



FACULTAD DE CIENCIAS

**Estructuras ordenadas en algunos sistemas
de reacción-difusión-advección**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE :

F Í S I C O

Víctor Francisco Breña Medina



Director de tesis:
Dr. Faustino Sánchez Garduño

2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno Breña Medina Víctor Francisco 50331768 Universidad Nacional Autónoma de México Facultad de Ciencias Física 095281869
2. Datos del tutor Dr. Faustino Sánchez Garduño
3. Datos del sinodal 1 Dr. Pablo Padilla Longoria
4. Datos del sinodal 2 Dr. Germinal Cocho Gil
5. Datos del sinodal 3 Dr. Octavio Miramontes Vidal
6. Datos del sinodal 4 Dr. Jorge Humberto Arce Rincón
7. Datos del trabajo escrito Estructuras ordenadas en algunos sistemas de reacción-difusión-advección 162p 2007

Estructuras ordenadas en algunos sistemas de reacción-difusión-advección.

Víctor Francisco Breña Medina.
Director de Tesis: Dr. Faustino Sánchez Garduño.

Facultad de Ciencias, UNAM.

27 de febrero de 2007

A mis papás.
A Doña Blanca.
A GuAPa.

*A journey of a thousand miles begins with a single
step.*

Lao-tzu, *The Way of Lao-tzu.*

Agradecimientos

Agradezco a la UNAM, por haber contribuido en gran medida en mi formación como persona. Es un gran honor pertenecer a la institución educativa más importante de Latinoamérica.

A mis sinodales, los doctores: Pablo Padilla, Germinal Cocho, Octavio Miramontes y Humberto Arce por su apoyo y comentarios. Sin ustedes este trabajo, probablemente, estaría todavía en proceso de elaboración.

A Faustino S. Garduño, mi tutor, sinodal, jefe y profesor. Gracias por mostrarme este sorprendentemente maravilloso mundo de las biomatemáticas; trabajar contigo ha sido un camino lleno de agradables sorpresas.

A J. Páez por tu dedicación e interés en formar excelentes profesionales. A L. Briseño porque contigo aprendí a sufrir y amar las matemáticas. A Toño G. por enseñarme a ver de distinta forma los problemas. Gracias por su ejemplo y apoyo.

A mis papás por su apoyo y cariño. Gracias por ser mis padres, por mostrarme que la vida tiene muchas caras y que como dice Mark Twain: *You cannot depend on your eyes when your imagination is out of focus.*

A Doña Blanca, por tener el corazón más grande que conozco, por ser tan auténtica y por haberme soportado desde que nos conocimos... ¡Y lo que falta!

A GuAPa, porque mi vida tiene más luz desde que llegaste a mi vida. Por las risas, las sonrisas, las miradas, la locura... *There is always some madness in love. But there is also always some reason in madness.* F. Nietzsche.

A la Aya, por la eternidad en el tiempo y en el espacio. Porque, juntos, hemos aprendido el valor de la amistad.

A mi hermano, Marco, por demostrarme que la amistad, cuando es verdadera, es incondicional. Atoncito, Ericcito, Kievenikus, Beaviribis, Javier, Alejandro porque son ustedes con quienes he crecido. Mis hermanos. *I no doubt deserved my enemies, but I don't believe I deserved my friends.* Walt Whitman.

A Alejandra, Goya, Le Ricardé, Le Sebastiané, Le KGMé, Le Gerardé, la madre, Linda, Edgar y Atenea (¡qué voz!), porque *Reality is that which, when you stop believing in it, doesn't go away*. Philip K. Dick.

Al más antiguo de todos, Elías (F.B.), por todas las cosas que nos hacen mantener la "guerra". Moghan, Pequeño, Marthita Aguayo y Alejandra, porque: *Without friends no one would choose to live, though he had all other goods*. Aristóteles.

Al Ramo, maestro de maestros, Mané, ¿te cae que algún día lo aplicaremos?, Xumo, por tu sabiduría y autenticidad, Morita, por las sorpresas y porque nadie más para deleitarnos, Alejandro, porque Dios está muy ocupado odiándote para fijarse en mí, Damián, por ser el único físico entre nosotros, Rafael, por el foro y con ello, mantenernos unidos. Nata, Amanda, Bárbara, Ferrán, Laura, Mauricio y Masaya por las conversaciones, los bailongos, las cantatas y risas con y sin sentido.

A la Miss por haberte convertido en una excelente amiga. Por Cuba, la chamba, las risas, los sabores y sinsabores que disfrutamos en cada conversación.

A la Sujeta (¡maestraza!), Serch, Mau, Aldo, Daniel, Laura, Clau, Abel, Balpo, Ángel, Chris, Capotito y Ruth: por la amistad, las noches de enajenación y los amaneceres...

A Hugo, César, Vasthi, Miguel y Laurita por Peter G., Pink F., J. Sabina, etc. y las fogatas enmedio de tanto frenesí.

Al Japo, gracias por tanto en tan poco. A la Serena Morena, Marie, Monique y Kenya, por la definición de Kundera.

Al Pablo por tu enorme apoyo y por recordarme que la amistad se cultiva: *Don't walk behind me, I may not lead. Don't walk in front of me, I may not follow. Just walk beside me and be my friend*. Albert Camus.

Abraham y Mabelita por todo. Puros buenos recuerdos.

Y no, por ser los últimos, los menos importantes: Vapo, Elena, Melinda (los dramas más risueños), Power-punch, Pam-pam, Itzia (¿tú de nuevo?), Anahí (por el Conversa), la Flaca y Oswaldo, Pollo, Imelda, Aldo, Hunter, Alan, la banda jiu-jitsoka, Jess y Lobo, Omaru-san y la banda rolera, José (por el cubo, la música, etc.), Karel, Manuel B. (por el rollo en el C. de Tlalpan), Rano, Richie, Chac, Ro, al Sweter y Tormentita.

The man of knowledge must be able not only to love his enemies but also to hate his friends. Friedrich Nietzsche.

Índice general

Agradecimientos	VII
Introducción	IX
1. Los antecedentes necesarios	1
1.1. Introducción	1
1.2. Emergencia de estructuras ordenadas	1
1.2.1. Sistemas físicos	2
1.2.2. Sistemas químicos	4
1.2.3. Sistemas biológicos	7
1.3. Modelación matemática en morfogénesis	10
1.3.1. Modelos discretos	11
1.3.2. Modelos continuos	14
1.3.3. Modelos discreto-continuos	20
1.4. El mecanismo de Turing	22
1.4.1. La bifurcación de Turing	23
1.4.2. Un ejemplo ilustrativo	33
1.5. Críticas a la proposición de Turing	40
2. Sistemas con difusión dependiente del tiempo	43
2.1. Introducción	43
2.2. Bases físicas de la difusión dependiente del tiempo	44
2.2.1. En sistemas no vivos	44
2.2.2. En sistemas vivos	60
3. Análisis de Turing con difusión dependiente del tiempo	67
3.1. Introducción	67
3.2. Análisis de estabilidad con Teoría de Floquet I	69

3.3. Análisis de estabilidad con Teoría de Floquet II	75
3.4. La maquinaria de Turing dependiente del tiempo	83
4. Emergencia de patrones en S-R-D-A	87
4.1. Introducción	87
4.2. Advección y algunas de sus manifestaciones	88
4.2.1. Leyes de conservación	89
4.2.2. Algunos ejemplos	89
4.3. Algunos modelos ecológicos	92
4.4. Patrones de Turing en S-R-D-A	93
4.4.1. Selección de modos iniciales.	101
4.4.2. Diferencias de fase y términos advectivos	102
4.5. Planta-polinizador-herbívoro	104
4.5.1. Resumen de la dinámica espacio-temporal	108
4.5.2. Resultados numéricos	109
5. Un acercamiento a la emergencia de patrones en S-R-D_t-A	115
5.1. Introducción	115
5.2. Los dos procesos	116
5.3. Crecimiento del dominio	121
6. Discusión y Conclusiones	123
6.1. Recapitulación	123
6.2. Problemas interesantes	126
A. Ecuación de Continuidad y de Fokker-Planck	129
A.1. La ecuación de Continuidad	130
A.2. La ecuación de Fokker-Planck	130
B. La Teoría de Floquet	139
B.1. Motivaciones	139
B.2. Los resultados	140
Bibliografía	145

Introducción

La emergencia de estructuras ordenadas o patrones, es ubicua en la naturaleza, trátase de sistemas vivos o de materia inanimada. Las escalas espaciales y temporales en las que aquéllas se dan, recorren un amplio espectro tanto espacial como temporal. Investigar los mecanismos físicos, químicos o bioquímicos subyacentes a tales estructuras ordenadas, ha sido un problema que ha convocado a personas con el más variado perfil profesional desde biólogos, físicos, matemáticos o químicos quienes –en algunos casos desde puntos de vista muy diferentes– se han acercado para estudiar estos problemas. A principios del siglo pasado, el zoólogo escocés D’Arcy W. Thompson, al referirse a la búsqueda de los mecanismos subyacentes a la emergencia de patrones –con la elegancia y la profundidad que caracterizan a su obra [1]– escribió:

Célula y tejido, concha y hueso, hoja y flor son representaciones de la materia que, obedeciendo las leyes de la física, sus partículas se mueven, moldean y conforman... Sus problemas de forma son, en primera instancia, problemas matemáticos, sus problemas de crecimiento son esencialmente, problemas físicos y el morfológico es, ipso facto, un estudiante de la Física.

En la línea de pensamiento *thompsoniana*, a principios de la década de los cincuenta, Alan Mathison Turing, el padre de la computación moderna, propuso un mecanismo morfogénico. Su proposición se basa en la ocurrencia simultánea de dos procesos físico-químicos: la reacción de sustancias a las que llamó morfógenos y la difusión de éstos por el medio. Él supuso que en la base de la emergencia de patrones se encuentran estos dos procesos. La formulación matemática de la proposición *turingiana* toma la forma de un par de ecuaciones diferenciales parciales no lineales de tipo parabólico, llamadas ecuaciones de

reacción y difusión y al conjunto de condiciones sobre los parámetros para los que se desencadenan la emergencia de estructuras ordenadas de acuerdo a este mecanismo, define la llamada *bifurcación de Turing* (véase [2]). Siguiendo el enfoque de Turing se han estudiado en los más variados sistemas y escalas. Desde el crecimiento de una colonia de bacterias, específicamente *Bacillus subtilis*¹ (véase [3]), hasta la formación de bandas de vegetación en zonas semidesérticas. A pesar de los muchos casos en los que el mecanismo propuesto por el padre de la computación moderna, ha dado resultados interesantes que sin duda alguna pudieran calificarse de exitosos, también ha sido criticado. Una línea de estas críticas proviene de que Turing no incorpora factores que, según diversos estudios, determinan la selección de patrones. Precisamente el efecto del crecimiento del dominio, así como el cambio de forma (curvatura) de éste, son dos factores no considerados originalmente y de los cuales se ha documentado en recientes publicaciones, influyen de forma determinante en la selección de patrones. En 2004, Plaza *et al.* [32] propusieron un marco teórico en el que se incorporan ambos factores. El modelo propuesto por estos autores es tanto para una dimensión, como para dominios bidimensionales. Las simulaciones numéricas realizadas por ellos sobre diferentes dominios de dimensión dos, muestra fehacientemente el papel determinante que juegan los dos factores mencionados. El modelo propiamente dicho, consta de dos ecuaciones diferenciales parciales en las que la parte difusiva incluye términos de reacción, advección y dilución, todos ellos dependientes de las variables espaciales y temporales. Además, consideran términos reactivos de tercer orden. Esta contribución, a pesar de su importancia, no aborda o lo hace apenas de forma incipiente, los análisis de carácter teórico a fin de dar las condiciones suficientes para la emergencia de patrones.

El problema descrito en las últimas líneas, fue la motivación original de esta tesis a lo largo de la cual me propongo hacer algo que bien pudiera calificarse de un primerísimo acercamiento teórico-numérico con vistas a la eventual solución del problema general. Para ello, primero documenté –a través de varios ejemplos físicos y ecológicos– el surgimiento de procesos difusivos que dependen del tiempo. Si a las ecuaciones que los describen, se les incorporan términos de interacción, se originan sistemas de reacción-difusión en los que la

¹Ésta comienza en una pequeña región de alguna superficie y extiende su dominio sobre la superficie donde crece. La variedad de estructuras dependen de la concentración de nutrientes, por ejemplo.

difusión es dependiente del tiempo. El ejemplo que sirve de punto de partida, fue el propuesto para la descripción de la interacción de dos poblaciones: una de fitoplancton y otra de zooplancton poblaciones que, en condiciones naturales, están sometidas a transporte que les imponen las corrientes marinas en las que viven. Este es el origen del término advectivo. La emergencia de parches en los que se llegan a dar explosiones demográficas (como la marea roja) de estas poblaciones, motiva el investigar las condiciones que ha de cumplir el sistema de reacción-difusión-advención, con coeficientes de difusión periódicos en tiempo, a fin de que emerjan esas estructuras ordenadas. Además de la parte analítica (bifurcaciones, aproximaciones asintóticas, etc.) el estudio que hago incluye la obtención de soluciones numéricas de dicho sistema y de otro que describe la dinámica espacial y temporal de la interacción de tres poblaciones: una de plantas, polinizadores y otra de herbívoros. En ambos casos, éstas muestran la emergencia de distintos tipos de patrones en la distribución espacial de las densidades poblacionales en interacción.

El material contenido en esta tesis se expone en el siguiente orden. En el Capítulo 1 a manera de motivación, presentaré algunos sistemas que exhiben estructuras espaciales ordenadas, haré una breve recopilación de los diferentes enfoques matemáticos que se han usado para estudiar los procesos morfogenéticos, expondré el mecanismo propuesto por Turing y finalmente, analizaré un caso particular para una interacción depredador-presa.

Después, en los Capítulos 2 y 3, entraré en materia de la difusión dependiente del tiempo. Expondré algunas evidencias físicas en las que el coeficiente de difusión depende del tiempo.

Para ello, a partir de un modelo básico para la descripción de la interacción de tipo presa-depredador entre una población de fitoplancton y otra de zooplancton, se introduce un término de difusión dependiente del tiempo. De hecho, aquél es una función periodica de esta variable, cosa que tiene sentido si se piensa en el efecto de los cambios estacionales en los patrones de dispersión de las poblaciones en el océano. Por otro lado, se encontrarán las condiciones para que se dé la bifurcación de Turing.

Más adelante, en el Capítulo 4 se introducen términos advectivos, pero manteniendo constantes los coeficientes de difusión y se hace una análisis cuyo resultado da condiciones suficientes para que en el modelo resultante aparezca la bifurcación de Turing.

El cuerpo principal de la tesis termina en el Capítulo 5 en el que se hace una suerte de recuento de lo realizado y, con base en éste, se plantean algunos problemas abiertos en esta área y que, a mi juicio, su estudio constituiría la continuación de este como ya dije, primerísimo acercamiento al problema general mencionado párrafos atrás.

A fin de hacer más ligera la presentación, he redactado dos apéndices cuyo contenido, siendo importante para este trabajo, hubiera desviado la atención del lector de haberlos incluido en el cuerpo principal de esta tesis.

Capítulo 1

Los antecedentes necesarios

1.1. Introducción

Algunos de los procesos que hacen posible la aparición de patrones se efectúan rápidamente; mientras que otros lo hacen lentamente.

En tanto que materia, no importa si se trata de sistemas biológicos, químicos, físicos todos, absolutamente todos, obedecen las leyes físicas y algunas de éstas se expresan matemáticamente en términos de ecuaciones diferenciales.

1.2. Emergencia de estructuras ordenadas

El fenómeno de *autoorganización* en *estructuras disipativas* es un fenómeno típico de sistemas que se encuentran fuera de equilibrio termodinámico.

Estas estructuras se dan fuera del equilibrio y difieren en gran medida de aquéllas que sí lo están. Para comprender mejor esta diferencia, considérese un cristal, el cual tiene un arreglo que se mantiene en equilibrio respecto al estado estable cuando se somete a un proceso dinámico que alimenta de energía al sistema. La estructura disipa la energía entrante produciendo un aumento en la entropía lo que a su vez, hace que el proceso sea irreversible. He ahí la gran diferencia.

Las estructuras disipativas son generalmente macroscópicas cuyo tamaño es independiente de las partículas que la conforman (moléculas, individuos, etc.). El tipo de estructuras disipativas que presentan *autoorganización* aparecen en la naturaleza muy a menudo. Ejemplo de éstas se encuentran fluidos que

exhiben inestabilidades convectivas, reacciones químicas o bien, en sistemas biológicos como el crecimiento de colonias de bacterias. A continuación expongo algunos ejemplos.

1.2.1. Sistemas físicos

Como primer ejemplo de un sistema que exhibe una estructura ordenada es la convección de Rayleigh-Bénard¹. La descripción idealizada del experimento consiste en dos placas horizontales separadas cierta distancia d , de área infinita y que se consideran perfectos conductores de calor entre las cuales se encuentra un determinado fluido. Éste, es empujado manteniendo la placa inferior a una temperatura constante mayor que la temperatura de la placa superior. Es decir, si la placa superior tiene temperatura T_1 , la placa inferior estará a una temperatura $T_2 = T_1 + \Delta T$ (figura 1.1).

Si la diferencia $\Delta T > 0$ es pequeña, entonces el fluido permanecerá en reposo y el transporte de calor será uniforme entre las dos placas, intercalando este transporte entre ambas placas. A este fenómeno se conoce como *conducción*.

Cerca de la placa inferior, el fluido es menos denso que en la placa superior, haciendo que el campo gravitacional provoque una situación de inestabilidad. Dado que el fluido (éste se expande al calentarse) no puede llenar todo el espacio, puesto que podría no haber lugar a dónde ir hacia arriba, la conservación de la masa induce una inestabilidad para una longitud de onda finita. Esta posible inestabilidad ocurre cuando ΔT es suficientemente grande como para vencer los efectos disipativos de la conducción térmica y la viscosidad.

Lord Rayleigh introduce un parámetro, el número de Rayleigh, R , de control de estas inestabilidades y se expresa por la razón entre la fuerza de flotación $\rho_0 \alpha g \Delta T$ y la fuerza estabilizadora disipativa $\nu \kappa \rho_0 / d^3$, es decir

$$R = \frac{\alpha g \Delta T d^3}{\kappa \nu},$$

¹La primera descripción de la convección fue hecha en 1870 por Benjamin Thompson, el Conde Rumford quien investigó la transferencia de calor en una tarta de manzana. El personaje que hizo estudios experimentales de mucha mayor importancia, fue el francés Henri Bénard y en 1916 John William Strutt, Lord Rayleigh en 1912, publica un artículo donde explica lo que ahora se conoce como *convección de Rayleigh-Bénard*.

donde ρ_0 es la densidad promedio del fluido, α es el coeficiente de expansión térmica, g la aceleración gravitatoria terrestre, ν la viscosidad cinética, κ la difusividad térmica. Experimentalmente se encuentra que la inestabilidad ocurre para $R = R_c \sim 1708$, que es independiente del fluido en cuestión (véase [13] donde, además, se dan un gran número de referencias).

Para valores de R ligeramente mayores que R_c , el surgimiento de los patrones que se forman es limitado, esto es debido a que el flujo convectivo transporta parte del calor aplicado a las placas, provocando que tanto el gradiente de temperatura (en norma), como la fuerza de flotación disminuyan.

Existe, en un punto determinado, un balance entre la fuerza provocada por el gradiente de temperatura aplicado y las fuerzas debidas al movimiento inducido por la convección, el fluido alcanzará un estado en el cual el flujo es estacionario cerca de un punto mínimo² en el cual empieza a formarse alguna estructura. Los patrones en forma de rollos que están representados en la figura 1.2, son el ejemplo más simple. Sin embargo, la superposición de éstos puede formar hexágonos o cuadrados.

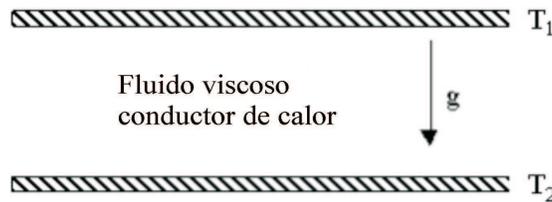


Figura 1.1: Fluido viscoso entre dos placas conductoras perfectas de calor: $T_2 > T_1$.

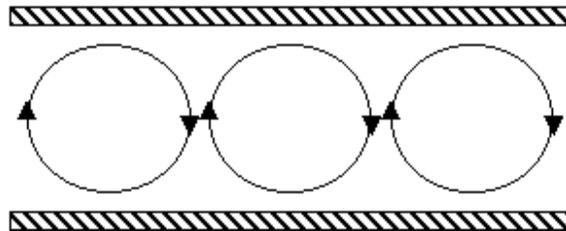


Figura 1.2: Corte transversal de un estado ideal para la convección de Raleigh-Bénard.

²Éste se encuentra al variar el número de Rayleigh.

Experimentalmente los estados ordenados sólo pueden ser obtenidos bajo ciertas condiciones, éstas son tales que $R \gtrsim R_c$ o bien que el recipiente donde se haga el experimento tenga alguna geometría específica. En el caso de los rollos, éstos tienden a alinearse perpendicularmente a las paredes del recipiente, de esta forma es mucho más sencillo obtener rollos que sean paralelos cuando el recipiente es largo y angosto. Si el valor de R se aumenta bruscamente por encima del valor crítico R_c , el sistema exhibe patrones que están desorganizados espacialmente (véase [13]).

Una característica de las inestabilidades en la hidrodinámica y flujos convectivos, es que las cantidades que tienen significado físico, pueden ser expresados en términos de parámetros sin dimensión (por ejemplo, el *número de Rayleigh*). Los resultados que se obtengan son válidos para todos los fluidos que satisfagan las ecuaciones de Navier-Stokes. Estos fluidos pudieran ser agua, mercurio, aceite, aire o inclusive helio en su estado líquido o gaseoso, por dar ejemplo de algunos.

En [13] se encuentran más ejemplos de sistemas físicos que exhiben alguna estructura ordenada, ahí se tratan sistemas como la convección de Bénard-Marangoni o la convección en alguna mezcla de fluidos, también se estudia el flujo de Taylor- Couette, entre otros.

1.2.2. Sistemas químicos

Sistemas en los cuales las reacciones químicas son protagonistas, muestran una gran variedad de estructuras autorganizadas. Éstos combinan fenómenos hidrodinámicos³ con reacciones moleculares que se estudian en química. Muchos de los patrones espaciales que se presentan en hidrodinámica y en cambios termodinámicos de fase, son fuertemente influenciados por procesos químicos. Por ejemplo, los patrones de Liesegang debidos a inestabilidades inducidas por difusión en reacciones fotoquímicas (véase [13]).

Aunque desde principios del siglo pasado se han observado experimentalmente oscilaciones en sistemas químicos, el crecimiento en el interés de este tipo de fenómenos fue hasta que los experimentos del químico soviético Boris Pávlovich Belousov (1951). Los cuales perseguían desarrollar un modelo químico simple de la oxidación de moléculas orgánicas en las células vivas, es decir,

³Un ejemplo hidrodinámico que presenta autorganización es el dado por el experimento de Taylor-Couette.

en la búsqueda de copiar de alguna forma el *ciclo de Krebs* en una versión inorgánica que siendo, mucho más simple, tuviera las propiedades cualitativas de esa complicada cadena de reacciones químicas. Los primeros experimentos se realizaron en un tubo de ensaye y exhibieron oscilaciones químicas con un periodo aproximado de un minuto⁴ cuya imagen visual era un cambio periódico en la coloración de la sustancia reaccionante. En nuestros días esta reacción recibe el nombre de *reacción de Belousov-Zhabotinsky*⁵ (BZ).

Las observaciones experimentales principales de la reacción BZ son los siguientes:

- (i) El sistema ligeramente perturbado, esto bajo ciertas condiciones, muestra oscilaciones espontáneas cuyo periodo es del orden de minutos. Estas oscilaciones pueden ser observadas si el ferrión es usado como un agente catalítico. Si es así, entonces habrá una alternancia entre el estado reducido Fe^{2+} con color naranja y el estado oxidado Fe^{3+} caracterizado por el color azul.

Si las condiciones experimentales son diferentes en las concentraciones, la temperatura, etc., el sistema puede ser estable en ambos estados (reducido u oxidado). También el sistema puede ser biestable, situación caracterizada por el hecho de que, para ciertos valores de los parámetros, éste puede ir a un estado u otro dependiendo de las condiciones iniciales. En ambos casos el sistema es excitable esto es, que ciertas condiciones iniciales decaen rápidamente a un estado estable; mientras que otras dominan el comportamiento para desviaciones grandes antes de alcanzar un estado estable.

- (ii) Si el sistema no está en una situación de ligero agitación, y éste se encuentra en un estado de equilibrio, es posible que perturbarlo localmente de manera que se propaguen pulsos circulares con rapidez y forma constantes. Si el estado de equilibrio es rojo, el pulso aparece como una inhomogeneidad azul que decae al color rojo inmediatamente

⁴No pudo publicar sus estudios debido a que las revistas rusas especializadas a las que envió sus resultados rechazaron su publicación argumentando que contradecía la segunda ley de la termodinámica. Hecho que después se mostró falso.

⁵Anatol Zhabotinsky, estudiante de posgrado que, introduciendo modificaciones, mejoró la solución dada por Belousov y averiguó el efecto que producía la dimensión espacial en la reacción.

después del perturbación. Estructuras de este tipo son conocidas como *auto-ondas*.

- (iii) Existen *patrones blanco*⁶ que emiten periódicamente pulsos como los descritos en el inciso anterior, estos pulsos son emitidos desde un punto llamado *marcapasos*. Se observa que los diferentes blancos tienen frecuencias variables con emisión de pulsos cada uno de los cuales tiene rapidez constante. Si la región fuera de estos blancos es oscilatoria, la frecuencia de éstos es mayor que la frecuencia dentro de esta región, produciendo que los pulsos sean aniquilados en el borde exterior de los blancos, esto debido a que éstos tienen una rapidez menor a la de los pulsos.

Cuando dos blancos se tocan, forman una estructura anular de tal forma que no penetran uno al otro. El blanco con mayor frecuencia absorbe al de menor frecuencia.

- (iv) Si un solo pulso es roto en un punto, se forma un patrón con forma de espiral que comienza a girar alrededor del punto de ruptura. Estos patrones son conocidos como *rotores* o *reverberadores*.
- (v) Las estructuras en forma de espirales (rotores) se han encontrado en reacciones que se efectúan en un medio con poca profundidad en cajas de Petri. Este hecho puede suponer que estos patrones son bidimensionales. También se han hecho experimentos en los cuales se exhiben rollos que se van envolviendo como una espiral, es decir "espirales bidimensionales" que, al subirlas a una dimensión más, preservan su forma y movimiento en la variedad original. Otro tipo de patrones tridimensionales que se han observado son ondas esféricas que son emitidas desde un punto, o bien *ondas enrolladas toroidales* con y sin torcimiento (como los que se observan en el humo de un cigarrillo).

La figura 1.3 muestra algunas de estas observaciones.

La reacción BZ, es el ejemplo por excelencia de un sistema dinámico en la química que presenta autoorganización. Para más detalles véase [49].

⁶Blanco en el sentido de una rueda de tiro al blanco.



Figura 1.3: De izquierda a derecha: propagación de una onda de oxidación en un medio sin agitar en un substrato de ácido férrico y malónico.

1.2.3. Sistemas biológicos

También en el mundo de lo vivo se encuentran sistemas con estructuras ordenadas. De hecho, el objetivo de esta tesis es el estudio de un modelo teórico que arroje luz en el estudio de este tipo de sistemas.

Los modelos teóricos más populares que se usan en sistemas biológicos con autoorganización, son muy similares a los que se usan en sistemas físicos o químicos pues en buena medida son inspiradores precisamente por éstos. Además que, a pesar de esta característica en común, la biología es una rama de la ciencia que tiene muchas preguntas sin responder. Aunque es cierto que los procesos involucrados en la vida misma, se encuentran fuera del equilibrio termodinámico, aún se está muy lejos de la existencia de leyes biológicas que los describan completamente. Es por esto que, debido a la complejidad de ésta, es necesario hechar mano de leyes físicas y químicas⁷. De hecho, el objetivo de los teóricos es establecer –con ayuda de modelos matemáticos– leyes que describan fenómenos biológicos cuya explicación aún es una tarea pendiente.

El estudio de patrones biológicos considera dos ingredientes básicos:

- (i) La construcción de un modelo que incorpore los mecanismos y las características del sistema que se esté estudiando.
- (ii) El análisis de la dinámica espacio-temporal del modelo en la cual dependerá de los parámetros involucrados.

⁷Véase la cita en la introducción, página IX.

El proceso de modelación matemática de la morfogénesis de sistemas biológicos es el primer ingrediente de una complejidad enorme. Por ello, lo que se hace es hacer un símil de modelos construidos para fenómenos físicos y químicos, dando argumentos plausibles a partir de observaciones experimentales.

En los seres vivos, hay una gran variedad de fenómenos y procesos, en virtud de los cuales se da la formación de estructuras ordenadas. Por ejemplo, en la piel de algunos mamíferos como el leopardo, la cebra o algunos reptiles, las sustancias que dan el pigmento (melanina, eumelanina, etc.). Los estudios que se han hecho al respecto, usan a menudo la formación de patrones provocadas por inestabilidades espacio-temporales (véase [13, 49], entre otros).

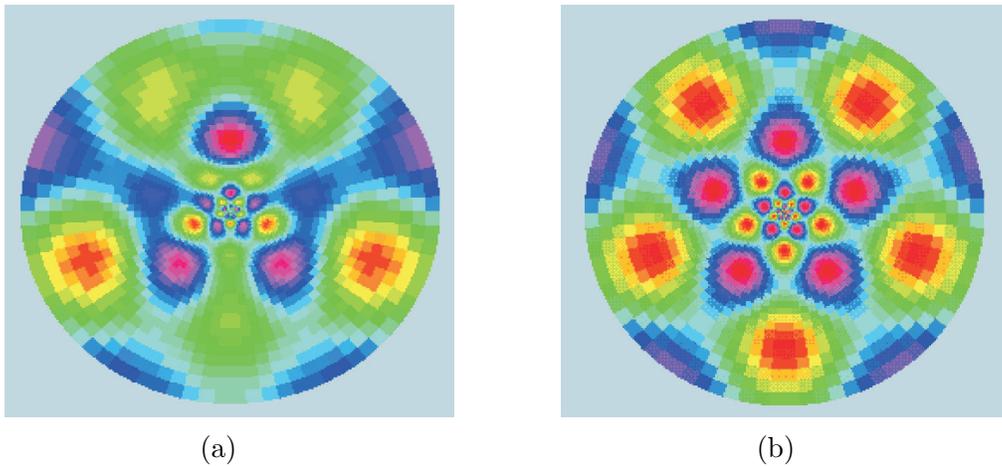


Figura 1.4: Actividad espontánea en un modelo de la corteza visual bajo el influjo de psicotrópicos.

Otro tipo de patrones que se han estudiado tienen bases fundamentalmente fisiológicas. Por ejemplo, se ha observado que en las primeras etapas de las alucinaciones debidas a psicotrópicos, se caracterizan por la aparición de estructuras geométricas simples que, aparentemente, son independientes de experiencias previas y del entorno (Ermentrout *et. al.* 1979, Murray 1989). Estas estructuras se clasifican de acuerdo con formas geométricas como rejillas o latices, espirales y telarañas y se interpretan como inestabilidades de tipo estacionario que son espacialmente periódicas (véase [13]) de la actividad neuronal en la corteza cerebral (véase la figura 1.4). A fin de estudiar este tipo de patrones, en [49], se da la transformación de las coordenadas de la corteza,

que se suponen rectangulares, en coordenadas polares de la retina del campo visual. Una característica muy importante que tiene la transformación que presentan Ermentrout *et. al.*, es que es conforme y por tanto, preserva ángulos. Esta propiedad determina que si dos curvas que se intersecan con un ángulo determinado, bajo una transformación conforme seguirán intersecando con el mismo ángulo. Para ello se tienen que satisfacer las ecuaciones de Cauchy-Riemann⁸

$$\frac{\partial f}{\partial x} = -i \frac{\partial f}{\partial y}.$$

En todos los distintos tipos de estructuras que se mencionaron en el párrafo anterior, se ha observado que los patrones corticales⁹ que corresponden a formas simples constantes de las coordenadas retinales, son estructuras regulares y son soluciones ideales de un sistema que exhiba patrones cuya inestabilidades son periódicas en el espacio y estacionarias en el tiempo, nombradas en [13] como del tipo I_s . El siguiente es proponer un modelo de la red neuronal acoplado¹⁰ tal que tenga un rango amplio en las coordenadas espaciales y de rango retardado en el tiempo. Este modelo debe tener elementos de excitación local y de inhibición lateral, además que el análisis de estabilidad debe tener las características correspondientes a inestabilidades del tipo I_s (véase [49]).

Otro ejemplo de estructuras ordenadas en sistemas vivos, es la formación de patrones durante el crecimiento, por ejemplo en las conchas de los moluscos. El significado biológico y la función de la pigmentación en estos animales, no es claro aún, pues muchos de éstos son nocturnos o viven bajo la arena.

Para una referencia y análisis más detallado de este tipo de sistemas y la presentación de más ejemplos con estructuras ordenadas, véase [13] y para sistemas biológicos, véase [49].

En [13] se puede ver un recorrido amplio en la formación de patrones fuera del equilibrio en distintas disciplinas de la ciencia como la física, la química y la biología.

Quizá sobra decir la importancia que tienen en la Biología Matemática los trabajos de de J. D. Murray muchos los cuales recopilan en sus libros (véase

⁸Para una función $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$, derivable, se prueba que sus derivadas satisfacen estas ecuaciones lo que, a su vez, tienen consecuencias muy importantes no sólo en la teoría sino en muchas aplicaciones. Recomiendo ampliamente la consulta de [57].

⁹Relacionados con la corteza cerebral.

¹⁰Esto sólo tiene sentido para este ejemplo.

[48, 49]). En éstos, hay una gran variedad de ejemplos biológicos que presentan autoorganización. Su autor realiza los análisis con suficiente profundidad, por lo que ésta es una referencia obligada.

1.3. Modelación matemática en morfogénesis

Como lo adelanté en la Sección 1.1, expondré algunos de los enfoques matemáticos que se han usado en los procesos morfogenéticos. Pero antes, haré una brevísima reseña sobre el estudio de la modelación de estructuras disipativas. Uno de los primeros estudiosos en este campo, fue el químico belga-estadounidense Ilya Prigogine quien hizo importantes contribuciones a la ciencia en general, y a la física-química y mecánica estadística en particular. Ganó el Premio Nobel de Química en 1977 por su aportación al estudio de estructuras disipativas y cabe destacar que fue pionero en la construcción de la teoría formal de la autoorganización, la cual está basada en la termodinámica fuera del equilibrio.

En su trabajo, Prigogine considera sistemas termodinámicos no-lineales lejos del equilibrio y, haciendo uso de teoría de bifurcación, analiza la selección de estados. Además, sugiere que un sistema fuera de equilibrio minimiza la producción de entropía, eligiendo el estado acorde a la misma. Dio el nombre de patrones a aquellos estados de los sistemas disipativos que se encuentran lejos del equilibrio.

En 1975 Rolf Landauer refuta las ideas de Prigogine argumentando que no es condición necesaria, en general, a estados estables puesto que no se puede determinar el estado favorable del sistema analizando sólo una vecindad del estado estable, se tiene que considerar la dinámica global fuera del equilibrio.

La termodinámica fuera del equilibrio está aún incompleta, pero en sistemas químicos es posible exhibir inestabilidades que resultan en patrones estacionarios en tiempo y espacio o que exhiben movimiento, es decir patrones que cambian de posición sin alterar su forma. Aunque las dificultades mencionadas por Landauer siguen estando presentes en la teoría de formación de patrones, en sistemas químicos es posible hacer un estudio profundo e interesante obteniendo resultados novedosos. En particular, el estudio del crecimiento de las formas en sistemas biológicos o morfogénesis ha sido un tema de estudio importante para la ciencia en general. Personajes como Nicholas Rashevsky, considerado como uno de los precursores del uso de

modelos matemáticos contruidos con bases físicas en el tratamiento de sistemas biológicos, a mediados de los años treinta del siglo pasado, estudió las inestabilidades inducidas por difusión. Rashevsky propuso un mecanismo similar a la división de células que podría ser explicado por medio del comienzo de la inestabilidad de gotas en algún líquido. Sin embargo, sus ideas no fueron aceptadas de buen grado por un gran número de biólogos hasta que, en 1934, presenta su análisis "físico-matemático" de las fuerzas que actúan en una célula esférica ideal. Aunque estas ideas son suficientes para explicar la división de células, su teoría no fue aceptada totalmente, puesto que no todas las células son esferas, a lo que Rashevsky argumentó que había que comenzar con un modelo sencillo en primera instancia, con una idealización del problema (véase [44]).

Afortunadamente ha habido una gran actividad de parte de físicos, biólogos (teóricos) y matemáticos en el desarrollo de modelos y teorías que expliquen el origen de las formas. Gracias a ello, existen una gran diversidad de éstos. A continuación haré una breve recopilación de algunos ejemplos de los diferentes modelos matemáticos.

Los enfoques matemáticos que se han usado para estudiar los procesos morfogénéticos se pueden dividir en dos grandes familias: los *modelos discretos* y los *modelos continuos*.

1.3.1. Modelos discretos

Los modelos donde se considera que la dinámica del sistema está dada por cambios discretos del tiempo y/o espacio, se les conoce como discretos. Uno de éstos -quizá los más destacados- son los llamados *autómatas celulares*, los cuales intentan capturar que, a cierto nivel de organización los individuos estamos constituidos por entes discretos, como las células las cuales pueden estar en un número pequeño de estados.

Considérese una región del espacio que ha sido discretizada por celdas previamente de forma uniforme. Cada celda es caracterizada por un estado tomado de un conjunto finito de posibilidades definidas de antemano¹¹. El tiempo también se discretiza de tal forma que a cada unidad de tiempo, cada celda cambia de estado obedeciendo a una regla establecida¹² también con

¹¹Este conjunto de posibilidades conforma un universo de estados pequeño.

¹²Llamada *función de estado*.

anterioridad. Ésta puede ser función de la misma celda en el estado anterior o bien, de los vecinos de cada una de las celdas. Los autómatas celulares más sencillos son aquellos donde se toma en cuenta una tira de celdas con reglas que son función a *primeros vecinos*, es decir sólo se toman en cuenta los estados anteriores de la misma celda y/o de aquellas que son contiguas. Sin embargo, la función de estado que rija el mecanismo del autómata puede ser tan compleja como el fenómeno a modelar lo requiera.

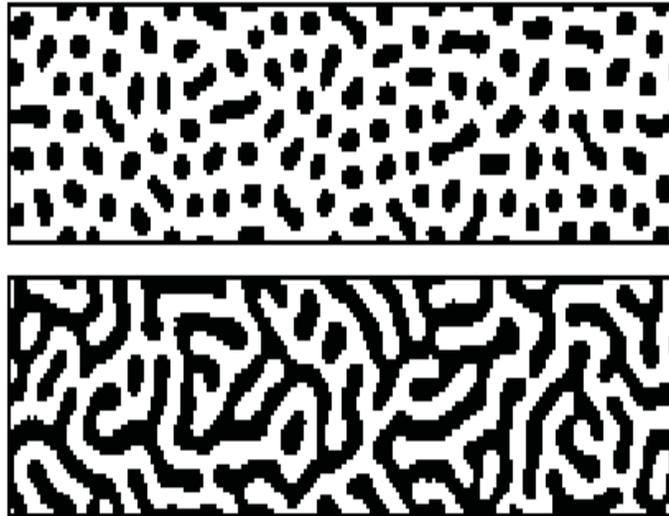


Figura 1.5: Patrón generado a partir de la propuesta de Young.

En [36] se menciona el trabajo de Young donde propone uno de estos modelos para la piel de un mamífero usando sólo dos estados: uno representa la pigmentación y el otro su ausencia. Las imágenes que se obtienen a partir de la simulación, son muy similares a las que se obtienen en un modelo continuo de reacción-difusión. Véase la figura 1.5.

Uno de los prioneros en el uso de autómatas celulares para el desarrollo de estructuras en forma de dedos, fue el matemático S. Ulam¹³, quien propone un espacio discretizado que provee de un medio para la detección de *colisiones* entre ramificaciones. La estructura se forma en una red cuadrada (supóngase

¹³Matemático polaco-americano involucrado en el proyecto Manhattan, desarrollado por la milicia Estadounidense en 1942 a cargo del General Leslie R. Groves. El objeto de este proyecto ultra secreto, era construir una bomba atómica antes que lo hicieran Alemania o Japón.

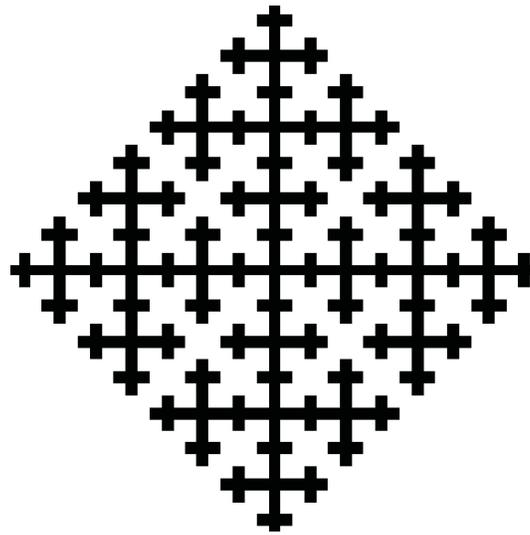


Figura 1.6: Cruces de Malta.

infinita) del autómata que comienza con una sola célula de una semilla y en cada iteración los patrones se extienden hacia las celdas adyacentes a menos que los *dedos* que se van formando choquen. Ulam llamó a la figura que se observa, *cruces de Malta*. Véase la figura 1.6. Aún así, es posible reproducir este proceso en rejillas con distinta geometría como hexágonos o triángulos obteniendo patrones con ramificaciones que llegan al centro de la rejilla.

También se han propuesto autómatas celulares en tres dimensiones que son utilizados para simular, por ejemplo, el crecimiento de las raíces de un árbol. Éstos se les conoce como *voxel-autómatas*¹⁴.

Los modelos discretos conocidos como de *agregación limitada por difusión* (DLA, por sus siglas en inglés), por sus siglas en inglés, consiste en tomar una célula (o partícula) en una red de tal manera que se mueva libremente de forma aleatoria para cada unidad de tiempo y otra fija en alguna parte de la red. Debido a que se considera que la célula está confinada a la región que define la red, en los bordes de ésta, rebota. Una vez que la célula alcanza a la que está fija, ésta se queda pegada en ella. Esto provoca que alguna otra célula tenga mayor probabilidad de unirse a la estructura donde el área de

¹⁴Voxel (término en inglés) es el cubo más pequeño dado por una discretización de alguna región en \mathbb{R}^3 . Este término es usado comúnmente cuando se hacen modelaciones tridimensionales.

contacto sea mayor. Así, sucesivamente, hasta que la estructura que se genera tiene forma de dedos o ramas. Véase la figura 1.7.

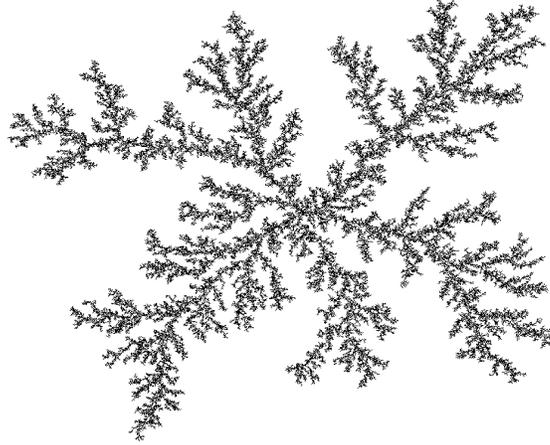


Figura 1.7: Ejemplo de un modelo tipo DLA.

Este es un modelo útil para la simulación del decaimiento de iones metálicos en un electrodo, por ejemplo. También se ha usado para la modelación de crecimientos de poblaciones que exhiban estructuras ordenadas con forma fractal, como por ejemplo el crecimiento de un bosque o una población de colonias de bacterias (*Bacillus subtilis*) en un medio controlado. En este contexto, es recomendable la lectura del Capítulo 14 del libro de Murray [48].

1.3.2. Modelos continuos

En los modelos continuos se considera que la variable tiempo, así como las variables espaciales toman valores reales, es decir $(t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n$.

Los modelos continuos que se estudian en esta tesis son aquellos que están relacionados con un proceso llamado *difusión*. Podría decirse que éste es el transporte de un material o sustancia química por medio de su movimiento molecular. Si se representan las moléculas de una sustancia química en un fluido que se encuentra aparentemente sin movimiento, se encontrará que a nivel microscópico, éstas exhibirán un movimiento errático golpeándose *aleatoriamente* unas con otras en el fluido en cuestión. Se debe mencionar que si se sigue la trayectoria de una partícula individual o la de una molécula el movimiento que describirán es conocido a menudo como *caminante aleatorio*.

En tal proceso, una sustancia química que se encuentra localizada inicialmente en alguna región tenderá a dispersarse. Es decir, habrá un transporte neto de la sustancia que en consecuencia de la segunda ley de la termodinámica, irá de regiones en las que la concentración es alta a una cuya concentración sea menor.

El fenómeno de difusión está presente en gran cantidad de procesos físicos, químicos, biológicos y, recientemente, se han hecho extensiones para estudiar procesos financieros.

Para la formulación matemática de la difusión véase el Apéndice A y particularmente el ejemplo A.1.

Los *modelos de reacción-difusión* fueron propuestos por Alan Mathison Turing, para explicar el rompimiento de simetría y homogeneidad que sucede en la emergencia de patrones en un medio continuo con una distribución inicial homogénea la cual se perturba espacial y temporal aleatoriamente (véase la sección 1.4). Matemáticamente, este proceso es descrito por medio de un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales parciales parabólicas acopladas.

Estos modelos pueden ser muy convenientes para generar patrones encontrados en diversos individuos como en las alas de una mariposa, los pétalos de una flor, la mancha en la piel de algunos felinos, entre otro tipo de estructuras en la naturaleza.

Otro proceso muy importante que en la emergencia de patrones y que aparece en varios sistemas, es la *quimiotaxis*. Para explicar en qué consiste este proceso, obsérvese que el sentido del olfato es un excelente instrumento para intercambiar información entre miembros de una misma especie. De hecho, una de las sustancias químicas culpable de este intercambio son las *feromonas*. Inclusive, en algunos peces el sentido del olfato es de vital importancia no sólo para la comunicación, sino también para la caza (como es el caso del tiburón). A veces, también, para la marcación de zonas territoriales es necesaria una cantidad grande de feromonas para generar una aglomeración de individuos de una especie, es decir una población.

A diferencia de la difusión, la quimiotaxis provoca un *impulso* en las partículas hacia un gradiente de concentración del quimioatrayente, no hacia menos el gradiente de ésta como ocurre en la difusión.

En las referencias [48] y [56] se estudia este fenómeno y se dan varios ejemplos en algunos procesos biológicos que son susceptibles de modelarse utilizando la quimiotaxis. Para su formulación matemática, la idea es tomar

en cuenta que el flujo total, \mathbf{J}_{Tot} , de la concentración en consideración, tiene dos componentes: una dada por la difusión de ésta \mathbf{J}_{Dif} y la otra debida a un proceso quimiotáctico \mathbf{J}_{Quim} , es decir \mathbf{J}_{Tot} se descompone así

$$\mathbf{J}_{Tot} = \mathbf{J}_{Dif} + \mathbf{J}_{Quim}$$

Si la difusión –actuando sólo ella– es un proceso que homogeneiza, la quimiotaxis puede interpretarse como un proceso que destruye lo hecho por la difusión. De esta manera, puede haber un equilibrio entre estos dos procesos provocando una heterogeneidad espacial, induciendo algún tipo de estructura ordenada (véase [49]).

Hay células que pueden ser influenciadas en su movimiento por la presencia de algún campo eléctrico aplicado. De hecho, éstas podrían alinearse con las líneas de campo, este fenómeno es conocido como *galvanotaxis*. Tomando en cuenta la deducción de la ecuación de reacción-difusión-quimiotaxis que se encuentra en [48] para grupos de amibas como la *Dictyoselium discoideum*, es posible extender esta idea para describir movimientos que se dan como respuesta a la presencia de un campo eléctrico. Para esto, se define un flujo galvanotáctico el cual está relacionado con el potencial eléctrico V . Así

$$\mathbf{J}_g = gn\nabla V,$$

donde n es el número de células, $g > 0$ un parámetro y ∇ denota el operador gradiente calculado respecto a las coordenadas espaciales.

Por otro lado, si se considera la contribución que podría existir debido al desplazamiento, $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, de las células, entonces el flujo debido a la convección es

$$\mathbf{J}_c = n \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}.$$

Este flujo también tendría su participación en el proceso.

Si, además se toman en cuenta la *tracción* que puedan ejercer las células, éstas generan un gradiente en la densidad de células en consideración. Las células que se mueven libremente en un gradiente de *adhesión*, tienden a dirigirse hacia células que se encuentran en zonas con una adherencia mayor, el flujo que se produce es muy similar al flujo quimiotáctico.

Ahora bien, también es plausible considerar efectos de largo alcance debido a las propiedades físicas del medio donde hay influencia del comportamiento no local. En [48] y [49] se dan los detalles que justifican la forma del flujo para

este caso al que se le llama *haptotaxis* o *mecanotaxis*. Así, el flujo haptotático es

$$\mathbf{J}_h = n(a_1 \nabla \rho - a_2 \nabla (\Delta \rho)),$$

donde a_1 y a_2 son parámetros positivos y ρ es la matriz de densidad¹⁵, $\Delta = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ es el operador de Laplace¹⁶.

Es posible introducir términos que indiquen efectos mecánicos como las fuerzas externas, fuerzas debidas a la viscosidad, la tensión o inclusive, la elasticidad del material (fuerzas mecanoelásticas). La combinación de estos flujos, determinan distintos escenarios de sistemas que modelan la morfogénesis de las células a nivel macroscópico.

Es importante señalar que la potencial formación de patrones que predigan estas ecuaciones, tienen que ser comparable con modelos experimentales que le den sustento físico. Al fin y al cabo las ecuaciones matemáticas por medio de los cuales se representan los modelos, son objetos abstractos que pretenden representar manifestaciones de la naturaleza. Los experimentos que se hagan sobre la materia, determinarán qué tan realistas son éstos.

Un trabajo interesante sobre la morfogénesis por agregación de colonias de bacterias llamadas *myxobacterias*, es el dado por Oshin *et. al.* en [43]. Estos autores proponen un modelo matemático que explica cuantitativamente el fenómeno de agregación y la aparición de patrones, debido a las ondas que aparecen en la fase de *ondulamiento*. Ésta es de las primeras que aparecen en un proceso donde una población de bacterias que se encuentra en condiciones de hambruna con comportamiento gregario, construyen una estructura cuya forma es específica de la especie dentro de la cual las células dispersan sus esporas¹⁷.

La diferencia entre las myxobacteria y algunas otras, es que las primeras se comunican por medio de contacto directo. En este caso, no habría un término en el flujo que describiera quimiotaxis.

El modelo estudiado por Oshin *et. al.*, está basado en observaciones

¹⁵La tracción ejercida por las células, genera gradientes en ρ .

¹⁶Aunque aquí, tanto el operador nabla como el operador de Laplace estén escritos en coordenadas rectangulares, pueden ser expresados en coordenadas generalizadas. No haré distinción alguna en la notación, simplemente indicaré la geometría cuando sea necesario.

¹⁷Cuerpo inactivo no reproductivo formado en algunas bacterias en respuesta a condiciones ambientales adversas.

experimentales. Sobre la movilidad celular y la comunicación entre células que coordinan el movimiento de las células para formar las estructuras ordenadas que se observan.

Esta comunicación se da por medio de una señal A que evalúa el estado de hambre y, dependiendo de ello, induce la primera etapa de agregación. Enseguida, una señal morfogenética C ayuda al movimiento de la célula y a la forma de la estructura que se va formando. La señal C es una proteína liberada en la superficie de la membrana celular que comunica información de una célula a otra. La esporulación, dependen de la actividad de la señal C la cual también, asegura que las esporas se dispersen formando una estructura ordenada.

Se ha observado que las myxobacterias rara vez se mueven de tal forma que retornen en "U"; de hecho, lo que hacen es cambiar su motor de impulso como lo hace un tren subterráneo (como el Metro), es decir la cabina se encuentra en una dirección y, cuando es necesario moverse en la dirección contraria, se usa la cabina que se encuentra en el otro extremo.

De esta manera, el modelo que se presenta considera cinco estados para una densidad local de células: dos estados de movimiento, uno a la derecha y el otro a la izquierda, dos estados en los cuales la densidad es sensible a la señal C, una que indica movimiento hacia la derecha y otro hacia la izquierda y, por último, un estado de transición que puede ser reversible en el sentido que puede caer en el estado de sensibilidad a la señal C, para la derecha o a la izquierda para después moverse. La razón de esto se debe a que si las células que se están moviendo, se encuentran atrapadas en un punto de alta concentración de las mismas, entonces puedan seguir moviéndose, ya sea hacia adelante o hacia atrás.

Una vez determinado el vector de estados (cuyas entradas son los mismos) de la población, se considera un flujo debido a la difusión de las células y otro debido a su movimiento natural. De igual manera, una matriz de transición entre estados. Así, se tiene la primera ecuación vectorial parabólica no lineal para los estados de las células. Debido a que las myxobacterias se consideran cilíndricas, éstas se alínean influenciando el movimiento natural de las demás células y el acumulamiento alargado que van formando. Por esto, se introduce un vector que describe la orientación de las células que tienen, además, rapidez constante. Este vector obedece, componente a componente, una ecuación parabólica donde se considera un término difusivo, el cual

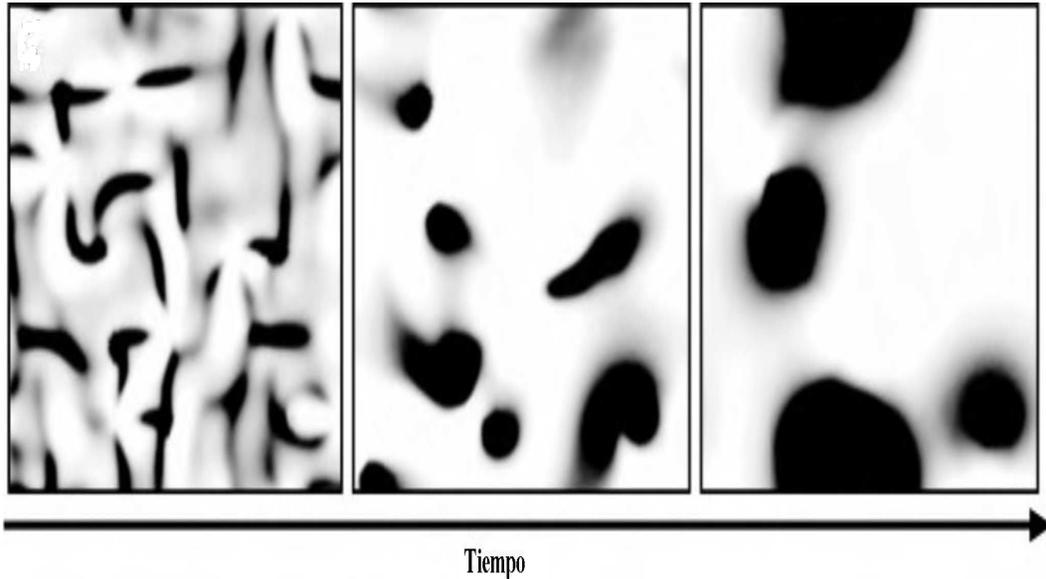


Figura 1.8: Simulación de espurulamamiento y agregación de bacterias a partir de una orientación aleatoria (véase [43]).

describe la tendencia de las células a alinearse cuando hay una gran cantidad de éstas. También se introduce otro "vector" que describe una torca de regreso que las células experimentan cuando se encuentran en una zona impenetrable de alta densidad. Cabe mencionar que depende del estado de las células. El modelo describe ondas bidimensionales de forma aproximada a las observadas en los experimentos y la morfogénesis por agregación de la myxobacteria (véase la figura 1.8). Para más detalles véase [43].

En los modelos continuos las herramientas matemáticas de mayor tradición son las ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. En este enfoque, se consideran el comportamiento del fenómeno punto a punto es decir, describen un comportamiento local, en el sentido de que el cambio depende sólo de la concentración exactamente en el punto en cuestión. Efectos a más largo alcance se logran, por ejemplo, usando ecuaciones diferenciales como la ecuación de difusión fraccionaria utilizada en la descripción de *vuelos de Levy*. Éstas se utilizan en la representación abstracta de las leyes de la física y de la química que dan el sustento teórico a dichos modelos. Véase la cita de D'Arcy Thompson en la Introducción, página IX.

1.3.3. Modelos discreto-continuos

Ha habido investigadores como el alemán Hans Meinhardt (véase [36]) que han extendido el tipo de modelos de reacción-difusión para explicar la diferenciación en una estructura en forma de red a partir de un medio no diferenciado. El estado de la célula es caracterizado por la concentración de cuatro morfógenos (véase la Sección 1.4), de los cuales uno determina cuando una célula, en un estado diferenciado, pertenece a la estructura o cuando una célula en un estado no diferenciado, pertenece al medio. El proceso de crecimiento comienza con la creación de una sucesión de filamentos de células diferenciadas, que se extienden a lo largo de un filamento con forma de punta. Durante el desarrollo de ésta puede dividirse creando ramificaciones y, a distancias suficientemente lejanas de la estructura, se forman filamentos con ramas, éstas aparecen debido a que hay una disminución de otro morfógeno que actúa como inhibidor. El resto de la estructura se forma de manera similar siempre y cuando no haya alguna otra cercana en crecimiento.

Este tipo de modelos mixtos combina los dos enfoques en la modelación, la discreta y la continua. Se les conoce como *modelos de reacción-difusión de diferenciación*. Los morfógenos se difunden en un medio continuo, mientras que la diferenciación es descrita por las células que se consideran discretas.

También hay procesos en los cuales la división entre la estructura y el medio subyacente es muy clara. Para la descripción de estos procesos los modelos que se usan se centran en el movimiento gradual de la estructura en la frontera. A éstos se les conoce como *modelos de difusión limitada por crecimiento acumulativo*.

Se ha simulado este tipo de procesos, para una célula, en una latiz cuadrada. En ésta, se simula el proceso por medio de la selección de células adyacentes (aleatoriamente) a la estructura formada en los pasos anteriores. Meakin (véase [36]) estudió este modelo suponiendo que la razón de crecimiento depende de la concentración local de nutrientes que se difunden desde una fuente exterior y que son consumidas por la estructura en crecimiento. Kaandorp (véase también [36]), usó este tipo de modelos en tres dimensiones para simular el crecimiento de corales y esponjas marinas (véase la figura 1.9), interpretando que la dirección de crecimiento es en la dirección de mayor concentración de nutrientes.

En este tipo de modelos, la topología de los patrones que emergen son

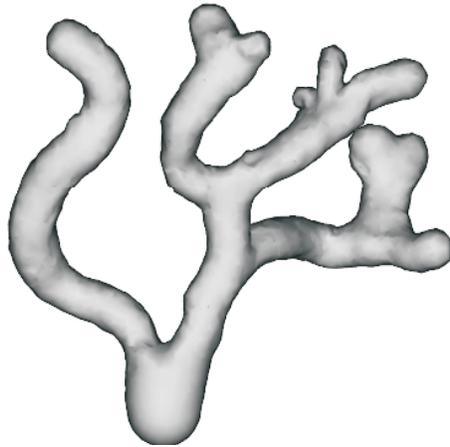


Figura 1.9: Modelo de la esponja *Haliclona occulata*.

del tipo ramificado, que pueden ser debidos al gradiente de concentración de nutrientes cerca de las ramas principales dando origen a esa estructura ordenada.

Un trabajo muy interesante es [42]. En éste, sus autores muestran que sólo son necesarios tres procesos para dar la morfogénesis básica de la *D. discoideum* en tres dimensiones. Estos procesos son la quimiotaxis, la producción de cAMP¹⁸ y la adhesión celular. La interacción de estos tres procesos inducen una autoorganización espacial de colonias de amibas¹⁹, provocando un comportamiento complejo de formación de cúmulos alargados y migración de las células. No hay cambio alguno en los parámetros mientras se da el proceso morfogenético.

El modelo que utilizan las autores es el de autómatas celulares usado por Glazier and Graner (1993), donde hacen algunas modificaciones para expresarlo en tres dimensiones usando una discretización de ecuaciones diferenciales parciales considerando un flujo quimiotáctico. Las condiciones de frontera que se toman en cuenta, son de tipo Neumann homogéneas, es

¹⁸La *adenosina monofosfato cíclica* (cAMP por sus siglas en inglés) es una molécula que es muy importante en algunos procesos biológicos. Actúa como un mensajero, usado como una señal para la transferencia de material genético de una célula a otra. En una bacteria, la cAMP es producida cuando los niveles de glucosa son bajos; activando la producción de enzimas que suministran glucosa.

¹⁹Organismos unicelulares con pseudópodos del reino protista.

decir, consideran un medio aislado.

Aunque el modelo de estos autores no explica los detalles del proceso morfogénético, sí provee de un sustrato de cómo las funciones de las células trabajan y hace predicciones que, según ellos, pueden ser verificadas experimentalmente.

Los distintos tipos de modelos biofísico-matemático-químicos (valga el término) tienen ventajas y desventajas en el estudio de la morfogénesis. Aunque los modelos discretos pueden ser muy prácticos en el momento de hacer simulaciones computacionales, no necesariamente describen adecuadamente las leyes de la física o de la química. Los modelos continuos tienen esa ventaja sobre los primeros, además que consideran sistemas macroscópicos. Sin embargo, para sistemas microscópicos los modelos discretos pueden ser mejor opción. Considero que la delgada línea que separa estos dos mundos, puede ser salvada con la aparición de modelos híbridos que combinen las ventajas de ambos. Los análisis de este tipo de modelos ya se ha iniciado, pero su presentación rebasa las intenciones de este trabajo en el que se centra en modelos continuos tipo EDP (ecuaciones diferenciales parciales). En la siguiente sección se expone de forma concisa el mecanismo morfogénético del matemático y computólogo inglés Alan M. Turing.

1.4. El mecanismo de Turing

En los años cincuenta del siglo pasado, al término de la Segunda Guerra Mundial, el matemático británico Alan Turing famoso por ser considerado el padre de la computación y haber participado en la creación de la computadora *Colossus*²⁰, se interesó en el estudio de la fisiología y neurología escribiendo un artículo (no publicado en vida) relacionado con las redes neuronales; también estudió la teoría matemática relacionada con la morfogénesis publicando un artículo que es considerado en la actualidad, como uno de los más importantes en este campo. Me refiero a: *The Chemical Basis of Morphogenesis*, publicado en 1952 (véase [2]).

La propuesta de Turing es de una sencillez asombrosa, puede pensarse que se tienen dos sustancias químicas que compiten; la primera representa alguna

²⁰Primer computadora electrónica, creada especialmente para vencer el programa criptográfico alemán *Enigma*.

activación determinada y se difunde a una lentamente que llamaré *activador*; mientras que la otra, será una inhibición de la primera y su rapidez de difusión es mayor que la del activador, el nombre que usaré será *inhibidor*. En su artículo Turing, llama *morfógenos* a estas sustancias que reaccionan y se difunden.

1.4.1. La bifurcación de Turing

Es importante mencionar algunos aspectos relacionados con el modelo de Turing. Como él mismo reconoce, su modelo es sólo una simplificación de un sistema biológico real, pero confía en que su trabajo sea de ayuda en la investigación del rompimiento espontáneo de simetrías y, por supuesto, la morfogénesis. Cabe destacar que Turing no considera los aspectos mecánicos ni eléctricos intrínsecos en el sistema, dando mucho mayor peso a la difusión y reacción de los morfógenos.

¿Por qué el modelo de Turing podría ser una buena línea de investigación en la morfogénesis? ¿Qué lo hace tan sorprendente? En primera instancia, la belleza del modelo de Turing radica en que, en gran medida, es de una enorme simplicidad. Además que los mecanismos que propone separados, no producen formaciones ordenadas en la distribución espacial de las sustancias en interacción. Sin embargo, ambos procesos juntos sí lo hacen.

La proposición relativa a un mecanismo morfogenético se basa en la ocurrencia simultánea de estos dos procesos fisico-químicos²¹: reacción química de sustancias y difusión de éstas por el medio.

Turing sólo consideró dos sustancias químicas.²² Denotaré por $X(\mathbf{x}, t)$ y $Y(\mathbf{x}, t)$ sus respectivas concentraciones en el punto \mathbf{x} al tiempo t . En la versión más simple supondré que la parte difusiva sigue la ley de Fick, mientras que la cinética la ley de Acción de masas. De esta manera, la dinámica espacial y temporal de las sustancias está dada por el sistema de reacción-difusión

$$(1.1) \quad \frac{\partial X}{\partial t} = D_X \Delta X + F(X, Y)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = D_Y \Delta Y + G(X, Y),$$

²¹En el Apéndice A se presenta la deducción de las ecuaciones diferenciales parciales que rigen estos procesos.

²²Es posible hacer el mismo estudio considerando un sistema con un número mayor de sustancias, como o hicieron Menzinger *et al.* en [4].

con condiciones a la frontera de Neumann homogéneas en $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ y condiciones iniciales, dadas²³.

Los sistemas de reacción-difusión como (1.1) pueden ser adimensionalizados y rescalados de tal manera que tomen la siguiente forma (véase [49]):

$$(1.2) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \gamma f(u, v)$$

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

donde $d = D_Y/D_X$ y γ puede interpretarse como la fuerza relativa de los términos reactivos o bien, como una medida del factor de escala. Al aumentar éste, puede pensarse de forma equivalente la disminución en el cociente de los coeficientes de difusión d . Para más detalles véase [49] especialmente los capítulos 2 y 3.

Los segundos términos del lado derecho en el sistema (1.2) son llamados términos cinéticos o de reacción que describen la interacción entre ambas sustancias químicas.

Una de las hipótesis en el mismo mecanismo de Turing requiere que el sistema tenga un estado²⁴ $(u^*, v^*)^T$ en el espacio de las concentraciones que sea asintóticamente estable ante perturbaciones temporales en ausencia de difusión. El estado de equilibrio proviene de la intersección de las ceroclinas $f(u, v) = 0$ y $g(u, v) = 0$ del sistema (1.3)

$$(1.3) \quad \dot{u} = \gamma f(u, v)$$

$$\dot{v} = \gamma g(u, v),$$

donde el punto sobre las variables u y v representa la derivada respecto al tiempo.

Haciendo un análisis lineal del sistema (1.3) alrededor del equilibrio, se obtiene la matriz Jacobiana que define al sistema lineal

$$(1.4) \quad \mathbf{J}(f, g) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix},$$

²³Cabe mencionar que si se estuviera haciendo el análisis en un dominio infinito, las condiciones de frontera y las iniciales tendrían que tener soporte compacto.

²⁴ T representa el transpuesto.

evaluada en el punto de equilibrio. A fin de no introducir tanta notación, de aquí en adelante se tomará en cuenta este hecho.

Se hace incapié en que el punto de equilibrio $(u^*, v^*)^T$ es punto hiperbólico. Ésto es puesto que sólo se está buscando estabilidad, si éstos no lo fueran, entonces se tendría que hacer un análisis más exhaustivo (véase [55]).

Ahora bien, el polinomio característico de la matriz de Jacobi (1.4) es

$$P(\lambda) \equiv \det(\gamma \mathbf{J} - \lambda \mathbf{I}) = \lambda^2 - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J})\lambda + \gamma^2 \det(\mathbf{J}).$$

Debido a que se considera estabilidad asintótica local en ausencia de difusión, la región del plano $\text{Tr}(\mathbf{J}) - 4 \det(\mathbf{J})$ que se requiere, es el segundo cuadrante y las condiciones para que tal comportamiento cualitativo se de son:

$$(1.5) \quad \text{Tr}(\mathbf{J}) < 0 \text{ y}$$

$$(1.6) \quad \det(\mathbf{J}) > 0.$$

Ahora, considerando los términos difusivos, introduciendo la notación $\mathbf{w} = (u, v)^T$ y recordando que en presencia de difusión ($d > 0$), Turing impone como hipótesis un comportamiento inestable ante perturbaciones espacio-temporales, esto es, si $\mathbf{w}^* = (u^*, v^*)^T$ es una solución homogénea y estacionaria, entonces se construye el vector *perturbado*

$$\mathbf{W}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{w}^* + \mathbf{w}(\mathbf{x}, t),$$

tal que

$$\lim_{\|\delta\| \rightarrow 0} \frac{\|\mathbf{w}\|}{\|\delta\|} = 0.$$

Sustituyendo este vector *perturbado* en el sistema (1.2) se tiene la siguiente ecuación diferencial parcial vectorial lineal para \mathbf{w} :

$$(1.7) \quad \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{D} \Delta \mathbf{w} + \gamma \mathbf{J} \mathbf{w}$$

donde

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$$

que lo aproxima en vecindades *suficientemente pequeñas* de \mathbf{w}^* .

Tomando en cuenta un dominio Ω acotado, entonces dada la linealidad se puede resolver la ecuación de valores propios

$$-\Delta \mathbf{w} = k^2 \mathbf{w} \text{ con } \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{n}} = 0 \text{ en } \partial \Omega.$$

Recuérdese que este problema de Sturm-Liouville proviene de buscar la solución del sistema, usando separación de variables en el sistema (1.7).

Para cada k se tiene una función propia \mathbf{w}_k del operador de Laplace en Ω . Es posible expresar la solución de la ecuación (1.7) en términos de estas funciones propias

$$(1.8) \quad \mathbf{w}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \langle \mathbf{w}, \mathbf{w}_k \rangle_{t=0} e^{\lambda t} \mathbf{w}_k(\mathbf{x}),$$

donde $\langle \mathbf{w}, \mathbf{w}_k \rangle_{t=0}$ denota el producto escalar entre las funciones \mathbf{w} y \mathbf{w}_k al tiempo $t = 0$ y son conocidos como los coeficientes de Fourier²⁵.

Sustituyendo (1.8) en la ecuación (1.7), se obtiene el problema algebraico

$$(\lambda \mathbf{I} + \mathbf{D}k^2 - \gamma \mathbf{J}) \mathbf{w}_k = 0, \text{ para cada } k.$$

A fin de que este sistema tenga solución diferente de la trivial se tiene que cumplir lo siguiente:

$$Q(\lambda) \equiv \det(\lambda \mathbf{I} + \mathbf{D}k^2 - \gamma \mathbf{J}) = 0$$

que, escrita explícitamente, toma la forma

$$(1.9) \quad \begin{aligned} Q(\lambda) &= \left(\lambda + k^2 - \gamma \frac{\partial f}{\partial u} \right) \left(\lambda + dk^2 - \gamma \frac{\partial g}{\partial v} \right) - \gamma^2 \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial u} = \\ &= \lambda^2 + ((1 + d)k^2 - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}))\lambda + h(k^2), \end{aligned}$$

donde

$$(1.10) \quad h(k^2) = dk^4 - \gamma \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right) k^2 + \gamma^2 \det(\mathbf{J}).$$

²⁵Estos coeficientes se calculan a partir de la condición inicial (véase [59]).

Si la parte real, $\Re(\lambda(k=0))$, es negativa se obtiene un comportamiento asintóticamente estable, sin embargo, esta condición ya está dada por (1.5). La inestabilidad espacio-temporal puede ocurrir cuando al menos un término que depende del tiempo, crezca al aumentar t , lo cual ocurre siempre que $\Re(\lambda) > 0$. Esto es, si se cumplen las condiciones siguientes para los coeficientes del polinomio (1.9) sin olvidar (1.10):

$$(1+d)k^2 - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}) < 0 \text{ o bien } h(k^2) < 0.$$

La razón de los coeficientes difusivos d es positiva puesto que en caso contrario el problema no estaría bien planteado, además el análisis lineal de la parte temporal (1.5) exige que $(1+d)k^2 - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}) > 0$, entonces la inestabilidad espacio-temporal surge sólo si $h(k^2) < 0$ para algún k^2 . Una condición necesaria más no suficiente, es que el coeficiente del segundo término de (1.10) sea positivo, es decir

$$(1.11) \quad d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} > 0.$$

Debido a las condiciones (1.5) y (1.11), se sigue que el cociente de los coeficientes de difusión debe ser distinto de uno, es decir $d \neq 1$.

Los términos reactivos dan las ceroclinas, a partir de éstas se puede verificar que $\frac{\partial f}{\partial u}$ y $\frac{\partial g}{\partial v}$ tienen signos distintos y usando (1.6), se tienen de manera esquemática, las siguientes posibles estructuras en los signos de los elementos de la matriz de Jacobi, para que exista la *bifurcación de Turing*.

$$(1.12) \quad \mathbf{J}(f, g) = \begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix},$$

conocido como *activador-inhibidor* y

$$\mathbf{J}(f, g) = \begin{pmatrix} + & + \\ - & - \end{pmatrix},$$

conocido como *activador-inhibidor cruzado*.

Para asegurar que $h(k^2)$ sea negativo en algún valor de k^2 es necesario pedir, además, que (1.10) tenga un mínimo y su valor ahí sea negativo, entonces

$$(1.13) \quad \frac{dh}{d(k^2)} = h'(k_c^2) = 2dk_c^2 - \gamma \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right) = 0$$

$$\Rightarrow k_c^2 = \frac{\gamma}{2d} \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right)$$

esto implica que el mínimo sea

$$h(k_c^2) = \gamma^2 \left(\det(\mathbf{J}) - \frac{1}{4d} \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right)^2 \right)$$

y por lo dicho en el párrafo anterior, se concluye la cuarta y última condición de la maquinaria de Turing

$$(1.14) \quad d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} > 2\sqrt{d \det(\mathbf{J})}.$$

Las desigualdades (1.5), (1.6), (1.11) y (1.14) son las condiciones suficientes que propone Turing sobre los parámetros involucrados en el sistema de estudio para que surjan inestabilidades debidas a la difusión, provocando la emergencia de los patrones que llevan su nombre.

Es importante recalcar que el análisis es local, puesto que se considera una linealización (1.7) del sistema original (1.2), por tanto la validez de dichas condiciones no son de naturaleza global.

Una vez establecido los criterios para obtener la inestabilidad de Turing, se observa que si éstos se cumplen, el comportamiento asintótico de la solución en términos de las funciones propias es:

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}, t) \sim \sum_{k_1^2}^{k_2^2} \langle \mathbf{w}, \mathbf{w}_k \rangle_{t=0} e^{\lambda(k^2)t} \mathbf{w}_k(\mathbf{x}),$$

donde $k^2 \in (k_1^2, k_2^2)$. La expresión $\lambda = \lambda(k^2)$ es llamada *relación de dispersión*.

Véase que los números de onda k_1^2 y k_2^2 pueden encontrarse en dominios acotados puesto que en éstos la ecuación (1.9) se satisface,²⁶ es decir

$$Q(\lambda) = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-(1+d)k^2 + \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}) \pm \sqrt{\Lambda} \right),$$

con $\Lambda = ((1+d)k^2 - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}))^2 - 4h(k^2)$, requiriéndose la condición de inestabilidad para los vectores propios correspondientes a los valores propios en términos de los números de onda que se encontrarán en dicho intervalo, $\Re(\lambda(k^2)) > 0$.

²⁶Aquí el factor de escala toma relevancia puesto que éste puede ser suficientemente pequeño de tal forma que no permita encontrar funciones propias para resolver el problema de valores propios correspondiente. De nueva cuenta véase [49] para un ejemplo.

La expresión (1.9) en función de $\Re(\lambda)$ es una parábola cuyo valor en el máximo es positivo (inestabilidad) en un intervalo definido por $\lambda_{1,2}$ los cuales están dados por $k_{1,2}^2$, que son aquellos números de onda en los cuales la función $h(k^2) = 0$.

La interpretación de los valores de los parámetros que cumplan con la maquinaria de Turing depende directamente del sistema en estudio, así mismo si éstos cumplen o no con las condiciones de Turing.

¿Es posible variar los parámetros del sistema de tal forma que, en el espacio de los parámetros, pasen de una región tal que el sistema se comporte de manera estable haya difusión o no, a una que provoque inestabilidades de Turing? La respuesta es sí, al menos teóricamente. En la práctica esta manipulación es de mucha mayor complejidad y no siempre es posible hacerlo de manera satisfactoria.

Cuando un sistema cambia de un comportamiento cualitativo a otro al variar los parámetros involucrados, se dice que se *bifurcó*.

En el caso del modelo de Turing, es posible encontrar esta bifurcación para valores fijos de los parámetros (restringidos a las cuatro condiciones deducidas anteriormente). La derivada (1.13) igualada a cero indica la existencia de un valor crítico para $h(k^2)$ en términos de los parámetros y la matriz jacobiana asociada al sistema, en este caso se exigió que $h(k_c^2)$ fuera negativo para satisfacer la inestabilidad impuesta como hipótesis, si $h(k_c^2) > 0$ entonces no habría inestabilidad y por tanto no se formarían los patrones de Turing. Esto indica que la bifurcación se da cuando se satisface la igualdad

$$(1.15) \quad h(k_c^2) = 0 \Rightarrow \det(\mathbf{J}) = \frac{\gamma^2}{4d} \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right)^2,$$

de esta manera se define una razón de los coeficientes de difusión crítico, d_c , como la raíz apropiada de la expresión anterior que, por cierto, es posible escribir de la siguiente manera

$$(1.16) \quad R(d_c) = d_c^2 \left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)^2 + 2d_c \left(2 \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial g}{\partial u} - \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial g}{\partial v} \right) + \left(\frac{\partial g}{\partial v} \right)^2 = 0.$$

El valor crítico d_c es único, es decir hay un único valor para la razón de los coeficientes de difusión que conduzca a la bifurcación. Este hecho puede verificarse fácilmente analizando el discriminante de (1.16), tomando en cuenta las condiciones de Turing y que $d_c > 0$ (véase la figura 1.10).

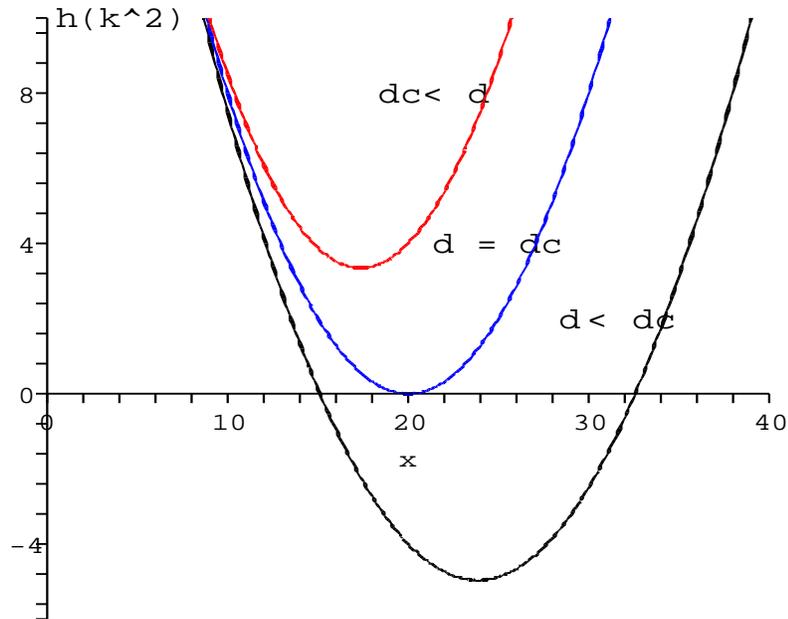


Figura 1.10: Bifurcación de Turing. Los parámetros que se usaron son $\kappa = 1/2$ y $c = 2$ con un factor de escala $\gamma = 4$ para $d = 0.065$ en negro, $d = d_c = 0.08$ en azul y $d = 0.095$ en rojo. El modelo que se usó para la simulación es (1.19). El eje horizontal x representa el número de onda k^2 .

La figura 1.10 exhibe la bifurcación de Turing al variar el coeficiente de difusión.

Así mismo, el número de onda crítico, k_c^2 , en el cual se tiene tal bifurcación, está dado por

$$(1.17) \quad k_c^2 = \frac{\gamma}{2d_c} \left(d_c \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right) = \gamma \sqrt{\frac{\det(\mathbf{J})}{d_c}},$$

donde para darle esta forma se usó (1.15).

Hay evidencia cualitativa que induce a pensar que el modelo sí puede describir fenómenos de autoorganización biológica (véase [49]). Es por eso que se ha buscado la existencia de morfógenos en la naturaleza o bien la aparición

de patrones que cumplan con las características del modelo propuesto por Turing. La figura 1.11 presenta algunos patrones que podrían satisfacer las características antes mencionadas.

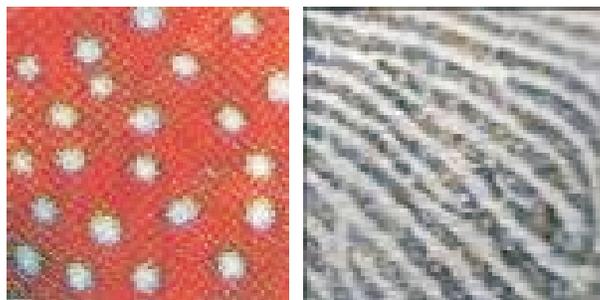


Figura 1.11: Izquierda: piel de pez. Derecha: huella digital.

La primera observación experimental de un patrón de Turing fue hecha en una reacción química por el grupo de Patrick De Krepper (1990), quienes observaron un patrón de manchas estacionarias en un sistema químico formado por iones de cloruro, iones de yodo y ácido malónico (CIMA por sus siglas en inglés, figura 1.12). En 1991 Ouyang y Swinney observaron no sólo manchas, comprobando los resultados del grupo de De Krepper, sino también franjas o estrías en un sistema con dimensiones espaciales mayores.

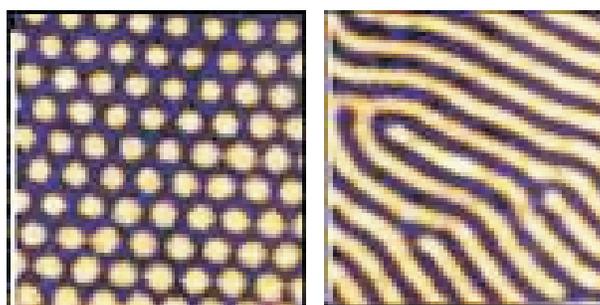


Figura 1.12: Reacción CIMA. El fondo indica las áreas de alta concentración de iones de yodo. Izquierda: motas. Derecha: franjas.

Aunque la reacción observada por Belousov (mencionada en la Sección 1.2) exhibe un mecanismo de formación de patrones con ciertas similitudes

con el propuesto por Turing, es importante mencionar que la reacción de Belousov-Zhabotinsky forma ondas viajeras, mientras que los patrones tal cual son predichos por Turing, son independientes del tiempo, son estados estables a los que tienden los sistemas para tiempos "grandes".

Razonando como lo hizo Turing, hay que pensar en un huevo fertilizado esféricamente simétrico el cual se convertirá en un organismo altamente estructurado y complejo. Se considera que los genes sólo actúan como catalizadores de reacciones químicas, los cuales regulan la producción de otros catalizadores o morfógenos. Esto sugiere que las leyes fundamentales de la física pueden explicar procesos fisico-químicos sumamente complejos. Si se tiene que el huevo en cuestión es esféricamente simétrico, éste permanecerá indefinidamente en dicha forma. Sin embargo, la difusión química y las reacciones se encuentran presentes. Algo hará que el estado estable se vuelva inestable provocando un rompimiento de simetría. La hipótesis de Turing radica en un estado químico que es estable ante perturbaciones temporales, en ausencia de difusión, pero cuando la difusión está presente se vuelve inestable ante perturbaciones espacio-temporales provocando heterogeneidad espacial en las concentraciones de las sustancias químicas, es decir, patrones químicos.

Hay que enfatizar que ningún huevo en etapa de blástula²⁷ tiene simetría esférica *perfecta* y las desviaciones aleatorias de la simetría esférica no son exactamente iguales en dos huevos de la misma especie, se podría decir que estas desviaciones no son de vital importancia puesto que al fin y al cabo, sin importar las desviaciones aleatorias iniciales, tendrán la misma estructura.

Turing hace incapié y muestra la importancia de este hecho, en los siguientes términos:

...hay algunas desviaciones que pueden alcanzar un estado de inestabilidad que produzcan un crecimiento de esas irregularidades
...

En un sistema biológico las desviaciones aleatorias surgirán debido a deformaciones y ruido natural.

Una característica propia de la inestabilidad de Turing, es que el patrón que haya emergido es independiente de la desviación aleatoria inicial necesaria

²⁷Fase de desarrollo del embrión en que éste tiene forma de una esfera hueca constituida por una sola capa de células.

para que aquél surja. La morfología del patrón es seleccionada intrínsecamente y no depende de la escala externa como es el caso de algunas inestabilidades debidas a convección. Las condiciones iniciales influyen en la posición de las manchas u orientación de las franjas que se obtienen y los parámetros así como la cinética de la reacción determinarán si se obtienen unas, otras o ambas.

La relevancia de la inestabilidad de Turing no sólo es importante en sistemas químicos, también en otros sistemas físicos con estructuras disipativas pueden ser entendidas por medio de la inestabilidad inducida por difusión; algunos de ellos son sistemas con descargas de gas, nanoestructuras semiconductoras, algunos de óptica no-lineal, materiales irradiados, reacciones catalíticas de superficie, ondas de superficie en líquidos y sistemas Lotka-Volterra, entre otros. Véase [5, 44].

A continuación expongo un ejemplo en el cual obtendré las condiciones de Turing.

1.4.2. Un ejemplo ilustrativo

La manifestación de vida en niveles microscópicos en ríos, lagos y océanos incluye poblaciones planctónicas, las cuales están formadas por una gran cantidad de organismos que se encuentran viviendo en la zona pelágica del océano²⁸. El plancton está compuesto por *fitoplancton* (fito) y *zooplancton* (zoo). El primero de éstos son el grupo de plantas microscópicas que, con ayuda de la fotosíntesis, producen la mitad del oxígeno que la humanidad necesita; además, absorben la mitad del bióxido de carbono que ayuda al calentamiento global. Mientras que el zoo conforman un grupo de crustáceos u otros animales pequeños que se alimentan de algún otro grupo de plancton. Algunas larvas y huevecillos son incluidos en este grupo, así como algunos peces. Los miembros de este grupo tienen cierta movilidad limitada (contracorriente) a diferencia del fitoplancton. El fito y el zoo, forman la base para todas las cadenas alimenticias en el mar. En efecto, existe una fuerte correlación entre el zoo y la abundancia de peces. Ésta y la distribución espacial del plancton se ve afectada por una gran cantidad de factores físicos, químicos y biológicos tales como la temperatura del agua, la intensidad de la luz solar, salinidad, corrientes

²⁸Zona en la cual se encuentran los peces que viven en mar abierto (o lagos muy grandes) en las capas superficiales o entre aguas, éstos limitan al máximo su contacto con la costa y el fondo.

marinas, comportamiento social, presencia de depredadores, disponibilidad de comida, entre otros. Debido a la simultaneidad de estos múltiples factores en lugares específicos del océano, hay una gran concentración de plancton en algunas regiones de éste. En efecto, los diferentes tipos de mareas provocan florecimientos locales de microorganismos.

Las distribuciones de poblaciones planctónicas presentan algunas heterogeneidades ligeras; a menudo estas distribuciones exhiben estructuras patrones llamadas *parches* que exhiben una gran riqueza espacio-temporal. Las características de estos parches, tales como su localización, extensión espacial, forma, biodiversidad y persistencia en conjunto son factores cruciales en la importancia del entendimiento de la dinámica de estos parches. En la formación de parches, las escalas espacio-temporales que se han observado van desde algunos centímetros hasta cientos de kilómetros. Algunos de estos eventos tienen una duración de algunos segundos mientras que otros se han observado por periodos de años. Los esfuerzos en tratar de describir esta complicada dinámica en el océano por medio de modelos matemáticos, han tenido una larga historia. Tomando en cuenta que el mecanismo subyacente en la distribución de estos parches sigue siendo un tema controversial, la forma específica de éstos dependen en gran medida de algunos de los factores listados anteriormente. Los modelos que resultan comparten, como una de sus características básicas, la no-linealidad. En esta sección se presenta un ejemplo que muestra la modelación matemática de la dinámica del plancton usando *ecuaciones de reacción-difusión*. En éstas, factores importantes como la difusión y términos de interacción (cinéticos) son incluidos.

El modelo propuesto por Levin y Segel (véase [6]) considera una estructura disipativa, en el que interaccionan: un depredador (zooplacton) y una presa (fitoplacton) y se consideran términos difusivos que representan movimiento aleatorio. El consumo de fitoplacton, favorece el crecimiento de la población de zooplacton. Ésto es modelado por el producto de ambas densidades de población, suponiendo un contacto equitativo entre los miembros de cada una de las poblaciones y que el sexo es prescindible²⁹. La supervivencia de los depredadores depende solamente del consumo del fitoplacton y su número de miembros se encuentra limitada por un término de competencia, ya que se consideran situaciones donde la mortandad de los depredadores es por combate.

²⁹Según los autores una situación más realista no influye en las conclusiones cualitativas.

La razón de reproducción del fitoplacton que exhibe cooperatividad (sobrevivencia) es: $S(\bar{p}) = \bar{a} + \bar{b}\bar{p}$.

Sean $\bar{p}(\xi, \tau)$ y $\bar{P}(\xi, \tau)$ la densidad de fitoplancton y zooplancton en el punto³⁰ ξ al tiempo τ , respectivamente.³¹ Por los argumentos dados anteriormente, la dinámica espacial y temporal de las densidades la dan las ecuaciones

$$(1.18) \quad \begin{aligned} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau} &= D_p \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial \xi^2} + \bar{p}S(\bar{p}) - \bar{c}\bar{P}\bar{p} \equiv D_p \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial \xi^2} + \bar{F}(\bar{p}, \bar{P}) \\ \frac{\partial \bar{P}}{\partial \tau} &= D_P \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \xi^2} - \bar{e}\bar{P}^2 + \bar{f}\bar{P}\bar{p} \equiv D_P \frac{\partial^2 \bar{P}}{\partial \xi^2} + \bar{G}(\bar{p}, \bar{P}), \end{aligned}$$

donde los parámetros ecológicos se interpretan de la siguiente manera:

\bar{f} : habilidad de caza,

\bar{b} : contacto entre presas o factor de sobrevivencia,

\bar{a} : tasa de crecimiento de la presa,

\bar{e} : competencia entre depredadores y

\bar{c} : susceptibilidad de ser presa.

Para reducir el número de parámetros, se introducen las variables sin dimensión

$$P = \bar{P}\bar{e}/\bar{a}, \quad p = \bar{p}\bar{f}/\bar{a}, \quad x = \xi \sqrt{\frac{\bar{a}}{D_P}}, \quad t = \tau\bar{a},$$

y sustituyendo en (1.18) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$(1.19) \quad \begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= d^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + p + \kappa p^2 - cPp = d^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + F(p, P) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - P^2 + Pp = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + G(p, P), \end{aligned}$$

³⁰Se considera sólo una dimensión por simplicidad, se hace esta aclaración puesto que puede suponerse que la variable, ξ , expresa la profundidad. En los capítulos subsiguientes, se hace la misma consideración.

³¹Ambas densidades tienen que ser positivas puesto que en caso contrario no tendría significado ecológico. Así mismo con los parámetros.

donde

$$\kappa = \frac{\bar{b}}{\bar{f}}, \quad c = \frac{\bar{c}}{\bar{e}}, \quad d^2 = \frac{D_p}{D_P}.$$

Primero se tiene que encontrar los puntos de equilibrio del sistema (1.19), es decir las aprejas $(p^*, P^*)^T$ que satisfacen tales que $F(p^*, P^*) = 0$ y $G(p^*, P^*) = 0$ que, geoméricamente representan la intersección de las ceroclinas. Éstos son

$$\begin{pmatrix} p_1^* \\ P_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} p_2^* \\ P_2^* \end{pmatrix} = \frac{1}{c - \kappa} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Ahora se analiza el sistema linealizado en términos de las entradas de la matriz de Jacobi $\{a_{ij}\}$. Entonces se tiene el siguiente sistema

$$\frac{\partial p}{\partial t} = d^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + a_{11}p + a_{12}P \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + a_{21}p + a_{22}P,$$

donde se ha obviado la traslación del origen al punto de equilibrio no trivial.

El origen es un punto no hiperbólico, es decir al menos uno de sus valores propios tiene módulo uno. Este punto en particular satisface

$$(1.21) \quad \text{Tr}(\mathbf{J}) > 0 \text{ y } 4 \det(\mathbf{J}) = 0,$$

llamado punto *degenerado* de primer tipo (véase [55]).

El retrato fase para el sistema lineal $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J}\mathbf{x}$, donde \mathbf{J} es la forma normal real de la matriz de Jacobi cuando se satisface (1.21), se caracteriza por que el primer cuadrante es positivamente invariante bajo el flujo asociado al sistema y de tal forma que se aleja del eje vertical perpendicularmente, en este caso de P . Esto es, se favorece el crecimiento de p , excluyendo estabilidad temporal y por tanto, la formación de patrones.

Sin embargo, el otro punto de equilibrio del sistema es hiperbólico y por tanto, es posible deducir el comportamiento cualitativo local del sistema no lineal, a partir de la linealización sin temor a un cambio abrupto en su espacio fase debido a pequeñas perturbaciones.³² En dicho punto, las entradas de la matriz de Jacobi, \mathbf{J} , son

$$a_{11} = \frac{\kappa}{c - \kappa}, \quad a_{12} = -\frac{c}{c - \kappa}, \quad a_{21} = \frac{1}{c - \kappa}, \quad a_{22} = -\frac{1}{c - \kappa},$$

³²Ésto lo garantiza el Teorema de Hartman-Grobman (véase [51]).

las cuales, si la inestabilidad de Turing ha de darse, se encuentra que el determinante de la matriz de Jacobi tiene que ser positivo (véase (1.6)), por tanto se tiene

$$(1.22) \quad c > \kappa,$$

es decir, el producto de los coeficientes de la susceptibilidad para ser cazados y el de habilidad de caza, tienen que ser estrictamente mayor que el producto de los coeficientes de competencia y de contacto entre presas, es decir

$$\bar{c}\bar{f} > \bar{b}\bar{e}.$$

Este resultado tiene como consecuencia que $a_{11}, a_{21} > 0$ y $a_{12}, a_{22} < 0$. De esta forma se deduce que el sistema se comporta como un sistema *activador-inhibidor*, donde al depredador juega el papel de inhibidor.

Usando la desigualdad (1.22), la condición equivalente a (1.5) para este caso, satisface

$$(1.23) \quad \kappa < 1,$$

lo cual puede interpretarse en términos de los parámetros originales de tal manera que el coeficiente que indica la habilidad de la especie depredadora para cazar tiene que ser mayor que el coeficiente que indica el encuentro con miembros de su propia especie, *i. e.*,

$$(1.24) \quad \bar{f} > \bar{b}.$$

Las condiciones para la inestabilidad de Turing³³ imponen, también, que

$$(1.25) \quad \kappa > d^2,$$

y

$$\bar{b}D_P > \bar{f}D_p,$$

de lo cual resulta que, junto con la primera condición (1.24), se encuentra que el coeficiente de difusión del depredador tiene que ser mayor que el correspondiente de la presa \bar{f}/\bar{b} veces el cociente, deduciéndose que $D_P > D_p$, de igual manera se llega a esta conclusión debido a que $1 > \kappa > d^2$.

³³Véase (1.11) y (1.14).

Por último, se encuentra que

$$(1.26) \quad c - d^2 > 2d\sqrt{c - \kappa}.$$

Con las cuatro condiciones³⁴ (1.23), (1.22), (1.25) y (1.26) se asegura la formación de patrones turingianos para el caso en que las difusividades en el sistema (1.18) son constantes, además proporcionan los valores de la frontera del intervalo en el cual el número de onda crítico para el cual la parte real del valor propio correspondiente es máximo positivo. Es decir, los números de onda, k , entre los cuales se desestabilizará el estado estacionario y homogéneo, producirán los patrones de Turing estarán dados por la condición

$$\Re(\lambda(k^2)) > 0 \text{ si } k^2 \in (k_1^2, k_2^2)$$

donde

$$(1.27) \quad k_{1,2}^2 = \frac{1}{2d^2(c - \kappa)} \left(\kappa - d^2 \pm \sqrt{(\kappa - d^2)^2 - 4d^2(c - \kappa)} \right) > 0$$

mientras que

$$k_c^2 = \frac{1}{d\sqrt{c - \kappa}} > 0$$

tal que

$$(1.28) \quad \Re(\lambda(k_c^2)) = \max_{k^2 \in (k_1^2, k_2^2)} \{ \Re(\lambda(k^2)) > 0 \}.$$

En la figura 1.13 se muestra el comportamiento de la parte real de λ como función del número de onda k . En ésta, se ilustra la existencia de los valores, k_1 y k_2 , para los que $\Re(\lambda) > 0$ para todo $k \in (k_1, k_2)$. Obsérvese que para $k = 0$, se obtiene que $\Re(\lambda) < 0$. En esta figura, sólo se graficó la raíz que podía exhibir la bifurcación deseada en términos de k y no k^2 , es por esta razón que tiene esa forma.

También es posible, determinar el valor crítico del cociente de los coeficientes de difusión a fin de que se de la bifurcación de Turing. Fijando los parámetros ecológicos y variando el coeficiente de difusión d continuamente, echando mano de la igualdad (1.16) se encuentra la expresión

$$R(d_c) = d_c^2 + 2d_c\sqrt{c - \kappa} - \kappa = 0$$

³⁴Éstas corresponden a las condiciones encontradas en la Sección 1.4.

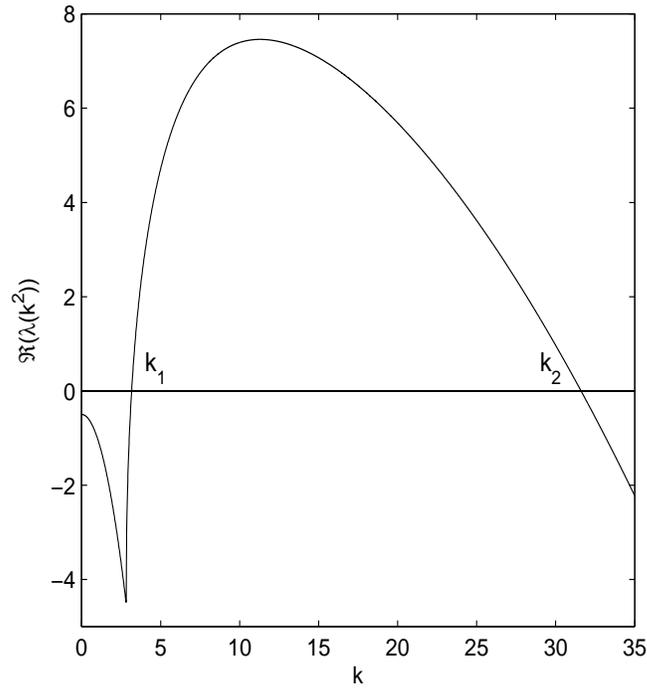


Figura 1.13: Números de onda para los cuales ocurre una inestabilidad de Turing. Los valores de los parámetros son $\kappa = 0.9$, $c = 1$ y $d = 0.1$.

Obsérvese que la desigualdad (1.26) es válida para $d = 0$. El límite superior del intervalo en el cual dicha desigualdad se satisface cuando $d = d_c$ es

$$(1.29) \quad c - d_c^2 = 2d_c\sqrt{c - \kappa} \Rightarrow d_c = \sqrt{c} - \sqrt{c - \kappa} > 0,$$

debido a que una de las raíces es negativa. Por tanto, el valor, d_c , para el cual existe una bifurcación de Turing es único.

Es posible verificar también, que $d_c < \kappa$. De esta manera, el intervalo de los valores de d donde existen patrones de Turing es $d \in (0, d_c)$ para valores fijos de los parámetros c y κ .

1.5. Críticas a la proposición de Turing

El modelo de Turing ha sido fundamental para el estudio de la emergencia de patrones en diversos sistemas físicos, químicos y biológicos. Sin embargo, a pesar de los avances que se han logrado, éste ha sido criticado. A continuación mencionaré algunas de las críticas que se le han hecho. Véase [56].

¿Existencia de morfógenos?

Como se menciona al principio de esta sección, la teoría de Turing tiene como principal hipótesis la existencia de una pareja de sustancias químicas que, al reaccionar y difundirse bajo ciertas condiciones, producirán estructuras ordenadas. Hasta ahora no es evidente la existencia o identificación de éstos, aparentemente sólo en algunos sistemas se han identificado su presencia, por ejemplo la reacción CIMA (véase [46]).

¿Existencia de los patrones de Turing?

El modelo de Turing es puramente teórico y por tanto, aún tiene una base experimental poco extensa que lo sustente. Se ha especulado mucho respecto a la realidad física de éstos. Sin embargo, el grupo de De Kepper diseñó una reacción química que exhibe patrones predichos por el modelo de Turing. Aunque el modelo se dedujo a partir de la búsqueda de una respuesta a un fenómeno biológico, experimentos como los del grupo de De Kepper (véase [46]) han motivado la modelación *turingiana* en sistemas que no sean estrictamente biológicos.

¿Y cuándo el dominio crece?

Es claro que un individuo que ha alcanzado su edad adulta el tamaño y geometría, no sufren cambios significativos al transcurrir el tiempo. Sin embargo, cuando el individuo se encuentra en una etapa de crecimiento (etapa juvenil) los cambios en el tamaño y la geometría de éste, se ven afectados drásticamente al transcurrir el tiempo.³⁵

³⁵El pez *Pomacanthus* en un año aumenta de tamaño drásticamente y las franjas que en su piel exhibe sufren un cambio radical en su orientación. A los tres meses éstas son prácticamente verticales, pero cuando llega al año de vida, se observan que estas franjas se orientan horizontalmente en una gran parte de su cuerpo.

Una de las hipótesis principales que considera el matemático inglés es que no incluye la dinámica del dominio, es decir, el dominio es independiente del tiempo. Entonces se deben tomar en cuenta estos cambios para tener un modelo menos idealizado.

De hecho, se ha documentado el papel que juega el crecimiento del dominio y las propiedades geométricas de éste, en la selección de patrones (véase [47]).

Ha habido bastantes esfuerzos para introducir estos factores en un modelo con el enfoque de tipo Turing.

En el Capítulo 6 de [56], los autores citan varios ejemplos de grupos de investigadores que han hecho aportaciones importantes en esta línea de investigación. En particular, basados en primeros principios³⁶, ellos construyen un modelo tipo reacción-difusión definido sobre un dominio que crece para dos y tres dimensiones donde los efectos debidos a la geometría del dominio son considerados. En particular, R. Plaza *et. al.* (véase [32]), deducen un modelo general para describir la dinámica espacio-temporal de un par de morfógenos que reaccionan y se difunden en una región que crece y cambia de forma. La deducción del modelo parte de primeros principios y además proveen un marco amplio en el estudio de la formación de patrones con ecuaciones de reacción-difusión con efectos de crecimiento y geométricos. El modelo que deducen, es en una y dos dimensiones. También, estudian el crecimiento isotrópico recalando algunos puntos en inestabilidades en dominios fijos de dos dimensiones. Por último, presentan una gran variedad de simulaciones numéricas con el fin de investigar la formación de patrones en diferentes superficies que crecen y hacen ver cómo ambos factores, crecimiento y curvatura, son fundamentales en la elección de determinados patrones que no se observan en dominios fijos, tomando en cuenta reacciones de tercer orden.

¿Condiciones de frontera y la aproximación a órdenes superiores?

En [56] los autores mencionan el estudio de un sistema de reacción-difusión en el que la aproximación lineal predice al existencia franjas como patrones. Sin embargo, al considerar términos a segundo orden, los patrones que se predicen son manchas. Esto quiere decir que no necesariamente los sistemas de Turing son estructuralmente estables y por tanto, habría que considerar las

³⁶Ley de Fick, Leyes de Conservación, Teorema de transporte de Reynolds entre otras (véase [33]).

propiedades cualitativas de forma global.

Por otro lado, las condiciones de frontera influyen de manera determinante en el tipo de patrones que predice el modelo de Turing, hay trabajos en los cuales sus autores varían las condiciones de frontera para un mismo sistema, exhibiendo patrones distintos. Véase referencia en [56].

Es necesario mencionar que, independientemente de las críticas de que es objeto la proposición de Turing, también ha dado luz en muchos sistemas y marca una línea de investigación que, por principio, deja fuera argumentos con un sustento menos palpable y que, quizá, invocan dogmas de índole menos objetiva.

Lo que se ha presentado hasta aquí, no obstante que supone que los coeficientes de difusión son constantes, constituye el punto de partida para dar pie a la deducción de los modelos de reacción-difusión en los que el coeficiente de difusión depende del tiempo.

Para introducir en el presente trabajo, esta problemática, en el siguiente capítulo se presenta una colección de ejemplos que muestran la ocurrencia de procesos en los que la difusión dependiente del tiempo aparece.

Capítulo 2

Sistemas con difusión dependiente del tiempo

2.1. Introducción

En el apéndice A (en el ejemplo A.1), se deducen los modelos de reacción-difusión en los que los coeficientes de difusión son constantes. Esto se hace a partir de las ecuaciones de Fokker-Planck y la de Continuidad. A nivel microscópico esto tiene como fundamento la isotropía del medio pues de esa manera, la partícula en su movimiento no privilegia dirección alguna. Esta base microscópica implica, macroscópicamente hablando, que una cantidad enorme de éstas siguen una direccionalidad para el flujo de la sustancia siguiendo la Ley de Fick.

Existe bastante evidencia que el flujo de las sustancias en diferentes procesos que no son del tipo *Fickianos* sino que la constante de proporcionalidad (el coeficiente de difusión), al incorporar factores que restan esa característica isotrópica al medio físico, dependen de diferentes variables¹, como el tiempo t , el espacio \mathbf{x} , la misma concentración de la sustancia química o de otras.

¹Obsérvese las expresiones para la desviación y en particular la de la movilidad en (A.10).

2.2. Bases físicas de la difusión dependiente del tiempo

En los trabajos que mencionaré a continuación, aunque se estudia la difusión o el papel que juega ésta, no están relacionados con la formación de estructuras ordenadas; sin embargo, son útiles para destacar la importancia de la dependencia temporal en la difusión. En la siguiente sección estudiaré un modelo cuyo coeficiente de difusión depende del tiempo y sí puede exhibir estructuras ordenadas.

2.2.1. En sistemas no vivos

Difusión de cloruros

R. de Coss *et. al.* (véase [15]) han estudiado el efecto que se produce en una columna cilíndrica de concreto poroso en el cual se presenta un fenómeno de difusión de cloruro bajo efectos ambientales periódicos (por ejemplo, las estaciones del año). Consideran que una de las causas principales del deterioro en estructuras, es debida a la corrosión inducida por cloruros. Es decir, causada por la rápida penetración de iones de cloruro en el concreto. Resultados experimentales muestran que en un concreto saturado a presión normal el proceso predominante de transporte es molecular, es decir, se presenta difusión iónica mientras que en concretos no saturados, la absorción y difusión de gases así como de líquidos y las condiciones ambientales se convierten en factores importantes. Estos autores sostienen que cuando el concreto se expone en zonas costeras, las condiciones ambientales juegan un papel importante en el transporte de cloruros. Esto se probó en un trabajo hecho por Castañeda *et. al.*, citado en [15] según datos tomados experimentalmente en Puerto Progreso, Yucatán. Usando esta información, se dan los parámetros adecuados para analizar los efectos producidos por las estaciones del año en el comportamiento del perfil de los cloruros. Analizan también, el efecto debido a los ciclos climáticos en el comportamiento de la concentración de cloruro en el centro de un cilindro respecto al tiempo.

Para simplificar el análisis del modelo, suponen que el concreto es homogéneo e isotrópico y que los iones de cloruro son transportados desde la superficie del cilindro hacia el interior del mismo. Como se puede ver en el apéndice A, el flujo de iones de cloruro por unidad de área, es directamente

proporcional al gradiente de concentración de los mismos

$$(2.1) \quad \mathbf{J} = -D\nabla C,$$

donde la constante de proporcionalidad es el coeficiente de difusión representado por D y C representa la concentración de cloruros. La ecuación de continuidad describe localmente esta característica de la concentración de cloruros para el flujo dado por (2.1)

$$(2.2) \quad \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0,$$

naturalmente, las coordenadas espaciales que se usan son cilíndricas.

Saetta *et. al.* (1993) muestra que la temperatura, humedad y la razón de sedimentación superficial oscilatoria para el cloruro, que reproducen cualitativamente la variabilidad estacional en promedio diario de estas tres cantidades. Éstas son de gran utilidad para la intrusión de cloruros en concretos expuestos a condiciones marítimas. Castañeda *et. al.* (1997) simplifica este modelo y sólo considera el proceso difusivo tomando en cuenta la variabilidad de la concentración superficial del cloruro como consecuencia de ciclos ambientales. Debido a esto, los autores (véase [15]) presentan resultados de simulaciones de la difusión de cloruros en cilindros de concreto poroso considerando una concentración oscilatoria de la concentración de cloruro en la superficie.

Los datos experimentales que usan son obtenidos a partir de cilindros de concreto cuyo radio es de ~ 7.5 cm de radio y ~ 15 cm de altura. La concentraciones de agua/cemento que usan son las que se usan regularmente en la construcción de casas, escuelas y edificios públicos. El tiempo de solidificación que toman en cuenta es de 7 a 28 días². Una vez solidificado la columna de concreto se sometió a condiciones donde los efectos de una atmósfera marítima tuviesen efectos significativos.

Una característica esencial en la difusión del cloruro, deducida a partir de sus datos experimentales, es la dependencia temporal del coeficiente de difusión. Para entender esto, se puede pensar que cuando comienza la solidificación, se forman poros de diversos tamaños cuyo número y tamaño son determinados por la difusión de los cloruros tomando en cuenta que el

²Tiempo especificado por leyes gubernamentales en construcción de edificios públicos y escuelas.

transporte neto de cloruros se hará en dirección contraria del gradiente de concentración de los mismos cuyas rapidezces variarán conforme transcurra el tiempo, es decir, la dirección de movimiento se mantendrá constante, no así la cantidad que indique la magnitud, la cual tendrá un valor para cada tiempo. He aquí la razón por la cual se considera el coeficiente de difusión dependiente del tiempo. Este no influye en la dirección, pero sí en el tamaño del vector de flujo.

Sustituyendo la ecuación (2.1) en la a veces conocida como segunda Ley de Fick³ (2.2), se obtiene la siguiente ecuación

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D(t) \Delta C,$$

la cual describe el comportamiento de la concentración local de cloruros en el concreto.

Una vez obtenido la ecuación, se propone un coeficiente de difusión de cloruros en materiales porosos. Los autores llaman *típico*, donde los parámetros involucrados están relacionados con el perfil del cloruro, esto es, α denota la rapidez a la cual el coeficiente de difusión D_2 decae tendiendo a cero. Este término predomina cuando el proceso de solidificación comienza, es decir cuando el tiempo es pequeño (el tiempo se toma en días). El coeficiente de difusión D_1 predomina en el proceso cuando ya ha terminado la solidificación, es decir, cuando han pasado suficientes días como para que $e^{-\alpha t} \sim 0$. El transporte neto de los cloruros cuando el cilindro está en el proceso de solidificación, no necesariamente tiene que ser el mismo cuando este proceso haya terminado.

El coeficiente de difusión que se propone está dado en la siguiente expresión

$$D(t) = D_1 + D_2 e^{-\alpha t},$$

la cual describe adecuadamente la difusión requerida.

Así mismo los datos que se presentan muestran que la concentración de cloruro sobre la superficie del cilindro en estudio a lo largo de un año, exhibe mínimos y máximos, comportamiento asociado con las condiciones climáticas, de esta forma proponen condiciones a la frontera de Dirchlet de carácter sinusoidal en $r = R$, donde R es el radio de la columna de concreto. Esta

³Término usado en el estudio de materiales, principalmente.

condición sobre la superficie es representada por

$$(2.3) \quad C_s(t) = C_1 + C_2 t + C_3 \sin(\omega t + \varphi),$$

donde $C_1 + C_2 t$ es el valor medio de la concentración de cloruros sobre la superficie en un periodo de un año ($\omega = 2\pi/T$), C_2 indica el cambio en el promedio para tiempos de exposición grandes, C_3 la amplitud de las oscilaciones de la concentración sobre la superficie y φ la fase inicial.

Debido a las propiedades geométricas de la columna en estudio las coordenadas cilíndricas son las más convenientes y se toma en cuenta una condición inicial nula puesto que se supone que no hay una concentración inicial de cloruros.

Los resultados que exhiben muestran que los ciclos climáticos tienen una fuerte influencia en la dinámica de la difusión del cloruro y por tanto, en el comienzo de corrosión de las barras de acero que refuerzan la columna de concreto cuando se imponen condiciones atmosféricas marinas propias del trópico.

A continuación presento otro ejemplo en el que aparece una ley de difusión dependiente del tiempo.

Dinámica de moléculas

Es de vital importancia el estudio de transporte en nanotubos y zeolitos⁴, debido a sus distintos usos en la industria. Los zeolitos son usados para purificación de agua, rompimiento petroquímico y separación de gases y solventes entre otras. Una de sus grandes ventajas es que tienen un papel importante en la reducción de desperdicio tóxico y en el consumo de energía.

El grupo de Subrata Pal (véase [21]) hacen uso de difusión dependiente del tiempo para tiempos pequeños en un estudio relacionado con el transporte de moléculas. Mencionan que se ha reportado en simulaciones de *dinámica de moléculas* que para tiempos grandes en sistemas Lennard-Jones⁵ (figura 2.1) en una dimensión, revelan que mientras el coeficiente de difusión de una partícula etiquetada considerando tiempos muy grandes tiende a cero, la desviación estándar del desplazamiento es lineal para tiempos medianos y pequeños.

⁴Formados en su mayoría por siliconas, aluminio y agua; pueden ser encontrados de manera natural o fabricados artificialmente.

⁵Los sistemas Lennard-Jones son aquellos en los cuales las partículas que los conforman

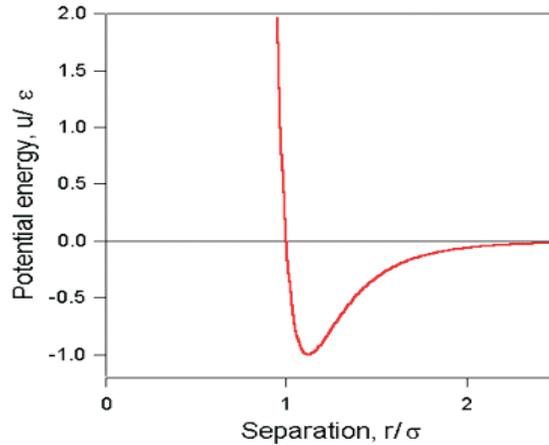


Figura 2.1: Potencial de Lennard-Jones.

Este hecho permite una definición del coeficiente de difusión dependiente del tiempo para valores pequeños de éste. Los autores reportan que las trayectorias de la partícula exhiben desplazamientos intermitentes consistentes con los experimentos reportados por Wei *et al.* (véase [22]).

La teoría utilizada es la de modos acoplados, la cual puede explicar parcialmente el comportamiento dinámico de la función de correlación de la velocidad y, además, la dependencia de la frecuencia por fricción. La razón que los motivó a usar esta teoría en una dimensión, radica en que ha tenido éxito en la predicción del coeficiente de difusión para tres dimensiones y así mismo podría hacerlo satisfactoriamente para dos dimensiones.

El primer estudio teórico que se hizo fue el realizado por Jepsen [23], representando una solución analítica para la función de correlación de barras sólidas. Años más tarde, Lebowitz y Percus [24] estudiaron el límite (para tiempos pequeños) de dicha función y dedujeron expresiones para el coeficiente de difusión. Básicamente su trabajo se centró en una aproximación de tipo exponencial para tiempos pequeños para la función de autocorrelación de la

tienen la misma masa y la interacción a pares sigue el *Potencial Lennard-Jones*:

$$u(r) = \epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right),$$

donde σ es una longitud y ϵ una medida de la interacción.

Naturalmente, aquellos modelos para fluidos que siguen este potencial son, en gran medida, menos ficticios que los modelos de fluidos de esferas duras.

velocidad para barras sólidas. Cabe mencionar que las expresiones dadas por Jepsen, dan valores distintos de cero para la difusión. Trece años después, Bishop *et al.*[25] calculó el coeficiente de difusión en una dimensión para un fluido Lennard-Jones. Sus cálculos estuvieron de acuerdo con las expresiones dadas por Lebowitz y Percus.

La expresión para la función de correlación de la velocidad dada por Jepsen muestran que para tiempos grandes ésta decae, como $1/t^3$. Ésta es una solución exacta y es obtenida calculando el límite $N \rightarrow \infty$ para t fijo, donde N es el número de partículas presentes en el sistema. Hahn y Kärger [26] ya habían probado que la desviación estándar del desplazamiento⁶ para este tipo de barras, obedecía el límite

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle \Delta x^2(t) \rangle = \frac{1}{6} (1 - \rho l) \frac{N}{\rho^2},$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota el promedio sobre todas las barras⁷, l la longitud de la barra y ρ la densidad. Lo cual da la independencia respecto al tiempo para valores de éste grandes. Sin embargo, la difusión para tiempos grandes es cero para toda densidad. Cálculos numéricos muestran que la variación de ésta cambia linealmente con el tiempo hasta que la saturación representada por el límite anterior ocurre. Esto lleva a que Δx es acotado por N/ρ , y por tanto, tiene sentido la difusión para tiempos pequeños siempre y cuando la distribución de probabilidad para la partícula etiquetada, siga una función gaussiana, tal como ocurre en procesos difusivos clásicos. El trabajo de Lebowitz y Percus, mencionado con anterioridad, predice que la difusión para tiempos cortos varía conforme $\rho/(1 - \rho l)$. Resultado confirmado por Bishop *et al.*

⁶Medida del grado de dispersión de los datos del valor promedio; en este caso, del promedio de la distancia entre partículas (moléculas, barras, etc.).

⁷Esta notación es denominada *valor esperado con peso unitario* y cuya definición es:

$$\langle f \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_i,$$

para una distribución discreta y

$$\langle f \rangle = \frac{\int_{\Omega} dx \psi(x) f(x) \psi^*(x)}{\int_{\Omega} dx |\psi(x)|^2},$$

para una distribución continua, donde $\psi(x)$ es una función de probabilidad y $\psi^*(x)$ su conjugada.

Debido a simulaciones hechas por Subrata Pal *et al.* (véase [21]) indican que la difusión dada por Bishop, efectivamente puede ser considerada un buen candidato para tiempos pequeños. En el mismo artículo se presenta una simulación la cual consiste en 1000 barras Lennard-Jones colocadas en una fila de dimensión uno. Las velocidades iniciales de cada una de éstas, está dada a partir de la distribución de Maxwell para la velocidad y las barras se mueven de acuerdo con la dinámica de Newton. Se toma la suma del potencial de Lennard-Jones para cada par de barras. En estas simulaciones, se observa que la función de autocorrelación para la velocidad para tiempos grandes exhibe una cola con valores negativos, así mismo la difusión dependiente del tiempo para tiempos grandes, oscila.

Para hacer su análisis, consideraron el uso de la función de correlación directa entre dos partículas $c(x)$ y la función de distribución radial $g(x)$ (obtenida a partir de las simulaciones), donde x denota la separación entre los centros de las barras Lennard-Jones. Esto con el fin de poder usar adecuadamente la teoría de modos acoplados para encontrar la función de autocorrelación para la velocidad y el coeficiente de difusión.

Haciendo un análisis muy superficial se observa que la función $C_v(z)$ de correlación para la velocidad dependiente de la frecuencia, z , se encuentra relacionada con la fricción dependiente de la frecuencia por medio de la relación generalizada de Einstein (véase [27])

$$C_v(z) = \frac{k_B T}{m(z + \zeta(z))},$$

donde $\zeta(z)$ es la fricción dependiente de la frecuencia.

Siguiendo la teoría de modos acoplados, la fricción total se descompone en dos partes, una correspondiente a tiempos cortos y otra a tiempos largos. La primera parte surge a partir de las colisiones binarias (golpea o no golpea) que hay entre la partícula etiquetada con los solventes que la rodean y la segunda parte es originada por las recolisiones correlacionadas. La expresión final para la fricción dependiente de la frecuencia usada para calcular la función de autocorrelación para la velocidad y la difusión dependiente del tiempo es dada por Sjogren *et al.* [28]

$$\zeta(z) = \zeta^B(z) + \zeta^R(z),$$

donde $\zeta^B(z)$ es la parte binaria de la fricción con frecuencia cero y $\zeta^R(z)$ es el término de colisión que contiene las contribuciones de las repeticiones de

las colisiones y la fricción total. Usando los resultados dados por [27] y [29] se escribe la expresión final para la fricción total

$$\zeta(z) = \frac{\zeta^B(z) R_{\rho\rho}(z) - \zeta^B(z) R_{\rho l}(z)}{1 + R_{\rho l}(z) + \zeta^B(z) R_{ll}(z)}.$$

La expresión $R_{\rho\rho}(z)$ tiene el acoplamiento con la densidad donde se encuentra involucrada la transformada de Fourier de la función $c(x)$. Para $R_{ll}(z)$, la contribución de la corriente longitudinal y $R_{\rho l}(z)$ incluye los modos del acoplamiento simultáneo entre la densidad y la corriente longitudinal (véanse los detalles en [21]).

Los autores dan como uno de sus resultados que la parte binaria de la fricción dependiente del tiempo es

$$\zeta^B(t) = \omega_0^2 \exp\left(-\frac{t^2}{\tau_\zeta^2}\right),$$

donde ω_0 es la frecuencia de Einstein en una dimensión⁸ y τ_ζ^2 es el tiempo de relajación. Así como la función de correlación de la corriente longitudinal

$$C_l(q, t) = -\frac{m^2}{q^2} \frac{d^2}{dt^2} F(q, t),$$

donde proponen, a partir de sus simulaciones, una función del tipo Gaussiana para $F(q, t)$. Suponiendo que para tiempos grandes las contribuciones significativas son provocadas por los números de onda pequeños e intermedios, aproximan las expresiones para $R_{\rho\rho}(z)$, $R_{\rho l}(z)$ y $R_{ll}(z)$ en términos de potencias negativas de t . Aunque éstos no esten relacionados directamente con la función de autocorrelación de la velocidad y por esto, no es posible hacer una estimación de algún factor de compensamiento en los distintos términos, se argumenta que la dependencia del tiempo del término de recolisión no es simple y tendrá un escalamiento múltiple en el tiempo. Esto concuerda razonablemente con las simulaciones presentadas.

⁸Donde m es la masa y $v(x)$ la velocidad:

$$\omega_0^2 = \frac{\rho}{m} \int dx g(x) \frac{d^2}{dx^2} v(x).$$

Con el fin de entender la predicción teórica de la difusión para un tiempo finito, distinto de cero para tiempos cortos, los autores graficaron la descripción de Green-Kubo para la difusión dependiente del tiempo:

$$D(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \langle \Delta x^2(t) \rangle = \int_0^t d\tau \langle v(0)v(\tau) \rangle,$$

donde $v(\tau)$ es la velocidad al tiempo τ y $\phi(\tau) = \langle v(0)v(\tau) \rangle$ es la función de autocorrelación de la velocidad.

Experimentalmente es importante destacar que se trabaja con difusiones dependientes del tiempo, además cabe mencionar que la difusión en una dimensión es definida comúnmente por expresiones similares a las anteriores

$$(2.4) \quad D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \langle \Delta x^2(t) \rangle = \int_0^{\infty} dt \langle v(0)v(t) \rangle.$$

Concluida esta descripción, doy lugar a un tercer ejemplo.

Difusión en una suspensión coloidal

En 2004, Falck *et al.* (véase [31]) estudian la difusión de una gran cantidad de partículas en dos dimensiones en una suspensión coloidal⁹. Estos autores hacen su estudio considerando todas las interacciones hidrodinámicas a través de una técnica de simulación mesoscópica¹⁰ enfocándose en el comportamiento de los coeficientes de difusión escalados para una clase de partículas etiquetada $D_T(\rho)/D_0$ y el correspondiente para las dos clases de partículas que se estudian $D_C(\rho)/D_0$, donde D_0 es el coeficiente de difusión para la clase de partículas más ligeras. Éstos son funciones de la densidad de los coloides ρ .

⁹Sistema que se encuentra dividido en partículas del orden de $0.001 \mu m$ a $1 \mu m$ y que se dispersan en un medio continuo de manera que no pueden pasar por un medio poroso fácilmente. El pionero en el estudio de los coloides fue el escocés Thomas Graham en 1861.

¹⁰A menudo en física y química, la escala mesoscópica se refiere a la longitud de escala donde es posible estudiar razonablemente las propiedades de un material o fenómeno sin considerar el comportamiento de las partículas que lo conforman. En esta escala tiene sentido hablar de cantidades estadísticas como la temperatura y la entropía, de alguna forma se establece el límite termodinámico.

Cabe mencionar que el número de Schmidt es un parámetro importante en la medición de propiedades de un fluido en equilibrio. Éste es definido de la siguiente manera: $S_c = \nu/D$, aquí D es el coeficiente de difusión de las partículas del fluido y ν es la viscosidad cinemática del mismo, equivalentemente que el cociente de la viscosidad del fluido sobre la densidad $\nu = \eta/\rho_s$. Para valores pequeños de este parámetro $S_c \sim 1$, los autores, encuentran que la hidrodinámica no afecta sustancialmente el comportamiento de $D_T(\rho)/D_0$, mientras que para valores de $S_c \gg 1$ se ve aumentado para todos los valores de la densidad, aunque las diferencias con el caso sin hidrodinámica es menor. En el artículo, se advierte que el coeficiente de difusión colectiva, $D_C(\rho)/D_0$, está mucho más intrínsecamente relacionado con las leyes de conservación de la hidrodinámica y es completamente distinto para casos puramente disipativos sin interacciones hidrodinámicas.

La descripción de Green-Kubo, presentada anteriormente, expresa el hecho que se está trabajando con cantidades dependientes del tiempo. Para sistemas coloidales con interacciones hidrodinámicas, hay "colas" largas de tiempo en las funciones de autocorrelación de las velocidades, este hecho es conocido desde la década de los 70's del siglo pasado, el cual se ha observado en modelos dinámicos moleculares y en simulaciones de latices de Boltzmann¹¹. En estos casos es importante tomar en cuenta que $D_T = f(t)$ es decir, el coeficiente de transporte relacionado con el coeficiente de difusión de la clase de partículas etiquetadas depende del tiempo t . Éste, es definido como

$$D_T = \lim_{t \rightarrow \infty} D_T(t),$$

y así, por la relación de Green-Kubo, se tiene

$$D_T(t) = \frac{1}{Nd} \sum_{i=1}^N \int_0^t d\tau \langle \mathbf{v}_i(\tau) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle$$

para N partículas idénticas. La dimensión d es igual a dos (para los resultados reportados por los autores), $\mathbf{v}_i(t)$ es la velocidad de la i -ésima partícula al tiempo t y la función de velocidad de autocorrelación es $\phi(t) \equiv \langle \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle$.

Cuando la difusión de la clase de partículas etiquetadas en suspensiones concentradas es investigada experimentalmente, es común que se distingan los

¹¹Interacciones descritas por una aproximación dada por una superposición lineal para cada interacción de energía por pares donde se usa el potencial de energía deducido numéricamente por la ecuación de Poisson-Boltzmann sobre una celda esférica.

efectos de las interacciones hidrodinámicas por concentración de los llamados coeficientes de difusión para tiempos pequeños. Estos son medidos en tiempos mucho más pequeños que el tiempo que le toma a ésta difundirse en el promedio de la distancia entre las partículas coloidales. Es por esto, que tales tiempos pueden ser significativamente más grandes que el tiempo que les toma a las partículas del coloide relajarse.

Un coeficiente importante que caracteriza la razón de decaimiento de la densidad de las fluctuaciones colectivas es el, ya antes mencionado, coeficiente de difusión colectiva. Éste se define como

$$D_C = \lim_{t \rightarrow \infty} D_C(t),$$

donde la relación de Green-Kubo aparece de nuevo

$$D_C(t) = \xi D_{CM}(t) = \frac{\langle N \rangle}{(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2) d N} \int_0^t d\tau \langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle.$$

La dimensión del sistema es representada por d ,

$$\xi = \frac{\langle N \rangle}{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2},$$

es el factor termodinámico que es inversamente proporcional a la compresibilidad isotérmica y $\mathbf{J}(t) = \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i(t)$ el flujo total de las partículas; la función de autocorrelación de todas las partículas está dada por $\phi(t) = \langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle$. Hay que señalar que esta cantidad es calculada sobre la velocidad de todas las partículas, es por eso que la función $D_{CM}(t)$ se interpreta como el coeficiente de difusión dependiente del tiempo que caracteriza el movimiento del centro de masa de las N partículas en estudio. Para más detalles véase [31].

A continuación, se describe un ejemplo más.

Movimiento Browniano en gases

J. Javier Brey *et al.* (véase [16]) en colaboración con James W. Dufty, publicaron un artículo donde estudian la dinámica de una partícula en un gas cuyas partículas son mucho más ligeras. El análisis parte de la ecuación de

Boltzmann-Lorentz¹² donde las colisiones entre las partículas que conforman el gas son inelásticas.

El primer paso a seguir es la deducción de las ecuaciones hidrodinámicas y las expresiones para los coeficientes de transporte que aparecen en ellas, éstas como funciones del coeficiente de restitución. Los autores usan el método de Chapman-Enskog [17, 20], para ello se sigue del análisis de la ecuación de Boltzmann con choques elásticos. Este método supone la existencia de una solución cuya dependencia en el espacio y tiempo ocurre sólo a través de campos hidrodinámicos. Debido a esto, se puede suponer que existe una relajación rápida de las excitaciones no-hidrodinámicas de tal manera que la descripción hidrodinámica domina en escalas de tiempo mucho mayores. Cabe señalar que esta separación de escalas no necesariamente es válida para todos los flujos granulares, especialmente para aquellos que presentan altos grados de inelasticidad. Aparentemente la base de este argumento radica en la aparición de una escala de tiempo para el enfriamiento del estado de referencia homogéneo, de esta forma las escalas de tiempo hidrodinámicas no sólo están determinadas por el grado de inhomogeneidad espacial. De cualquier manera, se ha mostrado que las excitaciones microscópicas decaen en tiempos cortos respecto a todos los tiempos hidrodinámicos, incluyendo aquellos para la razón de enfriamiento mencionado antes.

La idea que siguen estos investigadores, consiste en hacer un análisis detallado de la ecuación cinética de Boltzmann-Lorentz¹³ para una partícula etiquetada. Definen $F = F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ la densidad de probabilidad en la posición \mathbf{r} con velocidad \mathbf{v} al tiempo t que describe la dinámica de ésta y $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ es la distribución correspondiente de las partículas del gas en el cual se encuentra

¹²Ésta describe la distribución estadística de una o varias partículas en un fluido $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, donde \mathbf{r} , \mathbf{v} y t son la posición, la velocidad y el tiempo, respectivamente. Es una de las más importantes ecuaciones de la mecánica estadística fuera del equilibrio y es usada en el estudio del transporte de cantidades físicas como la carga y el calor por un fluido. Es posible deducir propiedades tales como la conductividad eléctrica, conductividad térmica y viscosidad, entre otras.

¹³Definiendo el operador de Liouville L , el cual describe la evolución del sistema en el espacio fase, como

$$L = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \mathbf{K} \cdot \nabla_{\mathbf{v}},$$

donde \mathbf{K} es el campo de fuerza interactuando con las partículas del fluido. Se escribe de forma más sencilla: $L[F] = C[F]$.

sumergida

$$(2.5) \quad \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \right) F = C[\mathbf{r}, \mathbf{v}, t|F, f],$$

donde $C[\mathbf{r}, \mathbf{v}, t|F, f]$ se denomina como el operador de colisión entre la partícula pesada con el gas de partículas ligeras; éste, describe dicha interacción.

El gas que rodea a la partícula etiquetada se encuentra en un ambiente libre, es decir no está sujeto a algún campo de fuerzas ($\mathbf{K} = \mathbf{0}$); por tanto, éste se supone en el límite asintótico de la masa relativa de la partícula en cuestión. En dicho límite la ecuación de Boltzmann-Lorentz se transforma en la ecuación de Fokker-Planck. Haciendo un análisis del espectro de la última ecuación se confirma la separación de escalas de tiempo para todos los grados de la partícula etiquetada con choques inelásticos, de esta manera se confirma la validez del análisis asintótico que va de la ecuación de Boltzmann-Lorentz a la de Fokker-Planck. Se hacen cambios de variable adecuados para las coordenadas espaciales y temporales de tal forma que se pueda transformar la ecuación de Fokker-Planck para colisiones inelásticas en una para choques elásticos.

Existen diferencias cualitativas que ocurren sólo a través de cambios en las escalas de tiempo y espacio, por ejemplo:

- (i) La renormalización del tiempo de escala esta relacionada logarítmicamente en tiempos reales. La velocidad de relajación y aproximamiento a la hidrodinámica es más algebraico que exponencial.
- (ii) El límite para tiempos grandes de la distribución de la partícula etiquetada para el estado homogéneo es gaussiano, aunque la distribución del baño de la partícula no lo sea.
- (iii) La *dependencia temporal de la temperatura* de la partícula gaussiana etiquetada difiere de la temperatura del baño circundante, aunque las razones de enfriamiento de ambas sean las mismas para tiempos suficientemente grandes.
- (iv) La desviación estándar del desplazamiento se aproxima a $\log t$ para tiempos grandes con un coeficiente que determina el coeficiente de difusión.

- (v) La ecuación de difusión para tiempos grandes tiene la forma usual, aunque sus soluciones sean cualitativamente diferentes para el caso elástico, esto es debido a la dependencia del tiempo en la temperatura en el coeficiente de difusión.

Considérese la ecuación (2.5) y el operador de colisión definido por los autores en [18, 19]

$$(2.6) \quad C[\mathbf{r}, \mathbf{v}, t|F, f] = \sigma_0^{d-1} \int d\mathbf{v}_1 \int d\mathbf{s} \Theta(\mathbf{g} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{g} \cdot \mathbf{s}) \\ \times (\alpha^{-2} F(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}'_1, t) - F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)),$$

donde Θ es la función de Heaviside, \mathbf{s} es el vector unitario que va desde el centro de la partícula uno al centro de la partícula etiquetada con la cual entra en contacto, $\sigma_0 = (\sigma + \sigma_g)/2$ es el promedio aritmético entre el diámetro de las partículas de la partícula pesada y el diámetro de las partículas del gas, respectivamente. El parámetro d representa la dimensión que se esté considerando, ya sean esferas o discos. Se toman en cuenta que todas las colisiones son inelásticas y que las partículas son suaves. El coeficiente de restitución (independiente de las velocidades) se denota por α para aquellas entre las partículas del gas y la etiquetada. Por último, $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ es la velocidad relativa. Las velocidades antes de la colisión están dadas por las siguientes expresiones

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \frac{(1 + \alpha)\varrho}{\alpha(1 + \varrho)}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{s})\mathbf{s} \quad \text{y} \quad \mathbf{v}'_1 = \mathbf{v}_1 + \frac{1 + \alpha}{\alpha(1 + \varrho)}(\mathbf{g} \cdot \mathbf{s})\mathbf{s},$$

con $\varrho = m_g/m$ el cociente entre la masa del gas y la masa de la partícula etiquetada.

Debido a que el gas alrededor de la partícula pesada se considera en un estado de enfriamiento y homogéneo, se determina por medio de su función de distribución calculada a partir de la ecuación de Boltzmann (véase [16]). En esta distribución, aparece la densidad del gas, la rapidez termal del gas al tiempo t , k_B la conocida constante de Boltzmann y $T_g(t)$ la temperatura que obedece a la ecuación de enfriamiento

$$(2.7) \quad \dot{T}_g = -\zeta(t)T_g.$$

La razón de enfriamiento $\zeta(t)$ depende del tiempo sólo mientras la temperatura lo haga, esto se da a partir del segundo momento de la ecuación de Boltzmann para el gas (véase [19]).

La solución de (2.7), está dada por¹⁴

$$T_g(t) = T_g(0) + \left(1 + \frac{\zeta(0)}{2}t\right)^{-2},$$

esto muestra que la temperatura decrece tan rápido como lo haga t^{-2} para tiempos grandes siempre y cuando el sistema permanezca en su estado de enfriamiento homogéneo.

Como puede verse en [18], la ecuación (2.5) (tomando en cuenta (2.6)) para $\varrho \sim 0$ es la transformada en una ecuación de Fokker-Plank (A.10) con un término no lineal¹⁵

$$(2.8) \quad L[F] = \gamma_e(t)a \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\mathbf{v} + \frac{k_B T_g(t)}{m} a \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) F,$$

donde $\gamma_e(t)$ es el coeficiente de fricción para colisiones elásticas.

Haciendo el cambio de variable sugerido en [16], la ecuación (2.8) se transforma en la ecuación adecuada para colisiones elásticas. Dicho cambio de variable es adimensional.

Introduciendo este cambio de variable en (2.8), se obtiene

$$(2.9) \quad L^*[F^*] = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}^*} \cdot \left(\mathbf{v}^* + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}^*} \right) F^*,$$

donde los asteriscos indican las nuevas variables. La nueva densidad de probabilidad F^* es una distribución cuya norma es uno y con la propiedad que también es adimensional.

Debido a estas características se puede concluir que las propiedades físicas para la partícula etiquetada con colisiones inelásticas moviéndose en un gas que se encuentra en un estado de enfriamiento homogéneo, son las mismas para aquellas con colisiones elásticas en un gas en equilibrio. Los autores destacan que la diferencia entre ambos sistemas son las escalas de espacio-tiempo.

Una vez hecho la transformación de (2.5) en (2.9), puede escribirse la solución al problema de Cauchy dado por la ecuación (2.9) en un dominio no acotado. Ésta es

$$(2.10) \quad F^*(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}^*, t^*) = \int d\mathbf{r}'^* \int d\mathbf{v}'^* K(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}^*, \mathbf{r}'^*, \mathbf{v}'^*, 0) F^*(\mathbf{r}'^*, \mathbf{v}'^*, 0),$$

¹⁴Ésta expresión tiene esta forma, debido a cómo se encuentra dada la rapidez termal en la función de distribución.

¹⁵ $\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}$ indica el operador nabla respecto a la velocidad, \mathbf{v} , es decir: $\nabla_{\mathbf{v}} = \left(\frac{\partial}{\partial v_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial v_n} \right)$.

cuyo núcleo puede verse con detalle en [16].

Considerando un estado inicial cuya distribución de la rapidez está dada por una distribución de enfriamiento homogénea maxweliana con una inhomogeneidad espacial

$$F^*(\mathbf{r}^*, \mathbf{v}^*, 0) = n^*(\mathbf{r}^*, 0) \pi^{-d/2} e^{-v^{*2}},$$

donde se denota $n^*(\mathbf{r}, t)$ la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en la posición \mathbf{r}^* al tiempo $t^* = 0$. La densidad correspondiente para toda t^* se calcula integrando (2.10), de esta forma se encuentra

$$(2.11) \quad n^*(\mathbf{r}^*, t) = \left(\frac{d}{2\pi l^{*2}(t^*)} \right)^{d/2} \int d\mathbf{r}'^* \exp \left(-d \frac{(\mathbf{r}^* - \mathbf{r}'^*)^2}{2l^{*2}(t^*)} \right) n^*(\mathbf{r}'^*, 0).$$

Derivando (2.11) respecto a t^* e integrando dos veces por partes se observa que $n^*(\mathbf{r}^*, t^*)$ obedece la ecuación de difusión extendida

$$\frac{\partial n^*}{\partial t^*} = (1 - e^{-t^*}) D^* \Delta n^*$$

donde el coeficiente de difusión es el dado por (2.4) para $t \gg 1$.

Entonces la ecuación de difusión asintótica, en términos de las variables originales, se escribe

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D(t) \Delta n,$$

tal que

$$D(t) = \frac{k_B T_g(t)}{m \gamma_e(t) (1 - \epsilon)^2},$$

donde $k_B T_g(t)/m \gamma_e(t)$ es el coeficiente de difusión para colisiones elásticas.

Los autores reportan que sus predicciones teóricas concuerdan en gran medida con resultados dados por simulaciones en la dinámica de moléculas.

Este último ejemplo, indica la importancia que juega la difusión dependiente del tiempo en el movimiento browniano de partículas. Enseguida se expone un ejemplo de esta dependencia en el mundo de lo vivo.

2.2.2. En sistemas vivos

Como se puede ver con estos trabajos, el estudio de la difusión dependiente del tiempo en la física no pasa desapercibido, al contrario, es de vital importancia para el entendimiento del transporte de la materia. A continuación observaré la importancia de este mismo fenómeno en sistemas biológicos, se verá que la física juega un papel importante para el estudio de estos sistemas.

Difusión de glóbulos rojos

Los paquetes de eritrocitos o glóbulos rojos¹⁶ son candidatos ideales, debido a sus características, como modelo para el estudio de difusión del agua en tejidos biológicos. El tamaño de la célula, la fracción volumétrica extracelular y la permeabilidad de la membrana pueden variar independientemente. Los investigadores L. L. Latour *et al.* [38], miden el coeficiente de difusión dependiente del tiempo, $D(t)$, en éstos. La técnica usada para este fin, es por medio del gradiente del campo pulsado (PFG, por sus siglas en inglés) del eco spin NMR¹⁷. Según su artículo, estiman la permeabilidad de la membrana de los eritrocitos de tal manera que se encuentra en concordancia con mediciones hechas en células aisladas; a partir del comportamiento para tiempos pequeños del coeficiente de difusión, también determinan la razón entre la superficie y el volumen de las células la cual es $\approx (0.72\mu m)^{-1}$.

El transporte de agua por difusión en presencia de membranas permeables es de fundamental importancia biológica. Para su estudio es necesario observar que la medición del coeficiente de difusión medido, depende del tiempo de observación y de algunos parámetros físicos. Éstos son la permeabilidad de la membrana κ , la fracción volumétrica del fluido extracelular conexo φ y la concentración local del agua. Se señala que el arreglo geométrico de las membranas es importante para determinar este coeficiente por tanto, el parámetro que se toma en cuenta para caracterizar tal geometría, es: φ . También se hace incapié en que los parámetros κ y φ pueden ser manipulados de forma independiente.

Para determinar el valor de permeabilidad de la membrana a partir del

¹⁶Las células encargadas del transporte de oxígeno. Éstas se encuentran, naturalmente, en la sangre.

¹⁷Véase [39] para mayores detalles de esta técnica.

coeficiente de difusión efectiva¹⁸, es posible usar la relación usada por Crick (véase [38]).

$$(2.12) \quad \frac{1}{D_{ef}} = \frac{1}{D_0} + \frac{1}{a\kappa},$$

donde D_0 es el coeficiente de difusión de todo el sistema y a es la distancia entre cada uno de los elementos del arreglo periódico de las barreras paralelas de permeabilidad κ .

Para la mayoría de los tejidos biológicos la ecuación (2.12) es deficiente en los siguientes sentidos:

- (i) No es adecuada para distintos coeficientes de difusión en diferentes compartimientos.
- (ii) El arreglo de membranas unidimensional no puede describir el efecto de los caminos de difusión paralelos en el coeficiente de difusión. En la figura 2.2 se esquematiza este caso. Por otro lado, se observa que (2.12) indica que si $\kappa \rightarrow 0$ entonces $D_{ef} \rightarrow 0$, lo cual no es el caso para células rodeadas de agua extracelular.
- (iii) La ecuación (2.12) no considera diferencias en las concentraciones de agua en diferentes compartimientos. Una generalización en este sentido podría ser

$$\frac{1}{D_{ef}} = \frac{1-r}{D_0} + \frac{r}{a\kappa},$$

con $0 < r < 1$ si hubiera algunas otras proteínas en el espacio entre membranas.

El coeficiente de difusión dependiente del tiempo $D(t)$, es definido por

$$D(t) = \frac{\langle r^2(t) \rangle}{6t}$$

donde $\langle r^2(t) \rangle$ mantiene su significado usual; en este caso se tienen moléculas de agua como partículas.

Primero se consideran tiempos grandes, por tanto es admisible calcular

$$\lim_{t \rightarrow \infty} D(t) = D_{ef}.$$

¹⁸Nombre usado para definir al coeficiente de difusión para tiempos grandes, D_{ef} .

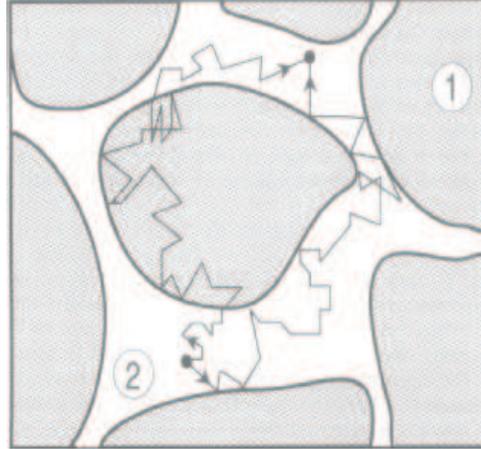


Figura 2.2: Paquete de eritrocitos. Las regiones más oscuras, marcadas con 1, representan el fluido intracelular (hemoglobina en un 33% –peso por unidad de volumen–), con coeficiente de difusión: D_i , éste se encuentra mezclado con una concentración de una fracción de agua C_i . El fluido extracelular, cuyo coeficiente de difusión se denota por D_e , mezclado con una concentración de una fracción de agua C_e se indica con el 2.

Para generalizar la ecuación (2.12), los autores desarrollan una teoría de medios efectivos¹⁹ para D_{ef} . Para ello los eritrocitos son modelados como esferas de radio a cuya permeabilidad es κ . Definiendo los coeficientes de difusión intracelulares D_i y extracelulares D_e ; así como las concentraciones de agua intracelular C_i y extracelular C_e . Haciendo una analogía de la teoría usada en [40, 41] para la conductividad en medios porosos, se considera una célula esférica acotada por una membrana de permeabilidad κ y radio a que contenga una concentración de fracción volumétrica de agua C_1 con coeficiente de difusión D_1 y que esté sumergida en un fluido extracelular con una concentración correspondiente de agua C_2 con coeficiente de difusión D_2 . En seguida se toman las densidades de moléculas etiquetadas dentro $\rho_1(\mathbf{r})$ y fuera $\rho_2(\mathbf{r})$. Como las densidades cumplen con la ley de Fick, la ecuación (2.1)

¹⁹EMT por sus siglas en inglés. Estas teorías están basadas en la idea de reemplazar las inhomogeneidades del medio en estudio por el equivalente que sea homogéneo de tal manera que las fluctuaciones surgidas por dicho reemplazo promedien cero. Originalmente usada para determinar coeficientes de transporte.

describe su flujo. Las condiciones de frontera en la superficie de la célula son

$$\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}_{1 \rightarrow 2} = \kappa \left(\frac{\rho_1}{C_1} - \frac{\rho_2}{C_2} \right); \quad (\mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}}_{1 \rightarrow 2} = 0,$$

donde la primera de ellas indica el flujo del líquido intracelular, el cual depende de la permeabilidad y la diferencia entre los cocientes de las densidades de las moléculas y las concentraciones de agua. La segunda condición de frontera indica la conservación de la masa que hay en la célula.

El caso más sencillo es aquél donde una sola célula se sumerge en un gradiente uniforme de concentración y perturba la corriente uniforme en la dirección vertical $J_0 \hat{\mathbf{z}}$. La variación espacial de ρ_2 está dada por

$$\rho_2(\mathbf{r}) = \frac{J_0}{D_2} \left(\frac{D_i C_1 - D_2 C_2}{D_i C_1 + 2D_2 C_2} \frac{a^3 \cos \theta}{r^2} - r \cos \theta \right),$$

donde se cumple $1/D_i C_1 = 1/D_1 C_1 + 1/a\kappa$. A continuación, se consideran N células distribuidas uniformemente en una región esférica cuyo radio es R . Cada una de ellas perturban la densidad de la misma manera que se hace en [40], siempre y cuando cada una de ellas esten situadas suficientemente lejos de las otras.

La perturbación total, a una distancia $r \gg R$, es producida N veces la perturbación de una sola célula localizada en el centro de la región considerada. Igualando esto con la perturbación causada por una sola esfera grande de radio R y el coeficiente de difusión efectiva D_{ef} , se obtiene

$$(2.13) \quad \frac{D_{ef} C_{ef} - D_2 C_2}{D_{ef} C_{ef} + 2D_2 C_2} = q \frac{D_i C_1 - D_2 C_2}{D_i C_1 + 2D_2 C_2},$$

donde q es la fracción volumétrica ocupada por la célula y $C_{ef} = qC_1 + (1-q)C_2$ la concentración del agua en esta misma. Puesto que la concentración de células se incrementa, es posible usar una versión diferencial de la ecuación (2.13); para hacer una aproximación adecuada se consideran células que van añadiéndose a un tiempo y volumen inicial de fluido extracelular hasta alcanzar finalmente la concentración deseada. En cada paso, tanto las células como el fluido extracelular presente son considerados como un medio homogéneo con difusión constante dada por la fórmula del medio efectivo. La ecuación (2.13) es usada para calcular el coeficiente de difusión efectiva después que un número pequeño de células se añaden. Esto da como resultado una ecuación diferencial

ordinaria de primer orden que gobierna este coeficiente

$$\frac{d}{d \log \varphi} (\log D_{ef} C_{ef}) = 3 \frac{D_{ef} C_{ef} - D_i C_1}{D_i C_1 + 2 D_{ef} C_{ef}}.$$

Integrando esta última sujeta a que $D_{ef} C_{ef} = D_e C_e$ para $\varphi = 1$ se obtiene la ecuación

$$\varphi = \left(\frac{D_{ef} C_{ef} - D_1 C_i}{D_e C_e - D_1 C_i} \right) \left(\frac{D_e C_e}{D_{ef} C_{ef}} \right)^{1/3},$$

tal que

$$D_1 C_i = \frac{a \kappa D_i C_i}{a \kappa + D_i C_i}$$

y $C_{ef} = \varphi C_e + (1 - \varphi) C_i$. Si $\varphi = 0$ entonces se regresa a la ecuación (2.12) donde el numerador del segundo sumando del miembro derecho es reemplazado por C_i y D_0 es sustituido por D_i . La potencia 1/3 esta relacionada con el factor de depolarización de la esfera. En el límite $\kappa = 0$ la fórmula de la EMT da como resultado que $D_{ef} C_{ef} = D_e C_e \varphi^{3/2}$, la cual es análoga a la Ley de Archie²⁰. La diferencia de esta ecuación con aquella para medios porosos radica en que el coeficiente de difusión escala con un factor φ extra.

Con un cálculo similar para una difusión perpendicular en células cilíndricas permeables se obtiene

$$\varphi = \left(\frac{D_{ef} C_{ef} - D_1 C_i}{D_e C_e - D_1 C_i} \right) \left(\frac{D_e C_e}{D_{ef} C_{ef}} \right)^{1/2}.$$

La dependencia de D_{ef} respecto a φ es cualitativamente similar en ambos casos como indican los autores.

Se han hecho estudios de la dependencia temporal de la difusión en arreglos periódicos de membranas (véase [37]). Sin embargo no se han hecho estudios similares para tiempos pequeños. Por esta razón, Latour *et. al.* hacen énfasis

²⁰Regla empírica usada para el estudio de rocas compuestas por minerales no conductivos y agua saturada. Ésta es útil en el análisis de propiedades eléctricas y es comúnmente escrita como

$$\rho_{roca} = \rho_{fluido} A \phi^{-m},$$

donde ρ indica las densidades de carga de la roca y del fluido que se encuentra en los poros, ϕ es la porosidad y tanto A como m son constantes que dependen de la geometría de los poros.

en un punto que se no había considerado en [37]. Para tiempos pequeños el coeficiente de difusión decrece con un comportamiento dado por: \sqrt{t} ; la rapidez con que lo haga dependerá únicamente de la razón entre la superficie y el volumen de las membranas (S/V). Este comportamiento está dado por

$$(2.14) \quad D(t) = D_0 \left(1 - \frac{4}{9\sqrt{\pi}} \frac{S\sqrt{D_0 t}}{V} \right) + \mathcal{O}(D_0 t).$$

El comportamiento descrito por (2.14) ocurre en medios porosos con paredes duras, sin embargo una extensión muestra que el mismo comportamiento con tiempos pequeños se conserva para membranas permeables. La razón de esta afirmación es la siguiente: la adimensionalización relevante que incluye κ es $\kappa t S/V$ y para tiempos pequeños

$$\kappa \frac{tS}{V} \ll \frac{4}{9} \sqrt{\pi} S \frac{\sqrt{D_0 t}}{V},$$

por esta razón el término de la izquierda es de orden superior que \sqrt{t} . Los términos en la ecuación (2.14) son de orden $S/V D_0 t \langle R^{-1} \rangle$ donde $\langle R^{-1} \rangle$ es la curvatura media de la membrana. En presencia de varios compartimientos, (2.14) generaliza el promedio aritmético sobre todos los compartimientos. Esta misma ecuación proporciona una técnica para determinar el cociente S/V en sistemas de membranas biológicas, asimismo funciona para superficies suaves por pedazos en geometrías arbitrarias.

A manera de conclusiones, los autores plantean que una de las principales motivaciones era la construcción de un modelo que pudiera ser usado en la ayuda del entendimiento de la difusión o el estudio de tejidos biológicos más complicados tales como el sistema central nervioso. Aunque la fórmula de EMT fue deducida a partir de células de forma esférica, los resultados que presentan los autores podrían ser cualitativamente correctos para geometrías mucho más complicadas. Esto es debido a que atrapa la importancia del planteamiento físico, es decir las permeabilidades de las membranas biológicas son pequeñas y la contribución dominante del coeficiente D_{ef} está dada por los caminos de difusión que van alrededor de las células y no tanto de aquellos que atraviesan las membranas celulares.

El coeficiente de difusión para tiempos grandes D_{ef} , depende sensiblemente de la fracción volumétrica extracelular. Esto puede explicar la caída del valor

de D_{ef} durante las primeras etapas de un Ictus Isquémico²¹, donde justo antes del ataque isquémico el volumen extracelular en la región afectada del cerebro se ve drásticamente reducido.

La medición del comportamiento transitorio para tiempos pequeños de $D(t)$ es un camino probable para determinar la razón entre la superficie y el volumen de membranas biológicas. La ausencia de dependencia temporal en el coeficiente de difusión medida puede ser interpretada como la ausencia de restricciones a la difusión. Los resultados que presentan estos investigadores muestran que esto puede deberse a que los tiempos de prueba que se han usado no son lo suficientemente pequeños para observar los efectos producidos por las restricciones.

La colección de ejemplos expuestos en este capítulo, muestran fehacientemente no sólo la aparición de procesos difusivos dependientes del tiempo, sino su importancia en diversos procesos. Con la seguridad que este recuento de, a fin de ir enfocando el tema principal de este trabajo, a continuación expongo el análisis detallado de un ejemplo en una interacción depredador-presa presentado por U. Timm y A. Okubo (véase [7]) y deduciré las condiciones para que se dé la bifurcación de Turing en un sistema con difusión dependiente del tiempo y su efecto para tiempos grandes.

²¹Enfermedad vascular que afecta las arterias o que llegan al cerebro debido a la falta de sangre, esto produce muerte del tejido y/o pérdida en las funciones normales del cerebro.

Capítulo 3

Análisis de Turing con difusión dependiente del tiempo

3.1. Introducción

Los modelos donde la difusión se encuentra involucrada y en particular, donde ésta es dependiente del tiempo, no sólo tienen validez en sistemas biológicos como el mundo de las células, sino que también se han hecho trabajos muy interesantes en ecología donde juega un papel muy importante. En algunos de éstos, el modelo de Turing es usado como herramienta principal. La formación de parches en el mar, debidos a explosiones de una población de fitoplancton y otra de zooplacton, han sido elementos de estudio para los ecólogos desde hace varias décadas. En algunos de estos estudios, el ingrediente "especial" es la presencia de inestabilidades debidas a difusión. Es por esto que el modelo de Turing puede ser usado en sistemas ecológicos.

En el ejemplo de la Sección 1.4.2 se analizó el modelo propuesto por Jackson y Segel donde se consideran términos que representan la difusión de las especies. Uno de los resultados que arroja el análisis realizado allá, es el hecho que se inducen inestabilidades de una distribución inicial estable y uniforme. Estas distribuciones iniciales se tornan en una inestabilidad espacial debida a perturbaciones de ciertas fluctuaciones espaciales las cuales son provocadas por condiciones impuestas sobre los parámetros: llamadas condiciones de Turing (véase la Sección 1.4.2). En este contexto, los estudios que se han hecho, generalmente se consideran coeficientes de difusión constante.

Para este tipo de modelos ecológicos, las condiciones de Turing están

relacionadas con la interacción entre la densidad de población del depredador y la de la presa. Éstas, necesarias para la formación de patrones. Entre las cuales se destaca, por ejemplo, que el coeficiente de difusión de la densidad de población del depredador sea mayor que la de la presa. Esto último es razonable puesto que el zooplancton tiene una menor dependencia que el fitoplancton respecto a las corrientes marinas.

Bajo la premisa que es necesario considerar un modelo menos idealizado y que la difusión depende del tiempo en la descripción de diversos fenómenos físicos, químicos y biológicos se propone que los coeficientes de difusión dependan del tiempo para el modelo de Segel y Jackson, tal como se plantea en [7].

En el océano, poblacionales que lo habitan, pueden dispersarse de tal forma que este proceso sea cualitativamente diferente de una estación del año a otra pero que mirado a lo largo del tiempo, su cualidad se repita. En ese caso, tiene sentido pensar que el proceso difusivo pueda ser descrito por una función periódica del tiempo. Esto puede explicarse de la siguiente manera: existen corrientes marítimas cuya dirección es horizontal y que son distintas a diferentes profundidades. Esto puede producir corrientes de corte verticales, las cuales pueden dar lugar a una dispersión horizontal cuando interactúan con procesos de mezclado verticales. Es por esto que resulta natural esperar comportamientos difusivos horizontales de fitoplancton y de zooplancton que no sólo son diferentes sino que también pueden variar con el tiempo.

La migración vertical diurna del zooplancton en combinación con estas corrientes verticales de corte, juegan un papel importante en la difusión horizontal que se genera; la dependencia con el tiempo es mucho más marcada que en el fitoplancton.

El modelo estudiado por Timm y Okubo, (véase [7]) es el propuesto originamente por Levin y Segel con una diferencia significativa: el coeficiente de difusión de la densidad de población del depredador depende del tiempo.

Considérese el sistema (1.18), en el que para simplificar la notación, se omiten las barras sobre los parámetros y las densidades de población y usando la notación común para el tiempo y el espacio, es decir se usará t y x , respectivamente. Los coeficientes de difusión se denotarán como sigue

$D_P(t)$: para la densidad de población del depredador al tiempo t y

D_p : para la densidad de población de la difusión de la presa.

De esta manera, el sistema que aquí consideraré toma la forma

$$(3.1) \quad \frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + F(p, P)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P(t) \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + G(p, P), \quad \forall (x, t) \in \Omega \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$$

donde los términos cinéticos o de interacción son $F(p, P) = ap + bp^2 - cPp$ y $G(p, P) = -eP^2 + fPp$.

El sistema (3.1), junto con las condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas completan el problema matemático por estudiar.

3.2. Análisis de estabilidad con Teoría de Floquet I

El objetivo de este capítulo es hacer el análisis de Turing para el sistema (3.1) que necesariamente tendrá diferencias con el realizado en la Sección 1.4.2 por la sencilla razón que ahora aparece un coeficiente de difusión dependiente del tiempo. Aunque en términos generales, el análisis sigue la misma lógica que el desarrollado en la Sección 1.4.2, el método que se usará para analizar este problema es proporcionado por la Teoría de Floquet (véase el Apéndice B y [8]).

Debido a que el origen sigue siendo punto de equilibrio y, como ya se dijo en la Sección 1.4.2, no presenta estabilidad, se considera el punto de equilibrio de la parte cinética en (3.1) que se encuentra en el primer cuadrante. Éste, es

$$(3.2) \quad \begin{pmatrix} p_2^* \\ P_2^* \end{pmatrix} = \frac{a}{cf - eb} \begin{pmatrix} e \\ f \end{pmatrix},$$

con $cf - eb > 0$.

Introduciendo una perturbación $(\tilde{s}, \tilde{S})^T$ alrededor del punto de equilibrio $(p_2^*, P_2^*)^T$, se tiene que en una vecindad de éste,

$$(3.3) \quad p(x, t) = p_2^* + \tilde{s}(x, t)$$

$$P(x, t) = P_2^* + \tilde{S}(x, t),$$

satisfaciendo las necesidades dadas en la Sección 1.4 para el vector perturbado. A fin de simular los cambios debidos a las corrientes marítimas, se supondrá que el coeficiente de difusión del depredador lo representa la función (véase [7])

$$D_P(t) = D_p(\alpha + \beta \sin \omega t),$$

donde D_p , α y β son positivos y además $|\beta| < \alpha$ y $\alpha > 1$. Nótese que $D_P(t) > 0 \forall t \in \mathbb{R}$ y así se tiene un problema bien planteado cosa que no puede ocurrir puesto que en caso contrario, la continuidad respecto a las condiciones iniciales se violaría.

La perturbación del punto de equilibrio de (3.2) (que se encuentra en el primer cuadrante) se representa de la siguiente forma:

$$(3.4) \quad \tilde{s}(x, t) = \varphi(t)e^{ikx}$$

$$\tilde{S}(x, t) = \psi(t)e^{ikx}.$$

Dado que se busca por solución al sistema (3.1) al par de funciones que aparecen en (3.3) siendo \tilde{s} y \tilde{S} como en (3.4), entonces al sustituir (3.3) en (3.1) se encuentra un sistema para las variables dependientes del tiempo $\varphi(t)$ y $\psi(t)$. Éste se escribe en forma matricial

$$(3.5) \quad \dot{\mathbf{w}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{\varphi}(t) \\ \dot{\psi}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11}(k) & q_{12} \\ q_{21} & q_{22}(k, t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(t) \\ \psi(t) \end{pmatrix} = \mathbf{A}(k, t)\mathbf{w}(t),$$

donde las entradas de la matriz $\mathbf{A}(k, t)$ se expresan en términos de los parámetros originales¹

$$q_{11} = a_{11} - k^2 D_p; \quad q_{12} = a_{12}; \quad q_{21} = a_{21},$$

y de la oscilación del coeficiente de difusión para la densidad de población del depredador

$$q_{22}(t) = (a_{22} - k^2 D_p \alpha) - k^2 D_p \beta \sin \omega t = \nu - k^2 D_p \beta \sin \omega t.$$

¹Las entradas de la matriz de Jacobi \mathbf{J} de nueva cuenta se denotan con $\{a_{ij}\}$. Con el fin de no recargar la notación se obviaré la dependencia de q_{ij} respecto a k .

Las entradas a_{ij} de la matriz de Jacobi tienen los mismos signos que en el caso del sistema con difusión constante

$$a_{11} = bp_2^* > 0, \quad a_{12} = -cp_2^* < 0, \quad a_{21} = fP_2^* > 0, \quad a_{22} = -eP_2^* < 0.$$

Hay que notar que la matriz del sistema (3.5) es dependiente del tiempo y periódica $\mathbf{A}(k, t) = \mathbf{A}(k, t + T)$ donde $T = 2\pi/\omega$ lo que abre la posibilidad de mayor riqueza respecto al caso en el que los coeficientes de difusión son constantes. Por esta razón, a fin de averiguar el tipo de soluciones que tiene el sistema (3.5), es posible usar la Teoría de Floquet (véase el Apendice B). Luego, por el Teorema B.2, el tipo de soluciones son soluciones normales, es decir, satisfacen

$$\mathbf{w}(t) = \mu \mathbf{w}(t + T),$$

donde μ es el multiplicador de Floquet (véase el Apendice B).

Sean $\mathbf{M}(t)$ una matriz fundamental del sistema (3.5) y \mathbf{C} una matriz no singular tal que

$$\mathbf{M}(t + T) = \mathbf{M}(t) \mathbf{C}$$

y μ_1, μ_2 los multiplicadores de Floquet de (3.5). Debido al Teorema B.4, se tiene

$$(3.6) \quad r = \mu_1 \mu_2 = \exp \left(\int_0^T \text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) dt \right).$$

Ahora, como la integral anterior es sobre un periodo y la función $\sin \omega t$ tiene periodo T , su valor es

$$\int_0^T \text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) dt = (\text{Tr}(\mathbf{J}) - D_p k^2 (1 + \alpha)) T$$

por lo que de (3.6) se sigue que

$$r = \exp \left(\text{Tr}(\mathbf{J}) - D_p k^2 (1 + \alpha) \right) T < 1,$$

esto es así puesto que $T > 0$ y se está en la región de inestabilidad inducida por difusión, es decir, se satisface la primera condición de Turing (1.5).

Los multiplicadores de Floquet, μ_1 y μ_2 , son valores propios de la matriz \mathbf{C} , entonces éstos son raíz del polinomio característico

$$\det(\mathbf{C} - \mu \mathbf{I}) = \mu^2 - q\mu + r,$$

donde $q = q(\alpha, \beta)$. No indicaré la dependencia explícita de los parámetros, se supondrá implícita. Las raíces de esta ecuación, son:

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{2} \left(q \pm \sqrt{q^2 - 4r} \right).$$

Una de las primeras observaciones que se puede hacer es que, tanto q como r , dependen del número de onda k y de la frecuencia, ω , de oscilación natural. Por otro lado, una consecuencia de la igualdad (3.6), indica que el producto de los multiplicadores está restringido a valores positivos. De hecho, son menores que uno, es decir $r \in (0, 1)$.

Para hacer un análisis completo se consideran tres casos:

Caso 1. $q^2 - 4r > 0$. Esto quiere decir que $|q| > 2\sqrt{r}$. Lo cual conduce a dos subcasos:

a) $q > 2\sqrt{r}$: se tiene que $\mu_1, \mu_2 \in \mathbb{R}^+$ y como $1 > r = \mu_1\mu_2$, entonces

$$\mu_2 < \frac{1}{\mu_1} = \frac{2}{q + \sqrt{q^2 - 4r}}.$$

Sin pérdida de generalidad, se considera $\mu_2 < 1$ y tomando $\sigma > 1$ de tal manera que $q = \sigma 2\sqrt{r}$. Este multiplicador toma la forma

$$\mu_2 = \sqrt{r} \left(\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 1} \right) = \sqrt{r} g_1(\sigma)$$

donde $g_1(\sigma) < 1 \forall \sigma > 1$ como puede comprobarse fácilmente. De aquí se deduce $\mu_2 < \sqrt{r} < 1$.

Por otro lado, $\mu_1 > 1$ si $q > r + 1$. Los exponentes característicos se definen tal cual se muestra en el Apéndice B; por tanto ρ_1 y ρ_2 , correspondientes a μ_1 y μ_2 , tienen signos distintos y por el Teorema B.1, las soluciones de (3.5) son inestables. En consecuencia, bajo estas condiciones el estado estacionario y homogéneo se desestabiliza.

Si $q < r + 1$ entonces se ve que $\mu_1 < 1$, esto implica que el exponente característico correspondiente ρ_1 es negativo y por tanto, las soluciones son estables.

Ahora, si resulta que $q = r + 1$ entonces un sencillo cálculo muestra que $\mu_1 = 1$, lo cual indica la existencia de al menos una solución periódica de (3.5), es decir

$$\mathbf{w}(t) = \mathbf{w}(t + T),$$

esto es debido al Teorema de Floquet B.2.

b) $-q > 2\sqrt{r}$: esta situación es equivalente a $q < -2\sqrt{r} \Rightarrow \mu_1, \mu_2 \in \mathbb{R}^-$.

Puesto que $r < 1$, uno de estos valores propios satisface que

$$\mu_1 = \frac{1}{2} \left(q + \sqrt{q^2 - 4r} \right) > -1.$$

En el caso que se tuviera la igualdad $q = -2\sigma\sqrt{r}$ para $\sigma > 0$, significaría que

$$\mu_1 = \sqrt{r} \left(-\sigma + \sqrt{\sigma^2 - 1} \right) = \sqrt{r}g_2(\sigma) > -1,$$

con $g_2(\sigma) < 1$ como puede verificarse fácilmente. La segunda raíz del polinomio característico tiene la siguiente expresión

$$\mu_2 = \sqrt{r} \left(-\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 1} \right) = \sqrt{r}g_2(\sigma) < -1,$$

para cualquier valor de $q < -(r + 1)$. Y como consecuencia, se concluye que surge una solución inestable dado que la parte real de

$$\rho_2 = \frac{\omega}{2\pi} \log \mu_2 = \frac{\omega}{2\pi} \log |\mu_2| + i \frac{\omega}{2\pi} \arg \mu_2$$

es positiva.

Ahora, si $q > -(r + 1)$ entonces $\mu_2 > -1$ provocando que $\Re(\rho_2) < 0$ y por tanto existe una solución estable.

Si $q = -(r + 1)$ se verifica que el multiplicador μ_2 es igual a uno y de nueva cuenta se tiene al menos una solución periódica.

Caso 2. $q^2 - 4r = 0$. Aquí se tiene que el parámetro q puede tomar un valor positivo o bien uno negativo. Por esta razón, se analizan dos subcasos:

a) $q = 2\sqrt{r}$: esto significa que el polinomio característico tiene una sola raíz de multiplicidad dos, es decir $\mu = \mu_1 = \mu_2 = \sqrt{r}$ lo cual implica que

$$\rho = \frac{\omega}{4\pi} \log r < 0,$$

dando a lugar a una solución estable.

b) $q = -2\sqrt{r}$: aquí el exponente característico es complejo, es decir

$$\rho = \frac{\omega}{4\pi} \log r + i\frac{\omega}{2} \in \mathbb{C}.$$

La parte imaginaria tiene ese valor puesto que $\arg \mu = \pi$, donde $\mu = -\sqrt{r}$.

De igual manera que en el subcaso anterior se obtiene una solución estable; la razón de esto está dada por $\Re(\rho) < 0$.

Caso 3. $q^2 - 4r < 0$. Esta ecuación satisface que $|q| < 2\sqrt{r}$, lo cual implica que los multiplicadores de Floquet son números complejos: uno el conjugado del otro

$$\bar{\mu}_2 = \mu_1 = \frac{1}{2} \left(q + i\sqrt{4r - q^2} \right) \in \mathbb{C},$$

donde

$$|\mu_1|^2 = r < 1, \quad \arg \mu_1 = \arctan \frac{\sqrt{4r - q^2}}{q}$$

y por tanto, también los exponentes característicos asociados, resultan ser números complejos.

No sólo existen soluciones estables sino que, además de las oscilaciones con frecuencia ω , aparecen otras cuya frecuencia está dada por $\arg \mu_j$ ($j = 1, 2$).

Una de las primeras conclusiones que arroja este análisis, es el hecho que cuando se tiene dependencia temporal y periódica en los coeficientes de difusión, ésta puede inhibir o favorecer la inestabilidad de Turing dependiendo de los valores de los parámetros. Si éstos son de tal manera que hay una inestabilidad, la bifurcación de Turing se ve favorecida.

En los casos donde existe estabilidad, se puede observar que puede haber dos tipos de ésta: soluciones periódicas y soluciones que convergen a una estacionaria. En otras palabras si se exhibe soluciones periódicas, ambas poblaciones pueden coexistir e inclusive, pueden producir patrones espaciales si se satisfacen el resto de las condiciones de Turing. Estas oscilaciones pueden ser muy complejas, sin embargo cualitativamente hablando este fenómeno puede explicarse de la siguiente forma: la convivencia, sin que una población (depredador) aniquile a la otra y así provocando su propia declinación, es de tal manera que al verse disminuida la densidad de una población la otra le permite crecer hasta alcanzar un valor suficiente para asegurar su existencia.

Esto produce que disminuya la densidad de la primera población hasta alcanzar un valor crítico que indica la disminución en el alimento (presa).

Los valores de los parámetros que permiten que el punto de equilibrio sea asintóticamente estable², puede interpretarse como que una fluctuación de éste, no permite que tanto la población del depredador como la de la presa, crezcan o disminuya sin control alguno. En efecto, no sólo esto sino que ambas convergerán a un valor fijo: no pueden ser poblaciones más grandes o pequeñas que las dadas por el punto de equilibrio para tiempos grandes.

A pesar que se cumple con la primera condición de Turing, este ejemplo particular, sugiere condiciones extras para que ocurra la bifurcación de Turing y por tanto, asegurar el surgimiento de patrones.

3.3. Análisis de estabilidad con Teoría de Floquet II

En la región de los parámetros en la que se obtiene un favorecimiento en la emergencia de patrones, en las soluciones del sistema (3.5), es posible analizar el hecho que así lo hagan éstas respecto al modelo cuando la difusión es constante. Es decir: ¿en qué sentido los coeficientes de difusión dependientes del tiempo producen inestabilidades espaciales en un modelo de Turing? En esta sección se analizará el sistema (3.1) con la Teoría de Floquet de manera distinta a la Sección 3.2 y se hará una comparación cualitativa con el caso de difusión constante de la Sección 1.4.2.

Prosiguiendo con el sistema (3.1), considerando que existe un valor crítico del coeficiente de difusión para el cual se da la bifurcación de Turing y tomando $\beta = 0$ como el estado de referencia; se sustituye en (1.16) y se obtiene la existencia de un valor crítico $\alpha = \alpha_c$ a partir del cual comienza haber inestabilidad³. El respectivo número de onda crítico, k_c^2 , en el que la primera perturbación surge, se calcula a partir de la expresión (1.28). Aquí d_c tiene su expresión en términos del estudiado por Segel y Jackson (véase la expresión (1.29)).

²Convergencia a una solución de equilibrio o estacionaria.

³La adimensionalización que se hace en la Sección 1.4.2 da como resultado que $d < 1$. En este caso por la forma en que está dada el coeficiente de difusión para el depredador, el cociente es: $D_P(t)/D_p > 1$. Los resultados no se ven afectados.

A partir del sistema (3.1), se tiene

$$(3.7) \quad \left. \frac{D_P(t)}{D_p} \right|_{\beta=0} = \alpha > \alpha_c = a_{11}^{-2} \left(\sqrt{\det(\mathbf{J})} + \sqrt{|a_{12}a_{21}|} \right)^2 > 1.$$

El sistema lineal (3.5) es equivalente a una ecuación diferencial de segundo orden en alguna de las funciones φ o ϕ . Se elige a $\varphi(t)$, ésta satisface la ecuación diferencial

$$(3.8) \quad \ddot{\varphi} - \text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) \dot{\varphi} + \det(\mathbf{A}(k, t)) \varphi = 0,$$

de la cual, a fin de ver el efecto que tiene la dependencia temporal en la difusión y así poder hacer una comparación entre ésta y cuando la difusión tiene coeficiente constante, se quiere averiguar el tipo de soluciones que tiene.

Introduciendo $\phi(t)$ de tal manera que

$$(3.9) \quad \phi(t) = \varphi(t) \exp \left(-\frac{1}{2} \int_0^t \text{Tr}(\mathbf{A}(k, \tau)) d\tau \right).$$

Sustituyendo esta representación de ϕ en (3.8), se obtiene que ésta satisface

$$\ddot{\phi}(t) + \left(\frac{1}{2} \dot{q}_{22}(t) - \frac{1}{4} \text{Tr} \mathbf{A}(k, t)^2 + \det \mathbf{A}(k, t) \right) \phi = 0,$$

la cual escribiendo las expresiones correspondientes para $\text{Tr} \mathbf{A}(k, t)$ y $\det \mathbf{A}(k, t)$, definiendo los nuevos parámetros δ y ϵ como

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{2} k^2 D_p \left((a_{22} + a_{11})(1 - \alpha) - \frac{1}{2} k^2 D_p (2(1 - \alpha)^2 + \beta^2) \right) \\ &- \frac{1}{4} \left((a_{11} + a_{22})^2 + 4(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) \right), \end{aligned}$$

reescalando el tiempo definiendo a y de manera que $t = 2y$ y $4\epsilon = \beta k^2 D_p$ se obtiene que $\phi(t)$ satisface la así llamada *ecuación de Hill*

$$(3.10) \quad \phi'' + H(y, \epsilon, k^2) \phi = 0,$$

donde

$$H(y, \epsilon, k^2) = \delta + \epsilon 2 \left((a_{22} + a_{11} - k^2 D_p (1 - \alpha)) \sin 2y - \cos 2y \right) + \epsilon^2 2 \cos 4y.$$

En (3.10) las comillas ' y '' indican derivación respecto a y (el tiempo reescalado).

Integrando (3.10) se encuentra la solución de la parte temporal para la densidad de población de la presa y por tanto, para la del depredador⁴; esto último a partir de la ecuación (3.9), es decir

$$(3.11) \quad \varphi(t) = \phi(t) \exp \left(\frac{1}{2} \left((a_{11} - k^2 D_p + \nu) t + \frac{k^2 D_p \beta}{\omega} \cos \omega t \right) \right).$$

Antes de proseguir, recuérdese que se está en el régimen de parámetros donde el tipo de soluciones de (3.5) son estables. Para hacer una comparación de la estabilidad cuando la difusividad del depredador varía con el tiempo (y de la presa) respecto al estado de referencia $\beta = 0$ (neutralmente estable), se considera una vecindad del valor crítico α_c para $\beta \sim 0$. Esto mostrará el efecto que produce el hecho que el coeficiente de difusión, no sea constante.

Tomando $\alpha = \alpha_c$ y $k = k_c$ para el estado neutralmente estable y $\beta \sim 0$ en $D_p(t)$, la ecuación que gobierna ésta para el sistema (3.5) se encuentra a partir de la ecuación de Hill (3.10). Obsérvese que en ésta, el parámetro δ toma la forma $-(a_{22} + a_{11} - k^2 D_p (1 - \alpha_c))^2$, dado que se hace uso del valor para α_c a partir de la expresión (3.7); por tanto

$$(3.12) \quad \phi'' + (\delta + \epsilon(2u \sin 2y - 2 \cos 2y))\phi = 0,$$

donde

$$u = q_{11} + \nu, \quad \epsilon = k_c^2 D_p \beta \sim 0, \quad \delta = -u^2.$$

El término de orden ϵ^2 , $\mathcal{O}(\epsilon^2)$, es ignorado debido a que $\beta \sim 0$.

El siguiente paso es proponer una solución de (3.12) en forma de series de Fourier como lo sugiere la Teoría de Floquet. Así, sea

$$(3.13) \quad \phi(y) = e^{\mu y} Z(y) = e^{\mu y} \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{i2ny}.$$

Los coeficientes de esta serie se eligen de esta forma, puesto que la ecuación de Hill cuya solución se estimará, tiene términos trigonométricos con argumento par, esto es debido al reescalamiento del tiempo hecho unos párrafos atrás. Sustituyendo (3.13) en (3.12) y recordando que el conjunto de funciones $\{e^{i2ny}\}_{n \in \mathbb{Z}}$ forma un conjunto ortogonal para toda $n \in \mathbb{Z}$, se obtiene

⁴Para el análisis cualitativo del tipo de soluciones véase la Subsección 3.2.

una expresión en términos de los coeficientes de Fourier c_{2n} . Para ello, hay que observar que

$$2 \cos 2y = e^{i2y} + e^{-i2y}; \quad 2i \sin 2y = e^{i2y} - e^{-i2y},$$

y la segunda derivada de (3.13) es

$$\phi''(y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} (\mu + i2n)^2 e^{(\mu+i2n)y}$$

y por tanto, al sustituir en (3.12) tiene que los coeficientes c_{2n} que aparecen en (3.13) se satisfacen la expresión

$$(3.14) \quad ((\mu + i2n)^2 + \delta) c_{2n} + \epsilon (c_{2n-2} + c_{2n+2}) - iu\epsilon (c_{2n-2} - c_{2n+2}) = 0.$$

Simplificando un poco la notación introduciendo ξ , tal que

$$\xi_{2n} \equiv (\mu + i2n)^2 + \delta = \delta - (2n - i\mu)^2$$

y suponiendo que no se anulan para ningún valor de los multiplicadores de Floquet μ , es decir que ocurre

$$\delta \neq (2n - i\mu)^2,$$

la ecuación (3.14) toma la forma

$$c_{2n} - \epsilon \xi_{2n}^{-1} (c_{2n-2} + c_{2n+2}) - iu\epsilon \xi_{2n}^{-1} (c_{2n-2} - c_{2n+2}) = 0 \forall n \in \mathbb{Z}.$$

Ésta puede escribirse en forma matricial: $\mathbf{B} \mathbf{c} = \mathbf{0}$, donde \mathbf{c} es el vector de los coeficientes c_{2n} y \mathbf{B} es la matriz asociada al sistema la cual resulta ser tridiagonal. Tanto \mathbf{B} como \mathbf{c} son de dimensión infinita. Las entradas de ésta están dadas por

$$b_{n,-1} = -\frac{(1 + iu)\epsilon}{\xi_{2n}}, \quad b_{n,1} = \frac{(-1 + iu)\epsilon}{\xi_{2n}},$$

donde el determinante de la matriz \mathbf{B} dependerá de $i\mu$ y para obtener una solución no trivial para \mathbf{c} , es necesario que se cumpla

(3.15)

$$\det \mathbf{B} \equiv \Upsilon(i\mu) = \begin{vmatrix} \ddots & & \ddots & & \ddots & & 0 \\ & b_{n-1,-1} & & & & & \\ & & \begin{bmatrix} 1 & b_{n-1,1} \\ b_{n,-1} & 1 & b_{n,1} \\ & b_{n+1,-1} & 1 \end{bmatrix} & & & & \\ & & & & & & b_{n+1,1} \\ 0 & & & \ddots & & \ddots & \ddots \end{vmatrix} = 0.$$

Como se puede ver en la definición de ξ , existe una relación importante entre el parámetro, δ , y el multiplicador de Floquet, μ . Por otro lado, a partir de (3.13) el argumento del factor $e^{\mu y}$ indica la razón a la cual ϕ crece. Por esta razón, es necesario hacer un análisis de (3.15) y así, encontrar una relación entre μ y δ .

Como $\Upsilon(i\mu)$ es una función complejo valuada a fin de estudiar sus propiedades, es posible echar mano del análisis complejo. Por ejemplo, los polos de esta función son aquellos donde $\xi_{2n} = 0$, esto quiere decir que aquellos valores para los cuales el determinante es singular, son

$$\mu = i(\sqrt{\delta} - 2n), \quad \mu = -i(\sqrt{\delta} + 2n).$$

Se construye una función que tenga polos simples en los mismos puntos y se supone que $\mu = 0$ no es un polo, es decir: $\delta \neq 4n^2$. Ahora, se define otra función que sea analítica⁵, dando una constante adecuada y por el Teorema 3.1 (véase [58]), podría hacerse uso del Teorema 3.2 (véase [57]). Éstos se enuncian así:

Teorema 3.1 (Teorema de Continuación de Riemann). *Si A es discreto y cerrado en Ω , entonces para una función analítica, f , en $\Omega \setminus A$ son equivalentes:*

1. f se puede extender analíticamente en todo A .
2. f se puede extender continuamente en todo A .
3. f es acotada en una vecindad de cada punto de A .
4. $\lim_{z \rightarrow z_0} (z - z_0)f(z) = 0$ para cada punto $z_0 \in A$.

Teorema 3.2 (Teorema de Liouville). *Cada función entera (analítica en todo el plano) acotada es constante.*

Con este fin, sea

$$\Psi(i\mu) = \Upsilon(i\mu) - K\Theta(i\mu),$$

tal que $\Psi(i\mu)$ cumple con las condiciones de este teorema. En efecto, es acotada y es analítica en todo el plano complejo.

⁵Una función analítica es aquella que es \mathbb{C} -diferenciable en $\Omega \subset \mathbb{C}$.

Es fácil ver que la función

$$\Theta(i\mu) = \frac{1}{\cos i\mu\pi - \cos \pi\sqrt{\delta}},$$

tiene exactamente los mismos polos simples que $\Upsilon(i\mu)$. Para encontrar la constante que se requiere para usar el Teorema 3.1, se toma el límite $\mu \rightarrow \infty$ y se observa que el determinante de la matriz \mathbf{B} tiende a uno. Esto dado que las entradas $b_{n,1}$ y $b_{n,-1}$ tienden a cero, por otro lado $\Theta(i\mu) \rightarrow 0$ puesto que el coseno complejo es equivalente al coseno hiperbólico. Entonces $\Psi(i\mu) \rightarrow 1$, esto implica que la constante K puede ser escrita en términos de las funciones Υ y Θ evaluadas en cualquier punto, en particular $\mu = 0 \Rightarrow K = (\Upsilon(0) - 1)(1 - \cos \pi\sqrt{\delta})$.

Considerando que se requiere $\Upsilon(i\mu) = 0 \forall i\mu \in \mathbb{C}$, entonces sustituyendo el valor de K en $\Psi(i\mu) = 1$ y recordando que $2 \sin^2 \frac{1}{2}w = 1 - \cos w$, se concluye

$$(3.16) \quad \sin^2 \frac{i\mu\pi}{2} = \Upsilon(0) \sin^2 \frac{\pi\sqrt{\delta}}{2}.$$

Se prosigue con el análisis del determinante de \mathbf{B} desarrollando $\Upsilon(i\mu)$ en serie de potencias de ϵ y ϵu directamente del determinante⁶, es decir

$$\Upsilon(0) \sim 1 - 2 \frac{\epsilon^2 + \epsilon^2 u^2}{\delta(\delta - 4)},$$

donde $\mu = 0$ y $\xi_{2n} \neq 0$. Sustituyendo en (3.16) y dado que $\delta = -u^2 < 0$, se obtiene

$$\begin{aligned} \sin^2 \frac{i\mu\pi}{2} &\sim \left(1 - 2 \frac{\epsilon^2 + \epsilon^2 u^2}{\delta(\delta - 4)}\right) \sin^2 \frac{i\pi\sqrt{|\delta|}}{2} \\ \Rightarrow \sinh \frac{\mu\pi}{2} &\sim \sqrt{1 - 2 \frac{\epsilon^2 + \epsilon^2 u^2}{|\delta(\delta - 4)|}} \sinh \frac{\pi\sqrt{|\delta|}}{2}. \end{aligned}$$

A partir de esta estimación, se deduce que el multiplicador de Floquet es menor que la mitad del valor absoluto de la traza del sistema (3.5) ($\sinh w$ es monótona creciente), es decir

$$\mu < \frac{1}{2} |q_{11} + \nu|.$$

⁶Observar la parte que se encuentra entre corchetes de (3.15).

Despreciando el término oscilatorio en (3.11) (considerando la estabilidad asintótica), las estimaciones para (3.9) son

$$\varphi(t) \sim \phi(t) \exp\left(-\frac{1}{2}|q_{11} + \nu|t\right),$$

en $\alpha = \alpha_c$ y $t \rightarrow \infty$.

Por tanto, se tiene que una aproximación a la solución $\varphi(t)$ a la ecuación (3.8) está dada por

$$\varphi(t) \sim \exp\left(\frac{1}{2}\left(\mu - \sqrt{|\delta|}\right)t\right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{int}.$$

Ahora, la serie que aquí aparece puede acotarse pues

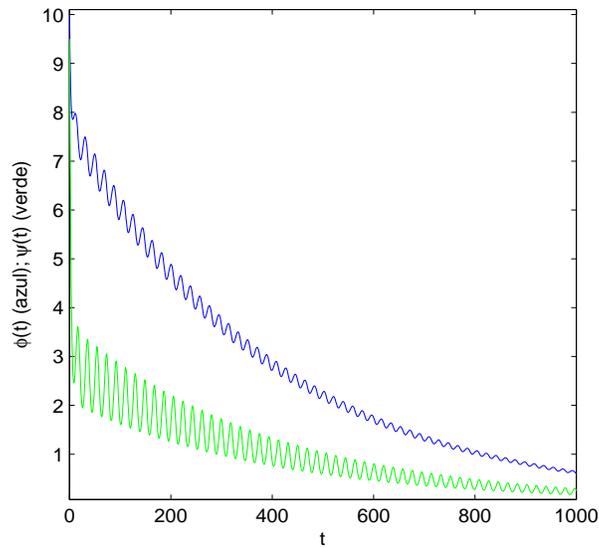
$$\left| \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{int} \right| \leq \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_{2n}| < \infty,$$

entonces la convergencia a cero para la parte temporal de la densidad de población de la presa es asintóticamente estable para valores pequeños de β y cerca de $\alpha = \alpha_c$.

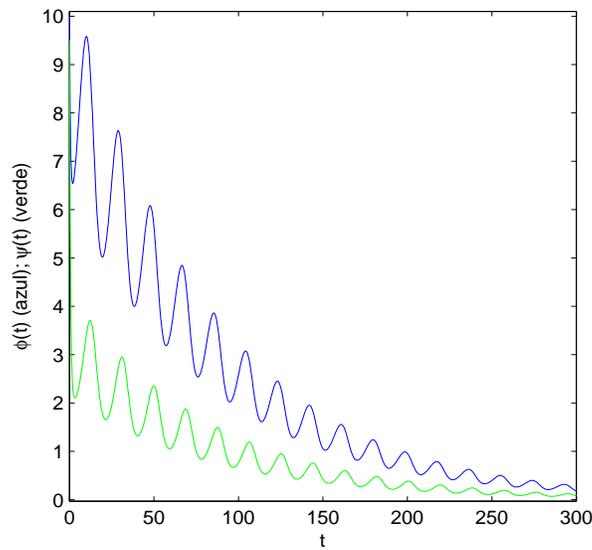
Del análisis anterior, se puede concluir que, para este caso, el coeficiente de difusión dependiente del tiempo, no sólo preserva la estabilidad sino que presenta un comportamiento que favorece esta estabilidad. Esto es así, siempre y cuando varíe de forma pequeña en el sentido descrito a lo largo de esta sección.

En [7], los autores presentan algunos gráficos donde exponen sus resultados. La fuente de datos que usan están dados por un artículo publicado por Wroblewski y O'Brien (1976). Las figuras 3.1(a) y 3.1(b), muestran el comportamiento tanto de ϕ , como de ψ con condiciones iniciales $\phi(0) = 10$ y $\psi(0) = 9.5$.

El estudio de formación de patrones vía el modelo de Turing con dependencia temporal en los coeficientes de difusión, es un problema de mucha mayor complejidad que aquellos donde éstos son constantes. Como muestra de esto debo mencionar, el análisis realizado por Sherrat [9], el cual es sumamente interesante. El autor toma en cuenta un coeficiente de difusión dependiente del tiempo periódico cuya forma es una función escalón. En este caso, el



(a) $q_{11} = 0.0507$, $q_{12} = -0.1470$, $q_{21} = 0.1042$, $\nu = -0.3020$,
 $(k^2 D_p)_c = 0.02599$ (calculado a partir de (1.27)) para
 $\alpha = \alpha_c = 5.963 > 4.5 = \beta$ y $\omega = 1/3$.



(b) $q_{11} = 0.3914$, $q_{12} = -1.0990$, $q_{21} = 0.7334$, $\nu = -2.0594$,
 $(k^2 D_p)_c = 0.1825$ (calculado a partir de (1.27)) para
 $\alpha = \alpha_c = 5.262 > 2 = \beta$ y $\omega = 1/3$.

Figura 3.1: Así cambian las partes temporales de la densidades de población en el modelo (3.1).

equivalente a la matriz \mathbf{A} que aparece en el sistema (3.5), toma la forma

$$\mathbf{A}^\pm(k, t) = \begin{pmatrix} a_{11} - k^2 D_p & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - k^2 D_p^\pm \end{pmatrix},$$

donde

$$\dot{\mathbf{w}} = \begin{cases} \mathbf{A}^+ \mathbf{w} & \text{si } nT < t < (n + \frac{1}{2})T \\ \mathbf{A}^- \mathbf{w} & \text{si } (n + \frac{1}{2})T < t < (n + 1)T. \end{cases}$$

Para analizar este sistema, se construye una matriz fundamental para ambos intervalos y tal que satisfaga la condición de continuidad, enseguida se usa la herramienta dada por la Teoría de Floquet. Una de sus conclusiones es que, como un problema matemático la investigación en la formación de patrones es considerablemente más compleja para razones de dispersión oscilatorias que para aquellas que son constantes. En un contexto más general, oscilaciones en los coeficientes de difusión pueden inducir la formación de patrones sólo en algunos casos, por ejemplo tomando la cinética propuesta por Levin y Segel y un coeficiente de difusión tipo diente cuadrado, las soluciones numéricas sugieren que para valores de los parámetros cercanos al punto de bifurcación de Turing, las soluciones convergen rápidamente a una solución que es aproximadamente de forma constante cuyas amplitudes varían periódicamente con periodo $T = 20$. Los parámetros que usa el autor en sus simulaciones, son: $\kappa = 0.5$, $c = 0.75$, $D^+ = 0.09$ y $D^- = 0.15$.

3.4. La maquinaria de Turing dependiente del tiempo

En la sección anterior se tocaron las principales características de los sistemas con los que se trabajó en este capítulo. Sin embargo, es necesario hacer algunas aclaraciones. Dada una condición inicial, las soluciones de un sistema no autónomo son únicas. Este tópico es claro a partir del Teorema de existencia y unicidad (véase [52]). Esto no garantiza la estabilidad de las soluciones pero sí su existencia y su unicidad.

Para sistemas que surgen por medio de un modelo de Turing, las condiciones que estos imponen deben satisfacerse. Es por esto que para todo

tiempo $t \in \mathbb{R}$ la traza de la matriz asociada tiene que ser negativa con determinante estrictamente positivo (las primeras dos condiciones de Turing). Para las ecuaciones de reacción-difusión que se utilizan en esta tesis, se toma en cuenta que el resto de las condiciones que se deducen en la Sección 1.4, ofrecen una cota sobre el coeficiente de difusión para cada tiempo.

Es posible decir más sobre este tipo de sistemas cuando la matriz asociada $\mathbf{A}(k, t)$ es periódica. En la sección 3.2, prácticamente se analizan todos los posibles casos en los cuales puede existir soluciones estables, periódicas o inestables. Como ya se ha dicho, se satisface la relación

$$r = \mu_1 \mu_2 = \exp \left(\int_0^T \text{Tr}(\mathbf{A}(k, \tau)) d\tau \right).$$

Por tanto, se observan algunos aspectos de la $\text{Tr}(\mathbf{A}(k, t))$. Si la $\text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) < 0$ entonces es posible obtener los resultados dados en la sección 3.2; de igual manera, si $\text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) > 0$ puesto que implica que el producto de los multiplicadores de Floquet es mayor que la unidad, por tanto el análisis es similar.

Por otro lado, falta observar las situaciones que genera la condición $\text{Tr}(\mathbf{A}(k, t)) = 0$. En primera instancia se tiene que $r = 1$, esto indica que el polinomio característico asociado a \mathbf{C} es

$$\det(\mathbf{C} - \mu \mathbf{I}) = \mu^2 - q\mu + 1 = 0,$$

donde

$$q = \mu_1 + \frac{1}{\mu_1}.$$

En aquél, se consideran tres casos nuevamente:

1. $|q| > 2$. Si $q > 2$, entonces se observa el caso uno de la página 72. La única excepción que hay que considerar es $q = -2$, para ello se tiene $\mu_1 = -1$ y por tanto $\mu_2 = -1$, esto implica que $\rho = i\omega/2 \in i\mathbb{R}$ para ambos multiplicadores. Es decir, las soluciones del sistema son de periodo $2T$ consecuencia del Teorema B.2.
2. $|q| = 2$. Si $q = 2$ entonces $\rho = 1$ dando a lugar una solución estable; si $q = -2$ se repite el caso del inciso anterior.

3. $|q| < 2$. Claramente $\mu_1, \mu_2 \in i\mathbb{R}$, por tanto se exhiben soluciones estables.

Una vez terminado con el análisis del modelo de Turing con coeficientes de difusión que dependen del tiempo y observado que es posible obtener condiciones sobre los parámetros para la no destrucción de la formación de patrones y considerado que, en algunos casos, muestran una mayor estabilidad respecto aquellos cuya razón de difusión es constante, se puede concluir el capítulo presente, para dar pie al siguiente en el que estoy interesado en incluir en los modelos el transporte neto que se imprime debido a factores advectivos. Esto tiene sentido, por ejemplo en un sistema donde el efecto que pueda tener alguna brisa ligera en la superficie donde ambas poblaciones (fito y zoo) se encuentren presentes.

En el siguiente capítulo se analizará la presencia de términos que modelan este tipo de efectos en el modelo de Turing.

Capítulo 4

Emergencia de patrones en S-R-D-A

4.1. Introducción

Como ya se ha dicho en este trabajo, determinar los mecanismos que hacen posible la emergencia de patrones en los más variados sistemas, es un problema central en la ciencia actual. En los capítulos anteriores, se han estudiado la forma cómo intervienen procesos físicos como reacción de sustancias, difusión de éstas y, en el capítulo inmediato anterior, se consideró el papel que tiene un proceso difusivo dependiente del tiempo en particular, periódico con respecto a esta variable.

En el capítulo que se está iniciando, interesa incorporar un proceso que juega un papel muy importante en la ocurrencia de distintos fenómenos. Esto es, la advección, proceso que, aunado a la reacción y a la difusión dará lugar a sistemas de ecuaciones que, genéricamente se denominan de tipo reacción-difusión-advección (S-R-D-A). Para ello, primero se presentará una colección de ejemplos donde la participación de este proceso es ponderante.

En las secciones subsecuentes, plantearé la importancia que éstos producen en el modelo de Turing y analizaré el tipo de condiciones que imponen sobre los parámetros en el modelo de Levin y Segel para el surgimiento de patrones de Turing. Al final se expondrá un ejemplo un tanto más elaborado en el que, aunque los tres procesos (reacción, difusión y advección) inducen la emergencia de patrones, éstos no son de Turing.

4.2. Advección y algunas de sus manifestaciones

Para los meteorólogos, la *advección* es el transporte de alguna propiedad atmosférica, como calor, vorticidad o humedad. Este transporte se realiza por medio de movimiento horizontal de una masa de aire. También se considera como el movimiento de agua, el ejemplo inmediato es una corriente marítima. Dicho de una forma más general, la advección es el transporte de alguna cantidad física¹ de una región a otra. La determinación de ésta, en mapas de clima (regiones donde la temperatura es mayor respecto a otras) depende de dos factores principales:

- la intensidad del viento y,
- el ángulo formado por la líneas de corriente del viento, relativo a las líneas donde el valor de la cantidad que está siendo transportada tiene el mismo valor (isolíneas).

Naturalmente, estos factores implican que cuando el aire se mueve perpendicularmente respecto a las isoterma, ocurre una advección con una gran intensidad. Y si éste se mueve paralelamente, se dice que no hay advección. La razón es clara porque no hay transporte de calor en el sentido de la dirección de las isoterma.

Por otro lado, para la mayoría de los físicos tiene sentido hablar de convección en lugar de advección. Aunque en su uso se manejan como sinónimos, la convección se refiere al transporte de energía calorífica entre un cuerpo y otro, cuando existe una diferencia de temperatura entre ellos. Si se piensa en un cuerpo sólido y un fluido existe un movimiento significativo del fluido alrededor del sólido, de esta manera la convección no puede ser ignorada; esto puede verse de la siguiente manera: la temperatura de un sólido debida a un campo externo como un fluido boyante puede producir un movimiento en el fluido. Comúnmente a este fenómeno se le conoce como *convección natural* y depende en gran medida, de la diferencia de temperaturas entre el sólido y el fluido.

¹Materia o energía

4.2.1. Leyes de conservación

En física, una *ley de conservación* es la que establece que alguna propiedad medible de un sistema físico aislado, no cambia mientras el sistema evoluciona. Cada ley de conservación tiene una representación matemática correspondiente a un sistema físico.

Como ya se mencionó en la sección anterior, la advección indica transporte; esto puede interpretarse como la evolución de un sistema al transportarse de una región a otra. Por tanto, no es de extrañarse que en muchos sistemas físicos donde se satisface alguna ley de conservación, aparecen términos advectivos.

El *Teorema de transporte de Reynolds* es la expresión matemática de las leyes de conservación en mecánica de fluidos. Este es su enunciado:

Teorema 4.1 (Teorema de transporte de Reynolds, [60]). *La razón de cambio de cualquier cantidad extensiva² N de un determinado sistema en una región $V(t)$ es igual a la razón de cambio de N dentro del volumen de control³ V y sobre la superficie, $S = \partial V$, de este mismo volumen, es decir:*

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \iiint_{V(t)} N dV = \iiint_V \frac{\partial N}{\partial t} dV + \iint_S N \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS,$$

donde \mathbf{u} es el vector de velocidad de transporte.

Las leyes de *conservación de la masa y conservación de la energía*, por ejemplo, tienen su representación matemática usando el teorema 4.1. Considérese un volumen fijo, V , se tiene que el lado izquierdo es cero y usando el Teorema de la divergencia en el segundo término del lado derecho se obtiene la misma ecuación deducida en el Apéndice A, esto dado que V es arbitrario.

A continuación se verán algunos ejemplos.

4.2.2. Algunos ejemplos

El modelo más sencillo que representa transporte de alguna cantidad, es aquél en el que el medio es unidimensional y la velocidad de transporte es constante. Por ejemplo: se tiene una densidad de coches $\rho = \rho(x, t)$ en la

²Cantidad física proporcional al tamaño del sistema en estudio. Puede ser expresada como la suma de cantidades por separado para subsistemas que conforman el sistema original. Por ejemplo: masa, volumen, momento, energía, etc.

³El volumen de control V es fijo y coincide con $V(t)$ para cada tiempo t .

posición x al tiempo t . Si se considera que ésta se conserva y que la rapidez de movimiento es c , se obtiene que ρ satisface la ecuación

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + c \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0.$$

La solución de esta ecuación está dada por una función, ρ , que sea de clase C^1 y que se expresa así: $\rho(x, t) = f(x - ct)$. Esta solución se interpreta como una distribución que viaja en el sentido positivo de las abscisas preservando su forma.

Otro ejemplo se da en el estudio de líneas de transmisión para el transporte de información. Denotando por x la distancia a lo largo de la línea de transmisión a partir de un punto fijo sobre ella y t el tiempo. Se supone que las propiedades eléctricas son conocidas y sólo dependen de la posición, entonces la capacitancia, C , por unidad de longitud es denotada por $C = C(x)$, $L = L(x)$ es la inductancia por unidad de longitud, $R = R(x)$ la resistencia también por unidad de longitud y $G = G(x)$ la conductancia por unidad de longitud. Ahora, sea $I = I(x, t)$ la corriente eléctrica y $V = V(x, t)$ el potencial eléctrico en la posición x al tiempo t . Usando las leyes de conservación⁴, se llega que L , I , V , R y C satisfacen el siguiente sistema:

$$L \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial x} + RI = 0$$

$$C \frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\partial I}{\partial x} + GV = 0.$$

Un ejemplo donde es posible obtener transporte de propiedades físicas en un sistema, es aquél donde se considera un fluido compresible no viscoso. Su poniendo que el medio es bidimensional, las *ecuaciones de movimiento de Euler* describen completamente al fluido en cuestión. La deducción de éstas se basa principalmente en el Teorema 4.1. Ésta es posible encontrarla en cualquier libro de mecánica de fluidos, de medios continuos o bien en [59].

Si se piensa que $\mathbf{w}(x, y, t) = (u(x, y, t), v(x, y, t))^T$ es la velocidad del fluido al tiempo t en el punto (x, y) , $\rho(x, y, t)$ y $p(x, y, t)$ denotan la densidad y presión del mismo, respectivamente, entonces el sistema de ecuaciones que describe el comportamiento del fluido es

$$\rho \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \rho (\mathbf{w} \cdot \nabla) \mathbf{w} + \nabla p = 0,$$

⁴Conservación de la carga y conservación de la energía por medio de la ecuación (A.2).

conocida como conservación del momento; mientras que la ley de conservación de la masa, es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{w}) = 0,$$

por último, la conservación de la energía:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho}{p^\gamma} \right) + (\mathbf{w} \cdot \nabla) \left(\frac{\rho}{p^\gamma} \right) = 0,$$

donde $\gamma > 1$ es la constante del cociente de los calores específicos.

La primera ecuación describe la transferencia del momento es decir, describe el comportamiento macroscópico que induce la transferencia de momento entre cada partícula del fluido. Por otro lado, la ecuación correspondiente a la conservación de la masa es consecuencia inmediata de la ecuación de continuidad (A.2). Por tanto, se interpreta como la ecuación que modela la evolución espacio-temporal de la masa del fluido y la tercera ecuación está relacionada con el transporte de energía.

Con el marco teórico anterior, se pretende analizar un gas no viscoso e *isentrópico* es decir, uno en el cual su entropía permanece constante⁵ mientras que se lleva a cabo un proceso que requiere la realización de algún trabajo. Observando que la rapidez local del sonido $c = c(\rho)$ dependerá de la densidad del gas y considerando una sola dimensión, las leyes de conservación recién escritas, toman la forma siguiente

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{c^2}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} + \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

Por el contrario, si se toma un gas cuya entropía no es constante, se debe agregar al sistema una ecuación correspondiente a la energía del sistema. En este caso, la presión del gas juega un papel importante y satisface la ecuación

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + c^2 \rho \frac{\partial u}{\partial x} = 0.$$

⁵Aunque se tenga un proceso isentrópico, éste puede ser reversible o irreversible. Esto se traduce en que es adiabático o no, respectivamente. La consecuencia de esto es la segunda ley de la termodinámica, a partir de la cual se escribe: $\delta Q \leq T dS$, donde δQ es la cantidad de energía obtenida por calentamiento, T la temperatura y dS el diferencial de entropía.

En la siguiente sección se expondrán algunos ejemplos cuyo contexto es ecológico y no sólo la advección modela alguna situación sino que la difusión también interviene.

4.3. Algunos modelos ecológicos

En el primer capítulo se presentó un mecanismo subyacente a los procesos de dispersión en biología: la difusión. Éste proceso se presenta en las más variadas escalas espaciales desde a nivel microscópico como a nivel de la escala humana. En la literatura está muy documentado⁶ que el movimiento de individuos se debe a los más variados factores, uno de éstos es en respuesta a hacinamiento. En este caso, en vez que el coeficiente de difusión sea constante, depende de la densidad poblacional local. Por ejemplo, la invasión de plantas, mamíferos, insectos y aves en distintas maneras. De igual manera, se mencionó que una extensión al modelo con difusión constante en la dispersión de una población, por ejemplo insectos, es cuando el coeficiente de difusión depende de la densidad de la población; dicho de otra manera, cuando el flujo depende de ésta. Situación que puede deberse al incremento de la difusión por la presión de la propia población.

Si $n = n(x, t)$ denota la densidad de una población de insectos en el punto x al tiempo t y se considera que éstos, a bajas densidades de población, tienden a agregarse, entonces un flujo unidimensional que puede modelar esta situación es

$$\mathbf{J} = vn - D(n) \frac{\partial n}{\partial x},$$

donde D es una función monótona creciente y v es la rapidez de transporte. Si se considera que un punto (el origen) es un centro de atracción para esta población y la rapidez de atracción es constante, es posible tomar $v = -v_0 \text{sgn}(x)$, donde $\text{sgn}(\cdot)$ es la función signo definida así

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x = 0 \\ -1 & \text{si } x < 0 \end{cases} .$$

⁶En la Sección 1.3.2 ya se mencionaron algunos de estos mecanismos. Se recomienda la lectura de [49, 50].

Usando (A.2) se obtiene la siguiente ecuación

$$\frac{\partial n}{\partial t} = v_0 \frac{\partial}{\partial x} (\text{sgn}(x)) + D_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(\frac{n}{n_0} \right)^m \frac{\partial n}{\partial x} \right),$$

donde el término difusivo es dependiente de la densidad cuya forma es

$$D(n) = D_0 \left(\frac{n}{n_0} \right)^m,$$

con D_0 , n_0 , m constantes positivas. Si $v_0 = 0$ se obtiene la ecuación (A.15); ésta tiene una solución exacta (véase [48]). Si $v_0 \neq 0$ la solución de ésta no es sencillo de obtener. Sin embargo, es posible conocer el comportamiento de la solución en algunas partes del dominio. Okubo y Chiang han observado distribuciones para algún tipo especial de enjambre de mosquito cuyo movimiento puede ser descrito adecuadamente por un difusión dependiente de la densidad como el anterior con $m = 1/2$.

Desde el punto de vista de la modelación matemática, el enfoque de caminatas aleatorias para la deducción de ecuaciones que describan algún tipo de dispersión es muy conveniente. En efecto, la incorporación de diversos factores físicos o biológicos que determinan el movimiento de los individuos de un sitio a otro, puede ser tomado en cuenta en la probabilidad de movimiento como puede verse con detalle en el Apéndice A.

A continuación, se analizará un sistema de ecuaciones S-R-D-A y se darán las condiciones para las cuales es posible obtener patrones de Turing.

4.4. Patrones de Turing en S-R-D-A

A juzgar por la literatura consultada, los estudios analíticos para dar condiciones bajo las cuales un sistema de ecuaciones son términos de reacción, difusión y advección sea capaz de generar patrones espaciales ordenados, son recientes. Uno de ellos es el realizado por Perumpanani *et. al* [12]. En éste, sus autores estudian de forma general un sistema de S-R-D-A con dos morfógenos en una dimensión, en el que los coeficientes de difusión son constantes y el vector de advección también. Se denotan las densidades densidades⁷ como

⁷En este capítulo cambiaré la notación con el fin de no recargarla demasiado y evitar confusión con la similitud entre p y P .

$u(x, t)$ y $v(x, t)$ respectivamente, es decir a partir de (A.12) con un vector, $\tilde{v} = (\sigma, \rho)^T$, de advección, constante.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma \frac{\partial u}{\partial x} + \gamma f(u, v), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} + \gamma g(u, v),$$

para $0 < x < 1$ y $t > 0$. Los términos de advección se expresan en términos del producto interior de \tilde{v} y el gradiente ∇u y ∇v , por lo cual el ángulo entre estos vectores determina la dirección del movimiento. En efecto, si este producto es positivo o negativo si el ángulo es mayor o menor que $\pi/2$, respectivamente. Por esta razón, sin pérdida de generalidad, se considera que los signos que anteceden a los términos advectivos en (4.1) es positivo. La cinética del sistema la dan las funciones f y g que, en general, son no-lineales. Finalmente γ es el factor de escala dado en [49].

Las condiciones que se toman en cuenta aquí, son periódicas es decir:

$$\begin{aligned} u(0) &= u(1), & u'(0) &= u'(1) \\ v(0) &= v(1), & v'(0) &= v'(1). \end{aligned} \quad (4.2)$$

En esta sección se está interesado en establecer las condiciones suficientes para asegurar que se dé la bifurcación de Turing. Este análisis es el análogo al realizado en la Sección 1.4, excepto que aquí se tiene, además, el término advectivo.

Suponiendo que la parte reactiva del sistema 4.1 tiene un punto de equilibrio en el primer cuadrante $(u_0, v_0)^T$. También se supondrá que éste es hiperbólico asintóticamente estable localmente, por lo que las desigualdades (1.5) y (1.6) se cumplen. Éstas, como ya se ha visto, imponen condiciones sobre los parámetros. De igual manera que en la Sección 1.4 se hace una aproximación lineal del sistema (4.1) en el punto de equilibrio $(u_0, v_0)^T$. Así, introduciendo la notación

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix},$$

se tiene que la perturbación, \mathbf{w} , del equilibrio satisface el sistema lineal que por abreviar escritura se representa en forma vectorial

$$(4.3) \quad \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{D} \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x^2} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x} + \gamma \mathbf{J} \mathbf{w},$$

donde $d = D_u/D_v$ y \mathbf{J} es la matriz de Jacobi asociada a la parte reactiva evaluada en el punto de equilibrio $(u_0, v_0)^T$.

Se buscan soluciones del sistema (4.3) de la forma

$$(4.4) \quad \mathbf{w}(x, t) = \mathbf{w}_0^T e^{\lambda t} \tilde{\mathbf{w}}(x),$$

donde \mathbf{w}_0^T es un vector renglón cuyas componentes corresponden son constantes. Debido a que se toman condiciones a la frontera periódicas, es admisible que para la parte espacial, se busquen soluciones de la forma

$$(4.5) \quad \tilde{\mathbf{w}}(x) = \mathbf{c}_1 e^{ikx} + \mathbf{c}_2 e^{-ikx},$$

donde los vectores constantes \mathbf{c}_1 y \mathbf{c}_2 son desconocidos.

Sustituyendo (4.4) en (4.3), se obtiene que \mathbf{w}_0 ha de satisfacer el sistema algebraico

$$(4.6) \quad (\lambda \mathbf{I} - \gamma \mathbf{J} - \mathbf{A}ik + \mathbf{D}k^2) \mathbf{w}_0 = \mathbf{0},$$

el cual tiene solución diferente de la trivial, siempre que, la relación de dispersión satisfaga,

$$\det(\lambda \mathbf{I} - \gamma \mathbf{J} - \mathbf{A}ik + \mathbf{D}k^2) = 0,$$

la cual, escrita explícitamente es

$$(4.7) \quad \begin{aligned} & \lambda^2 + (k^2(1+d) - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}) - ikp) \lambda + \\ & + dk^4 - k^2 \left(\gamma \left(\frac{\partial g}{\partial v} + d \frac{\partial f}{\partial u} \right) + \frac{1}{2} (p^2 - q^2) \right) + \gamma^2 \det(\mathbf{J}) - \\ & - \frac{ik^3}{2} (p(d+1) + q(d-1)) + \frac{ik}{2} \gamma \left((p+q) \frac{\partial g}{\partial v} + (p-q) \frac{\partial f}{\partial u} \right), \end{aligned}$$

donde $p = \sigma + \rho$ y $q = \sigma - \rho$.

Con el fin de simplificar la escritura, se definen los parámetros α_i y β_i con $i = 1, 2$ como

$$\alpha_1 = k^2(1 + d) - \gamma \text{Tr}(\mathbf{J}), \quad \beta_1 = -kp,$$

$$\alpha_2 = dk^4 - k^2 \left(\gamma \left(\frac{\partial g}{\partial v} + d \frac{\partial f}{\partial u} \right) + \frac{1}{2} (p^2 - q^2) \right) + \gamma^2 \det(\mathbf{J}),$$

y

$$\beta_2 = -\frac{k^3}{2} (p(d+1) + q(d-1)) + \frac{k}{2} \gamma \left((p+q) \frac{\partial g}{\partial v} + (p-q) \frac{\partial f}{\partial u} \right);$$

y entonces las raíces de (4.7) están dadas por la expresión

$$(4.8) \quad \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-(\alpha_1 + i\beta_1) \pm \sqrt{(\alpha_1 + i\beta_1)^2 - 4(\alpha_2 + i\beta_2)} \right).$$

Con el fin de poder escribir explícitamente la parte real e imaginaria de λ de manera que se facilite el análisis, se hacen algunos cálculos en el sub-radical de la raíz que aquí aparece. Después de éstos se llega a que puede escribirse como

$$\sqrt{2r} \exp \left(\frac{i\varphi}{2} \right) = \sqrt{2} \sqrt{(\alpha_1^2 - \beta_1^2 - 4\alpha_2)^2 + (2\alpha_1\beta_1 - 4\beta_2)^2} \left(\cos \frac{\varphi}{2} + i \sin \frac{\varphi}{2} \right),$$

donde

$$\xi = \tan \varphi = \frac{2\alpha_1\beta_1 - 4\beta_2}{\alpha_1^2 - \beta_1^2 - 4\alpha_2}.$$

Usando las fórmulas para calcular el coseno de $\varphi/2$, se obtiene

$$\cos^2 \frac{\varphi}{2} = \frac{1 + \cos \varphi}{2} = \frac{1 + \sec \varphi}{2 \sec \varphi} = \frac{1 + \sqrt{1 + \xi^2}}{2\sqrt{1 + \xi^2}} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{1 + \xi^2}},$$

análogamente para $\sin^2 \varphi/2$ y con ayuda de todas ellas, se llega que la parte real de λ , es

$$(4.9) \quad \Re(\lambda) = \frac{1}{2} \left(-\alpha_1 + \sqrt{r} \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \xi^2}}} \right);$$

mientras que la parte imaginaria de λ , toma la forma

$$(4.10) \quad \Im(\lambda) = \frac{1}{2} \left(-\beta_1 + \sqrt{r} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \xi^2}}} \right).$$

Las desigualdades (1.5) y (1.6) garantizan que $\Re(\lambda(k=0)) < 0$, esto es, en ausencia de difusión y advección, el sistema será linealmente estable. Se pide como condición de inestabilidad de Turing que para pequeñas perturbaciones del punto de equilibrio, con difusión presente que exista al menos para un número de onda $k > 0$, para el que $\Re(\lambda(k)) > 0$. De esta manera, la bifurcación de Turing surgirá cuando ocurra que $\Re(\lambda) = 0$ lo que, para la ecuación (4.9), conduce a

$$(4.11) \quad \begin{aligned} \tilde{R}(d, q; k) = & k^6 (k^2 - \gamma f_u) d^3 + \\ & + k^4 (2k^4 + \gamma^2 (2f_u^2 - f_v g_u + 3f_u g_v) - \gamma k^2 (4f_u + 3g_v)) d^2 + \\ & + k^2 (k^6 + \gamma^3 (2f_u f_v g_u + 2f_v g_u g_v - 4f_u^2 g_v - 3f_u g_v^2 - f_u^3) + \\ & + \gamma^2 k^2 (3f_u^2 - 2f_v g_u + 8f_u g_v + 3g_v^2) - \gamma k^4 (3f_u + 4g_v + f_u q^2) + k^4 q^2) d + \\ & + \gamma^4 Tr^2(\mathbf{J}) \det \mathbf{J} + \gamma^3 k^2 Tr(\mathbf{J}) (2f_v g_u - 3f_u g_v - g_v^2) + \\ & + \gamma^2 k^4 (\det \mathbf{J} + 2g_v Tr(\mathbf{J})) - \gamma g_v k^6 - q^2 k^2 \gamma g_v (k^2 - \gamma f_u) = 0, \end{aligned}$$

donde se usa la notación compacta: las letras que aparecen como subíndice denotan las derivadas parciales. Nótese que en esta expresión, diferentes potencias del parámetro γ aparece como factor en cada uno de los sumandos, esto indica que habrá una dependencia importante de la escala, en las correspondientes condiciones de Turing. Así, éste influye en los números de onda que son admisibles para que surja la inestabilidad debida a la difusión. Para valores muy pequeños de γ (véase [49]) no es posible encontrar números de onda adecuados; por tanto, es necesario considerar valores suficientemente grandes para que éstos aparezcan.

Si $q \neq 0$, es posible resolver la ecuación (4.11) para q , dando a lugar a una expresión de la forma $q^2 = \tilde{Q}(d; k)$, donde $\tilde{Q}(d; k)$ resulta de despejar q^2 . Si se toman valores tales que $q^2 < \tilde{Q}(d; k)$, entonces se tendría que, a partir de (4.11), $\Re(\lambda) < 0$ y así, la estabilidad. En caso contrario, habrá inestabilidad, lo cual da lugar a una bifurcación que será llamada *bifurcación de Turing con advección*. A diferencia del caso cuando no hay advección, el equivalente a las

condiciones (1.11) y (1.14) se tiene

$$(4.12) \quad q^2 > \tilde{Q}(d; k),$$

para cualquier número de onda k admisible. Éstos, están dados por las

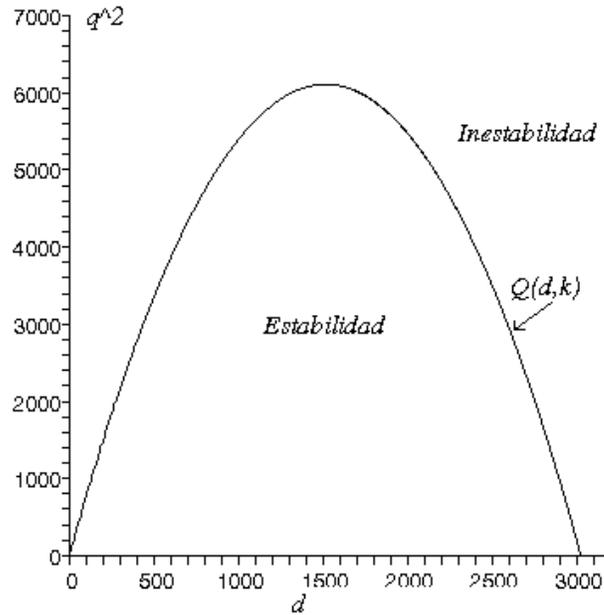


Figura 4.1: Bifurcación de Turing con advección. $\kappa = 1/2$ y $c = 2$ con $\gamma = 475$ y $k = 4\pi$ con la cinética 4.13.

condiciones de frontera (4.2), de las cuales se deduce que $k = 2\pi n$ con $n \in \mathbb{Z}$.

Utilizando la cinética de Levin y Segel,

$$(4.13) \quad f(u, v) = u + \kappa u^2 - cuv$$

$$g(u, v) = -v^2 + uv,$$

la figura 4.1 muestra esquemáticamente la condición (4.12) con advección al variar el parámetro d .

Recordado la condición (1.5) tenemos que dos opciones son posibles: los valores de f_u y g_v son ambos negativos o bien, tienen signo contrarios. Si la

primera situación ocurre, se tiene que \tilde{Q} satisface la desigualdad $\tilde{Q}(d; k) < 0 \forall d, k^2 > 0$. Entonces es posible elegir, sin pérdida de generalidad, $f_u > 0$.

Si se eligen números de onda (admisibles) tales que $k^2 > \gamma f_u$, entonces se vuelve a tener que $\tilde{Q}(d; k) < 0 \forall d > 0$. De esta forma, los números de onda que inducen inestabilidad tienen que satisfacer una cuarta condición: $k^2 < \gamma f_u$. Obsérvese una vez más que, el factor de escala juega un papel importante. Ésta es: si el valor de γ es suficientemente pequeño para que no existan números de onda admisibles, entonces no habrá emergencia de patrones en presencia de advección. Es decir, γ tiene que ser tal que el producto γf_u sea suficientemente grande como para poder encontrar, al menos, un número de onda admisible.

Como se muestra en la Sección 1.4, la figura 1.10 indica la presencia de un valor crítico, d_c , para el cual ocurre la bifurcación de Turing. Si $d < d_c$, el sistema es linealmente estable ante pequeñas perturbaciones. En presencia de advección, la correspondiente bifurcación ocurre cuando q^2 crece respecto a $\tilde{Q}(d; k)$. La derivada parcial $\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d}$ evaluada en $d = 0$, tiene la forma

$$\frac{\partial \tilde{Q}(0)}{\partial d} = \frac{\gamma \text{Tr}(\mathbf{J}) - k^2}{g_v(k^2 - \gamma f_u)} ((k^2 - \gamma f_u)(2g_v^2 + f_v g_u) + \gamma f_v g_u g_v);$$

donde $\text{Tr} \mathbf{J} < 0$, mientras que $f_v g_u g_v > 0$. Por lo tanto, el signo de esta derivada parcial, depende del correspondiente de $2g_v^2 + f_v g_u$. Se observan dos casos:

1. $2g_v^2 + f_v g_u < 0$, lo cual implica que

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d}(0; k) > 0 \forall k > 0.$$

2. $2g_v^2 + f_v g_u > 0$. Aquí se tienen dos subcasos: entonces

- a) Si k satisface

$$k^2 < \gamma f_u - \frac{\gamma f_v g_u g_v}{2g_v^2 + f_v g_u} < \gamma f_u,$$

entonces

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d}(0; k) > 0$$

- b) Si k satisface

$$\gamma f_u > k^2 > \gamma f_u - \frac{\gamma f_v g_u g_v}{2g_v^2 + f_v g_u},$$

entonces

$$\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d}(0; k) < 0,$$

esta última condición indica que, dentro de los valores admisibles para los números de onda, si éstos son pequeños, la derivada evaluada en $(0; k)$ es negativa; mientras que ésta es positiva, si son grandes.

Para un valor positivo de la derivada $\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d}$, implica que para $q^2 > \tilde{Q}(0; k)$ fijos, al variar continuamente d se obtendrá inestabilidad ante perturbaciones para números de onda pequeños y grandes. Esto quiere decir que, en presencia de advección, existen dos bifurcaciones correspondientes a dos valores de d : $d = d_1$ y $d = d_2$ para una diferencia de coeficientes advectivos $q = \sigma - \rho$ fija. Véase la figura 4.2.

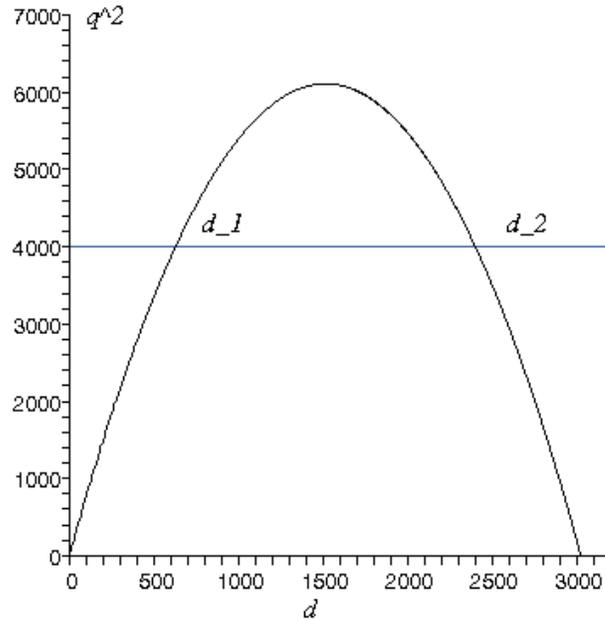


Figura 4.2: Doble bifurcación de Turing al variar d continuamente en presencia de advección. La línea azul representa la condición $q^2 > \tilde{Q}(0; k)$.

El máximo de $\tilde{Q}(d; k)$ para el cual pueden elegirse valores de $q^2 > \tilde{Q}(0; k)$ donde no existan estas dos bifurcaciones, se calcula a partir de la raíz positiva de la ecuación cuadrática en d que se obtiene de la igualdad: $\frac{\partial \tilde{Q}}{\partial d} = 0$.

En la Sección 1.4 no se enfatizó la importancia del parámetro γ debido a que no aparece en las condiciones de Turing. Sin embargo, al hacer el análisis se encuentra que, tanto (1.10) como (1.17), se modifican ligeramente como puede verse en el mismo apéndice.

4.4.1. Selección de modos iniciales.

Cuando los coeficientes de advección son iguales o bien son nulos: $q = 0$; es decir, cuando la curva dada en la figura 4.1 interseca el eje horizontal, entonces la bifurcación de Turing se dará cuando los números de onda admisibles satisfacen la ecuación

$$(4.14) \quad h(k^2) = dk^4 - \gamma \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right) k^2 + \gamma^2 \det(\mathbf{J}) = 0;$$

y así, el modo inicial está dado por (véase (1.10) y (1.17))

$$k_c^2 = \gamma \frac{1}{2d} \left(d \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \right).$$

La figura 4.3 muestra distintas curvas descritas por (4.14) para distintos valores del parámetro γ . Nótese que estas curvas son para el caso particular donde se considera la cinética (4.13). Obsérvese que, aunque la forma es similar para cada una de ellas, la gráfica se va ensanchando y recorriendo hacia la derecha respecto al eje de los modos conforme γ aumenta.

Si se observa detenidamente la figura 4.1, existe una intersección con el eje vertical, ésta se da cuando $d = 0$. Este hecho, puede interpretarse pensando que la densidad de población de la presa (activador) no se difunde⁸ o bien cuando el depredador (inhibidor) tiene un coeficiente de difusión infinito respecto a la presa. En ausencia de advección, se mostró que era indispensable que el coeficiente de difusión del depredador fuese mayor que el de la presa (véase el Capítulo 1), sin embargo la ecuación (4.11) indica que aunque $d = 0$, puede ocurrir una bifurcación de Turing. Esto es

$$(4.15) \quad \begin{aligned} \tilde{R}(0, q; k) &= \gamma^4 Tr^2(\mathbf{J}) \det \mathbf{J} + \gamma^3 k^2 Tr(\mathbf{J}) (2f_v g_u - 3f_u g_v - g_v^2) + \\ &+ \gamma^2 k^4 (\det \mathbf{J} + 2g_v Tr(\mathbf{J})) - \gamma g_v k^6 - q^2 k^2 \gamma g_v (k^2 - \gamma f_u) = 0. \end{aligned}$$

⁸Considerando el modelo de Levin y Segel nuevamente.

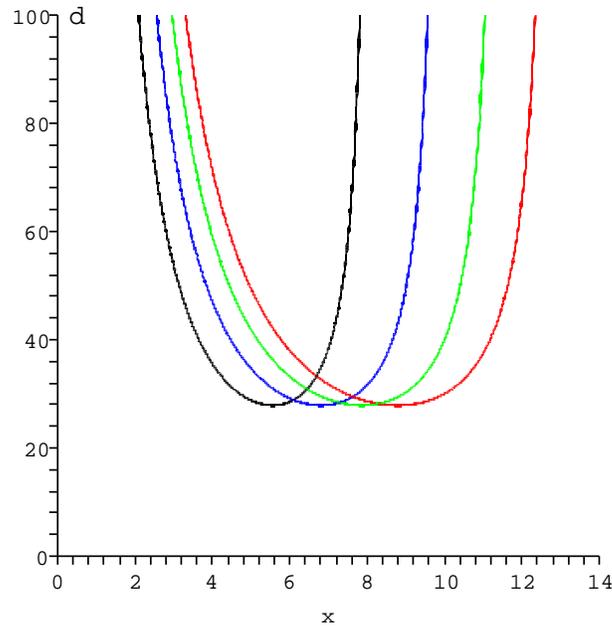


Figura 4.3: Sistema (4.1) con la cinética (4.13); se considera ausencia de advección o coeficientes advectivos iguales, los valores de los parámetros son los mismos que en la figura 4.1. $\gamma = 200$ en negro, $\gamma = 300$ en azul, $\gamma = 400$ en verde y $\gamma = 500$ en rojo.

La figura 4.4 muestra la selección de modos que describe (4.15) para distintos tamaños del dominio. Conforme γ aumenta, se observa que, en ausencia de difusión, la q mínima para que se dé la bifurcación de Turing, también aumenta; la forma de las curvas siendo similares, sufren una contracción.

4.4.2. Diferencias de fase y términos advectivos

En [12], los autores aseveran que la diferencia de fase y la razón de crecimiento⁹ son independientes del parámetro $p = \sigma + \rho$ y sólo dependen de $q = \sigma - \rho$. Según los cálculos que se hacen en el presente trabajo ((4.8) y (4.9)), éstos no sólo dependen de la diferencia de los coeficientes de advección,

⁹La razón de crecimiento está dada por la parte real de λ : $\Re(\lambda)$.

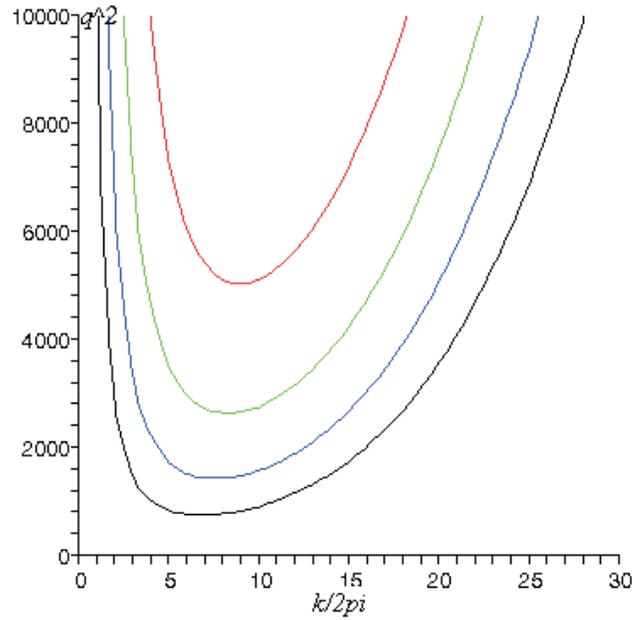


Figura 4.4: Sistema (4.1) con la reacción dada en (1.19) con $d = 0$; los valores de los parámetros son los mismos que en la figura 4.1. $\gamma = 200$ en negro, $\gamma = 250$ en azul, $\gamma = 300$ en verde y $\gamma = 400$ en rojo.

sino que también de la suma. Por otro lado, en la subsección 4.4.1 se analizó la bifurcación de Turing y se vió que efectivamente ésta sí es independiente de p .

El movimiento temporal de las soluciones se ve influido en gran medida por los parámetros p y q , esto es debido a la dependencia de $\Im(\lambda)$. Si, además $\Im(\lambda) \neq 0$ entonces no son estacionarias en el tiempo. La parte imaginaria de la relación de dispersión determina la fase y así, el patrón de los morfógenos se mueve con una rapidez (de fase) uniforme.

Dado que las funciones $u = u(x, t)$ y $v = v(x, t)$ son sinusoidales¹⁰, entonces es posible escribirlas en una forma más adecuada: $u = R_1 \exp(i\theta_1)$ y $v = R_2 \exp(i\theta_2)$ respectivamente. De esta manera, la diferencia de fase está dada por $\phi = \theta_1 - \theta_2$; la cual puede ser calculada a partir de (4.6) por la

¹⁰Véase la forma de las soluciones dadas por (4.4) y (4.5).

expresión

$$\phi = \arctan \frac{\Im(\lambda) - \sigma k}{\Re(\lambda) + k^2 - \gamma f_u}.$$

Nótese que se está usando el sistema linealizado para obtener información del sistema no lineal. Por tanto, los resultados sólo serán válidos en una vecindad de las primeras bifurcaciones ya que en éstas los efectos no lineales son pequeños.

Los patrones inducidos por difusión estarán en fase si $\phi = 0$, esto sucede cuando $\Im(\lambda) - \sigma k = 0$ es decir,

$$\Im(\lambda) - \sigma k = \frac{1}{2} \left(k(\sigma + \rho) + \sqrt{r} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \xi^2}}} \right) - \sigma k = 0$$

o bien

$$\frac{1}{2} \left(-kq + \sqrt{r} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \xi^2}}} \right) = 0,$$

es decir, cuando existen valores críticos de q de la forma

$$q_c = \frac{\sqrt{r}}{k} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \xi^2}}} = \frac{\sqrt{r}}{k} \sin \frac{\varphi}{2},$$

tal que $\theta_1 = \theta_2$, obsérvese (4.10). Una de las características de esta ecuación es que es trascendente puesto que φ depende de α_1 , α_2 , β_1 y de β_2 . Éstos, a su vez, dependen de p y q , como puede observarse en la página 96 cuando se definieron éstos. Además, son distintos para cada modo y son menores conforme k crece.

El máximo en la diferencia de fase ocurre cuando $d = 0$ según sugieren las investigaciones numéricas de Perumpanani *et al.* en [12].

A continuación se presenta un modelo para tres especies donde la la advección juega un pael importante. Se recalca que aunque no presenta patrones de Turing, sí considero es vital para exhibir la importancia de este proceso en al formación de patrones.

4.5. Planta-polinizador-herbívoro

Los polinizadores son conocidos por actuar negativamente ante la variación en la morfología floral. Cuando un herbívoro se alimenta del polen o néctar

producidos por flores de plantas, reduce de forma indirecta la producción de la planta. Esto puede disminuir las propiedades que inducen visitas de polinizadores, lo cual conduce a que la planta no se reproduzca de manera exitosa. En ecología los modelos donde tres poblaciones interactúan son de vital interés, en particular para el presente caso se tiene que ésta es tal que mientras dos de las especies compiten la otra "ayuda" a alguna de ellas en su crecimiento. A continuación se presenta la construcción del modelo donde la difusión y la advección jugarán un papel importante.

Sea $p(x, y, t)$ la densidad de población de la planta al tiempo t en el lugar (x, y) . Primero se supone que ninguno de los individuos de esta población realizará una fecundación sin la intervención de un polinizador y, por el momento, se excluyen otros medios como el viento para que ésta se lleve a cabo.

Resulta natural que la tasa de polinización sea proporcional a la tasa de visitas de la especie polinizadora a las plantas, cuya densidad al tiempo t en la posición (x, y) se denota por $a(x, y, t)$. Por tanto la tasa instantánea de visitas está dada por una respuesta funcional de Holling de tipo II (véase [48]), es decir

$$(4.16) \quad \frac{\alpha p}{1 + \alpha \beta p},$$

donde α se interpreta como la tasa de búsqueda del polinizador y β es la tasa del manejo por cada visita a la planta, es decir: el empleo de recursos que proporciona la planta por parte del polinizador. Cabe señalar que la tasa dada por (4.16) captura un hecho con profundo significado ecológico, a saber: la razón de visitas de polinizadores a plantas está acotada, es decir, no porque haya más plantas el número de visitas de polinizadores se verá incrementado. Así, no se excede el valor dado por $1/\beta$ por más recursos que el polinizador tenga.

Supóngase que las limitaciones por el suministro de óvulos es despreciable; por tanto, si k_1 es el parámetro que determina la eficiencia para el número de óvulos fertilizados por cada visita, la tasa de nacimientos de la planta está dada por

$$\frac{k_1 \alpha a p}{1 + \alpha \beta p}.$$

Si la probabilidad, σ , de encuentros es constante y α es función de la recompensa energética μ obtenida por cada visita, podría considerarse que

$\alpha = \sigma\mu$. Análogamente, la tasa de manejo β es también función de esta recompensa. Sea φ la tasa de extracción de la recompensa energética y piénsese que el tiempo invertido en miembros de la población de plantas que no se encontraban con recursos es nulo es decir, todas las plantas proporcionan recompensa energética, entonces se tiene

$$\frac{k_1\sigma\varphi\mu ap}{1 + \sigma\varphi\mu^2 p}$$

donde $\beta = \varphi\mu$.

Como el herbívoro puede producir una reducción en la tasa de visitas, se toma $g = g(h)$ una función dependiente de la densidad de población de herbívoros; cuya densidad se denota por $h(x, y, t)$ en términos del tiempo t y la posición (x, y) .

La función $g(h)$ debe satisfacer:

1. $g(h) > 0$ y $g'(h) \leq 0 \forall h \geq 0$. Se considera función positiva y decreciente reforzando la hipótesis que para densidades de población del herbívoro grandes la tasa de crecimiento para la planta tienda a cero sin afectar negativamente su crecimiento, es decir, el herbívoro dificultará el crecimiento de la población de plantas sin provocar la extinción de éstas.
2. $g \in C^1[0, \infty)$ tal que $g(0) = 1$. La función tiene que ser "suave" en el sentido que la reducción en la tasa de visitas no sea abrupta y que si $h = 0$, $g(0) = 1$ no haya influencia del herbívoro.

Por lo tanto, la tasa de nacimiento de $p(x, y, t)$ es

$$(4.17) \quad g(h) \frac{k_1\sigma\varphi\mu ap}{1 + \sigma\varphi\mu^2 p}.$$

Considerando que cuando las plantas sean consumidas en su totalidad por los herbívoros, la tasa de mortandad correspondiente se incrementará. Si ϵ es la afectividad de los herbívoros para consumir plantas (efectividad de depredación) y γ es la tasa máxima de mortandad de las plantas, entonces la mortandad de las plantas será gobernada por $\gamma p + \epsilon h$. Supóngase que ϵ también es una respuesta funcional de Holling de tipo II, es decir

$$(4.18) \quad \epsilon = \frac{m_1 p}{s + p},$$

donde m_1 es la ingestión máxima y s la saturación media. Usando (4.17) y (4.18) se tiene la primera ecuación

$$(4.19) \quad \dot{p} = g(h) \frac{k_1 \sigma \varphi \mu a p}{1 + \sigma \varphi \mu^2 p} - \gamma p - \frac{m_1 h p}{s + p}.$$

Ahora, λ es el parámetro que mide la tasa máxima de mortandad de la densidad de población de los polinizadores. En presencia de la población de plantas, ésta decrece debido a un aumento en la tasa de energía consumida la cual es proporcional al producto de visitas con la recompensa energética. De nueva cuenta el herbívoro influirá negativamente en la tasa de visitas y tomando en cuenta a k_2 la transformación energética, la tasa de mortandad tiene la expresión

$$(4.20) \quad \lambda a - g(h) \frac{k_2 \sigma \varphi \mu a p}{1 + \sigma \varphi \mu^2 p}.$$

La tasa de nacimiento de los polinizadores dependerá, naturalmente de la densidad $a(x, y, t)$. Puesto que el alimento no es ilimitado, habrá competencia por los recursos protéicos; comportamiento modelado por un crecimiento logístico

$$(4.21) \quad \delta a - \xi a^2,$$

donde δ es la tasa máxima de nacimientos y ξ es el parámetro de regulación.

La especie polinizadora puede ser algún tipo particular de insectos, de ser así cada uno de ellos se mueve aleatoriamente produciendo un comportamiento macroscópico de tipo difusivo con un coeficiente de difusión D_1 . Si, además, se considera que el desplazamiento de la densidad $a(x, y, t)$ se ve favorecido hacia alguna dirección por una ráfaga de viento de baja intensidad con velocidad \mathbf{v} , definiendo $\phi = (\delta - \lambda)/\xi$ y usando las expresiones (4.20) y (4.21), la dinámica espacio-temporal para la especie polinizadora, está dada por la ecuación:

$$(4.22) \quad \frac{\partial a}{\partial t} = D_1 \Delta a - (\mathbf{v} \cdot \nabla) a + \xi a (\phi - a) + g(h) \frac{k_2 \sigma \varphi \mu a p}{1 + \sigma \varphi \mu^2 p}.$$

La tasa de mortandad del herbívoro es independiente de la densidad, esto dado que no se supondrá competencia entre ellos. Esta hipótesis puede interpretarse en el sentido que a pesar que el alimento es limitado, éste es suficiente para que no haya "batallas" como se supuso para la especie

polinizadora. O bien, los herbívoros consumen sólo el alimento necesario para que no haya necesidad de competencia entre ellos mismos. Si la tasa de mortandad se denota por η , considerando que la tasa de crecimiento m_2 es menor que la tasa de ingestión máxima, es decir: $m_1 > m_2 > 0$ y que pueden ser otro tipo de insectos con comportamiento aleatorio cuyo coeficiente de difusión es D_2 de tal manera que $D_1 > D_2$. También se supone que la ráfaga de viento no influirá significativamente en el movimiento de esta especie. Por lo tanto el sistema formado por las ecuaciones (4.19), (4.22) y (4.23) modelan una interacción planta-polinizador-herbívoro donde se consideran términos de difusión y advección.

$$(4.23) \quad \frac{\partial h}{\partial t} = D_2 \Delta h + \frac{m_2 h p}{s + p} - \eta h.$$

4.5.1. Resumen de la dinámica espacio-temporal

Pueden encontrarse condiciones sobre los parámetros para encontrar la coexistencia entre estas tres especies. Se han hecho trabajos al respecto (véase [10]). En dicho trabajo, se dan las condiciones necesarias para la estabilidad. Las simulaciones que se han hecho sugieren la posible existencia de un ciclo límite, sin embargo también podría haber la existencia de una curva homoclínica.

La suma de los términos de difusión y advección exhiben la formación de patrones dentro del régimen de estabilidad temporal. Aparentemente éstas indican que, tanto la difusión como la advección, no destruyen la estabilidad del sistema, inclusive se observan patrones en las tres distribuciones tales que pueden interpretarse en términos de los resultados que se esperan. Sin embargo, hay mucho por hacer aún. Algunas de las incógnitas que hay que intentar responder es la naturaleza de la estabilidad, es decir ¿lo que las simulaciones exhiben es un ciclo límite o una curva homoclínica?, también sería interesante conocer la posible existencia de patrones de Turing es decir, ¿es posible hacer una elección en los parámetros advectivos y difusivos de tal forma que la solución sea estacionaria en el tiempo y espacialmente heterogénea? La respuesta a esta y muchas otras preguntas, aún no son conocidas. De hecho, tanto para este sistema como para otros en los que aparece la respuesta funcional de Holling de tipo IV, se está realizando trabajo hoy en día a fin de desentrañar la dinámica espacio-temporal involucrada (véase [35]).

4.5.2. Resultados numéricos

Algunas de las simulaciones que se han hecho respecto al sistema deducido al inicio de esta sección se presentan en la presente. El problema completo consiste en el sistema de ecuaciones (4.19), (4.22) y (4.23), donde el dominio se considera un rectángulo donde sus lados mayores no permiten flujo alguno, es decir condiciones a la frontera de Neumann homogéneas en dichos lados. Esto tiene como significado físico una región donde hay una dirección privilegiada (en el sentido horizontal). La figura 4.5 muestra las condiciones iniciales para cada una de las especies, éstas están dadas por las siguientes expresiones:

1. Figura 4.5(a). Simula una distribución con la forma de una "punta" de polinizadores entrando en la región rectangular. Denotando $H(z)$ como la función de Heaviside, la condición inicial para la especie polinizadora está dada por:

$$a(x, y, 0) = 2 \times 10^{-4} H(5 - 0.5x - y) H(y - 0.5x).$$

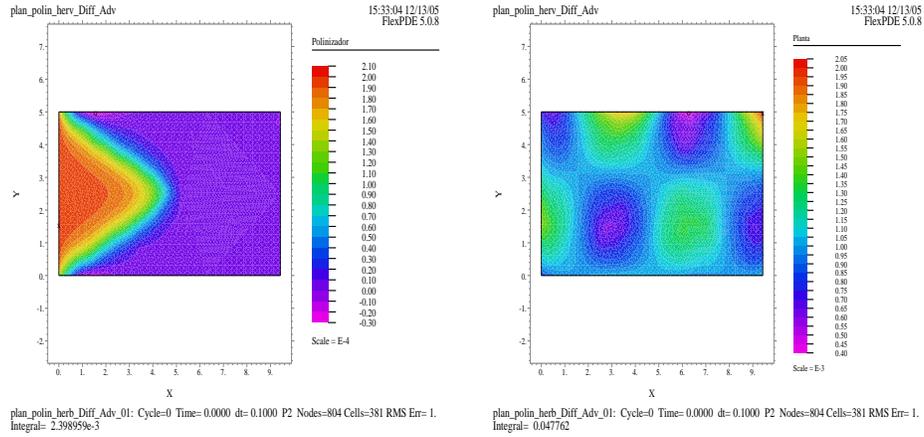
2. Figura 4.5(b). Simula una distribución no homogénea. Se eligió una distribución que tuviera la característica de una serie de motas con altura aleatoria. Esto con el fin de simular el hecho que en la densidad de plantas en una región no es uniforme y tiende a formar concentraciones mayores en algunas regiones respecto a otras. La función¹¹ *random* que toma valores al azar entre cero y el valor del argumento. Por tanto, la condición inicial es:

$$p(x, y, 0) = 10^{-3} (1 + \text{random}(\cos x \sin y)).$$

3. Figura 4.5(c). También simula una distribución no homogénea y distinta a la especie de la planta. La razón de esta elección es la misma que para las plantas, sin embargo diferente para poder observar la dinámica de la interacción de estas especies junto con la difusión y la advección. La condición inicial para este caso es:

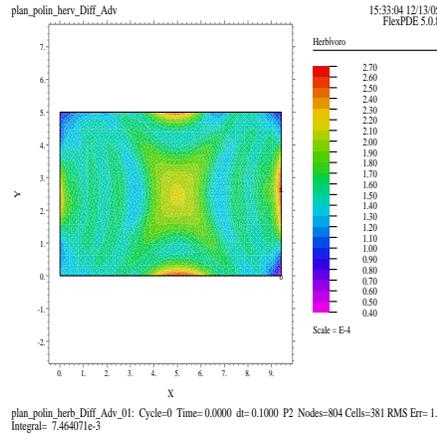
$$h(x, y, 0) = 1.5 \times 10^{-4} (1 + 0.5 \cos((5 - x)^2 - (y - 2.5)^2))$$

¹¹La paquetería que se usó tiene esta función *random*, ésta no es de naturaleza totalmente aleatoria.



(a) Polinizador

(b) Planta



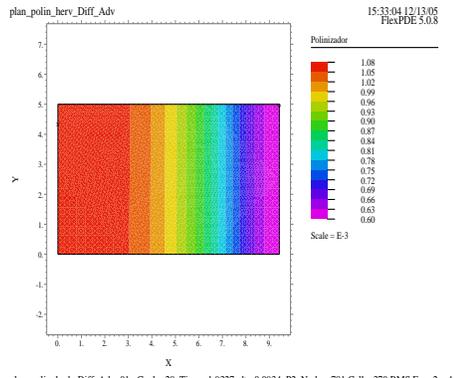
(c) Herbívoro

Figura 4.5: $t = 0$. Las regiones con rojo indican aquellas donde la densidad es mayor, mientras que las regiones con colores violáceos indican densidad menor. Los valores de los parámetros son: $D_1 = 3$, $D_2 = 0.3$, $v = 3$, $k_1 = 3.5$, $k_2 = 4$, $\sigma = 2$, $m_1 = 2$, $m_2 = 3$ y $\mu = \varphi = \gamma = \phi = \eta = \xi = s = 1$.

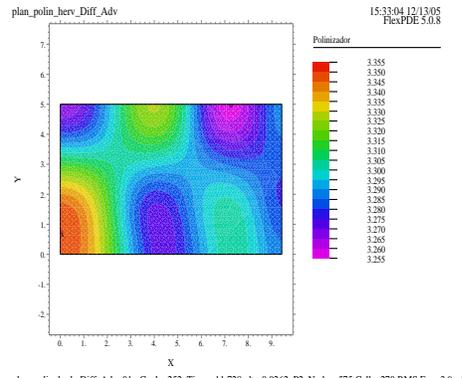
Los valores de los parámetros en la parte reactiva se tomaron a partir del trabajo [45] y se consideró que la velocidad para el término advectivo es horizontal y constante cuyo valor es de igual magnitud que la difusión del polinizador. Esto modela una corriente de viento que entra y sale de la región en consideración, de izquierda a derecha.

En las simulaciones, se observa que el sistema al estabilizarse, surge un patrón en las tres especies que se mueve de izquierda a derecha como si fuera un frente de onda. Este fenómeno puede interpretarse de la siguiente manera: los polinizadores se moverán donde la densidad de plantas es mayor, esto produce un aumento de alimento para la especie herbívora induciendo una migración a estas regiones; como se espera, este hecho inhibe el crecimiento de la concentración de plantas y por tanto, para los polinizadores estas regiones dejarán de ser atractivas por la pobre recompensa energética. Al haber regiones donde la densidad de herbívoros se ve disminuida, surgirá un aumento de la densidad de plantas y por tanto, una importante migración de polinizadores (véanse las figuras 4.6, 4.7 y 4.8). Aparentemente, la advección no necesariamente destruye la formación de patrones. Sin embargo, a partir de ellas resulta difícil sugerir la existencia de patrones estacionarios. También se hicieron simulaciones con coeficientes advectivos y con distribuciones iniciales distintas. En todos los casos, repite el mismo comportamiento cualitativo.

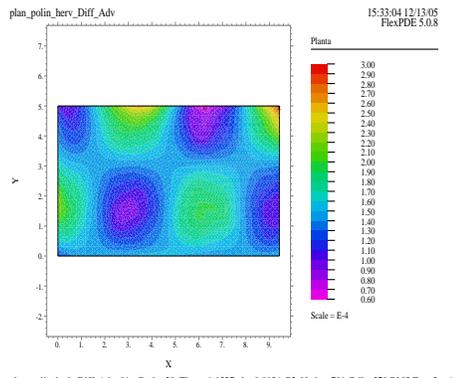
En el siguiente capítulo expondré el análisis para un sistema de S-R-D-A con coeficiente de difusión dependiente el tiempo bajo el régimen de Turing.



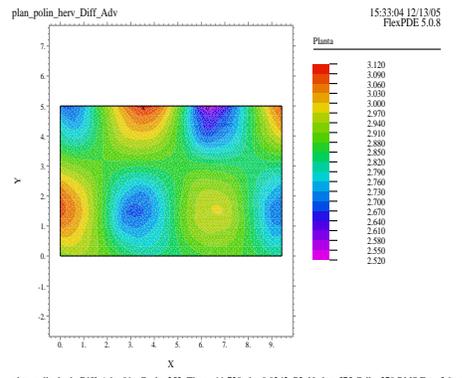
(a) Polinizador $t = 1.933$



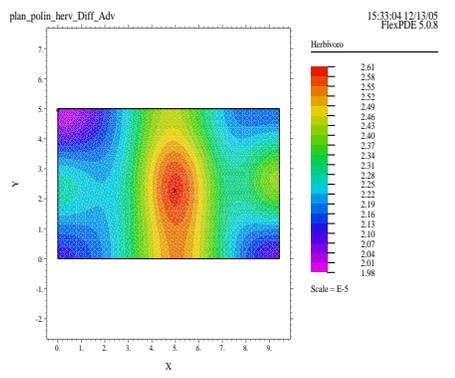
(b) Polinizador $t = 11.73$



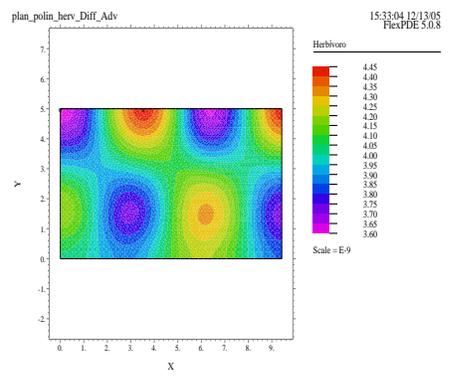
(c) Planta $t = 1.933$



(d) Planta $t = 11.73$

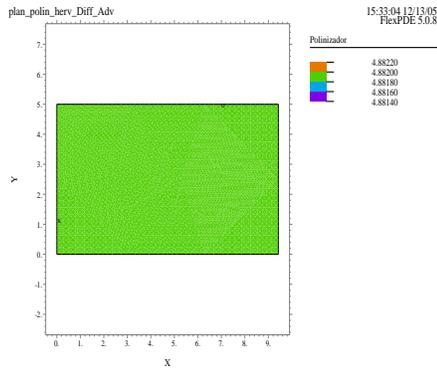


(e) Hervívoro $t = 1.933$



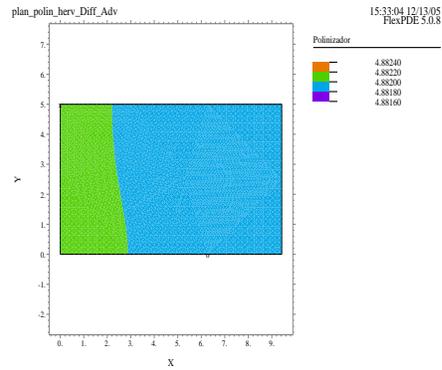
(f) Hervívoro $t = 11.73$

Figura 4.6: Curvas de nivel: transitorio.



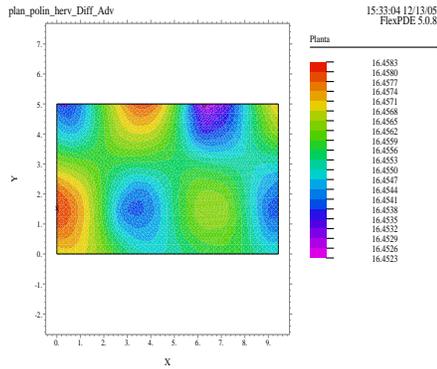
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=408 Time= 16.865 dt= 0.0381 P2 Nodes=575 Cells=270 RMS Err= 1.1e-4
Integral= 230.0503

(a) Polinizador $t = 16.87$



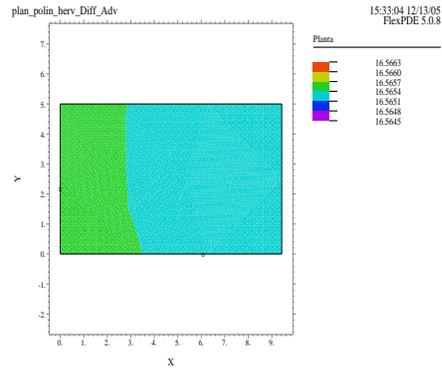
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=516 Time= 20.508 dt= 0.0239 P2 Nodes=541 Cells=254 RMS Err= 3.5e-5
Integral= 230.0585

(b) Polinizador $t = 20.56$



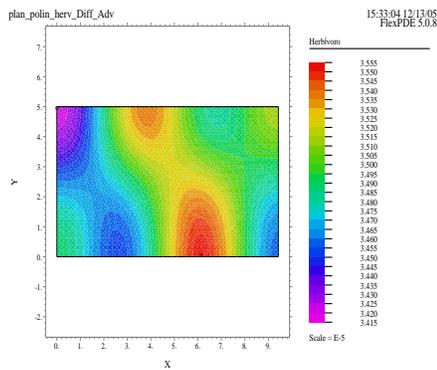
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=408 Time= 16.865 dt= 0.0381 P2 Nodes=575 Cells=270 RMS Err= 1.1e-4
Integral= 775.4484

(c) Planta $t = 16.87$



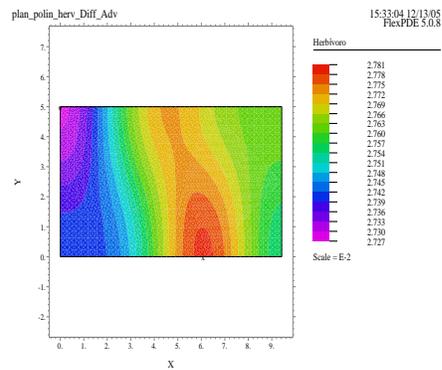
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=516 Time= 20.508 dt= 0.0239 P2 Nodes=541 Cells=254 RMS Err= 3.5e-5
Integral= 780.6244

(d) Planta $t = 20.56$



plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=408 Time= 16.865 dt= 0.0381 P2 Nodes=575 Cells=270 RMS Err= 1.1e-4
Integral= 1.646446e-3

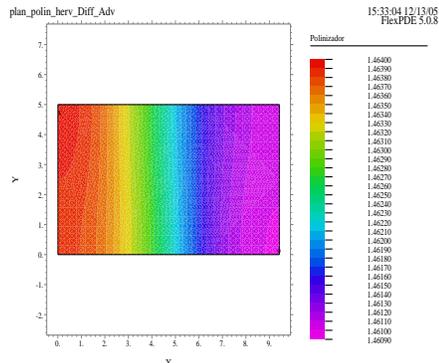
(e) Herbívoro $t = 16.87$



plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=516 Time= 20.508 dt= 0.0239 P2 Nodes=541 Cells=254 RMS Err= 3.5e-5
Integral= 1.300999

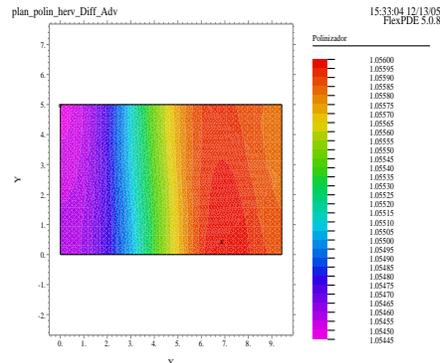
(f) Herbívoro $t = 20.56$

Figura 4.7: Curvas de nivel: transitorio.



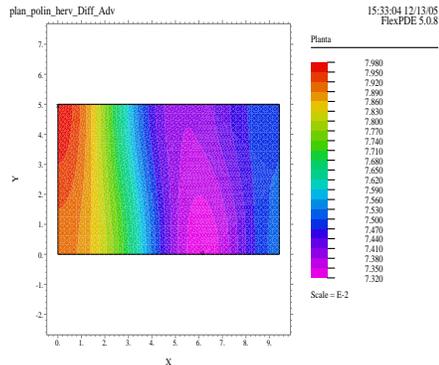
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=692 Time=23.963 dt=7.2369e-3 P2 Nodes=319 Cells=148 RMS Err=2.9e-5 Integral= 68.91350

(a) Polinizador $t = 23.96$



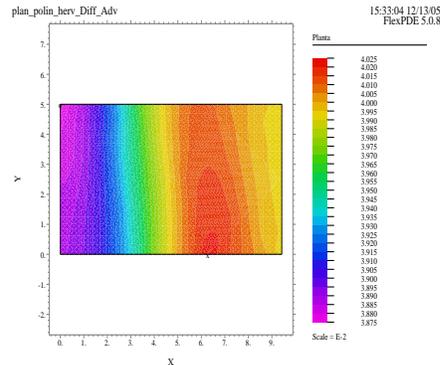
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=1040 Time=27.680 dt=0.0142 P2 Nodes=82 Cells=35 RMS Err=2.4e-4 Integral= 49.73504

(b) Polinizador $t = 27.62$



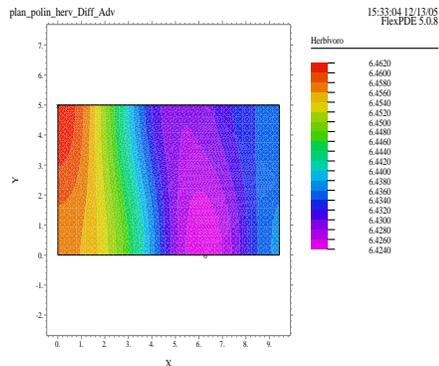
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=692 Time=23.963 dt=7.2369e-3 P2 Nodes=319 Cells=148 RMS Err=2.9e-5 Integral= 3.565498

(c) Planta $t = 23.96$



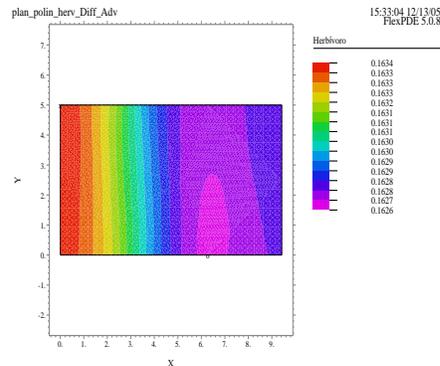
plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=1040 Time=27.680 dt=0.0142 P2 Nodes=82 Cells=35 RMS Err=2.4e-4 Integral= 1.869990

(d) Planta $t = 27.62$



plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=692 Time=23.963 dt=7.2369e-3 P2 Nodes=319 Cells=148 RMS Err=2.9e-5 Integral= 303.4158

(e) Herbívoro $t = 23.96$



plan_polin_herv_Diff_Adv_01: Cycle=1040 Time=27.680 dt=0.0142 P2 Nodes=82 Cells=35 RMS Err=2.4e-4 Integral= 7.678083

(f) Herbívoro $t = 27.62$

Figura 4.8: Curvas de nivel: estabilidad. Migración por medio de un probable frente de onda.

Capítulo 5

Un acercamiento a la emergencia de patrones en S-R- D_t -A

5.1. Introducción

En los capítulos anteriores se ha estudiado el efecto de dos procesos importantes y que, a menudo, están presentes en la naturaleza: difusión y advección. Ambos, junto con los términos cinéticos pueden provocar la emergencia de estructuras ordenadas (patrones). En particular, el mecanismo de Turing en el que intervienen los procesos de reacción y de difusión de dos morfógenos, induce un rompimiento de homogeneidad espacial cuya característica principal es que los patrones que se forman –una vez estabilizados– son estáticos respecto al tiempo. Si además de introducir términos advectivos, se considera dependencia temporal en el coeficiente de difusión, es posible encontrar condiciones sobre los parámetros para las cuales ocurra una bifurcación de Turing. A este tipo de ecuaciones las denominaré como S-R- D_t -A.

En este capítulo, se analizarán las condiciones necesarias mencionadas para un sistema de ecuaciones diferenciales parciales parabólico no lineal acoplado con coeficientes de difusión dependiente del tiempo y términos advectivos. Se advierte al lector que este es un primer acercamiento a estos análisis en los cuales, sin duda, aún hay muchas interrogantes que esperan respuesta.

5.2. Los dos procesos

Como se ha hecho a lo largo del presente trabajo, piénsese en dos morfógenos que reaccionan y se difunden a una razón variable que dependen del tiempo; también considérese la presencia de un proceso advectivo que afecta a los dos morfógenos.

Sean $u = u(x, t)$ y $v = v(x, t)$ dos funciones que representan las densidades de los dos morfógenos en la posición x al tiempo t , respectivamente. Naturalmente, debido a la naturaleza de los objetos que se están modelando, se impone que $u, v \in \mathbb{R}^+ \cup \{0\} \forall (x, t) \in [0, 1] \times \mathbb{R}^+$. Reuniendo todos los procesos mencionados, el sistema adimensionalizado¹ que se obtiene es

$$(5.1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \sigma \frac{\partial u}{\partial x} + \gamma f(u, v),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = d(t) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \rho \frac{\partial v}{\partial x} + \gamma g(u, v),$$

para $0 < x < 1$. De nueva cuenta, el signo que antecede a los términos advectivos puede escribirse positivo sin pérdida de generalidad. El cociente, $d(t)$, de entre los coeficientes de difusión para u y para v es tal que $d(t) > 0 \forall t \geq 0$; así mismo, los parámetros σ , ρ y γ son positivos cuya interpretación se ha establecido en los capítulos anteriores.

Usando las mismas hipótesis que se usaron en la Sección 4.4 del Capítulo 4, las condiciones a la frontera que se consideran son periódicas, es decir

$$(5.2) \quad \begin{aligned} u(0) &= u(1), & u'(0) &= u'(1) \end{aligned}$$

$$v(0) = v(1), \quad v'(0) = v'(1).$$

Supóngase que $(u_0, v_0)^T$ es punto de equilibrio hiperbólico entonces, por el Teorema de Hartman-Grobman, el comportamiento local de este punto para (5.1), es topológicamente equivalente al del sistema lineal

$$(5.3) \quad \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \mathbf{D}(t) \frac{\partial^2 \mathbf{w}}{\partial x^2} + \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial x} + \gamma \mathbf{J} \mathbf{w},$$

¹Se toma en cuenta una dimensión por simplicidad, además que es posible encontrar una transformación del dominio en el intervalo unitario, $[0, 1]$.

que lo aproxima, donde $\mathbf{w}(x, t)$ es el vector con entradas²

$$w_1(x, t) = u(x, t) - u_0, \quad w_2(x, t) = v(x, t) - v_0,$$

\mathbf{J} es la matriz de Jacobi evaluada en el punto $(u_0, v_0)^T$ cuyas entradas son $\{a_{ij}\}$ y las matrices \mathbf{A} y $\mathbf{D}(t)$ se definen de la siguiente manera

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d(t) \end{pmatrix}.$$

Las hipótesis de Turing establecen que en ausencia de efectos espaciales, el sistema tiene que ser estable ante perturbaciones, es decir, que se satisfacen las condiciones $Tr(\mathbf{J}) < 0$ y $\det(\mathbf{J}) > 0$.

En la Sección 3.1, se hace la suposición que el coeficiente $d(t)$ tiene periodo mínimo $T > 0$, de tal manera que, $d(t + T) = d(t) \forall t > 0$, aquí se tomará la misma hipótesis.

Debido al método de separación de variables y a las condiciones de frontera (5.2), se buscan soluciones para (5.3) de la forma

$$(5.4) \quad \mathbf{w}(x, t) = \begin{pmatrix} \varphi(t) \\ \phi(t) \end{pmatrix} e^{ikx},$$

donde φ y ϕ son desconocidas.

Sustituyendo (5.4) en el sistema (5.3), se obtiene el sistema de ecuaciones diferenciales no autónomo

$$(5.5) \quad \dot{\mathbf{z}} = \begin{pmatrix} \dot{\varphi}(t) \\ \dot{\psi}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} \\ q_{21} & q_{22}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi(t) \\ \psi(t) \end{pmatrix} = \mathbf{B}(t)\mathbf{z},$$

donde las entradas de la matriz $\mathbf{B}(t)$ están dadas por

$$q_{11} = \gamma a_{11} - k^2 + i\sigma k, \quad q_{12} = \gamma a_{12}, \quad q_{21} = \gamma a_{21}, \quad q_{22}(t) = \gamma a_{22} - k^2 d(t) + i\rho k.$$

Supóngase, además, que la matriz de Jacobi asociada al sistema lineal (5.3) corresponde a un sistema del tipo activador-inhibidor, véase (1.12). Entonces,

²Las diferencias dadas por w_1 y w_2 se consideran suficientemente pequeñas. Véase la Sección 1.4.

$a_{11} > 0$, $a_{12} < 0$, $a_{21} > 0$ y $a_{22} < 0$ de tal manera que $a_{11} < a_{22}$ y $a_{11}a_{22} > a_{12}a_{21}$.

Debido a la naturaleza del cociente de difusión, $d(t)$, la matriz $\mathbf{B}(t)$ resulta periódica, de periodo T . La Teoría de Floquet (véase Apéndice B) será sumamente útil en el análisis. Considérese un matriz fundamental $\mathbf{M}(t)$ del sistema (5.5), tal que para una matriz constante de 2×2 no singular, \mathbf{C} , se tiene

$$\mathbf{M}(t+T) = \mathbf{M}(t)\mathbf{C};$$

Sean μ_1 y μ_2 los valores propios³ de \mathbf{C} . Siguiendo la Teoría de Floquet, en virtud que el promedio de una función periódica se considera la integral

$$(5.6) \quad \int_0^T (q_{11} + q_{22}(t))dt = (\gamma(a_{11} + a_{22}) - k^2 + i(\sigma + \rho)k) T,$$

debido a que el promedio de un función periódica de signo alternante⁴ es cero. Por el Teorema B.4, a partir de (5.6), los multiplicadores de Floquet, μ_1 y μ_2 , son tales que

$$(5.7) \quad \mu_1\mu_2 = \exp((\gamma(a_{11} + a_{22}) - k^2) T) \exp(i(\sigma + \rho)kT) \in \mathbb{C}.$$

De aquí, se observa que los multiplicadores dependen, al menos, del número de onda, k , los coeficientes de advección σ y ρ , el parámetro del factor de escala, γ , y de las entradas, a_{11} y a_{22} , de la matriz jacobiana.

El polinomio característico para la matriz \mathbf{C} , está dado por la expresión

$$(5.8) \quad \det(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I}) = \mu^2 - 2q\mu + r = 0,$$

donde $q = q(k, \sigma, \rho, \gamma)$ y $r = r(k, \sigma, \rho, \gamma)$ tal que $r = \mu_1\mu_2$. La forma de $2q$ no está dada explícitamente; sin embargo, aún así, es posible determinar algunas propiedades de las soluciones como se verá a continuación.

Observando que el producto (5.7) es complejo y que ambos μ_1 y μ_2 son solución de la ecuación (5.8), se deduce que cada uno de ellos es también, un número complejo. Por tanto, se tiene que la forma de los multiplicadores de Floquet es

$$\mu_j = q \pm \sqrt{q^2 - r},$$

³estos corresponden a los mutiplicadores de Floquet del sistema (5.5) (véase 1.4).

⁴Funciones como el seno o el coseno.

para $j = 1, 2$.

Con el objeto de escribir explícitamente, la parte real e imaginaria de los multiplicadores de Floquet, se hacen las identificaciones siguientes

$$\begin{aligned}\alpha_q &= \Re(q), & \beta_q &= \Im(q), \\ \alpha_r &= \exp\left(\left(\gamma(a_{11} + a_{22}) - k^2\right) T\right) \cos\left((\sigma + \rho)kT\right), \\ \beta_r &= \exp\left(\left(\gamma(a_{11} + a_{22}) - k^2\right) T\right) \sin\left((\sigma + \rho)kT\right),\end{aligned}$$

así se escribe el discriminante $q^2 - r$ de la siguiente manera

$$q^2 - r = \alpha_q^2 - \beta_q^2 - \alpha_r + i(2\alpha_q\beta_q - \beta_r),$$

definiendo los parámetros ζ y η como

$$2\zeta = \sqrt{(\alpha_q^2 - \beta_q^2 - \alpha_r)^2 + (2\alpha_q\beta_q - \beta_r)^2}, \quad \eta = \tan \theta = \frac{2\alpha_q\beta_q - \beta_r}{\alpha_q^2 - \beta_q^2 - \alpha_r},$$

y usando las identidades trigonométricas para el medio ángulo, se obtienen las expresiones para la parte real, $\Re(\mu)$, e imaginaria, $\Im(\mu)$, de las raíces de (5.8)

$$(5.9) \quad \Re(\mu) = \alpha_q + \sqrt{\zeta} \sqrt{1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}}},$$

$$(5.10) \quad \Im(\mu) = \beta_q + \sqrt{\zeta} \sqrt{1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \eta^2}}}.$$

En el Apéndice B, la definición B.3 indica la relación entre los multiplicadores de Floquet y los exponentes característicos. El tipo de soluciones que tiene el sistema (5.5) dependerán de éstos. Por esta razón, se toma la rama principal del logaritmo y así, los exponentes característicos tienen la forma siguiente

$$T\varrho = \log |\mu| + i \arg \mu,$$

donde T es el periodo de la matriz asociada al sistema (5.5) y

$$|\mu| = \sqrt{\Re(\mu)^2 + \Im(\mu)^2}, \quad \arg \mu = \arctan \frac{\Im(\mu)}{\Re(\mu)}.$$

Obsérvese que la ecuación (5.7) implica que $|\mu| \neq 0$, entonces $\Re(\mu)$ ni $\Im(\mu)$ se anulan simultáneamente para cualquier elección de los parámetros. Se observan tres casos; para cuyo análisis se denota por \mathbb{D} al disco abierto en el plano de radio uno complejo,

Caso 1. Si $\Re(\mu) = 0$, se tiene que $\arg \mu = \pm\pi/2$ dependiendo del signo de $\Im(\mu)$ y $|\mu| = |\Im(\mu)|$.

1. Si $\mu \in \mathbb{D}$, entonces el exponente característico tiene parte real negativa y, por el Teorema B.2, las soluciones son asintóticamente estables y oscilatorias donde ésta se ve afectada por una frecuencia $\pi/2T$.
2. Si $\mu \in \partial\mathbb{D}$, aunque la parte real de μ es cero, las soluciones que exhibe el sistema son estables pero no de periodo, T , sino que hay, de nueva cuenta, una frecuencia $\pi/2T$ influyendo en la periodicidad de las mismas (véase el Teorema B.1).
3. Si $\mu \in \mathbb{D}^c \setminus \partial\mathbb{D}$, las soluciones oscilan con parte real positiva en el exponente característico, produciendo un comportamiento inestable; nuevamente la oscilación de éstas se ve afectada por la frecuencia debida al argumento de μ .

Caso 2. Si $\Im(\mu) = 0$, el argumento de μ es cero y su módulo dependería sólo de la parte real, entonces

1. Si $\mu \in \mathbb{D}$, las soluciones son oscilatorias y asintóticamente estables.
2. Si $\mu \in \partial\mathbb{D}$, entonces por el Teorema B.1, las soluciones son periódicas con periodo T .
3. Si $\mu \in \mathbb{D}^c \setminus \partial\mathbb{D}$, el exponente característico tiene parte real positiva y así el comportamiento es inestable.

Caso 3. Si $\Re(\mu) \neq 0$ y $\Im(\mu) \neq 0$, entonces se observan los mismos posibles comportamientos en las soluciones, que en el primer caso. La diferencia radica en que las oscilaciones tienen una frecuencia natural $2\pi/T$ y una frecuencia $\Im(\mu)/T\Re(\mu)$.

Una vez llegado a este punto, es posible hacer algunos comentarios respecto a la interpretación biofísica del efecto conjunto de los tres procesos que en esta sección se consideran y que se plasmaron en el sistema de S-R-D_t-A (5.1).

5.3. Crecimiento del dominio

R. Plaza *et al.* en [32], proporcionan un modelo de reacción-difusión donde los efectos debidos a la geometría y crecimiento son tomados en cuenta. La idea para la deducción de su modelo es bastante simple, razón por la cual sorprende. Consideran un proceso de reacción-difusión⁵ que se efectúa en un dominio que crece. Ellos consideran un dominio de una y dos dimensiones. en esta presentación sólo consideraré una dimensión, aunque se hace incapié en que en dicho artículo, la dimensión espacial juega un papel muy importante debido a la geometría.

Se parametrizan éstos por medio de una transformación $\psi_t : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ tal que $\psi_t(\cdot) = \mathbf{X}(\cdot, t)$ representa una curva⁶ donde Ω es un intervalo de \mathbb{R} . Esta transformación recibe el nombre de *función de crecimiento* debido a que para un dominio Ω_0 fijo, la transformación $\Omega_t \equiv \psi_t(\Omega_0)$ modela la geometría y el crecimiento del organismo en estudio.

Usando la ley de Fick se obtiene la ecuación (A.1) donde Ω y S dependen del tiempo. En términos de las concentraciones u y v , se construye el vector de morfógenos $\mathbf{w} = (u, v)^T$ y la matriz, \mathbf{D} , de 2×2 con coeficientes de difusión constantes D_{ij} de tal manera que, usando el Teorema de transporte de Reynolds (véase Teorema 4.1), se obtiene

$$(5.11) \quad \frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \mathbf{w}(\mathbf{x}, t) d\mathbf{X} = \mathbf{D} \int_{\partial\Omega_t} \nabla \mathbf{w} \cdot \mathbf{n} dS + \int_{\Omega_t} \mathbf{R}(\mathbf{w}, t) d\mathbf{X};$$

se define la concentración del morfógeno por unidad de longitud por medio de $\mathbf{w} = \mathbf{w}(\mathbf{X}(x, t), t)$. De esta manera, se reparametriza en términos de la longitud de curva dada por $\sigma_x(x, t) = |\mathbf{X}_x|$ y sustituyendo en (5.11), al adimensionalizar⁷ se obtiene el sistema de ecuaciones

$$(5.12) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{\sigma_x^2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_x} \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\sigma_{xt}}{\sigma_x} u + \gamma f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \frac{d}{\sigma_x^2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_x} \frac{\partial v}{\partial x} \right) - \frac{\sigma_{xt}}{\sigma_x} v + \gamma g(u, v), \end{aligned}$$

⁵Naturalmente es un sistema no lineal acoplado.

⁶Ésta se supone C^2 .

⁷Véase [49].

donde $d = D_2/D_1$. En este sistema los coeficientes dan cuenta de sendos procesos físicos de la siguiente manera

$$\frac{d}{\sigma_x^2} : \text{difusión}, \quad -\frac{\sigma_{xx}}{\sigma_x^3} : \text{advección}, \quad -\frac{\sigma_{xt}}{\sigma_x} : \text{dilución}.$$

Haciendo una comparación entre el sistema (5.1) que fue el estudiado se observa que la naturaleza de cada uno de los términos puede verse como casos particulares de los correspondientes en el sistema (5.12). En éste último, los procesos de difusión y advección son consecuencia natural del crecimiento en el dominio además que aparece un término de dilución⁸; éste determina que la razón de cambio de cada morfógeno es proporcional a su capacidad para diluirse en el punto x para cada tiempo t . La comparación mencionada permite ver que el sistema de reacción-difusión-advección cuyo acercamiento fue desarrollado de forma paulatina a lo largo de este trabajo, constituye sólo un caso particular de un marco teórico más general como lo es el sistema (5.12).

Por esta razón, considerando este modelo para una interacción depredador-presa como se hizo en los Capítulos 2 y 4, los procesos de difusión dependiente del tiempo y advección modelan la formación de parches en mar abierto en condiciones menos ideales. Es decir, bajo ciertas condiciones la difusión de ambas especies favorecidas por las corrientes marítimas verticales y la presencia de una corriente horizontal provocan que al interactuar, no sólo haya coexistencia sino una distribución espacial heterogénea que, en principio, dependerá de diversos procesos físicos, éstos, inducidos por el movimiento del agua de mar y la interacción entre ambas especies.

⁸Generalmente usado en farmacología, es la medida de la masa de una sustancia por volumen de agua.

Capítulo 6

Discusión y Conclusiones

En este Capítulo final propongo hacer una recapitulación sobre lo expuesto en este trabajo. Ésta permitirá visualizar lo que, a mi juicio, son los problemas relevantes y cuyo análisis constituiría la continuación de lo que modestamente se ha avanzado en el trabajo que el lector tiene en sus manos.

6.1. Recapitulación

Llegado a este punto, se pueden hacer algunos comentarios respecto al presente trabajo. En éste, se presentó un breve recorrido en la modelación matemática por medio de EDP de la emergencia de estructuras ordenadas en la física, química y biología. En particular, se estudiaron los distintos enfoques de la morfogénesis y el modelo de Turing. Para éste, se obtuvieron con detalle las condiciones necesarias para la formación patrones en un contexto general.

También, se dedujeron las ecuaciones de reacción-difusión-advección de dos formas distintas permitiendo conocer los modelos deterministas y probabilísticos en materia, de tres de los procesos más interesantes en el estudio de sistemas dinámicos continuos: reacción, difusión y advección.

La difusión dependiente del tiempo es un fenómeno que no se encuentra aislado en la naturaleza, como muestra de ello, se vieron una gran variedad de ejemplos de este fenómeno en áreas del conocimiento que se consideran ajenas como la física y biología. En el Capítulo 2, el modelo de Turing para un sistema depredador-presa estudiado por Timm y Okubo, es una muestra de la interdisciplinariedad de estas dos ramas de la ciencia. A lo largo del análisis se exhiben las condiciones que dan posibilidad a la coexistencia. Este

hecho es de esperarse puesto que se observan a menudo en la naturaleza, además, en los modelos Lotka-Volterra es posible encontrar condiciones para que esto suceda. Cabe mencionar que, el modelo que se presenta considera agrupación por supervivencia por parte de la presa y competencia por parte del depredador. Por otro lado, resulta interesante ver que es posible observar un comportamiento oscilatorio en ambas densidades de población que al transcurrir el tiempo llegarán al equilibrio; esto se interpreta observando que la población de depredadores "necesita" conservar su alimento sin sufrir hambruna y así, debido a los efectos difusivos pueden exhibirse parches en el océano. Esta estabilidad temporal (asintótica) permite concluir que estos patrones, son de Turing. Se hace notar que esto es teóricamente posible, sin embargo habrá que verificar estas hipótesis haciendo observaciones adecuadas para mostrar la presencia de éstos. También es notable que aunque pueda haber estabilidad asintótica, no es la única posible, sino que también la conocida como *estabilidad orbital*. Ésta no induce patrones de estacionarios¹; cuando se dan las condiciones para que en la parte temporal existan soluciones periódicas se pueden observar heterogeneidades espaciales en movimiento. Otro hecho importante, es el que se exhibió en el Capítulo 2, ahí se encontró que cuando se está en el régimen dado por la condiciones de Turing y se perturba la difusión dependiente del tiempo², la estabilidad es mayor que cuando hay difusión constante. Es decir, la difusión dependiente del tiempo, de hecho periódica respecto a esta variable aparte que es menos ideal, es un proceso que induce la formación de parches en el mar con menor facilidad que cuando se considera difusión constante. Aparentemente, tiende a impedir la formación de patrones. Esto es de esperarse, cada miembro del grupo de fitoplancton se mueve asazamente produciendo un comportamiento macroscópico pero a su vez, se ve influenciado fuertemente por las corrientes marinas, así mismo para el zooplancton. El caso contrario es pensar en un océano estático, lo cual está muy lejos de la realidad; sin embargo, no hay que despreciar los resultados que se obtienen en ese sentido debido a que inducen las líneas de investigación.

Por otro lado en el Capítulo 4, se plantean una gran diversidad de ejemplos donde la advección juega un papel importante, en uno de ellos se hace énfasis en una interacción de naturaleza competitiva-mutualista. En dicho capítulo, se dedujeron las ecuaciones para un modelo planta-polinizador-herbívoro donde

¹Recuérdese que los patrones de Turing son independientes del tiempo.

²Cuando las corrientes verticales son de poca intensidad.

influyen efectos espaciales (advección y difusión) y se mostraron algunos de los resultados numéricos. Esto permitió la aplicación del mecanismo de Turing en el modelo de Levin y Segel agregando un ingrediente nuevo para éste: la advección. La presencia de un término de arrastre hace suponer que para que exista una bifurcación de Turing no es necesaria la difusión, contrario a lo que pudiese imaginarse. Este hecho se probó observando la curva de bifurcación. La diferencia de los coeficientes de advección tomó un papel importante en este fenómeno. Tomando una elección adecuada de ésta, es posible observar una doble bifurcación (véase la figura 4.2). Observando el modelo para el zooplancton y el fitoplancton, este hecho, puede interpretarse que al variar las condiciones climatológicas como una corriente de aire o una corriente marina horizontal, pueden favorecer la formación de parches, destruirlos y favorecerlos dependiendo del número de onda admisible. Los números de onda admisibles están restringidos por el tamaño del espacio es decir, para que se forme la distribución espacial heterogénea, es necesario un tamaño crítico del dominio.

La escala espacial, cuando se tiene advección, cobra una importancia fundamental. Pues influye en la bifurcación con mayor intensidad cuando no hay difusión que en ausencia de advección, como puede verse en las figuras 4.3 y 4.4. Entre más grande sea la diferencia entre los coeficientes de advección de cada una de las poblaciones, es más difícil que se formen parches.

La advección induce una diferencia de fase que puede producir que aunque sí se formen los parches, no necesariamente son de Turing, esto se debe a que para ciertos valores de los parámetros las soluciones no son estacionarias en el tiempo. Sin embargo, es posible encontrar una diferencia crítica en los coeficientes de advección para el cual estos patrones permanezcan estacionarios. Es de destacar que este valor crítico, es distinto para cada número de onda admisible. En efecto, conforma k crece, q_c es menor y por tanto, más fácil de provocar un patrón de Turing. Esto es de esperarse, puesto que si q_c es cero, entonces puede pensarse en el caso donde la advección no participa o bien, donde la reacción y la difusión juegan un papel predominante respecto al de la advección.

Cuando se integran estos dos procesos, sale a relucir la naturaleza de ellos actuando de forma conjunta, como ya se mencionó en el Capítulo 5, estos provienen de efectos de crecimiento en el dominio. Dicho en otras palabras, para las poblaciones estudiadas las corrientes marinas (verticales y horizontales) influyen significativamente en la formación de estos parches.

Así como sucede cuando se tiene difusión dependiente del tiempo, es posible encontrar soluciones que se acercan rápidamente a la estabilidad y por tanto, aunque impide la formación de patrones de Turing y existen soluciones de naturaleza periódica que no inducen patrones estacionarios, es posible que en algunos casos se favorezca la formación de éstos. Si se considera la superficie del agua en mar abierto y bajo de ésta hay corrientes que impulsan masas de agua hacia arriba, donde también existe una corriente horizontal en alguna dirección preferencial, se observan en la superficie pequeños "brotes" de agua. Pensando que ambas poblaciones se encuentran sobre la misma interactuando, se entiende que los patrones que se formen se ven fuertemente influidos por estos brotes de agua. Éstos producen que, para una región imaginaria inicial sobre el agua, crezcan para tiempos posteriores. Naturalmente, afectando espacialmente las distribuciones de las densidades y produciendo así, una heterogeneidad.

6.2. Problemas interesantes

El modelo presentado en el Capítulo 5, aunque conserva las características, bajo las condiciones de Turing; por un lado presentadas cuando la difusión es constante y por el otro: difusión dependiente del tiempo y advección en situaciones de difusión constante, se encuentra aún limitado. El análisis para la parte temporal no es suficientemente general, se restringe a coeficientes cuya dependencia temporal es periódica. Además, no considera coeficientes que podrían relacionarse con crecimiento isotrópico, exponencial o logístico como lo hacen los autores en [32]. Aunque el modelo puede verse como una alternativa a la influencia del crecimiento en la formación de patrones, no refleja explícitamente los efectos que puede producir la curvatura del dominio al crecer, es decir, no exhibe la forma ni manera en la que crece el dominio. Se hace énfasis en que, para estos efectos, es necesario considerar dimensiones superiores, otro punto desfavorable del modelo con ecuaciones dadas en (5.1).

El análisis que se hace en el presente trabajo es de índole local, esto quiere decir que, aunque es posible caracterizar las soluciones alrededor de los puntos de equilibrio del sistema de ecuaciones, no es posible asegurar la dinámica global del mismo. Este podría ser un tema muy interesante para estudios en el futuro.

Otro de los aspectos que faltaron en el presente trabajo, es la ausencia de

simulaciones cuando el coeficiente de difusión es constante, dependiente del tiempo, cuando aparecen términos advectivos y por último todos los procesos en conjunto. De esta manera, los cambios cualitativos podrían ser más claros cuando se vayan integrando los cambios en el modelo. Éste, también, es un tema importante para trabajos posteriores.

Uno de los trabajos, a futuro, de mayor interés en la misma línea de investigación, es el análisis analítico para el sistema planta-polinizador-herbívoro, el análisis de la posible aplicación del modelo de R. Plaza *et al.* y las comparaciones correspondientes en los resultados, así como las simulaciones numéricas.

Un trabajo más teórico que representa un reto muy interesante es el análisis formal (local y global) del modelo presentado en [32].

Apéndice A

Ecuación de Continuidad y de Fokker-Planck

En un ensamble de partículas, por ejemplo células, bacterias, animales, partículas de una sustancia química, etcétera, cada una de ellas se mueven aleatoriamente. La propagación de éstas dan como resultado un movimiento irregular e individual. Cuando este movimiento microscópico resulta en un movimiento macroscópico regular del grupo de partículas; se puede pensar en un proceso de difusión. Como ejemplo de esto piénsese en las moléculas de un gas: cada una se mueve aleatoriamente pero una cantidad enorme de éstas producen un movimiento macroscópico regular.

Obtener un comportamiento macroscópico a partir del movimiento individual de cada partícula es una tarea prácticamente imposible, debido a la interacción entre cada una de las partículas con sus compañeras. El objetivo de este apéndice es deducir un modelo matemático continuo que describa el comportamiento global en términos de la densidad o concentración de las partículas.

Empezaré deduciendo el modelo determinista que da como resultado la *ecuación de Continuidad* que representa una ley de conservación, en este caso de la materia y en seguida deduciré una ecuación que parte de bases probabilísticas conocida como la *ecuación de Fokker-Planck*¹.

Al final del apéndice presentaré algunos ejemplos en los cuales se puede apreciar la utilidad de ambas ecuaciones en la deducción de las ecuaciones que se usan en esta tesis.

¹También conocida como la *ecuación hacia adelante de Kolmogorov*.

A.1. La ecuación de Continuidad

Supóngase un fluido que se difunde en un volumen $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Sea $S \subset \mathbb{R}^3$ una superficie arbitraria que encierra un volumen $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ y denótese por $c(\mathbf{x}, t)$ una concentración de alguna sustancia en el punto \mathbf{x} al tiempo t . Supóngase que $c(\mathbf{x}, t)$ es una función de clase² C^k con $k \geq 1$ y $f = f(c, \mathbf{x}, t)$ la función que representa la fuente del material.

Si \mathbf{J} denota el flujo de la sustancia a través de un área unitaria en S por unidad de tiempo, entonces

$$\begin{aligned} \iint_{\partial\Omega=S} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} &\equiv \text{flujo total a través de la superficie } S. \\ \iiint_{\Omega} c(\mathbf{x}, t) dv &\equiv \text{la cantidad total de sustancia en } \Omega \text{ al tiempo } t. \\ \iiint_{\Omega} f(c, \mathbf{x}, t) dv &\equiv \text{la cantidad total de sustancia creada por } f. \end{aligned}$$

Usando una de las leyes de conservación de la física que dice: la razón de cambio de una sustancia en Ω es igual a la razón de flujo del material que cruza por S el volumen Ω , más el material creado en Ω . Usando las definiciones anteriores, se obtiene la ecuación siguiente

$$(A.1) \quad \frac{d}{dt} \iiint_{\Omega} c(\mathbf{x}, t) dv = - \iint_{\partial\Omega=S} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} + \iiint_{\Omega} f(c, \mathbf{x}, t) dv,$$

pidiendo suavidad a \mathbf{J} y considerando que los operadores $\frac{d}{dt}$ y \int conmutan, finalmente se obtiene, al usar el Teorema de la divergencia, la llamada *ecuación de Continuidad*

$$(A.2) \quad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = f(c, \mathbf{x}, t) \quad \forall \Omega \subset \mathbb{R}^3 \text{ y } t > 0,$$

debido a que Ω es arbitrario.

Nótese que, dependiendo de la forma del flujo \mathbf{J} la ecuación (A.2) también es aplicable, ya sea que éstos se den por difusión o algún otro proceso.

A.2. La ecuación de Fokker-Planck

La ecuación de Fokker-Planck se deduce fácilmente a partir del análisis del movimiento browniano el cual tuvo su origen en la observación del movimiento

²Dependiendo del flujo en cuestión.

irregular de partículas de polvo o de polen suspendidas en un líquido por ejemplo agua. Este fenómeno fue descubierto en 1828 por el botánico inglés Robert Brown. Las primeras *aplicaciones* de este movimiento dadas por el botánico apelaban a la posibilidad de que esas partículas tuviesen vida. Con el tiempo, el problema de describir este movimiento errático de partículas suspendidas en líquido, se convirtió en un reto al que acudieron científicos de la talla de Albert Einstein quien, en 1905, publicó un par de artículos en los que plantea un marco teórico para la descripción de tan complicados movimientos. Estos trabajos resultaron pieza clave en el entendimiento de —a nivel microscópico— de la radiación electromagnética.

El estudio del movimiento browniano ha sido tan importante que durante su estudio se han desarrollado ramas de la ciencia como el ruido aleatorio, procesos estocásticos, análisis espectral y las ecuaciones estocásticas sin olvidar, por supuesto, la teoría de caminatas aleatorias.

La deducción de la ecuación de Fokker-Planck se hará en una sola dimensión, esto por simplicidad. Supóngase que el espacio es toda la recta real.

Sea $u(\xi, t)$ la densidad de una población de individuos o de algún material (partículas) en el punto ξ al tiempo t . Luego, la densidad en el punto x en un tiempo corto después τ , será $u(x, t + \tau)$. Esta cantidad puede ser calculada mediante la multiplicación de la probabilidad de transición de la densidad de interés en el punto ξ al tiempo t que se moverá al lugar x en un incremento de tiempo τ y la concentración en ξ al tiempo t . Por último hay que sumar sobre todos los valores de ξ .

Si $\phi(\xi, t; x, t + \tau)d\xi$ es la probabilidad que tiene la población situada entre ξ y $\xi + d\xi$ al tiempo t , de que se mueva a x durante el lapso de duración τ al tiempo $t + \tau$, entonces

$$(A.3) \quad u(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\xi, t) \phi(\xi, t; x, t + \tau) d\xi.$$

La probabilidad que tiene un individuo en ξ al tiempo t se mueva al punto x en $t + \tau$ es uno, es decir

$$(A.4) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi, t; x, t + \tau) dx = 1.$$

Por otro lado, la ecuación (A.3) es independiente del estado previo al tiempo t . Esto quiere decir que la probabilidad que tiene la densidad de moverse de su estado en t al nuevo estado en $t + \tau$ es un proceso determinado por un *proceso de Markov*³.

Se definen ahora las transformadas de Fourier de las funciones características $\phi(\xi, t; x, t + \tau)$ y $\psi(\xi, t; k, t + \tau)$ que se supondrá son funciones $L^2(\mathbb{C})$

$$(A.5) \quad \psi(\xi, t; k, t + \tau) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\xi, t; x, t + \tau) e^{ik(x-\xi)} dx,$$

$$(A.6) \quad \phi(\xi, t; x, t + \tau) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi, t; k, t + \tau) e^{-ik(x-\xi)} dk$$

Nótese que tanto ψ como ϕ son la transformada de Fourier una de otra.

Usando la definición en series de la exponencial compleja y sustituyendo en (A.5), es decir

$$e^{ik(x-\xi)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} (x - \xi)^n,$$

entonces sin temor alguno a la convergencia (debido a que $\phi, \psi \in L^2(\mathbb{C})$), se tiene

$$\psi(\xi, t; k, t + \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} (x - \xi)^n \phi(\xi, t; x, t + \tau) dx$$

Definiendo los n -ésimos momentos de la función ϕ de la siguiente manera

$$m_n(\xi, t, \tau) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} (x - \xi)^n \phi(\xi, t; x, t + \tau) dx,$$

entonces (A.5) toma la siguiente forma

$$(A.7) \quad \psi(\xi, t; k, t + \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} m_n(\xi, t, \tau),$$

donde se usa el hecho que $m_0(\xi, t, \tau) = 1$, debido a (A.4).

³Un proceso de Markov es un proceso determinado por solamente la dependencia de una generación.

Sustituyendo (A.7) en (A.6) y haciendo lo correspondiente en (A.3) se obtiene

$$\begin{aligned}
 u(x, t + \tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi dk \left(\frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(ik)^n}{n!} m_n(\xi, t, \tau) \right) e^{-ik(x-\xi)} u(\xi, t) = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi u(\xi, t) \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{m_n(\xi, t, \tau)}{n!} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (ik)^n e^{-ik(x-\xi)} dk \right) = \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m_n(\xi, t, \tau)}{n!} u(\xi, t) \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x - \xi) d\xi = \\
 \text{(A.8)} \quad &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n m_n(x, t, \tau) u(x, t),
 \end{aligned}$$

donde $\delta(x - \xi)$ es la función delta de Dirac.

Nótese que no es difícil ver que se cumple la relación⁴

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (ik)^n e^{-ik(x-\xi)} dk = \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \delta(x - \xi)$$

Por último, a partir de (A.8), se forma el cociente

$$\text{(A.9)} \quad \frac{u(x, t + \tau) - u(x, t)}{\tau} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \frac{m_n(x, t, \tau)}{\tau n!} u(x, t)$$

y al tomar el límite de (A.9) cuando $\tau \rightarrow 0$ se encuentra la *ecuación de Fokker-Planck*

$$\text{(A.10)} \quad \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial(\beta u)}{\partial x} + \frac{\partial^2(\mu u)}{\partial x^2},$$

con

$$\beta(x, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{m_1(x, t, \tau)}{\tau},$$

⁴Úsese inducción matemática y las propiedades de la δ -Dirac.

conocida como la *desviación*⁵ y

$$\mu(x, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{m_2(x, t, \tau)}{2\tau},$$

la *movilidad* que es una medida del movimiento en sí.

Se ha supuesto que en un intervalo pequeño de tiempo τ , los diversos factores que influyen en un organismo o una partícula de tal forma que cambien de posición son despreciables, esto quiere decir en términos matemáticos que

$$M_n(x, t) = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{m_n(x, t, \tau)}{n!\tau} = 0 \quad \forall n \geq 3$$

Para un análisis más detallado de esta ecuación en términos ecológicos recomiendo ampliamente [50]⁶.

Así como la movilidad y la desviación dependen de $(x, t)^T$ (pueden ser constantes), también pueden hacerlo de la densidad u localmente. Este es el caso, por ejemplo, cuando se consideran individuos (partículas) con comportamiento gregario siguiendo la Ley de Fick.

Tanto (A.10) como (A.2) pueden generalizarse fácilmente para dimensiones superiores y también suponiendo que haya más de dos ($n \geq 2$) sustancias en interacción.

A continuación presento algunos ejemplos sencillos de ecuaciones de tipo reacción-difusión que se deducen directamente de las ecuaciones (A.10) y (A.2).

Los ejemplos

Ejemplo A.1. Una de las ecuaciones más importantes de la física matemática es, sin duda, la ecuación de calor⁷. Es posible deducirla haciendo uso de una ley fundamental en el estudio de procesos biológicos: la Ley de Fick⁸ y utilizando

⁵El signo de β indica la dirección de la desviación, es decir la dirección de la tendencia del conjunto de partículas (esto si se considera un gas por ejemplo).

⁶En algunas páginas he encontrado algunos errores de impresión, así que hay que tener cuidado en los detalles de las deducciones de las ecuaciones.

⁷Joseph Jean Baptiste Fourier (1807) en su tesis doctoral *Theoria analytique de la chaleur*, propone el primer marco matemático sobre la dinámica espacio-temporal que sigue el calor al propagarse. Concluye con su Ley de Fourier del calor: *El calor se propaga de sitios de alta temperatura hacia sitios donde la temperatura es menor.*

⁸Adolph Eugene Fick en 1855, estableció una analogía entre el flujo del calor y el correspondiente de sustancias las bases conceptuales de lo que se conoce como la Ley de Fick: *Las sustancias químicas se propagan de sitios de alta concentración hacia sitios de baja concentración.*

(A.2). Aunque históricamente, éste no fue el orden cronológico. En este caso dicha ecuación recibe el nombre de ecuación de reacción-difusión.

Considérese la situación en la que no hay fuentes, es decir $f(c, \mathbf{x}, t) \equiv 0$, y que el flujo de la sustancia es proporcional al gradiente de la misma $\mathbf{J} \sim -\nabla c$, entonces al sustituir en (A.2) se obtiene que c satisface la ecuación

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c,$$

donde D es una constante de proporcionalidad conocida como coeficiente de difusión.

Por supuesto que si se consideran n sustancias y términos de fuente, la ecuación correspondiente es

$$(A.11) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{D}\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t)$$

con $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$ el vector cuyas componentes son las respectivas concentraciones de las n sustancias químicas, \mathbf{f} el término vectorial de fuente y \mathbf{D} una matriz de coeficientes de difusión que puede ser o no diagonal, dependiendo si la difusión es isotrópica o no (véase [49]).

Haciendo uso también de la Ley de Fick, esto es considerando que no hay desviación ($\beta(x, t) = 0$) y que la movilidad es constante $\mu(x, t) = D$ y sumando un término de fuente a la ecuación (A.10), se obtiene de nueva cuenta la ecuación de reacción-difusión (A.11).

Ejemplo A.2. Si ahora se toma en cuenta que sí hay desviación $\beta(x, t) = v$, con la misma movilidad del ejemplo anterior en (A.10) y se suma un término reactivo correspondiente, se encuentra la ecuación de reacción-difusión con término advectivo que se estudia, en parte, en los capítulos tres y cuatro.

Es fácil observar que lo que se obtiene es la expresión siguiente

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -v \frac{\partial p}{\partial x} + D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + f(p, x, t),$$

El término $-vp_x$ indica un especie de *arrastre* de materia en la dirección de la velocidad \mathbf{v} cuya rapidez constante v empuja a una población de partículas en un determinado medio, por ejemplo se puede pensar en las moléculas de agua en un río poco profundo que viaja a una rapidez suficientemente pequeña (considerando que no se presenten vórtices) y constante. Dicho término es

conocido como término de *advección* o bien, término *convectivo* en un contexto termodinámico.

Si se considera, en (A.2), un flujo que depende de la concentración en estudio y del gradiente de ésta de la manera como se supone en [12], es decir

$$J_i = -D_i \nabla u_i + a_i u_i,$$

con D_i y a_i constantes para cada $i = 1, \dots, n$. En la forma vectorial se tiene

$$(A.12) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{D} \Delta \mathbf{u} - \nabla (\mathbf{a} \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{f}(\mathbf{u}, \mathbf{x}, t)$$

Ejemplo A.3. Como último ejemplo presentaré la ecuación de los medios porosos.

Considerando

1. La ecuación de estado $P = P_0 \rho^\alpha$ donde P es la presión, ρ representa la densidad y $\alpha > 1$ y P_0 son constantes.
2. La ecuación de continuidad (A.2) en la versión

$$(A.13) \quad k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = g(\rho),$$

donde k : es el coeficiente de porosidad y \mathbf{v} : es la velocidad.

3. La Ley de D'Arcy:

$$(A.14) \quad \nu \mathbf{v} = -\mu \nabla P,$$

con ν : la viscosidad y μ : la permeabilidad del medio.

Sustituyendo en (A.14) la ecuación dada en 1 y acto seguido haciendo lo correspondiente en (A.13), se encuentra la *ecuación de los medios porosos*

$$(A.15) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = \alpha \frac{\mu P_0}{k \nu} \nabla \cdot (\rho^\alpha \nabla \rho) + g(\rho) = \nabla \cdot (D(\rho) \nabla \rho) + g(\rho),$$

con $D(\rho) = \alpha \frac{\mu P_0}{k \nu} \rho^\alpha$. En [34] se hace una brevísima reseña de los modelos cuyo coeficiente de difusión depende de la densidad, ahí se expone que éstos son usados para modelar comportamientos gregarios de individuos pertenecientes a una misma población.

Hay que enfatizar que en la presente tesis se utilizan las ecuaciones (A.11) y (A.12) con el término reactivo sólo dependiendo de la concentración de las sustancias, es decir $\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u})$. En otras palabras, no se considera que las coordenadas espaciales y/o el tiempo influyen en las reacciones químicas que involucran a los procesos descritos. Además que, sólo se toman en cuenta dos sustancias y una sola dimensión espacial. Esto debido a la simplicidad de los cálculos y la similitud con los sistemas físicos que modelan.

Tanto (A.11) como (A.12) son generalizaciones de las que se estudian en el presente trabajo.

Apéndice B

La Teoría de Floquet

Los procesos oscilatorios aparecen en muchos sistemas físicos. Cuando éstos se modelan matemáticamente, a menudo su planteamiento conduce a sistemas no lineales de ecuaciones diferenciales que pueden ser autónomos o no autónomos. Aunque la fenomenología constituye una guía para la búsqueda de condiciones que impongan comportamiento de naturaleza oscilatoria, el resultado del análisis de aquéllos suele dar también mucha información para su estudio. A continuación se exponen algunos ejemplos.

B.1. Motivaciones

Ejemplo B.1. El movimiento de un péndulo simple donde existe una fuerza externa que obliga, a priori, un movimiento vertical de naturaleza oscilatoria en la base (el extremo donde se sujeta el cordel al techo), conduce a que la ecuación que modela tal movimiento para oscilaciones suficientemente pequeñas ($\lesssim 15^\circ$) es la siguiente

$$(B.1) \quad l\ddot{\theta} + (g - \ddot{\Omega}(t))\theta = 0,$$

donde g es la aceleración debida a la atracción terrestre, l la longitud del cordel del péndulo, θ el ángulo respecto a la vertical y $\Omega(t)$ representa la fuerza de constricción de periodo T . La ecuación (B.1) es conocida como la ecuación de Hill.

Ejemplo B.2. Otro ejemplo en el que se encuentra una ecuación similar es el estudio de la ecuación de Duffing

$$\ddot{x} + x + \epsilon x^3 = A \cos t,$$

que bien puede modelar un resorte que presente histéresis y que además esté forzado de forma periódica. Utilizando métodos asintóticos (véase [54]) se encuentra que a fin de obtener aproximaciones a la solución a cierto nivel, hay que resolver la ecuación de Mathieu (un caso particular de la ecuación de Hill)

$$\xi'' + (\alpha + \beta \cos \tau) \xi = 0$$

Ejemplo B.3. El crecimiento de una población de hembras cuya densidad al tiempo t se denota por H y de machos M respectivamente, de alguna especie de aves es posible modelarlo por medio de un sistema lineal no autónomo de ecuaciones diferenciales cuya matriz asociada es periódica, siempre y cuando sólo se considere el apareamiento durante una temporada al año, no haya depredadores y el alimento sea ilimitado. Dicho sistema es el que a continuación se escribe

$$\begin{pmatrix} \dot{M} \\ \dot{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\kappa & \mu(t) \\ \mu(t) & -\kappa \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M \\ H \end{pmatrix},$$

donde κ es la razón de crecimiento de las aves y $\mu(t)$ es la razón de apareamiento. Debido a las hipótesis se supone la siguiente función

$$\mu(t) = \begin{cases} \delta & \text{si } 0 < t \leq \epsilon \\ 0 & \text{si } \epsilon < t \leq T \end{cases},$$

donde T es el periodo.

B.2. Los resultados

La solución de ecuaciones como las que se exponen en los ejemplos pueden ser o no periódicas. Por ejemplo en la ecuación

$$(B.2) \quad \dot{y} = (1 + \sin t)y,$$

a pesar de que el coeficiente $1 + \sin t$ es de periodo 2π , sus soluciones $\phi(t) = Ke^{t - \cos t}$ no lo son. Para ecuaciones diferenciales de las que (B.2) es sólo un caso particular, se cuenta con un resultado que da condiciones necesarias y suficientes para que sus soluciones sean periódicas. Este es asegurar la

periodicidad de soluciones en ecuaciones del tipo (en una dimensión) $\dot{x} = p(t)x$ con $p(t) = p(t + T)$ es necesario que se cumpla

$$\overline{p(t)} = \frac{1}{T} \int_0^T p(s) ds = 0.$$

No obstante este resultado, el problema general que se plantea es: dado un sistema no autónomo

$$(B.3) \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{A}(t)\mathbf{x},$$

donde \mathbf{A} es una matriz cuyas entradas son todas funciones reales de variable real, periódicas y del mismo periodo T i.e. \mathbf{A} satisface $\mathbf{A}(t+T) = \mathbf{A}(t) \forall t \in \mathbb{R}$, ¿bajo qué condiciones las soluciones de (B.3) son periódicas de periodo T ?

La *Teoría de Floquet* plantea cuando y cuando no habrá soluciones periódicas en sistemas de ecuaciones diferenciales¹ cuya matriz asociada es periódica. No sólo es de utilidad en este aspecto sino que además da herramientas para estudiar tales sistemas.

En este apéndice, haré un resumen de los resultados más importantes. En la presentación con frecuencia se hará uso de las propiedades de las matrices fundamentales de un sistema lineal así como de la fórmula de Abel².

Considérese $\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$ y una matriz $\mathbf{A}(t) \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$ tal que $\mathbf{A}(t + T) = \mathbf{A}(t)$ con $t \in \mathbb{R}$ y el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (B.3).

Puede probarse que si $\mathbf{M}(t)$ es una matriz fundamental del sistema (B.3) entonces $\mathbf{M}(t + T)$ también es matriz fundamental del mismo sistema.

Una de las características de las matrices fundamentales es que existe \mathbf{C} no singular tal que $\mathbf{M}(t + T) = \mathbf{M}(t)\mathbf{C}$, entonces si $\mathbf{M}(0) = \mathbf{I}$ existe una matriz \mathbf{B} tal que $\mathbf{C} = e^{T\mathbf{B}}$

$$(B.4) \quad \Rightarrow \mathbf{M}(T) = e^{T\mathbf{B}}$$

Una vez hecho esta identificación se enuncia el primer teorema.

¹Recuérdese que una ecuación diferencial de orden n es posible escribirla como un sistema de n ecuaciones diferenciales.

²Si $\mathbf{M}(t) \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$ solución de (B.3) con $\mathbf{A}(t)$ no necesariamente periódica, se satisface

$$\det(\mathbf{M}(t)) = \det(\mathbf{M}(t_0)) \exp \left(\int_{t_0}^t \text{Tr}(\mathbf{A}(s)) ds \right)$$

Teorema B.1 (Floquet primera versión). *Sea $\mathbf{A}(t) \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$ continua y periódica y $\mathbf{M}(t)$ una matriz fundamental de (B.3). Entonces existe una matriz periódica no singular $\mathbf{P}(t)$ con periodo mínimo T y una matriz constante³ \mathbf{B} tal que*

$$\mathbf{M}(t) = \mathbf{P}(t)e^{\mathbf{B}t}$$

Demostración. Se toma una matriz fundamental del sistema (B.3), una matriz \mathbf{B} definida en (B.4) y se define $\mathbf{P}(t) = \mathbf{M}(t)e^{-\mathbf{B}t} \forall t \in \mathbb{R}$.

Como puede observarse el determinante de la matriz $\mathbf{P}(t)$ es distinto de cero para todo tiempo t , es decir

$$\det(\mathbf{P}(t)) = \det(\mathbf{M}(t)) \det(e^{-\mathbf{B}t}) \neq 0,$$

esto quiere decir que $\mathbf{P}(t)$ es no singular. Si se muestra que ésta tiene periodo T se concluye la prueba. Esto ocurre pues

$$\mathbf{P}(t+T) = \mathbf{M}(t+T)e^{-\mathbf{B}(t+T)} = \mathbf{M}(t)e^{\mathbf{B}T}e^{-\mathbf{B}(t+T)} = \mathbf{P}(t) \forall t \in \mathbb{R}.$$

□

Si las matrices $\mathbf{P}(t)$ y \mathbf{B} fuesen conocidas, el Teorema B.1 es de gran ayuda para transformar (B.3) en otro sistema cuya matriz asociada sea constante, como se ve a continuación.

Sea $\mathbf{x} = \mathbf{P}(t)\mathbf{u}$ con $\mathbf{P}(t+T) = \mathbf{P}(t)$. Usando el Teorema B.1 se satisface

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{P}(t)e^{\mathbf{B}t}) &= \dot{\mathbf{P}}(t)e^{\mathbf{B}t} + \mathbf{P}(t)\mathbf{B}e^{\mathbf{B}t} = \mathbf{A}(t)\mathbf{P}(t)e^{\mathbf{B}t} \\ \Rightarrow \dot{\mathbf{P}}(t) &= \mathbf{A}(t)\mathbf{P}(t) - \mathbf{P}(t)\mathbf{B}, \end{aligned}$$

sustituyendo en (B.3) y tomando en cuenta que $\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{P}}(t)\mathbf{u} + \mathbf{P}(t)\dot{\mathbf{u}}$ se encuentra que

$$\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{B}\mathbf{u},$$

el cual es posible resolver fácilmente. Cabe hacer notar que el cálculo de las matrices $\mathbf{P}(t)$ y \mathbf{B} no es inmediato.

A continuación una segunda versión del Teorema B.1.

Teorema B.2 (Floquet segunda versión). *Sea el sistema (B.3), entonces tiene al menos una solución no trivial $\mathbf{x} = \mathbf{f}(t)$ tal que $\mathbf{f}(t+T) = \mu\mathbf{f}(t) \forall t \in \mathbb{R}$.*

³Si \mathbf{A} es constante, entonces $\mathbf{P}(t) = \mathbf{I}$ y $\mathbf{B} = \mathbf{A}$.

Demostración. Tómesese una matriz fundamental de (B.3) y, de nueva cuenta, se construye una matriz \mathbf{C} como en (B.4), entonces eligiendo convenientemente⁴ $t = t_0$ se encuentra que $\mathbf{C} = \mathbf{M}^{-1}(t_0)\mathbf{M}(t_0 + T)$.

Sea μ un valor propio de \mathbf{C} , entonces $\det(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I}) = 0$. Sea \mathbf{m} el vector propio correspondiente a μ , esto implica que se satisface $(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I})\mathbf{m} = \mathbf{0}$. Sea $\mathbf{x} = \mathbf{M}(t)\mathbf{m} = \mathbf{f}(t)$ que por construcción es solución de (B.3). Por tanto

$$\mathbf{f}(t + T) = \mathbf{M}(t + T)\mathbf{m} = \mathbf{M}(t)\mathbf{C}\mathbf{m} = \mathbf{M}(t)\mu\mathbf{m} = \mu\mathbf{f}(t) \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

□

Observación B.1. *En el caso que $\mu = 1$ se tiene que al menos una solución de (B.3) es periódica. En el caso del ejemplo B.3, las aves se reproducen periódicamente si $\kappa T = \epsilon\delta$. Es decir, si el cociente entre la razón de crecimiento de las aves y la razón de apareamiento es igual al cociente entre el tiempo de apareamiento ϵ y el periodo.*

A continuación, tres definiciones.

Definición B.1. Los valores μ son llamados *multiplicadores de Floquet* de (B.3) o *números característicos* del sistema (B.3).

Definición B.2. Una solución de (B.3) que satisface la conclusión del Teorema B.2 es conocida como *solución normal*.

Definición B.3. El *exponente característico* ρ de (B.3) se define como $e^{\rho T} = \mu$ tomando la rama principal del logaritmo $-\pi \leq \arg \rho < \pi$.

Pareciera natural suponer que los multiplicadores de Floquet dependen de la elección de la matriz fundamental, esto debido a cómo se construye la matriz \mathbf{C} (véase (B.4)). El siguiente teorema establece que este hecho es irrelevante.

Teorema B.3. *Los multiplicadores de Floquet son independientes de la elección de la matriz fundamental $\mathbf{M}(t)$.*

Demostración. El teorema queda demostrado si encontramos que, para dos matrices fundamentales de (B.3), los multiplicadores de Floquet son iguales.

⁴Las matrices fundamentales no son únicas, por tanto es posible elegir $t = t_0$.

Entonces tómense dos matrices fundamentales $\mathbf{M}_1(t)$ y $\mathbf{M}_2(t)$ de (B.3). Luego, existe una matriz constante no singular \mathbf{K} tal que $\mathbf{M}_1(t) = \mathbf{M}_2(t)\mathbf{K}$ y

$$\Rightarrow \mathbf{M}_1(t+T) = \mathbf{M}_2(t+T)\mathbf{K} = \mathbf{M}_2(t)\mathbf{C}\mathbf{K} = \mathbf{M}_1(t)\mathbf{K}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{K} = \mathbf{M}_1(t)\mathbf{D}.$$

Ahora, para calcular los valores propios μ de \mathbf{D} es necesario considerar que $\mathbf{K}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{K} - \mu\mathbf{I} = \mathbf{K}^{-1}(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I})\mathbf{K}$ y las propiedades de los determinantes. Es decir

$$\det(\mathbf{D} - \mu\mathbf{I}) = \det(\mathbf{K}^{-1}) \det(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I}) \det(\mathbf{K}) = \det(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I}),$$

la última igualdad viene del hecho que $\det(\mathbf{X}) \in \mathbb{R}$.

El determinante de \mathbf{D} es cero sí y sólo si el determinante de \mathbf{C} se anula.

$\therefore \mathbf{D}, \mathbf{C}$ tienen los mismo valores propios.

□

Por último, demostraré un teorema que exhibe una propiedad interesante y a la vez útil de los multiplicadores de Floquet.

Teorema B.4. Sean μ_1, \dots, μ_n los multiplicadores de Floquet de (B.3), entonces

$$\mu_1 \cdots \mu_n = \exp \left(\int_0^T \text{Tr}(\mathbf{A}(s)) ds \right)$$

Demostración. Tómense una matriz \mathbf{C} definida de igual manera que en (B.4), entonces su polinomio característico es

$$Q_n(\mu) = \det(\mathbf{C} - \mu\mathbf{I}),$$

donde debido al Teorema fundamental del álgebra y considerando la hipótesis, se tiene

$$Q_n(\mu) = (\mu_1 - \mu) \cdots (\mu_n - \mu),$$

evaluando en $\mu = 0$ se llega a

$$\mu_1 \cdots \mu_n = Q_n(0) = \det(\mathbf{C}) = \det(\mathbf{M}(T)),$$

y, por la fórmula de Abel, se concluye la prueba.

□

Bibliografía

Artículos

- [1] D'Arcy W. Thompson, *On Growth and Form*, Cambridge University Press, 2000.
- [2] A. M. Turing, *The Chemical Basis of Morphogenesis*, Phil. Trans. R. Soc. Lond., **B237**, 37-72 (1952).
- [3] Ohgiwari, M., Matsushita, M. and Matsuyama, T., *Morphological Changes in Growth Phenomena of Bacterial Colony Patterns*, J. Phys. Soc. Jpn., **61**, 816-822 (1992).
- [4] R. A. Satnoianu, P. K. Maini and M. Menzinger, *Parameter space analysis, pattern sensitivity and model comparison for Turing and stationary flow-distributed waves (FDS)*, Physica D, **160**, 79-102 (2001).
- [5] T. Leppanën, *Theory of Turing pattern formation* por aparecer en el libro *Current Topics in Physics*, Imperial College Press, 2004.
- [6] Segel L. A. and Jackson J. L., *J. theor. Biol.*, **37**, 545-559 (1972).
- [7] U. Timm and A. Okubo, *J. Math. Biol.*, **30**, 307-320 (1992).
- [8] Fernández I., García J. L. and Pacheco J. M., *Bifurcations and Turing Instabilities in Reaction-Diffusion Systems with Time-dependent Diffusivities.*, Departamento de Matemáticas, Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.
- [9] Jonathan A. Sherrat, *J. Math. Biol.*, **33**, 293-333 (1995).
- [10] Jang, S. R.-J., *J. Math. Biol.*, **44**, 129-149 (2002).

-
- [11] J. A. Sherrat, *J. Math. Biol.*, **33**, 295-308 (1993).
- [12] A. J. Perumpanani, J. A. Sherrat and P. K. Maini, *IMA Journal of Applied Mathematics*, **55**, 19-33 (1995).
- [13] M. C. Cross, P. C. Hohenberg *Reviews of Modern Physics*, **65**, number 3, 851-1086 (2003).
- [14] F. Triozon, S. Roche, A. Rubio and D. Mayou, *Phys. Rev. B*, **69**, (2004).
- [15] R. de Coss, G. Murrieta and P. Castro, *Effect of Weather cycles on chloride diffusion in porous concrete.*, Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV-IPN, Unidad Mérida, Yucatán, México.
- [16] J. Javier Brey, M. J. Ruiz-Montero, R. García-Rojo and James W. Dufty, *Physical Review E*, **60**, number 6, 1999.
- [17] J. J. Brey, J. W. Dufty, C-S. Kim and A. Santos, *Phys. Rev. E*, **58**, 4638 (1998).
- [18] J.J. Brey, J.W. Dufty, and A. Santos, *J. Stat. Phys.*, **97**, 281 (1999).
- [19] J.J. Brey, J.W. Dufty, and A. Santos, *J. Stat. Phys.*, **87**, 1051 (1997).
- [20] V. Garzo and J. W. Dufty, *Phys. Rev. E*, **59**, 5895 (1999).
- [21] S. Pal, G. Srinivas, S. Bhattacharyya and B. Bagchi, *Journal of Chemical Physics*, **116**, number 14, 5941-5950, (2002).
- [22] Q.-H. Wei, C. Bechinger, and P. Leiderer, *Science* **287**, 625 (2000).
- [23] D. W. Jepsen, *J. Math. Phys.* **6**, 405 (1965).
- [24] J. L. Lebowitz and J. K. Percus, *Phys. Rev.* **155**, 122 (1967); J. L. Lebowitz, J. K. Percus, and J. Sykes, *ibid.* **171**, 224 (1968).
- [25] M. Bishop, M. Derosa, and J. Lalli, *J. Stat. Phys.* **25**, 229 (1981).
- [26] K. Hahn and J. Kärger, *J. Phys. Chem.* **100**, 316 (1996).
- [27] B. Bagchi and S. Bhattacharyya, *Adv. Chem. Phys.* **116**, 67 (2001).
- [28] L. Sjogren and A. Sjolander, *J. Phys. C* **12**, 4369 (1979).

-
- [29] G. Srinivas and B. Bagchi, *J. Chem. Phys.* **112**, 7557 (2000).
- [30] J. J. Brey, M. J. Ruiz-Montero and R. García-Rojo, *Phys. Rev. E*, **60**, number 6 (1999).
- [31] E. Falck, J. M. Lahtinen, I. Vattulainen and T. Ala-Nissila, *Eur. Phys. J. E* **13**, 267–275 (2004).
- [32] R. Plaza, F. Sánchez-Garduño, P. Padilla, R. A. Barrio and P. K. Maini, *Journal of Dynamics and Differential Equations*, **16**, number 4, (2004).
- [33] F. Sánchez-Garduño y P. Padilla, *Autoorganización y excitabilidad en algunos sistemas complejos*, por aparecer en ciencias.
- [34] F. Sánchez-Garduño, *Recent Res. Devel. Ecol.*, **1**, 115-127, (2001).
- [35] F. Sánchez-Garduño: Dinámica espacio-temporal de un modelo para tres especies: dos mutualistas y un depredador. Trabajo en preparación.
- [36] P. Prusinkiewicz, *Modeling and Visualitation of Biological Structures*, Department of computer Science, University of Calgary, Calgary, Alberta, Canada.
- [37] J. Tanner, *Journal of Chemical Physics*, **69**, (1978).
- [38] Lawrence L. Latour, Karel Svodoba, Partha P. Mitra y Christopher H. Sotak, *Time-dependent diffussion of water in a biological model system*, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **91**, pp: 1229-1233 (1994).
- [39] Stejskal, E. and Tanner, J. E. *J. Chem. Phys.*, **42**, 288-292 (1965).
- [40] Maxwell, J. C. *Treatise on Electricity and Magnetism*, Dover, New York, 1873.
- [41] Sen, P. N., Scala, C. and Cohen, M. H. *Geophysics*, **46**, 781-795 (1981).
- [42] N. J. Navill and P. Hogeweg, *J. theor. Biol.*, **184**, 229-235, (1997).
- [43] O. A. Igoshin, R. Welch, D. Kaiser and G. Oster, *PNAS*, **101**, number 12, 4256-4261, (2004).

- [44] T. Leppanën, M. Karttunen, K. Kaski and R. A. Barrio, *Prog. Theor. Phys. (Suppl.)*, **50**, 367, (2003).
- [45] G. del Muro, *Dinámica de algunos mutualistas*, Tesis Profesional, Facultad de Ciencias, UNAM, 2004.
- [46] P. De Kepper, V. Castets, E. Dulos, J. Boissonade, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, **49**, 161-169, (1991).
- [47] Shigeru Kondo and Rihito Asai, *Nature*, **376**, 765-768, (2002).

Libros

- [48] J. D. Murray, *Mathematical Biology I: An introduction*, Springer-Verlag, Third Edition, 2002.
- [49] J. D. Murray, *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*, Springer-Verlag, Third Edition, 2002.
- [50] A. Okubo and S. A. Levin, *Diffusion and Ecological Problems: Modern Perspectives*, Springer-Verlag, Second Edition, 2001.
- [51] S. Wiggins, *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, Springer-Verlag, 1990.
- [52] Morris W. Hirsch, Stephen Smale and Robert L. Devaney, *Differential Equations, Dynamical Systems and an introduction to Chaos.*, second edition, Elsevier Academic Press, 2004.
- [53] F. Brauer and J. A. Nohel, *Qualitative theory of ordinary differential equations*, W. A. Benjamin, 1969.
- [54] D. W. Jordan and P. Smith, *Nonlinear ordinary differential equations: An introduction to dynamical systems*, Third edition, Oxford University Press, 1999.
- [55] D. K. Arrowsmith and C. M. Place, *An introduction to Dynamical Systems*, Cambridge University Press, 1990.

-
- [56] L. Esteva, M. Falconi (compiladores) *Biología Matemática: Un enfoque desde los sistemas dinámicos*. Las prensas de Ciencias, 2002.
- [57] Lars V. Ahlfors, *Complex Analysis: An Introduction to the Theory of Analytic Functions of One Complex Variable*, Third edition, McGraw-Hill International Company, 1979.
- [58] Reinhold Remmert, *Theory of complex Functions*, English edition, Springer-Verlag, 1991.
- [59] Garabedian, P., *Partial Differential Equations*, John Wiley and Sons, Inc., 1964.
- [60] Joseph H. Spurk and Katherine Mayes, *Fluid Mechanics*, Springer-Verlag, 1997.