



Sociedad Mexicana de Computación Científica
y sus Aplicaciones

Boletín

de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y
sus Aplicaciones

Año X - Número 10
Diciembre 2024



Comité Editorial

Justino Alavez Ramirez,	UJAT
Pablo Barrera Sánchez,	UNAM
Pedro Flores Pérez,	UNISON
Gerardo Tinoco Guerrero,	UMSNH, CONAHCyT
José Gerardo Tinoco Ruíz,	UMSNH

Editores Técnicos

Gerardo Tinoco Guerrero,	UMSNH, CONAHCyT
José Alberto Guzmán Torres	UMSNH, CONAHCyT

El boletín de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones publica artículos de investigación originales y de alta calidad en las áreas de matemáticas aplicadas y computación científica, así como artículos de difusión científica. Todos los artículos son sometidos a una revisión por expertos en estas áreas de instituciones nacionales e internacionales.

El Boletín de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones A. C. (SMCCA), Año X, No. 10, Diciembre 2024, es una publicación oficial anual editada por la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones A. C., calle Luis Horacio Salinas, 545, Col. Valle de Morelos, Saltillo, Coahuila, C.P. 25013, Tel. (844) 133 5647, www.smcca.org.mx.

Editor responsable: Gerardo Tinoco Guerrero. Reserva de Derechos al Uso Exclusivo No. 04 - 2017 - 103114330600 - 203, ISSN: 2594-0457, ambos otorgados por el Instituto Nacional de Derechos de Autor. Responsable de la última actualización de este Número, Gerardo Tinoco Guerrero, Avenida Francisco J. Mújica S/N, Ciudad Universitaria, Edificio B, Morelia, Michoacán, C.P. 58030, fecha de la última modificación: 27 de diciembre de 2024.

Las opiniones expresadas por los autores no necesariamente reflejan la postura del editor de la publicación.

Queda prohibida la reproducción total o parcial de los contenidos e imágenes de la publicación sin previa autorización de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones A. C.

Suscripciones al Boletín
smcca@smcca.org.mx
<https://www.scipedia.com/sj/smcca>

Índice general

Índice general	II
Carta de Bienvenida	1
Reseña de la XXXII Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico	2
Artículos	12
Parametrización del Álabo de una Turbina Francis 99 Usando Polinomios de Bernstein	13
Comportamiento Sísmico de un Edificio de Concreto Reforzado de Seis Niveles con Aislamiento de Base en la Ciudad de Morelia	23
Multicolor Parallel Fourth-Order Implicit Finite Difference for Solving the 2D Poisson Equation	39
Un Modelo Matemático de la Formación de la Orina	55
Estimación Bayesiana del Número Reproductivo Básico en un Brote de Chikungunya en Acapulco, Guerrero	72
Numerical Turing Patterns Formation on 3D Surfaces with a Linear Finite Element Method	96
Robustez y Componente Gigante de la Red Aeroportuaria de la República Mexicana Mediante un Análisis en Teoría de Grafos	119
Información General	139

Carta de Bienvenida

La Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones, A.C. (SMCCA) y el Comité Editorial, les damos una cordial bienvenida a la décima edición del Boletín electrónico anual de la SMCCA, el cual tiene como objetivo mantenerlos informados de las actividades realizadas por la SMCCA y sus asociados. En el Boletín se publican noticias, eventos, artículos de divulgación, de docencia y de investigación de alto nivel en el área de las Matemáticas Aplicadas y Cómputo Científico, así como resúmenes de las mejores tesis de Licenciatura en Matemáticas Aplicadas.

En esta décima edición del boletín se presentan: una breve semblanza de la XXXII Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico, llevada a cabo en conjunto con la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Juárez del Estado de Durango, en modalidad híbrida del 24 al 28 de junio del presente año, en la Ciudad de Durango, Dgo.; e incluye siete artículos de investigación, cinco de ellos por solicitud y los otros dos corresponden a la tesis ganadora y mención honorífica de la vigésima segunda edición del premio Mixbaal.

La SMCCA agradecerá que ante el interés que surja en los lectores en los temas que se presenten en nuestra publicación, éstos se conviertan en usuarios asiduos, así como en miembros activos de nuestra Sociedad. La información del registro de membresías a la SMCCA la pueden consultar en el Módulo de Registro de nuestra página www.smcca.org.mx.

Jonathan Montalvo Urquizo

Presidente

Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones, A.C.

Reseña de la XXXII Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico

Justino Alavez Ramírez,
Rina Betzabeth Ojeda Castañeda,
Armando Mata Romero,
Enrique Vargas Betancourt



Del 24 al 28 de junio de 2024 se celebró con gran éxito la XXXII edición de la Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico (ENOAN 2024). Se realizó conjuntamente con la Facultad de Ciencias Exactas (FCE) de la Universidad Juárez del Estado de Durango (UJED), en modalidad híbrida en la Ciudad de Durango, Dgo.

El comité organizador estuvo constituido por el Comité Local formado por profesores-investigadores, administradores y técnicos de la FCE de la Universidad Juárez del Estado de Durango, y el Comité Nacional conformado por profesores-investigadores miembros en activo de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones (SMCCA).

Como en anteriores ediciones, las actividades académicas realizadas en esta ENOAN 2024 comprendieron: 9 cursos cortos, 6 conferencias plenarias y 22 conferencias invitadas a cargo de reconocidos investigadores tanto nacionales como internacionales, 13 trabajos de investigación en formato de cartel y 18

en formato de comunicación oral agrupados en 4 sesiones temáticas; adicionalmente se tuvieron tres sesiones especiales: la sesión del “V Mini-Symposium de Medicina y Matemáticas (Cáncer, Corazón, Obesidad y Diabetes)”, la sesión de “Modelos Matemáticos en el Sector Forestal” y la sesión del “III Foro Conjunto de Sociedades Científicas (SMM, SMCCA, MEX-SIAM, AME y SMIO)”. Al ser un evento híbrido, todas las actividades tanto presenciales como virtuales se transmitieron en línea vía Zoom y por <https://www.facebook.com/Facultad.de.ciencias.exactas.ujed>, salvo la exposición de los carteles que se realizó en modalidad presencial. Las actividades virtuales también se proyectaron en la sala para los participantes presenciales.

En cuanto a los 9 cursos cortos, estos fueron de diferentes niveles: básico, intermedio y avanzado, y fueron impartidos por profesores-investigadores, de diferentes Instituciones de Educación Superior y Centros de Investigación del País. Se ofrecieron para alumnos de licenciatura y posgrado, así como a profesores y profesionales interesados, de distintas instituciones educativas del país y del extranjero, y con tópicos específicos, los cuales generalmente no son abordados con regularidad en sus instituciones. El nombre de los cursos impartidos, así como la asistencia promedio en cada uno de ellos se presenta en la tabla 0.1.

CURSOS NIVEL BÁSICO:	ASISTENCIA PROMEDIO
Resolución en Scilab de sistemas de ecuaciones diferenciales conectando circuitos. M.C.N. Fidel Esteban Flores Ocampo, UJED.	15
Observando matemáticas a través de la impresión 3D. M.C. Jesús Eduardo Mata Cano, FCE-UJED.	21
Desarrollo de modelos de crecimiento forestal. Dr. José Javier Corral Rivas, FCF-UJED.	14
CURSOS NIVEL INTERMEDIO:	ASISTENCIA PROMEDIO
Algoritmos en redes de sensores para la prevención de desastres naturales. Dr. Joel Antonio Trejo Sánchez, CIMAT Unidad Mérida, Investigador por México, CONAHCYT.	14
An introduction to Machine and Deep Learnings with applications. Parte I. Prof. Biswa Nath Datta, IEEE Fellow, Northern Illinois University.	32
Algoritmos de Cómputo Evolutivo aplicados a la resolución de rompecabezas de lógica. Dr. Jonás Velasco Álvarez, CIMAT-Unidad Aguascalientes, Investigador por México, CONAHCYT.	31
CURSOS NIVEL AVANZADO:	ASISTENCIA PROMEDIO
Resolviendo Laberintos con Ecuaciones Diferenciales Parciales. Dr. Reymundo Ariel Itzá Balam, CIMAT Unidad Mérida, Investigador por México, CONAHCYT. Dr. Miguel Ángel Uh Zapata, CIMAT Unidad Mérida, Investigador por México, CONAHCYT.	22
An introduction to Machine and Deep Learnings with applications. Parte II. Prof. Biswa Nath Datta, IEEE Fellow, Northern Illinois University.	21
Análisis del estado de la vegetación usando imágenes satelitales e información geoespacial. Dr. Jonathan Montalvo Urquizo, Tecnológico de Monterrey.	21

Tabla 0.1: Cursos impartidos en la XXXII ENOAN.

En cuanto a las 6 conferencias plenarias, la conferencia inaugural “Diego Bricio”, estuvo a cargo del reconocido Profesor-Investigador, el Dr. José Carlos Gómez Larrañaga, Director de la Unidad Mérida del CIMAT, la conferencia “Cátedra Humberto Madrid” estuvo a cargo del reconocido Profesor-Investigador, el Dr. Carlos

Armando Cuevas Vallejo, del Departamento de Matemática Educativa del CINVESTAV, y las cuatro conferencias restantes estuvieron a cargo de los reconocidos profesores investigadores: el Prof. Biswa Nath Datta del IEEE Fellow, Northern Illinois University, la Dra. María Isabel Asensio Sevilla del Departamento de Matemática de la Universidad de Salamanca, el Dr. Higmar Herrera Hernández de Física médica del Centro Estatal de Cancerología de Durango, y el Dr. Gilberto Calvillo Vives de la Unidad Cuernavaca del Instituto de Matemáticas de la UNAM. El título y resumen de las conferencias se puede consultar en la página de la sociedad en la liga http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

La presentación de trabajos en forma de cartel se realizó a través de la exposición de 13 carteles, en modalidad presencial, sometidos y aprobados por la comisión de evaluación de trabajos. Actualmente se puede acceder a todos ellos en http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024. La presentación de los 18 trabajos en forma de comunicación oral, agrupados en 4 sesiones temáticas, se llevó a cabo en modalidad híbrida y transmitidas a través de las aulas virtuales de la plataforma Zoom. Los títulos y resúmenes de los trabajos, así como la información de los ponentes y la grabación de la ponencias se pueden consultar en http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

Las conferencias invitadas de la Escuela, estuvieron a cargo de la Dra. María Aracelia Alcorta García de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas de la Universidad Autónoma de Nuevo León, el Dr. Gerardo Maximiliano Méndez del Departamento de Ingeniería Eléctrica y Electrónica del Instituto Tecnológico de Nuevo León-TecNM, y el Dr. Benito Chen Charpentier del Departamento de Matemáticas, University of Texas at Arlington. El título y resumen de las conferencias así como las grabaciones de las mismas se puede consultar en la página de la sociedad en http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

En cuanto a la sesión especial “V Mini-Symposium de Medicina y Matemáticas”, coordinada por el Dr. Gilberto Calvillo Vives y el Dr. Jesús López Estrada, se contó con la participación de la Dra. Adriana Monroy Guzmán, investigadora del Hospital General de México - Facultad de Medicina de la UNAM, la Dra. Graciela María de los Dolores González Farías, investigadora del CIMAT Monterrey, el Dr. Humberto Arce Rincón y la QFB. Araceli Torres Pérez, investigadores de la Facultad de Ciencias de la UNAM, el Dr. Roberto Alonso Sáenz Casas, investigador de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Colima, el Dr. Isaac Martínez Velis, investigador de Física médica del Centro Estatal de Cancerología de Durango, el Dr. Ricardo Strausz Santiago, investigador del Instituto de Matemáticas de la UNAM, y la conferencia plenaria del Dr. Higmar Herrera Hernández de Física médica del Centro Estatal de Cancerología de Durango. El programa de esta sesión se puede consultar en http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

En la sesión especial de “Modelos Matemáticos en el Sector Forestal”, coordinada por el Dr. Enrique Vargas Betancourt y M.C.N. Fidel Esteban Flores Ocampo de la UJED, se contó con la participación de el Dr. Santiago Solís González del Instituto Tecnológico del Salto Pueblo Nuevo Durango, el Dr. Pablito Marcelo López Serrano de la Facultad de Ciencias Forestales y Ambientales de la Universidad Juárez del Estado de Durango, el Dr. Francisco Javier Hernández del Instituto Tecnológico del Salto Pueblo Nuevo Durango, el Dr. Francisco Cruz Cobos del Instituto Tecnológico del Salto Pueblo Nuevo Durango, el Dr. Gerónimo Quiñonez-Barraza del Campo Experimental Valle del Guadiana, Instituto Nacional de Investigaciones Forestales, Agrícolas y Pecuarias (INIFAP), el Dr. José Javier Corral Rivas de la Facultad de Ciencias Forestales y Ambientales de la Universidad Juárez del Estado de Durango, y la conferencia plenaria de la Dra. María Isabel Asensio Sevilla del Departamento de Matemática de la Universidad de Salamanca. Los títulos y resúmenes de las conferencias así como las grabaciones de las mismas se pueden consultar en la página http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

En la sesión especial de “III Foro Conjunto de Sociedades (SMCCA, SMM, SMIO, AME, MEX-SIAM)”, coordinada por el Dr. Justino Alavez Ramírez y la Dra. Rina Betzabeth Ojeda Castañeda de la SMCCA, se contó con la participación de conferencistas de cinco sociedades: el Dr. Plácido Salomón Álvarez López de la Sociedad Matemática Mexicana, el Dr. Francisco Javier Domínguez Mota de la Sociedad Mexicana de Investigación de Operaciones, el Dr. Gerardo Hernández Dueñas de SIAM Sección México, la Dra. Addy Margarita Bolívar Címé de la Asociación Mexicana de Estadística, y la conferencia plenaria de el Dr. Gilberto Calvillo Vives de la SMCCA. Los títulos y resúmenes de las conferencias así como las grabaciones de las mismas se pueden consultar en la página http://www.smcca.org.mx/Productos_y_Resultados_2024.

Ganadores del vigésimo primer Premio Mixbaal

Desde 2002, dentro del marco de la ENOAN, se instituyó el “Premio Mixbaal a la Mejor Tesis de Licenciatura en Matemáticas Aplicadas”, cuya convocatoria está dirigida a los egresados de carreras de matemáticas y áreas afines. Los ganadores de la vigésima segunda edición de este premio, evaluado en la ENOAN 2024, son los siguientes:

Ganador del premio Mixbaal

- **Omar Martínez Rosas**
Licenciatura de Modelación Matemática
Universidad Autónoma de la Ciudad México
- **Trabajo:** Conectividad y robustez de la red aeroportuaria de la República Mexicana mediante teoría de redes complejas.
- **Director:** Dr. Luis Agustín Olivares Quiroz.

Mención Honorífica

- **María Guadalupe Vázquez Peña**
Licenciatura en Matemáticas Aplicadas
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
- **Trabajo:** Modelación, análisis y estimación bayesiana de la dinámica hospederovector con recaídas en la enfermedad de chikungunya.
- **Director:** M.C. Cruz Vargas de León y Dr. Jorge Velazquez Castro.

Los ganadores expusieron su trabajo en la ENOAN 2024 como ponentes invitados.

Concurso de Carteles

Continuando con la tradición de las anteriores ediciones de la ENOAN, se realizó el concurso de carteles, en el cual una vez que los participantes exponen ante el jurado y el público su trabajo, el jurado lleva a cabo una evaluación para decidir la premiación. Los participantes expusieron su cartel ante el jurado y el público en forma oral. El jurado, integrado por el Dr. Justino Alavez Ramírez (Coordinador), la Dra. María del Pilar Alonso Reyes, la Dra. María Luisa Sandoval Solís, el Dr. Saul Nevárez Nieto y el Dr. Jonathan Montalvo Urquizo, analizó la exposición de los participantes y con base en la Convocatoria emitida para tal fin y bajo los Criterios de Evaluación: Calidad Científica, Impacto Visual, Creatividad y Originalidad, los Miembros del Jurado revisaron reservada y libremente la totalidad de los carteles presentados, dictaminando lo siguiente:

Mejor Cartel Nivel Licenciatura	
Título	Autor(es)-Institución
Números pseudoaleatorios generados por el mapeo logístico modificado y su aplicación en la encriptación de imágenes.	Sara Apolinar Crisanto <i>Universidad Autónoma de la Ciudad de México</i>
Estimación de tasas de infección por COVID-19.	Sarai Martínez Méndez Iojanya Abigail Valle Queb Wendy Hernández Flores <i>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco</i>
Mejor Cartel Nivel Maestría	
Título	Autor(es)-Institución
Solución numérica de la interacción de 2 especies con difusión.	Saúl David Candeleró Jiménez Jorge López López <i>Universidad Juárez Autónoma de Tabasco</i>
Mención Honorífica Nivel Licenciatura	
Título	Autor(es)-Institución
π en la modelación matemática: desde círculos hasta series infinitas.	María Fernanda Domínguez Cerda Enrique Cruz Martínez Felipe Alfaro Aguilar <i>Universidad Autónoma de la Ciudad de México</i>
Solución numérica de un problema de Laplace en el contexto de electroencefalografía.	Andry Alexander Peregrino Rodríguez Jorge López López <i>Univerisidad Juárez Autónoma de Tabasco</i>

Cobertura de las actividades

De acuerdo al registro oficial del Certificado de Inscripción a la ENOAN 2024, se contó con la asistencia de 119 personas, de las cuales 42 (35%) pertenecían al género femenino y 77 (65%) al género masculino, éstos resultados se muestran en la gráfica 0.1.

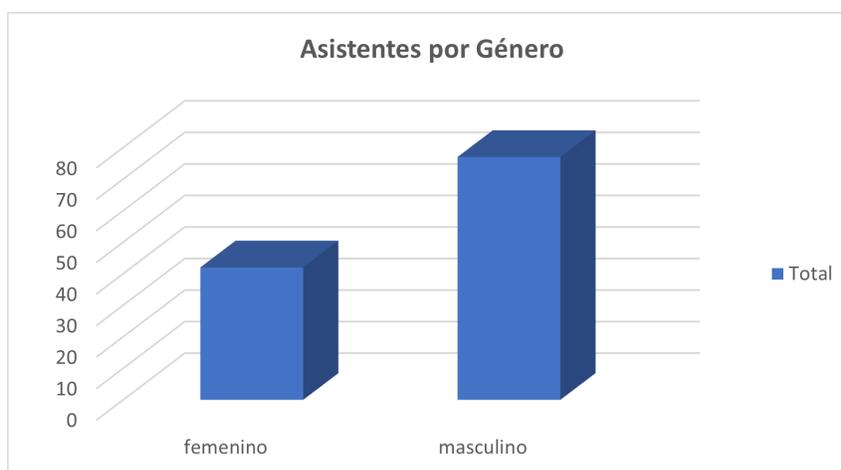


Figura 0.1: Gráfica de número de asistentes por género a la XXXII ENOAN.

Los intervalos de edades que se establecieron en la cédula de registro fueron de los 18 años a más de 64 años, que eran las edades probables de la audiencia para este tipo de evento (jóvenes, adultos y adultos mayores), y los resultados que se obtuvieron con respecto a la edad se presentan en la tabla 0.2 y figura 0.2. Se puede observar en la tabla 0.2 que el mayor número de asistentes se dieron en el rango de 18 a 24 años que fueron 44 (37%), seguido por el rango de 35 a 44 años que fueron 21 (18%), estando el menor número

de asistentes en las edades adultas de 55 a más de 64 años con 10 (8%). Es importante resaltar que hubo una alta participación de los jóvenes que desde sus primeros semestres de la licenciatura estén decidiendo participar en la ENOAN.

Intervalos de edades	Número de asistentes	Porcentaje de asistentes
18 a 24	44	37 %
25 a 34	17	14 %
35 a 44	21	18 %
45 a 54	12	10 %
55 a 64	10	8 %
> 64	15	13 %
Total	119	100 %

Tabla 0.2: Número y porcentaje de asistentes al evento por intervalo de edades.



Figura 0.2: Gráfica de intervalos de edades de los participantes.

En la tabla 0.3 y figura 0.3 se muestran las frecuencias cruzadas edad-género, que permite ver la relación existente entre estas dos variables. Tanto la tabla como la gráfica muestran que en todos los rangos de edad de los 18 a los 64 años y más, se tuvo un mayor porcentaje de asistencia de hombres que de mujeres, habiendo una diferencia menor de participación entre los géneros en los intervalos de edades de 25 a 34, 45 a 54 y más de 64.

Género	Intervalos de Edades						Total
	18-24	25-34	35-44	45-54	55-64	Más de 64	
Femenino	25	3	4	3	5	2	42
Porcentaje	21.0 %	2.5 %	3.4 %	2.5 %	4.2 %	1.7 %	35.3 %
Masculino	19	14	17	9	5	13	77
Porcentaje	16.0 %	11.8 %	14.3 %	7.5 %	4.2 %	10.9 %	64.7 %
Total	44	17	21	12	10	15	119
Porcentaje	37.0 %	14.3 %	17.7 %	10.0 %	8.4 %	12.6 %	100 %

Tabla 0.3: Frecuencia cruzada Edad-Género de los asistentes.

A continuación se muestra en la tabla 0.4 y figura 0.4, los porcentajes de asistentes en cada una de las dos modalidades (presencial y virtual) y en la tabla 0.5 y figura 0.5 se presenta una gráfica cruzada de porcentaje de asistentes que muestra la relación entre el género y la modalidad seleccionada.

Como se puede visualizar tanto en la tabla 0.4 como en la gráfica 0.4, que en esta edición de la ENOAN 2024, hubo una mayor participación en modalidad presencial 97 (82%) que en la virtual que fueron 22 (18%). Tanto la tabla 0.5 como la gráfica 0.5 muestran que en ambos géneros, femenino y masculino, se prefirió la participación en la modalidad presencial.

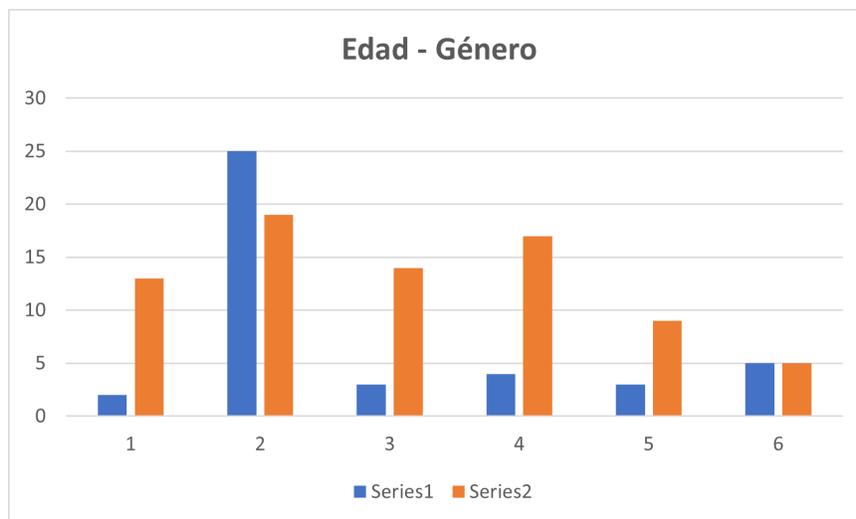


Figura 0.3: Gráfica relación entre Género y Edad por intervalo de edades. Series 1 = Femenino y Series 2 = Masculino.

Modalidad	Número	Porcentaje
Presencial	97	82 %
Virtual	22	18 %
Total	119	100 %

Tabla 0.4: Número y porcentaje de asistentes en cada modalidad.

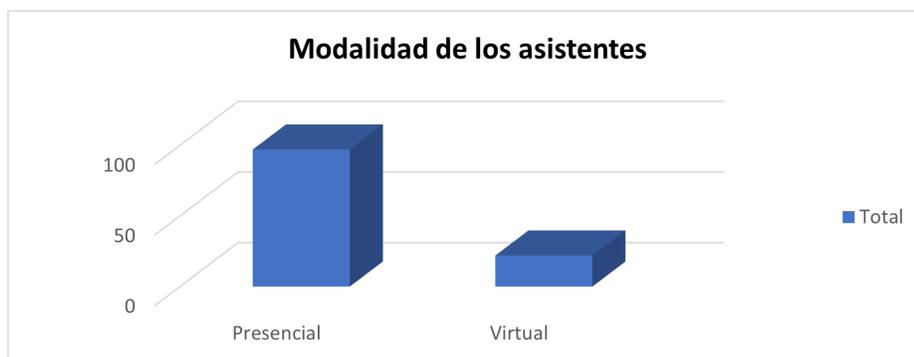


Figura 0.4: Gráfica de la selección de modalidad de los asistentes.

Genero	Modalidad		Total
	Presencial	Virtual	
Femenino	37	5	42
Porcentaje	31 %	4 %	35 %
Masculino	60	17	77
Porcentaje	51 %	14 %	65 %
Total	97	22	119
Porcentaje	82 %	18 %	100 %

Tabla 0.5: Frecuencia cruzada Género-Modalidad de los asistentes.

Se obtuvieron otros estadísticos relacionados con características de los asistentes como: país y estado de nacimiento, pertenencia a algún grupo étnico, entre otros. La información completa de las estadísticas de la asistencia se puede consultar en

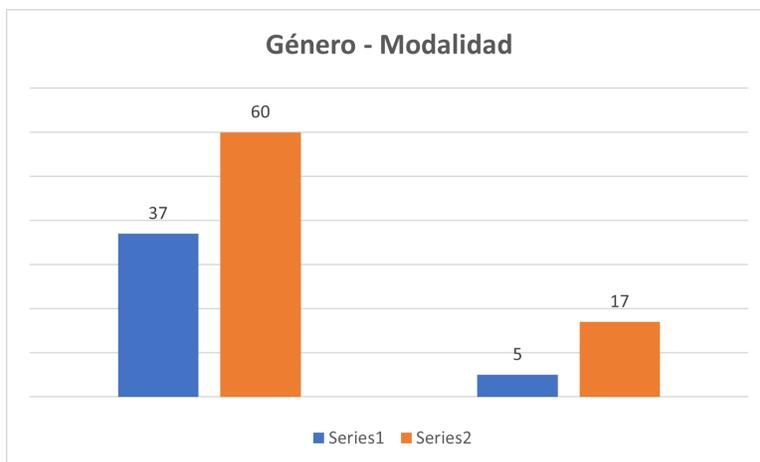


Figura 0.5: Gráfica cruzada Género-Modalidad de los asistentes al evento. Series 1 = Femenino y Series 2 = Masculino.

<https://www.smcca.org.mx/Bolet%C3%ADnes/Estadisticas-Asistencia-ENOAN-2024.pdf>

Consideraciones finales

Por último es de gran importancia señalar que el gran esfuerzo de trabajo realizado tanto por el Comité Local (Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Juárez del Estado de Durango) como el Comité Nacional (aglutinados dentro de la SMCCA) en la organización, y contando con el importante apoyo financiero de Instituciones, Dependencias y Centros de Investigación como: CONAHCYT, la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones, A.C., la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Juárez del Estado de Durango, la Facultad de Ciencias de la UNAM, la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa, la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, la SIAM Sección México (MexSIAM), la Sociedad Matemática Mexicana (SMM), la Sociedad Mexicana de Investigación de Operaciones (SMIO) y la Sociedad Mexicana de Estadística (AME), entre otras; permitió obtener un conjunto de resultados a beneficio de una comunidad científica conformada por alumnos, profesores, investigadores y profesionales interesados en la Computación Científica y las Matemáticas Aplicadas, que incidieron en indicadores de impacto como los que se presentan en la tabla 0.6.

Finalmente, se muestran en la figura 0.6 algunas imágenes de las actividades desarrolladas por los participantes de la ENOAN 2024.

Indicador	Cantidad
Total de asistentes registrados:	119
Programas Académicos beneficiados por el evento:	38
Cuerpos Académicos o Grupos de Investigación beneficiados:	15
Cursos cortos impartidos:	9
Conferencias (Diego Bricio, Humberto Madrid, Plenarias e Invitadas):	28
Ponencias por solicitud presentadas:	18
Carteles expuestos:	13
Estudiantes beneficiados:	60
Investigadores y Docentes beneficiados:	59
Mujeres beneficiadas:	42
Hombres beneficiados:	77
Número de Instituciones Nacionales participantes:	38
Número de Instituciones Internacionales participantes:	5
Integrantes del Comité Nacional:	14
Integrantes del Comité Local:	7
Personal de Apoyo Sede (alumnos, técnicos audiovisuales y administrativos):	18
Auditorio para inauguración, conferencias plenarias e invitadas:	1
Salas de cómputo equipados con cañón proyector para cursos:	4
Salones equipados con cañón proyector y pizarrón para ponencias:	2
Mamparas para carteles:	7
Licencias de uso de aulas virtuales de la plataforma ZOOM:	3

Tabla 0.6: Indicadores de impacto.





Figura 0.6: Algunas imágenes de las actividades de la ENOAN 2024.

Artículos

Parametrización del Álabes de una Turbina Francis 99 Usando Polinomios de Bernstein

Heriberto Arias-Rojas^{*1,2}, Francisco J. Dominguez-Mota^{1,2}, Juan I. López-Pérez²,
and Miguel A. Rodríguez-Velázquez²

¹Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

²Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Resumen

Uno de los problemas fundamentales en los procesos de manufactura de piezas de turbomáquinas consiste en dotar a las mismas de un sistema de coordenadas adecuado. En otras palabras, en dotarlas de un mallado adecuado. Dentro de los procesos de generación de mallas y las consiguientes geometrías para álabes existen aquellos que usan funciones relacionadas con la dinámica de las líneas de corriente del fluido, y otros, más prácticos, que se basan en la parametrización a partir de las coordenadas “naturales” sobre la superficie del elemento. El presente trabajo muestra la implementación de polinomios de Bernstein para parametrizar la geometría del álabes de una turbina Francis 99 a través de un problema adecuado de mínimos cuadrados. La metodología utilizada es versátil y puede emplearse en álabes de diversas geometrías que se usan con frecuencia en el diseño de turbomáquinas.

Palabras clave: Polinomios de Bernstein, Parametrización, Turbina Francis

1 Introducción

En la teoría de variable compleja existen técnicas que nos permiten diseñar secciones de álabes con formas relativamente complicadas empleando mapeos conformes [2, 12, 23], pero estos tienen un costo computacional elevado debido al gran número de parámetros que se necesitan determinar para generar una geometría útil para un control numérico, por lo que en la práctica es necesario recurrir a metodologías más simples como la parametrización empleando polinomios, reduciendo así el número de coeficientes a determinar. Los

*heriberto.arias@umich.mx

métodos de parametrización de álabes pueden clasificarse en dos principales grupos: aproximación por secciones y parches sobre superficies. Para ambas metodologías, la clave de su implementación eficiente consiste en reducir el número de parámetros para representar geometrías complejas con el menor costo computacional, lo cual ha llevado al desarrollo y uso de un gran número de técnicas en busca de parametrizaciones óptimas [2, 7, 8, 10, 13]. Por su parte, los álabes de turbinas Francis son formas complejas que difícilmente pueden ser reconstruidas geométricamente a partir de una sola función. Algunas de las investigaciones recientes incluyen el uso de métodos de optimización para el diseño de álabes de compresores y turbinas, además del desarrollo de perfiles aerodinámicos [3, 4, 5, 14, 15, 19, 22]. Una opción versátil e intuitiva para realizar la representación numérica de un álabe es el uso de Polinomios de Bernstein [20]. Estos pueden utilizarse con la idea de realizar ajustes suficientemente precisos en un intervalo cerrado de las curvas continuas que representan líneas de corriente. Originalmente fueron propuestos por Bernstein en 1912, y fueron empleados en relativamente pocas aplicaciones debido a limitaciones de las capacidades de cómputo en ese momento [11, 21]. Actualmente, su versatilidad ha permitido aplicarlos en áreas como el cálculo, análisis de elementos finitos, control de sistemas dinámicos, modelado y optimización de geometrías complejas, etc. [9, 20, 11, 24, 16, 6]. El presente trabajo muestra una implementación de los polinomios de Bernstein para realizar un ajuste numérico de un álabe de una turbina Francis 99. A continuación, se describe el proceso de parametrización implementado y los resultados obtenidos.

2 Descripción de la turbina

Las turbinas hidráulicas son turbomáquinas motoras que absorben energía del fluido y la convierte en energía mecánica. Estas se pueden clasificar en función de su grado de reacción (ε_T) como turbinas de acción y reacción [18]. Las turbinas Francis son turbinas de reacción que trabajan con flujo radio-axial y son utilizadas para la producción de energía eléctrica. El caso de estudio se basa en la parametrización del álabe de una turbina hidráulica Francis 99 (Figura 1a), cuyo rotor está compuesto por 15 álabes principales (Figura 1b) y 15 divisores, y tiene un diámetro de 0,63 m. El rotor puede alcanzar una velocidad de 335,4 revoluciones por minuto y una eficiencia hidráulica de 92,61 %.

3 Metodología de parametrización

El proceso de parametrización puede realizarse en tres etapas: extracción de datos, reconstrucción del álabe y evaluación numérica (Figura 2). A continuación se describe en que consiste cada una de ellas.

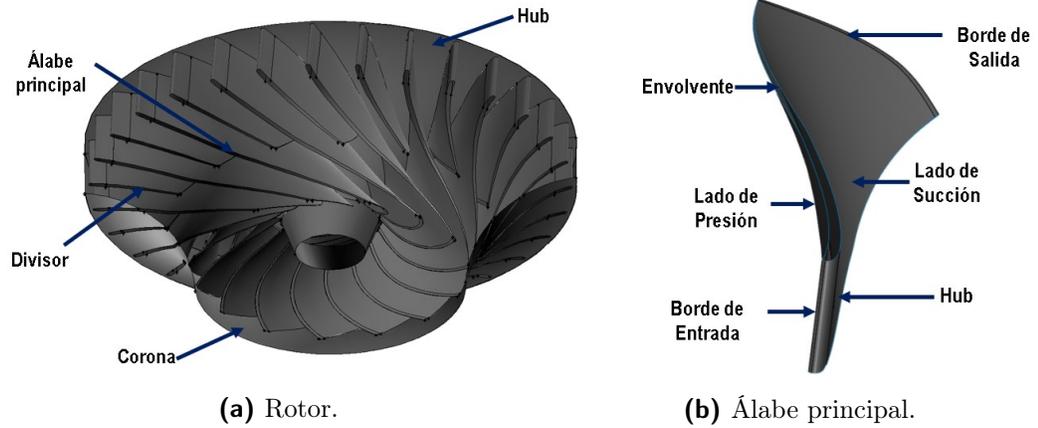


Figura 1: Turbina Francis 99.

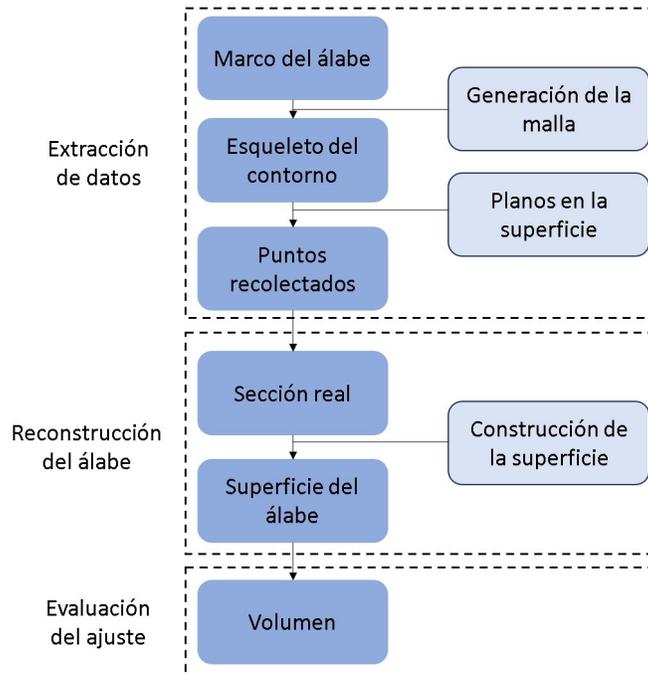


Figura 2: Etapas del proceso de parametrización.

3.1. Extracción de datos

El primer paso consiste en la obtención de las coordenadas x_i, y_i, z_i a partir de un escaneo del álabe real de una turbina Francis 99. El perfil se divide en n secciones (para este caso en particular $n = 10$) las cuales definen los planos de corte en los que la sección es escaneada (Figura 3a). Para definir cada plano se obtienen las coordenadas de m puntos en cada una de las caras de succión y presión ($m = 128$ para este caso en particular) (Figura 3b). El proceso de extracción de datos es vital, mientras mejor sea la distribución de puntos sobre la superficie escaneada obtendremos una mejor representación del elemento y por lo tanto una parametrización más precisa; por otra parte, un escaneo deficiente introduce errores que se manifiestan en la calidad de la parametrización. Los datos del escaneo usados en este trabajo fueron proporcionados por *the Norwegian Hydropower Centre* [1].

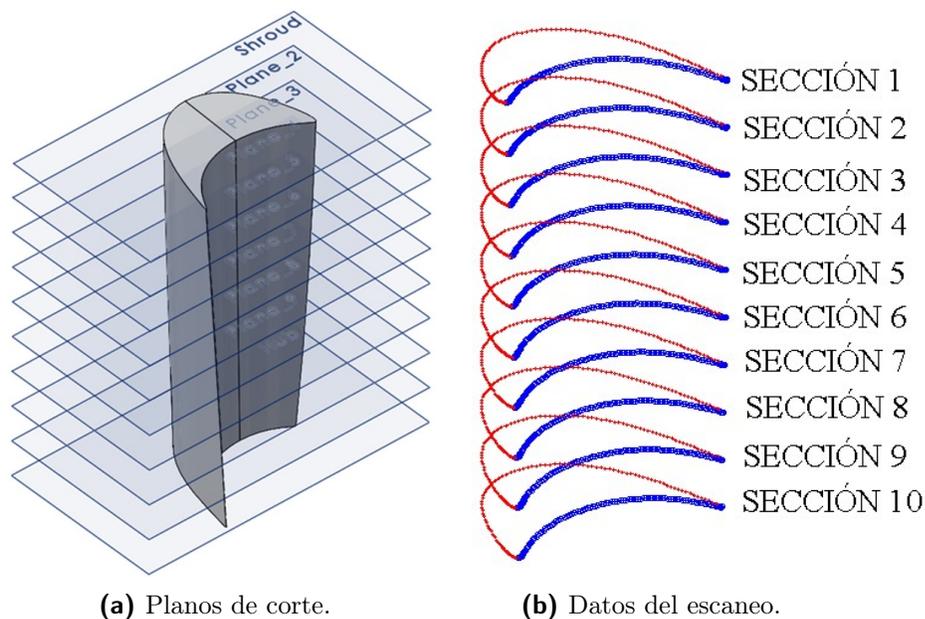


Figura 3: Definición de los planos de corte.

3.2. Reconstrucción de la geometría del álabe

En la etapa de reconstrucción se realiza el ajuste de las caras de presión y succión de la sección transversal del álabe para cada uno de los planos previamente definidos. Para esto se ejecuta un proceso de interpolación empleando un polinomio $P(t)$ definido por 8 curvas de Bernstein $P^{(k)}(t)$ de cuarto orden (1). La elección de la cantidad de curvas implementadas para definir el contorno de la sección transversal esta directamente relacionada con la precisión que se desea obtener. Cada cara de la sección transversal puede ser definida con

tres polinomios o menos, pero esto disminuiría la precisión del ajuste. Del mismo modo incrementar el número de curvas de ajuste reduciría el error pero incrementaría el costo computacional, por lo que lo más conveniente es establecer una tolerancia para el error y encontrar un punto de equilibrio entre precisión y costo computacional.

Las ocho curvas de Bernstein están dadas por

$$P^{(k)}(t) = \sum_{i=0}^{n=4} C_i^{(k)} B_i^4(t), \quad k = 1, \dots, 8 \quad (1)$$

donde t representa la longitud de arco de cada una de las 8 piezas de la sección de la cara correspondiente (presión o succión) $0 \leq t \leq 1$, $C_i^{(k)}$ son 5 puntos de control que definen la forma del ajuste en cada curva, y k representa la curva correspondiente a cada uno de las piezas de la parametrización (figura 5). Como sabemos, los polinomios $B_i^4(t)$ pueden escribirse como

$$B_i^n(t) = \binom{n}{i} t^i (1-t)^{n-i} \quad (2)$$

donde,

$$\binom{n}{i} = \frac{n!}{(n-i)!i!} \quad (3)$$

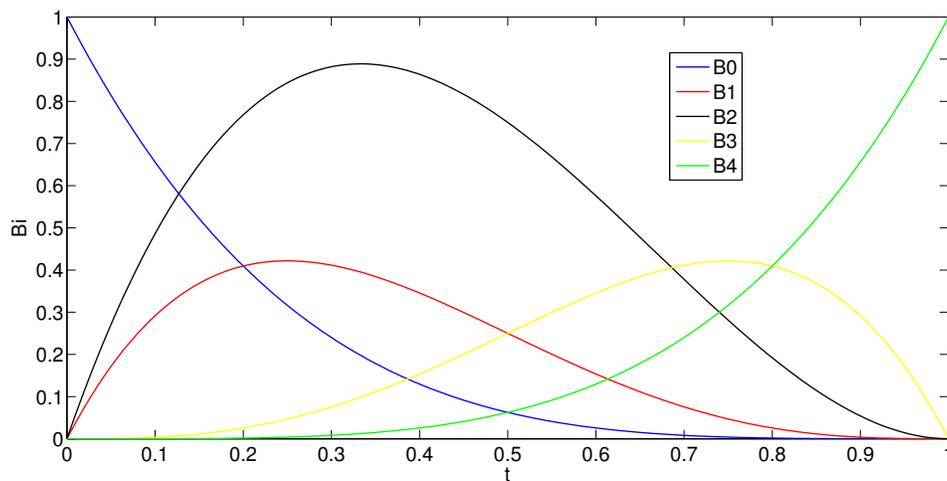


Figura 4: Polinomio de Bernstein de cuarto orden.

Algunas de las propiedades más importantes de los polinomios de Bernstein son la simetría, la positividad y la partición de la unidad [17], entre otras, que los convierten en herramientas útiles para el diseño asistido por computadora (ver Figura 4).

Proponiendo un problema de mínimos cuadrados para obtener el mejor ajuste en la evaluación de $P(t)$ de manera simultánea en todas las coordenadas x_i, y_i, z_i , considerando restricciones de continuidad para los diferentes $P^{(k)}$, se determinan los puntos de control $C_i^{(k)}$; $k = 1, \dots, 8$; $i = 0, \dots, 4$. Cada cara es definida usando 4 polinomios (Figura 5) con lo que se generan así 20 puntos de control. La condición de continuidad viene dada por

$$P^{(k)}(\tau_k) = P^{(k+1)}(\tau_k),$$

donde los valores τ_k se eligen de tal manera que el error cuadrático medio entre $P(t)$ y los puntos escaneados sea un mínimo. Una vez definidos los coeficientes se puede generar una representación de la sección transversal del álabo usando N puntos. Es importante mencionar que la precisión del ajuste está directamente relacionada con el valor de N ; a mayor número de puntos, menor error, lo cual se puede observar a simple vista en la Figura (6) en donde se muestra los resultados del ajuste para $N = 10$ y $N = 100$ (La línea punteada representa el ajuste y la línea continua la geometría real).

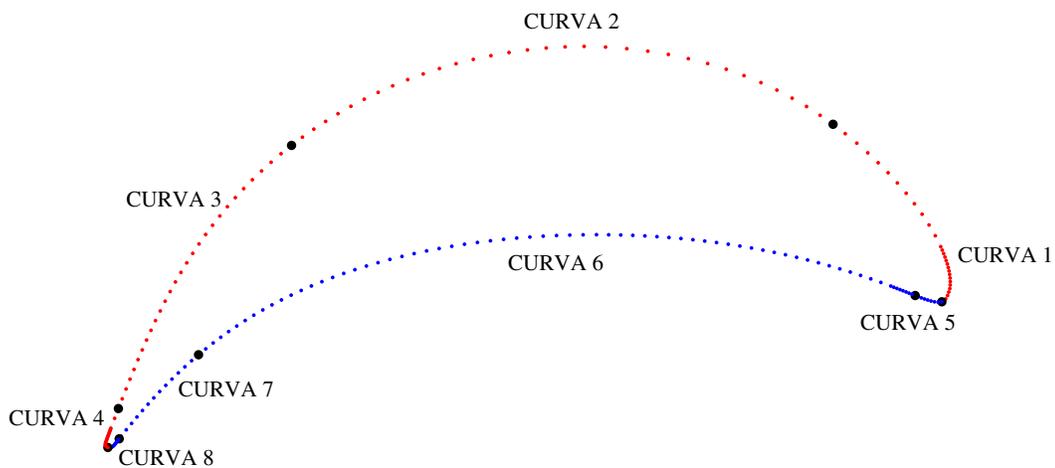
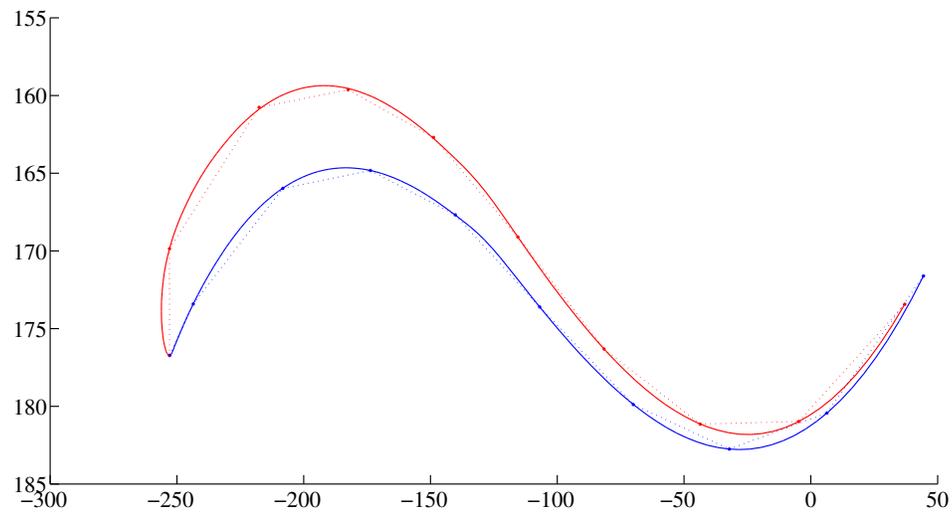
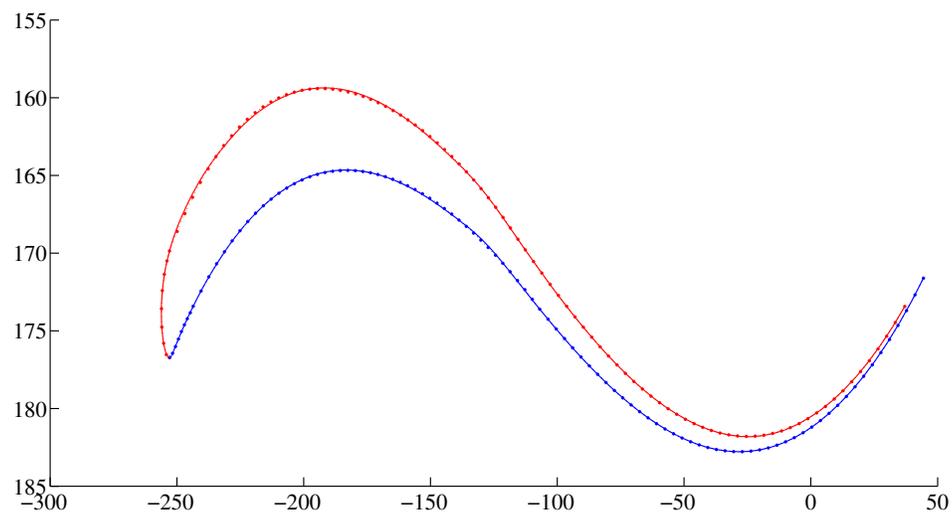


Figura 5: Puntos de control.

Después de generar una sección transversal el proceso se repite para producir cada uno de los planos (Figura 3) y posteriormente construir la superficie del álabo empleando interpolación transfinita (Figura 7) [20].



(a) $N=10$.



(b) $N=100$.

Figura 6: Ajuste numérico usando N puntos.

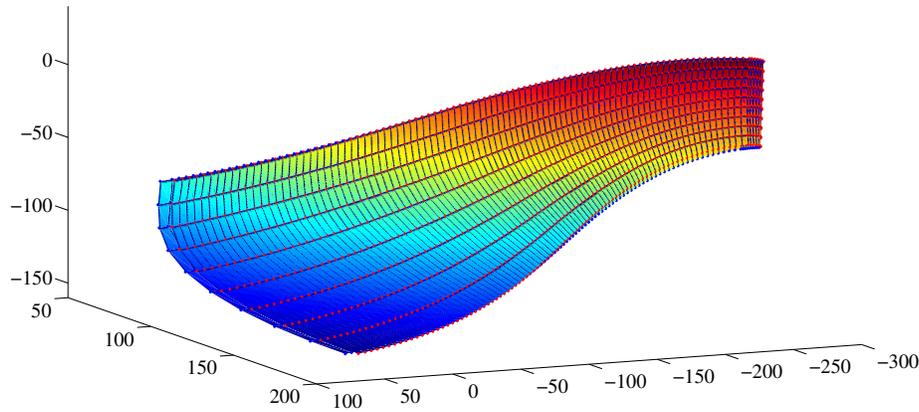


Figura 7: Superficie del álabo.

3.3. Evaluación del error

La etapa final del proceso de parametrización es la evaluación del error para determinar la precisión del ajuste sobre toda la superficie del álabo y los datos escaneados. Dado que se compara la precisión con que el modelo ajusta los datos reales obtenidos a partir del escaneo, en la literatura se utiliza el error cuadrático medio dado por (4):

$$SME = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n D_i^2}{n}} \quad (4)$$

donde D_i , es la distancia euclidiana entre el punto (x_i, y_i, z_i) y la tangente a la superficie definida por el correspondiente vector unitario normal a la superficie generada del álabo [8].

Al evaluar la ecuación (4) tomando $N = 128$, el error cuadrático medio obtenido entre los datos del escaneo y el ajuste es de $1,5496 \times 10^{-3} \%$ en la cara de presión y $9,685 \times 10^{-5} \%$ para la cara de succión [20], ambos valores dentro de la tolerancia sugerida por Dube et al. [9].

4 Conclusiones

El presente trabajo se enfocó en mostrar la implementación de la metodología de aproximación por secciones usando polinomios de Bernstein para la parametrización de formas geométricas complejas, y en particular de álabos de turbinas. Los polinomios de Bernstein muestran ser una opción viable y adecuada, relativamente fácil de implementar. Los resultados obtenidos son muy satisfactorios, y la versatilidad con la que los polinomios se adaptan a la geometría compleja sugiere que esta metodología puede ser implementada

para parametrizar álabes de diferentes tipos de turbina, hélices o cualquier otra geometría compleja.

Bibliografía

- [1] Norwegian hydropower centre, 2016. Available online: <https://www.ntnu.edu/nvks/norwegian-hydropower-center>, 2023. (Accessed on 16 March 2023).
- [2] I. H. Abbott and A. E. Von Doenhoff. *Theory of wing sections: including a summary of airfoil data*. Courier Corporation, USA, 1 edition, 2012.
- [3] R. Agromayor, N. Anand, J.-D. Müller, M. Pini, and L. O. Nord. A unified geometry parametrization method for turbomachinery blades. *Computer-Aided Design*, 133:102987, 2021.
- [4] R. Agromayor and L. O. Nord. Preliminary design and optimization of axial turbines accounting for diffuser performance. *International Journal of Turbomachinery, Propulsion and Power*, 4(3):32, 2019.
- [5] N. Anand, S. Vitale, M. Pini, and P. Colonna. Assessment of ffd and cad-based shape parametrization methods for adjoint-based turbomachinery shape optimization. *Proceedings of Montreal*, 7:9th, 2018.
- [6] H. Arias-Rojas, M. A. Rodríguez-Velázquez, Á. Cerriteño-Sánchez, F. J. Domínguez-Mota, and S. R. Galván-González. A fem structural analysis of a francis turbine blade parametrized using piecewise bernstein polynomials. *Computation*, 11:1–23, 2023.
- [7] A. Cerriteño, G. Delgado, S. Galván, F. Dominguez, and R. Ramírez. Reconstruction of the francis 99 main runner blade using a hybrid parametric approach. In *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, volume 774, pages 012–074. IOP Publishing, 2021.
- [8] G. Delgado, S. Galván, F. Dominguez-Mota, J. García, and E. Valencia. Reconstruction methodology of a francis runner blade using numerical tools. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 34:1237–1247, 2020.
- [9] J.-F. Dubé, F. Guibault, M.-G. Vallet, and J.-Y. Trépanier. Turbine blade reconstruction and optimization using subdivision surfaces. In *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, pages 13–27, 2006.
- [10] G. Farin. *Curves and surfaces for computer-aided geometric design: a practical guide*. Elsevier, USA, 3 edition, 2014.

- [11] R. T. Farouki. The bernstein polynomial basis: A centennial retrospective. *Computer Aided Geometric Design*, 29:379–419, 2012.
- [12] M. Farrashkhalvat and J. Miles. *Basic Structured Grid Generation: With an introduction to unstructured grid generation*. Elsevier, 2003.
- [13] L. Ferrando, J.-L. Kueny, F. Avellan, C. Pedretti, and L. Tomas. Surface parameterization of a francis runner turbine for optimum design. In *22nd IAHR Symposium on hydraulic machinery and systems*, pages 1–11, 2004.
- [14] F. Gagliardi and K. C. Giannakoglou. Rbf-based morphing of b-rep models for use in aerodynamic shape optimization. *Advances in Engineering Software*, 138:102724, 2019.
- [15] A. John, S. Shahpar, and N. Qin. Novel compressor blade shaping through a free-form method. *Journal of Turbomachinery*, 139(8):081002, 2017.
- [16] K. I. Joy. Bernstein polynomials. *On-Line Geometric Modeling Notes*, 13:1–11, 2000.
- [17] R. Kelisky and T. Rivlin. Iterates of bernstein polynomials. *Pacific Journal of Mathematics*, 21:511–520, 1967.
- [18] C. Mataix. *Mecánica de fluidos y máquinas hidráulicas*. MADRID, 2 edition, 1986.
- [19] O. Mykhaskiv, M. Banović, S. Auriemma, P. Mohanamuraly, A. Walther, H. Legrand, and J.-D. Müller. Nurbs-based and parametric-based shape optimization with differentiated cad kernel. *Computer-Aided Design and Applications*, 15(6):916–926, 2018.
- [20] L. D. Pérez Rubio, S. R. Galván González, F. J. Domínguez Mota, A. Cerriteño Sánchez, M. A. Tamayo Soto, and G. Delgado Sánchez. Reconstruction of a steam turbine blade using piecewise bernstein polynomials and transfinite interpolation. In *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*, volume 85017. American Society of Mechanical Engineers, 2021.
- [21] K.-G. Steffens. *The history of approximation theory: from Euler to Bernstein*. Springer, 2006.
- [22] X. Tang, J. Luo, and F. Liu. Adjoint aerodynamic optimization of a transonic fan rotor blade with a localized two-level mesh deformation method. *Aerospace Science and Technology*, 72:267–277, 2018.
- [23] J. F. Thompson, B. K. Soni, and N. P. Weatherill. *Handbook of grid generation*. CRC press, 1998.
- [24] S. A. Yousefi and M. Behroozifar. Operational matrices of bernstein polynomials and their applications. *International Journal of Systems Science*, 41:709–716, 2010.

Comportamiento Sísmico de un Edificio de Concreto Reforzado de Seis Niveles con Aislamiento de Base en la Ciudad de Morelia

Juan I. López-Pérez^{*1}, José M. Jara-Guerrero¹, Heriberto Arias-Rojas^{1,2}, Francisco J. Dominguez-Mota^{1,2}, and Bertha A. Olmos-Navarrete¹

¹Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

²Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Resumen

El aislamiento de base es reconocido actualmente como una opción efectiva para el control de la respuesta sísmica de edificios. Sin embargo, su aplicación se suele limitar a edificaciones que, por su uso, o importancia para la sociedad se desea proteger. Lo anterior conduce a que pocas veces en la actualidad se consideren estos sistemas como una opción viable de estructuración. En este trabajo se analiza un edificio de seis niveles ubicado en una zona de sismicidad moderada, al cual se incorpora un sistema de aislamiento en la base para determinar su impacto en la respuesta sísmica del edificio. Se consideraron la distorsión de entrepiso y la demanda de fuerza cortante como parámetros para cuantificar la respuesta sísmica, debido a que estos se asocian con el daño y el costo esperado de la edificación, además de ser utilizados como parámetros de diseño en los reglamentos de construcción.

Palabras clave: Construcciones, Respuesta sísmica, Aislamiento de base.

1 Introducción

La implementación de medidas para prevenir desastres por la ocurrencia de temblores debería ser de gran interés para la sociedad, ya que conduce a mitigar las pérdidas humanas y materiales que provocan estos fenómenos. En México y otros países, los sismos son una de las principales causas de desastre, por lo que diversos autores han estudiado sus efectos

*ignacio.perez@umich.mx

sobre las construcciones [1, 2, 3]. Los edificios son algunas de las estructuras más afectadas cuando ocurre un temblor, debido a su geometría, y a otros factores relacionados con una mala configuración estructural, un deficiente proceso constructivo y a la falta de mantenimiento [4, 5].

Actualmente los sistemas de control pasivo son una alternativa ampliamente utilizada para reducir los efectos del sismo sobre las edificaciones. Entre ellos se encuentra el aislamiento de base, que nos permite desacoplar el movimiento de los edificios del movimiento del suelo cuando ocurre un temblor, permitiendo que las demandas sísmicas en el edificio sean menores [6, 7]. En México el uso de estos dispositivos es aún limitado, sin embargo, ya se pueden encontrar algunas aplicaciones [8, 9], principalmente en la Ciudad de México debido al riesgo sísmico que presenta [5]. Sin embargo, en ciudades como Morelia, que se considera de sismicidad moderada a alta [10], el uso de sistemas de aislamiento de base es todavía nulo, a pesar de que podrían mejorar el comportamiento de los edificios y ofrecer un mayor nivel de seguridad.

2 Sistemas de aislamiento sísmico

El aislamiento de base consiste en la colocación de un dispositivo entre la estructura de la edificación y su cimentación. Tiene la función de aislar el movimiento del edificio durante un evento sísmico. Un edificio aislado se puede representar como un sistema de un grado de libertad con una masa (m), rigidez (k_s) y amortiguamiento viscoso (c_s), conectado a un aislador, que se representa como un resorte lineal con rigidez (k_b) y amortiguamiento viscoso (c_b), tal como se muestra en la Figura 1.

Existe también una masa a nivel de la cimentación (m_b), donde se aplica directamente la aceleración del suelo provocada por el sismo, por lo que realmente se tiene un sistema de dos grados de libertad formado por ambas masas m y m_b . Aplicando la segunda Ley de Newton e involucrando los desplazamientos laterales absolutos del entrepiso (u_s), la cimentación (u_b) y el suelo (u_g), es posible expresar el equilibrio dinámico mediante las ecuaciones (1) y (2). Aquí, \dot{u} y \ddot{u} son la primera y la segunda derivada del desplazamiento y representan la velocidad y la aceleración respectivamente.

$$m\ddot{u} = -c_s(\dot{u}_s - \dot{u}_b) - k_s(u_s - u_b) \quad (1)$$

$$m\ddot{u}_s + m_b\ddot{u}_b = -c_b(\dot{u}_b - \dot{u}_g) - k_b(u_b - u_g) \quad (2)$$

Para edificios de varios niveles, los cuales pueden ser representados como sistemas de múltiples grados de libertad, las ecuaciones (1) y (2) suelen expresarse en forma matricial

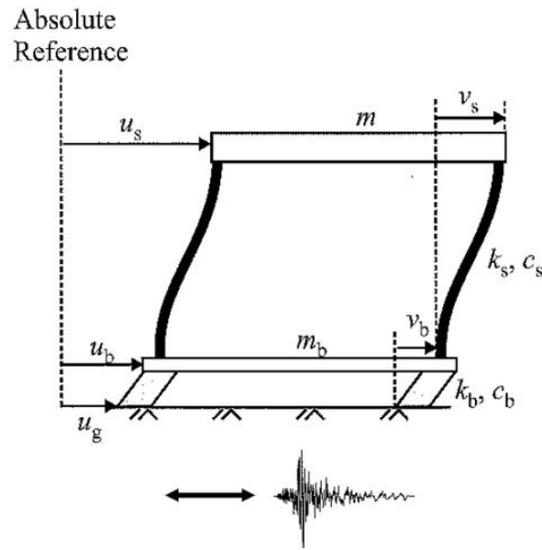


Figura 1: Modelo numérico de un edificio de un nivel con aislamiento de base, tomada de [11].

como:

$$[M]\{\ddot{v}\} + [C]\{\dot{v}\} + [K]\{v\} = -[M]\{r\}\{\ddot{u}_g\} \quad (3)$$

Donde $[M]$ es la matriz de masas, $[C]$ la matriz de amortiguamiento, $[K]$ la matriz de rigideces del sistema y $\{r\}$ es un vector de rotación. Asimismo $\{v\}$ representa el vector de desplazamientos relativos y sus derivadas $\{\dot{v}\}$ y $\{\ddot{v}\}$ son los vectores de velocidad y aceleración respectivamente. Se puede demostrar que $[M]$ y $[K]$ son simétricas y definidas positivas [12], por lo que es posible resolver el problema de valores y vectores característicos para obtener las formas modales y frecuencias de vibrar del sistema estructura-aislador (Figura 2), en donde la primera forma modal representa un comportamiento de cuerpo rígido sobre un sistema flexible. En el segundo modo de vibrar, el movimiento en la parte superior del sistema está fuera de fase con respecto al movimiento del aislador, de forma que incluso si se generan aceleraciones grandes en este segundo modo, este no generará fuerzas cortantes de gran magnitud en la base.

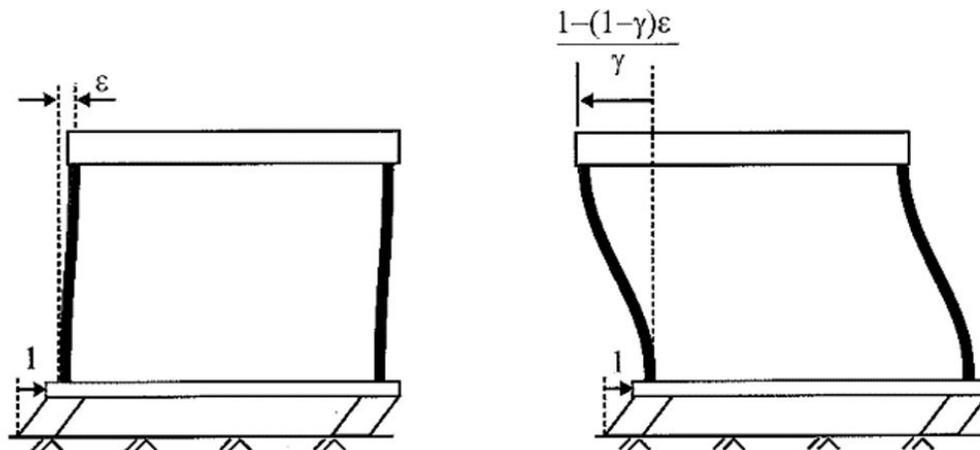


Figura 2: Formas modales de un sistema estructura-aislador, tomada de [11].

3 Tipos de aisladores

Aunque existe actualmente una diversidad de aisladores de base, los más utilizados son los aisladores a base de elastómeros y los aisladores deslizantes. Este estudio se enfoca al análisis de edificaciones con elastómeros. En la categoría de los elastómeros se encuentran los aisladores de hule de alto amortiguamiento (*HDR*), (Figura 3a) que pueden alcanzar porcentajes de amortiguamiento crítico cercanos al 20 %, lo que favorece la disipación de energía en la estructura. Otro aislador elastomérico muy utilizado es el de hule con núcleo de plomo (*LRB*), (Figura 3b), con un comportamiento elasto-plástico por la fluencia del plomo, y comportamiento histerético que puede generar un amortiguamiento equivalente de entre 20 y 25 %.

4 Diseño de los aisladores

El diseño de los aisladores requiere conocer algunas propiedades del sistema sin aislamiento, como son: el peso total de la superestructura (W), el número de aisladores que se desean colocar (N) y el periodo de la estructura sin aislamiento (T). Esta información se obtiene de un análisis elástico del edificio con base rígida, a excepción del número de aisladores que está en función de la cantidad de columnas que posee el edificio.

El siguiente paso consiste en elegir un periodo de vibrar objetivo (T_M), una recomendación utilizada comúnmente es que el periodo del edificio aislado sea de alrededor de tres veces el periodo del edificio con base rígida [13]. Para los aisladores *HDR* se obtiene la rigidez lateral del sistema de aislamiento K_{HT} (ec. 4) y la rigidez de un aislador K_H (ec. 5) a partir del peso total del edificio y el periodo objetivo. Finalmente, se define un porcentaje

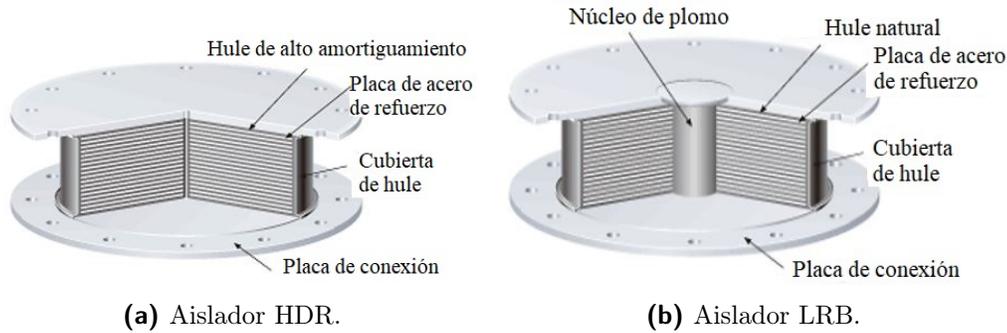


Figura 3: Aisladores utilizados en la propuesta de aislamiento. Tomado del folleto publicitario de la empresa Bridgestone, https://www.bridgestone.com/products/diversified/antiseismic_rubber/product.html

de amortiguamiento de acuerdo con el fabricante y con ello se tienen todos los parámetros necesarios para representar los aisladores en el modelo numérico.

$$K_{HT} = \left(\frac{2\pi}{T_M} \right)^2 \frac{W}{g} \quad (4)$$

$$K_H = \frac{K_{HT}}{N} \quad (5)$$

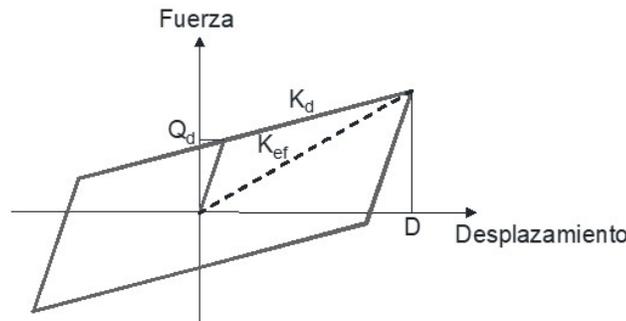


Figura 4: Comportamiento bilineal de un aislador LRB.

Una diferencia en el diseño de los aisladores *LRB* es que se requieren calcular dos rigideces, la rigidez elástica y la rigidez post-fluencia, ya que ahora el aislador tiene un comportamiento bilineal (Figura 4). Ambas rigideces se obtienen a partir de la rigidez efectiva K_{ef} que se obtiene también con la ecuación (4). La rigidez post-fluencia K_d (ec. 8) se obtiene con la resistencia de fluencia Q_d (ec. 6) y el desplazamiento del aislador D (ec.

7). S_a es la pseudo-aceleración asociada al periodo objetivo en el espectro de diseño por sismo. Finalmente, la rigidez elástica se asume igual a 10 veces la rigidez post-fluencia.

$$Q_d = \frac{2\pi K_{ef}}{4D} \quad (6)$$

$$D = \left(\frac{g}{4\pi^2} \right) S_a T_M \quad (7)$$

$$K_d = K_{ef} - \frac{Q_d}{D} \quad (8)$$

5 Caso de estudio

El aislamiento sísmico puede aplicarse a cualquier estructura, sin embargo su efectividad es mayor cuando se cumplen las siguientes condiciones: que el subsuelo sea firme, que la edificación tenga más de dos niveles o sea inusualmente pesada, que la ubicación del edificio permita que este se desplace al menos 20 cm para que trabaje el sistema de aislamiento, y que la estructura tenga un periodo de vibrar corto.

En este caso se propone implementar el aislamiento de base en un edificio de seis niveles de la ciudad de Morelia, Michoacán, con un periodo fundamental de vibrar menor que 1 segundo. El tipo de terreno más común en la ciudad es suelo tipo *I* (firme), con algunas zonas de suelo tipo *II* (de transición), y no hay presencia de suelos tipo *III* (blandos)[14]. Este trabajo analiza el uso de estos sistemas en edificios nuevos por lo que se considera que no hay una limitación en los desplazamientos que pueden experimentar. Por lo anterior, se concluye que el edificio propuesto cumple con los requisitos planteados para que el sistema de aislamiento sea efectivo.

5.1. Geometría y diseño del edificio propuesto

El edificio tiene forma regular y se compone de marcos de concreto reforzado con cuatro crujeías de 5.0 m en la dirección *X*, y cuatro crujeías de 5.5 m en la dirección *Y*. La altura de entrepiso es de 3.5 m en el primer nivel y 3.0 m en los demás niveles (Figura 5). El edificio se analizó de acuerdo con el espectro de diseño para la ciudad de Morelia [15] y se diseñó utilizando las Normas Técnicas Complementarias del Reglamento de la Ciudad de México [16]. Como resultado del diseño estructural se obtuvieron columnas con sección transversal de $65 \times 65\text{ cm}$ y trabes de $25 \times 60\text{ cm}$ para los dos niveles inferiores, mientras que para los niveles superiores resultaron secciones transversales en columnas de $55 \times 55\text{ cm}$ y en trabes de $20 \times 50\text{ cm}$. Con estas dimensiones se cumple con los estados límite de falla establecidos por el Reglamento de Construcciones de la Ciudad de México [16], y no se excede la distorsión de entrepiso de 0.015 que señala el reglamento para edificios formados por marcos

de concreto de baja ductilidad.

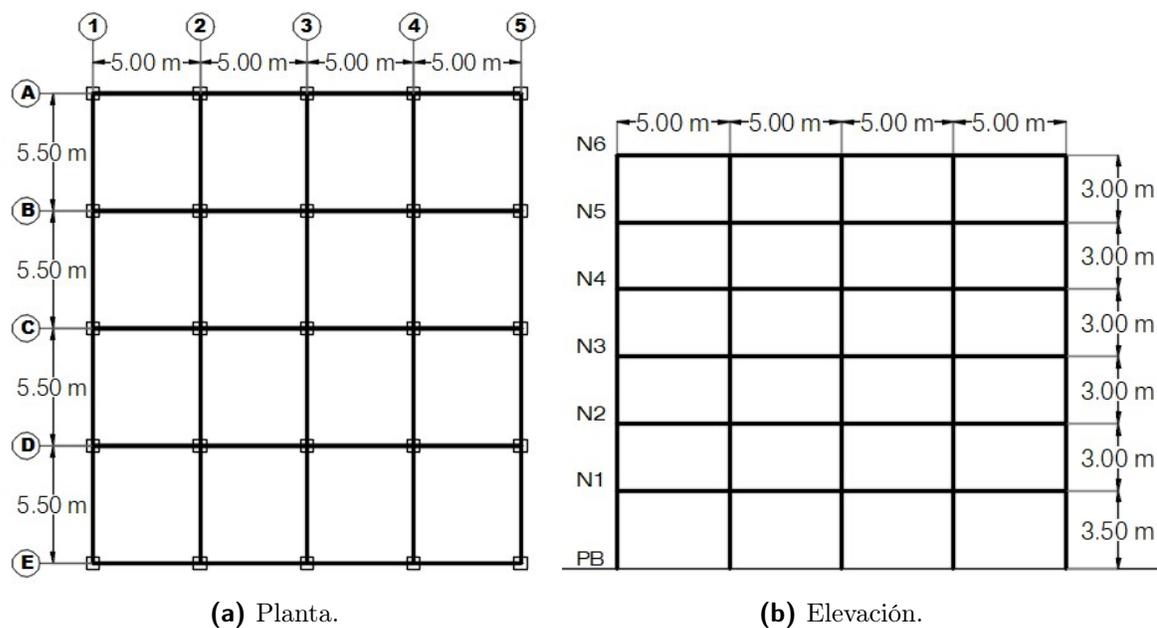


Figura 5: Geometría del edificio estudiado.

Se emplearon las cargas gravitacionales mostradas en la Tabla 1, utilizando las cargas vivas y las combinaciones de carga establecidas en el Reglamento de la Ciudad de México [16]. Por otro lado, el espectro de diseño (Figura 5) se calculó con base en los criterios del Manual de Diseño de Obras Civiles (MDOC) [10], utilizando los parámetros indicados en la Tabla 2 y considerando un amortiguamiento del 5%. La Ciudad de Morelia se encuentra ubicada en la zona sísmica *C*, según lo establecido en el estudio de peligro sísmico realizado por el MDOC. En este contexto, el factor de comportamiento sísmico Q , considera la influencia del comportamiento no lineal de la estructura, mientras que el factor R_0 tiene en cuenta la posible sobrerresistencia de la estructura en función del sistema estructural empleado. Por otro lado, el factor de importancia está directamente relacionado con el uso del edificio, siendo de 1.0 para edificios de carácter habitacional. Asimismo, los factores de redundancia y regularidad guardan relación con la cantidad de marcos o sistemas que aportan resistencia lateral y la regularidad geométrica que posee el edificio.

Se aplicó un análisis dinámico modal espectral para lo cual se creó un modelo numérico con comportamiento elástico lineal en el software *ETABS V.20.0.1* [17], el cual utiliza el método de los elementos finitos para resolver el sistema representado en la ecuación (3). Se desarrollaron 3 modelos diferentes, el primer modelo representa el edificio sin aislamiento

Tabla 1: Análisis de cargas gravitacionales.

Uso	Carga muerta (kg/m^2)	Carga viva máxima (kg/m^2)	Carga viva instantánea (kg/m^2)
Azotea	310	100	70
Entrepiso	100	250	180

Tabla 2: Parámetros para la obtención del espectro de diseño sísmico.

Zona sísmica	C
Tipo de suelo	II
Factor de comportamiento sísmico Q	2
Factor de sobrerresistencia R_0	2
Factor de redundancia	1.25
Factor de importancia	1 (grupo B)
Factor de irregularidad	1

(base rígida o modelo de control), el segundo modelo incorpora aisladores de hule de alto amortiguamiento (HDR) como se muestra en la Figura 6 y el tercer modelo utiliza aisladores de hule con núcleo de plomo (LRB).

5.2. Propiedades de los aisladores

El peso total de la estructura es $W = 2467 t$ y, a partir de los resultados del análisis elástico del edificio el periodo fundamental es de $0.834 s$, correspondiente a un movimiento de traslación en la dirección X . El número de aisladores está dado por la cantidad de columnas presentes en el edificio, que en este caso son 25. Como resultado del diseño de los aisladores se obtuvieron las rigideces incluidas en la Tabla 3.

Tabla 3: Rigideces horizontales de los aisladores.

Rigidez (kg/cm)	Aislador HDR	Aislador LRB
K_{HT}, K_{ef}	15887	15887
$K_H, K_{elstica}$	635	4278
K_d	-	471

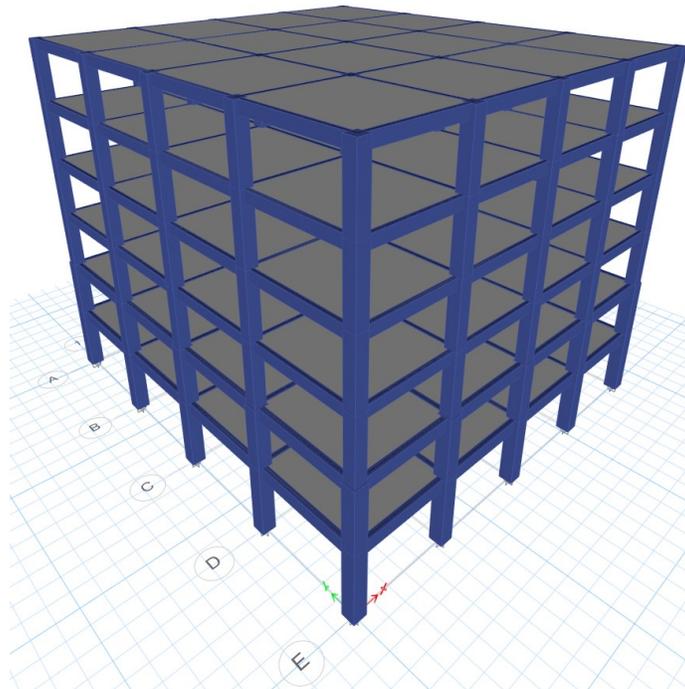


Figura 6: Representación conceptual del modelo numérico del edificio aislado desarrollado en ETABS.

6 Análisis de resultados

La reducción de la demanda de fuerza cortante en un edificio aislado se debe fundamentalmente al incremento de su periodo fundamental. Una recomendación utilizada comúnmente es que el periodo del edificio aislado sea de alrededor de tres veces el periodo del edificio con base rígida. En este caso el periodo del edificio con base rígida es de 0.834 s , por lo que se propone un periodo objetivo del sistema aislado de 2.5 s . En la Figura 6 se muestra el cambio en los espectros de diseño por sismo, tanto de los espectros transparentes o elásticos (*ET*), como de los espectros para el estado límite de prevención de colapso (*EPC*), modificados por amortiguamiento. Para el diseño del edificio con base rígida se utilizaron los espectros con un amortiguamiento del 5%, mientras que para el diseño de los sistemas de aislamiento se utilizaron espectros modificados por amortiguamiento, 10% para el sistema HDR y 25% para el sistema LRB.

Los aisladores se diseñaron con base en los criterios del American Society of Civil Engineers [13]. Una vez integrado el sistema de aislamiento se obtuvo un periodo de 2.47 s para el edificio con aisladores HDR y 2.53 s para el edificio con aisladores LRB. Al crecer el periodo en los edificios por la adición de los sistemas de aislamiento, las demandas sísmicas de pseudo-aceleración (*Sa*) de los espectros de diseño disminuyen, en comparación con el edificio en base rígida. Como se observa, el periodo de vibrar del edificio original se localiza en la meseta del espectro y pasa a la rama descendente del espectro al crecer el periodo en base aislada, como se ilustra en la Figura (7). También se observa que el efecto del sistema de aislamiento en el crecimiento de los periodos de vibrar es mayor en los primeros modos (Figura 8), ya que a partir del cuarto modo su influencia es menor.

La Figura 9 muestra que los desplazamientos absolutos de entrepiso se incrementan con el sistema de aislamiento, lo que justifica la recomendación de que exista un espacio suficiente entre la edificación y las estructuras colindantes. En este caso el edificio se desplaza lateralmente 52 cm y 38 cm con aislamiento HDR y LRB respectivamente. Sobre base rígida, el desplazamiento máximo es de 19 cm . En los edificios aislados el mayor desplazamiento ocurre al nivel del sistema de aislamiento, mientras que en el edificio sin aislar ocurre en el último nivel.

Los daños en edificaciones dependen más de las distorsiones angulares de entrepiso que de los desplazamientos absolutos (desplazamiento relativo entre la altura del entrepiso). La Figura (10) muestra las distorsiones de entrepiso de los edificios. El edificio sin aislamiento se encuentra en el límite de distorsiones permitidas por el reglamento, mientras que los edificios aislados presentan una clara disminución de las distorsiones en todos los entrepisos. En el nivel del aislamiento la distorsión es mayor, sin embargo, esta deformación lateral corresponde al aislador de base. Estos resultados se pueden relacionar con los estados límite de daño propuestos por *FEMA* [18], de acuerdo a los siguientes intervalos de distorsión

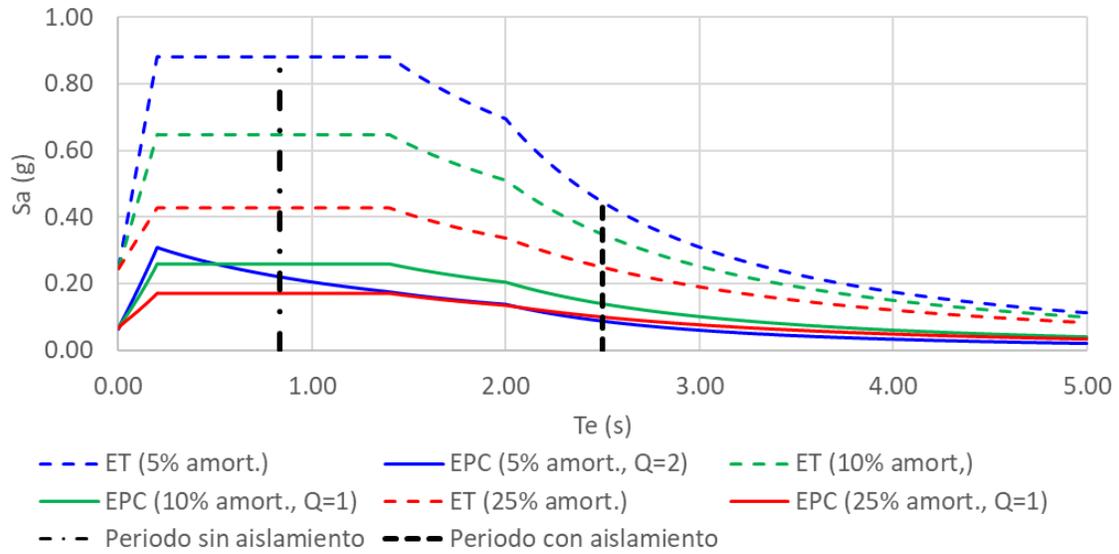


Figura 7: Espectros transparentes (*ET*) y de prevención de colapso (*EPC*) para el edificio sin y con aislamiento.

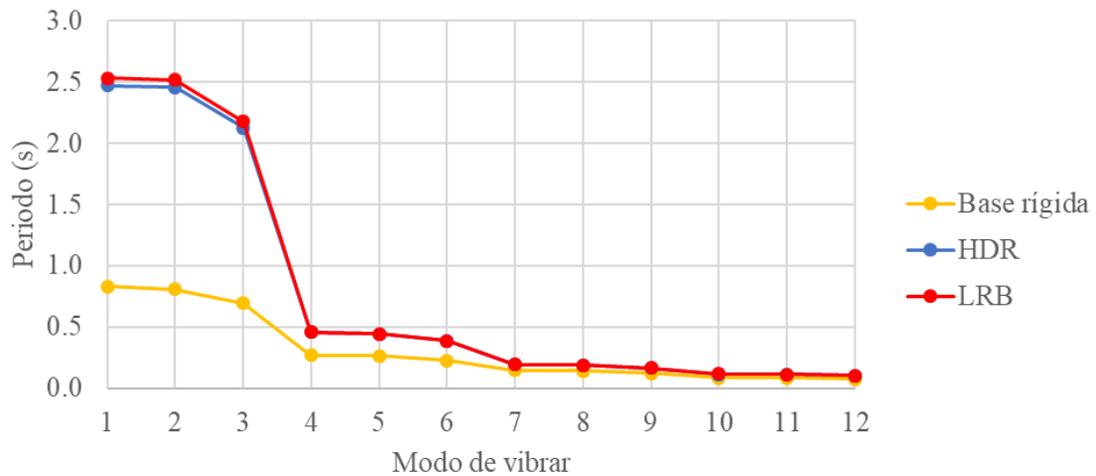


Figura 8: Periodos de vibrar de los tres edificios analizados.

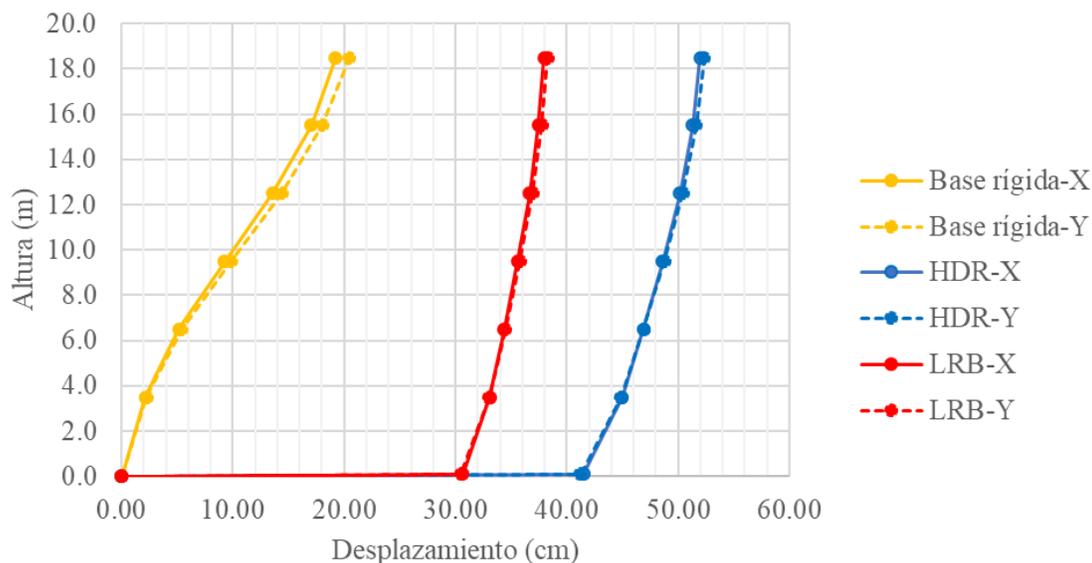


Figura 9: Desplazamientos de entrepiso de los tres edificios analizados.

de entrepiso: 0.0033 – 0.0053 corresponde a daño ligero, 0.0053 – 0.0133 daño moderado, 0.0133 – 0.0333 daño extenso y mayor a 0.0333 daño completo. En este caso el edificio sin aislamiento se ubica en una zona de daño extenso, mientras que los dos edificios que cuentan con aislamiento se ubican en una zona de daño moderado en los niveles inferiores y daño ligero en los niveles superiores.

Finalmente se obtuvo la demanda de fuerza cortante de entrepiso generada por el sismo. Se observa claramente una disminución de la demanda sísmica en las columnas, pasando de una fuerza cortante en la base de alrededor de $425 t$ en ambas direcciones para el edificio con base rígida, a $160 t$ en el edificio con aislamiento HDR y $112 t$ en el edificio con aislamiento LRB (Figura 11). Esto significa que, además de la disminución de las demandas de distorsión angular, los edificios aislados podrían diseñarse con columnas y trabes de menor sección transversal.

7 Conclusiones

Se analizó un edificio de concreto reforzado de seis niveles con base rígida y con dos sistemas de aislamiento: *HDR* y *LRB*. Con base en la respuesta de los edificios se determinó que el uso de sistemas de aislamiento en edificios con periodos cercanos a $1 s$, puede ser efectivo en zonas de sismicidad alta o moderada, como es el caso de la ciudad de Morelia.

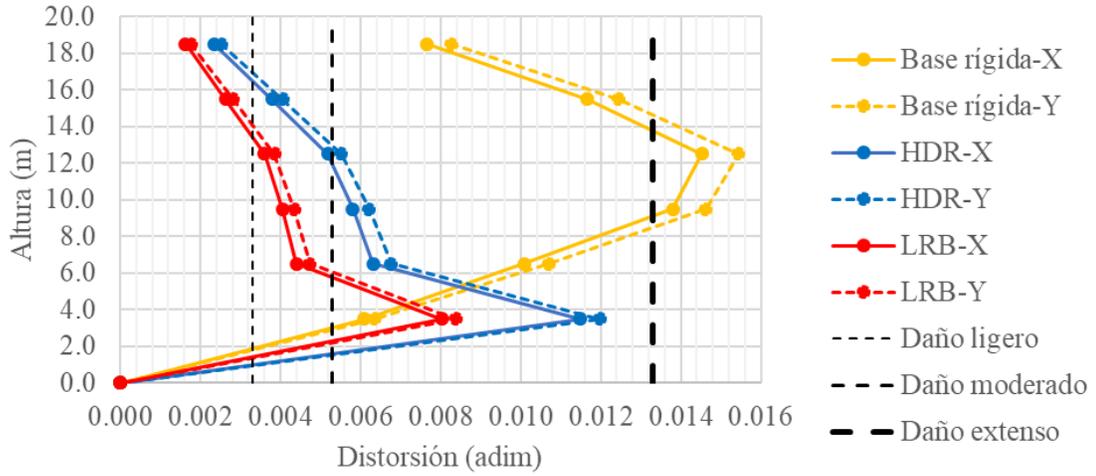


Figura 10: Distorsiones de entrepiso y estado de daño [18] para los tres edificios analizados.

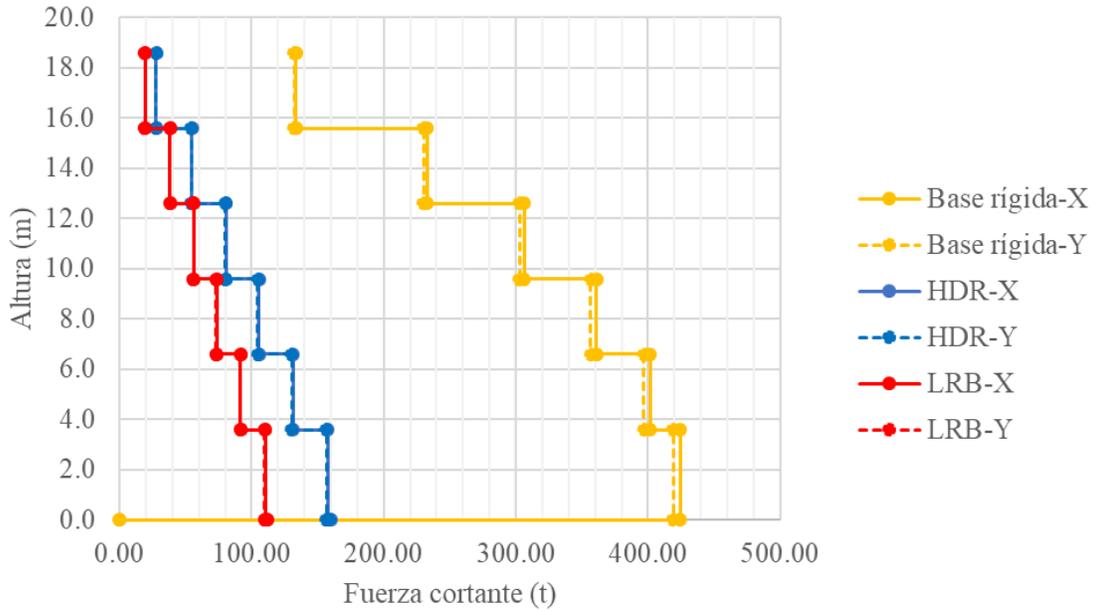


Figura 11: Fuerza cortante de entrepiso para los tres edificios analizados.

Al utilizar sistemas de aislamiento se modifican los espectros de diseño debido al cambio de amortiguamiento, y crece el periodo fundamental de los edificios. Ambas cosas reducen la demanda sísmica de edificios en base rígida. Las distorsiones de entrepiso, que son un indicador del estado de daño del edificio, se reducen considerablemente, causando que el edificio pasara de daño extenso cuando no tiene aislamiento a daño entre ligero y moderado cuando se implementó el aislamiento. El objetivo de este trabajo fue mostrar la efectividad del uso de sistemas de aislamiento para reducir los daños esperados en edificios. Por ello, sólo se muestra el análisis con un conjunto de parámetros de los aisladores que podría ser modificado para obtener una respuesta óptima de la estructura, que incluso condujera a menores daños esperados.

Finalmente se evaluó también la respuesta del edificio en términos de la demanda de fuerza cortante de entrepiso, en donde se identificó una disminución considerable de dicha fuerza en todos los entrepisos para los dos casos con aislamiento. En general, se muestran resultados muy favorables para las dos propuestas de aislamiento, sin embargo, resultó más eficiente el sistema LRB al tener las menores distorsiones de entrepiso y la menor demanda de fuerza cortante de entrepiso, sin un cambio apreciable en el periodo fundamental objetivo.

Esto se debe principalmente a dos razones: la primera es porque el amortiguamiento que provee el sistema de aislamiento LRB es mayor que cuando se utilizan aisladores HDR, por lo que la demanda sísmica disminuye aún más, adicional a los efectos causados por el cambio de periodo de la estructura. La segunda razón tiene que ver con la forma del ciclo histérico, ya que los aisladores LRB al tener un comportamiento bilineal tienen una mayor superficie en su ciclo de histéresis y por lo tanto permiten una mayor disipación de energía, lo que contribuye a controlar la respuesta del edificio en términos de deformaciones laterales y fuerza cortante. Adicionalmente, se muestra que al utilizar un sistema de aislamiento, las secciones transversales de trabes y columnas podrían disminuir.

Con base en lo anterior se concluye que los sistemas de aislamiento sísmico son una alternativa viable para proyectar y construir edificios con características similares a las que se presentan en este trabajo. Para otros casos, se puede seguir el procedimiento de diseño que aquí se propone. Ahora bien, con respecto a qué sistema de aislamiento sísmico conviene utilizar, los resultados muestran que la diferencia en el comportamiento de los edificios analizados fue mínima entre ambos tipos de aisladores *HDR* y *LRB*. Sin embargo, este último además de resultar más favorable en términos de distorsión angular y fuerza cortante, ofrece un mecanismo de disipación de energía más efectivo debido a su comportamiento bilineal, lo que lo hace un sistema más atractivo para reducir el daño en el edificio.

Referencias

- [1] Víctor Manuel Cruz Atienza, Shri Krishna Singh, and Mario Ordaz Schroeder. ¿ qué ocurrió el 19 de septiembre de 2017 en México? *Revista digital universitaria*, 18(7):1,

- 2017.
- [2] Ezgi Karasözen, Pınar Büyükakpınar, Deniz Ertuncay, Emre Havazlı, and Elif Oral. A call from early-career turkish scientists: seismic resilience is only feasible with “earthquake culture”. *Seismica*, 2(3), 2023.
 - [3] Saburoh Midorikawa. Strong ground motion of the 1923 kanto, japan earthquake. *Journal of Disaster Research*, 18(6):570–577, 2023.
 - [4] Francisco A. Galvis, Eduardo Miranda, Pablo Heresi, Héctor Dávalos, and Jorge Ruiz-García. Overview of collapsed buildings in mexico city after the 19 september 2017 (mw7. 1) earthquake. *Earthquake Spectra*, 36(2_suppl):83–109, 2020.
 - [5] F. Hernández, R. Astroza, F. Ochoa, and C. Pastén. Razones estructurales del colapso de edificios debido al terremoto de puebla-morelos (mw 7.1). In *de Conference: XII Congreso Chileno de Sismología e Ingeniería Sísmica, Chile*, 2019.
 - [6] R. Retamales, R. Boroschek, V. Contreras, R. Lagos, and M. Lafontaine. Aislación sísmica edificio ñuñoa capital. In *XI Congreso Chileno de Sismología e Ingeniería Sísmica*, 2015.
 - [7] Juan C. De la Llera, Carl Lüders, Patricio Leigh, and Henry Sady. Analysis, testing, and implementation of seismic isolation of buildings in chile. *Earthquake engineering & structural dynamics*, 33(5):543–574, 2004.
 - [8] Instalación de aisladores sísmicos en espacio condesa. <https://www.mageba-group.com/global/en/1023/LatinAmerica/Mexico/183052/EspacioCondesa-Building.htm>, 2020. (Accessed on October 20 2023).
 - [9] Arturo Tena-Colunga. State of the art and state of the practice for energy dissipation and seismic isolation of structures in mexico. In *Memorias, 10th World Conference on Seismic Isolation, Energy Dissipation and Active Vibration Control of Structures*, pages 101–129, 2007.
 - [10] Comisión Federal E. Manual de diseño de obras civiles, capítulo c.1.3: Diseño por sismo. Technical report, Comisión Federal de Electricidad.
 - [11] C. Christopoulos and A. Filiatrault. *Principles of passive supplemental damping and seismic*. IUSS Press, Pavia, Italy, 2006.
 - [12] Gilbert Strang. Computational science and engineering. *Optimization*, 551(563):571–586, 2007.
 - [13] American Society of Civil Engineers ASCE 7-16. Minimum design loads and associated criteria for buildings and other structures. 2017.

-
- [14] Aldair Estrada. Peligro sísmico y espectros de respuesta esperados en la ciudad de Morelia. Master's thesis, Maestría en Estructuras. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Marzo 2023.
 - [15] Programa de Diseño Sísmico PRODISIS V4.1, Comisión Federal de Electricidad (CFE), Ciudad de México. *Instituto de Investigaciones Eléctricas (IIE)*, 2015.
 - [16] Normas técnicas complementarias para diseño por sismo. *Gaceta oficial de la Ciudad de Mexico*, (220), 2017.
 - [17] Computers and Structures Inc., Berkeley, California. *ETABS Building Analysis and Design V1.0.1*, 2023.
 - [18] Federal Emergency Management Agency (FEMA). Hazus earthquake model technical manual, 2022.

Multicolor Parallel Fourth-Order Implicit Finite Difference for Solving the 2D Poisson Equation

Miguel Uh Zapata^{1,2}, Reymundo Itzá Balam^{*1,2}, and Heidy Escamilla Puc³

¹Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías, CONAHCYT, México

²Centro de Investigación en Matemáticas A. C., CIMAT Unidad Mérida, México

³Facultad de Matemáticas, Universidad Autónoma de Yucatán, México

Abstract

The Poisson equation is central in numerous physics and engineering applications, such as computational fluid dynamics and acoustic wave propagation, where efficient and accurate solutions are essential. This study focuses on the numerical solution of the 2D Poisson equation with Dirichlet boundary conditions using a fourth-order compact Implicit Finite Difference scheme. Finite difference methods, particularly high-order schemes, are advantageous for solving the Poisson equation due to their efficiency and suitability for structured grids. To address the computational demands of large-scale problems, we incorporate domain decomposition and the Multicolor Successive Over Relaxation method, facilitating parallel computation. Through numerical experiments, we demonstrate that our approach significantly enhances both accuracy and computational efficiency when compared to traditional second-order methods.

Keywords: Fourth-order finite difference; Domain decomposition; MPI; Poisson equation; Speedup; Elapsed time.

1 Introduction

The Poisson equation plays a crucial role in a wide range of physics and engineering applications, including computational fluid dynamics, acoustic wave propagation, and theoretical physics [3]. However, the implementation of simple, accurate, and efficient numerical solver remains fundamental to the successful resolution of these problems. In this work, we study the numerical solution of the 2D Poisson equation, which is formulated as follows:

$$u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega, \quad (1)$$

*reymundo.itza@cimat.mx

where $\Omega = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) \times (\mathbf{c}, \mathbf{d})$ and Dirichlet boundary conditions are applied on $\partial\Omega$. The right-hand side f is a known function defined over Ω . The study of large-scale physical phenomena, which often involves solving Poisson's equation (1), requires significant computational effort. As a result, these computations demand parallel computing systems with high-speed, massively parallel processors and large memory capacities to efficiently implement numerical approaches within this framework [4]. Domain decomposition is a popular strategy for dividing the overall problem into smaller sub-domain problems, where parallelization can be effectively applied [6]. This technique offers advantages such as simpler construction and greater speed-up. Many numerical methods have been developed to exploit these benefits. However, finite difference (FD) methods are preferred for solving the Poisson equation over rectangular domains, as they typically lead to a large, block-structured, and sparse system of equations [9]. In addition, for smooth problems, high-order FD methods can compute numerical solutions hundreds of times faster than second-order FD schemes for a fixed level of accuracy. Implicit finite difference (IFD) methods provide high-order schemes without the drawback of requiring large stencils; in fact, some of them are associated with compact schemes [7].

In this paper, we present a compact implicit finite difference (IFD) scheme for numerically solving the 2D Poisson problem, which is primarily based on the domain decomposition strategy. Furthermore, the Successive Over-Relaxation (SOR) method is chosen for its efficiency and simplicity as a solver. However, since SOR is inherently sequential, it cannot be directly parallelized. To address this limitation, a coloring method is employed, as suggested in previous works [1, 10, 5, 2].

This paper is organized as follows: Section 2 provides the high-order finite difference discretization. Section 3 is devoted to explaining the domain decomposition technique. In Section 4, we test our algorithm with several numerical examples and evaluate its speedup and efficiency. Finally, Section 5 presents the conclusions and suggestions for future work.

2 Fourth-order Implicit Finite Difference Scheme

The classic one-dimensional finite-difference approximation for a second derivative of a real-valued function ϕ at x with a small value $h > 0$ is given by

$$\delta^2\phi = \frac{\phi(x+h) - 2\phi(x) + \phi(x-h)}{h^2}. \quad (2)$$

Using Taylor series, it follows that the second-order derivative at x can be approximated by (2) with the following local truncation error

$$\phi_{xx} = \frac{\phi(x+h) - 2\phi(x) + \phi(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}h^2\phi_{xxxx} - \frac{1}{360}h^4\phi_{xxxxx} + h.o.t. \quad (3)$$

Note that the accuracy of centered finite difference approximation (3) can be fourth-order re-arranging the terms as follows

$$\phi_{xx} + bh^2 (\phi_{xx})_{xx} = \frac{\phi(x+h) - 2\phi(x) + \phi(x-h)}{h^2} + O(h^4), \quad (4)$$

where $b = 1/12$. Furthermore, it can be shown that the second-order derivative operator $(\cdot)_{xx}$ on the left-hand side can be replaced by a finite difference operator δ^2 without compromising the overall order of accuracy [7], as follows

$$(1 + bh^2\delta^2) \phi_{xx} = \delta^2\phi + O(h^4). \quad (5)$$

This formulation is called *implicit* because approximations to the second-order derivative appear in both sides of equation (5). Finally, we remark that the application of the implicit operator for a general real-valued function u (in particular $u = \phi_{xx}$) is given by

$$\mathfrak{D}u = (1 + bh^2\delta^2) u = bu(x+h) + (1 - 2b)u(x) + bu(x-h). \quad (6)$$

2.1 Two-dimensional scheme

In this section, we present the numerical scheme for solving the 2D Poisson problem. The computational domain, Ω , is divided using a uniform mesh with N sub-divisions along the x - and y -axes, where the grid points are defined as follows:

$$x_i = \mathbf{a} + h_x i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, N_x, \quad (7)$$

$$y_j = \mathbf{c} + h_y j, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N_y, \quad (8)$$

where $h_x = (\mathbf{b} - \mathbf{a})/N_x$ and $h_y = (\mathbf{d} - \mathbf{c})/N_y$. To maintain a simple explanation, we assume that the computational domain is a square, so $N = N_x = N_y$ and $h = h_x = h_y$. We use the following notation: $u_{i,j} = u(x_i, y_j)$ and $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$ where (x_i, y_j) represents the ij -th grid point.

Let us consider the finite difference operators

$$\mathfrak{D}_x = 1 + b\delta_x^2, \quad \text{and} \quad \mathfrak{D}_y = 1 + b\delta_y^2. \quad (9)$$

The subscripts at \mathfrak{D} are not derivatives, they only indicate the dependence of the x and y direction respectively. Applying simultaneously these operators at equation (1), it yields

$$\mathfrak{D}_y \mathfrak{D}_x (u_{xx})_{ij} + \mathfrak{D}_y \mathfrak{D}_x (u_{yy})_{ij} = \mathfrak{D}_x \mathfrak{D}_y f_{ij}, \quad (10)$$

Next, we use formula (5) to the second derivatives in x and y to get

$$\mathfrak{D}_y \left(\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \right) + \mathfrak{D}_x \left(\frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} \right) = \mathfrak{D}_x \mathfrak{D}_y f_{ij} + O(h^4) \quad (11)$$

Thus the two-dimensional *fourth-order implicit finite difference scheme* (IFD) results from applying (6) in 11. The following theorem states the final numerical discretization for 2D Poisson problem using the IFD method.

Theorem 2.1. *Let us assume that the solution u has sufficient regularity and the grid size h is positive. The full discretization of the problem (1) is given by the fourth-order scheme*

$$2b(U_{i-1,j+1} + U_{i+1,j+1} + U_{i+1,j-1} + U_{i-1,j-1}) + (1 - 4b)(U_{i,j-1} + U_{i,j+1} + U_{i-1,j} + U_{i+1,j}) + (-4 + 8b)U_{i,j} = F_{i,j}, \quad (12)$$

where

$$F_{i,j} = h^2 [(1 - 4b)f_{i,j} + b(f_{i,j-1} + f_{i,j+1} + f_{i-1,j} + f_{i+1,j})], \quad (13)$$

and $U_{i,j}$ is an approximation of $u_{i,j}$.

More details about the proof of the Theorem 2.1 can be found in [7]. Additionally, if we set $b = 0$ in (12) the resulting scheme becomes the classical second-order method. This parameter b allows us directly compare both numerical schemes by setting it either 0 or 1/12. Furthermore scheme (12) is compact scheme because its stencil requires only the surrounding nine points. The stencil of the classical second-order and the fourth-order implicit finite-difference schemes are illustrated in Figure 1.

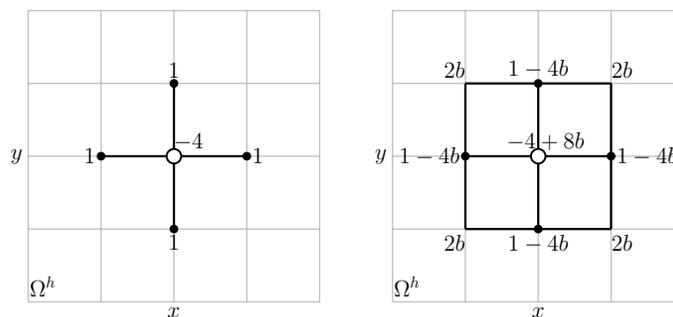


Figure 1: Second- and fourth-order finite-difference stencil for the two-dimensional Poisson equation. The numbers correspond to the weights next to unknown variables.

2.2 Linear system and solvers

The discretization given in (12) and (13) results in large linear system $\mathbf{A}\mathbf{U} = \mathbf{F}$ as N becomes larger. Therefore, to efficiently obtain the solution $U_{i,j}$, this system should be solved using an appropriate high-performance numerical solver. It is not difficult to demonstrate that \mathbf{A} is a diagonally dominant matrix, thus a wide range of iterative linear solvers are available in this case.

Due to their robustness, efficiency and ease of implementation, we consider the classical stationary methods: the Jacobi method, the Gauss-Seidel (GS) method, and the Successive Over-Relaxation (SOR) method [8]. The Jacobi method is a well-known iterative approach that is straightforward to implement and parallelize. However, its slow convergence rate

makes it unsuitable for practical, large-scale applications. The GS and SOR methods offer more efficient solvers, with SOR converging faster than GS when an appropriate relaxation factor is chosen. The main challenge with the SOR method is that, in its original form, it cannot be easily parallelized due to its inherently sequential nature. Thus, alternative approaches must be considered for parallel implementation. In this work, we utilize the Multicolor SOR method due to its simplicity in parallelization and its minimal modifications compared to the Jacobi method.

We begin by considering the Jacobi method. While its convergence is slow, it provides the advantages of high execution speed and straightforward implementation, particularly when it comes to vectorization and parallelization. Let the k -th equation of the resulting linear system

$$\sum_{l=1}^{N^2} a_{kl}\phi_l = \ell_k, \quad (14)$$

then, an iteration of the Jacobi method is given by

$$\phi_k^{(n+1)} = \frac{1}{a_{kk}} \left(\ell_k - \sum_{l=1, l \neq k}^{N^2} a_{kl}\phi_l^{(n)} \right), \quad (15)$$

where the $(n+1)$ values are from the current iteration, and (n) values are from the previous iteration. Here the vectors ϕ and ℓ are constructed using a natural indexation of matrices \mathbf{U} and \mathbf{F} , respectively. The iteration process will be stopped once a convergence tolerance ε is achieved. Note that the Jacobi method can be easily implemented in parallel since all updated values depend solely on the previous iteration (n) . The convergence rate of the Jacobi method can be improved by employing the SOR method. In these iterative solvers, each component at the new iteration depends on some previously computed components within the same iteration. The SOR method is expressed as:

$$\phi_k^{(n+1)} = \phi_k^{(n)} + \omega \left(\frac{1}{a_{kk}} \left(\ell_k - \sum_{l=1}^{k-1} a_{kl}\phi_l^{(n+1)} - \sum_{l=k+1}^{N^2} a_{kl}\phi_l^{(n)} - a_{kk}\phi_k^{(n)} \right) \right), \quad (16)$$

where $0 < \omega < 2$ is the relaxation factor. The Gauss-Seidel method is recovered by setting $\omega = 1$ in the SOR method. It is important to note that, unlike the Jacobi method, the computations in the SOR method are inherently sequential, meaning the updates cannot be performed simultaneously.

To apply this solver to our compact fourth-order implicit scheme, we can rewrite (16) but now using a residual vector as follows:

$$U_{i,j}^{(n+1)} = U_{i,j}^{(n)} + \omega \left(\frac{1}{-4 + 8b} R_{i,j}^{(n)} \right), \quad (17)$$

where

$$\begin{aligned} R_{i,j}^{(n)} &= F_{i,j} - 2b(U_{i-1,j+1} + U_{i+1,j+1} + U_{i+1,j-1} + U_{i-1,j-1})^{(n)} \\ &\quad - (1 - 4b)(U_{i,j-1} + U_{i,j+1} + U_{i-1,j} + U_{i+1,j})^{(n)} - (-4 + 8b)U_{i,j}^{(n)}. \end{aligned} \quad (18)$$

The stopping criterion for (17) with a given tolerance ε is that the residual (18) is sufficiently small, i.e., $|R_{i,j}| < \varepsilon$, for all indices i, j . In addition to the tolerance, we include a maximum number of iterations as a complementary stopping criterion.

2.3 Multicolor SOR method

Several algorithms exist for parallelizing the SOR method on structured grids, and due to their simplicity, coloring methods have often been a popular choice [1]. However, there are limited works on the implementation and performance of these techniques when applied to compact schemes using a nine-point stencil [10, 5, 2].

The classical two-color SOR method (RBSOR) divides the domain into a chessboard pattern of red and black points. In this configuration, each unknown is updated based on values of the opposite color, allowing the points of the same color to be computed in parallel. However, this algorithm is only applicable to stencils like the classical second-order finite-difference scheme, see Figure 2. Each iteration is carried out in two steps. Updating the first set of points (red) relies solely on previous black values. In contrast, the remaining points (black) require only the already updated red points for their calculations. The challenge with a nine-point stencil lies in the use of corner points, which complicates the direct application of the RBSOR method.

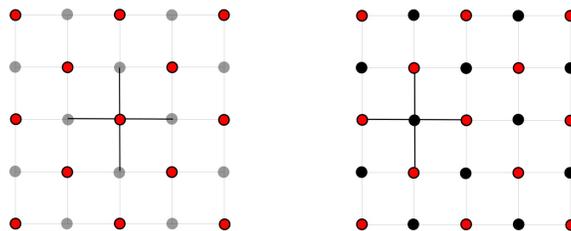


Figure 2: Second-order finite-difference stencil for the two-dimensional Poisson equation using RBSOR iterative method.

In the case of our nine-point compact scheme, four colors are sufficient to decouple the grid points. Thus, the four-color SOR (MCSOR) method is employed. For simplicity, we assign the colors red (R), black (B), green (G), and orange (O). For each grid point of a given color, the nearest grid points along both coordinate directions must be assigned different colors to ensure independence during the update process, as shown in Figure 3. This figure also illustrates the four sub-steps employed to update all grid points for each iteration (n).

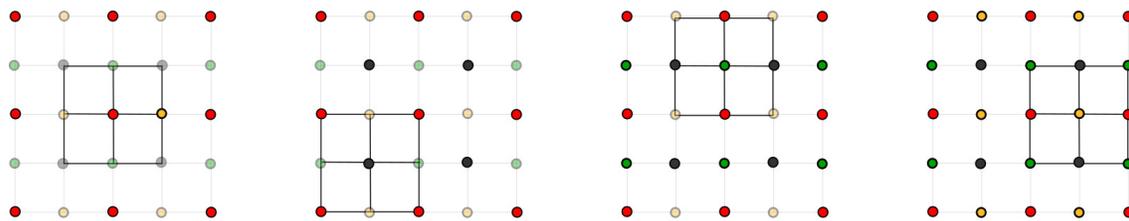


Figure 3: Fourth-order finite-difference stencil for the two-dimensional Poisson equation. The numbers correspond to the weights next to unknown variables.

It is important to remark that we use the same variable to store all color values at each iteration. This approach allows the grid points of each color to be updated using the most recently computed values from the other colors. For example, when updating a reference grid point colored green, the neighboring grid points colored red and black are taken from the current iteration, while the orange values are taken from the previous iteration, as presented below:

$$(U_{i,j}^G)^{(n+1)} = (U_{i,j}^G)^{(n)} + \omega \left(\frac{1}{-4 + 8b} R_{i,j} \right), \quad (19)$$

where

$$\begin{aligned} R_{i,j} = & F_{i,j} - 2b(U_{i-1,j+1}^O + U_{i+1,j+1}^O + U_{i+1,j-1}^O + U_{i-1,j-1}^O)^{(n)} \\ & - (1 - 4b)(U_{i,j-1}^R + U_{i,j+1}^R + U_{i-1,j}^B + U_{i+1,j}^B)^{(n+1)} - (-4 + 8b)(U_{i,j}^G)^{(n)}, \end{aligned} \quad (20)$$

and the superscripts in U indicate the corresponding color. This configuration is expected to lead to faster convergence than the original SOR method, as demonstrated by the numerical results presented in the next section. However, further theoretical investigations are needed in this direction to better understand and confirm the potential improvements in convergence. Finally, we emphasize that, similar to the Jacobi method, the MCSOR method is well-suited to straightforward parallel implementation because all new values only depends on calculations previous sub-steps.

3 Parallelization using domain decomposition

Instead of computing the solution over the entire domain Ω , we subdivide the domain into smaller parts and compute the solution over each subdomain Ω_k , allowing for parallel computation. Let us define a domain decomposition for the problem using M strips, as follows

$$\Omega = \cup_{k=1}^M \Omega_k,$$

where Ω_k is an vertical strip. Then we find a solution u of the 2D Poisson problem such $u = \sum_{k=1}^M u_k$, where u_k is the solution of the problem over the strip Ω_k . In practice, we

solve the discrete problem (12) over the computational domain Ω^h with step size h , which is decomposed into M sub-grids Ω_k^h , see Figure 4(a).

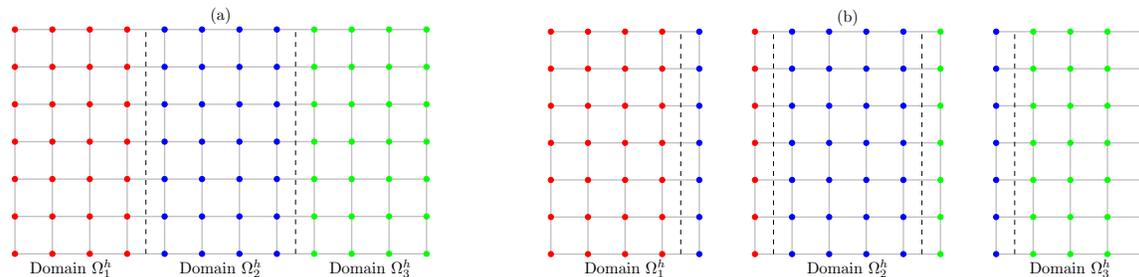


Figure 4: Sketch of rectangular domain decomposition into smaller sub-domains with overlapping grid points.

The compact IFD numerical scheme using the MCSOR method, combined with the domain decomposition method, requires that each element of the sub-domain obtains information from its nine neighbors in each iteration. Consequently, the boundary (or artificial boundary) approximations of each sub-domain need information from the elements in the columns of neighboring sub-domains. This presents a challenge when parallelizing the scheme, as the processes computing the solution in one part of the domain do not have direct access to the memory of other processes. To address this issue, we propose creating sub-domains that overlap, ensuring they include the adjacent neighboring elements, see Figure 4(b). The adjacent information is exchanged using the Message Passing Interface (MPI), meaning that neighboring processors communicate with each other. These communications occur after each sub-step of the MCSOR solver within each sub-domain.

4 Numerical examples

In this section, we perform several tests to analyze the capabilities of the numerical scheme and describe the differences between standard finite difference methods and the implicit finite difference method within the parallel paradigm.

The error is analyzed by comparing the exact and numerical solutions, and it is measured using the l^∞ - and l^2 -norms at all grid points. The order of accuracy is calculated as follows:

$$\text{Order} := \frac{\log(\|\cdot\|_{N_1}/\|\cdot\|_{N_2})}{\log(N_2/N_1)}, \quad (21)$$

where $\|\cdot\|_{N_1}$ and $\|\cdot\|_{N_2}$ represent the error norms with a resolution relative to grid resolution N_1 and N_2 respectively.

Next, we conduct several examples to test the robustness of the proposed methodology. We present different examples using iterative solvers such as Jacobi, SOR, RBSOR, and

MCSOR methods to find the solutions of the resulting linear system. However, only Jacobi, RBSOR, and MCSOR are suitable for parallelization.

4.1 Example 1

In this example, we show that the numerical method can recover the numerical solution with great accuracy. We consider the 2D Poisson problem over the unit square $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ given by

$$u_{xx} + u_{yy} = -8\pi^2 \sin(2\pi x) \sin(2\pi y), \quad (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1), \quad (22)$$

$$u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega. \quad (23)$$

Notice that we impose the Dirichlet boundary conditions at the boundary $\partial\Omega$. The exact solution of problem (22) and (23) is given by the function

$$u(x, y) = \sin(2\pi x) \sin(2\pi y), \quad (x, y) \in \Omega.$$

Figure 5 shows the numerical and the absolute error for example using a grid resolution with $N = 80$. Notice that even when we use a coarse grid resolution, we obtain an accurate numerical solution. Table 1 shows the convergence analysis for Example 1. As expected, the numerical order for the FD and IFD methods corresponds to second- and fourth-order accuracy, respectively. This confirms that the proposed IFD scheme provides an accurate approximation.

Table 1: Norm errors and accuracy orders for different values of N in FD and IFD methods.

N	FD ($b = 0$)				IFD ($b = 1/2$)			
	l^∞ -norm	Order	l^2 -norm	Order	l^∞ -norm	Order	l^2 -norm	Order
20	8.27E-03	—	4.13E-02	—	2.69E-05	—	1.34E-05	—
40	2.06E-03	2.01	1.03E-02	2.01	1.69E-06	3.99	8.44E-07	3.99
80	5.14E-04	2.00	2.57E-03	2.00	1.06E-07	4.00	5.28E-08	4.00
160	1.29E-04	2.00	6.43E-04	2.00	6.64E-09	4.00	3.30E-09	4.00

The SOR iterative solver has a parameter $0 < \omega < 2$ that can be tuned to improve performance. Figure 6 illustrates how the number of iterations depends on the parameter ω for a given tolerance of $\varepsilon = 10^{-9}$ and a grid resolution of $N = 320$. Figure 6(a) compares the FD and IFD methods, showing that the implicit method not only provides better accuracy but also achieves greater efficiency in terms of the number of iterations required for convergence when using the SOR method. Figure 6(b) shows that both multicolor methods exhibit similar behavior to the standard SOR method. Here, MCSOR requires fewer iterations for convergence compared to RBSOR.

Figure 7(a) shows residual errors for the SOR and Multicolor SOR methods with $\omega = 1.8$ and a grid resolution of $N = 320$. As expected, in all methods, the residual errors decrease

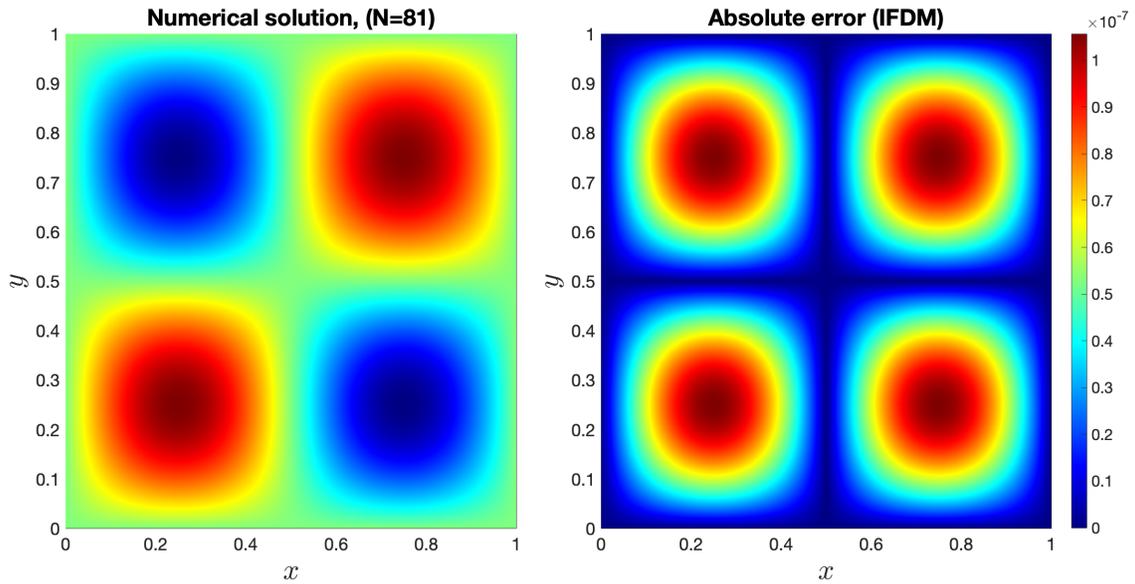


Figure 5: The numerical solution and the absolute error for Example 1 using a grid resolution with $N = 80$.

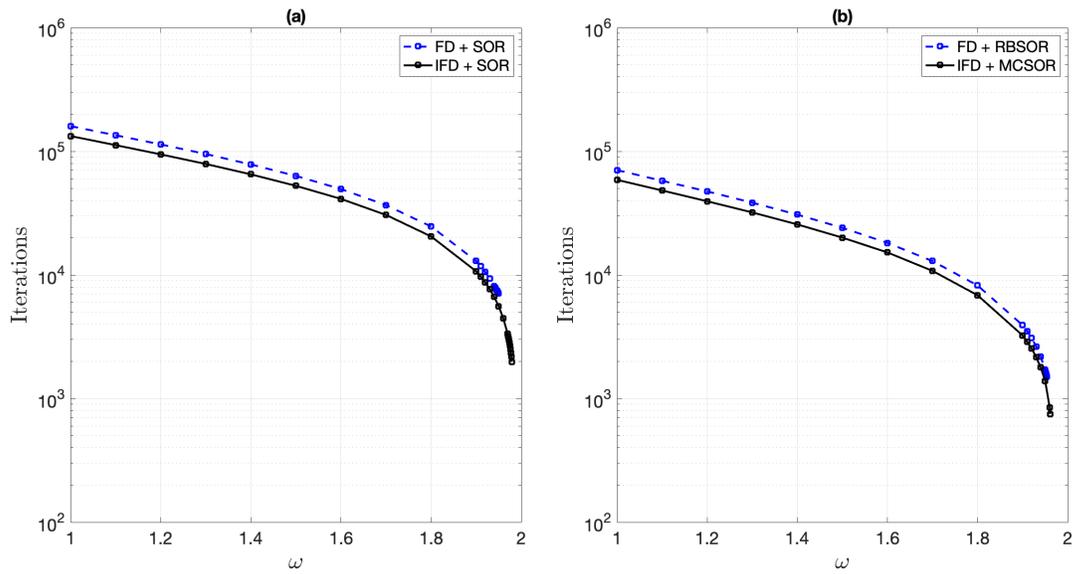


Figure 6: Iterations for the corresponding ω were performed to achieve a tolerance of $\varepsilon = 10^{-9}$ in Example 1, utilizing a grid resolution of $N = 320$.

as the number of iterations increases, with the IFD methods offering better efficiency in terms of requiring fewer iterations. On the other hand, Figure 7(b) shows the l^∞ -norm of the absolute error between the numerical and exact solutions of the problem. Note that the IFD method not only improves efficiency but also offers greater accuracy, a distinct advantage inherent to this implicit technique. Although the results are not shown here, the Jacobi iteration solver demonstrates similar behavior between the IFD and FD methods.

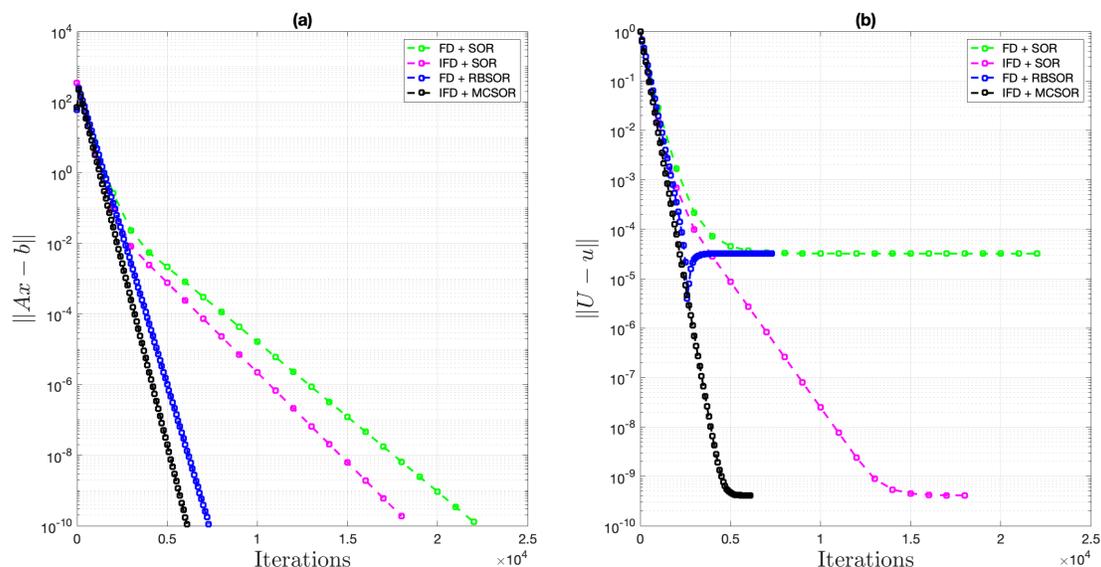


Figure 7: The l^∞ -norm of residual errors ($\|Ax - b\|$) for the iterative solvers and their corresponding l^∞ -norm of absolute errors ($\|U - u\|$) are shown for $\omega = 1.8$, with a tolerance of $\varepsilon = 10^{-9}$ and a grid resolution of $N = 320$ for Example 1.

4.2 Example 2

In the second example, we test our numerical scheme on a more challenging problem characterized by oscillatory behavior, a key aspect often encountered in computational fluid dynamics simulations. Here, we demonstrate not only the performance of the parallel implementation of the implicit finite-difference method but also a comparison with the standard central finite-difference method (the five-point stencil scheme).

Let us consider the 2D Poisson problem over the unit square Ω defined by

$$u_{xx} + u_{yy} = -800\pi^2 \sin(20\pi x) \sin(20\pi y), \quad (x, y) \in (0, 1) \times (0, 1) \quad (24)$$

$$u(x, y) = 0, \quad (x, y) \in \partial\Omega. \quad (25)$$

Notice that we impose the Dirichlet boundary conditions at the boundary $\partial\Omega$. Here, the

exact solution of problem (24) and (25) is given by the function

$$u(x, y) = \sin(20\pi x) \sin(20\pi y), \quad (x, y) \in \Omega.$$

Problems with large oscillations (high frequency) bring challenges for numerical approximation, as capturing these oscillations accurately requires a large number of grid points. While this may seem like a minor issue for static problems, it becomes significant when solving large Poisson problems as part of evolutionary simulations, such as those involving the Navier-Stokes equations over long time periods.

Figure 8 shows the exact solution and the absolute errors obtained from both the standard and implicit finite difference schemes using a resolution of $N = 80$. As expected, the implicit method yields an accurate approximation. It is also noteworthy that, in both cases, the errors are distributed throughout the entire domain.

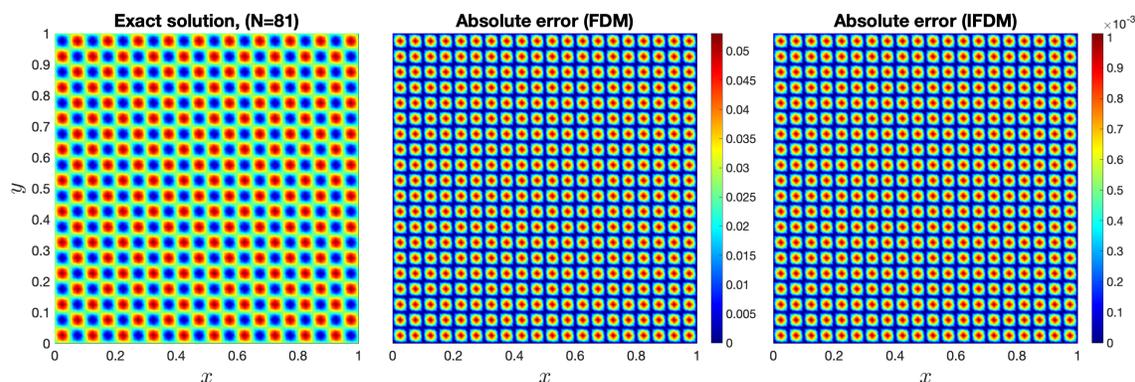


Figure 8: The exact solution and absolute errors for the FD and IFD schemes corresponding to Example 2, using a grid resolution of $N = 80$.

Table 2 shows the norm errors and simulation time in seconds of the proposed FD methods using a stopping criterion of $\varepsilon = 10^{-9}$ and $\omega = 1.85$. Similar to the previous example, IFD shows higher accuracy as the standard FD method. For instance, to obtain an approximation with an absolute error less than 10^{-3} , results shows that the FD method requires $N = 640$ grid points, whereas the IFD method only needs $N = 160$ grid points. Furthermore, the computational time required to achieve this absolute error using the Jacobi method with the FD method (47.24 seconds) is approximately 337 times longer than with the IFD method (0.14 seconds). On the other hand, using more advanced and faster solvers such as RBSOR and MCSOR provides the same precision, but both are significantly faster than the Jacobi method. For instance, MCSOR is approximately 30 times faster than Jacobi when using $N = 640$.

Table 2: Absolute errors and performance for various resolutions of N for the FD and IFD methods using a single processor.

N	FD ($b = 0$)				IFD ($b = 1/2$)			
	l^∞ -norm	l^2 -norm	Jacobi(s)	RBSOR(s)	l^∞ -norm	l^2 -norm	Jacobi(s)	MCSOR(s)
40	2.34E-01	1.17E-01	0.000125	0.00424	1.30E-02	6.52E-03	0.000131	0.00539
80	5.30E-02	2.65E-02	0.01	0.0173	1.01E-03	5.07E-04	0.00878	0.0224
160	1.30E-02	6.48E-03	0.17	0.0683	6.54E-05	3.27E-05	0.14	0.0956
320	3.22E-03	1.61E-03	2.81	0.28	4.13E-06	2.06E-06	2.42	0.39
640	8.04E-04	4.02E-04	47.24	1.19	2.58E-07	1.29E-07	39.91	1.58

4.2.1 Parallel performance

To analyze the performance of the proposed method, the resolution of the numerical problem will be set into $N = 641$ and $N = 1281$ (more than 400 thousand and 1.6 million of grid points, respectively). The stopping criterion is set to $\varepsilon = 10^{-9}$. This stringent tolerance is selected to ensure that both FD and IFD methods reach their theoretical absolute error.

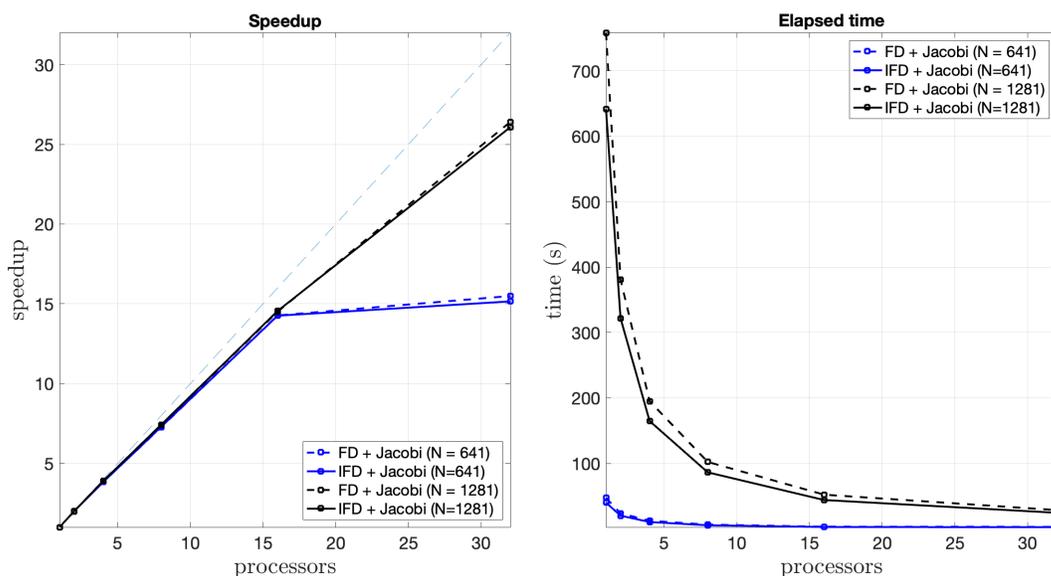


Figure 9: The speedup and elapsed time for the FD and IFD schemes at different resolutions are analyzed using various numbers of processors and the Jacobi solver, with a tolerance of $\varepsilon = 10^{-9}$.

Figure 9 shows the speedup and elapsed time for solving the 2D Poisson problem using different schemes and resolutions with the Jacobi solver. Note that the speedup and elapsed time are nearly identical in both cases; however, the IFD method yields more accurate results. In this case, the maximum error for the FD method is approximately 10^{-4} , while for the same setting with the IFD method, the maximum error is close to 10^{-6} . Finally, it

is worth noting that the computational time with 32 processors is 24.6 seconds, which is 26 times faster than the sequential solver (641.46 seconds) when using the IFD with $N = 1281$. This represents a reduction of nearly 96% in the original runtime.

Figure 10 illustrates the performance for the RBSOR and MCSOR solvers. It is important to note that RBSOR and MCSOR are quite different solvers, as they consider the stencil structure for both FD and IFD techniques. Therefore, they recover the solution by accessing the global matrix in different ways and perform different arithmetic operations. However, both methods achieve the same accuracy as described for the Jacobi solver. In terms of parallel performance, the MCSOR method achieves a computational time of 2.37 seconds with 32 processors, making it 16 times faster than the sequential solver (37.99 seconds) for the IFD with $N = 1281$. This represents a nearly 94% reduction compared to MCSOR on a single processor. Moreover, this parallel execution is 270 times faster than the sequential Jacobi solver, yielding a 99.6% reduction in runtime.

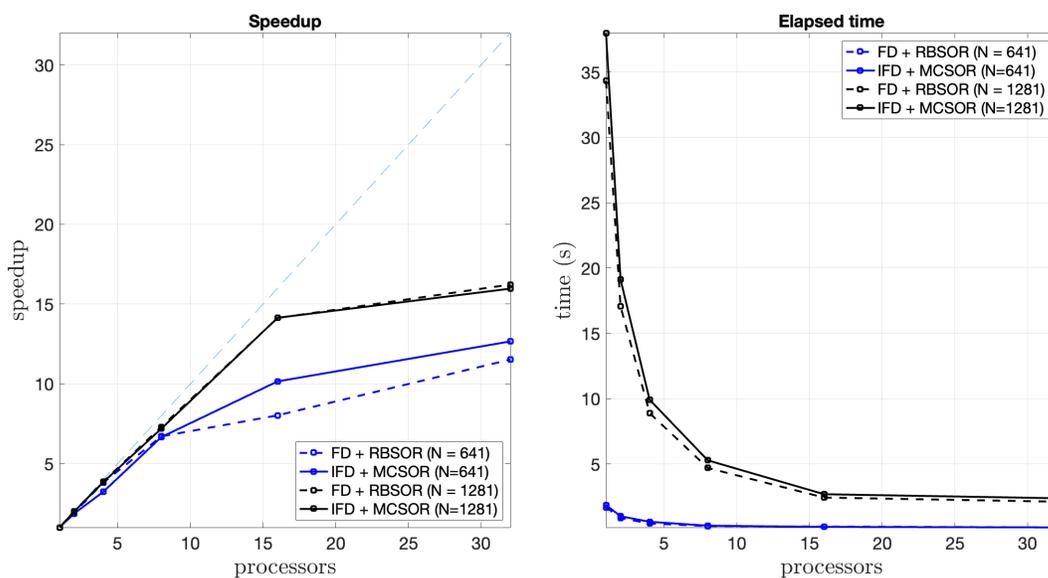


Figure 10: The speedup and elapsed time for the FD and IFD schemes at different resolutions are evaluated using various numbers of processors and the RBSOR and MCSOR solvers, with a tolerance of $\varepsilon = 10^{-9}$.

5 Conclusions

We present an implicit finite-difference scheme combined with domain decomposition and the Multicolor SOR method for solving the 2D Poisson equation. This scheme provides a fourth-order approximation, consistent with its sequential counterpart. Our experiments

demonstrate that, under the same conditions, the IFD method produces more accurate solutions than the standard finite-difference method. Moreover, the speedup and elapsed time are comparable for both numerical schemes, making the IFD method an attractive option since it delivers better results with the same computational effort. In future work, we propose developing a sixth-order implicit finite-difference scheme to solve 2D and 3D Poisson problems.

Acknowledgments

This work was partially supported by the Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) under the program *Investigadores e Investigadoras por México*, and CONAHCYT México under Ciencia de Frontera Project Number: CF-2023-I-2639. We also acknowledge to the supercomputer facilities provided by CIMAT, specifically Cluster Merida TOLOK, for their invaluable support in conducting our research.

References

- [1] L. Adams and J. Ortega. A multi-color sor method for parallel computation. In *Proc. 1982 Internat. Conf. on Parallel Processing*, pages 53–58, Bellaire, MI, 1982.
- [2] D. Deka and S. Sen. Compact higher order discretization of 3d generalized convection diffusion equation with variable coefficients in nonuniform grids. *Applied Mathematics and Computation*, 413:126652, 2022.
- [3] H. Diersch and C. Fletcher. *Computational Techniques for Fluid Dynamics. Vol. I: Fundamental and General Techniques. Vol. II: Specific Techniques for Different Flow Categories*. Springer-Verlag, 1988.
- [4] C. C. Douglas, G. Haase, and U. Langer. *A tutorial on elliptic PDE solvers and their parallelization*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.
- [5] Z. H. Li, L. Chen, and W. Q. Tao. A parallel scalable multigrid method and hoc scheme for anisotropy elliptic problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 71(4):346–358, 2017.
- [6] A. Toselli and O. Widlund. *Domain decomposition methods—algorithms and theory*. Springer-Verlag, Berlin, 2005.
- [7] M. Uh Zapata and R. Itzá Balam. High-order implicit finite difference schemes for the two-dimensional poisson equation. *Applied Mathematics and Computation*, 309:222–244, 2017.

-
- [8] M. Uh Zapata, D. Pham Van Bang, and K. D. Nguyen. Parallel sor methods with a parabolic-diffusion acceleration technique for solving an unstructured-grid poisson equation on 3d arbitrary geometries. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 30(5):370–385, 2016.
- [9] D. M. Young. *Iterative solution of large linear systems*. Academic Press, New York, 1971.
- [10] J. Zhang, L. Ge, and J. Kouatchou. A two colorable fourth-order compact difference scheme and parallel iterative solution of the 3d convection diffusion equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 54(1-3):65–80, 2000.

Un Modelo Matemático de la Formación de la Orina

F. I. Domínguez Pérez¹ and J. López López^{*1}

¹División Académica de Ciencias Básicas, UJAT

Resumen

En este trabajo, se estudia un modelo matemático de la hemodinámica renal involucrada en la producción de la orina. El modelo se compone de tres submodelos: uno para la etapa de filtración glomerular, que da entrada a la sangre que se procesa en el riñón, otro para el proceso de autorregulación renal que define el flujo de sangre que debe entrar al riñón, para mantener su correcto funcionamiento, aún frente a variaciones de la presión sanguínea y el último para las etapas de reabsorción y secreción, correspondiendo la primera al proceso mediante el cual los riñones recuperan sustancias útiles del filtrado glomerular y las devuelven a la sangre y en la segunda los riñones eliminan sustancias no deseadas desde la sangre hacia los capilares peritubulares.

Palabras clave: Hemodinámica renal, filtrado glomerular, secreción renal, reabsorción renal.

1 Introducción

Junto al cerebro y el corazón, el riñón es un órgano fundamental en el sistema cardiovascular, ya que recibe aproximadamente el 20% de la sangre que el corazón expulsa hacia el organismo, en cada latido. Entre sus principales funciones se encuentran: regular la presión arterial, eliminar los desechos tóxicos a través de la orina y producir la hormona que estimula la formación de los glóbulos rojos [5].

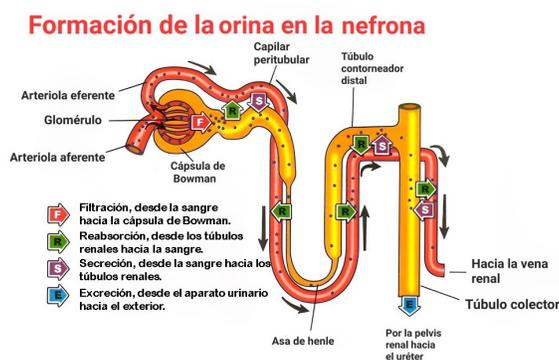
Cuando no hay un funcionamiento adecuado del riñón, pueden presentarse enfermedades renales de diversas formas, desde infecciones y cálculos renales hasta enfermedades crónicas como la nefropatía diabética y la enfermedad renal crónica (ERC). Estas generan un problema de salud cada vez más importante a nivel global, afectando no solo la vida de los pacientes, sino también generando una carga significativa para los sistemas de salud debido a su alta prevalencia y costos asociados.

*jorge.lopez@ujat.mx

Por otra parte, los modelos hemodinámicos renales proporcionan una comprensión profunda sobre los patrones y comportamientos del flujo sanguíneo renal, lo que puede permitir detectar anomalías y disfunciones que de otra manera podrían pasar desapercibidas. Asimismo contribuyen a tener una perspectiva global e integral del problema, lo que coadyuva a avanzar en el diagnóstico, tratamiento y prevención de las afecciones renales.

Ahora bien, el torrente sanguíneo arrastra una gran cantidad de sustancias, muchas de las cuales entran al riñón y alguna proporción de estas pasa a formar parte de la orina. Sin embargo, la mayoría de los modelos nefrológicos consideran solo la concentración de una sustancia [6]. Estos modelos se han utilizado con fines terapéuticos o tratamiento de enfermedades vía control (cantidad de medicamentos)[2], y también con fines de diseño de riñones artificiales. En general el modelado del proceso de hemodiálisis se basa en ecuaciones cinético-hemodinámicas [3] o ecuaciones cinético-matemáticas [1].

Figura 1: Esquema de las etapas de la formación de la orina en la nefrona [6].



En este contexto, el propósito de este trabajo es analizar la hemodinámica renal modelando matemáticamente los procesos básicos de la producción de la orina, siguiendo las ideas expuestas en [6]. Para esto se asumen varias cosas: que el tejido renal es homogéneo, que ciertos parámetros fisiológicos son constantes y que la anatomía del riñón es simple. Además, se supone que el flujo sanguíneo es uniforme, se simplifican las interacciones químicas y se asume la ausencia de patologías. Con estos supuestos, el modelo resultante se puede resolver al menos numéricamente. En su mayoría este trabajo es expositivo, aunque se complementa con el desarrollo de los detalles que justifican las afirmaciones, y con los resultados de las simulaciones propias respectivas que no están en el artículo. El modelo que se considera está formado por: i) una EDO de primer orden con dos condiciones de frontera (el valor de una de ellas es también desconocido y debe determinarse como parte del modelo), ii) una EDP con retardo, con una condición de frontera y su respectiva condición inicial, y iii) 8 EDOs adicionales con sus respectivas condiciones iniciales.

2 Formulación del modelo

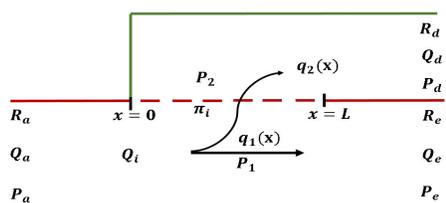
La principal unidad operativa del riñón se llama nefrona, de la que hay aproximadamente un millón en cada riñón y cada nefrona es capaz de formar orina por sí misma. Es en esta donde se llevan a cabo las 3 etapas para la producción de la orina (ver figura 1). En la primera etapa, la etapa de filtración glomerular, el glomérulo filtra el agua y otras sustancias del torrente sanguíneo.

Cada nefrona tiene un glomérulo cuya función es un filtrado inicial de la sangre. El glomérulo consta de una red de capilares envuelto por la cápsula de Bowman (una estructura en forma de copa). La presión arterial de la sangre en los capilares empuja el agua y los solutos pequeños hacia la cápsula de Bowman, a través de una membrana de filtrado. Con esto inicia el proceso de formación de la orina [6]. Aproximadamente el 20% de la sangre que entra a la nefrona, se filtra hacia la cápsula de Bowman. Tanto las plaquetas como las proteínas plasmáticas y células sanguíneas son demasiado grandes para pasar por el filtro, por lo que éstas continúan por la arteriola eferente, formando el 80% del líquido que no se filtró [5].

2.1. Modelo para la filtración glomerular.

Para modelar matemáticamente la dinámica del filtrado glomerular [6], suponemos que los capilares glomerulares se distribuyen en una región en forma de un tubo unidimensional con flujo q_1 y que la cápsula de Bowman que lo rodea también tienen la misma forma y flujo q_2 (ver figura 2). Suponemos que el filtrado glomerular se da a través de una pared capilar de longitud L (línea punteada de la figura 2). Dado que el flujo a través de los capilares glomerulares es proporcional a la diferencia de presión a través de la pared capilar, el modelo para la filtración glomerular es

Figura 2: Modelo tubular del glomérulo [6].



$$\begin{cases} \frac{dq_1}{dx} = K_f(P_2 - P_1 + \pi_i \frac{Q_i}{q_1}), & 0 < x < L, \\ q_1(0) = Q_i, \\ q_1(L) = Q_e, \end{cases} \quad (1)$$

junto con las relaciones

$$P_a - R_a Q_i = P_1, \quad (2)$$

$$P_1 - P_e = R_e Q_e, \quad (3)$$

$$P_2 - P_d = R_d Q_d, \quad (4)$$

donde

- P_1 y P_2 son las presiones hidrostáticas del fluido en los tubos 1 y 2 respectivamente (como se muestra en la figura 2) y satisfacen las relaciones (2),(3), (4), donde P_i representa las presiones, R_i las resistencias y Q_i los flujos. Aquí, $i = a, e, d$ y a hace referencia a la arteriola aferente, e hace referencia a la arteriola eferente y d hace referencia al túbulo descendente. Q_i denota el flujo de entrada, es decir el flujo en $x = 0$. Q_i y Q_e son ambas desconocidas y deben determinarse. Esto hace que este problema esté bien definido y sea no trivial.
- K_f es la tasa de filtración capilar.
- π_i es la presión osmótica tanto de las proteínas suspendidas como de otras sustancias de alto peso molecular y depende de q_1 .

2.1.1. Solución del modelo para la filtración glomerular.

2.1.2. Solución analítica implícita

Con unas simplificaciones algebraicas, la EDO en (1) se puede resolver por el método de separación de variables. La solución está definida implícitamente por

$$\frac{1}{K_f(P_2 - P_1)} \left[q_1 - \frac{K_f Q_i \pi_i}{K_f(P_2 - P_1)} \ln(K_f(P_2 - P_1)q_1 + K_f Q_i \pi_i) \right] = x + C. \quad (5)$$

Usando la condición inicial $q_1(0) = Q_i$ y final $q_1(L) = Q_e$, determinamos la constante de integración C . Usando propiedades de logaritmo y haciendo algunas manipulaciones algebraicas (ver [4]), se llega a la siguiente expresión

$$\frac{Q_e}{Q_i} + \alpha \ln \left[\frac{\frac{Q_e}{Q_i} - \alpha}{1 - \alpha} \right] = 1 - \frac{K_f \pi_i L}{\alpha Q_i}, \quad (6)$$

donde $\alpha = \frac{\pi_i}{(P_1 - P_2)}$.

En resumen, hasta ahora tenemos la solución implícita para q_1 dada por (5) y la de Q_e, Q_i dada por (6) y además tenemos la relación $Q_i = Q_e + Q_d$. Así que si damos un valor para

Q_d podemos resolver (6) para Q_e y obtener Q_i o de igual forma resolver (6) para Q_i y obtener Q_e . También obtenemos P_a , vía la relación (2).

Aún con esto no podemos obtener una formula explícita para q_1 pero sí podemos resolver numéricamente, como lo explicaremos en la siguiente sección.

2.1.3. Solución numérica

Los valores típicos de los parámetros son $P_1 = 60, P_2 = 18, P_a = 100, P_e = 18, P_d = 14-18, \pi_i = 25mmHg$, con $Q_i = 650, Q_d = Q_i - Q_e = 125ml/min$. Estos valores corresponden a una dinámica estacionaria del riñón, donde los parámetros permanecen constantes. La solución del modelo con estos parámetros se ilustra en la figura 3 (izquierda) para q_1 obtenida cuando $Q_d = 125$, que se obtuvo dándole valor a Q_d , a las resistencias R_a, R_e y a las presiones P_e, P_d y π_i especificadas y fijadas en niveles típicos. Con esto, resolvemos (6) para Q_i (utilizando un simple algoritmo de bisección) y Q_e , a partir de ello, las presiones correspondientes P_1, P_2, P_a se determinan con ayuda de (2)-(4). Con los valores de Q_e y Q_i podemos darle solución la ecuación (5) por medio de bisección para encontrar a q_1 o bien aplicar un método como runge Kutta para problemas de valor inicial.

Si quisiéramos estudiar el funcionamiento del riñón en estado no estacionario, por ejemplo, en una situación donde variara la presión de la arteria aferente P_a entonces esto haría variar todos los demás parámetros. Los flujos y las presiones varían en función de la presión arterial. Para entender algo de esta variación, se dan valores para Q_d y para cada una de ellas se hace el procedimiento explicado anteriormente, obteniendo a Q_i, Q_e, P_1, P_2, P_a correspondientes a cada Q_d y se grafican (como se muestran en la figura 3 derecha) la tasa de flujo sanguíneo renal Q_i y la tasa de flujo de filtración glomerular Q_e como funciones de la presión arterial P_a . Observamos que tanto Q_i como Q_d crecen linealmente con respecto a P_a . Sin embargo, en la realidad (según los datos mostrados en la figura 4), la tasa de filtración glomerular permanece relativamente constante incluso cuando la presión arterial varía entre 75 y 160 mmHg, lo que sugiere que existe cierta autorregulación en la tasa de filtración y por tanto en las tasas de flujo Q_i . Este fenómeno lo estudiaremos en la siguiente sección.

2.2. Autorregulación

En la segunda etapa, que es la reabsorción, algunos nutrientes y agua del líquido filtrado que fluye por el túbulo renal se reincorporan al torrente sanguíneo (capilares peritubulares). Lo que retorna son grandes cantidades de: aminoácidos, vitaminas, agua, glucosa, parte de la urea, los iones $K^+, Na^+, NaHCO_3$ (bicarbonato), Cl^-, HPO_4 (fosfato).

Por lo que se concluyó en la sección anterior, es claro que el riñón necesita regular la tasa de filtración glomerular. La función principal del túbulo ascendente grueso es bombear iones de sodio Na^+ fuera de éste hacia el espacio intersticial, siendo casi totalmente impermeable al agua. Si la velocidad de flujo es lenta a través del túbulo, habrá una mayor reabsorción y

Figura 3: Gráfica de la Curva $q_1(x)$ correspondiente a $Q_d = 125$. Para este caso, $Q_i = 652,1$ y $Q_e = 527,1$, $x \in [0, L]$ (izquierda). Gráficas de $\frac{Q_i}{5}$ y Q_d contra P_a (derecha).

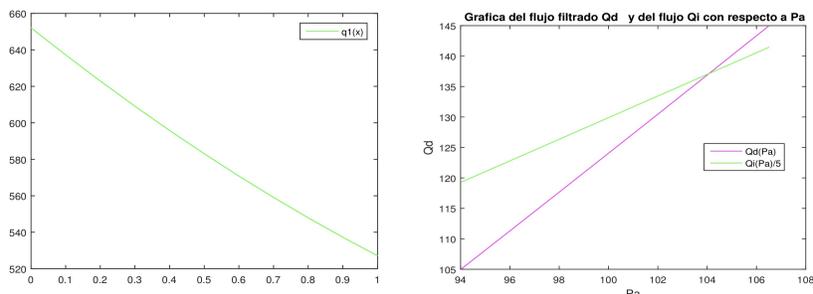
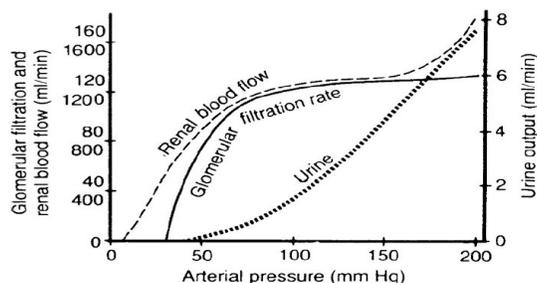


Figura 4: Gráficas reales del flujo sanguíneo renal con autorregulación y de la tasa de filtración glomerular [6].



una concentración de Cl^- baja al final del túbulo que esta conectado con la mácula densa y el glomérulo. Por otro lado, cuando la velocidad de flujo es alta, hay una baja reabsorción y se produce una mayor concentración de Na^+ y Cl^- en la mácula densa. Esto se resume en el cuadro 1.

Tabla 1: Relación del flujo, la reabsorción y la concentración de cloro en el túbulo ascendente.

Flujo del túbulo ascendente	Reabsorción	$C(L, \tau)$
Caso 1: lento	Alta	Baja
Caso 2: rápido	Baja	Alta

Para normalizar el flujo del túbulo ascendente ya sea porque este sea lento o rápido, las células de la mácula densa responden a la disminución de la concentración de $NaCl$ (a través de un mecanismo no completamente conocido) liberando un vasodilatador que aumenta o

Tabla 2: Acciones que se deben tomar en las arteriolas para aumentar o disminuir el flujo.

Flujo q_1	Filtración	P_1	R_a	R_e
Caso 1: Aumentar	Aumentar	Aumentar	Disminuir	Disminuir
Caso 2: Disminuir	Disminuir	Disminuir	Disminuir	Aumentar

disminuye la resistencia de las arteriolas aferentes. En el caso 1, es decir cuando el flujo es lento, las células yuxtaglomerulares liberan renina, una enzima que promueve la formación de angiotensina II, la cual constriñe las arteriolas eferentes. Esto resulta en un aumento simultáneo del flujo de filtrado a través del glomérulo. En cambio, en el caso 2, cuando el flujo es rápido, la concentración de NaCl en la mácula densa aumenta, se disminuye la resistencia de la arteriola aferente y aumenta la resistencia de la arteriola eferente, lo que disminuye la tasa de filtración y el flujo a lo largo del túbulo. Esto se resume en el cuadro 2.

2.2.1. Modelado de la concentración de Cl^- para la autorregulación

Un modelo sencillo de las oscilaciones tubuloglomerulares [6], se centra en el papel de la concentración de cloruro en la rama ascendente gruesa. Para modelar matemáticamente esta dinámica, suponemos que la rama ascendente gruesa tiene forma de un tubo unidimensional de longitud L y radio constante, a través del cual el Cl^- es transportado y al mismo tiempo bombeado a través de las paredes del túbulo (es el Na^+ el que se elimina activamente, pero como el Cl^- sigue pasivamente, el efecto es el mismo).

Supondremos que la concentración de cloruro es uniforme en cada sección transversal. Si usamos una coordenada y para describir cada sección transversal del túbulo y dado los supuestos que hemos mencionado, denotamos por $C(y, \tau)$ la concentración de Cl^- en la sección transversal asociada con y en el momento τ y modelamos esa concentración con la siguiente ecuación diferencial parcial de transporte

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \phi(C(L, \tau - \bar{\tau})) \frac{\partial C}{\partial y} = -R(C), \quad y \in (0, L), \tau \in (0, \infty), C(0, \tau) = C_0 \equiv cte, \quad (7)$$

donde $R(C)$ representa la tasa de eliminación de Cl^- del tubo mediante el bombeo de Na^+ y $\phi \frac{\partial C}{\partial y}$ la tasa de cloro que pasa a través de cada sección transversal. Consideramos las expresiones siguientes

$$R(C) = r_c C, \quad \phi(C) = F_o + F_\delta \tanh(\alpha(\bar{C} - C)),$$

con α constante, F_δ una diferencia de presiones, F_o el flujo de referencia de una persona normal y \bar{C} la concentración de Cl^- para la cual ϕ tiene un punto de inflexión, constante.

A esta ecuación de transporte le asociamos la condición inicial $C(0, \tau) = C_0 \equiv cte$.

2.2.2. Análisis cualitativo de la solución del modelo para la autorregulación

Introducimos el cambio de variable $y = Lx, \tau = \frac{L}{F_0}t, C(y, \tau) = C_0c(x, t)$ y definimos $\bar{\tau} = \frac{L}{F_0}\bar{t}, K_1 = \frac{F_s}{F_0}, K_2 = C_0, \Omega = (0, 1) \times (0, T)$ donde \bar{t} es el periodo de retardo adimensional. De donde obtenemos la ecuación diferencial parcial retardada

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} + F(c(1, t - \bar{t})) \frac{\partial c}{\partial x} &= -\mu c, \forall (x, t) \in \Omega, \\ c(x, 0) &= 0, \quad \forall x \in (0, 1] \\ c(0, t) &= 1, \quad \forall t \in [0, T]. \end{aligned} \quad (8)$$

con $F(c) = 1 + K_1 \tanh(K_2(\bar{c} - c))$ y $\mu = r_c \frac{L}{F_0}$. Para iniciar el estudio de la ecuación (8), vamos a obtener las soluciones en estado estacionario. Es decir le daremos solución a la ecuación

$$F(s(1)) \frac{ds}{dx} = -\mu s, \quad (9)$$

con $s(0) = 1$. Claramente la solución de esta ecuación es

$$s(x) = e^{-kx}, \quad (10)$$

con $k = \frac{\mu}{F(s(1))}$. El valor de k debe ser determinado y tomando en cuenta que $s(1) = e^{-k}$, el valor de k debe satisfacer

$$kF(e^{-k}) = \mu. \quad (11)$$

Dado que F es una función decreciente de c ya que $F'(c) < 0$, así existe un único valor de k para el cual se cumple (11) y por tanto, una solución única en estado estacionario.

Al analizar la estabilidad de $s(x)$ se presentan oscilaciones en la concentración de Cl^- de la mácula densa, y por tanto en las demás variables como la tasa de flujo y la presión glomerular, estas podrían ser explicadas por un mecanismo similar al de una bifurcación de Hopf. En este mecanismo, existen algunos parámetros que dentro de un rango producen soluciones oscilatorias que convergen al estado estacionario, mientras que para otro rango de valores de los parámetros resultan soluciones que oscilan sin acercarse, alrededor del estado estacionario. Podemos encontrar más sobre esto en [4].

2.2.3. Solución numérica de la concentración de Cl^- a través del tiempo

Se realizó un programa para aproximar numéricamente la solución del problema (8). Para ello realizamos los siguientes pasos:

1. Discretizamos en $(M + 1) \times (N + 1)$ nodos ($(M \times N)$ rectángulos) a Ω . Para esto, consideramos una partición x_j en x , donde

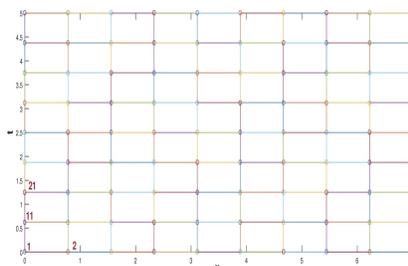
$$\begin{aligned} hx &= 1/M, \\ x_j &= j * hx, \quad j = 0, 1, \dots, M, \\ x_0 &= 0, x_M = 1, \end{aligned}$$

y una partición t_i en t , donde

$$\begin{aligned} ht &= T/N, \\ t_i &= i * ht, \quad i = 0, 1, \dots, N, \\ t_0 &= 0, t_N = T. \end{aligned}$$

De lo anterior se tiene como resultado una malla con nodos o vértices $n_{ij} = (x_j, t_i)$. Para cálculos posteriores necesitamos enumerar cada nodo $n_{ij} = (x_j, t_i)$ y esta numeración se hará recorriendo las rectas horizontales de abajo hacia arriba y los nodos en cada recta horizontal recorridos de izquierda a derecha, numerando cada intersección entre ellas. Al nodo n_{ij} se le asocia el numero de nodo $k = (i - 1)M + j, j = 1, \dots, N$ e $i = 1, \dots, N$. Esto se muestra en la figura 5.

Figura 5: Resultado del paso 1: Malla computacional.



2. Construimos una aproximación c_{ij} para $c(x_j, t_i)$, es decir, para la solución en cada nodo $n_{ij} = (x_j, t_i)$. De acuerdo a las condiciones de frontera para toda t conocemos el valor de la función en $x = 0$, entonces simplemente le asignamos a los nodos con esta característica el valor 1. Para todos los demás nodos se aproxima la solución mediante el método de Euler explícito, que se resume en el siguiente esquema

$$c_{ij} = \left(1 - \frac{s}{\rho}\right) c_{(i-1)j} + \frac{s}{\rho} c_{(i-1)(j-1)}, \quad (12)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$ y $j = 1, 2, \dots, M$ con $\rho = (1/Nx)/(T/Nt)$ y $s = F(c(1, t_i - \bar{t})) = F(c_{(i-itg)M})$, donde itg es la parte entera de $\frac{\bar{t}}{Nt}$.

3. Finalmente construimos una función \bar{c} continua por pedazos, a partir de los valores de aproximación obtenidos en lo anterior. Esta función será la aproximación numérica de la solución para la ecuación (8) y graficándola obtenemos gráficas dadas en las figuras 6 y 7.

Dado el dominio $\Omega = (0, 1) \times (0, T)$, con $F(z) = 1 + k_1 \tanh(k_2(\bar{c} - z))$ y los valores típicos de los parámetros $K_1 = 1, K_2 = 10, \bar{c} = e^{(-0,91)}, \mu = 0,5$, con las ideas anteriores, hicimos un programa para encontrar las soluciones numéricas de la concentración de Cl^- a través del tiempo y con los datos siguientes para el caso estable $\gamma = 0,1223, \bar{t} = 0,2, \frac{k}{\mu} = 1$, (ver figura 6) y para el caso inestable $\gamma = 3,1787, \bar{t} = 0,2, \frac{k}{\mu} = 1$ (ver figura 7). La concentración de Cl^- se representa en unidades adimensionales y la concentración al inicio de la rama ascendente gruesa es 1. La variable t también es adimensional; para obtener segundos se debe multiplicar por 15.5 .

Una vez obtenida la concentración de Cl^- como función global es decir la superficie obtenida para cada x y t , para nuestros propósitos la gráfica de la concentración de Cl^- que nos interesa es cuando estamos al final del asa ascendente de Henle, es decir en este caso para $x = 1$, gráficas a la derecha en las figuras 6 y 7. Esta será la concentración (en $x = 1$) que vamos a monitorear para saber cuál debe ser la cantidad de flujo en la filtración glomerular Q_d (la variable Q_d es adimensional, para hacerla dimensional se debe multiplicar por $F_o = 10$). Si se da que en cierto tiempo $c(1, t) \gg s(1)$, se tendría que acelerar el flujo, al contrario, si en cierto tiempo se da que $c(1, t) \ll s(1)$ se tendría que disminuir el flujo. Esto se hace modificando las resistencias de las arteriolas aferente y eferente, lo cual tienen como efecto la modificación respectiva de la presión, del flujo y de la concentración. A este efecto le llamamos autorregulación.

Con las acciones que se hacen para los dos casos anteriores, se puede regular el flujo para que a medida que la presión aumente, el flujo Q_d se vuelva casi constante, como se muestra en la figura 8, que se obtuvo fijando la resistencia R_a y variando la resistencia R_e . Con esto observamos que aunque la presión aumente, Q_d se puede mantener acotada variando adecuadamente las resistencias.

Figura 6: Caso estable de las soluciones oscilatorias del modelo de la concentración de Cl^- para la autorregulación, a la izquierda la superficie de la concentración de Cl^- para cada x y t , a la derecha la curva que pertenece a $x = 1$ para toda t .

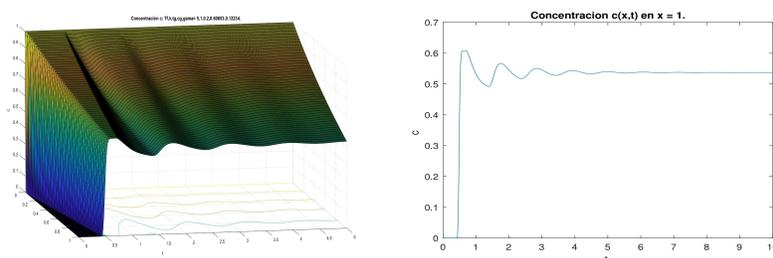


Figura 7: Caso inestable de las soluciones oscilatorias del modelo de la concentración de Cl^- para la autorregulación, a la izquierda la superficie de la concentración de Cl^- para cada x y t , a la derecha la curva que pertenece a $x = 1$ para toda t .

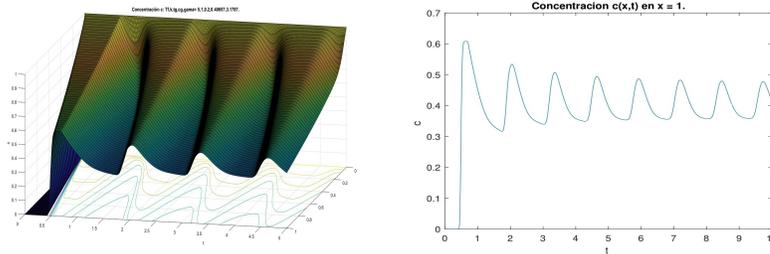
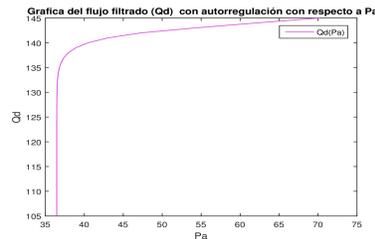


Figura 8: Grafica del flujo Q_d con el proceso de autorregulación.



2.3. Modelado de la reabsorción y la secreción

En esta etapa de secreción, se eliminan sustancias no deseadas hacia los túbulos renales, funcionando como un proceso inverso a la secreción. En la nefrona, el fluido dentro del asa de Henle fluye en direcciones opuestas en los segmentos ascendente y descendente, lo que permite la creación de un gradiente osmótico en la médula renal. Este gradiente facilita la reabsorción de agua. Además, debido a la conexión en el extremo inferior del asa de Henle, el flujo y la concentración de solutos que salen del tubo descendente deben coincidir con los que entran en el tubo ascendente.

Siguiendo a [6], consideramos que el asa de Henle consta de cuatro compartimentos: tres túbulos (rama descendente, rama ascendente y conducto colector (túbulo amarillo en la figura 1)) y un compartimento único para el intersticio y los capilares peritubulares (túbulo rojo en la figura 1). El lecho intersticial/capilar se trata como un tubo unidimensional que recibe líquido de los otros tres túbulos y lo entrega a las vénulas. En cada uno de estos compartimentos, seguimos el flujo de agua y la concentración de solutos.

Suponemos que el flujo en cada uno de los tubos sigue un patrón simple (positivo en la dirección x positiva), con tasas de flujo q_d, q_a, q_c, q_s para los túbulos descendentes, ascendentes,

colectores y los túbulos intersticiales, respectivamente. De igual manera, la concentración de soluto en cada uno de estos se representa como c_d, c_a, c_c, c_s . Se considera que los túbulos son unidimensionales, con el flujo del filtrado glomerular ingresando a la rama descendente en $x = 0$, pasando de la rama descendente a la ascendente en $x = L$, dirigiéndose desde la rama ascendente al conducto colector en $x = 0$, y finalmente saliendo del conducto colector en $x = L$. Se asume que el intersticio/compartimento capilar se vacía en $x = 0$, y que no hay flujo en $x = L$. Para una mejor comprensión de lo anterior, ver figura 9.

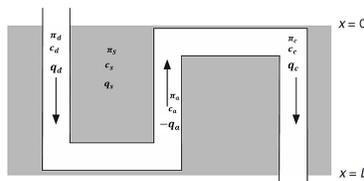


Figura 9: Diagrama del modelo de cuatro compartimentos del asa de Henle [6].

El sistema de ecuaciones que resultan en nuestra modelación de la actividad en el asa de Henle es:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{k_d} \frac{dq_d}{dx} = P_s - \pi_s - P_d + 2RT(c_d - c_s), \quad q_d(0) = Q_i - Q_e, \\ \frac{d(q_d c_d)}{dx} = h_d(c_s - c_d), \quad c_d(0) = c_d 0, \\ \frac{dq_a}{dx} = 0, \quad q_a(L) = -q_d(L), \\ \frac{d(q_a c_a)}{dx} = -p, \quad c_a(L) = c_d(L), \\ \frac{1}{k_c} \frac{dq_c}{dx} = P_s - \pi_s - P_c + 2RT(c_c - c_s), \quad q_c(0) = -q_a(0), \\ \frac{d(q_c c_c)}{dx} = h_c(c_s - c_c), \quad c_c(0) = c_a(0), \\ \frac{dq_s}{dx} = -\frac{d}{dx}(q_d + q_a + q_c), \quad q_s(0) = q_c(L) - q_d(0), \\ \frac{d(q_s c_s)}{dx} = -\frac{d}{dx}(q_d c_d + q_a c_a + q_c c_c), \quad c_s(0) = c_c(L) - c_d(0), \end{array} \right. \quad (13)$$

2.3.1. Solución del modelo para la reabsorción y secreción

Con fines de simplificar la descripción de la solución del modelo, haremos una adimensionalización al sistema de ecuaciones (13), normalizando los flujos y las concentraciones de solutos, con

$$x = Ly, Q_j = \frac{q_j}{q_d(0)}, C_j = \frac{c_j}{c_d(0)}, j = d, a, c, s$$

y los parámetros adimensionales $\rho_j = \frac{q_d(0)}{2LRT_c d(0)k_j}$, $\Delta P_j = \frac{P_j + \pi_s - P_s}{RT2c_d(0)}$, $H_j = \frac{Lh_j}{q_d(0)}$, $j = d, c$.

La versión adimensional de (13) es

$$\frac{dQ_d}{dy} = \frac{1}{\rho_d} [-\Delta P_d + (C_d - C_s)], \quad Q_d(0) = 1, \quad (14)$$

$$\frac{d(Q_d C_d)}{dy} = -H_d(C_d - C_s), \quad C_d(0) = 1, \quad (15)$$

$$\frac{dQ_a}{dy} = 0, \quad Q_a(0) = Q_a(L), \quad (16)$$

$$\frac{d(Q_a C_a)}{dy} = \frac{-pL}{q_a(0)c_d(0)}, \quad C_a(L) = C_d(L), \quad (17)$$

$$\frac{dQ_c}{dy} = \frac{\rho_c}{\rho_c} [-\Delta P_c + (C_c - C_s)], \quad Q_c(0) = -Q_a(0), \quad (18)$$

$$\frac{d(Q_c C_c)}{dy} = -H_c(C_c - C_s), \quad C_c(0) = C_a(0), \quad (19)$$

$$\frac{dQ_s}{dy} = -\frac{d}{dy}(Q_d + Q_a + Q_c), \quad Q_s(0) = Q_c(L) - Q_d(0), \quad (20)$$

$$\frac{d(Q_s C_s)}{dy} = -\frac{d}{dy}(Q_d C_d + Q_a C_a + Q_c C_c), \quad C_s(0) = C_c(L) - C_d(0). \quad (21)$$

La ecuaciones (14)- (21) tienen las siguientes soluciones implícitas, respectivamente

$$\rho_d(Q_d - 1) + \frac{1}{H_d}(Q_d C_d - 1) = -\Delta P_d y, \quad (22)$$

$$C_d(y) = F_1(Q_d, y) = \frac{1}{Q_d}(1 + \rho_d H_d(1 - Q_d) - \Delta P_d H_d y), \quad (23)$$

$$Q_a(y) = Q_a(0) = Q_a(L) = Q_a, \quad (24)$$

$$C_a(y) = \frac{\frac{-pL}{q_a(0)c_d(0)}y + Q_a(0)C_a(0)}{Q_a}, \quad (25)$$

$$\rho_c(Q_c - Q_c(0)) + \frac{1}{H_c}(Q_c C_c - Q_c(0)C_c(0)) = -\Delta P_c y, \quad (26)$$

$$C_c(y) = F_2(Q_c, y) = \frac{1}{Q_c}(Q_c(0)C_c(0) + \rho_c H_c(Q_c(0)C_c(0) - Q_c) - \Delta P_c H_c y), \quad (27)$$

$$Q_s(y) = -(Q_d + Q_a + Q_c)(y) + Q_c(L), \quad (28)$$

$$C_s(y) = F_3(Q_d, Q_a, Q_c, y) = \frac{-(Q_d C_d + Q_a C_a + Q_c C_c)(y) + Q_c(L)C_c(L)}{Q_s}. \quad (29)$$

La solución implícita del modelo de 8 ecuaciones (14)- (21) dice que si conocemos $Q_d(y)$, entonces C_d está determinada, $Q_a(y)$ está determinada si conocemos Q_a y $C_a(y)$, si conocemos Q_a , $Q_c(y)$, entonces C_c está determinada y finalmente si conocemos Q_d , Q_a , Q_c , entonces Q_s y C_s están determinadas. En resumen si Q_d y Q_c están determinadas, las seis ecuaciones diferenciales restantes (15), (16),(17),(19),(20) y (21) tienen solución y por lo tanto el sistema original de ocho ecuaciones estaría resuelto. Así que lo que hace falta es resolver el siguiente sistema de dos ecuaciones de primer orden en dos incógnitas.

$$\begin{cases} \rho_d \frac{dQ_d}{dy} = -\Delta P_d + C_d - C_s, \\ Q_d(0) = 1, \\ Q_d(1) = -Q_a(1) = -Q_a, \end{cases} \quad (30)$$

$$\begin{cases} \rho_c \frac{dQ_c}{dy} = -\Delta P_c + C_c - C_s, \\ Q_c(0) = -Q_a(0) = -Q_a, \end{cases} \quad (31)$$

donde C_c, C_s y C_d son funciones de Q_d y Q_c . Aunque hay tres condiciones iniciales para dos ecuaciones de primer orden, el número Q_a también es desconocido, por lo que este problema está bien planteado. Con esto observamos que la solución del modelo completo de 8 ecuaciones se reduce a resolver el modelo de 2×2 que en general es difícil de resolver tanto analítica como numéricamente.

En las siguientes secciones estudiaremos un poco del comportamiento de la solución de esta ecuación, considerando un caso particular o un caso límite que es cuando se considera ausencia de ADH en la formación de orina.

2.3.2. Solución del modelo en ausencia de ADH y de aldosterona

La hormona antidiurética (ADH) regula la permeabilidad al agua en los riñones, mientras que la aldosterona controla la permeabilidad al sodio. La falta de ADH, como en la diabetes insípida central, provoca la producción de grandes cantidades de orina diluida. La aldosterona, producida en la corteza suprarrenal, modula la cantidad de canales de sodio y la actividad de la ATPasa Na^+/K^+ , afectando la eliminación de sodio y potasio. Desórdenes como la enfermedad de Addison o el síndrome de Conn ilustran desequilibrios causados por niveles anormales de aldosterona. Vamos a considerar un caso en particular, suponemos que no hay ADH presente, entonces $\rho_c = \infty$ y que no hay aldosterona presente, $H_c = 0$. En este caso se deduce que

$$Q_c = Q_c(0) = -Q_a, \quad C_c = C_c(0) = C_a(0).$$

En otras palabras, no hay pérdida de agua o de Na^+ en el conducto colector por lo que la ecuación para Q_c , (31) ha sido reducida a una ecuación algebraica. Por lo que ahora, queda por determinar lo que ocurre en los túbulos descendente y ascendente. El flujo se rige por las siguientes ecuaciones

$$\begin{cases} \rho_d \frac{dQ_d}{dy} = f(Q_d, Q_a, y), \\ Q_d(0) = 1, \\ Q_d(1) = -Q_a, \\ Q_c(y) = -Q_a. \end{cases} \quad (32)$$

con $f(Q_d, Q_a, y) = C_d - C_s - \Delta P_d$. De las ecuaciones (22) y (27) se deduce que

$$C_d = \frac{1}{Q_d}(1 + \rho_d H_d(1 - Q_d) - \Delta P_d H_d y), \quad C_s = \frac{(P + \Delta P_d H_d)(1 - y)}{Q_d + Q_a} - \rho_d H_d.$$

Con Q_a constante ya que el miembro ascendente es impermeable al agua y C_a una función linealmente decreciente de y .

Observamos que el problema (32), tiene asociadas dos condiciones de frontera, pero una de ellas está en términos de un parámetro desconocido Q_a , que se debe determinar como parte

del problema.

En el caso que nos ocupa (ausencia de ADH), adicionalmente consideraremos que el túbulo descendente sea bastante permeable al agua. Lo cual implicaría que debemos tomar ρ_d pequeño en el problema (32). Pero entonces, la ecuación diferencial (32) es difícil de resolver tanto analítica como numéricamente ya que resulta ser singular. Dado que Q_d es diferenciable e invertible, por el teorema de la función inversa, podemos resolver este problema buscando una solución en la forma $y = y(Q_d, \rho_d)$ que satisface la ecuación diferencial

$$\begin{cases} f(Q_d, Q_a, y) \frac{dy}{dQ_d} = \rho_d, \\ Q_d(0) = 1, Q_d(1) = -Q_a(0). \end{cases} \quad (33)$$

Para resolver este problema buscamos y en función de Q_d como serie de potencias de ρ_d .

$$y = y_0 + \rho_d y_1 + \rho_d^2 y_2 + O(\rho_d^2), \quad (34)$$

sustituyendo en (33), igualando y expandiendo en potencias de ρ_d , se tiene que

$$y = 1 - \frac{Q_a + Q_d}{PQ_d - \Delta P_d H_d Q_a} [1 - \Delta P_d(Q_d + H_d)] + O(\rho_d). \quad (35)$$

Ahora determinamos Q_a haciendo $y = 0, Q_d = 1$ en (35), y despejando Q_a para determinarla, obteniendo

$$-Q_a = 1 - \frac{P + H_d \Delta P_d}{1 - \Delta P_d} + O(\rho_d). \quad (36)$$

Ahora podemos graficar y en función de Q_d y girar los ejes para ver Q_d en función de y . Esto se representa en las figuras 10. Una vez que se determina Q_d en función de y , podemos graficar la concentración C_d en función de y , dada en la figura 11.

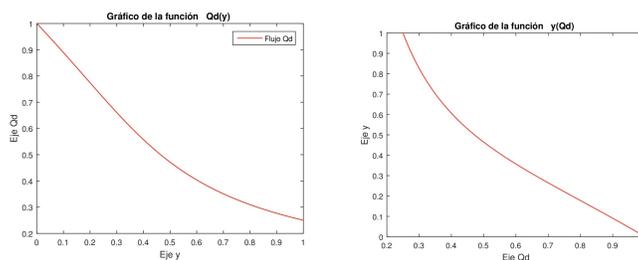


Figura 10: Curva del flujo Q_d (izquierda) y la curva de la función y (derecha) con los valores de los parámetros con los valores de los parámetros: $P = 0,09, \Delta P_d = 0,15, H_d = 0,1, \rho_d = 0,12, H_c = 0$.

A partir de las gráficas anteriores observamos que la función Q_d es decreciente ya que hay ausencia de ADH y de aldosterona en el tubo descendente, es decir no hay regulación en el flujo de agua, produciendo una gran cantidad de orina diluída y un flujo rápido. En el caso de la función C_d es creciente ya que no hay una adecuada reabsorción, quedando gran cantidad de sodio en el túbulo descendente.

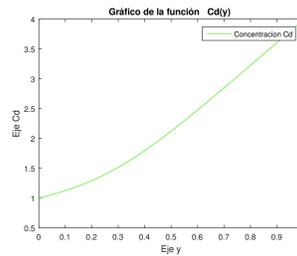


Figura 11: Curva de la concentración en el túbulo descendente C_d con los valores de los parámetros: $P = 0,09$, $\Delta P_d = 0,15$, $H_d = 0,1$, $\rho_d = 0,12$, $H_c = 0$.

3 Conclusiones

En este trabajo, se presenta un modelo para la hemodinámica renal, centrado en la producción de orina. El modelo se descompone en tres submodelos:

1. **Filtración glomerular:** Se modela mediante una ecuación diferencial de primer orden con dos condiciones de frontera desconocidas, mostrando que el flujo resultante es lineal con respecto a la presión arterial, lo cual no es del todo preciso en la realidad debido a un proceso de autorregulación renal que mantiene constante el filtrado a pesar de variaciones en la presión.

2. **Autorregulación:** Se utiliza una ecuación diferencial parcial de transporte con retardo para modelar la concentración de cloro Cl^- en el túbulo ascendente del asa de Henle. Se descubrió que, dependiendo de algunos rangos de parámetros, las oscilaciones en la concentración de Cl^- pueden llevar a soluciones que convergen rápidamente al estado estacionario o a soluciones casi periódicas, lo que sugiere la posibilidad de una bifurcación en el sistema.

3. **Reabsorción y secreción:** Se aborda mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que modela el flujo de agua y sodio en el asa de Henle. Se demuestra que, en ausencia de ADH y aldosterona, se produce un flujo decreciente de agua, lo que resulta en una gran cantidad de orina diluida y un aumento en la concentración de cloro.

En conjunto, aunque el modelo presenta limitaciones, logra simular satisfactoriamente la dinámica de la eliminación de desechos metabólicos a través de la orina en situaciones específicas.

Referencias

- [1] Baigent, S. Unwin, R. Yeng, C.. Mathematical Modelling of Profiled Hemodialysis: A Simplified Approach. *Journal of Theoretical Medicine*, 3(2):143–160, 2001.
- [2] Bazaev, N.A, Grinvald, V. M. Selischev, S. V. A Mathematical Model for a Biotechnological Hemodialysis system. *Biomedical Engineering*, 44(3):79–84, 2010.

-
- [3] Cavalcanti, S. Ciandrini, A. Avanzolini, G. Mathematical modeling of arterial pressure response to hemodialysis-induced hypovolemia. *Computers in Biology and Medicine*, 36(2):128–144, 2006.
- [4] Dominguez, F. *Un modelo matematico del funcionamiento del rinon*. Tesis licenciatura UJAT. Tesis de Maestria en Ciencias en Matemáticas Aplicadas, Universidad Juarez Autonoma de Tabasco, 2024.
- [5] Escuela Universitaria de Enfermeria. Sistema urinario: anatomia. *Universidad de Barcelona*, (<https://www.infermeravirtual.com/files/media/file/103/Sistema/20urinario.pdf> 1358605607).
- [6] James, K. James, S. *Renal Physiology, Mathematical Physiology Systems Physiology*. Springer, 2009.

Estimación Bayesiana del Número Reproductivo Básico en un Brote de Chikungunya en Acapulco, Guerrero

María Guadalupe Vázquez-Peña¹, Cruz Vargas-De-León^{*2,3}, Rafael Martínez-Fonseca⁴, and Jorge Velázquez-Castro⁵

¹Centro de Investigación en Matemáticas

²División de Investigación, Hospital Juárez de México

³Sección de Estudios de Posgrado e Investigación, Escuela Superior de Medicina, Instituto Politécnico Nacional

⁴Facultad de Matemáticas, Universidad Autónoma de Guerrero

⁵Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Resumen

El chikungunya es una enfermedad viral transmitida por vectores, causada por los mosquitos *Aedes aegypti* y *Aedes albopictus*. No existe un tratamiento médico específico ni una vacuna disponible. En este trabajo, se presenta un modelo hospedero-vector que considera dos estructuras de edad: la edad cronológica y la edad de la infección asintomática. Este modelo contempla la variabilidad en el período de recaídas y en la susceptibilidad al virus del chikungunya. A partir de este sistema de ecuaciones integro-diferenciales, se deriva un caso particular en forma de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO). El objetivo de este trabajo es [estimar el número reproductivo básico \$R_0\$ del modelo en EDO para un brote de chikungunya ocurrido en 2015 en Acapulco, México. Se aplica](#) un enfoque bayesiano con el método de Monte Carlo Hamiltoniano para estimar los parámetros del modelo en EDO y, con ellos, posteriormente estimar el R_0 . Estimamos que el R_0 es 2.61, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (1.66, 3.80), lo cual es consistente con otros informes en la literatura.

Palabras clave: Chikungunya; Modelo hospedero-vector; Brote epidémico; Estimación Bayesiana; Número reproductivo básico.

*leoncruz82@yahoo.com.mx

1 Introducción

La fiebre chikungunya es una enfermedad viral transmitida a los humanos por mosquitos del género *Aedes* [1]. El virus, que da nombre a la enfermedad, se describió en humanos por primera vez en 1952 en Tanzania, África, donde entre el 60 % y el 80 % de la población presentó síntomas de artralgia, fiebre y erupciones cutáneas. Muchas personas, tras el periodo agudo de la enfermedad, continuaron experimentando dolores articulares durante meses [2].

Entre 1960 y 1990, hubo brotes de fiebre chikungunya en varios países africanos, como República Democrática del Congo, Uganda, Angola, Sudáfrica y Nigeria [3]. En América, el primer caso se reportó en [la isla de San Martín ubicada en el Caribe](#) en 2013, y para diciembre de 2014, la enfermedad se había extendido a 17 países sudamericanos. Actualmente, se ha identificado en 45 países en el Caribe, América del Norte, América del Sur y América Central [3].

En México, el primer caso importado de fiebre chikungunya se presentó en mayo de 2014 [4]. A finales de ese año, se reportaron 155 casos en los estados de Chiapas, Guerrero, Oaxaca, Sonora y Sinaloa. Para la [semana epidemiológica 40](#), en 2015 se habían contabilizado 8,668 casos confirmados, siendo Guerrero el estado con la mayor cantidad de infectados, con el 18.38 % [5]. Al final de ese año, se confirmaron un total de 12,588 casos de chikungunya [en México](#) [6].

Cuando una persona es picada por un mosquito infectado, los síntomas suelen comenzar entre 3 y 7 días después del período de incubación. [Durante este tiempo, el virus se multiplica en el organismo del infectado, pero la persona no presenta síntomas ni es contagiosa para otros.](#) Los síntomas incluyen dolor intenso en las articulaciones, fiebre superior a 39°C, dolor muscular y, ocasionalmente, náuseas, vómitos y erupciones cutáneas. El dolor articular puede ser tan intenso que resulta debilitante o incapacitante [2]. Tras una semana, la mayoría de los pacientes experimenta una notable mejora: la fiebre, el cansancio y la artralgia disminuyen significativamente en 1 o 2 semanas, aunque frecuentemente se produce una recaída [7]. Actualmente, no existe un tratamiento específico para la infección por chikungunya; el manejo se limita a aliviar los síntomas con medicación analgésica y antiinflamatoria [2].

Se ha reportado el fenómeno de recaída en las infecciones por chikungunya [8, 9, 10]. La recaída se define como la reaparición de artralgia debido a la persistencia del virus en las células del tejido musculoesquelético después de un período sin síntomas de al menos una semana [8] o después de un mes [10]. En un estudio de cohortes realizado en Francia, basado en datos de un sistema de vigilancia de laboratorio, se confirmó la infección inicial mediante una prueba de anticuerpos o PCR (reacción en cadena de la polimerasa). En ese estudio, se reportaron recaídas de artralgia en el 72 % de los pacientes; el número promedio de recaídas fue de 4 y el tiempo promedio entre dos recaídas fue de 8 semanas [8]. Por otro lado, un estudio transversal realizado en Acapulco, Guerrero, en diciembre de 2015, encontró que el 66 % de la población (3,531 de 5,870 personas) autoreportó haber estado infectada; el 31.1 % de los que sufrieron de chikungunya (1,098 de 3,531 personas) reportaron al menos

una recaída al menos un mes después de recuperarse de la enfermedad. De estos, el 13% reportó exactamente una recaída, el 12% reportó dos recaídas, el 4% reportó tres recaídas y solo el 2% reportó más de cuatro recaídas [10].

La edad como factor de riesgo es común en las enfermedades infecciosas transmitidas por vectores. En el caso del chikungunya, un estudio de seropositividad reportó la frecuencia de positivos al virus en los siguientes grupos etarios: 33% en el grupo de 0 a 19 años, 62% en el de 20 a 39 años, 67.4% en el de 40 a 49 años, 75% en el de 50 a 59 años, 59% en el de 60 a 69 años, 25% en el de 70 a 79 años, y 33% en el de 80 años y más [11], lo que muestra una variabilidad en la susceptibilidad al virus.

La variabilidad en el período de recaídas y en la susceptibilidad al virus del chikungunya motivó a Vázquez-Peña, Vargas-De-León y Velázquez-Castro [12] a desarrollar un modelo hospedero-vector que considera tanto la edad cronológica como la edad de la infección asintomática. Este modelo se presentará en la Sección 2.

A partir de este modelo hospedero-vector con dos estructuras de edad, obtendremos un modelo en ecuaciones diferenciales ordinarias para el virus del chikungunya, tal como fue propuesto por Vázquez-Peña et al. [13], el cual se discutirá en la Sección 3, y se derivará el número reproductivo básico.

En este trabajo, se propone estimar los parámetros y el número reproductivo básico utilizando un enfoque Bayesiano con los datos del brote de chikungunya en Acapulco, Guerrero [10]. Para ello, emplearemos el modelo hospedero-vector presentado en la Sección 3. La metodología del enfoque Bayesiano se describirá en la Sección 4, mientras que los resultados de la estimación Bayesiana de los parámetros y del [número reproductivo básico \(12\)](#) se presentará en la Sección 5. Finalmente, en la Sección 6, se realizarán algunas conclusiones finales.

2 Modelo hospedero-vector con dos estructuras de edades

Denotamos por N_h y N_v el número total de hospederos y vectores, respectivamente. Las poblaciones de hospederos y vectores se dividen en clases disjuntas según su estado epidemiológico. Para los hospederos, consideramos cuatro grupos: [susceptibles \(\$s_h\(t, \tau\)\$ \)](#), [infectados \(\$I_h\(t, \tau\)\$ \)](#), [asintomáticos \(\$a_h\(t, \omega\)\$ \)](#) y [recuperados \(\$R_h\(t, \tau\)\$ \)](#). En contraste, los [vectores se dividen únicamente en susceptibles \(\$S_v\(t\)\$ \) e infectados \(\$I_v\(t\)\$ \)](#).

La edad cronológica se denota por τ , de manera que $s_h(t, \tau)$ representa la cantidad de hospederos susceptibles con edad cronológica τ en el tiempo t . Entonces, el total de hospederos susceptibles está dado por

$$S_h(t) = \int_0^{\infty} s_h(t, \tau) d\tau. \quad (1)$$

Suponemos que la probabilidad de transmisión del vector al hospedero depende de la edad del hospedero, lo cual se denota por $\beta_h(\tau)$.

La tasa de transmisión del vector infectado al hospedero susceptible está definida por $\frac{b}{N_h}\beta_h(\tau)s_h(t, \tau)I_v(t)$, donde b es el promedio de picaduras por unidad de tiempo, y $\frac{b}{N_h}$ representa el número promedio de picaduras por unidad de tiempo por cada hospedador. Esto significa que se está distribuyendo el número total de picaduras entre el total de hospedero. Al mismo tiempo, la clase de hospederos susceptibles disminuye debido a la muerte natural a una tasa μ_h y a alguna estrategia de prevención, como la vacunación, enfocada únicamente a ciertos grupos de edad, la cual será modelada por el parámetro $\rho(\tau)$. Por lo tanto, definimos $\varepsilon(\tau) = \mu_h + \rho(\tau)$.

Bajo estas hipótesis, se formula la primera ecuación del modelo

$$\frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial t} + \frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{b}{N_h}\beta_h(\tau)s_h(t, \tau)I_v(t) - \varepsilon_h(\tau)s_h(t, \tau).$$

Suponemos que todos los individuos nacen susceptibles a una tasa $\mu_h N_h$, de manera que obtenemos la condición de frontera

$$s_h(t, 0) = \mu_h N_h.$$

Una vez que un hospedero se ha infectado, permanece en dicha clase hasta que los síntomas desaparecen a una tasa γ o por muerte por causas naturales a una tasa μ_h . Consideramos que una fracción p no se recuperará y pasará a la fase asintomática durante un tiempo ω , que representa la edad de la infección asintomática. La clase de hospederos asintomáticos se representa por $a_h(t, \omega)$, donde

$$A_h(t) = \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega, \quad (2)$$

es el total de hospederos asintomáticos. Además, la tasa en que los síntomas de la enfermedad vuelven a manifestarse depende de la edad de la infección asintomática; por ende, los hospederos asintomáticos retornan a la clase de hospederos infectados en un tiempo $1/\delta_h(\omega)$. Con esto, se propone la segunda ecuación del modelo:

$$\frac{dI_h(t)}{dt} = \frac{b}{N_h} \int_0^\infty \beta_h(\tau)s_h(t, \tau)I_v(t)d\tau - (\mu_h + \gamma)I_h(t) + \int_0^\infty \delta_h(\omega)a_h(t, \omega)d\omega.$$

La clase de hospederos asintomáticos se reduce cuando los síntomas vuelven a manifestarse o por muerte por causas naturales, lo que da lugar a la siguiente ecuación del modelo:

$$\frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial t} + \frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial \omega} = -(\mu_h + \delta_h(\omega))a_h(t, \omega).$$

Los hospederos infectados entran en la clase asintomática a una tasa $p\gamma$, comenzando el conteo de la edad de la infección asintomática, lo que se traduce en la condición de frontera

$$a_h(t, 0) = p\gamma I_h(t).$$

Los hospederos infectados se recuperan de manera permanente a una tasa $(1-p)\gamma$ y permanecen en esa clase hasta la muerte por causas naturales a una tasa μ_h , lo que se representa en la cuarta ecuación diferencial del modelo

$$\frac{dR_h(t)}{dt} = (1-p)\gamma I_h(t) - \mu_h R_h(t).$$

En cuanto a los vectores, suponemos que nacen y mueren a la misma tasa μ_v . Un vector nace susceptible y se infecta al picar a una persona con el virus, ya sea un hospedador infectado o un hospedador asintomático. De manera análoga al caso de los hospedadores, la tasa de transmisión $\frac{\beta_v b}{N_h} S_v(t) I_h(t)$ depende de la probabilidad de que el contacto entre un hospedador infectado y un vector susceptible sea efectivo. Esta probabilidad se modela con el producto de la probabilidad de transmisión del virus β_v y el número promedio de picaduras por unidad de tiempo por cada hospedero $\frac{b}{N_h}$. Adicionalmente, se introduce el parámetro κ para tener en cuenta que la probabilidad de transmisión de un hospedero infectado a un vector es mayor que la tasa de transmisión de un hospedero asintomático a un vector. Por lo tanto, se considera que $0 \leq \kappa \leq 1$. Bajo estas suposiciones, obtenemos la quinta ecuación del modelo:

$$\frac{dS_v(t)}{dt} = \mu_v N_v - \frac{\beta_v b}{N_h} S_v(t) I_h(t) - \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v(t) \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega - \mu_v S_v(t).$$

Después de que el vector se infecta [de la forma descrita](#), permanece en esa clase hasta morir, lo que se modela en la última ecuación:

$$\frac{dI_v(t)}{dt} = \frac{\beta_v b}{N_h} S_v(t) I_h(t) + \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v(t) \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega - \mu_v I_v(t).$$

Por lo que se obtiene el siguiente sistema integro-diferencial recientemente propuesto

por Vázquez-Peña, Vargas-De-León y Velázquez-Castro para el virus de chikungunya [12].

$$\begin{aligned}
\frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial t} + \frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial \tau} &= -\frac{b}{N_h} \beta_h(\tau) s_h(t, \tau) I_v(t) - \varepsilon_h(\tau) s_h(t, \tau), \\
s_h(t, 0) &= \mu_h N_h, \\
\frac{dI_h(t)}{dt} &= \frac{b}{N_h} \int_0^\infty \beta_h(\tau) s_h(t, \tau) I_v(t) d\tau - (\mu_h + \gamma) I_h(t) + \int_0^\infty \delta_h(\omega) a_h(t, \omega) d\omega, \\
\frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial t} + \frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial \omega} &= -(\mu_h + \delta_h(\omega)) a_h(t, \omega), \\
a_h(t, 0) &= p\gamma I_h(t), \\
\frac{dR_h(t)}{dt} &= (1-p)\gamma I_h(t) - \mu_h R_h(t), \\
\frac{dS_v(t)}{dt} &= \mu_v N_v - \frac{\beta_v b}{N_h} S_v(t) I_h(t) - \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v(t) \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega - \mu_v S_v(t), \\
\frac{dI_v(t)}{dt} &= \frac{\beta_v b}{N_h} S_v(t) I_h(t) + \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v(t) \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega - \mu_v I_v(t).
\end{aligned} \tag{3}$$

Si consideramos que el tamaño de la población de vectores se mantiene constante en el tiempo, $N_v = S_v(t) + I_v(t)$, y observamos que la variable $R(t)$ no está acoplada en las demás ecuaciones, el modelo se reduce a

$$\begin{aligned}
\frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial t} + \frac{\partial s_h(t, \tau)}{\partial \tau} &= -\frac{b}{N_h} \beta_h(\tau) s_h(t, \tau) I_v(t) - \varepsilon_h(\tau) s_h(t, \tau), \\
s_h(t, 0) &= \mu_h N_h, \\
\frac{dI_h(t)}{dt} &= \frac{b}{N_h} \int_0^\infty \beta_h(\tau) s_h(t, \tau) I_v(t) d\tau - (\mu_h + \gamma) I_h(t) + \int_0^\infty \delta_h(\omega) a_h(t, \omega) d\omega, \\
\frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial t} + \frac{\partial a_h(t, \omega)}{\partial \omega} &= -\alpha(\omega) a_h(t, \omega), \text{ con } \alpha(\omega) = \mu_h + \delta_h(\omega), \\
a_h(t, 0) &= p\gamma I_h(t), \\
\frac{dI_v(t)}{dt} &= \frac{\beta_v b}{N_h} (N_v - I_v(t)) \left(I_h(t) + \kappa \int_0^\infty a_h(t, \omega) d\omega \right) - \mu_v I_v(t).
\end{aligned} \tag{4}$$

Las condiciones iniciales están dadas por

$$s_h(0, \tau) = s_{h0}(\tau), \quad I_h(0) = I_{h0}, \quad a_h(0, \omega) = a_{h0}(\omega), \quad I_v(0) = I_{v0}.$$

Donde $s_{h0}(\tau)$ y $a_{h0}(\omega)$ representan la distribución inicial de los huéspedes susceptibles y de los hospederos asintomáticos con edad cronológica y edad de infección asintomática, respectivamente. I_{h0} e I_{v0} son el número inicial de hospederos y de vectores infectados, respectivamente.

2.1. Propiedades del sistema

El número reproductivo básico para el modelo (4) fue obtenido en [12]

$$R_0(\tau, \omega) = \frac{\eta p \gamma N_h + D \beta_v b N_v}{N_h(\mu_h + \gamma)}, \quad (5)$$

donde D está dada por

$$D = \frac{b}{\mu_v N_h} \int_0^\infty s_h^0(\tau) \beta_h(\tau) d\tau, \quad (6)$$

y η por

$$\eta = \int_0^\infty \left[\delta_h(v) + \frac{\beta_v b N_v \kappa}{N_h} D \right] \exp \left(- \int_0^v \alpha(\phi) d\phi \right) dv. \quad (7)$$

El punto de equilibrio libre de la enfermedad E^0 del sistema integro-diferencial (4) se obtiene al considerar $I_h(t)$, $a_h(t, \omega)$ e $I_v(t)$ iguales a cero simultáneamente, lo que resulta en $E^0 = (s_h^0(\tau), 0, 0, 0)$, donde

$$s_h^0(\tau) = \mu_h N_h \exp \left(- \int_0^\tau \varepsilon_h(\phi) d\phi \right). \quad (8)$$

En [12], se utiliza una estrategia geométrica para demostrar la existencia del punto de equilibrio endémico $E^* = (s_h^*(\tau), I_h^*, a_h^*(\omega), I_m^*)$ cuando $R_0(\tau, \omega) > 1$.

Las propiedades de las soluciones a tiempos largos se resumen en el siguiente teorema:

Teorema 1. (Ver [12])

- i) Si $R_0(\tau, \omega) \leq 1$, entonces el punto de equilibrio libre de la enfermedad E^0 del sistema integro-diferencial (4) es global asintóticamente estable.*
- ii) Si $R_0(\tau, \omega) > 1$, entonces existe un único punto de equilibrio endémico E^* del sistema (4) y es global asintóticamente estable.*

El ítem i) del Teorema 1 se demostró utilizando el segundo método de Lyapunov. Se construyó el siguiente funcional de Lyapunov $W(t)$, que es una combinación de una funcional tipo Volterra $f(x) = x - 1 - \ln x$ y funcionales lineales

$$\begin{aligned} W(t) &= \int_0^\infty s_h^0(\tau) f \left(\frac{s_h(t, \tau)}{s_h^0(\tau)} \right) d\tau + I_h(t) \\ &\quad + \int_0^\infty g_0(\omega) a(t, \omega) d\omega + \frac{b}{\mu_v N_h} I_v(t) \int_0^\infty s_h^0(\tau) \beta_h(\tau) d\tau, \end{aligned}$$

donde $g_0(w)$ es la siguiente función auxiliar:

$$g_0(w) = \int_w^\infty \left[\delta_h(v) + \frac{\beta_v b N_v \kappa}{N_h} D \right] \exp \left(- \int_w^v \alpha(\phi) d\phi \right) dv > 0 \quad (9)$$

para todo $w \geq 0$.

El ítem ii) del Teorema 1 se demostró usando una funcional de Lyapunov $L(t)$, que es una combinación de funcionales tipo Volterra $f(x) = x - 1 - \ln x$, definida por

$$L(t) = \frac{\mu_v N_h}{I_v^* b} \int_0^\infty s_h^*(\tau) f\left(\frac{s_h(t, \tau)}{s_h^*(\tau)}\right) d\tau + \frac{I_h^* \mu_v N_h}{I_v^* b} f\left(\frac{I_h(t)}{I_h^*}\right) \\ + \frac{\mu_v N_h}{I_v^* b} \int_0^\infty a_h^*(\omega) g_e(\omega) f\left(\frac{a_h(t, \omega)}{a_h^*(\omega)}\right) d\omega + f\left(\frac{I_v(t)}{I_v^*}\right) \int_0^\infty \beta_h(\tau) s_h^*(\tau) d\tau,$$

donde $g_e(w)$ es la siguiente función auxiliar:

$$g_e(w) = \int_w^\infty \left[\delta_h(v) + \frac{\beta_v b^2 (N_v - I_v^*) \kappa}{\mu_v N_h^2} \int_0^\infty \beta_h(\tau) s_h^*(\tau) d\tau \right] \exp\left(-\int_w^v \alpha(\phi) d\phi\right) dv > 0$$

para todo $w \geq 0$.

La estrategia de construcción de funcionales de Lyapunov tipo Volterra ha sido ampliamente utilizada en epidemiología matemática [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20].

3 Modelo hospedero-vector independientemente de las edades

Usando las siguientes transformaciones (1) y (2) donde $S_h(t)$ es el total de hospederos susceptibles de cualquier edad cronológica y $A_h(t)$ es el total de hospederos asintomáticos con cualquier edad de la infección asintomática. Además, [para simplificar la complejidad del modelo, proponemos que las funciones dependientes de la edad se definan como constantes](#): $\delta_h(\omega) = \delta_h$, $\beta_h(\tau) = \beta_h$, y $\varepsilon_h(\tau) = \mu_h$. Al integrar la primera ecuación del sistema (3) con respecto de τ y la cuarta ecuación de (3) con respecto de ω utilizando las respectivas condiciones de frontera, el sistema integro-diferencial (3) se reduce a un modelo en ecuaciones diferenciales ordinarias para el virus de chikungunya que ha sido estudiado por Vázquez-Peña et al. [13]

$$\begin{aligned} \frac{dS_h}{dt} &= \mu_h N_h - \frac{\beta_h b}{N_h} S_h I_v - \mu_h S_h, \\ \frac{dI_h}{dt} &= \frac{\beta_h b}{N_h} S_h I_v - (\mu_h + \gamma) I_h + \delta_h A_h, \\ \frac{dA_h}{dt} &= p\gamma I_h - (\mu_h + \delta_h) A_h, \\ \frac{dR_h}{dt} &= (1-p)\gamma I_h - \mu_h R_h, \\ \frac{dS_v}{dt} &= \mu_v N_v - \frac{\beta_v b}{N_h} S_v I_h - \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v A_h - \mu_v S_v, \\ \frac{dI_v}{dt} &= \frac{\beta_v b}{N_h} S_v I_h + \frac{\kappa \beta_v b}{N_h} S_v A_h - \mu_v I_v. \end{aligned} \tag{10}$$

Considerando ambas poblaciones constantes $N_h = S_h + I_h + A_h + R_h$ y $N_v = S_v + I_v$ el sistema se reduce a

$$\begin{aligned}\frac{dS_h}{dt} &= \mu_h N_h - \frac{\beta_h b}{N_h} S_h I_v - \mu_h S_h, \\ \frac{dI_h}{dt} &= \frac{\beta_h b}{N_h} S_h I_v - (\mu_h + \gamma) I_h + \delta_h A_h, \\ \frac{dA_h}{dt} &= p\gamma I_h - (\mu_h + \delta_h) A_h, \\ \frac{dI_v}{dt} &= \frac{\beta_v b}{N_h} (N_v - I_v)(I_h + \kappa A_h) - \mu_v I_v.\end{aligned}\tag{11}$$

Las condiciones iniciales del sistema (11) están dadas por

$$S_h(0) = S_{h0}, \quad I_h(0) = I_{h0}, \quad A_h(0) = A_{h0}, \quad I_v(0) = I_{v0}.$$

Donde I_{h0} e I_{v0} no son cero simultáneamente.

La región factible de las soluciones del modelo (11) es

$$\Delta = \{(S_h, I_h, A_h, I_v) \in \mathbb{R}_+^4 : S_h + I_h + A_h \leq N_h, I_v \leq N_v\}.$$

3.1. Número reproductivo básico

Para calcular el número reproductivo básico, Vázquez-Peña et al. [13] utilizaron el método de la matriz de la siguiente generación [21]. Separaron las ecuaciones en \mathcal{F} , que contiene los términos asociados a nuevas infecciones, y \mathcal{V} , que incluye los términos de transiciones individuales en cada clase, es decir,

$$\mathcal{F} = \left(\frac{\beta_h b}{N_h} S_h I_v, 0, \frac{\beta_v b}{N_h} (N_v - I_v)(I_h + \kappa A_h) \right)^T$$

y

$$\mathcal{V} = ((\mu_h + \gamma) I_h - \delta_h A_h, -p\gamma I_h + (\mu_h + \delta_h) A_h, \mu_v I_v)^T.$$

Tras calcular las matrices Jacobianas de \mathcal{F} y \mathcal{V} y evaluarlas en el punto de equilibrio libre de la enfermedad $E^0 = (N_h, 0, 0, 0)$ se obtienen, respectivamente, una matriz no negativa \mathcal{F} y una M -matriz \mathcal{V} .

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \beta_h b \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\beta_v b N_v}{N_h} & \frac{\kappa \beta_v b N_v}{N_h} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mu_h + \gamma & -\delta_h & 0 \\ -p\gamma & \mu_h + \delta_h & 0 \\ 0 & 0 & \mu_v \end{pmatrix}.$$

Entonces, el número reproductivo básico está dado por el radio espectral de la matriz $\mathcal{F}\mathcal{V}^{-1}$, es decir

$$R_0 = \sqrt{\hat{R}_0},\tag{12}$$

donde

$$\hat{R}_0 = \frac{\beta_h \beta_v b^2 N_v (\kappa p \gamma + \mu_h + \delta_h)}{N_h \mu_v [(\mu_h + \gamma)(\mu_h + \delta_h) - \delta_h p \gamma]}, \quad (13)$$

R_0 denota el número promedio de casos secundarios que produce un individuo infectado al introducirlo a una población totalmente susceptible. Esto se puede entender de la siguiente manera: un mosquito infectado distribuye picaduras en la población humana durante el resto de su vida, y una proporción $\frac{\beta_h b N_v}{\mu_v N_h}$ de estas picaduras se convierte en nuevas infecciones. Por otro lado, el número de nuevas infecciones en los mosquitos por parte de hospederos infectados y asintomáticos durante el periodo infeccioso está dado por $\beta_v b \frac{\kappa p \gamma + \mu_h + \delta_h}{(\mu_h + \gamma)(\mu_h + \delta_h) - \delta_h p \gamma}$, respectivamente. La media geométrica de estas dos cantidades, que es igual a \hat{R}_0 , proporciona el número promedio de infecciones secundarias. En el contexto de enfermedades transmitidas por vectores, como el chikungunya, un $R_0 > 1$ sugiere que la enfermedad se propagará en la población, mientras que un $R_0 < 1$ indica que la enfermedad eventualmente se extinguirá.

3.2. Puntos de equilibrio y su estabilidad global

Además del punto de equilibrio libre de la enfermedad E^0 , el modelo (11) tiene un punto de equilibrio endémico $E^* = (S_h^*, I_h^*, A_h^*, I_v^*)$, con

$$\begin{aligned} S_h^* &= \frac{N_h (N_h N_v^{-1} \mu_h \hat{R}_0 + \beta_h b)}{\hat{R}_0 (N_h N_v^{-1} \mu_h + \beta_h b)}, \\ I_h^* &= \left(\frac{\mu_h N_h (\mu_h + \delta_h) \beta_h b}{(\mu_h + \gamma)(\mu_h + \delta_h) - \delta_h p \gamma} \right) \left(\frac{\hat{R}_0 - 1}{\hat{R}_0 (N_h N_v^{-1} \mu_h + \beta_h b)} \right), \\ A_h^* &= \left(\frac{\mu_h N_h \beta_h b p \gamma}{(\mu_h + \gamma)(\mu_h + \delta_h) - \delta_h p \gamma} \right) \left(\frac{\hat{R}_0 - 1}{\hat{R}_0 (N_h N_v^{-1} \mu_h + \beta_h b)} \right), \\ I_v^* &= \frac{\mu_h N_h (\hat{R}_0 - 1)}{N_h N_v^{-1} \mu_h \hat{R}_0 + \beta_h b}. \end{aligned} \quad (14)$$

Dado que el sistema (11) es un caso particular del sistema integro-diferencial (4), obtenemos el siguiente corolario derivado del Teorema 1.

Corolario 1. *i) Cuando $R_0 \leq 1$ entonces el punto de equilibrio libre de la enfermedad E_0 del sistema (11) es global asintóticamente estable. ii) Cuando $R_0 > 1$ entonces el punto de equilibrio endémico E^* del sistema (11) es global asintóticamente estable.*

4 Estimación Bayesiana

4.1. Brote de chikungunya en Acapulco

En 2015, Acapulco, Guerrero, experimentó un brote de chikungunya. En [10] se realizó un estudio transversal para caracterizar dicho brote epidémico, que incluyó encuestas en 1,305 viviendas distribuidas en ocho conglomerados urbanos considerados representativos de Acapulco. En total, se administraron 5,870 cuestionarios, identificando 3,531 casos de chikungunya entre enero y diciembre de 2015. Para asegurar la representatividad en el estudio [10], se realizó un muestreo intencional que buscaba reflejar las condiciones urbanas promedio de Acapulco, lo cual es clave en contextos donde no se puede utilizar un muestreo probabilístico.

Para reducir el impacto de las fluctuaciones aleatorias o ruido en los datos reportados de los casos de chikungunya [10], se [aplica](#) el método de suavizamiento exponencial:

$$F_{t+1} = \alpha Y_t + (1 - \alpha)F_t,$$

donde F_{t+1} es el pronóstico de casos de chikungunya para el tiempo $t + 1$ de la serie de tiempo, donde Y_t representa el valor observado de casos de chikungunya en el tiempo t , F_t es el pronóstico de casos de chikungunya para el tiempo t , y α es la constante de suavizamiento ($0 < \alpha < 1$). Se supone que el pronóstico inicial F_0 de casos de chikungunya es igual al primer valor observado Y_0 . Con el suavizado, logramos obtener valores con menor variabilidad, lo que permite observar mejor la evolución de la serie temporal. La estimación Bayesiana se realizará con F_{t+1} .

Utilizando los datos recabados por [10] sobre los casos mensuales autoinformados de chikungunya y el método de suavizamiento exponencial con un valor de $\alpha = 0,7$, se ajustará la curva de los humanos infectados I_h para estimar de manera puntual y por intervalo los parámetros y el número reproductivo básico R_0 (12) del modelo (11).

4.2. Modelo estadístico

Para $\mathbf{y} = (y(t_1), y(t_2), \dots, y(t_n))$ el vector de n observaciones del número de humanos infectados ($I_h(t)$) en el tiempo t , considere el siguiente modelo estadístico:

$$y_i(t_i) = G(\mathcal{M}(t_i, \boldsymbol{\theta})) + \varepsilon(t_i), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (15)$$

donde:

- $y(t_i)$ es el número de humanos infectados ($I_h(t)$) en el tiempo t_i .
- $\boldsymbol{\theta}$ es vector de parámetros en la estimación Bayesiana.
- $G(\mathcal{M}(t_i, \boldsymbol{\theta}))$ es la solución numérica del modelo \mathcal{M} (11) con el método G . En este caso se usó el método numérico de Runge-Kutta de orden 4.

- $\varepsilon(t_i)$ es el error aleatorio en el tiempo t_i , los errores son independientes para cada tiempo, normalmente distribuidos con media cero y varianza σ^2 .

4.3. Función de verosimilitud

Considerando el supuesto de normalidad para el error aleatorio $\varepsilon(t_i) \sim N(0, \sigma^2)$, entonces se tiene que $y(t_i) \sim N(G(\mathcal{M}(t_i, \boldsymbol{\theta})), \sigma^2)$. Por tal razón, la función de verosimilitud está dada por la ecuación (16):

$$L(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n (\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{(y(t_i) - G(\mathcal{M}(t_i, \boldsymbol{\theta})))^2}{2\sigma^2} \right\} \quad (16)$$

4.4. Distribución a priori y a posteriori

La estadística Bayesiana permite al investigador incorporar conocimiento de los parámetros al proceso de inferencia. Esta información se especifica por medio de una *distribución a priori* ($P(\boldsymbol{\theta})$) y puede restringir la inferencia a un rango de interés y asignar mayor probabilidad a un subconjunto de valores. Esto permite enfocarse en los rangos plausibles según el conocimiento de la literatura o la definición del parámetro en el modelo matemático. Por ejemplo, la probabilidad de transmisión de vector a humano está definida en el intervalo $[0, 1]$. Dado que se trata de una probabilidad, es conveniente utilizar o definir distribuciones a priori con soporte en este mismo intervalo, como la distribución uniforme $U(0, 1)$ o la distribución Beta $Beta(\alpha, \beta)$, entre otras. Para proponer la distribución a priori de $\boldsymbol{\theta}$ se consultaron en la literatura los valores que se han reportado y se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1: Distribuciones a priori seleccionadas con base en los valores reportados en la literatura.

Parámetro	Descripción	Referencia	Valor medio o rango de valores	Distribución a priori
β_h	Probabilidad de transmisión de vector a humano	[22]	0.99 [0.6,1]	$Beta(5, 2)$
		[23]	0.37	
		[24]	[0.5, 0.8]	
		[25]	0.67 [0.26, 1]	
β_v	Probabilidad de transmisión de humano a vector	[22]	0.6 [0.6,1]	$Beta(5, 2)$
		[23]	0.375	
		[24]	0.37	
b	Número de picaduras	[22]	2.46 [1,3]	$U(0, 4)$
		[23]	1	
		[24]	0.5 or 1	
μ_v	Tasa de muerte y nacimiento de vectores [mes^{-1}]	[23]	2.72	$U(2, 4, 5)$
		[24]	4.28	
		[26]	2.14	
γ	Tasa de recuperación [mes^{-1}]	[22]	[3.7,4.5]	$U(2, 5, 7, 5)$
		[26]	[2,6]	
p	Fracción de infectados que se vuelven asintomáticos	Supuesto		$U(0, 1)$
δ_h	Tasa de recaída [mes^{-1}]	[8]	0.5	$U(0, 1)$
		[10]	0.66	
κ	Fracción de transmisión de humano asintomático a vector	Supuesto		$Beta(2, 5)$
N_v	Número total de vectores	Supuesto	2 a 4.5 veces el número total de humanos	$U(11740, 26415)$
μ_h	Tasa de muerte y nacimiento de humanos [mes^{-1}]	[27]	$\frac{1}{75 \times 12} \approx 0,0011$	Valor fijo
N_h	Número total de humanos	[10]	5870	Valor fijo

En las distribuciones Beta $Beta(\alpha, \beta)$, α y β son parámetros de forma, mientras que en las distribuciones uniformes $U(a, b)$, a y b son los valores mínimo y máximo.

La inferencia Bayesiana se basa en la *distribución a posteriori*, por el teorema de Bayes la distribución a posteriori esta definida por (17):

$$P(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) = \frac{P(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{\theta})}{P(\mathbf{y})} \quad (17)$$

donde

- $P(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$ es la distribución a posteriori de $\boldsymbol{\theta}$ dada un conjunto de observaciones Y .
- $P(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})$ es la distribución de las observaciones \mathbf{Y} para un valor específico del vector $\boldsymbol{\theta}$.
- $P(\boldsymbol{\theta})$ distribución a priori.
- $P(\mathbf{y})$ es una constante de normalización $\int_p P(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{\theta}$.

Note que la expresión (17) esta bien definida si $P(\mathbf{y}) \neq 0$. $P(\mathbf{y})$ es constante, por tanto podemos reescribir (17) como (18):

$$P(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) \propto P(\mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{\theta}). \quad (18)$$

En la inferencia Bayesiana es necesario obtener integrales que involucran la distribución a posteriori. Un ejemplo es la media de la distribución a posteriori.

$$E[\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}] = \int \dots \int \boldsymbol{\theta} P(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y}) d\boldsymbol{\theta}. \quad (19)$$

Sin embargo, en la gran mayoría de los casos, la integral de la marginalización (19) no puede resolverse de forma analítica debido a la complejidad de $P(\boldsymbol{\theta} | \mathbf{y})$ y alta dimensionalidad de $\boldsymbol{\theta}$. En la práctica, se usan cadenas de Markov Chain Monte Carlo (MCMC por sus siglas en inglés) para aproximar la distribución a posteriori [28].

Las cadenas de Markov se conforman de valores muestrales de la distribución a posteriori y se obtienen a partir del uso de algoritmos de muestreo, los más empleados son el muestreador de Gibbs, el algoritmo de muestreo Metropolis-Hastings y Hamiltoniano Monte Carlo (HMC). El proceso de muestrear la distribución a posteriori, es un proceso iterativo que continua hasta que la cadena de Markov converja. Es común que durante un período inicial los valores muestreados estén alejados del valor verdadero, por lo que se recomienda descartar este período inicial. A este período se le conoce como “período de quemado”.

4.5. Estimador de Bayes

Una vez obtenida la muestra de los parámetros de interés, para realizar inferencias se utiliza el estimador de Bayes T^B , definido como la solución de 20.

$$T^B = \underset{T}{\text{mín}} E[L(T, \boldsymbol{\theta})] = \underset{T}{\text{mín}} \left[\int L(T, \boldsymbol{\theta}) f(\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{\theta} \right]. \quad (20)$$

con $L(T, \boldsymbol{\theta}) = (T - \boldsymbol{\theta})^2$ la función de pérdida cuadrática, se obtiene el mínimo en $T = E[\boldsymbol{\theta}]$, es decir el estimador obtenido es el valor medio $T^B = E(\boldsymbol{\theta})$.

4.6. Intervalos creíbles de alta densidad

Para la estimación por intervalo se utilizó el método de intervalos de alta densidad a posteriori (HPD, por sus siglas en inglés Highest Posterior Density). Un HPD conserva los valores más probables de la distribución a posteriori a un porcentaje deseado. Los HPD al 95 % contienen los valores de θ tales que $p(\theta | \mathbf{y}) > W$, donde W satisface $\int_{x:p(\theta|\mathbf{y})>W} d\theta p(\theta | \mathbf{y}) = 0,95$ [29]. Se prefieren los intervalos HPD sobre el método de percentiles debido a que los HPD son los intervalos de menor longitud entre todos los posibles intervalos de probabilidad para un nivel de credibilidad deseado.

4.7. Método Hamiltoniano de Monte Carlo

El método de Hamiltoniano Monte Carlo (HMC) ha demostrado ser un muestreador más eficiente que el muestreador de Gibbs, el algoritmo de muestreo Metropolis-Hastings. Su tasa de aceptación es aproximadamente el doble de la tasa de aceptación del algoritmo de Metropolis-Hastings [30]. Esta técnica de muestreo se basa en la mecánica Hamiltoniana para explorar distribuciones de alta dimensionalidad. El estudio detallado de esta técnica avanzada está fuera del alcance de este trabajo; para una comprensión más profunda de HMC, se recomienda consultar el trabajo de Betancourt [31].

4.8. Convergencia de Cadenas

- Método de inspección visual: Este método se basa en la observación empírica de las cadenas de Markov para verificar que sus trazas estén adecuadamente mezcladas. Es común que esta mezcla produzca visualmente una figura similar a una “oruga”.
- Diagnóstico de Gelman-Rubin: Este diagnóstico es uno de los más populares para determinar la convergencia de las cadenas de Markov. Se basa en comparar la varianza dentro de las cadenas con la varianza entre cadenas utilizando el cociente \hat{R} , también conocido como Rhat debido al acento circunflejo de R. En la práctica, se considera que las cadenas convergen si $\hat{R} \leq 1,1$, mientras que si $\hat{R} \geq 1,1$, al menos una de las cadenas aún no ha convergido [32].

4.9. Número reproductivo básico

El número reproductivo básico R_0 (12) del modelo (11) se estimará utilizando las distribuciones a posteriori de los parámetros, para lo cual se operan de forma ordenada los estados de las cadenas de Markov de los parámetros usando la ecuación (12), así como su propiedad de invarianza. Además, se evaluará la convergencia de la cadena R_0 .

4.10. Software estadístico

En este trabajo se utilizó el lenguaje de programación Julia [33] con el paquete de análisis Bayesiano Turing.jl [34] para estimar los parámetros. Se ejecutaron tres cadenas de Markov, cada una inicializada de manera aleatoria y con 20,000 iteraciones. Las primeras 1,000 iteraciones de cada cadena se descartaron como periodo de quemado, resultando en una muestra final de 19,000 valores por cadena. El diagnóstico de convergencia de Gelman-Rubin se realizó por defecto utilizando el paquete Turing.

Se utilizó la paquetería MCMChains.jl [35] para estimar los intervalos de HPD al 95 %.

5 Resultados

De la muestra posterior de cada parámetro se obtienen los valores de media y mediana muestral, intervalos de HPD del 95 % y Rhat. La estimación Bayesiana se resume en la Tabla 2.

Tabla 2: Resultados de la estimación Bayesiana.

Parámetro	Media	Mediana	Intervalos de HPD del 95 %	Rhat
β_h	0.72	0.74	(0.46, 0.97)	1.00
β_v	0.75	0.76	(0.49, 0.98)	1.00
b	3.13	3.15	(2.29, 4.00)	1.00
μ_v [mes ⁻¹]	3.42	3.49	(2.08, 4.44)	1.00
γ [mes ⁻¹]	4.44	4.32	(2.50, 6.63)	1.00
p	0.65	0.66	(0.41, 0.84)	1.00
δ_h [mes ⁻¹]	0.75	0.79	(0.38, 1.00)	1.00
κ	0.24	0.21	(0.01, 0.52)	1.00
N_v	19183	19179	(12589, 26358)	1.00
R_0	2.61	2.46	(1.66, 3.80)	1.00

Las trazas de las cadenas de Markov de los parámetros del modelo (11) y del R_0 se muestran en la Tabla 3, las cuales se observan mezcladas y no presenta patrones “extraños”. Más aún, en la Tabla 2 los valores de \hat{R} son menores a 1.1, por lo tanto las cadenas presentadas convergen.

Las probabilidades de transmisión de vector a humano β_h y de humano a vector β_v tienen medias de 0.72 y 0.75 (medianas de 0.74 y 0.76), respectivamente, con intervalos de credibilidad del 95 % de (0.46, 0.97) y (0.49, 0.98). Esto representa probabilidades altas de transmisión. Nuestras estimaciones son consistentes con lo publicado en [22, 24, 25], que se muestran en la Tabla 1.

La media y mediana del número de picaduras b de los vectores son de 3.13 y 3.15, respectivamente, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (2.29, 4.00). La estimación de

b es consistente con lo publicado en [22], que se muestra en la Tabla 1.

La media y la mediana de la tasa de muerte y nacimiento de vectores μ_v son de 3.42 y 3.49 mes^{-1} , respectivamente, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (2.08, 4.44), lo que equivale a un periodo de vida de los vectores de 6.7 a 14.4 días. Esta estimación es consistente con el hecho de que el periodo de vida de un mosquito adulto puede ser de aproximadamente 8 a 28 días [36, 37]. Se estima una media del número total de vectores N_v de 19183, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (12589, 26358).

La tasa de recuperación γ tiene una media y mediana de 4.44 y 4.32, respectivamente, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (2.50, 6.63), lo que corresponde a un periodo de recuperación de 4.5 a 12 días. Esta estimación es consistente con lo publicado en [22], que se muestra en la Tabla 1. La tasa de recaídas δ_h muestra una media y mediana de 0.75 y 0.79 mes^{-1} , respectivamente, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (0.38, 1.00), lo que equivale a un periodo de recaída de 30 a 77.7 días. Nuestras estimaciones son consistentes con lo reportado en [10], que señala que las recaídas se presentan después de un mes de la primera infección.

La media y la mediana de la fracción de infectados que se vuelven asintomáticos p son 0.65 y 0.66, respectivamente, con un intervalo de credibilidad del 95 % que varía entre una fracción baja de 0.41 y una alta de 0.84. La media y la mediana de la fracción de transmisión de humano asintomático a vector κ son de 0.24 y 0.21, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (0.01, 0.52), que va de una fracción casi nula a moderada. Esto podría sugerir que la fracción de transmisión de humanos asintomáticos a vectores no desempeña un papel relevante en la propagación de la enfermedad.

En la Figura 1 se muestra el ajuste del modelo a la curva de humanos infectados con chikungunya, así como la simulación de las cuatro clases: hospederos susceptibles S_h , hospederos infectados I_h , hospederos asintomáticos A_h y vectores infectados I_v . Los puntos sólidos representan los datos obtenidos por [10] que se han suavizado por el modelo de suavizamiento exponencial con $\alpha = 0,7$.

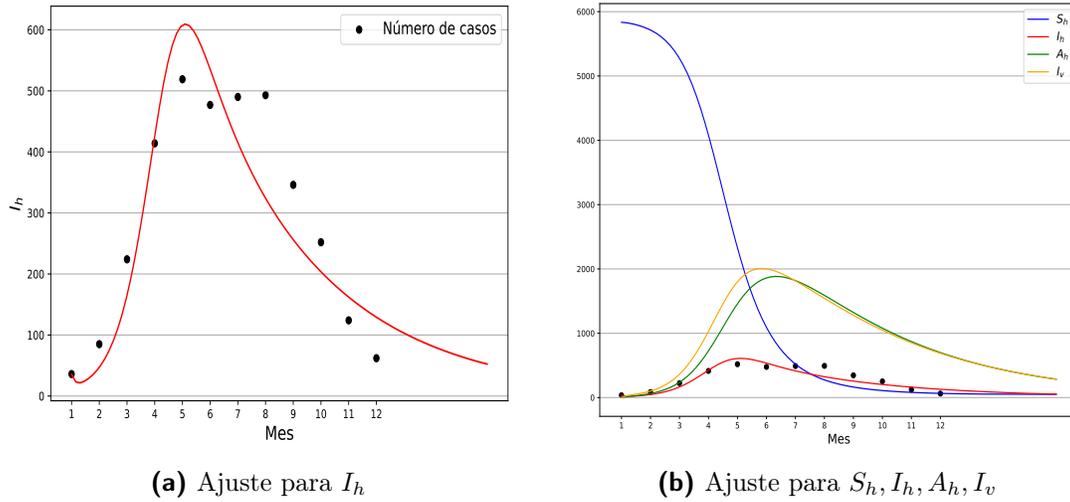
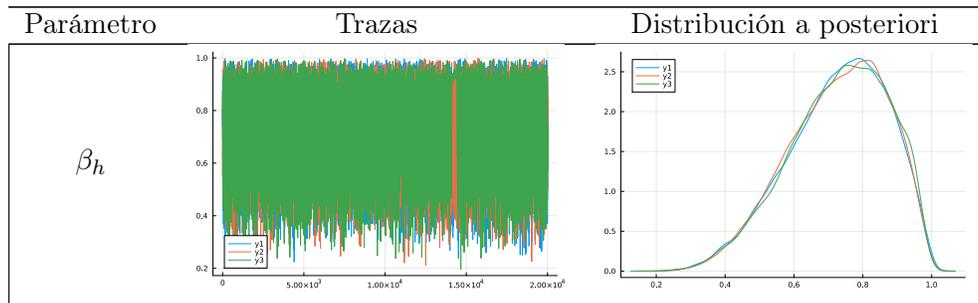
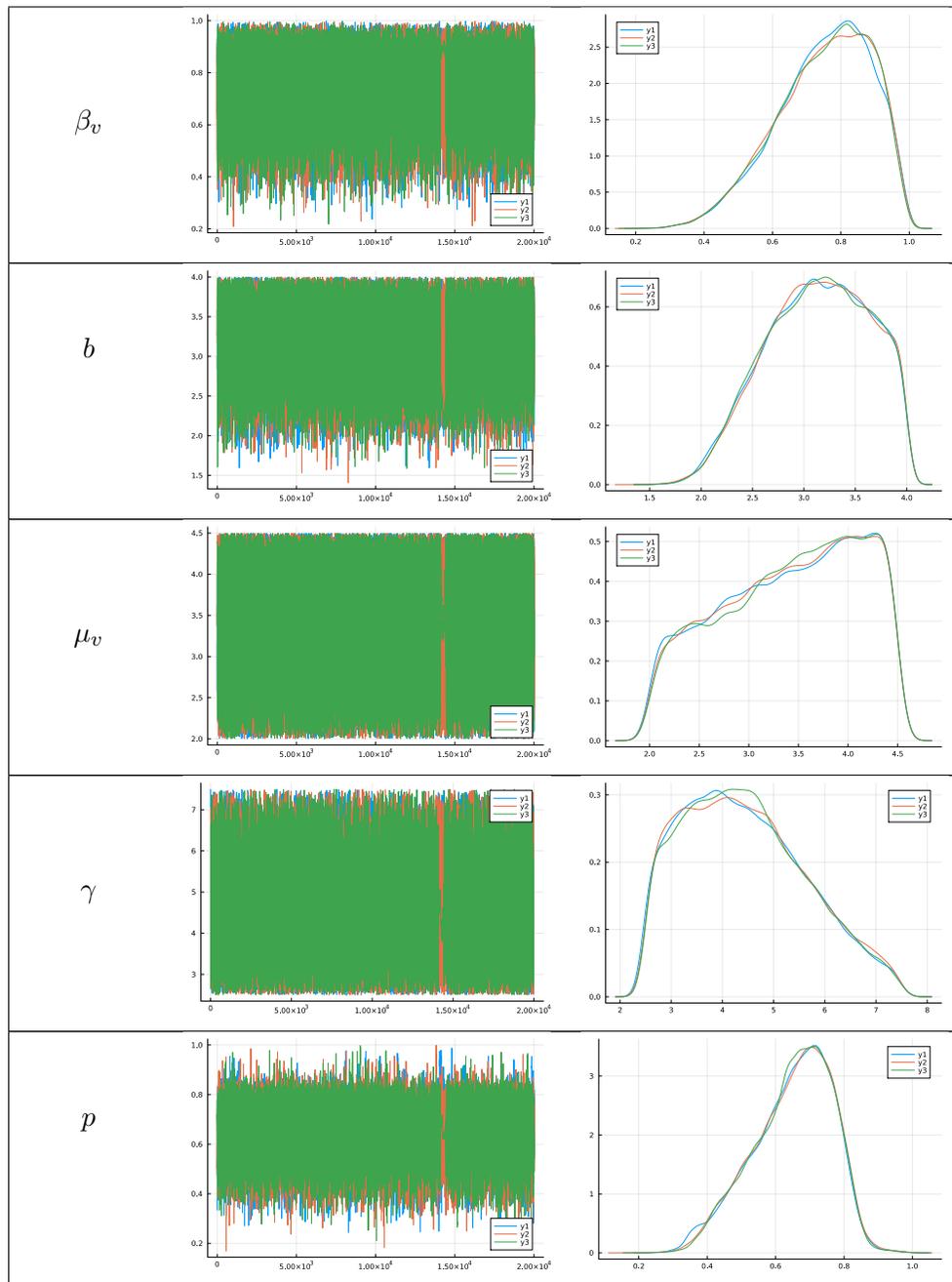


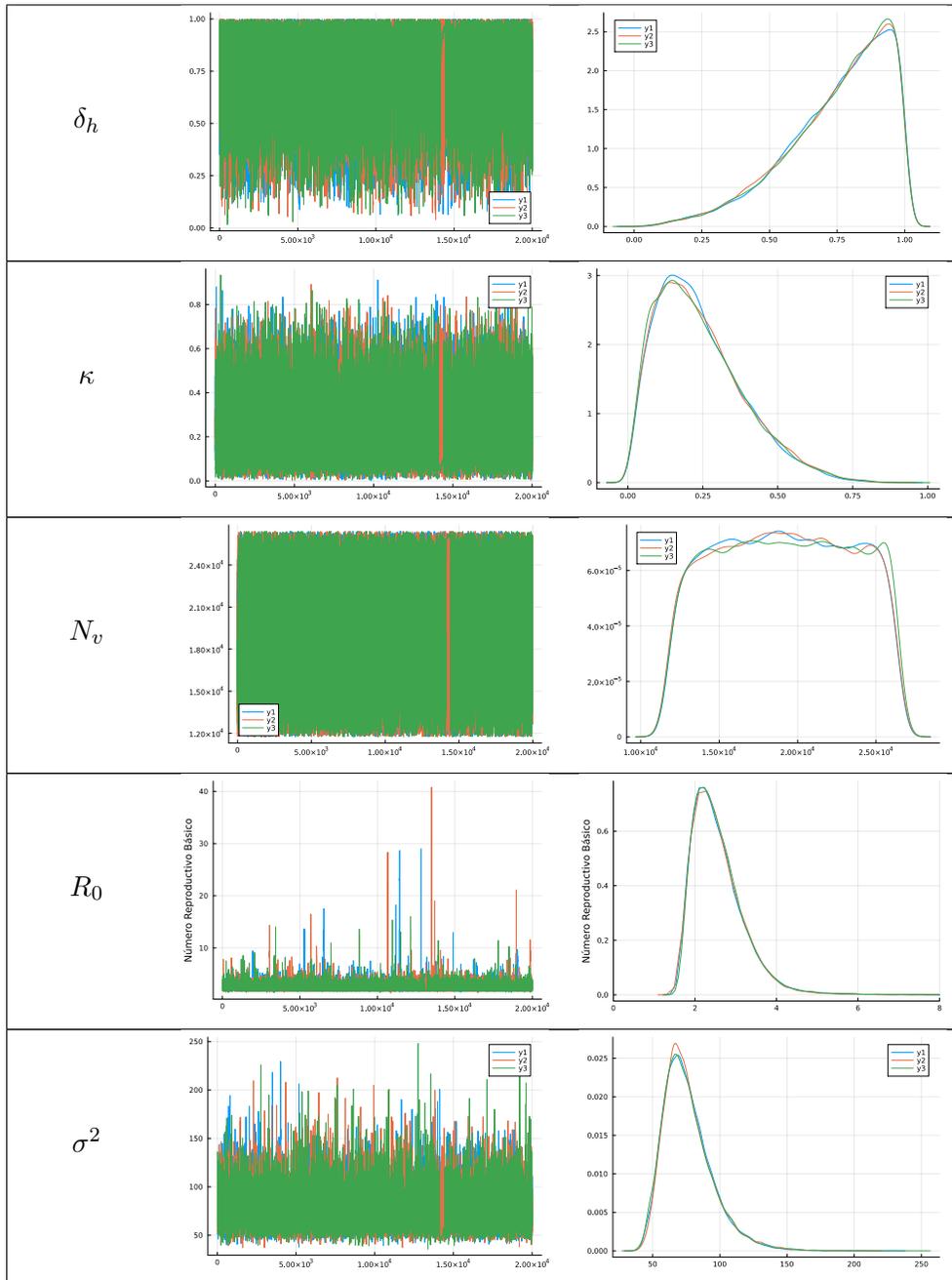
Figura 1: Modelo (11) ajustado usando el valor medio de los parámetros.

Finalmente, el número reproductivo básico R_0 presentó una media de 2.61 y una mediana de 2.46, con un intervalo de credibilidad del 95 % de (1.66, 3.80). En [38], se estima que el R_0 es de 4.1, con un intervalo de confianza del 95 % que va de 1.50 a 6.60 para los vectores *Aedes aegypti*. Esto sugiere que el brote de chikungunya en Acapulco se propagó rápidamente. Nuestras estimaciones son consistentes con lo publicado en [38].

Tabla 3: Trazas y distribuciones a posteriori de los parámetros y el número reproductivo básico del modelo de chikungunya (11).







6 Conclusiones

En este trabajo, presentamos una revisión de modelos recientemente desarrollados para el virus del chikungunya. Uno de estos modelos incorpora dos estructuras de edad, mientras que el otro es un caso particular, independiente de la edad. [Para este último modelo, se estimó el número reproductivo básico \$R_0\$ del brote de chikungunya en Acapulco, con el que alcanzamos el objetivo planteado en este trabajo.](#)

[El valor estimado de \$R_0\$ mostró la capacidad del virus para expandirse rápidamente, lo cual fue consistente con estudios previos que indicaron una rápida expansión del chikungunya. La fracción de transmisión de humanos asintomáticos a vectores varió de baja a moderada, lo que podría haber sugerido que esta fracción no desempeñó un papel relevante en la propagación de la enfermedad. La estimación de los parámetros del brote en Acapulco sugirió que la transmisión del virus fue alta tanto de vectores a humanos como de humanos a vectores, lo que indicó un alto riesgo de propagación. El elevado número de picaduras contribuyó a la propagación continua del virus.](#)

[Estos resultados subrayan la importancia de implementar medidas de control y prevención contra las picaduras de mosquitos. Para ello, se recomienda eliminar las aguas estancadas, realizar fumigaciones y utilizar mosquiteros en zonas residenciales. De este modo, se puede evitar la reproducción de estos mosquitos, el contagio de la enfermedad y la propagación del virus.](#)

[El enfoque Bayesiano ofrece ventajas en el trabajo: permite incorporar información previa mediante distribuciones a priori, lo que mejora la precisión de las estimaciones. Además, facilita la obtención de intervalos de credibilidad, proporcionando no solo valores puntuales, sino también un rango de valores en el cual se encuentra un parámetro con una cierta probabilidad.](#)

Referencias

- [1] Folashade B Agosto, Shamise Easley, Kenneth Freeman, and Madison Thomas. Mathematical model of three age-structured transmission dynamics of chikungunya virus. *Computational and mathematical methods in medicine*, 2016(1):4320514, 2016.
- [2] David M Vu, Donald Jungkind, and Angelle Desiree LaBeaud. Chikungunya virus. *Clinics in laboratory medicine*, 37(2):371–382, 2017.
- [3] Braira Wahid, Amjad Ali, Shazia Rafique, and Muhammad Idrees. Global expansion of chikungunya virus: mapping the 64-year history. *International Journal of Infectious Diseases*, 58:69–76, 2017.
- [4] Roberto Carlos Rivera-Ávila. Fiebre chikungunya en México: caso confirmado y apuntes para la respuesta epidemiológica. *Salud pública de México*, 56(4):402–404, 2014.

- [5] Carolina Garay-Morán, Juan Francisco Román-Pedroza, Irma López-Martínez, José Cruz Rodríguez-Martínez, Cuitláhuac Ruiz-Matus, Pablo Kuri-Morales, and José Alberto Díaz-Quinonez. Caracterización clínica y epidemiológica de fiebre Chikungunya en México. *Revista Panamericana de Salud Pública*, 41:e58, 2017.
- [6] Nina Méndez, Luis Baeza-Herrera, Rafael Ojeda-Baranda, Oswaldo Huchim-Lara, and Salvador Gómez-Carro. Perfil clinicoepidemiológico de la infección por Chikungunya en casos hospitalarios atendidos en 2015 en Mérida, México. *Revista Panamericana de Salud Pública*, 41:e91, 2018.
- [7] Fabrice Simon, Emilie Javelle, Manuela Oliver, Isabelle Leparç-Goffart, and Catherine Marimoutou. Chikungunya virus infection. *Current infectious disease reports*, 13:218–228, 2011.
- [8] Elisabeth Couturier, Francis Guillemin, Marie Mura, Lucie Léon, Jean-Marc Virion, Marie-José Letort, Henriette De Valk, Fabrice Simon, and Véronique Vaillant. Impaired quality of life after Chikungunya virus infection: a 2-year follow-up study. *Rheumatology*, 51(7):1315–1322, 2012.
- [9] Frederik Staikowsky, Karin Le Roux, Isabelle Schuffenecker, Philippe Laurent, Philippe Grivard, A Develay, and Alain Michault. Retrospective survey of Chikungunya disease in Reunion Island hospital staff. *Epidemiology & Infection*, 136(2):196–206, 2008.
- [10] Ixtac Xochitl de La Cruz-Castro, Elizabeth Nava-Aguilera, Arcadio Morales-Pérez, Ángel Francisco Betanzos-Reyes, Miguel Flores-Moreno, Liliana Morales-Nava, Alejandro Balanzar-Martínez, Felipe René Serrano-de Los Santos, and Neil Andersson. Factors associated with chikungunya relapse in Acapulco, Mexico: a cross-sectional study. *Vector-Borne and Zoonotic Diseases*, 20(10):782–787, 2020.
- [11] P. A. Mac, P. E. Airiohuodion, R. Velayudhan, et al. Antibody seropositivity and endemicity of chikungunya and Zika viruses in Nigeria. *Animal Diseases*, 3(7), 2023.
- [12] María Guadalupe Vázquez-Peña, Cruz Vargas-De-León, and Jorge Velázquez-Castro. Global stability for a mosquito-borne disease model with continuous-time age-structure in the susceptible and relapsed host classes. *Submitted to Mathematical Biosciences and Engineering*, 21(11):7582–7600, 2024.
- [13] María Guadalupe Vázquez-Peña, Cruz Vargas-De-León, Jorge Fernando Camacho-Pérez, and Jorge Velázquez-Castro. Analysis and bayesian estimation of a model for Chikungunya dynamics with relapse: An outbreak in Acapulco, Mexico. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 20(10):18123–18145, 2023.
- [14] A. Korobeinikov. Lyapunov functions and global properties for SEIR and SEIS epidemic models. *Mathematical Medicine and Biology*, 21(2):75–83, 2004.

- [15] A. Korobeinikov. Global properties of basic virus dynamics models. *Bulletin of Mathematical Biology*, 66(4):879–883, 2004.
- [16] C. Vargas-De-León and J. A. Castro-Hernández. Local and global stability of host-vector disease models. *Foro-Red-Mat: Revista Electrónica de Contenido Matemático*, 25:1–9, 2008.
- [17] C. Vargas-De-León. Global analysis of a delayed vector-bias model for malaria transmission with incubation period in mosquitoes. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 9(1):165–174, 2012.
- [18] Cruz Vargas-De-León. On the global stability of infectious diseases models with relapse. *Abstraction and Application Magazine*, 9, 2014.
- [19] Cruz Vargas-De-León, Lourdes Esteva, and Andrei Korobeinikov. Age-dependency in host-vector models: The global analysis. *Applied Mathematics and Computation*, 243:969–981, 2014.
- [20] Cruz Vargas-De-León. Global stability properties of age-dependent epidemic models with varying rates of recurrence. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*, 39(8):2057–2064, 2016.
- [21] Pauline Van den Driessche and James Watmough. Reproduction numbers and sub-threshold endemic equilibria for compartmental models of disease transmission. *Mathematical biosciences*, 180(1-2):29–48, 2002.
- [22] Hamadjam Abboubakar, Albert Kouchéré Guidzavaï, Joseph Yangla, Irépran Dama-koka, and Ruben Mouangue. Mathematical modeling and projections of a vector-borne disease with optimal control strategies: A case study of the Chikungunya in Chad. *Chaos, Solitons & Fractals*, 150:111197, 2021.
- [23] Yves Dumont and Frederic Chiroleu. Vector control for the Chikungunya disease. *Mathematical Biosciences & Engineering*, 7(2):313–345, 2010.
- [24] Yves Dumont, Frédéric Chiroleu, and Caroline Domerg. On a temporal model for the Chikungunya disease: modeling, theory and numerics. *Mathematical biosciences*, 213(1):80–91, 2008.
- [25] Diego Ruiz-Moreno, Irma Sanchez Vargas, Ken E Olson, and Laura C Harrington. Modeling dynamic introduction of Chikungunya virus in the United States. *PLoS Neglected Tropical Diseases*, 6(11):e1918, 2012.
- [26] Gilberto C González-Parra, Diego F Aranda, Benito Chen-Charpentier, Miguel Díaz-Rodríguez, and Jaime E Castellanos. Mathematical modeling and characterization of the spread of chikungunya in Colombia. *Mathematical and Computational Applications*, 24(1):6, 2019.

- [27] Consejo Nacional de Población. Indicadores demográficos de México de 1950 a 2050 (Spanish) [National Population Council, Demographic Indicators of Mexico from 1950 to 2050], 2022.
- [28] Andrew Gelman, John B. Carlin, Hal S. Stern, and Donald B. Rubin. *Bayesian Data Analysis*. Chapman and Hall/CRC, New York, 1995.
- [29] J.K. Kruschke. *Doing Bayesian Data Analysis: A Tutorial with R, JAGS, and Stan*. Academic Press. Academic Press, 2015.
- [30] M. A. Rodríguez-Parra, C. Vargas-De-León, F. Godinez-Jaimes, and C. Martínez-Lázaro. Bayesian estimation of parameters in viral dynamics models with antiviral effect of interferons in a cell culture. *Mathematical Biosciences and Engineering*, 20:11033–11062, 2023.
- [31] Michael Betancourt. *A Conceptual Introduction to Hamiltonian Monte Carlo*, 2017.
- [32] Aki Vehtari, Andrew Gelman, Daniel Simpson, Bob Carpenter, and Paul-Christian Bürkner. Rank-Normalization, Folding, and Localization: An Improved \hat{R} for Assessing Convergence of MCMC (with Discussion). *Bayesian Analysis*, 16:1–70, 2021.
- [33] Jeff Bezanson, Alan Edelman, Stefan Karpinski, and Viral B. Shah. Julia: A fresh approach to numerical computing. *SIAM Review*, 59:65–98, 2017.
- [34] He Ge, Kun Xu, and Zoubin Ghahramani. Turing: a language for flexible probabilistic inference. In *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, pages 1682–1690. PMLR, 2018.
- [35] Cameron Pfiffer, David Widmann, Martin Trapp, Rob J Goedman, Michael Krabbe Borregaard, Rik Huijzer, Seth Axen, Hong Ge, Kai Xu, dfish, Tor Erlend Fjelde, Andreas Noack, PaulinaMartin96, Chris Elrod, Jeremiah, Julia TagBot, Matt Karikomi, Hessam Mehr, Xianda Sun, and Will Tebbutt. `Turinglang/mcmcchains.jl: v6.0.6`. *Zenodo*, v6.0.6, 2024.
- [36] V. M. Alvarado-Castro, C. Vargas-De-León, S. Paredes-Solís, et al. The influence of gender and temephos exposure on community participation in dengue prevention: a compartmental mathematical model. *BMC Infectious Diseases*, 24(1):463, 2024.
- [37] Graham V. Gill and Nick Beeching. *Tropical Medicine: Lecture Notes*. Wiley, Oxford, 7th edition, 2014.
- [38] N. Haider, F. Vairo, G. Ippolito, A. Zumla, and R. A. Kock. Basic reproduction number of Chikungunya virus transmitted by Aedes mosquitoes. *Emerging Infectious Diseases*, 26(10):2429–2431, 2020.

Numerical Turing Patterns Formation on 3D Surfaces with a Linear Finite Element Method

David I. González Mena¹ and L. Héctor Juárez Valencia*¹

¹Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa

Abstract

The purpose of this article is the numerical generation of Turing like patterns on 3D bounded surfaces, based on the analysis of Turing instability in certain types of reaction-diffusion systems in planar regions. We first include a well known 2D-study and analysis of these systems that yield the mathematical conditions under which spatial patterns arise, and which is based on temporal solutions where the classical Laplace diffusion operator is considered. Then, we extend the numerical study to 3D surfaces, employing the Laplace-Beltrami operator to simulate diffusion while keeping the same reaction terms, thus generating similar Turing patterns. The solutions to the involved systems will be calculated numerically using a semi-implicit time discretization in combination with a linear finite element method for spatial discretization using triangular meshes. Details about the numerical implementation are provided for clearness to a broader audience.

Keywords. Turing pattern; 3D surfaces; Laplace-Beltrami operator; reaction-diffusion; finite element method.

1 Introduction

Reaction-diffusion systems are mathematical models that allow us to describe how the concentration of one or more substances distributed in a medium changes under the influence of two physical processes: a *chemical reaction*, which transform the substances into each other, and *diffusion*, which causes the substances to spread in the medium. Applications for these systems have been found in a wide range of scientific and technological areas, from biology to physics, as well as chemistry, and even in the social sciences.

A fascinating aspect of a great variety of reaction-diffusion systems is their ability to generate spatio-temporal patterns from the solution of their governing equations. These

*hect@xanum.uam.mx

patterns, such as those studied by Turing in 1952 (see [22]), not only reveal ordered structures in biological systems, such as the models of morphogenesis that explain how complex patterns can form on an animal skin, like spots on a leopard or stripes on a zebra, but can also be found in more abstract contexts, such as in the distribution of resources in complex networks as well as in the organization of neural patterns in the brain.

The adaptability and versatility of reaction-diffusion systems have allowed these models to be applied to more complex problems that require an analysis similar to that used in the study of Turing patterns. For example, they have been used to model tumour growth, cell organization in tissues, and ecosystem dynamics. The ability of these systems to capture both the complexity of local dynamics and the global interaction within a system makes them valuable tools in scientific research.

In this work we explore the numerical generation of Turing patterns on three dimensional surfaces using as a guideline the well known conditions that arise from the analysis of reaction-diffusion systems on planar regions. Several numerical schemes have been applied to solve numerically the reaction-diffusion system on surfaces. For instance, the finite element method is employed in [9], while a lifted local Galerkin method on implicit surfaces is proposed in [24], a finite difference method has been introduced in [8], and mesh-free kernel method like the ration basis function (RBF) is proposed in [20]. In this work we aim to introduce with some detail a simple but effective scheme based on a linear finite element method for space discretization combined with a semi-implicit (some time named IMPEX) Euler time discretization. It is applied directly on the discrete surface in Cartesian coordinates and yield accurate results in an efficient way, as shown with some numerical examples.

2 Mechanism for Turing pattern formation on planar regions

The model proposed by Alan Turing to describe patterns in nature was a model based on reaction-diffusion systems. Turing's main idea lies in the following sentence:

"A system in a stable state can be guided to an unstable state through diffusion, and in that state, the patterns will appear."

The general form of reaction-diffusion systems that allow generating spatial patterns through their temporal solutions is the following:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D_u \nabla^2 \mathbf{u} + \gamma f(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = D_v \nabla^2 \mathbf{v} + \gamma g(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (2)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \partial \Omega, \quad (3)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4)$$

where ∇^2 is the **Laplace operator** and $\gamma > 0$ is known as **scale factor** that determines the size and the complexity of the patterns generated by the Turing conditions, as it will be shown later. Functions $u(\mathbf{x}, t)$, $v(\mathbf{x}, t)$ represent the concentrations of two substances mixing in a medium $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ at time t whose initial concentrations are given by (4), respectively. The diffusion coefficients $D_u, D_v > 0$ are assumed constant, and $\hat{\mathbf{n}}$ denotes the outer unit normal vector to the boundary $\partial\Omega$ of Ω . Zero flow conditions (3) are introduced for open surfaces ($\partial\Omega \neq \emptyset$) to ensure pattern formation due to self-organization only, avoiding the influence of external forces.

2.1 Turing conditions for pattern formation

Turing conditions are those that ensure the generation of spatial patterns from the temporal solutions of the reaction-diffusion systems (1-4), and they can be derived from Turing's idea already expressed before. First, under the absence of diffusion, $D_u = D_v = 0$, we assume the existence of an equilibrium point $\mathbf{w}^* = (u^*, v^*)^T$ and linearize the system (1-2) around $\mathbf{w} = (u, v)^T$:

$$\dot{\mathbf{w}} \approx \gamma \mathbb{J} (\mathbf{w} - \mathbf{w}^*) \quad (5)$$

with

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} f_u(\mathbf{w}^*) & f_v(\mathbf{w}^*) \\ g_u(\mathbf{w}^*) & g_v(\mathbf{w}^*) \end{pmatrix}.$$

By setting $\mathbf{z} = \mathbf{w} - \mathbf{w}^*$ and assuming equality in (5) we have $\dot{\mathbf{z}} = \gamma \mathbb{J} \mathbf{z}$, and then proposing a non trivial solution of (1-4), say $\mathbf{z} = \mathbf{K}e^{\lambda t}$, with \mathbf{K} eigenvector of the Jacobian matrix \mathbb{J} and λ it's associated eigenvalue, we get

$$\lambda = \frac{\gamma}{2} \left[\text{Tr}(\mathbb{J}) \pm \sqrt{[\text{Tr}(\mathbb{J})]^2 - 4 \det(\mathbb{J})} \right]. \quad (6)$$

Since we look for a stable point, then from the Hartman-Grobman theorem ([17], p. 120), ([21], p. 155) we must assume that \mathbf{w}^* is a *hyperbolic equilibrium point*, that is $\text{Re}(\lambda) \neq 0$, and to ensure such stability it is necessary that

$$\text{Tr}(\mathbb{J}) < 0, \quad (7)$$

$$\det(\mathbb{J}) > 0. \quad (8)$$

Thus, obtaining the first conditions. Next, as a second step, diffusion is reintroduced in (1-2), that is $D_u, D_v > 0$, and assuming that $\mathbf{w}^* = (u^*, v^*)^T$ is still an equilibrium point, then it must satisfy $f(\mathbf{w}^*) = g(\mathbf{w}^*) = 0$ and $\nabla^2 u^* = \nabla^2 v^* = 0$. But now, we want that \mathbf{w}^* be an unstable equilibrium point (diffusion destabilize the system). To derive the mathematical condition for this new situation, the following linear system with diffusion is analysed.

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbb{D} \nabla^2 \mathbf{z} + \gamma \mathbb{J} \mathbf{z}, \quad (9)$$

with $\nabla^2 \mathbf{z} = \nabla^2(\mathbf{w} - \mathbf{w}^*)$ and $\mathbb{D} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix}$. This time we consider a separated solution

$$z(\mathbf{x}, t) = \mathbf{Z}(\mathbf{x}) T(t), \quad (10)$$

where $\mathbf{Z}(\mathbf{x}) = (Z_1(\mathbf{x}), Z_2(\mathbf{x}))^T$ is a vectorial function in \mathbb{R}^2 and $T(t)$ is a scalar function. From (9) we obtain

$$T(t) = C e^{\lambda t}, \quad C \in \mathbb{R}, \quad (11)$$

$$\nabla^2 \mathbf{Z} + \mathbb{D}^{-1}(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}_2) \mathbf{Z} = \mathbf{0}. \quad (12)$$

It is worth mentioning that the constant λ in (11) is not the same as the one in (6), but it plays an equivalent role, as will be see below. We denote by k^2 the eigenvalues¹ of matrix $\mathbf{A} = \mathbb{D}^{-1}(\gamma \mathbb{J} - \lambda \mathbb{I}_2)$. If $\mathbf{Z}_k(\mathbf{x})$ is the associated eigenfunction, then from (12) it must solve the following *Helmholtz equation* with zero-flux at the boundary

$$\nabla^2 \mathbf{Z}_k + k^2 \mathbf{Z}_k = \mathbf{0}, \quad (13)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{Z}_k = \mathbf{0}. \quad (14)$$

Solutions \mathbf{Z}_k are commonly oscillatory and depend exclusively on system's geometry. For bounded domains, values k are discrete and can be enumerated, they represent the oscillatory mode of the solution and are called the **wave numbers**. Therefore, $\mathbf{z}_k(\mathbf{x}, t) = e^{\lambda_k t} \mathbf{Z}_k(\mathbf{x})$ is a solution of (9) with zero flux on the boundary, and

$$\lambda_k = \frac{[\gamma \text{Tr}(\mathbb{J}) - k^2 \text{Tr}(\mathbb{D})] \pm \sqrt{[k^2 \text{Tr}(\mathbb{D}) - \gamma \text{Tr}(\mathbb{J})]^2 - 4h(k^2)}}{2}, \quad (15)$$

with

$$h(k^2) = \det(\mathbb{D})k^4 - \gamma(D_v f_u + D_u g_v)k^2 + \gamma^2 \det(\mathbb{J}). \quad (16)$$

The roots of the function $h(k^2)$ determine an interval (k_1^2, k_2^2) , and any **wave number** k^2 inside this interval will allow the generation of spatial patterns in the medium Ω . Those roots are positive and are given by

$$k_1^2, k_2^2 = \frac{\gamma}{2D_v} \left[(d f_u + g_v) \mp \sqrt{(d f_u + g_v)^2 - 4d \det(\mathbb{J})} \right]. \quad (17)$$

where $d = D_v/D_u > 0$ is the diffusivity ratio. This means that only the modes with wave number k between these two values are able to produce spatial patterns, all other modes, out this range, have an exponential decay in time and eventually vanish. Thus, the

¹The squared exponent is for algebraic convenience when performing calculations.

equilibrium point \mathbf{w}^* is unstable if $\text{Re}[\lambda_k] > 0$ for some $k^2 \in (k_1^2, k_2^2)$. This occurs when $h(k^2) < 0$, and from (16) and (17) the following inequalities must be satisfied

$$d f_{\mathbf{u}} + g_{\mathbf{v}} > 0, \quad (18)$$

$$(d f_{\mathbf{u}} + g_{\mathbf{v}})^2 - 4d \det(\mathbb{J}) > 0, \quad (19)$$

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2. \quad (20)$$

Combining these conditions with (7-8), we obtain the so called **Turing conditions** for pattern generation:

$$f_{\mathbf{u}} + g_{\mathbf{v}} < 0, \quad (21)$$

$$f_{\mathbf{u}} g_{\mathbf{v}} - f_{\mathbf{v}} g_{\mathbf{u}} > 0, \quad (22)$$

$$d f_{\mathbf{u}} + g_{\mathbf{v}} > 0, \quad (23)$$

$$(d f_{\mathbf{u}} + g_{\mathbf{v}})^2 - 4d \det(\mathbb{J}) > 0, \quad (24)$$

$$k_1^2 < k^2 < k_2^2. \quad (25)$$

Furthermore, from these conditions and some simple algebraic calculations, it can be shown that the following must hold: $d > 1$, $f_{\mathbf{u}} > 0$, $g_{\mathbf{v}} < 0$ and $f_{\mathbf{v}} g_{\mathbf{u}} < 0$.

3 Finite element approximation of the Laplace-Beltrami operator

In this part, we will focus on the numerical approximation of the following elliptic equation

$$\alpha \phi - D_{\Sigma} \nabla_{\Sigma}^2 \phi = f, \quad (26)$$

with homogeneous Neumann boundary conditions when the bounded surface Σ is open. Of course if the surface is closed (like an sphere), there are no boundary conditions. In this equation α and D_{Σ} are positive constants, ∇_{Σ}^2 denotes the so called Laplace-Beltrami operator, defined on Σ , and f is a source term. This numerical approximation will be performed by a linear finite element method. This methodology will be the basis, with some minimal adjustments, to numerically solve the reaction-diffusion systems for the generation of Turing patterns on those surfaces, as shown in next sections.

3.1 The Laplace-Beltrami operator (LBO)

The Laplace-Beltrami operator is a generalization of the usual Laplace operator. This operator acts on functions defined on surfaces in the Euclidean space and, more generally, on Riemannian surfaces and manifolds. We will use it for functions defined on three-dimensional surfaces in the Euclidean space \mathbb{R}^3 .

Definición 3.1 Let $\Sigma \subset \mathbb{R}^3$ be a smooth oriented surface, and let $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ be a unit normal vector at \mathbf{x} , exterior to Σ , and $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ a function defined on Σ of class \mathcal{C}^1 . The **tangential gradient** of ϕ at $\mathbf{x} \in \Sigma$ is defined by

$$\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x}) = \nabla\phi(\mathbf{x}) - \langle \nabla\phi(\mathbf{x}), \hat{\mathbf{n}} \rangle \hat{\mathbf{n}} \quad (27)$$

where $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denotes the inner product in \mathbb{R}^3 .

Geometrically, the tangential gradient is the orthogonal projection of the gradient vector $\nabla\phi(\mathbf{x})$ onto the tangent plane at \mathbf{x} with normal vector $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x})$ as shown in figure 1. The projection matrix to the normal vector is $\mathbb{P} = \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}}^T$, and $\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x})$ can also be expressed as:

$$\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x}) = (\mathbb{I} - \mathbb{P})\nabla\phi(\mathbf{x}), \quad (28)$$

where \mathbb{I} represents the identity matrix of size 3×3 and $\mathbb{I} - \mathbb{P}$ is the *complementary orthogonal projection* to \mathbb{P} .

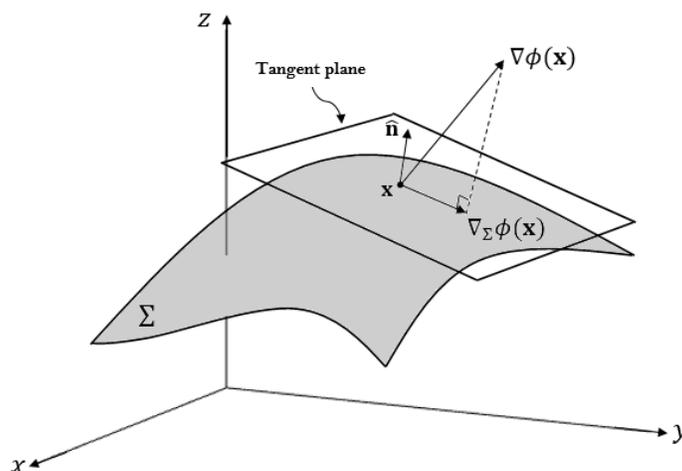


Figure 1: Tangential gradient $\nabla_{\Sigma}\phi(\mathbf{x})$.

Definición 3.2 Let $\phi : \Sigma \subset \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}$ be of class \mathcal{C}^2 . We define the **Laplace-Beltrami operator** of ϕ denoted by $\nabla_{\Sigma}^2\phi$, by

$$\nabla_{\Sigma}^2\phi = \text{div}(\nabla_{\Sigma}\phi), \quad (29)$$

or equivalently, $\nabla_{\Sigma}^2\phi = \nabla_{\Sigma} \cdot \nabla_{\Sigma}\phi$. In many texts, this operator is denoted by $\Delta_{\Sigma}\phi$.

3.2 Weak form of equation (26)

In order to numerically solve the elliptic equation (26) using a finite element method, we must find its weak or variational formulation. It is obtained by multiplying that equation

by a test function v and integrating over the surface Σ . After applying integration by parts we obtain the following problem:

Find $\phi \in \mathcal{L}^2(\Sigma)$ such that, for all $v \in \mathcal{H}^1(\Sigma)$, it satisfies

$$\alpha \int_{\Sigma} \phi v \, d\Sigma + D_{\Sigma} \int_{\Sigma} \nabla_{\Sigma} \phi \cdot \nabla_{\Sigma} v \, d\Sigma = \int_{\Sigma} f v \, d\Sigma, \quad (30)$$

where

$$\mathcal{H}^1(\Sigma) = \left\{ v \in \mathcal{L}^2(\Sigma) : \int_{\Sigma} |\nabla_{\Sigma} v|^2 \, d\Sigma < \infty \right\}$$

and where $d\Sigma$ represents the surface differential.

Note. The integral equation (30) does not include boundary integral terms, because either the surface is closed ($\partial\Sigma = \emptyset$) or it is open with zero-flux boundary conditions. So, the above variational formulation is the same for both cases.

3.2.1 Approximation of the variational problem

To obtain a finite element approximation to the variational problem (30) we use a Ritz-Galerkin approach, where the Hilbert space $\mathcal{H}^1(\Sigma)$ is approximated by a finite-dimensional subspace. One possible way is approximating each function in $\mathcal{H}^1(\Sigma)$ by a continuous piecewise polynomial. One of the most simple approximations is obtained with continuous piecewise polynomials of degree one. So, if we denote by \mathbb{P}_1 the set of polynomials in two variables of degree 1, and we approximate the surface Σ by a triangular mesh \mathcal{T}_h , then $\mathcal{H}^1(\Sigma)$ is approximated by the following finite-dimensional space of piecewise linear functions:

$$H_h = \left\{ v \in \mathcal{C}^0(\widehat{\Sigma}) : v|_T \in \mathbb{P}_1, \forall T \in \mathcal{T}_h \right\}, \quad (31)$$

We denote by \mathcal{V}_h the set of vertices of \mathcal{T}_h and for each vertex (node point) $P \in \mathcal{V}_h$ there is a ‘hat function’, denoted by $\varphi_P \in H_h$, that satisfies the following basic property for each vertex $Q \in \mathcal{V}_h$ (see Figure 2):

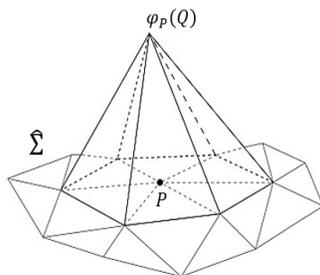


Figure 2: Pyramidal or ‘hat’ function.

$$\varphi_P(Q) = \begin{cases} 1 & \text{if } Q = P, \\ 0 & \text{if } Q \neq P. \end{cases}$$

The set of hat (pyramidal) functions $\beta_h = \{\varphi_P \mid P \in \mathcal{V}_h\}$ form a basis of the finite element space H_h . Furthermore, the dimension N_I of H_h is number of vertex nodes in the triangulation \mathcal{T}_h .

We can now discretize the variational problem (30) as follows: Find $\phi_h \in H_h$ such that

$$\alpha \int_{\hat{\Sigma}} \phi_h v_h d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \phi_h \cdot \nabla_\Sigma v_h d\Sigma = \int_{\hat{\Sigma}} f v_h d\Sigma, \quad \forall v_h \in H_h. \quad (32)$$

It is enough that (32) be satisfied for each basis function φ_P . Furthermore, by expressing $\phi_h \in H_h$ as linear combination of the basis functions $\phi_h(\mathbf{x}) = \sum_{P \in \mathcal{V}_h} \phi_h(P) \varphi_P(\mathbf{x})$, we get

the following reformulation of (32):

$$\sum_{P \in \mathcal{V}_h} \left(\alpha \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_P \varphi_Q d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_P \cdot \nabla_\Sigma \varphi_Q d\Sigma \right) \phi_h(P) = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_Q d\Sigma, \quad \forall Q \in \mathcal{V}_h, \quad (33)$$

which can be expressed in the following form (after enumerating the vertices in the mesh):

Find the values $\phi_i = \phi_h(P_i)$, $i = 1, 2, \dots, N_I$ such that

$$\sum_{i=1}^{N_I} \left(\alpha \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma + D_\Sigma \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_i \cdot \nabla_\Sigma \varphi_j d\Sigma \right) \phi_i = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_j d\Sigma, \quad \forall j = 1, 2, \dots, N_I. \quad (34)$$

Written in matrix form, we obtain

$$(\alpha \mathbb{M} + D_\Sigma \mathbb{K}) \boldsymbol{\Phi} = \mathbf{F}, \quad (35)$$

where $\boldsymbol{\Phi}$ is the vector of unknowns $\{\phi_i\}$, $\mathbb{M} = (M_{ij})$, $\mathbb{K} = (K_{ij})$ and $\mathbf{F} = (F_1, \dots, F_{N_I})^T$, with

$$M_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \varphi_i \varphi_j d\Sigma, \quad (36)$$

$$K_{ij} = \int_{\hat{\Sigma}} \nabla_\Sigma \varphi_i \cdot \nabla_\Sigma \varphi_j d\Sigma, \quad (37)$$

$$F_j = \int_{\hat{\Sigma}} f \varphi_j d\Sigma. \quad (38)$$

\mathbb{M} and \mathbb{K} are called the **mass matrix** and **stiffness matrix**, respectively, and \mathbf{F} is known

as the **load vector**. Since $\widehat{\Sigma} = \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T$, we obtain

$$M_{ij} = \sum_{T \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_T \varphi_i \varphi_j \, dT, \quad (39)$$

$$K_{ij} = \sum_{T \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_T \nabla_T \varphi_i \cdot \nabla_T \varphi_j \, dT \quad (40)$$

where \mathcal{T}_h^{ij} represents the triangular elements containing the adjacent vertices P_i, P_j and ∇_T is the tangential gradient over the triangle T .

3.2.2 Building local basis functions on each element

Let ne be the number of triangular elements in the mesh. For each $e = 1, 2, \dots, ne$, the triangular element $T_e \in \mathcal{T}_h$ has vertices P_1^e, P_2^e, P_3^e , with coordinates $(x_1^e, y_1^e, z_1^e), (x_2^e, y_2^e, z_2^e), (x_3^e, y_3^e, z_3^e)$, respectively. The **connectivity matrix** $\{g(e, \lambda)\}$, $1 \leq e \leq ne$, $1 \leq \lambda \leq 3$, relates local node numbering to the global one. More precisely, the local vertices $\lambda = 1, 2, 3$ of an element T_e have global numbering $i = g(e, 1)$, $j = g(e, 2)$, $k = g(e, 3)$, respectively. So, a basis function φ_i restricted to the element T_e can be denoted by

$$\varphi_\lambda^e(\mathbf{x}) = \varphi_i(\mathbf{x})|_{T_e}, \quad \text{with } i = g(e, \lambda).$$

These local basis function thus have the following properties

1. $\varphi_\lambda^e(x, y, z)$ is a polynomial of degree ≤ 1 on T_e .
2. $\varphi_\lambda^e(x_\mu^e, y_\mu^e, z_\mu^e) = \delta_{\lambda\mu}$, $1 \leq \lambda, \mu \leq 3$.
3. $\varphi_1^e(\mathbf{x}) + \varphi_2^e(\mathbf{x}) + \varphi_3^e(\mathbf{x}) = 1$, $\forall \mathbf{x} = (x, y, z) \in T_e$.

and \mathbf{x} can be expressed as a weighted average of the vertices of the triangle with weights determined by the local basis functions. That is,

$$\mathbf{x} = \varphi_1^e(\mathbf{x}) P_1^e + \varphi_2^e(\mathbf{x}) P_2^e + \varphi_3^e(\mathbf{x}) P_3^e \quad (41)$$

where $P_1^e = (x_1^e, y_1^e, z_1^e)$, $P_2^e = (x_2^e, y_2^e, z_2^e)$ y $P_3^e = (x_3^e, y_3^e, z_3^e)$ are the coordinates of the vertices of triangle T_e .

3.2.3 Reference element and affine transformation

We consider a reference unit triangle \widehat{T} in the coordinates ξ - η and a triangular element $T_e \in \mathcal{T}_h$ in the Cartesian system x - y - z as in Figure 3.

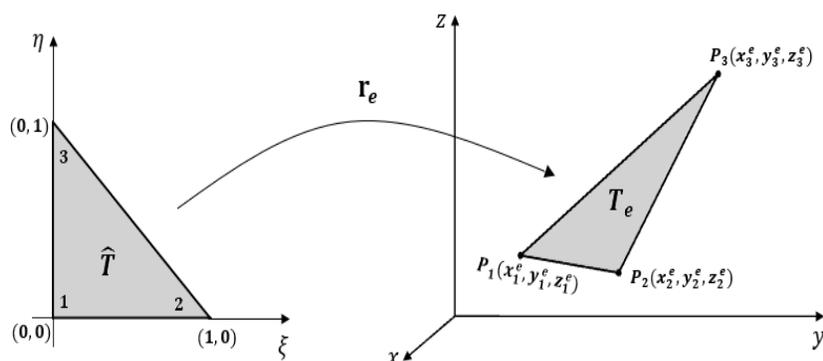


Figure 3: Affine transformation from the reference element \hat{T} to the physical element T_e .

Assuming a counter-clockwise node numbering, the affine transformation $\mathbf{r}_e : \hat{T} \mapsto T_e$ is given by

$$\mathbf{r}_e(\xi, \eta) = \hat{\varphi}_1(\xi, \eta)(x_1^e, y_1^e, z_1^e)^T + \hat{\varphi}_2(\xi, \eta)(x_2^e, y_2^e, z_2^e)^T + \hat{\varphi}_3(\xi, \eta)(x_3^e, y_3^e, z_3^e)^T, \quad (42)$$

where

$$\begin{aligned} \hat{\varphi}_1(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta, \\ \hat{\varphi}_2(\xi, \eta) &= \xi, \\ \hat{\varphi}_3(\xi, \eta) &= \eta. \end{aligned}$$

The Jacobian matrix \mathbb{J}_e of the affine transformation (42) is

$$\mathbb{J}_e = \begin{bmatrix} x_2^e - x_1^e & x_3^e - x_1^e \\ y_2^e - y_1^e & y_3^e - y_1^e \\ z_2^e - z_1^e & z_3^e - z_1^e \end{bmatrix}. \quad (43)$$

The column vectors of this matrix are the fundamental vectors $\mathbf{r}_\xi^e, \mathbf{r}_\eta^e$. This vectors, along the normal vector to the triangular element T_e are:

$$\mathbf{r}_\xi^e = \begin{pmatrix} x_2^e - x_1^e \\ y_2^e - y_1^e \\ z_2^e - z_1^e \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_\eta^e = \begin{pmatrix} x_3^e - x_1^e \\ y_3^e - y_1^e \\ z_3^e - z_1^e \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{n}}^e = \mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e \quad (44)$$

3.2.4 Assembly of mass and stiffness matrices using the reference element

Assembly of the mass matrix \mathbb{M} . From equation (39), and the connectivity matrix relating local to global nodes, we get

$$M_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{T_e} \varphi_\lambda^e \varphi_\mu^e dT_e,$$

with $i = g(e, \lambda)$ and $j = g(e, \mu)$ adjacent nodes. These integrals are computed in the reference element employing the affine transformation (42), so

$$M_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \iint_{\hat{T}} \hat{\varphi}_\lambda \hat{\varphi}_\mu \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| d\xi d\eta = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \widehat{M}_{\lambda\mu}, \quad (45)$$

where, for $1 \leq \lambda, \mu \leq 3$

$$\widehat{M}_{\lambda\mu} = \iint_{\hat{T}} \hat{\varphi}_\lambda(\xi, \eta) \hat{\varphi}_\mu(\xi, \eta) d\xi d\eta, \quad (46)$$

are the coefficients of the 3×3 **local mass matrix** \widehat{M} . Double integral notation has been used to emphasize that they are surface integrals. Coefficients $\widehat{M}_{\lambda\mu}$ may be computed exactly or approximated by Simpson's rule or a Gaussian quadrature only once and stored in memory.

Assembly of the stiffness matrix \mathbb{K} . From (40), we get

$$K_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{T_e} \nabla_{T_e} \varphi_\lambda^e \cdot \nabla_{T_e} \varphi_\mu^e dT_e,$$

with $i = g(e, \lambda)$ and $j = g(e, \mu)$ as before. Here $\nabla_{T_e} \varphi_\lambda^e = (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e$, where $\mathbb{P}_e = \widehat{\mathbf{n}}^e (\widehat{\mathbf{n}}^e)^\top$ is the projection matrix over the normal vector $\widehat{\mathbf{n}}^e$ to the triangular element T_e . Then, we can write

$$K_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \int_{T_e} (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e \cdot (\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\mu^e dT_e. \quad (47)$$

Again, these integrals are calculated in the reference element using the affine transformation. Observing that $\nabla \hat{\varphi}_\lambda = \mathbb{J}_e^\top \nabla \varphi_\lambda^e$, and that $\nabla \varphi_\lambda^e$ is a linear combination of the local fundamental vectors $\mathbf{r}_\xi^e, \mathbf{r}_\eta^e, \widehat{\mathbf{n}}^e$, we obtain

$$(\mathbb{I} - \mathbb{P}_e) \nabla \varphi_\lambda^e = \mathbb{J}_e (\mathbb{J}_e^\top \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\varphi}_\lambda, \quad \lambda = 1, 2, 3. \quad (48)$$

Therefore,

$$K_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \iint_{\hat{T}} (\nabla \hat{\varphi}_\lambda)^\top (\mathbb{J}_e^\top \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\varphi}_\mu \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| d\xi d\eta = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \widehat{K}_{\lambda\mu}^e, \quad (49)$$

where, for $1 \leq \lambda, \mu \leq 3$,

$$\widehat{K}_{\lambda\mu}^e = \frac{1}{2} (\nabla \hat{\varphi}_\lambda)^\top (\mathbb{J}_e^\top \mathbb{J}_e)^{-1} \nabla \hat{\varphi}_\mu, \quad (50)$$

and the gradients are the constant column vectors $\nabla\hat{\varphi}_1(\xi, \eta) = (-1, -1)^T$, $\nabla\hat{\varphi}_2(\xi, \eta) = (1, 0)^T$ and $\nabla\hat{\varphi}_3(\xi, \eta) = (0, 1)^T$.

In summary, the coefficients of the matrix

$$\mathbb{A} = \alpha \mathbb{M} + \mathbb{D}_\Sigma \mathbb{K},$$

associated to the finite element approximation of the elliptic equation (26) are computed by means of the formula:

$$\mathbf{a}_{ij} = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \left(\alpha \widehat{M}_{\lambda\mu} + \mathbb{D}_\Sigma \widehat{K}_{\lambda\mu}^e \right), \quad (51)$$

with $i = g(e, \lambda)$ y $j = g(e, \mu)$.

3.2.5 Calculation of the coefficients F_j of the load vector \mathbf{F}

Using again the relationship between the global index and the local index we can approximate the load vector (38). First, the source term $f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z)$ is approximated on each triangular element as

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z) \approx \sum_{\lambda=1}^3 f(x_\lambda^e, y_\lambda^e, z_\lambda^e) \varphi_\lambda^e(\mathbf{x}, \mathbf{y}, z),$$

then, we have

$$F_j = \sum_{T_e \in \mathcal{T}_h^{ij}} \|\mathbf{r}_\xi^e \times \mathbf{r}_\eta^e\| \sum_{\lambda=1}^3 f(x_\lambda^e, y_\lambda^e, z_\lambda^e) \widehat{M}_{\lambda\mu}, \quad (52)$$

assuming that $j = g(e, \mu)$ in T_e , so $i = g(e, \lambda)$ run over the adjacent nodes.

4 Full discretization of the reaction diffusion model for 3-D surfaces

Coming back to the generation of Turing patterns on three-dimensional surfaces, we must solve the following reaction-diffusion system on a given surface Σ .

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbb{D}_u \nabla_\Sigma^2 \mathbf{u} + \gamma f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad \text{in } \Sigma, \quad (53)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbb{D}_v \nabla_\Sigma^2 \mathbf{v} + \gamma g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \quad \text{in } \Sigma, \quad (54)$$

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{u} = (\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad \text{on } \partial \Sigma, \quad (55)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{v}_0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Sigma. \quad (56)$$

A similar analysis to the one done in Section (2.1) may be performed for this system. However, the analysis is not as simple as before, because surface geometry and topology

(curvature, for instance) play an important role in pattern formation and in pattern dynamics. Nowadays there is a limited understanding about this phenomena [16]. In fact, a static pattern on a flat plane can become a propagating pattern on a curved surface [15]. Also, it is well-known that geometric aspects influence the transport properties of particles that diffuse on curved surfaces, as shown in [11] and some reference therein. For these reasons, we will take advantage of what has been done for planar regions and use it as a guideline to generate Turing patterns on curved surfaces. Therefore, we will consider the Turing conditions (21-25) for planar regions and, with some slight variation of the parameter values, depending of the particular surface, we will generate some Turing patterns by solving numerically the above reaction-diffusion equations and show some results with the numerical methodology developed in the previous sections.

4.1 Semi-implicit scheme for discretizing the parabolic form of the Laplace-Beltrami equation

A full discretization of the reaction-diffusion system (53)-(56) is may be obtained by a combination of finite difference discretization with respect to time and finite element discretization with respect to space variables. One of the simplest, but still very effective, schemes is obtained by means of Euler time discretization. The time-interval $[0, T]$ with $T > 0$ is divided into N subintervals of small length $\Delta t = T/N$, say $[(n-1)\Delta t, n\Delta t]$, $n = 1, \dots, N$. From the initial conditions we obtain the starting values $(u^0(\mathbf{x}), v^0(\mathbf{x})) = (u_0(\mathbf{x}), v_0(\mathbf{x}))$, and assuming that approximations $(u^1(\mathbf{x}), v^1(\mathbf{x})) \approx (u(\mathbf{x}, \Delta t), v(\mathbf{x}, \Delta t)), \dots, (u^n(\mathbf{x}), v^n(\mathbf{x})) \approx (u(\mathbf{x}, n\Delta t), v(\mathbf{x}, n\Delta t))$, are already known, we can compute the next approximation $(u^{n+1}(\mathbf{x}), v^{n+1}(\mathbf{x}))$ by solving the system

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} - D_u \nabla_{\Sigma}^2 u^{n+1} = \gamma f(u^n, v^n), \quad (57)$$

$$\frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} - D_v \nabla_{\Sigma}^2 v^{n+1} = \gamma g(u^n, v^n), \quad (58)$$

where the boundary conditions $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla)u^{n+1} = 0$ and $(\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla)v^{n+1} = 0$ must be satisfied if $\partial\Sigma \neq \emptyset$. It is easy to see that these equations are of elliptic type (26). For instance for the first equation we can set $u = u^{n+1}$, $\alpha = 1/\Delta t$ and $f = \gamma f(u^n, v^n) + \alpha u^n$, obtaining a system of the form (26). So, the numerical solution of both equations at each time step is obtained by the finite element method developed in Section 3. The full discretization scheme is called *semi-implicit* (see [7]) because the diffusion terms are evaluated implicitly while the reaction terms are evaluated explicitly, at each time step.

4.2 Validation of the proposed methodology

According to the full discretization scheme, we must solve the elliptic equation (26) at every time step. So, it is very important to have an effective and accurate numerical solution to

this equation. Let Σ be the unit sphere, $\alpha = 0$, $D_\Sigma = 1$ and $f(x, y, z) = 12xyz$, then the exact solution of (26) is $\phi(x, y, z) = xyz$. We can compare the numerical solution ϕ_h with this exact solution and find the accuracy of the numerical method. We generate triangular meshes on the unit sphere by the subdivision of an inscribed icosahedron, and we denote by N_s the number of the subdivisions. We show the generated meshes for $N_s = 0, 3, 4, 5$ in Figure 4.

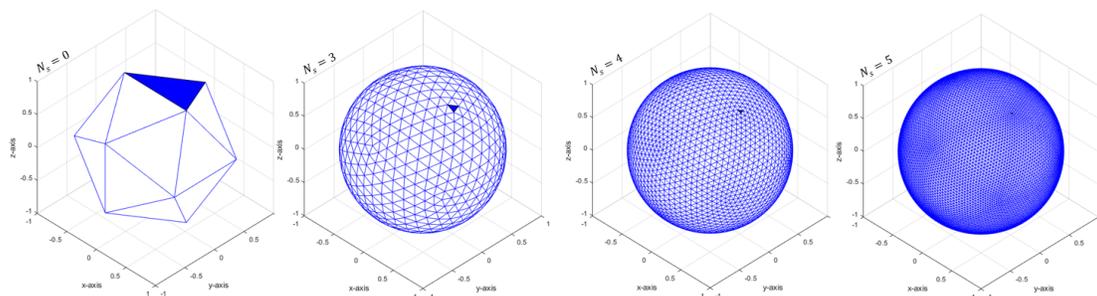


Figure 4: Triangular meshes for $N_s = 0, 3, 4, 5$ subdivisions.

The rate of convergence r of the linear finite element method is obtained from the error estimate

$$\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)} \leq C \|\phi\|_{L^2(\Sigma)} h^r, \quad (59)$$

where ϕ_h is the numerical solution on a triangular mesh with mesh-size h (the average diameter of the triangular elements), C is a constant independent of h . It we show that r is close to 2, then our numerical method achieves the optimal convergence rate. This parameter is estimated from the relation

$$\frac{\|\phi - \phi_h\|_{L^2(\Sigma)}}{\|\phi - \phi_{h/2}\|_{L^2(\Sigma)}} \approx 2^r, \quad (60)$$

for two meshes, one with mesh-size h and a refinement with mesh-size $h/2$, for h small enough. We obtained $r = 2.0155$ with mesh-sizes h and $h/2$, corresponding $N_s = 4$ and 5, respectively.

On the other hand, for parabolic PDE the methodology has been tested in the context of optimal control on a toroidal surface and on a sphere, as shown in references [12, 13].

5 Numerical results

Example 1. We consider the **Schnakenberg model**, which is a classical and simple model to generate spot patterns, among other structures. Its reaction terms give rise to

one of the simplest oscillating reactions between two chemical species, and was introduced by Schnakenberg in 1979 [19]. These reaction terms, in dimensionless form, are

$$f(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \gamma (\mathbf{a} - \mathbf{u} + \mathbf{u}^2 \mathbf{v}), \quad (61)$$

$$g(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \gamma (\mathbf{b} - \mathbf{u}^2 \mathbf{v}), \quad (62)$$

with $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \gamma$ positive constants. We assume homogeneous Neumann-type boundary conditions for the case of open and bounded surfaces, and initial conditions as in (55–56). The stable equilibrium of the chemical reaction is

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{a} + \mathbf{b}, \quad \mathbf{v}^* = \frac{\mathbf{b}}{(\mathbf{a} + \mathbf{b})^2}. \quad (63)$$

The Jacobian matrix at the equilibrium point (63) is

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{b} - \mathbf{a}}{\mathbf{a} + \mathbf{b}} & (\mathbf{a} + \mathbf{b})^2 \\ \frac{2\mathbf{b}}{\mathbf{a} + \mathbf{b}} & -(\mathbf{a} + \mathbf{b})^2 \end{pmatrix} \quad (64)$$

Considering $\mathbf{a} < \mathbf{b}$ the conditions (21-24) translate into

1. $0 < \mathbf{b} - \mathbf{a} < (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3$,
2. $D_{\Sigma}(\mathbf{b} - \mathbf{a}) > (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3$,
3. $[D_{\Sigma}(\mathbf{b} - \mathbf{a}) - (\mathbf{a} + \mathbf{b})^3]^2 > 4D_{\Sigma}(\mathbf{a} + \mathbf{b})^4$.

For more details we recommend references [14, 5, 10].

We present numerical results for four different 3-D surfaces for which we show coarse meshes in Figure 5: The first two are closed surfaces and the other two are open. Actual meshes to compute numerical solutions are refinement of these meshes (the number of nodes and triangular elements are included along with each numerical result below. These meshes were generated using their parametric equations:

- ‘**Blood cell**’²: $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2, 0 \leq \phi \leq 2\pi$,

$$x = r_0 \cos \phi \cos \theta$$

$$y = r_0 \sin \phi \cos \theta$$

$$z = \frac{1}{2} \sin \theta (c_0 + c_2 \cos^2 \theta + c_4 \cos^4 \theta)$$

where $r_0 = 3.91/3.39$, $c_0 = 0.81/3.39$, $c_2 = 7.83/3.39$ and $c_4 = -4.39/3.39$.

²Equations obtained from [6]

- ‘**Strawberry**’: $x^2 + y^2 + (z - \sqrt{x^2 + y^2})^2 = 1$.
- ‘**Coiled toroid**’: $0 \leq \theta \leq 2\pi$, $0 \leq \phi \leq 4\pi$,

$$x = (3 + \cos \theta) \cos \phi$$

$$y = (3 + \cos \theta) \sin \phi$$

$$z = \sin \theta - 0.325 \phi$$
- ‘**Helical shell**’³: $0 \leq \theta \leq 2\pi$ and $t \in [-40, -1]$,

$$x = e^{0.05t}(1.5 + \cos \theta) \cos t$$

$$y = -e^{0.05t}(1.5 + \cos \theta) \sin t$$

$$z = e^{0.05t}(-8.5 + 1.2 \sin \theta)$$

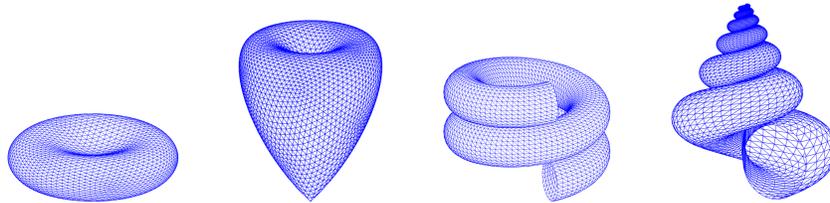


Figure 5: Surfaces used for the Schnakenberg model to generate spot patterns.

For all these cases we fix the parameter values $D_{\Sigma} = 20$, $a = 0.126779$ and $b = 0.792366$, for which it is known that generate spot like patterns in a planar region for different values γ . The initial conditions (u_0, v_0) were generated by a 10% perturbation of the equilibrium (u^*, v^*) .

- ‘**Blood cell**’. Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-4}$, mesh with 40 962 nodes and 81 920 triangular elements. Scale factor $\gamma = 1000$.

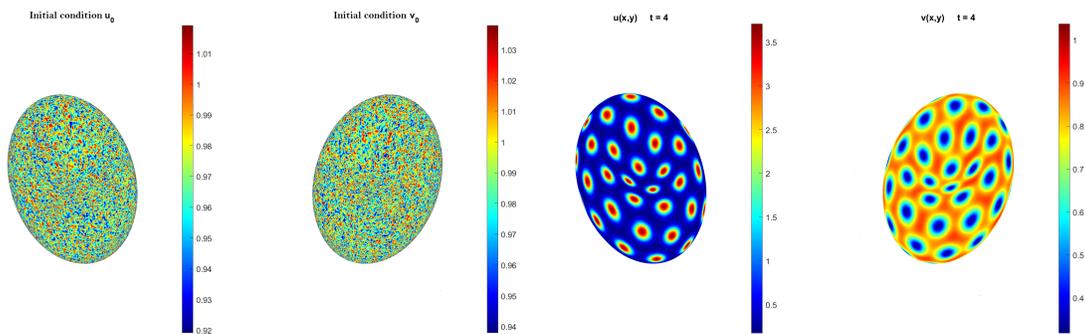


Figure 6: Concentrations at $t = 0$ and $t = 4$.

³Equations obtained from [1]

- **'Strawberry surface'** Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-4}$, mesh with 40 962 nodes and 81 920 triangular elements. Scale factor $\gamma = 500$.

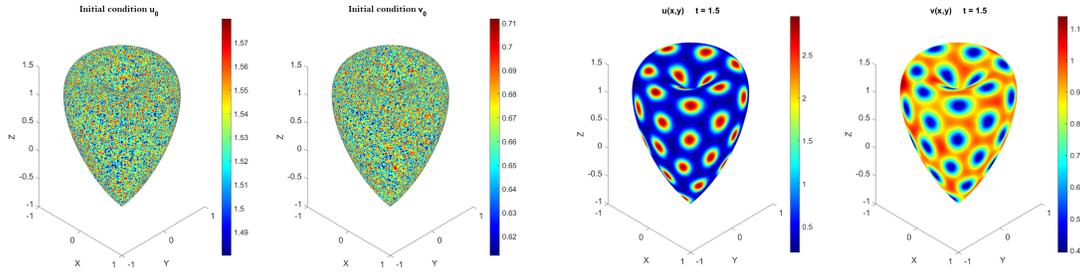


Figure 7: Concentrations at $t = 0$ and $t = 1.5$.

- **'Coiled toroid'**. Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-4}$, mesh with 48 690 nodes and 97 200 elements. Scale factor $\gamma = 100$.

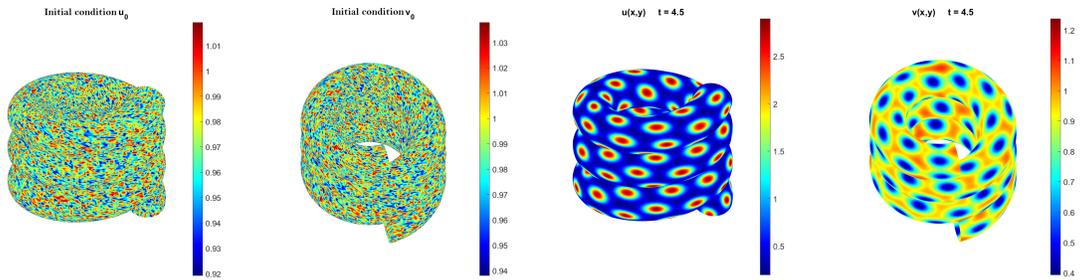


Figure 8: Concentrations at $t = 0$ and $t = 4.5$.

- **'Helical shell'**. Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-4}$, mesh with 90 150 nodes and 180 000 elements. Scale factor $\gamma = 500$.

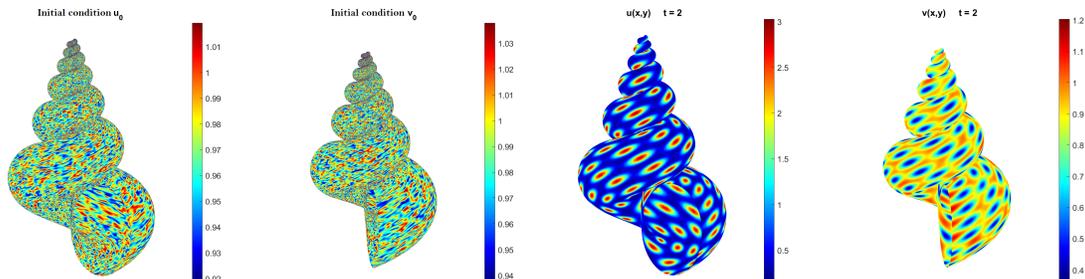


Figure 9: Concentrations at $t = 0$ and $t = 2$.

Example 2. Now, we consider the **BVAM model**⁴ taken from [2], which expressed in its Laplace-Beltrami form for surface domains is given by :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} &= D_{\Sigma} \delta \nabla_{\Sigma}^2 \mathbf{u} + \gamma [\alpha \mathbf{u}(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 \mathbf{u})], \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \delta \nabla_{\Sigma}^2 v + \gamma \left[\beta v \left(1 + \frac{\alpha r_1}{\beta} \mathbf{u} v \right) + \mathbf{u}(\epsilon + r_2 v) \right],\end{aligned}$$

where $\alpha, \beta, \delta, \epsilon, D$ are constants. The scale factor $\gamma > 0$ has been added to allow for more convenient manipulation of pattern sizes. The stable equilibria of the chemical reaction, $\mathbf{w}^* = (\mathbf{u}^*, v^*)^T$, must satisfy

$$v^* = -\frac{(\alpha + \epsilon)}{1 + \beta} \mathbf{u}^*, \quad \beta \neq 1. \quad (65)$$

For $\epsilon = -\alpha$, $v^* = 0$. For simplicity, we consider $\mathbf{w}^* = (0, 0)^T$ as the equilibrium point. In this case the Jacobian matrix at the equilibrium point $\mathbf{w}^* = (0, 0)^T$ is given by

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 \\ \epsilon & \beta \end{pmatrix}. \quad (66)$$

Thus, the conditions (21-24) for this case are:

1. $\alpha + \beta < 0$,
2. $\alpha\beta - \epsilon > 0$,
3. $D\alpha + \beta > 0$,
4. $(D\alpha + \beta)^2 > 4D(\alpha\beta - \epsilon)$,

with $\alpha, \delta > 0$, $\beta, \epsilon < 0$ and $0 < D < 1$.

Again, we present numerical results for four different 3-D surfaces shown in Figure 10, three of them are closed surfaces and the other one is open. These meshes were generated using their parametric equations:

- **Unit sphere:** standard parametrization with radius $R = 1$
- **Toroid:** usual parametrization with major radius $R = 2.5$ and minor radius $r = 1$.

⁴Named after the initials of its authors: Barrio, Varea, Aragón and Maini.

- **Dupin's cyclide**⁵: $0 \leq \phi, \theta \leq 2\pi$,

$$\begin{aligned}x &= \frac{d(c - a \cos \phi \cos \theta) + b^2 \cos \phi}{a - c \cos \phi \cos \theta} \\y &= \frac{b \sin \phi (a - d \cos \theta)}{a - c \cos \phi \cos \theta} \\z &= \frac{b \sin \theta (c \cos \phi - d)}{a - c \cos \phi \cos \theta}\end{aligned}$$

with $a = 2$, $b = 1.95$, $c^2 = a^2 - b^2$, $d = c + 0.2$.

- **Wavy cylinder without covers**: $0 \leq \theta \leq 2\pi$, $0 \leq z \leq 2$

$$\begin{aligned}x &= R(z) \cos \theta \\y &= R(z) \sin \theta \\z &= z\end{aligned}$$

with $R(z) = 0.5 \cos^2(3z) + 1$.

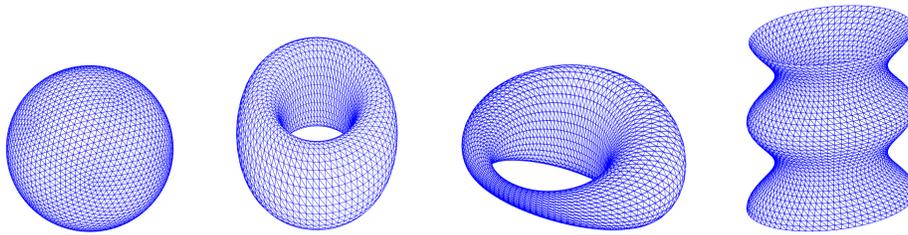


Figure 10: Surfaces used for the BVAM model to generate Turing patterns.

The following numerical results were obtained with parameter values α , β , δ , ϵ , r_1 , r_2 , D_Σ within the range proposed in [6]. In particular, the following parameters are common for the four cases: $\alpha = 0.899$, $\beta = -0.91$, $\delta = 0.516$, $\epsilon = -0.899$.

- **Sphere.** Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-2}$, mesh with 40 962 nodes and 81 920 triangular elements. Scale factor $\gamma = 10$. Parameters: $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$, $D_\Sigma = 2.1 \times 10^{-3}$.

⁵Equations obtained from [23].

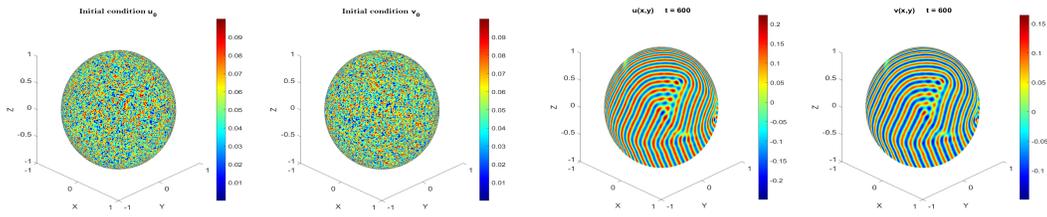


Figure 11: Concentrations at $t = 0$ and $t = 600$.

- **Toroid.** Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-2}$, mesh with 20 000 nodes and 40 000 triangular elements. Scale factor $\gamma = 0.5$. Parameters: $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$, $D_\Sigma = 4.5 \times 10^{-3}$.

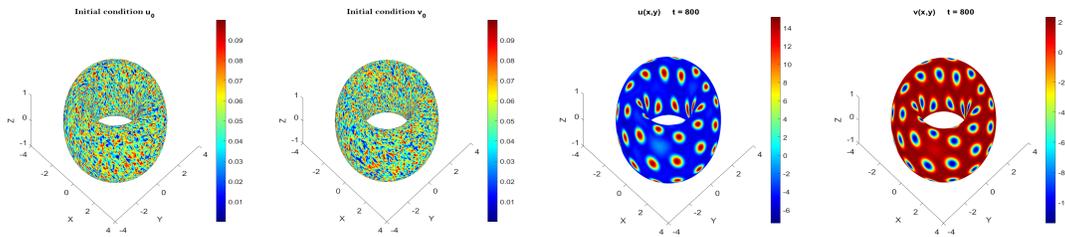


Figure 12: Concentrations at $t = 0$ and $t = 800$.

- **Dupin's cyclide.** Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-2}$, mesh with 22 500 nodes and 45 000 elements. Scale factor $\gamma = 10$. Parameters: $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$, $D_\Sigma = 2.1 \times 10^{-3}$.

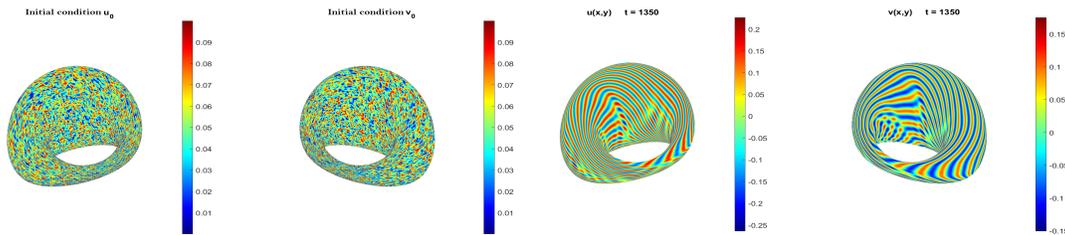


Figure 13: Concentrations at $t = 0$ and $t = 1350$.

- **Wavy cylinder without covers.** Discretization parameters: $\Delta t = 10^{-2}$, mesh with 29 040 nodes and 57 600 elements. Scale factor value $\gamma = 2$. Parameters: $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$, $D_\Sigma = 4.5 \times 10^{-3}$.

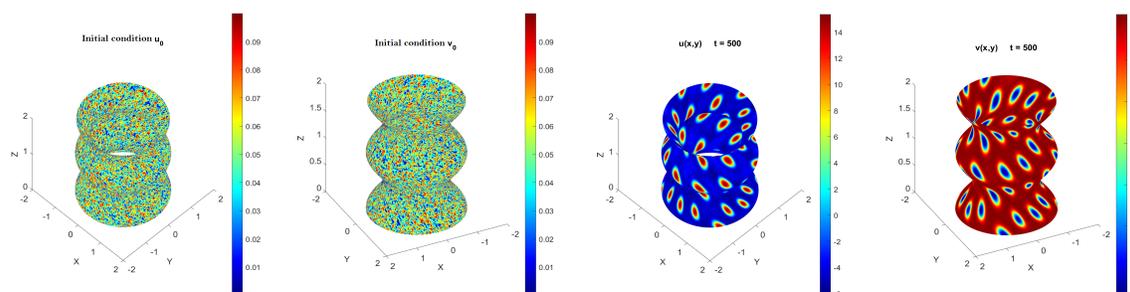


Figure 14: Concentrations at $t = 0$ and $t = 500$.

6 Conclusions

- When transferring the mathematical conditions for pattern generation from planar regions to surfaces, the Laplace-Beltrami operator was used and computational simulations were performed. In these simulations, spatial patterns similar to those already known in planar regions were observed. In some cases, it was necessary to adjust the value of the scale factor γ , which is closely related to the wave modes in the analytical solution; this adjustment was crucial to obtain patterns on surfaces.
- The numerical methodology for the solution of the Laplace-Beltrami equation, using the finite element method, allowed the development of a simple way for calculating the mass matrices \mathbb{M} , the stiffness matrix \mathbb{K} and the load vector \mathbf{F} . This resulted in an optimized code to perform the computational simulations. A great advantage of this implementation is that the calculations to determine the mass matrices \mathbb{M} , stiffness \mathbb{K} and the load vector \mathbf{F} depend only on the coordinates of the nodes of the triangular mesh associated with the surface and on the gradients of the functions $\hat{\phi}_1$, $\hat{\phi}_2$ and $\hat{\phi}_3$, which, as previously seen, are constant.
- Although the strategy for solving the system $(\alpha\mathbb{M} + D_{\Sigma}\mathbb{K})\boldsymbol{\phi} = \mathbf{F}$ obtained in (35) was not presented, the Cholesky-type factorization was used in the matrix $\mathbb{A} = \alpha\mathbb{M} + D_{\Sigma}\mathbb{K}$ because it is a positive definite symmetric matrix. Additionally, since matrix \mathbb{A} is sparse, different methods are available to further speed up the calculations (see [3], [4]). In our case, the Minimum Degree Permutation Method was used, which significantly optimized the computation time.
- It is important to mention that, for the most part, the triangular meshes are generated from known parametrizations of the surfaces. It is crucial that these meshes are of good quality to obtain optimal numerical results, as poor-quality meshes can lead to significant numerical errors. Reference [18] can be consulted for an introduction to the study of triangular mesh quality. It is worth mention that parametrizations are

not used for the numerical solution of the reaction diffusion-models, instead they are solved directly in Euclidean coordinates, as indicated in Section 3.

References

- [1] American Mathematical Society. Mathematical features on shells. <https://www.ams.org/publicoutreach/feature-column/fcarc-shell15>.
- [2] R. Barrio, C. Varea, J. Aragón, and P. Maini. A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting turing systems. *Bulletin of mathematical biology*, 61(3):483–505, 1999.
- [3] T. A. Davis. *Direct methods for sparse linear systems*. SIAM, 2006.
- [4] I. S. Duff, A. M. Erisman, and J. K. Reid. *Direct methods for sparse matrices*. Oxford University Press, 2017.
- [5] V. Dufiet and J. Boissonade. Numerical studies of turing patterns selection in a two-dimensional system. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 188(1-3):158–171, 1992.
- [6] E. J. Fuselier and G. B. Wright. A high-order kernel method for diffusion and reaction-diffusion equations on surfaces. *Journal of Scientific Computing*, 56(3):535–565, 2013.
- [7] L. H. Juárez Valencia. *Notas Método del Elemento Finito*. UAM-I, 2023.
- [8] H. Kim, A. Yun, S. Yoon, C. Lee, J. Park, and J. Kim. Pattern formation in reaction-diffusion systems on evolving surfaces. *Computers & Mathematics with Applications*, 80(9):2019–2028, 2020.
- [9] D. Lacitignola, B. Bozzini, M. Frittelli, and I. Sgura. Turing pattern formation on the sphere for a morphochemical reaction-diffusion model for electrodeposition. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 48:484–508, 2017.
- [10] A. Ledesma Durán. Patrones de turing en sistemas biológicos. Master’s thesis, 2012.
- [11] A. Ledesma Durán and L. H. Juárez Valencia. Diffusion coefficients and msd measurements on curved membranes and porous media. *The European Physical Journal E*, 46(8):70, 2023.
- [12] A. D. León Velasco, R. Glowinski, and L. H. Juárez Valencia. On the controllability of diffusion processes on the surface of a torus: a computational approach. *Pac J Optim*, 11:763–790, 2015.

- [13] A. D. León Velasco, R. Glowinski, and L. H. Juárez Valencia. On the controllability of diffusion processes on a sphere: a numerical study. *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 22(4):1054–1077, 2016.
- [14] A. Madzvamuse. Time-stepping schemes for moving grid finite elements applied to reaction–diffusion systems on fixed and growing domains. *Journal of computational physics*, 214(1):239–263, 2006.
- [15] R. Nishide and S. Ishihara. Pattern propagation driven by surface curvature. *Physical Review Letters*, 128(22):224101, 2022.
- [16] R. Nishide and S. Ishihara. Weakly nonlinear analysis of turing pattern dynamics on curved surfaces. *arXiv preprint arXiv:2403.12444*, 2024.
- [17] L. Perko. *Differential equations and dynamical systems*, volume 7. Springer Science & Business Media, 2013.
- [18] J. Sarrate, J. Palau, and A. Huerta. Numerical representation of the quality measures of triangles and triangular meshes. *Communications in numerical methods in engineering*, 19(7):551–561, 2003.
- [19] J. Schnakenberg. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *Journal of theoretical biology*, 81(3):389–400, 1979.
- [20] X. Song and Y. Li. An efficient numerical method for reaction–diffusion equation on the general curved surfaces. *Applied Mathematics Letters*, 133:108268, 2022.
- [21] S. H. Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. CRC press, 2018.
- [22] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Bulletin of mathematical biology*, 52:153–197, 1990.
- [23] Wikipedia. Dupin cyclide. https://en.wikipedia.org/wiki/Dupin_cyclide.
- [24] X. Xiao, K. Wang, and X. Feng. A lifted local galerkin method for solving the reaction–diffusion equations on implicit surfaces. *Computer Physics Communications*, 231:107–113, 2018.

Robustez y Componente Gigante de la Red Aeroportuaria de la República Mexicana Mediante un Análisis en Teoría de Grafos

Omar Martínez Rosas^{*1} and Luis Agustín Olivares Quiroz¹

¹Colegio de Ciencia y Tecnología, Universidad Autónoma de la Ciudad de México, México

Resumen

La robustez \mathcal{R} de un grafo es un parámetro que cuantifica la vulnerabilidad de una red bajo ataque en alguno de sus nodos n_j . La robustez se define como la fracción de la componente gigante después de que se eliminan ciertos nodos ya sea de forma aleatoria o bien de forma específica. Usando estas dos últimas definiciones y un script de programación en Python y NetworkX analizamos la dinámica de la componente conectada principal de la red de tráfico aéreo de la República Mexicana cuando se realizan ataques aleatorios y dirigidos en sus nodos. Asimismo, y a manera de comparación, calcularemos la fracción crítica de nodos eliminados q^* en función de la densidad ρ de la red para diferentes redes aleatorias usando el modelo de Gilbert y la red de tráfico aéreo de la República Mexicana con el fin de decidir si ésta última es o no es vulnerable a dichos ataques. Los resultados obtenidos muestran el grado de vulnerabilidad de la red de tráfico aereo en la República Mexicana.

Keywords: Fourth-order finite difference; Domain decomposition; MPI; Poisson equation; Speedup; Elapsed time.

1 Introducción y relevancia

La robustez es una cualidad deseada en cualquier sistema conectado en el cual las unidades interactúen entre sí y su funcionamiento global dependa de esta comunicación. En un universo interconectado y en constante cambio, la capacidad de resistir perturbaciones, adaptarse a desafíos inesperados y mantener su funcionalidad esencial se convierte en un

^{*}omar.martinez.rosas@estudiante.uacm.edu.mx

criterio fundamental para evaluar la eficacia y la viabilidad de diversos sistemas interconectados [3, 19].

Algunas de las áreas donde la robustez se constituye como una piedra angular para evaluar la estabilidad y la capacidad de respuesta incluyen las redes eléctricas y de transporte de energía [8], los ecosistemas naturales (desde bosques hasta arrecifes de coral) [23] así como las redes de transporte urbano [14], por mencionar solo algunas. La evaluación de la robustez en estos contextos proporcionan un marco invaluable para comprender cómo estos sistemas pueden enfrentar y sobrellevar situaciones de estrés, identificando sus vulnerabilidades y fortalezas ante diferentes escenarios. En particular, el estudio de la robustez en las redes de transporte es fundamental para garantizar la eficiencia y la continuidad del servicio en caso de perturbaciones. Diversos trabajos han abordado este tema desde distintas perspectivas y en diferentes tipos de redes de transporte, proporcionando una base sólida para comprender cómo la estructura y las características topológicas influyen en su capacidad para resistir fallos y ataques [7, 16, 13].

En uno de estos trabajos, los autores examinan la robustez del sistema de metro de Madrid [11], destacando la importancia de la teoría de redes para entender cómo la infraestructura responde a fallos y ataques. Su investigación revela que la robustez de la red puede variar significativamente dependiendo de la topología y las características específicas del sistema.

Por otro lado, en [18] se ofrece un análisis completo sobre la red del metro de Nueva York, aportando una visión detallada sobre cómo el sistema mantiene su conectividad frente a diversas perturbaciones. Este estudio subraya la capacidad de la red para adaptarse y recuperarse de fallos, y proporciona una base para comparar con otros sistemas de transporte. La vulnerabilidad de las redes de transporte público, según [21], se comparará el análisis de la robustez de las redes de metro y de autobuses, demostrando que cada tipo de red tiene características distintas que influyen en su resiliencia. Este enfoque comparativo es fundamental para comprender las ventajas y limitaciones de cada sistema de transporte en situaciones de crisis.

En el ámbito del transporte aéreo, como se menciona en [22], es posible analizar la estabilidad de la red aeroportuaria global bajo ataques aleatorios y objetivo en los aeropuertos. Su investigación revela cómo la red global de aeropuertos puede verse afectada por perturbaciones en nodos clave, y proporciona una perspectiva importante sobre la gestión de redes complejas a nivel internacional. Finalmente, como se ha demostrado en [17], se utiliza la Teoría de Grafos (*Graph-Theory*) y simulaciones para identificar las debilidades estructurales de la red ferroviaria de la ciudad de Londres y proponer mejoras para un funcionamiento más robusto y equilibrado de dicha red. Este enfoque es crucial para garantizar la continuidad del servicio ferroviario y minimizar los impactos de los fallos.

Inspirado por los estudios anteriores, este artículo se centra en analizar la robustez de la Red Aeroportuaria de la República Mexicana a través de grafos y redes complejas. Se utilizará el concepto de componente gigante, que es el subconjunto mayor de nodos que están conectados a través de enlaces o aristas, para estimar la reducción en el tamaño de la componente conectada principal de la red.

Por ejemplo, si se eliminan nodos clave o importantes como el Aeropuerto Internacional de la Ciudad de México, Benito Juárez o el Aeropuerto de Tijuana, Gral. Abelardo Rodríguez, que son aeropuertos de conexión fundamentales, se podría observar una fragmentación significativa de la red, lo que implicaría una disminución abrupta de su funcionalidad y accesibilidad. Este tipo de análisis permite entender la estructura topológica, vulnerabilidad y funcionalidad de la red, evaluando estrategias para mejorar su capacidad de resistir perturbaciones. Con ello, se busca contribuir al desarrollo de un sistema de transporte aéreo más eficiente y seguro, incluso frente a escenarios de ataques dirigidos o fallos en infraestructura crítica.

2 Metodología: Componente gigante y robustez \mathcal{R} de un grafo

Una red o grafo, denotado como G , consiste en un conjunto de nodos N , los cuales están interconectados mediante un conjunto de enlaces E . La cantidad de enlaces que conectan a un nodo n_i se denota como k_i , lo cual representa el grado k_i del nodo n_i . Cada conexión entre nodos representa una relación o interacción específica. Una red se puede representar formalmente mediante la notación $G = G(N, E)$. Asimismo vamos a considerar únicamente y exclusivamente redes no dirigidos (todos sus enlaces son bidireccionales y no tienen orientación específica) y simples (que no formen conexiones directas desde un nodo hacia sí mismo).

La distribución de probabilidad de grado o distribución de grado, que la denotamos de la forma p_k , nos proporciona la probabilidad de que un nodo n_i seleccionado de forma aleatoria tenga grado k_i [10]. Dado que p_k es una probabilidad, debe normalizarse, es decir

$$\sum_{k=1}^{N-1} p_k = 1$$

La distribución de probabilidad de grado p_k se expresa como la proporción de nodos con grado k en relación con el total de nodos N en la red. Por lo tanto:

$$p_k = \frac{N_k}{N} \tag{1}$$

indica la probabilidad de que un nodo seleccionado al azar tenga exactamente k conexiones. La distribución p_k nos ayuda a comprender la topología, estructura y conectividad de una red, lo cual nos permite identificar nodos de mayor relevancia.

Una forma de representar un grafo es a través de un arreglo matricial. La matriz asociada A de una red dada $G(N, E)$ es de tamaño $N \times N$ e indica si dos nodos n_i y n_j (con $i, j = 1, 2, 3, \dots, N$) están conectados o no. Esto es, los elementos a_{ij} de la matriz de adyacencia tendrán los siguientes valores:

- $a_{ij} = 1$ si hay conexión simple entre los nodos n_i y n_j ;
- $a_{ij} = 0$ en caso contrario.

Por consiguiente, $G(N, E)$ lo podemos representar de la forma:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}$$

Tal como se mencionó previamente este arreglo matricial es conocida como la matriz de adyacencia [2]. En el caso de grafos no dirigidos, la matriz de adyacencia es simétrica, es decir, $A = A^T$.

Es posible calcular el grado k_i de cada nodo mediante la matriz de adyacencia sumando los elementos de la fila o columna de A de la forma:

$$k_i = \sum_{j=1}^N A_{ij} = \sum_{j=1}^N A_{ji} \quad (2)$$

El número de enlaces que posee la red lo podemos calcular utilizando A mediante:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N A_{ij}$$

Teniendo presente los conceptos anteriores, en la Figura 1 podemos observar un ejemplo de una red $G(N = 8, E = 8)$ con su respectiva distribución de probabilidad de grado p_k graficado de la forma p_k versus N_k .

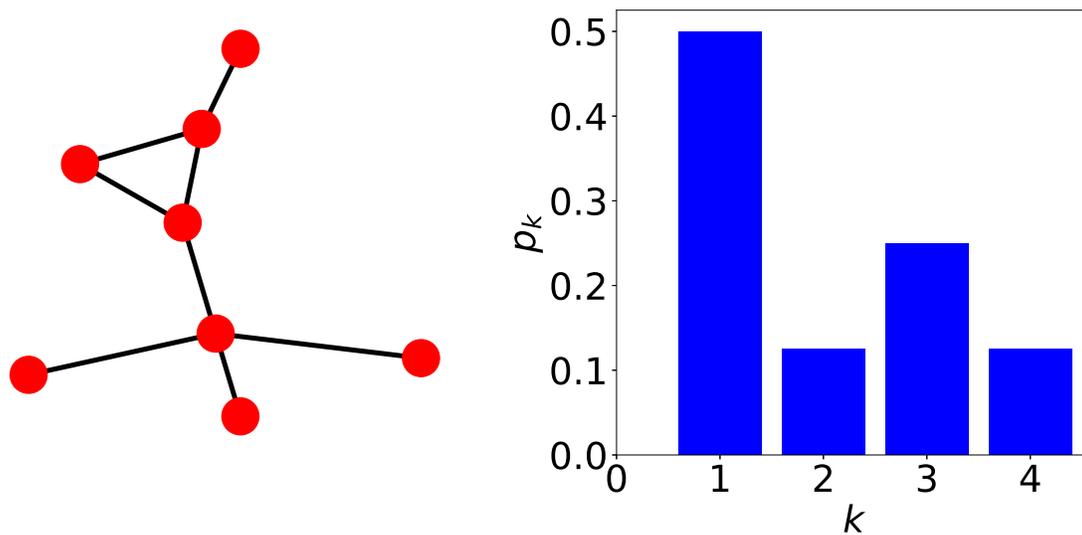


Figura 1: Red $G(8, 8)$ con sus respectiva p_k

En la Figura 1 se presenta una red pequeña en donde cada nodo representa un punto de conexión, y cada enlace representa una conexión entre dos nodos.

En el caso de la gráfica, p_k muestra la probabilidad de que un nodo seleccionado al azar tenga un cierto número de conexiones o grado k . Los datos obtenidos para la distribución de probabilidad de grado son los siguientes:

- $p_1 = \frac{N_1}{N} = \frac{4}{8} = 0,5$
- $p_2 = \frac{N_2}{N} = \frac{1}{8} = 0,125$
- $p_3 = \frac{N_3}{N} = \frac{2}{8} = 0,25$
- $p_4 = \frac{N_4}{N} = \frac{1}{8} = 0,125$

Esto significa que hay un 50% de probabilidad de que un nodo tenga grado 1, un 12.5% de probabilidad de que tenga grado 2, un 25% de probabilidad de que tenga grado 3, y un 12.5% de probabilidad de que tenga grado 4.

La figura 1 ilustra cómo se distribuyen las conexiones de los nodos en la red, ayudando a entender la estructura del mismo y cómo se conectan los nodos entre sí. Esta información es útil para analizar la conectividad y las propiedades de la red en diversas aplicaciones.

Por otro lado, la matriz de adyacencia A asociada a la red G anteriores es de la forma:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Al calcular el grado del nodo n_2 utilizando la ecuación (3) obtenemos:

$$k_2 = \sum_{j=1}^8 A_{2j} = 3 \quad (3)$$

Asimismo, es evidente notar que la red de la Figura 1 es no dirigida ($A = A^T$) y es simple ($a_{ii} = 0 \forall i = 1, 2, \dots, 8$).

La distribución de probabilidad de grado la retomaremos más adelante para definir la existencia de la componente gigante en una red que es la parte esencial para analizar la vulnerabilidad o resistencia de una red cuando enfrenta ataques a sus N nodos.

2.1. Componente gigante y robustez de la red

La componente gigante (denotada como CG) de una red la podemos definir como la componente conectada más grande, que incluye o contiene la mayor proporción o la mayor cantidad de nodos de la red conectados entre sí mediante los enlaces.

Denotemos con $u = 1 - \frac{N_C}{N}$ la fracción de nodos que no están en la CG, cuyo tamaño es N_C ; y sea p la probabilidad de que un par de nodos estén conectados por un enlace. Si un nodo n_i forma parte de la CG, debe unirse a otro nodo n_j , que también debe de formar parte de la CG. Por ende, si n_i no es parte de la CG, podría suceder dos casos:

- No exista una conexión entre n_i y n_j (la probabilidad para esto es $1 - p$).
- Existe una conexión entre n_i y n_j , pero n_j no es parte de CG (la probabilidad para esto es pu).

Por lo tanto, la probabilidad total de que n_i no sea parte de la CG a través del nodo n_j es $1 - p + pu$. La probabilidad de que n_i no esté conectado a la CG a través de ningún otro nodo es $(1 - p + pu)^{N-1}$, ya que hay $N - 1$ nodos que podrían servir como conexiones a la

CG para el nodo $N - i$. Como u es la fracción de nodos que no pertenecen a la CG, para cualquier N y un valor p con $0 < p \leq 1$ el modelo matemático

$$u = (1 - p + pu)^{N-1} \quad (4)$$

proporciona el tamaño de la CG mediante $N_C = N(1 - u)$.

También podemos representar el tamaño de la CG de la siguiente forma. Denotemos con \tilde{N} el número de nodos que forman parte de la CG; y $Q = qN$ el número de nodos eliminados, cuya forma normalizada lo tomamos como $q = \frac{Q}{N}$ (Más adelante explicamos las formas de eliminar Q nodos). En consecuencia, para cualquier N y Q (con $Q \leq N$) el modelo matemático:

$$s(Q) = \frac{\tilde{N}}{N} \quad (5)$$

proporciona el tamaño de la componente gigante mediante la cantidad de nodos a eliminar de una red.

El criterio de Molloy-Reed nos garantiza la existencia de la CG dentro de una red [15]. Sea:

$$\langle k \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i = \sum_{k_{min}}^{k_{max}} k p_k$$

el promedio de los grados de todos los nodos en una red, también conocido como el grado promedio; y

$$\langle k^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i^2 = \sum_{k_{min}}^{k_{max}} k^2 p_k$$

el promedio del cuadrado de los grados de los nodos. Este último proporciona la dispersión o variabilidad de los grados en la red, mejor conocido como la varianza.

Por lo tanto, podemos determinar la existencia de la CG de la siguiente manera:

$$\kappa = \frac{\langle k^2 \rangle}{\langle k \rangle} \quad (6)$$

Si $\kappa > 2$, entonces existe una CG. En caso contrario, la red carece de una CG.

Para entender mejor este concepto, mostraremos unos ejemplos de la CG. En la figura 2 (a) podemos observar una red conexas y en la figura 2 (b) visualizamos una red disconexa con varias componentes conectadas. Para ambos casos, aplicando la ecuación (6) tenemos como resultado que $\kappa \approx 2,75 > 2$ para la red del inciso (a) y $\kappa \approx 2,64 > 2$ para la red del

inciso (b), es decir, existe una CG en ambas redes. De forma visual podemos identificar que en la red del inciso (a) la CG es toda la red y en la red del inciso (b) la CG es la componente conectada con el mayor número de nodos (ubicada en la parte derecha).

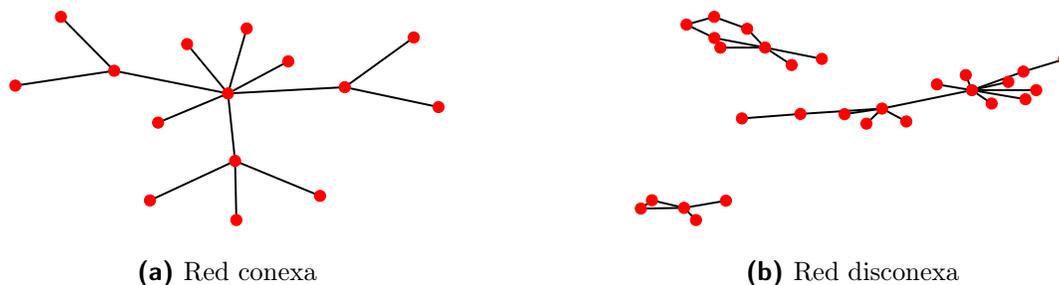


Figura 2: Ejemplos de redes con existencia de la CG

La CG será de interés para medir la robustez de la red debido a su importancia de conectividad y, en ocasiones, por su facilidad para romper dicha componente en componentes diminutas.

La robustez de la red se refiere a la capacidad de dicha red para resistir y mantener su estructura y funcionalidad frente a la pérdida de nodos [20, 9]. Llamaremos \mathcal{R} a la medición de la robustez de la red, el cual se puede estimar mediante:

$$\mathcal{R} = \frac{1}{N} \sum_{Q=0}^N s(Q) \quad (7)$$

Tengamos en cuenta que el posible rango de \mathcal{R} estará entre $1/N$ y $0,5$, $0 \leq s(Q) \leq 1$ y $q = Q/N$ es la forma normalizada de Q .

La eliminación de nodos de una red lo realizaremos uno por uno a través de dos tipos: fallas aleatorias y ataques objetivo.

a) Fallas aleatorias

En este caso, eliminaremos de manera aleatoria y secuencial los nodos Q (Con $Q \leq N$) de una red. El nodo seleccionado para remover podría ser un nodo de grado bajo o de conectividad alta que forma parte de la CG, un nodo sin conectividad (nodo aislado) o incluso un nodo con conectividad que no forma parte de la CG.

b) Ataques objetivo

En este tipo de eliminación, nos enfocaremos en atacar selectivamente los nodos de mayor a menor conectividad en la red, es decir, comenzaremos eliminando los nodos n_1, n_2, n_3, \dots donde $k_{n_1} \geq k_{n_2} \geq k_{n_3} \geq \dots$. Estos nodos son considerados óptimos debido a su importancia en la red, destacándose por su considerable conectividad con otros nodos. En esta ocasión, la eliminación de nodos se llevará a cabo de manera específica y selectiva.

Nuestro objetivo es analizar, a través de una gráfica q contra $s(q)$, cómo se reduce el tamaño de la CG, que concentra la funcionalidad principal de la red. Si la reducción es lineal y constante, la red se considera robusta. En cambio, si la reducción es agresiva, es decir, si el tamaño de la CG tiende a cero o se acerca a $s(q) = 0$ al atacar pocos nodos, la red se considera no robusta. No obstante, también es posible que la reducción no se ajuste completamente a ninguno de estos dos casos. En la siguiente sección examinaremos este comportamiento utilizando el residual de un ajuste lineal para argumentar sobre la posible robustez de la red.

2.2. Fracción crítica de nodos eliminados y densidad de una red

La fracción crítica de nodos eliminados (denotada como q^*) es el punto en el que, al eliminar nodos de una red, el tamaño de la CG experimenta una reducción abrupta y significativa, perdiendo su comportamiento robusto. Este comportamiento se observa en una gráfica donde el eje de las abscisas representa la proporción de nodos eliminados q y el eje de las ordenadas muestra el tamaño de la CG $s(q)$. La fracción crítica q^* indica el umbral a partir del cual la red pierde su funcionalidad o conectividad principal de manera drástica. Identificar q^* es esencial para evaluar la robustez de la red frente a ataques. Esta fracción se determina aplicando el residual de un ajuste lineal o una regresión lineal [4]:

$$re = |s(q_i) - \tilde{s}(q_i)| > 15\% \quad \forall i = 1, 2, \dots, N \quad (8)$$

donde $s(q_i)$ corresponde al valor de la función de reducción en el tamaño de la CG de una red y $\tilde{s}(q_i)$ corresponde al valor de la función de reducción ($s(q) = 1 - q$) en el tamaño de la CG de una red robusta a un ataque. Con un error del 15% en re encontraremos q^* , en caso contrario, $q^* = 1$.

Para comprender el significado de q^* , en la figura 3 podemos observar dos reducciones en el tamaño de la CG de una red $G(100, 175)$ y de una red robusta bajo ataques aleatorios. Asimismo, observamos q^* que se obtuvo aplicando la ecuación (8).

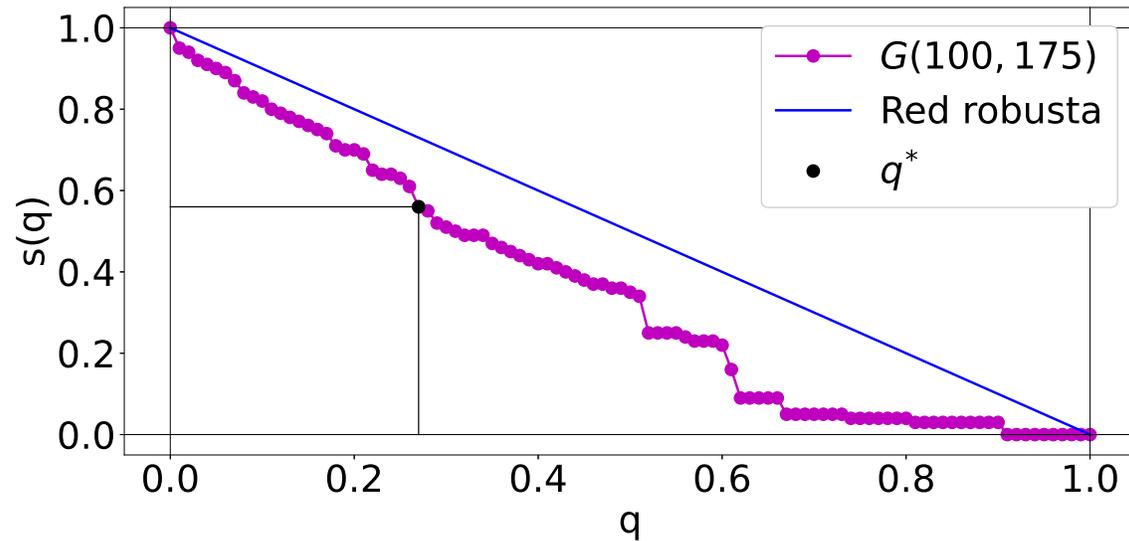


Figura 3: Identificación de q^* en el análisis de la reducción en el tamaño de la CG de una red $G(100, 175)$

En caso de que $re \leq 15 \forall i = 1, 2, \dots, N$, es decir, no se identifica q^* en la reducción en el tamaño de la CG de una red similar a la de la figura 3, entonces se le asigna a esa red $q^* = 1$.

Por otro lado, la densidad ρ de una red cuantifica la proporción de conexiones entre los nodos con respecto al máximo número posible de conexiones en la red. Una red es densa si el número de enlaces alcanza el máximo de enlaces posibles. En este caso, tenemos una red completa con $\rho = 1$. En caso contrario, una red es vacía si no cuenta con enlaces, es decir, $\rho = 0$ [5]. La densidad de una red se define formalmente como:

$$\rho = \frac{E}{\binom{N}{2}} = \frac{2E}{N(N-1)} \quad (9)$$

donde $0 \leq \rho \leq 1$. Para redes completas podemos calcular el número máximo de enlaces posibles de la forma:

$$E_{max} = \frac{N(N-1)}{2}$$

Dicho lo anterior, la robustez de la red se determina a través de la fracción crítica q^* y la densidad ρ , especialmente cuando la reducción en el tamaño de la componente gigante no sea de tipo decaimiento exponencial o de tipo reducción lineal similar a la red robusta de la figura 3.

3 Aplicaciones a la red aeroportuaria de la República Mexicana

En este trabajo analizaremos la conectividad aeroportuaria de la República Mexicana utilizando el formalismo anterior. Para ello utilizaremos una base de datos pública de siete aerolíneas mexicanas que corresponden al transporte aéreo local de pasajeros, es decir, vuelos comerciales y vuelos privados de pasajeros nacionales [6].

3.1. Red de tráfico aéreo de la República Mexicana

Definamos G como a la red aeroportuaria de la República Mexicana (RARM), Los aeropuertos o terminales aéreas los denotaremos como los nodos N y los enlaces E corresponden a los vuelos directos comerciales y privados nacionales que brindan las siete aerolíneas mexicanas que están consideradas en la tabla 1.

	Aerolíneas mexicanas
1	Aeromar
2	Calafia Airlines
3	Grupo Aeroméxico
4	Magnicharters
5	Transportes Aéreos Terrestres
6	Viva Aerobus
7	Volaris

Tabla 1: Aerolíneas mexicanas que ofrecen transporte aéreo de pasajeros

La base de datos de los vuelos directos comerciales y privados lo podemos encontrar en las páginas web de cada una de las siete aerolíneas mexicanas de la forma: vuelos de ciudad a ciudad o vuelos directos entre dos ciudades y la vamos a guardar o almacenar en un programa o un sistema de gestión de bases de datos. Posteriormente con la programación de Python y NetworkX podemos estructurar esa base de datos para darle forma de red.

Como resultado de este análisis, en la figura 4 visualizamos el tráfico aéreo de la RARM correspondiente a enero de 2023.

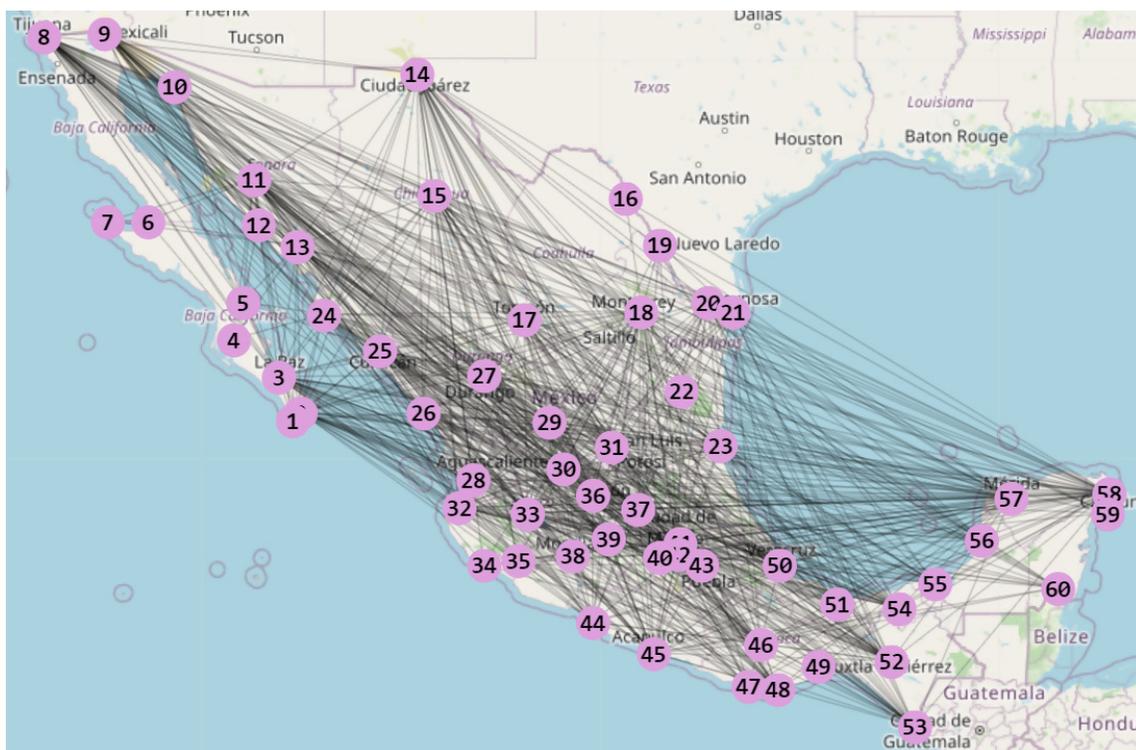


Figura 4: Red de tráfico aéreo de la República Mexicana. Los nodos indican los aeropuertos y los enlaces indican los vuelos directos

La red consta de $N = 60$ aeropuertos que ofrecen $E = 723$ vuelos directos comerciales y privados nacionales. Como podemos observar, la RARM es no dirigida, es decir, cada vuelo es de ida y vuelta; y es simple, es decir, solamente contemplamos un vuelo entre cada par de aeropuertos.

3.2. Robustez de la red aeroportuaria

En esta sección nos dedicaremos a analizar la reducción en el tamaño de la CG y la robustez de la RARM cuando enfrenta ataques aleatorios y ataques objetivo a sus 60 aeropuertos.

Es importante considerar que al simular el ataque a un aeropuerto ya sea de forma aleatoria u objetiva, estamos representando situaciones en las que un aeropuerto interrumpe totalmente sus operaciones debido a diversos eventos, como desastres naturales, condiciones climatológicas adversas, mantenimiento, modernización de la terminal u otros escenarios que puedan suspender completamente su funcionamiento. Dicho lo anterior, en la figura 5 se muestran las gráficas de interés correspondientes a la reducción en el tamaño de la CG $s(q)$ y la robustez de la red \mathcal{R} , donde se simulaban fallas aleatorias.

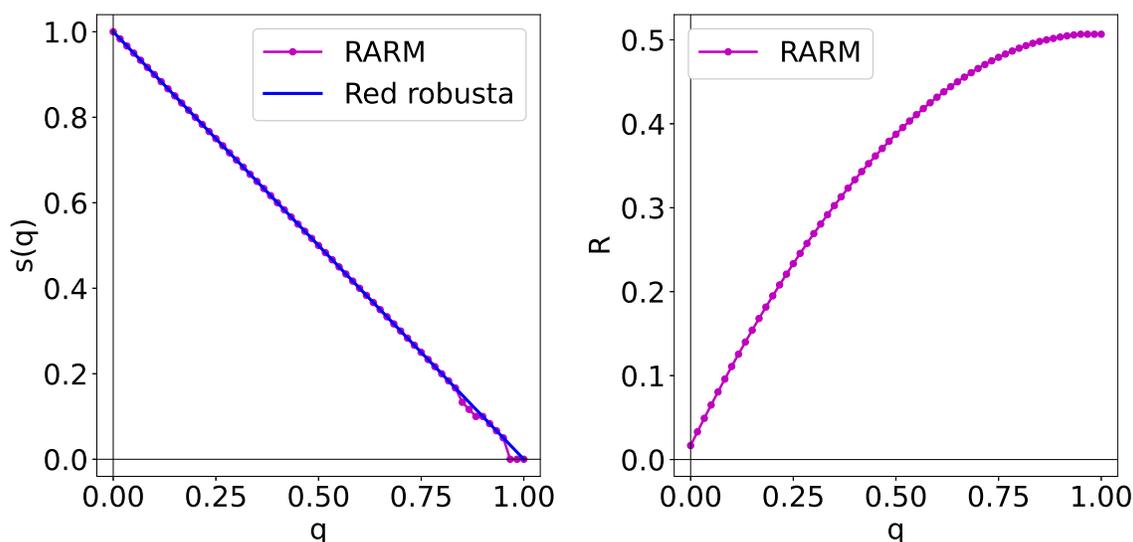


Figura 5: Reducción en el tamaño de la CG y robustez de la RARM bajo fallas aleatorias

Podemos analizar en la gráfica de la figura 5 que la reducción en el tamaño de la CG de la RARM no es significativa, es decir, reduce de forma lineal y casi se parece a la reducción de una red robusta a dicho ataque que es la función continua $s(q) = 1 - q$. En caso de la robustez, vemos que la función discreta converge a la cota superior de la estimación de la robustez, es decir, al rango superior con valor cercano al $1/2$. Esto quiere decir que la red es robusta. Por lo tanto, las dos gráficas de la figura 5 indican una robustez en la RARM bajo fallas aleatorias.

Ahora analizaremos el comportamiento de la reducción en el tamaño de la CG y la robustez de la RARM bajo ataques objetivo contra sus aeropuertos de mayor conectividad a menor conectividad destacando al Aeropuerto Internacional de la Ciudad de México, Benito Juárez; Aeropuerto Internacional de Tijuana, Gral. Abelardo Rodríguez y el Aeropuerto Internacional de Hermosillo, Gral. Ignacio Pesqueira García como los primeros para atacarlos. Estos aeropuertos son clave debido a su alta conectividad dentro de la red, lo que los convierte en aeropuertos estratégicos cuya desactivación podría generar fragmentación significativa, afectando tanto la funcionalidad operativa como la accesibilidad regional. Por lo que, en la figura 6 analizaremos la robustez.

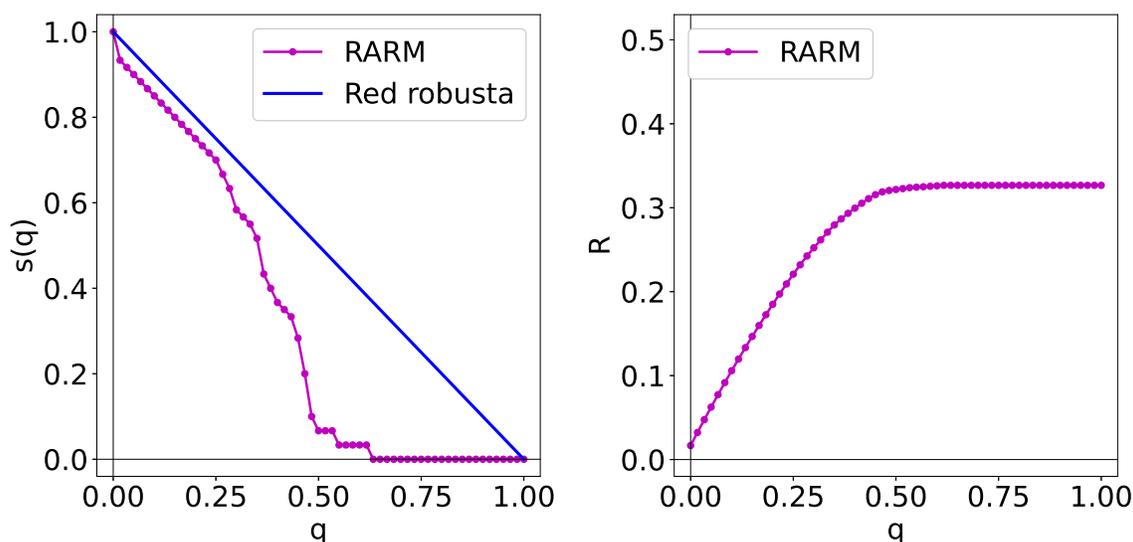


Figura 6: Robustez de la red aeroportuaria de la República Mexicana bajo ataques objetivo

En la gráfica 6 vemos que su reducción en el tamaño de la CG tiene variaciones y pierde su parecido a la función de reducción de una red robusta. En la gráfica de la robustez, la función discreta no converge a la cota superior como en el caso de fallas aleatorias. Si la robustez de la RARM hubiese tenido una convergencia a la cota inferior, es decir, al valor $1/N$ que es cercano al valor 0, entonces la RARM hubiese sido no robusta. Sin embargo, no sucede eso y las dos gráficas de la figura 6 no nos dice nada sobre la robustez de la red. Por lo que, debemos de identificar la fracción crítica de nodos eliminados para decidir si la RARM es o no robusta bajo ataques objetivo.

Con base a la reducción en el tamaño de la CG de la RARM bajo ataques objetivo. En la figura 7 observamos la identificación de la fracción crítica de nodos eliminados q^* . Teniendo en cuenta esa fracción crítica cuyo valor en el eje q es de 0.37 y calculando la densidad ρ de la red aeroportuaria es de 0.408 podemos analizar la robustez de la RARM.

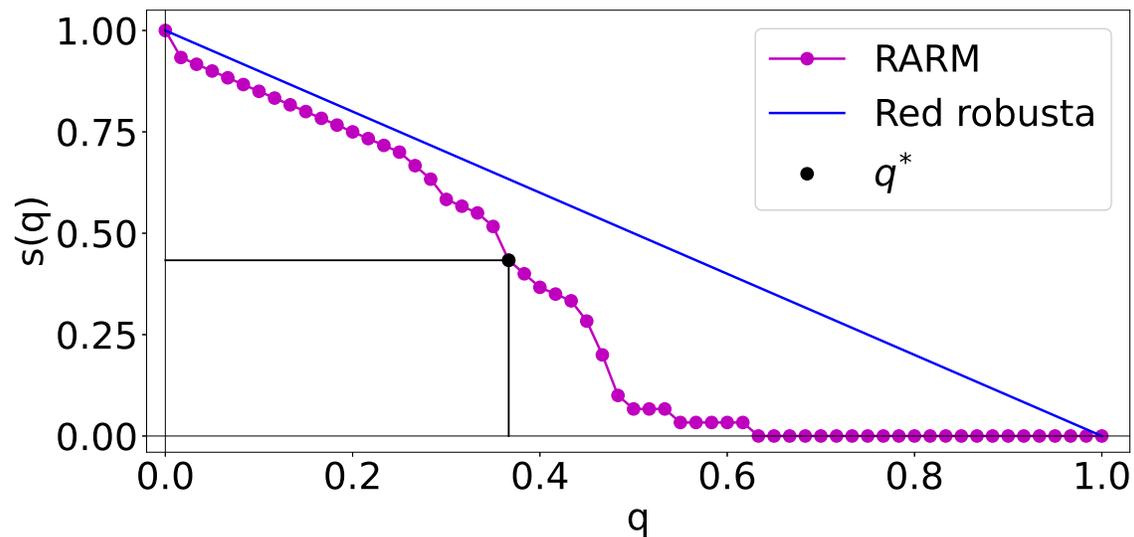


Figura 7: Identificación de q^* en la reducción en el tamaño de la CG de la RARM bajo ataques objetivo

Para analizar la robustez de la RARM a través de su q^* y ρ , graficaremos q^* y ρ de diferentes redes aleatorias empleando el modelo de Gilbert $G(N, \zeta)$ donde $0 < \zeta \leq 1$ es la probabilidad de que un par de nodos entre conectados por un enlace [12]. La ventajas del modelo de Gilbert para crear diferentes redes aleatorias es por la coincidencia de ζ y la densidad ρ , es decir, con una densidad $0 < \rho \leq 1$ podemos crear una red aleatoria $G(N, \zeta)$ con $\zeta = \rho$. Dicho lo anterior, en la figura 8 podemos observar la gráfica ρ contra q^* .

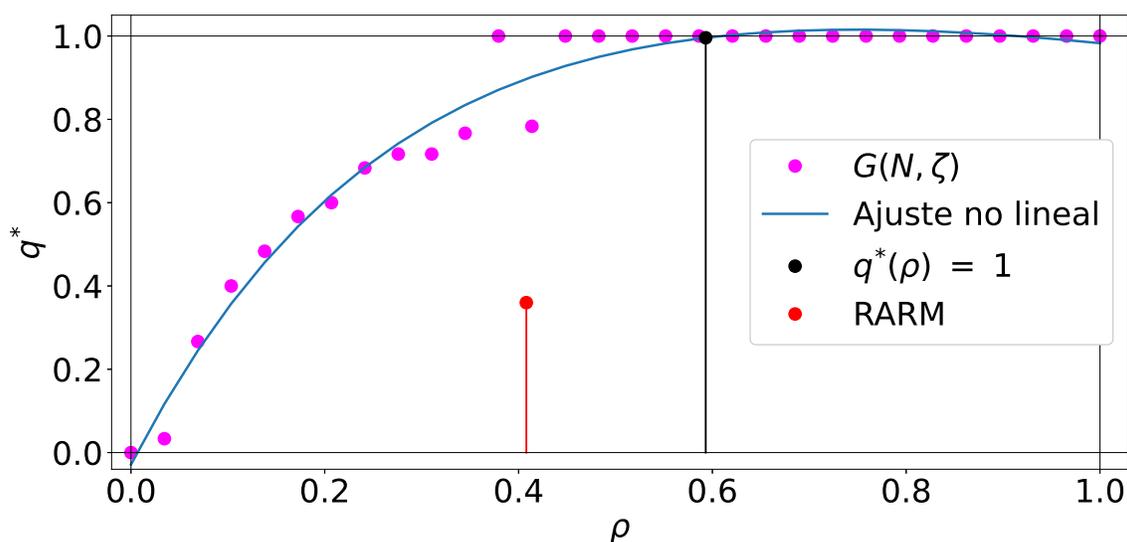


Figura 8: Análisis de la vulnerabilidad de la RARM bajo ataques objetivo empleando q^*

Notemos que se empleó un ajuste no lineal en la figura 8 a la nube de puntos $G(N, \zeta)$ con la finalidad de encontrar el punto $q^*(\rho) = 1$ que está unido con una línea vertical y esta línea nos permita separar a las redes que están ubicados en el lado izquierdo y a las redes que están ubicados en el lado derecho de dicha línea. Las redes de lado izquierdo y las redes de lado derecho son considerados redes no robustas y redes robustas a ataques objetivo, respectivamente. Como podemos observar, la RARM que es el punto de color rojo se ubica en la parte izquierda. Esto quiere decir, que es no robusta cuando enfrenta ataques objetivo.

4 Conclusiones

Al analizar la robustez en RARM, hemos obtenido resultados interesantes que nos permiten comprender mejor su conectividad, estructura y características.

Se ha demostrado que la RARM exhibe un alto nivel de robustez cuando enfrenta fallas o ataques de forma aleatoria a sus 60 aeropuertos. En estas condiciones, la red demuestra una capacidad notable para mantener su estructura y funcionamiento fundamental, como se refleja en la preservación de su CG incluso en presencia de fallas aleatorias.

Sin embargo, se ha observado que la RARM es no robusta cuando se somete a ataques de forma objetiva. Específicamente, cuando se atacan selectivamente los aeropuertos de mayor conectividad a menor conectividad. La red muestra diferentes variaciones en la disminución

con el tamaño de su CG, lo que indica una mayor susceptibilidad y una mayor posibilidad de experimentar interrupciones significativas en la conectividad entre los aeropuertos, generando retrasos masivos y afectaciones en la operación regular de los vuelos, o inclusive, el sistema puede colapsar o deje de funcionar de forma inesperada ante este tipo de ataques focalizados.

A continuación, se presentan dos gráficas que refuerzan las conclusiones obtenidas en la robustez. En la gráfica de la figura 9, se comparó la reducción en el tamaño de la CG de la RARM, una red aleatoria y una red de escala libre [1] cuando se atacaron a sus aeropuertos de forma aleatoria. Los resultados indican que tanto la red aleatoria como la RARM demostraron robustez, manteniendo la conectividad de su CG, mientras que la red de escala libre presentó variaciones a considerar en la reducción en el tamaño de su CG.

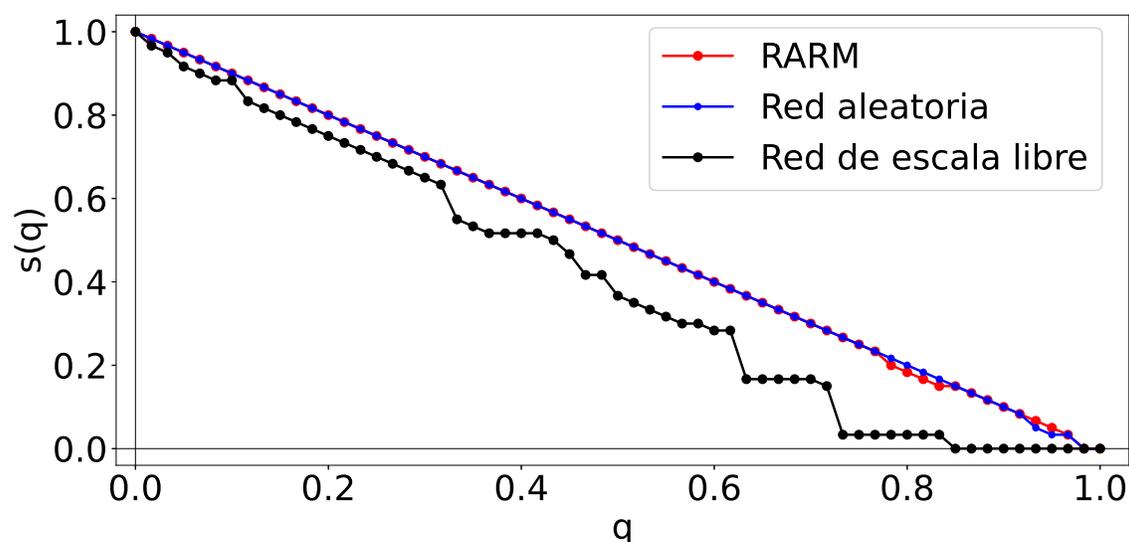


Figura 9: Comparaciones $s(q)$ de una red aleatoria, una red de escala libre y de la RARM bajo fallas aleatorias

En la segunda gráfica de la figura 10, se analizó la reducción en el tamaño de la CG de las tres redes cuando se atacaron de manera objetiva, enfocándose en los nodos de mayor conectividad y los comparamos con una red robusta a dicho ataque. En este caso, la red de escala libre mostró una reducción significativa en el tamaño de su CG, lo que la hace especialmente no robusta. Por otro lado, tanto la RARM como la red aleatoria exhibieron cierta variabilidad cuando se ataca más del 20% de los nodos, demostrando que son más robusta que la red de escala libre, pero aún así no completamente robustas.

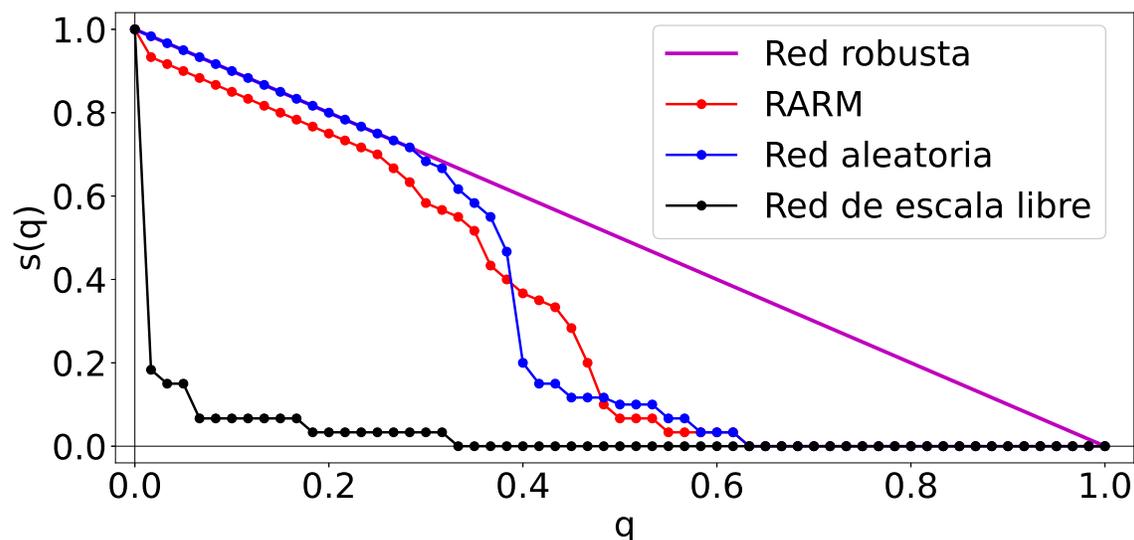


Figura 10: Comparaciones $s(q)$ de una red aleatoria, una red de escala libre y de la RARM bajo ataques objetivo

En consecuencia, estos hallazgos resaltan la importancia de la distribución de la conectividad del sistema aeroportuario mexicano. Si bien la red muestra robustez ante eventos aleatorios, se hace evidente la necesidad de implementar estrategias específicas para proteger y fortalecer los aeropuertos de mayor importancia y conectividad en la red. Estos resultados tienen implicaciones prácticas para el diseño y la gestión de la RARM, ya que podríamos comprender la importancia de la conectividad y la distribución de los aeropuertos y pueden ayudar a diseñar estrategias más efectivas para garantizar su funcionamiento óptimo y su resiliencia en situaciones adversas.

5 Agradecimientos

Omar Martínez Rosas agradece a la Universidad Autónoma de la Ciudad de México UACM-SLT por las oportunidades para realizar este trabajo y a los organizadores del Premio Mixbaal 2024 y a la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones (SMCCA) por la invitación a escribir este artículo. Luis Olivares Quiroz desea expresar su agradecimiento al Colegio de Ciencia y Tecnología (CCyT) de la Universidad Autónoma de la Ciudad de México (UACM) y al Sistema Nacional de Investigadores SNII-CONAHCyT por el apoyo para la realización de este Proyecto.

Referencias

- [1] R. Albert and A.-L. Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of modern physics*, 74(1):47, 2002.
- [2] R. B. Bapat. *Graphs and matrices*, volume 27. Springer, 2010.
- [3] A.-L. Barabási. Network science. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 371(1987):20120375, 2013.
- [4] S. Chapra and R. Canale. Regresión por mínimos cuadrados. *Métodos numéricos para ingenieros, L. Campa, Mexico DF, Mc Graw Hill*, pages 466–474, 2006.
- [5] T. F. Coleman and J. J. Moré. Estimation of sparse jacobian matrices and graph coloring blems. *SIAM journal on Numerical Analysis*, 20(1):187–209, 1983.
- [6] A. F. de Aviación Civil. Boletín de estadística operacional, 2022.
- [7] S. Derrible and C. Kennedy. The complexity and robustness of metro networks. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 389(17):3678–3691, 2010.
- [8] I. Dobson, B. A. Carreras, V. E. Lynch, and D. E. Newman. Complex systems analysis of series of blackouts: Cascading failure, critical points, and self-organization. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 17(2), 2007.
- [9] S. Dong, H. Wang, A. Mostafavi, and J. Gao. Robust component: a robustness measure that incorporates access to critical facilities under disruptions. *Journal of the Royal Society Interface*, 16(157):20190149, 2019.
- [10] S. N. Dorogovtsev, J. F. Mendes, and A. N. Samukhin. Size-dependent degree distribution of a scale-free growing network. *Physical Review E*, 63(6):062101, 2001.
- [11] E. Frutos Bernal and A. Martín del Rey. Study of the structural and robustness characteristics of madrid metro network. *Sustainability*, 11(12):3486, 2019.
- [12] E. N. Gilbert. Random graphs. *The Annals of Mathematical Statistics*, 30(4):1141–1144, 1959.
- [13] M. Hossain, S. Alam, T. Rees, and H. Abbass. Australian airport network robustness analysis: a complex network approach. In *Proceeding of the 36th Australasian Transport Research Forum, Brisbane, Australia*, 2013.
- [14] R. Louf, C. Roth, and M. Barthelemy. Scaling in transportation networks. *PLoS One*, 9(7):e102007, 2014.

-
- [15] M. Molloy and B. Reed. A critical point for random graphs with a given degree sequence. *Random structures & algorithms*, 6(2-3):161–180, 1995.
- [16] A. Pagani, G. Mosquera, A. Alturki, S. Johnson, S. Jarvis, A. Wilson, W. Guo, and L. Varga. Resilience or robustness: identifying topological vulnerabilities in rail networks. *Royal Society open science*, 6(2):181301, 2019.
- [17] A. Pagani, G. Mosquera, A. Alturki, S. Johnson, S. Jarvis, A. Wilson, W. Guo, and L. Varga. Resilience or robustness: identifying topological vulnerabilities in rail networks. *Royal Society open science*, 6(2):181301, 2019.
- [18] X. Ren, Z. Zhang, and Z. Yu. Analysis of the complex characteristics of the new york city subway network. *Highlights in Science, Engineering and Technology*, 64:99–106, 2023.
- [19] H. Sayama. *Introduction to the modeling and analysis of complex systems*. Open SUNY Textbooks, 2015.
- [20] C. M. Schneider, A. A. Moreira, J. S. Andrade Jr, S. Havlin, and H. J. Herrmann. Mitigation of malicious attacks on networks. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(10):3838–3841, 2011.
- [21] G. Sun. Robustness analysis of an urban public traffic network based on a multi-subnet composite complex network model. *Entropy*, 25(10):1377, 2023.
- [22] X. Sun, V. Gollnick, and S. Wandelt. Robustness analysis metrics for worldwide airport network: A comprehensive study. *Chinese Journal of Aeronautics*, 30(2):500–512, 2017.
- [23] B. Walker and D. Salt. *Resilience thinking: sustaining ecosystems and people in a changing world*. Island press, 2012.

Información General

¿Quieres publicar artículos, información sobre eventos o noticias en el boletín?

La Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones A. C. (SMCCA), convoca a toda la comunidad interesada en el área de la Computación Científica y sus Aplicaciones, a presentar noticias, información sobre eventos, artículos de divulgación e investigación de alta calidad en el área, así como reportes de trabajos de tesis de nivel licenciatura y posgrado en Matemáticas Aplicadas.

Requisitos para la colaboración en el Boletín

I Artículos de Divulgación e Investigación.

- a) Los artículos que se envíen para ser publicados deberán ser inéditos y no haber sido ni ser sometidos simultáneamente a la consideración en otras publicaciones.
- b) Todos los artículos son sometidos a una revisión por expertos en estas áreas de instituciones nacionales e internacionales.
- c) Los artículos a presentarse deben de ser enviados por medio de la página del Boletín:
<https://www.scipedia.com/sj/smcca>
- d) En la página de la sociedad se puede encontrar la plantilla de LaTeX para la correcta escritura de artículos.

II Información sobre eventos.

- a) Los eventos cuya información quiera ser publicada para promocionarlos, deberán estar relacionados con el área de las Matemáticas Aplicadas y la Computación Científica.
- b) La información debe enviarse en un archivo de imagen: PDF, JPG, PNG.
- c) La información no deberá exceder una cuartilla.
- d) Enviar la información con al menos 6 meses de anticipación a la fecha en que se llevaría a cabo.

III Noticias.

- a) Las noticias a ser publicadas en el Boletín deben ser noticias relevantes de actividades de la SMCCA, Socios, Comunidad Científica interesada en las Matemáticas y Computación Científica.
- b) La información de las noticias debe enviarse en un archivo de imagen: PDF, JPG, PNG.
- c) La información no deberá exceder una cuartilla.

El material de colaboración, noticias e información de eventos, deberán ser dirigidos al Dr. Gerardo Tinoco Guerrero al correo electrónico de la SMCCA: smcca@smcca.org.mx.

Todos los artículos son sometidos a evaluación por especialistas de instituciones nacionales e internacionales y su publicación estará sujeta a la disponibilidad de espacio en cada número. Las demás colaboraciones se someterán a corrección de estilo y su publicación estará sujeta a la disponibilidad de espacio en cada número. Sólo se aceptará el material enviado que cumpla con todos los requisitos anteriormente señalados.

El envío de cualquier colaboración al Boletín implica no solo la aceptación de lo establecido en este documento, sino también la autorización al Comité Editorial del Boletín de la SMCCA para incluirlo en su página electrónica, reimpresiones, colecciones y cualquier otro medio que permita lograr una mayor y mejor difusión.

Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones

Consejo directivo de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones 2024-2027

Presidente:

Dr. Jonathan Montalvo Urquizo.

Vicepresidente:

Dr. Miguel Ángel Uh Zapata.

Secretario General y de Actas y Acuerdos:

Dr. Jonás Velasco Álvarez.

Tesorero:

Dra. Rina B. Ojeda Castañeda.

Vocal:

Dra. Maria del Pilar Alonso Reyes.

Vocal:

Dr. Jorge López López.

La Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones fue fundada el 16 de Mayo de 2013, para realizar actividades de investigación científica o tecnológica inscritas en el RENIECyT (Registro Nacional de Instituciones y Empresas Científicas y Tecnológicas), prestadas únicamente a los socios y asociados. Es una Asociación sin fines de lucro. Entre sus tareas fundamentales destacan: Conjuntar acciones e intereses comunes en los investigadores, profesores y estudiantes interesados en la Computación Científica y sus Aplicaciones, con el fin de fomentar la investigación de calidad, promover la actualización y el perfeccionamiento para el desarrollo científico, tecnológico y social; promover la creación, organización, acumulación y difusión de conocimientos referidos a la Computación Científica y sus Aplicaciones; promover la formación e interacción de redes y grupos de trabajo orientados hacia el desarrollo disciplinar, interdisciplinar y temático de la investigación; fomentar el desarrollo de la investigación sobre la Computación Científica y sus Aplicaciones en la República Mexicana; contribuir al mejoramiento de la enseñanza de la Computación Científica y sus Aplicaciones en la República Mexicana; promover y organizar toda clase de encuentros y eventos académicos orientados a la comunicación y discusión entre investigadores y profesores, así como también a la difusión del conocimiento hacia sectores interesados en la integración de la Computación Científica y sus Aplicaciones en los problemas de su sector.

smcca@smcca.org.mx

<http://www.smcca.org.mx>

<https://www.scipedia.com/sj/smcca>