



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**“ESTUDIOS EN SISTEMAS DE
REACCIÓN-DIFUSIÓN CON DIFUSIÓN
ANÓMALA”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

DAMIÁN HERNÁNDEZ HERRÁN

DIRECTOR DE TESIS: DR. RAFAEL BARRIO PAREDES

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DRA. CARMEN VAREA GILABERT

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTORAL: DRA. JULIA TAGÜEÑA PARGA



posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

2009

A mi madre.

A mi Abuela.

A mis padres Jorge y David.

A mis hermanos Roman y Leo.

A los amigos.

A la UNAM.

Agradecimientos.

A Rafael Barrio, por haberme introducido en este tema, por todas las oportunidades de desarrollo (tanto personal como académico) que gracias a él se dieron a lo largo de mi doctorado. Por su paciencia (se que aveces puedo ser muy terco) y la confianza que depositó en mí. Por su tiempo y por la libertad que me dio para el desarrollo de este trabajo.

A Carmen Varea, por su paciencia en general, pero particularmente por su paciencia en las explicaciones con todo lo referente a los cálculos numéricos, ya que mi torpeza en este asunto lo hacía un trabajo difícil.

A Julia Tagüeña, por su disposición a ayudarme y sus valiosos comentarios.

A David Romeu, por presentarme el mundo de la ciencia, por las muchas explicaciones y por el cariño con que lo hacía. Por siempre estar dispuesto a ayudarme, por una de las mejores clases de física que he tenido, y en general por su impecable ejemplo.

A Denis Boyer, por tener siempre su puerta abierta, por su disposición a ayudar, por su tiempo y sus valiosos comentarios.

A Pablo Padilla, Pedro Miramontes, Faustino Sanchez y Leonardo Dagdug, por el tiempo que dedicaron en leer este trabajo, por sus correcciones y comentarios.

A Jorge Ize, por ser un gran maestro, por su dedicación.

A Yanalte Herrero, por su alegría, su amistad y por la mucha ayuda que me dio a lo largo de estos años.

A Rosa, por su ayuda y paciencia.

A Manuel Torres, por su apoyo.

A mi madre, por que a ella le debo todo, por que sin ella esto nunca hubiera sido posible. Por su cariño incondicional, su ayuda, su sabiduría y su ejemplo.

A mi padre, por siempre estar ahí, por su gran ejemplo, su entereza, su apoyo y su cariño.

A mi tía Vicky, por su ayuda, por su cariño incondicional y su confianza.

A Roman, por su ejemplo de incorruptibilidad y libertad de ser, por todos los momentos, buenos y malos, que hemos compartido, por nuestro encuentro en Europa y por ser un excelente roommate.

A Leo, por ser parte de mi familia además de un gran amigo. Por las fiestas, los viajes, Yacatas, en fin por los viejos y los nuevos tiempos.

A mis hermanos, Mariana, Joaquina y Santiago, por el placer de convivir con ustedes.

A Almendra, María y Mónica, por su apoyo y cariño.
A mi tío JÓse, por su cariño, su apoyo y por siempre estar ahí.
A mis tíos Begoña y Jorge, y a mis primos, Mariana, Rodrigo y Juan Pablo, por los buenos momentos que he pasado con ustedes.
A Lourdes y Alvaro, por tratarme como parte de su familia, por sus palabras de apoyo y de motivación, por las pláticas y los buenos momentos que he tenido gracias a ustedes.
A Marisa y Erik, por su cariño y su presencia durante todos estos años.
A Fer, por su presencia en este último año, por su cariño y ternura, por su apoyo y por los increíbles momentos que he vivido junto a ella. Por ser una de las personas más lindas y valiosas que he conocido.
A Jorge (viejo), por la amistad de tantos años, por su ejemplo e inquebrantable honestidad, por su cariño. Por ser una de las personas más nobles que he conocido.
A Paolita, por su amistad y cariño, por las muchas pláticas, las chelas, los buenos y los malos momentos, por su increíble sabiduría y su impresionante coraje.
A Toñito, por la época Copilquera, por las cáscaras y los billares, los viajes, las chelas y los toquines. Por todos los paros que me ha hecho. En fin, por su gran amistad y su cariño.
Al Bouls, por los jueves cheleros (o eran miercoles?), y por todas las aventuras que vivimos juntos, por su cariño y su amistad.
Al Abuelo, por todo lo que vivimos, porque siempre he contado con él, por su amistad, su confianza y por la alegría que proyecta.
Al Villa, por su ejemplo de autenticidad, por su cariño, su amistad y su buen humor.
A Santiago, por los muchos años de amistad y por todo lo que hemos compartido.
A Susana, por su magia, su increíble amistad, su sabiduría, sus consejos y todas las cosas que he vivido con y a través de ella. Por su cariño y su importante presencia en mi vida.
A Jazmin, por el cariño con que ha tratado a las personas que quiero y a mi familia. Por su amistad y su gran actitud hacia todo, especialmente por el PANIC ATTACK.
A Ale, por su originalidad, por no creer en la cuántica y por diferir sin ganas de hacerlo, o simplemente por diferir como deporte. Por su cariño y su invaluable amistad, por las peleas y los reencuentros, por la unidad y las grandes pláticas que tuvimos en ella. Por los seciones enajenantes de violencia y des-

trucción.

A Mariano (...UTIII!!!), por tantos años de trabajar juntos, por ser una de las personas que más me han hecho reír en mi vida, por su ejemplo, sinceridad y su gran manera de ser. Por la mucha ayuda que me dio a lo largo de estos años tanto en lo académico como en lo personal, por la Pedro, los viajes, los laboratorios y sus gritos debrayados (Luuuz!!, Kaku!! etc.).

A Amanda, por su cariño y sus grandes consejos, porque trabajar con ella siempre fue una motivación, por la diversión y los buenos momentos que me ha dado. Por los Sanborn's (ni modo lo tuve que decir!).

A Ayari, por su gran amistad, por todo lo que hemos vivido, porque (aunque me lo reclame) me consiente, porque siempre he sentido cariño y apoyo de su su parte, por ser una gran anfitriona.

A Rafa, por su amistad y los buenos momentos del vecinismo. Por las multiples chelas, discusiones y viajes que hemos compratido. Por la pajarera y por ser un gran anfitrión.

Al Gallo, por su amistad y las historias que compartimos. Por las pláticas y su cariño.

Al Octavius, por su amistad y porque tuvo mucho que ver en mi acercamiento a los sistemas complejos.

A Mane, por las discusiones, trabajos y regaños que hemos compartido. Por los buenos momentos que hemos pasado.

A Emiliano, Masaya, Victor, Laura, Bárbara, Rodrigo, Ramón, Natalia, Alan, Ferrán, por el gran placer de aprender y convivir con ustedes todos estos años.

A Brisa, por todo lo que me enseñó, por su cariño, por todo lo que vivimos, porque siempre ha sido una fuente de alegría y motivación, por ser una de las personas más increíbles que he conocido.

A Alejandra, por las buenas pláticas en el cubículo y por todas las veces que me echó la mano en cuestiones computacionales.

Al IFUNAM, por brindarme un espacio de trabajo durante la realización de este proyecto.

A Conacyt, por el apoyo económico.

A la Facultad de Ciencias, por todo lo que ofrece, por su gente y porque ahí pase algunos de los mejores momentos de mi vida.

A la UNAM, por todo lo que me dio en estos últimos años y por todo lo que representa.

Índice general

1. Introducción	11
2. Estructuras disipativas	15
3. Reacciones químicas y difusión.	20
3.1. La ley de acción de masas.	21
3.2. Sistemas de Reacción Difusión.	25
3.2.1. Distintos Modelos de Reacción-Difusión	27
3.3. La inestabilidad de Turing.	31
4. Difusión anómala.	37
4.1. Difusión normal y el teorema del límite central.	39
4.2. CATC y la ecuación de difusión generalizada.	44
4.2.1. Superdifusión	55
4.2.2. Subdifusión	60
5. Cálculo fraccionario.	65
5.1. Derivación e integración de orden arbitrario.	66
5.2. Transformadas de Fourier y Laplace para operadores de orden arbitrario.	73
5.2.1. Ecuación de valores propios.	76
6. Sistemas de reacción-difusión generalizados.	82
6.1. Sistemas generalizados con subdifusión.	83
6.2. Modelo BVAM con subdifusión	99
7. Propagación de ondas en sistemas generalizados con cinéticas biestables.	108
7.1. Frentes en presencia de difusión normal.	109

7.2. Frentes en presencia de superdifusión.	113
7.3. Frentes en presencia de subdifusión.	124
8. Propagación de ondas en el Modelo BVAM en el régimen biestable.	130
8.1. Dinámica en una dimensión	135
8.2. Dinámica en dos dimensiones	141
9. Resumen y conclusiones	146
A. Teorema del Límite Central	151
B. Teorema del Límite Central Generalizado	155
C. Funciones de Mittag-Leffler.	158
D. Condiciones de Turing en el espacio Fourier-Laplace para $\alpha = \beta = 1$.	161

Capítulo 1

Introducción

Algunas de las preguntas más intrigantes de la ciencia son: ¿cómo nacen las formas en la naturaleza? ¿cómo es que un conjunto de entidades, ya sean partículas, moléculas, seres humanos, etc., que interactúan entre sí, pueden organizarse formando estructuras cuya extensión excede por mucho las dimensiones de dichos seres y de sus interacciones? ¿cómo es que aún cuando las condiciones a las que se encuentran sujetos dichos conjuntos, no exhiben ninguna estructura espacial ni temporal o ninguna influencia externa que defina una dirección o introduzca una escala, éstos logran tener comportamientos periódicos, cuasiperiódicos e incluso caóticos en el espacio y en el tiempo? ¿cómo logran desarrollar estructuras espaciales con escalas bien definidas? La mayoría de las respuestas a estas preguntas son desconocidas, aunque se han encontrado respuestas parciales y en algunos casos respuestas sólidas a algunas de ellas. En particular podemos mencionar a los sistemas físicos que se encuentran cerca del equilibrio termodinámico, ya que en este caso pueden ser descritos por un número relativamente pequeño de variables macroscópicas independientes, cuya evolución está determinada por la minimización de cantidades tales como la producción de entropía [1, 2] o la energía libre, lo cual tiene como consecuencia que el estado final de su evolución temporal sea generalmente único y estacionario.

El hecho que en los conjuntos o sistemas mencionados aparezcan las clases de fenómenos anteriormente descritos, sugiere fuertemente que la dinámica bajo la cual evolucionan es *no lineal*. Los efectos más importantes y dramáticos que tiene la no linealidad en la evolución de éstos, aparecen cuando se encuentran lejos del equilibrio termodinámico, causa por la cual el comportamiento de un sistema físico es generalmente más complicado tanto

espacial como temporalmente conforme se aleja de dicho estado. Por ejemplo, cuando podemos asociar a esta clase de equilibrio características como la homogeneidad e isotroía del espacio y la homogeneidad del tiempo¹, cualquier sistema que esté en o cerca de dicho estado termodinámico, tiene que experimentar rompimientos sucesivos de las simetrías que lo caracterizan para adquirir los comportamientos complicados típicos de los sistemas fuera de equilibrio [2]. Dichos rompimientos de simetría son espontáneos en el sentido en el cual, la dinámica del sistema no cambia su forma explícita y son solamente consecuencia de la naturaleza no lineal de su evolución, ya que lo único que cambia en la descripción de los distintos estados en los que se encuentra, es el valor de uno o varios parámetros que sirven como medida de la interacción del sistema con el mundo exterior.

Cuando un sistema está lejos del equilibrio, puede suceder que su evolución temporal no esté determinada por la minimización de la energía libre, ya que en estos casos es común que dichas cantidades no existan, es decir, en ciertos casos no existe una función (funcional) de cuya derivada se obtenga la dinámica, y para los casos en los que existe, no asegura la unicidad del estado final del sistema, ya que estos potenciales pueden tener además de un valor mínimo global, mínimos locales². Por lo tanto, en dichas situaciones la evolución del sistema está determinada por las condiciones iniciales y por su interacción con el mundo exterior.

De lo dicho anteriormente, los sistemas físicos que aquí nos interesan, aunque compuestos por muchas unidades independientes que interactúan entre sí, pueden ser descritos por pocas variables macroscópicas, tales como el volumen, la temperatura, presión, número de partículas etc., por lo tanto podemos estudiarlos mediante ecuaciones de evolución relativamente sencillas que capturen sus características esenciales, tales como los diferentes tipos de rompimientos de simetría que suceden al variar parámetros que pueden ser controlados experimentalmente. Como ejemplo podemos mencionar los sistemas químicos en los que la difusión juega un papel importante. Estos sistemas se conocen como sistemas de *reacción-difusión*, y fue hasta 1952 cuando el matemático inglés Alan Turing [3], se dio cuenta que podían servir, entre otras cosas, como un modelo para explicar la aparición de las estructuras espaciales características de un embrión en desarrollo. Desde la publicación de este importante artículo, los sistemas de reacción-difusión se han utilizado

¹Sistemas invariantes ante traslaciones espaciales y temporales de cualquier tamaño.

²Estados metaestables.

para modelar la formación de patrones y en general el desarrollo de estructuras espacio-temporales coherentes en química [4, 5], biología [6, 7], física [8], ecología [7, 9] etc.

La motivación de esta tesis es estudiar de manera teórica el comportamiento de los sistemas de reacción-difusión cuando la difusión es anómala, es decir cuando la distancia al cuadrado promedio recorrida por la sustancia que se difunde, no crece de forma lineal en el tiempo. En particular se enfoca en los fenómenos de formación de patrones y propagación de ondas químicas, fenómenos donde la difusión juega un papel central. La razón de nuestro estudio, es que la manera tradicional de modelar la difusión hace muchas suposiciones acerca del medio donde ésta se lleva a cabo, en particular la homogeneidad e isotropía del espacio y las propiedades estocásticas específicas que tienen como consecuencia el movimiento difusivo. Dichas suposiciones hacen que los modelos de reacción-difusión sean poco realistas para la descripción de reacciones químicas en medios desordenados y en medios fuera del equilibrio termodinámico, características típicas de muchos sistemas físicos y biológicos [10, 11, 12].

La forma de modelar la difusión anómala es mediante derivadas fraccionarias y ecuaciones de difusión generalizadas. Las derivadas fraccionarias son operadores integro-diferenciales que se pueden ver como una generalización del concepto de derivada. Dichos operadores dependen de un parámetro que puede variar de manera continua y se reducen a los operadores diferenciales típicos cuando éste es un número entero. Para dar una idea de a qué nos referimos, podemos pensar en una función que pueda ser expresada como una serie de Fourier,

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} C_k e^{ikx}.$$

Al derivar dicha función n veces, obtenemos

$$\frac{d^n}{dx^n} f(x) = \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} (ik)^n C_k e^{ikx}.$$

Por otro lado, si en la ecuación anterior sustituimos n por un número real arbitrario γ , vemos que el lado derecho de la ecuación está bien definido, pero ¿qué significa hacer dicha sustitución del lado izquierdo? Si definimos un operador lineal D^γ que cumpla con $D^\gamma e^{ikx} = (ik)^\gamma e^{ikx}$, entonces podemos

escribir

$$D^\gamma f(x) = \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} (ik)^\gamma C_k e^{ikx},$$

por lo tanto, si comparamos las últimas dos ecuaciones, vemos que D^γ se puede pensar como una generalización del operador de diferenciación normal, ya que además se reduce a una derivada de orden n cuando $\gamma = n$, con n un número natural. La forma explícita y las propiedades que este tipo de derivadas generalizadas deben cumplir, se comenzaron a estudiar desde los tiempos de Leibniz, y su definición y formalización se llevo a cabo por muchos matemáticos, entre los cuales podemos mencionar a Laplace, Fourier, Liouville y Riemann. Pero no fue hasta mucho después cuando la gente se dio cuenta que podían servir para modelar muchos fenómenos físicos reales, en particular en la década de los años 90, se descubrió que servían para describir el comportamiento difusivo de algunas cantidades físicas en distintas clases de medios. Dicho comportamiento está caracterizado por el hecho que la distancia al cuadrado promedio recorrida por la sustancia o cantidad que se difunde es una ley de potencias en el tiempo, es decir $\langle r^2 \rangle \propto t^\gamma$, donde el caso $\gamma > 1$ se conoce como *superdifusión* mientras que $\gamma < 1$ se conoce como *subdifusión*.

La tesis comienza con la introducción de los conceptos y herramientas necesarios para la deducción y el análisis de los sistemas de reacción-difusión típicos, seguidos por un recuento de los principales modelos utilizados hasta ahora y su relación con un modelo propuesto por Barrio *et al.* [6], conocido como el modelo BVAM (capítulos 1, 2 y 3). En los capítulos 4 y 5, se introducen las diferencias esenciales entre la difusión normal y la *difusión anómala*, la manera de deducir la ecuación de difusión generalizada y una descripción introductoria de la herramienta matemática utilizada para esto. En los últimos capítulos (capítulos 6, 7 y 8) se tratan los modelos de reacción-difusión generalizados y su análisis, estudiando así las consecuencias que tiene la difusión anómala en la formación de patrones y en la propagación de frentes de onda en sistemas biestables. Cuando es posible esto se hace de manera analítica y cuando no, el estudio se lleva a cabo de forma numérica.

Por último, se proponen algunas aplicaciones de estos modelos y se dan las conclusiones del trabajo.

Capítulo 2

Estructuras disipativas

Existen en la naturaleza muchos sistemas que presentan de manera natural estados estables no uniformes en el espacio o en el tiempo. Esto permite reconocer regiones espaciales diferentes, que tomadas en conjunto forman un patrón. La teoría de la *formación de patrones* se ha desarrollado en varias áreas del conocimiento científico [13, 14], y existe una amplia diversidad de situaciones en las que este fenómeno es observado, por ejemplo: reacciones químicas (fig.2.1(a)), medios granulares (fig.2.1(b)), fluidos y sobre todo en las ciencias biológicas. Como ejemplo de esta última, podemos mencionar los diversos patrones de pigmentación en la piel de algunos animales, tales como zebras o peces, ver la fig.(2.2).

Es por esto que es importante entender cómo se forman estos patrones, lo que sin duda es uno de los retos científicos fundamentales de esta época. En general, los patrones son estructuras espacio-temporales que surgen en sistemas físico-químicos cuando hay una ruptura espontánea de simetría. En sistemas fuera del equilibrio termodinámico, las estructuras espacio-temporales que aparecen después de la ruptura de simetría se llaman *estructuras disipativas* o a veces estructuras auto-organizadas. Ejemplos muy conocidos de patrones o estructuras disipativas en sistemas simples son: los rollos de convección en el experimento de Rayleigh-Bénard, o los distintos tipos de patrones espaciales que pueden lograrse con la reacción de Belousov-Zhabotinskii, ver la fig.2.1(a).

Como se mencionó en la introducción, algunos patrones que se ven en la naturaleza pueden ser modelados por ecuaciones de evolución no lineales. Dichas ecuaciones pueden ser discretas o continuas, deterministas o estocásticas. En el caso determinista continuo, los modelos utilizados se dividen en



(a)



(b)

Figura 2.1: (a) Patrones espaciales en la reacción Belousov-Zhabotinskii. (b) Patrón de rayas en dunas de arena.



Figura 2.2: Patrones de pigmentación en seres vivos.

ecuaciones diferenciales ordinarias (que generalmente aparecen cuando en el fenómeno modelado no importan las coordenadas espaciales) y en ecuaciones diferenciales parciales. En este contexto, una manera de estudiar el origen de distintos patrones espaciales es analizar la respuesta lineal del sistema ante

pequeñas perturbaciones con respecto al estado homogéneo estacionario, las cuales pueden crecer o decrecer en el tiempo. En el primer caso, el estado homogéneo es un estado de equilibrio inestable, mientras que en el segundo, el estado homogéneo es estable. La respuesta lineal del sistema está determinada por la *relación de dispersión* $\omega(k)$, donde k es el número de onda. Dicha relación caracteriza la evolución de pequeñas perturbaciones o fluctuaciones con longitudes de onda específicas, es decir, nos dice si el sistema es estable o inestable dependiendo del signo de la parte real de dicha relación.

En general, los modelos utilizados dependen de varios parámetros que describen la interacción del sistema con el exterior, y la estabilidad o inestabilidad de los estados de equilibrio dependen de los valores de dichos parámetros.

Entonces, si pensamos en un modelo determinista que está descrito mediante el siguiente conjunto de variables de estado $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ y su interacción con el mundo exterior está determinada por los parámetros $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, podemos decir, de manera general, que su evolución en el tiempo está dada por

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = \vec{F}(\vec{V}, \vec{\lambda}), \quad (2.1)$$

donde \vec{V} es un vector que contiene a las variables de estado del sistema, mientras que \vec{F} es un conjunto de funciones (generalmente no lineales) que dependen su estado e indican la manera en que las variables interactúan entre sí, $\vec{\lambda} = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$.

Generalmente los modelos estudiados son autónomos, es decir, la parte que describe la interacción entre las variables dinámicas es independiente del tiempo. Esto se debe a que, comúnmente, uno está interesado en cómo es que aparecen comportamientos periódicos o incluso comportamientos más complicados en el tiempo, aún cuando la dinámica bajo la cual se da la evolución de las variables de estado es independiente de éste, es decir lo primero que se hace es estudiar el tipo de rupturas de simetría temporal que pueden ocurrir en el modelo.

Ahora bien, el primer paso para analizar sistemas descritos por expresiones tales como la ec.(2.1), es encontrar los estados estacionarios, dichos estados cumplen con

$$F(\vec{V}_0, \vec{\lambda}) = 0. \quad (2.2)$$

Los estados estacionarios¹ son generalmente estados del sistema para los

¹Es importante notar que la ec.(2.2) define implícitamente a los estados estacionarios

cuales todavía no hay ningún rompimiento de simetría, por lo que son homogéneos en el espacio y estacionarios en el tiempo. Dichos rompimientos de simetría son consecuencia de la presencia de bifurcaciones en las ecuaciones de evolución.

Una vez encontrados los estados estacionarios, se perturban débilmente, $\vec{V} = \vec{V}_0 + \vec{v}'$ con $\|\vec{v}'\| \ll 1$ y se estudia la evolución de estas perturbaciones en el tiempo. Como la perturbación es pequeña es posible linealizar la función \vec{F} alrededor del estado estacionario, por lo que dichas perturbaciones cumplen con la siguiente ecuación de evolución

$$\frac{\partial \vec{v}'}{\partial t} = L(\vec{V}_0, \lambda) \vec{v}', \quad (2.3)$$

donde \vec{v}' es la perturbación y $L(\vec{V}_0, \lambda)$ es un operador lineal. Sustituyendo $\vec{v}' = \vec{V}_i e^{\omega_i t}$ en la ecuación anterior tenemos

$$\omega_i \vec{V}_i = L(\vec{V}_0, \lambda) \vec{V}_i. \quad (2.4)$$

La ec.(2.4) es una ecuación de valores propios para el operador lineal L , por lo tanto, las soluciones del problema linealizado son

$$\vec{v}' = \sum_i A_i \vec{V}_i e^{\omega_i t}, \quad (2.5)$$

donde las A_i son constantes que solamente dependen del estado inicial.

De la ec.(2.5) es fácil ver que el estado de equilibrio es estable si y sólo si $\text{Re}(\omega_i) \leq 0, \forall i$.

Por otro lado, los valores propios ω_i del operador lineal $L(\vec{V}_0)$, dependen del conjunto de parámetros $\vec{\lambda}$, por lo tanto podemos calcular para qué valores de dichos parámetros el estado de equilibrio estable se vuelve inestable. Para hacer ésto, y sin perder mucha generalidad podemos suponer que todos los parámetros λ_i son constantes, y que sólo uno de ellos, digamos λ_0 se puede manipular o controlar experimentalmente. Entonces un estado estacionario estable pierde su estabilidad o se vuelve *marginamente estable* para $\lambda_0 = c_0$ si se cumple

$$\begin{aligned} \max_{i=1,2,\dots} (\text{Re}(\omega_i))(\lambda_0) &= \omega_0 = 0, \\ \frac{d\omega_0}{d\lambda_0} \Big|_{c_0} &\neq 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

como función del conjunto de parámetros $\vec{\lambda}$.

En sistemas espacialmente extendidos, el operador L es generalmente de la forma $L = L(\nabla, \nabla^2, \dots, \nabla^4, \vec{V}_0, \vec{\lambda})$, por lo tanto para ver como dependen los valores propios de fluctuaciones espaciales con longitud de onda $\ell = 2\pi/k$ donde k es el número de onda, podemos escribir dichas fluctuaciones como $\vec{v}_i = \vec{V}_i e^{\omega_i t + i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, por lo tanto al sustituir esta expresión en la ec.(2.3), obtenemos la siguiente ecuación de valores propios

$$\omega_i \vec{V}_i = L(k, k^2, \dots, k^4, \vec{V}_0, \vec{\lambda}) \vec{V}_i. \quad (2.7)$$

De la ec.(2.7) es posible determinar ω_i como función de k y del conjunto de parámetros $\vec{\lambda}$. Esto permite clasificar las inestabilidades de un sistema extendido en función del tipo de estructuras espaciales que se vuelven inestables cuando hay una bifurcación o rompimiento de simetría, fenómeno que sucede al variar alguno de los parámetros en $\vec{\lambda}$. Entonces, sea $\text{Re}(\omega_0) = \max_{i=1,2,\dots} (\text{Re}(\omega_i))$, y sea k_c el número de onda para el cual, $\text{Re}(\omega_0)$ alcanza su valor máximo como función de k , las inestabilidades de un sistema espacialmente extendido son:

1. Inestabilidad *celular* si $\text{Re}(\omega_0(k_c)) > 0$ y $\text{Im}(\omega_0(k_c)) = 0$ con $k_c \neq 0$.
2. Inestabilidad *homogénea* si $\text{Re}(\omega_0(k_c)) > 0$ y $\text{Im}(\omega_0(k_c)) = 0$ con $k_c = 0$.
3. Inestabilidad *oscilatoria* si $\text{Re}(\omega_0(k_c)) > 0$ y $\text{Im}(\omega_0(k_c)) \neq 0$ con $k_c \neq 0$.

A $\omega_0(k)$ se le conoce como la relación de dispersión.

Para un análisis más detallado de los temas expuestos en este capítulo ver [15]. Un ejemplo particular del tipo de ecuaciones de evolución tratadas en este capítulo para sistemas químicos, son las ecuaciones de reacción-difusión, de las cuales hablaremos más adelante.

Capítulo 3

Reacciones químicas y difusión.

En general una reacción química entre dos partículas (átomos, moléculas etc.) se da dentro de un medio con propiedades físicas bien determinadas, por ejemplo un sólido, un líquido o un gas que, entre otras cosas, tiene un volumen Ω bien definido. Si el medio es inerte, esto es que no reacciona con los sustancias o partículas en cuestión, entonces lo único que aporta éste a la reacción química es el transporte de las partículas para que éstas se encuentren y reaccionen. Dicho transporte es, en general, de tipo difusivo, aunque si el medio es un fluido, además de difusión también puede haber advección y convección. Es importante decir que el movimiento difusivo siempre está presente, no importa el medio en el cual se lleve a cabo la reacción.

El tiempo promedio que tardan dos partículas que están en lugares diferentes en encontrarse, se llama tiempo difusivo. El tiempo promedio que tardan dos partículas contiguas en reaccionar se llama tiempo reactivo. Las reacciones químicas se pueden clasificar en dos grupos de acuerdo con estos tiempos característicos. Las reacciones químicas en el límite reactivo o reacciones en las que el tiempo difusivo es mucho menor que el tiempo reactivo ($\tau_d \ll \tau_r$) y las reacciones químicas en el límite difusivo o reacciones químicas en las que el tiempo reactivo es mucho menor que el tiempo difusivo. Esta distinción es importante, ya que la dinámica de estos dos procesos es muy diferente.

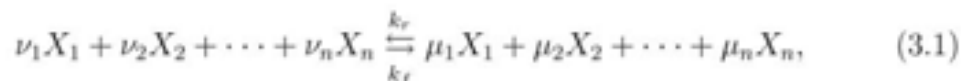
En el límite reactivo ($\tau_d \ll \tau_r$), las partículas recorren en promedio grandes porciones del volumen Ω antes de reaccionar entre ellas, por lo que las cantidades importantes son las concentraciones globales de las sustancias o compuestos químicos que reaccionan. Debido a ésto, la densidad local de los compuestos no se toma en cuenta y por lo tanto, la densidad se puede con-

siderar uniforme. Al no depender de las coordenadas espaciales, la evolución en el tiempo de la densidad de los reactivos, se puede modelar, como veremos más adelante (sección 3.1), mediante ecuaciones diferenciales ordinarias

Las reacciones químicas en el límite difusivo se caracterizan por un tiempo difusivo mucho mayor al tiempo reactivo, por lo tanto las partículas reaccionan antes de que puedan recorrer fracciones considerables del volumen Ω . Esto tiene como consecuencia que en dicho límite los valores locales de la densidad sean importantes para la dinámica. Una manera de modelar reacciones químicas con las características mencionadas, es utilizando ecuaciones de reacción-difusión (sección 3.2).

3.1. La ley de acción de masas.

En general una reacción química que involucra n moléculas diferentes se puede escribir de la siguiente manera



donde los coeficientes ν y μ se conocen como los coeficientes estequiométricos. Las dos flechas en la expresión anterior quieren decir que la reacción ocurre en ambas direcciones. Para el caso en que el proceso químico representado por la ec.(3.1) ocurra en el límite reactivo, la *ley de acción de masas* dice que el número de reacciones por unidad de volumen por unidad de tiempo que ocurren en la ec.(3.1) de *izquierda a derecha*, es proporcional a $\prod_i^n c_i^{\nu_i}$; donde c_i es la concentración del i -ésimo reactivo. El producto expresa la probabilidad de que las partículas que participan en la reacción, reaccionen unas con otras, y asume de forma implícita que la probabilidad de encontrar a un reactivo en un punto específico del volumen Ω , es independiente de la posición de los demás. La constante de proporcionalidad que llamaremos k_f , es una medida de cuantas reacciones hay por unidad de tiempo, y en general es una función de la temperatura del sistema, por lo que para poder considerar estos coeficientes como constantes, el medio tiene que estar a una temperatura fija. Entonces, a temperatura constante $k_f \propto \frac{1}{\tau_r}$ y por lo tanto, el cambio en el tiempo de la concentración del reactivo j está dado por

$$\frac{dc_j}{dt} = (\mu_j - \nu_j) k_f \prod_i^n c_i^{\nu_i}. \quad (3.2)$$

Para la reacción en el otro sentido, la ley de acción de masas nos dice que la ecuación de evolución temporal del reactivo j es

$$\frac{dc_j}{dt} = (\nu_j - \mu_j)k_r \prod_i^n c_i^{\mu_i}. \quad (3.3)$$

Por lo tanto, el cambio en el tiempo de la concentración del compuesto j debido a la reacción química correspondiente a la ec.(3.1), se puede escribir como

$$\frac{dc_j}{dt} = (\mu_j - \nu_j)k_f \prod_i^n c_i^{\nu_i} + (\nu_j - \mu_j)k_r \prod_i^n c_i^{\mu_i}. \quad (3.4)$$

Como un ejemplo de la aplicación de la ley de acción de masas, podemos considerar la siguiente reacción química



La ec.(3.5) es un modelo de una reacción autocatalítica, donde la concentración del catalizador A permanece constante.

Si suponemos que la reacción ocurre en el límite reactivo, la evolución de la concentración del compuesto X está dada por

$$\frac{dc_X}{dt} = (k_1 c_A - k_2) c_X - k_1 c_A c_X^2. \quad (3.6)$$

Si reescalamos el tiempo por $k_1 c_A$, y definimos un nuevo parámetro r como $r = \frac{k_1 c_A - k_2}{k_1 c_A}$, la ecuación de evolución toma la siguiente forma

$$\frac{dc_X}{dt} = r c_X - (c_X)^2, \quad (3.7)$$

donde el parámetro r puede tomar distintos valores dependiendo de la concentración del catalizador A y de la temperatura del sistema.

Las ecuaciones de evolución para las concentraciones mostradas hasta ahora son ecuaciones para las concentraciones globales de los compuestos químicos que participan en la reacción, que en el caso de reacciones en el límite reactivo se definen como

$$c_j = \frac{\text{Promedio del número de partículas del reactivo J en } \Omega}{\Omega}. \quad (3.8)$$

Dicha definición se debe a que las reacciones químicas son en realidad procesos estocásticos, por lo que sólo tiene sentido hablar de promedios y de fluctuaciones alrededor de dichos promedios. De esto último, podemos concluir que las ecuaciones mostradas o mencionadas en los párrafos anteriores, sólo son aplicables si el número de partículas que participan en la reacción es grande, ya que en este caso las fluctuaciones de dicha cantidad alrededor de su valor promedio son despreciables.

Es importante señalar que la ley de acción de masas ya es una aproximación al proceso estocástico que modela la reacción química. Para ver esto podemos imaginar una reacción química en la cual una molécula A reacciona con una molécula B para producir una molécula C , la cual se degrada en una molécula C' .

Si la probabilidad por unidad de tiempo de que suceda la reacción entre A y B la llamamos f , y a la probabilidad por unidad de tiempo de que la molécula C se degrade la llamamos d , entonces la fórmula química que describe esta reacción está dada por



Si consideramos un intervalo de tiempo dt lo suficientemente pequeño para que sólo pueda haber una reacción durante éste, la probabilidad de encontrar al sistema en el estado descrito por n_A, n_B, n_C donde n_i es el número de partículas del reactivo i con $i = A, B, C$, es $P_{n_A, n_B, n_C}(t)$. Dicha distribución de probabilidad cumple con la siguiente ecuación maestra

$$\begin{aligned} P_{n_A, n_B, n_C}(t + dt) = & \\ & W(n_A, n_B, n_C | (n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C) P_{(n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C}(t) \\ & + W(n_A, n_B, n_C | n_A, n_B, (n+1)_C) P_{n_A, n_B, (n+1)_C}(t) + (W_{norea}) P_{n_A, n_B, n_C}(t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde $W(i | j) =$ Probabilidad de transición del estado j al estado i en el intervalo de tiempo dt y $W_{norea} =$ Probabilidad de que no ocurra ninguna reacción en el intervalo de tiempo dt .

Las probabilidades de transición, exepcto por un factor de normalización que puede ser absorbido por las constantes f y d , están dadas por las siguien-

tes expresiones

$$\begin{aligned}
W(n_A, n_B, n_C | (n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C) &= f((n+1)_A) ((n+1)_B) dt, \\
W(n_A, n_B, n_C | n_A, n_B, (n+1)_C) &= d((n+1)_C) dt, \\
W_{noreac} &= 1 - f n_A n_B dt - d n_C dt.
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Ahora bien, si sustituimos las expresiones de la ec.(3.11) en la ecuación maestra, dividimos entre dt y tomamos el límite cuando $dt \rightarrow 0$ tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P_{n_A, n_B, n_C}}{\partial t} &= f((n+1)_A) ((n+1)_B) (P_{(n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C}(t) \\
&- n_A n_B P_{n_A, n_B, n_C}) - d(n_C P_{n_A, n_B, n_C} - ((n+1)_C) P_{n_A, n_B, (n+1)_C}).
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Multiplicando la ec.(3.12) por n_C y sumando sobre n_A, n_B y n_C tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} &= f \sum ((n-1+1)_C) (n+1)_A (n+1)_B P_{(n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C} \\
&- f \sum n_A n_B n_C P_{n_A, n_B, n_C} - d \sum n_C^2 P_{n_A, n_B, n_C} \\
&+ d \sum ((n+1-1)_C) ((n+1)_C) P_{n_A, n_B, (n+1)_C}.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

entonces, utilizando la expresión

$$\begin{aligned}
\langle ABC \rangle &= \sum_{n_A, n_B, n_C=0}^{\infty} n_A n_B n_C P_{n_A, n_B, n_C} \\
&= \sum_{n_A, n_B, n_C=0}^{\infty} ((n+1)_A) ((n+1)_B) ((n-1)_C) P_{(n+1)_A, (n+1)_B, (n-1)_C},
\end{aligned} \tag{3.14}$$

y el hecho que $P_{n_A, n_B, n_C} = 0$ si $n_i < 0$, podemos escribir la ec.(3.13) como

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} &= f(\langle ABC \rangle + \langle AB \rangle) - f \langle ABC \rangle - d \langle C^2 \rangle \\
&+ d(\langle C^2 \rangle - \langle C \rangle) = f \langle AB \rangle - d \langle C \rangle.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Por otro lado, la ley de acción de masas aplicada a la reacción química de la ec.(3.9) nos dice que el cambio de la concentración del compuesto C en el tiempo está dado por

$$\frac{dc_c}{dt} = \tilde{f} c_A c_B - \tilde{d} c_c. \tag{3.16}$$

Comparando las expresiones mostradas en las ec.(3.15) y (3.16), podemos ver que la ley de acción de masas es igual a la ley microscópica derivada de las propiedades estocásticas intrínsecas a una reacción química si y sólo si $\tilde{f} = f \frac{\Omega \langle AB \rangle}{\langle A \rangle \langle B \rangle}$ (en el caso de una reacción en la que participan dos compuestos químicos o reacción de segundo orden) y $\tilde{d} = d$. Además como dicha ley establece que \tilde{f} es constante, necesitamos que $\langle AB \rangle \approx \langle A \rangle \langle B \rangle$, lo cual implica suponer que los procesos aleatorios correspondientes a cada reactivo son independientes, y que $\tilde{f} \approx f\Omega$. Si esto es así, entonces \tilde{f} se puede ver como una medida del número de reacciones por unidad de tiempo entre los reactivos A y B en el volumen Ω .

En la literatura sobre sistemas de reacción-difusión existente, generalmente se modela la parte reactiva de las ecuaciones mediante la ley de acción de masas y no se mencionan las ecuaciones microscópicas de las cuales se deduce ésta. Aunque esto no es importante en sistemas de reacción-difusión normales, la naturaleza estocástica de las reacciones químicas puede ser importante cuando la difusión es anómala, lo cual se ve reflejado en que hasta ahora, la modelación de la parte reactiva en un sistema de reacción-difusión en presencia de subdifusión sigue siendo un problema abierto. Por ejemplo, se ha demostrado que la presencia de subdifusión, al menos en algunos casos, puede cambiar de manera drástica la forma de la cinética química (ver capítulo 6).

3.2. Sistemas de Reacción Difusión.

Cuando las reacciones químicas se llevan a cabo en el límite difusivo, no es la densidad global de los compuestos químicos lo que determina la dinámica de la reacción, si no la densidad local. Por lo tanto, para estudiar la evolución de estos sistemas es necesario ver cómo cambia la concentración local de los químicos en el tiempo debido a fluctuaciones localizadas alrededor de la densidad promedio. Para esto, consideramos un volumen imaginario Ω' dentro del volumen Ω donde se lleva a cabo la reacción y calculamos cómo cambia la cantidad de partículas o moléculas de uno de los compuestos dentro de Ω' en el tiempo. La razón de cambio en el tiempo del número de partículas en Ω' , puede ser consecuencia solamente de dos procesos: del flujo de partículas que entra o sale del volumen a través de la superficie que lo delimita (flujo debido a las propiedades de transporte inherentes al medio en cual las partículas se encuentran diluidas, éste puede ser advectivo, convectivo, difusivo o una

combinación de los tres) y a las reacciones químicas. Por lo tanto, dicha razón de cambio se puede expresar de la siguiente manera

$$\frac{dn_c}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega'} \rho_c dv = - \oint_{\partial\Omega'} \vec{J} \cdot \hat{n} da + \int_{\Omega'} f(\rho_c) dv, \quad (3.17)$$

donde f es la cantidad de partículas del compuesto C por unidad de tiempo y por unidad de volumen que aparecen o desaparecen debido a las reacciones, y \vec{J} es el flujo de partículas por unidad de tiempo y por unidad de superficie. Utilizando el teorema de la divergencia en la ec.(3.17) obtenemos

$$\int_{\Omega'} (\rho_c + \nabla \cdot \vec{J} - f(\rho_c)) dv = 0. \quad (3.18)$$

Como esta última ecuación es válida para todo Ω' , podemos concluir que la evolución temporal de la densidad local del reactivo C está dada por

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} - f(\rho_c) = 0. \quad (3.19)$$

Si suponemos que la ley de acción de masas también se cumple localmente, la función $f(\rho_c)$ está determinada por dicha ley.

Para plantear de forma completa la expresión mostrada en la ec.(3.19), necesitamos saber la dependencia del flujo \vec{J} como función de la densidad local ρ_c . Si suponemos que la concentración de ρ_c varía lentamente en el espacio, y que no hay convección ni advección, podemos escribir \vec{J} como función de la densidad de la siguiente manera: $\vec{J} = -D\nabla\rho_c$, donde D es un factor de proporcionalidad¹ que depende de las coordenadas espaciales si el medio no es homogéneo y se conoce como coeficiente de difusión. La suposición que el flujo es proporcional al gradiente de la densidad, se conoce generalmente como la 1^a ley de Fick.

Si el medio es homogéneo e isotrópico podemos reescribir la ec.(3.19) de la siguiente forma

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} = D\nabla^2 \rho_c + f(\rho_c). \quad (3.20)$$

A este tipo de ecuación se le llama *ecuación de reacción-difusión*².

¹De manera general D es una matriz de 3×3 , que en el caso de un medio isotrópico es diagonal con todas sus entradas iguales y positivas.

²Las ecuaciones de reacción-difusión en su forma más general, son ecuaciones en las que D es una matriz no diagonal y sus entradas son funciones dependientes de las coordenadas espaciales. En éste trabajo sólo se tratará el caso en el que D es diagonal y sus entradas son constantes.

Generalizando para n compuestos químicos distintos tenemos

$$\frac{\partial \vec{C}}{\partial t} = D \nabla^2 \vec{C} + \vec{K}(\vec{C}), \quad (3.21)$$

donde \vec{C} es un vector cuyas entradas son las densidades de cada compuesto químico, \vec{K} es una función vectorial ($\vec{K}(\vec{C}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$) cuyas entradas son las funciones que modelan las reacciones en las que participa cada compuesto de acuerdo a la ley de acción de masas, y D es una matriz diagonal cuyas entradas son positivas y corresponden a los coeficientes de difusión de cada compuesto químico.

Si los compuestos que participan en la reacción no se degradan ni reaccionan entre sí tenemos $\vec{K} = 0$, por lo tanto el sistema de ecuaciones no lineales acopladas dado en la ec.(3.21), se reduce a un conjunto de ecuaciones lineales desacopladas (una por cada sustancia) dadas por

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 C_i. \quad (3.22)$$

La ec.(3.22) se conoce como la ecuación de difusión y será estudiada con más detalle en el siguiente capítulo, donde además se deducirá la generalización de esta ecuación para el caso de difusión anómala.

3.2.1. Distintos Modelos de Reacción-Difusión

Como se mencionó anteriormente, desde el trabajo de Turing los sistemas de reacción-difusión se han utilizado para modelar la aparición de estructuras coherentes espacio-temporales en diferentes contextos, en particular en biología y en química. A continuación haremos un breve resumen de los modelos de reacción-difusión más usados y de las ideas de las cuales éstos surgieron.

En la tabla 3.1 se pueden ver las distintas cinéticas correspondientes a cada modelo. Las funciones $F(u, v, w, \dots)$, $G(u, v, w, \dots)$ y $H(u, v, w, \dots)$ corresponden a las entradas de la función \vec{K} mostrada en la ec.(3.21), y están dadas por la ley de acción de masas correspondiente a las reacciones químicas entre los compuestos cuyas concentraciones son u, v, w, \dots .

La ecuación de reacción-difusión correspondiente a la primera cinética de la tabla 3.1, se conoce como ecuación de Fisher o algunas veces como ecuación de Fisher-Kolmogorov. Esta ecuación fue propuesta originalmente

para modelar la propagación de un gen exitoso en una población [16]. La ecuación de Fisher también ha sido utilizada para modelar propagación de epidemias y en algunos casos, para modelar la dinámica espacio-temporal de ciertas poblaciones de bacterias [17].

Tabla 3.1: Principales modelos.

Cinética química	Nombre del Modelo	Ref.
$F(u, v) = \mu u(1 - u/K)$	Ecuación de Fisher	[16]
$F(u, v) = au - buv$ $G(u, v) = -cu + duv$	Lotka-Volterra	[18]
$F(u, v) = \rho_u - \mu_u u + \rho u^2/v$ $G(u, v) = \rho_v - \mu_v v + \rho v^2$	Gierer-Meinhardt	[19]
$F(u, v) = f(1 - u) - uv^2$ $G(u, v) = bu - u^2v$	Gray Scott	[21]
$F(u, v) = a - (b + 1)u + u^2v$ $G(u, v) = bu - u^2v$	Bruselador	[23]
$F(u, v, w) = 1/\epsilon(qv - uv + u(1 - u))$ $G(u, v, w) = 1/\epsilon'(-qv - uv + fw)$ $H(u, v, w) = u - v$	Oregonador	[26]
$F(u, v) = \gamma(a - u + u^2v)$ $G(u, v) = \gamma(b - uv^2)\gamma$	Shnakenberg	[27]
$F(u, v) = a - u - 4uv/(1 + u^2)$ $G(u, v) = \delta(u - uv/(1 + u^2))$	Lengyel-Epstein	[28]
$F(u, v) = -v + u + u^3$ $G(u, v) = \epsilon(u - \alpha v - \beta)$	Fitzgub-Nagumo	[29]
$F(u, v) = \eta(u + av - Cuv - uv^2)$ $G(u, v) = \eta(bv + hu + Cuv + uv^2)$	BVAM	[6]

Para la segunda cinética, el modelo de reacción-difusión correspondiente se conoce como el modelo de Lotka-Volterra [18], éste fue diseñado por el químico Alfred Lotka y el biólogo Vito Volterra para estudiar la dinámica de presa-depredador entre dos poblaciones. Dicho modelo y sus variantes han sido ampliamente utilizados por ecólogos.

El tercer modelo se conoce como modelo de Gierer-Meinhardt [19] y fue introducido para estudiar la formación de estructuras biológicas a través de la inestabilidad de Turing. La cinética es representativa de un tipo de cinética más general conocida como activador-inhividor. El modelo Gierer-Meinhardt

ha sido utilizado entre otras cosas, como una posible explicación para los patrones que aparecen en las conchas de ciertos moluscos [20].

El modelo conocido como Gray-Scott [21] fue construido como una primera aproximación al fenómeno de la glicólisis dentro de las células. Dicho modelo ha sido extensamente estudiado debido a su simplicidad. Recientemente nosotros hemos propuesto este modelo como un mecanismo mediante el cual se forma un patrón químico de caminos que conectan a distintas neuronas. En el modelo propuesto, dichos caminos sirven como guías para el crecimiento de axones de manera quimiotáctica [22].

El bruselador [23] es un modelo diseñado para describir reacciones autocatalíticas, proceso muy común en la naturaleza. Fue propuesto por Prigogine y su equipo y ha sido ampliamente estudiado. Recientemente se ha utilizado para estudiar la dinámica de sistemas de Turing acoplados a través de superficies [24, 25].

El oregonador [26] es un modelo simplificado de la reacción química conocida como la reacción de Belousov-Zhabotinskii y ha sido utilizado exitosamente para producir diversos tipos de patrones espaciales. Una simplificación del oregonador es el modelo conocido como Schnakenberg [27].

El primer patrón de Turing fue observado experimentalmente hasta 1990 en una reacción química conocida como *CIMA* (chlorine-iodine-malonic acid) [4]. El modelo de Lengyel-Epstein [28] fue creado para estudiar la dinámica de dicha reacción.

La penúltima cinética de la tabla se conoce como el modelo de FitzHugh-Nagumo [29] y es en realidad una simplificación del modelo de Hodgkin-Huxley, el cual ha sido aplicado exitosamente para el estudio de la propagación de impulsos nerviosos. Este modelo es matemáticamente complicado, por lo que el FitzHugh-Nagumo lo simplifica y captura sus principales características [7, 30].

Por último tenemos al modelo BVAM, éste se puede ver como una generalización de algunos de los modelos anteriores.

Por ejemplo la ecuación de Fisher es un caso particular del modelo BVAM si ponemos en este $u = v, \mu = \eta$ y $C = 1/K$ y todos los demás parámetros igual a cero. El modelo de Lotka Volterra también se puede ver como un caso particular del modelo BVAM si se desprecian los términos de orden cúbico.

El modelo BVAM nace de suponer una cinética química $F(U, V), G(U, V)$ con un punto de equilibrio (U_0, V_0) y de expandir estas funciones en una serie

de Taylor hasta tercer orden

$$\begin{aligned}
F(u, v) &= A_1 u + A_2 v + H_{11} u^2 + 2H_{12} uv + H_{22} v^2 + \\
&\quad M_{111} u^3 + 3M_{121} u^2 v + 3M_{122} uv^2 + M_{222} v^3, \\
G(u, v) &= B_1 u + B_2 v + N_{11} u^2 + 2N_{12} uv + N_{22} v^2 + \\
&\quad Q_{111} u^3 + 3Q_{121} u^2 v + 3Q_{122} uv^2 + Q_{222} v^3,
\end{aligned} \tag{3.23}$$

donde

$$\begin{aligned}
A_1 &= \partial_u F |_{(U_0, V_0)}, & A_2 &= \partial_v F |_{(U_0, V_0)}, & H_{11} &= \partial_u^2 F |_{(U_0, V_0)}, & \text{etc.} \\
M_{111} &= \partial_u^3 F |_{(U_0, V_0)}, & M_{121} &= \partial_{uvu}^3 F, & & \text{etc.} & \text{etc} \\
B_1 &= \partial_u G |_{(U_0, V_0)}, & B_2 &= \partial_v G |_{(U_0, V_0)}, & N_{11} &= \partial_u^2 G |_{(U_0, V_0)}, & \text{etc.} \\
Q_{111} &= \partial_u^3 G |_{(U_0, V_0)}, & Q_{121} &= \partial_{uvu}^3 G |_{(U_0, V_0)}, & & \text{etc.} &
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Tomando $A_1 = 1$, $A_2 = v$, $H_{11} = H_{22} = 0$, $2H_{12} = C$, $3M_{121} = 1$, $M_{111} = M_{221} = 0$ y $B_1 = h$, $B_2 = b$, $N_{11} = 0 = N_{22}$, $2N_{12} = -C$ y $3Q_{121} = -1$, $Q_{111} = Q_{221} = 0$ obtenemos el modelo BVAM.

Nótese que los valores de Q_{121} , M_{121} , H_{12} y N_{12} son escogidos de tal manera que la concentración total $u + v$ debido a la reacción entre los dos compuestos químicos permanece constante durante este proceso.

Por lo tanto este modelo se puede pensar como un modelo que describe la evolución de pequeñas fluctuaciones alrededor de un estado estacionario homogéneo para cualquier cinética química que tenga una expansión de Taylor de la forma mencionada alrededor de un punto fijo.

Finalmente, es importante mencionar que debido a la naturaleza de la deducción del modelo, las variables u y v pueden tomar valores negativos, ya que $u = U - U_0$ y $v = V - V_0$, donde U_0 y V_0 cumplen con $F(U_0, V_0) = 0$, y $G(U_0, V_0) = 0$.

3.3. La inestabilidad de Turing.

De lo dicho anteriormente sabemos que una reacción entre dos compuestos químicos, que se lleva a cabo en un medio isotrópico y homogéneo en el cual la difusión es normal³, se puede escribir de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D_u \nabla^2 u + F(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_v \nabla^2 v + G(u, v).\end{aligned}\tag{3.25}$$

Mediante un cambio de variables, este tipo de ecuaciones se pueden escribir de manera adimensional de la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d \nabla^2 & 0 \\ 0 & \nabla^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + \eta \begin{pmatrix} F(u, v) \\ G(u, v) \end{pmatrix},\tag{3.26}$$

donde η es un parámetro que mide que tan fuerte es la reacción con respecto a la difusión, o a veces, sirve como una medida del tamaño del sistema, y $d = D_u/D_v$.

El medio donde sucede la reacción química es un medio con volumen finito, por lo tanto para que el problema esté bien definido necesitamos especificar las condiciones a la frontera que cumplen las densidades u y v . Dichas condiciones pueden ser de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\left. \begin{aligned} u &= g(\vec{x}) \\ v &= f(\vec{x}) \end{aligned} \right\} \vec{x} \in \partial\Omega; \text{ Dirichlet} \\ \left. \begin{aligned} \nabla u \cdot \vec{n} &= f(\vec{x}) \\ \nabla v \cdot \vec{n} &= g(\vec{x}) \end{aligned} \right\} \vec{x} \in \partial\Omega; \text{ Newmann} \\ \left. \begin{aligned} \nabla u \cdot \vec{n} + u &= f(\vec{x}) \\ \nabla v \cdot \vec{n} + v &= g(\vec{x}) \end{aligned} \right\} \vec{x} \in \partial\Omega; \text{ Robin.}\end{aligned}\tag{3.27}$$

Donde \vec{n} , es el vector normal exterior unitario de la frontera $\partial\Omega$.

También es común utilizar condiciones de frontera periódicas.

La primera condición quiere decir que las densidades de los compuestos químicos en la frontera están dadas por las funciones f y g .

³Llamamos difusión normal al proceso físico que puede ser modelado mediante la ecuación de difusión. Para ver cómo se caracteriza la difusión anormal o anómala ver el siguiente capítulo.

La segunda, que el flujo de los compuestos en la frontera está determinado por las funciones f y g .

La tercera condición dice que el flujo y la densidad de los compuestos químicos en la frontera no son independientes, y están relacionadas mediante las funciones f y g .

Que tipo de condición a la frontera se utiliza, depende del sistema que se esté modelando.

Ahora bien, para estudiar los distintos tipos de inestabilidades que pueden sufrir los estados homogéneos estacionarios del sistema dado en la ec.(3.26), nos podemos olvidar por un momento de las condiciones de frontera y estudiar la dinámica de la ecuación linealizada alrededor de dichos estados

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d\nabla^2 & 0 \\ 0 & \nabla^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} + \eta A \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

donde A es conocida como la matriz de estabilidad, y es la matriz Jacobiana del vector cuyas entradas son las funciones $F(u, v)$ y $G(u, v)$. Por otro lado, u' y v' cumplen con $u - u_0 = u'$ y $v - v_0 = v'$, y son pequeñas fluctuaciones con respecto al estado estacionario $(u, v) = (u_0, v_0)$.

Escrita de manera explícita A está dada por

$$A = \begin{pmatrix} \partial_u F & \partial_v F \\ \partial_u G & \partial_v G \end{pmatrix}_{(u_0, v_0)}. \quad (3.29)$$

En términos espaciales, hay dos posibilidades para el tipo de inestabilidades que pueden sufrir los estados de equilibrio homogéneos. La primera, que sean *inestables* ante perturbaciones con longitud de onda grande⁴. La segunda, que sean *estables* ante perturbaciones con longitud de onda grande, e *inestables* ante perturbaciones con longitudes de onda más pequeñas que las dimensiones características del volumen en el cual se lleva a cabo la reacción.

El primer caso puede extenderse al límite asintótico correspondiente a perturbaciones con longitud de onda infinita, por lo tanto, podemos pensar que las perturbaciones bajo las cuales el sistema es inestable son de la forma $\vec{V}e^{\omega t}$.

⁴Grande con respecto al volumen donde sucede la reacción química.

La evolución de dichas perturbaciones⁵ está dada por

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \eta A \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

Como supusimos que el sistema es inestable ante este tipo de perturbaciones, la parte real de los valores propios ($Re(\omega_i) > 0$) de la matriz A es positiva, por lo tanto, hay sólo dos posibilidades para la dinámica del sistema linealizado, es decir $Im(\omega_i) = 0$ o $Im(\omega_i) \neq 0$. Si además suponemos que los términos no lineales impiden que las soluciones crezcan indefinidamente⁶, los únicos estados a los cuales puede tender el sistema cuando $t \rightarrow \infty$ son un punto fijo estable o un ciclo límite estable⁷. El primer caso, corresponde a un estado estacionario homogéneo, mientras que el segundo corresponde a un estado en el cual la densidad global del sistema oscila de manera periódica.

Como queremos estudiar el tipo de inestabilidades para un estado estacionario homogéneo, nos olvidaremos por un momento del segundo caso, es decir, del caso cuando el sistema oscila de manera periódica.

Podemos concluir entonces, que los estados estacionarios homogéneos de la ec.(3.26), tienen que ser estables ante perturbaciones con longitudes de onda grande, ya que en caso contrario cualquier perturbación del estado estacionario, tiene como consecuencia que el sistema evolucione de dicho estado homogéneo estacionario a otro estado homogéneo estacionario estable, lo que implica que los estados estacionarios inestables nunca podrán ser observados experimentalmente mientras que los estables si. La condición de estabilidad para el estado estacionario homogéneo impone restricciones a los valores que los parámetros del sistema pueden tener. Para ver dichas restricciones de manera explícita tenemos que calcular los valores propios ω_i de la matriz de estabilidad o matriz de Jacobi.

La ecuación que cumplen los valores propios está dada por

$$\begin{vmatrix} \eta \partial_u F - \omega_i & \eta \partial_v F \\ \eta \partial_u G & \eta \partial_v G - \omega_i \end{vmatrix} = 0. \quad (3.31)$$

⁵En este caso, todas las perturbaciones con longitud de onda menor que las dimensiones de Ω , decaen exponencialmente en el tiempo, por lo tanto es válido suponer que la dinámica del sistema es la misma que en el caso de reacciones en el límite reactivo.

⁶Suposición que debe cumplir cualquier modelo de un fenómeno cuyas variables de estado están acotadas, tales como la densidad.

⁷Al estar trabajando con dos sustancias, la dimensión del espacio fase del sistema es dos, por lo tanto podemos descartar un régimen asintótico caótico para las densidades [31].

Por lo tanto

$$\omega_i/\eta = \frac{\partial_u F + \partial_v G}{2} \pm \frac{((\partial_u F + \partial_v G)^2 - 4(\partial_u F \partial_v G - \partial_v F \partial_u G))^{1/2}}{2}, \quad (3.32)$$

donde las derivadas parciales que aparecen en la ec.(3.31) están evaluadas en el estado (u_0, v_0) . Entonces, para que $Re(\omega_i) < 0$; $i = 1, 2$, lo que garantiza que (u_0, v_0) sea asintóticamente estable ante perturbaciones uniformes (perturbaciones cuyo número de onda $k = 0$), necesitamos:

$$\begin{aligned} (\partial_u F + \partial_v G) |_{(u_0, v_0)} &< 0, \\ \det(A) |_{(u_0, v_0)} &= |A| > 0. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para estudiar la estabilidad de los estados de equilibrio con respecto a perturbaciones con número de onda k , podemos escribir dichas perturbaciones como $V e^{st+i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, sustituyendo esta expresión en la ec.(3.28) tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -dk^2 + a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -k^2 + a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

donde $a_{i,j}$, es el elemento ij -ésimo de la matriz de estabilidad.

Entonces, la solución general de la ec.(3.34) está dada por

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \sum_k \left(W_1(k) V_1(k) e^{\omega_1(k)t} f(kx) + W_2(k) V_2(k) e^{\omega_2(k)t} f(kx) \right), \quad (3.35)$$

donde las W_i con $i = 1, 2$, son constantes que dependen únicamente de la condición inicial, mientras que V_i y ω_i son los vectores y valores propios de la matriz $A - Ik^2$, donde I es la matriz diagonal de 2×2 cuyas entradas son d y 1 , y $f(kx)$ son las funciones propias del operador de Laplace.

La ecuación que cumplen los valores propios ω_i en este caso es

$$\begin{vmatrix} \eta a_{11} - dk^2 - \omega_i & \eta a_{12} \\ \eta a_{21} & \eta a_{22} - k^2 - \omega_i \end{vmatrix} = 0. \quad (3.36)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} \omega_i^2 + \omega_i(k^2(1+d) - \eta(a_{11} + a_{22})) + h(k^2) &= 0, \\ h(k^2) &= dk^4 - \eta(da_{11} + a_{22})k^2 + \eta^2|A|. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Despejando ω_i de la ec.(3.37) tenemos

$$2\omega_i = -(k^2(1+d) - \eta(a_{11} + a_{22})) \pm [k^2(1+d) - \eta(a_{11} + a_{22})^2 - 4h(k^2)]^{1/2}. \quad (3.38)$$

Ahora bien, para que exista una inestabilidad es necesario que $Re(\omega_i(k)) > 0$, con $k \neq 0$, por lo tanto: $h(k^2) = dk^4 - \eta(da_{11} + a_{22})k^2 + \eta^2|A| < 0$, ya que debido a las condiciones dadas en la ec.(3.33) tenemos: $-(k^2(1+d) - \eta(a_{11} + a_{22})) < 0$. Debido también a dichas condiciones, la única forma en que $h(k^2) < 0$ es $da_{11} + a_{22} > 0$, y para que esta última desigualdad se cumpla, es necesario que se satisfagan las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \text{signo}(a_{11}) &\neq \text{signo}(a_{22}), \\ d &\neq 1. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Podemos concluir entonces, que para la existencia de una inestabilidad ante perturbaciones con $k \neq 0$, es necesario que los compuestos químicos con concentraciones u y v se difundan a diferentes velocidades.

La condición $da_{11} + a_{22} > 0$ es una condición necesaria pero no suficiente para el cumplimiento de $h(k^2) < 0$. Para asegurar que $h(k^2) < 0$, se pide que el mínimo de la función $h(k^2)$ sea menor que cero, lo que implica

$$\begin{aligned} h(k_0^2) &< 0, \\ \frac{dh(k^2)}{d(k^2)} \Big|_{k_0^2} &= 0, \end{aligned} \tag{3.40}$$

donde k_0 es el número de onda para el cual $h(k^2)$ tiene un mínimo. Escritas explícitamente las condiciones son

$$\begin{aligned} h_{min} &= \eta^2 \left(|A| - \frac{(da_{11} + a_{22})^2}{4d} \right) < 0, \\ k_0^2 &= \eta \frac{(da_{11} + a_{22})}{2d}. \end{aligned} \tag{3.41}$$

El punto de bifurcación $h_{min} = 0$, nos define un valor crítico d_c al suponer que todos los demás parámetros están fijos. Por lo tanto, si $d > d_c$ el sistema es inestable ante perturbaciones con número de onda $k^2 \sim k_0^2$, donde k_0 corresponde al número de onda más inestable.

El intervalo de números de onda k que pueden ser inestables está determinado por los ceros de $h(k^2)$, de tal manera que si $k^2 \in (k_1^2, k_2^2)$, donde $h(k_1^2) = 0$ y $h(k_2^2) = 0$, entonces es un número de onda inestable, ver la fig.(3.1). La inestabilidad que cumple con las condiciones antes mencionadas, se conoce como la inestabilidad de Turing, y es, de acuerdo con la clasificación del capítulo 2, una inestabilidad celular.

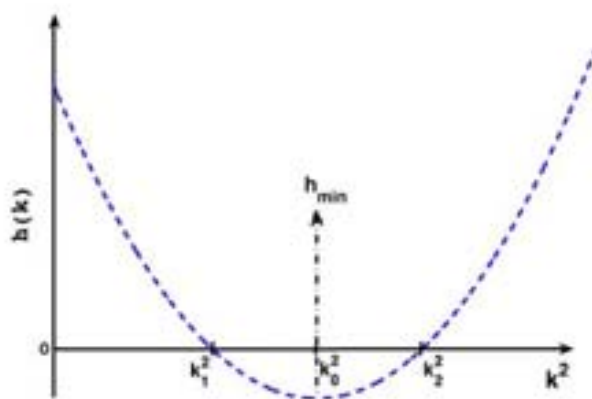


Figura 3.1: Gráfica de la función $h(k)$ vs. k^2 cuando ésta cumple las condiciones para la existencia de la inestabilidad de Turing.

Si juntamos los resultados de la última sección, podemos concluir que para que exista una inestabilidad de Turing en un sistema de reacción-difusión, la cinética química debe cumplir con las siguientes condiciones

$$\begin{aligned}
 a_{11} + a_{22} &< 0 \\
 a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} &> 0 \\
 da_{11} + a_{22} &> 0 \\
 (da_{11} + a_{22})^2 - 4d(a_{12}a_{22} - a_{12}a_{21}) &> 0,
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

condiciones que tienen como consecuencia las relaciones mostradas en la ec.(3.39).

Como veremos en el Capítulo 6, la presencia de *subdifusión* en los sistemas de reacción-difusión puede tener como consecuencia que cinéticas químicas que no cumplen algunas de las desigualdades mostradas en la ec.(3.42) (en particular la primera desigualdad) presenten una inestabilidad de Turing, es decir, en presencia de subdifusión las condiciones necesarias para la existencia de dicha inestabilidad pueden ser relajadas.

En el siguiente capítulo definiremos formalmente lo que queremos decir con subdifusión, además de deducir las ecuaciones necesarias para modelar este fenómeno.

Capítulo 4

Difusión anómala.

La difusión es un fenómeno común en la naturaleza, y es fundamentalmente un mecanismo que transporta materia o alguna otra cantidad física de un lugar a otro. Las características de dicho mecanismo dependen de las propiedades físicas del medio en el cual se lleva a cabo y de la sustancia que se difunde. Algunas de estas propiedades son: la temperatura, la dimensión del espacio, la estructura geométrica del espacio o sustancia en la cual se lleva a cabo la difusión y el tipo de interacción entre la sustancia que se difunde y la sustancia en la cual ocurre este fenómeno.

El proceso que da origen a la difusión es un proceso estocástico o aleatorio; esto se puede apreciar mediante el ejemplo más conocido y mejor entendido de dicho fenómeno, el movimiento browniano. La observación del *movimiento browniano* fue reportada por primera vez en 1784 por el físico Holandés Jan Ingen-Housz, pero no fue hasta 1828, cuando el botánico inglés Robert Brown publicó sus estudios sobre el movimiento de pequeños granos de polen en la superficie del agua cuando éste fue nombrado. Dicho movimiento fue explicado por primera vez por Albert Einstein en 1905, en un artículo titulado: *On the motion, required by the molecular-kinetic theory of heat, of particles suspended in fluids at rest*¹. En este artículo, Einstein utiliza como herramienta a los caminantes aleatorios, que junto con la hipótesis atómica de la materia sirven para deducir una ecuación que modela este fenómeno².

¹Este artículo fue muy importante ya que, entre otras cosas, ayudó a establecer de manera definitiva la hipótesis atómica de la materia.

²Una de las ideas de Einstein, era que mediante los resultados obtenidos en el artículo mencionado, sería posible medir experimentalmente el número de Avogadro, cosa que hizo Jean Perrin, lo cual le valió el Premio Nobel de física de 1926.

El hecho que Einstein haya utilizado estas ideas, se debe a que la causa del movimiento browniano son los continuos choques que sufren las partículas suspendidas en la superficie del fluido con las moléculas del mismo, lo cual tiene como consecuencia que su movimiento sea errático e impredecible. De ahí la naturaleza estocástica del fenómeno. Uno de los principales resultados del artículo antes mencionado, es que $\langle r^2 \rangle \propto t$, donde r es la distancia recorrida por el caminante y los corchetes significan el promedio de la cantidad dentro de ellos. Este resultado es la principal característica de la difusión normal y es fundamentalmente, consecuencia de un teorema conocido como el teorema del *límite central*.

El teorema del límite central establece, sin ser muy rigurosos, que la distribución de probabilidad que define a una suma de variables aleatorias independientes e idénticamente distribuidas, cuyo segundo momento existe, tiende a una distribución gaussiana cuando el número de variables N que entran en la suma tiende a infinito³.

Alrededor de 1926, debido al trabajo de Richardson sobre la difusión en medios turbulentos, se empezaron a conocer los primeros ejemplos en los cuales no se cumplía la relación encontrada por Einstein para $\langle r^2 \rangle$, y para mediados de los 60's ya había varios ejemplos de sistemas físicos para los cuales tampoco se cumplía dicha predicción, entre ellos destaca la difusión de partículas cargadas en sólidos amorfos [32].

En 1965 Montroll y Weiss [33] introdujeron las *caminatas aleatorias en tiempo continuo* (CACT), herramienta mediante la cual fue posible la explicación de algunos de estos fenómenos, conocidos ahora como difusión anómala [34, 35].

Por otro lado, en la década de los años 90 se descubrió que el formalismo de las caminatas aleatorias en tiempo continuo, en ciertos casos era equivalente a una descripción continua y macroscópica de la densidad de caminantes mediante una ecuación de difusión generalizada. En esta ecuación de difusión generalizada, los operadores diferenciales que aparecen en la ec.(3.22) son sustituidos por operadores conocidos como derivadas fraccionarias [36, 37, 38, 39]. Las ventajas de dicho descubrimiento fueron entre otras, la resolución de problemas de valores iniciales con condiciones a la frontera específicas [40] para fenómenos de difusión anómala, el estudio de las soluciones de esta ecuación en presencia de fuerzas o campos y la gran ventaja de poder utilizar las herramientas ya conocidas de la teoría de ecuaciones diferenciales

³Véase Apéndice A.

parciales, tales como separación de variables y métodos de transformadas.

Para concluir esta sección introductoria es importante aclarar que el fenómeno de la difusión puede ser extendido a cantidades más abstractas, tales como energía, momento etc., ya que muchos casos de difusión anómala ocurren en el espacio fase de ciertos sistemas dinámicos [41], por lo tanto, es posible que este fenómeno ocurra en espacios con dimensiones mucho mayores a 3 o incluso en espacios con dimensiones no enteras [41].

4.1. Difusión normal y el teorema del límite central.

En el capítulo anterior se vió cómo obtener la ecuación de difusión utilizando la ecuación de continuidad y la ley de Fick. Esta misma ecuación puede ser deducida usando una de las ideas mencionadas en la introducción de este capítulo, es decir, mediante caminantes aleatorios.

Un caminante aleatorio, es un proceso estocástico definido sobre los puntos de una malla. Generalmente la variable que toma el papel del tiempo se considera como una variable discreta, y para cada unidad de tiempo τ , el caminante cambia su posición actual por otra posición cualquiera en la malla de acuerdo a una distribución de probabilidad $\lambda(x)$. Esta distribución define la probabilidad que el caminante tiene de hacer un salto de cierta longitud en cierta dirección. Entonces, la posición que ocupa el caminante en la malla después de N saltos, donde $N = t/\tau$, y suponiendo que éste partió del origen, está dada por

$$X_N = \sum_{i=1}^N x_i, \quad (4.1)$$

donde x_i son variables aleatorias definidas por una distribución de probabilidad $\lambda_i(x)$. Estas variables son de manera general vectores de la forma $x_i = X_n - X_m$, donde X_n y X_m son dos puntos cualesquiera de la malla.

Si suponemos que todos los saltos están idénticamente distribuidos y son independientes entre sí, la posición del caminante cumple con

$$\begin{aligned} \langle X_N \rangle &= N \langle x \rangle, \\ \langle X_N^2 \rangle &= \sum_{i,j} \langle x_j \cdot x_i \rangle = \sum_{i \neq j} \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle + \sum_{i=1}^N \langle x_i^2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.2)$$

La ec.(4.2) puede reescribirse de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\langle X_N \rangle &= N\langle x \rangle, \\ \langle X_N^2 \rangle &= N\langle x^2 \rangle + N(N-1)\langle x \rangle^2.\end{aligned}\quad (4.3)$$

Sustituyendo $N = t/\tau$, $v = \langle x \rangle/\tau$ y $D = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)/2d\tau$ en la ec.(4.3) podemos concluir que el promedio y la varianza del desplazamiento del caminante, están dados por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}\langle X_N \rangle &= vt, \\ \langle X_N^2 \rangle - \langle X_N \rangle^2 &= 2dDt,\end{aligned}\quad (4.4)$$

donde d es la dimensión del espacio donde se lleva a cabo la caminata.

Es importante notar que para la deducción de la ec.(4.4), suponemos de manera implícita la existencia del segundo momento de la distribución de saltos $\lambda(x)$, y el hecho que no se utilizó la forma explícita de dicha distribución. Por lo tanto, estas expresiones son válidas independientemente de la distribución de probabilidad utilizada para los saltos del caminante. Las únicas condiciones necesarias son: la existencia del segundo momento y la independencia entre saltos.

El hecho que la varianza de la variable X_N sea lineal en el tiempo y que este resultado sea independiente de las distribuciones de probabilidad utilizadas, es consecuencia del teorema del límite central. Este teorema afirma, que si el segundo momento de la distribución de probabilidad $\lambda(x)$ existe, y las variables x_i son independientes entre sí, entonces la distribución de probabilidad $P_N(X)$ que define a la variable aleatoria X_N tiende a una distribución gaussiana cuando el número de saltos $N \rightarrow \infty$ ⁴.

Para poder obtener más información acerca del movimiento del caminante aleatorio y de su relación con la ecuación de difusión, es importante conocer la distribución $P_N(X)$. Para esto supongamos que la caminata se da en una malla cúbica d -dimensional, y que los saltos se dan solamente entre puntos adyacentes de la malla con una probabilidad $\lambda(x) = \frac{1}{2d}$, donde d es la dimensión de la malla.

La probabilidad de encontrar al caminante en X_i al tiempo $t = N\tau$ está dada por [34]

$$P_N(X_i) = \sum_{j=1}^d \frac{P_{N-1}(X_i - a\hat{e}_j)}{2d} + \sum_{j=1}^d \frac{P_{N-1}(X_i + a\hat{e}_j)}{2d}. \quad (4.5)$$

⁴Véase Apéndice A.

Donde \hat{e}_j son los vectores unitarios que definen la malla y a es la distancia entre dos puntos vecinos.

Las ecuaciones con la estructura de la ec.(4.5), se conocen como ecuaciones maestras.

Restando $P_{N-1}(X_i)$ de los dos lados de la ecuación maestra y reacomodando términos tenemos

$$P_N(X_i) - P_{N-1}(X_i) = \frac{1}{2d} \sum_{j=1}^{j=d} (P_{N-1}(X_i - a\hat{e}_j) - 2P_{N-1}(X_i) + P_{N-1}(X_i + a\hat{e}_j)). \quad (4.6)$$

Dividendo entre τ y tomando el límite cuando $\tau \rightarrow 0$ y $a \rightarrow 0$, de tal manera que: $0 < \lim_{\tau, a \rightarrow 0} \frac{a^2}{\tau} < \infty$, la ec.(4.6) toma la siguiente forma

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \nabla^2 P(x, t). \quad (4.7)$$

Por lo tanto, la dinámica de $P_N(X)$ en el límite continuo está dada por la ecuación de difusión (ec.(4.7)), donde el coeficiente de difusión es

$$D = \lim_{\tau, a \rightarrow 0} \left(\frac{a^2}{2\tau d} \right). \quad (4.8)$$

Cuando la caminata se lleva a cabo no en una malla, sino en todo el espacio \mathbb{R}^d , la distribución $P_N(X)$ cumple con la siguiente ecuación maestra

$$P_{N+1}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} P_N(X - x) \lambda_{N+1}(x | X - x) dx; \quad x, X \in \mathbb{R}^d, \quad (4.9)$$

donde⁵ $\lambda_{N+1}(x | X - x)$ es la probabilidad de que el caminante de un salto x dado que su posición es $X - x$. Si suponemos que los saltos son independientes del lugar en el cual se llevan a cabo, entonces podemos escribir la distribución del N - ésimo salto como $\lambda_N(x | X - x) = \lambda_N(x)$.

Por otro lado, si suponemos que todos los saltos del caminante son independientes y están dados por la misma distribución, es decir si $\lambda_i(x) = \lambda(x)$, y además pedimos que la función $P_N(X)$ sea infinitamente diferenciable, la

⁵Nótese que en la ec.(4.9) estamos suponiendo de manera implícita la siguiente igualdad: $\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, x_2, \dots, x_d) dx_1 dx_2 \cdots dx_d = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$.

ec.(4.9) puede ser escrita (utilizando un desarrollo en serie de Taylor alrededor de X) como

$$\begin{aligned}
P_{N+1}(X) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(P_N(X) + \sum_{j=0}^d \frac{\partial^j P_N(X)}{\partial X_j} (-x_j) \right) \lambda(x) d\bar{x} \\
&+ \frac{1}{2!} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{j,i=0}^d \frac{\partial^2 P_N(X)}{\partial X_i \partial X_j} x_j x_i + \dots \right) \lambda(x) d\bar{x}.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Si $N \gg 1 \implies \|X\| \gg \|x\|$, por lo tanto es posible despreciar los términos mayores al término cuadrático, haciendo esto y reacomodando términos en la ec.(4.10) tenemos

$$P_{N+1}(X) - P_N(X) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\nabla P_N(X) \cdot x \lambda(x) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P_N(X)}{\partial X_i \partial X_j} x_i x_j \lambda(x) \right) d\bar{x}. \tag{4.11}$$

Donde x_i con $i = 1, 2, \dots, d$ son las componentes del salto x en la dirección i . Si suponemos que la caminata es isotrópica, es decir $\langle x \rangle = 0$, dividimos ambos lados de la igualdad entre τ y tomamos el límite cuando $N \rightarrow \infty$ tenemos

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = D \nabla^2 P(X, t), \tag{4.12}$$

recuperando así la ecuación de difusión, con el coeficiente de difusión dado por

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{2\tau d}. \tag{4.13}$$

Si aplicamos la transformada de Fourier a ambos lados de la ec.(4.12) y resolvemos la ecuación diferencial que satisface dicha transformada tenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} &= -Dk^2 \tilde{P}(k, t) \\
\implies \tilde{P}(k, t) &= \tilde{P}(k, 0) e^{(-Dk^2 t)} \\
\implies P(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} P(x', 0) \frac{e^{-\frac{(x-x')^2}{4Dt}}}{(\sqrt{4\pi Dt})^d} dx',
\end{aligned} \tag{4.14}$$

donde $\tilde{P}(k, t)$ es la transformada de Fourier de $P(x, t)$.

Por lo tanto, si el caminante está en la posición $x = 0$ al tiempo $t = 0$ entonces $P(x, 0) = \delta(x)$ donde $\delta(x)$ es la delta de Dirac, sustituyendo esto en la última expresión de la ec.(4.14) y calculando la integral, tenemos que la distribución de probabilidad para la posición del caminante al tiempo t está dada por

$$P(x, t) = \frac{e^{-(x^2/4Dt)}}{(\sqrt{4\pi Dt})^d}, \quad (4.15)$$

recuperando así el resultado predicho por el teorema del límite central.

Ahora bien, los momentos de una distribución de probabilidad pueden ser calculados mediante la siguiente expresión

$$\langle X_j(t)^n \rangle = i^n \frac{\partial^n \tilde{P}(k, t)}{\partial k_j^n} \Big|_{k=0}, \quad (4.16)$$

donde $\tilde{P}(k, t)$ es la transformada de Fourier de $P(X, t)$.

Entonces

$$\langle X_j^2 \rangle = -\frac{\partial^2 \tilde{P}(k, t)}{\partial k_j^2} \Big|_{k_j=0}, \quad (4.17)$$

Por lo tanto, utilizando la ec.(4.17) y la segunda expresión de la ec.(4.14) con $\tilde{P}(k, 0) = 1$, es decir con $P(x, 0) = \delta(x)$ tenemos:

$$\langle X(t)^2 \rangle = 2dDt. \quad (4.18)$$

Este último resultado también puede ser obtenido calculando explícitamente el segundo momento de la distribución dada en la ec.(4.15).

Ahora, si en lugar de un caminante hay M caminantes diferentes, y la probabilidad de encontrar al j -ésimo caminante en un elemento de volumen alrededor de la posición X al tiempo t está dada por $P_j(X, t)dX$, el número promedio de caminantes dentro de un volumen Ω es

$$N(t) = \int_{\Omega} \sum_{j=1}^M P_j(X, t)dX. \quad (4.19)$$

De la ec.(4.19) podemos concluir que la densidad de cualquier sustancia compuesta de M partículas que se difunden en un medio determinado, está dada por

$$\rho(X, t) = \sum_{j=1}^M P_j(X, t). \quad (4.20)$$

Si además suponemos que dichos caminantes no interactúan entre sí y que $t \gg \tau$, donde τ es el tiempo característico entre saltos sucesivos, podemos afirmar que $P_j(X, t)$ es solución a la ecuación de difusión para $j = 1, 2, \dots, M$. Por lo tanto, de la ec.(4.20) y de la linealidad de la ecuación de difusión, es fácil ver que $\rho(X, t)$ cumple con

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(X, t)}{\partial t} &= D \nabla^2 \rho(X, t), \\ \int_{\mathbb{R}^d} \rho(X, t) dX &= M. \end{aligned} \tag{4.21}$$

Podemos concluir entonces, que el comportamiento de M caminantes aleatorios que no interactúan entre sí con las características antes mencionadas, es equivalente al comportamiento de la solución de la ec.(4.21) que satisface la densidad ρ , donde el coeficiente de difusión está dado por la ec.(4.13).

Es importante mencionar que si se toman en cuenta las interacciones entre los M caminantes, el comportamiento de la densidad de estos también está dado por la ec.(4.21), con la diferencia que el coeficiente de difusión ya no corresponde a la expresión mostrada en la ec.(4.13). Cuando esto sucede se dice que la difusión es difusión cooperativa, mientras que para el caso en que dichas interacciones no existen el proceso difusivo se conoce generalmente como auto-difusión. Cuando los sistemas están muy diluidos ($\rho \ll 1$) los dos procesos son prácticamente iguales, por lo que en estos casos solamente se habla de difusión.

4.2. CATC y la ecuación de difusión generalizada.

En la sección anterior vimos que la ecuación de difusión es consecuencia fundamentalmente del teorema del límite central y que su principal característica está dada por la ec.(4.18).

Las suposiciones hechas para la deducción de esta ecuación fueron: la homogeneidad del espacio, la independencia entre saltos sucesivos, y la existencia del segundo momento de la distribución de saltos.

La difusión anómala generalmente se da en sistemas desordenados o inhomogéneos [32, 34, 41, 42]. Dicho "desorden" tiene dos tipos de consecuencias en el movimiento difusivo. La primera consiste en la modificación de los coeficientes de transporte (tales como el coeficiente de difusión y la velocidad

promedio de las partículas que se difunden) con respecto a los mismos coeficientes en sistemas ordenados, mientras que la segunda, puede alterar las leyes fundamentales del movimiento difusivo, tales como el cumplimiento del teorema del límite central.

Generalmente la difusión anómala se caracteriza mediante alguna de las siguientes expresiones [34]

$$\langle X(t)^2 \rangle \propto t^\gamma, \quad \gamma \neq 1, \quad (4.22)$$

o

$$\langle X(t)^2 \rangle \propto t \ln(t), \quad (4.23)$$

donde dependiendo del valor de γ , conocido como el *exponente anómalo*, ésta puede ser clasificada en dos casos. El primero corresponde a $\gamma < 1$ y es conocido como *subdifusión*; mientras que el segundo corresponde a $1 < \gamma$ y se conoce como *superdifusión*.

De acuerdo con lo dicho en la sección anterior, es claro que en situaciones en las cuales las relaciones dadas por la ec.(4.22) son válidas, el teorema del límite central no se cumple. Las razones para que este teorema no se cumpla son esencialmente: la aparición de distribuciones con colas anchas o pesadas en la caminata aleatoria, esto es, distribuciones para las cuales el segundo e incluso el primer momento no existen, y la aparición de correlaciones de largo alcance entre saltos.

Si los saltos son independientes entre sí, pero la distribución de saltos $\lambda(x)$ es una distribución con colas pesadas⁶, es decir, es una distribución que cumple

$$\begin{aligned} \lambda(x) &\sim c_\gamma |x|^{-1-\gamma}, \\ 1 &\ll \|x\|, \\ 0 &< \gamma < 2, \end{aligned} \quad (4.24)$$

entonces surge la pregunta de como caracterizar la suma dada por

$$X_N = \sum_{i=1}^N x_i. \quad (4.25)$$

⁶Para este tipo de distribuciones el primer momento no existe ($\langle x \rangle = \infty$) si $0 < \gamma < 1$ mientras que para $1 < \gamma < 2$ el primer momento existe pero el segundo ya no ($\langle x^2 \rangle = \infty$), por lo tanto $\langle X_N \rangle = \infty$ si $0 < \gamma < 1$ o $\langle X_N^2 \rangle = \infty$ si $1 < \gamma < 2$.

Esta pregunta fue contestada por P. Lévy y Khintchine [34, 43], quienes demostraron que la distribución de probabilidad $P_N(X)$ que caracteriza a la variable aleatoria X_N tiende a una distribución límite $L_{\gamma,\beta}(X)$ cuando $N \rightarrow \infty$. Las distribuciones límite mencionadas son conocidas como distribuciones de Lévy y están caracterizadas por dos parámetros, γ y β . El parámetro β nos dice que tan asimétrica es la distribución, $-1 \leq \beta \leq 1$, donde $\beta = 0$ corresponde a una distribución simétrica, ver la fig.(4.2). Las distribuciones

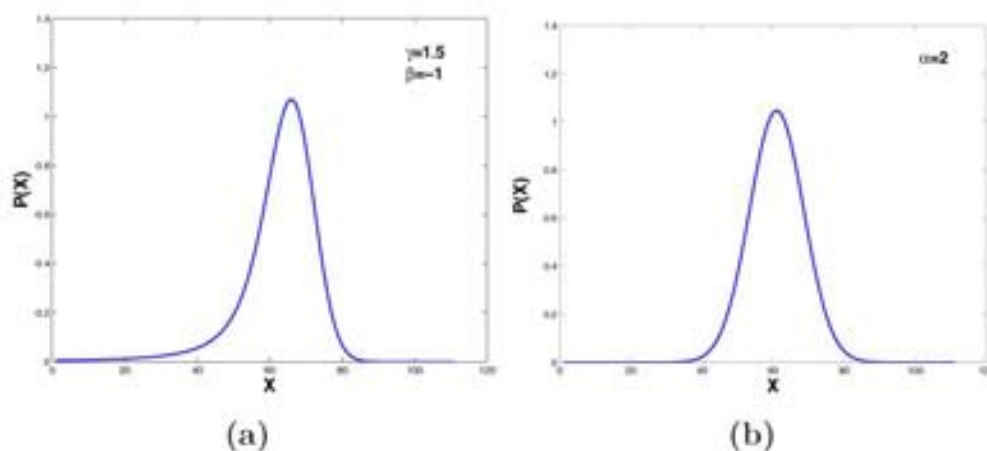


Figura 4.1: (a) Distribución de Lévy completamente asimétrica $\beta = -1$. (b) Distribución Gaussiana.

de Lévy también son distribuciones con colas pesadas, y son del mismo tipo que las distribuciones $\lambda(x)$ que las generan. Por lo tanto, el parámetro γ en dichas distribuciones nos dice cómo se comportan cuando $\|X\| \gg 1$, es decir si la distribución de saltos cumple con la ec.(4.24), entonces $\lim_{N \rightarrow \infty} P_N(X) = L_{\gamma,\beta}(X)$, donde $L_{\gamma,\beta}(X)$ tiene las siguientes características

$$\begin{aligned} L_{\gamma,\beta}(X) &\sim C_\gamma X^{-1-\gamma}, \\ X &\gg 1, \\ 0 &< \gamma < 2. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Estos resultados son claramente una generalización al teorema del límite central para distribuciones cuyos primer y segundo momento no existen. El papel que juega la distribución gaussiana en el teorema del límite central lo

toman las distribuciones de Lévy en este caso⁷.

El comportamiento de la suma dada en la ec.(4.25) puede ser caracterizado de manera cualitativa para una caminata en una dimensión de la siguiente forma:

Sea $x_c(N)$ el salto más pequeño para el cual la probabilidad de que ocurra un salto $x \geq x_c$ sea $O(\frac{1}{N})$, donde N es el número de pasos. Por lo tanto

$$\int_{x_c}^{\infty} \lambda(x) dx \simeq \frac{1}{N}. \quad (4.27)$$

Si $N \gg 1 \implies x_c \gg 1$ por lo que $\lambda(x) \simeq c_\gamma |x|^{-1-\gamma}$ para $x \geq x_c$, entonces $x_c(N) \sim N^{1/\gamma}$.

Utilizando la expresión calculada para $x_c(N)$ podemos ver que para el caso en que $0 < \gamma \leq 1$ (es decir cuando el primer momento de la distribución de saltos no existe) podemos aproximar el primer momento de la distribución $L_{\gamma,\beta}(X)$ como

$$\begin{aligned} \langle X_N \rangle &\sim N \int_{x_0}^{x_c} x \lambda(x) dx \sim N (N^{1/\gamma})^{1-\gamma} = N^{1/\gamma}, \quad \gamma < 1, \\ \langle X_N \rangle &\sim N \int_{x_0}^{x_c} x \lambda(x) dx \sim N (N^{1/\gamma})^{1-\gamma} = N \ln(N), \quad \gamma = 1, \end{aligned} \quad (4.28)$$

donde x_0 toma el valor $x_0 = -\infty$ si la distribución es asimétrica o $x_0 = -x_c$ si es simétrica.

El caso correspondiente a $1 < \gamma \leq 2$ (cuando el segundo momento de la distribución de saltos no existe) está caracterizado por

$$\begin{aligned} \langle X_N - \langle X_N \rangle \rangle^2 &\sim N \int_{x_0}^{x_c} (x - \langle x \rangle)^2 \lambda(x) dx \sim N (N^{1/\gamma})^{2-\gamma} = N^{2/\gamma}, \\ 1 < \gamma < 2; \\ \langle X_N - \langle X_N \rangle \rangle^2 &\sim N \int_{x_0}^{x_c} (x - \langle x \rangle)^2 \lambda(x) dx \sim N \ln(N), \\ \gamma &= 2, \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde $x_0 = -\infty$ si la distribución es asimétrica o $x_0 = -x_c$ si es simétrica.

Si sustituimos $N = t/\tau$ en la ec.(4.28), tenemos

$$\begin{aligned} \langle X(t) \rangle &\sim t^{1/\gamma}, \quad \gamma < 1, \\ \langle X(t) \rangle &\sim t \ln(t), \quad \gamma = 1. \end{aligned} \quad (4.30)$$

⁷Véase Apéndice B.

Por otro lado, si sustituimos $N = t/\tau$ en la ec.(4.29), podemos ver que el comportamiento del caminante para el caso de distribuciones de saltos cuyo segundo momento no existe está caracterizado por

$$\begin{aligned} \langle X(t) - \langle X(t) \rangle \rangle^2 &\sim t^{2/\gamma}, 1 < \gamma < 2, \\ \langle X(t) - \langle X(t) \rangle \rangle^2 &\sim t \ln(t), \gamma = 2. \end{aligned} \tag{4.31}$$

Este tipo de caminatas aleatorias son conocidas como *vuelos de Lévy* y son caminatas que, a diferencia de las caminatas ya discutidas, no tienen una escala bien definida, ver la fig.(4.2).



Figura 4.2: Diferencia entre una caminata aleatoria normal (izquierda) y los vuelos de Lévy (derecha). Las dos caminatas tienen el mismo número de pasos.

En las últimas décadas se ha descubierto que los vuelos de Lévy son útiles para describir toda una gama de fenómenos naturales, desde difusión en sistemas caóticos [44] y turbulentos [45], hasta difusión en polímeros [46] y sistemas biológicos, tales como la descripción de los patrones de vuelo en moscas (*Drosophila*) [47] y albatros [48] entre otros.

De las expresiones dadas en las ec.(4.30,4.31), podemos concluir que este tipo caminatas sirven como modelos para el fenómeno de la superdifusión.

Por otro lado, si las distribuciones de saltos son distribuciones con todos sus momentos definidos, pero los saltos no son independientes entre sí, entonces el primer y el segundo momento de la variable X_N están dados por

$$\begin{aligned}\langle X_N \rangle &= N\langle x \rangle, \\ \langle X_N^2 \rangle &= \sum_{i,j}^N \langle x_j x_i \rangle.\end{aligned}\tag{4.32}$$

Suponiendo que la caminata es isotrópica podemos escribir la ec.(4.32) de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\langle X_N \rangle &= 0, \\ \langle X_N^2 \rangle &= 2 \sum_{i=1}^N (N-i)C(i) + \sum_{i=1}^N C(0),\end{aligned}\tag{4.33}$$

donde hemos supuesto que la función de correlación $C(i) = \langle x_j x_{j+i} \rangle$ es solamente función de i .

Por otro lado

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^N (N-i)C(i) &\sim \int_1^N (N-x)C(x)dx = N \int_1^N (1-x/N)C(x)dx = \\ &N^2 \int_0^{1-1/N} uC(N(1-u))du; \quad u = (1-x/N).\end{aligned}\tag{4.34}$$

Si suponemos que la función de correlación es de la forma $C(x) \sim x^{-\gamma}$ y utilizamos la aproximación de la ec.(4.34), tenemos el siguiente comportamiento para el segundo momento de la posición del caminante

$$\langle X_N^2 \rangle \sim C(0)N + BN^{2-\gamma},\tag{4.35}$$

donde $B = 2 \int_0^{1-1/N} u(1-u)^{-\gamma} du$. Sustituyendo $t = N\tau$ en la ec.(4.35) tenemos

$$\langle X(t)^2 \rangle \sim C(0)t + Bt^{2-\gamma}. \quad (4.36)$$

Por lo tanto, cuando $N \gg 1$ el comportamiento de $\langle X^2 \rangle$ se divide en dos casos

$$\begin{aligned} \langle X(t)^2 \rangle &\sim Bt^{2-\gamma}, \quad \gamma < 1, \\ \langle X(t)^2 \rangle &\sim C(0)t, \quad \gamma > 1. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Si $\gamma < 1$ tenemos superdifusión⁸, mientras que $\gamma > 1$ corresponde a difusión normal. Dicho en palabras: cuando las correlaciones entre los saltos son de corto alcance el teorema del límite central sigue siendo válido, por lo que recuperamos el comportamiento difusivo normal. Para correlaciones de largo alcance, tenemos superdifusión.

En la fig.(4.2) se pueden ver ejemplos de este tipo de caminatas aleatorias en dos dimensiones.



Figura 4.3: Trayectorias típicas de caminatas aleatorias con correlaciones de largo alcance en dos dimensiones. La caminata del lado izquierdo corresponde a: $\gamma = 0.3$, mientras que la del lado derecho corresponde a: $\gamma = 0.8$. Las dos caminatas tienen el mismo número de pasos.

Es importante notar que las causas de la difusión anómala no pueden ser determinadas utilizando la dependencia de X respecto al tiempo. Esto

⁸Esta condición implica que la función de correlación es de largo alcance, mientras que $\gamma > 1$ corresponde a correlaciones de corto alcance.

puede verse en el caso de superdifusión causado por correlaciones de largo alcance y por vuelos de Lévy. Los dos fenómenos nos dan un comportamiento cualitativo de $\langle X(t)^2 \rangle$ idéntico, sin embargo las causas son completamente diferentes.

Si suponemos ahora que el lapso de tiempo que transcurre entre saltos sucesivos es una variable aleatoria, el tiempo t está dado por $t = \sum_{i=1}^N \tau_i$, donde τ_i es una variable aleatoria definida por una distribución de probabilidad $\psi(\tau)$. Este tipo de caminatas se conocen como *caminatas aleatorias en tiempo continuo* y fueron propuestas por primera vez en 1965 por Montroll y Weiss [33] para estudiar ciertos casos de difusión anómala asociados a difusión de partículas cargadas en sólidos amorfos.

Bajo la suposición que los lapsos de tiempo entre saltos sucesivos son variables aleatorias, la ecuación maestra para la probabilidad $P(X, t)$ de encontrar al caminante en X al tiempo t dado que está en $X = 0$ al tiempo $t = 0$, está dada por

$$P(X, t) = \delta(X) \int_0^\infty \psi(\tau) d\tau + \int_0^t \int_{-\infty}^\infty \zeta(X - x, t - \tau) P(x, \tau) dx d\tau, \quad (4.38)$$

donde $\zeta(X - x, t - \tau)$ es la densidad de probabilidad de que suceda un salto de $X - x$ en un lapso de tiempo de duración $t - \tau$. El primer término de la ec.(4.38) es consecuencia de la condición impuesta al tiempo $t = 0$, y da la probabilidad de que la partícula en $X = 0$ no de ningún salto en el intervalo de tiempo $[0, t]$. El segundo término da la probabilidad de que el caminante llegue a X al tiempo t desde cualquier posición del espacio.

Las distribuciones de saltos y de tiempos de espera para CATC están dadas por

$$\begin{aligned} \lambda(x) &= \int_0^\infty \zeta(x, t) dt, \\ \psi(t) &= \int_{-\infty}^\infty \zeta(x, t) dx. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Si escribimos las transformadas de Fourier-Laplace de la ec.(4.38), tenemos

$$\tilde{P}(k, s) = \frac{1 - \tilde{\psi}(s)}{s} \frac{1}{1 - \tilde{\zeta}(k, s)}, \quad (4.40)$$

donde k es la variable de Fourier, s la variable de Laplace, $\tilde{P}(k, t)$ es la transformada de Fourier de $P(x, t)$ y $\tilde{P}(x, s)$ la transformada de Laplace.

Si suponemos que los saltos y los intervalos de tiempo entre saltos son variables independientes, podemos escribir $\zeta(x, t) = \lambda(x)\psi(t) \implies \tilde{\zeta}(k, s) = \tilde{\lambda}(k)\hat{\psi}(s)$, sustituyendo esto en la ec.(4.40) tenemos

$$\tilde{P}(k, s) = \frac{1 - \hat{\psi}(s)}{s} \frac{1}{1 - \tilde{\lambda}(k)\hat{\psi}(s)}. \quad (4.41)$$

Ahora bien, si por simplicidad consideramos que la caminata se lleva a cabo en una dimensión y suponemos que el primer momento de $\psi(t)$ existe y el segundo momento de la distribución de saltos $\lambda(x)$ también existe, entonces para $t \gg 1, |X| \gg 1$, $\hat{\psi}(s)$ y $\tilde{\lambda}(k)$ pueden ser aproximadas mediante los primeros términos de sus expansiones en series⁹ de Taylor, es decir

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}(k) &\approx 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 \tilde{\lambda}(k)}{dk^2} \Big|_{k=0} \right) k^2, \\ \hat{\psi}(s) &\approx 1 + \left(\frac{d\hat{\psi}(s)}{ds} \Big|_{s=0} \right) s, \end{aligned} \quad (4.42)$$

donde hemos supuesto que la caminata es isotrópica, razón por la cual no aparece la primera derivada de $\tilde{\lambda}(k)$.

Sustituyendo las aproximaciones anteriores en la ec.(4.41) y reacomodando términos tenemos

$$s\tilde{P} - 1 = -\frac{\langle x^2 \rangle}{\langle \tau \rangle} k^2 \tilde{P}. \quad (4.43)$$

Aplicando las transformadas inversas de Fourier y Laplace a los dos lados de la ec.(4.43), vemos que la distribución $P(X, t)$ cumple con la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(X, t)}{\partial t} &= D \nabla^2 P(X, t), \\ P(X, 0) &= \delta(X), \\ D &= \frac{\langle x^2 \rangle}{\langle \tau \rangle}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Por otro lado, si no existe el primer momento de $\psi(t)$ (es decir $\langle t \rangle = \infty$) ni el segundo momento de $\lambda(x)$, y además su comportamiento asintótico

⁹Las derivadas de $\tilde{\lambda}(k)$ y $\hat{\psi}(s)$ valuadas en cero corresponden a los momentos de dichas distribuciones, ver la ec.(4.16)

está determinado por¹⁰

$$\begin{aligned}\psi(t) &\sim A_\beta t^{-(1+\beta)}, \quad t \gg 1, \\ \lambda(x) &\sim |x|^{-(1+\gamma)}, \quad x \gg 1.\end{aligned}\tag{4.45}$$

Entonces para $t \gg 1$ y $x \gg 1$ tenemos

$$\begin{aligned}\tilde{\lambda}(k) &\approx 1 - D_\gamma |k|^\gamma, \\ \hat{\psi}(s) &\approx 1 - c_\beta s^\beta.\end{aligned}\tag{4.46}$$

Las expresiones mostradas en la ec.(4.46) son expansiones asintóticas para $\tilde{\lambda}(k)$ y $\hat{\psi}(s)$, cuando $u, k \ll 1$, ya que en este caso no existe la primera derivada de $\hat{\psi}(s)$ ni la segunda derivada de $\tilde{\lambda}(k)$.

Sustituyendo la ec.(4.46) en la ec.(4.41) y reacomodando términos tenemos

$$\begin{aligned}s^\beta \tilde{P}(k, s) - s^{\beta-1} &= -D_{\gamma, \beta} |k|^\gamma \tilde{P}(k, s), \\ 0 < \beta \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2.\end{aligned}\tag{4.47}$$

Aplicando las transformadas inversas de Fourier y Laplace a ambos lados de la ec.(4.47) obtenemos la siguiente ecuación para $P(X, t)$

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\beta P(X, t)}{\partial t^\beta} &= D_{\gamma, \beta} \frac{\partial^\gamma P(x, t)}{\partial |X|^\gamma}, \\ P(X, 0) &= \delta(X), \\ 0 < \beta \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2.\end{aligned}\tag{4.48}$$

Donde $\frac{{}^c\partial^\beta P(X, t)}{\partial t^\beta}$ es la *derivada fraccionaria de Caputo* de la función $P(X, t)$ de orden β [49, 50, 51] y $\frac{\partial^\gamma P(x, t)}{\partial |X|^\gamma}$ es la *derivada fraccionaria simétrica de Riemann-Liouville* de orden γ [36, 37, 52]. La forma explícita de estos operadores es

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\beta P(X, t)}{\partial t^\beta} &= \frac{1}{\Gamma(1-\beta)} \int_0^t (t-\tau)^{-\beta} \frac{\partial P(X, \tau)}{\partial \tau} d\tau, \\ \frac{\partial^\gamma P(X, t)}{\partial |X|^\gamma} &= \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial^2}{\partial X^2} \int_{-\infty}^{\infty} |X-Y|^{1-\gamma} P(Y, t) dY, \\ 0 < \beta \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2.\end{aligned}\tag{4.49}$$

¹⁰Nótese que el pedir que no existan el primer momento de $\psi(t)$ y el segundo momento de $\lambda(x)$ implica las siguientes desigualdades: $0 < \beta < 1$ y $1 < \gamma < 2$. El límite inferior para γ quiere decir que estamos suponiendo que el primer momento de la distribución de saltos existe.

Como veremos en el siguiente capítulo, las expresiones mostradas en la ec.(4.49) son una generalización de los operadores de derivación usuales, y es posible ver que cumplen con

$$\begin{aligned}\lim_{\beta \rightarrow 1} \frac{{}^c \partial^\beta P(X, t)}{\partial t^\beta} &= \frac{\partial P(X, t)}{\partial t}, \\ \lim_{\gamma \rightarrow 2} \frac{\partial^\gamma P(X, t)}{\partial |X|^\gamma} &= \frac{\partial^2 P(X, t)}{\partial X^2},\end{aligned}\tag{4.50}$$

ya que $\lim_{\beta \rightarrow 1} \frac{(t-\tau)^\beta}{\Gamma(1-\beta)} = \delta(t-\tau)$, $\lim_{\gamma \rightarrow 2} \frac{(X-Y)^{1-\gamma}}{\Gamma(2-\gamma)} = \delta(X-Y)$.

La ec.(4.48) se conoce como la ecuación de difusión generalizada, y mediante ella es posible estudiar varios aspectos de la difusión anómala, en particular superdifusión causada por vuelos de Lévy, subdifusión causada por trampas u obstáculos en el medio en el cual ocurre el fenómeno difusivo, e incluso combinaciones de estos dos fenómenos.

El estudio de la difusión anómala mediante esta ecuación es útil, ya que permite utilizar herramientas conocidas de la teoría de ecuaciones diferenciales parciales, tales como técnicas de transformadas y separación de variables. Además permite introducir fuerzas o en general campos en los fenómenos modelados a través de ella. Otra ventaja de utilizar la ecuación de difusión generalizada es que permite resolver problemas con condiciones a la frontera, mientras que estudiar este tipo de problemas utilizando técnicas de caminantes aleatorios es más difícil.

Es importante mencionar que al haber pedido que la distribución $\zeta(x, t)$ de la ec.(4.38) fuera de la forma $\zeta(x, t) = \lambda(x)\psi(t)$, dejamos de lado un modelo para superdifusión conocido como caminatas de Lévy [35, 53]. La ventaja de este modelo es que $\langle X(t)^2 \rangle < \infty$ a diferencia de los vuelos de Lévy.

En una caminata de Lévy, la distribución de saltos también es una distribución con colas pesadas, pero el lapso de tiempo que transcurre entre saltos sucesivos no es independiente del tamaño del salto, sino que cumple con: $\zeta(x, t) = \psi(x|t)\lambda(x)$, donde $\psi(x|t)$ es la probabilidad condicional de que un salto x tome un tiempo t . Para caminantes que se mueven a velocidad constante v , dicha distribución condicional se puede escribir como: $\psi(r|t) = \delta(t - |x|/v)$.

Las expresiones para el segundo momento del desplazamiento $X(t)$ del

caminante, correspondientes a las caminatas de Lévy son [53] :

$$\langle X(t)^2 \rangle = \begin{cases} t^2, 0 < \gamma < 1, \\ t^2 / \ln(t), \gamma = 1, \\ t^{3-\gamma}, 1 < \gamma < 2, \\ t \ln(t), \gamma = 2, \\ t, \gamma > 2. \end{cases} \quad (4.51)$$

Donde γ es el exponente anómalo que aparece en la ec.(4.24).

4.2.1. Superdifusión

De lo dicho anteriormente, vemos que la ecuación de difusión generalizada correspondiente al fenómeno de superdifusión en una dimensión está dada por

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = D_\gamma \frac{\partial^\gamma P(X, t)}{\partial |X|^\gamma}, \quad (4.52)$$

$$1 < \gamma \leq 2.$$

Las solución de esta ecuación correspondiente a la condición inicial $P(X, 0) = \delta(X)$, es una distribución de Lévy simétrica de orden γ , es decir $L_{\gamma,0}(X)$. Para obtener dicho resultado, aplicamos la transformada de Fourier a los dos lados de la ec.(4.52) y utilizamos el hecho que la transformada de Fourier del operador espacial de la ec.(4.52) está dada por la siguiente expresión ¹¹

$$F\left(\frac{\partial^\gamma P(X, t)}{\partial |x|^\gamma}\right) = -|k|^\gamma \tilde{P}(k, t). \quad (4.53)$$

donde $F(f(x)) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} f(x) dx$ y $\tilde{P}(k, t)$ es la distribución escrita en el espacio de Fourier.

Entonces, en el espacio de Fourier la ec.(4.52) toma la siguiente forma

$$\frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} = -D_\gamma |k|^\gamma \tilde{P}(k, t), \quad (4.54)$$

$$\tilde{P}(k, 0) = 1.$$

De la ec.(4.54) se puede concluir que las unidades del coeficiente de difusión generalizado D_γ son (distancia ^{γ} /tiempo).

¹¹Para más información sobre este tipo de resultados véase el siguiente capítulo.

Si resolvemos la ecuación diferencial dada en la ec.(4.54) tenemos

$$\tilde{P}(k, t) = \exp(-D_\gamma |k|^\gamma t). \quad (4.55)$$

Esta última expresión es exactamente la función característica o transformada de Fourier de $\frac{1}{(D_\gamma t)^{1/\gamma}} L_{\gamma,0}(X/(D_\gamma t)^{1/\gamma})$ ¹².

Por lo tanto, antitransformando la ec.(4.55) tenemos

$$P(X, t) = \frac{1}{(D_\gamma t)^{1/\gamma}} L_{\gamma,0}(X/(D_\gamma t)^{1/\gamma}). \quad (4.56)$$

Este resultado es análogo al resultado obtenido al resolver la ecuación de difusión con condición inicial $P(X, 0) = \delta(X)$, pero en este caso, en lugar de una gaussiana tenemos una distribución de Lévy simétrica de orden γ .

Podemos concluir que el tipo de superdifusión que modela la ec.(4.52) es isotrópica, es decir la sustancia que se difunde, se difunde igual en todas direcciones.

Por otro lado, de los resultados obtenidos en los párrafos anteriores surge la pregunta de si hay una ecuación para la cual, utilizando como condición inicial $P(X, 0) = \delta(X)$, tengamos como solución una distribución de Lévy con simetría arbitraria. Para responder esto, podemos escribir la ec.(4.52) de la siguiente forma

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \chi_\gamma \left(\frac{1}{2} (-_\infty D_x^\gamma) + \frac{1}{2} ({}_x D_\infty^\gamma) \right) P(x, t). \quad (4.57)$$

Donde χ_γ es el coeficiente de difusión generalizado y los operadores ${}_{-\infty} D_x^\gamma$ y ${}_x D_\infty^\gamma$ son las derivadas fraccionarias de Riemann-Liouville izquierda y derecha respectivamente, cuya forma explícita está dada por

$$\begin{aligned} {}_{-\infty} D_x^\gamma P(x, t) &= \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^x (x-y)^{(1-\gamma)} P(y, t) dy, \\ {}_x D_\infty^\gamma P(x, t) &= \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_x^\infty (y-x)^{(1-\gamma)} P(y, t) dy. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Al utilizar estas definiciones, estamos suponiendo de manera implícita y sin pérdida de generalidad que estamos trabajando en una dimensión¹³.

¹²Véase Apéndice B.

¹³La generalización del laplaciano en tres dimensiones puede ser escrita como $\nabla^2 \rightarrow \partial_{|x|^\gamma}^\gamma + \partial_{|y|^\gamma}^\gamma + \partial_{|z|^\gamma}^\gamma$ [54].

De la definición para la derivada fraccionaria simétrica de Riemann-Liouville ec.(4.49) y de (4.52,4.57,4.58) es fácil ver que la simetría de la ec.(4.52) se debe a que los coeficientes de $_{-\infty}D_x^\gamma$ y $_xD_\infty^\gamma$ son iguales. Si escribimos la ec.(4.57) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(X, t)}{\partial t} &= \chi_\gamma (s({}_{-\infty}D_x^\gamma) + (1-s)({}_xD_\infty^\gamma)) P(x, t), \\ 0 \leq s \leq 1, \end{aligned} \quad (4.59)$$

donde s es un parámetro que rompe la simetría entre las derivadas fraccionarias derecha e izquierda y sacamos la transformada de Fourier a la ec.(4.59) tenemos

$$\frac{\partial \tilde{P}(k, t)}{\partial t} = \chi_\gamma (s(-ik)^\gamma + (1-s)(ik)^\gamma) \tilde{P}(k, t). \quad (4.60)$$

Para escribir la ec.(4.60) utilizamos las siguientes expresiones para las transformadas de Fourier de los operadores fraccionarios[55, 56]

$$\begin{aligned} F({}_{-\infty}D_x^\gamma P(x, t)) &= (-ik)^\gamma \tilde{P}(k, t), \\ F({}_xD_\infty^\gamma P(x, t)) &= (ik)^\gamma \tilde{P}(k, t). \end{aligned} \quad (4.61)$$

La solución a la ecuación diferencial mostrada en la ec.(4.60) con condición inicial $P(x, 0) = \delta(x)$, está dada por

$$\tilde{P}(k, t) = \exp\left(\chi_\gamma (s(-ik)^\gamma + (1-s)(ik)^\gamma) t\right). \quad (4.62)$$

Escribiendo $(\pm ik)^\gamma = |k|^\gamma \exp(\pm i \frac{\text{sign}(k)\gamma\pi}{2})$ y sustituyendo esta expresión en la ec.(4.62) tenemos

$$\tilde{P}(k, t) = \exp\left(\chi_\gamma t |k|^\gamma \left(s \exp(-i \frac{\text{sign}(k)\gamma\pi}{2}) + (1-s) \exp(i \frac{\text{sign}(k)\gamma\pi}{2})\right)\right), \quad (4.63)$$

simplificando

$$\begin{aligned} \tilde{P}(k, t) &= \exp\left(\chi_\gamma |k|^\gamma t ((1-2s)\text{sign}(k)i \sin(\gamma\pi/2) + \cos(\gamma\pi/2))\right) \\ &= \exp\left(\chi_\gamma |k|^\gamma t \cos\left(\frac{\pi\gamma}{2}\right) (1 + (1-2s)\text{sign}(k)i \tan\left(\frac{\gamma\pi}{2}\right))\right). \end{aligned} \quad (4.64)$$

Ahora bien, si comparamos la expresión de $\tilde{P}(k, t)$ con la función característica de una distribución de Lévy arbitraria, dada por¹⁴

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{\gamma, \beta}(k) &= \exp\left(-C|k|^\gamma\left(1 + i\beta\text{sign}(k)\tan\left(\frac{\gamma\pi}{2}\right)\right)\right), \\ \beta, \gamma, C &\in \mathbb{R}, \quad -1 < \beta \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2, \quad C > 0. \end{aligned} \quad (4.65)$$

vemos que $\tilde{P}(k, t) = \tilde{L}_{\gamma, \beta}(kt^{1/\gamma}) \Leftrightarrow 1 - 2s = \beta$, $\chi_\gamma = (-\chi_0/\cos(\pi\gamma/2))$, con $\chi_0 > 0$. Por lo tanto la solución de la ec.(4.59) con condición inicial $P(X, 0) = \delta(X)$ y con el coeficiente de difusión generalizado dado por $\chi_\gamma = (-\chi_0/\cos(\pi\gamma/2))$ es

$$P(X, t) = \frac{1}{(\chi_\gamma t)^{1/\gamma}} L_{\gamma, \beta}\left(\frac{X}{(\chi_\gamma t)^{1/\gamma}}\right). \quad (4.66)$$

Multiplicando la ec.(4.66) por X^α e integrando sobre todo el dominio vemos que

$$\langle X^\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} X^\alpha P(X, t) dX < \infty \iff \alpha < \gamma. \quad (4.67)$$

Por otro lado, es fácil ver que si restringimos los límites de integración mediante el argumento utilizado para la deducción de las ec.(4.28,4.29), tenemos¹⁵

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{(\chi_\gamma t)^{1/\gamma}} \frac{X^2}{(\chi_\gamma t)^{1/\gamma}} L_{\gamma, \beta(s)}\left(\frac{X}{(\chi_\gamma t)^{1/\gamma}}\right) dX \\ &= (\chi_\gamma t)^{2/\gamma} \int_{-\infty}^1 \eta^2 L_{\gamma, \beta(s)}(\eta) d\eta \\ &\Rightarrow \langle X^2 \rangle \sim t^{2/\gamma}. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Finalmente, utilizando la ec.(4.66) y el teorema de la convolución para la transformada de Fourier, podemos escribir la solución de la ec.(4.59) para

¹⁴Véase Apéndice B.

¹⁵Para este cálculo vamos a suponer sin pérdida de generalidad que la cola ancha de la distribución asimétrica de Lévy está hacia los reales positivos, para el caso de una distribución simétrica, el truncamiento de la integral se hace en los dos límites de integración. La justificación física del truncamiento antes mencionado, es que cualquier fenómeno físico real sucede en escalas de tiempo y espacio finitas.

cualquier condición inicial $P(X, 0) = f(X)$, $\chi_\gamma = 1$ de la siguiente manera

$$P(X, t) = \frac{1}{t^{1/\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} f(X') L_{\gamma, \beta(s)} \left(\frac{X - X'}{t^{1/\gamma}} \right) dX'. \quad (4.69)$$

La ec.(4.59) también se puede escribir como una ecuación de continuidad (conservación local de la probabilidad) más una ley constitutiva que nos dice cómo depende el flujo de la densidad. En este caso, el flujo va a ser una generalización de la ley de Fick. La ecuación de continuidad correspondiente a la ec.(4.59) está dada por [49, 57, 58]

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} (J_\gamma(x)), \\ J_\gamma(x) &= -\chi_\gamma (s({}_{-\infty}D_x^{\gamma-1}) - (1-s)_xD_\infty^{\gamma-1}) P(x, t). \end{aligned} \quad (4.70)$$

Donde se utilizaron las siguientes propiedades de las derivadas fraccionarias izquierda y derecha

$$\begin{aligned} {}_{-\infty}D_x^\gamma P(x, t) &= \frac{d}{dx} ({}_{-\infty}D_x^{\gamma-1} P(x, t)), \\ {}_xD_\infty^\gamma P(x, t) &= -\frac{d}{dx} ({}_xD_\infty^{\gamma-1} P(x, t)). \end{aligned} \quad (4.71)$$

Escrito en forma explícita el flujo generalizado está dado por

$$\begin{aligned} J^\gamma(x, t) &= -\chi_\gamma \frac{s}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^x (x-y)^{(1-\gamma)} P(y, t) dy + \\ &\chi_\gamma \frac{(1-s)}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial}{\partial x} \int_x^\infty (y-x)^{1-\gamma} P(y, t) dy. \end{aligned} \quad (4.72)$$

$J^\gamma(x)$ también se puede escribir como $J^\gamma(x, t) = j_l^\gamma(x, t) + j_r^\gamma(x, t)$, donde $j_l^\gamma(x)$ es el flujo izquierdo, o flujo de probabilidad que llega al punto x al tiempo t por el lado izquierdo del punto x , mientras que $j_r^\gamma(x, t)$ es el flujo derecho o flujo de probabilidad que llega a la posición x al tiempo t por el lado derecho del punto x .

Integrando por partes las expresiones que definen al flujo izquierdo y derecho tenemos que

$$\begin{aligned} j_l^\gamma(x, t) &= -\chi_\gamma \frac{s}{\Gamma(3-\gamma)} \frac{\partial}{\partial x} \int_{-\infty}^x (x-y)^{(2-\gamma)} \frac{\partial P(y, t)}{\partial y} dy, \\ j_r^\gamma(x, t) &= \chi_\gamma \frac{(1-s)}{\Gamma(3-\gamma)} \frac{\partial}{\partial x} \int_x^\infty (y-x)^{(2-\gamma)} \frac{\partial P(y, t)}{\partial y} dy. \end{aligned} \quad (4.73)$$

De las ec.(4.73,4.72) es fácil ver que si $\gamma = 2$, la expresión para el flujo se vuelve $J(x, t) \propto -\nabla P(x, t)$, recuperando así la ley de Fick¹⁶.

4.2.2. Subdifusión

Para modelar subdifusión la ecuación de difusión generalizada toma la siguiente forma

$$\frac{c\partial^\beta P(X, t)}{\partial t^\beta} = D_\beta \nabla^2 P(X, t), \quad (4.74)$$

$$0 < \beta \leq 1,$$

donde D_β es el coeficiente de difusión generalizado.

La causa de la aparición de la derivada fraccionaria en el tiempo, es que la distribución de tiempos de espera utilizada en la caminata aleatoria es de la forma

$$\psi(t) \sim c_\beta t^{-1-\beta}, \quad (4.75)$$

$$0 < \beta < 1, t \gg 1.$$

Este tipo de distribuciones para los tiempos de espera entre saltos consecutivos, aparecen cuando en el medio en el cual se lleva a cabo la difusión hay trampas o regiones en las cuales el caminante puede quedar atrapado [34, 41]. Como ejemplo consideremos un medio en el cual el caminante está sujeto a un potencial V en cada punto del espacio. Si suponemos que el valor de dicho potencial está distribuido espacialmente de acuerdo a una distribución de probabilidad dada por $P(V) = V_0 \exp(-V/V_0)$, y el caminante está en equilibrio térmico con el medio en el cual se difunde, la probabilidad por unidad de tiempo de que el caminante salga de un pozo de potencial V es proporcional al factor de Boltzmann, es decir $\omega \sim \exp(-V/k_B T)$, donde ω es la probabilidad por unidad de tiempo de que el caminante salga del pozo. Por lo tanto, la variable aleatoria ω está distribuida como: $W(\omega) \sim P(v(\omega))dv/d\omega \sim -\omega^{(k_B T/V_0 - 1)}$.

Por otro lado, el tiempo entre saltos sucesivos cumple con: $t \sim 1/\omega$, por lo tanto la distribución de tiempos de espera se comporta como: $\psi(t) \sim W(w(t))dw/dt \sim t^{-(1+k_B T/V_0)}$. De esto último podemos concluir que si $0 <$

¹⁶Recuérdese que si $\gamma = 2$ estamos ya en el régimen de difusión normal.

$T/V_0k_B < 1$, la distribución de tiempos de espera tiene las mismas características que la ec.(4.75), por lo que para que haya subdifusión en este modelo es necesario que la temperatura cumpla con $T < V_0/k_B$, donde k_B es la constante de Boltzmann. Para más ejemplos de modelos con comportamiento subdifusivo ver [34, 53].

Otra forma de obtener la ec.(4.74) es mediante ecuaciones maestras fraccionarias [59]. En estas ecuaciones la derivada temporal de la distribución de probabilidad es sustituida por una derivada fraccionaria de orden $0 < \beta \leq 1$. Utilizando dicho formalismo es posible deducir la ec.(4.74) si y sólo si la distribución de tiempos de espera está dada por: $\psi(t) = (t^{\beta-1}/C)E_{\beta,\beta}(-t^\beta/C)$, $C > 0$, donde las funciones $E_{\alpha,\beta}(X)$ se conocen como las funciones de Mittag-Leffler¹⁷ [60, 61]. Estas funciones también se comportan como leyes de potencia para tiempos grandes y son una generalización de la función exponencial. Además, como veremos más adelante juegan un papel importante en el análisis de modelos físicos con derivadas fraccionarias.

Hay que señalar que, aunque muchos autores [36, 37, 41, 49] tratan la condición dada en la ec.(4.75) como una condición suficiente para deducir la ec.(4.74), hay estudios [62] que muestran que ésta no es una condición suficiente sino necesaria.

Sacando la transformada de Fourier de la ec.(4.74) tenemos

$$\frac{{}^c\partial^\beta \tilde{P}(k, t)}{\partial t^\beta} = -D_\beta k^2 \tilde{P}(k, t). \quad (4.76)$$

La solución de la ecuación diferencial fraccionaria mostrada en la ec.(4.76) está dada por $\tilde{P}(k, t) = E_{\beta,1}(-D_\beta k^2 t^\beta)$, es decir, por la función de Mittag-Leffler de orden $(\beta, 1)$. La expresión en forma de serie de dicha función es

$$E_{\beta,1}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(\beta n + 1)}. \quad (4.77)$$

De la ec.(4.77) se puede ver que la función de Mittag-Leffler es una generalización de la exponencial, reduciéndose a ésta cuando $\beta = 1$.

Por lo tanto, la solución de la ec.(4.74) para una condición inicial arbitraria $P(x, 0) = g(x)$ está dada por

$$\begin{aligned} P(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x', t)g(x')dx', \\ G(x, t) &= F^{-1} (E_{\beta,1}(-D_\beta k^2 t^\beta)). \end{aligned} \quad (4.78)$$

¹⁷Véase Apéndice C.

La ecuación de subdifusión también puede ser escrita como una ecuación de continuidad, para esto sacamos la derivada fraccionaria temporal de Riemann-Liouville¹⁸ de orden $1 - \beta$ de los dos lados de la ec.(4.74), obteniendo así la siguiente expresión

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D_\beta \nabla^2 \frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} P(x, t). \quad (4.79)$$

Donde la forma explícita de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville está dada por

$$\frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} P(x, t) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t (t - t')^{(\beta-1)} P(x, t') dt'. \quad (4.80)$$

Por lo tanto, la ecuación de continuidad y el flujo generalizado están dados por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(x, t)}{\partial t} &= -\nabla \cdot (J_\beta(x, t)), \\ J_\beta(x, t) &= -\frac{D_\beta}{\Gamma(\beta)} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t (t - t')^{(\beta-1)} \nabla P(x, t') dt'. \end{aligned} \quad (4.81)$$

De la ec.(4.81) podemos ver que, si $\beta = 1$ el flujo generalizado toma la siguiente forma

$$J_\beta(x, t) |_{\beta=1} = -D \nabla P(x, t). \quad (4.82)$$

Por lo tanto cuando $\beta = 1$ se reduce a la ley de Fick.

Ahora bien, multiplicando la ec.(4.74) por x^2 e integrando sobre todo el dominio tenemos

$$\frac{c \partial^\beta \langle x^2 \rangle}{\partial t^\beta} = 2D_\beta. \quad (4.83)$$

Sacando la integral fraccionaria¹⁹ de orden β a los dos lados de la ec.(4.83) o aplicando la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville de orden $1 - \beta$

¹⁸La derivada fraccionaria de Caputo de orden β se puede ver como una integral fraccionaria de orden $1 - \beta$ aplicada a la parcial en el tiempo de la distribución $P(x, t)$. La derivada fraccionaria de Riemann-Liouville, es el operador inverso de dicha integral fraccionaria, por lo que al aplicar la derivada de orden $1 - \beta$ de los dos lados de la ecuación; del lado izquierdo sólo nos queda la parcial en el tiempo de $P(x, t)$.

¹⁹Para más información sobre integrales y derivadas de orden arbitrario, ver el siguiente capítulo.

seguida de una integración en el tiempo tenemos

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \frac{2D_\beta}{\Gamma(1+\beta)} t^\beta, \\ 0 < \beta \leq 1,\end{aligned}\tag{4.84}$$

recuperando así el comportamiento característico de la subdifusión.

Es importante mencionar que la subdifusión también es posible en sustancias que se difunden mediante vuelos de Lévy, y que la ecuación de difusión generalizada también nos permite estudiar este fenómeno, es decir, partículas que se difunden en un medio con trampas (cuya consecuencia es la aparición de la derivada fraccionaria en el tiempo) mediante vuelos de Lévy. Dicho fenómeno puede ser modelado mediante la siguiente expresión [56]

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\beta P(X,t)}{\partial t^\beta} &= \chi_{\gamma,\beta} (s({}_{-\infty}D_x^\gamma) + (1-s)_x D_\infty^\gamma) P(x,t) \\ 0 \leq s \leq 1, \quad 0 < \beta \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2.\end{aligned}\tag{4.85}$$

Donde las unidades del coeficiente de difusión generalizado $\chi_{\gamma,\beta}$ son distancia $^\gamma$ /tiempo $^\beta$.

En este caso, la difusión puede ser subdifusión o superdifusión dependiendo del valor de la razón entre los exponentes anómalos, ya que el segundo momento correspondiente a la solución de la ec.(4.85) con condición inicial $P(x,0) = \delta(x)$, se comporta como

$$\langle x^2 \rangle \sim t^{2\beta/\gamma} \begin{cases} \frac{2\beta}{\gamma} > 1, & \text{superdifusión,} \\ \frac{2\beta}{\gamma} < 1, & \text{subdifusión.} \end{cases}\tag{4.86}$$

En la tabla 4.1 se muestran de forma resumida los principales resultados expuestos a lo largo de este capítulo. En ella podemos ver los diferentes tipos de difusión y su relación con el teorema del límite central (TLC), además de sus principales características y el tipo de sistemas donde aparecen.

Tabla 4.1: DIFERENTES TIPOS DE DIFUSION

	Difusión normal $\langle r^2 \rangle \propto t^\alpha$ $\alpha = 1$	Subdifusión $\langle r^2 \rangle \propto t^\alpha$ $0 < \alpha < 1$	Superdifusión $\langle r^2 \rangle \propto t^\alpha$ $1 < \alpha < 2$
Ejemplos	La mayor parte de los sistemas físicos, químicos y biológicos.	Sólidos desordenados, medios porosos, tejidos biológicos y transporte a través de membranas celulares.	Física de plasmas, medios turbulentos, dinámicas caóticas, polímeros, epidemias y forrajeo de animales.
Formalismo matemático	Caminantes aleatorios \rightarrow TLC \rightarrow distribución Gaussiana \rightarrow ley de Fick.	CATC \rightarrow distribución de tiempos de espera con colas anchas \rightarrow ley de Fick con memoria.	CATC+vuelos de Lévy \rightarrow TLC generalizado \rightarrow distribuciones de Lévy \rightarrow ley de Fick no local.
Ecuación	$\partial_t \phi = D \nabla^2 \phi$ (derivadas de orden entero)	${}^c \partial_t^\alpha \phi = D_\alpha \nabla^2 \phi$ (derivada fraccionaria temporal)	$\partial_t \phi = D_\alpha \nabla_s^\alpha \phi$ (derivada fraccionaria espacial)

Capítulo 5

Cálculo fraccionario.

En este capítulo se introducen las herramientas necesarias para el desarrollo y la obtención de los principales resultados de los siguientes, donde se tratan los temas de formación de patrones y propagación de ondas químicas en sistemas de reacción-difusión generalizados. La manera como se generalizan estos sistemas de ecuaciones, es mediante la sustitución de los operadores diferenciales que aparecen en los sistemas de reacción-difusión normales por derivadas de orden arbitrario. Estas derivadas de orden arbitrario son una generalización del concepto de derivada en el sentido en el cual, las expresiones del tipo: $\partial_x, \partial_{x^2}, \dots, \partial_{x^n}, n \in \mathbb{N}$, pueden ser extendidas a operadores de la forma: $\partial_{x^\beta}; \beta \in \mathbb{R}$, es decir, en lugar de aplicar la **primera, segunda o n-ésima** derivada a una función $f(x)$, se puede aplicar la derivada o integral de orden $\beta: \frac{\partial^\beta f(x)}{\partial x^\beta}$, donde β es un número real. Esta manera de extender los conceptos de diferenciación e integración, junto con el estudio de las definiciones y propiedades de estos nuevos operadores, dio lugar a lo que hoy se conoce como cálculo fraccionario, del cual nació la relativamente nueva rama de las matemáticas conocida como: sistemas dinámicos fraccionarios, o dicho de otra manera, ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, de orden arbitrario.

Aunque de lo dicho en los párrafos anteriores se puede ver que el nombre: cálculo fraccionario, no describe adecuadamente esta nueva herramienta matemática¹, su origen puede ser trazado hasta finales del siglo XVII, época en la que varios matemáticos comenzaron a pensar en la extensión de los operadores integro-diferenciales de orden entero a operadores de or-

¹Siendo el nombre: Cálculo de orden arbitrario más apropiado.

den fraccionario. Esto se puede ver en una carta escrita a Leibniz en 1695, donde L'Hôpital le hace la siguiente pregunta: ¿ "Qué pasa si en la expresión $\frac{\partial^n f}{\partial x^n}$, $n = 1/2$?" [63].

En las últimas décadas esta herramienta matemática, aunque poco intuitiva² (a diferencia de los operadores diferenciales normales), ha demostrado ser muy útil en la modelación de fenómenos físicos reales, entre los cuales se pueden mencionar propagación de ondas en sistemas desordenados [64, 65], conducción eléctrica en sistemas biológicos [66], fenómenos termodinámicos [67] y por supuesto fenómenos difusivos [37, 41, 45].

El capítulo comienza con la deducción de los operadores diferenciales e integrales de orden arbitrario a partir de las definiciones de los operadores integro-diferenciales normales, para luego pasar al estudio de sus principales características y a la deducción de algunos resultados que serán utilizados en los siguientes capítulos.

5.1. Derivación e integración de orden arbitrario.

Comenzaremos la generalización de los operadores integro-diferenciales con la generalización del concepto de integración. Para esto necesitamos encontrar algún operador, que aplicado a una función arbitraria sea equivalente a la aplicación de n integrales sucesivas a dicha función. Es decir

$$I(a, n, x)(f(x)) = \int_a^x \int_a^{x_1} \int_a^{x_2} \dots \int_a^{x_n} f(\xi) d\xi dx_{n-1} dx_{n-2} \dots dx_1 \quad (5.1)$$

$$\implies I(a, n, x) = ???.$$

Si tomamos $n = 2$ en la ec.(5.1), es fácil ver que

$$\int_a^x \int_a^{x_1} f(\xi) d\xi dx_1 = \int_a^x \int_\xi^x f(\xi) dx_1 d\xi = \int_a^x (x - \xi) f(\xi) d\xi. \quad (5.2)$$

²Sobre todo en lo que respecta a su significado geométrico.

Sea $K_1(x, \xi) = (x - \xi)$, si sustituimos $K_1(x, \xi)$ en la ec.(5.2) e integramos una vez más tenemos

$$\begin{aligned} \int_a^x \int_a^{x_1} K_1(x_1, \xi) f(\xi) d\xi dx_1 &= \int_a^x \int_\xi^x K_1(x_1, \xi) f(\xi) dx_1 d\xi \\ &= \int_a^x f(\xi) \int_a^x K_1(x_1, \xi) dx_1 = \int_a^x \frac{(x - \xi)^2 f(\xi) d\xi}{2!}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Si repetimos los pasos utilizados para la deducción de las ecuaciones ec.(5.2) y ec.(5.3) n veces, podemos concluir que $K_n = \frac{(x - \xi)^{n-1}}{(n-1)!}$, y por lo tanto

$$\begin{aligned} \int_a^x \frac{(x - \xi)^{n-1}}{(n-1)!} f(\xi) d\xi &= \int_a^x \int_a^{x_1} \int_a^{x_2} \dots \int_a^{x_n} f(\xi) d\xi dx_{n-1} dx_{n-2} \dots dx_1 \implies \\ I(x, n, a)(f(\xi)) &= \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x - \xi)^{n-1} f(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Ahora bien, sabemos que la función $\Gamma(x)$ es una generalización de la función factorial, es decir, cuando n es un número natural tenemos: $n! = \Gamma(n+1)$. Por lo tanto, utilizando la función $\Gamma(x)$ podemos reescribir la última expresión de la ec.(5.4) sustituyendo n por cualquier número real positivo de la siguiente forma

$$\begin{aligned} I(x, \beta, a)(f(\xi)) &= {}_a I_x^\beta f(\xi) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x - \xi)^{\beta-1} f(\xi) d\xi, \\ 0 < \beta; \beta &\in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Obteniendo así la definición del operador de integración ${}_a I_x^\beta$ de orden β . La restricción sobre β en la ec.(5.5) es consecuencia de la existencia de una singularidad en el kernel de la integral cuando $\beta < 1$, es decir de la singularidad de la función $(x - \xi)^{\beta-1}$. Dicha singularidad es integrable si y sólo si se cumple la condición: $\beta > 0$, además la función $\Gamma(\beta)$ no está definida para números enteros negativos.

Mediante la definición de integración fraccionaria, podemos demostrar la siguiente expresión

$${}_a I_x^\beta \quad {}_a I_x^\alpha = {}_a I_x^{\beta+\alpha}, \quad (5.6)$$

para esto, escribimos explícitamente la ec.(5.6)

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Gamma(\beta)\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} \int_a^\xi (\xi-\phi)^{\alpha-1} f(\phi) d\phi d\xi \\
&= \frac{1}{\Gamma(\beta)\Gamma(\alpha)} \int_a^x \int_a^\xi (x-\xi)^{\beta-1} (\xi-\phi)^{\alpha-1} f(\phi) d\phi d\xi \quad (5.7) \\
&= \frac{1}{\Gamma(\beta)\Gamma(\alpha)} \int_a^x f(\phi) \int_\phi^x (x-\xi)^{\beta-1} (\xi-\phi)^{\alpha-1} d\xi d\phi.
\end{aligned}$$

Sustituyendo $t = (x-\xi)(x-\phi)^{-1}$ en la última integral de la ec.(5.7) tenemos

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Gamma(\beta)\Gamma(\alpha)} \int_a^x f(\phi) \int_\phi^x (x-\xi)^{\beta-1} (\xi-\phi)^{\alpha-1} d\xi \\
&= \frac{B(\alpha, \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \int_a^x (x-\phi)^{(\alpha+\beta)-1} f(\phi) d\phi, \quad (5.8) \\
& B(\alpha, \beta) = \int_0^1 t^{\alpha-1} (1-t)^{\beta-1} dt,
\end{aligned}$$

donde $B(\alpha, \beta)$ es la definición integral de la función beta, la cual puede ser escrita en términos de $\Gamma(x)$ de la siguiente manera [68]

$$B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)}. \quad (5.9)$$

Sustituyendo la ec.(5.9) en la ec.(5.8) obtenemos

$${}_a I_x^\beta \quad {}_a I_x^\alpha f(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha + \beta)} \int_a^x (x-\phi)^{(\alpha+\beta)-1} f(\phi) d\phi = {}_a I_x^{\alpha+\beta} f(x), \quad (5.10)$$

demostrando así la expresión mostrada en la ec.(5.6).

La ec.(5.6) es importante debido a que, entre otras cosas, nos permitirá encontrar la forma explícita del operador de diferenciación fraccionaria.

Ahora bien, utilizando la definición de integración de orden β , es fácil ver que muchos de los resultados característicos de la integración normal pueden ser generalizados, por ejemplo

$$\begin{aligned}
{}_a I_x^\beta (f + g) &= \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} (f(\xi) + g(\xi)) d\xi \\
&= \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} f(\xi) dx + \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} g(\xi) dx \quad (5.11) \\
&= {}_a I_x^\beta (f) + {}_a I_x^\beta (g).
\end{aligned}$$

Podemos ver también como actúa la integral fraccionaria de orden β en funciones del tipo $f(t) = (t - a)^p$; $p \in \mathbb{R}$, esto es

$${}_a I_x^\beta (x - a)^p = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x - \xi)^{\beta-1} (\xi - a)^p d\xi. \quad (5.12)$$

Si definimos u como $u = (x - \xi)(x - a)^{-1}$, podemos escribir la ec.(5.12) de la siguiente forma

$${}_a I_x^\beta \xi^p = x^{\beta+p} \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_0^1 (1 - u)^{\beta-1} u^p du, \quad (5.13)$$

utilizando de nuevo la definición integral de la función $B(\alpha, \beta)$ (ec.(5.8)) y la ec.(5.9) tenemos

$${}_a I_x^\beta (x - a)^p = \frac{\Gamma(p + 1)}{\Gamma(p + \beta + 1)} (x - a)^{\beta+p}. \quad (5.14)$$

Finalmente, es importante observar que el orden de los límites de integración en las ec.(5.4,5.5) es arbitrario, por lo que también es posible definir un operador de integración de orden β de la siguiente manera

$${}_x I_a^\beta (f(x)) = \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_x^a (\xi - x)^{\beta-1} f(\xi) d\xi. \quad (5.15)$$

Por lo tanto, para diferenciar estos dos operadores haremos la siguiente definición

$$\begin{aligned} {}_a I_x^\beta (f(x)) &= \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x - \xi)^{\beta-1} f(\xi) d\xi, \quad a < x; \text{ Integral fraccionaria izquierda,} \\ {}_x I_a^\beta (f(x)) &= \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_x^a (\xi - x)^{\beta-1} f(\xi) d\xi, \quad x < a; \text{ Integral fraccionaria derecha,} \\ 0 < \beta; \beta &\in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Mediante un símil con el cálculo integro-diferencial, podemos definir la derivada fraccionaria como el inverso izquierdo de los operadores ${}_a I_x^\beta$, ${}_x I_a^\beta$.

El operador inverso a la integral fraccionaria puede ser deducido utilizando la ec.(5.6) y el teorema fundamental del cálculo de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
{}_a I_x^\alpha ({}_a I_x^\beta (f(x))) &= {}_a I_x^{\alpha+\beta} (f(x)) \implies \\
\text{si } \alpha &= m - \beta \text{ tenemos} \\
{}_a I_x^{\alpha+\beta} &= {}_a I_x^m = \int_a^x \int_a^{x_1} \dots \int_a^{x_{m-1}} f(\xi) d\xi dx_1 \dots dx_{m-1} \therefore \quad (5.17) \\
\frac{d^m}{dx^m} {}_a I_x^{m-\beta} ({}_a I_x^\beta (f(x))) &= f(x); \\
0 < m - \beta < 1, \quad m &\in \mathbb{N}.
\end{aligned}$$

De la ec.(5.17) podemos concluir que la derivada fraccionaria de orden β está dada por

$$\begin{aligned}
{}_a D_x^\beta f(x) &= \frac{d^m}{dx^m} {}_a I_x^{m-\beta} f(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x (x-\xi)^{(m-\beta)-1} f(\xi) d\xi \\
m-1 \leq \beta \leq m, \quad m &\in \mathbb{N}. \quad (5.18)
\end{aligned}$$

Esta definición de derivada fraccionaria es conocida como la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville, y algunas de sus propiedades más importantes son:

$$\begin{aligned}
i) \quad {}_0 D_x^\beta x^\lambda &= \frac{\Gamma(\lambda+1)}{\Gamma(\lambda-\beta+1)} x^{\lambda-\beta}, \\
ii) \quad -\infty D_x^\beta e^{ikx} &= (-ik)^\beta e^{ikx}, \\
iii) \quad {}_a D_x^\beta (x-a)^p &= \frac{\Gamma(p+1)}{\Gamma(p+1-\beta)} (x-a)^{p-\beta},
\end{aligned} \quad (5.19)$$

y

$$\begin{aligned}
i) \quad {}_a D_x^\beta (f+g) &= {}_a D_x^\beta f(x) + {}_a D_x^\beta g(x), \\
ii) \quad \frac{d^n}{dx^n} ({}_a D_x^\beta f(x)) &= {}_a D_x^{\beta+n} f(x), \\
iii) \quad {}_a D_x^\beta \left(\frac{d^n f}{dx^n} \right) &= {}_a D_x^{\beta+n} f(x) - \sum_0^{n-1} \frac{f^{(j)}(a)(x-a)^{j-\beta-n}}{\Gamma(1+j-\beta-n)}, \\
iv) \quad {}_a D_x^\alpha ({}_a D_x^\beta f(x)) &= {}_a D_x^{\alpha+\beta} f(x) - \sum_{j=1}^m [{}_a D_x^{\beta-j} f(x)] \Big|_{x=a} \frac{(x-a)^{-j-\alpha}}{\Gamma(1-\alpha-j)},
\end{aligned} \quad (5.20)$$

donde $m - 1 < \alpha < m$, $n - 1 < \beta < n$; $n, m \in \mathbb{N}$.

Mediante las propiedades dadas en la ec.(5.20) es posible demostrar que dos derivadas fraccionarias conmutan si

$${}_a D_x^\alpha ({}_a D_x^\beta f(x)) = {}_a D_x^\beta ({}_a D_x^\alpha f(x)) \iff \begin{cases} ({}_a D_x^{\beta-j} f(x))|_{x=a} = 0, & j = 1, \dots, n, \\ ({}_a D_x^{\alpha-j} f(x))|_{x=a} = 0, & j = 1, \dots, m, \end{cases} \quad (5.21)$$

Por otro lado, si en la definición de la derivada fraccionaria (ec.(5.18)) cambiamos β por $-\beta$ tenemos

$$\begin{aligned} {}_a D_x^{-\beta} &= \frac{d^m}{dx^m} {}_a I_x^{m+\beta} f(x) = \frac{1}{\Gamma(m+\beta)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x (x-\xi)^{(m+\beta)-1} f(\xi) d\xi \\ &= \frac{(m-1+\beta)(m-2+\beta) + \dots + \beta}{\Gamma(m+\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} f(\xi) d\xi \\ &= \frac{1}{\Gamma(\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{\beta-1} f(\xi) d\xi \\ &= {}_a I_x^\beta f(x). \end{aligned} \quad (5.22)$$

Por lo tanto podemos redefinir el operador de integración fraccionaria como

$$\begin{aligned} {}_a I_x^\beta &= {}_a D_x^{-\beta} \\ \beta &\in \mathbb{R}_+. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Con lo dicho anteriormente, es posible demostrar las siguientes relaciones entre integrales y derivadas fraccionarias

$$\begin{aligned} i) \quad &{}_a D_x^{-\alpha} ({}_a D_x^\alpha f(x)) = f(x) - \sum_{j=1}^n \frac{(x-a)^{\alpha-j}}{\Gamma(\alpha-j+1)}, \quad n-1 < \alpha < n; \\ ii) \quad &{}_a D_x^\alpha ({}_a D_x^{-\beta} f(x)) = {}_a D_x^{\alpha-\beta} f(x); \\ iii) \quad &{}_a D_x^{-\alpha} ({}_a D_x^\beta f(x)) = {}_a D_x^{\beta-\alpha} f(x) - \sum_{j=1}^n \frac{(x-a)^{\alpha-j}}{\Gamma(\alpha-j+1)}; \\ &0 < \beta < \alpha. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Como ya vimos, la integral fraccionaria se divide en dos operadores diferentes: integral fraccionaria izquierda e integral fraccionaria derecha, por lo tanto, también podemos definir dos operadores diferentes correspondientes a

la derivada fraccionaria de orden beta, éstos son

$$\begin{aligned}
 {}_a D_x^\beta f &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x (x-\xi)^{(m-\beta)-1} f(\xi) d\xi; & \text{derivada izquierda,} \\
 {}_x D_a^\beta f &= \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^a (\xi-x)^{(m-\beta)-1} f(\xi) d\xi; & \text{derivada derecha,} \\
 m-1 < \beta < m, & \quad m \in \mathbb{N}.
 \end{aligned}
 \tag{5.25}$$

Es importante notar³ que de acuerdo con la definición de derivada fraccionaria de Riemann-Liouville, la derivada fraccionaria de una constante es diferente de cero, lo cual puede traer problemas al intentar modelar fenómenos de evolución temporal mediante dichos operadores. Otra limitación importante para este tipo de derivadas, es su comportamiento cerca del límite inferior, es decir: $\lim_{x \rightarrow a} ({}_a D_x^\beta f(x)) = ?$, $\beta > 0$. Para estudiar el comportamiento de la derivada fraccionaria cerca de su límite inferior, podemos suponer que $f(x)$ es una función analítica y expandir esta función en serie de Taylor alrededor de dicho valor, esto es

$$\begin{aligned}
 {}_a D_x^\beta \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)(x-a)^k}{k!} \right) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a) {}_a D_x^\beta (x-a)^k}{k!} \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)(x-a)^{k-\beta}}{\Gamma(k+1-\beta)} \\
 \therefore \lim_{x \rightarrow a} {}_a D_x^\beta f(x) &= \infty \quad \forall k < \beta; \quad m-1 < \beta < m.
 \end{aligned}
 \tag{5.26}$$

Por lo tanto, la única manera de evitar la divergencia de estos operadores cerca de su límite inferior es que: $f^{(k)}(a) = 0$, $k = 1, 2, \dots, m-1$, donde $f^{(k)}(a)$ significa la k -ésima derivada de f valuada en $x = a$. Esta propiedad de la derivada fraccionaria de Riemann-Liouville puede traer problemas al modelar sistemas físicos con valores a la frontera o problemas de valores iniciales [69]. Debido a estas limitaciones, se ha definido una nueva clase de

³Todos los resultados mencionados para la derivada fraccionaria izquierda tienen su equivalente para la derivada fraccionaria derecha.

derivada fraccionaria, conocida como derivada fraccionaria de Caputo. La derivada fraccionaria de Caputo se puede pensar como una aproximación a la derivada de Riemann-Liouville [56, 70], la cual mantiene casi todas sus propiedades, excepto que la derivada de una constante es cero y no hay divergencias en sus límites inferiores.

Las derivadas fraccionarias de Caputo son los operadores utilizados para modelar sistemas físicos con valores a la frontera o problemas de evolución con valores iniciales. La definición de dichos operadores es

$$\begin{aligned} {}^c D_x^\beta f(x) &= \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} \int_a^x (x-\xi)^{(m-\beta)-1} \frac{d^m f}{d\xi^m} d\xi, \text{ Derivada izquierda,} \\ {}^c D_a^\beta f(x) &= \frac{-1}{\Gamma(m-\beta)} \int_x^a (\xi-x)^{(m-\beta)-1} \frac{d^m f}{d\xi^m} d\xi, \text{ Derivada derecha,} \\ m-1 &< \beta < m. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Finalmente, mediante la definición de la derivada fraccionaria de Caputo es fácil ver que se cumplen las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} i) \quad & {}^c D_x^\beta A = 0, \quad A \in \mathbb{R}, \\ ii) \quad & \lim_{x \rightarrow a} ({}^c D_x^\beta f(x)) = 0, \\ iii) \quad & {}^c D_{-\infty}^\beta f(x) = {}_{-\infty} D_x^\beta f(x). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Las propiedades *i)* y *ii)* de la derivada de Caputo son la razón por la que dicho operador se utiliza en problemas con valores a la frontera y condiciones iniciales.

Estas propiedades son especialmente importantes en este trabajo, ya que como veremos en el capítulo 6, nos permiten obtener patrones espaciales independientes del tiempo como soluciones a un sistema de ecuaciones de reacción-difusión en presencia de subdifusión cuando $t \rightarrow \infty$, y cuyas condiciones iniciales son condiciones al azar.

5.2. Transformadas de Fourier y Laplace para operadores de orden arbitrario.

De las definiciones de integral y derivada fraccionaria dadas hasta ahora, podemos ver que dichos operadores son convoluciones entre la función sobre la cual actúan y un kernel. Debido a esto, las técnicas de transformadas de

Fourier y Laplace son muy útiles en la resolución de problemas con operadores fraccionarios. Por esta razón, en esta sección se mencionarán los principales resultados de la aplicación de dichas transformadas a los operadores integro-diferenciales fraccionarios utilizados en los siguientes capítulos.

Si aplicamos la transformada de Laplace al operador ${}_0D_x^\beta f(x)$ tenemos

$$\begin{aligned}
L({}_0D_x^\beta f(x)) &= \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} L\left(\frac{d^m}{dx^m} \int_0^x (x-\xi)^{m-\beta-1} f(\xi) d\xi\right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} \left(\int_0^\infty e^{-sx} x^{m-\beta-1} dx\right) \left(\int_0^\infty e^{-sx} f(x) dx\right) \\
&\quad - \sum_{k=0}^{m-1} s^k [{}_0D_x^{\beta-k-1} f(x)]|_{x=0} \\
&= s^\beta \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} s^k [{}_0D_x^{\beta-k-1} f(x)]|_{x=0} \\
m-1 &< \beta < m,
\end{aligned} \tag{5.29}$$

donde $L(f) = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt$.

Para llegar a este resultado se utilizó la definición integral de la función $\Gamma(x)$ y las propiedades de la transformada de Laplace, entre las cuales se puede mencionar el hecho que la transformada de una convolución entre dos funciones es el producto de sus transformadas.

Es importante notar que para que la transformada de Laplace de ${}_0D_x^\beta f(x)$ esté bien definida, es necesario especificar los valores de $[{}_0D_x^{\beta-k-1} f(x)]|_{x=0}$, para $k = 0, 1, \dots, m-1$, valores que, como ya vimos pueden diverger.

Por otro lado, en lo que respecta a la aparición de esta derivada en ecuaciones de evolución, podemos ver que las condiciones iniciales del sistema tienen que ser expresadas en términos de derivadas fraccionarias, lo cual es difícil de interpretar físicamente [69].

Si ahora calculamos la transformada de Laplace de la derivada fracciona-

ria izquierda de Caputo tenemos

$$\begin{aligned}
L({}_0^c D_x^\beta f(x)) &= \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} L\left(\int_0^x (x-\xi)^{m-\beta-1} \frac{d^m f(x)}{dx^m} d\xi\right) \\
&= \frac{1}{\Gamma(m-\beta)} \left(\int_0^\infty e^{-sx} x^{m-\beta-1} dx\right) \left(\int_0^\infty e^{-sx} \frac{d^m f(x)}{dx^m} dx\right) \\
&= s^\beta \hat{f}(s) - \sum_{k=0}^{m-1} s^k f^{(m-\beta-1)}(0).
\end{aligned} \tag{5.30}$$

De la ec.(5.30) podemos concluir que la evolución de un sistema físico descrito por una derivada fraccionaria de Caputo en el tiempo, depende del estado del sistema al tiempo cero y no de las derivadas fraccionarias de dicho estado, a diferencia de la evolución de un sistema descrito mediante la derivada de Riemann-Liouville.

Si sacamos la transformada de Fourier a ${}_{-\infty} D_x^\beta f(x)$, ${}_x D_\infty^\beta f(x)$ y utilizamos de nuevo la definición integral de la función $\Gamma(x)$ tenemos

$$\begin{aligned}
F({}_{-\infty} D_x^\beta f(x)) &= \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \int_{-\infty}^\infty e^{-ikx} \frac{d^m}{dx^m} \int_{-\infty}^x (x-\xi)^{m-\beta-1} f(\xi) d\xi dx = (-ik)^\beta \tilde{f}(k) \\
F({}_x D_\infty^\beta f(x)) &= \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \int_{-\infty}^\infty e^{-ikx} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^\infty (\xi-x)^{m-\beta-1} f(\xi) d\xi dx = (+ik)^\beta \tilde{f}(k) \\
m-1 &< \beta < m.
\end{aligned} \tag{5.31}$$

Aunque se puede decir mucho más acerca de las propiedades de los operadores fraccionarios [61, 63, 71], los resultados mencionados hasta ahora son suficientes para los propósitos de este trabajo.

En la siguiente sección resolveremos una ecuación diferencial fraccionaria que además de servir como ejemplo del uso de los resultados expresados en esta sección, será útil para el análisis lineal de sistemas de reacción-difusión generalizados, de los cuales hablaremos en el siguiente capítulo.

5.2.1. Ecuación de valores propios.

Como ejemplo de como resolver ecuaciones diferenciales fraccionarias mediante la transformada de Laplace resolveremos la siguiente ecuación

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} &= \lambda u; \\ u(0) &= 1; \quad 0 < \alpha \leq 1.\end{aligned}\tag{5.32}$$

Donde la forma explícita de la derivada fraccionaria está dada por

$$\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} \frac{\partial u}{\partial \tau} d\tau.\tag{5.33}$$

Aplicando la transformada de Laplace a ambos lados de la ec.(5.32) y utilizando el hecho que la derivada fraccionaria es una convolución entre las funciones $t^{-\alpha}$ y $\partial_t u(t)$ tenemos

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} L(t^{-\alpha}) L\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) = \lambda L(u).\tag{5.34}$$

Si utilizamos la definición integral de la función $\Gamma(x)$, esto es

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt,\tag{5.35}$$

es fácil ver que

$$L(t^{-\alpha}) = \Gamma(1-\alpha) s^{\alpha-1}.\tag{5.36}$$

Por otro lado, utilizando la siguiente propiedad de la transformada

$$L\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right) = s\hat{u}(s) - u(0),\tag{5.37}$$

y sustituyendo las ecuaciones ec.(5.36) y ec.(5.37) en la ec.(5.34) tenemos

$$\frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \Gamma(1-\alpha) s^{\alpha-1} (s\hat{u}(s) - u(0)) = \lambda \hat{u}(s).\tag{5.38}$$

Despejando $\hat{u}(s)$ de la ec.(5.38):

$$\hat{u}(s) = \frac{s^{\alpha-1} u(0)}{s^\alpha - \lambda} = \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda}.\tag{5.39}$$

Invirtiendo la Transformada de Laplace [72]

$$u(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} ds, \quad (5.40)$$

donde σ es mayor que la parte real de todas las singularidades del integrando de la ec.(5.40).

Ahora bien, si utilizamos el teorema de Cauchy y el hecho que el integrando de la ec.(5.40) tiene polos simples en $s_{0,n} = |\lambda|^{1/\alpha} \exp(i(\theta + 2n\pi)/\alpha)$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, y un corte rama en los reales negativos, podemos escoger como trayectoria de integración para la inversión de la transformada, la trayectoria mostrada en la fig.(5.1), y por lo tanto, expresar la ec.(5.40) de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} f(s) ds &= \sum \text{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_1} f(s) ds - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_2} f(s) ds - \\ &\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} f(s) ds - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_3} f(s) ds - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_4} f(s) ds, \\ f(s) &= \frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Por otro lado, es posible demostrar que

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_i} f(s) ds &= 0, \quad i = 1, 4, \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\Gamma_\epsilon} f(s) ds &= 0. \end{aligned} \quad (5.42)$$

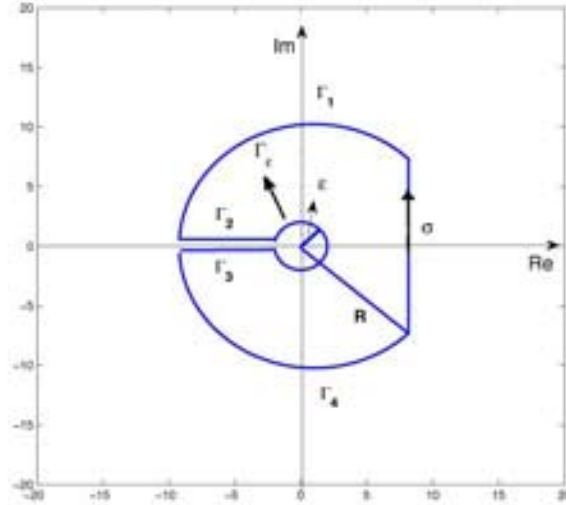


Figura 5.1: Trayectoria de Bromwich utilizada para la inversión.

Por lo tanto, la ec.(5.40) se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 u(t) &= \sum \operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) - \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{\Gamma_2} \hat{u}(s) e^{st} ds + \int_{\Gamma_3} \hat{u}(s) e^{st} ds \right) = \\
 &\sum \operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) \\
 &- \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{-\infty}^0 \frac{e^{xte^{i\pi}} x^{\alpha-1} e^{i\pi(\alpha-1)} e^{i\pi} dx}{x^\alpha e^{i\pi\alpha} - \lambda} + \int_0^\infty \frac{e^{xte^{-i\pi}} x^{\alpha-1} e^{-i\pi(\alpha-1)} e^{-i\pi} dx}{x^\alpha e^{-i\pi\alpha} - \lambda} \right) = \\
 &\sum \operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) \\
 &- \frac{1}{2\pi i} \left(\int_0^\infty \frac{e^{i\pi\alpha} x^{\alpha-1} e^{-xt} dx}{x^\alpha e^{i\pi\alpha} - \lambda} - \int_0^\infty \frac{e^{-i\pi\alpha} x^{\alpha-1} e^{-xt} dx}{x^\alpha e^{-i\pi\alpha} - \lambda} \right) = \\
 &\sum \operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) - \frac{1}{2\pi i} \left(\lambda \int_0^\infty \frac{x^{\alpha-1} e^{-xt} dx}{x^{2\alpha} - 2\lambda x^\alpha \cos(\pi\alpha) + \lambda^2} \right). \tag{5.43}
 \end{aligned}$$

El cálculo de los residuos se lleva a cabo mediante la siguiente expresión

$$\operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) = \frac{e^{s_0 t} s_0^{\alpha-1}}{\frac{d}{ds}(s^\alpha - \lambda) |_{s=s_0}}. \quad (5.44)$$

Donde s_0^α , cumple con $s_0^\alpha - \lambda = 0$, es decir

$$\begin{aligned} s_0^\alpha &= |\lambda|^{1/\alpha} e^{i(\theta+2n\pi)/\alpha}, \\ |(\theta + 2n\pi)/\alpha| &\leq \pi, \quad n \in \mathbb{N}. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Ahora, como $\alpha < 1$ entonces $|(\theta + 2n\pi)/\alpha| \leq \pi \iff n = 0$, por lo tanto la suma sobre los residuos está dada por

$$\sum \operatorname{Res} \left(\frac{e^{st} s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda} \right) = \frac{1}{\alpha} \exp(|\lambda|^{1/\alpha} t e^{i\theta/\alpha}). \quad (5.46)$$

Finalmente, haciendo el cambio de variable $x = |\lambda|^{1/\alpha} r$ y escribiendo $\lambda = |\lambda| e^{i\theta}$ en la integral de la última expresión de la ec.(5.43), obtenemos la solución de la ec.(5.32), es decir

$$u(t) = \frac{1}{\alpha} \exp(|\lambda|^{1/\alpha} t e^{i\theta/\alpha}) - \frac{\sin(\pi\alpha)}{\pi} \int_0^\infty \frac{r^{\alpha-1} e^{-|\lambda|^{1/\alpha} r t} dr}{e^{-i\theta} r^{2\alpha} - 2r^\alpha \cos(\pi\alpha) + e^{-i\theta}}. \quad (5.47)$$

En esta última ecuación es fácil ver que si λ es un número real, hay dos posibilidades para el comportamiento de $u(t)$ cuando $t \rightarrow \infty$, éstas son

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t) = \begin{cases} \infty & \text{si } \lambda > 0, \\ 0 & \text{si } \lambda < 0. \end{cases} \quad (5.48)$$

Por otro lado, si $\lambda \in \mathbb{C}$, es decir si λ es de la forma $\lambda = |\lambda| e^{i\theta}$, existe un valor crítico de α , para el cual se cumple⁴

$$\lim_{t \rightarrow \infty} u(t) = \begin{cases} \infty & \text{si } \alpha > \alpha_c, \\ 0 & \text{si } \alpha < \alpha_c. \end{cases} \quad (5.49)$$

Dicho valor crítico está dado por

$$\alpha_c = \frac{2}{\pi} \theta. \quad (5.50)$$

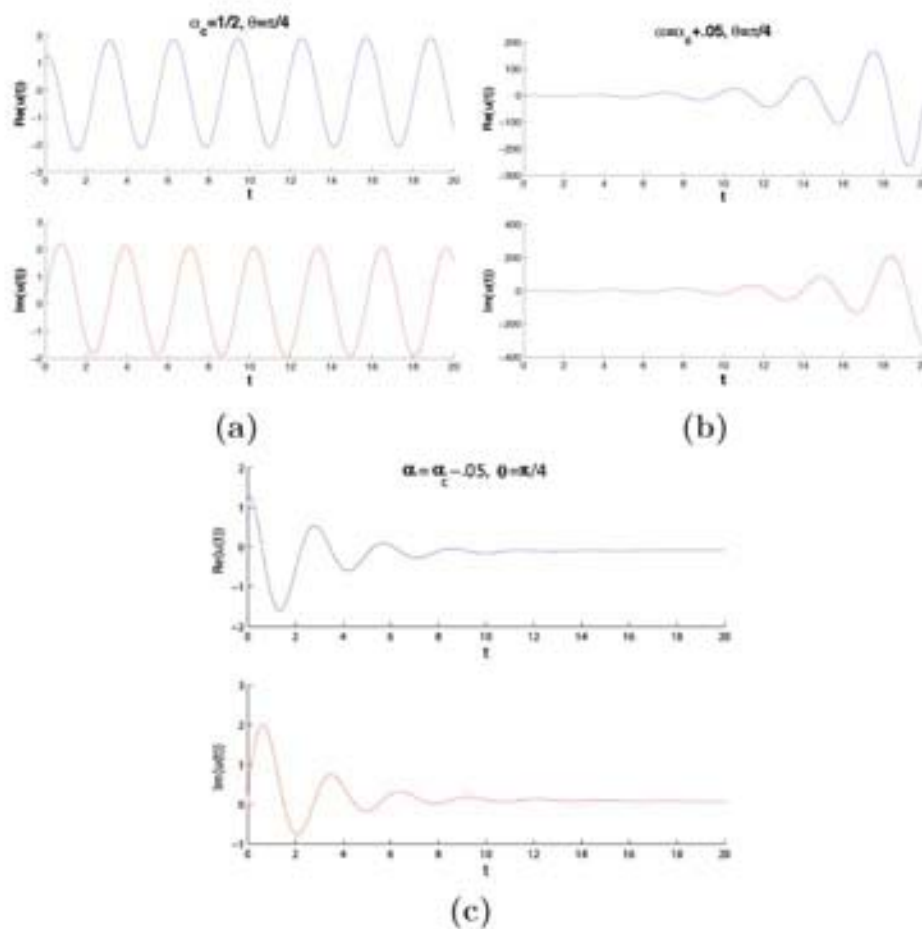


Figura 5.2: Comportamiento de $u(t)$ cuando $\lambda \in \mathbb{C}$. (a) $\alpha = \alpha_c$, (b) $\alpha > \alpha_c$, (c) $\alpha < \alpha_c$.

Si $\alpha = \alpha_c$ la función $u(t)$ es periódica, y su periodo está dado por

$$T = \frac{1}{\sin(\theta/\alpha_c)}. \quad (5.51)$$

En las fig.(5.2) y fig.(5.3), se muestran ejemplos de los distintos comportamientos asintóticos de $u(t)$ calculados numéricamente para: $\alpha_c = 1/2$ con $\lambda = e^{i\pi/4}$ y para $\alpha = 1/2$ con $|\lambda| = 1$ y $\theta = -\pi, 0$, es decir para $\lambda \in \mathbb{R}$.

⁴Es importante notar que el valor crítico de α sólo existe si $\text{Re}(\lambda) > 0$.

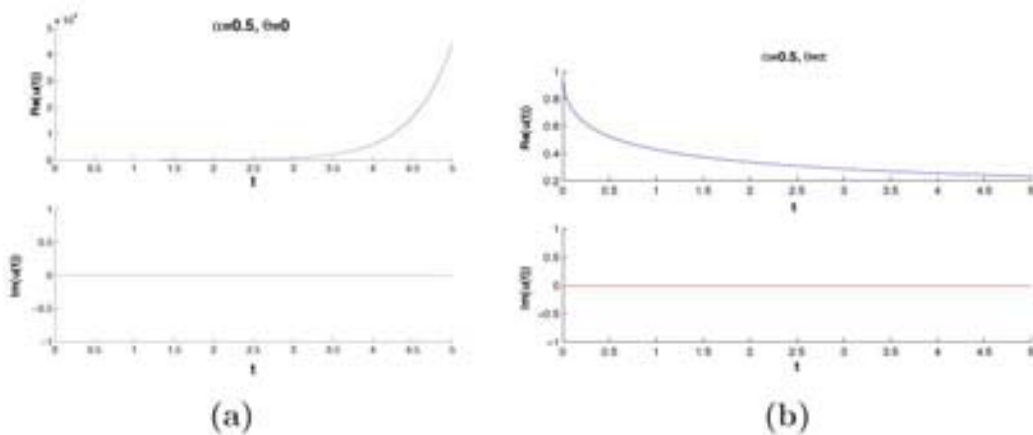


Figura 5.3: Comportamiento de $u(t)$ cuando $\lambda \in \mathbb{R}$. **(a)** $\lambda > 0$, **(b)** $\lambda < 0$.

En la fig.(5.2) vemos el comportamiento de $u(t)$ para valores de α alrededor del valor crítico α_c cuando $\lambda \in \mathbb{C}$. En la fig.5.2**(a)**, el valor de α es igual a α_c , por lo que el comportamiento de $u(t)$ es periódico, mientras que en la fig.5.2**(b)** $\alpha > \alpha_c$ por lo tanto $u(t) \rightarrow \infty$ cuando $t \rightarrow \infty$ de forma oscilatoria. En la fig.5.2**(c)** $\alpha < \alpha_c$, por lo que $u(t) \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$. Nótese que en este caso, el estado estacionario $u = 0$ es estable aún cuando $\lambda > 0$.

En la fig.(5.3) vemos los distintos comportamientos de $u(t)$ cuando $\lambda \in \mathbb{R}$.

Finalmente, nótese que si $\alpha = 1$ la ec.(5.47) se reduce a $u(t) = \exp(\lambda t)$, que como sabemos, es solución de la ec.(5.32) cuando $\alpha = 1$.

En el siguiente capítulo veremos que la ec.(5.32) aparece de manera natural en el análisis lineal de sistemas de reacción subdifusión. Veremos también que la existencia del valor crítico para el exponente anómalo, tiene consecuencias importantes en las condiciones necesarias para la existencia de una inestabilidad de Turing.

Capítulo 6

Sistemas de reacción-difusión generalizados.

Este capítulo trata sobre sistemas de reacción-difusión generalizados y sobre el tipo de patrones que éstos pueden generar, es decir, se estudian sistemas que modelan reacciones químicas en presencia de difusión anómala y sus posibilidades como sistemas generadores de patrones espacio-temporales. La manera de modelar la difusión anómala, o bien, de generalizar los sistemas de reacción-difusión, es mediante la introducción de derivadas fraccionarias tanto en el espacio como en el tiempo. De este modo, un sistema de reacción-difusión normal se vuelve un caso particular de los sistemas de reacción-difusión generalizados.

Hasta ahora, no hay muchos estudios teóricos sobre la formación de patrones en sistemas que modelan reacciones químicas en presencia de difusión anómala [54, 73, 75, 76, 77, 78, 79]. Esto se debe, entre otras cosas, a que la teoría sobre la generalización de los sistemas de reacción-difusión no está terminada, ya que todavía no se resuelven incógnitas tales como la modelación de la parte reactiva en sistemas con subdifusión [75, 80, 81, 82].

Este capítulo se enfoca en la modelación de reacciones químicas en presencia de subdifusión, en el análisis lineal del sistema generalizado correspondiente, y finalmente, en los efectos que este tipo de difusión tiene en las condiciones necesarias para la existencia de una inestabilidad de Turing.

En la última parte del capítulo se utilizan los resultados generales del análisis lineal para estudiar las diferencias entre los patrones generados con difusión normal y con subdifusión utilizando el modelo BVAM.

6.1. Sistemas generalizados con subdifusión.

Como ya vimos, un sistema de reacción-difusión para dos compuestos químicos se puede escribir de manera general de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\nabla^2 u + \eta F(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \nabla^2 v + \eta G(u, v),\end{aligned}\tag{6.1}$$

donde F y G son funciones que modelan la cinética química de acuerdo a la ley de acción de masas.

Las expresiones mostradas en la ec.(6.1) se pueden escribir de forma más general utilizando derivadas fraccionarias, lo cual introduce la posibilidad de que los compuestos se difundan de manera anómala. Dicha manera de reescribir la ec.(6.1) está dada por

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} &= \chi \nabla^\beta u + \eta F(u, v), \\ \frac{{}^c\partial^\gamma v}{\partial t^\gamma} &= \nabla^\delta v + \eta G(u, v), \\ \nabla^\beta &= \sum_{i=1}^3 \left(s_{x_i} (-\infty D_{x_i}^\beta) + (1 - s_{x_i})_{x_i} D_\infty^\beta \right), \\ \nabla^\delta &= \sum_{i=1}^3 \left(r_{x_i} (-\infty D_{x_i}^\delta) + (1 - r_{x_i})_{x_i} D_\infty^\delta \right), \\ 0 < \alpha, \gamma &\leq 1; \quad 1 < \beta, \delta \leq 2; \quad x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z; \quad 0 \leq s_{x_i}, r_{x_i} \leq 1,\end{aligned}\tag{6.2}$$

donde las derivadas fraccionarias en el tiempo modelan subdifusión y las derivadas fraccionarias en el espacio modelan superdifusión¹.

Los parámetros r_{x_i}, s_{x_i} , $i = 1, 2, 3$, son los parámetros de asimetría correspondientes a cada compuesto químico en las tres direcciones espaciales, y χ es la razón entre coeficientes de difusión generalizados, es decir $\chi = \frac{\chi_{\alpha,\beta}}{\chi_{\gamma,\delta}}$.

De la ec.(6.2) se puede ver que si los valores de los exponentes anómalos α, γ y β, δ son uno y dos respectivamente, recuperamos la ec.(6.1), donde la difusión es normal.

¹La forma más general de la ec.(6.2) corresponde a diferentes valores del exponente anómalo para las derivadas fraccionarias en las diferentes direcciones espaciales [54].

Ahora bien, para el caso en que la difusión anómala es solamente subdifusión, el sistema de reacción-difusión generalizado toma la siguiente forma

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} &= D\nabla^2 u + \eta F(u, v), \\ \frac{{}^c\partial^\beta v}{\partial t^\beta} &= \nabla^2 v + \eta G(u, v), \\ 0 < \alpha, \beta &\leq 1.\end{aligned}\tag{6.3}$$

Es importante mencionar, que a diferencia de las reacciones químicas con superdifusión [82, 83], la modelación mediante derivadas fraccionarias de reacciones químicas en presencia de subdifusión es todavía un problema abierto [75, 80], razón por la cual existen varios modelos para este fenómeno, ninguno de los cuales ha sido experimentalmente favorecido hasta ahora [80].

El estudio de reacciones químicas en presencia de subdifusión ha adquirido importancia en las últimas décadas. Esto se debe a que se ha encontrado de manera experimental la existencia de subdifusión en distintos tipos de sistemas, entre los cuales podemos mencionar: medios porosos [84], vidrios [85], transporte a través de membranas celulares [86, 87] y otros sistemas biológicos [88].

El problema de la modelación de reacciones químicas en presencia de subdifusión mediante derivadas fraccionarias, radica fundamentalmente en la modelación de la parte reactiva, ya que bajo hipótesis más o menos similares, es posible obtener diferentes ecuaciones de reacción-subdifusión cuyas propiedades y soluciones son distintas entre sí².

Los modelos más utilizados hasta ahora son de tres tipos. Dos de ellos se pueden ver como una generalización de los sistemas de reacción-difusión normales, y difieren entre sí en la aparición de una derivada fraccionaria temporal actuando sobre el término reactivo.

Estos dos modelos son los únicos que se han utilizado para estudiar la aparición de estructuras de Turing en sistemas de reacción subdifusión [73, 75, 76, 77], y su forma explícita está dada por los siguientes sistemas de

²Para un ejemplo claro de como la difusión anómala (en el caso de caminatas aleatorias correlacionadas) afecta la cinética química ver [78].

ecuaciones

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \nabla^2 u + F(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_\beta \frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} \nabla^2 v + G(u, v), \\ 0 < \alpha, \beta &\leq 1,\end{aligned}\tag{6.4}$$

y

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D_\alpha \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} \nabla^2 u + \frac{\partial^{1-\alpha}}{\partial t^{1-\alpha}} F(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= D_\beta \frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} \nabla^2 v + \frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} G(u, v), \\ 0 < \alpha, \beta &\leq 1,\end{aligned}\tag{6.5}$$

donde las funciones F y G modelan la cinética química y están dadas por la ley de acción de masas.

El tercer tipo de dichos modelos no se puede ver como una generalización de los sistemas de reacción-difusión normales, ya que en ellos, los parámetros de la cinética química aparecen de forma explícita en la parte que modela la difusión. Este tipo de modelos han sido utilizados solamente para estudiar reacciones químicas de primer orden, es decir reacciones del tipo: $A \xrightarrow{k} C$ [80], $A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} C$ [81, 82]. A continuación se puede ver un ejemplo del tercer tipo de modelo, propuesto por Henry *et al.* [80]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_\beta \exp(\pm kt) \frac{\partial^{1-\beta}}{\partial t^{1-\beta}} (\exp(\pm kt) \nabla^2 u) \pm ku\tag{6.6}$$

Los dos primeros modelos (ec.(6.4) y ec.(6.5)) se pueden deducir de manera rigurosa utilizando caminatas aleatorias continuas en el tiempo con fuentes o sumideros, bajo la suposición que dichas fuentes (sumideros) estén dadas por una función lineal de la densidad de caminantes, esto es, se pueden deducir para reacciones de primer orden [75, 89]. La generalización de estos dos modelos a reacciones químicas de cualquier orden, es decir, la sustitución de dichos términos lineales por las funciones (no lineales) obtenidas mediante la ley de acción de masas para reacciones entre dos o más compuestos, es puramente formal y todavía no está bien justificada.

La hipótesis importante para la obtención de los modelos correspondientes a las ecuaciones ec.(6.4) y ec.(6.5) mediante CTRW, es que la reacción química debe darse de manera instantánea y debe suceder antes que las partículas den un salto.

Para obtener el tercer modelo, se supone que la reacción química no es instantánea y sucede a lo largo de los intervalos de tiempos de espera [80, 81].

Como ya he dicho, el estudio de la formación de patrones sólo se ha hecho para los primeros dos modelos. Para el modelo correspondiente a la ec.(6.4), Henry B.I. *et al.* [73], demostraron la existencia de la inestabilidad de Turing y el hecho que mediante dicha inestabilidad es posible generar patrones estacionarios robustos. Demostraron también, que el valor crítico de la razón entre coeficientes de difusión generalizados necesario para la existencia de dicha inestabilidad, es menor que el valor crítico del mismo parámetro en sistemas con difusión normal. Este resultado es importante, ya que una de las principales objeciones que se hace a la aplicación de los sistemas de Turing para explicar patrones en la naturaleza, es que el valor crítico de la razón entre coeficientes de difusión necesario para la formación de un patrón, implica que los compuestos en cuestión deben difundirse a velocidades muy diferentes, hecho que es difícil de lograr experimentalmente.

Finalmente, también mostraron que en este modelo la magnitud de las longitudes de onda que se vuelven inestables a través la inestabilidad de Turing, disminuye con el exponente anómalo de la derivada fraccionaria.

Para el segundo modelo (ec.(6.5)), y solamente para el caso en que los exponentes anómalos son iguales, Langlands *et al.* [75] mostraron que existe una inestabilidad de Turing y que las condiciones para la aparición de dicha inestabilidad son las mismas que en el caso de difusión normal. También mostraron que los patrones formados por esta inestabilidad bajo las condiciones ya mencionadas, son similares a los patrones obtenidos con difusión normal.

Por otro lado, utilizando también el modelo correspondiente a la ec.(6.5) con exponentes anómalos iguales, V.V.Gafiychuk *et al.* [76, 77] mostraron que el exponente anómalo es un parámetro de bifurcación en este tipo de sistemas, y que para valores del exponente anómalo mayores al valor crítico, aparece una inestabilidad oscilatoria de tipo celular, es decir, una inestabilidad caracterizada por una relación de dispersión cuya parte real es positiva para un número de onda diferente de cero, y cuya parte imaginaria es diferente de cero, teniendo como consecuencia la aparición de patrones oscilantes en el tiempo.

En los artículos escritos por V.V.Gafiychuk *et al.*, el exponente anómalo se toma en el intervalo $(0, 2)$, por lo que es importante notar que cuando este exponente es mayor que uno, el sistema ya no se puede considerar como un sistema de reacción subdifusión, sino como una generalización mediante derivadas fraccionarias a la ecuación de onda inhomogénea.

En lo que sigue, haremos el análisis lineal del modelo correspondiente a la ec.(6.5) para un sistema de reacción subdifusión general. Como caso particular, analizaremos el problema cuando los exponentes anómalos son iguales, expresando la solución del problema lineal en términos de la representación integral de las funciones de Mittag-Leffler, recuperando así los resultados obtenidos por V.V.Gafiychuk *et al.* y Langlands *et al.*, además de obtener nuevos resultados. Dicho análisis se hará de forma muy parecida al análisis efectuado en [75] y [76, 77].

Ahora bien, regresando al modelo descrito en la ec.(6.5), podemos ver que este sistema de ecuaciones puede ser escrito como la ec.(6.3) si se aplica la integral fraccionaria de orden $1 - \alpha$ ($1 - \beta$ para la segunda ecuación) de los dos lados de la ec.(6.5). Haciendo esto y linealizando alrededor de un punto fijo podemos escribir

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} &= D\delta\nabla^2 u + a_{11}u + a_{12}v, \\ \frac{{}^c\partial^\beta v}{\partial t^\beta} &= \delta\nabla^2 v + a_{21}u + a_{22}v,\end{aligned}\tag{6.7}$$

donde $\delta > 0$ es un factor de escala.

Aplicando las transformadas de Fourier y de Laplace (veáse capítulo 5) a la ec.(6.7) tenemos

$$\begin{aligned}s^\alpha U - s^{\alpha-1}U(k, 0) &= -D\delta k^2 U + a_{11}U + a_{12}V, \\ s^\beta V - s^{\beta-1}V(k, 0) &= -\delta k^2 V + a_{21}U + a_{22}V,\end{aligned}\tag{6.8}$$

donde U y V están dados por

$$\begin{aligned}U(k, s) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{ikx} e^{-st} u(x, t) dt dx = F(L(u)), \\ V(k, s) &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{ikx} e^{-st} v(x, t) dt dx = F(L(v)).\end{aligned}\tag{6.9}$$

Despejando U de la primera expresión de la ec.(6.8) tenemos

$$U(k, s) = \frac{s^{\alpha-1}U(k, 0) + a_{12}V}{s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11}},\tag{6.10}$$

sustituyendo la ec.(6.10) en la segunda expresión de la ec.(6.8) tenemos

$$s^\beta V - s^{\beta-1}V(0, k) = -\delta k^2 V + a_{21} \left(\frac{s^{\alpha-1}U(k, 0) + a_{12}V}{s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11}} \right) + a_{22}V. \quad (6.11)$$

Despejando V de la ec.(6.11)

$$V(k, s) = \frac{(s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11})s^{\beta-1}V(k, 0) + a_{21}s^{\alpha-1}U(k, 0)}{H(s, k)}, \quad (6.12)$$

$$H = (s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11})(s^\beta + \delta k^2 - a_{22}) - a_{12}a_{21}.$$

Sustituyendo la expresión para V en la ec.(6.10) y despejando U obtenemos las siguientes expresiones

$$U(k, s) = \frac{s^{\alpha-1}U(k, 0) + a_{12}G(s, k)}{s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11}},$$

$$G(k, s) = \frac{(s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11})s^{\beta-1}V(k, 0) + a_{21}s^{\alpha-1}U(k, 0)}{s^{\alpha+\beta} + s^\beta(D\delta k^2 - a_{11}) + s^\alpha(\delta k^2 - a_{22}) - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + D\delta^2 k^4 + \det},$$

$$\det = (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}). \quad (6.13)$$

Por otro lado, utilizando la siguiente igualdad

$$(s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11})(s^\beta + \delta k^2 - a_{22}) =$$

$$s^{\alpha+\beta} + s^\beta(D\delta k^2 - a_{11}) + s^\alpha(\delta k^2 - a_{22}) - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + D\delta^2 k^4 + a_{11}a_{22}, \quad (6.14)$$

es posible simplificar la expresión para U mostrada en la ec.(6.13), y por lo tanto reescribir las ecuaciones ec.(6.11) y ec.(6.10) de la siguiente forma

$$U(k, s) = \frac{(s^\beta + D\delta k^2 - a_{22})s^{\alpha-1}U(k, 0) + s^{\beta-1}a_{12}V(k, 0)}{S(k, s)},$$

$$V(k, s) = \frac{(s^\alpha + D\delta k^2 - a_{11})s^{\beta-1}V(k, 0) + s^{\alpha-1}a_{21}U(k, 0)}{S(k, s)},$$

$$S = s^{\alpha+\beta} + s^\beta(D\delta k^2 - a_{11}) + s^\alpha(\delta k^2 - a_{22}) - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + D\delta^2 k^4 + \det. \quad (6.15)$$

Ahora bien, sabemos que la evolución temporal de $u(k, t) = L^{-1}(U(k, s))$ está dada por las singularidades (polos y cortes rama) de la función $S(k, s)$, es decir de la función

$$S = s^{\alpha+\beta} + s^{\beta}(D\delta k^2 - a_{11}) + s^{\alpha}(\delta k^2 - a_{22}) - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + D\delta^2 k^4 + \det. \quad (6.16)$$

Las condiciones para una inestabilidad de Turing en el espacio³ (s, k) están dadas por

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(s_0(k=0)) &< 0, \\ \operatorname{Re}(s_0(k)) &> 0, k \in [k_1, k_2], \\ 0 &< k_1 < k_2. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Donde $s_0(k)$ cumple con la siguiente condición

$$S(k, s_0) = 0. \quad (6.18)$$

Los ceros⁴ de la función $S(k, s)$ (tomando a s como variable dependiente y a k como variable independiente) se pueden calcular numéricamente, por lo tanto, es posible hacer un estudio (numérico) de $s_0(k)$ como función de los parámetros del sistema, (exponentes anómalos, factores de escala, razones entre coeficientes de difusión etc...) y de esta manera determinar si existe una inestabilidad de Turing, y en caso que exista, ver como depende la aparición de dicha inestabilidad como función de los parámetros antes mencionados.

Tomando los valores para a_{11} , a_{22} , a_{12} y a_{21} de [6], podemos comenzar el estudio numérico de los ceros de $S(k, s)$ como función de k cerca de una región en la cual sabemos, existe una inestabilidad de Turing cuando $\alpha = \beta = 1$. Estos valores son: $a_{11} = 0.899$, $a_{22} = -0.91$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -0.899$ y $D = 0.516$, $\delta = 2$.

En la fig.(6.1) podemos ver como varía $s_0(k)$ para distintos valores de los exponentes anómalos. En estas figuras es posible observar que para sistemas con subdifusión también existe una inestabilidad de Turing. Por otro lado, es importante notar que el cambio más significativo al variar solamente uno de los exponentes anómalos ocurre para números de onda del orden de $k \sim 0$, ya que estos modos se vuelven inestables cuando $\alpha - \beta > \Delta_c(\alpha, \beta)$, donde

³Espacio Fourier-Laplace.

⁴Es posible demostrar que mediante las ecuaciones ec.(6.16), ec.(6.17) y utilizando como valor de los exponentes anómalos $\alpha = \beta = 1$ (difusión normal), recuperamos las condiciones de Turing. Véase Apéndice D.

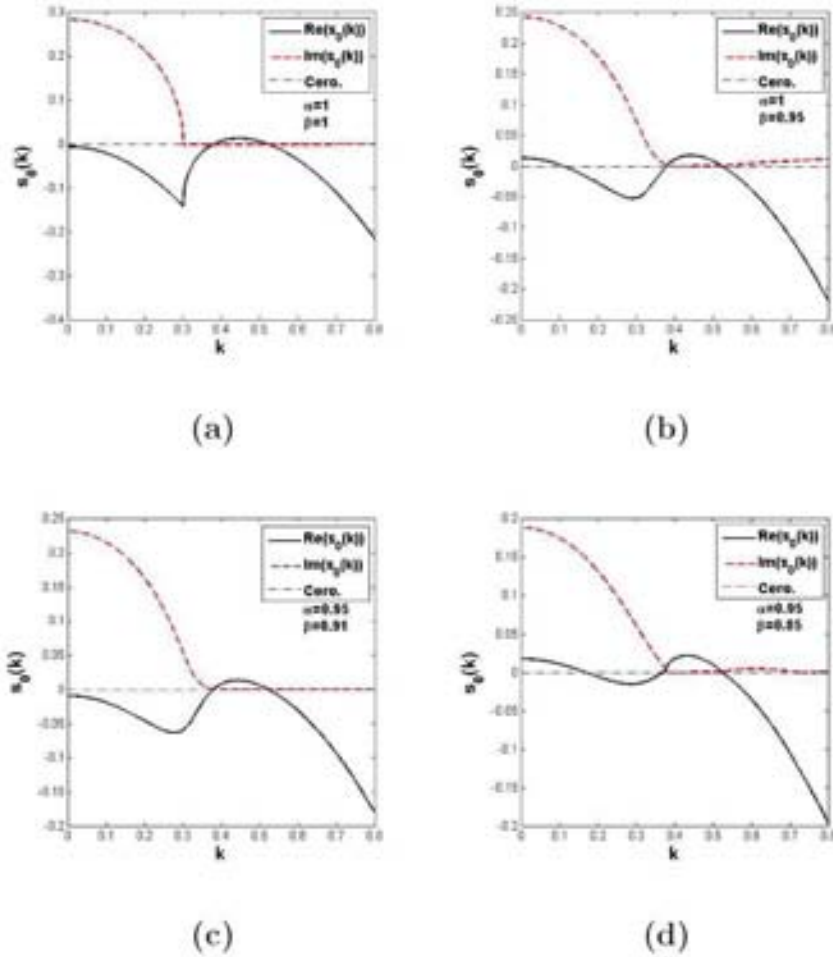


Figura 6.1: Ceros de la función $S(k, s)$ para exponentes anómalos distintos. Nótese que entre mayor es la diferencia entre α y β el estado homogéneo ($k = 0$), se vuelve inestable. (a) $\alpha - \beta = \Delta(\alpha, \beta) = 0$. (b) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.05$ (c) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.04$ (d) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.1$.

$\Delta_c(\alpha, \beta)$ es un número real que tiene que ser calculado de forma numérica para cada par de exponentes anómalos. De esto último podemos concluir que $\Delta(\alpha, \beta)$ es un parámetro de bifurcación para este tipo de sistemas.

En la fig.(6.2) podemos ver el comportamiento de los ceros de $S(k, s)$

como función de la razón entre los coeficientes de difusión D y del factor de escala δ . De esta figura podemos concluir que la inestabilidad de Turing en presencia de subdifusión, se comporta de manera similar a sistemas con difusión normal en lo que respecta a los parámetros δ y D , es decir, si los parámetros de la cinética química están fijos (al igual que los exponentes anómalos), entonces la razón entre los coeficientes de difusión de cada compuesto químico es un parámetro de bifurcación, mientras que el variar el parámetro de escala δ , tiene como consecuencia el desplazamiento del modo de Fourier más inestable.

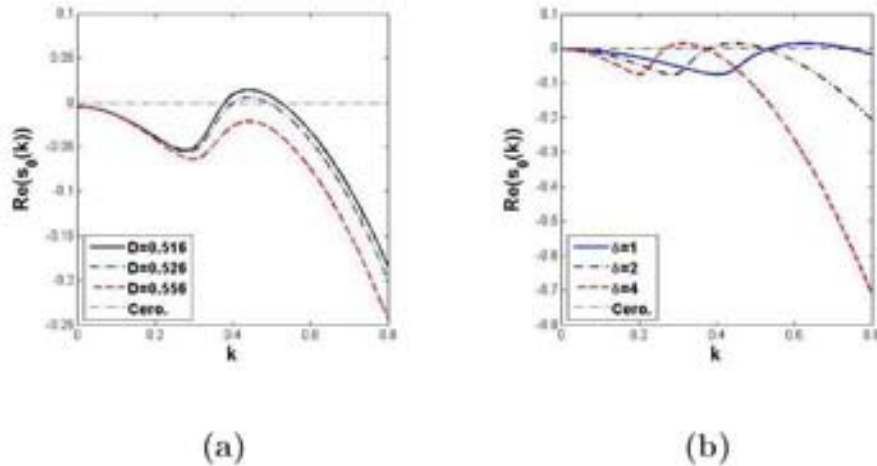


Figura 6.2: Comportamiento de los ceros de $S(k, s)$ como función de D y δ con $\alpha = 0.95$, $\beta = 0.92$. (a) Comportamiento de $s_0(k)$ para distintos valores de D . (b) Comportamiento de $s_0(k)$ para distintos valores de δ .

Ahora bien, si en la ec.(6.7) $\alpha = \beta < 1$, el análisis lineal del sistema se puede hacer de manera diferente al ya descrito, y de este modo, obtener información que mediante el método anterior es más difícil de encontrar.

En este caso, después de linealizar tenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{{}^c\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta D_\alpha \nabla^2 + a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & \delta \nabla^2 + a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}. \quad (6.19)$$

Aplicando la transformada de Fourier a la ec.(6.19) tenemos

$$\frac{{}^c\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -D_\alpha \delta k^2 + a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & -\delta k^2 + a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}. \quad (6.20)$$

Sea C la matriz cuyas columnas están dadas por los vectores propios de la matriz A , es decir

$$C = \begin{pmatrix} \tilde{u}_1 & \tilde{u}_2 \\ \tilde{v}_1 & \tilde{v}_2 \end{pmatrix}, \quad (6.21)$$

donde

$$A \begin{pmatrix} \tilde{u}_i \\ \tilde{v}_i \end{pmatrix} = \lambda_i \begin{pmatrix} \tilde{u}_i \\ \tilde{v}_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, 2. \quad (6.22)$$

Utilizando el siguiente cambio de variable

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = C^{-1} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix}, \quad (6.23)$$

y reescribiendo la ec.(6.20) en términos de las variables primadas tenemos

$$\begin{aligned} C \frac{{}^c\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} &= AC \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} \\ \frac{{}^c\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} &= C^{-1}AC \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix}, \\ C^{-1}AC &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Por lo tanto, cualquier solución del sistema se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} u'(t, k) \\ v'(t, k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} u'(0, k) \xi(\lambda_1(k)t) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} v'(0, k) \xi(\lambda_2(k)t), \quad (6.25)$$

donde ξ es una función que cumple con la siguiente ecuación diferencial fraccionaria

$$\begin{aligned} \frac{{}^c\partial^\alpha \xi}{\partial t^\alpha} &= \lambda \xi, \\ \xi(0) &= 1. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Como ya vimos, la solución de esta ecuación está dada por: $E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$, es decir, por las funciones de Mittag-Leffler de orden α , cuya forma explícita es

$$E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\lambda t^\alpha)^n}{\Gamma(\alpha n + 1)}. \quad (6.27)$$

La ec.(6.27) no da mucha información acerca de la estabilidad o inestabilidad del sistema, por lo que es más conveniente utilizar los resultados del capítulo anterior, donde pudimos expresar la solución de la ec.(6.26) en términos de la representación integral de las funciones de Mittag-Leffler, véase la ec.(5.47) [90, 91]. Utilizando dichos resultados, podemos expresar las soluciones de la ec.(6.24) de la siguiente forma

$$u'(k, t) = \begin{cases} u'(k, 0)K(\alpha, \lambda_1(k), t) - \frac{u'(k, 0)\sin(\pi\alpha)}{\pi} I(\alpha, \lambda_1(k), t); & \text{si } \left| \frac{\theta_1(k)}{\alpha} \right| \leq \pi, \\ -\frac{u'(k, 0)\sin(\pi\alpha)}{\pi} I(\alpha, \lambda_1(k), t); & \text{si } \left| \frac{\theta_1(k)}{\alpha} \right| > \pi, \end{cases} \quad (6.28)$$

$$v'(k, t) = \begin{cases} v'(k, 0)K(\alpha, \lambda_2(k), t) - \frac{v'(k, 0)\sin(\pi\alpha)}{\pi} I(\alpha, \lambda_2(k), t); & \text{si } \left| \frac{\theta_2(k)}{\alpha} \right| \leq \pi, \\ -\frac{v'(k, 0)\sin(\pi\alpha)}{\pi} I(\alpha, \lambda_2(k), t); & \text{si } \left| \frac{\theta_2(k)}{\alpha} \right| > \pi, \end{cases} \quad (6.29)$$

donde las funciones $I(\alpha, \lambda_j(k), t)$ y $K(\alpha, \lambda_j(k), t)$ están dadas por las siguientes expresiones

$$I(\alpha, \lambda_j(k), t) = \int_0^\infty \frac{r^{\alpha-1} e^{-|\lambda_j(k)|^{1/\alpha} t} dr}{e^{-i(\theta_j(k))r^{2\alpha}} - 2r^\alpha \cos(\pi\alpha) + e^{-i(\theta_j(k))}}, \quad (6.30)$$

$$K(\alpha, \lambda_j(k), t) = \frac{1}{\alpha} \exp\left(|\lambda_j(k)|^{1/\alpha} t e^{i\left(\frac{\theta_j(k)}{\alpha}\right)}\right), \quad j = 1, 2.$$

Entonces, mediante la forma explícita de $I(\alpha, \lambda_j(k), t)$, $K(\alpha, \lambda_j(k), t)$ y las ecuaciones ec.(6.28) y ec.(6.29), podemos concluir que

$$u'(k, t) \begin{cases} \text{es inestable} \iff |\theta_1(k)| < \frac{\pi\alpha}{2}, \\ \text{es estable} \iff |\theta_1(k)| \geq \frac{\pi\alpha}{2}, \end{cases} \quad (6.31)$$

$$v'(k, t) \begin{cases} \text{es inestable} \iff |\theta_2(k)| < \frac{\pi\alpha}{2}, \\ \text{es estable} \iff |\theta_2(k)| \geq \frac{\pi\alpha}{2}. \end{cases} \quad (6.32)$$

De las ec.(6.31) y ec.(6.32), es fácil ver que si se cumplen las siguientes desigualdades: $\lambda_j(k) < 0$, o $\lambda_j(k) > 0$, $j = 1, 2$, $\lambda \in \mathbb{R}$, entonces el estado estacionario homogéneo de la ec.(6.3) (cuando $\alpha = \beta$) es estable para la primera desigualdad e inestable para la segunda; mientras que para el caso en que $\lambda_j(k)$ es de la forma: $\lambda_j = |\lambda_j|e^{i\theta_j}$, existe un valor crítico de α para

el cual dicho estado se vuelve marginalmente estable, es decir, si $\alpha > \alpha_c$ el estado estacionario es inestable mientras que para $\alpha < \alpha_c$ es estable.

Es importante notar que el valor crítico de α solamente existe si se cumple la siguiente condición⁵: $TrA(k) > 0$, y está dado por

$$\begin{aligned}\alpha_c(k) &= \frac{2}{\pi} \arctan\left(\sqrt{\frac{4h(k)}{(TrA(k))^2} - 1}\right), \\ TrA(k) &= -\delta k^2(D+1) + (a_{11} + a_{22}), \\ h(k) &= D\delta^2 k^4 - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + \det.\end{aligned}\tag{6.33}$$

Ahora, como ya vimos, las condiciones para la existencia de una inestabilidad de Turing son:

- El estado estacionario homogéneo debe ser linealmente estable ante perturbaciones con números de onda pequeños ($k \sim 0$).
- El estado estacionario homogéneo debe ser inestable ante perturbaciones con número de onda diferente de cero ($|k| > 0$).

Entonces, de acuerdo a las ec.(6.31), ec.(6.32) y ec.(6.33), cuando tenemos reacciones químicas en presencia de subdifusión la primera de las condiciones anteriores (a diferencia de reacciones químicas con difusión normal ($\alpha = 1$)) se puede satisfacer de dos maneras diferentes, éstas son

$$\begin{aligned}a_{11} + a_{22} &< 0, \\ \det &> 0.\end{aligned}\tag{6.34}$$

o

$$\begin{aligned}a_{11} + a_{22} &> 0, \\ 4\det &> (a_{11} + a_{22})^2, \\ \alpha_c(0) &> \alpha.\end{aligned}\tag{6.35}$$

Es importante notar que la ec.(6.35) implica que bajo ciertas condiciones, reacciones químicas inestables, pueden volverse estables en presencia de subdifusión, lo cual se debe a la posibilidad del sistema de ser linealmente estable incluso cuando $Re(\lambda_i) > 0$. Este resultado puede ser verificado experimentalmente, y por lo tanto podría ser útil en la verificación o refutación del modelo que estamos usando.

⁵En caso contrario la desigualdad: $\theta_j > \frac{\alpha_j}{2}$ siempre es válida.

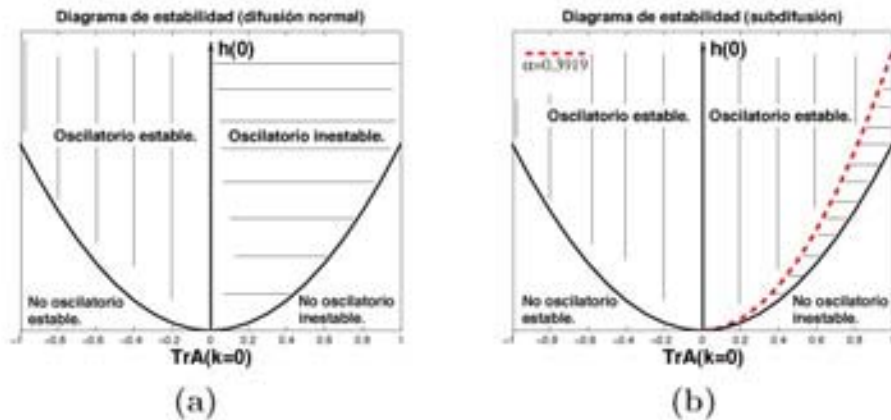


Figura 6.3: Diagrama de estabilidad para el estado homogéneo estacionario. Las líneas horizontales corresponden a una región en el espacio de parámetros donde el estado estacionario es inestable. (a) Difusión normal. (b) Subdifusión, $\alpha_c = 0.3919$.

Las diferencias entre las ec.(6.34) y ec.(6.35), se pueden ver de forma gráfica en la fig.(6.3).

En el primer caso, es decir, cuando se cumplen las condiciones dadas en la ec.(6.34) no existe α_c para el estado estacionario homogéneo, por lo tanto para que el sistema sea inestable ante perturbaciones con números de onda diferentes de cero, es necesario que $h(k) < 0$, lo que implica las siguientes condiciones para los parámetros del sistema: $(a_{11} + Da_{22}) > 0$, $D \neq 1$ y $\text{signo}(a_{11}) \neq \text{signo}(a_{22})$; recuperando así las condiciones normales para la existencia de una inestabilidad de Turing [75]. El cálculo de la razón crítica entre coeficientes de difusión D_c y del número de onda crítico, se hacen exactamente igual que cuando la difusión es normal.

Podemos concluir entonces, que en un sistema de reacción-subdifusión cuya cinética química cumple con la ec.(6.34), las condiciones para una inestabilidad de Turing son idénticas que las condiciones correspondientes al mismo sistema con difusión normal.

Por otro lado, si la cinética química cumple con la ec.(6.35), entonces, para que el sistema sea inestable ante perturbaciones con $k \neq 0$, existen dos posibilidades, las cuales pueden ser clasificadas de acuerdo al signo de $\text{Tr}A(k)$ y al valor del exponente anómalo α .

De las ec.(6.31) y ec.(6.32), podemos ver que para el caso correspondiente

a $\text{Tr}A(k) > 0$, los números de onda inestables cumplen con ⁶

$$\text{Tr}A(k^2) > 0 \implies \begin{cases} 4h(k) < (\text{Tr}A(k))^2 \implies \text{Im}(\lambda_i(k)) = 0, k \neq 0, \\ 4h(k^2) > (\text{Tr}A(k))^2 \implies \text{Im}(\lambda_i(k)) \neq 0, \alpha > \alpha_c(k), \end{cases} \quad (6.36)$$

mientras que para $\text{Tr}A(k) < 0$, los números de onda inestables deben cumplir con

$$\text{Tr}A(k) < 0 \implies h(k) < 0, k \neq 0. \quad (6.37)$$

Nótese que en este caso, la desigualdad dada en la ec.(6.37) no implica que $\text{signo}(a_{11}) \neq \text{signo}(a_{22})$.

Ahora bien, para tener una inestabilidad de tipo Turing es necesario que los números de onda para los cuales $\text{Im}(\lambda_i(k)) \neq 0$ sean estables, por lo tanto debemos pedir que⁷

$$\alpha < \min_k(\alpha_c(k)). \quad (6.38)$$

Para que $\alpha_c(k)$ tenga un mínimo diferente de cero es necesario que $h(k_0) > 0$, donde k_0 es el número de onda para el cual se cumple $\text{Tr}A(k_0) = 0$. En este caso, la función $\alpha_c(k)$ es una función monótona creciente cuyo mínimo es: $\alpha_c(0)$, y cuyo máximo es: $\max_k(\alpha_c(k)) = \alpha_c(k_0) = 1$. En caso contrario, es decir, cuando $h(k_0) < 0$ el $\min_k(\alpha_c(k)) = 0$. En la fig.(6.4) podemos ver los diferentes comportamientos de α_c y de $\text{Tr}A$ como función del número de onda. Nótese que en dicha figura, la variable independiente es k^2 y no k . Esto se debe a que de esta manera es más fácil reconocer la función $\text{Tr}A(k^2)$, que en este caso, es una línea recta.

Por otro lado, si relajamos la condición dada en la ec.(6.38) para el exponente anómalo, el sistema puede tener inestabilidades celulares oscilatorias, e incluso es posible tener inestabilidades celulares oscilatorias y no oscilatorias para distintos números de onda al mismo tiempo.

Finalmente, sabemos que los valores propios de la matriz Jacobiana de

⁶Es importante notar que en este caso, es posible tener una inestabilidad aun cuando $h(k) > 0$, cosa que es imposible para el caso de difusión normal.

⁷Nótese que en el momento en que la parte imaginaria de los valores propios se vuelve una función del número de onda, el parámetro α_c se vuelve una función continua y acotada del número de onda.

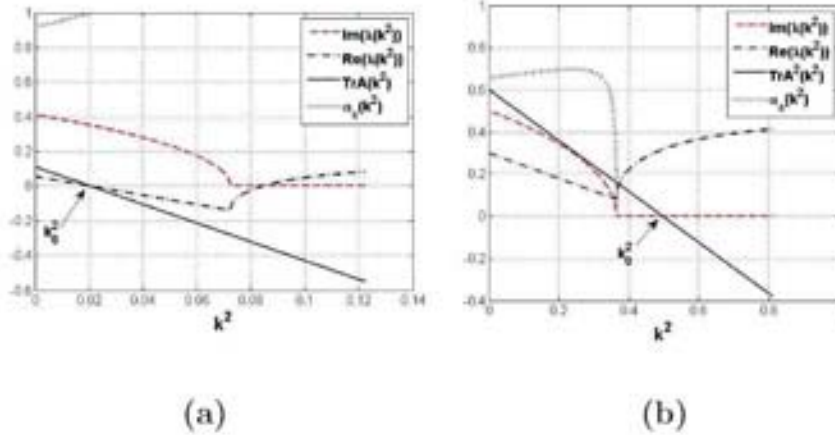


Figura 6.4: Diferentes comportamientos de $\alpha_c(k^2)$. (a) $h(k_0^2) > 0$. (b) $h(k_0^2) < 0$.

nuestro sistema están dados por las siguientes ecuaciones

$$\lambda_i(k) = \frac{\text{Tr}A(k)}{2} \pm \frac{\sqrt{H(k)}}{2}, \quad i = 1, 2; \quad (6.39)$$

$$H(k) = (\text{Tr}A(k))^2 - 4h(k).$$

Además, sabemos que para tener una inestabilidad de tipo Turing es necesario que cerca de los números de onda inestables se cumpla $H(k) > 0$, donde la forma explícita de $H(k)$ está dada por

$$H(k) = k^4(D - 1)^2 + 2k^2(1 - D) + (a_{11} + a_{22})^2 - 4\det > 0. \quad (6.40)$$

Por lo tanto, de la ec.(6.40) es fácil ver que también en este caso, es decir cuando se cumplen las condiciones de la ec.(6.35), no es posible tener una inestabilidad de Turing cuando $D = 1$, ya que debido a las condiciones impuestas sobre el estado homogéneo sabemos que $(a_{11} + a_{22})^2 - 4\det < 0$.

Ahora bien, si tenemos una cinética química que cumple con las condiciones dadas en la ec.(6.35), podemos estudiar como se comporta un sistema de reacción-subdifusión con estas características cuando los exponentes anómalos correspondientes a cada compuesto son diferentes. Para esto usamos de nuevo la función $S(k, s)$. En la fig.(6.5) podemos ver los diferentes

comportamientos de $s_0(k)$ para diferentes exponentes anómalos correspondientes a los siguientes parámetros: $a_{11} = 0.91$, $a_{22} = -0.7$, $a_{12} = 1$ y $a_{21} = -a_{11}$.

La fig.6.5(a) muestra las partes real e imaginaria correspondientes a uno de

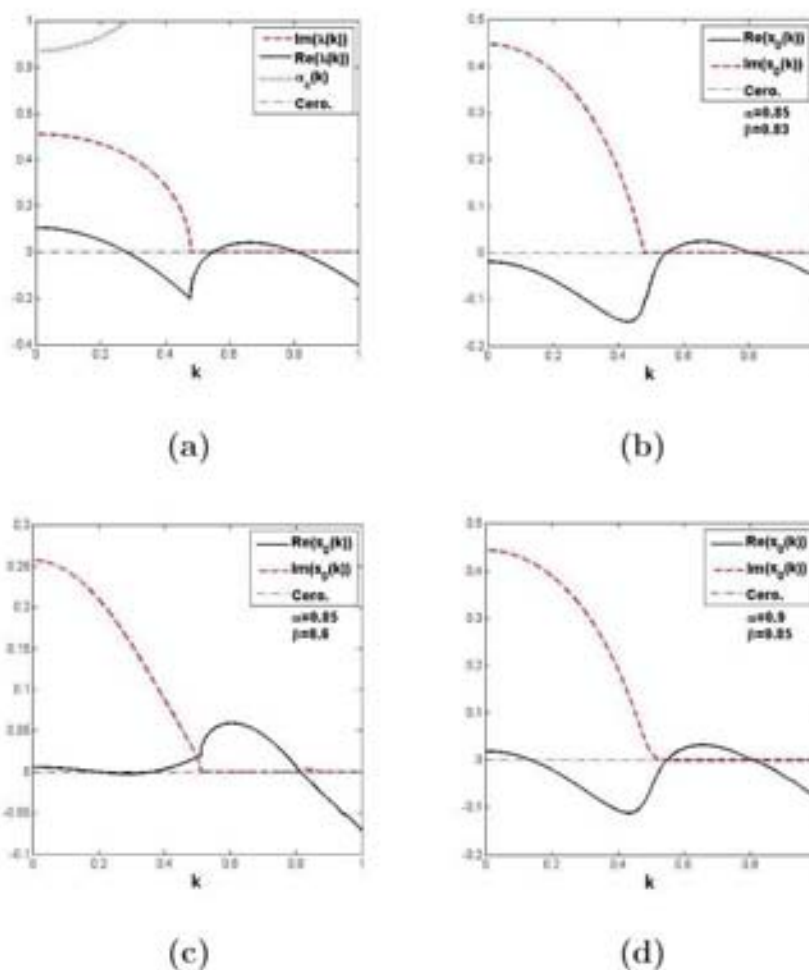


Figura 6.5: Ceros de la función $S(k, s)$ para exponentes anómalos distintos. Nótese que entre mayor es la diferencia entre α y β , el estado homogéneo ($k = 0$) se vuelve inestable. (a) $\lambda(k)$ Vs. k , $\alpha(k)$ Vs. k , $\alpha_c(0) = 0.8712$ (b) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.02$ (c) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.25$ (d) $\Delta(\alpha, \beta) = 0.05$.

los valores propios de la matriz Jacobiana como función del número de onda k , y a la curva correspondiente a: $\alpha_c(k)$, donde $\alpha_c(0) = 0.8712$.

De la fig.(6.5), vemos que también en este caso existe $\Delta_c(\alpha, \beta)$, donde si $\Delta(\alpha, \beta) = \alpha - \beta > \Delta_c(\alpha, \beta)$, el estado estacionario homogéneo es inestable ante perturbaciones con $k = 0$.

Por otro lado la fig.6.5(d), sugiere que en el caso en que cualquiera de los dos exponentes anómalos sea mayor a $\alpha_c(0)$ entonces el estado homogéneo es inestable ante perturbaciones con $k = 0$ ⁸.

6.2. Modelo BVAM con subdifusión

Utilizando los resultados obtenidos en la sección anterior en el modelo BVAM, cuya forma explícita está dada por [6]

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\delta\nabla^2 u + au(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 u), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \delta\nabla^2 v + bv(1 + (ar_1/b)uv) + u(\gamma + r_2 v),\end{aligned}\tag{6.41}$$

es posible estudiar la aparición de patrones de Turing en presencia de subdifusión. Para esto, sustituimos las derivadas temporales del modelo por derivadas fraccionarias de Caputo, y llevamos a cabo un estudio numérico similar al hecho por Barrio *et al.* [6].

Entonces, si reescribimos la ec.(6.41) en términos de derivadas fraccionarias tenemos

$$\begin{aligned}\frac{{}^c\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} &= D\delta\nabla^2 u + a_{11}u(1 - r_1 v^2) + v(a_{12} - r_2 u), \\ \frac{{}^c\partial^\beta v}{\partial t^\beta} &= \delta\nabla^2 v + a_{22}v(1 + (a_{11}r_1/a_{22})uv) + u(a_{21} + r_2 v), \\ 0 < \alpha, \beta &\leq 1,\end{aligned}\tag{6.42}$$

donde $a_{12} = 1$, $\gamma = a_{21}$, $a_{11} = a$ y $a_{22} = b$.

Ahora bien, si las entradas de la matriz Jacobiana a_{ij} no tienen ninguna restricción, es fácil ver que existen tres puntos fijos en este modelo, mientras que bajo la condición $a_{11} = -a_{21}$, el único punto fijo de la ec.(6.42) es: $(u, v) = (0, 0)$.

⁸Recuérdese que $\alpha_c(k)$ sólo se conoce para el caso en que $\alpha = \beta$.

Si utilizamos como valores para los parámetros del modelo los valores dados en [6], podemos calcular de forma explícita los ceros de la función $S(k, s)$ mencionada en la sección anterior. Dichos valores son: $a_{11} = 0.899$, $a_{22} = -0.91$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -a_{11} = 0.899$, $\delta = 2$, $D = 0.516$. Los ceros de $S(k, s)$ como función del número de onda ($s_0(k)$) y para diferentes exponentes anómalos, se pueden ver en la fig.(6.6). De acuerdo a estas figuras existe una inestabilidad de Turing para los exponentes anómalos utilizados, por lo tanto,

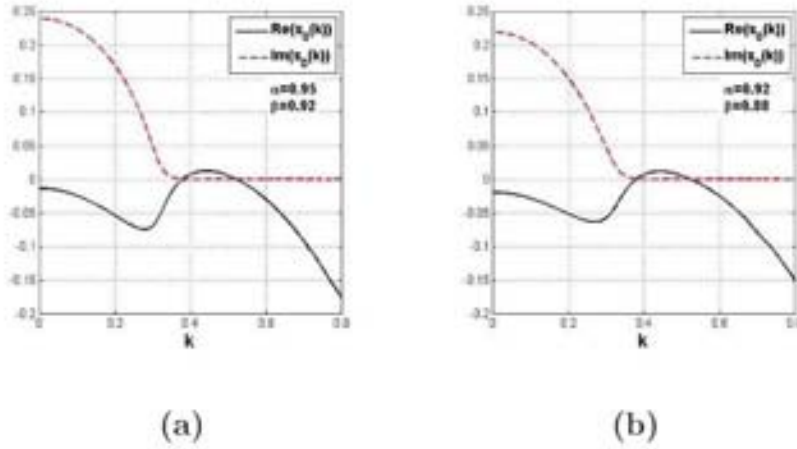


Figura 6.6: Ceros de la función $S(k, s)$, como función de k para distintos exponentes anómalos. (a) $\Delta = 0.3$. (b) $\Delta = 0.04$.

al resolver numéricamente la ec.(6.42) con los exponentes anómalos correspondientes a la fig.(6.6), utilizando condiciones iniciales al azar alrededor del estado $(u, v) = (0, 0)$ y con el conjunto particular de parámetros ya mencionados, la solución debe converger a un patrón espacial estacionario con una escala bien definida.

Para la integración numérica, utilizamos el método de Euler y la discretización propuesta por Gorenflo *et al.* [92] para la derivada fraccionaria de Caputo en el tiempo. Dicha discretización está dada por

$$\frac{{}^c \partial^\alpha y_{i,j}}{\partial t^\alpha}(t_{n+1}) = \sum_{m=0}^{n+1} (-1)^m \binom{\alpha}{m} \frac{y_{i,j}(t_{n+1-m}) - y_{i,j}(t_0)}{(\Delta t)^\alpha}, \quad (6.43)$$

donde $y_{ij}(t_n)$ es el valor que toma la función y en el punto (i, j) de una malla

bidimensional al tiempo t_n . La cantidad Δt representa el intervalo de tiempo utilizado para la integración numérica, que en todos los cálculos fue tomado como $\Delta t = 0.01$.

Es importante observar que el sistema tiene una memoria de $n + 2$ pasos en el tiempo, por lo tanto es necesario ir guardando esta información a largo de la integración numérica. Esto último es problemático para los cálculos numéricos utilizados para obtener un patrón de Turing convergido, ya que el número de iteraciones necesarias para esto, es del orden de 10^5 . Por lo tanto, para obtener los patrones de Turing mostrados en esta sección, tomamos en cuenta solamente los términos de la suma de la ec.(6.43) cuyos coeficientes cumplen con

$$\binom{\alpha}{m} = \frac{\Gamma(\alpha + 1)}{\Gamma(m + 1)\Gamma(\alpha - m + 1)} \geq 10^{-7}. \quad (6.44)$$

Aquí surge otro problema al calcular los valores de las expresiones mostradas en la ec.(6.44) para $m \gg 1$. Para evitar dicho problema, utilizamos la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes binomiales [93]

$$\binom{\alpha}{m} = - \left[1 - \frac{1 + \alpha}{m} \right] \binom{\alpha}{m - 1}. \quad (6.45)$$

La integración numérica la llevamos a cabo en un dominio rectangular utilizando una malla de 100×100 puntos, donde la separación entre puntos adyacentes fue tomada como $\Delta x = 1$. Las condiciones de frontera son periódicas y las condiciones iniciales al azar.

Ahora bien, como las curvas mostradas en la fig.(6.6) fueron calculadas numéricamente, lo primero que haremos es checar la estabilidad del estado homogéneo estacionario con respecto a perturbaciones uniformes ($k = 0$). Para esto, resolvemos la ec.(6.42) con $\delta = 0$, es decir, resolvemos de forma numérica las ecuaciones diferenciales fraccionarias correspondientes a la cinética química sin tomar en cuenta la parte espacial.

Los retratos fase del sistema correspondientes a $\delta = 0$ se pueden ver en la fig.(6.7). Nótese que las condiciones iniciales para la fig.6.7(a) y la fig.6.7(b) son las mismas, por lo tanto el comportamiento de las trayectorias es muy parecido. De dichos retratos fase podemos concluir que para los exponentes anómalos escogidos, el estado estacionario homogéneo $((u, v) = (0, 0))$ del sistema es estable, tal como lo predice la fig.(6.6).

Una vez checada la estabilidad del estado homogéneo, resolvemos el sistema de ecuaciones para $\delta = 2$. Los patrones obtenidos pueden ser puntos o rayas

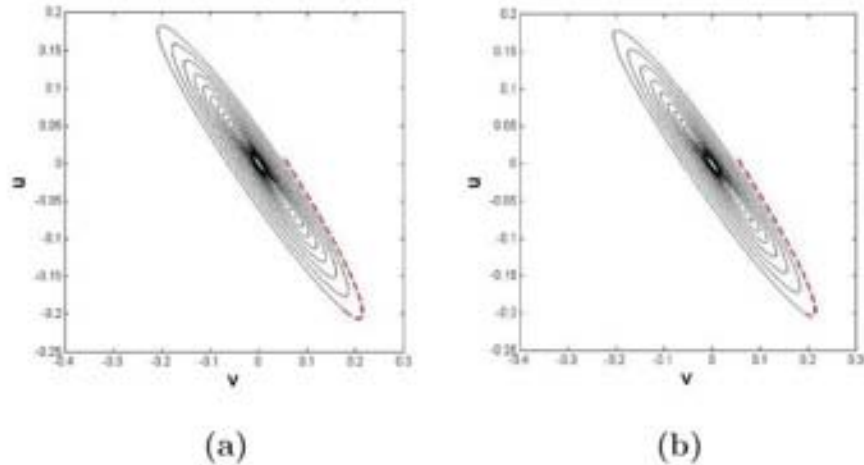


Figura 6.7: Retratos fase del estado homogéneo correspondientes a los parámetros utilizados en la fig.(6.6). La curva discontinua corresponde a las primeras 800 iteraciones, por lo tanto, en ambas figuras el punto $(u, v) = (0, 0)$ es un punto fijo estable.

dependiendo de los valores de r_1 y r_2 , ver la fig.(6.8). Al igual que en [6] podemos ver que los términos no lineales cúbicos, correspondientes al parámetro r_1 favorecen la formación de rayas, mientras que los términos cuadráticos correspondientes al parámetro r_2 favorecen la formación de puntos.

Ahora bien, si comparamos los patrones de la fig.(6.8) con los patrones obtenidos mediante difusión normal fig.(6.9), podemos ver que no hay diferencias cualitativas importantes. Esto se debe a que el patrón final es independiente del tiempo, y por lo tanto solución a la siguiente ecuación

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= -\frac{1}{\delta D} (a_{11}u(1 - r_1v^2) + v(a_{12} - r_2u)), \\ \nabla^2 v &= -\frac{1}{\delta} (a_{22}v(1 + (a_{11}r_1/a_{22})uv) + u(a_{21} + r_2v)), \end{aligned} \quad (6.46)$$

independientemente si el patrón se formó en presencia de subdifusión o de difusión normal. Estas observaciones sugieren que la presencia de subdifusión en sistemas de reacción-difusión que cumplen con la ec.(6.34) solamente afecta la evolución temporal del patrón hacia su estado final, lo que sugiere de igual manera, la existencia de un sistema de ecuaciones de amplitud genera-

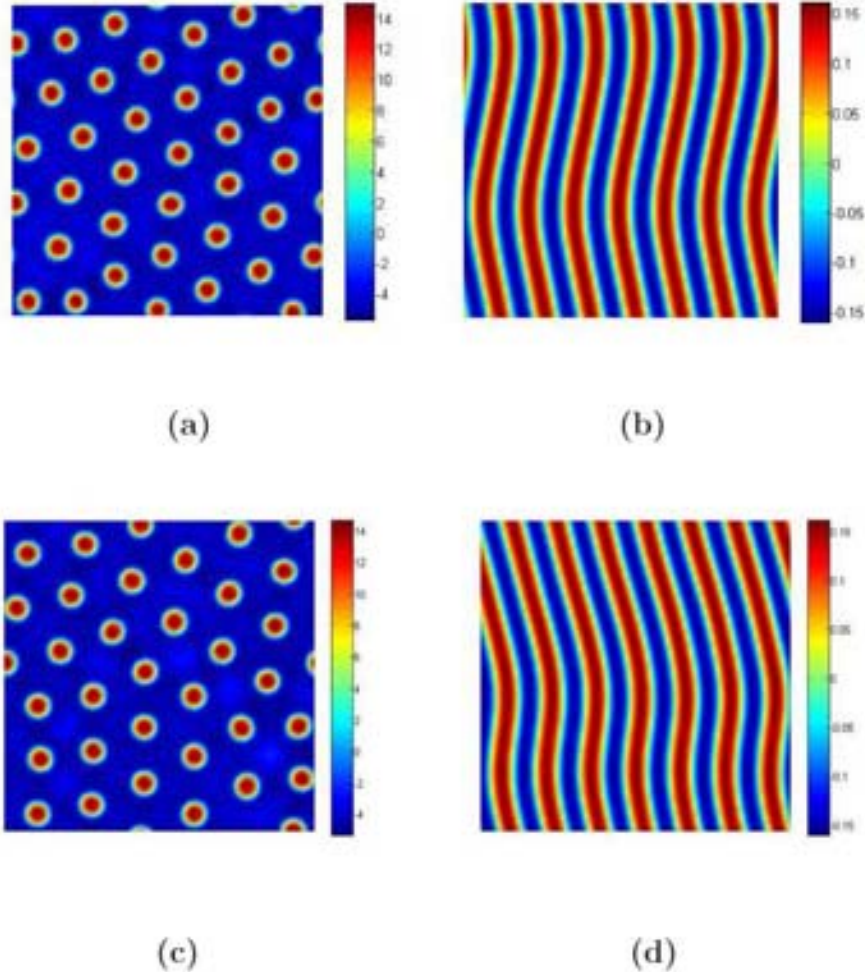


Figura 6.8: (a) $\alpha = 0.95$, $\beta = 0.92$, $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$. (b) $\alpha = 0.95$, $\beta = 0.92$, $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$. (c) $\alpha = 0.92$, $\beta = 0.88$, $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$. (d) $\alpha = 0.92$, $\beta = 0.88$, $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$.

lizado⁹, es decir un sistema de ecuaciones diferenciales fraccionarias que nos diga como evolucionan las amplitudes de los diferentes modos de Fourier (o números de onda) en el tiempo, y cuyos atractores sean independientes de

⁹Existen ya algunos resultados en lo que respecta a ecuaciones de amplitud fraccionarias para el caso de la ecuación de Ginzburg-Landau compleja [94, 95, 96].

éste. Por otro lado, si dichas ecuaciones de amplitud generalizadas existen, debe ser posible extender el teorema de la variedad central de ecuaciones diferenciales ordinarias a ecuaciones diferenciales fraccionarias, teniendo como consecuencia que muchos de los resultados ya conocidos para sistemas de reacción-difusión puedan ser generalizados para el caso de subdifusión.

Como ya vimos, la presencia de subdifusión también tiene como consecuen-

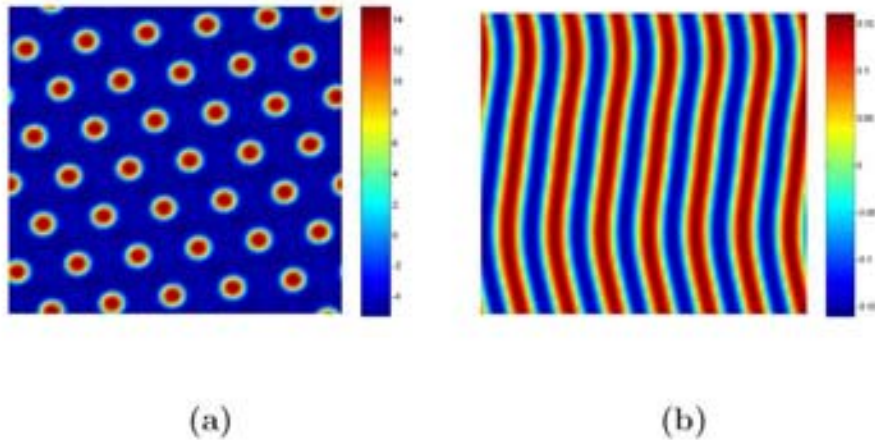


Figura 6.9: (a) $\alpha = 1$, $\beta = 1$, $r_1 = 0.02$, $r_2 = 0.2$, (b) $\alpha = 1$, $\beta = 1$, $r_1 = 3.5$, $r_2 = 0$

cia que cinéticas químicas que normalmente no exhiben una inestabilidad de Turing, exhiban una inestabilidad de Turing. Esto sucede cuando la cinética química cumple con las condiciones impuestas en la ec.(6.35).

Utilizando los siguientes parámetros: $a_{11} = 0.91$, $a_{22} = -0.7$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -a_{11}$, $\delta = 2$, $D = 0.35$, vemos que la cinética química del modelo BVAM cumple con las condiciones dadas en la ec.(6.35).

La relación de dispersión correspondiente a estos valores se puede ver en la fig.6.10(a), mientras que en la fig.6.10(b) vemos las curvas correspondientes a uno de los valores propios de la matriz Jacobiana y a la función $\alpha_c(k)$.

En dicha figura, es fácil ver que se cumplen las siguientes desigualdades: $\text{Re}(\lambda(k))|_{k=0} > 0$, $\text{Im}(\lambda(k))|_{k=0} \neq 0$ y $h(k_0) < 0$, por lo tanto, para tener una inestabilidad de Turing es necesario escoger el exponente anómalo α de tal manera que cumpla con: $\alpha < \min_k \alpha_c(k) = \alpha_c(0)$, donde $\alpha_c(0) = 0.8712$. Nótese que en este caso la longitud de onda más inestable es menor que en los casos mostrados anteriormente.

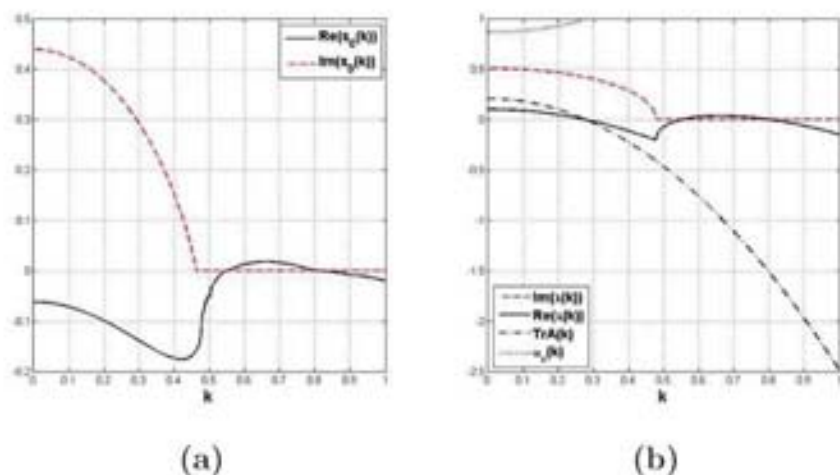


Figura 6.10: (a) Relación de dispersión correspondiente a los parámetros: $a_{11} = 0.91$, $a_{22} = -0.7$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -a_{11}$, $\delta = 2$, $D = 0.35$, $\alpha = \beta = 0.8$ (b) Valores propios de la matriz Jacobiana, α_c y TrA como funciones de k para los mismos parámetros.

En la fig.(6.11), podemos ver los retratos fase del sistema de ecuaciones dado por la ec.(6.42) para $\delta = 0$ y para distintos valores de α alrededor de $\alpha_c(0)$. De dicha figura, podemos concluir que los resultados numéricos concuerdan con las predicciones del análisis lineal mostradas en la fig.6.10(a), donde vemos que el estado homogéneo es estable ante perturbaciones uniformes ($k = 0$).

Ahora, utilizando el valor de α correspondiente a la fig.6.11(b), para así asegurar la estabilidad del estado estacionario homogéneo, resolvemos de forma numérica el modelo BVAM utilizando los parámetros correspondientes a la figura fig.(6.10) para $\delta = 2$. Las soluciones numéricas se pueden ver en la fig.(6.12), figura mediante la cual podemos concluir, que las cinéticas químicas que cumplen con las condiciones dadas en la ec.(6.35) producen patrones de Turing en presencia de subdifusión, y que de la misma manera que en los casos anteriores, podemos ver que los términos cúbicos en la cinética favorecen la formación de rayas mientras que los términos cuadráticos favorecen la formación de puntos.

La importancia de los resultados mostrados en la última parte de esta sección radica en la posibilidad de obtener patrones de Turing en regiones

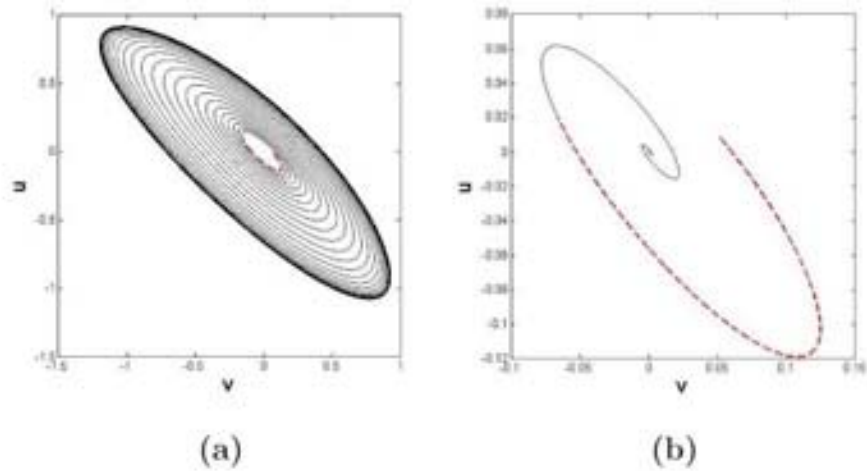


Figura 6.11: Retratos fase del estado homogéneo para distintos exponentes anómalos. La curva discontinua corresponde a las primeras 800 iteraciones. (a) $\alpha = 0.9 > \alpha_c(0)$. (b) $\alpha = 0.8 < \alpha_c(0)$.

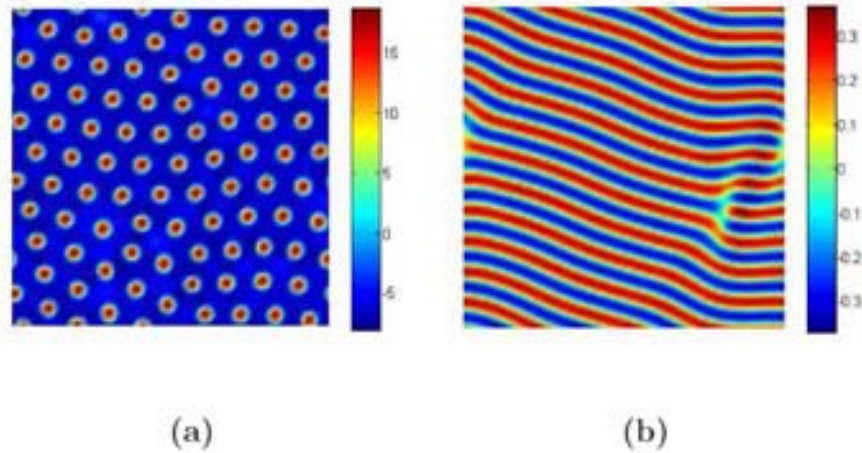


Figura 6.12: Patrones de Turing correspondientes a los parámetros: $a_{11} = 0.91$, $a_{22} = -0.7$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -a_{11}$, $\delta = 2$, $D = 0.35$ (a) $r_2 = 0.2$, $r_1 = 0.02$. (b) $r_2 = 0$, $r_1 = 3.5$.

del espacio de parámetros que hasta ahora estaban prohibidas para dichas estructuras. En particular hemos visto que es posible obtener patrones de Turing incluso si $\text{Tr}A(k) > 0$ para $k \sim 0$, y que para obtener dichos patrones no es necesaria la condición típica: $\text{signo}(a_{11}) \neq \text{signo}(a_{22})$. La relajación de estas condiciones implica que muchos sistemas físicos, químicos y biológicos que antes no cumplían las condiciones necesarias para la formación de patrones de Turing, tengan la posibilidad de formar dichos patrones cuando la difusión de los compuestos químicos o en general de los seres que se difunden e interactúan entre sí, es de tipo subdifusivo.

Finalmente, de acuerdo a los resultados obtenidos por Barrio *et al.* [54], Henry *et al.* [73], Langlands *et al.* [75] y los resultados expuestos en este capítulo, podemos concluir que el efecto que tiene la difusión anómala, ya sea superdifusión¹⁰ o subdifusión (independientemente del modelo utilizado), es en términos generales, ampliar la región del espacio de parámetros del sistema en la cual existe una inestabilidad de Turing, es decir, la presencia de difusión anómala en los sistemas de reacción-difusión favorece la existencia de dicha inestabilidad.

Por otro lado, de los resultados obtenidos en este capítulo, podemos concluir que los efectos que (ya sean cualitativos o cuantitativos) tiene la subdifusión en los patrones espaciales cuando $t \rightarrow \infty$ son nulos, (fig.(6.8) y fig.(6.9)), lo cual se debe a que las soluciones a las cuales tienden estas dinámicas, es decir las soluciones de las ec.(6.1) y ec.(6.3) cuando ambas presentan una inestabilidad de Turing, no dependen del tiempo cuando $t \rightarrow \infty$. Con esto en mente, podemos inferir que los efectos más notorios de la subdifusión en los fenómenos característicos de los sistemas de reacción-difusión, deben aparecer cuando la dependencia temporal de las soluciones del modelo nunca desaparece. Como ejemplo de esto podemos mencionar la propagación de ondas químicas en todas sus posibles manifestaciones (ondas espirales, ondas en sistemas biestables, etc.). En el capítulo siguiente, estudiamos algunos de los efectos que tiene la difusión anómala, ya sea superdifusión o subdifusión en la propagación de ondas en sistemas de reacción-difusión generalizados con cinéticas químicas biestables.

¹⁰En [54], Barrio *et al.* muestran que en presencia de superdifusión, es posible obtener patrones de Turing aún cuando la razón entre coeficientes de difusión $D = 1$.

Capítulo 7

Propagación de ondas en sistemas generalizados con cinéticas biestables.

En este capítulo se estudian los efectos que tiene la difusión anómala sobre la propagación de frentes de onda en sistemas de reacción-difusión con cinéticas biestables. Este tipo de sistemas (en el régimen de difusión normal) se utilizan para describir, entre otras cosas, la dinámica de algunas transiciones de fase cerca del equilibrio termodinámico, tales como solidificación [8, 97] y problemas de coarsening [98]. También son utilizados para estudiar propagación de ondas químicas [5] y la propagación de frentes y pulsos eléctricos en neuronas [30, 99].

La finalidad del estudio, es conocer de manera cualitativa el efecto que tiene la difusión anómala en la velocidad de propagación de frentes de onda entre un estado estable y un estado metaestable.

Dicho estudio se lleva a cabo en 1-dimensión, por lo que los resultados obtenidos dependen solamente de los parámetros de la cinética, los exponentes anómalos y el parámetro de asimetría en el caso de superdifusión.

En la primera parte del capítulo, se da una pequeña introducción a los principales resultados de la teoría básica sobre propagación de frentes en sistemas biestables en presencia de difusión normal, para luego pasar al estudio de las consecuencias que tienen la superdifusión y la subdifusión en dichos resultados.

7.1. Frentes en presencia de difusión normal.

El tipo de modelo que estudiamos en esta sección tiene la siguiente forma

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + g(\phi), \quad (7.1)$$

donde D es el coeficiente de difusión y $g(\phi)$ es una función diferenciable con las siguientes características

$$\begin{aligned} g(\phi_i) &= 0, \quad i = 0, 1, 2, \\ \frac{dg}{d\phi} \Big|_{\phi_i} &< 0, \quad i = 0, 2, \\ \frac{dg}{d\phi} \Big|_{\phi_1} &> 0. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Por lo tanto la ec.(7.1) tiene tres soluciones homogéneas, dos de ellas estables: $\phi = \phi_0$, $\phi = \phi_2$ y una inestable: $\phi = \phi_1$, ver la fig.(7.1). Ahora bien, si

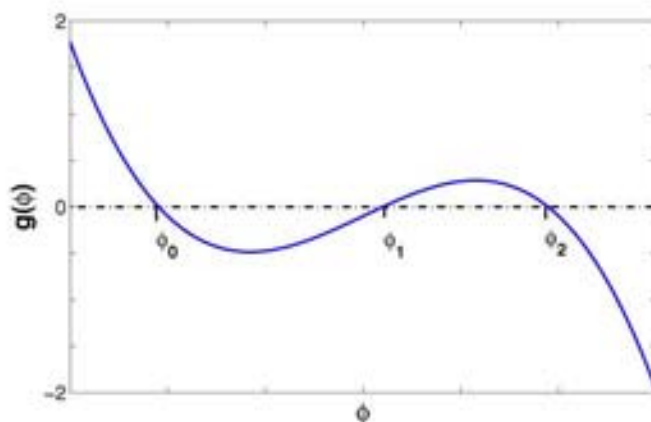


Figura 7.1: Cinética biestable.

escribimos $g(\phi)$ como

$$g(\phi) = -\frac{df}{d\phi}, \quad (7.3)$$

podemos ver que la ecuación de evolución para ϕ se puede reescribir de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{df(\phi)}{d\phi} \implies \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} &= -\frac{\delta F}{\delta \phi}, \end{aligned} \quad (7.4)$$

$$F(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{D}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + f(\phi) \right) dx,$$

donde $\frac{\delta F}{\delta \phi}$ es la derivada funcional de $F(\phi)$.

La ventaja de escribir la ec.(7.1) como una derivada funcional de cierto potencial, es que de esta manera, es fácil ver que la evolución temporal de $\phi(x, t)$ es tal que minimiza el funcional $F(\phi)$, ya que

$$\frac{dF}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta F}{\delta \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\delta F}{\delta \phi} \right)^2 dx \leq 0. \quad (7.5)$$

Por lo tanto, el funcional $F(\phi)$ puede ser interpretado como la energía libre del sistema, mientras que la función $f(\phi)$ puede ser interpretada como la densidad de energía libre, cuya forma cualitativa general se puede ver en la fig.(7.2), donde en este caso particular y solamente como ejemplo, ϕ_0 corres-

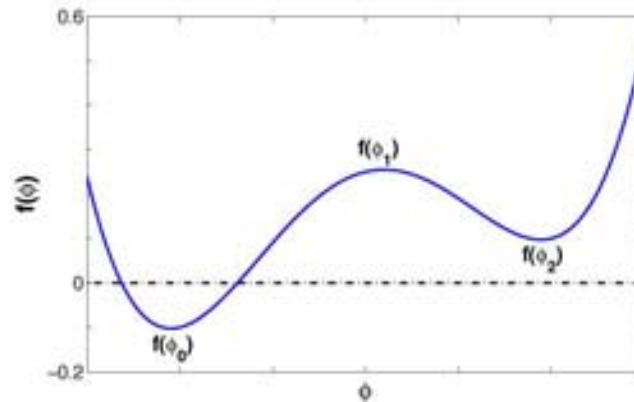


Figura 7.2: Potencial biestable.

ponde al estado estable y ϕ_2 al metaestable.

Como ya he dicho, nos interesa estudiar el movimiento de los frentes de onda que van del estado estable al estado metaestable, es decir frentes del tipo mostrado en la fig.(7.3). Ahora, cuando $t \gg 1$ dichos frentes son estables,

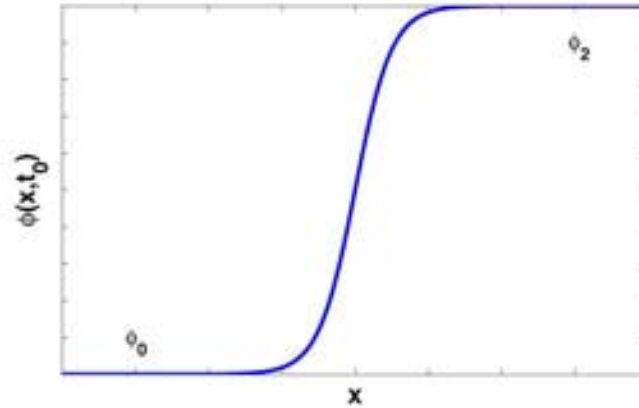


Figura 7.3: Frente entre el estado estable ϕ_0 y el metaestable ϕ_2 al tiempo $t = t_0$.

no cambian de forma y se mueven a velocidad constante [8, 100, 101], por lo tanto estamos interesados en soluciones a la ec.(7.1) que cumplan con

$$\begin{aligned} \phi(x, t) &= \phi(x - vt), \\ \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \phi(x, t) &= \phi_i, \\ i &= 0, 2, \end{aligned} \tag{7.6}$$

donde v es la velocidad de propagación del frente. El signo de dicha velocidad tiene que ser tal que el estado estable se expanda a costa del metaestable, ya que al ser el estado estable un mínimo global de la función $f(\phi)$, la energía libre del sistema correspondiente a este estado es menor que la energía libre correspondiente al estado metaestable, por lo tanto como consecuencia de la ec.(7.5), la dinámica de $\phi(x, t) = \phi(x - vt)$ tiene que minimizar $F(\phi)$. De esto último podemos concluir que el signo de la velocidad del frente debe de estar determinado por el signo de: $(f(\phi_0) - f(\phi_2))$. Para ver esto, sustituimos

$\phi(x, t) = \phi(x - vt) = \phi(\rho)$ en la ec.(7.4), obteniendo así la siguiente expresión

$$-v \frac{d\phi}{d\rho} = \frac{d^2\phi}{d\rho^2} - \frac{df(\phi)}{d\phi},$$

$$\rho = x - vt. \quad (7.7)$$

Multiplicando la ec.(7.7) por $\frac{d\phi}{d\rho}$ e integrando tenemos¹

$$-v \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi}{d\rho}\right)^2 d\rho = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\phi}{d\rho} \frac{d^2\phi}{d\rho^2} d\rho - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df(\phi)}{d\phi} \frac{d\phi}{d\rho} d\rho \implies$$

$$-v \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi}{d\rho}\right)^2 d\rho = \frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{d\rho}\right)^2 \Big|_{-\infty}^{\infty} - (f(\phi_2) - f(\phi_0)). \quad (7.8)$$

Por lo tanto la velocidad está dada por

$$v = \frac{(f(\phi_2) - f(\phi_0))}{\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi}{d\rho}\right)^2 d\rho}. \quad (7.9)$$

De la ec.(7.9) podemos ver que si los dos estados estables están en equilibrio, es decir, si se cumple la siguiente igualdad: $f(\phi_0) = f(\phi_2)$, el valor de la velocidad de propagación es $v = 0$ y por lo tanto de la ec.(7.8) podemos concluir que, cuando los estados estables están en equilibrio, la energía libre toma la siguiente forma

$$F(\phi_{eq}) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi_{eq}}{dx}\right)^2 dx, \quad (7.10)$$

donde ϕ_{eq} es solución de

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{df}{d\phi}, \quad (7.11)$$

$$\phi(-\infty) = \phi_0, \quad \phi(\infty) = \phi_2.$$

La ec.(7.10) nos dice cuanta energía está almacenada en la zona de transición entre los dos estados en equilibrio y es conocida como la tensión superficial

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi_{eq}}{dx}\right)^2 dx. \quad (7.12)$$

¹Nótese que estoy suponiendo $D = 1$.

Finalmente, de la ec.(7.9) podemos ver que cuando la velocidad del frente es pequeña, ésta puede ser aproximada como

$$v \approx \frac{(f(\phi_2) - f(\phi_0))}{\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d\phi_{eq}}{dx}\right)^2 dx} = \frac{\Delta f}{\sigma}. \quad (7.13)$$

Por lo tanto para $|v| \ll 1$ la velocidad se comporta como una función lineal de la variable independiente Δf cuya pendiente está dada por el recíproco de la tensión superficial.

Ahora bien, como ya hemos visto existen muchos sistemas físicos y biológicos donde la difusión es anómala, por lo que es importante extender el estudio de los frentes antes mencionados a estos casos.

Un modelo general para estudiar el tipo de frentes de onda mencionados en los párrafos anteriores en presencia de difusión anómala, se puede escribir como

$$\begin{aligned} \frac{{}^c\partial^\alpha \phi}{\partial t^\alpha} &= \chi_{\alpha,\gamma} (s (-\infty D_x^\gamma) + (1-s) ({}_x D_\infty^\gamma)) \phi + \omega g(\phi) \\ 0 < \alpha \leq 1, \quad 1 < \gamma \leq 2, \quad 0 \leq s \leq 1. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Donde los operadores espaciales son las derivadas fraccionarias izquierda y derecha de Riemman-Liouville de orden γ , el operador temporal es la derivada fraccionaria de Caputo de orden α , $\chi_{\alpha,\gamma}$ es el coeficiente de difusión generalizado, ω es una medida de que tan fuerte es la reacción, g es la parte reactiva o cinética química y s el parámetro de asimetría.

7.2. Frentes en presencia de superdifusión.

Tomando $\alpha = 1$ en la ec.(7.14) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \chi_\gamma (s (-\infty D_x^\gamma) + (1-s) ({}_x D_\infty^\gamma)) \phi + \omega g(\phi), \\ 1 < \gamma \leq 2, \quad 0 \leq s \leq 1, \end{aligned} \quad (7.15)$$

ecuación que como ya vimos, nos describe la evolución espacio-temporal del parámetro de orden $\phi(x, t)$ en presencia de superdifusión. Esta ecuación ya ha sido utilizada para estudiar problemas de segregación en reacciones químicas

[102]. También ha sido utilizada para estudiar los efectos que tiene la superdifusión en la propagación de frentes entre un estado estable y uno inestable [103], y para estudiar frentes en sistemas biestables en el caso de superdifusión simétrica, es decir cuando en la ec.(7.15) el parámetro de asimetría toma el valor $s = 1/2$ [104].

Una manera de estudiar el comportamiento de frentes en sistemas biestables descritos por la ec.(7.14), consiste en aproximar el término reactivo biestable por la siguiente expresión [104]

$$g(\phi) = -(\phi - \phi_0) + \phi_h H(\phi - \phi_c), \quad (7.16)$$

donde H es la función de Heaviside, ϕ_c es la concentración o densidad crítica donde la función $g(\phi)$ tiene una discontinuidad, (en el caso continuo ϕ_c correspondería al estado inestable de la cinética), ϕ_0 es una constante que puede ser negativa o positiva dependiendo de la interpretación que se le de a $\phi(x, t)$, finalmente ϕ_h es una medida de la altura del escalón.

La ec.(7.16) tiene dos raíces, $\phi = \phi_0$ y $\phi = \phi_h + \phi_0$, que en nuestro caso tomaremos como: $\phi_0 = 0$, $\phi_h > 0$.

En la fig.(7.4), podemos ver la gráfica de la cinética dada en la ec.(7.16) y la gráfica del potencial biestable correspondiente a dicha cinética.

Ahora bien, si utilizamos como término reactivo biestable la expresión muestra-

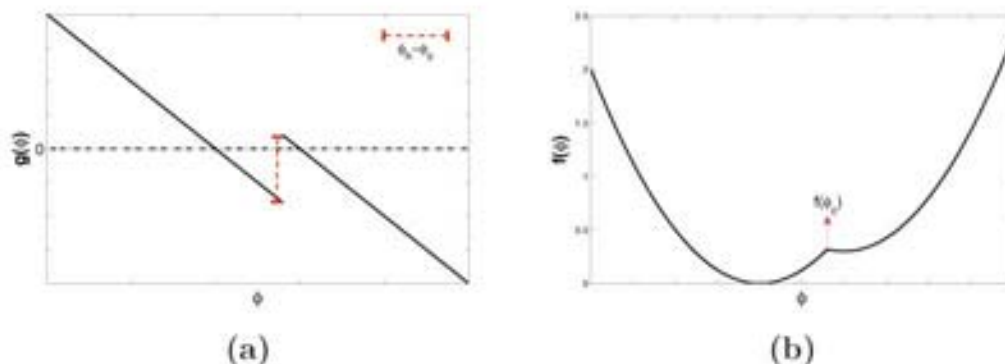


Figura 7.4: (a) Gráfica del término reactivo $g(\phi) = -\frac{df}{d\phi}$. (b) Potencial $f(\phi)$ asociado al término reactivo $g(\phi)$.

da en la ec.(7.16) en la ecuación de reacción-difusión generalizada (ec.(7.15))

y aplicamos la transformada de Fourier, tenemos

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(k, t)}{\partial t} = \chi_\gamma \left(s(ik)^\gamma + (1-s)(-ik)^\gamma \right) \tilde{\phi}(k, t) - \omega \tilde{\phi}(k, t) - \frac{\omega \phi_h}{(2\pi)^{1/2} ik} e^{ikx_c}, \quad (7.17)$$

El tipo de soluciones que buscamos tiene la siguiente forma $\phi(x, t) = \phi(x - vt)$, por lo tanto su transformada de Fourier está dada por $\tilde{\phi}(k, t) = \exp(ikvt)\phi(k)$. Sustituyendo esta última expresión en la ec.(7.17) tenemos

$$ikv\tilde{\phi}(k) = \chi_\gamma \left(s(ik)^\gamma + (1-s)(-ik)^\gamma \right) \tilde{\phi}(k) - \omega \tilde{\phi}(k) - \frac{\omega \phi_h}{(2\pi)^{1/2} ik} e^{ik\rho_c}, \quad (7.18)$$

donde $\rho = x - vt$ y ρ_c es el valor para el cual se cumple $\phi(\rho_c) = \phi_c$, valor que sin pérdida de generalidad podemos suponer como $\rho_c = 0$.

Las condiciones de frontera utilizadas para obtener la ec.(7.18) son: $\phi(-\infty, t) = 0$ y $\phi(\infty, t) = \phi_h$.

Despejando $\tilde{\phi}(k)$ de la ec.(7.18) tenemos

$$\tilde{\phi}(k) = \frac{\omega \phi_h}{2(\pi)^{1/2} ik} (\omega + ivk - \chi_\gamma [s(ik)^\gamma + (1-s)(-ik)^\gamma])^{-1}. \quad (7.19)$$

Antitransformando la ec.(7.19) tenemos

$$\phi(\rho) = \frac{\phi_h}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega \exp(-ik\rho) dk}{(-ik + \epsilon) (ivk - \chi_\gamma [s(ik)^\gamma + (1-s)(-ik)^\gamma] + \omega)}. \quad (7.20)$$

Es posible demostrar que la integral dada en la ec.(7.20) es real y es equivalente a la siguiente expresión

$$\phi(y) = \frac{\phi_h}{2} \left(1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{k^{-1} \sin(ky) [1 - k^\gamma \cos(\psi)] dk}{[1 - k^\gamma \cos(\psi)]^2 + [k^\gamma \sin(\psi)(1 - 2s) + uk]^2} \right) + \frac{\phi_h}{2} \left(\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{k^{-1} \cos(ky) [uk - k^\gamma \sin(\psi)(2s - 1)] dk}{[1 - k^\gamma \cos(\psi)]^2 + [k^\gamma \sin(\psi)(1 - 2s) + uk]^2} \right). \quad (7.21)$$

Donde y , u y ψ están dadas por

$$\begin{aligned} y &= \left(\frac{\omega}{\chi_\gamma} \right)^{1/\gamma} \rho, \\ u &= \left(\frac{\omega}{\chi_\gamma} \right)^{1/\gamma} \frac{v}{\omega}, \\ \psi &= \left(\frac{\pi\gamma}{2} \right). \end{aligned} \quad (7.22)$$

Evaluando la ec.(7.21) en la discontinuidad ($y = 0$) tenemos

$$\begin{aligned} \phi(0) = \phi_c &= \frac{\phi_h}{2} (1 + I(v, \gamma, s)), \\ I(v, \gamma, s) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{u - k^{\gamma-1} \sin(\psi)(2s - 1)dk}{[1 - k^\gamma \cos(\psi)]^2 + [k^\gamma \sin(\psi)(1 - 2s) + uk]^2}. \end{aligned} \quad (7.23)$$

La ec.(7.23) define a la velocidad como una función implícita de los parámetros: ϕ_c , ϕ_h , γ y s .

Definiendo una nueva variable como $z = 1 - 2\phi_c/\phi_h$, es fácil ver que la ec.(7.23) puede reescribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} z &= -I(v, \gamma, s), \\ I(v, \gamma, s) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{u - k^{\gamma-1} \sin(\psi)(2s - 1)dk}{[1 - k^\gamma \cos(\psi)]^2 + [k^\gamma \sin(\psi)(1 - 2s) + uk]^2}. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Los valores que puede tomar esta nueva variable van de $z = -1$ a $z = 1$ y dependiendo de su signo, los puntos fijos de la cinética biestable dada por la ec.(7.16) (tomando $\phi_0 = 0$) pueden cambiar su tipo de estabilidad, es decir pueden pasar de metaestables a estables o viceversa, ver la fig.(7.5).

Si $\gamma = 2$ en la ec.(7.24), es posible recuperar la solución conocida para la velocidad como función de z cuando la difusión es normal [104], dicha solución está dada por la siguiente expresión

$$u = \frac{-2z}{\sqrt{1 - z^2}}. \quad (7.25)$$

Para el caso en que $1 < \gamma < 2$ podemos resolver la ec.(7.24) de forma numérica y así encontrar la velocidad como función del parámetro z para γ y s fijos. En la Fig(7.6) se muestran los resultados numéricos para la velocidad como

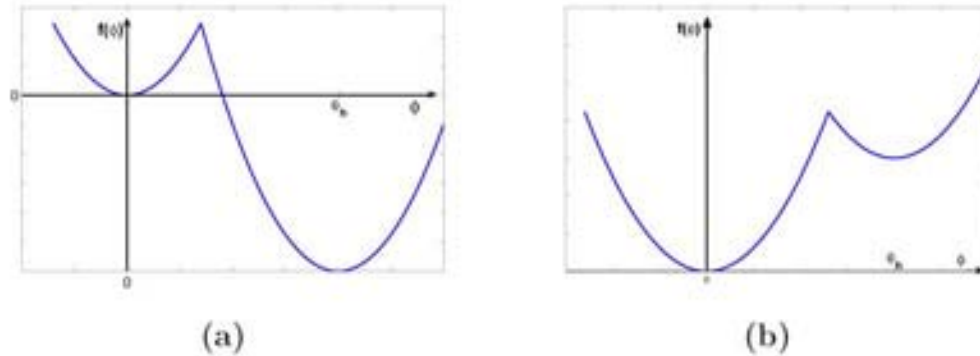


Figura 7.5: (a) Potencial correspondiente a $z = 0.3$. (b) Potencial correspondiente a $z = -0.3$.

función de z . Es importante notar que en el caso simétrico, fig.7.6(a), la velocidad es siempre negativa para $z > 0$ y positiva para $z < 0$. Esto significa que el estado estable se está expandiendo a costa del estado metaestable, respetando así los resultados correspondientes a difusión normal. Este resultado no es de extrañarse, ya que cuando la superdifusión es simétrica, la ec.(7.15) puede escribirse como

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\delta F(\phi)}{\delta \phi}, \quad (7.26)$$

donde la energía libre está dada por

$$F(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi) dx - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} V(x-y) \phi(x) \phi(y) dx dy, \quad (7.27)$$

$$V(x-y) = \frac{1}{\Gamma(2-\gamma)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \frac{1}{|x-y|^{\gamma-1}}.$$

Y por lo tanto $dF/dt < 0$, lo que implica que el estado final del sistema tiene que ser el estado estable. Es interesante observar que las ec.(7.26) y ec.(7.27) implican que es posible obtener ecuaciones de reacción-difusión generalizadas del tipo mostrado en la ec.(7.15) en su forma simétrica, al modelar sistemas cuyas interacciones son de largo alcance y de la forma: $V(x-y) \propto |x-y|^{-(1+\gamma)}$, $1 < \gamma < 2$ sin utilizar vuelos de Lévy [94].

La fig.7.6(b) muestra que en el caso de superdifusión asimétrica, la velocidad

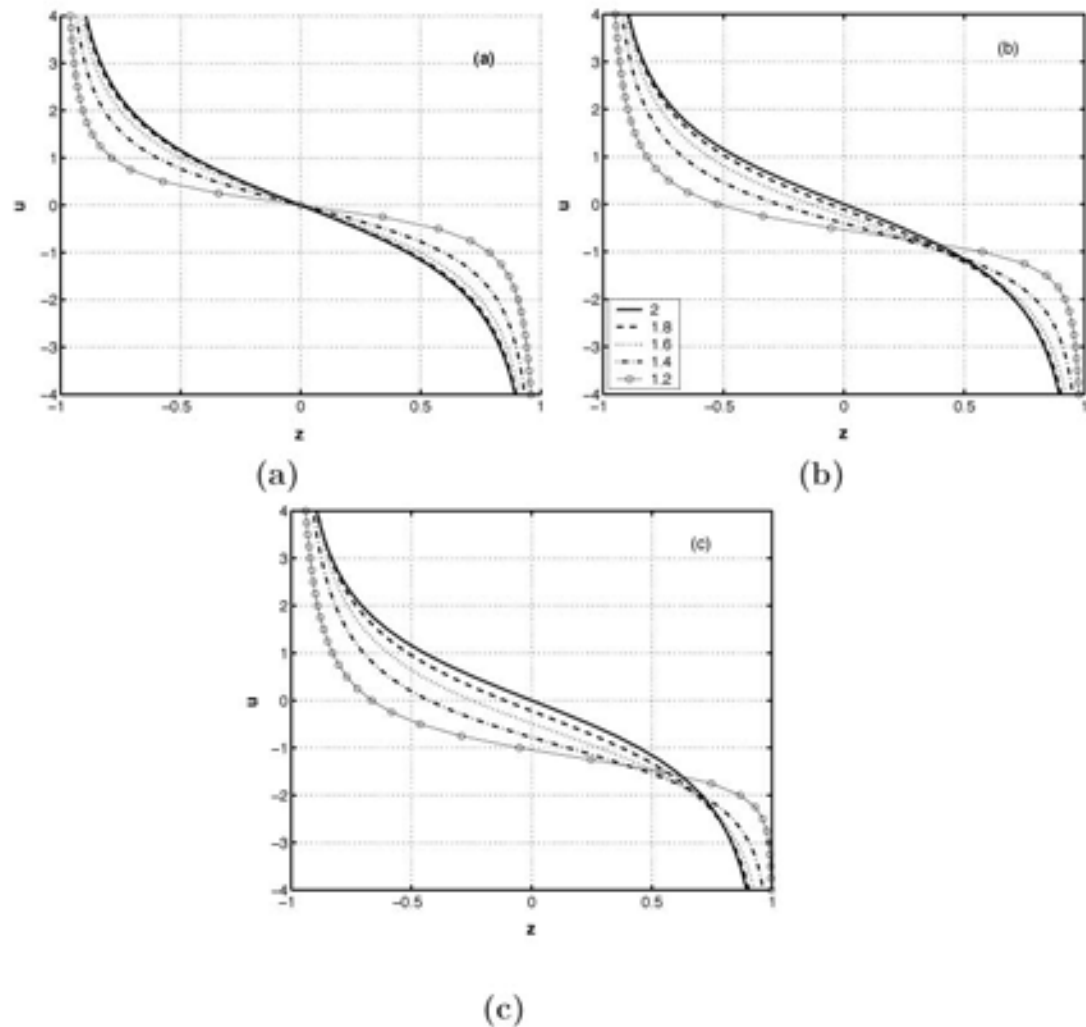


Figura 7.6: Velocidad adimensional u como función del parámetro z . (a) Difusión simétrica $s = 1/2$. (b) Difusión asimétrica $s = 0.25$. (c) Difusión completamente asimétrica $s = 0$.

puede ser negativa cuando $z < 0$, lo que significa que el estado metaestable se expande a costa del estable. Nótese que la región donde esto sucede ($u < 0$, $z < 0$) crece conforme el exponente anómalo γ decrece (*i.e.* conforme la difusión es más anómala). En la fig.7.6(c), mostramos el caso extremo de superdifusión completamente asimétrica. En este caso el comportamiento de

la velocidad u es el mismo que antes, con la única diferencia que la región donde $u < 0$ es mayor que en la fig.7.6(b). En todos los casos de la fig.(7.6), para valores pequeños de la velocidad² ($u \ll 1$) ésta se comporta como una función lineal de z .

Por otro lado, en la fig.(7.7) mostramos que para cualquier valor de z existe un valor del exponente anómalo γ para el cual la velocidad de propagación del frente es cero, con excepción por supuesto del caso simétrico, donde el único valor de z que cumple con $u = 0$ es $z = 0$. Nótese que en la

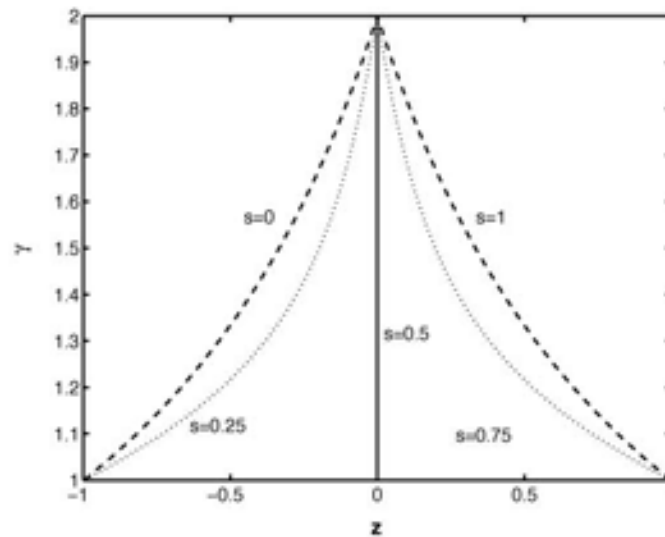


Figura 7.7: Valores del exponente anómalo γ como función de z , correspondientes a velocidad de propagación $u = 0$ para distintos valores del parámetro de asimetría s .

fig.(7.7) todas las curvas convergen al mismo punto ($z = 0$) cuando $\gamma = 2$, recuperando así los resultados conocidos para difusión normal.

La forma de los frentes se puede obtener mediante la ec.(7.21), ecuación que escrita en términos de la variable z toma la siguiente forma: $z(y) = -I(y, \gamma, s, u)$. En la fig.7.8(a) vemos que la forma de los frentes depende fuertemente del parámetro de asimetría y que el ancho de éstos, aumenta conforme aumenta s . Esto puede ser verificado en la fig.7.8(b) donde vemos la primera derivada correspondiente a cada frente, ya que el ancho del frente Δ

²Véase la ec.(7.13).

puede ser caracterizado de manera cualitativa por: $\Delta \propto (d\phi/dy)^{-1} |_{y=0}$. Los parámetros utilizados para el cálculo de los frentes y sus derivadas son: $u = 0$, $z(0) = 0.7$, $(s, \gamma) = (1, 1.176)$, $(s, \gamma) = (0.8, 1.128)$, $(s, \gamma) = (0.6, 1.053)$. Ahora bien, para ver que los resultados obtenidos hasta ahora son indepen-

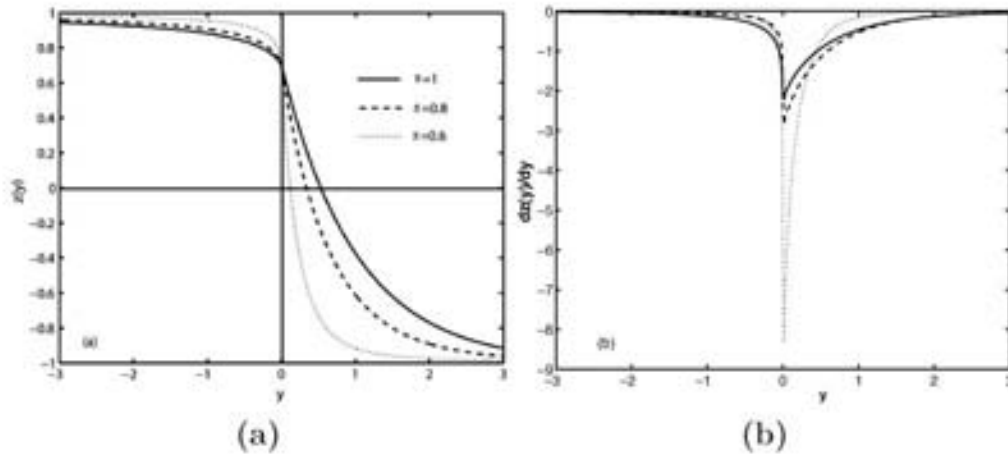


Figura 7.8: **(a)** Frentes como función de y para diferentes valores del parámetro de asimetría. Todos los frentes son estables con $u = 0$ y con el exponente anómalo escogido para que se cumpla $z(0) = 0.7$. **(b)** Primera derivada dz/dy de los frentes $z(y)$.

dientes de la cinética biestable utilizada, resolvemos de forma numérica la ec.(7.15) para $s = 0$, utilizando como término reactivo la siguiente expresión

$$g(\phi) = -(\phi^2 - 1)\phi - \mu. \quad (7.28)$$

Es decir, resolvemos de forma numérica la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \chi_\gamma ({}_x D_\infty^\gamma \phi) - \frac{\partial F}{\partial \phi}, \quad (7.29)$$

$$1 < \gamma \leq 2,$$

donde $F(\phi)$ es de la forma

$$F(\phi) = \frac{1}{4} (\phi^2 - 1) + \mu\phi. \quad (7.30)$$

En este caso, el parámetro μ juega el mismo papel que el parámetro z definido anteriormente. Si $\mu \neq 0$ entonces la ec.(7.29) tiene dos soluciones estacionarias homogéneas estables, una de ellas metaestable y la otra estable.

En la fig.(7.9) mostramos los resultados numéricos de la velocidad del frente calculada como función de μ para diferentes valores del exponente anómalo. Todos los cálculos fueron hechos mediante el método de Euler en una malla con 2000 puntos y con un intervalo de tiempo $\Delta t = 0.005$. Para la discretización de la derivada fraccionaria se utilizó la discretización de Grünwald-Letnikov [54, 61]. Los valores a la frontera de $\phi(x, t)$ se tomaron como fijos en los dos estados de equilibrio, $\phi_+ > 0$ y $\phi_- < 0$ (condiciones de frontera de Dirichlet). Como condición inicial se utilizó una función escalón centrada de la siguiente forma: $\phi_+ + (\phi_+ - \phi_-)H(x - 1000)$, donde $H(x)$ es la función de Heaviside. El valor del coeficiente de difusión generalizado utilizado fue $\chi_\gamma = 30$. En la fig.(7.9) podemos ver que el comportamiento de la

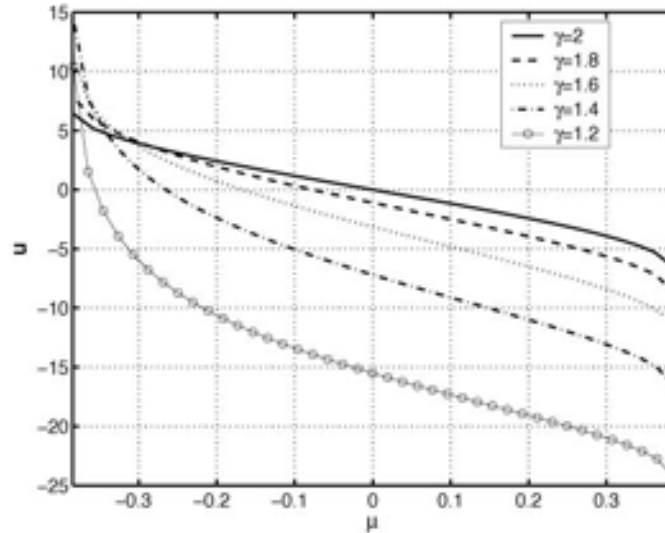


Figura 7.9: Velocidad como función de μ para diferentes valores del exponente anómalo. En estos cálculos el parámetro de asimetría es $s = 0$.

velocidad como función de μ es similar al comportamiento de la velocidad como función de z mostrado en la fig.(7.6). Podemos ver por ejemplo, que para $\mu = 0$ tenemos propagación de frentes con velocidades distintas de cero. Esto significa que cuando los dos estados estables están en equilibrio, uno de ellos

siempre crece a costa del otro cuando la difusión es completamente asimétrica, hecho que como vimos en la primera parte de este capítulo es imposible cuando la difusión es normal. Es importante hacer énfasis en que el proceso físico responsable de este fenómeno es la asimetría en la superdifusión. Notar que en la fig.(7.9) se incluyó el cálculo correspondiente a difusión normal.

En la fig.(7.10) se muestra el valor de la velocidad como función del exponente anómalo para tres valores diferentes de μ . Estos valores son: $\mu = 0$, $\mu = \pm 0.384 \approx \mu_c$, donde $\pm \mu_c$ son los valores para los cuales el estado metaestable desaparece. En esta figura también podemos ver como la asimetría de la

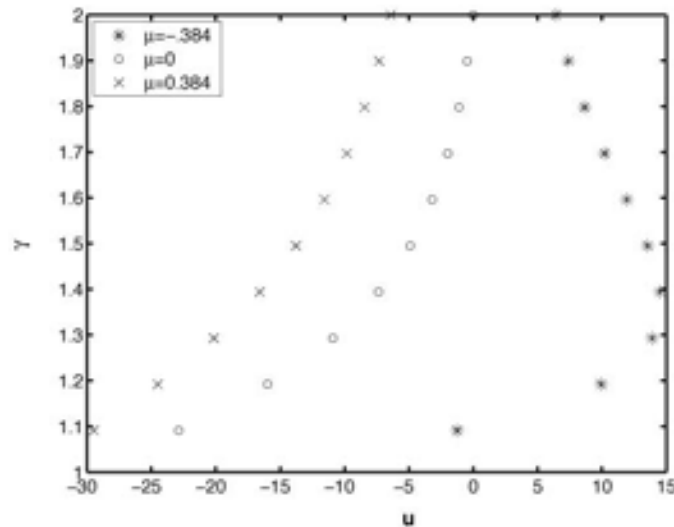


Figura 7.10: Velocidad como función de γ para diferentes valores de μ .

superdifusión afecta la velocidad entre más anómala es la difusión. Una consecuencia de esto, es que para $\mu = 0.384$ la velocidad del frente alcanza un máximo y luego decrece hasta que cambia de signo conforme el exponente anómalo decrece, lo que significa que para ciertos valores de μ es posible cambiar la dirección de propagación del frente mediante la manipulación del exponente anómalo, además, podemos ver que para el valor de μ utilizado existe un valor de γ para el cual la velocidad del frente es cero. De nuevo, esto significa que para algunos valores del parámetro μ existe un valor del exponente anómalo (uno para cada valor de μ) para el cual, el estado metaestable se expande a costa del estable, el mismo resultado obtenido con el término

reactivo dado en la ec.(7.16).

Finalmente, en la fig.(7.11) vemos los frentes correspondientes a $\mu = 0$ para distintos valores de γ después de 2000 iteraciones. Para dicho valor del

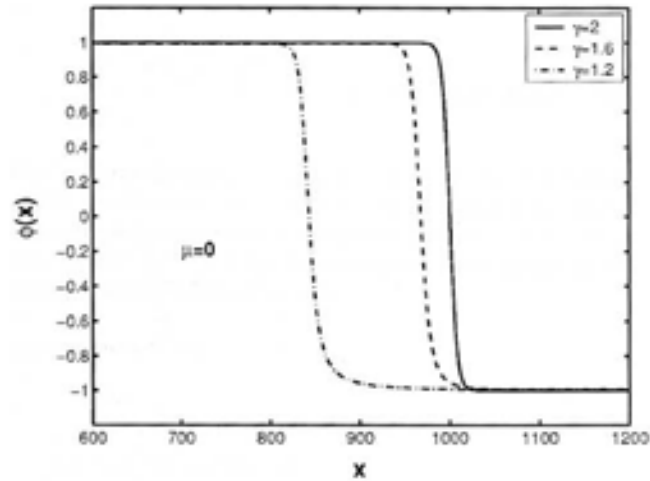


Figura 7.11: Frentes correspondientes a $\mu = 0$ para distintos valores del exponente anómalo γ .

parámetro μ los dos mínimos del $f(\phi)$ están al mismo nivel, por lo tanto en ausencia de difusión anómala los dos estados están en equilibrio y el frente no se mueve. Ahora, en presencia de superdifusión asimétrica los frentes adquieren una velocidad. Dicha velocidad fue medida siguiendo la posición correspondiente a $\phi = 0$. Después de 400 iteraciones el frente adquiere una forma fija y se mueve a velocidad constante. También hemos tomado como condición inicial perturbaciones al azar con respecto a uno de los estados estables en la parte central de la malla, y vimos que después de cierto número de iteraciones obtenemos frentes del tipo antes mencionado moviéndose a velocidad constante [105].

7.3. Frentes en presencia de subdifusión.

Para estudiar la propagación de frentes en presencia de subdifusión con el modelo utilizado en la sección anterior, necesitamos: $\gamma = 2$ y $\alpha \in (0, 1)$.

Tomando estos valores para los exponentes anómalos de la ec.(7.14) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{{}^c\partial^\alpha \phi}{\partial t^\alpha} &= D_\alpha \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \omega(-\phi + \phi_h H(\phi - \phi_c)), \\ 0 < \alpha &\leq 1. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Donde la forma explícita de la derivada fraccionaria en el tiempo está dada por

$$\frac{{}^c\partial^\alpha \phi}{\partial t^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial \tau} d\tau. \quad (7.32)$$

Adimensionalizando la ec.(7.31) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{{}^c\partial^\alpha \phi}{\partial t^\alpha} &= \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \phi + H(\phi - \phi_c), \\ 0 < \alpha &\leq 1, \end{aligned} \quad (7.33)$$

donde se utilizaron los siguientes cambios de variable³

$$\begin{aligned} \phi &= \phi' \phi_h, & t' &= \omega^{1/\alpha} t, \\ x &= x' \left(\frac{\omega}{D_\alpha} \right)^{1/2}, & \tau' &= \omega^{1/\alpha} \tau. \end{aligned} \quad (7.34)$$

Los puntos fijos de la cinética adimensionalizada son $\phi = 0$ y $\phi = 1$.

Ahora bien, si sacamos la transformada de Laplace a la ec.(7.33) tenemos

$$L(t^{-\alpha})L\left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right) = \frac{\partial^2 L(\phi)}{\partial x^2} - L(\phi) + L(H(\phi - \phi_c)). \quad (7.35)$$

Donde se utilizó el hecho que la derivada fraccionaria de Caputo es una convolución entre las funciones $T(t) = t^{-\alpha}$ y $\partial_t \phi(x, t)$.

Por otro lado, si antes de calcular explícitamente la transformada de Laplace, pedimos que la dependencia espacio-temporal de la densidad sea de la forma

$$\begin{aligned} \phi &= \phi(\rho), \\ \rho &= x + vt, \end{aligned} \quad (7.36)$$

³En la ec.(7.33) quitamos las primas de las nuevas variables.

y que $\phi(x, t)$ cumpla con $\phi(\infty, t) = 1$, $\phi(-\infty, t) = 0$, entonces en el espacio de Laplace la ec.(7.33) toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} & \int_x^\infty \exp(-s\rho/v) \phi(\rho) d\rho \left(\frac{s^\alpha}{v} - \frac{s^2}{v^3} + \frac{1}{v} \right) \exp(sx/v) \\ &= \phi(x) (s^{\alpha-1} - s/v^2) - \frac{1}{v} \frac{d\phi}{dx} + L(H(\phi - \phi_c)), \end{aligned} \quad (7.37)$$

donde

$$\begin{aligned} L(H(\phi - \phi_c)) &= \frac{\exp(sx/v) \exp(-s\rho_c/v)}{s} \quad x \leq \rho_c, \\ L(H(\phi - \phi_c)) &= \frac{\exp(sx/v)}{s} \quad x > \rho_c. \end{aligned} \quad (7.38)$$

En la ec.(7.38), ρ_c es el valor para el cual $\phi(\rho_c) = \phi_c$.

Por otro lado, si fijamos el valor de x como $x = 0$ en la ec.(7.37) y suponemos:

- 1) En $t = 0$ el frente se encuentra muy lejos del punto $x = 0$.
 - 2) El frente se mueve hacia la izquierda ($v > 0$),
- podemos poner las siguientes condiciones iniciales

$$\begin{aligned} \phi(0) &= 0, \\ \frac{d\phi}{dx}(0) &= 0. \end{aligned} \quad (7.39)$$

Por lo tanto, sustituyendo la ec.(7.39) en la ec.(7.37) obtenemos

$$\int_0^\infty \exp(-s\rho/v) \phi(\rho) d\rho \left(\frac{s^\alpha}{v} - \frac{s^2}{v^3} + \frac{1}{v} \right) = \frac{\exp(-s\rho_c/v)}{s}. \quad (7.40)$$

Reescribiendo la ec.(7.40) en términos del tiempo t vemos que la transformada de Laplace de $\phi(x, t) |_{x=0}$ cumple con

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \exp(-st) \phi(vt) dt \left(s^\alpha - \frac{s^2}{v^2} + 1 \right) = \frac{\exp(-st_c)}{s} \Rightarrow \\ & \hat{\phi}(s) \left(s^\alpha - \frac{s^2}{v^2} + 1 \right) = \frac{\exp(-st_c)}{s}, \end{aligned} \quad (7.41)$$

donde $\hat{\phi}(s) = L(\phi)$.

Despejando $\hat{\phi}(s)$ de la ec.(7.41) tenemos

$$\hat{\phi}(s) = \frac{v^2 \exp(-st_c)}{v^2 s^{\alpha+1} - s^3 + sv^2}. \quad (7.42)$$

El denominador de la ec.(7.42) tiene un polo en $s = 0$, un corte rama en los reales negativos y un polo en los reales positivos (polo cuya existencia fue corroborada numéricamente).

Aplicando la transformada inversa de Laplace a ambos lados de la ec.(7.42) vemos que la densidad $\phi(x, t) |_{x=0}$ cumple con

$$\phi(vt) = \frac{v^2}{2\pi} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\exp(st) \exp(-st_c) ds}{v^2 s^{\alpha+1} - s^3 + v^2 s}. \quad (7.43)$$

Donde c es un número cuya parte real está entre el polo en los reales positivos y $s = 0$. Esto se debe a que no hay que tomar en cuenta el polo positivo para calcular la transformada inversa, ya que

$$\begin{aligned} \left| \int_0^\infty \exp(-st) \phi(vt) dt \right| &\leq \int_0^\infty |\exp(-st) \phi(vt)| dt \\ &= \int_0^\infty |\exp(-st)| |\phi(vt)| dt, \text{ y como } |\phi(x)| \leq 1 \forall x \\ \left| \int_0^\infty \exp(-st) \phi(vt) dt \right| &\leq \int_0^\infty \exp(-st) dt = \frac{1}{s}, \end{aligned} \quad (7.44)$$

por lo tanto $\hat{\phi}(s) < \infty \forall s > 0$, lo que implica que el polo en los reales positivos no pertenece a la transformada de Laplace de $\phi(x, t)$.

La ec.(7.43) puede ser expresada de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \phi(vt) &= H(t - t_c) L^{-1}(\zeta(s)) |_{(t-t_c)}, \\ \zeta(s) &= \frac{v^2}{v^2 s^{\alpha+1} - s^3 + sv^2}. \end{aligned} \quad (7.45)$$

Donde $H(t)$ es la función de Heaviside⁴.

Si tomamos una trayectoria en el plano complejo que rodee el corte rama y el polo en $s = 0$ es posible demostrar que $L^{-1}(\zeta(s))$ se puede escribir como

$$L^{-1}(\zeta(s)) = 1 - \frac{v^4}{\pi} \sin(\pi\alpha) \int_0^\infty \frac{\xi^{\alpha-1} \exp(-\xi t) d\xi}{(v^2 \xi^\alpha \cos(\pi\alpha) + v^2 - \xi^2)^2 + (v^2 \xi^\alpha \sin(\pi\alpha))^2}, \quad (7.46)$$

⁴ $\exp(-st_c)\zeta(s) = \int_0^\infty H(t - t_c)\zeta(t - t_c)e^{-st} dt.$

por lo tanto, la densidad $\phi(0, t)$ como función del tiempo en el punto $x = 0$ está dada por la siguiente expresión

$$\begin{aligned}\phi(vt) &= H(t - t_c) (1 - I(\alpha, v, t - t_c)), \\ I(\alpha, v, t - t_c) &= \frac{v^4}{\pi} \sin(\pi\alpha) \int_0^\infty \frac{\xi^{\alpha-1} \exp(-\xi(t - t_c)) d\xi}{(v^2 \xi^\alpha \cos(\pi\alpha) + v^2 - x^2)^2 + (v^2 \xi^\alpha \sin(\pi\alpha))^2}.\end{aligned}\tag{7.47}$$

Valuando la ec.(7.47) en $t = t_c$ tenemos

$$\phi_c = 1 - I(\alpha, v, 0).\tag{7.48}$$

Si definimos una nueva variable z como $z = 1 - 2\phi_c$, podemos escribir la ec.(7.48) de la siguiente forma

$$\begin{aligned}z &= -1 + 2I(\alpha, v, 0), \\ I(\alpha, v, 0) &= \frac{v^4}{\pi} \sin(\pi\alpha) \int_0^\infty \frac{\xi^{\alpha-1} d\xi}{(v^2 \xi^\alpha \cos(\pi\alpha) + v^2 - x^2)^2 + (v^2 \xi^\alpha \sin(\pi\alpha))^2}.\end{aligned}\tag{7.49}$$

La ec.(7.49) define la velocidad como una función implícita de z para valores de α fijos. Por otro lado, el signo del parámetro z nos dice (de la misma manera que en la sección anterior) cual de los dos estados estables es metaestable.

En la fig.(7.12) vemos la velocidad como función de z para distintos valores de α . Los datos mostrados en la fig.(7.12) fueron calculados mediante la ec.(7.49).

En la fig.(7.12) podemos ver dos resultados importantes. El primero es que en presencia de subdifusión los frentes siempre se mueven en la dirección en la cual el estado estable se expande a costa del metaestable, es decir si $z < 0 \implies v > 0$ y viceversa. El segundo resultado radica en la existencia de un valor crítico $z_c(\alpha)$ para el cual los frentes cuyo valor de z sea menor a z_c se mueven más lento que que los frentes correspondientes a difusión normal, mientras que los frentes cuyo valor de z cumple con $z > z_c$ se mueven más rápido que los frentes en presencia de difusión normal. Es interesante notar que V.Méndez *et al.* [106] obtienen un resultado muy parecido en el caso de propagación de frentes entre un estado estable y uno inestable en sistemas de reacción-difusión con memoria. El resultado mencionado lo obtienen cuando el término que modela la memoria del sistema está dado por una función del

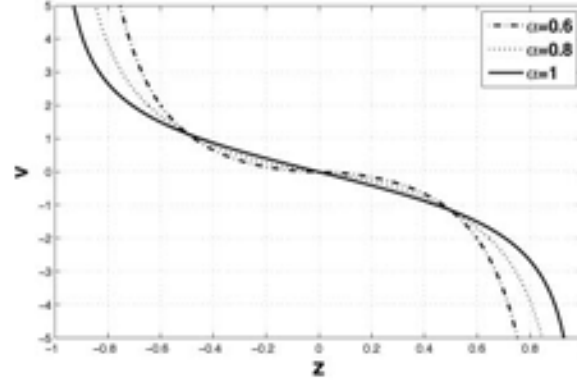


Figura 7.12: Velocidad adimensional como función de z para distintos exponentes anómalos.

tipo $\varphi(t - \tau) \propto |t - \tau|^{-(1+\alpha)}$, $0 < \alpha < 1$.

Finalmente, notar que si $\alpha = 1$, $\hat{\phi}(s)$ toma la siguiente forma

$$\hat{\phi}(vt) = \frac{v^2}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{\exp(st) \exp(-st_c) ds}{v^2 s^2 - s^3 + v^2 s}, \quad (7.50)$$

por lo tanto

$$\phi(vt) = H(t - t_c) \sum \text{Res} \left(f(s) e^{s(t-t_c)} \right), \quad (7.51)$$

donde $f(s)$ está dada por

$$f(s) = \frac{-v^2}{(s^2 - v^2 s - v^2)s} = \frac{-v^2}{(s - s_+)(s - s_-)s}, \quad (7.52)$$

$$s_{\pm} = \frac{v^2 \pm (v^4 + 4v^2)^{1/2}}{2}.$$

Calculando la transformada inversa tenemos⁵

$$\phi(vt) = H(t - t_c) \left(\frac{-v^2}{s_+ s_-} + \frac{-v^2}{(s_- - s_+) s_-} \right), \quad (7.53)$$

⁵Recuérdese que para calcular la antitransformada no hay que tomar en cuenta el polo positivo.

Valuando la ec.(7.53) en $t = t_c$

$$\phi_c = \frac{-v^2}{s_+ s_-} + \frac{-v^2}{(s_- - s_+) s_-}. \quad (7.54)$$

Si reescribimos la ec.(7.54) en términos de z ($z = 1 - 2\phi_c$) y despejamos la velocidad, obtenemos la siguiente expresión

$$v = \frac{-2z}{\sqrt{1 - z^2}}, \quad (7.55)$$

recuperando así el resultado correspondiente a difusión normal.

Capítulo 8

Propagación de ondas en el Modelo BVAM en el régimen biestable.

Como ya hemos visto, la propagación de frentes de onda en sistemas de reacción-difusión con cinéticas biestables es un fenómeno común. Hasta ahora, hemos tratado dichos frentes en una dimensión y con un sólo compuesto químico en presencia de difusión anómala, y vimos que, con la excepción del caso de superdifusión asimétrica, la propagación de frentes en sistemas biestables para un solo reactivo siempre se puede escribir en términos de una energía libre, la cual es minimizada en el transcurso del tiempo. Cuando tenemos propagación de frentes debidos a la interacción entre dos o más compuestos químicos en sistemas biestables, no siempre es posible expresar la dinámica de éstos en términos de una energía libre, y por lo tanto no existe ninguna cantidad que se minimize durante la evolución dinámica del sistema. Como ejemplo de esto, podemos mencionar la propagación de frentes de onda en el modelo BVAM en el régimen biestable, fenómeno que estudiaremos en este capítulo. Dicho estudio se llevará a cabo en una y dos dimensiones en presencia de difusión normal. En la primera parte del capítulo se hace el análisis lineal del sistema alrededor de los puntos fijos. Utilizando los resultados de dicho análisis, nos enfocamos en una región del espacio de parámetros para la cual los dos puntos fijos son igualmente estables, y estudiamos de forma analítica y numérica las soluciones del sistema correspondientes a frentes de onda entre los dos estados estables. En la última parte del capítulo se mencionan algunas de las posibles aplicaciones de los resultados obtenidos.

El modelo BVAM ha sido utilizado en el pasado para modelar patrones de pigmentación en la piel de algunos peces [107] y la aparición de ciertas simetrías en el desarrollo de erizos de mar [108]. La forma del modelo utilizada en los trabajos mencionados está dada por

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\delta\nabla^2 u + \alpha u(1 - r_1 v^2) + v(1 - r_2 u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \delta\nabla^2 v + \beta v(1 + (\alpha r_1/\beta)uv) + u(\gamma + r_2 v).\end{aligned}\tag{8.1}$$

Donde los parámetros del sistema son: δ , D , α , β , r_1 , r_2 y γ . Como ya se ha dicho, δ corresponde a un factor de escala, mientras que D es la razón entre los coeficientes de difusión de los reactivos. Los parámetros restantes definen las características particulares de la cinética bajo la cual evolucionan las concentraciones u y v . En los trabajos mencionados en el párrafo anterior, el modelo se estudió bajo la suposición de $\gamma = -\alpha$, lo cual implica la existencia de un solo punto fijo en la cinética de la ec.(8.1). Para estudiar este modelo en el régimen biestable es conveniente reescribir la ec.(8.1) de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} &= D\nabla^2 u + \eta(u + av - Cuv - uv^2), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \nabla^2 v + \eta(bv + hu + Cuv + uv^2),\end{aligned}\tag{8.2}$$

donde $a = 1/\alpha$, $b = \beta/\alpha$, $h = \gamma/\alpha$, $C = r_2/(\alpha\sqrt{r_1})$ y $\eta = L^2\alpha/\delta$, con $h \neq 1$, es decir $\gamma \neq -\alpha$. En la ec.(8.2) hemos redefinido las variables, sustituyendo x por Lx , donde L tiene unidades de longitud y es una medida del tamaño característico del dominio donde evolucionan las concentraciones u y v . Por otro lado el tiempo y las concentraciones fueron sustituidos por: $t \rightarrow L^2 t/\delta$, $u \rightarrow u/\sqrt{r_1}$ y $v \rightarrow v/\sqrt{r_1}$, pero las seguiremos denotando de la misma forma con el fin de no introducir más notación.

La cinética de la ec.(8.2) tiene como único punto fijo¹ el estado $(u, v) = (0, 0)$ para $h = -1$, por otro lado cuando $h \neq -1$ existen dos puntos fijos además del $(0, 0)$ localizados en:

$$\begin{aligned}v_0 &= \frac{-C \pm \sqrt{C^2 - 4(h - b/g)}}{2}, \\ u_0 &= -gv_0.\end{aligned}\tag{8.3}$$

¹El análisis de este modelo (incluyendo la deducción de sus ecuaciones de amplitud) para el caso $h = -1$ se puede encontrar en [109].

Donde $g = (a+b)/(1+h)$. En ausencia del término cuadrático $C = 0$, los dos puntos fijos se encuentran localizados de forma simétrica respecto del punto $(u, v) = (0, 0)$ y están dados por $v_0 = \pm\sqrt{b/g - h} = \pm\sqrt{f}$, y $u_0 = -gv_0$. Esta situación implica la posibilidad de tener dos fases igualmente estables (los valores propios de la matriz de estabilidad valuada en los dos puntos fijos son iguales) compitiendo entre sí, cuya evolución temporal no puede ser deducida de un potencial o energía libre. En lo que sigue nos enfocaremos solamente al estudio de la evolución espacio temporal de dichas fases igualmente estables.

Linealizando la ec.(8.2) alrededor de los puntos fijos tenemos

$$\begin{aligned}\omega^2 - \omega X + Y &= 0, \\ X &= \eta(1 - f + g(h - f)) = \text{Tr}(j), \\ Y &= \eta^2 g((h - f)(1 - f) - (h + f)(1 + f)) = \det(j),\end{aligned}\tag{8.4}$$

donde j es la matriz Jacobiana de la cinética linealizada.

Si uno fija el valor de h , es posible examinar el comportamiento de los valores propios $\omega_{1,2} = \sigma_{1,2} + i\tau_{1,2}$ como función de los parámetros f, g . Haciendo esto para $h = -2.5$ el plano (f, g) queda dividido en cinco regiones diferentes, ver la fig.(8.1). Dichas regiones caracterizan el tipo de puntos fijos

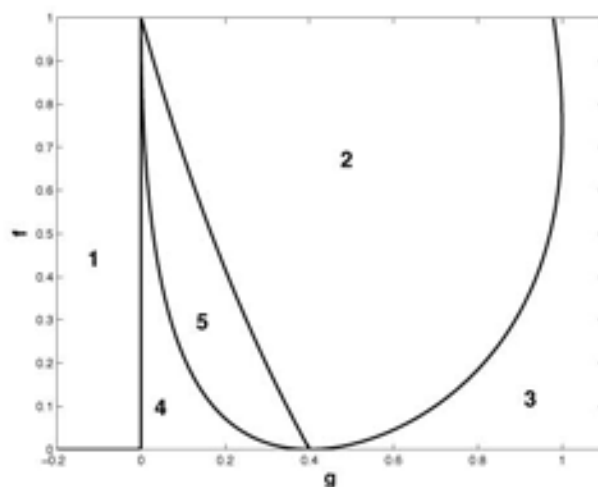


Figura 8.1: Diagrama de fases. En este diagrama podemos ver el comportamiento del modelo alrededor de los puntos fijos en ausencia de difusión, para $C = 0$ y $h = -2.5$.

que puede tener el sistema mostrado en la ec.(8.2) en ausencia de difusión:

Región **1**, $\sigma_1 < 0$, $\sigma_2 > 0$, $\tau_{1,2} = 0$ (puntos silla).

Región **2**, $\sigma_{1,2} < 0$, $\tau_{1,2} \neq 0$ (puntos fijos oscilantes estables).

Región **3**, $\sigma_{1,2} < 0$, $\tau_{1,2} = 0$ (puntos fijos estables).

Región **4**, $\sigma_{1,2} > 0$, $\tau_{1,2} = 0$ (puntos fijos inestables).

Región **5**, $\sigma_{1,2} > 0$, $\tau_{1,2} \neq 0$ (puntos fijos oscilantes inestables).

En la región **1** las trayectorias que comienzan cerca de los puntos fijos se alejan de ellos hasta encontrar un ciclo límite estable que rodea a los mismos.

En la región **5** los puntos fijos son inestables por lo que las trayectorias que comienzan cerca de ellos también se alejan hasta encontrar un ciclo límite estable. La existencia de dichos ciclos límite fue corroborada mediante cálculos numéricos.

En la región **2** los dos puntos fijos situados de manera simétrica alrededor del punto $(u, v) = (0, 0)$ son igualmente estables.

Las regiones **3** y **4** no son relevantes para nuestro estudio, ya que en la región **4** los puntos fijos simétricos son inestables mientras que en la región tres existe la posibilidad de una inestabilidad de Turing.

En lo que sigue nos concentraremos en la región **2** cerca de la región **5**. Para investigar el comportamiento de las concentraciones u y v (en ausencia de difusión) en la región ya mencionada, calculamos varios retratos fase del sistema mediante el método de Euler. En la fig.(8.2) presentamos una serie de retratos fase empezando muy cerca del valor crítico $f_c = (1 + hg)/(g + 1)$ que separa las regiones **2** y **5**, manteniendo g constante en $g = 0.165$, y adentrándonos cada vez más en la región **2** desde la frontera con la región **5**.

En la fig.8.2(a) podemos ver que alrededor de cada punto fijo estable existen dos ciclos límite inestables, los cuales separan las regiones de atracción de cada uno de los puntos fijos y del ciclo límite estable exterior. Las trayectorias grises terminan en los puntos fijos, mientras que las negras terminan en el ciclo límite estable. Nótese que los puntos localizados alrededor de $(u, v) = (0, 0)$ están contenidos en la región de atracción del ciclo límite exterior. En la fig.8.2(b) vemos que las regiones de atracción de los puntos fijos estables crece, y en este caso, el origen está contenido dentro de éstas. La transición entre estos dos retratos fase ocurre a través de una bifurcación homoclínica, es decir, al ir variando el parámetro f los ciclos límite inestables alrededor de los puntos fijos simétricos crecen hasta tocar el punto fijo en el origen, momento en el cual ocurre la bifurcación homoclínica. Al seguir variando el parámetro f , las trayectorias homoclínicas desaparecen y aparece un ciclo límite inestable alrededor de los tres puntos fijos. La fig.8.2(b) co-

responde a este caso. Si seguimos variando el parámetro f , el ciclo límite inestable crece hasta tocar al ciclo límite estable exterior, momento en el cual ocurre una bifurcación punto-silla entre los dos ciclos límite, teniendo como consecuencia la aparición de un ciclo límite semiestable. Al variar aún más el parámetro f el ciclo límite semiestable desaparece, por lo que en este caso, los únicos atractores son los dos puntos fijos simétricos, ésta es la situación mostrada en la fig.8.2(d).

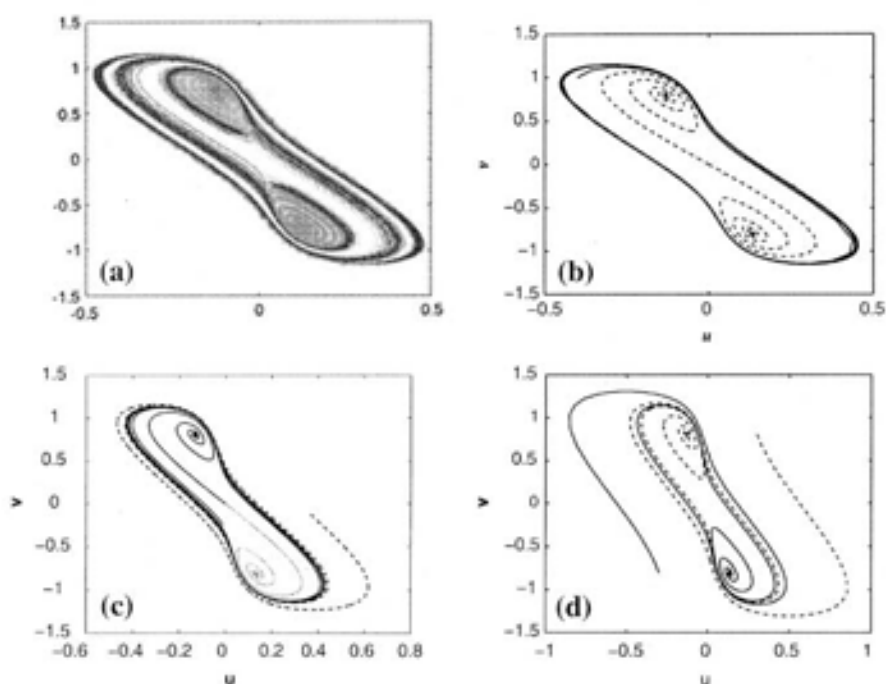


Figura 8.2: $h = -2.5$, $g = 0.165$, $f_c = 0.5043$. (a) Retrato fase correspondiente a la región 2 muy cerca de la región 5, $f = f_c + 0.07$ (b) Lo mismo que a pero $f = f_c + 0.12$ (c) Lo mismo que b pero con $f = f_c + 0.14$ (d) Lo mismo que c pero con $f = f_c + 0.15$. Notar que en éste caso, el ciclo límite estable ya no aparece.

8.1. Dinámica en una dimensión

En esta sección estudiaremos el comportamiento del modelo en una dimensión. Si utilizamos los parámetros apropiados para estar en la región descrita por la fig.8.2(d), tenemos entonces dos puntos fijos simétricos igualmente estables y un punto fijo $(u, v) = (0, 0)$ inestable. En este caso podemos predecir la existencia de ondas viajeras, característica universal en los sistemas de reacción-difusión biestables [7]. Para estudiar las propiedades de dichas ondas viajeras suponemos que las soluciones del sistema son del tipo: $u(x, t) = u(\xi)$, $v(x, t) = v(\xi)$, con $\xi = x - ct$, donde c es la velocidad de propagación de los frentes. Sustituyendo dicha dependencia espacio-temporal de las concentraciones en la ec.(8.2) con $C = 0$ obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{aligned} -c \frac{du}{d\xi} &= D \frac{d^2u}{d\xi^2} + \eta(u + av - uv^2), \\ -c \frac{dv}{d\xi} &= \frac{d^2v}{d\xi^2} + \eta(bv + hu + uv^2). \end{aligned} \quad (8.5)$$

Sumando e integrando respecto de ξ el sistema de ecuaciones dado en la ec.(8.5) tenemos:

$$-c \int_{-\infty}^{\infty} d(u + v) = \eta(1 + h) \int_{-\infty}^{\infty} (u + gv)d\xi + \int_{-\infty}^{\infty} d \left(\frac{d(Du + v)}{d\xi} \right). \quad (8.6)$$

El valor de la integral del lado izquierdo de la ec.(8.6) es $2c(u_0 + v_0)$, la primera integral del lado derecho es una medida de la asimetría de los perfiles, es decir, si el área debajo de la parte del perfil correspondiente a $u(x, t)$ ($v(x, t)$) con $u(x, t) > 0$ ($v(x, t) > 0$) es igual al valor absoluto del área debajo de la parte del perfil correspondiente a $u(x, t) < 0$ ($v(x, t) < 0$), el valor de dicha integral es cero, (condición conocida como condición de Maxwell) y por lo tanto los frentes correspondientes a u y a v son simétricos, ver la fig.(8.3). Finalmente, el valor de la última integral de la ec.(8.6) es cero, ya que $\frac{du}{d\xi} \rightarrow 0$ y $\frac{dv}{d\xi} \rightarrow 0$ cuando $\xi \rightarrow \infty$.

Entonces, despejando la velocidad de la ec.(8.6) tenemos:

$$c = - \frac{\eta(1 + h) \int_{-\infty}^{\infty} (u + gv)d\xi}{2(u_0 + v_0)}. \quad (8.7)$$

Ahora bien, si escribimos el sistema de ecuaciones dado en la ec.(8.5) como un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, el

comportamiento dinámico de nuestro sistema está dado por:

$$\begin{aligned}
 \frac{du}{d\xi} &= \theta, \\
 \frac{d\theta}{d\xi} &= -\frac{c}{D}\theta - F, \\
 \frac{dv}{d\xi} &= \phi, \\
 \frac{d\phi}{d\xi} &= -c\phi - G.
 \end{aligned}
 \tag{8.8}$$

Donde $F = (\eta/D)(u + av - uv^2)$ y $G = \eta(bv + hu + uv^2)$.

En esta formulación del problema, las ondas viajeras o frentes de onda, corresponden a las trayectorias heteroclínicas que conectan a dos puntos fijos, por lo tanto si la velocidad de propagación $c \neq 0$, deben existir dos trayectorias heteroclínicas que conectan a los puntos fijos de la ec.(8.8), una correspondiente a $c < 0$ y la otra a $c > 0$, mientras que para el caso $c \rightarrow 0$ dichas trayectorias deben converger a la misma trayectoria heteroclínica, ver la fig.(8.4).

Ahora bien, para estudiar el comportamiento de los frentes mencionados, resolvemos de forma numérica la ec.(8.2) utilizando el método de Euler en una malla de 500 puntos con un paso en el tiempo de $\Delta t = 0.0012$. Los parámetros utilizados para asegurar que estamos en la región **2** son $h = -2.5$, $g = 0.165$ y $f = 0.75$. Las condiciones de frontera utilizadas son de no flujo y las condiciones iniciales:

$$\begin{aligned}
 u(x, 0) &= u_0 - 2u_0H(x - 250), \\
 v(x, 0) &= v_0 - 2v_0H(x - 250),
 \end{aligned}
 \tag{8.9}$$

donde u_0, v_0 están dados por la ec.(8.3) y $H(x)$ es la función escalón. En la fig.(8.3) mostramos los resultados del cálculo numérico mencionado. En esta figura podemos observar que la zona de transición entre los dos estados estables, está centrada justo a la mitad de la malla, es decir, está centrada en $x = 250$ al igual que la condición inicial, por lo tanto podemos concluir que los frentes mostrados no adquirieron ninguna velocidad una vez formados, lo cual concuerda con el hecho que el área debajo de de la gráfica de los frentes ya formados es cero para ambas concentraciones. Es interesante notar que la forma de los frentes o interfases de la fig.(8.3) es muy parecida a las

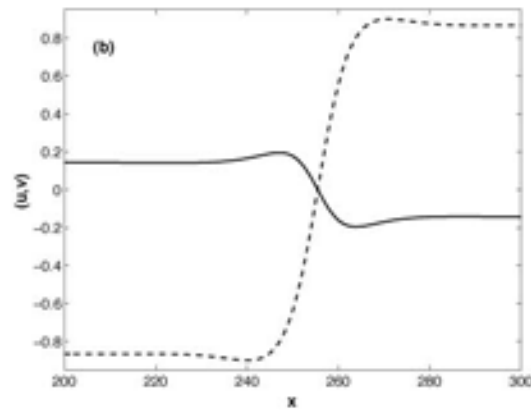


Figura 8.3: Frentes de onda simétricos correspondientes a los parámetros $f = 0.75$, $g = 0.165$, $D = 1$ y $\eta = 1/12$. La curva sólida corresponde a u .

interfases observadas por Coulet *et al.* [110], indicando que nuestros perfiles se comportan de manera similar a la propuesta en [110].

Ahora bien, si introducimos una pequeña cantidad de ruido en las condiciones iniciales dadas en la ec.(8.9), los frentes se vuelven asimétricos y una vez formados se mueven a velocidad constante, lo cual nos dice que los frentes simétricos son estructuras inestables, mientras que los frentes asimétricos son estables. En la fig.(8.4) mostramos las formas de los frentes (simétricos y asimétricos) en el plano (u, v) .

Esta figura puede ser pensada como la proyección en el plano (u, v) de las trayectorias heteroclínicas del sistema dado en la ec.(8.8) del espacio fase. La curva simétrica que pasa por $(u, v) = (0, 0)$ corresponde a los frentes de la fig.(8.3), mientras que las otras dos trayectorias asimétricas corresponden a los frentes mostrados en la fig.(8.5).

Si definimos como frente derecho FD a los frentes para los cuales u o v aumentan de izquierda a derecha y como frente izquierdo FI a los frentes para los cuales u o v aumentan de derecha a izquierda, entonces vemos que los FD y los FI pueden viajar hacia la izquierda o hacia la derecha dependiendo de su asimetría, ya que de acuerdo con la ec.(8.7) si el área bajo la gráfica de un FD es negativa, entonces su velocidad de propagación es positiva, y por lo tanto, el FD se mueve hacia la derecha, mientras que si el área bajo el perfil es positiva, el FD se mueve hacia la izquierda, ver la fig.(8.5). Para ilustrar esto, en la fig.(8.5) mostramos un cálculo usando condiciones

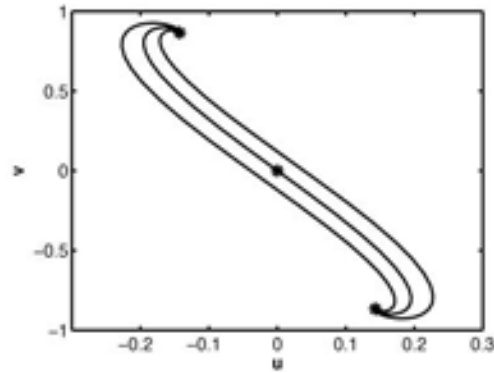


Figura 8.4: Forma de los frentes en el plano (u, v) . La curva simétrica central corresponde a los perfiles mostrados en la fig.(8.3). Estos perfiles son inestables. La curva izquierda corresponde a los perfiles asimétricos cuya integral es negativa, mientras que la curva derecha, corresponde a perfiles asimétricos cuya integral es positiva.

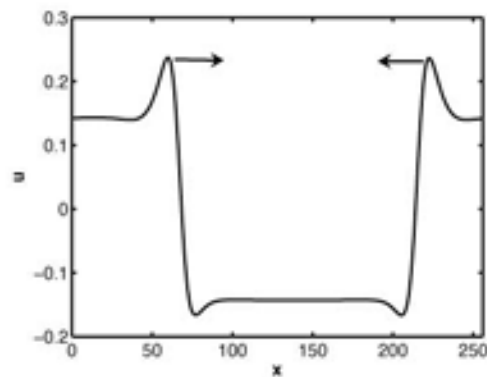


Figura 8.5: *FD* y *FI* viajando en diferentes direcciones. Los parámetros utilizados son los mismos que en la fig.(8.3) y la forma de los frentes corresponden a la curva del lado derecho de la fig.(8.4).

de frontera periódicas y utilizando como condición inicial una función seno más una pequeña desviación del 10%, lo cual tiene como consecuencia que conforme transcurre el tiempo, se produzcan un *FD* y un *FI* asimétricos

viajando en direcciones opuestas. Al chocar, los frentes se vuelven a formar con simetrías distintas (la integral debajo de cada uno de los perfiles se vuelve negativa), es decir, después de la colisión, el *FD* se mueve hacia la derecha y el *FI* se mueve hacia la izquierda, sus formas corresponden a la curva del lado izquierdo de la fig.(8.4).

Por otro lado, si las condiciones iniciales utilizadas son condiciones al azar alrededor del estado $(u, v) = (0, 0)$, se forman muchos frentes, y una vez que adquieren su forma asimétrica característica, se empiezan a mover en ambas direcciones con velocidad constante. En la fig.(8.6) mostramos un cálculo de esta naturaleza. Ahora bien, una vez que los frentes están formados

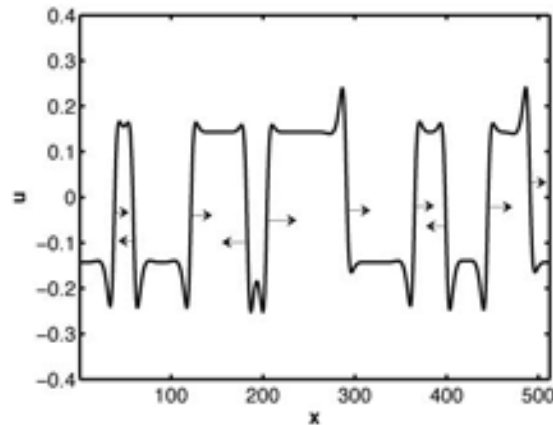


Figura 8.6: Frentes obtenidos en un cálculo con condiciones de frontera periódicas y condiciones iniciales al azar alrededor de $(u, v) = (0, 0)$ después de 12,300,000 iteraciones usando un intervalo de tiempo $\Delta t = 0.0004$. El parámetro de escala es $\eta = 1/4$ y los demás parámetros son los mismos que en la fig.(8.3). Las flechas muestran la dirección en la que se mueve cada frente.

y moviéndose, se observa que muchos de éstos se aniquilan al chocar, (esto sucede independientemente si los frentes son *FD* o *FI*), quedando al final un número de *FD* y *FI* moviéndose en ambas direcciones que al interactuar no se aniquilan. Esto sucede para cada corrida diferente con condiciones iniciales al azar, lo que indica que existe una densidad crítica ρ_c de frentes de onda para la cual si $\rho > \rho_c$ muchos de éstos se aniquilan al chocar hasta que $\rho \sim \rho_c$, momento en el cual ya no hay aniquilación de frentes. De esto,

podemos concluir que existe una escala espacial definida para dichos frentes y que una vez que dicha escala es alcanzada, el número de frentes se conserva a lo largo de la dinámica, obteniendo así un patrón periódico en el tiempo. La velocidad de los frentes en los cálculos mencionados anteriormente, es de $c = 0.1429$ espacios de la malla por unidad de tiempo.

Otro fenómeno observado en la propagación de FD y FI , es que si la razón entre coeficientes de difusión D es diferente de uno, es posible lograr que los frentes dejen de moverse. Examinamos este fenómeno mediante cálculos numéricos para diferentes valores de D , llegando a la conclusión que si $D < D_c = 0.9$ los frentes se vuelven estacionarios. Para valores de D cercanos a D_c , la velocidad se comporta como $c \propto (D - D_c)^{1/2}$. Un fenómeno muy similar al que ocurre cuando $D < D_c$ ocurre también para el parámetro f , ya que si $f > f_c = 0.82$ la velocidad de los frentes es $c = 0$, ver la fig.(8.7).

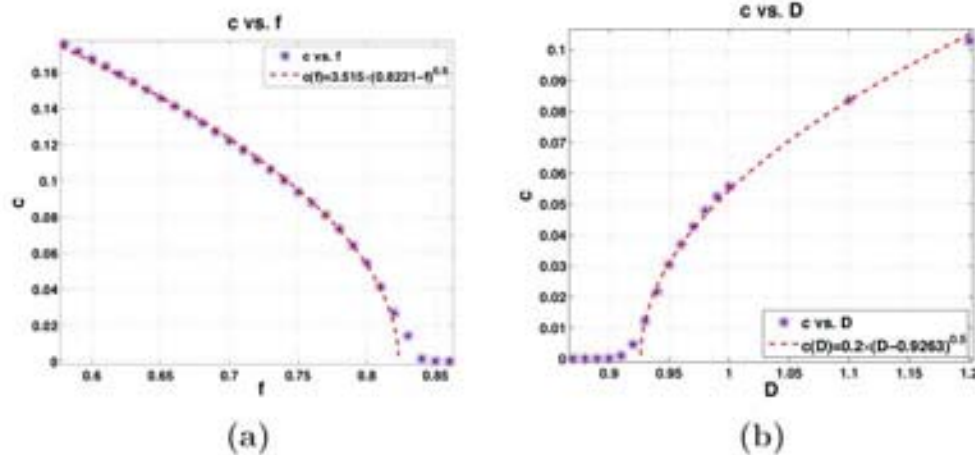


Figura 8.7: Los marcadores en forma de estrella corresponden a los valores numéricos de la velocidad. Las curvas punteadas son las curvas que mejor se ajustan a los datos numéricos. (a) Comportamiento de la velocidad como función de f . (b) Comportamiento de la velocidad como función de D .

También vimos que si las condiciones de frontera son condiciones de no flujo, los frentes correspondientes a un valor de $f < 0.74$, no rebotan en las fronteras y el sistema termina en una fase uniforme cuyo valor corresponde a uno de los dos puntos fijos.

Hasta aquí el estudio numérico en una dimensión. La dinámica en dos dimensiones de los frentes de onda en la misma región de parámetros estudiada

hasta ahora es mucho más complicada, ya que, como veremos en la siguiente sección, la velocidad depende de la curvatura del frente.

8.2. Dinámica en dos dimensiones

Hemos visto que muy cerca de la frontera entre la región **2** y la región **5** (ver la fig.(8.1)) existe un ciclo límite estable que rodea a los puntos fijos de la cinética. Esto tiene como consecuencia la aparición de otro tipo de ondas, tales como las ondas espirales. Este tipo de estructuras espacio-temporales son soluciones de la ec.(8.2) cuando el sistema se encuentra en la región **5** pero cerca de la región **2** del espacio de parámetros. En la fig.(8.8) mostramos un patrón espacio temporal correspondiente a esta región del diagrama de fases tomando $D = 1$. El tomar $D = 1$ asegura que este patrón no sea un patrón de Turing. Las condiciones iniciales utilizadas para este cálculo fueron condiciones iniciales al azar alrededor del punto $(u, v) = (0, 0)$. La resolución numérica se llevo a cabo mediante el método de Euler, en una malla de 256×256 puntos con condiciones de frontera periódicas.

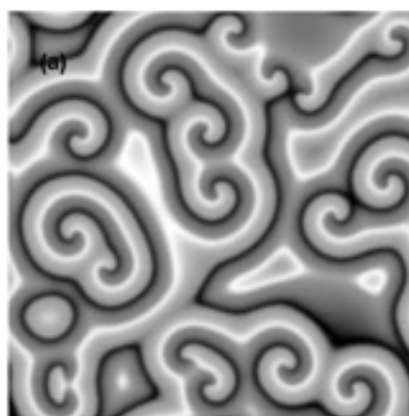


Figura 8.8: Patrón obtenido con los parámetros correspondientes a una región muy cercana a la frontera entre la región **2** y la región **5** . Los valores son $g = 0.165$, $h = -2.5$, y $f = 0.5043$

En la fig.8.9(a) graficamos los valores de las concentraciones u y v de los 256×256 puntos de la malla en el plano (u, v) para diferentes tiempos. En esta figura podemos ver como los valores de dichos puntos, viajan hacia

el ciclo límite estable (estructura más oscura debido a la acumulación de puntos) durante el transcurso de la dinámica.

El hecho que el patrón mostrado en la fig.(8.8) oscila en el tiempo se puede ver en la fig.8.9(b), donde R es una medida del tamaño del patrón, y

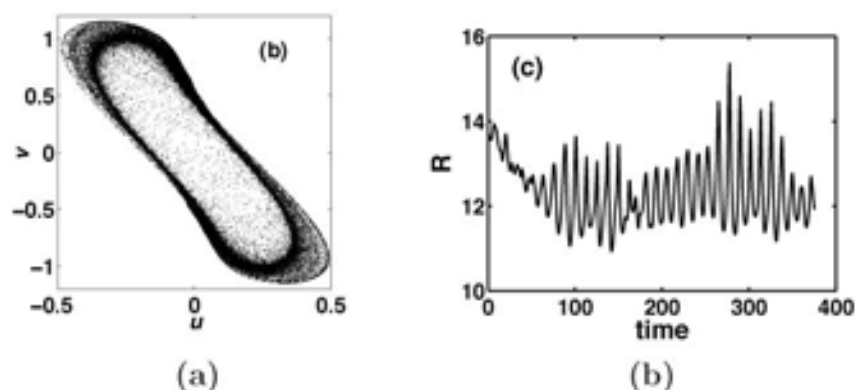


Figura 8.9: (a) En esta figura podemos ver que diferentes valores de (u, v) (representados por puntos) se acercan al ciclo límite estable conforme transcurre el tiempo. (b) Gráfica de R como función de t , donde R corresponde al primer cero de la función de correlación de pares promediada sobre todo el dominio.

corresponde al primer cero de la función de correlación de pares promediada sobre todos los puntos del dominio y calculada numéricamente para todo tiempo.

Los patrones espirales mostrados en la fig.(8.8) son mejor conocidos como ondas espirales, y aparecen comunmente como soluciones a muchos sistemas no lineales, tales como la reacción Belousov-Zhabotinskii y el Bruselador [7].

Ahora bien, si usamos los parámetros f , g y h correspondientes al retrato fase de la fig.8.2(d) y resolvemos el sistema de ecuaciones dado en la ec.(8.2) de forma numérica con $\eta = 1/2$, utilizando las mismas condiciones iniciales y de frontera que las usadas para obtener la fig.(8.8), obtenemos el patrón espacio temporal mostrado en la fig.(8.10). Los patrones mostrados en la fig.(8.10) están ordenados temporalmente, por lo tanto es fácil concluir que distintos puntos del mismo frente se mueven a distintas velocidades, donde el máximo valor de dichas velocidades ocurre en los puntos del perfil con mayor curvatura. Esto último tiene como consecuencia que los frentes de onda comiencen a rotar alrededor de los puntos donde los perfiles cambian

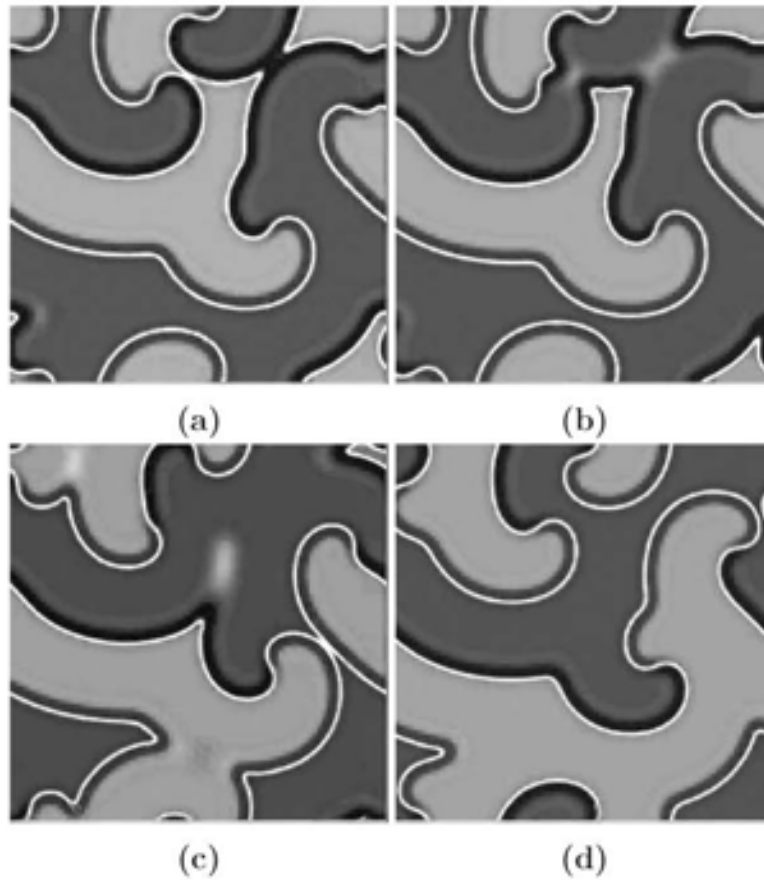


Figura 8.10: Dinámica ondulatoria correspondiente a cuatro instantes sucesivos en el tiempo. Obsérvese la existencia de una escala característica y la existencia de puntos alrededor de los cuales los frentes rotan, nótese que estos puntos no se mueven.

de concavidad, es decir alrededor de los puntos donde la curvatura del frente es cero.

Es importante notar que en este caso, los frentes de onda también tienen una escala bien definida, por lo que muchos de los frentes que se forman en la etapa inicial del cálculo son eliminados. El comportamiento de las concentraciones u y v converge al patrón oscilante mostrado en la fig.(8.10) después de 300,000 iteraciones, que en este caso corresponden a 300 unidades de tiempo.

El periodo de oscilación correspondiente a este cálculo (fig.(8.10)) es de

75 unidades de tiempo, y fue medido mediante el cálculo del primer cero de la función de correlación.

Finalmente, en una dimensión vimos que existe un valor crítico de D para el cual los frentes podían volverse estacionarios si $D < D_c$. En dos dimensiones ocurre el mismo fenómeno, y el valor crítico de D es del orden de $D_c = 0.8$. El patrón espacial formado cuando los frentes dejan de moverse ($D < D_c$), es un patrón estable de tipo laberinto, ver la fig.(8.11). Este tipo de patrones estacionarios en sistemas biestables es un fenómeno común, y su existencia ya ha sido comprobada experimentalmente [111], además, ya se han propuesto algunos modelos para su estudio analítico [112, 113]. Obsérvese



Figura 8.11: Patrón obtenido con $g = 0.165$, $h = -2.5$, $f = 0.75$ y $D = 0.8$, después de 500,000 iteraciones. En el recuadro pequeño de la figura, se muestra la transformada de Fourier del patrón.

que en la fig.(8.11) hay un pequeño recuadro donde se muestra la transformada de Fourier del patrón. En él se puede ver que dicha transformada es un anillo alrededor de un valor definido por un vector onda k , lo cual comprueba la existencia de una escala en el problema.

Por último, es importante mencionar que la dinámica correspondiente a la fig.(8.10) es muy parecida a las dinámicas encontradas en el tejido cardíaco [114], por lo que este modelo puede ser útil para el estudio de estos fenómenos.

En el modelado de la dinámica del corazón mediante ecuaciones diferenciales parciales, generalmente se utilizan cinéticas simples pero que contienen los ingredientes básicos de los fenómenos encontrados en los experimentos,

tales como existencia de ciclos límite, biestabilidad [30, 115], excitabilidad, bifurcaciones de doblamiento de periodo y existencia de ondas espirales. Todas estas características están presentes en el modelo más utilizado para estudiar este tipo de dinámica, es decir las ecuaciones de Fitzhugh-Nagumo. Nótese que a excepción de la excitabilidad, muchas de estas características también las tiene el modelo BVAM, modelo que aunque es parecido al de Fitzhugh-Nagumo, es más fácil de obtener y de analizar. Para reforzar estas suposiciones, en la fig.(8.12) mostramos la historia temporal del punto $(x, y) = (1, 1)$ del cálculo correspondiente a la fig.(8.10), la cual es similar a algunas ondas encontradas en electrocardiogramas [115]. En una dimensión

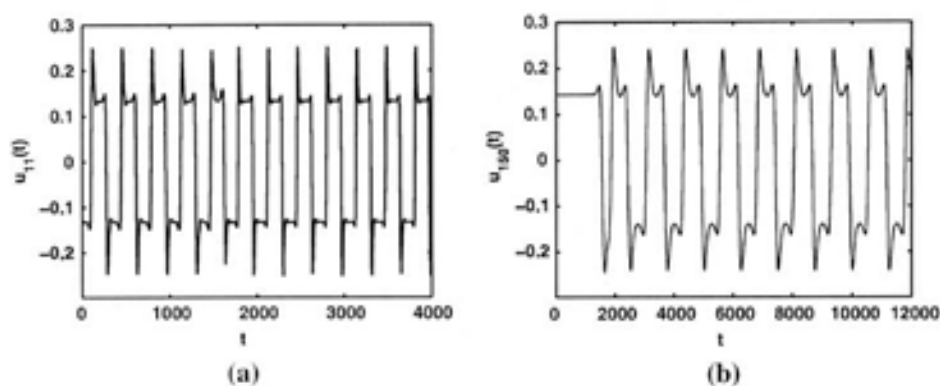


Figura 8.12: (a) Comportamiento de u en el punto $(x, y) = 1$ correspondiente al cálculo de la fig.(8.10). (b) Comportamiento de u en el punto $x = 250$, (cálculo en una dimensión).

es difícil obtener una historia temporal periódica iniciando con condiciones iniciales al azar, por lo que para producir la fig.8.12(b), producimos un tren periódico de frentes de onda con condiciones de frontera de no flujo. Para esto empezamos con un solo frente (ya sea FI o FD) del lado izquierdo del dominio, cambiando el signo de la concentración u cada 684 unidades de tiempo. La escala temporal escogida tiene como consecuencia que los frentes producidos estén muy cerca el uno del otro, por lo que al chocar con la frontera del lado derecho, el frente que rebota se aniquila al encontrarse con el primer frente que se encuentra viajando en sentido contrario al frente rebotado. De esta manera calculamos la evolución temporal de u en el punto central de la malla.

Capítulo 9

Resumen y conclusiones

Hasta ahora, la mayor parte del trabajo teórico y experimental que se ha realizado en sistemas físico-químicos [5, 98, 111] y biológicos [7] que pueden ser modelados mediante ecuaciones de reacción-difusión, se ha hecho bajo la suposición que la difusión es normal y cumple con

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \phi. \quad (9.1)$$

En cambio, en la mayor parte de este trabajo hemos estudiado las consecuencias que tiene la difusión anómala en diferentes fenómenos característicos de los sistemas de reacción-difusión. Dichos fenómenos son, la inestabilidad de Turing junto con los patrones espaciales formados a través de dicha inestabilidad y la propagación de frentes de onda en sistemas de reacción-difusión con cinéticas biestables.

El tipo de difusión anómala que utilizamos a lo largo del trabajo es: superdifusión debida a vuelos de Lévy y subdifusión debida a trampas y obstáculos [41] en el medio donde ésta ocurre. Este tipo de difusión está caracterizado por

$$\langle x^2 \rangle \sim t^\beta, \quad (9.2)$$

donde x es la posición de una partícula que se difunde en un medio determinado y β es un parámetro (comunmente conocido como exponente anómalo) que nos dice si la difusión es superdifusión $\beta > 1$, o subdifusión $\beta < 1$. La forma de modelar los diferentes casos de difusión mencionados, es mediante ecuaciones de difusión generalizadas, ecuaciones que pueden ser deducidas utilizando caminantes aleatorios en tiempo continuo y cuya forma más gene-

ral está dada por

$$\frac{{}^c \partial^\alpha \phi}{\partial t^\alpha} = \chi_{\alpha, \gamma} (s ({}_{-\infty} D_x^\gamma) + (1 - s) ({}_x D_\infty^\gamma)) \phi, \quad (9.3)$$

$$0 < \alpha \leq 1, 1 < \gamma \leq 2, 0 \leq s \leq 1,$$

donde $\alpha = 1$, $1 < \gamma < 2$ corresponde a superdifusión y $0 < \alpha < 1$, $\gamma = 2$ corresponde a subdifusión. La derivada en el tiempo es la derivada de Caputo de orden α y las derivadas espaciales son las derivadas de orden γ de Riemann-Liouville.

Para el caso de la inestabilidad de Turing en presencia de subdifusión, hemos visto que existe dicha inestabilidad, y que es posible encontrar una relación de dispersión generalizada al resolver la ecuación $S(k, s) = 0$. Al igual que en el caso de difusión normal, dicha relación de dispersión nos dice bajo que condiciones tenemos una inestabilidad y como se comporta ésta al variar los parámetros del sistema, además conserva la propiedad de ser una herramienta útil para predecir el tipo de patrón espacial al cual converge la dinámica cuando $t \rightarrow \infty$.

Si los exponentes anómalos son diferentes, es decir, cuando los dos compuestos químicos se difunden de acuerdo a la ec.(9.2) con diferentes velocidades, demostramos que es posible tener una inestabilidad de Turing si y sólo si la diferencia $\Delta(\beta_u, \beta_v)$ de dichos exponentes es menor que un valor crítico $\Delta_c(\beta_u, \beta_v)$, (β_u es el exponente anómalo correspondiente al compuesto u y β_v es el exponente anómalo correspondiente al compuesto v) ya que en caso contrario el estado estacionario homogéneo es inestable.

También demostramos que si los exponentes anómalos de los compuestos que se difunden son iguales $\beta_u = \beta_v$, la inestabilidad de Turing aparece no sólo en la región de parámetros correspondiente a la región donde se forman patrones en presencia de difusión normal, sino en nuevas regiones de parámetros donde las condiciones normales para la bifurcación de Turing no se cumplen. En particular, existe la posibilidad de tener dicha inestabilidad y de obtener patrones espaciales de Turing aún cuando $TrA(k) > 0$ para $k \sim 0$, lo que implica que en este caso, no es necesaria la condición $\text{signo}(a_{11}) \neq \text{signo}(a_{22})$. La relajación de las condiciones de Turing mencionadas, tiene como consecuencia que muchos sistemas ya sean químicos, físicos o biológicos que no cumplen dichas condiciones en presencia de difusión normal, presenten una inestabilidad de Turing junto con sus estructuras espaciales características cuando la difusión es subdifusión.

Aparte de extender el espacio de Turing, el hecho de obtener un estado homogéneo asintóticamente estable aún cuando la parte real de los valores propios de la matriz Jacobiana correspondiente a la cinética es positiva, es importante, ya que implica que una reacción química inestable puede volverse estable en presencia de subdifusión. Este resultado podría ser verificado experimentalmente y por lo tanto servir para validar o invalidar el modelo de reacción-subdifusión utilizado, hecho que hasta ahora no ha sido posible debido a los pocos resultados experimentales existentes.

De acuerdo con nuestros resultados y con los resultados de diferentes estudios sobre las consecuencias de la difusión anómala en la inestabilidad de Turing, [54, 73, 75], podemos concluir que el efecto que tiene la difusión anómala, ya sea superdifusión o subdifusión, es en términos generales, ampliar la región del espacio de parámetros del sistema en la cual existe una inestabilidad de Turing, es decir, la presencia de difusión anómala en los sistemas de reacción-difusión favorece la existencia de dicha inestabilidad.

Es importante mencionar que nuestros resultados sugieren la existencia de ecuaciones de amplitud fraccionarias, y que el estudio y la generalización de este tipo de ecuaciones para la formación de patrones en presencia de difusión anómala, debiera ser el siguiente paso en el estudio de este tipo de sistemas. La generalización de las ecuaciones de amplitud (tema que hasta ahora ha sido poco explorado) podría servir no sólo para sistemas de reacción-difusión, si no para muchos modelos mediante los cuales es posible generar patrones espacio-temporales [7, 14], y en los cuales la difusión juega un papel importante. Como ejemplo de éstos, podemos mencionar sistemas de reacción-difusión con difusión cruzada, quimotaxis, modelos de depredador-presa e incluso modelos financieros. El estudio de las propiedades dinámicas de los ejemplos mencionados ha sido, en su mayoría, en condiciones de difusión normal, por lo que incluir difusión anómala y estudiar sus consecuencias tanto teóricas como en sus aplicaciones es una línea de investigación interesante.

Para el caso de propagación de frentes de onda en sistemas biestables, demostramos que cuando la difusión es superdifusión asimétrica, dichos frentes adquieren una velocidad incluso cuando los dos estados estables están en equilibrio. También vimos que en este caso, la tendencia de los frentes de crecer siempre a costa del estado metaestable puede ser contrarrestada por la asimetría de la superdifusión cuando el exponente anómalo es suficientemente pequeño. La superdifusión asimétrica utilizada para obtener los resultados descritos, se puede encontrar en plasmas, donde ya ha sido usada para modelar la propagación de frentes de onda entre un estado estable y

uno inestable [103]. Esto sugiere que nuestros resultados podrían ser útiles en el estudio de algunos fenómenos asociados a la física de plasmas, además que, de forma general, aumentan el tipo de comportamientos que pueden esperarse en sistemas donde existe biestabilidad, tales como la dinámica de células cardíacas [30, 115] y el crecimiento y propagación de frentes sólidos en fases líquidas [97], etc.

En el caso de propagación de frentes en presencia de subdifusión, vimos que el comportamiento de éstos es muy parecido al comportamiento correspondiente a difusión normal. En este caso, encontramos que existe un valor crítico del parámetro z , para el cual si $z > z_c$ los frentes en presencia de subdifusión se mueven más rápido que los frentes formados mediante difusión normal, mientras que si $z < z_c$ los frentes correspondientes a subdifusión se mueven más lento que los frentes formados con difusión normal. Esto podría tener consecuencias interesantes en fenómenos como la descomposición espinodal.

También se llevó a cabo un estudio del comportamiento de frentes de onda en el modelo BVAM en un régimen biestable, tanto en una como en dos dimensiones en presencia de difusión normal. Los principales resultados de dicho estudio son, la existencia de una escala definida para la formación de frentes entre los dos estados estables, y la posibilidad de obtener un patrón espacial (de tipo laberinto) estacionario cuando al variar uno de los parámetros del sistema (f) los frentes disminuyen su velocidad hasta que quedar totalmente estáticos. Es importante mencionar que los patrones espacio-temporales obtenidos en dos dimensiones cuando los frentes se propagan en un medio con condiciones de frontera periódicas, son similares a las ondas medidas en tejidos cardíacos [114]. Esto sugiere que el modelo BVAM puede ser un modelo útil en el estudio de la dinámica cardíaca, y puede ser una alternativa a modelos tales como el modelo de Fitzhugh-Nagumo.

De los resultados obtenidos, podemos concluir que es interesante tanto teórica como experimentalmente, estudiar los efectos que tiene la difusión anómala en todos los fenómenos donde la difusión juega un papel importante, ya que como hemos visto en los casos aquí estudiados, la existencia de ésta tiene como consecuencia la extensión de algunos resultados clásicos, y en algunos casos la aparición de nuevos fenómenos, tales como el crecimiento del estado metaestable a costa del estado estable en un sistema de reacción superdifusión biestable y las nuevas condiciones para la bifurcación de Turing en sistemas de reacción subdifusión.

Finalmente, también podemos concluir que el cálculo fraccionario es una

herramienta útil y en algunos casos más realista en la modelación de fenómenos naturales, por lo que es interesante ver que leyes fundamentales de la física pueden ser extendidas mediante el uso de dicha herramienta y que implicaciones tiene esto en la interpretación y deducción de dichas leyes.

En lo que respecta a los sistemas de reacción-difusión generalizados, queda mucho por hacer incluso en los casos estudiados en este trabajo. Por ejemplo, las consecuencias que tienen los vuelos de Lévy junto con la aparición de distribuciones con colas pesadas en los tiempos de espera entre saltos, es decir falta estudiar el tipo de fenómenos que aparecen en sistemas modelados por ecuaciones de reacción-difusión generalizadas (ec.(9.3)) donde $0 < \alpha < 1$ y $1 < \gamma < 2$ al mismo tiempo, además de estudiar el efecto que tiene la difusión anómala en la propagación de ondas del tipo tratado en el último capítulo, ondas espirales e incluso dinámicas caóticas.

Apéndice A

Teorema del Límite Central

Como ya vimos, un caminante aleatorio es esencialmente una suma de variables estocásticas o aleatorias. En lo que sigue, haremos un breve estudio de dichas sumas y de su relación con el teorema del límite central, el cual afirma que la distribución de probabilidad ($P_N(\vec{R})$) del valor de una suma de N variables aleatorias independientes ($\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$), definidas por una distribución de probabilidad $p(\vec{r})$ cuyo segundo momento existe, tiende a una distribución gaussiana cuando el número de sumandos tiende a infinito ($N \rightarrow \infty$).

Entonces, sea \vec{X}_N la suma de N variables aleatorias, es decir:

$$\vec{X}_N = \sum_{n=1}^N \vec{x}_n. \quad (\text{A.1})$$

Si los elementos del conjunto $\{\vec{x}_n\}$ son independientes entre sí, entonces el conjunto $\{\vec{X}_N\}$ se conoce como: cadena de Markov. En una cadena de Markov el valor de la variable \vec{X}_{N+1} es independiente del valor de la variable \vec{X}_n para $n < N$, y sólo depende del valor de la variable anterior, es decir del valor de \vec{X}_N .

Ahora bien, sean $P_N(\vec{R})$ la distribución de probabilidad¹ para los valores de la variable aleatoria \vec{X}_N , y $p_N(\vec{r}|\vec{R})$ la distribución de probabilidad de los valores que puede tomar la variable aleatoria \vec{x}_N dado que el valor de la variable X_N es \vec{R} . Entonces, si el conjunto $\{\vec{X}_N\}$ es una cadena de Markov

¹ $P_N(\vec{R})$ puede ser calculada para sistemas continuos o discretos, donde los sistemas discretos pueden ser tratados como sistemas continuos con distribuciones de saltos dadas por deltas de Dirac centradas en los valores permitidos para los saltos.

podemos escribir:

$$P_N(\vec{R}) = \int_{-\infty}^{\infty} p_N(\vec{r}|\vec{R} - \vec{r}) P_{N-1}(\vec{R} - \vec{r}) d^d \vec{r}. \quad (\text{A.2})$$

Donde $p_N(\vec{r}|\vec{R} - \vec{r})$ se conoce como la probabilidad de transición entre el estado $\vec{R} - \vec{r}$ y el estado \vec{r} .

Ahora bien, si suponemos que el valor de la variable \vec{x}_N es independiente del valor de la variable X_N tenemos que $p_N(\vec{r}|\vec{R} - \vec{r}) = p_N(\vec{r})$, por lo tanto la ec.(A.2) se convierte en una convolución entre las funciones $P_{N-1}(\vec{R})$ y $p_N(\vec{r})$, es decir:

$$\begin{aligned} P_N &= p_N \star P_{N-1}, \\ p_N \star P_{N-1} &= \int_{-\infty}^{\infty} p_N(\vec{r}) P_{N-1}(\vec{R} - \vec{r}) d^d \vec{r}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Utilizando de nuevo el hecho que el conjunto $\{X_N\}$ es una cadena de Markov, es fácil ver que P_{N-1} también está descrita por una convolución de la forma dada en la ec.(A.3), por lo tanto podemos escribir:

$$P_N = P_0 \star p_1 \star p_2 \star \cdots \star p_N. \quad (\text{A.4})$$

Donde P_0 es la distribución para los valores de X_0 , que tomaremos como $P_0 = \delta(x)$.

Si escribimos la transformada de Fourier de la ec.(A.4) tenemos:

$$\tilde{P}_N(\vec{k}) = \tilde{p}_1(\vec{k}) \tilde{p}_2(\vec{k}) \cdots \tilde{p}_N(\vec{k}). \quad (\text{A.5})$$

Antitransformando:

$$P_N(\vec{R}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \prod_{n=1}^N \tilde{p}_n(\vec{k}) d^d \vec{k}. \quad (\text{A.6})$$

Si las variables aleatorias \vec{x}_n están idénticamente distribuidas, la ec.(A.6) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} P_N(\vec{R}) &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} (\tilde{p}(\vec{k}))^N d^d \vec{k} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R} + N\psi(\vec{k})} d^d \vec{k}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Donde

$$\psi(\vec{k}) = \ln \left(\tilde{p}(\vec{k}) \right). \quad (\text{A.8})$$

Ahora bien, tomando en cuenta que² $\ln \left(\tilde{p}(\vec{k}) \right) < 0 \forall k$, podemos aproximar la ec.(A.7) en el límite cuando $N \gg 1$ como:

$$P_N(\vec{R}) \approx \int_{|k| < \epsilon(N)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} e^{N\psi(\vec{k})} d^d \vec{k}. \quad (\text{A.9})$$

Donde $N \gg 1$ implica $\epsilon \ll 1$.

Desarrollando la función $\psi(\vec{k})$ en serie de Taylor alrededor de $k = 0$, y sustituyendo en la ec.(A.9) tenemos:

$$P_N(\vec{R}) \approx \int_{|k| < \epsilon(N)} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \exp \left(N \left[-i\vec{C} \cdot \vec{k} - \frac{1}{2} \vec{k} H \vec{k} + \dots \right] \right) d^d \vec{k}. \quad (\text{A.10})$$

Donde $\vec{C} = i\nabla \psi(k) |_{\vec{k}=0}$ y $H_{ij} = -\partial_{k_i k_j}^2 \psi(k) |_{\vec{k}=0}$.

Entonces, para N suficientemente grande podemos aproximar la ec.(A.10) de la siguiente manera:

$$P_N(\vec{R}) \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R} - N\vec{C})} e^{-\frac{1}{2} \vec{k} N H \vec{k}} d^d \vec{k}. \quad (\text{A.11})$$

Utilizando el cambio de variable³ $\vec{\omega} = N^{1/2} H^{1/2} \vec{k}$, y definiendo una nueva variable z_N como $z_N = (NH)^{-1/2} \left(\vec{R} - N\vec{C} \right)$ podemos reescribir la ec.(A.11) como:

$$P_N(\vec{R}) \approx \frac{1}{(2\pi N)^{d/2} (\det(H))^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{\omega} \cdot z_N} e^{-\omega^2/2} d^d \omega. \quad (\text{A.12})$$

Por otro lado, de la definición de $\psi(k)$ es fácil ver que:

$$\begin{aligned} \nabla \psi(k) |_{\vec{k}=0} &= i\langle R \rangle, \\ -\frac{\partial^2 \psi}{\partial k_n \partial k_m} |_{\vec{k}=0} &= \langle R_n^2 \rangle - \langle R_n \rangle \langle R_m \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

² $|\tilde{p}(\vec{k})| = \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} p(\vec{r}) d^d \vec{r} \right| \leq \int_{-\infty}^{\infty} |e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} p(\vec{r})| d^d \vec{r} \leq \int_{-\infty}^{\infty} p(\vec{r}) d^d \vec{r} = 1 \implies p(\vec{k}) < 1$.

³ La raíz cuadrada de la matriz H está dada por $H^{1/2} = Q A^{1/2} Q^T$, con A una matriz diagonal y Q una matriz ortogonal cuyas columnas están dadas por los vectores propios de H .

Utilizando la ec.(A.13) y el hecho que la ec.(A.12) es la transformada de Fourier de una Gaussiana en d -dimensiones tenemos:

$$\begin{aligned}
 P_N(\vec{R}) &\approx \frac{1}{(2\pi N)^{d/2} \sqrt{\det(H)}} \exp\left(\frac{-|\vec{z}_N|^2}{2}\right) = \\
 P_N(\vec{R}) &\approx \frac{1}{(2\pi N)^{d/2} \sqrt{\det(H)}} \exp\left(\frac{-(\vec{R} - N\langle\vec{R}\rangle)H^{-1}(\vec{R} - N\langle\vec{R}\rangle)}{2N^{1/2}}\right).
 \end{aligned}
 \tag{A.14}$$

Por lo tanto, la distribución de probabilidad para los valores de la variable aleatoria X_N con $N \gg 1$, está dada por una función Gaussiana centrada en $R = N\langle R \rangle$. Es importante notar que al deducir este resultado, no se utilizó ninguna distribución $p(\vec{r})$ particular, por lo que dicho resultado es válido para toda distribución cuyo segundo momento exista. Otro punto importante es que la ec.(A.14) sólo es válida para $z_N = O(1)$, por lo tanto es válida si $R = N\langle R \rangle + O(N^{1/2})$. Esto nos dice que el teorema del límite central se cumple solamente en la región central de la Gaussiana. El comportamiento de la distribución lejos de la región central, depende de todos los momentos de $p(\vec{r})$ mayores a $\langle r^2 \rangle$.

Finalmente, es importante mencionar que existe una manera más general (y formal) de formular el teorema del límite central, para esto la distribución Gaussiana toma el papel de un atractor en el espacio de las distribuciones $P_N(X)$ generadas por las sumas del tipo dado en ec.(A.1), atractor al cual convergen todas las distribuciones con ciertas características (tales como la existencia del segundo momento), es decir: $\lim_{N \rightarrow \infty} P_N(X) \rightarrow \text{Gaussiana}$.

Escrito de esta manera es posible demostrar que incluso distribuciones que decaen como $P_N(x) \sim x^{-3}$, para $x \gg 1$, distribuciones cuyo segundo momento no existe, pertenecen al conjunto de distribuciones que convergen a la distribución Gaussiana cuando $N \rightarrow \infty$.

En dicha formulación del teorema del límite central, la distribución Gaussiana también se conoce como una distribución límite estable. Para más información sobre este teorema ver [34, 116].

Apéndice B

Teorema del Límite Central Generalizado

En este apéndice hablaremos sobre el teorema del límite central generalizado. Para esto, es necesario tomar el punto de vista de las distribuciones límite o distribuciones a las cuales convergen toda distribución $P_N(X)$ generada por sumas del tipo

$$\vec{X}_N = \sum_{n=1}^N \vec{x}_n. \quad (\text{B.1})$$

Donde las x_n son variables aleatorias independientes definidas por una distribución de probabilidad $p(x)$. Este tipo de distribuciones límite se conocen como distribuciones límite estables y una de sus principales características es que son invariantes ante convoluciones. Dichas distribuciones están caracterizadas mediante el siguiente teorema [34]:

Teorema 1 (*Distribuciones límite estables*): Si $P(X)$ es una distribución límite estable, entonces para todo a_1, a_2 , con $a_i > 0$, y b_1, b_2 con $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2$ existen $a > 0$ y $b \in \mathbb{R}$ tal que

$$P(a_1X + b_1) \star P(a_2X + b_2) = P(aX + b). \quad (\text{B.2})$$

Donde $P(a_1X + b_1) \star P(a_2X + b_2)$ significa la convolución entre las funciones $P(a_1X + b_1)$ y $P(a_2X + b_2)$.

Las distribuciones límite estables se pueden dividir en dos tipos, las distribuciones de Lèvy y la distribución normal o Gaussiana. Las distribuciones de Lèvy son los atractores de las distribuciones de probabilidad con colas pesadas, es decir distribuciones que decaen como $P_N(x) \sim x^{-(1+\gamma)}$ con $0 < \gamma < 2$,

para $x \gg 1$.

Por otro lado la distribución Gaussiana es el atractor para toda distribución $P_N(x)$ que decae más rápido que $x^{-(1+\gamma)}$, $0 < \gamma < 2$ para $x \gg 1$.

El Teorema 1 toma una forma particularmente sencilla en el espacio de Fourier, debido a que en dicho espacio, la operación de convolución se convierte en una multiplicación. Debido a esto, la representación canónica de las distribuciones límite estables se da siempre en el espacio de Fourier y está dada por el siguiente teorema [34]

Teorema 2 (*Representación canónica de las distribuciones límite estables*): $P(x) = (2\pi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \tilde{P}(k) dk$ es una distribución límite estable si y solo si su transformada de Fourier $\tilde{P}(k)$ cumple con

$$\tilde{P}(k) = \exp(i\zeta k - C|k|^\gamma [1 + i\beta \text{sign}(k)\omega(k, \gamma)]) \quad (\text{B.3})$$

Donde γ , β , C y ζ son números reales tal que $-1 \leq \beta \leq 1$, $0 < \gamma \leq 2$, $C > 0$ y $\omega(k, \gamma) = \tan(\pi\gamma/2)$ si $\gamma \neq 1$, $\omega(k, \gamma) = (2/\pi) \ln(|k|)$ si $\gamma = 1$.

Los parámetros ζ y C son factores asociados a traslaciones ($x \rightarrow x + \text{cte.}$) y cambios de escala ($x \rightarrow rx$). Los parámetros importantes del teorema anterior son γ y β , por lo que las distribuciones estables se pueden escribir como $P(x) = L_{\gamma,\beta}(x)$. El parámetro γ caracteriza el comportamiento de $L_{\gamma,\beta}(x)$ para $x \gg 1$, y cumple con

$$\begin{aligned} L_{\gamma,\beta}(x) &\simeq |x|^{-(1+\gamma)}, \\ 0 < \gamma < 2. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

De la ec.(B.4) podemos ver que los momentos $\langle |x|^\delta \rangle$ de una distribución límite estable existen si y solo si $\delta < \gamma$.

Por otro lado el parámetro β nos dice que tan asimétrica es la distribución, es decir si $\beta = 0$ tenemos que $L_{\gamma,\beta}(x)$ es una función par de x mientras que para $\beta = \pm 1$ tenemos distribuciones completamente asimétricas. Es importante notar que si $\gamma = 2$ la dependencia de $L_{\gamma,\beta}(x)$ en β desaparece, ya que $\omega(\gamma, k) = 0$, recuperando así una distribución Gaussiana centrada en $x = \zeta$. Por lo tanto las distribuciones $L_{\gamma,\beta}(x)$ con $0 < \gamma < 2$ son distribuciones de Lévy, mientras que $L_{2,\beta}(x)$ corresponde a la distribución Gaussiana.

Finalmente el teorema del límite central generalizado nos dice [34]

Teorema 3 (*Teorema del límite central generalizado*): $P(x)$ pertenece al conjunto de distribuciones que convergen a la distribución límite estable $L_{\gamma,\beta}(x)$ si y sólo si $R(X) = \int_{-\infty}^X P(x)dx$ satisface:

1. $\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{R(-x)}{1-R(X)} = \frac{1-\beta}{1+\beta};$
2. $\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{1-R(X)+R(-X)}{1-R(rX)+R(rX)} = r^\gamma \quad \forall r.$

Para más información sobre este teorema ver [34] y las referencias ahí incluidas.

Apéndice C

Funciones de Mittag-Leffler.

Las funciones de Mittag-Leffler nacieron como una generalización de la función exponencial, lo cual es claro si uno ve su definición en términos de series. Dicha definición está dada por la siguiente expresión

$$E_{\alpha,\beta}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(\alpha k + \beta)}, \quad (\text{C.1})$$
$$\alpha > 0, \beta > 0,$$

donde $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{x-1} dt$.

De la ec.(C.1) podemos ver que si los parámetros α y β son números naturales, las funciones de Mittag-Leffler se reducen a muchas funciones conocidas de la física matemática, así como a varias combinaciones lineales de funciones exponenciales y polinomios. Como un ejemplo podemos ver que las funciones exponencial, coseno hiperbólico y seno hiperbólico se pueden escribir como

$$E_{1,1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{\Gamma(k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^k}{k!} e^z,$$
$$E_{2,1}(z^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{\Gamma(2k+1)} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{(2k)!} = \cosh(z), \quad (\text{C.2})$$
$$E_{2,2}(z^2) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k}}{\Gamma(2k+2)} = \frac{1}{z} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{z^{2k+1}}{(2k+1)!} = \sinh(z).$$

En este apéndice nos enfocaremos al caso particular de la ec.(C.1) donde $\beta = 1$.

Así como la función exponencial es solución de la siguiente ecuación diferencial

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}f(t) &= \lambda f(t), \\ f(0) &= 1 \implies \\ f(t) &= e^{\lambda t} = E_{1,1}(\lambda t),\end{aligned}\tag{C.3}$$

la función $E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$ es solución del problema de condiciones iniciales asociado a la siguiente ecuación diferencial fraccionaria

$$\begin{aligned}\frac{{}^c d^\alpha}{dt^\alpha}f_\alpha(t) &= \lambda f_\alpha(t), \\ f_\alpha(0) &= 1, \implies \\ f_\alpha(t) &= E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha), 0 < \alpha < 1.\end{aligned}\tag{C.4}$$

Para ver esto, aplicamos de derivada fraccionaria de Caputo de orden α a $E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$ escrita en términos de la ec.(C.1), es decir

$$\begin{aligned}\frac{{}^c d^\alpha}{dt^\alpha}E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha) &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^k \left(\frac{{}^c d^\alpha}{dt^\alpha} t^{k\alpha}\right)}{\Gamma(k\alpha + 1)} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^k t^{k\alpha - \alpha} \Gamma(k\alpha + 1)}{\Gamma(k\alpha + 1)\Gamma(k\alpha - \alpha + 1)} = \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda^k t^{\alpha(k-1)}}{\Gamma(\alpha(k-1) + 1)} = \lambda \sum_{k'=0}^{\infty} \frac{\lambda^{k'} t^{\alpha k'}}{\Gamma(\alpha k' + 1)} = \lambda E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha).\end{aligned}\tag{C.5}$$

Donde se utilizaron las propiedades de la derivada fraccionaria de Caputo mencionadas en el texto.

Ahora bien, aunque la transformada de Laplace de la función $f(t) = e^{\lambda t}$ puede ser fácilmente calculada mediante la aplicación de la definición de dicha transformada a la función exponencial, también podemos calcular $L(e^{\lambda t})$ aplicando la transformada de Laplace a la ec.(C.3) y despejando $L(e^{\lambda t})$, es decir

$$\begin{aligned}L\left(\frac{d}{dt}f(t)\right) &= \lambda L(f(t)) \implies \\ sL(f) - f(0) &= \lambda L(f) \implies \\ L(f) &= \frac{1}{s - \lambda} \implies \\ L(e^{\lambda t}) &= \frac{1}{s - \lambda}.\end{aligned}\tag{C.6}$$

De manera análoga podemos ver cual es la expresión de $E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$ en el espacio de Laplace, para esto sacamos la transformada de Laplace a la ec.(C.4)

$$\begin{aligned} s^\alpha L(E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)) - s^\alpha E_{\alpha,1}(0) &= \lambda L(E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)) \implies \\ L(E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)) &= \frac{s^{\alpha-1}}{s^\alpha - \lambda}. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

Donde se utilizó el hecho que la derivada fraccionaria de Caputo¹ es una convolución entre las funciones $t^{-\alpha}$ y $\frac{d}{dt}E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$.

Finalmente, es importante mencionar que el comportamiento asintótico de $E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha)$ cuando $t \gg 1$ está dado por

$$E_{\alpha,1}(\lambda t^\alpha) \sim \Gamma(1 - \alpha)\lambda t^{-\alpha}. \quad (\text{C.8})$$

Para más información sobre estas funciones ver [60, 61, 117].

¹Recuérdese que la derivada fraccionaria de Caputo de orden α con $0 < \alpha < 1$ de la función f está dada por: $\frac{{}^c d^\alpha f}{dt^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t (t-\tau)^{-\alpha} \frac{df}{d\tau} d\tau$.

Apéndice D

Condiciones de Turing en el espacio Fourier-Laplace para $\alpha = \beta = 1$.

Para el caso $\alpha = \beta = 1$ (difusión normal) la ec.(6.16) toma la siguiente forma

$$S(k, s) = s^2 + s(\delta k^2(D+1) - (a_{11} + a_{22})) - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + D\delta^2 k^4 + \det \quad (\text{D.1})$$

Por lo tanto, los ceros de la función $S(k, s)$ están dados por

$$\begin{aligned} s_+ &= \frac{\text{Tr}A(k)}{2} + \frac{\left((\text{Tr}A(k))^2 - 4h(k) \right)^{1/2}}{2}, \\ s_- &= \frac{\text{Tr}A(k)}{2} - \frac{\left((\text{Tr}A(k))^2 - 4h(k) \right)^{1/2}}{2}, \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$
$$\begin{aligned} \text{Tr}A(k) &= -\delta k^2(D+1) + (a_{11} + a_{22}), \\ h(k) &= D\delta^2 k^4 - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + \det. \end{aligned}$$

Si imponemos a la ec.(D.2) las condiciones dadas en la ec.(6.17) tenemos

$$\begin{aligned} a_{11} + a_{22} &< 0, \\ a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} &> 0, \\ D\delta^2 k^4 - \delta k^2(a_{11} + Da_{22}) + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) &< 0. \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

La última desigualdad de la ec.(D.3) es posible si y sólo si se cumplen las siguientes condiciones

$$\begin{aligned}(a_{11} + Da_{22}) > 0 &\implies D \neq 1, \\ \text{signo}(a_{11}) &\neq \text{signo}(a_{22}),\end{aligned}\tag{D.4}$$

recuperando así las ya familiares condiciones para la existencia de una inestabilidad de Turing en un sistema de reacción-difusión para dos compuestos químicos con difusión normal.

Bibliografía

- [1] Grégoire Nicolis, Ilya Prigogine, *Exploring complexity* W.H. Freeman and Company, New York (1989).
- [2] Grégoire Nicolis, Ilya Prigogine *Self-Organization in Nonequilibrium Systems*, Jonh Wiley and Sons (1977).
- [3] A.M.Turing, Philos.Trans.R.Soc.London, B237 (1952).
- [4] V.Castets, E.Dulos, J.Biossonade, and P.D. Kepper, Phys.Rev.Lett.**64** 2953 (1990).
- [5] Y.Kuramoto, *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*, Dover Publications, Mineola New York (2003).
- [6] R.A.Barrio, C.Varea, J.L.Aragón and P.K.Maini, Bulletin of Mathematical Biology, **61** (1999).
- [7] J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer Verlag (2003).
- [8] Altmann K.G., Gorman G.E., Saarloos W.v., Physics Reports, Volume **301**, 1 (1998).
- [9] J. von Hardenberg, E. Meron, M.Shachak, and Y.Zarmi, Phys.Rev.Lett **87**, 19801 (2001).
- [10] T.H. Solomon, Eric R. Weeks, and Harry L. Swinney, Phys.Rev.Lett.**71** 24 (1993).
- [11] Matthias Weiss, Hitoshi Hashimoto, and Tommy Nilsson, Biophysical Journal **84**, 4043 (2003).

- [12] Matthias Weiss, Markus Elsner, Fredrik Kartberg, and Tommy Nilsson, *Biophysical Journal* **87**, 3518 (2004).
- [13] M.I Rabinovich, A.B Ezersky, P.D. Weidman, *The Dynamics of Patterns*, World Scientific (2000).
- [14] M.C.Cross and P.C. Hohenberg, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 3 (1993).
- [15] Paul Manneville, *Dissipative Structures and Weak Turbulence*, Academic Press, San Diego (1990).
- [16] R.A. Fisher, *Ann. Eugenics*, **7**, 353 (1937).
- [17] V.M. Kenkre, *Physica A*, **342**, 242 (2004).
- [18] J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer Verlag, Berlin (1980), pp. 63-68.
- [19] A. Gierer, H. Meinhardt, *Kibernetik* **12**, 30 (1972).
- [20] H. Meinhardt and M. Klinger, *J.Theor.Biol.*, **126**, 63 (1987).
- [21] P.Gray and S.K.Scott, *J.Chem.Phys.*, **89**, 22 (1985).
- [22] O. Avila, D. Hernández, R. A. Barrio y L. Zhang, *Revista Especializada en Ciencias Químico-Biológicas*, **10**, 5 (2007).
- [23] I. Prigogine, R. Lefever, *J. Chem. Phys.* **48**, 1695 (1968).
- [24] K.Kyttä, K.Kaski and R.A.Barrio, *Physica A* **385**, 105 (2007).
- [25] I. Berenstein, M.Dolnik, L. Yang, A. Zhabotinsky and I.Epstein, *Phys.Rev.E*, **70**, 046219 (2004).
- [26] R.J. Field and R.M. Noyes, *J. Chem. Phys.* **60**, 1877 (1974).
- [27] J. Schnackenberg, *J. Theor. Biol.* **81**, 389 (1979).
- [28] I. Lengyel and I.R. Epstein, *Science*, **251**, 650 (1991).
- [29] R. FitzHugh, *Biophysics J.*, **1**, 445 (1961); J. S. Nagumo, S. Arimoto and S. Yoshizawa, *Proc. IRE*, **50**, 2061 (1962).

- [30] A. Beutner, L. Glass, Michael C. Mackey, Michèle S. Titcombe, *Nonlinear Dynamics in Physiology and Medicine*, Springer-Verlag, New York (2003).
- [31] Steven H. Strogatz, *Nonlinear Dynamics and Chaos with applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*, Westview Press (2000).
- [32] Shcer H., and Montroll E., Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids, *Phys Rev.B*, **7**, 4491 (1975).
- [33] Montroll E.W. and Weiss G.H., Random walks on lattices II, *J.Math.Phys.*, **6**, 167 (1965).
- [34] J.P. Bouchaud and A. Georges, *Phys. Rep.* **195**, 127 (1991).
- [35] Joseph Klafter, Michael F. Shlesinger and Gert Zumofen, Beyond Brownian Motion, *Physics Today* **49**, 33 (1996).
- [36] Albert Compte, Stochastic foundations of fractional dynamics, *Phys.Rev.E*, **53**, 4, 4191 (1996).
- [37] Ralf Metzler, Joseph Klafer, The Random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach, *Physics Reports* **339**, 1 (2000).
- [38] Ralf Metzler and Joseph Klafer, The restaurant at the end of the random walk: recent developments in the description of anomalous transport by fractional dynamics. *J.Phys.A:Math.Gen.* **37**, R161 (2004).
- [39] A.S. Chaves, *Phys Lett. A* **239**, 13 (1998).
- [40] Ralf Metzler and Joseph Klafter, Boundary value problems for fractional diffusion equations, *Physica A*, 278, 107 (2000).
- [41] Michael F. Shlesinger, George M. Zaslavsky and Joseph Klafter, Strange kinetics, *Nature*, Vol.**363**, 31 (1993).
- [42] F.Amblard, A.C.Maggs, B.Yurke, A.N.Pargellis, and S.Leibler, *Phys.Rev.Lett.***77**, 4470 (1996).
- [43] P.Lévy,*Théorie de l'Addition des Variables Aliétoires*, Guthier-Villars, Paris (1937).

- [44] Geisel T., Nierwetbeg J., and Zacherl A., Accelerated diffusion in Josephson junctions and related chaotic systems, *Phys.Rev.Lett.* **54**, 616 (1985).
- [45] Shlesinger M. F., West B. and Klafter J., Lévy dynamics of enhanced diffusion: application to turbulence, *Phys.Rev.Lett.* **58**, 1100 (1984).
- [46] A.Ott, J.P.Bouchaud, D.Langevin, and W.Urbach, Anomalous diffusion in living polymers: A Genuine Levy Flight?, *Phys.Rev.Lett.* **65**, 2201 (1990).
- [47] Cole B.J., Fractal time in animal behavior: the movement activity of drosophila, *J.Anim.Behav.* **50**, 1317 (1995).
- [48] Viswanathan G.W., Afanasyev V., Buldyrev S. V., Murphy E.J., Prince P.A., and Stanley H.E., Lévy flight search pattern of wandering albatrosses, *Nature Lond.***381**, 413 (1996).
- [49] D.del-Castillo-Negrete, B.A.Carreras, and V.E. Lynch, *Phys.Rev.Lett* **94**, 065003 (2005).
- [50] Mainardi F., Pagnini G. and Gorenflo R., *Appl.Math.Comput.* **187**, 295 (2007).
- [51] Scalas E., Gorenflo R., Mainardi F., Raberto M., *Fractals*, vol.**11**, p.281 Suppl.S (2003).
- [52] Alexander I.Saichev, George M.Zaslavsky, Fractional kinetic equations: solutions and applications, *Chaos* **7**, 4 (1997).
- [53] Daniel ben-Avraham and Shlomo, *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*, Cambridge University Press, United Kingdom (2004).
- [54] C. Varea and R.A. Barrio, *J.Phys.Condens.Matter* **16**, 1 (2004).
- [55] R.Hilfer, *Fractional Calculus in Physics*, World Scientific, Singapore (2000).
- [56] Diego del Castillo Negrete, Lecture notes presented at the Institute of Mathematics, UNAM, Mexico City, August (2005).

- [57] Damián H. Zanette, *Physica A* **252**, 159 (1998).
- [58] P.Paradisi, R.Cesari, F. Mainardi, F. Tampieri, *Physica A* **293**, 130 (2001).
- [59] R. Hilfer and L. Anton, *Phys. Rev. E* **51**, R848 (1995).
- [60] Mainardi F. and Gorenflo R., *J. Comput. Appl. Math.* **118**, p.283 (2000).
- [61] I. Podlubny, *Fractional differential equations*, Academic Press, San Diego (1999).
- [62] R. Hilfer, *Physica A* **329**, 35 (2003).
- [63] K. Miller and B. Ross, *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations*, John Wiley & Sons. Inc, Canada (1993).
- [64] W.Wyss, *J.Math.Phys.*, vol.**27**, no.11, (1986).
- [65] F. Mainardi, *Chaos, Soliton and Fractals*, vol.**7**, 1461 (1996).
- [66] K.S.Cole, Electric conductance of biological systems, *Proc. Cold Spring Harbor Symp. Quant. Biol.*, Cold Spring Harbor, New York, pp.107 (1933).
- [67] R.Hilfer, *Phys. Rev. E*, **48**, 2466 (1993).
- [68] N.N.Lebedev, *Special Functions and Their Applications*, Dover Publications Inc., New York (1972).
- [69] N.Heymans and I.Podlubny, arXiv:math-ph/0512028v1 (2005).
- [70] C. Li, W. Deng, *Appl.Math.Comput.* vol.**187**, 2 (2007).
- [71] K.B. Oldham, J. Spanier, *The Fractional Calculus*, Academic Press Inc., New York (1974).
- [72] Jerrold E. Marsden y Michael J.Hoffman, *Análisis Básico de Variable Compleja*, Trillas, México (1996).
- [73] B.I. Henry and S.L. Wearne, *SIAM J. Appl. Math.* **62**, 870 (2002).
- [74] B.I. Henry and T.A.M Langlands, *Phys.Rev.E* **72**, 026101 (2005).

- [75] T.A.M Langlands, B.I. Henry and S.L. Wearne SIAM J.Phys.Condens.Matter. **19**, 065115 (2007).
- [76] V.V. Gafiychuk, B.Yo. Datsko, Physica A **365**, 300 (2006).
- [77] Vasyl Gafiychuk, Bohdan Datsko, and Vitaly Meleshko, arXiv:nlin/0611005v3 [nlin.AO] (2006).
- [78] Thomas Hillen, J.Math.Biol. **35**, 49 (1996).
- [79] Matthias Weiss, Phys.Rev.E **68**, 036213 (2003).
- [80] B.I. Henry and T.A.M Langlands, Phys.Rev.E **74**, 031116 (2006).
- [81] F.Sagués, V.P. Shkilev and I.M. Sokolov, Phys.Rev.E **77**, 032102 (2008).
- [82] M.G.W Schmidt, F. Sagués and I.M. Sokolov J. Phys. Condens. Matter **19**, 065118 (2007).
- [83] G. Zumofen, J. Klafter, M.F. Shlesinger, Chem. Phys. **212**, 89 (1996).
- [84] German Drazer, Damián H. Zanette, Phys. Rev. E **60**, 5858 (1999).
- [85] R. Hilfer, Chemical Physics **284**, 399 (2002).
- [86] Igor Goychuk and Peter Hänggi, Phys. Rev. E **70**, 051915 (2004).
- [87] Ken Ritchie, Xiao-Yuan Shan, Junko K., Kokoro Iwasawa, Takahiro Fujiwara, and Akihiro Kusumi, Biophysical Journal **88**, 2266 (2005).
- [88] R.Metzler, J.Klafter, J.Jortner, M.Volk, Chem. Phys. Lett. **293**, 477 (1998).
- [89] B.I. Henry, S.L. Wearne, Physica A **276**, 448 (2000).
- [90] R. Gorenflo and F. Mainardi. Fractional oscillations and Mittag-Leffler functions. Technical Report preprint A-14/96, Freie Universitat Berlin, (1996)
- [91] Zaslavsky G.M., Stanislavsky A.A., Edelman M., Chaos **16**, (1), 013102 (2006).
- [92] R. Gorenflo, E.A. Abdel-Rehim, Journal of Computational and Applied Mathematics, **205**, 871 (2007).

- [93] M. Ciesielski and J. Leszczynski, *Computer Methods in Mechanics*, Poland (2003).
- [94] V. E. Tatarov and G.M. Zaslavsky, *Chaos* **16**, 023110 (2006).
- [95] V.E. Tatarov, *Journal of Physics A* **39**, 26, 8395 (2006).
- [96] V.E. Tatarov and G.M. Zaslavsky, *Physica A* **354**, 249, (2005).
- [97] P.W.Bates, P.C.Fife, R.A.Garden, C.K.R.T.Jones, *Physica D* **104**, 1, (1997).
- [98] A.J.Bray, *Advances in Physics* **43**, No.3, (1994).
- [99] Richard A. Gray, Oleg A. Mornev, José Jalife, Oleg V. Aslanidi, and Arkady M. Pertsov, *Phys. Rev. Lett.* **87** 16 (2001).
- [100] P. Grindrod, *The theory and Applications of Reaction-Diffusion Equations*, Oxford University Press Inc., New York (1996).
- [101] J. Smoller, *Shock Waves and Reaction Diffusion Equations*, Springer, Berlin (1994).
- [102] G.Zumofen, J. Klafter, and M.F.Shlesinger, *Phys. Rev. Lett* **77**, 2830 (1996); *Chem. Phys.* **212**, 89 (1996).
- [103] D. del-Castillo-Negrete, B. A. Carreras, and V. E. Lynch, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 018302-1 (2003).
- [104] D. H. Zanette, *Phys Rev E* **55**, 1181 (1997).
- [105] D. Hernández, R. Barrio and C. Varea, *Phys. Rev. E* **74**, 046116 (2006).
- [106] V.Méndez, S.Fedotov, W.Horsthemke, *EPL (Europhysics Letters)* **77**, 58006 (2007).
- [107] Aragón, J.L., Varea, C.,Barrio,R.A., Maini P.K., *FORMA* **13**, 154 (1998).
- [108] Aragón J.L., Torres M. Gil D., Barrio R.A., Maini, P.K., *Phys Rev. E* **65**, 051913 (2002).

- [109] Leppänen, T., Computational studies of pattern formation in Turing systems, Ph.D. thesis, Helsinki University of Technology (2004).
- [110] Coulet P., Elphick C., Repaux D., Phys.Rev.Lett.**58**, 431 (1987).
- [111] Kyoung J. Lee and Harry L. Swinney, Phys.Rev.E **51**, 1899 (1995).
- [112] R.E. Goldstein, D.J. Muraki, D.M. Petrich, Phys. Rev. E **53**, 4, 3933 (1996).
- [113] D.M. Petrich and R.E. Goldstein, Phys. Rev. Lett. **72**, 1120 (1994).
- [114] Nagai Y., González H., Shier A., Glass L., Phys.Rev. Lett. **84**, 4248 (2000).
- [115] J. Sundnes, G.T. Lines, X. Cai, B.F, Nielsen, K. Mardal and A. Tveito, *Computing the Electrical Activity in the Heart* Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2006).
- [116] Boris V. Gnedenko, *Theory of Probability*, Gordon and Breach Science Publishers, Amsterdam B.V (1997).
- [117] F. Mainardi, G. Pagnini, Comput. App. Math., doi: 10.1016/j.cam.2006.10.014 (2006).