

55

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO



FACULTAD DE CIENCIAS

ASPECTOS GEOMÉTRICOS Y DINÁMICOS
EN LA FORMACIÓN DE PATRONES

T E S I S

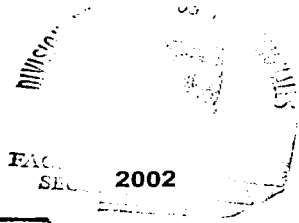
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
FÍSICO.

P R E S E N T A :
JAVIER TORALES MONTERO

DIRECTOR DE TESIS
DR. PABLO PADILLA LONGORIA



FACULTAD DE CIENCIAS
UNAM



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo receptivo.

NOMBRE: Javier Torales Martelo

FECHA: 27 de Nov de 2002

FIRMA: [Firma manuscrita]

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
DIRECCIÓN GENERAL DE BIBLIOTECAS



M. EN C. ELENA DE OTEYZA DE OTEYZA

Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunico a usted que hemos revisado el trabajo escrito:

Aspectos Geométricos y Dinámicos en la Formación de Patrones
realizado por Javier Torales Montero

con número de cuenta 09550429-0 , quién cubrió los créditos de la carrera de Física

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis Propietario	Dr. Pablo Padilla Longoria
Propietario	Dra. Carmen Varea Gilabert
Propietario	Dr. Pedro Miramontes Vidal
Suplente	Dr. Faustino Sánchez Garduño
Suplente	Dr. José Luis Mateos Trigos

Pablo Padilla L.

Carmen Varea

Pedro Miramontes Vidal

Faustino Sánchez Garduño

José Luis Mateos Trigos

Consejo Departamental de Física

Patricia Goldstein Menache

DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHE

I

Aspectos Geométricos y Dinámicos en la Formación de Patrones

Javier Torales Montero

26 de noviembre de 2002

Agradecimientos

Deseo dedicar esta tesis de manera muy especial a mi madre, pues sin ella nada de lo que he logrado hubiera sido posible. También deseo agradecer a mi hermano, por su amistad y compañía, y a mi padre, por su apoyo.

Quiero agradecer especialmente al Dr. Pablo Padilla por su interminable paciencia, su gusto por enseñar, y su amistad.

A todos mi amigos, por su entrañable apoyo y cariño.

III

Índice general

Agradecimientos	i
Introducción	v
1. Nociones básicas	1
1.1. Sistemas termodinámicos fuera del equilibrio	1
1.2. Convección térmica de Rayleigh-Bénard	4
1.3. Reacción Belousov-Zhabotinsky	6
1.4. Mecanismo de Turing	10
1.5. Autoorganización	13
2. Sistemas de reacción y difusión	15
2.1. Formación de patrones en biología	15
2.2. Algunos sistemas de reacción y difusión	23
2.3. Análisis lineal	26
3. Filotaxis	33
3.1. Modelo geométrico	34
3.2. Filotaxis como sistema de reacción y difusión	45
3.3. Filotaxis como sistema dinámico	52
4. Patrones Convectivos	55
4.1. Ecuaciones de Navier-Stokes	55

4.2. Análisis lineal	65
4.3. Patrones convectivos y filotaxis	72
Conclusiones	77
A. Ley de acción de masas y modelo Field-Noyes	79
B. Deducción de las ecuaciones de reacción y difusión	81

Introducción

El término autoorganización se aplica a sistemas complejos donde se percibe alguna clase de actividad, patrón o dinámica coordinados. En este sentido, podemos decir que un sistema se autoorganiza, cuando a través de algún comportamiento complejo surgen correlaciones de largo alcance, ya sean éstas espaciales o temporales.

La formación de patrones es una consecuencia muy llamativa del fenómeno de autoorganización. Los podemos encontrar tanto en sistemas físicos como biológicos y químicos, dando lugar a una gran riqueza de formas y estructuras. El fenómeno mismo de la vida se sustenta y recrea en procesos complicados de autoorganización donde surgen una gran variedad de patrones que contienen parte de la belleza y complejidad de las formas vivientes.

Resulta sumamente interesante tratar de comprender los mecanismos intrínsecos que producen que un sistema salga del aparente desorden y se autoorganice. Es necesario hacer notar que este proceso se da en sistemas abiertos y fuera del equilibrio. Se han observado una gran variedad de sistemas que pasan del desorden a un régimen de autoorganización al modificarse algún parámetro o cantidad física. Esto permite el estudio de dichos sistemas en el laboratorio, donde el científico es capaz de controlar ese parámetro, e identificar el dominio donde aparece el fenómeno.

En este trabajo abordamos el estudio de la formación de patrones en dos sistemas principalmente, que aunque provenientes de distintas áreas del conocimiento científico, la Física y la Biología, presentan aspectos geométricos y dinámicos en común. Estudiamos por un lado, el fenómeno de morfogénesis en un tipo de filotaxis plana, y por otro, analizamos la formación de los patrones convectivos de Bénard. Ambos procesos de autoorganización están relacionados por varias razones, y ello se puede observar a simple vista; los patrones en los dos sistemas son muy similares. La causa más importante de esta similitud es que ambos pueden ser considerados como soluciones a un problema variacional: el llamado empaquetamiento de discos. En este contexto, dichos patrones son la estructura resultante del acomodo de celdas, con tamaños y formas aproximadamente iguales, en una región espacial plana,

de tal manera que dos condiciones geométricas son satisfechas: los centros de las celdas se alejan unos de otros tanto como es posible, al mismo tiempo que el patrón está constituido por el mayor número de celdas posibles. En el caso de la filotaxis que estudiamos, las celdas representan pétalos u otros órganos presentes, por ejemplo, en la corola de una flor, como la margarita o el girasol. En el caso del sistema hidrodinámico, el patrón está constituido por celdas de convección. Aunque abordamos únicamente el caso plano, varios de los resultados que obtenemos pueden ser generalizados a la formación de filotaxis cilíndrica.

Podemos emplear varios enfoques en el estudio de la formación de filotaxis, los cuales clasificamos en dos tipos básicos: aquellos que buscan explicar el fenómeno a partir de primeros principios, y aquellos que lo describen a partir de sus características globales. En este trabajo presentamos ambos enfoques al estudiar primero los aspectos geométricos para después proponer un mecanismo químico, basado en procesos de reacción y difusión como responsable de su morfogénesis. Estos procesos generan una dinámica tipo Turing, en donde la difusión es el factor de desestabilización local. Esta propuesta se fundamenta en resultados recientes ([5], [6] y [19]) que demuestran la existencia de estados en sistemas de reacción-difusión, caracterizados por la existencia de zonas muy localizadas de alta concentración de uno de los reactivos, conocidas como manchas o picos, cuya configuración obedece el principio variacional mencionado arriba. Por otro lado, las simulaciones realizadas por Meinhardt, Koch y Bernasconi [11] muestran como el mecanismo morfogenético que hace posible la ubicación de nuevos órganos en el meristemo, puede ser resultado de la dinámica de un sistema de reacción-difusión compuesto de tres sustancias; dos de ellas interactúan entre sí como activador e inhibidor, mientras que la tercera funciona como marcador en un mecanismo de *memoria*. Nuestra propuesta señala a un sistema de tipo activador-inhibidor, con dos sustancias únicamente, como responsable de la formación de filotaxis plana, no solo en el meristemo, sino en toda la corola. La ubicación de nuevos órganos en el meristemo es consecuencia, bajo esta propuesta, del principio variacional inherente a la dinámica de nuestro sistema y no de un *segundo inhibidor* como proponen Meinhardt *et al* (vease [11]).

Este trabajo está organizado como sigue. En el primer capítulo presentamos aspectos generales del fenómeno de autoorganización y algunos ejemplos del mismo, con el objetivo de familiarizarnos con el tema. En el segundo, establecemos los conocimientos preliminares de los sistemas de reacción-difusión y la inestabilidad de Turing que empleamos en el tercer capítulo, donde exponemos nuestra propuesta central para explicar la emergencia de filotaxia en flores. En el cuarto capítulo hacemos un estudio global de los patrones convectivos de Bénard y establecemos la similitud entre ellos y los patrones en filotaxis.

Nos gustaría utilizar este espacio para hacer énfasis en la importancia que tiene

para la Física y las Matemáticas el estudio de filotaxis. En primer lugar, la filotaxis puede considerarse como un tipo de cristalografía, y desde los inicios de esta rama de la ciencia, aquella ha jugado un papel muy relevante, pues muestra regularidades y condiciones geométricas propias de la formación de redes cristalinas. Por otro lado, la filotaxis muestra procesos dinámicos complejos, y su estudio es un cruce de caminos de diferentes disciplinas como la botánica, la teoría de ecuaciones diferenciales parciales y el cálculo de variaciones. Por último, la formación de filotaxis es un ejemplo fascinante de la capacidad de autoorganización de los sistemas vivos. El estudiar y describir los mecanismos encargados de este proceso puede conducir, eventualmente, a una mayor comprensión de la emergencia de simetrías en organismos vivos.

Capítulo 1

Nociones básicas

En este primer capítulo hacemos una descripción conceptual del fenómeno de autoorganización, y presentamos una colección de ejemplos en el que éste se da. Este fenómeno es sumamente vasto, tanto en los múltiples enfoques y teorías que se usan para su descripción, como en la evidencia empírica que de él tenemos disponible. Por supuesto que no pretendemos abarcar todas las facetas de este fascinante tema, pero esperamos que lo expuesto en este capítulo sea un buen punto de partida para el desarrollo posterior, y dé una idea de la profundidad que puede alcanzar su estudio.

1.1. Sistemas termodinámicos fuera del equilibrio

Debido a que el estudio de la formación de patrones hace uso en gran medida del andamiaje que provee la termodinámica, gran parte del vocabulario que se emplea proviene de esta. En esta sección pretendemos hacer un repaso general muy breve sobre algunos conceptos clave de la termodinámica que estaremos usando constantemente¹.

Cuando queremos estudiar algo tendemos a *aislarlo* del medio que lo rodea - generalmente esto lo hacemos en nuestra mente- y enfocarlo de manera exclusiva. En la Física como en otras ciencias, llamamos *sistemas* a aquellas regiones acotadas del espacio o aquellas porciones finitas de materia, que son sujetos de estudio. Por ejemplo, podríamos escoger como nuestro sistema a una neurona del cerebro lo

¹Gran parte de los conceptos presentados en esta primera sección pueden encontrarse y revisarse en [20]

mismo que al fluido que se encuentra dentro del pistón de un automóvil. Aislar el sistema de sus alrededores implica reconocer o establecer sus fronteras.

Una vez que hemos delimitado nuestro sistema, el paso siguiente es definir ciertas cantidades (variables físicas, químicas, etc.) que nos permitan hacer una descripción de él. Aquí encontramos dos diferentes tipos de enfoques: el macroscópico y el microscópico. Si queremos analizar al sistema desde un punto de vista macroscópico, entonces las cantidades mediante las cuáles lo describamos deberán provenir, hasta cierto punto, de nuestra percepción sensorial; mientras que desde el punto de vista microscópico esa condición no se cumple. Así por ejemplo, las cantidades macroscópicas que describen al fluido en el pistón pueden ser su presión, volumen y temperatura. Estas cantidades tienen como importante característica que son medibles. Microscópicamente consideramos al sistema como el conjunto de una gran cantidad de moléculas interactuando entre sí. La descripción microscópica entonces, requiere una gran cantidad de variables (la velocidad de cada molécula, por ejemplo), que difícilmente serán medibles; mientras que en el nivel macroscópico las variables son pocas, y tienen la característica de que representan promedios de las variables microscópicas.

La Termodinámica se concentra principalmente en encontrar y describir las relaciones que existen entre aquellas variables que representan el estado *interior* de un sistema. Para tener una mejor idea de qué queremos decir cuando hablamos del estado interior, tomemos como ejemplo el pistón de un automóvil. Este sistema en su totalidad (el pistón y el fluido contenido) tiene la misma velocidad promedio que el auto, pero tiene una temperatura promedio diferente. La velocidad a la que se mueve no tiene relación con su estado interno, mientras que la temperatura sí. Es por ello que la temperatura es una variable termodinámica mientras que la velocidad del auto no lo es.

Equilibrio termodinámico

Hemos visto que para poder describir a un sistema de manera interna, es necesario especificar un cierto número de variables termodinámicas. Cuando un sistema alcanza un estado tal, que dichas variables tienen un valor que no cambia con el tiempo, siempre que las condiciones externas al sistema no cambien, se dice que el sistema está en equilibrio.

Tomemos como ejemplo de sistema al café contenido en una taza. Algunas posibles variables termodinámicas son su temperatura, masa, presión y volumen. En este caso, todos hemos percibido como nuestro sistema alcanza un estado de equilibrio: dejándolo reposar, el café termina por enfriarse. Si midiéramos su temperatura una vez que se enfrió, observaríamos que no cambia (al menos de manera significativa), siempre que la temperatura de la habitación en la que estamos tam-

bien se mantenga constante.

Existen diferentes tipos de equilibrio. El equilibrio *mecánico* se alcanza cuando no existe ninguna fuerza sin balancear en el interior del sistema, ni entre el sistema y sus alrededores. Aun cuando dentro del sistema existan diferentes tipos de fuerzas actuando, estas fuerzas se pueden anular unas a otras, teniendo como resultado global una fuerza total nula. Por ejemplo, un puente está en equilibrio mecánico aun cuando actúa sobre él la fuerza gravitacional. Dicha fuerza se anula con otras de reacción propias de la estructura rígida del puente. Su estado de equilibrio se refleja en el hecho de que no se cae.

Por otra parte, si el sistema además de estar en equilibrio mecánico, no sufre ningún cambio en su estructura interna, ya sea por alguna reacción química o por flujo de material en un proceso de difusión, entonces se encuentra en equilibrio *químico*.

Una tercera clase de equilibrio es el *térmico*. A diferencia de los anteriores, este se define para dos o más sistemas. Cuando hablamos de dos sistemas que interactúan entre sí, es necesario determinar el tipo de frontera que los separa. Las fronteras *adiabáticas* son aquellas que no permiten ningún tipo de interacción entre los sistemas. En el caso de la taza de café, los sistemas pueden ser el café mismo y el aire contenido en la habitación, mientras que la frontera es la taza (suponiendo que tenga tapa). Dicha frontera no puede ser considerada adiabática, debido a que permite el paso del calor, dando como resultado que el café se enfríe. De hecho, las fronteras adiabáticas son ideales, aunque es posible conseguir algunas buenas aproximaciones como puede ser un recipiente térmico costoso que mantenga al café caliente. A las fronteras que permiten el paso de calor de un sistema a otro, se les llama *diatérmicas*. Estas son mucho más comunes que las anteriores. Cuando tenemos dos sistemas separados por una frontera diatérmica, algunas variables termodinámicas comenzarán a cambiar de valor -la temperatura del café disminuye-hasta alcanzar un valor estable -café frío-. En ese momento ambos sistemas alcanzan un equilibrio térmico. Por lo tanto, un sistema alcanza un estado de equilibrio térmico cuando, aparte de satisfacerse las condiciones de equilibrios mecánico y químico, no hay cambio en el valor de las variables termodinámicas cuando se encuentra separado de los alrededores por una frontera diatérmica.

Cuando en un sistema se cumplen las condiciones de equilibrio mecánico, químico y térmico, entonces decimos que ha alcanzado un estado de equilibrio *termodinámico*.

Sistemas abiertos y fuera del equilibrio

Es un hecho comprobado experimentalmente que todos ² los sistemas presentan una tendencia hacia los estados de equilibrio. El ejemplo de la taza de café es muy ilustrativo. Es por ello que, para que un sistema se mantenga fuera del equilibrio, es necesario que exista algún factor externo que lo *empuje*, con lo cual es necesario que sus fronteras le permitan algún tipo de interacción con el exterior. A los sistemas que cuentan con ese tipo de fronteras se les conoce como *abiertos*.

La mayoría de los sistemas que encontramos de manera natural son abiertos. Un ejemplo muy familiar es nuestro propio organismo, el cual, para nuestra fortuna, se encuentra fuera del equilibrio termodinámico. Los sistemas abiertos y fuera del equilibrio son especialmente relevantes, pues en ellos se presenta el muy interesante fenómeno de autoorganización. Más adelante damos una definición compacta de este concepto, pero antes de hacerlo preferimos introducirlo a partir de ejemplos particulares.

1.2. Convección térmica de Rayleigh-Bénard

El sistema convectivo de Rayleigh-Bénard ha sido uno de los más estudiados y es un fenómeno prototípico de la formación de patrones. Gran parte del entendimiento que de ellos se ha alcanzado se debe a este sistema [3].

En 1900, Henri Bénard descubrió que al calentar por debajo un fluido (dejando la superficie libre), se formaba un patrón más o menos regular de celdas convectivas hexagonales. Posteriormente en 1916, John William Strutt Lord Rayleigh explicó dicho fenómeno como el resultado de la inestabilidad generada en el sistema, debido a la fuerza de flotación que sufren las capas inferiores del fluido al aumentar su temperatura. Actualmente, el fenómeno convectivo descubierto por Bénard no se explica nada más mediante la inestabilidad generada por la fuerza de flotación, sino se agregan otras fuerzas que están relacionadas con la tensión superficial y la temperatura. Sin embargo, al proceso convectivo generado por la fuerza de flotación se le conoce como convección térmica de Rayleigh-Bénard, mientras que al inducido por la tensión superficial se le conoce como convección de Marangoni.

En su forma ideal, la convección de Rayleigh-Bénard consiste de un fluido entre dos placas paralelas, infinitas y perfectamente conductoras de calor (ver fig.(1.1)). Cuando la temperatura de las placas es idéntica $-\Delta T = T_2 - T_1 = 0$, el sistema alcanza un estado de equilibrio térmico, donde el fluido es homogéneo e isotrópico. Este estado es estable, dado que si se aplica una pequeña perturbación al sistema (elevando ligeramente la temperatura de la placa inferior por un intervalo de tiempo corto), eventualmente el sistema regresa al estado de equilibrio [16]. Hasta

²Salvo que se descubra alguno que no lo haga.

aquí, el sistema descrito es muy aburrido pues todos los elementos del fluido se ven idénticos en todos los puntos. Las condiciones cambian cualitativamente cuando elevamos la temperatura de la placa inferior T_2 progresivamente y *empujamos* al sistema fuera del equilibrio. Para ΔT cercana a cero, el sistema se mantiene en reposo ³ y una diferencia de temperaturas surge entre las placas (la temperatura va disminuyendo conforme nos acercamos a la placa superior). Este estado recibe el nombre de *estado de conducción*. Ahora vemos condiciones claramente distintas a las del equilibrio térmico, pues encontramos un rompimiento de homogeneidad. Debido a la expansión térmica que sufre el fluido cuando aumenta su temperatura, la densidad de las capas inferiores es menor, situación que puede derivar en inestabilidad puesto que el sistema está sumergido en un campo gravitacional: aparece una fuerza de flotación F_f que empuja las capas inferiores hacia arriba. El sistema se vuelve inestable cuando esta fuerza es capaz de superar los efectos disipativos derivados de la conducción térmica y la viscosidad [3].

Podemos definir entonces un parámetro ⁴ de control R como el cociente de la fuerza de flotación entre la fuerza estabilizadora consecuencia de la disipación. Se puede verificar que R es directamente proporcional a ΔT debido a que si aumentamos la temperatura de la placa inferior, la fuerza de flotación se incrementa. Se ha observado que la inestabilidad se presenta cuando R alcanza el valor crítico $R_c \simeq 1708$ independientemente del fluido que se tenga [3]. Cuando el sistema cruza el umbral, determinado por ese valor crítico, el sistema se autoorganiza formando células de convección, donde el calor es transportado mediante regiones de material caliente que sube y regiones donde el material frío baja.

La formación de este patrón convectivo nos sirve para ilustrar los aspectos típicos del proceso de autoorganización. El sistema se mantiene fuera del equilibrio mediante la inyección de energía, generándose así la inestabilidad para determinado dominio de un parámetro de control. La inestabilidad encierra un proceso de *retroalimentación*: cuando el parámetro de control cruza el umbral del valor crítico, los elementos de fluido en las capas inferiores necesitarán de una pequeña perturbación (quizá el choque entre dos moléculas) para comenzar a subir empujados por la fuerza de flotación. Esta perturbación, que en el régimen de equilibrio tendería a desaparecer, crece y da paso a un patrón de convección, rompiendo la homogeneidad. Vemos finalmente que el sistema pasa de un régimen de comportamiento simple, donde lo relevante son las interacciones moleculares de orden microscópico, a un régimen con orden y coherencia, donde ciertas correlaciones de alcance

³Refiriéndose a que no hay movimiento en escala macroscópica aunque a nivel atómico las moléculas estén en continuo movimiento.

⁴Este parámetro tiene la forma adimensional $R = \frac{\alpha g \Delta T d^3}{\nu \kappa}$ con α como el coeficiente de expansión térmico, g la aceleración gravitacional, d la distancia entre las placas, κ el coeficiente de difusión térmica y ν la viscosidad cinemática.

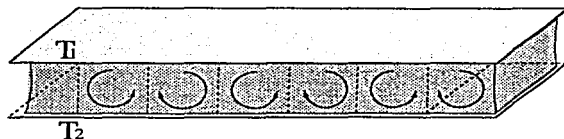


Figura 1.1: Sistema Convectivo de Benard, en el que podemos observar la formación de celdas convectivas.

macroscópico juegan un papel muy importante en la dinámica: Cuando una célula convectiva gira en el sentido de las manecillas del reloj, las adyacentes lo hacen en sentido contrario. Por otra parte, el sistema no tiene un único estado posible para el mismo valor del parámetro. El estado más sencillo es el que presenta células convectivas cuadradas. Sin embargo, la superposición de ellas formando hexágonos también es posible [3].

Es importante resaltar que el rompimiento de una simetría espacial, caracterizada por la homogeneidad e isotropía del sistema, para dar lugar a otras con mayor complejidad, encierra en sí el proceso de formación de patrones.

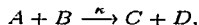
1.3. Reacción Belousov-Zhabotinsky

Existe una gran variedad de sistemas químicos que presentan el fenómeno de la autoorganización. Estos sistemas han sido ampliamente estudiados, particularmente con mucha intensidad a partir de la década de los ochentas del siglo pasado, debido a la interesante diversidad de estructuras y comportamientos que en ellos observamos. En particular, uno de los aspectos que los hace muy atractivos para el estudio es que presentan, con mucha frecuencia, comportamientos oscilatorios análogos a los observados en la mayoría de los sistemas biológicos. Dado que en el estudio de estos últimos, el entendimiento de los fenómenos oscilatorios es fundamental, dichos sistemas químicos cobran especial relevancia.

Pensemos por ejemplo en el corazón. Este órgano está constituido por una gran cantidad de células musculares especializadas. Cada una de las cuales, realiza una función relativamente simple: al recibir determinado estímulo externo la célula se contrae, y después de ello, permanece inactiva un corto periodo de tiempo en el cuál, vuelve al estado previo a la contracción. Dos cosas debemos notar en este ejemplo: en primer lugar, las contracciones rítmicas, del corazón en su conjunto, son el resultado de la acción concertada de un número grande de elementos constitutivos

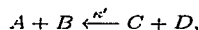
simples, y en segundo, cada célula se contrae en respuesta a un estímulo (eléctrico) que viaja a través del tejido cardíaco. Ambos fenómenos, tanto las contracciones globales del corazón como el estímulo viajero que las produce, son oscilatorios, y pueden ser modelados por comportamientos análogos, observados en reacciones químicas como la de Belousov-Zhabotinsky (B-Z). Más adelante profundizaremos en este ejemplo, pero por lo pronto estudiemos brevemente algunos aspectos de las reacciones en general.

Consideremos un sistema químico representado por la ecuación

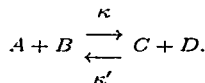


donde A y B son dos tipos de moléculas que interactúan para formar otros dos tipos C y D . κ es una constante que representa el ritmo al que se lleva a cabo la reacción. Mientras mayor es κ , más rápido se están produciendo los elementos C y D , y disminuyendo las concentraciones de los reactivos A y B .

Si el sistema se mantiene cerrado (no entra ni sale energía pero tampoco materia), después de un tiempo suficientemente largo el sistema alcanza el equilibrio químico, situación análoga al sistema de Raleigh-Bénard cuando la temperatura de las placas es la misma. Esto sucede como consecuencia de la existencia de una reacción inversa:



que compensa la acción de la directa:



Cuando se alcanza el equilibrio químico, la velocidad (V_r) de la reacción directa es igual a la velocidad (V_i) de la inversa. En donde, por la ley de acción de masas (ver apéndice A), $V_r = \kappa[A][B]$ y $V_i = \kappa'[C][D]$; donde denotamos por $[X]$ a la concentración del reactivo X . Por lo tanto, el equilibrio químico está caracterizado por la aparición de un cociente (α) de concentraciones constante. Es decir, como $V_r = V_i$, entonces

$$\alpha = \frac{\kappa}{\kappa'} = \frac{[C][D]}{[A][B]}. \quad (1.1)$$

Como en el caso del sistema convectivo, buscamos sacar al sistema del equilibrio para buscar comportamientos complejos y más interesantes. Esto se logra *abriendo* el sistema. En este caso en particular, una manera de hacerlo es inyectando

moléculas del tipo *A* y *B* o extrayendo moléculas del tipo *C* y *D*, de tal forma que la condición de equilibrio dada por la ecuación (1.1) no se cumpla:

$$\frac{[C][D]}{[A][B]} \neq \alpha.$$

En estas condiciones un fenómeno típico es el de *autocatálisis*, análogo al proceso de retroalimentación del sistema convectivo, donde la presencia de una sustancia aumenta su producción de manera indirecta. Nuevamente, en el estado de equilibrio, cualquier pequeña perturbación tendería a disminuir. El fenómeno de autocatálisis se caracteriza por que dichas perturbaciones se amplifican -este fenómeno hace posible, por ejemplo, el almacenaje y transmisión de la información genética en las células, debido a que el material genético se sintetiza gracias a la presencia de proteínas, sintetizadas a su vez por material genético-.

Reacción Belousov-Zhabotinsky

La historia del descubrimiento de esta reacción es memorable, pues en ella no solo encontramos el hallazgo de uno de los paradigmas de la formación de patrones en sistemas químicos, sino que además podemos observar cómo el escepticismo natural del medio científico en ocasiones puede producir actitudes muy cerradas, que incluso pueden obstruir el propio avance de la ciencia.

El primero en descubrirla fué el científico soviético Boris Pavlovich Belousov [15] a mediados del siglo pasado, quien estaba interesado en obtener una reacción con una cinética análoga a la observada en el ciclo del ácido cítrico (conocido como ciclo de Krebs). Este último consiste en una sucesión de reacciones químicas de vital importancia para el metabolismo de los organismos aeróbicos. La idea de Belousov consistía en oxidar el ácido cítrico mediante iones metálicos, y no mediante enzimas catalíticas como sucede en los organismos vivos. Para este propósito utilizó iones de bromato (BrO_3^-), y cerio, el cual presenta dos estados (Ce^{3+} y Ce^{4+}), como catalizador. El resultado fue inesperado: a lo largo de la reacción el cerio alternaba entre sus dos estados, y el periodo de tiempo que duraba en cada uno de ellos era aproximadamente de un minuto. Visualmente el proceso era espectacular, pues cada estado de la sustancia le confería un color particular a la solución: amarillo e incoloro. En diferentes ocasiones, Belousov intentó publicar los resultados obtenidos, y sus artículos fueron rechazados repetidamente. El argumento principal para ello se basaba en una de las leyes de la termodinámica, mediante la cual se decía que todo sistema químico tendía al equilibrio, y que por lo tanto las oscilaciones eran imposibles. No entendían los editores, que un sistema puede tender al equilibrio de manera oscilatoria, como de hecho sucede con esta reacción. Tal fue la frustración de Belousov, que incluso decidió retirarse de la investigación

científica. Pasaron varios años hasta que Anatoly Zhabotinsky continuara con los estudios de Belousov, y por fin la reacción fuera conocida bajo el nombre de estos dos científicos.

La cinética de la reacción B-Z es complicada y varios modelos se han propuesto y estudiado. En el apéndice A mostramos brevemente el modelo Field-Noyes cuya cinética es una buena aproximación. En este espacio solo haremos una descripción cualitativa del comportamiento, y de algunos fenómenos observados. A grandes rasgos, el proceso de la reacción puede separarse en dos partes [15]. Cada una de ellas determinada por el comportamiento de la concentración de los iones de bromato. En la primera, dicha concentración va disminuyendo, hasta llegar a niveles relativamente pequeños, mientras que en la segunda, vuelve a incrementarse, como consecuencia de la acción de los iones de Ce^{4+} . La presencia de de estos, promueve la producción del bromato, al mismo tiempo que se descompone en Ce^{3+} . Una vez que el bromato se restituye a sus niveles iniciales, el proceso comienza de nuevo.

¿Por qué la cinética de la reacción B-Z puede servir como modelo químico de lo que sucede en algunos sistemas biológicos, en particular en el corazón? La respuesta a esta pregunta proviene de dos propiedades muy importantes que presenta dicha reacción, las cuáles son características de los sistemas biológicos: la excitabilidad y la autoorganización.

Para hablar en términos abstractos, la excitabilidad es la característica que presenta un sistema cuando a partir de determinado estímulo, su estado cambia drásticamente, para después de cierto periodo de tiempo⁵, regresar nuevamente al estado inicial. Podemos ilustrar esta propiedad pensando nuevamente en una célula del tejido cardíaco. Para que esta se contraiga necesita recibir un estímulo eléctrico, -el cuál, de hecho, necesita ser de intensidad superior a cierto umbral; de no ser así, la respuesta celular no se da.- Una vez que ello ha sucedido, pasa determinado lapso de tiempo para que la célula esté nuevamente en condiciones apropiadas para contraerse. El mismo tipo de comportamiento es observado en la reacción B-Z: una disminución en la concentración de iones de bromato, -siempre que sea suficientemente grande,- origina el ciclo de reacciones mencionado. Cuando ello sucede, el sistema pasa por muchos estados, antes de volver al inicial.

La otra propiedad, la autoorganización, puede por el momento concebirse como la capacidad de generar estructuras espaciales y temporales organizadas, como consecuencia de la dinámica interna del sistema, -o de la interacción entre los elementos constitutivos-. En el caso del corazón, el impulso que genera la contracción se transmite como una onda viajera. Lo mismo sucede en la reacción B-Z, con las perturbaciones en las concentración de iones. Estas últimas han sido estudiadas en reacciones llevadas a cabo en películas delgadas, buscando que el dominio espacial

⁵Conocido como periodo refractario.

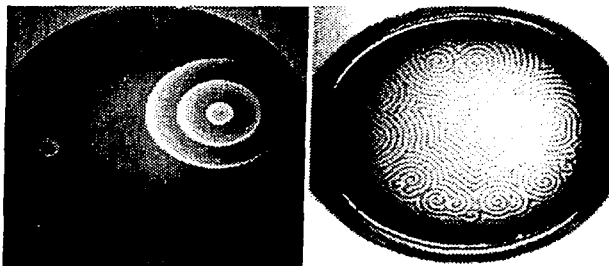


Figura 1.2: Frentes de onda circulares y espirales en la reacción Belousov-Zhabotinsky.

sea aproximadamente bidimensional. Las ondas generadas pueden estudiarse con cierta facilidad, debido al cambio de color de la sustancia. Cuando el sistema es perturbado en una pequeña región, una onda circular es generada. Si esto se realiza en forma periódica, se pueden observar ondas circulares concéntricas (ver imagen 1.2). Por otro lado, cuando una onda circular se rompe, -lo cuál puede suceder por la presencia de pequeñas inhomogeneidades en el medio-, los extremos giran en sentidos opuestos; la perturbación se transmite con la forma de dos espirales rotando (ver imagen 1.3). Este tipo de estructuras ordenadas (ondas circulares y en espiral) son observadas con mucha frecuencia en sistemas excitables. Para seguir con nuestro ejemplo, diremos que las ondas en espiral en el tejido del corazón son el presagio del fenómeno conocido como *fibrilación*, que generalmente antecede al paro cardiaco.

Estos ejemplos nos han servido para delinear una característica esencial del proceso de autoorganización, y de la emergencia de patrones espaciales: ambos son consecuencia de factores endógenos del sistema. Más adelante volveremos a este punto.

1.4. Mecanismo de Turing

El fenómeno de la vida engloba múltiples procesos de autoorganización que se caracterizan por su complejidad y riqueza de formas y patrones. Dentro de la biología, y en particular en embriología, existen procesos que su comprensión

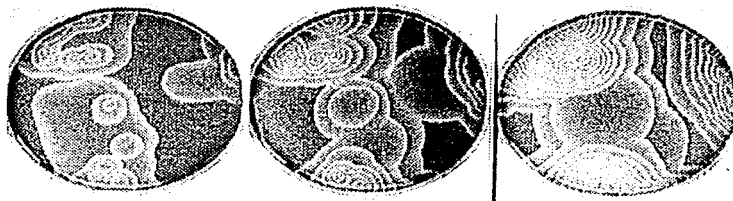


Figura 1.3: Frentes de onda espirales en la reacción Belousov-Zhabotinsky



Figura 1.4: El fenómeno de la vida engloba una gran variedad de procesos de autoorganización y algunas de sus simetrías saltan a la vista

representa un reto para la ciencia. Desde los patrones y simetría que se encuentran en el pelaje de un leopardo o la piel de un reptil, hasta el proceso de diferenciación espacial que requieren las células de un embrión para formar los distintos órganos y sistemas, la autoorganización juega un papel sustancial en la creación de las formas vivientes. En esta sección analizaremos sólo uno de los modelos propuestos para explicar la morfogénesis de ciertas estructuras biológicas, que ha servido para disparar y encauzar la investigación en formación de patrones. Dicho modelo se conoce como mecanismo de Turing.

Después de la fertilización, las células en un embrión comienzan a multiplicarse. En esta parte del proceso, todas las células son idénticas; el embrión es una masa homogénea pluricelular. Cuando se alcanza un número determinado de células,

estas comienzan a diferenciarse -en un sentido biológico-, dependiendo del lugar en el que estén. Este proceso de diferenciación implica el surgimiento de determinado patrón espacial y los mecanismos que lo hacen posible aun no están completamente descritos.

Otro ejemplo biológico de surgimiento espacial de patrones, lo encontramos en la piel de algunos mamíferos como los leopardos o jirafas, donde la simetría espacial es evidente a simple vista. En general, el mecanismo (o mecanismos), que genera tal o cual patrón en las formas vivientes no está completamente determinado. Se sabe que la información necesaria se encuentra almacenada genéticamente, pero no se sabe el proceso específico que sigue la célula para, a partir de dicha información, convertirse en parte del sistema nervioso y no del corazón, o teñirse de negro y no de blanco.

Como base para entender el modelo propuesto por Turing, es necesario hacer referencia a Lewis Wolpert, quien propuso la forma en que las células "podrían saber como comportarse" a partir de su posición espacial [15]. Él sugirió que las células estarían programadas, a partir de su información genética, para reaccionar ante algunas sustancias químicas presentes en el medio ambiente inmediato. La presencia de alguna de estas sustancias, llamadas morfógenos por su supuesta participación en la creación de los patrones, provocaría que la célula actuara de alguna forma determinada (comportándose como célula del corazón o del hígado, según el caso). Por lo tanto, el patrón espacial estaría predeterminado por la distribución espacial de los morfógenos. Esta teoría ha sido corroborada hacia finales del siglo pasado, pues se ha logrado comprobar que, en general, ciertos productos genéticos (proteínas o enzimas) son responsables de la morfogénesis en organismos vivos.

Sin embargo, aun cuando en un sistema podamos identificar plenamente la existencia de morfógenos, la pregunta que surge es relativamente la misma que se tenía al principio: ¿Cómo son los mecanismos mediante los cuales estas sustancias se autoorganizan y forman un patrón espacial, que sirve de mapa guía para las células del embrión? Un mecanismo plausible fue propuesto por Turing (1952) [15], quien mostró que la interacción de dos fenómenos químicos, la reacción y difusión de dos (o más) sustancias, puede conducir a la creación de patrones y simetrías espaciales. Este proceso sería seguido por los morfógenos al momento de autoorganizarse espacialmente.

En el siguiente capítulo estudiaremos con detalle los modelos cinéticos de sustancias que se difunden e interactúan. Por lo pronto, nos limitaremos a mostrar de manera intuitiva cómo los procesos de reacción y difusión de dos sustancias pueden propiciar la formación de un patrón espacial.

Como hemos visto en secciones anteriores, la formación de patrones se tiene en sistemas que se encuentran fuera del equilibrio. En los sistemas de reacción-difusión

propuestos por Turing, el elemento de desestabilización proviene del proceso de difusión seguido por los reactantes. Esta es una idea que se contrapone a nuestro sentido común pues, estamos acostumbrados a concebir a la difusión de una sustancia como una tendencia estabilizadora. Pensemos por ejemplo en una gota de colorante vertida en un recipiente con agua: después de determinado tiempo toda el agua termina por colorearse. Proponemos la siguiente analogía como explicación intuitiva, de cómo el proceso difusivo actúa como agente desestabilizador del sistema. Imaginemos un extenso bosque después de una prolongada sequía, donde las condiciones son tales que alguna chispa puede desencadenar un incendio. En determinado momento esto sucede y las llamas comienzan a dispersarse dejando a su paso zonas quemadas y negras. Cuando los bomberos locales se dan cuenta del incendio, deciden sofocarlo con agua, tierra y explosiones, además de cortarle el paso tirando arboles y abriendo brechas despejadas de maleza. Existen varios posibles desenlaces: si los bomberos no se mueven con la suficiente rapidez, el fuego puede llegar a consumir todo el bosque -esto podría pasar incluso si los bomberos se mueven a la misma velocidad que el fuego-. Si por el contrario, los bomberos son extremadamente veloces, las áreas quemadas serán pequeñas, lo cual sería el caso más afortunado. Lo más realista está entre esos dos extremos, cuando las áreas quemadas no son tan pequeñas pero los bomberos han logrado salvar buena parte del bosque.

¿Qué tiene que ver esto con un sistema de reacción-difusión? Es posible establecer la similitud imaginando tanto a los bomberos como al fuego como dos sustancias reaccionando entre sí - el fuego *activa* a los bomberos y estos lo *inhiben* sofocándolo- y dispersándose (difundiéndose). Los patrones espaciales en este singular sistema se perciben como áreas quemadas y áreas verdes. Ahora imaginemos lo que sucedería si el fuego se encendiera en más de un punto y de manera periódica en el tiempo. Es claro que si las sustancias no se dispersaran, el sistema tendería a un estado de equilibrio -el bosque totalmente quemado o sin quemar-. También es necesario notar que las velocidades de difusión de los reactantes deben ser distintas para propiciar la formación de simetrías espaciales.

1.5. Autoorganización

Hemos ya mencionado que el fenómeno de autoorganización es muy vasto; puede ser encontrado en una gran variedad de sistemas, y estudiado desde distintos enfoques. Aunque no pretendemos dar una definición adabada del concepto, pues corremos el riesgo de dar una imagen muy parcial e incompleta, creemos pertinente delinear una idea general, así como de enlistar algunas de sus características esenciales.

A lo largo de los ejemplos que hemos presentado, podemos observar con cierta claridad dos condiciones fundamentales que acompañan a este proceso: el sistema en el que se presenta está fuera del equilibrio, lo cual implica que existe un continuo flujo de materia y energía, -el sistema es abierto-. Por ejemplo, nuestro organismo requiere continuamente de alimento y oxígeno para mantenerse vivo.

Como el término mismo lo sugiere, este fenómeno exhibe dos características esenciales: el sistema presenta cierto grado de organización interna, -lo cual se manifiesta, por ejemplo, mediante el mantenimiento de estructuras espaciales ordenadas, a las que llamamos patrones-, y ella es consecuencia, como hemos dicho, de factores endógenos. En esta tesis estudiamos una consecuencia del fenómeno de autoorganización: la emergencia de cierta filotaxia en plantas, y sus analogías con los patrones convectivos de Bénard.

Capítulo 2

Sistemas de reacción y difusión

En este capítulo presentamos, con formalidad, un acercamiento teórico que busca explicar los mecanismos de formación de patrones espaciales. Dicho acercamiento se basa en modelos matemáticos de sistemas compuestos por sustancias que se difunden y reaccionan entre sí. El surgimiento de simetrías espaciales será consecuencia de la dinámica de esos sistemas. Los sistemas de reacción-difusión han demostrado tener características muy similares a muchos sistemas biológicos, en donde la formación de patrones es sumamente importante en la concepción y desarrollo de los organismos vivos.

En la primera sección analizaremos cómo los mecanismos de reacción-difusión explican la formación de patrones biológicos. En la segunda, presentamos algunos tipos de sistemas de reacción-difusión y su forma adimensional general. En la última, hacemos un análisis lineal de ellos. La deducción de la forma general de una ecuación de reacción-difusión, así como una descripción del proceso difusivo mediante caminatas aleatorias, pueden verse en el apéndice B.

2.1. Formación de patrones en biología

Autocatálisis local e inhibición global

Muchos de los patrones observados en los organismos vivos pueden ser explicados a través de modelos matemáticos basados en sistemas de reacción-difusión. Estos modelos deben su eficacia a un mecanismo clave que presentan dichos sistemas: autocatálisis local acompañada de inhibición global. La formación de patrones como consecuencia de ese mecanismo es común en la naturaleza, aún en sistemas no orgánicos.



Figura 2.1: La formación de patrones en un desierto como este puede ser explicada mediante mecanismos de autocatálisis local e inhibición global

Pensemos por ejemplo en la formación de dunas en los desiertos. Una duna pequeña ofrece más resistencia al aire que una zona completamente llana, lo cual induce que más arena se acumule sobre ella. Conforme la duna va creciendo, más resistencia al aire ofrece, y por lo tanto más arena se acumula. Como podemos ver, este es entonces un ejemplo prototípico de proceso autocatalítico. Sin embargo, la cantidad de arena en el desierto es finita, lo cual propicia que la acumulación en ciertas regiones implique la ausencia en otras. Esto quiere decir que la presencia de cierto número de dunas inhibe la formación de otras. Gracias a esta competencia entre autocatálisis e inhibición -procesos contrarios pero complementarios- emergen formas ondulantes en el desierto, que tal vez recuerden la coloración del pelaje de algunos animales como el leopardo.

Ciertos sistemas de reacción-difusión presentan procesos análogos al descrito arriba. En estos sistemas, dos sustancias químicas interactúan de tal forma que una de ellas, a la cual llamaremos activador, se produce a sí misma, al mismo tiempo que promueve la producción de la otra sustancia, que llamaremos inhibidor. El inhibidor, por otro lado, detiene la producción de la primera sustancia, de tal manera que su presencia tiende a disminuir la concentración de activador. Este proceso, igual que en el caso de las dunas en el desierto, mantiene un equilibrio global del sistema. Cualquier aumento en la concentración del activador se compensa por un aumento en la concentración del inhibidor, que a su vez reduce nuevamente la cantidad de activador.

Hasta aquí, todavía no es claro cómo se han de formar patrones espaciales de ningún tipo en el sistema que estamos considerando, pues como hemos dicho,

nuestro sistema hipotético mantiene un equilibrio global. Hemos entonces de incorporar otro factor importante que subyace en la formación de patrones en el desierto. Supongamos por un momento que inicialmente no hay una sola duna. Luego, todas las regiones contienen la misma cantidad de arena y por lo tanto, ninguna región ofrece resistencia al viento. Sin embargo, esta situación es localmente inestable. Cualquier pequeña acumulación de arena, provocada por alguna inhomogeneidad ambiental (alguna depresión natural o algún cambio en la humedad del suelo) es capaz de iniciar el proceso autocatalítico. Entonces, el factor importante que propicia la emergencia del patrón es que la inhibición de formación de dunas es global, mientras que el proceso autocatalítico es local.

¿De qué manera se produce, en los sistemas de reacción-difusión, autocatálisis local sumada a inhibición global? En el sistema activador-inhibidor delineado previamente, la concentración de activador aumenta por autocatálisis mientras el proceso de inhibición se debe a la presencia de la otra sustancia. Luego, para obtener las condiciones de inestabilidad local con inhibición global, es necesario que el inhibidor se difunda en los alrededores mucho más rápidamente que el activador. De contar con esta diferencia en las velocidades de difusión, un pequeño aumento en la concentración de activador tenderá a crecer por autocatálisis, aumento que no es detenido por el aumento consecuente de inhibidor, pues éste se dispersa a los alrededores. La estabilidad se alcanza nuevamente, sólo cuando la cantidad de inhibidor es suficientemente grande para cubrir todo el dominio.

El proceso descrito puede ser modelado matemáticamente mediante el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales parciales (ver apéndice B), propuesto por Meinhardt, para las concentraciones del activador (a) y del inhibidor (h):

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\rho a^2}{h} - \mu a + D_a \Delta a + \rho_0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \rho a^2 - \nu h + D_h \Delta h + \rho_1,$$

donde a aumenta autocatalíticamente gracias al término $\rho a^2/h$, y promueve el aumento de h , a través de ρa^2 . Denotamos con Δ el operador de Laplace¹, con lo cual los términos $D_a \Delta a$ y $D_h \Delta h$ toman en cuenta el proceso difusivo de las sustancias (ver apéndice B); el valor de las constantes D_a y D_h es una medida de la rapidez con que se difunden (difusividad). Dado que esperamos que el inhibidor se difunda con mayor velocidad, es necesario que $D_h \gg D_a$. Al incorporar los términos $-\mu a$ y $-\nu h$ estamos suponiendo que ambas sustancias desaparecen continuamente del sistema, consecuencia de su descomposición química. En el modelo, estos términos

¹Si la reacción se lleva a cabo en tres dimensiones, entonces $\Delta a = \sum_{i=1}^3 (\partial^2 a) / (\partial x_i^2)$, donde x_i representa la i -ésima coordenada espacial.

además hacen posible la existencia de un estado de equilibrio diferente a aquel donde las concentraciones son nulas en todo punto. Las constantes ρ_0 y ρ_1 indican la generación continua de ambas sustancias en el medio.

Meinhardt hace un análisis muy simple para mostrar cómo en el sistema descrito por (2.1), encontramos autocatálisis local e inhibición global. Si el inhibidor se difunde muy rápidamente, su concentración local se mantiene constante, aun cuando existe un pequeño aumento en la concentración de activador. Esto, unido a la autocatálisis del último, es el principio de la inestabilidad local. Esto puede observarse en las ecuaciones tomando h constante e igual a uno. Ignorando por el momento el término difusivo y tomando todas las constantes iguales a 1, buscamos equilibrio en la concentración de activador, dado por $\frac{da}{dt} = 0$:

$$\frac{da}{dt} = 0 = a^2 - a. \quad (2.2)$$

Por lo tanto, ese equilibrio se alcanza cuando $a = 1$. Este es inestable pues si a es ligeramente mayor que 1, $a^2 - a$ es positivo, con lo cual la concentración de activador aumenta.

Por otra parte, la estabilidad global del sistema se observa cuando dejamos de tomar h constante. En ese caso, bajo las mismas simplificaciones tenemos que:

$$\frac{dh}{dt} = a^2 - h. \quad (2.3)$$

Ello implica que el punto de equilibrio, para ambas concentraciones, se obtiene cuando $a^2 = h$. Ahora suponiendo que nos encontramos cerca del equilibrio, y que un cambio en la concentración del inhibidor es equilibrada rápidamente por el inhibidor, podemos escribir el cambio en la concentración del activador como función de ella misma, es decir:

$$\frac{da}{dt} = \frac{a^2}{h} \simeq \frac{a^2}{a^2} - a = 1 - a. \quad (2.4)$$

Por lo tanto, las concentraciones alcanzan un equilibrio cuando $a = 1$. Este estado es estable pues si $a > 1$, $1 - a$ es negativo, y la concentración disminuye hasta alcanzar nuevamente uno.

Como vemos, la acción del inhibidor tiende a estabilizar globalmente al sistema, mientras que su difusión y el proceso de autocatálisis son factores de desestabilización local.

Del análisis anterior podemos extraer condiciones necesarias para que un sistema de reacción-difusión presente autocatálisis local e inhibición global. Supon-

gamos que el sistema en cuestión tiene alguna dinámica expresada a través del siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{\partial a}{\partial t} &= f(a, h), \\ \frac{\partial h}{\partial t} &= g(a, h).\end{aligned}\tag{2.5}$$

Suponiendo que el inhibidor se difunde rápidamente, podemos suponer que su concentración es función de la concentración promedio del activador. Con ello obtenemos que

$$\frac{\partial a}{\partial t} = f(a, h(\bar{a})),$$

donde con \bar{a} denotamos la concentración promedio del activador. Suponemos entonces que el activador alcanza un equilibrio cuando $a = a_0$, de tal forma que

$$\left(\frac{\partial a}{\partial t}\right)_{a_0} = 0.$$

Para que dicho equilibrio sea inestable, es necesario que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_{a_0} > 0.\tag{2.6}$$

Por otro lado, para que la acción del inhibidor produzca estabilidad global es necesario que

$$\left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_{a_0} + \left(\frac{\partial f}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial a}\right)_{a_0} < 0.\tag{2.7}$$

Morfogénesis e información posicional

En la concepción y desarrollo de los organismos vivos se observan complejos procesos de autoorganización, donde las simetrías y los patrones surgen y evolucionan de manera sorprendente. Ya hemos hablado de cómo un embrión pasa, de manera espontánea pero precisa, de ser una masa homogénea pluricelular, a un organismo de células diferenciadas. Este es un ejemplo donde los mecanismos de autoorganización pueden ser explicados a través de los mecanismos descritos arriba ([12] y [13]). Procesos como este, donde la generación de patrones y formas refleja autoorganización de los sistemas, son prototípicos en biología, aunque se encuentran también de manera abundante en física y química.

Cuando hablamos de formación de patrones en un embrión, estamos pensando en la emergencia de zonas en el tejido celular que se diferencian unas de otras.

Esta diferenciación es el resultado de las diversas características y tipos de funcionamiento que de *pronto* adquieren las células en las deferentes regiones. Uno de los principales objetivos de la embriología es proponer y explicar mecanismos que hacen posible la generación de estos patrones, generación que se realiza de manera muy precisa y estable en la naturaleza. Esto es muy importante pues finalmente, estos patrones embriológicos son aquellos que predeterminan la forma y características corporales de los organismos.

El mecanismo delineado arriba, basado en inestabilidad local e inhibición global, es capaz de explicar ampliamente y con detalle muchos aspectos de la morfogénesis embrional. En particular, el estudio de sistemas de reacción-difusión ha logrado un gran alcance en ese propósito. El concepto que facilita la incorporación de estos sistemas en los modelos de morfogénesis, es el de *información posicional*. Para que una célula adquiriera determinadas características distintas a las de células en otra región, aquélla debe de alguna manera, *conocer* en qué región se encuentra. Expliquemos esto con más detalle. El sitio específico en el embrión donde una célula se ubica, es determinante de las características que debe adquirir y las funciones que debe realizar, con el objeto de que el embrión se desarrolle adecuadamente. Por ejemplo, las células neuronales no se deben desarrollar junto a las células gástricas, sin que medie algún tipo de interface. Luego, toda célula debe contar con ciertos mecanismos que le permitan identificar el lugar donde se encuentra, y como consecuencia, adoptar cierta identidad.

Algunos de los primeros y más comunes procesos de diferenciación celular que un embrión presenta, son los que inducen ciertos rompimientos de simetría. Por ejemplo, ciertos embriones se doblan sobre sí mismos en una especie de bolsa (gástrula), de tal manera que las células que quedan afuera se comportan de distinta manera que las células interiores. En otros embriones, en cierto momento de su desarrollo, la parte superior se diferencia de la inferior, y en un extremo aparece la cabeza. Es claro que la información posicional de las células es muy importante. ¿Cómo explicar este fenómeno, si en la mayoría de los embriones todas las células son idénticas, aún a nivel genético? Más aun, cuando algunos experimentos demuestran que la asimetría por invaginación que presentan ciertos embriones al inicio de su desarrollo, es importante pero no indispensable para los posteriores desarrollos asimétricos.

La propuesta teórica, sobre la cual descansa la explicación que señala a los mecanismos de inestabilidad local aunada a estabilidad global como generadores de estas asimetrías y patrones, indica que previamente a la formación de zonas diferenciadas, el embrión está sumergido en una especie de mapa químico. El cual funciona de manera análoga a los mapas topográficos, que muestran las diferentes alturas de un terreno, salvo que en este caso no se trata de alturas sino grados

de concentración de sustancias químicas. En este contexto, cada célula reacciona ante la presencia local de las sustancias o reactivos que conforman el mapa. Estas sustancias son conocidas como morfógenos. La cualidad de la reacción celular a los morfógenos depende, no sólo del tipo de sustancia presente, sino de su grado de concentración. Entonces, el encargado de generar el patrón espacial, que después determinará estructuras celulares diversas, es un proceso químico, como el de activador-inhibidor descrito arriba.

Pongamos un ejemplo simple para aclarar la idea anterior². Supongamos que en cierta etapa de un embrión de células idénticas, éste necesita un rompimiento de simetría elemental: el extremo superior, donde se ubicará la cabeza, debe distinguirse del inferior. Además supongamos que el embrión tiene simetría cilíndrica, con lo cual sólo nos interesa considerar una coordenada espacial. Por otro lado, imaginemos que dos sustancias, los morfógenos, permean el embrión y reaccionan entre sí, de manera análoga al sistema representado por (2.1). Una de ellas actúa como inhibidor y la otra como activador. Lo importante, en todo caso, es que el sistema presente autocatálisis local e inhibición global. Dadas las condiciones anteriores, debemos notar que la formación de gradientes asimétricos de concentración es típico de un sistema de esta naturaleza, y estos emergen cuando el dominio (el embrión) tiene cierto tamaño crítico. Demos una explicación intuitiva de cómo sucede.

El embrión es un dominio que crece. Si este es relativamente pequeño, la concentración homogénea de morfógenos es estable, pues el inhibidor cubre rápidamente todo el espacio, impidiendo al aparición de una alta concentración local de activador. Conforme el embrión crece esto deja de ser posible, pues el inhibidor tiene más espacio para dispersarse. Sin embargo, es poco probable que el activador se concentre en el centro, pues aún no hay suficiente espacio para los consiguientes gradientes creciente y decreciente que acompañan a una alta concentración central. Una zona de alta concentración debe estar suficientemente alejada de una zona de baja. Esto sólo se logra, cuando el dominio no es muy grande, si la primera aparece en un extremo del dominio³. La asimetría se genera entonces de la siguiente manera: el embrión va creciendo, hasta que alcanza un tamaño crítico. Este se caracteriza por ser lo suficientemente grande para permitir una zona de activador

²Lo que sigue fue tomado en gran parte de Meinhardt ([12] y [13])

³Éste es sólo un argumento heurístico para explicar la aparición de zonas de alta concentración en la frontera de un dominio relativamente pequeño. Encontramos el sustento teórico de esta idea en los resultados de Wei-Ming [19]. En su trabajo demuestra que ciertos tipos de sistemas de reacción-difusión, entre los cuales está incluido el representado por (2.1), presentan estados caracterizados por zonas localizadas de alta concentración del activador (picos) que cumplen un principio variacional de *mínima energía*. La *energía* de dichos estados se concentra en estas zonas, lo cual implica que los primeros picos en aparecer están situados en la frontera, pues estos tienen menor *energía* que los que se encuentran enteramente contenidos en el dominio.

en un extremo, pero no tanto como para permitir una en el centro. Esta zona de alta concentración crece por autocatálisis, hasta que la cantidad global de inhibidor es significativa y suficiente para frenarla. Las células entonces reaccionan a la fuerte presencia de activador y se diferencian de las demás.

Como causa adicional de la generación de la asimetría, suponemos que las células embrionales producen ellas mismas los morfógenos. Con ello, las pequeñas inhomogeneidades, responsables de desencadenar el proceso, pueden provenir de pequeños descensos o aumentos en esa producción. Este hecho tiene implicaciones muy importantes en la manera como describimos el desarrollo embrional, pues apunta a que la generación de estos y otros patrones, y por ende las posteriores estructuras embrionales, no necesita estímulos específicos. Cualquier cambio ambiental, ya sea en la acidez, temperatura o cantidad de oxígeno presente, puede desencadenar el proceso autocatalítico.

Patrones periódicos

Los patrones periódicos son comunes en la naturaleza; basta observar la piel de algunas serpientes o algunos felinos para obtener algunos vistosos ejemplos. El mecanismo de inestabilidad local puede generar estos patrones tal como se vio en el caso de las dunas en el desierto. En los sistemas de reacción-difusión, el tamaño del dominio juega un papel muy relevante en el tipo de patrones que se forman. Este hecho se verá con detalle en la cuarta sección del capítulo. Por lo pronto, podemos darnos cuenta que la generación de patrones periódicos necesita de dominios relativamente grandes. Esto se debe a que zonas de alta concentración requieren zonas de baja concentración, suficientemente lejanas, para mantener estabilidad global.

Regeneración de patrones

Se ha observado que la separación en mitades de algunos embriones puede conducir a la formación de dos embriones completos. En nuestro modelo, dicho fenómeno se explica observando cómo el retiro de una zona con alta concentración de activador elimina también una fuente de inhibidor. Las concentraciones entonces decaen hasta que otra fuente de activador aparezca. La partición del embrión sólo implica una reducción de las dimensiones del dominio, que eventualmente vuelve a crecer.

Como conclusión, decimos que el mecanismo de formación de patrones, mediante autocatálisis local e inhibición global, constituye un buen modelo para la explicación de fenómenos como el de diferenciación celular, o periodicidad de formas. Este éxito puede corroborarse a través de simulaciones numéricas, en donde sistemas de reacción-difusión generan patrones muy similares a los observados empíricamente.

2.2. Algunos sistemas de reacción y difusión

El sistema de activador e inhibidor (2.1), propuesto por Meinhardt, es un ejemplo de un sistema de reacción-difusión, que exhibe formación de patrones bajo ciertas condiciones. En general, los sistemas de ecuaciones que modelan la reacción y difusión de dos o más sustancias pueden escribirse como (ver apéndice B):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = f(\bar{c}) + D \Delta \bar{c}, \quad (2.8)$$

donde \bar{c} es un vector cuyas componentes son las concentraciones o densidades de los reactivos, y por lo tanto $\partial \bar{c} / \partial t$ representa el cambio de éstas conforme el tiempo pasa. La función $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, que en la mayoría de los casos es no lineal, engloba toda la cinética de la reacción. Δ es el operador laplaciano y $D \Delta \bar{c}$ es un vector columna, donde cada entrada corresponde con el laplaciano de cada concentración. D es una matriz diagonal cuyas entradas son los coeficientes de difusión de los reactivos.

Algunos de los sistemas que estudiamos aquí están compuestos por dos reactivos, y pueden ser representados de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} &= F(A, B) + D_A \Delta A, \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= G(A, B) + D_B \Delta B. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Recordemos, de secciones anteriores, que la formación de patrones en general se tiene en sistemas que se encuentran fuera del equilibrio, y que en el caso de sistemas de reacción-difusión, el elemento desestabilizador es el proceso de difusión. También es importante recordar que, para obtener patrones espaciales, los reactivos deben difundirse a diferentes velocidades. Estas dos condiciones se expresan en (2.9) al tenerse D_A diferente de D_B , diferentes ambas de cero. Sin embargo, el que en dicho sistema emerjan patrones espaciales depende en gran medida de la forma que tomen las funciones F y G , que representan la cinética de la reacción. A continuación presentamos algunos sistemas que, bajo ciertas condiciones de los parámetros, pueden desarrollar algunas simetrías espaciales.

Un sistema muy estudiado es el de Schnakenberg, en el que los términos que expresan la cinética de la reacción son

$$\begin{aligned} F(A, B) &= k_1 - k_2 A + k_3 A^2 B \\ &\quad \text{y} \\ G(A, B) &= k_4 - k_3 A^2 B, \end{aligned} \quad (2.10)$$

donde las k 's son parámetros constantes positivos, cuyos valores son determinantes en la generación de patrones. Nótese que el término $k_3 A^2 B$ representa un proceso de autocatálisis de la sustancia A .

Otro sistema, que presenta una cinética de reacción con un activador y un inhibidor como reactivos, es el propuesto por Gierer y Meinhardt (1972). Los términos de reacción están dados por las expresiones:

$$\begin{aligned} F(A, B) &= k_1 - k_2 A + \frac{k_3 A^2}{B} \\ &\quad \text{y} \\ G(A, B) &= k_4 A^2 - k_5 B, \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde A juega el papel de activador y B el de inhibidor.

Los sistemas anteriores han sido estudiados predominantemente de manera teórica. Sin embargo, existen otro tipo de sistemas, como el de la reacción Belousov-Zhabotinskii, cuyo estudio se hace más factible de manera experimental. Ese es el caso del siguiente sistema, estudiado por Thomas (1975), cuya cinética la definen las funciones:

$$\begin{aligned} F(A, B) &= k_1 - k_2 A - H(A, B), \\ G(A, B) &= k_3 - k_4 B - H(A, B) \\ &\quad \text{y} \\ H(A, B) &= \frac{k_5 AB}{k_6 + k_7 A + k_8 A^2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Dado que H aparece con signo negativo tanto en F como en G , este término implica la reducción de las concentraciones. Sin embargo dicha reducción puede ser inhibida por una alta concentración de A mediante el término $k_8 A^2$.

Antes de iniciar el análisis de cualquiera de los sistemas anteriores, es conveniente *adimensionarlos*. El hacerlo reduce el número de parámetros involucrados, además de que permite dilucidar con cierta facilidad algunos parámetros importantes de la cinética. Más adelante quedará mas claro a que nos referimos con esto. Realizaremos dicho proceso con detalle para el sistema dado por (2.10) y el resultado podrá ser generalizado a cualquier sistema de reacción-difusión. Para ello consideremos el siguiente cambio de variables:

$$x^* = \xi x, \quad t^* = \tau t, \quad u = \alpha A, \quad v = \beta B.$$

Con lo cual el sistema (2.9), siendo F y G definidas por (2.10), se transforma en:

$$\frac{\partial u}{\partial t^*} = \left(\frac{\alpha k_1}{\tau} - \frac{k_2}{\tau} u + \frac{k_3}{\alpha \beta \tau} u^2 v \right) + D_A \frac{\xi^2}{\tau} \Delta^* u,$$

$$\frac{\partial v}{\partial t^*} = \left(\frac{\beta k_4}{\tau} - \frac{k_3}{\alpha^2 \tau} u^2 v \right) + D_B \frac{\xi^2}{\tau} \Delta^* v.$$

Donde Δ^* es el operador del laplaciano con respecto a la variable x^* . Esto implica que si tomamos

$$\xi = \frac{1}{L}, \quad \tau = \frac{D_A}{L^2} \quad y \quad \alpha = \beta = \left(\frac{k_3}{k_2} \right)^{\frac{1}{2}},$$

el sistema anterior se transforma en:

$$u_t = \left(\frac{L^2 k_2}{D_A} \right) \left[\frac{k_1}{k_2} \left(\frac{k_3}{k_2} \right)^{\frac{1}{2}} - u + u^2 v \right] + \Delta u,$$

$$v_t = \left(\frac{L^2 k_2}{D_A} \right) \left[\frac{k_4}{k_2} \left(\frac{k_3}{k_2} \right)^{\frac{1}{2}} - u^2 v \right] + \frac{D_B}{D_A} \Delta v.$$

Y, finalmente, definiendo

$$d = \frac{D_B}{D_A}, \quad \gamma = \frac{L^2}{D_A}, \quad a = \frac{k_1}{k_2} \left(\frac{k_3}{k_2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad y \quad b = \frac{k_4}{k_2} \left(\frac{k_3}{k_2} \right)^{\frac{1}{2}},$$

nuestro sistema toma la forma:

$$u_t = \gamma(a - u + u^2 v) + \Delta u = \gamma f(u, v) + \Delta u, \tag{2.13}$$

$$v_t = \gamma(b - u^2 v) + d \Delta v = \gamma g(u, v) + d \Delta v.$$

En general, un sistema adimensional puede escribirse como

$$u_t = \gamma f(u, v) + \Delta u, \tag{2.14}$$

$$v_t = \gamma g(u, v) + d \Delta v.$$

De su construcción, $\gamma^{\frac{1}{2}}$ tiene dimensión de longitud. Se observará en la siguiente sección que este parámetro es de gran relevancia, pues su valor será determinante en la estabilidad del sistema. Por otro lado, de la inspección directa del sistema (2.14), es posible darse cuenta que γ regula la intensidad de la reacción, al ser factor de los términos reactivos.

La formación de patrones en el sistema (2.14) depende crucialmente de la forma particular de las funciones de reacción f y g . Como ejemplo de ello, vimos en la primera sección de éste capítulo como la desigualdad (2.6) expresa una condición necesaria para que el sistema presente inestabilidad local, mientras que (2.7) expresa una condición equivalente necesaria para obtener estabilidad global. En la siguiente sección descubriremos la importancia de los parámetros γ y d .

2.3. Análisis lineal

Los sistemas de reacción-difusión, como se ha visto en secciones anteriores, pueden exhibir estados estables ante perturbaciones cuando el término difusivo es omitido. Cuando se toma en cuenta el proceso de difusión, dichos estados se pueden volver inestables y simetrías más complejas pueden llegar a surgir.

El objetivo de esta sección es profundizar en el análisis matemático de estos sistemas para encontrar las condiciones necesarias para que la inestabilidad de Turing (inestabilidad generada por difusión) se presente. La mayor parte del análisis que aquí se presenta fue tomado de Murray [15].

El problema al cual nos avocaremos, tal como se presentó en la sección anterior, está dado por:

$$\begin{aligned}u_t &= \gamma f(u, v) + \Delta u, \\v_t &= \gamma g(u, v) + d\Delta v.\end{aligned}\tag{2.15}$$

Además de las ecuaciones que expresan la cinética de la reacción, es necesario incluir condiciones iniciales y de frontera, con las cuales el problema está planteado adecuadamente. Por ejemplo, podemos tomar las siguientes:

$$\begin{aligned}\text{(i)} \quad & u(\bar{x}, 0) = u^0(\bar{x}); \quad v(\bar{x}, 0) = v^0(\bar{x}) \quad \text{y} \\ \text{(ii)} \quad & n \cdot \nabla \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0, \quad \text{en } \partial\Omega,\end{aligned}$$

con u^0 y v^0 dadas. Hemos denotado con $\partial\Omega$ a la frontera del dominio espacial donde se lleva a cabo la reacción y, por simplicidad, el flujo a través de ella igual a cero.

Siguiendo un razonamiento análogo al empleado en la sección 2.1, buscamos un estado (u_0, v_0) que sea estable en ausencia de variaciones espaciales. Dicho estado, debe cumplir las ecuaciones:

$$f(u_0, v_0) = 0, \quad g(u_0, v_0) = 0.$$

El sistema, en ausencia de difusión, está gobernado por las ecuaciones:

$$\begin{aligned}u_t &= \gamma f(u, v), \\v_t &= \gamma g(u, v).\end{aligned}\tag{2.16}$$

Una forma de estudiar la estabilidad del estado (u_0, v_0) es analizar su estabilidad lineal. Para ello es necesario linealizar las ecuaciones anteriores, alrededor de dicho punto de equilibrio. Tomando entonces

$$w = \begin{pmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \end{pmatrix},$$

(2.16) se transforma, cuando la norma de w es pequeña, en el sistema lineal:

$$w_t = \gamma A w, \quad \text{con } A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

donde las derivadas parciales de las funciones f y g , en esta expresión y a partir de ahora en adelante, están evaluadas en el punto (u_0, v_0) . Las soluciones al sistema (2.17) están dadas por

$$w = \alpha e^{\lambda t},$$

donde λ representa a un eigenvalor de A y α es constante. El estado $w = 0$ será linealmente estable si cualquier perturbación tiende a desaparecer con el tiempo. Esto ocurre cuando $\text{Re} \lambda < 0$, lo cual impone condiciones sobre la cinética de la reacción que derivamos a continuación. Los eigenvalores $\lambda_{1,2}$ son raíces del polinomio característico y por lo tanto cumplen la ecuación:

$$\det(\gamma A - \lambda I) = 0,$$

es decir,

$$\lambda^2 - \gamma(f_u + g_v)\lambda + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) = 0. \quad (2.18)$$

Resolviendo para λ obtenemos:

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \gamma \left[(f_u + g_v) \pm \left((f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u) \right)^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (2.19)$$

Por lo tanto, para que (u_0, v_0) sea asintóticamente estable, es necesario que $\text{Re} \lambda_i < 0$, para $i = 1, 2$. A su vez, para que esto ocurra se requieren el siguiente par de condiciones:

$$\text{tr} A = f_u + g_v < 0 \quad (2.20)$$

y

$$\det(A) = |A| = f_u g_v - f_v g_u > 0; \quad (2.21)$$

las cuales son evidentes cuando pensamos en la forma diagonal de la matriz A . Estas condiciones reducen la familia de funciones f y g para las cuales se asegura la estabilidad lineal.

Ahora consideremos el sistema completo, linealizado alrededor de $w = 0$:

$$w_t = \gamma A w + D \nabla^2 w, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Proponemos como solución a (2.22) las siguientes funciones:

$$w_k = \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} e^{ikr + \lambda t}. \quad (2.23)$$

Sustituyendo (2.23) en (2.22), obtenemos:

$$\lambda \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \gamma A \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} - k^2 D \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

donde al sustituir las formas explícitas de A y D se obtiene:

$$\begin{pmatrix} \lambda - \gamma f_u + k^2 & -\gamma f_v \\ -\gamma g_u & \lambda - \gamma g_v + dk^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = 0. \quad (2.25)$$

Como buscamos soluciones no triviales a (2.22), el determinante de la matriz en la ecuación anterior debe ser igual a cero, lo cual nos proporciona la relación:

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] + h(k^2) = 0, \quad (2.26)$$

donde

$$h(k^2) = dk^4 - \gamma k^2(df_u + g_v) + \gamma^2|A| = 0. \quad (2.27)$$

Observemos que cuando $k = 0$, equivalente a la ausencia del término difusivo, recuperamos (2.18) como era de esperarse. La ecuación que acabamos de deducir nos abre la posibilidad de obtener condiciones para la inestabilidad lineal de Turing. Lo que buscamos, siguiendo su propuesta, es que el estado (u_0, v_0) sea inestable bajo el efecto difusivo. Para ello es necesario que $Re\lambda(k)$ sea positiva para algunos valores de k distintos de cero (recordemos que para $k = 0$, $Re\lambda(k) < 0$). Dada la relación (2.26), $Re\lambda(k)$ podría ser positiva si su coeficiente en (2.26) es negativo o si el término independiente $h(k^2)$ es negativo para alguna $k \neq 0$ (estas condiciones son necesarias pero no suficientes). Sin embargo, $k^2(1+d)$ es siempre positivo y de (2.20), tenemos que $(f_u + g_v) < 0$, con lo cual:

$$[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] > 0.$$

Por lo tanto, para que $Re\lambda(k)$ sea positiva para algún valor de k , la única posibilidad que nos queda es que el término independiente sea negativo. Nuevamente

recordamos (2.20) y (2.21), de donde $|A|$ debe ser positivo. El término dk^4 es siempre positivo. Por lo tanto, la inestabilidad de Turing se presentará si $df_u + g_v$ es positivo, pero como $f_u + g_v < 0$, entonces d debe ser distinto de 1 y los signos de f_u y g_v distintos. Observemos que en el caso del sistema (2.1), propuesto por Meinhardt, $f_u > 0$, $g_v < 0$ y d es mucho mayor que 1.

Podemos encontrar el número de onda crítico (k_m) para el cual $h(k^2)$ es mínima (y negativa), diferenciando respecto a k^2 en (2.27) e igualando a cero. Esto es:

$$2dk_m^2 - \gamma(df_u + g_v) = 0 \quad \iff \quad k_m^2 = \frac{\gamma(df_u + g_v)}{2d}. \quad (2.28)$$

k_m será pues el número de onda para el cual la inestabilidad es mayor, si el mínimo de h ($h_{min} = h(k_m^2)$) es negativo. Pero,

$$h_{min} = dk_m^4 - \gamma k_m^2(df_u + g_v) + \gamma^2|A|,$$

por lo tanto

$$h_{min} = \gamma^2 \left(|A| - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right), \quad (2.29)$$

y con lo cual, $h_{min} < 0$ si

$$\gamma^2 \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} > |A|. \quad (2.30)$$

Un dato importante que también se puede rescatar de este análisis, es el coeficiente de difusión crítico (d_c), que marca la bifurcación entre el comportamiento linealmente estable para toda k , y la inestabilidad lineal de Turing para algunos valores del número de onda. Dicho coeficiente crítico se obtiene cuando h_{min} es exactamente cero, es decir

$$\gamma^2 \left(|A| - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right) = 0 \quad \iff \quad (2.31)$$

$$d_c^2 f_u^2 + d_c(4f_v g_u - 2f_u g_v) + g_v^2 = 0.$$

Cuando $h_{min} < 0$, existe un intervalo (k_1, k_2) para el cual $h(k^2)$ es negativa. Para este intervalo de números de onda, las soluciones a (2.22) serán inestables. k_1 y k_2 se pueden calcular igualando a cero $h(k^2)$ para $d > d_c$, de donde obtenemos:

$$\begin{aligned} k_1^2 &= \gamma \frac{(df_u + g_v) - [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}}}{2d} \\ & \text{y} \\ k_2^2 &= \gamma \frac{(df_u + g_v) + [(df_u + g_v)^2 - 4d|A|]^{\frac{1}{2}}}{2d}. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Dado que la ecuación (2.22) es lineal, por el principio de superposición su solución general está dada por la suma:

$$w(r, t) = \sum_k w_k \quad (2.33)$$

donde los coeficientes a_k y b_k en (2.23), son determinados a partir de las condiciones iniciales. Es importante recordar que el dominio de las funciones u y v es finito, y ello induce que el espectro de valores del número de onda sea discreto. Por lo tanto, a_k y b_k son los coeficientes de Fourier de las condiciones iniciales.

Finalmente para tiempos largos, el comportamiento de las soluciones a (2.22) será dominado principalmente por los términos en (2.33) cuya λ sea positiva. Es decir

$$w(r, t) \approx \sum_{k_1}^{k_2} w_k; \quad t \gg 1. \quad (2.34)$$

Las funciones propias linealmente inestables que están expresadas en (2.34) crecen de manera exponencial. Por ello la suposición central del comportamiento lineal, la norma de w pequeña, pronto deja de ser válida y los términos no lineales, en la expansión de Taylor, se vuelven relevantes. De esta manera, el sistema puede alcanzar un estado estable, espacialmente inhomogéneo, conformando un patrón espacial.

En la sección (2.1) se hizo incapié en la importancia del tamaño del dominio para el crecimiento de alguna inhomogeneidad. Este importante hecho se hace patente al resaltar que la inestabilidad se presenta para $k_1 < k < k_2$. Donde k_1 y k_2 están dados por (2.32). Tres importantes hechos debemos enfocar: i) En esas expresiones, el parámetro γ es determinante en la longitud del intervalo (k_1, k_2). ii) El valor de γ está directamente relacionado con las dimensiones del dominio, como se observó al deducir las ecuaciones adimensionales en la sección anterior. iii) Dado que los valores de k en (2.34) son discretos, sólo existe un número finito de ellos que caen en el intervalo de inestabilidad. Todo lo anterior lleva a la conclusión de que si γ es suficientemente pequeña (que equivale a un dominio pequeño), no habrá valor de k dentro del dominio (k_1, k_2) y la inestabilidad no surgirá.

Esta última conclusión puede ser ligada directamente con la discusión relativa al crecimiento del embrión en la sección (2.1). Para que los primeros rompimientos de simetría embrional se lleven a cabo, es necesario que el organismo haya alcanzado un tamaño pertinente, que permita el surgimiento de la inestabilidad. Una vez que dicho tamaño se ha alcanzado, el estímulo que desencadena el crecimiento exponencial (autocatalítico) puede ser cualquier inhomogeneidad. Sin embargo,

aunque el estímulo es inespecífico, el patrón resultante está bien determinado. Esto se debe a que la perturbación que prevalece es aquella cuyo número de onda corresponde al eigenvalor más grande.

Capítulo 3

Filotaxis

La formación de patrones en plantas es un ejemplo prototípico de los procesos de autoorganización en los seres vivos. Ejemplo ampliamente estudiado, donde la complejidad de los modelos propuestos para su explicación contrasta con la belleza y riqueza de sus formas.

Filotaxis es el nombre que se le da a determinados patrones observados en una gran variedad de plantas, particularmente en flores y frutos, que son generados como consecuencia de cierta regularidad en la posición u ordenamiento de hojas, pétalos o algún otro tipo de órganos componentes.

Un mismo tipo de filotaxis puede ser observada en diferentes estructuras orgánicas, que no necesariamente pertenecen a una sola especie. Por otro lado, la observación ha demostrado la existencia de ciertas constantes numéricas características de los patrones. Lo anterior hace suponer que los mecanismos *empleados* por las plantas en la generación de estos patrones siguen ciertas reglas simples que pueden ser *modeladas* matemáticamente mediante algoritmos relativamente sencillos.

El crecimiento de las estructuras orgánicas sigue, en última instancia, la información genética codificada en el ADN. Sin embargo, dada la complejidad de los procesos de decodificación de dicha información, el estudio de la formación de filotaxis parte preferentemente de un enfoque *holístico* (concentrándose en descubrir procesos que *simulen* mejor la formación de los patrones) que de primeros principios (donde se buscaría entender las reacciones moleculares que la gobiernan).

En este capítulo estudiamos un tipo de filotaxis plana (observada en flores como la margarita y girasol) cuya estructura es análoga a los patrones convectivos de Bénard. Comenzamos con una descripción geométrica de la filotaxis en la margarita, lo cual nos lleva a construir un modelo geométrico en la primera sección. En la segunda, mostramos como los mecanismos de generación y crecimiento estable



Figura 3.1: La formación de patrones en plantas refleja procesos de autoorganización característicos del fenómeno de la vida.

de este patrón pueden ser consecuencia de la dinámica de un sistema de reacción-difusión. Para sustentar este modelo, mostramos como la dinámica de estos sistemas obedece un principio variacional de *mínima energía*, equivalente al principio de empaquetamiento de discos. En este argumento son muy importantes los resultados de Wei-Ming [19], que muestran como un tipo de sistemas de reacción-difusión, al cuál pertenece el que aquí proponemos, presentan estados con múltiples picos, cuya configuración es equivalente al principio variacional mencionado. En la tercera sección, presentamos la formación de filotaxis como un proceso dinámico en un sistema compuesto por un conjunto finito de partículas, sumergidas en un potencial con simetría radial, las cuales se repelen unas a otras. El objetivo en esta sección es enfatizar el carácter variacional del proceso mediante el cuál este patrón emerge.

3.1. Modelo geométrico

Descripción de la filotaxis en la margarita

El estudio con perspectiva geométrica de la filotaxis ha sido motivado por ciertas regularidades geométricas y numéricas observadas en los patrones. Por ejemplo, en los tallos, de una gran cantidad de especies de plantas, el ángulo que guardan las hojas entre sí es generalmente constante e igual a la sección áurea de 2π ($360^\circ(1 - \tau^{-1}) \simeq 137,5^\circ$, donde $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$). (Ver fig.(3.2)).

La filotaxis que buscamos modelar es la observada en ciertas flores como la mar-

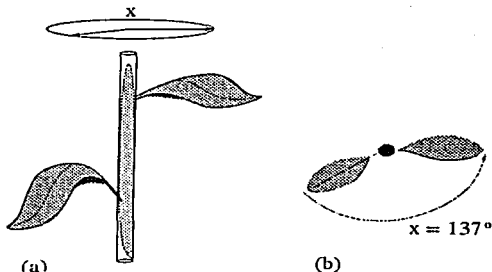


Figura 3.2: En un tallo, el ángulo x que guardan las hojas entre sí es aproximadamente igual a la sección aurea. En (b) observamos el tallo, representado en (a), desde arriba.

garita o el girasol. Ella está formada por pétalos de formas similares que cubren la parte central de la corola. Estos pétalos cubren todo el espacio, que podemos considerar como bidimensional, sin traslaparse unos en otros. A simple vista, los pétalos parecen alinearse en espirales que parten del centro de la estructura a la periferia, convergiendo estas en el centro. En general se observan dos tipos de espirales, dependiendo del sentido de giro. Esas espirales son conocidas como *parastiquios*. Los parastiquios son pues cadenas de pétalos adyacentes. (Ver fig.(3.3))

Un descubrimiento interesante nos lleva a encontrar una misteriosa relación numérica entre el número de parastiquios que giran en un sentido y en otro: en la mayoría de los casos resultan ser dos números consecutivos de una sucesión de Fibonacci [18]. Esta sucesión está dada por el conjunto:

$$\{f_n\}_{n=1}^{\infty} = \{1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \dots\}.$$

Los números de esta sucesión se obtienen sumando los dos números anteriores, partiendo de $f_1 = f_2 = 1$.

En un primer análisis, nuestro principal interés es explicar, a partir de consideraciones puramente geométricas, esta singular distribución de pétalos. Es importante observar, que aunque los pétalos aumentan de tamaño conforme se alejan del centro, su forma no cambia sustancialmente. Ello sugiere que lo determinante en el patrón, no es la forma particular de cada pétalo, sino su ubicación respecto del centro. La forma de los pétalos es consecuencia, en última instancia, de otros factores como la condición de no traslape entre pétalos o la *necesidad* de cubrir

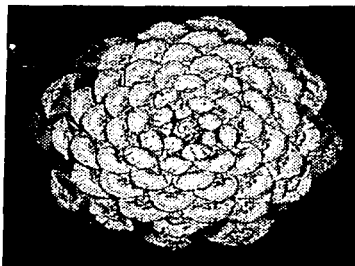


Figura 3.3: Las piñas de pino presentan la filotaxis que buscamos modelar en este capítulo. En esta imagen podemos apreciar los dos tipos de parastiquios convergiendo al centro de la estructura.

todo el espacio¹.

Una última observación importante está relacionada con transiciones en el número de parastiquios en la estructura. El patrón está subdividido en regiones circulares concéntricas, que se distinguen unas de otras por el par de números de Fibonacci que caracterizan a los parastiquios. Las zonas de transición son anillos concéntricos constituidos por *defectos* o, como se les conoce en cristalografía, *dislocaciones*.

Fraciones continuadas y razón áurea

En el estudio geométrico de filotaxis, la teoría y propiedades de las fracciones continuadas juegan un papel muy relevante. En este apartado presentamos de manera breve algunos conceptos preliminares que usaremos más adelante².

Para todo número x , en el intervalo $(0, 1]$, existen números naturales a_k , con $k = 1, 2, \dots$, tales que x puede ser como sigue (ver [7]):

$$x = \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{\dots}}}$$

¹Esta condición parte de un razonamiento teleológico: "los pétalos en la flor deben tener la forma necesaria para cubrir todo el espacio". Siendo más rigurosos en un pensamiento causal deberíamos decir: "La forma de los pétalos es tal, que todo el espacio es cubierto".

²Para una descripción más detallada de las propiedades de las fracciones continuadas ver Khinchin [7]

La expresión anterior recibe el nombre de fracción continuada de x , y puede escribirse con notación más sencilla de la forma:

$$x = [a_1, a_2, a_3, \dots].$$

Es interesante resaltar que la fracción continuada *más simple* corresponde al inverso de la sección áurea [7]:

$$\tau^{-1} = [1, 1, 1, \dots] = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0,6180\dots$$

Es posible obtener sucesiones de racionales que aproximen a x , truncando la expansión de la fracción continuada. La sucesión entonces, está formada por números de la forma:

$$\frac{p_1}{q_1} = [a_1], \quad \frac{p_2}{q_2} = [a_1, a_2], \quad \dots, \quad \frac{p_n}{q_n} = [a_1, a_2, \dots, a_n].$$

A las fracciones anteriores se les conoce como convergentes principales de x y los numeradores y denominadores cumplen con las relaciones recursivas[10]:

$$p_0 = 0, \quad p_1 = 1, \quad p_m = a_m p_{m-1} + p_{m-2} \tag{3.1}$$

$$q_0 = 1, \quad q_m = a_m q_{m-1} + q_{m-2}.$$

Por otra parte, podemos relacionar las sucesiones de Fibonacci y Lucas, -esta última se obtiene de la misma manera que la de Fibonacci, salvo que sus primeros dos elementos son 1 y 3,- con los convergentes principales del inverso de la sección áurea. Los convergentes principales de τ^{-1} están dados por la sucesión:

$$\frac{0}{1}, \quad \frac{1}{1}, \quad \frac{1}{2}, \quad \frac{2}{3}, \quad \frac{3}{5}, \quad \dots;$$

donde los denominadores son precisamente números de Fibonacci. Si por otra parte consideramos la fracción continuada:

$$\tau_L = [3, 1, 1, 1, \dots] = 1/(3 + \tau^{-1}),$$

los convergentes principales asociados están dados por la sucesión:

$$\frac{0}{1}, \quad \frac{1}{3}, \quad \frac{1}{4}, \quad \frac{2}{7}, \quad \frac{3}{11}, \quad \dots;$$

donde los denominadores son los números de Lucas.

El número τ_L pertenece al conjunto de números conocidos como nobles. Los números nobles, relevantes en el estudio de filotaxis, son aquellos cuya expansión en fracciones continuadas admite únicamente "1's", a partir de cierto momento, es decir, si α es un número noble, entonces

$$\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k, 1, 1, 1, \dots],$$

para cierto valor de k . Los números nobles se pueden escribir como [7]:

$$\alpha = \frac{a + b\tau^{-1}}{c + d\tau^{-1}}$$

con $|ad - bc| = 1$.

Modelo geométrico

Para la construcción del modelo geométrico³, idealizamos a los pétalos que forman la filotaxis como celdas circulares cuyos centros descansan como puntos nodales de una red. Dos cantidades son entonces determinantes en la estructura del patrón: el radio de cada círculo y la ubicación de su centro; estamos dejando de lado la forma específica de cada celda.

A partir de las observaciones de la filotaxis en la margarita, cualquier modelo geométrico que propongamos debe cumplir con dos condiciones muy importantes: las celdas deben ser tangentes entre sí y no deben traslaparse.

Siguiendo la construcción de Van Iterson (1907), tomemos una espiral logarítmica en coordenadas polares:

$$r(\theta) = r_0 R^{\theta/d}. \quad (3.2)$$

Los puntos nodales de la red (los centros de la celdas) son elementos del conjunto $L_s = \{P_k = (r_k, \theta_k) \mid k \in \mathbf{Z}\}$, donde

$$r_k = r_0 R^k, \quad \theta_k = kd; \quad (k \in \mathbf{Z}). \quad (3.3)$$

(Ver fig.(3.4)).

Esta construcción tiene la ventaja de mostrar explícitamente los parámetros d y R , conocidos como *ángulo de divergencia*, o simplemente *divergencia*, y *razón platócroma* respectivamente. Sus significados geométricos pueden deducirse fácilmente si observamos que

$$d = \theta_{k+1} - \theta_k, \quad R = \frac{r_{k+1}}{r_k}.$$

³Gran parte de lo que aquí se muestra fue tomado de Koch y Rothen [10]

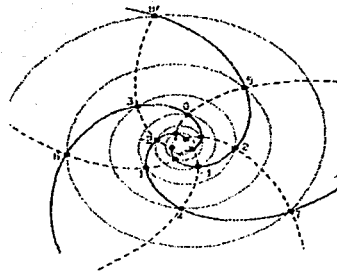


Figura 3.4: En línea gris punteada observamos la espiral ontogénica. Los puntos en negro representan los puntos nodales de la red, que han sido numerados a lo largo de la espiral empezando por un punto arbitrario. Al unir estos puntos obtenemos los dos tipos de parastiquios, representados por líneas negras, continuas y punteadas. Es importante notar que el número de parastiquios girando en determinado sentido corresponde a la diferencia de índices de dos discos contiguos en uno de ellos. En esta figura se tienen parastiquios de tipo 3 y 5.

La divergencia es el ángulo entre los radiovectores de dos puntos nodales adyacentes en la espiral ontogénica. En la mayoría de los patrones observados, esta se mantiene constante.

Una vez determinada la ubicación del centro P_k del disco D_k , el otro dato relevante en la descripción es el radio de la celda, que denotamos como ρ_k . Es claro entonces que cada celda, en nuestro modelo, está completamente caracterizada por la terna (r_k, θ_k, ρ_k) . Como hemos visto, el tamaño de los pétalos aumenta conforme están más lejos del centro. Esta observación se puede introducir directamente en el modelo, suponiendo que el radio de la celda es proporcional a la distancia entre el centro de la celda, y el centro del patrón. Esto conduce a la ecuación:

$$\rho_k = \rho_0 R^k, \quad (3.4)$$

donde ρ_0 es la constante de proporcionalidad.

Entonces, tomando en consideración las expresiones (3.3) y (3.4) es inmediato concluir que nuestro modelo queda determinado a partir de los parámetros r_0 , ρ_0 , R y d .

Ahora estamos en condiciones adecuadas, para poder analizar las consecuencias que sobre nuestro modelo tienen las dos condiciones geométricas arriba expresadas. La condición de tangencia se incorpora suponiendo que la distancia entre los centros de discos que se tocan es igual a la suma de sus radios. Es decir, si los discos D_k y D_{k+n} están juntos y, ρ_k y ρ_{k+n} son sus radios respectivos, entonces

$$r_0(1 + R^{2n} - 2R^n \cos nd)^{1/2} = \rho_0(1 + R^n)$$

Observemos que la relación anterior no involucra el índice k . Esto implica que la condición de tangencia es válida para cualesquiera dos discos con diferencia de índices igual a n , siempre que se cumpla para alguna pareja con la misma diferencia. Este hecho, tiene como consecuencia la formación de cadenas de discos tangentes entre sí, ya que el disco D_k es tangente tanto al disco D_{k+n} como al disco D_{k-n} . Esas cadenas son el análogo de los parastiquios en la filotaxis real. Por otro lado, empíricamente se ha verificado que cada pétalo se encuentra junto a otros cuatro. Para la tangencia del disco D_k con otro par de discos, tenemos otra expresión similar.

Por lo tanto, la condición de tangencia queda expresada en forma general a través de las expresiones:

$$\frac{(R^{2n} - 2R^n \cos nd + 1)^{1/2}}{1 + R^n} = \frac{\rho_0}{r_0} \quad (3.5)$$

y

$$\frac{(R^{2m} - 2R^m \cos md + 1)^{1/2}}{1 + R^m} = \frac{\rho_0}{r_0}. \quad (3.6)$$

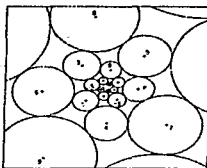


Figura 3.5: Red espiral de discos donde se satisfacen las condiciones de tangencia y no traslape.

De esta forma, cada parastiquio en nuestro modelo (cadenas de discos tangentes) puede caracterizarse por la diferencia de índices de sus discos tangentes. Tenemos entonces dos tipos de parastiquios: los de tipo m y n . Es pertinente resaltar que los números naturales m y n , dadas las condiciones de tangencia, son primos relativos (sólo tienen al número 1 como común denominador).

Es posible condensar las ecuaciones (3.5) y (3.6) en una sola, y para ello definimos:

$$F_s(d, R) = \frac{(R^{2s} - 2R^s \cos sd + 1)^{1/2}}{1 + R^s}.$$

Entonces, la condición de tangencia se expresa como:

$$F_m^2(d, R) = F_n^2(d, R). \quad (3.7)$$

A partir de la ecuación anterior, uno puede deducir al cociente ρ_0/r_0 y a R como funciones de d y de los primos relativos m y n .

La segunda condición geométrica, que debe cumplir el modelo, implica que los discos no se traslapen. Entonces, tomando dos discos cualesquiera D_k y D_{k+j} , se tiene:

$$\frac{(R^{2j} - 2R^j \cos jd + 1)^{1/2}}{1 + R^j} \geq \frac{\rho_0}{r_0}. \quad (3.8)$$

La desigualdad anterior tiene como consecuencia una relación entre d y los números naturales m y n , de tal forma que ya no son independientes. Sea x un número real en el intervalo $(0, 1]$ tal que $d = 2\pi x$. A continuación enunciamos el teorema que establece tal relación (véase [10]).

Teorema 1 Sean m y n dos naturales primos relativos, $0 < m < n$, y $x \in (0, 1]$ ($d = 2\pi x$), tal que $x = [a_1, a_2, \dots]$. Entonces, la construcción de una red espiral

L_s , cuyos nodos son centros de discos que no se traslapan y tangentes aquellos que se tocan, es posible para un rango continuo de x si y sólo si

$$m = q_r, \quad n = q_{r+1}$$

o

$$m = q_r, \quad n = q_{r+2} \quad \text{con} \quad a_{r+2} = 1$$

donde q_r, q_{r+1} y q_{r+2} son denominadores de tres convergentes principales sucesivos de x .

Por razones de espacio, no presentamos aquí la demostración de este teorema, misma que se puede encontrar en [10]. Por lo tanto, para alguna $d = 2\pi x$ fija, todas las parejas (m, n) , para las cuales se tiene una red espiral como la que se menciona en el teorema, están dadas por las relaciones recursivas (3.1). Por otro lado, si fijamos los naturales m y n , los posibles ángulos de divergencia se obtienen mediante las mismas relaciones con $q_r = m, q_{r+1} = n$ ó, $q_r = m, q_{r+2} = n$ con $a_{r+2} = 1$.

Por otro lado, se ha verificado empíricamente que, en un gran número de casos, los números naturales m y n son dos números consecutivos de la sucesión de Fibonacci. De acuerdo con el Teorema 1, ello implica que x tiene que ser aproximadamente igual al inverso de la razón áurea. ¿Cómo se explica este hecho a través de nuestra construcción geométrica?

Conforme los discos se alejan del centro de la estructura, su tamaño se incrementa. Al escribir la ecuación (3.4) establecimos que la razón de este cambio es igual a la razón plastócrona:

$$\frac{\rho_{k+1}}{\rho_k} = R.$$

Sin embargo, esa suposición no es realista, pues en los patrones reales observamos que el crecimiento de los pétalos no es exponencial. Es por ello que, para que nuestro modelo represente de manera adecuada lo observado en las flores, necesitamos suponer que R va decreciendo conforme nos alejamos del centro. De hecho, esto es lo que sucede en la filotaxis real. Otro hecho muy importante que debemos resaltar, es que buscamos que la divergencia se mantenga constante a lo largo de la estructura, tal como observamos que sucede. En lo que sigue omitiremos los detalles del análisis y sólo expondremos los aspectos más relevantes. Una exposición más detallada se encuentra en [10].

El decrecimiento de la razón plastócrona induce transiciones en el par de números que caracterizan las familias de parastiquios visibles, transiciones que son de la forma:

$$\{m, n\} \longrightarrow \{m', n'\}.$$

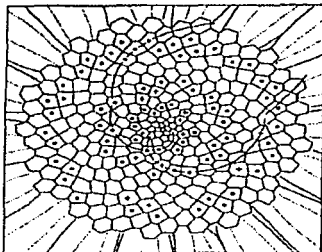


Figura 3.6: Este es un dibujo de la filotaxis en la margarita. Una transición en el conjunto de parastiquios es visible con la forma $\{13, 21\} \rightarrow \{21, 34\}$. Los pétalos marcados con \circ se tratan de dislocaciones pentagonales, mientras que aquellos con $+$ son dislocaciones heptagonales.

A continuación explicamos cómo se lleva a cabo dicha transición en nuestro modelo.

En nuestro análisis, hemos utilizado la suposición de que cada disco es adyacente a otros cuatro, implicando con ello la existencia de sólo dos familias de parastiquios $-D_k$ es adyacente a los discos $D_{k\pm m}$ y $D_{k\pm n}$. Sin embargo, bajo ciertas circunstancias que pronto presentaremos, cada disco puede ser tangente a otros seis. Esta configuración en la red espiral es conocida como *empaquetamiento compacto de discos*. Cada vez que tenemos una configuración de esta naturaleza, una transición en los números que determinan a las familias de parastiquios toma lugar.

Las condiciones que determinan un empaquetamiento compacto de discos en la red espiral están dadas por el siguiente teorema [10].

Teorema 2 *En una red espiral L_s , empaquetamiento compacto de discos toma lugar si y sólo si*

$$m = q_r, \quad n = q_{r+1}, \quad m + n = q_{r+2}$$

donde q_r , q_{r+1} y q_{r+2} son denominadores de tres convergentes principales del ángulo de divergencia x . En caso de que dicho empaquetamiento compacto tome lugar, los valores del ángulo de divergencia x y de la razón platócroma R están única y totalmente determinados por los números m y n .

¿Cómo se dan entonces las transiciones en la red espiral de discos? Al encontrarnos inicialmente en una región donde las familias de parastiquios visibles están

relacionadas al conjunto de números $\{m, n\}$, la reducción paulatina de R conduce eventualmente a la aparición de una zona de transición, donde ahora tres familias de parastiquios son visibles. Esto sucede pues un empaquetamiento compacto de discos ha tomado lugar. Esas tres clases de parastiquios se relacionan con el conjunto $\{m, n, m+n\}$ y caracterizan al anillo de transición. Al continuar la reducción de R , una de las familias desaparece, dando lugar a una nueva zona en la estructura, con sólo dos familias de parastiquios visibles. Esta transición puede ser de dos tipos. La que llamaremos transición regular, la cual tiene la forma:

$$\{m, n\} \longrightarrow \{n, m+n\}. \quad (3.9)$$

Y la que llamaremos transición singular, de la forma

$$\{m, n\} \longrightarrow \{m, m+n\}. \quad (3.10)$$

En los patrones reales observamos un serie de transiciones conforme nos alejamos del centro. En la mayoría de las plantas donde encontramos este fenómeno, las transiciones son casi exclusivamente de tipo regular. En nuestro modelo sin embargo, nada impide que ambos tipos de transiciones ocurran con la misma frecuencia. Por otro lado, las series infinitas de transiciones regulares conducen necesariamente a un número noble como valor de la divergencia [10]. Esto quiere decir, que en la mayoría de las plantas donde observamos este tipo de filotaxis, la divergencia es cercana a un número noble.

¿Cómo justificamos, a partir de nuestro modelo geométrico, que en las plantas se observen preferentemente transiciones regulares, que conducen a un número noble como ángulo de divergencia? Aunque no tenemos razones concluyentes que expliquen este fenómeno, podemos exponer un par de argumentos que sugieren su factibilidad. En primer lugar, las transiciones regulares modifican menos las celdas componentes de la filotaxis, que las transiciones singulares [9]. Entonces, dado que las celdas en realidad son pétalos de la flor -u otro tipo de órganos similares-, podemos imaginar que una transición regular genera menos tensiones por contacto entre celdas. El segundo argumento está relacionado con la invariabilidad del valor de la divergencia. Las condiciones de tangencia y no traslape hacen que el conjunto de valores, que el ángulo de divergencia puede tomar, esté determinado por el conjunto de números $\{m, n\}$. Por otro lado, si R disminuye, el ángulo de divergencia permisible tiende a variar. Sin embargo, se ha demostrado a partir de consideraciones numéricas, que si la divergencia x toma algún valor cercano a τ^{-1} , entonces una secuencia de transiciones regulares, inducidas por el decremento de R , dejan más o menos invariante a x [10]. Por lo tanto, si x es cercano a τ^{-1} , y una serie de transiciones regulares toma lugar, entonces la filotaxis necesita reordenamientos estructurales menores.

3.2. Filotaxis como sistema de reacción y difusión

En el capítulo 2 vimos como un sistema de reacción-difusión, del tipo activador-inhibidor, es capaz de generar patrones espaciales, a partir de condiciones de homogeneidad, cuando el inhibidor se difunde más rápidamente que el activador. Nuestro propósito en esta sección es mostrar como dichos sistemas son compatibles con los modelos geométricos de filotaxis vistos en la sección anterior. Para lograr este objetivo, mostramos que la generación de patrones en un sistema de reacción-difusión sigue principios variacionales que resultan equivalentes a las condiciones geométricas presentes en filotaxis.

Partimos del supuesto que el crecimiento de estas estructuras orgánicas está regulado por reacciones químicas que señalan la ubicación de nuevos órganos (primordia), generando una especie de mapa químico. El mecanismo sería relativamente simple: una alta concentración del activador promovería el crecimiento de un primordium, dado que el tejido circundante es capaz de reaccionar a dicha sustancia.

Reducción del sistema de Meinhardt

Consideremos un sistema análogo al (2.1):

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \Delta a + \alpha \frac{a^r}{h} - \beta a + \delta, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D_h \Delta h + \gamma a^s - \theta h + \kappa,$$

donde a y h son las concentraciones del activador y el inhibidor respectivamente. Vemos que el activador promueve su producción y la del inhibidor, como está expresado por los términos $\alpha a^r/h$ y γa^s con r y s exponentes mayores que 1. Las letras griegas son todas constantes.

Una forma de estudiar el comportamiento del sistema (3.11) es aproximar numéricamente las soluciones para distintos valores de los parámetros. Simulaciones de este tipo se pueden encontrar en la literatura.

Por simplicidad supongamos que las constantes δ y κ son iguales a cero. Estas constantes representan una producción constante de las sustancias que aseguran que ninguna de ellas desaparezca del medio. En el análisis que efectuaremos, estamos interesados principalmente en la interacción química entre las sustancias. Dicha simplificación, por lo tanto, no afecta significativamente los resultados, siempre que busquemos estados estables.

Nuestra suposición permanente, base de la inestabilidad de Turing, es que el inhibidor se difunde más rápidamente que el activador. Esto, aunado a que partimos

inicialmente de un estado homogéneo, nos permite suponer que la concentración del inhibidor es constante espacialmente, es decir, $\Delta h = 0$; las pequeñas variaciones del inhibidor desaparecen rápidamente cuando $D_h \gg 1$.

Finalmente, si nos enfocamos en soluciones estacionarias, podemos suponer que ambas concentraciones se mantienen constantes a lo largo del tiempo, esto es $\partial h / \partial t = \partial a / \partial t = 0$. Todas las suposiciones anteriores nos permiten despejar h como función de a a partir de la segunda ecuación en 3.11, así tenemos que

$$h = \frac{\gamma a^s}{\theta}.$$

Sustituyendo en la primera ecuación, obtenemos:

$$D_a \Delta a + \lambda a^{r-s} - \beta a = 0,$$

para alguna λ constante.

Por otro lado, suponiendo que el inhibidor se difunde lentamente entonces podemos tomar $D_a = \varepsilon$, con ε muy pequeña. El sistema (3.11) se reduce entonces a la ecuación:

$$\varepsilon \Delta a + \lambda a^p - \beta a = 0, \quad (3.12)$$

donde $p = r - s$.

La función a en la ecuación anterior no depende del tiempo. Si en un acercamiento ligeramente distinto, suponemos que la presencia del activador cataliza su propia producción en una escala mucho mayor que la producción del inhibidor, lo cual sucedería si $r \gg s$, entonces, durante un intervalo relativamente corto de tiempo, la concentración del inhibidor se mantendría constante, aun cuando hubiera cambios en la concentración del activador. En ese caso, podemos entonces suponer que nada más $\partial h / \partial t = 0$ durante intervalos cortos de tiempo, con lo cual obtendríamos la ecuación:

$$\varepsilon \Delta a + \lambda a^p - \beta a = \partial a / \partial t. \quad (3.13)$$

Estructura variacional de la ecuación reducida

Consideremos el funcional:

$$E(u) = \int_{\Omega} F(u, \nabla u) d\bar{x}, \quad (3.14)$$

donde

$$F(u, \nabla u) = \frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{\beta}{2} u^2 - \lambda \frac{u^{p+1}}{p+1}, \quad (3.15)$$

y Ω es el dominio sobre el cual se forma el patrón estudiado.

Nuestro interés es caracterizar a la función (o funciones) que *minimice* $E(u)$. Es decir buscamos u_0 tal que

$$E(u_0) = \min\{E(u) | u \in U\}, \quad (3.16)$$

donde U es el conjunto de funciones de clase C^2 cuyo dominio es Ω .

Supongamos que conocemos u_0 dada por (3.16), consideremos entonces otra función u elemento de U , escribiendo:

$$U(\bar{x}) = U_0(\bar{x}) + \epsilon \eta(\bar{x}),$$

con ϵ pequeña y η cualquier función de clase C^2 y dominio en Ω . Sustituyendo u en (3.14) obtenemos E como función de ϵ dada por:

$$E(\epsilon) = \int_{\Omega} F(u_0 + \epsilon \eta, \nabla u_0 + \epsilon \nabla \eta) d\bar{x}.$$

Como u_0 , en caso de existir, minimiza a E , entonces se tiene que

$$\frac{dE(\epsilon)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} = 0. \quad (3.17)$$

La ecuación anterior se reescribe como:

$$\int_{\Omega} [\epsilon(\nabla u_0)(\nabla \eta) + \beta u_0 \eta - \lambda u_0^2 \eta] d\bar{x} = 0.$$

Entonces si u_0 minimiza al funcional (3.14) tenemos que,

$$\int_{\Omega} [\epsilon(\nabla u_0)(\nabla \eta) + \beta u_0 \eta - \lambda u_0^2 \eta] d\bar{x} = 0. \quad (3.18)$$

Por otro lado, del teorema de Green, se tiene que

$$\epsilon \int_{\Omega} \nabla u_0 \cdot \nabla \eta d\bar{x} = \epsilon \int_{\partial \Omega} \eta (\nabla u_0 \cdot n) ds - \epsilon \int_{\Omega} \eta \Delta u_0 d\bar{x},$$

donde $\partial \Omega$ es la frontera del dominio Ω y n es el vector normal a ella.

Nuestro análisis se centra en buscar formación de patrones como consecuencia de un proceso de autoorganización del sistema. Ello nos obliga, como hicimos en el capítulo 2, a considerar un flujo nulo en la frontera del dominio. En ese caso, el primer término del lado derecho en la ecuación anterior es cero. Por lo tanto, la ecuación (3.18) se transforma en:

$$\int_{\Omega} \eta [-\epsilon \Delta u_0 + \beta u_0 - \lambda u_0^2] d\bar{x} = 0.$$

Como la ecuación anterior es válida para toda η , no es difícil demostrar que la expresión que multiplica a η debe ser idénticamente cero. Por lo tanto, si una función u minimiza a $E(u)$ entonces satisface la ecuación:

$$-\varepsilon \Delta u_0 + \beta u_0 - \lambda u_0^p = 0, \quad (3.19)$$

que es idéntica a (3.12).

Si, por otro lado, consideramos la dependencia temporal de la concentración ($u = u(t)$), entonces es posible recuperar la ecuación parabólica (3.13), mediante similares consideraciones variacionales. Presentamos aquí una explicación intuitiva del razonamiento.

Imaginemos por el momento que el funcional $E = E(u)$ es una función con dominio en \mathbb{R}^n , es decir $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$. En ese caso, nuestro problema consistiría en encontrar los puntos estacionarios (mínimos) de ella. Si además buscamos incorporar cierta dependencia temporal de los puntos del dominio, ello nos conduciría, en nuestro problema, a buscar aquella parametrización $u = u(t)$, que minimice, o tienda a minimizar, a E . Una condición necesaria para que esto suceda es que el vector tangente a dicha parametrización apunte en la dirección de mayor cambio, en sentido inverso al vector gradiente de E . Es decir,

$$\frac{du}{dt} = -\nabla E.$$

Multiplicando por un vector arbitrario $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$ obtenemos:

$$\frac{du}{dt} \cdot \eta = -(\nabla E) \cdot \eta,$$

donde el lado derecho es la derivada de E en la dirección de h . Esta derivada direccional es análoga a aquella que se igualó a cero en la ecuación (3.17). Sin embargo, la ecuación anterior no es del todo correcta. Debemos recordar que E se relaciona con u , a través de la integral de F sobre todo el dominio Ω . En este sentido, lo que buscamos minimizar es una cantidad global, y por lo tanto, la condición necesaria para que ello suceda es expresada de la siguiente manera:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \cdot \eta \right) d\bar{x} = -(\nabla E) \cdot \eta.$$

Finalmente, siguiendo un proceso similar al que se desarrolló arriba, obtenemos:

$$\int_{\Omega} \eta [-\varepsilon \Delta u_0 + \beta u_0 - \lambda u_0^p] d\bar{x} = \int_{\Omega} -\eta \frac{\partial u_0}{\partial t} d\bar{x}.$$

La expresión anterior es válida para toda η , y para toda región Ω , lo cual implica que

$$\varepsilon \Delta u_0 - \beta u_0 + \lambda u_0^p = \frac{\partial u_0}{\partial t},$$

ecuación equivalente a (3.13).

Como conclusión tenemos que las soluciones a la ecuación elíptica (3.12) deben satisfacer un principio variacional: deben ser extremos del funcional dado por (3.14) y (3.15). Por otro lado, las soluciones a la ecuación parabólica (3.13) no cumplen propiamente ese mismo principio, pero deben ser tales que tiendan a minimizar el mismo funcional, conforme el tiempo transcurre.

Compatibilidad entre el modelo geométrico y la estructura variacional del sistema activador-inhibidor.

En el capítulo anterior explicamos cómo los sistemas de reacción-difusión, en particular el de activador-inhibidor, son capaces de generar patrones similares a los observados en ciertos sistemas físicos y biológicos. Específicamente estudiamos algunos mecanismos capaces de explicar la morfogénesis embrional. Recordemos brevemente, que el fenómeno de autocatálisis tiene como consecuencia que las zonas de alta concentración de activador estén tan juntas como la cantidad de inhibidor, que aumenta debido a la presencia de ellas, lo permita. La dinámica resultante, entre el acoplamiento de autocatálisis local e inhibición global, produce por tanto mecanismos equivalentes al proceso de empaquetamiento de discos. Esta equivalencia encuentra sustento teórico en el principio variacional inherente a las soluciones a la ecuación reducida (3.12). A continuación exponemos a grandes rasgos el razonamiento que nos permite sustentar la afirmación anterior.

Consideremos el siguiente problema con condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta u - u + u^p &= 0 \quad \text{con } u > 0 \quad \text{en } \Omega; \\ \frac{\partial u}{\partial \bar{x}} &= 0 \quad \text{en } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{3.20}$$

donde el dominio Ω es un subconjunto acotado de \mathbb{R}^n y $\partial\Omega$ es la frontera. Se puede demostrar que este problema, cuando ε es pequeña, exhibe soluciones constituidas por múltiples picos -llamamos picos a zonas radialmente simétricas donde el valor de u es mucho mayor que en los alrededores-. Más aun, estas soluciones, por su estructura variacional, resuelven un problema de empaquetamiento de esferas -discos, en el caso de \mathbb{R}^2 -. Es decir, los picos se acomodan de tal manera que sus centros se alejan unos de otros tanto como es posible. La demostración de estos dos hechos se puede encontrar en [6]. En el caso que nos concierne, los llamados picos corresponden a zonas de alta concentración de activador. Por lo tanto, el principio de empaquetamiento de discos inherente en nuestro modelo geométrico, es análogo al principio variacional de las soluciones a (3.12).

Por otro lado, de acuerdo a los resultados de Wei-Ming [19], los estados estables del sistema 3.11 -con flujo nulo en la frontera- están muy relacionados con las soluciones estables de (3.20), de tal manera que el estudio de los primeros se reduce esencialmente al estudio de este problema. A continuación nos basamos en este hecho para proponer un mecanismo morfogenético que ofrece una explicación al crecimiento de filotaxis, basado en un sistema de reacción-difusión.

Filotaxis como sistema de reacción-difusión

En la literatura se pueden encontrar varios modelos de reacción-difusión aplicados al crecimiento de filotaxis. En este apartado exponemos a grandes rasgos los conceptos más relevantes sobre los cuales se construyen la mayoría de ellos.

Las características que en general presentan dichos modelos son básicamente dos: La primera es que la filotaxis se genera a partir del mapa químico que provee un sistema de reacción-difusión, el cual exhibe propiedades morfogenéticas como aquéllas que hemos descrito en el capítulo anterior. Las sustancias químicas componentes del sistema, están presentes en el meristemo, que es el órgano donde se generan los pétalos que constituyen la estructura; primordia es el término usado para referirse a estos órganos en su primera etapa de desarrollo. En la mayoría de los casos, el meristemo es idealizado como un anillo circular, con lo cual el dominio en donde se estudia la dinámica del sistema es unidimensional, y las condiciones de frontera son consideradas periódicas. La segunda característica es que estos sistemas mantienen memoria de la zona donde previamente se generó un primordium, con lo cual se asegura que durante cierto tiempo, no aparezca otro en el mismo lugar.

Ejemplifiquemos brevemente estas características con el siguiente sistema de reacción difusión [11]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= D_a \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{a^2}{h(\kappa_a + s)} - \mu_a a + \sigma_a \\ \frac{\partial h}{\partial t} &= D_h \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + a^2 - \mu_h h \\ \frac{\partial s}{\partial t} &= D_s \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + a - s; \end{aligned} \quad (3.21)$$

las constantes D_a , D_h y D_s son los coeficientes de difusión de cada una de las sustancias, σ_a representa una fuente constante de activador y κ_a es conocida como término de saturación. Los términos $(-\mu_a a)$, $(-\mu_h h)$ y $(-s)$ dan como resultado el decaimiento de cada sustancia. Las sustancias a y h interactúan entre sí como activador e inhibidor respectivamente, reproduciendo una dinámica análoga a aquella del sistema (2.1).

Lo que hace particularmente útil al sistema anterior para modelar el crecimiento de filotaxis, es la presencia de la sustancia s , la cual juega el papel de marcador de los lugares donde previamente hubo una alta concentración local de activador. Esto se logra de la siguiente manera. Cuando $D_h \gg D_a$ y $\mu_a > \mu_h$, la dinámica entre el activador y el inhibidor produce altas concentraciones locales del primero. Cada una de estas concentraciones, que decae rápidamente, produce a su vez, tal como está expresado por la tercera ecuación del sistema, un aumento local en la concentración de la sustancia s . Si además tenemos que $D_s \ll 1$, esta concentración decae y se dispersa muy lentamente, convirtiéndose en una huella duradera de la existencia de la concentración de activador que la precedió. Por otro lado, como se puede apreciar en la primera ecuación, la sustancia s también actúa como inhibidor de a . Por lo tanto, la aparición de un nuevo pico en la concentración de activador se dará cuando s se reduzca suficientemente, y en zonas donde recientemente no hubo otros picos. Las propiedades morfogenéticas del sistema (3.21) recaen por lo tanto, en la dinámica entre el activador a y el inhibidor h , mientras que el mecanismo de memoria corre a cargo de la sustancia s . Simulaciones numéricas, de la dinámica de este sistema en una dimensión [11], muestran como éste es un buen modelo del crecimiento de filotaxis.

Nuestra propuesta tiene las mismas características salvo en el mecanismo de memoria. El sistema que proponemos para la morfogénesis de la filotaxis está representado por (3.11), cuyo estudio, de acuerdo con los resultados de Wei-Ming [19], se reduce en esencia al estudio de la ecuación reducida (3.12). Esta ecuación posee determinada estructura variacional, lo cual implica que sus soluciones estén constituidas por picos o manchas cuya ubicación resuelve el problema de empaquetamiento de discos propio del patrón. En lugar de considerar un dominio unidimensional, correspondiente a la idealización del meristemo, tomamos un dominio bidimensional acotado, que representa el lugar donde se acomodan los discos. En lugar de añadir una tercera sustancia, como el componente que mantiene la información de los lugares donde previamente han aparecido concentraciones locales de activador, nos basamos en la estructura variacional del sistema causa de las condiciones de empaquetamiento, para que a partir de estas condiciones, los primordia aparezcan *en los lugares donde deben aparecer*. Es decir, el meristemo es el único lugar de la estructura capaz de generar nuevos pétalos, pero éstos una vez presentes, continúan siendo lugares donde la concentración de activador es alta, y por lo tanto el tejido del meristemo es sensible a ellos. De esta manera, los pétalos cercanos al centro de la estructura tienen mayor influencia sobre el meristemo, de tal manera que los primordia aparecen en el lugar disponible más lejano a aquellos. De hecho, cada vez que aparece un primordium, debe correr cierto intervalo de tiempo para que aparezca el siguiente. Justo en el intervalo de tiempo necesario para que el empaquetamiento de discos sea posible.

Por lo tanto, en nuestra propuesta de generación y crecimiento de filotaxis, tanto el mecanismo morfogenético como el de memoria, están dados por la dinámica variacional de la ecuación (3.12). Esta propuesta es análoga al estudio experimental que llevan a cabo Douady y Couder [4], donde estudian la formación de filotaxis como un sistema dinámico físico autoorganizado. En la siguiente sección exponemos los resultados de su experimento, pero podemos adelantar que ese trabajo muestra la factibilidad de nuestro modelo, al demostrar que la elección de los sitios donde aparecen los primordia, puede ser resultado de la interacción y presencia de los pétalos que ya se encuentran en el patrón. Nuestra propuesta abre la perspectiva de futuras investigaciones donde, eventualmente, se tendrá que determinar la sensibilidad del patrón a determinados parámetros. Por ejemplo, creemos que los coeficientes de difusión de los recativos determinan el periodo de tiempo que transcurre entre la aparición de dos primordia consecutivos. En este análisis los métodos numéricos jugarán un papel muy relevante.

3.3. Filotaxis como sistema dinámico

En esta sección exponemos un sistema físico autoorganizado, capaz de reproducir el patrón de filotaxis estudiado en este capítulo. Tomamos como ejemplo guía el sistema experimental construido por Douady y Couder [4], mediante el cual se reproducen los patrones espirales. En este sistema, y en la generalización teórica que hacemos de él, los elementos constitutivos del patrón son idealizados como partículas que interactúan entre sí, debido a un potencial que cada una de ellas genera. El sistema dinámico que así obtenemos tiene también cierta estructura variacional, análoga a aquella que observamos en el sistema de reacción-difusión estudiado en la sección anterior. Procedemos a la descripción general de dicho sistema.

Imaginemos un sistema de N partículas (p_1, p_2, \dots, p_n) inmersas en un potencial con simetría radial, dado por la ecuación:

$$V(r) = \frac{g}{r^q}, \quad (3.22)$$

en la cual r es la coordenada radial, q algún número natural y g una constante. Cada partícula a su vez repele a las demás al generar un potencial de la forma:

$$V_i(r) = \frac{\alpha}{|r_j - r_i|^s}, \quad (3.23)$$

donde los subíndices i y j distinguen a las partículas; s es un número natural. En el crecimiento de filotaxis, los primordia son generados en el ápice del meristemo regularmente, para después desplazarse hacia la periferia de la estructura. Esto puede

ser implementado en el sistema físico, si las partículas aparecen de manera periódica en una circunferencia de radio r_0 situada en el centro del patrón, para después ser empujadas en dirección radial, gracias al potencial en que están sumerjidas. El potencial (3.23) que cada partícula genera, asegura que ésta se mantenga alejada de las demás tanto como sea posible. Por otro lado, el punto de la circunferencia donde las nuevas partículas van apareciendo debe ser aquel donde la energía total es mínima.

El sistema que acabamos de presentar tiene la ventaja de que puede ser estudiado tanto experimentalmente, mediante un sistema físico real, como numéricamente, a través de simulaciones por computadora. La manera más sencilla de hacer esto último, es considerar la interacción entre partículas sólo cuando se trata de decidir dónde aparecerá la siguiente.

Ahora pasemos a la descripción del sistema experimental estudiado por Douady y Couder. Las partículas componentes del sistema son gotas de fluido ferromagnético, con volúmenes aproximadamente iguales. Estas gotas son vertidas periódicamente en intervalos de tiempo de longitud T , en un recipiente circular lleno de aceite de silicón. Todo el sistema está a su vez inmerso en un campo magnético $H(r)$ perpendicular a la superficie donde se mueven las gotas, el cual polariza estas últimas, convirtiéndolas en pequeños imanes que se repelen unos a otros; la fuerza de repulsión entre las gotas es proporcional a $|r_j - r_i|^{-4}$. Además, el campo magnético presenta un gradiente de potencial que apunta en dirección radial; en la parte central, donde las gotas son vertidas, el campo magnético es mayor que en la periferia, ocasionando que aquellas se muevan hacia afuera con velocidad $v(r)$, gracias a la fuerza que sienten debido al campo. El ápice del meristemo es modelado por un pequeño cono truncado de radio r_0 , colocado en el centro del recipiente, de tal manera que las gotas vertidas sobre él se deslizan rápidamente hacia el perímetro de la base. Los resultados de los experimentos realizados con este sistema muestran, que el parámetro que determina las cualidades del patrón obtenido es

$$G = v_0 T / r_0, \quad (3.24)$$

donde v_0 es la velocidad inicial de las gotas.

Cualitativamente sucede lo siguiente. Cuando G es grande, las partículas se alejan rápidamente del centro y en ese caso, cada nueva partícula interactúa casi exclusivamente con la anterior, ubicándose sobre la circunferencia en el extremo opuesto a ésta. El patrón resultante, en este caso, consiste de partículas moviéndose en direcciones opuestas. Conforme G va decreciendo, el efecto sobre las partículas emergentes es la suma de la interacción de estas, con un cada vez mayor número de partículas anteriores. Un rompimiento de simetría toma lugar cuando son dos las partículas que interactúan con la tercera. Por debajo de algún valor $G = G_{1,1}$, el punto donde aparece la tercera partícula se aleja de las dos anteriores, hacia uno

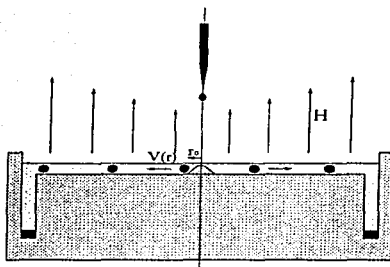


Figura 3.7: Diagrama del arreglo experimental de Douady y Couder.

u otro lado de la línea que las une. Este evento determina, de una vez por todas, la dirección de rotación de la espiral ontogénica. El decremento del parámetro ocasiona un decremento continuo del valor del ángulo de divergencia, de tal manera que poco a poco se alcanza un régimen estable, caracterizado por un valor constante ϕ de dicho ángulo, y dos familias visibles de parastiquios. Reduciendo aun más el valor de G , las partículas emergentes interactúan con un número mayor de partículas anteriores. El patrón es más compacto cada vez, y varias transiciones en el par de familias de parastiquios visibles toman lugar. El ángulo de divergencia converge a cierto valor constante Φ , conforme G tiende a cero.

El patrón obtenido mediante este sistema experimental modela con gran precisión los patrones en filotaxis plana. Estos resultados confirman nuestra hipótesis, manejada implícitamente en la sección anterior, de que el crecimiento de filotaxis es consecuencia de correlaciones de largo alcance entre los elementos componentes, e.g. pétalos y meristemo. Más aun, dicha interacción tiene cierta estructura variacional inherente, la cual es responsable en mayor medida de la morfogénesis, posibilitando la generación y crecimiento estable de los patrones.

Capítulo 4

Patrones Convectivos

En este capítulo presentamos algunos aspectos generales del proceso de formación de patrones convectivos de Rayleigh-Bénard. Estos patrones, como hemos dicho en la introducción, presentan características similares a los observados en filotaxis, debido a que ambos surgen como consecuencia de una dinámica sujeta al principio variacional de empaquetamiento de discos.

En la primera sección deducimos las ecuaciones que describen la dinámica de los fluidos que estamos considerando; las de Navier-Stokes entre ellas. En la segunda, presentamos un análisis lineal de esas ecuaciones para estudiar el sistema convectivo de Bénard. En particular buscamos conocer el punto donde surge la inestabilidad en este sistema, que abre paso a la formación de los patrones convectivos.

4.1. Ecuaciones de Navier-Stokes

Empezamos imaginando que tenemos cierto fluido dentro de una región Ω en el espacio, donde $\bar{v}(\bar{x}, t) = (u(\bar{x}, t), v(\bar{x}, t), w(\bar{x}, t))$ es la velocidad en todo punto \bar{x} en Ω , al tiempo t (Ver figura (4.2)). Nuestro objetivo es describir su dinámica, a partir de los siguientes postulados físicos:

Postulado 1 *Conservación de masa.*

Postulado 2 *Conservación de momento.*

Postulado 3 *Conservación de energía.*

Además de los postulados anteriores, también suponemos que existen un par de funciones escalares, $\rho, \varrho : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, que representan la densidad de masa

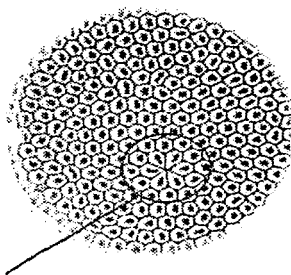


Figura 4.1: Patrón resultante de un sistema convectivo de Rayleigh-Bénard. El patrón es *casi perfecto*, salvo por las dislocaciones que podemos observar en el centro de la circunferencia pequeña.

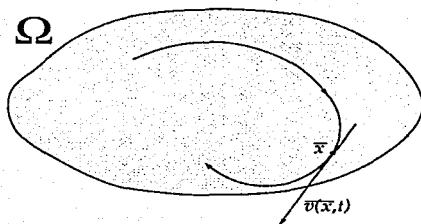


Figura 4.2: $\bar{v}(\bar{x}, t)$ es la velocidad del elemento de fluido que pasa por \bar{x} al tiempo t .

y energía respectivamente, en todo punto $\bar{x} = (x, y, z)$ en Ω , al tiempo t . Las ecuaciones que eventualmente deduciremos son la llamada ecuación de continuidad:

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho\bar{v}) = 0, \quad (4.1)$$

que es consecuencia de la conservación de masa, las ecuaciones de Navier-Stokes, representadas en su forma vectorial:

$$\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -\nabla p + (\lambda + \mu)[\nabla(\text{div } \bar{v})] + \mu[\Delta \bar{v}] + \rho\bar{g}, \quad (4.2)$$

y la ecuación de conservación de energía:

$$\bar{v} \cdot \frac{D\bar{v}}{Dt} + \frac{D\theta}{Dt} = 0. \quad (4.3)$$

P1. Conservación de Masa

Dada la existencia de la función de densidad $(\rho(\bar{x}))$, podemos calcular la cantidad de masa contenida en una subregión del espacio ω a través de la integral:

$$\int_{\omega} \rho(\bar{x}, t) dV,$$

donde $dV = dx dy dz$.

Dado que suponemos que la masa se conserva, el cambio en la cantidad de masa contenida en ω debe ser igual a la cantidad de masa que sale o entra por su frontera $\partial\omega$, es decir:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho(\bar{x}, t) dV = - \int_{\partial\omega} \rho[\bar{v} \cdot \bar{n}] dA,$$

donde \bar{n} es el vector normal a $\partial\omega$ apuntando hacia el exterior de ω . El signo negativo del término de la derecha implica que la masa en ω aumenta cuando el fluido entra.

Haciendo uso del teorema de la divergencia, la integral de la derecha se transforma en una integral de volumen, con lo cual obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho(\bar{x}, t) dV = - \int_{\omega} \text{div}(\rho\bar{v}) dV,$$

es decir

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} \rho(\bar{x}, t) + \text{div}(\rho\bar{v}) dV = 0.$$

La ecuación anterior es válida para cualquier subregión del espacio ω , y eso sucede si y sólo si se cumple que

$$\frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho\bar{v}) = 0.$$

La ecuación anterior es la ecuación de continuidad.

P2. Conservación de Momento

En la derivación de la ecuación (4.1), se consideró una región ω fija en el espacio. Sin embargo, cuando se trata de obtener una ecuación análoga para la conservación de momento, es necesario enfocarse en porciones de fluido en movimiento. Esto sucede pues la trayectoria de cualquier partícula de fluido esta determinada por la fuerza aplicada sobre ella. Como consecuencia hemos de considerar un marco de referencia que *se mueva con el fluido*, es decir, tomando en consideración la dependencia temporal de las coordenadas espaciales $\bar{x}(t) = (x(t), y(t), z(t))$.

En ese contexto, la velocidad de una partícula depende no sólo del tiempo, sino también de su ubicación espacial:

$$\bar{v} = (u, v, z) = \bar{v}(x(t), y(t), z(t), t).$$

Entonces la aceleración de la partícula está dada por:

$$\bar{a}(t) = \frac{d\bar{v}}{dt} = \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \dot{y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \dot{z} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial t}.$$

Por otro lado, tenemos por definición que

$$\bar{v} = (u, v, w) = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}).$$

Definimos entonces la *derivada material* como el operador

$$\frac{D}{Dt} = \partial_t + \bar{v} \cdot \bar{\nabla},$$

donde

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t},$$

y

$$\bar{v} \cdot \bar{\nabla} = u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y} + w \frac{\partial}{\partial z}.$$

Por lo tanto,

$$\bar{a}(t) = \frac{D\bar{v}}{Dt} = \partial_t \bar{v} + (\bar{v} \cdot \bar{\nabla}) \bar{v}. \quad (4.4)$$

Antes de proceder a la derivación de una ecuación que exprese el postulado de conservación de momento, es necesario introducir algunos conceptos que ayuden a calcular el cambio de momento para una porción de fluido en movimiento.

Sea $\bar{\varphi}(\bar{x}, t)$, la trayectoria seguida por una partícula que se encuentra en \bar{x} al tiempo $t = 0$, para toda punto \bar{x} en Ω . Si denotamos como φ_t el mapeo que

transforma a \bar{x} en $\bar{\varphi}(\bar{x}, t)$ entonces definimos la subregión ω_t como $\omega_t = \bar{\varphi}_t(\omega)$, para toda ω subregión de Ω .

Dado lo anterior, la razón de cambio del momento de la porción de fluido contenida en ω_t está dada por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega_t} \rho \bar{v} dV,$$

donde tomamos la integral *siguiendo* el flujo.

Para derivar adentro del signo de integración hacemos uso de nuestro conocimiento de la trayectoria $\bar{\varphi}(\bar{x}, t)$ seguida por todas las partículas contenidas en ω_t :

$$\int_{\omega_t} \rho \bar{v} dV = \int_{\omega} (\rho \bar{v})(\bar{\varphi}(\bar{x}, t), t) \mathbf{J}(\bar{x}, t) dV,$$

donde $\mathbf{J}(\bar{x}, t)$ es el jacobiano de la transformación ω_t .

Como ω está fija en el espacio, podemos derivar adentro del signo de integral:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega_t} \rho \bar{v} dV = \int_{\omega} \frac{d}{dt} \{(\rho \bar{v})(\bar{\varphi}(\bar{x}, t), t) \mathbf{J}(\bar{x}, t)\} dV.$$

Antes de seguir adelante, enunciemos una fórmula que nos permite calcular la derivada del jacobiano:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{J}(\bar{x}, t) = (\text{div } \bar{v}) \mathbf{J}. \quad (4.5)$$

Deduciremos esta ecuación en el apéndice.

Entonces

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega_t} \rho \bar{v} dV &= \int_{\omega} \left[\left(\frac{D}{Dt} \rho \bar{v} \right) (\bar{\varphi}(\bar{x}, t), t) + \text{div } \bar{v} (\rho \bar{v})(\bar{\varphi}(\bar{x}, t), t) \right] \mathbf{J}(\bar{x}, t) dV \\ &= \int_{\omega_t} \left[\left(\frac{D}{Dt} \rho \bar{v} \right) + (\rho \text{div } \bar{v}) \bar{v} \right] dV. \end{aligned}$$

Finalmente, usando el hecho de que la masa se conserva, tenemos que

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \text{div } \bar{v} = \frac{d\rho}{dt} + \text{div}(\rho \bar{v}) = 0,$$

con lo cual obtenemos:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega_t} \rho \bar{v} dV = \int_{\omega_t} \rho \frac{D\bar{v}}{Dt} dV. \quad (4.6)$$

El resultado anterior se conoce, en su forma más general, como el teorema del transporte [2]:

Teorema 3 Para cualesquiera función $f = f(\bar{x}, t)$ y porción de fluido ω_t , tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega_t} \rho f \, dV = \int_{\omega_t} \rho \frac{Df}{Dt} \, dV.$$

La conservación de momento se expresa a través de la segunda ley de Newton, que establece que el cambio en el momento de cualquier cuerpo es proporcional a la fuerza aplicada sobre él. Tomemos en consideración la porción de fluido contenida en ω_t . Sobre esa porción de materia actúan dos clases de fuerzas: aquellas que son resultado de la presencia del fluido circundante y aquellas de carácter externo, como la gravedad. Llamaremos *esfuerzos* a aquellas fuerzas que el fluido circundante ejerce sobre la porción de fluido en cuestión. Los esfuerzos pueden descomponerse a su vez, en una componente normal a la superficie (esfuerzos normales) y otra tangente a ella (esfuerzos tangenciales).

En este punto, es necesario establecer cómo los esfuerzos actúan. Al hacerlo estaremos definiendo, una clase particular de fluido. En nuestro estudio, nos enfocamos en aquéllos que se conocen como fluidos *newtonianos*, los cuales han sido ampliamente estudiados y dentro de los cuales se encuentran el agua y el aire. Los fluidos newtonianos son aquellos que satisfacen las siguientes condiciones:

1. Cuando el fluido está en reposo, los esfuerzos que actúan sobre una porción de fluido ω_t son resultado únicamente de la presión hidrostática. Esto quiere decir que cuando el fluido está en reposo, la componente tangencial de los esfuerzos es nula.
2. Los esfuerzos dependen únicamente de los gradientes de velocidad $\nabla \bar{v}$. Dicha dependencia es lineal.
3. Los esfuerzos tangenciales son invariantes ante rotaciones de cuerpo rígido.
4. El fluido es isotrópico. Esto quiere decir que no existen direcciones preferenciales.

Si denotamos con F_{ω_t} la suma de todos los esfuerzos actuando sobre ω_t , la primera condición de los fluidos newtonianos implica que

$$F_{\omega_t} = \int_{\partial\omega_t} p \bar{n} \, dA + \int_{\partial\omega_t} \Gamma \bar{n} \, dA, \quad (4.7)$$

donde p es la presión hidrostática, y \bar{n} es el vector normal a la superficie $\partial\omega_t$. El segundo término del lado izquierdo representa los esfuerzos tangenciales, que se presentan cuando el fluido está en movimiento. Analicemos cada término por separado.

F a l t a

P á g i n a

6 | 1 |

donde Γ es una matriz de 3×3 y \bar{n} es el vector normal a la superficie $\partial\omega_t$. La forma específica que adquiera Γ determina las características de la fuerza tangencial. Antes de proceder a describir esta matriz, exponemos algunos hechos importantes de los campos vectoriales que ayudarán más adelante en ese propósito.

Teorema 4 [2] *Sea \bar{v} un campo vectorial en \mathbb{R}^3 . Definimos el vector $\bar{\xi}$ como el rotacional de \bar{v} ($\bar{\xi} = \nabla \times \bar{v}$). Entonces \bar{v} puede descomponerse localmente como la suma de una traslación, una deformación D y una rotación rígida S alrededor del eje $\bar{\xi}$.*

La demostración de este teorema se basa en el teorema de Taylor, según el cual

$$\bar{v}(\bar{x} + \bar{h}) = \bar{v}(\bar{x}) + \nabla \bar{v} \cdot \bar{h} + O(\bar{h}^2),$$

donde $\nabla \bar{v} \cdot \bar{h}$ denota la multiplicación matricial entre $\nabla \bar{v}$ y el vector (columna) \bar{h} y \bar{h}^2 es la norma de \bar{h} al cuadrado. Definimos la deformación D como

$$D = \frac{1}{2}(\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^t),$$

donde el superíndice t significa tomar la transpuesta. De manera análoga definimos la rotación S como

$$S = \frac{1}{2}(\nabla \bar{v} - \nabla \bar{v}^t).$$

No es difícil verificar que $\nabla \bar{v} = D + S$ y que $S \cdot \bar{h} = (1/2)(\bar{\xi} \times \bar{h})$. Luego, sustituyendo estas igualdades en la expansión de \bar{v} , obtenemos:

$$\bar{v}(\bar{x} + \bar{h}) = \bar{v}(\bar{x}) + D \cdot \bar{h} + \frac{1}{2}(\bar{\xi} \times \bar{h}) + O(\bar{h}^2), \quad (4.9)$$

con lo cual el teorema queda demostrado.

Notamos que la matriz D es simétrica y por lo tanto diagonalizable. Sea $\{\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3\}$, la base canónica de \mathbb{R}^3 en donde D es diagonal:

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix}.$$

Para entender qué representa esta matriz en el caso de un fluido en movimiento, recordemos que la velocidad de éste está dada por \bar{v} . Ignorando todos los términos de la expansión en Taylor (4.9) exceptuando $D \cdot \bar{h}$ y dejando \bar{x} fija, obtenemos que la dinámica del fluido esta dada por:

$$\frac{d\bar{h}}{dt} = D \cdot \bar{h}.$$

Esta ecuación vectorial se desacopla en la base $\{\bar{e}_1, \bar{e}_2, \bar{e}_3\}$, dando lugar a tres ecuaciones diferenciales lineales de la forma:

$$\frac{d\bar{h}_i}{dt} = d_i h_i,$$

donde $i = 1, 2, 3$ y \bar{h}_i es la componente de \bar{h} en la dirección del vector \bar{e}_i . Por lo tanto, el campo vectorial $\mathbf{D} \cdot \bar{h}$ se expande o contrae en la dirección de los vectores \bar{e}_i . Otro hecho importante es que la tasa de cambio del volumen de un cubo con lados paralelos a los vectores \bar{e}_i es

$$\frac{d}{dt}(\bar{h}_1 \cdot \bar{h}_2 \cdot \bar{h}_3) = (d_1 + d_2 + d_3)(\bar{h}_1 \cdot \bar{h}_2 \cdot \bar{h}_3).$$

Por otro lado, sabemos que la traza de una matriz queda invariante bajo transformaciones ortogonales, lo cual implica que

$$(d_1 + d_2 + d_3) = \text{Tr}[\mathbf{D}] = \text{div } \bar{v}.$$

Esto quiere decir que los elementos de volumen cambian a un ritmo proporcional a la $\text{div } \bar{v}$.

Ahora nos encontramos listos para poder definir Γ , de tal manera que exprese el transporte de momento debido al proceso de difusión de las partículas en el fluido. De acuerdo con la segunda condición de los fluidos newtonianos, Γ depende linealmente de $\nabla \bar{v}$. Además, según la tercera condición, Γ debe ser invariante ante rotaciones de cuerpo rígido, lo cual implica que depende únicamente de la parte simétrica de $\nabla \bar{v}$, es decir de la deformación \mathbf{D} . La cuarta condición impone requerimientos de simetría sobre Γ que no trataremos en detalle aquí, pues ello necesitaría de un análisis tensorial mucho más profundo que queda fuera del objetivo de esta sección. Sólo diremos que para satisfacer las cuatro condiciones de los fluidos newtonianos, la matriz de esfuerzos tangenciales debe ser de la forma:

$$\Gamma = \lambda(\text{Tr}[\mathbf{D}])\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D},$$

donde \mathbf{I} es la matriz identidad. Las constantes λ y μ son parámetros que miden la viscosidad del fluido en cuestión y su valor debe ser determinado empíricamente.

Entonces, los esfuerzos tangenciales, que actúan sobre una porción de fluido ω_t , están dados por:

$$F_{\omega_t}^T = \lambda \int_{\partial\omega_t} (\text{div } \bar{v}) \bar{n} \, dA + \mu \int_{\partial\omega_t} [\nabla \bar{v} + \nabla \bar{v}^+] \cdot \bar{n} \, dA.$$

Usando el teorema de la divergencia obtenemos que

$$F_{\omega_t}^T = \lambda \int_{\omega_t} \nabla(\text{div } \bar{v}) \, dV + \mu \int_{\omega_t} [\Delta \bar{v} + \nabla(\text{div } \bar{v})] \, dV. \quad (4.10)$$

Usando las ecuaciones (4.6), (4.7), (4.8) y (4.10), concluimos que la conservación de momento en flúidos newtonianos se expresa a través de la siguiente ecuación:

$$\int_{\omega_t} \rho \frac{D\bar{v}}{Dt} dV = - \int_{\omega_t} \nabla p dV + \\ + \int_{\omega_t} [(\lambda + \mu)[\nabla(\operatorname{div} \bar{v})] + \mu[\Delta \bar{v}]] dV + \int_{\omega_t} \rho \bar{g} dV,$$

donde hemos incluido, por completez, la acción de la gravedad, dada por el último término.

La ecuación anterior es válida para cualquier subregión ω_t y por lo tanto es equivalente a la ecuación de Navier-Stokes:

$$\rho \frac{D\bar{v}}{Dt} = -\nabla p + (\lambda + \mu)[\nabla(\operatorname{div} \bar{v})] + \mu[\Delta \bar{v}] + \rho \bar{g}. \quad (4.11)$$

P3. Conservación de Energía

Completamos nuestra descripción, haciendo uso del postulado de conservación de energía, de donde deducimos una tercera ecuación.

La energía total (E_t) presente en el flúido puede descomponerse en la suma de la energía cinética total más un término de energía interna, dando lugar a la ecuación:

$$E_t = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho |\bar{v}|^2 dV + \int_{\Omega} \rho \varrho dV,$$

donde ϱ es la densidad de energía interna. Tal como en el caso de ρ , establecer la existencia de ϱ supone una aproximación macroscópica en el estudio de la dinámica del flúido. Dado que la energía se conserva, y usando el teorema del transporte, obtenemos:

$$\frac{dE_t}{dt} = 0 = \int_{\Omega} \rho \left[\bar{v} \cdot \frac{D\bar{v}}{Dt} + \frac{D\varrho}{Dt} \right] dV,$$

Esta ecuación es válida, sin importar como se mueva el flúido, y por lo tanto es equivalente a:

$$\bar{v} \cdot \frac{D\bar{v}}{Dt} + \frac{D\varrho}{Dt} = 0. \quad (4.12)$$

En las siguiente sección centraremos nuestra atención en una clase particular de flúidos: aquellos que se conocen como incompresibles. Estos flúidos presentan la característica de que su volumen se mantiene constante aun cuando la presión varía dentro de un amplio rango. Matemáticamente la invariabilidad del volumen se escribe:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega_t} dV = 0.$$

Usando (4.5) tenemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\omega_t} dV &= \frac{d}{dt} \int_{\omega} \mathbf{J} dV \\ &= \int_{\omega} \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} \mathbf{J} dV \\ &= \int_{\omega_t} \operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} dV = 0. \end{aligned}$$

Lo cual es válido para cualquier porción ω_t de fluido. Por lo tanto la incompresibilidad de un fluido equivale a que $\operatorname{div} \bar{\mathbf{v}} = 0$.

4.2. Análisis lineal

El sistema que estudiaremos en este capítulo consiste de un fluido contenido entre dos placas paralelas conductoras de calor. Cuando existe una diferencia de temperaturas entre las placas, el calor se transmite a través del fluido. En nuestro estudio, supondremos que el sistema se encuentra inmerso en un campo gravitacional, donde la placa con mayor temperatura está por debajo de la placa con menor temperatura.

Las observaciones empíricas indican que existen al menos dos mecanismos mediante los cuales se lleva a cabo la transmisión térmica. El calor puede transmitirse por conducción y por convección, sin que estos fenómenos sean excluyentes. Cuando la diferencia de temperaturas entre las placas es pequeña, la transmisión se realiza exclusivamente por conducción. Al aumentar la diferencia de temperaturas eventualmente llegamos a un punto crítico, a partir del cual el proceso convectivo se inicia. La convección térmica se caracteriza por transporte de materia; porciones de fluido con mayor temperatura se mueven (suben) a las regiones de menor temperatura, mientras que porciones con menor temperatura se mueven (bajan) en sentido inverso.

En esta sección haremos un análisis lineal de las ecuaciones de Navier-Stokes, para determinar el punto de inestabilidad del sistema que da inicio al proceso de convección térmica, en el cual se observan los patrones convectivos de Bénard.

Nuestro punto de partida es enunciar las ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales describen la dinámica del fluido contenido entre las placas:

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{n}}}{\partial t} + (\bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{v}} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \bar{\mathbf{g}} + \nu \Delta \bar{\mathbf{v}}. \quad (4.13)$$

Además de la ecuación anterior, enunciaremos otra, satisfecha por la temperatura $T(\vec{x})$:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)T = \lambda \Delta T. \quad (4.14)$$

Al conjunto de ecuaciones anteriores hay que agregar condiciones de frontera que completan el problema. Por lo pronto, sólo supondremos que la temperatura en la placa inferior es T_1 y en la placa superior es T_2 , donde $T_1 > T_2$.

Parte de la cuestión de las condiciones de frontera se resuelve tomando las dimensiones de las placas como infinitas. Para fijar imágenes, supongamos por otro lado que la separación entre las placas se encuentra en la dirección del vector $(0, 0, 1)$. El estado del sistema, en donde el calor se transmite exclusivamente por conducción, es estacionario. Ello quiere decir que la velocidad del fluido es cero en todo punto y que la temperatura no depende del tiempo. Dadas las condiciones anteriores, el gradiente de temperaturas apunta en dirección paralela al vector $(0, 0, 1)$ y, por lo tanto, la ecuación (4.14) se reduce a:

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0.$$

Entonces, en el estado estacionario de conducción, la temperatura presenta un comportamiento lineal dado por:

$$T(z) = T_1 + \frac{T_2 - T_1}{d} z, \quad (4.15)$$

donde d es la separación entre las placas.

Hemos visto ya como la evidencia empírica demuestra que el estado estacionario de conducción es estable cuando la diferencia de temperaturas entre las placas es pequeña. Cuando esa diferencia crece, y cruza cierto umbral, el estado estacionario deja de ser estable y se inicia el proceso convectivo. El punto de transición entre ambos estados, caracterizado por algún valor fijo de la diferencia de temperaturas puede ser determinado teóricamente mediante un análisis lineal de las ecuaciones (4.13) y (4.14), que gobiernan la dinámica del sistema.

Lo anterior se logra considerando una pequeña perturbación del estado estacionario; perturbación que a su vez está gobernada por una versión lineal de las ecuaciones (4.13) y (4.14). Mediante este nuevo sistema lineal, es posible determinar si las perturbaciones crecen o tienden a desaparecer, y para qué valores de la diferencia de temperaturas entre las placas lo hacen. El primer caso correspondería a un estado de conducción inestable, dando lugar a la convección térmica, y el segundo a un estado de conducción estable.

Sean \vec{v}_0 , T_0 , ρ_0 y p_0 el conjunto de funciones que definen el estado estacionario de conducción. Este estado se caracteriza por la ausencia, a nivel macroscópico,

de transporte de materia. Es por ello que $\bar{v}_0 = 0$. Consideremos ahora el conjunto de perturbaciones $\delta\bar{v}$, δT , $\delta\rho$, y δp . Con ellas, el sistema está descrito localmente, alrededor del estado estacionario, por el conjunto de variables:

$$\begin{aligned}\bar{v} &= \delta\bar{v}, & T &= T_0 + \delta T, \\ \rho &= \rho_0 + \delta\rho, & p &= p_0 + \delta p.\end{aligned}\tag{4.16}$$

Sustituyendo las funciones \bar{v} , ρ y p de (4.16) en (4.13) obtenemos:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu\Delta\right)\delta\bar{v}_0 + (\delta\bar{v}_0 \cdot \nabla)\delta\bar{v}_0 = -\left(\frac{\nabla(p_0 + \delta p)}{\rho_0 + \delta\rho}\right) + \bar{g}.$$

El segundo término del lado izquierdo es despreciable pues las perturbaciones son pequeñas. Con el propósito de encontrar la ecuación lineal que describe el comportamiento de las perturbaciones, hacemos uso del teorema de Taylor para aproximar el primer término del lado derecho:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu\Delta\right)\delta\bar{v}_0 &= -\left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{\delta\rho}{\rho_0^2}\right)\nabla(p_0 + \delta p) + \bar{g} \\ &= -\frac{\nabla(\delta p)}{\rho_0} + \frac{\delta\rho\nabla p_0}{\rho_0^2} + \frac{\delta\rho\nabla\delta p}{\rho_0^2} - \frac{\nabla p_0}{\rho_0} + \bar{g}.\end{aligned}\tag{4.17}$$

De acuerdo a la ecuación (4.13), en el estado estacionario tenemos la relación:

$$\frac{\nabla p_0}{\rho_0} - \bar{g} = 0,\tag{4.18}$$

que cancela los dos últimos términos de la ecuación (4.17).

El proceso de convección se inicia y se mantiene debido a la fuerza de flotación que actúa sobre las porciones de fluido con temperatura más alta, respecto a porciones superiores. Esta fuerza es un efecto indirecto de la acción de la gravedad que empuja las porciones más frías, y por ende más pesadas, hacia abajo. En el fondo de todo ello se encuentra la suposición de que el fluido se comprime. Es decir, las porciones de fluido más calientes tienen una menor densidad que las porciones más frías.

Sin embargo, podemos simplificar la ecuación (4.17) considerando las compresibilidad del fluido de manera selectiva. Para ello tomamos a $\delta\rho$ igual a cero en todos aquellos términos que no involucran la acción de la gravedad, y que por lo tanto no están relacionados directamente con la fuerza de flotación. De esa forma,

podemos establecer el comportamiento aproximado de las perturbaciones a través de la ecuación :

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu \Delta\right) \delta \bar{v}_0 = -\frac{\nabla(\delta p)}{\rho_0} + \bar{g} \frac{\delta \rho}{\rho_0}, \quad (4.19)$$

donde nuevamente hemos hecho uso de (4.18).

La aproximación descrita arriba establece la incompresibilidad del fluido -salvo al momento de considerar la fuerza de flotación-. Por otro lado, la condición de incompresibilidad es equivalente a que la divergencia de la velocidad sea cero. Esta última condición debe ser satisfecha también por $\delta \bar{v}$, con lo cual se tiene que

$$\nabla \cdot \delta \bar{v} = 0. \quad (4.20)$$

Tomando entonces la divergencia en ambos lados de la ecuación (4.19) y aplicando la condición (4.20) tenemos que

$$\Delta \delta p = (\bar{g} \cdot \nabla) \delta \rho = -g \frac{\partial(\delta \rho)}{\partial z},$$

donde g denota la componente vertical de la gravedad, la cual es negativa pues la última apunta hacia abajo. Derivando ahora respecto a z obtenemos:

$$\Delta \left(\frac{\partial \delta p}{\partial z} \right) = -g \frac{\partial^2(\delta \rho)}{\partial z^2}. \quad (4.21)$$

Dada la simetría de nuestro arreglo, estamos interesados principalmente en la componente vertical de $\delta \bar{v}$, a la cual denotamos como δw . La ecuación (4.19) nos describe su comportamiento lineal, de tal manera que

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu \Delta\right) \delta w = -\frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial}{\partial z} \delta p + g \delta \rho\right).$$

Si tomamos el laplaciano en ambos lados y aplicamos (4.21), la ecuación anterior obtiene la forma:

$$\Delta \left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu \Delta\right) \delta w = -\frac{g}{\rho_0} \left(\Delta - \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \delta \rho. \quad (4.22)$$

La densidad, por otro lado, depende de la temperatura. Aunque no conocemos la forma explícita de esa dependencia, si podemos establecer que

$$\delta \rho = \frac{\partial \rho}{\partial T} \delta T.$$

Definimos a continuación el coeficiente de expansión térmica α como:

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial T}. \quad (4.23)$$

Luego, reescribimos (4.22) como:

$$\Delta \left(\frac{\partial}{\partial t} - \nu \Delta \right) \delta w = \alpha g \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \delta T. \quad (4.24)$$

Por otro lado, la versión lineal de la ecuación (4.14) se escribe:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} - \lambda \Delta \right) \delta T &= -(\delta v \cdot \nabla) T_0 \\ &= \delta w \frac{\Delta T}{d}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde hemos ΔT es la diferencia de temperaturas entre las placas superior e inferior.

Podemos simplificar significativamente las ecuaciones (4.24) y (4.25) si reescalamos las variables adecuadamente. Esto lo hacemos definiendo las siguientes cantidades adimensionales:

$$X = \frac{x}{d}, \quad Y = \frac{y}{d}, \quad Z = \frac{z}{d}, \quad \tau = \frac{t\nu}{d^2}, \quad (4.26)$$

$$\theta = \frac{\delta T}{\Delta T}, \quad w = \frac{\delta w d}{\lambda}, \quad \sigma = \frac{\nu}{\lambda},$$

que al sustituirlas en (4.24) y (4.25), obtenemos:

$$\Delta \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \Delta \right) w = R \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) \theta \quad (4.27)$$

y

$$\left(\sigma \frac{\partial}{\partial \tau} - \Delta \right) \theta = w, \quad (4.28)$$

donde el laplaciano se toma respecto a las nuevas variables y R denota el número de Rayleigh, dado por:

$$R = \frac{\alpha(\Delta T)gd^3}{\lambda\nu}. \quad (4.29)$$

La simetría del sistema, nos lleva a pensar que las soluciones a las ecuaciones (4.27) y (4.28) deben tener un comportamiento periódico en direcciones paralelas a los vectores $(1, 0, 0)$ y $(0, 1, 0)$. Esta conjetura está apoyada en la evidencia experimental que muestra patrones convectivos periódicos. Con estos argumentos parece razonable proponer como soluciones a (4.27) y (4.28), el siguiente par de funciones:

$$w(X, Y, Z, \tau) = W(Z) e^{i(k_x x + k_y y) + r\tau} \quad (4.30)$$

y

$$\theta(X, Y, Z, \tau) = \Theta(Z)e^{i(k_x x + k_y y) + r\tau}. \quad (4.31)$$

La estabilidad del estado estacionario de conducción está determinada por el valor que tome la constante de relajamiento r . Si la parte real de r es negativa, las perturbaciones w y θ tienden a desaparecer conforme el tiempo transcurre. Por otro lado, si la parte real de r es positiva, entonces las perturbaciones se magnifican conforme el tiempo transcurre, y su comportamiento eventualmente deja de ser lineal.

Al sustituir las funciones (4.30) y (4.31) en (4.27) y (4.28), aparecen dos ecuaciones que deben ser satisfechas por W y Θ :

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2\right)\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2 - r\right)W = Ra^2\Theta, \quad (4.32)$$

y

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2 - \sigma r\right)\Theta = -W, \quad (4.33)$$

donde $a = (k_x^2 + k_y^2)d^2$ es el número de onda adimensionalado.

Procedemos ahora a establecer las condiciones de frontera necesarias para resolver el sistema descrito por las ecuaciones (4.32) y (4.33). Dos tipos de frontera podemos considerar dependiendo del esquema experimental que tengamos en mente. Por un lado, podemos pensar que la presencia de las placas induce inmovilidad en las porciones de fluido que se encuentran más próximas a ellas. Por otro, podemos considerar fronteras más libres, en el sentido de que las porciones más próximas a ellas se mueven libremente. Al primer tipo las llamaremos fronteras estacionarias.

Supongamos que la perturbación adimensional de la velocidad está dada por el vector (u, v, w) . En el caso de tener fronteras estacionarias, las velocidades tangentes a las placas son cero, y además,

$$\frac{\partial u}{\partial X} = \frac{\partial v}{\partial Y} = 0,$$

cuando $Z = 0$ y $Z = 1$. Por otro lado, la ecuación de continuidad (4.1), obtenida en la sección anterior, implica en este caso que

$$\frac{\partial u}{\partial X} + \frac{\partial v}{\partial Y} + \frac{\partial w}{\partial Z} = 0,$$

en $Z = 0$ y $Z = 1$. Por lo tanto, para las porciones de fluido adyacentes a las placas tenemos que

$$\frac{\partial w}{\partial Z} = 0.$$

Adicionalmente, si suponemos que las placas presentan una alta conductividad térmica, entonces podemos suponer que la temperatura se mantiene constante en ellas. En ese caso, la perturbación de la temperatura también se anula en las porciones de fluido adyacentes a las placas. En resumen, si consideramos fronteras estacionarias y alta conductividad térmica podemos establecer las condiciones:

$$W = \frac{dW}{dZ} = \Theta = 0; \quad Z = 0, 1. \quad (4.34)$$

Despejando Θ de (4.33) y sustituyendo en (4.32) obtenemos una sola ecuación para W :

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2\right)\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2 - r\right)\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2 - \sigma r\right)W = -Ra^2W.$$

Como dijimos al inicio de la sección, estamos interesados en caracterizar el punto de inestabilidad que da origen al proceso de convección. Ese umbral se alcanza cuando $r = 0$ y en ese caso la ecuación anterior se transforma en:

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2\right)^3 W = -Ra^2W. \quad (4.35)$$

Además de tomar $r = 0$, buscamos el menor valor posible de R en el cual se tienen soluciones convectivas, pues ese valor es el que se puede medir experimentalmente. Las soluciones a (4.35) pueden darse en términos de senos y cosenos hiperbólicos. Sin embargo, las soluciones simétricas respecto al plano $Z = 1/2$ corresponden a valores menores de R , que las soluciones antisimétricas. La solución simétrica a (4.35) puede escribirse como:

$$W = A_1 \cosh \gamma_1 \left(Z - \frac{1}{2}\right) + A_2 \cosh \gamma_2 \left(Z - \frac{1}{2}\right) + A_3 \cosh \gamma_3 \left(Z - \frac{1}{2}\right), \quad (4.36)$$

donde γ_i , con $i = 1, 2$ y 3 , debe satisfacer la ecuación:

$$(\gamma_i^2 - a^2)^3 + Ra^2 = 0. \quad (4.37)$$

Las constantes A_1 , A_2 y A_3 deben ser determinadas por las condiciones de frontera (4.34), a las cuales se debe añadir una tercera condición que es consecuencia de la ecuación (4.32) al ser evaluada en $Z = 0$ y 1 :

$$\left(\frac{d^2}{dZ^2} - a^2\right)^2 W = 0. \quad (4.38)$$

En lo que sigue, omitiremos algunos detalles del análisis que nos llevan a encontrar el valor crítico de R , con el cual se inicia el proceso convectivo. En parti-

cular, omitimos algunos pasos algebraicos que resultan demasiado engorrosos para la lectura. Empleando las condiciones (4.34) y (4.38) encontramos tres ecuaciones homogéneas para las constantes A_1 , A_2 y A_3 . Usando la condición algebraica que garantiza que este sistema tenga solución, encontramos a R_c como función de a . Por último, buscamos el mínimo de dicha función que resulta ser:

$$R_c \simeq 1708, \quad (4.39)$$

el cual se alcanza cuando

$$a_c \simeq 3,12. \quad (4.40)$$

Sólo nos resta decir que estos valores son muy cercanos a los obtenidos experimentalmente.

4.3. Patrones convectivos y flotaxis

En esta sección hacemos una breve descripción de un tipo muy particular de patrones convectivos, los llamados patrones de Bénard-Marangoni, desde el punto de vista de la cristalografía. Nos restringimos a patrones con simetría radial (cilíndrica), lo que nos permite establecer analogías con los patrones de flotaxis estudiados en el capítulo anterior. Nuestro propósito es mostrar que, aunque la descripción geométrica de los patrones es muy precisa, ésta es insuficiente para describir los mecanismos morfogenéticos; situación que también encontramos en los modelos geométricos de flotaxis.

Descripción del patrón convectivo

Nuestro análisis se centra en los patrones convectivos de Bénard-Marangoni con simetría radial. Estos son generados al calentar un fluido por debajo, contenido en un recipiente (circular) de poca profundidad relativa al diámetro de su base. Lo que diferencia al sistema de Bénard-Marangoni del sistema de Bénard, es que en el primero la superficie superior del fluido está libre, mientras que en el segundo está en contacto con una placa conductora de calor. Ambos patrones son generados de la misma manera: la diferencia de temperaturas entre la parte inferior y la superficie induce una fuerza de flotación en las capas inferiores. Cuando esa diferencia es mayor que determinado umbral, el calor se transmite por convección generando celdas.

En los experimentos podemos observar que la mayoría de las celdas convectivas tienen forma hexagonal, mientras que la minoría restante son generalmente pentagonales o heptagonales. Jamás han sido observados patrones convectivos con

estructura hexagonal perfecta. Esto nos lleva a pensar que estas celdas son requisito estructural del patrón. El fluido con mayor temperatura asciende por la parte central de las celdas, para después descender por la periferia. Un punto importante debemos enfatizar: debido a la dinámica del fluido en convección, las celdas se repelen entre sí. Esta observación, aunada a la evidencia empírica obtenida en el experimento de Douady y Couder donde las partículas también se repelen, nos motiva a suponer que esta fuerza de repulsión es responsable, no exclusivamente pero en gran medida, de la generación y mantenimiento del patrón. En filotaxis podemos suponer, sin necesidad de argumentos muy elaborados, que entre pétalos existe repulsión debido a la tensión mecánica generada por el crecimiento de la estructura. Sin embargo, no creemos que esta tensión mecánica sea responsable, al menos no exclusivamente, de la ubicación de nuevos órganos en el meristemo.

Continuando con el patrón convectivo, otro aspecto debemos mencionar: en los experimentos podemos observar que todo el patrón está girando, y el periodo de rotación es igual al periodo del péndulo de Foucault. Cada celda también gira alrededor de su propio eje con el mismo periodo. Este movimiento rotacional puede ser ocasionado por la fuerza de coriolis, aunque la causa no es lo más relevante en este momento, sino el efecto que produce en la forma: debido a la rotación, esfuerzos cortantes son generados a lo largo de toda la estructura. Las celdas penta y heptagonales son necesarias entonces para disipar la energía generada por estos esfuerzos [17].

Defectos, elemento estructural del patrón

Hemos dicho arriba cómo, en los patrones convectivos, invariablemente aparecen celdas pentagonales y heptagonales. Estas celdas, que en un primer acercamiento parecen ser *defectos* en la estructura, resultan ser elementos indispensables. Esto es debido en parte a que la red hexagonal generada es finita; las condiciones de frontera imponen la presencia de dichos defectos. Lo anterior es consecuencia del teorema de Euler, que relaciona el número de vértices (V), aristas (E) y celdas (F), que componen una red. Según este teorema

$$F - E + V = 1. \quad (4.41)$$

Por otro lado, supongamos que V_p y E_p son respectivamente el número de vértices y aristas en la frontera, y que F_n es el número de celdas con n lados (aristas). Entonces tenemos que

$$\sum_n nF_n = 2E - E_p. \quad (4.42)$$

Esto sucede pues cada arista es lado de dos celdas, salvo aquellas que se encuentran en la frontera. De la misma forma podemos relacionar el número de vértices y aristas

mediante la ecuación:

$$2E = 3V - V_p, \quad (4.43)$$

observando que cada arista une dos vértices y que en cada vértice convergen tres aristas, salvo en la frontera, donde cada vértice une sólo dos aristas.

De (4.41), (4.42) y (4.43) podemos obtener:

$$6F - \sum_n nF_n = 6 + E_p - 2V_p.$$

Pero sabemos que $E_p = 2V_p$, con lo cual

$$6F - \sum_n nF_n = 6 \quad (4.44)$$

Esta última ecuación implica que en una malla hexagonal finita, no todas las celdas pueden ser hexagonales. Deben existir, por lo menos, seis celdas pentagonales. Empíricamente podemos concluir que los patrones convectivos presentan siempre más celdas pentagonales que las seis requeridas por el razonamiento anterior. Los estudios de Rivier et al [17] muestran que las celdas penta y heptagonales disipan la energía generada por esfuerzos cortantes. Esto mismo ocurre en filotaxis, donde las celdas no hexagonales ayudan a disipar la tensión generada por el crecimiento radial de la estructura.

Similitudes entre patrones convectivos y filotaxis

La similitud que consideramos más relevante entre los patrones convectivos y filotaxis, radica en que ambas estructuras resuelven un problema de empaquetamiento de discos, -problema que por cierto has sido resuelto desde hace mucho tiempo por las abejas, en la construcción de panales-. Lo interesante en ambos casos es que, considerando los sistemas en dónde emergen estos patrones, los mecanismos morfogénéticos que los producen pueden ser emulados mediante algoritmos o códigos relativamente simples. En filotaxis esta condición es necesaria para la codificación genética, que hace posible la reproducción precisa de la estructura en diversos organismos, incluso pertenecientes a distintas especies. En el caso del sistema convectivo, Rivier et al [17] han mostrado cómo a partir de algoritmos simples se pueden simular numéricamente los mecanismos morfogénéticos, a partir de consideraciones geométricas, y siguiendo analogías de la estructura convectiva y filotaxis.

Sin embargo, consideramos que el hecho de contar con algoritmos capaces de emular el crecimiento de los patrones, no implica necesariamente una descripción de los mecanismos físicos o químicos que los generan. En el caso de filotaxis nuestra propuesta, que señala a un sistema de reacción-difusión como responsable de

la morfogénesis, tiene como objetivo esbozar una descripción de esa naturaleza. No contamos con algo similar para los patrones convectivos, aunque creemos que todo intento de desarrollar una descripción de primeros principios, debe tomar en consideración principalmente los aspectos variacionales del problema.

Conclusiones

Hemos visto como el patrón de filotaxis en la margarita, -el cuál puede ser encontrado en una gran variedad de estructuras orgánicas [18],- guarda grandes similitudes geométricas con el patrón convectivo de Bénard. Ambos patrones, como hemos repetido en varias ocasiones, resuelven un problema de empaquetamiento de discos, y esto es resultado de un proceso de autoorganización.

Los modelos geométricos han logrado mostrar, con buenos resultados, un conjunto de relaciones numéricas intrínsecas a estos patrones. Esto ha hecho posible la construcción de algoritmos capaces de generar las estructuras observadas ([9], [10] y [17]). Sin embargo, los mecanismos (dinámicos) morfogenéticos involucrados todavía no han sido completamente explicados. En este sentido, el experimento de Douady y Couder [4] da mucha luz sobre la dinámica que dichos mecanismos deben presentar.

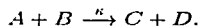
Por otro lado, se ha propuesto un mecanismo de reacción-difusión con tres sustancias [11], para explicar la emergencia de filotaxis en la margarita. En este trabajo proponemos un mecanismo análogo, con un sistema tipo activador-inhibidor, en donde participan sólo dos reactivos. Esta propuesta se fundamenta en resultados recientes ([5], [6] y [19]), donde se demuestra la existencia de estados en esta tipo de sistemas, caracterizados por manchas, cuya configuración es solución al problema de empaquetamiento de discos.

A. Ley de acción de masas y modelo Field-Noyes

Ley de acción de masas.

En el capítulo 1 mencionamos la ley de acción de masas y una consecuencia de la misma, cuando una reacción química alcanza un equilibrio termodinámico. En este apéndice enunciamos formalmente esta ley, y mostramos su utilidad en un modelo de la cinética de la reacción B-Z.

La ley de acción de masas puede enunciarse de la siguiente manera [15]: "La velocidad a la que se realiza una reacción química es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos". Supongamos por ejemplo que tenemos una reacción dónde dos sustancias, A y B , interactúan de tal manera que se tienen dos productos, C y D , representada mediante la ecuación:



Según la ley de acción de masas, la velocidad (V_r) de esta reacción está dada por:

$$V_r = \kappa[A][B],$$

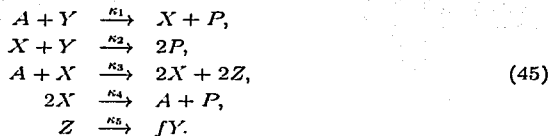
donde κ es una constante de proporcionalidad, y hemos denotado por $[X]$ a la concentración de la sustancia X .

Modelo Field-Noyes.

En este apartado presentamos, de manera muy breve, un modelo relativamente simple de la cinética de la reacción B-Z: el modelo Field-Noyes (F-N). El propósito de esta exposición es mostrar algunas implicaciones de la ley de acción de masas en el estudio de las reacciones químicas.

En el modelo F-N se consideran cinco reactivos [15]: $X = HBrO_2$, $Y = Br^-$, $Z = Ce^{4+}$, $A = BrO_3^-$ y $P = HOBr$. La cinética del modelo está dada por el

conjunto de ecuaciones:



En el curso de la reacción, podemos considerar como constante la concentración de A , e ignorar la de P . De acuerdo entonces con (45), e incorporando la ley de acción de masas, la cinética de la reacción B-Z puede aproximarse mediante el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 \frac{d[X]}{dt} &= \kappa_1[A][Y] - \kappa_2[X][Y] + \kappa_3[A][X] - \kappa_4[X]^2, \\
 \frac{d[Y]}{dt} &= -\kappa_1[A][Y] - \kappa_2[X][Y] + f\kappa_5[Z], \\
 \frac{d[Z]}{dt} &= 2\kappa_3[A][X] - \kappa_5[Z].
 \end{aligned}$$

B. Deducción de las ecuaciones de reacción y difusión

Caminatas aleatorias

En el capítulo 2 vimos cómo el proceso de difusión juega un papel muy relevante en la formación de patrones, dentro del contexto de autocatálisis local e inhibición global. Uno de los primeros en proponer este mecanismo fue Turing (1952), con base en un concepto audaz: el proceso difusivo como generador de inestabilidad local. Esta idea, innovadora en su tiempo, contraviene nuestras expectativas intuitivas, pues tendemos a pensar en la difusión como proceso homogeneizador. Es difícil imaginar, al menos en primera intención, que el rompimiento de simetrías sea consecuencia de ese proceso.

En este apéndice deduciremos la ecuación de difusión mediante el estudio de partículas que se mueven de manera aleatoria. Dado que por simplicidad se consideran movimientos no continuos, estas partículas son conocidas como *caminantes aleatorios*. Este análisis nos permitirá entender el proceso difusivo como el resultado macroscópico del movimiento azaroso de estas partículas. Por razones de simplicidad, supondremos que el movimiento se realiza en una sola dimensión espacial, aunque los resultados son generalizables a dimensiones superiores.

Consideremos una partícula que se mueve en una dimensión de manera aleatoria. Su movimiento es discreto, de tal manera que recorre una distancia Δx en un tiempo Δt ; x representa la coordenada espacial, cuyo dominio son los reales, mientras que t representa el tiempo, con dominio en los reales positivos. Supongamos, sin pérdida de generalidad, que cuando $t = 0$, la partícula se encuentra en $x = 0$. Nuestra pregunta central es: ¿Cuál es la probabilidad $p(x, t)$, de que la partícula se encuentre en x al tiempo t ?

Antes de contestar la pregunta anterior, hagamos una observación importante. Si la probabilidad de que la partícula se mueva a la derecha es α , mientras que la

probabilidad de que se mueva a la izquierda es β , entonces

$$p(x, t) = \alpha p(x - \Delta x, t - \Delta t) + \beta p(x + \Delta x, t - \Delta t). \quad (46)$$

Además, por el teorema de Taylor:

$$p(x \pm \Delta x, t - \Delta t) = p(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} - \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \\ + \frac{1}{2} [(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \mp 2\Delta x \Delta t \frac{\partial^2 p}{\partial x \partial t} + (\Delta t)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial t^2}] + \dots$$

Tomando $\alpha = \beta = 1/2$ y sustituyendo lo anterior en (46), obtenemos:

$$\Delta t \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2} [(\Delta x)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + (\Delta t)^2 \frac{\partial^2 p}{\partial t^2}] + \dots$$

Finalmente, haciendo tender Δx y Δt a cero, y suponiendo que

$$\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} \rightarrow D, \quad \text{cuando } \Delta x \rightarrow 0 \text{ y } \Delta t \rightarrow 0, \quad (47)$$

donde D es constante, obtenemos una ecuación para la distribución de probabilidad $p(x, t)$:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}. \quad (48)$$

D es el coeficiente de difusión, el cual es una medida de la *eficiencia* con que las partículas se mueven de zonas de alta concentración a zonas de baja. Esta constante puede ser determinada experimentalmente. Es importante notar que la suposición expresada en (47) se basa en observaciones empíricas.

Ahora podemos enfocarnos en deducir una expresión analítica para la probabilidad de encontrar a la partícula en determinado lugar. Regresemos al sistema discreto y supongamos que al tiempo $t = n\Delta t$ la partícula se encuentra en $x = m\Delta x$. Denotemos con a , el número de pasos tomados a la derecha, y con b , el número de pasos a la izquierda. Entonces $m = a - b$ y $n = a + b$. Lo anterior implica que $a = (m + n)/2$ y $b = n - a$.

El número total de caminos posibles para llegar a $x = m\Delta x$, con a pasos a la derecha y b pasos a la izquierda, está dado por:

$$\frac{n!}{a!b!} = \frac{n!}{a!(n-a)!},$$

mientras que el número total de caminos con n pasos es 2^n . Esto nos permite afirmar que si denotamos con $p(m, n)$ la probabilidad de encontrar a la partícula en $x = m\Delta x$ al tiempo $t = n\Delta t$, entonces

$$p(m, n) = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{a!(n-a)!} \quad (49)$$

Cuando n es muy grande se puede establecer el comportamiento asintótico del factorial como sigue:

$$n! \simeq (2\pi n)^{1/2} n^n e^{-n} \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty. \quad (50)$$

Este resultado se obtiene aplicando el método asintótico de Laplace [14] en la integral que define a la función gama:

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^n dt.$$

Usando (50) en (49) encontramos que

$$p(m, n) \simeq \left[\frac{2}{\pi n} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{m^2}{2n} \right],$$

cuando m y n son muy grandes.

Las variables espacial y temporal continuas pueden definirse tomando el límite de $x = m\Delta x$ y $t = n\Delta t$, cuando m y n tienden a infinito, pero Δx y Δt tienden a cero. Sin embargo, en ese caso $p(m, n)$ tiende a cero, pues el número de puntos donde se puede encontrar a la partícula tiende a infinito. Por lo tanto, la cantidad que nos interesa es la probabilidad u de encontrar a la partícula en el intervalo $(x, x + \Delta x)$, donde $u = p/2\Delta x$.

Tenemos entonces que

$$\frac{p\left(\frac{x}{\Delta x}, \frac{t}{\Delta t}\right)}{2\Delta x} \simeq \left[\frac{\Delta t}{2\pi t (\Delta x)^2} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{x^2}{2t} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \right]$$

Tomando el límite cuando Δx y Δt tienden a cero y suponiendo la validez de la ecuación (47), entonces

$$u(x, t) = \left(\frac{1}{4\pi Dt} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{x^2}{4Dt} \right] \quad (51)$$

El resultado anterior de alguna manera satisface nuestras expectativas intuitivas. Entre más lejos nos encontremos del punto de partida de la partícula, más improbable será encontrarla. La distribución de probabilidad encontrada es similar al perfil de concentraciones, que se puede observar al arrojar una gota de colorante en agua.

Ecuaciones de reacción-difusión

Sea Ω una región acotada del espacio. Supongamos que en ella se lleva a cabo una reacción química en donde se produce (o desaparece) cierta sustancia A , a una

tasa f . Dicho ritmo de producción puede depender de la variable espacial, el tiempo, o incluso de la propia concentración de la sustancia. Sea a esta última. Deduciremos en este apartado la forma general de las ecuaciones de reacción-difusión:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = f + D\Delta a, \quad (52)$$

donde D denota la difusividad de la sustancia, y Δ representa el operador de Laplace.

De acuerdo a la ley de conservación de masa, para toda región ω contenida en Ω , podemos escribir:

$$\frac{d}{dt} \int_{\omega} a(\bar{x}, t) dV = - \int_{\partial\omega} \bar{J} \cdot ds + \int_{\omega} f dV,$$

donde $\partial\omega$ representa la frontera de ω y \bar{J} el flujo de material por difusión. Haciendo uso del teorema de la divergencia y suponiendo que a es continua, podemos reescribir la ecuación anterior como:

$$\int_{\omega} \left[\frac{\partial a}{\partial t} + \text{div}(\bar{J}) - f \right] dV = 0.$$

Como lo anterior es válido para toda región ω , entonces tenemos que:

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \text{div}(\bar{J}) - f = 0.$$

Si suponemos además que el flujo de la sustancia es proporcional al gradiente de la concentración:

$$\bar{J} = -D\nabla a,$$

donde el signo negativo indica que la sustancia se mueve en la dirección hacia dónde a disminuye, entonces

$$\frac{\partial a}{\partial t} = f + \text{div}(D\nabla a).$$

Finalmente suponiendo que la difusividad es la misma en todo el espacio (por homogeneidad), entonces la ecuación anterior equivale a (52).

Bibliografía

- [1] J. K. Bhattacharjee. *Convection and Chaos in Fluids*. World Scientific Publishing Co., 1987.
- [2] A. J. Chorin y J. E. Marsden. *A Mathematical Introduction to Fluid Mechanics*. Springer-Verlag, 1979.
- [3] M. Cross y P. Hohenberg. *Pattern formation outside of equilibrium*. Reviews of Modern Physics, Vol 65, 851 (1993)
- [4] S. Douady y Y. Couder. *Phyllotaxis as a physical self-organized growth process*. Physical Review Letters, 68 (1992), pp. 2098-2101.
- [5] C. E. Garza-Hume y P. Padilla. *A Pattern formation problem on the Sphere*. IIMAS-FENOMEC, Universidad Nacional Autónoma de México, México, 2000.
- [6] Gui, Wei, J. *Multiple interior peak solutions for some singularly perturbed Neumann problems*. J. Differential Equations, 158 (1999), no.1, pp. 1-27.
- [7] A.I. Khinchin. *Continued Fractions*. Phoenix Sciences Series. The University of Chicago Press, 1964.
- [8] A. J. Koch, G. Bernasconi y F. Rothen. *A Phyllotaxis as a Geometrical and Dynamical System*. Series in Mathematical Biology and Medicine Vol. 4: Symmetry in Plants, pp. 459-486, World Scientific Publishing Co, 1998.
- [9] A. J. Koch y F. Rothen. *Phyllotaxis, or the properties of spiral lattices. I. Shape invariance under compression*. Journal de Physique, 50 (1989), pp. 633-657.
- [10] A. J. Koch y F. Rothen. *Phyllotaxis, or the properties of spiral lattices. II. Packing of circles along logarithmic spirals*. Journal de Physique, 50 (1989), pp. 1603-1621.

- [11] H. Meinhardt, A. J. Koch y G. Bernasconi. *Models of Pattern Formation Applied to Plant Development*. Series in Mathematical Biology and Medicine Vol. 4: Symmetry in Plants, pp. 723-758, World Scientific Publishing Co, 1998.
- [12] H. Meinhardt. *Biological Pattern Formation As A Complex Dynamic Phenomenon*. International Journal of Bifurcation and Chaos, Vol. 7, No. 1 (1997), 1-26, World Scientific Publishing Company.
- [13] H. Meinhardt. *Pattern formation in biology: a comparison of models and experiments*. Reports in Progress in Physics, 55 (1992), pp. 797-849.
- [14] Murray. *Asymptotic Analysis*. Springer-Verlag, 1984.
- [15] J. D. Murray. *Mathematical Biology*. Springer-Verlag, 1989.
- [16] G. Nicolis e I. Prigogine. *Exploring Complexity: An Introduction*. W. H. Freeman and Company, 1989.
- [17] N. Rivier, R. Occelli, J. Pantaloni y A. Lissowski. *Structure of Bénard convection cells, phyllotaxis and crystallography in cylindrical symmetry*. Journal de Physique, 45 (1984), pp. 49-63.
- [18] P. Miramontes. *La geometría de las formas vivas*. Ciencias, 42 (1996), pp. 12-19.
- [19] Wei-Ming Ni. *Diffusion, Cross-Diffusion, and Their Spike-Layer Steady States*. Notices of the AMS, Vol. 45, No.1 (1998).
- [20] M. W. Zemansky. *Heat and Thermodynamics*. Mc. Graw-Hill Book Company, Inc. 1957.