
Ecuaciones de reacción-difusión y formación de patrones.



UNIVERSIDAD
COMPLUTENSE
MADRID

Adrián Sánchez Nevado
Tutor : José María Arrieta Algarra
Facultad de Ciencias Matemáticas
Departamento de Análisis Matemático y Matemática Aplicada
Universidad Complutense de Madrid

Trabajo de Fin de Grado presentado para optar al Grado de
Matemáticas

Curso académico 2022-2023

Resumen

La difusión es un proceso presente en multitud de situaciones biológicas, siendo la más conocida la propagación de energía térmica en forma de calor. Usualmente, la difusión viene acompañada de procesos químicos de creación o degradación celular, dando lugar a las ecuaciones de reacción-difusión. En el primer capítulo deduciremos dichas ecuaciones.

Bajo determinadas condiciones, las soluciones de sistemas de 2 ecuaciones de reacción-difusión pueden formar patrones espaciales, lo que permite explicar matemáticamente la formación de las rayas de las cebras, las manchas del guepardo o los dedos del ser humano ([7],[8]). En el segundo capítulo estudiaremos el mecanismo Turing, uno de los más conocidos para la formación de patrones. Posteriormente, aplicaremos los resultados obtenidos a un modelo concreto cuyo estudio analítico y posterior simulación numérica nos permitirá observar dichos patrones.

Palabras Clave

Difusión, reacción-difusión, leyes de Fick, inestabilidad de Turing, formación de patrones, modelo de Schnakenberg, biología matemática.

Abstract

Diffusion is a process that takes place in a lot of biological situations, being the best known the propagation of thermal energy in the form of heat. Usually, diffusion takes place with chemical processes of cell creation or degradation, giving reaction-diffusion equations. In the first chapter we will deduce these equations.

Under certain conditions, the solutions of systems of 2 reaction-diffusion equations can form spatial patterns, being able to explain mathematically several interesting phenomena in biology like the formation of zebra stripes, cheetah spots or human fingers ([7],[8]). In the second chapter we will study the Turing mechanism, one of the best known in pattern formation. Afterwards, we will apply the results to a particular model whose analytic study and later numerical simulation will allow us to see the patterns.

Keywords

Diffusion, reaction-diffusion, Fick's laws, Turing instability, pattern formation, Schnakenberg model, mathematical biology.

Introducción y objetivos.

El presente trabajo aborda el fenómeno conocido como formación de patrones, al que contribuyó de forma decisiva el matemático Alan Mathison Turing (1912-1954), mundialmente conocido por sus trabajos en computación pero menos conocido por sus estudios de ecuaciones en derivadas parciales y sus aplicaciones a la biología matemática.

En primer lugar, estudiaremos el fenómeno de difusión molecular. Durante el siglo XIX se estaba estudiando cómo modelizar la propagación de calor a lo largo de una varilla fina de longitud L aislada térmicamente y con temperatura nula en los extremos, sobre la cual se administra cierta temperatura inicial que viene dada por una función $u_0(x)$. El primero que resolvió este problema fue Joseph Fourier, publicando en 1822 el libro *Theorie analytique de la chaleur* en el que se modeliza el problema anterior mediante la ecuación

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, & 0 < x < L \\ u(0, t) = u(L, t) = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x), & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (1)$$

donde $u(x, t)$ representa la temperatura de la varilla en la posición x en tiempo t . La ecuación anterior es la *ecuación del calor* y una vez propuesta marcó un antes y un después en la teoría de ecuaciones en derivadas parciales, siendo hoy en día uno de los temas más estudiados por la matemática pura y aplicada. En el primer capítulo deduciremos esta ecuación mediante las leyes de Fick, leyes que nos permiten modelizar la propagación molecular en fenómenos de difusión.

Por otro lado, en situaciones biológicas más complejas no sólo es importante tener en cuenta la difusión sino también procesos químicos de transformación celular, obteniendo así ecuaciones de la forma

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + f(u) \quad (2)$$

donde $f(u)$ modeliza dichas transformaciones. Por ejemplo, la función $f(u) = u(1 - u)e^{-\beta(1-u)}$ con $0 < \beta < \infty$ se utiliza en teoría de la combustión, mientras que la función $f(u) = u(1 - u)$ permite explicar procesos de mutación genética. La ecuación (2) se conoce como *ecuación de reacción-difusión* y permite explicar multitud de situaciones químicas, físicas y biológicas, tal y como ponen

de manifiesto los ejemplos anteriores. Deduciremos esta ecuación en la sección 1.2.

Consideremos ahora el problema de difusión

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, & 0 < x < L \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0 \\ u(x, 0) = u_0(x), & 0 \leq x \leq L \end{cases} \quad (3)$$

que surge de (1) al cambiar las condiciones de contorno de tipo Dirichlet ($u = 0$) a tipo Neumann ($\frac{\partial u}{\partial x} = 0$). Estas nuevas condiciones representan que la varilla está completamente aislada y no se produce pérdida de calor en los extremos.

En el problema anterior, puede probarse que a medida que pasa el tiempo, la temperatura se va distribuyendo uniformemente por toda la varilla hasta alcanzar una temperatura constante. Por ello, es razonable pensar que la difusión es un proceso estabilizador, es decir, toda solución estacionaria que sea estable en un problema sin difusión de la forma

$$u' = f(u) \quad (4)$$

seguirá siendo estable y constante al considerar la difusión, es decir, al considerar el problema

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + f(u), & x \in (0, L) \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = \frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

(Nótese que si $u = a$ es solución de (4) entonces también es solución de (5)).

En 1952, Alan Turing publica el artículo *The Chemical Basis of Morphogenesis* [9], abriendo las puertas a una nueva rama de investigación matemática relacionada con la formación espontánea de patrones en la naturaleza. En dicho artículo, Turing describe un modelo matemático para el crecimiento del embrión mediante un sistema de ecuaciones de reacción-difusión en el que una sustancia química activadora $u(x, t)$ reacciona con otra sustancia química inhibidora $v(x, t)$, difundándose ambas por un recinto unidimensional:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= f(u, v) + D_u \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \\ \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} &= g(u, v) + D_v \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (6)$$

Al analizar las ecuaciones del modelo, Turing descubre que existen soluciones estacionarias constantes que son estables en ausencia de difusión (cuando $\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} = 0$) pero inestables en presencia de la misma, es decir, la difusión puede deshacer la distribución homogénea e uniforme en la que se encuentran ambas sustancias químicas, creando un estado en el que las mismas están bien diferenciadas, lo que da lugar a la aparición de diversos tipos de patrones. Este es un hecho sorprendente y contraintuitivo, pues como hemos visto anteriormente, es razonable pensar que la difusión, lejos de desestabilizar, estabiliza. A este fenómeno se le conoce como *inestabilidad de Turing*

(diffusion-driven instability).

Años después, James Dickson Murray estaba convencido de que el modelo de Turing podía explicar gran parte de los patrones que vemos en las pieles de los animales. Por ello, en 1993 publica el libro *Mathematical Biology* [7] en el que, partiendo de la idea de Turing, extiende el estudio del sistema (6) al caso bidimensional, ofreciendo condiciones para que tenga lugar el fenómeno de inestabilidad de Turing. Desarrollaremos esta idea en la primera sección del segundo capítulo.

Aplicando sus resultados a modelos concretos, Murray descubre que en determinadas ocasiones, las soluciones de un modelo pueden generar diferentes patrones en función del valor de sus parámetros y de la geometría en la que se desarrolle el proceso de reacción-difusión (véanse las Figuras 1 y 2). En la sección 2.2 trabajaremos con esta idea, estudiando la formación de patrones para el modelo de Schnakenberg en recintos cuadrados.

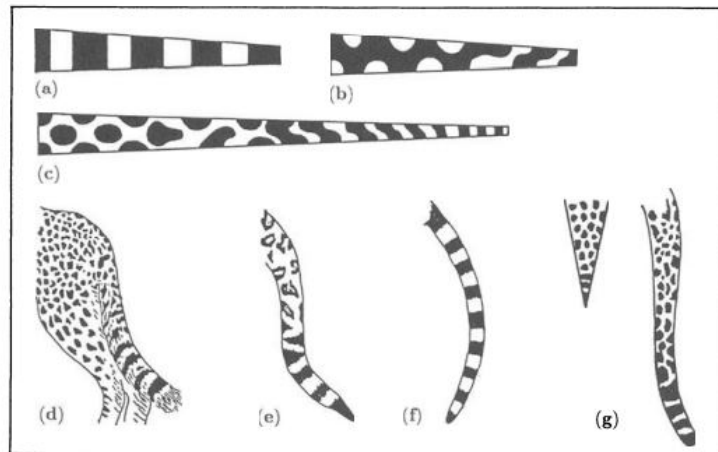


Figura 1: (a)-(c) Patrones espaciales generados por las soluciones de un sistema de reacción-difusión al variar uno de los parámetros. (d) Manchas en la cola de un guepardo adulto (*Acinonyx jubatus*). (e) Patrón de manchas en la cola del jaguar adulto (*Panthera onca*). (f) Marcas en la cola de una gineta macho prenatal (*Genetta genetta*). (g) Marcas típicas en la cola de un leopardo adulto (*Panthera pardus*). Imágenes sacadas de [7].

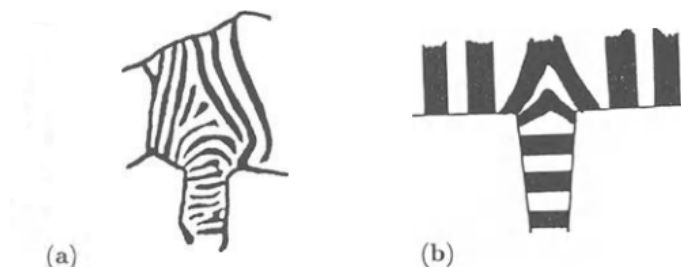


Figura 2: (a) Rayas en la pata delantera de la cebra de montaña (*Equus zebra*). (b) Patrón espacial generado por las soluciones de un sistema de reacción-difusión. Imágenes sacadas de [7].

El artículo de Turing y los posteriores descubrimientos de Murray supusieron grandes avances en la biología del desarrollo, rama de la biología que estudia los procesos llevados a cabo por las células embrionarias para la formación de órganos y tejidos. Gracias a Turing, se cree que lo que hacen los genes en el embrión es ordenar la producción de sustancias químicas activadoras e inhibidoras, las cuales indican a las células como diferenciarse para poder formar los órganos. Estas ideas siguen estando presentes en la investigación actual, por ejemplo para explicar la formación de los dedos (véase [8]).

Índice general

1. Modelización matemática de los fenómenos de difusión y reacción-difusión.	1
1.1. Difusión en una dimensión y recinto de área fija. Leyes de Fick.	1
1.1.1. Primera ley de Fick.	2
1.1.2. Segunda ley de Fick.	4
1.2. Ecuaciones de reacción-difusión.	5
1.3. Reacción-difusión en recinto unidimensional de área variable.	7
2. Mecanismo de Turing para la formación de patrones.	11
2.1. Condiciones generales para inestabilidad de Turing.	13
2.2. Formación de patrones espaciales en modelos químicos y biológicos. Modelo de Schnakenberg.	19
Bibliografía	23

Capítulo 1

Modelización matemática de los fenómenos de difusión y reacción-difusión.

En este capítulo se pretenden deducir las ecuaciones de reacción-difusión. Para ello, deduciremos en primer lugar las leyes de Fick, leyes cuantitativas que permiten describir el fenómeno de difusión molecular.

1.1. Difusión en una dimensión y recinto de área fija. Leyes de Fick.

La difusión es el desplazamiento de partículas de zonas de mayor concentración a zonas de menor concentración, lo que permite una distribución uniforme de la sustancia en el espacio que la contiene. Este movimiento de partículas producirá choques aleatorios entre moléculas vecinas que alterarán las trayectorias de las partículas haciéndolas totalmente aleatorias, lo que se conoce como movimiento browniano.

En esta sección trataremos de describir matemáticamente dicho proceso de difusión, cuando este tiene lugar en un tubo fino de sección constante A que puede ser considerado como unidimensional. Sea x una posición arbitraria del tubo. En lo sucesivo centraremos nuestra atención en el movimiento aleatorio de las partículas en la sección del tubo comprendida en $(x, x + \Delta x)$, donde Δx es un pequeño desplazamiento a la derecha desde la posición x , tal y como muestra la Figura 1.1.

Antes de comenzar, definiremos las siguientes cantidades que nos resultarán útiles :

Definición 1.1.1. Llamaremos $N(x, t)$ al número de partículas en la posición x en tiempo t .

Definición 1.1.2. Llamaremos $C(x, t)$ a la concentración (número de partículas por unidad de volumen) en la posición x en tiempo t .

Observación 1.1.3. Con las definiciones anteriores se tiene que $C(z, t) \cdot (A \cdot \Delta x) = N(z, t)$ para cualquier $z \in (x, x + \Delta x)$, pues $A \cdot \Delta x$ es el volumen de la sección del tubo comprendida en $(x, x + \Delta x)$.

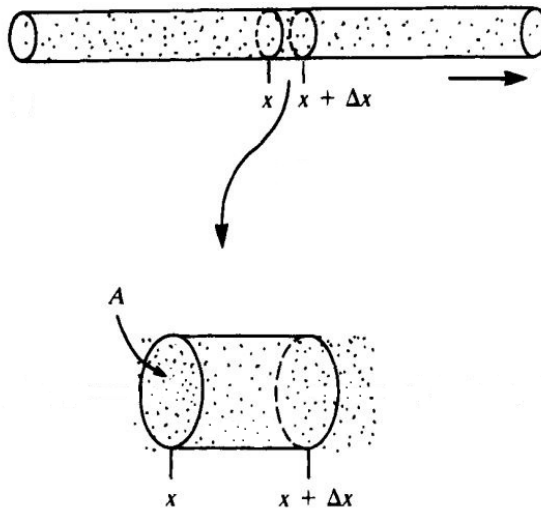


Figura 1.1: Tubo fino de sección constante A por el que fluyen partículas en la dirección positiva. Figura sacada de [2].

Definición 1.1.4. Llamaremos $J(x, t)$ al flujo de partículas (número de partículas cruzando una unidad de área en la dirección positiva por unidad de tiempo) en la posición x en tiempo t .

Observación 1.1.5. Nótese que por la definición anterior $J(z, t) \cdot A$ representa el número de partículas cruzando la posición z por unidad de tiempo, sea cual sea $z \in (x, x + \Delta x)$.

1.1.1. Primera ley de Fick.

En primer lugar, recordemos que las partículas se mueven de forma aleatoria, produciéndose choques con moléculas vecinas que podrían variar su trayectoria. Además, al encontrarnos en una dimensión, cada partícula únicamente podrá moverse hacia la izquierda o hacia la derecha. Así pues, si trazamos una línea imaginaria por el centro de la sección del tubo comprendida en $(x, x + \Delta x)$, tras el paso de un pequeño tiempo ξ tendremos que la mitad de las partículas del lado derecho habrán pasado al izquierdo y las del lado izquierdo al lado derecho, por lo que el número neto de partículas que atraviesan la línea será

$$\frac{1}{2}N(x, t) - \frac{1}{2}N(x + \Delta x, t) = -\frac{1}{2}(N(x + \Delta x, t) - N(x, t))$$

Por tanto, teniendo en cuenta la observación 1.1.5 podemos deducir que tras un pequeño tiempo ξ

$$J(z, t) \cdot A \cdot \xi = -\frac{(N(x + \Delta x, t) - N(x, t))}{2} \quad (1.1)$$

de donde despejando obtenemos la siguiente relación entre el flujo en $z = \frac{x+(x+\Delta x)}{2}$ y el número neto de partículas que atraviesa dicha posición

$$J(z, t) = -\frac{(N(x + \Delta x, t) - N(x, t))}{2A\xi} \quad (1.2)$$

Por otro lado, multiplicando y dividiendo el lado derecho de la ecuación (1.2) por Δx y teniendo en cuenta la observación 1.1.3 tenemos que

$$J(z, t) = -\frac{\Delta x}{2\xi} (C(x + \Delta x, t) - C(x, t))$$

de donde multiplicando y dividiendo de nuevo por Δx obtenemos que

$$J(z, t) = -\frac{(\Delta x)^2}{2\xi} \frac{C(x + \Delta x, t) - C(x, t)}{\Delta x} \quad (1.3)$$

Ahora bien, como Δx es un pequeño desplazamiento y el tiempo transcurrido ξ es pequeño, podemos tomar límites cuando $\Delta x, \xi \rightarrow 0$ a ambos lados de la ecuación anterior, lo que nos da

$$J(x, t) = \lim_{\Delta x, \xi \rightarrow 0} J(z, t) = -\lim_{\Delta x, \xi \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\xi} \cdot \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{C(x + \Delta x, t) - C(x, t)}{\Delta x} \quad (1.4)$$

En el primer capítulo de [1] se deduce la relación

$$\frac{(\Delta x)^2}{\xi} = \frac{\langle x^2(T) \rangle}{T}$$

donde $\langle x^2(T) \rangle$ es la media aritmética del cuadrado de los desplazamientos aleatorios de las partículas y T el tiempo transcurrido durante dichos desplazamientos.

Por otro lado, Albert Einstein en 1905 dedujo la ecuación

$$D = \frac{\langle x^2(T) \rangle}{2T}$$

donde D es una constante llamada *coeficiente de difusión* que describe la facilidad de movimiento de una sustancia a través de una región determinada [3].

Así pues, juntando ambas ecuaciones deducimos que el cociente $\frac{(\Delta x)^2}{2\xi}$ toma un valor constante que es independiente de los valores de Δx y ξ . Esto nos permite convertir la ecuación (1.4) en

$$J(x, t) = -\lim_{\Delta x, \xi \rightarrow 0} \frac{(\Delta x)^2}{2\xi} \cdot \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{C(x + \Delta x, t) - C(x, t)}{\Delta x} = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1.5)$$

A la ecuación anterior se la conoce como *primera ley de Fick*.

La primera ley de Fick también podría enunciarse para recintos de volumen fijo y dimensión n con $n \in \mathbb{N}$, obteniendo

$$\vec{J}(x_1, \dots, x_n, t) = -D \cdot \nabla C(x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.6)$$

donde D es el coeficiente de difusión y $\nabla C(x_1, \dots, x_n, t) = \left(\frac{\partial C}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial C}{\partial x_n} \right)$. A la vista de esta ecuación, la primera ley de Fick establece que el flujo es proporcional al gradiente de concentración, lo que implica que las partículas fluyen de regiones de alta concentración a regiones de baja concentración, ya que el vector gradiente marca la dirección de máximo crecimiento de la concentración. Utilizaremos esta ecuación más adelante.

1.1.2. Segunda ley de Fick.

En ausencia de reacciones químicas o de otros procesos que puedan alterar el número total de moléculas del tubo entre las posiciones x y $x + \Delta x$, estas ni se crearán ni se destruirán, lo que se conoce como *principio de conservación de la masa*. Por ello, si dejamos pasar un pequeño tiempo ξ , el número de nuevas partículas en la posición x (de hecho en cualquier posición $z \in (x, x + \Delta x)$) coincidirá con la diferencia entre el número de partículas entrantes y salientes de la sección comprendida entre x y $x + \Delta x$ durante el tiempo ξ , es decir,

$$N(x, t + \xi) - N(x, t) = (J(x, t) - J(x + \Delta x, t)) \cdot A \cdot \xi \quad (1.7)$$

en donde se han utilizado las definiciones 1.1.1 y 1.1.4 y la observación 1.1.5 para deducir la ecuación anterior.

Así pues, pasando el término $A \cdot \xi$ a la izquierda de la ecuación, dividiendo por Δx a ambos lados de la igualdad y utilizando la observación 1.1.3 deducimos que

$$\frac{C(x, t + \xi) - C(x, t)}{\xi} = \frac{J(x, t) - J(x + \Delta x, t)}{\Delta x} = -\frac{J(x + \Delta x, t) - J(x, t)}{\Delta x} \quad (1.8)$$

Finalmente, observemos que tanto el desplazamiento Δx como el tiempo transcurrido ξ son pequeños. Esto nos permite tomar límites cuando $\Delta x, \xi \rightarrow 0$ a ambos lados de la ecuación anterior, lo que junto con la definición de derivada parcial nos da la ecuación

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{C(x, t + \xi) - C(x, t)}{\xi} = -\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{J(x + \Delta x, t) - J(x, t)}{\Delta x} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x} \quad (1.9)$$

A la ecuación (1.9) se la conoce como *ecuación de conservación*, pues ha sido deducida del principio de conservación de la masa. Un procedimiento similar al anterior cuando se consideran n dimensiones espaciales con $n \in \mathbb{N}$ nos daría la ecuación

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}(x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.10)$$

ecuación que relaciona la velocidad de cambio de partículas en un volumen fijo con la divergencia del flujo.

Ahora bien, observemos que introduciendo la ecuación (1.5) en la ecuación de conservación (1.9) tenemos que

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial J(x, t)}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right) \quad (1.11)$$

Si D es constante, podemos sacarla fuera de la derivada parcial, obteniendo así la *segunda ley de Fick*, comúnmente conocida como *ecuación del calor*

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x, t)}{\partial x^2} \quad (1.12)$$

De forma análoga para varias dimensiones, si introducimos la ecuación (1.6) en la ecuación de conservación (1.10) obtenemos

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}(x_1, \dots, x_n, t) = -\nabla \cdot (-D \cdot \nabla C(x_1, \dots, x_n, t)) \quad (1.13)$$

de donde si D es constante deducimos la segunda ley de Fick para recintos de volumen fijo y dimensión n con $n \in \mathbb{N}$

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = D \nabla^2 C(x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.14)$$

1.2. Ecuaciones de reacción-difusión.

En multitud de fenómenos de la naturaleza las reacciones químicas juegan un papel crucial, ya que modifican el número de moléculas de determinada sustancia, lo que altera inevitablemente el entorno biológico en el que nos encontramos. Por ejemplo, en un tumor, no sólo es importante considerar la difusión de células tumorales a lo largo del torrente sanguíneo, sino también los procesos químicos de mutación que convierten células sanas en tumorales.

En esta sección trataremos de introducir el fenómeno de reacción en la modelización de la ecuación de conservación. Para ello, supongamos que nos encontramos en un recinto unidimensional $(x, x + \Delta x)$ como el de la Figura 1.1 y supongamos que $f(C, x, t)$ es una función que representa el número de partículas creadas por unidad de volumen y unidad de tiempo en la posición x en tiempo t como consecuencia de una reacción química. Observemos que f depende de la concentración $C(x, t)$, ya que cuando tienen lugar reacciones químicas, cambios en la concentración de partículas implican cambios en la creación molecular.

Así pues, similar a como ocurría en la sección 1.1.2, pasado un pequeño tiempo ξ , el número de nuevas partículas en la posición x será la diferencia entre el número de partículas entrantes y salientes de la sección comprendida entre x y $x + \Delta x$ en tiempo ξ más el número de partículas creadas en x durante dicho tiempo, es decir,

$$N(x, t + \xi) - N(x, t) = (J(x, t) - J(x + \Delta x, t)) \cdot A \cdot \xi + f(C, x, t) \cdot (A \cdot \Delta x) \cdot \xi \quad (1.15)$$

de donde dividiendo por $A \cdot \xi$ y por Δx a ambos lados de la igualdad, utilizando la observación 1.1.3 y tomando límites cuando $\Delta x, \xi \rightarrow 0$ deducimos la siguiente ecuación de conservación :

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{C(x, t + \xi) - C(x, t)}{\xi} = - \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{J(x + \Delta x, t) - J(x, t)}{\Delta x} + f(C, x, t) = - \frac{\partial J(x, t)}{\partial x} + f(C, x, t) \quad (1.16)$$

la cual podría extenderse a recintos multidimensionales de área fija, obteniendo

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J}(x_1, \dots, x_n, t) + f(C, x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.17)$$

Finalmente, si combinamos la 1ª Ley de Fick (ecuación (1.5)) con la ecuación (1.16) deducimos la *ecuación de reacción-difusión* para recintos unidimensionales de área fija

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} \right) + f(C, x, t) \quad (1.18)$$

De forma análoga, combinando las ecuaciones (1.6) y (1.17) obtenemos la ecuación de reacción-difusión para recintos multidimensionales de área fija

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot (-D \cdot \nabla C(x_1, \dots, x_n, t)) + f(C, x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.19)$$

en donde si D es constante (como ocurre en multitud de modelos) tenemos que

$$\frac{\partial C(x_1, \dots, x_n, t)}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 C(x_1, \dots, x_n, t) + f(C, x_1, \dots, x_n, t) \quad (1.20)$$

Veamos una situación biológica que se modelizaría con esta última ecuación. Supongamos que estamos estudiando el comportamiento de una determinada población celular en la que se ha producido una mutación en uno de los genes de una de las células. El gen es beneficioso para la población celular, por lo que la mutación genética comienza a difundirse por el espacio a medida que pasa el tiempo. Bajo estas hipótesis, la proporción de células con el nuevo gen crecerá con el paso del tiempo como consecuencia del proceso de difusión y del propio crecimiento celular (que será de tipo logístico ya que se producirá lucha por el alimento entre células con gen ventajoso y sin él), dando la siguiente ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 A + \alpha A + \beta AB$$

donde $A(x, y, z, t)$ representa la proporción de células con gen ventajoso, $B(x, y, z, t)$ la proporción de células sin dicho gen, α la tasa de crecimiento celular y β la probabilidad de cruce entre células ventajosas y no ventajosas. Ahora bien, teniendo en cuenta que $B(x, y, z, t) = 1 - A(x, y, z, t)$ y renombrando $r = \alpha + \beta$ y $K = 1 + \frac{\alpha}{\beta}$ obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial A}{\partial t} = D \cdot \nabla^2 A + rA \left(1 - \frac{A}{K} \right)$$

A la ecuación anterior se la conoce como *ecuación de Fisher*, pues fue propuesta en su forma unidimensional por primera vez por Fisher en 1937 como explicación matemática de la propagación de un gen ventajoso en una población (véase [4]).

Como pone de manifiesto el ejemplo anterior, la ecuación de reacción-difusión es necesaria para la explicación de algunos fenómenos biológicos. Otra situación común en biología son los medios en los que interactúan varias poblaciones que presentan procesos de reacción-difusión. Para formular estos problemas, generalizamos la ecuación (1.19), obteniendo la ecuación de reacción-difusión para m especies que interactúan entre sí :

$$\frac{\partial \vec{C}}{\partial t} = \vec{f} + \nabla \cdot (D \nabla \vec{C})$$

donde D es una matriz de coeficientes de difusión, $\vec{C} = \begin{pmatrix} C_1(x_1, \dots, x_n, t) \\ \vdots \\ C_m(x_1, \dots, x_n, t) \end{pmatrix}$ representa las distintas concentraciones de cada sustancia y $\vec{f} = \begin{pmatrix} f_1(\vec{C}, x_1, \dots, x_n, t) \\ \vdots \\ f_m(\vec{C}, x_1, \dots, x_n, t) \end{pmatrix}$ los distintos aportes celulares debido a reacciones químicas. El sistema de ecuaciones en derivadas parciales anterior se conoce como *sistema de reacción-difusión*.

Si no hay aporte difusivo entre especies, la matriz D es una matriz diagonal. Si además cada coeficiente de difusión de la diagonal es constante, la ecuación anterior se convierte en

$$\frac{\partial \vec{C}}{\partial t} = \vec{f} + D \nabla^2 \vec{C}$$

Un sistema de reacción-difusión muy estudiado es aquel en el que interactúan 2 especies A y B en un medio donde D es una matriz diagonal constante y \vec{f} solo depende de la concentración \vec{C} :

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = f(A, B) + D_A \nabla^2 A \\ \frac{\partial B}{\partial t} = g(A, B) + D_B \nabla^2 B \end{cases} \quad (1.21)$$

Este sistema fue propuesto por Alan Turing en su versión unidimensional (véase [9]) y fue una de las publicaciones más significativas en biología matemática, ya que bajo determinadas condiciones permite explicar la formación de patrones en seres vivos, como veremos en el capítulo 2.

El sistema fue tan influyente que hoy en día sigue usándose en la investigación, por ejemplo para explicar la formación de los dedos en el embrión (véase [8]).

1.3. Reacción-difusión en recinto unidimensional de área variable.

En una situación práctica experimental, podría ocurrir que el volumen del recinto por el que transcurre el proceso de reacción-difusión variase en función del espacio y tiempo transcurridos, como muestra la Figura 1.2. En esta sección formularemos la ecuación de conservación y de reacción-difusión para este caso.

Para ello, estudiaremos el proceso de reacción-difusión en un tubo fino de sección variable $A(x, t)$ que puede ser considerado como unidimensional, centrando nuestra atención en la sección del tubo comprendida en $(x, x + \Delta x)$, donde Δx es un pequeño desplazamiento a la derecha desde la posición x (véase la Figura 1.2).

En primer lugar, como nos encontramos en una región de área variable, teniendo en cuenta la definición 1.1.4, observemos que $J(z, t) \cdot A(z, t)$ representará el número de partículas cruzando la posición z por unidad de tiempo, sea cual sea $z \in (x, x + \Delta x)$.

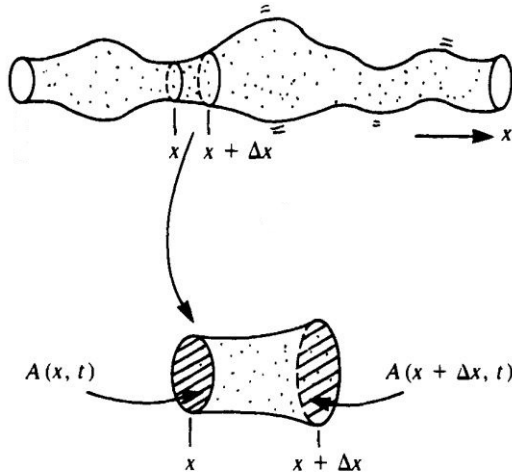


Figura 1.2: Tubo fino de sección variable $A(x, t)$ por el que fluyen partículas en la dirección positiva. Figura sacada de [2].

Por otro lado, no es difícil ver que si $z_1, z_2 \in (x, x + \Delta x)$, el número de partículas en la sección del tubo comprendida entre z_1 y z_2 en tiempo t viene dado por $\int_{z_1}^{z_2} C(s, t)A(s, t) ds$, donde $C(s, t)$ representa la concentración de partículas (número de partículas por unidad de volumen) en la posición s en tiempo t . Observemos que la integral anterior tiene sentido, pues al ser una integral definida una suma de Riemann infinita, lo que se está haciendo para cuantificar el número total de partículas en la sección del tubo comprendida en (z_1, z_2) en tiempo t es sumar el producto de los distintos valores de $C(s, t)$ con los distintos volúmenes infinitesimales $A(s, t) ds$, es decir, la definición anterior es una forma de extender la observación 1.1.3 al caso de área variable.

Por otra parte, si $z_1, z_2 \in (x, x + \Delta x)$, el número neto de partículas creadas en la sección comprendida entre z_1 y z_2 por unidad de tiempo viene dado por $\int_{z_1}^{z_2} f(s, t)A(s, t)ds$, donde $f(s, t)$ representa la concentración de partículas (número de partículas por unidad de volumen y unidad de tiempo) creadas en la posición s en tiempo t como consecuencia de una reacción química.

Ahora bien, tal y como ocurría en la sección anterior, si dejamos pasar un pequeño tiempo ξ , el número de nuevas partículas en la sección del tubo comprendida en $(x, x + \Delta x)$ será igual a la diferencia entre el número de partículas entrantes y salientes de la sección en tiempo ξ más el número neto de partículas creadas en dicha sección durante dicho tiempo, es decir,

$$\begin{aligned}
 & \int_x^{x+\Delta x} C(s, t + \xi)A(s, t + \xi)ds - \int_x^{x+\Delta x} C(s, t)A(s, t)ds = \\
 & = \xi (J(x, t)A(x, t) - J(x + \Delta x, t)A(x + \Delta x, t)) + \int_x^{x+\Delta x} f(s, t)A(s, t)\xi ds
 \end{aligned} \tag{1.22}$$

Ahora bien, si pasamos ξ a la izquierda y tomamos límites cuando $\xi \rightarrow 0$, por la definición de derivada parcial tendremos que $\frac{\partial C \cdot A(s,t)}{\partial t} = \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{C \cdot A(s,t+\xi) - C \cdot A(s,t)}{\xi}$ por lo que la ecuación anterior quedará

$$\int_x^{x+\Delta x} \frac{\partial C \cdot A(s,t)}{\partial t} ds = J(x,t)A(x,t) - J(x+\Delta x,t)A(x+\Delta x,t) + \int_x^{x+\Delta x} f \cdot A(s,t) ds \quad (1.23)$$

Gracias al teorema de derivación bajo el signo integral podemos sacar la derivada parcial fuera de la integral, obteniendo la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_x^{x+\Delta x} C \cdot A(s,t) ds = J(x,t)A(x,t) - J(x+\Delta x,t)A(x+\Delta x,t) + \int_x^{x+\Delta x} f \cdot A(s,t) ds \quad (1.24)$$

La ecuación anterior es la *ecuación de conservación* en forma integral (o débil). Observemos que aplicando el teorema del valor medio del cálculo integral, podemos encontrar valores v_1 y v_2 tales que $x \leq v_i \leq x + \Delta x$ con $i = 1, 2$ que verifican que

$$\int_x^{x+\Delta x} C(s,t)A(s,t) ds = C(v_1,t)A(v_1,t) (x + \Delta x - x)$$

$$\int_x^{x+\Delta x} f(s,t)A(s,t) ds = f(v_2,t)A(v_2,t) (x + \Delta x - x)$$

lo que convierte la ecuación (1.24) en

$$\frac{\partial}{\partial t} (C \cdot A(v_1,t)\Delta x) = J(x,t)A(x,t) - J(x+\Delta x,t)A(x+\Delta x,t) + f \cdot A(v_2,t)\Delta x \quad (1.25)$$

Por otro lado, observemos que si tomamos el límite cuando $\Delta x \rightarrow 0$ tendremos que $v_1 \rightarrow x$ y $v_2 \rightarrow x$, ya que $x \leq v_i \leq x + \Delta x$ con $i = 1, 2$. Teniendo esto en cuenta, dividiendo por Δx en la ecuación anterior y tomando límites cuando $\Delta x \rightarrow 0$ obtenemos la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} (C \cdot A(x,t)) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{J(x,t)A(x,t) - J(x+\Delta x,t)A(x+\Delta x,t)}{\Delta x} + f \cdot A(x,t)$$

de donde deducimos, utilizando la definición de derivada parcial, la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} (C \cdot A(x,t)) = -\frac{\partial J \cdot A(x,t)}{\partial x} + f \cdot A(x,t) \quad (1.26)$$

que es la *ecuación de conservación* para un recinto unidimensional de área variable en el que tiene lugar un proceso de reacción-difusión. Observemos que si el área fuera constante ($A(x,t) = A$) obtendríamos la ecuación (1.16). Si además no hubiera reacciones químicas ($f = 0$) tendríamos la ecuación de conservación (1.9).

Finalmente, combinando la expresión (1.26) con la primera Ley de Fick (ecuación (1.5)) llegamos a la *ecuación de reacción-difusión* para recintos unidimensionales de área variable

$$\frac{\partial}{\partial t} (C \cdot A(x,t)) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-DA(x,t) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + f \cdot A(x,t) \quad (1.27)$$

en donde si suponemos que $A(x, t) \neq 0$ tenemos que

$$\frac{1}{A(x, t)} \frac{\partial}{\partial t} (C(x, t)A(x, t)) = -\frac{1}{A(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} \left(-DA(x, t) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + f(x, t) \quad (1.28)$$

Esta última ecuación nos permite deducir, si $A(x, t) = A(x) \neq 0$, es decir, para un recinto que no varía en tiempo aunque sí en espacio, que

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{1}{A(x)} \frac{\partial}{\partial x} \left(-DA(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right) + f(x, t) \quad (1.29)$$

o equivalentemente

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \left(-D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{1}{A(x)} D \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial x} + f(x, t) \quad (1.30)$$

que es similar a la ecuación (1.18) pero contiene un término extra que representa cambios en la concentración de partículas como consecuencia de las dilataciones o contracciones del tubo.

Capítulo 2

Mecanismo de Turing para la formación de patrones.

En este capítulo estudiaremos condiciones para que en un sistema de ecuaciones de reacción-difusión se tenga el mecanismo Turing de desestabilización de soluciones estacionarias espacialmente constantes. Posteriormente, aplicaremos dichas condiciones a un modelo biológico muy utilizado en morfogénesis : El modelo de Schnakenberg.

En primer lugar, probaremos que las condiciones para que ocurra el mecanismo Turing sólo pueden darse en problemas de reacción-difusión en los que interactúan dos o más sustancias, es decir, no hay mecanismo Turing en ecuaciones escalares de la forma

$$u_t = D\nabla^2 u + f(u) \quad (2.1)$$

donde $u(\vec{x}, t)$ es una sustancia que reacciona y se difunde en un dominio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ a medida que pasa el tiempo. En primer lugar, daremos condiciones iniciales y de contorno a la ecuación (2.1). Supongamos que $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ es un dominio arbitrario sin aportes externos (el flujo es nulo en $\partial\Omega$) sobre el que tiene lugar un proceso de reacción-difusión que presenta cierta función inicial $u_0(\vec{x})$. Por ello, el problema a tratar será

$$\begin{cases} u_t = D\nabla^2 u + f(u) \\ \vec{n} \cdot \nabla u = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \\ u(\vec{x}, 0) = u_0(\vec{x}) \end{cases} \quad (2.2)$$

donde \vec{n} es el vector normal a la frontera de Ω y D el coeficiente de difusión.

Para que tenga lugar el mecanismo Turing, se deben dar condiciones para que una solución estacionaria y espacialmente constante $u = p$ del problema anterior sea asintóticamente estable en ausencia de difusión pero inestable en presencia de la misma. Para ello, supongamos que $u = p$ es solución del problema de ecuaciones diferenciales

$$u' = f(u) \quad (2.3)$$

es decir, $f(p) = 0$. Linealizando alrededor del punto p tenemos que

$$f(u) = f'(p)(u - p) + R_f(u - p)$$

donde $R_f(u - p)$ es el resto de Taylor obtenido al aproximar la función f . Así pues, llamando $w = u - p$, el linealizado del problema (2.3) será

$$w' = f'(p)w \tag{2.4}$$

Ahora bien, un resultado de ecuaciones diferenciales garantiza que si $f'(p) < 0$, entonces $u = p$ es asintóticamente estable para el problema (2.3). Veamos cómo si se cumple esta condición no es posible que $u = p$ sea una solución inestable de (2.2).

Proposición 2.0.1. *Si $u = p$ es una solución estacionaria espacialmente constante de (2.2) que verifica $f'(p) < 0$, entonces es una solución asintóticamente estable para dicho sistema.*

Demostración. Linealizando el problema (2.2) en un entorno de p obtenemos el problema

$$\begin{cases} w_t = D\nabla^2 w + f'(p)w \\ \vec{n} \cdot \nabla w = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{2.5}$$

donde $w = u - p$. Por ello, para estudiar la estabilidad del problema (2.2), estudiamos los autovalores del operador que asocia a cada función W la función $D\nabla^2 W + f'(p)W$, es decir, buscamos autofunciones W_j tales que

$$\begin{cases} D\nabla^2 W_j + f'(p)W_j = \lambda_j W_j \\ \vec{n} \cdot \nabla W_j = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{2.6}$$

Este sistema puede reescribirse como

$$\begin{cases} D\nabla^2 W_j = (\lambda_j - f'(p)) W_j \\ \vec{n} \cdot \nabla W_j = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{2.7}$$

Llegados a este punto, veamos el siguiente lema, que nos será útil para lo sucesivo:

Lema 2.0.2. *Los autovalores μ del problema*

$$\begin{cases} D\nabla^2 W = \mu W \quad \vec{x} \in \Omega \\ \vec{n} \cdot \nabla W = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{2.8}$$

forman una sucesión de valores reales no negativos $\{\mu_j\}_{j=1}^{\infty}$ con $\mu_1 = 0 > \mu_2 \geq \mu_3 \cdots$ y $\mu_j \rightarrow -\infty$.

Denotamos además por W_j la autofunción asociada a μ_j , es decir, $D\nabla^2 W_j = \mu_j W_j$ para $\vec{x} \in \Omega$ y $\vec{n} \cdot \nabla W_j = 0$ para $\vec{x} \in \partial\Omega$.

Demostración. Veamos que $\mu_j \leq 0$. Sea W una solución no nula de (2.8). Multiplicando por el conjugado de W e integrando en Ω , por las fórmulas de Green tenemos que

$$\int_{\Omega} \overline{W} \cdot \nabla^2 W = \int_{\partial\Omega} \overline{W} \cdot (\nabla W \cdot \vec{n}) - \int_{\Omega} \nabla \overline{W} \cdot \nabla W$$

Ahora bien, como W es solución de (2.8) deducimos que

$$\mu \int_{\Omega} \overline{W} \cdot W = -D \int_{\Omega} \nabla \overline{W} \cdot \nabla W$$

Finalmente, como $\nabla \overline{W} = \overline{\nabla W}$ obtenemos que

$$\mu \int_{\Omega} |W|^2 = -D \int_{\Omega} |\nabla W|^2$$

luego $\mu \in \mathbb{R}$ y $\mu \leq 0$, ya que las integrales de los módulos de W y ∇W son números reales positivos y $D > 0$ por ser el coeficiente de difusión.

Que los autovalores forman una sucesión con $\mu_j \rightarrow -\infty$ se sigue de la Teoría espectral de operadores. \square

Observemos que si μ_j es el autovalor asociado a la autofunción W_j en el problema (2.8) entonces por (2.7) $\mu_j = \lambda_j - f'(p)$, es decir, $\lambda_j = \mu_j + f'(p)$. Como $f'(p) < 0$ por hipótesis y $\mu_j \leq 0$ por el lema anterior, los autovalores λ_j del operador $(D\nabla^2 + f'(p))(\cdot)$ son números reales estrictamente negativos. Utilizando resultados de estabilidad de ecuaciones en derivadas parciales, lo anterior garantiza que la solución estacionaria y espacialmente constante $u = p$ es asintóticamente estable para el problema (2.2), como queríamos. \square

Así pues, tal y como hemos probado, únicamente tiene sentido estudiar el mecanismo Turing en sistemas de ecuaciones de reacción-difusión.

2.1. Condiciones generales para inestabilidad de Turing.

En esta sección deduciremos condiciones para que tenga lugar una inestabilidad de Turing sobre un sistema de reacción-difusión de la forma

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = f(u, v) + D_u \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = g(u, v) + D_v \nabla^2 v \end{cases} \quad (2.9)$$

Para ello, estudiaremos condiciones para que una solución estacionaria del sistema sea asintóticamente estable en ausencia de difusión pero inestable en presencia de la misma. Podemos hacer el cambio de variable en la variable temporal $t \rightarrow D_u t$ que transforma el sistema anterior en

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d \nabla^2 v \end{cases} \quad (2.10)$$

donde $\gamma = \frac{1}{D_u}$ y $d = \frac{D_v}{D_u}$. En primer lugar, daremos condiciones iniciales y de contorno al sistema (2.10). Supongamos que estamos estudiando un dominio n -dimensional arbitrario Ω sin aportes

externos (el flujo es nulo en $\partial\Omega$) en el tiene lugar un proceso de reacción-difusión entre dos sustancias con funciones iniciales $u_0(\vec{x})$ y $v_0(\vec{y})$. Por todo lo anterior, el problema a tratar será

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d\nabla^2 v \\ (\vec{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \quad \vec{x} \in \partial\Omega \\ u(\vec{x}, 0) = u_0(\vec{x}) \\ v(\vec{x}, 0) = v_0(\vec{x}) \end{array} \right. \quad (2.11)$$

Para que se produzca el fenómeno conocido como inestabilidad de Turing, tenemos que garantizar en primer lugar la estabilidad en ausencia de difusión de una solución estacionaria y espacialmente constante del sistema (2.10). Para ello, consideramos el sistema

$$\begin{cases} u' = \gamma f(u, v) \\ v' = \gamma g(u, v) \end{cases} \quad (2.12)$$

Sea (a, b) un solución positiva estacionaria de dicho sistema, es decir, $f(a, b) = g(a, b) = 0$. Por el teorema de Taylor tenemos que

$$\begin{aligned} f(u, v) &= \frac{\partial f}{\partial u}(a, b)(u - a) + \frac{\partial f}{\partial v}(a, b)(v - b) + R_f(u - a, v - b) \\ g(u, v) &= \frac{\partial g}{\partial u}(a, b)(u - a) + \frac{\partial g}{\partial v}(a, b)(v - b) + R_g(u - a, v - b) \end{aligned} \quad (2.13)$$

donde $R_f(u - a, v - b)$ y $R_g(u - a, v - b)$ son los restos de Taylor de las respectivas aproximaciones de f y g . Esto nos permite escribir el sistema (2.12) como

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} f_u(a, b) & f_v(a, b) \\ g_u(a, b) & g_v(a, b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u - a \\ v - b \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} R_f(u - a, v - b) \\ R_g(u - a, v - b) \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

donde $\begin{pmatrix} f_u(a, b) & f_v(a, b) \\ g_u(a, b) & g_v(a, b) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u}(a, b) & \frac{\partial f}{\partial v}(a, b) \\ \frac{\partial g}{\partial u}(a, b) & \frac{\partial g}{\partial v}(a, b) \end{pmatrix}$.

Observemos que definiendo $\vec{w} := \begin{pmatrix} u - a \\ v - b \end{pmatrix}$ podemos convertir el sistema (2.14) en el sistema autónomo

$$\vec{w}_t = h(\vec{w}) \quad (2.15)$$

donde $\vec{w}_t = \begin{pmatrix} \frac{\partial(u-a)}{\partial t} \\ \frac{\partial(v-b)}{\partial t} \end{pmatrix}$ y $h(\vec{w}) = \gamma \left(A\vec{w} + \vec{R}(\vec{w}) \right)$, siendo $A := \begin{pmatrix} f_u(a, b) & f_v(a, b) \\ g_u(a, b) & g_v(a, b) \end{pmatrix}$ y $\vec{R}(\vec{w}) := \begin{pmatrix} R_f(\vec{w}^t) \\ R_g(\vec{w}^t) \end{pmatrix}$.

La teoría de ecuaciones diferenciales afirma que para estudiar la estabilidad del punto de equilibrio (a, b) es necesario estudiar la estabilidad del $(0, 0)$ en el linealizado de (2.15), es decir, en el sistema

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w}$$

Por ello, para que (a, b) sea un punto de equilibrio asintóticamente estable de (2.12), es condición suficiente que todos los autovalores de γA tengan parte real negativa. Así pues, calculando el polinomio

característico tendremos que los autovalores de γA son las soluciones de la ecuación

$$\begin{aligned} 0 = |\gamma A - \lambda I| &= \begin{vmatrix} \gamma f_u(a, b) - \lambda & \gamma f_v(a, b) \\ \gamma g_u(a, b) & \gamma g_v(a, b) - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= \lambda^2 - \gamma(f_u(a, b) + g_v(a, b))\lambda + \gamma^2(f_u(a, b)g_v(a, b) - f_v(a, b)g_u(a, b)) \end{aligned} \quad (2.16)$$

El siguiente lema nos será útil :

Lema 2.1.1. *Sea $\lambda^2 + b\lambda + c = 0$ una ecuación de segundo grado en la incógnita λ .*

1. Si $b > 0$ y $c > 0$, entonces todas las soluciones de la ecuación anterior tienen parte real negativa.
2. Si alguna solución de la ecuación anterior tiene parte real positiva, entonces $b < 0$ o $c < 0$.

Demostración. Sabemos que las raíces de la ecuación de segundo grado anterior son $\lambda_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4c}}{2}$ y $\lambda_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4c}}{2}$. Distinguiamos varios casos en función del signo del discriminante :

Caso 1 : $b^2 - 4c \leq 0$. En este caso, la parte real de λ_1 y λ_2 es $-\frac{b}{2}$.

1. Si $b > 0$, λ_1 y λ_2 tienen parte real negativa.
2. Si λ_1 o λ_2 tiene parte real positiva, necesariamente $b < 0$.

Caso 2 : $b^2 - 4c > 0$.

1. Si $b > 0$, es claro que $\lambda_2 < 0$. Para que λ_1 también sea negativo tenemos que garantizar que $-b + \sqrt{b^2 - 4c} < 0$, lo cual se cumple por ser $c > 0$.
2. Como por hipótesis $\lambda_1 > 0$ o $\lambda_2 > 0$, necesariamente $-b + \sqrt{b^2 - 4c} > 0$ o $-b - \sqrt{b^2 - 4c} > 0$. De la primera desigualdad deducimos que $-4c > 0$, es decir, $c < 0$. Por otro lado, de la segunda desigualdad se tiene que $b < -\sqrt{b^2 - 4c} < 0$. Por tanto, $b < 0$ o $c < 0$, como queríamos.

□

Así pues, aplicando el lema anterior a la ecuación (2.16), los autovalores de la matriz γA tendrán parte real negativa (y por tanto (a, b) será asintóticamente estable) si se verifica que

$$\begin{aligned} f_u(a, b) + g_v(a, b) &< 0 \\ f_u(a, b)g_v(a, b) - f_v(a, b)g_u(a, b) &> 0 \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para simplificar la notación, denotaremos en lo sucesivo $f_u(a, b) = f_u$, $f_v(a, b) = f_v$, $g_u(a, b) = g_u$, $g_v(a, b) = g_v$.

Una vez hecho esto, observemos que (a, b) no sólo es solución de (2.12), sino también de (2.10). Como buscamos que la solución estacionaria se desestabilice en presencia de difusión, queremos que (a, b) sea un punto de equilibrio inestable de (2.10). Para garantizar esto, consideramos dicho sistema que utilizando las ecuaciones (2.13) se convierte en

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial t} \\ \frac{\partial v}{\partial t} \end{pmatrix} = \gamma \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u - a \\ v - b \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} R_f(u - a, v - b) \\ R_g(u - a, v - b) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla^2 u \\ \nabla^2 v \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Este sistema puede reescribirse definiendo $\vec{w} := \begin{pmatrix} u - a \\ v - b \end{pmatrix}$ como

$$\vec{w}_t = \tilde{h}(\vec{w}) \quad (2.19)$$

donde $\vec{w}_t = \begin{pmatrix} \frac{\partial(u-a)}{\partial t} \\ \frac{\partial(v-b)}{\partial t} \end{pmatrix}$ y $\tilde{h}(\vec{w}) = \gamma A \vec{w} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \nabla^2 \vec{w} + \gamma \vec{R}(\vec{w})$, siendo $A := \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}$ y $\vec{R}(\vec{w}) := \begin{pmatrix} R_f(\vec{w}^t) \\ R_g(\vec{w}^t) \end{pmatrix}$.

Ahora bien, sabemos por la teoría de estabilidad de soluciones de EDPs que para que (a, b) sea un punto de equilibrio inestable del sistema (2.10) basta con garantizar la inestabilidad en $(0, 0)$ del sistema

$$\vec{w}_t = \gamma A \vec{w} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \nabla^2 \vec{w} \quad (2.20)$$

con condiciones iniciales y de contorno dadas en (2.11). Para ello, buscamos soluciones no triviales de (2.20) de la forma $e^{\lambda t} \begin{pmatrix} w_1(\vec{x}) \\ w_2(\vec{x}) \end{pmatrix}$ con $Re(\lambda) > 0$. Introduciendo esta expresión en (2.20) obtenemos:

$$\lambda e^{\lambda t} \begin{pmatrix} w_1(\vec{x}) \\ w_2(\vec{x}) \end{pmatrix} = \gamma e^{\lambda t} A \begin{pmatrix} w_1(\vec{x}) \\ w_2(\vec{x}) \end{pmatrix} + e^{\lambda t} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla^2 w_1 \\ \nabla^2 w_2 \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

Si buscamos soluciones no triviales que además verifiquen que $w_1(\vec{x}) = \alpha W_j(\vec{x})$ y $w_2(\vec{x}) = \beta W_j(\vec{x})$ donde α, β son constantes y W_j es la autofunción del problema (2.8) con $D = 1$ asociada a μ_j obtenemos la ecuación

$$\lambda \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - \gamma A \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - \mu_j \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

que tendrá soluciones no triviales si y sólo si

$$\det \left(\lambda I - \gamma A - \mu_j \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \right) = 0$$

es decir, λ es autovalor de la matriz $\gamma A + \mu_j \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix}$. Calculando el valor del determinante tenemos que

$$0 = \det \left(\lambda I - \gamma A - \mu_j \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \right) = \lambda^2 - ((d+1)\mu_j + \gamma(f_u + g_v))\lambda + h(\mu_j) \quad (2.23)$$

siendo $h(\mu_j) = d\mu_j^2 + \gamma(df_u + g_v)\mu_j + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)$.

Llegados a este punto, supongamos que se cumplen las condiciones (2.17) que tratamos anteriormente y por tanto la solución $(0, 0)$ del sistema (2.20) es asintóticamente estable en ausencia de difusión. Si alguna de las raíces calculadas en (2.23) para algún μ_j tiene parte real positiva, entonces (a, b) es inestable para el problema (2.11). Para que esto ocurra, por el lema 2.1.1 deducimos que necesariamente $(d+1)\mu_j + \gamma(f_u + g_v) > 0$ o $h(\mu_j) < 0$ para algún μ_j no nulo. Ahora bien, como estamos suponiendo que se cumplen las condiciones (2.17) tenemos que $f_u + g_v < 0$, lo que garantiza que

$(d+1)\mu_j + \gamma(f_u + g_v) < 0$, ya que γ y d son mayores que 0 y $\mu_j \leq 0$ por el lema 2.0.2. Por tanto, para que (a, b) sea inestable necesariamente debe ocurrir que para algún $\mu_j \neq 0$

$$h(\mu_j) = d\mu_j^2 + \gamma(df_u + g_v)\mu_j + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) < 0 \quad (2.24)$$

Como se cumplen las condiciones (2.17), se tiene que $f_u g_v - f_v g_u > 0$, por lo que como $\gamma, d > 0$ y $\mu_j < 0$ la única posibilidad para que $h(\mu_j)$ sea negativa es que $df_u + g_v > 0$.

Así pues, para que (a, b) sea inestable en presencia de difusión es necesario que

$$df_u + g_v > 0 \quad (2.25)$$

Llegados a este punto, podemos demostrar algunas condiciones necesarias para que se produzca inestabilidad de Turing :

Corolario 2.1.2. *Si se produce inestabilidad de Turing entonces $d = \frac{D_v}{D_u} \neq 1$. Además, $f_u = \frac{\partial f}{\partial u}(a, b)$ y $g_v = \frac{\partial g}{\partial v}(a, b)$ tienen signos distintos.*

Demostración. Como se produce inestabilidad de Turing, se cumplen las condiciones (2.17) y la ecuación (2.25), es decir, $f_u + g_v < 0$ y $df_u + g_v > 0$, lo que implica que $d \neq 1$, pues si $d = 1$ obtendríamos una contradicción en el signo de $f_u + g_v$.

Por otro lado, f_u y g_v tienen signos distintos, pues si ambos fueran negativos $df_u + g_v < 0$ lo que contradice la ecuación (2.25) y si ambos fueran positivos $f_u + g_v > 0$, que contradice las condiciones (2.17). \square

Corolario 2.1.3. *Si tenemos una inestabilidad de Turing y $f_u = \frac{\partial f}{\partial u}(a, b) > 0$, entonces $d = \frac{D_v}{D_u} > 1$. Por otro lado, si $f_u < 0$, entonces $d = \frac{D_v}{D_u} < 1$.*

Demostración. Como se produce inestabilidad de Turing, sabemos que $f_u + g_v < 0$ y $df_u + g_v > 0$, lo que implica que

$$f_u + g_v < df_u + g_v$$

Esto nos permite deducir que

$$(d-1)f_u > 0$$

Por tanto, si $f_u > 0$ necesariamente $(d-1) > 0$ luego $d = \frac{D_v}{D_u} > 1$, es decir, $D_v > D_u$. Por otro lado, si $f_u < 0$ entonces $(d-1) < 0$, obteniendo así que $D_u > D_v$. \square

Una vez vistos estos corolarios, volvamos a lo anterior. Observemos que la condición $df_u + g_v > 0$ da una condición necesaria pero no suficiente para garantizar (2.24), ya que podría ocurrir que, a pesar de ser $df_u + g_v > 0$, $-\gamma(df_u + g_v)\mu_j \leq d\mu_j^2 + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)$, lo que nos daría $d\mu_j^2 + \gamma(df_u + g_v)\mu_j + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) \geq 0$, que contradice (2.24). Por tanto, se hace necesario encontrar una condición que garantice (2.24) para algún autovalor μ_j .

Para ello, basta con encontrar las regiones de la semirrecta $z \leq 0$ en las que la parábola $h(z) = dz^2 + \gamma(df_u + g_v)z + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)$ es negativa. Para ello, estudiaremos el crecimiento y decrecimiento de la función $h(z)$. En efecto, derivando respecto de z obtenemos que

$$h'(z) = 2dz + \gamma(df_u + g_v)$$

por lo que el único punto crítico de la parábola (su vértice) será $(z_0, h(z_0))$, donde $z_0 = -\frac{\gamma(df_u + g_v)}{2d} < 0$ y $h(z_0) = \gamma^2 \left(f_u g_v - f_v g_u - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} \right)$. Observamos que para valores $z < z_0$ $h'(z) < 0$ y para valores $z > z_0$ $h'(z) > 0$, por lo que h tiene un mínimo relativo (de hecho absoluto) en $z = z_0$. Por tanto, teniendo en cuenta este estudio, para que $h(z) < 0$ para algunos valores $z \leq 0$ basta con que se cumpla $h(z_0) < 0$. Esto nos permite deducir la condición

$$f_u g_v - f_v g_u - \frac{(df_u + g_v)^2}{4d} < 0 \Leftrightarrow (df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0 \quad (2.26)$$

la cual garantiza la existencia de valores $z < 0$ para los que $h(z) < 0$. Concretamente, dichos valores serán los comprendidos en el intervalo (z_1, z_2) , donde z_1 y z_2 son las soluciones de la ecuación $h(z) = 0$, es decir, los puntos de corte de la parábola $h(z)$ con el eje OX. Resolviendo dicha ecuación de segundo grado deducimos que

$$\begin{aligned} z_1 &= \gamma \frac{-(df_u + g_v) - \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u)}}{2d} \\ z_2 &= \gamma \frac{-(df_u + g_v) + \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u)}}{2d} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Como $df_u + g_v > 0$ y $(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0$, $z_1, z_2 \in \mathbb{R}$. Como además $z_1 < 0$ y $z_1 \cdot z_2 = \frac{\gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)}{d} > 0$, deducimos que $z_1, z_2 < 0$. Así pues, podremos asegurar la inestabilidad de la solución estacionaria (a, b) cuando exista al menos un autovalor $\mu_j < 0$ tal que $z_1 < \mu_j < z_2$. Veamos que reescalando adecuadamente el dominio Ω siempre podemos garantizar lo anterior. En primer lugar, estudiaremos el caso unidimensional. Supongamos que $\Omega = (0, L)$ con $L > 0$ es un dominio unidimensional en el que ningún autovalor μ_j del problema (2.8) verifica que $z_1 < \mu_j < z_2$. Como $\Omega = (0, L)$, sabemos que los autovalores $\mu_j = -\frac{j^2 \pi^2}{L^2}$, con j un número entero. Veamos que existe $\tilde{L} > 0$ tal que en el dominio $\tilde{\Omega} = (0, \tilde{L})$ existe al menos un autovalor $\tilde{\mu}_j$ tal que $z_1 < \tilde{\mu}_j < z_2$. Para ello, fijando $j \neq 0$ y considerando la longitud $L > 0$ como variable, todo se reduce a estudiar la imagen de la función $\mu_j(L) = -\frac{j^2 \pi^2}{L^2}$ a lo largo de la semirrecta $L > 0$. Observamos que $\lim_{L \rightarrow 0} \mu_j(L) = -\infty$ y que $\lim_{L \rightarrow \infty} \mu_j(L) = 0$, por lo que como $\mu_j(L)$ es continua y negativa para $L > 0$ tenemos que $\text{Im } \mu_j = (-\infty, 0)$. Así pues, como los valores z_1 y z_2 dados en (2.27) son negativos, necesariamente existe $\tilde{L} > 0$ tal que $z_1 < \mu_j(\tilde{L}) < z_2$. Como j era un valor fijo, en el dominio $\tilde{\Omega} = (0, \tilde{L})$ tendremos al menos un valor j para el que $z_1 < \tilde{\mu}_j < z_2$, donde $\tilde{\mu}_j$ son los autovalores de (2.8) en el dominio $\tilde{\Omega}$. Observemos que en $\tilde{\Omega}$ se siguen cumpliendo las condiciones (2.17), (2.25) y (2.26), pues estas son independientes del dominio en el que tenga lugar el proceso de reacción-difusión.

Lo anterior podría generalizarse a dominios Ω arbitrarios con el siguiente resultado que ofrecemos sin demostración :

Proposición 2.1.4. Si $\{\mu_j\}_{j=1}^{\infty}$ son los autovalores del problema (2.8) en Ω , entonces los autovalores del problema (2.8) en $r\Omega$ son $\{\frac{\mu_j}{r^2}\}_{j=1}^{\infty}$ para todo $r > 0$.

Concluimos esta sección enunciando el teorema que hemos probado:

Teorema 2.1.5. Para que tenga lugar el fenómeno de inestabilidad de Turing sobre un sistema de reacción-difusión de la forma

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma f(u, v) + \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = \gamma g(u, v) + d\nabla^2 v \\ (\vec{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = 0 \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \vec{x} \in \Omega \\ \vec{x} \in \partial\Omega \end{array}$$

tenemos que garantizar las siguientes condiciones sobre las funciones f y g :

$$f_u + g_v < 0 \quad f_u g_v - f_v g_u > 0 \quad (2.28)$$

$$df_u + g_v > 0 \quad (df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0$$

donde f_u, f_v, g_u, g_v son las derivadas parciales de f y g evaluadas en un punto de equilibrio (a, b) del sistema. Además de estas condiciones, algún autovalor μ_j del problema (2.8) debe verificar que $z_1 < \mu_j < z_2$, donde z_1 y z_2 son los valores dados en (2.27).

2.2. Formación de patrones espaciales en modelos químicos y biológicos. Modelo de Schnakenberg.

En esta sección aplicaremos lo estudiado en la sección anterior a un modelo concreto : El modelo de Schnakenberg. Este modelo ha sido ampliamente estudiado por sus múltiples aplicaciones en morfogénesis, de las que cabe destacar su uso para explicar la formación y crecimiento de hueso [5]. El modelo está formado por un sistema de reacción-difusión de la forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \gamma (\alpha - u + u^2 v) + \nabla^2 u \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \gamma (\beta - u^2 v) + d\nabla^2 v \end{aligned} \quad (2.29)$$

donde u es la concentración de cierto químico activador, v la concentración de cierto químico inhibidor y $d = \frac{D_v}{D_u}$ el cociente entre los coeficientes de difusión de u y v . Para la interpretación de los términos del modelo puede verse [10].

Veamos bajo qué condiciones tiene lugar el mecanismo Turing sobre el sistema de reacción-difusión anterior. Para ello, calculamos los puntos de equilibrio del sistema en ausencia de difusión, es decir, buscamos las soluciones de :

$$0 = \gamma (\alpha - u + u^2 v)$$

$$0 = \gamma (\beta - u^2 v)$$

Sumando ambas ecuaciones deducimos que $u = \alpha + \beta$ luego sustituyendo en la segunda ecuación tenemos que $0 = \gamma \left(\beta - (\alpha + \beta)^2 v \right)$, es decir, $v = \frac{\beta}{(\alpha + \beta)^2}$, valor de v que verifica la primera ecuación, por lo que $(a, b) := (\alpha + \beta, \frac{\beta}{(\alpha + \beta)^2})$ es la solución estacionaria que estamos buscando.

Una vez hecho esto, calculamos

$$\begin{aligned} f_u &= \frac{\partial f}{\partial u}(a, b) = -1 + 2ab = -1 + 2\frac{\beta}{\alpha + \beta} = \frac{\beta - \alpha}{\alpha + \beta} & f_v &= \frac{\partial f}{\partial v}(a, b) = a^2 = (\alpha + \beta)^2 \\ g_u &= \frac{\partial g}{\partial u}(a, b) = -2ab = -2\frac{\beta}{\alpha + \beta} & g_v &= \frac{\partial g}{\partial v}(a, b) = -a^2 = -(\alpha + \beta)^2 < 0 \end{aligned}$$

Utilizando el corolario 2.1.2 sabemos que es condición necesaria para la inestabilidad de Turing que f_u y g_v tengan signos distintos, por lo que para que esto ocurra $\alpha < \beta$. Por otro lado, como los parámetros del modelo son positivos, para que $f_u + g_v < 0$ deberá ocurrir que

$$0 < \frac{\beta - \alpha}{\alpha + \beta} < (\alpha + \beta)^2 \Rightarrow 0 < \beta - \alpha < (\alpha + \beta)^3 \quad (2.30)$$

Por otro lado, un cálculo sencillo nos da que

$$f_u g_v - f_v g_u = -(\beta - \alpha)(\alpha + \beta) + 2\beta(\alpha + \beta) = (\alpha + \beta)^2$$

por lo que para que $f_u g_v - f_v g_u > 0$ necesariamente

$$(\alpha + \beta)^2 > 0 \Rightarrow \alpha + \beta \neq 0 \quad (2.31)$$

De forma análoga deducimos que para que $df_u + g_v > 0$ es necesario que α, β, d verifiquen

$$\frac{d(\beta - \alpha)}{\alpha + \beta} > (\alpha + \beta)^2 \Rightarrow d(\beta - \alpha) > (\alpha + \beta)^3 \quad (2.32)$$

Finalmente, para garantizar la última condición de (2.28), es decir, $0 < (df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u)$, α, β, d deben verificar

$$\left(d(\beta - \alpha) - (\alpha + \beta)^3 \right)^2 > 4d(\alpha + \beta)^4 \quad (2.33)$$

Así pues, para que pueda tener lugar el mecanismo Turing en el sistema (2.29), los parámetros α, β, d deben verificar las desigualdades (2.30), (2.31), (2.32) y (2.33).

Para finalizar, veamos algunas simulaciones numéricas de modelos del tipo (2.29) en los que se forman patrones espaciales. En efecto, tomando $\alpha = 0,1$ y $\beta = 0,9$ se verifican las condiciones (2.30) y (2.31). Por otro lado, el valor de d válido es aquel que verifica (2.32) y (2.33) para esos valores de α y β . De (2.32) deducimos que los valores d válidos son aquellos tales que $0,9d > 0,1d + 1$, es decir, $d > 1,25$. Por otro lado, de (2.33) deducimos que los valores d válidos serán las soluciones de la inecuación de segundo grado

$$(0,8d - 1)^2 > 4d \Rightarrow 0,64d^2 - 5,6d + 1 > 0$$

Para resolverla, calculamos en primer lugar las soluciones de $0,64d^2 - 5,6d + 1 = 0$ que son $d_1 = \frac{5(7+3\sqrt{5})}{8} \cong 8,5676$ y $d_2 = \frac{5(7-3\sqrt{5})}{8} \cong 0,1824$. Como para que se cumpla (2.32) debe ser $d > 1,25$,

estudiaremos la inecuación $0,64d^2 - 5,6d + 1 > 0$ para esos valores de d . Comprobaciones elementales nos dan que $0,64d^2 - 5,6d + 1$ toma valores positivos para $d > d_1$ y negativos cuando $1,25 < d < d_1$. Todo lo anterior nos permite concluir que podremos garantizar las condiciones (2.30),(2.31), (2.32) y (2.33) eligiendo $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9$ y cualquier valor d tal que $d > d_1 \cong 8,5676$. Veamos el caso particular en el que $d = 10$. En ese caso, como se cumplen las condiciones (2.30)-(2.33), tal y como vimos en la sección anterior, la parábola $h(z) = dz^2 + \gamma(df_u + g_v)z + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) = 10z^2 + 7\gamma z + \gamma^2$ es negativa para valores de z comprendidos entre los puntos de corte de dicha parábola con el eje OX, que en este caso son las soluciones de la ecuación de segundo grado $10z^2 + 7\gamma z + \gamma^2 = 0$, es decir,

$$z_1 = \frac{-7\gamma - \sqrt{49\gamma^2 - 4 \cdot 10 \cdot \gamma^2}}{2 \cdot 10} = -\frac{10}{20}\gamma = -\frac{1}{2}\gamma$$

$$z_2 = \frac{-7\gamma + \sqrt{49\gamma^2 - 4 \cdot 10 \cdot \gamma^2}}{2 \cdot 10} = -\frac{4}{20}\gamma = -\frac{1}{5}\gamma$$

Si por ejemplo tomamos $\gamma = 30$, tendremos que los posibles autovalores μ_j del problema (2.8) que hacen posible la inestabilidad de Turing son aquellos tales que $-15 < \mu_j < -6$. Si estuviéramos en una única dimensión espacial con dominio $0 \leq x \leq 1$, los autovalores μ_j del problema (2.8) serán $\mu_j = -j^2\pi^2$, con j un número entero, lo que nos da $6 < j^2\pi^2 < 15$, es decir, $0,61 \simeq \frac{6}{\pi^2} < j^2 < \frac{15}{\pi^2} \simeq 1,52$, luego el único valor posible para j es $j = 1$, lo que nos da un único autovalor y una única autofunción posible para que tenga lugar el mecanismo Turing.

Llegados a este punto, para observar cómo serían las concentraciones de u y v es necesaria la implementación de algún método numérico que permita aproximar la solución del sistema (2.29). Para ello, se resuelve el modelo de Schnakenberg con $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9, d = 10$ y $\gamma = 30$ mediante el método de los elementos finitos (para más información sobre este método puede verse [6]). Las Figuras 2.1 y 2.2 muestran los resultados obtenidos. En ellas puede apreciarse la evolución de las soluciones desde el estado estacionario en $t = 0$ hacia un estado de inestabilidad espacial en $t = 5$. Finalmente, estudiaremos una simulación numérica del modelo de Schnakenberg en un dominio bidimensional. En efecto, tomando $\alpha = 0,1$, $\beta = 0,9, d = 8,6676$ y $\gamma = 230,82$, un procedimiento similar al realizado anteriormente nos da que los posibles autovalores para los que tiene lugar el mecanismo Turing se encuentran en el intervalo $(-88,8, -69,2)$. Si tomamos un dominio espacial cuadrado $[0, 1] \times [0, 1]$, resolviendo el problema (2.8) tendremos autovalores $\mu_{jl} = -(j^2 + l^2)\pi^2$ con j y l números enteros, lo que nos da $69,2 < (j^2 + l^2)\pi^2 < 88,8$, es decir, $7,011 \simeq \frac{69,2}{\pi^2} < j^2 + l^2 < \frac{88,8}{\pi^2} \simeq 8,997$. Observemos que el único par (j, l) que verifica las desigualdades anteriores es $j = l = 2$, por lo que de nuevo existe un único autovalor y una única autofunción posible para que tenga lugar el mecanismo Turing. La Figura 2.3 muestra las concentraciones de u y v para $t = 20$ al implementar el método de elementos finitos con los parámetros anteriores. En las imágenes puede observarse con claridad la formación de patrones espaciales.

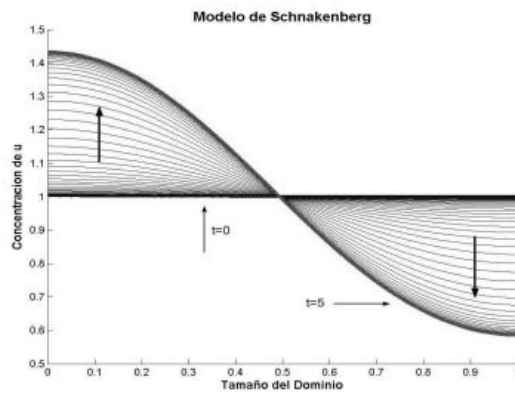


Figura 2.1: Concentración de $u(x, t)$ para diferentes valores de t . Imagen sacada de [10].

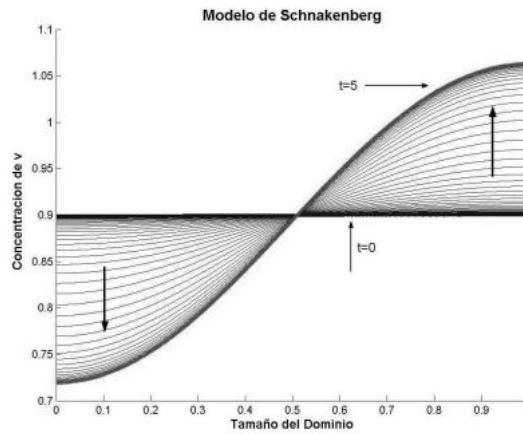


Figura 2.2: Concentración de $v(x, t)$ para diferentes valores de t . Imagen sacada de [10].

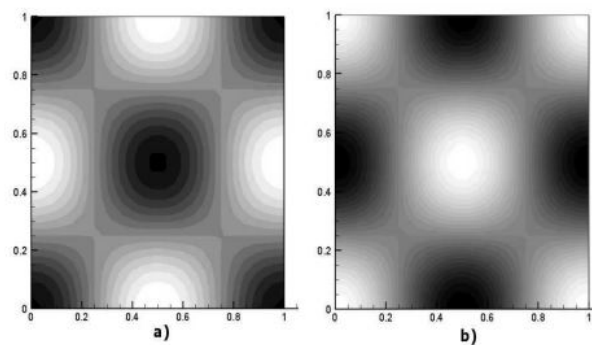


Figura 2.3: Concentración de $u(x, y, t)$ (a) y $v(x, y, t)$ (b) para el modelo de Schnakenberg en $t = 20$. Imágenes sacadas de [10].

Bibliografía

- [1] H. C. Berg. *Random Walks in Biology: New and Expanded Edition*. Princeton University Press, 1993.
- [2] L. Edelstein-Keshet. *Mathematical Models in Biology*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005.
- [3] A. Einstein. *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*, volume 17. Annalen der Physik, 1905.
- [4] R. A. Fisher. *The Wave of Advance of Advantageous Genes*, volume 7. Annals of Eugenics, 1937.
- [5] D. Garzón. *Simulación de Procesos de Reacción-Difusión: Aplicación a la Morfogénesis del Tejido Óseo. Tesis doctoral*. Centro Politécnico Superior de la Universidad de Zaragoza., 2007.
- [6] A. Madzvamuse et al. *A Numerical Approach to the Study of Spatial Pattern Formation in the Ligaments of Arcoid Bivalves. PhD Thesis*, volume 64. Bulletin of Mathematical Biology, 2002.
- [7] J. D. Murray. *Mathematical Biology*, volume 19. Biomathematics Texts. Springer, 1993.
- [8] S. Rushikesh et al. *Hox Genes Regulate Digit Patterning by Controlling the Wavelength of a Turing-Type Mechanism*, volume 338. Science AAAS, 2012.
- [9] A. M. Turing. *The Chemical Basis of Morphogenesis*, volume 237. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences, 1952.
- [10] J. Vanegas et al. *Análisis de la inestabilidad de Turing en modelos biológicos*, volume 76. DYNA: revista de la Facultad de Minas. Universidad Nacional de Colombia. Sede Medellín, 2009.
- [11] C. Fernández Pérez et al. *Ecuaciones diferenciales y en diferencias: Sistemas dinámicos*. Ediciones Paraninfo, 2003.