

En la Figura 7.1, se observa cómo la logística provoca la creación de picos de altura similar en la aproximación de u . Aún así estos no son producto de la reacción logística exclusivamente, ya que se encuentran por encima de la capacidad $\delta = 5$, por tanto este efecto es una combinación de la reacción logística junto con la quimiotaxis.

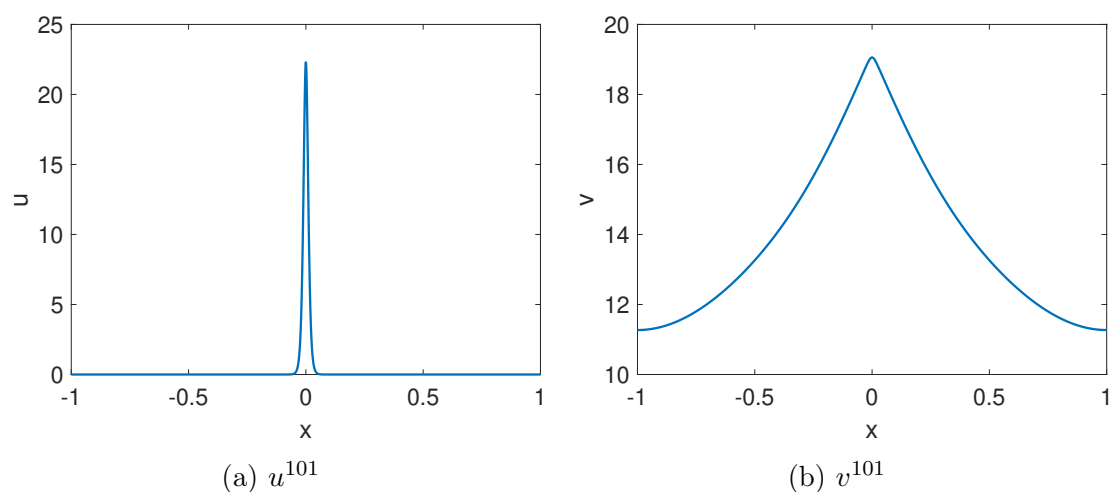


Figura 7.2: Aproximación en $t_{51} = 0, 2$.

En la Figura 7.2, se observa cómo se produce una agregación de u mucho menor que en el caso sin la logística, y lo mismo ocurre para v , la producción de v es mucho menor debido a que lo es u . Cabe decir que la reducción de la altura era un efecto esperable ya que la capacidad del medio es pequeña con respecto a los valores que alcanza la agregación. También cabe señalar que no se tiene a diferencia que en el caso centrado la negatividad. Por último, otra diferencia respecto del modelo de Keller-Segel es que en este caso, la agregación final se produce antes con el término logístico ($t \approx 0, 2$) que sin él ($t \approx 0, 35$). El momento en el que se produce la

agregación final en Keller-Segel se puede observar en la gráfica de la energía de la Figura (4.3), cuando esta decrece bruscamente.

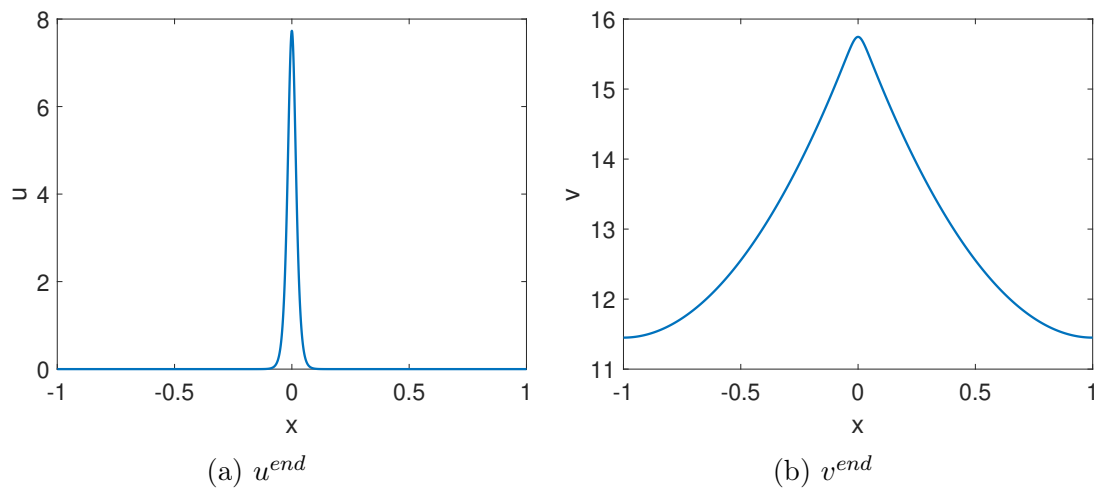


Figura 7.3: Aproximación en tiempo final.

En la última etapa de tiempo, como se aprecia en la Figura 7.3, se observa cómo el término logístico ha ido dominando desde que se produjo la agregación, disminuyendo el pico de u , además esto ha ocasionado que la degradación de v también domine. Aún así, se ha observado que la dinámica va disminuyendo, lo que parece indicar que estas aproximaciones están cerca de la solución estacionaria con estos parámetros. Esto nos lleva a pensar que podemos llegar a soluciones estacionarias no constantes, lo que se conoce como el fenómeno de formación de patrones.

Asimismo, se ha comprobado que variando la tasa de crecimiento logístico r la solución estacionaria de u parece crear patrones distintos como se aprecia en la Figura 7.4, o incluso para valores de $r \gg \lambda$ parece estar regida por la logística y corresponderse con la capacidad, este último efecto se aprecia en la Figura 7.5.

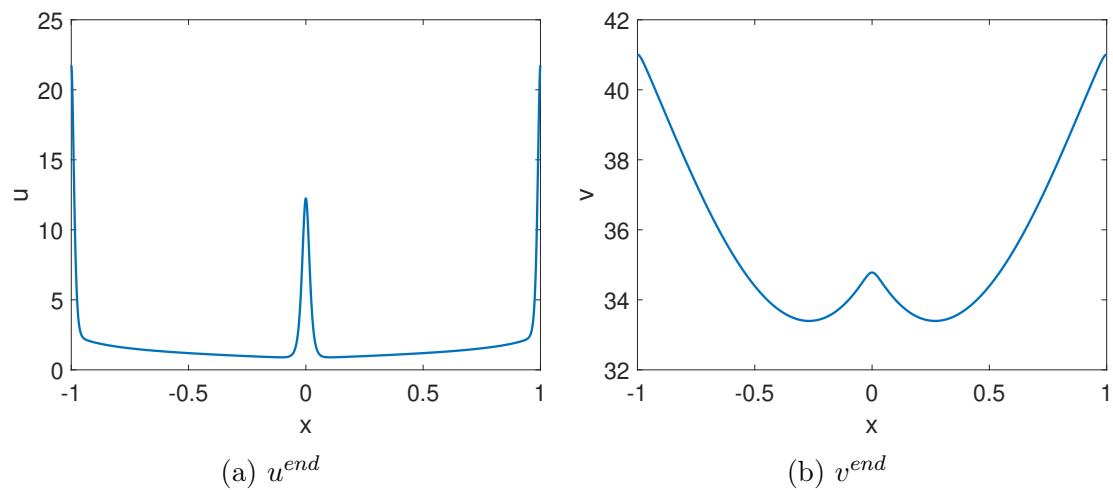


Figura 7.4: Aproximación en tiempo final $r = 100$.

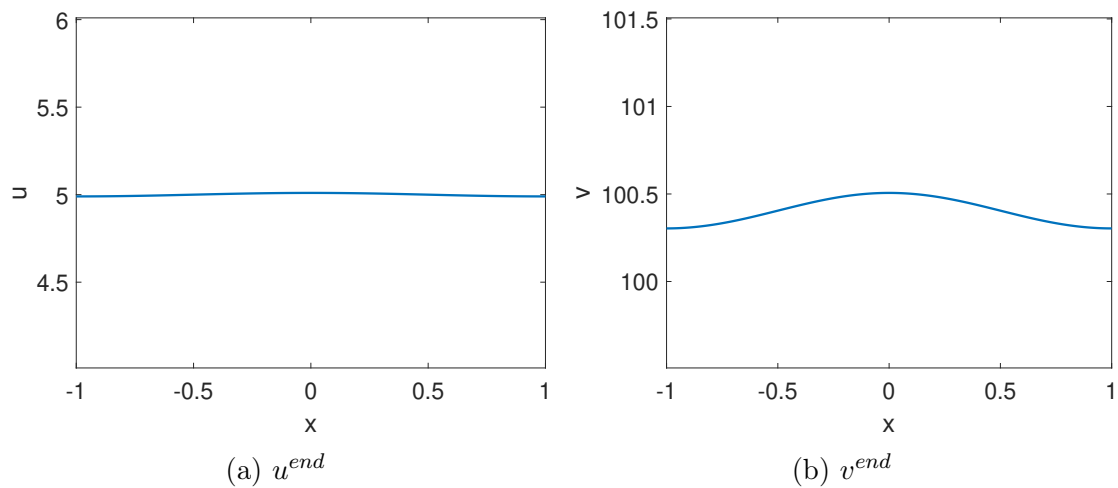


Figura 7.5: Aproximación en tiempo final $r = 1000$.

7.2. Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio líquido.

Este modelo se corresponde con el de Keller-Segel que hemos tratado habitualmente, modificándose la velocidad quimiotáctica para que esta se reduzca al aumentar v , eliminándose el término de autodegradación de v y sustituyéndose el término de producción de v por otro que aunque sigue siendo creciente respecto de u , está

acotado por 1 para valores grandes de u .

$$\begin{cases} u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot \left(\frac{u}{(1+v)^2} \nabla v \right) = 0, & \text{en } \Omega \times (0, T). \\ v_t - D_v \Delta v - \alpha \frac{u^2}{\mu + u^2} = 0, & \text{en } \Omega \times (0, T). \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0, & \text{en } \partial\Omega \times (0, T). \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), & \text{en } \Omega. \end{cases} \quad (7.6)$$

Una propiedad fácil de ver de (7.6) es la siguiente:

Proposición 7.2.1. *El problema (7.6) conserva la cantidad total de u*

Demostración. Es bastante similar al caso de Keller-Segel, basta con integrar en Ω y aplicar las condiciones de contorno. \square

Empecemos estudiando la ecuación de v . Aplicaremos una aproximación centrada en espacio para el laplaciano. Para conseguir positividad incondicional, tomaremos el término de difusión implícito y el término de producción explícito. Esto es

$$- \alpha \frac{(u^{k-1})^2}{\mu + (u^{k-1})^2}. \quad (7.7)$$

Esta última elección (7.7), incluso desacoplará las ecuaciones de u^k de las ecuaciones de v^k . La aproximación v^k , por tanto, se reduce a resolver el sistema de ecuaciones

$$\frac{v_j^k - v_j^{k-1}}{dt} - D_v \Delta_h v_j^k - \alpha \frac{(u^{k-1})^2}{\mu + (u^{k-1})^2} = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad (7.8)$$

Por otro lado, para la ecuación de u , en lo relacionado a la discretización en espacio tomaremos el término de autodifusión centrado y el término de quimiotaxis descentrado. Para la aproximación en tiempo tomamos todos los términos implícitos. Por tanto el sistema de ecuaciones que resuelve u^k queda tal que así

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{dt} - D_u \Delta u_j^k + \lambda \text{chem}_j^{upw} = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad (7.9)$$

donde el descentrado del término de quimiotaxis viene recogido en

$$\begin{aligned} \text{chem}_j^{upw} = & - \frac{((v_x)_{j-1/2}^k)^+}{h} \frac{u_{j-1}^k}{(1+v_{j-1}^k)^2} - \frac{((v_x)_{j-1/2}^k)^-}{h} \frac{u_j^k}{(1+v_j^k)^2} \\ & + \frac{((v_x)_{j+1/2}^k)^+}{h} \frac{u_j^k}{(1+v_j^k)^2} + \frac{((v_x)_{j+1/2}^k)^-}{h} \frac{u_{j+1}^k}{(1+v_{j+1}^k)^2}. \end{aligned} \quad (7.10)$$

El orden y la forma de resolver la ecuaciones será la misma que en la sección anterior.

7.2.1. Simulación y análisis de los resultados

En esta sección utilizaremos los parámetros habituales junto con $\mu = 1$ y compararemos las aproximaciones de este nuevo modelo con las aproximación descentrada de Keller-Segel para $\beta = 0$. Esta última se presenta en la Figura 7.6

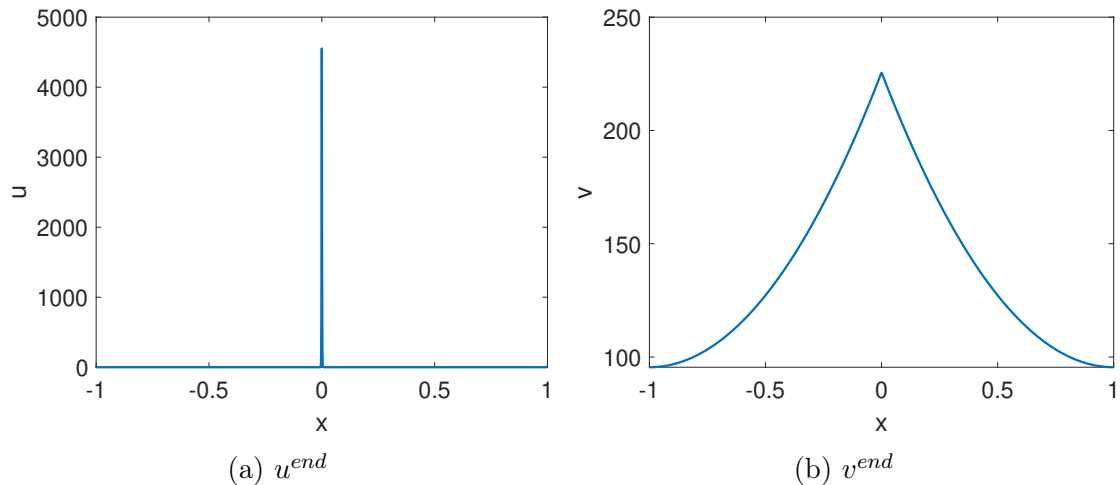


Figura 7.6: Aproximación de Keller-Segel en tiempo final $\beta = 0$.

A continuación se muestran las aproximaciones del nuevo modelo

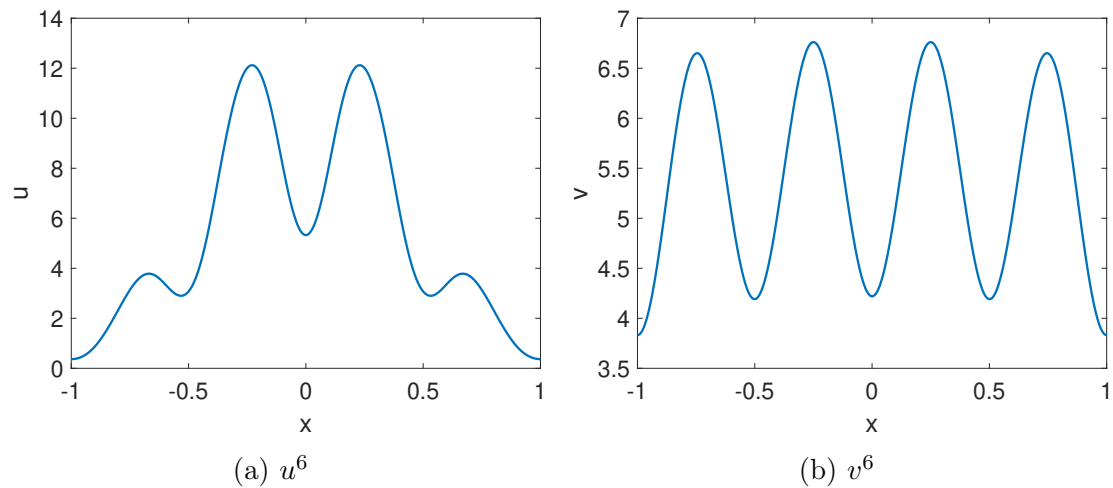
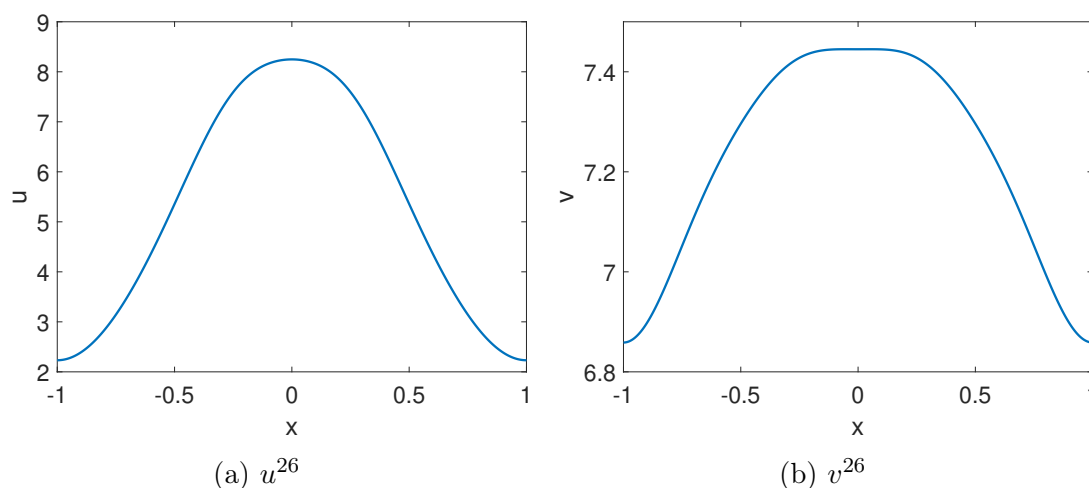


Figura 7.7: Aproximación para $t_6 = 0,01$.

En la Figura 7.7, se observa que la aproximación del u del nuevo modelo no genera picos tan pronunciados como en Keller-Segel o incluso en la logística con autodegradación de u .

Figura 7.8: Aproximación para $t_{26} = 0,05$.

Observando la Figura (7.8), se aprecia que la agregación final de u se produce en un tiempo muy corto con respecto a Keller-Segel y esta es mucho menos prominente.

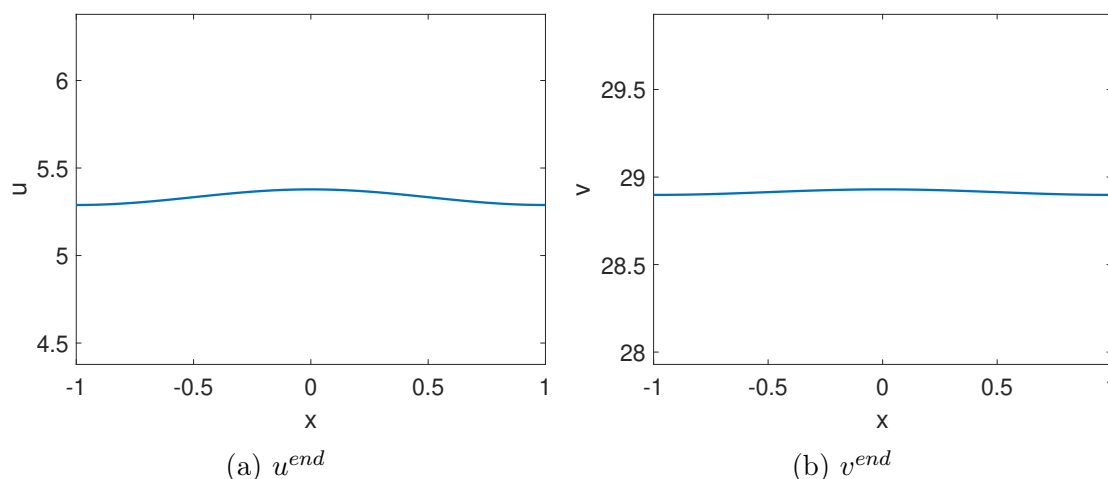


Figura 7.9: Aproximación en tiempo final.

La aproximación en tiempo final del nuevo modelo que observamos en la Figura 7.9 difiere bastante de la de Keller-Segel (ver Figura 7.6). Estas nuevas gráficas dan lugar a pensar que están dominando los términos de autodifusión y la solución de u parece tender a un valor fijo. Este será el valor medio de su condición inicial $\tilde{u} = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 u_0(x) dx = 5, \bar{3}$, ya que por la Proposición 7.2.1 la cantidad total se conserva. Esto es diferente en el caso de v ya que no conserva la cantidad total. Veamos por último las cantidades totales numéricamente

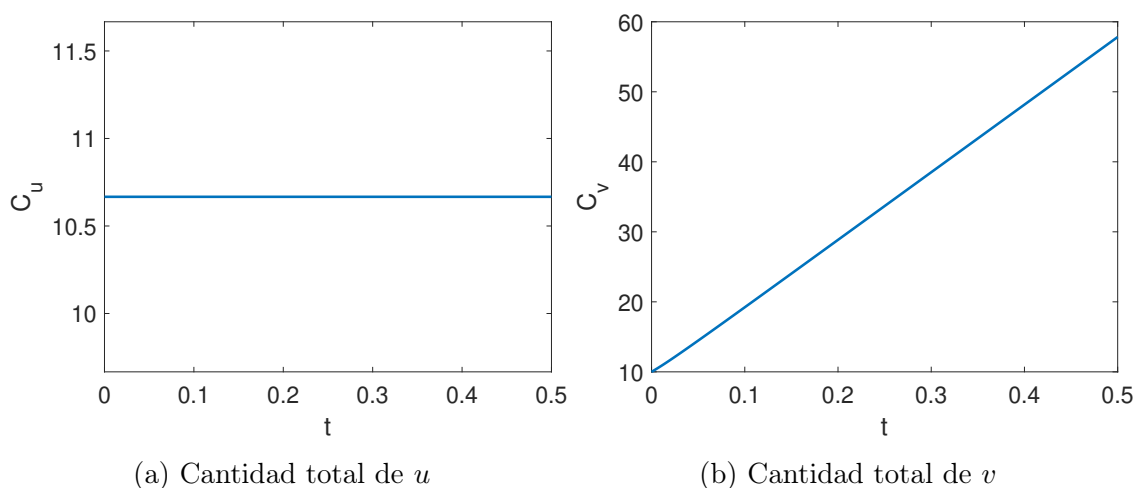


Figura 7.10: Cantidad total.

En la Figura (7.10), se corrobora que el esquema discretizado mantiene la conservación de la cantidad total de u .

7.3. Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio semi-sólido.

Este es un nuevo modelo distinto al de Keller-Segel. Lo más notorio es que se introduce una variable adicional w , cuya interpretación física se corresponde con la concentración de nutrientes en el medio. La ecuación que gobierna la dinámica de esta nueva variable posee únicamente un término de autodifusión y otro de consumo por la variable u regulado al mismo tiempo por w .

Por otro lado, con respecto al las ecuaciones de u y v del esquema de la Sección 7.2, se incorpora un término de reacción logístico a la variable u , cuya capacidad de carga dependerá de la variable w . Asimismo, se introduce para la ecuación de v un término de consumo por u , con dependencia lineal de v y se añade al término de

producción una dependencia lineal de w .

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t - D_u \Delta u + \lambda \nabla \cdot \left(\frac{u}{(1+v)^2} \nabla v \right) - ru \left(\delta \frac{w^2}{1+w^2} - u \right) = 0, \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \\ v_t - D_v \Delta v - \alpha \frac{wu^2}{\mu + u^2} + \beta uv = 0, \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \\ w_t - D_w \Delta w + \kappa u \frac{w^2}{1+w^2} = 0, \quad \text{en } \Omega \times (0, T). \\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial n} = 0, \quad \text{en } \partial\Omega \times (0, T). \\ u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad w(x, 0) = w_0(x), \quad \text{en } \Omega. \end{array} \right. \quad (7.11)$$

Comenzaremos con la ecuación de w . Como sabemos, tomamos la aproximación del laplaciano centrada en espacio e implícita en tiempo. El término de degradación, como hemos visto, es conveniente que tenga carácter semi-implícito en w para conseguir positividad incondicional. Con esta idea, lo más simple es tomarlo de una forma que linealice la ecuación y la desacople. Por tanto la elección que tomamos dará lugar al siguiente sistema

$$\frac{w_j^k - w_j^{k-1}}{dt} - D_w \Delta_h w_j^k + \kappa u^{k-1} \frac{w^{k-1} w^k}{1 + (w^{k-1})^2} = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N. \quad (7.12)$$

Con todas las ideas propuestas, y habiendo sido capaces de desacoplar el sistema que despeja w^k , resulta directo para v^k realizar la siguiente elección

$$\frac{v_j^k - v_j^{k-1}}{dt} - D_v \Delta_h v_j^k - \alpha \frac{w^k (u^{k-1})^2}{\mu + (u^{k-1})^2} + \beta u^{k-1} v^k = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad (7.13)$$

Finalmente, la ecuación de u es una combinación de las que se presentaron en las Secciones 7.1 y 7.2, donde ya w^k y v^k han podido ser calculada independientemente. Por tanto para u^k tendremos

$$\frac{u_j^k - u_j^{k-1}}{dt} - D_u \Delta_h u_j^k + \lambda \text{chem}_j^{upw} - ru_j^{k-1} \left(\delta \frac{(w^k)^2}{1 + (w^k)^2} - u_j^k \right) = 0, \quad \forall j = 1, \dots, N, \quad (7.14)$$

Para obtener las aproximaciones, dados u^{k-1} , v^{k-1} y w^{k-1} , obtendremos w^k de (7.12), la cual introduciremos en (7.13) para calcular v^k y finalmente, sustituyendo w^k y v^k en (7.14) obtendremos u^k .

7.3.1. Simulación y análisis de los resultados

Este modelo, al introducir una nueva variable es difícilmente comparable con los anteriores, por ello se estudia independientemente.

Como dominio espacio-temporal tomamos el habitual $\Omega \times T = (-1, 1) \times (0, 0, 5)$, y los pasos de espacio $h = 0,001$ y tiempo $dt = 0,002$. Por otro lado, tomamos los siguientes datos para los parámetros: $D_u = D_v = D_w = \mu = 1$, $\lambda = \alpha = 50$, $\beta = 10$, $\kappa = 20$, $r = 3$ y $\delta = 5$.

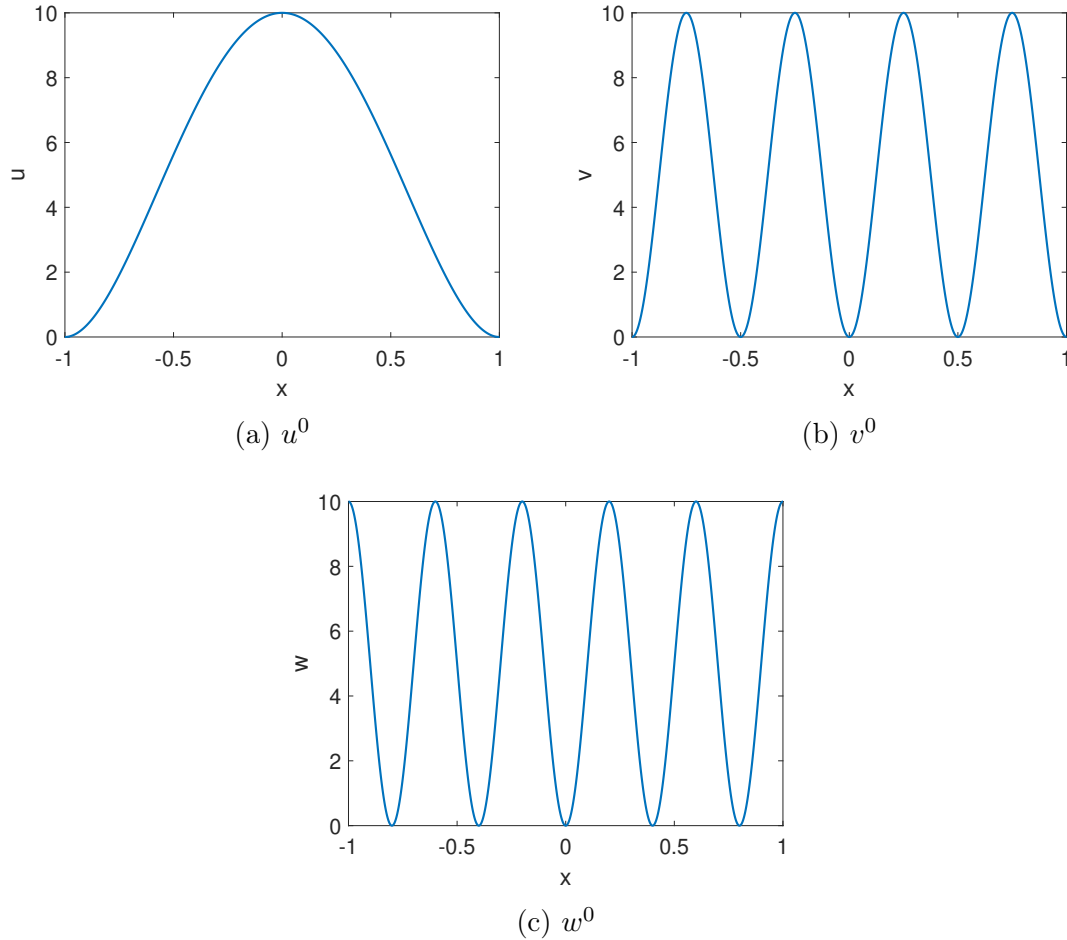


Figura 7.11: Condiciones iniciales.

Las condiciones iniciales se corresponden con las gráficas de la Figura 7.11. estas son: $u_0(x) = 10(x+1)^2(x-1)^2$, $v_0(x) = 10 \operatorname{sen}^2(2\pi x)$ y $w_0(x) = 10 \operatorname{sen}^2(5\pi/2x)$.

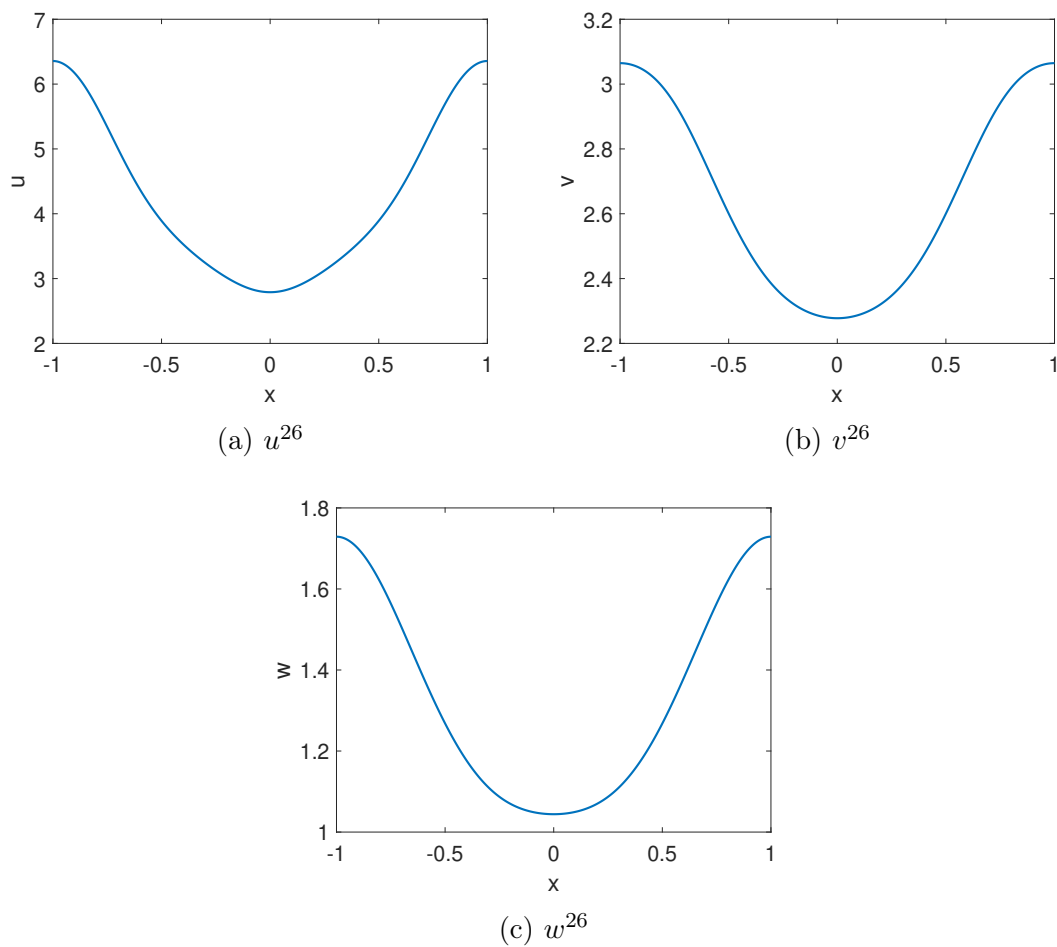


Figura 7.12: Aproximación para $t_{26} = 0,05$.

Estudiemos lo que ocurre en esta configuración. En primer lugar, las aproximaciones parecen acomodarse rápidamente a las funciones que se observan en la Figura (7.12) y con esta forma permanecen durante un tiempo. Pero la forma del sistema (7.11) sugiere que esta situación debe evolucionar a otra distinta, ya que v y w son consumidas por u y las tres funciones poseen grandes valores en zonas cercanas en el espacio.

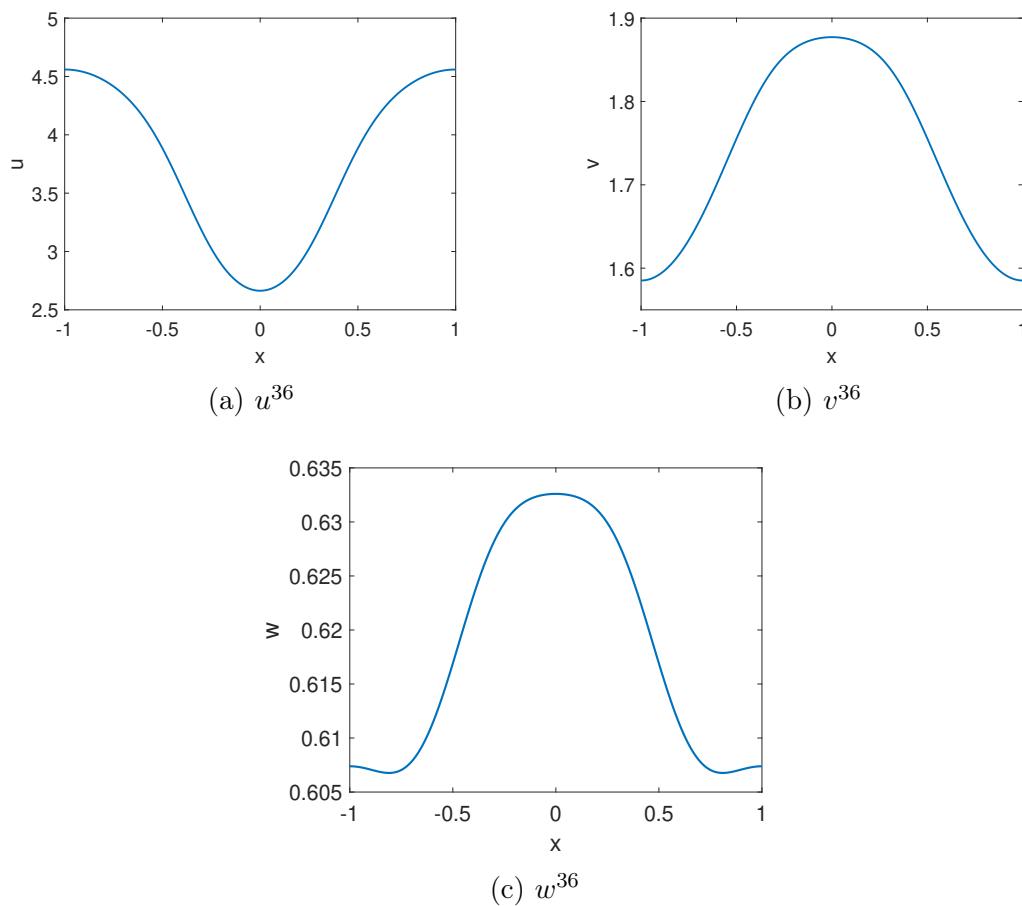


Figura 7.13: Aproximación para $t_{36} = 0,07$.

Ya en la Figura 7.13, vemos que nuestra intuición era cierta. Ahora en esta configuración se infiere otra evolución distinta por dos vías distintas. Al disminuir en gran medida los valores v en los extremos y al aumentar en el centro, los valores de u tenderán a simular la forma de v por el término de quimiotaxis. Además la desaparición de w en los extremos y su crecimiento en el centro, provocará que el término logístico haga que la gráfica de u trate de parecerse en forma a la de w . Estos dos comportamientos se complementan y es lo que explica lo que se aprecia poco después en la Figura 7.14.

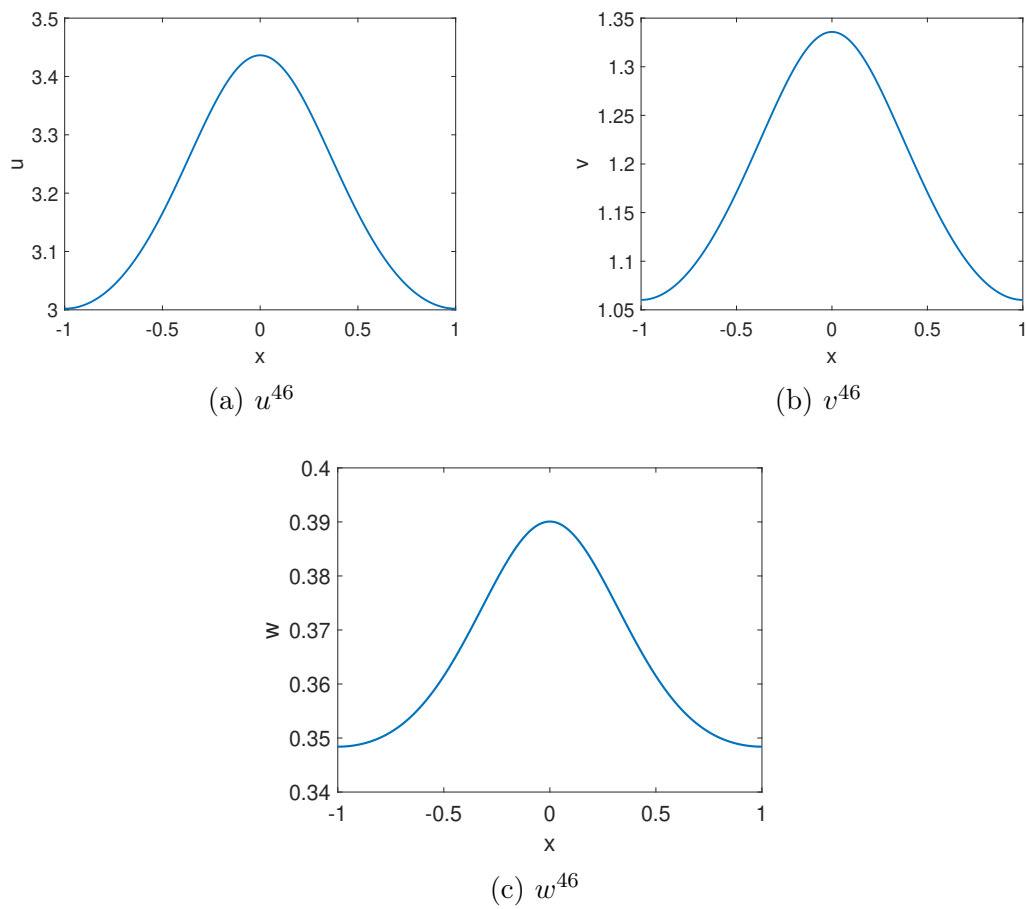


Figura 7.14: Aproximación para $t_{46} = 0,09$.

Ya en la Figura 7.14 se observa la configuración simétrica de la Figura 7.12. Por tanto las aproximaciones van oscilando entre estos tipos de soluciones cada vez con una amplitud inferior.

Apéndice A

Mass lumping

En esta sección se justifica la razón por la que esta técnica recibe este nombre.

Proposición A.0.1. *Los elementos de la diagonal de la matriz de masa con “Mass lumping” se corresponden con la de la suma de todos los elementos de sus filas correspondientes.*

Demostración. En primer lugar sabemos que $\varphi_i \varphi_j|_{I_k} \in \mathbb{P}_2$, por tanto calcularemos los elementos de la matriz de masa utilizando la fórmula de Simpson, que es exacta para los polinomios de grado 2

$$m_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j) = \sum_{\{k : \text{sop}(\varphi_i \varphi_j) \in I_k\}} \frac{|I_k|}{6} \begin{cases} 4 \left(\frac{1}{2}\right)^2 & \text{si } i \neq j. \\ 1^2 + 4 \left(\frac{1}{2}\right)^2 & \text{si } i = j. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

En nuestro caso, dado un $i, j \in \{i-1, i, i+1\}$, debido a nuestra partición uniforme y a las propiedades de las funciones base, los elementos opuestos respecto de la diagonal serán iguales y por la simetría del producto escalar la matriz será simétrica.

$$\begin{aligned} m_{ii} &= (\varphi_i, \varphi_i) = \frac{|I_{i-1}|}{6} 2 + \frac{|I_i|}{6} 2. \\ m_{ii-1} &= (\varphi_i, \varphi_{i-1}) = \frac{|I_{i-1}|}{6}. \\ m_{ii+1} &= (\varphi_i, \varphi_{i+1}) = \frac{|I_i|}{6}. \\ \tilde{m}_{ii} &= \frac{|I_{i-1}|}{6} + \frac{|I_{i-1}|}{6} 2 + \frac{|I_i|}{6} 2 + \frac{|I_i|}{6} = \frac{|I_{i-1}| + |I_i|}{2} = \int_{\Omega} I_h(\varphi_i^2) dx. \end{aligned}$$

Y para los extremos basta únicamente tomar los elementos inexistentes como

vacíos.

$$\begin{aligned}
 m_{11} &= \frac{|I_1|}{6} 2 = \frac{|I_1|}{3}, \\
 m_{12} &= \frac{|I_1|}{6}, \\
 \tilde{m}_{11} &= \frac{|I_1|}{3} + \frac{|I_1|}{6} = \frac{|I_1|}{2} = \int_{\Omega} I_h(\varphi_1^2) dx, \\
 m_{NN} &= \frac{|I_{N-1}|}{6} 2 = \frac{|I_{N-1}|}{3}, \\
 m_{NN-1} &= \frac{|I_{N-1}|}{6}, \\
 \tilde{m}_{NN} &= \frac{|I_{N-1}|}{3} + \frac{|I_{N-1}|}{6} = \frac{|I_{N-1}|}{2} = \int_{\Omega} I_h(\varphi_N^2) dx.
 \end{aligned}$$

Con todo esto será cierto que

$$\tilde{m}_{ij} = \int_{\Omega} I_h(\varphi_i \varphi_j) dx = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j. \\ \sum_j m_{ij} & \text{si } i = j. \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

□

Apéndice B

Códigos de simulación

Método de elementos finitos

```
1 clear all
2 clf;
3
4 %% Parametros
5
6 Du=1;Dv=1;lambda=10;beta=1;alpha=50;
7
8 %% Datos iniciales
9
10 h=0.001; L=1; X=(-L:h:L); N=length(X); N1=N-1;
11 dt=0.002; T=(0:dt:0.5); Nt=length(T); Nt1=Nt-1;
12
13 %% Condicion inicial
14
15 factorv0=10;factoru0=10;
16 U0=factoru0*(((X+1).^2.*(X-1).^2))';
17 V0=factorv0*((sin(4*pi/2*X)).^2)';
18
19 %% Matrices de rigiez y masa
20
21 cero=zeros(N,1); %cero
22 R=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
23 M=spdiags( cero , 0,N,N);
24
25 for k=1:N1
26
27 R(k,k)=R(k,k)+1/h;
28 R(k+1,k+1)=R(k+1,k+1)+1/h;
```

```

29 R(k,k+1)= R(k,k+1) -1/h;
30 R(k+1,k)=R(k,k+1);
31 M(k,k)=M(k,k)+h/2;
32 M(k+1,k+1)=M(k+1,k+1)+h/2;
33
34 end
35
36 %% Matrices para guardar las soluciones
37
38 Mu=zeros(Nt,N);
39 Mv=zeros(Nt,N);
40 Mu(1,:)=U0;
41 Mv(1,:)=V0;
42
43 %% Graficas (Inicial)
44
45 figure
46 subplot(1,2,1)
47 plot(X,Mu(1,:))
48 xlabel('x');
49 ylabel('u');
50 title('Densidad de celulas');
51 shg
52
53 subplot(1,2,2)
54 plot(X,Mv(1,:))
55 xlabel('x');
56 ylabel('v');
57 title('Densidad de quimico');
58 shg
59
60
61 %% Computing
62
63 for t=1:Nt1
64
65 % Resolucion de v
66 Av=Dv*R+(1/dt+beta)*M;
67 Bv=M*(V0/dt+alpha*U0);
68 V=Av\Bv;
69
70 % Derivada espacial de v
71 Vx=(V(2:N)-V(1:N1))/h;
72
73 % Matriz de quimiotaxis
74 Mq=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);

```

```

75
76     for k=1:N1
77
78         Mq(k,k)=Mq(k,k)-Vx(k)/2;
79         Mq(k,k+1)=Mq(k,k+1)- Vx(k)/2 ;
80         Mq(k+1,k)=Mq(k+1,k)+ Vx(k)/2 ;
81         Mq(k+1,k+1)=Mq(k+1,k+1)+Vx(k)/2;
82
83     end
84
85     % Resolucion de u
86     Au=Du*R+1/dt*M-lambda*Mq;
87     Bu=M*(1/dt*U0);
88     U=Au\Bu;
89
90     % Actualizacion
91     U0=U;
92     V0=V;
93
94     % Guardado de las soluciones
95     Mu(t+1,:)=U0;
96     Mv(t+1,:)=V0;
97
98     %% Graficas
99     subplot(1,2,1)
100    plot(X,Mu(t+1,:))
101    xlabel('x');
102    ylabel('u');
103    title('Densidad de celulas');
104    shg
105
106    subplot(1,2,2)
107    plot(X,Mv(t+1,:))
108    xlabel('x');
109    ylabel('v');
110    title('Densidad de quimico');
111    shg
112
113    end

```

Cantidad total

```

1    %% Cantidad total
2

```



```

3 Cu=zeros(1,Nt);
4 Cv=zeros(1,Nt);
5
6 for t=1:Nt
7
8 Cu(t)=trapz(X,Mu(t,:));
9 Cv(t)=trapz(X,Mv(t,:));
10
11 end
12
13 %% Graficas
14
15 figure
16 subplot(1,2,1)
17 plot(T,Cu,T,Cu(1)*ones(1,Nt))
18 title('Cantidad total de sustancia celulas')
19 axis([0,T(end),Cu(1)-1,Cu(1)+1])
20 xlabel('t')
21 ylabel('C_u')
22 legend('Aproximaci'on','Te'orica','Location','northwest')
23 shg
24
25 % V teorica
26 Vteo=@(x) Cv(1)*exp(-beta*x)+alpha/beta*Cv(1)*(1-exp(-
    beta*x));
27
28 subplot(1,2,2)
29 plot(T,Cv,T,Vteo(T))
30 title('Cantidad total de sustancia quimica')
31 xlabel('t')
32 ylabel('C_v')
33 legend('Aproximacion','Teorica','Location','northwest')
34 shg

```

Energía

```

1 %% Energia
2
3 % E=\integral(F(u)+1/2((Vx)^2+v^2)-u*v), F(u)=u*log u-u-v
4 F=@(u) alpha*Du*u.*(log(u)-1);
5 E=zeros(1,Nt);
6 D=zeros(1,Nt1);
7
8 for t=1:Nt

```

```

9
10 Vx=(Mv(t,3:N)-Mv(t,1:N-2))/(2*h);
11 Vx=[0,Vx,0]; %Condiciones de contorno
12 Fu=F(Mu(t,:));
13 Fu(Mu(t,)==0)=0; %Fu(0)=0
14
15 E(t)=trapz(X,Fu+lambda*Dv*1/2*Vx.^2+lambda*beta*1/2*Mv(t
    ,:).^2-lambda*alpha*Mu(t,).*Mv(t,:));
16
17 %% Disipacion
18
19 if t==1
20     Vt(1,:)=zeros(N,1);
21 else
22     Vt=(Mv(t,:)-Mv(t-1,:))/dt;
23 end
24
25 logx=(log(Mu(t,3:N))-log(Mu(t,1:N-2)))/(2*h);
26 logx=[0,logx,0]; %Condiciones de contorno
27
28
29 D(t)=trapz(X,alpha*Mu(t,).* (Du*logx-lambda*Vx).^2 +
    lambda*Vt.^2);
30 end
31
32 %% Ley de Energia
33
34 LE=(E(2:Nt)-E(1:Nt1))/dt+D(1:Nt1);
35
36
37 %% Graficas
38
39 figure
40 subplot(1,2,1)
41 plot(T,E)
42 title('Energia')
43 xlabel('t')
44 ylabel('E')
45 shg
46
47 subplot(1,2,2)
48 plot(T(2:Nt),LE(2:Nt))
49 title('Ley de energia')
50 xlabel('t')
51 ylabel('LE')
52 shg

```

Diferencias finitas descentradas

```
1 clear all
2 clf;
3
4 %% Parametros
5
6 Du=1;Dv=1;lambda=10;beta=1;alpha=50;
7
8 %% Datos iniciales
9
10 h=0.001; L=1; X=(-L:h:L); N=length(X); N1=N-1;
11 dt=0.002; T=(0:dt:0.5); Nt=length(T); Nt1=Nt-1;
12
13 %% Condicion inicial
14
15 factorv0=10;factoru0=10;
16 U0=factoru0*(((X+1).^2.*(X-1).^2))';
17 V0=factorv0*((sin(4*pi/2*X)).^2)';
18
19 %% Graficas (inicial)
20
21 subplot(1,2,1)
22 plot(X,U0)
23 title('Densidad de celulas');
24 ylabel('u')
25 xlabel('x')
26 shg
27
28 subplot(1,2,2)
29 plot(X,V0)
30 title('Densidad de quimico');
31 ylabel('v')
32 xlabel('x')
33 % hold on
34 shg
35
36 %% Matrices para guardar las soluciones
37
38 Mu=zeros(Nt,N);
39 Mv=zeros(Nt,N);
40 Mu(1,:)=U0;
41 Mv(1,:)=V0;
42
43 %% Matrices de coeficientes
44
```

```

45 % Identidad
46 I=spdiags(ones(N,1),0,N,N);
47
48 % Difusion
49 v1=(-1/h^2)*ones(N,1);
50 v2=(2/h^2)*ones(N,1);
51 Adif=spdiags([v1 v2 v1],[-1 0 1],N,N);
52 Adif(1,2)=-Adif(1,1);
53 Adif(N,N-1)=-Adif(N,N);
54
55 % Matriz de v
56 Av=(1/dt+beta)*I+Dv*Adif;
57
58 % Matris de u sin quimiotaxis
59 Au1=1/dt*I+Du*Adif;
60
61 cero=zeros(N,1);
62 for t=1:Nt1
63 %% Resolucion de v
64
65 Bv=alpha*U0+1/dt*V0;
66 V=Av\Bv;
67
68 %% Quimiotaxis
69 Vx(2:N)=(V(2:N)-V(1:N1))/h;
70
71 Vxpos=Vx>0;
72 Vxneg=Vx<0;
73
74 Auchem=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
75 for k=2:N1
76     Auchem(k,k-1)=-Vxpos(k)*Vx(k)/h;
77     Auchem(k,k)=Vxpos(k+1)*Vx(k+1)/h-Vxneg(k)*Vx(k)/h;
78     Auchem(k,k+1)=Vxneg(k+1)*Vx(k+1)/h;
79 end
80 Auchem(1,1)=2*Vxpos(2)*Vx(2)/h;
81 Auchem(1,2)=2*Vxneg(2)*Vx(2)/h;
82 Auchem(N,N-1)=-2*Vxpos(N)*Vx(N)/h;
83 Auchem(N,N)=-2*Vxneg(N)*Vx(N)/h;
84
85 Au=Au1+lambda*Auchem;
86 Bu=1/dt*U0;
87
88 %% Resolucion de u
89 U=Au\Bu;
90 %% Graficas

```

```

91
92 subplot(1,2,1)
93 plot(X,U)
94 title('Densidad de células');
95 ylabel('u')
96 xlabel('x')
97 shg
98
99 subplot(1,2,2)
100 plot(X,V)
101 title('Densidad de químico');
102 ylabel('v')
103 xlabel('x')
104 shg
105
106
107 %% Actualizacion
108 U0=U;
109 V0=V;
110
111 %% Guardado de las soluciones
112 Mu(t+1,:)=U0;
113 Mv(t+1,:)=V0;
114 end

```

Keller-Segel con reacción logística

```

1 clc; clear; clf;
2
3 %% parametros
4 Du=1;Dv=1;lambda=10;beta=1;alpha=50;r=1;delta=5;
5
6 %% Datos iniciales
7 h=0.001; L=1; X=(-L:h:L); N=length(X); N1=N-1;
8 dt=0.002; T=(0:dt:5); Nt=length(T); Nt1=Nt-1;
9
10 %% Condicion inicial
11 factoru0=10; factorv0=10;
12 U0=factoru0*(((X+1).^2.*(X-1).^2))';
13 V0=factorv0*((sin(4*pi/2*X)).^2)';
14
15 %% Graficas
16 subplot(1,2,1)
17 plot(X,U0)

```

```

18 title('Densidad de c'elulas');
19 ylabel('u')
20 xlabel('x')
21 shg
22
23 subplot(1,2,2)
24 plot(X,V0)
25 title('Densidad de qu'ímico');
26 ylabel('v')
27 xlabel('x')
28
29 shg
30
31 %% Matrices de rigiez y masa
32 cero=zeros(N,1);
33 K=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
34 M=spdiags( cero , 0,N,N);
35
36 for k=1:N1
37 K(k,k)=K(k,k)+1/h;
38 K(k+1,k+1)=K(k+1,k+1)+1/h;
39 K(k,k+1)= K(k,k+1) -1/h;
40 K(k+1,k)=K(k,k+1);
41 M(k,k)=M(k,k)+h/2;
42 M(k+1,k+1)=M(k+1,k+1)+h/2;
43 end
44 Av=Dv*K+(1/dt+beta)*M;
45
46 for t=1:Nt1
47
48 %% Resolucion de v
49 Bv=M*(alpha*U0+1/dt*V0);
50
51 V=Av\Bv;
52
53 %% Quimiotaxis
54 Vx(2:N)=(V(2:N)-V(1:N1))/h;
55
56 Vxpos=Vx>0;
57 Vxneg=Vx<0;
58
59 Auchem=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
60 for k=2:N1
61     Auchem(k,k-1)= -Vxpos(k)*Vx(k);
62     Auchem(k,k)= Vxpos(k+1)*Vx(k+1)-Vxneg(k)*Vx(k);
63     Auchem(k,k+1)= Vxneg(k+1)*Vx(k+1);

```

```

64 end
65 Auchem(1,1)=Vxpos(2)*Vx(2);
66 Auchem(1,2)=Vxneg(2)*Vx(2);
67 Auchem(N,N-1)=-Vxpos(N)*Vx(N);
68 Auchem(N,N)=-Vxneg(N)*Vx(N);
69
70 %% Resolucion de u
71 Bu=(1/dt+r*delta)*M*U0; %/r*delta -> produccion explicita
    (logistica)
72 Umod=spdiags(U0,0,N,N); % degradacion semiimplicita (
    logistica)
73 Au=M*1/dt+r*M*Umod+Du*K+lambda*Auchem;
74 U=Au\Bu;
75
76 %% Graficas
77 subplot(1,2,1)
78 plot(X,U)
79 title('Densidad de c'elulas');
80 ylabel('u')
81 xlabel('x')
82 shg
83
84 subplot(1,2,2)
85 plot(X,V)
86 title('Densidad de qu'ímico');
87 ylabel('v')
88 xlabel('x')
89 shg
90
91 %% Actualizacion
92 U0=U;
93 V0=V;

```

Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio líquido.

```

1 clc; clear; clf;
2
3 %% parametros
4 Du=1;Dv=1;lambda=10;mu=1;alpha=50;
5
6 %% Datos iniciales
7 h=0.001; L=1; X=(-L:h:L); N=length(X); N1=N-1;

```

```

8 dt=0.002; T=(0:dt:0.3); Nt=length(T); Nt1=Nt-1;
9
10 %% Condicion inicial
11 factoru0=10; factorv0=10;
12 U0=factoru0*(((X+1).^2.*(X-1).^2))';
13 V0=factorv0*((sin(4*pi/2*X)).^2)';
14
15 %% Graficas
16 subplot(1,2,1)
17 plot(X,U0)
18 title('Densidad de c'elulas');
19 ylabel('u')
20 xlabel('x')
21 shg
22
23 subplot(1,2,2)
24 plot(X,V0)
25 title('Densidad de qu'imico');
26 ylabel('v')
27 xlabel('x')
28 shg
29
30
31 %% Matrices de rigiez y masa
32 cero=zeros(N,1);
33 K=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
34 M=spdiags( cero , 0,N,N);
35
36 for k=1:N1
37 K(k,k)=K(k,k)+1/h;
38 K(k+1,k+1)=K(k+1,k+1)+1/h;
39 K(k,k+1)= K(k,k+1) -1/h;
40 K(k+1,k)=K(k,k+1);
41 M(k,k)=M(k,k)+h/2;
42 M(k+1,k+1)=M(k+1,k+1)+h/2;
43 end
44 Av=Dv*K+1/dt*M;
45
46 for t=1:Nt1
47
48 %% Resolucion de v
49 Bv=M*(alpha*U0.^2./(mu+U0.^2)+1/dt*V0); % alpha*... ->
    produccion explicita
50
51 V=Av\Bv;
52

```



```

53
54 %% Quimiotaxis
55 Vx(2:N)=(V(2:N)-V(1:N1))/h;
56
57 Vxpos=Vx>0;
58 Vxneg=Vx<0;
59
60 Auchem=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
61 for k=2:N1
62     Auchem(k,k-1)=-Vxpos(k)*Vx(k);
63     Auchem(k,k)= Vxpos(k+1)*Vx(k+1)-Vxneg(k)*Vx(k);
64     Auchem(k,k+1)=Vxneg(k+1)*Vx(k+1);
65 end
66 Auchem(1,1)=Vxpos(2)*Vx(2);
67 Auchem(1,2)=Vxneg(2)*Vx(2);
68 Auchem(N,N-1)=-Vxpos(N)*Vx(N);
69 Auchem(N,N)=-Vxneg(N)*Vx(N);
70
71 %%Resolucion de u
72 Vmod=spdiags(1./(1+V).^2,0,N,N); %modificacion de
    quimiotaxis
73 Bu=1/dt*M*U0;
74 Au=1/dt*M+Du*K+lambda*Auchem*Vmod;
75 U=Au\Bu;
76
77 %% Graficas
78 subplot(1,2,1)
79 plot(X,U)
80 title('Densidad de c'elulas');
81 ylabel('u')
82 xlabel('x')
83 shg
84
85 subplot(1,2,2)
86 plot(X,V)
87 title('Densidad de qu'imico');
88 ylabel('v')
89 xlabel('x')
90 shg
91
92
93 %% Actualizacion
94 U0=U;
95 V0=V;
96 end

```

Modelo de patrones de bacterias quimiotácticas en medio semi-sólido.

```

1  clc; clear; clf;
2
3  %% parametros
4  Du=1;Dv=1;Dw=1;lambda=50;beta=10;alpha=50;mu=1;r=3;delta
    =5;kappa=20;
5
6  %% Datos iniciales
7  h=0.001; L=1; X=(-L:h:L); N=length(X); N1=N-1;
8  dt=0.002; T=(0:dt:0.3); Nt=length(T); Nt1=Nt-1;
9
10 %% Condicion inicial
11 factoru0=10; factorv0=10; factorw0=10;
12 U0=factoru0*(((X+1).^2.*(X-1).^2))';
13 V0=factorv0*((sin(4*pi/2*X)).^2)';
14 W0=factorw0*((sin(5*pi/2*X)).^2)';
15
16 %% Graficas
17 subplot(2,2,1)
18 plot(X,U0)
19 title('Densidad de c'elulas');
20 ylabel('u')
21 xlabel('x')
22 shg
23
24 subplot(2,2,2)
25 plot(X,V0)
26 title('Densidad de qu'ímico');
27 ylabel('v')
28 xlabel('x')
29
30 subplot(2,2,3)
31 plot(X,W0)
32 title('Densidad de nutrientes');
33 ylabel('w')
34 xlabel('x')
35 shg
36
37 %% Matrices de rigiez y masa
38 cero=zeros(N,1);
39 K=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
40 M=spdiags( cero , 0,N,N);
41
42 for k=1:N1

```

```

43 K(k,k)=K(k,k)+1/h;
44 K(k+1,k+1)=K(k+1,k+1)+1/h;
45 K(k,k+1)=K(k,k+1)-1/h;
46 K(k+1,k)=K(k,k+1);
47 M(k,k)=M(k,k)+h/2;
48 M(k+1,k+1)=M(k+1,k+1)+h/2;
49 end
50 Aw1=1/dt*M+Dw*K;
51 Av1=Dv*K+1/dt*M;
52
53 for t=1:Nt1
54
55 %% Resolucion de w
56 Wdeg=spdiags(U0.*W0./(1+W0.^2),0,N,N); %degradacion
    semiimplicita
57 Aw2=M*kappa*Wdeg;
58 Aw=Aw1+Aw2;
59 Bw=1/dt*M*W0;
60
61 W=Aw\Bw;
62
63 %% Resolucion de v
64 Vdeg=spdiags(U0,0,N,N); %degradacion semiimplicita
65 Av2=beta*M*Vdeg;
66 Av=Av1+Av2;
67 Bv=M*(alpha*W.*U0.^2./(mu+U0.^2)+1/dt*V0); % alpha... ->
    produccion
68
69
70 V=Av\Bv;
71
72
73 %% Quimiotaxis
74 Vx(2:N)=(V(2:N)-V(1:N1))/h;
75
76 Vxpos=Vx>0;
77 Vxneg=Vx<0;
78
79 Auchem=spdiags([cero cero cero],[-1 0 1],N,N);
80 for k=2:N1
81     Auchem(k,k-1)=-Vxpos(k)*Vx(k);
82     Auchem(k,k)=Vxpos(k+1)*Vx(k+1)-Vxneg(k)*Vx(k);
83     Auchem(k,k+1)=Vxneg(k+1)*Vx(k+1);
84 end
85 Auchem(1,1)=Vxpos(2)*Vx(2);
86 Auchem(1,2)=Vxneg(2)*Vx(2);

```

```
87 Auchem(N,N-1)=-Vxpos(N)*Vx(N);
88 Auchem(N,N)=-Vxneg(N)*Vx(N);
89
90 %% Resolucion de u
91 Bu=M*(1/dt*U0+r*delta*U0.*W.^2./(1+W.^2)); % r*delta...
    -> produccion explicita (logistica)
92 Umod=spdiags(U0,0,N,N); %degradacion semiimplicita (
    logistica)
93 Vmod=spdiags(1./(1+V).^2,0,N,N); %modificacion
    quimiotaxis
94
95 Au=M*1/dt+r*M*Umod+Du*K+lambda*Auchem*Vmod;
96 U=Au\Bu;
97
98 %% Graficas
99 subplot(2,2,1)
100 plot(X,U)
101 title('Densidad de c'elulas');
102 ylabel('u')
103 xlabel('x')
104 shg
105
106 subplot(2,2,2)
107 plot(X,V)
108 title('Densidad de qu'imico');
109 ylabel('v')
110 xlabel('x')
111 shg
112
113 subplot(2,2,3)
114 plot(X,W)
115 title('Densidad de nutrientes');
116 ylabel('w')
117 xlabel('x')
118
119
120 %% Actualizacion
121 U0=U;
122 V0=V;
123 W0=W;
124 end
```

Bibliografía

1. Allaire, G. *Numerical analysis and optimization: an introduction to mathematical modelling and numerical simulation* (OUP Oxford, 2007).
2. Bellomo, N., Bellouquid, A., Tao, Y. y Winkler, M. Toward a mathematical theory of Keller–Segel models of pattern formation in biological tissues. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences* **25**, 1663-1763 (2015).
3. Dobell, C. y van Leeuwenhoek, A. *Antony van Leeuwenhoek and his "Little animals"* (Harcourt, Brace y company, New York, 1932).
4. Guillén González, F. Apuntes CMON. *Universidad de Sevilla* (2020).
5. Horstmann, D. From 1970 until present: the Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences (2003).
6. Osaki, K. y Yagi, A. Finite-Dimensional attractor for one-dimensional Keller-Segel equations. *Funkcial. Ekvac.* **44**, 441-469 (2001).
7. Saito, N. Conservative upwind finite-element method for a simplified Keller-Segel system modelling chemotaxis. *IMA Journal of Numerical Analysis* **27** (sep. de 2006).
8. Tyson, R., Lubkin, S. R. y Murray, J. D. Model and analysis of chemotactic bacterial patterns in a liquid medium. *Journal of Mathematical Biology* **38**, 359-375 (1999).
9. Zhou, G. y Saito, N. Finite volume methods for a Keller-Segel system: discrete energy, error estimates and numerical blow-up analysis. *Numerische Mathematik* **135**, 265-311 (ene. de 2017).