

UNA INTRODUCCIÓN AL ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE PATRONES DE  
TURING

DANIEL ANDRÉS FIGUEROA PÉREZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE MATEMÁTICAS  
BUCARAMANGA  
2023

UNA INTRODUCCIÓN AL ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE PATRONES DE  
TURING

DANIEL ANDRÉS FIGUEROA PÉREZ

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE  
MATEMÁTICO

DIRECTOR  
ÉLDER JESÚS VILLAMIZAR ROA  
Ph.D EN MATEMÁTICAS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE MATEMÁTICAS  
BUCARAMANGA

2023

## CONTENIDO

	pág.
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>9</b>
<b>1. GENERALIDADES</b>	<b>13</b>
1.1. Alan Turing	13
1.2. Cinética de reacción	14
1.3. Difusión	17
1.4. ¿Por qué $d > 1$ ?	18
1.5. Criterio de estabilidad	20
1.6. Ciclo límite	22
<b>2. REACCIÓN-DIFUSIÓN: MECANISMO DE TURING</b>	<b>23</b>
2.1. Ecuación de reacción-difusión	23
2.2. Reacción de Schnakenberg	26
2.3. Reacción de Gierer-Meinhardt	27
2.4. Reacción de Thomas	28
2.5. Adimensionalización	28
2.5.1. Reacción de Schnakenberg.	29
2.5.2. Reacción de Gierer-Meinhardt	31
2.5.3. Reacción de Thomas	32
2.6. Inestabilidad de Turing	34
2.6.1. Estabilidad sin difusión	35
2.6.2. Inestabilidad en presencia de difusión.	38
2.7. Relación de dispersión	42
2.8. Condiciones de Turing aplicadas al modelo de cinética de reacción de Schnakenberg	47
2.9. Número de onda para el modelo de Schnakenberg	49
2.10. Inexistencia de patrones de Turing	52

<b>3. APROXIMACIÓN NUMÉRICA</b>	<b>57</b>
3.1. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Schnakenberg	57
3.1.1. Resultados de simulación para la reacción de Schnakenberg.	61
3.2. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Gierer-Meinhardt	73
3.2.1. Resultados de simulación para reacción de Gierer-Meinhardt.	74
3.3. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Thomas	79
3.3.1. Resultados de simulación para reacción de Thomas.	79
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>83</b>

## LISTA DE FIGURAS

	<b>pág.</b>
Figura 1. Ejemplo saltamontes y llamas de fuego.	19
Figura 2. Tipos de ciclo límite.	22
Figura 3. Reacción de Schnakenberg para parámetros $a = 0.2$ y $b = 0.5$ .	30
Figura 4. Reacción de Gierer-Meinhardt para parámetros $a = 2.1$ y $b = 3.2$ .	32
Figura 5. Secciones de $h(u, v)$ .	33
Figura 6. Reacción de Thomas.	34
Figura 7. Variación de parámetros $\gamma$ y $d$ .	41
Figura 8. Relación de dispersión.	45
Figura 9. Variación de parámetros $\gamma$ y $d$ .	46
Figura 10. Variación de parámetros para la reacción de Schnakenberg.	49
Figura 11. Formación de patrones para la sustancia $u$ a partir de la reacción de Schnakenberg.	63
Figura 12. Formación de patrones para la reacción de Schnakenberg obtenida de la referencia <sup>14</sup> .	64
Figura 13. Solución del “esquema S” para la sustancia $u$ .	65
Figura 14. Desfase entre $u$ y $v$ soluciones de el “esquema S”.	65
Figura 15. Solución del “esquema S” vs solución de Matlab para la sustancia $u$ .	66
Figura 16. Comparación de la positividad del “esquema S” y del “esquema Z” para la sustancia $u$ .	67
Figura 17. Formación de patrones adicionales para la reacción de Schnakenberg.	68
Figura 18. Similitud de patrones de Turing con los observados en la naturaleza usando la reacción de Schnakenberg.	69
Figura 19. Formación de patrones para el sistema Sel’kov-Schnakenberg.	70
Figura 20. Formación de patrones para el sistema de difusión cruzada para la reacción de Schnakenberg.	71

Figura 21. Formación de patrones para la sustancia $u$ a partir de la reacción de Gierer-Meinhardt.	75
Figura 22. Formación de patrones para la reacción de Gierer-Meinhardt obtenida de la referencia <sup>14</sup> .	76
Figura 23. Solución del “esquema G” para las concentraciones $u$ y $v$ .	77
Figura 24. Formación de patrones adicionales para la reacción de Gierer-Meinhardt.	77
Figura 25. Formación de patrones para la reacción de Gierer-Meinhardt incluyendo el termino de saturación.	78
Figura 26. Formación de patrones para la sustancia $u$ a partir de la reacción de Thomas.	80
Figura 27. Formación de patrones para la reacción de Thomas obtenida de la referencia <sup>22</sup> .	81
Figura 28. Formación de patrones adicionales para la reacción de Thomas.	82

## RESUMEN

**TÍTULO:** UNA INTRODUCCIÓN AL ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE PATRONES DE TURING\*.

**AUTOR:** DANIEL ANDRÉS FIGUEROA PÉREZ\*\*.

**PALABRAS CLAVE:** PATRONES DE TURING, ECUACIONES DE REACCIÓN-DIFUSIÓN, APROXIMACIÓN NUMÉRICA.

**DESCRIPCIÓN:** La naturaleza está dotada de una amplia gama de colores, formas, tamaños a toda escala, simetrías, patrones, que despiertan nuestros sentidos de manera abrumadora. Alan Mathison Turing, además de sus aportes seminales en lo que hoy se denomina ciencia de la computación y la inteligencia artificial, tuvo también entre sus logros más significativos, sus aportes en el modelado matemático de la formación de patrones con su célebre artículo publicado en 1952 y titulado “The Chemical Basis of Morphogenesis”, en el cual, en términos muy generales, plantea, cómo el proceso estabilizante de la difusión se convierte en un desestabilizador de un sistema interactivo entre dos sustancias químicas.

Se llevó a cabo una revisión bibliográfica sobre los fundamentos subyacentes a la teoría de los patrones de Turing. Comenzamos explorando los conceptos físicos y químicos que sientan las bases de esta teoría. Además, se analizaron las condiciones de inestabilidad según las ecuaciones diferenciales que la teoría de Turing emplea y se examinaron trabajos recientes relevantes en el campo.

Adicionalmente, se presentaron en este trabajo algunos esquemas numéricos diseñados para capturar la dinámica de los sistemas de reacción-difusión que son responsables de la generación de los patrones de Turing.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Matemáticas. Director: Élder Jesús Villamizar Roa, Ph.D. en Matemáticas.

## ABSTRACT

**TÍTULO:** AN INTRODUCTION TO THE STUDY OF TURING PATTERN FORMATION\*.

**AUTOR:** DANIEL ANDRÉS FIGUEROA PÉREZ\*\*.

**KEYWORDS:** TURING PATTERN, REACTION-DIFFUSION EQUATIONS, NUMERICAL APPROXIMATION.

**DESCRIPTION:** Nature is endowed with a wide range of colors, shapes, sizes at all scales, symmetries, and patterns that overwhelm our senses. Alan Mathison Turing, in addition to his seminal contributions to what is now called computer science and artificial intelligence, also had among his most significant achievements his contributions to the mathematical modeling of pattern formation with his famous article published in 1952 titled "The Chemical Basis of Morphogenesis," in which, in very general terms, he raises how the stabilizing process of diffusion becomes a destabilizer of an interactive system between two chemical substances.

A literature review was conducted on the underlying fundamentals of Turing pattern theory. We began by exploring the physical and chemical concepts that form the basis of this theory. Additionally, the conditions of instability according to the differential equations that Turing pattern theory employs were analyzed, and relevant recent work in the field was examined.

Furthermore, this work presented some numerical schemes designed to capture the dynamics of reaction-diffusion systems that are responsible for the generation of Turing patterns.

---

\* Bachelor Thesis

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Matemáticas. Director: Élder Jesús Villamizar Roa, Ph.D. en Matemáticas.

## INTRODUCCIÓN

La naturaleza está dotada de una amplia gama de colores, formas, tamaños a toda escala, simetrías, etc, que despiertan nuestros sentidos de manera abrumadora. Basta pensar en los arrecifes de coral, las bandadas y colores de pájaros, las pieles de ciertos animales y peces, pero también en organismos microscópicos como ciertas colonias de bacterias y elementos inertes como las dunas de arena, en donde es común observar ciertos patrones que los identifican. Esta lista de ejemplos puede tornarse muy amplia, al punto que no es exagerado decir que los patrones son ubicuos en la naturaleza.

Ciertamente, más allá de la belleza abrumadora que caracteriza los patrones en la naturaleza, desde el punto de vista científico, es inquietante conocer el origen de estas particularidades morfológicas y su rol en el desarrollo, adaptación y supervivencia de organismos, así como en la composición de sistemas biológicos en el medio ambiente. En ese contexto científico, además de los biólogos, físicos y químicos, los matemáticos también se han mostrado activos en la búsqueda de explicaciones acuciosas y elegantes de este tipo de particularidades naturales, a través del planteamiento y análisis de modelos matemáticos que describen ese tipo de fenómenos.

Alan Mathison Turing, más conocido como el padre de la computación y de la inteligencia artificial, reconocido popularmente por su papel en la derrota de Alemania durante la Segunda Guerra Mundial al descifrar el código Enigma, tuvo también entre sus logros más significativos, sus aportes en el modelado matemático de la formación de patrones, con su célebre artículo publicado en 1952 y titulado “The Chemical Basis of Morphogenesis”, en el cual, en términos muy generales, planteó, cómo el proceso estabilizante de la difusión se convierte en un desestabilizador de un sistema interactivo entre dos sustancias químicas.

El modelo planteado por Turing se basa en la ocurrencia de dos fenómenos fisicoquí-

micos. Por un lado, la reacción de dos sustancias químicas, denominadas *morfógenos*, que reaccionan entre sí, y por otro lado, el proceso de difusión en el medio que las contiene. Cuando ocurren estos dos procesos se generan patrones espacio-temporales, siempre y cuando el sistema de reacción-difusión que los describe cumpla con ciertas condiciones. El resultado de este mecanismo es lo que se conoce en la literatura como *Mecanismo de Turing* o *Inestabilidad de Turing*. Su idea consistió en encontrar condiciones de estabilidad alrededor del punto de equilibrio del sistema de ecuaciones diferenciales sin difusión, es decir, un sistema de EDO. Después, bajo ciertas condiciones, se incluyen términos de difusión de manera tal que se genere inestabilidad, es decir, que no se conserve el estado homogéneo, que a principio se esperaría que no ocurriera debido a los efectos difusivos. Ocurre que el proceso de difusión puede desestabilizar el equilibrio del sistema, generando como consecuencia patrones espacio temporales.

En este trabajo se propone disertar sobre las bases teóricas necesarias para la formación de patrones de Turing, comentando la importancia fundamental del término de la cinética reacción, el cual permite el cambio en la concentración de las sustancias, y el papel innovador de la componente difusiva como mecanismo de desestabilización.

En el Capítulo 1 se presentarán los elementos preliminares para entender las ideas de Alan Turing en torno a la formación de patrones, tales como, cinética reacción, el cual es un factor fundamental para analizar matemáticamente el cambio en la concentración de una sustancia; el fenómeno de difusión y la relación de los respectivos coeficientes de dos sustancias químicas involucradas en el análisis de las ecuaciones de reacción-difusión. Por último, se revisará un criterio de estabilidad para sistemas de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden con coeficientes constantes.

En el Capítulo 2 se plantean las ecuaciones de reacción-difusión para el análisis de los patrones de Turing, resaltando la importancia de cada termino en estas ecuaciones, desde la componente difusiva hasta la cinética de reacción entre las sustancias consideradas en el proceso. El sistema de ecuaciones de reacción-difusión se dota de con-

diciones iniciales y condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas. Estas últimas son condiciones naturales, dado que se está interesado en la auto-organización de las sustancias.

Una vez definido el sistema de ecuaciones de reacción-difusión, se realiza un proceso de adimensionalización dependiendo de cada cinética de reacción en particular, lo cual trae ventajas computacionales y permite, en general, analizar de una forma más sencilla las ecuaciones de reacción-difusión. Se analiza la estabilidad del sistema alrededor del punto de equilibrio, proceso que se divide en dos casos: en el primer caso se imponen condiciones sobre los parámetros de reacción para que el sistema sea linealmente estable sin la presencia de la componente difusiva, y en el segundo caso se imponen condiciones sobre los parámetros de reacción, difusión y términos de gran relevancia en la solución de las ecuaciones linealizadas, como es el número de onda, el cual permite determinar si el sistema es linealmente inestable en presencia de la difusión. Por último, se muestra que en el proceso de formación de patrones de Turing los coeficientes de difusión no deben tener valores muy grandes, ya que de lo contrario dicho patrones desaparecerían.

En el Capítulo 3, se plantea un esquema numérico mixto basado en una discretización por diferencias finitas en tiempo y una discretización espacial basada en el método de los elementos finitos para aproximar las soluciones del sistema de reacción-difusión en su forma adimensional. Se muestra la buena postura del esquema y se demuestra la positividad de la solución discreta, lo cual es de suma importancia por la naturaleza biológica de las incógnitas. Por último, se presentan los resultados de algunos experimentos numéricos realizados.

Específicamente, las simulaciones se centran en tres tipos diferentes de reacciones: El modelo de Schnakenberg muestra un desfase entre las sustancias involucradas en el proceso, en particular  $u$  y  $v$  en nuestro caso de interés, lo que confirma el comportamiento autocatalítico de  $u$  al tiempo que inhibe a la sustancia  $v$ , mientras que esta última activa a  $u$  y se autoinhibe. En el modelo de Gierer-Meinhardt y el modelo de Thomas, se observa un comportamiento activador y autocatalítico para la sustancia  $u$ ,

así como un comportamiento inhibitor y autoinhibidor para la sustancia  $v$ . Esto tiene, respectivamente, como resultado que los valores máximos y mínimos de las concentraciones de  $u$  y  $v$ , se localicen en el mismo lugar. Los resultados de estas reacciones se comparan con los presentados en la literatura con el objetivo de validar el esquema numérico utilizado. Se destaca que en el proceso de generación de patrones espacio-temporales, una vez que se han elegido los parámetros de reacción-difusión, las condiciones iniciales o perturbaciones, preferentemente alrededor del punto de equilibrio, empleadas en el proceso tienen un gran impacto en el resultado final.

---

## 1. GENERALIDADES

En este capítulo se introducirán algunos elementos conceptuales necesarios para estudiar las ecuaciones de reacción-difusión asociadas al mecanismo de Turing. Se revisarán algunos elementos conceptuales de la cinética química para algunas reacciones en particular mediante el estudio de la cinética de reacción, la cual es fundamental para analizar matemáticamente la degradación o el consumo de una sustancia.

### 1.1. Alan Turing

El matemático británico Alan Mathison Turing nació el 23 de junio de 1912 en Paddington, Londres, en una familia de clase media. Alan Turing fue el segundo hijo de Julius Mathison Turing y Ethel Sara Stoney, quienes se conocieron en la India, razón por la cual Alan Turing pasó sus primeros 13 años en dicho lugar, donde su padre trabajaba en la administración colonial. Al regresar al Reino Unido, vivió parte de su niñez junto a su hermano mayor, John, marcados por la severa educación de su clase y la ausencia de sus padres, quienes se quedaron en la India hasta su jubilación. En 1928, en Sherborne School, Alan Turing conoció a Christopher Morcom, con quien compartió un importante periodo de amistad y entorno intelectual, hasta la muerte de Christopher en 1930. Influenciado por Christopher, Alan Turing hizo acercamientos al mundo de la física. En 1931, ingresó al King's College, y tras su graduación, se trasladó a la Universidad de Princeton, en Estados Unidos, en donde trabajó con el lógico Alonzo Church. En 1937 publicó el célebre artículo, "Máquina de Turing", que operaba basándose en una serie de reglas lógicas, sentando así las bases del concepto moderno de algoritmo. Alan Turing diseñó además un método teórico para decidir si una máquina tenía la capacidad de pensar como un ser humano, al cual se le denomina Test de Turing. Gracias a su curiosidad y creatividad, Alan Turing se destacaba por tener un alto interés en entender sistemas complejos a partir de hipótesis y pensamientos sencillos que los describieran. Además, tenía un interés particular en sistemas de auto-organización y creía que, gracias a sus conocimientos avanzados en computación, los sistemas

biológicos podrían describirse mediante algoritmos y reacciones químicas sencillas. Esto llevó a Turing a realizar importantes contribuciones a otras ramas de la matemática aplicada, como la formulación teórica del problema biológico de la morfogénesis, aspecto sobre el cual se enmarca este trabajo de disertación.

## 1.2. Cinética de reacción

La cinética de reacción es una rama de la química que se centra en el estudio de la velocidad y el mecanismo de las reacciones químicas. Su objetivo principal es entender cómo cambian las concentraciones de las sustancias involucradas en una reacción a medida que transcurre el tiempo. Para lograrlo, se asigna a cada reacción involucrada en el proceso, una función matemática que describe este cambio de concentración a lo largo del tiempo<sup>1</sup>. Los cambios químicos que toman lugar en una reacción se pueden representar mediante



en donde  $a$  y  $b$  son los coeficientes estequiométricos que indican el número de moles de los reactivos  $A$  y  $B$  que se consumen para producir los productos  $C$  y  $D$ , representados por  $c$  y  $d$ , respectivamente. Cabe destacar que una mol de cualquier sustancia equivale a  $6.022 \times 10^{23}$  unidades de dicha sustancia.

A modo de ejemplo, se puede mencionar la formación de agua a partir de hidrógeno y oxígeno, cuya ecuación química balanceada es un claro ejemplo de este tipo de reacciones, dada por



Es importante destacar que esta reacción solo ocurre en una dirección, es decir, el hidrógeno reacciona con el oxígeno para formar agua, pero la reacción contraria, en la que el agua se descompone en hidrógeno y oxígeno, no ocurre espontáneamente.

---

<sup>1</sup> Steinfeld Jeffrey, Salvadore-Francisco Joseph y Hase William. *Chemical kinetics and dynamics*. Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 1999.

Existen otras reacciones químicas que pueden tener una forma más compleja, como por ejemplo



en la que los reactivos  $A$  y  $B$  pueden combinarse para formar los productos  $C$  y  $D$ , pero también es posible que los productos  $C$  y  $D$  reaccionen para formar los reactivos  $A$  y  $B$ . En estas reacciones, la dirección en la que se lleva a cabo la reacción puede estar determinada por factores como la concentración de los reactivos o la temperatura. A este tipo de reacciones se les denomina de tipo reversible, lo cual se representa por el símbolo de "doble flecha". Por ejemplo, la formación de yoduro de hidrógeno a partir de yoduro e hidrógeno se puede representar como una reacción reversible dada por



Las ecuaciones (2) y (4) representan de forma general las reacciones como si ocurrieran exactamente de inicio a fin, pero en realidad, durante la formación de los productos, ocurren la formación de diferentes especies y reacciones intermedias, conocidas como reacciones elementales. En el caso de la reacción química (1), la velocidad de reacción  $R$  se puede expresar de la siguiente manera

$$R = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}, \quad (5)$$

donde los símbolos  $[.]$  representan la concentración de la sustancia indicada que, dependiendo del contexto, pueden ser omitidos.

Es importante destacar que se utilizan signos negativos para los reactivos, lo que indica que su concentración está disminuyendo debido a que se están consumiendo. Por otro lado, se utilizan signos positivos para los productos, lo que indica que su concentración está aumentando debido a que se están formando. Esta expresión matemática nos permite relacionar la velocidad de la reacción con las concentraciones de los reactivos y productos en un instante determinado. Los estudios experimentales han demostrado que la velocidad de una reacción química puede ser proporcional al

producto de las potencias de las concentraciones de los reactivos involucrados en la reacción. Esta proporcionalidad se puede expresar mediante la ley de velocidad de la reacción, que en el caso de la reacción química (1) se expresa como

$$R = k[A]^m[B]^n, \quad (6)$$

donde  $m, n \in \mathbb{R}$  son exponentes que se determinan experimentalmente y que corresponden a la dependencia de la velocidad de reacción con respecto a las concentraciones de los reactivos  $A$  y  $B$ , respectivamente. La constante  $k$ , conocida como constante de velocidad de reacción, es un coeficiente fenomenológico que se obtiene ajustando los datos experimentales a la ecuación cinética.

El orden de la velocidad de reacción,  $p$ , se define como la suma de los exponentes de los reactivos en la ecuación cinética, es decir,  $p = m + n$ . Este concepto es útil para clasificar las reacciones como de primer, segundo o tercer orden, dependiendo de si  $p = 1, 2$  o  $3$ , respectivamente. En el caso de reacciones elementales, se asume que el orden de cada reactivo está dado por su coeficiente estequiométrico correspondiente <sup>2</sup>. Utilizando esta idea, se puede obtener una expresión para el cambio en la concentración de una sustancia particular en la reacción (1). Por ejemplo, la velocidad de reacción en términos de  $A$  se puede obtener a partir de la ecuación

$$R = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = k[A]^a[B]^b, \quad (7)$$

lo que resulta en la siguiente expresión para el cambio de concentración de  $A$  en el tiempo

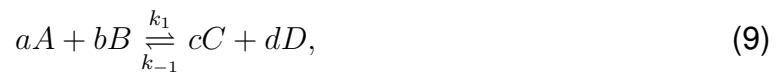
$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a[B]^b. \quad (8)$$

Observe que en (8) se sustituye  $k = ak$  por simplicidad <sup>3</sup>. Cuando se trata de reaccio-

<sup>2</sup> Péter Érdi y Tóth János. *Mathematical models of chemical reactions: theory and applications of deterministic and stochastic models*. Manchester University Press, 1989.

<sup>3</sup> Upadhyay Santosh. *Reaction dynamics*. Springer, 2006.

nes reversibles, el cambio de concentración de la sustancia de interés puede aumentar o disminuir dependiendo de si la sustancia actúa como un producto o un reactivo en la reacción. Por lo tanto, si consideramos una reacción química reversible con constantes de velocidad  $k_1$  y  $k_{-1}$  dada por la ecuación



podemos obtener una expresión para el cambio en la concentración de la sustancia  $A$  en función del tiempo, que está dada por la siguiente ecuación

$$\frac{d[A]}{dt} = k_{-1}[C]^c[D]^d - k_1[A]^a[B]^b. \quad (10)$$

La primera parte de la ecuación representa la formación de  $A$  a partir de los productos, mientras que la segunda parte representa el consumo de  $A$  debido a la reacción directa.

### 1.3. Difusión

En un conjunto de partículas, por ejemplo, células, bacterias, productos químicos, animales, etc, cada partícula generalmente se mueve de forma aleatoria. Las partículas se dispersan como resultado del movimiento irregular e individual de las mismas. Cuando este movimiento microscópico irregular da como resultado algún movimiento macroscópico se origina un proceso de difusión. Obtener el comportamiento macroscópico a partir del conocimiento del comportamiento microscópico individual es demasiado difícil, por lo que conviene considerar un modelo continuo que describa el comportamiento global en términos de densidad o concentración del conjunto de partículas.

Si se define la cantidad de una sustancia por unidad de volumen como la concentración de esta, según la Ley de Fick, el flujo de una sustancia  $u$  es proporcional al gradiente de concentración, es decir,

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -D(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x}, t), \quad (11)$$

en donde  $D(\mathbf{x})$  corresponde al coeficiente de difusión de la sustancia, el cual puede depender de la variable espacial, o incluso de la propia variable  $u$ . El signo negativo indica que el movimiento de partículas va de zonas de mayor concentración a zonas de baja concentración<sup>4</sup>. A partir de la expresión (11), y usando la Ley de conservación de la masa, es posible derivar las ecuaciones de difusión que describen la dinámica de la concentración de una sustancia química.

#### 1.4. ¿Por qué $d > 1$ ?

Como se introducirá en los próximos capítulos, denominamos  $d$  a la relación de coeficientes de difusión  $D_{u_1}$  y  $D_{u_2}$ , dada por  $d = \frac{D_{u_2}}{D_{u_1}}$ , donde  $u_1$  y  $u_2$  son sustancias químicas generalmente consideradas como activador e inhibidor, respectivamente. La relación de coeficientes de difusión  $d$  es un parámetro de suma importancia, ya que dependiendo de su valor, este permitirá o no la formación de patrones. Es por esto que surgen condiciones impuestas sobre  $d$ , y una de ellas establece que el coeficiente de difusión del inhibidor  $D_{u_2}$  debe ser mayor que el del activador  $D_{u_1}$ . La función del activador  $u_1$  es producirse a sí mismo dependiendo de su concentración local, es decir, llevar a cabo una reacción autocatalítica, y a su vez activar la formación del inhibidor  $u_2$ . Por lo tanto, el inhibidor  $u_2$  se debe difundir a una velocidad mayor que el activador  $u_1$ , de lo contrario, el inhibidor suprimiría por completo la presencia del activador en la región y la reacción terminaría. Basados en un ejemplo sencillo tomado de Murray<sup>5</sup>, se tratará de explicar por qué los coeficientes de difusión del inhibidor y del activador no pueden ser iguales.

---

<sup>4</sup> Çengel Yunus-Ali. *Transferencia de calor y masa: un enfoque práctico*. McGraw-Hill, 2007.

<sup>5</sup> Murray James. *Mathematical biology II: spatial models and biomedical applications*. Vol. 3. Springer-Verlag, 2001.

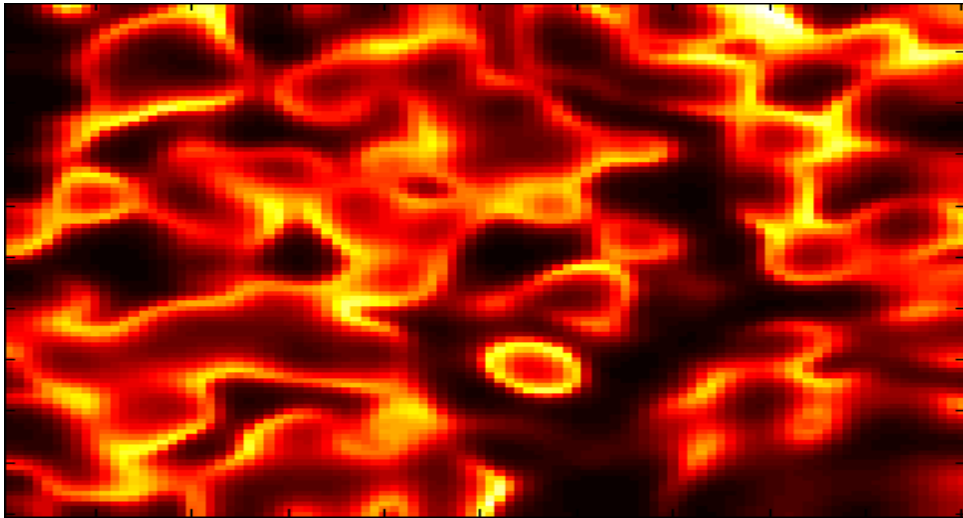


Figura 1. Ejemplo saltamontes y llamas de fuego.

Considere un campo de pasto seco en el que una determinada población de microorganismos generan cierta humedad en función de la temperatura. Ahora suponga que en cierto punto del campo, una llama de fuego empieza a propagarse. Luego, se puede considerar a la población de microorganismos como el inhibidor y a la llama de fuego como el activador. Si los microorganismos no generan suficiente humedad, entonces la llama de fuego se propagará por todo el campo y simplemente quedara una capa uniforme de cenizas. Por lo tanto, suponga que la población de microorganismos genera suficiente humedad como para evitar que el fuego se propague en la zona donde se generó dicha humedad. En este caso, la zona de cenizas está limitada por la humedad generada debido a la población de microorganismos. Ahora suponga que las llamas de fuego se generan en zonas arbitrarias del campo. Si la velocidad de difusión del fuego y de la población de microorganismos es diferente, entonces se llegara a un estado heterogéneo estable donde hay zonas con cenizas y otras que no las tienen. Pero si se difunden a una misma velocidad, ningún patrón podría evolucionar, ya que existiría una constante competencia igualitaria entre las llamas de fuego y la población de microorganismos.

## 1.5. Criterio de estabilidad

A continuación se presentará un criterio para determinar la estabilidad de un sistema, pero primero se introducirán conceptos necesarios para una mejor comprensión.

**Definición 1.1.** *Considere el sistema*

$$\frac{du}{dt} = f(u), \quad (12)$$

donde  $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^N$ , y  $\Omega \subset \mathbb{R}^N$  representa un dominio acotado. Se llama punto de equilibrio o solución estacionaria  $\bar{u}$  de (12) si cumple la condición  $f(\bar{u}) = 0$ . Es decir, las soluciones estacionarias o puntos de equilibrio son aquellas cuyas gráficas son rectas horizontales de la forma  $u(t) = \bar{u}$ .

Una vez definido el concepto de punto de equilibrio, se procederá a caracterizar su estabilidad.

**Definición 1.2.** *El punto de equilibrio  $u = \bar{u}$  es:*

- *Estable, si para cada  $\epsilon > 0$  existe  $\delta = \delta(\epsilon) > 0$  tal que*  
$$\|u(0) - \bar{u}\| < \delta \Rightarrow \|u(t) - \bar{u}\| < \epsilon, \quad \forall t \geq 0.$$
- *Asintóticamente estable si es estable y si  $\delta$  puede elegirse tal que*  
$$\|u(0) - \bar{u}\| < \delta \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} |u(t) - \bar{u}| = 0.$$
- *Inestable si no es estable.*

En este punto, vale la pena introducir cierta notación relativa a un sistema de ecuaciones diferenciales lineales, ya que se puede analizar un problema no lineal calculando su aproximación alrededor de su punto de equilibrio.

**Definición 1.3.** *Un sistema de ecuaciones lineales de primer orden tiene la forma general*

$$\begin{aligned} \frac{du_1}{dt} &= a_{11}(t)u_1 + a_{12}(t)u_2 + \cdots + a_{1n}(t)u_n + f_1(t) \\ \frac{du_2}{dt} &= a_{21}(t)u_1 + a_{22}(t)u_2 + \cdots + a_{2n}(t)u_n + f_2(t) \\ &\vdots \qquad \qquad \qquad \ddots \qquad \qquad \qquad \vdots \\ \frac{du_n}{dt} &= a_{n1}(t)u_1 + a_{n2}(t)u_2 + \cdots + a_{nn}(t)u_n + f_n(t), \end{aligned} \quad (13)$$

en donde las funciones  $a_{ij}$  y  $f_i$  son continuas para algún intervalo común en  $\mathbb{R}$ . Cuando se cumple la condición  $f_i(t) = 0$  para todo  $i = 1, \dots, n$ , se dice que el sistema (13) es homogéneo; de otra forma se dice que es no homogéneo.

Considere la forma matricial compacta de (13), denotando a  $u$ ,  $A(t)$  y  $F(t)$  como

$$u = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_n(t) \end{pmatrix}, \quad A(t) = \begin{pmatrix} a_{11}(t) & \cdots & a_{1n}(t) \\ a_{21}(t) & \cdots & a_{2n}(t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}(t) & \cdots & a_{nn}(t) \end{pmatrix}, \quad F(t) = \begin{pmatrix} f_1(t) \\ f_2(t) \\ \vdots \\ f_n(t) \end{pmatrix},$$

obteniendo simplemente

$$\frac{du}{dt} = Au + F. \quad (14)$$

En el caso de que el sistema sea homogéneo se obtiene la siguiente representación compacta

$$\frac{du}{dt} = Au. \quad (15)$$

Note que la matriz  $A(t)$  puede tener todas sus entradas constantes, es decir, un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden con coeficientes constantes. Como se mencionó anteriormente, estamos interesados en analizar el comportamiento de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden, para nuestro caso, con coeficientes constantes. Por lo tanto, se requiere del siguiente teorema atribuido a Liapunov:

**Teorema 1.4.** *Sea  $\frac{du}{dt} = Au$  un sistema lineal homogéneo de ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes y  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, n$ , los valores propios asociados a la matriz  $A$ . Estos valores propios determinan la estabilidad o inestabilidad en el origen, es decir, en el punto de equilibrio del sistema, como se presenta a continuación:*

- *Si para todo  $i$  se cumple que  $\text{Re}(\lambda_i) < 0$ , entonces el punto de equilibrio es asintóticamente estable.*
- *Si para algún  $j$  se cumple que  $\text{Re}(\lambda_j) > 0$ , entonces el punto de equilibrio es inestable.*

En el caso de que algunos de los valores propios solo tenga parte imaginaria se podría tener estabilidad o no.

## 1.6. Ciclo límite

Un ciclo límite es una trayectoria aislada, esto es, que todas la trayectorias cercanas a este ciclo límite no son cerradas. Estas trayectorias pueden acercarse o alejarse en forma de espiral del ciclo límite. A continuación, se presentan las tres tipos de ciclo límite

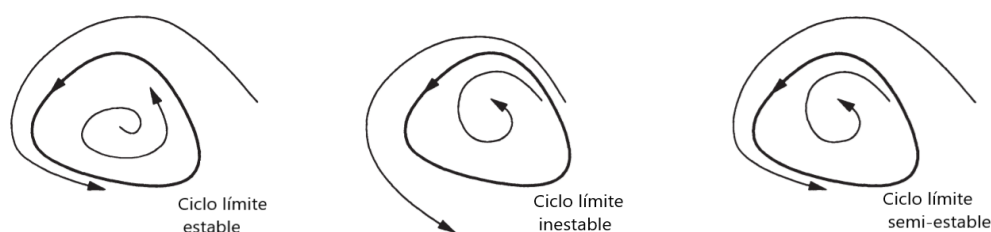


Figura 2. Tipos de ciclo límite.

Si todas las trayectorias se acercan a el ciclo límite, entonces el ciclo límite es estable; de lo contrario el ciclo límite es inestable. En casos particulares donde se presentan ambos comportamientos, se denomina semi estable<sup>6</sup>.

---

<sup>6</sup> Strogatz Steven Henry. *Nonlinear dynamics and chaos with student solutions manual: With applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. CRC press, 2018.

## 2. REACCIÓN-DIFUSIÓN: MECANISMO DE TURING

En este capítulo se analizará teóricamente el modelado de los patrones de Turing, junto con sus respectivas cinéticas de reacción que permiten la generación de estos patrones. En particular, se analizarán las condiciones necesarias que debe satisfacer el sistema de ecuaciones de reacción-difusión para que, sin presencia de la componente difusiva, el sistema sea linealmente estable, y en presencia de la difusión, sea linealmente inestable. Esto se logra mediante un análisis lineal de estabilidad alrededor de los puntos de equilibrio de cada reacción, para que así se puedan ajustar parámetros del sistema de reacción-difusión y se logre la transición de un estado homogéneo estable a un estado heterogéneo estable, lo que lleva a la formación de patrones de Turing.

### 2.1. Ecuación de reacción-difusión

El objetivo de esta sección es presentar una breve descripción de las ecuaciones en derivadas parciales que rigen el proceso de reacción y difusión de  $m$  sustancias químicas, cuyas concentraciones cambian respecto al tiempo y al espacio. Considere  $\Omega \subset \mathbb{R}^N$  ( $N \leq 3$ ), un dominio (abierto y conexo) acotado con frontera  $\partial\Omega$  Lipschitz y  $\mathbf{c}(\mathbf{x}, t) = (u_1(\mathbf{x}, t), \dots, u_m(\mathbf{x}, t))^T$  el vector de concentraciones con  $\mathbf{x} \in \Omega$  y  $t > 0$ . Es de conocimiento que las sustancias químicas dirigen su movimiento de regiones de mayor concentración a regiones de menor concentración, lo que indica que el flujo  $\mathbf{J}_i(\mathbf{x}, t)$  de cada concentración  $u_i$  apunta en la dirección de mayor decrecimiento, es decir, en la dirección opuesta al gradiente  $\nabla u_i$ , hecho que corresponde a la *Ley de Fick* y que se representa por

$$\mathbf{J}_i(\mathbf{x}, t) = -D_i(\mathbf{x})\nabla u_i(\mathbf{x}, t), \quad i \in \{1, \dots, m\}, \quad (16)$$

donde cada  $D_i(\mathbf{x})$  corresponde al  $i$ -ésimo coeficiente de difusión para la respectiva sustancia  $u_i(\mathbf{x}, t)$ . Para que existan reacciones químicas entre las sustancias, se introduce un término que define la cinética de cada reacción dado por  $\mathbf{f}(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) =$

$(f_1(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)), \dots, f_m(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)))^T$ , el cual, generalmente, es no lineal. Usando el principio de conservación de la materia para un volumen de control arbitrario  $V \subset \Omega \subset \mathbb{R}^N$  con frontera  $\partial V$ , el cambio de materia contenida en  $V$  es igual a la generación o degradación de la materia menos el flujo neto a través de la frontera, y está dado por

$$\frac{d}{dt} \left( \int_V u_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \right) = \left( \int_V f_i(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right) - \left( \int_{\partial V} \mathbf{J}_i(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} dV \right), \quad i \in \{1, \dots, m\}, \quad (17)$$

donde  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$  es el vector normal unitario en  $\mathbf{x}$  sobre la frontera  $\partial V$ . Aplicando el Teorema de la divergencia, se tiene que

$$\int_S \mathbf{J}_i(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \text{div}(\mathbf{J}_i(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}, \quad i \in \{1, \dots, m\}, \quad (18)$$

donde  $\text{div}(\cdot)$  representa el operador de divergencia. Usando las ecuaciones (16), (17) y (18), se obtiene que

$$\frac{d}{dt} \left( \int_V u_i(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \right) = \left( \int_V f_i(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right) + \int_V \text{div}(D_i(\mathbf{x}) \nabla u_i(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}, \quad i \in \{1, \dots, m\}. \quad (19)$$

Suponiendo que  $u_i(\mathbf{x}, t)$  es suficientemente regular, se puede inferir que

$$\int_V \frac{\partial u_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} d\mathbf{x} = \left( \int_V f_i(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x} \right) + \int_V \text{div}(D_i(\mathbf{x}) \nabla u_i(\mathbf{x}, t)) d\mathbf{x}, \quad i \in \{1, \dots, m\}. \quad (20)$$

Teniendo en cuenta que  $V$  se toma arbitrario, de la ecuación (20), se concluye que

$$\frac{\partial u_i(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \text{div}(D_i(\mathbf{x}) \nabla u_i(\mathbf{x}, t)) + f_i(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)), \quad i \in \{1, \dots, m\}, \quad (21)$$

conocida como ecuación (sistema) de reacción-difusión, donde el término  $\text{div}(D_i(\mathbf{x}) \nabla u_i(\mathbf{x}, t))$  corresponde a la parte difusiva, es decir, es el término que permite el movimiento de partículas en el sistema, y  $f_i(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t))$  representa la reacción química que ocurre entre las sustancias. Para analizar la buena postura del sistema (21), se

requiere establecer condiciones de frontera y condiciones iniciales. Se supone que en un instante inicial se tienen concentraciones dadas

$$\mathbf{c}(\mathbf{x}, 0) = (u_1(\mathbf{x}, 0), \dots, u_m(\mathbf{x}, 0))^T = \mathbf{c}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{c}_0(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m, \quad (22)$$

y se asume que no hay flujo de sustancias a través de la frontera, puesto que el interés es la auto-organización de las sustancias, es decir, se consideran condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas, esto es,

$$\frac{\partial u_i}{\partial \mathbf{n}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{n} \cdot \nabla u_i(\mathbf{x}, t) = 0, \quad i \in \{1, \dots, m\}, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty). \quad (23)$$

Juntando las ecuaciones (21), (22) y (23) se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \operatorname{div}(\mathbb{D}(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{c}(\mathbf{x}, t)) + \mathbf{f}(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)), \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \\ \mathbf{c}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{c}_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \end{array} \right. \quad (24)$$

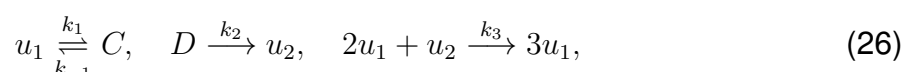
donde  $\mathbb{D}$  es la matriz diagonal de coeficientes de difusión. A lo largo de este trabajo, se considerarán solo dos sustancias químicas, cuya cinética química generalmente es no lineal. Tomamos entonces las sustancias químicas  $u_1(\mathbf{x}, t)$  y  $u_2(\mathbf{x}, t)$  con coeficientes de difusión  $D_{u_1}$  y  $D_{u_2}$  respectivamente, y asumimos que el problema es de orden isotrópico, es decir,  $D_{u_1}$  y  $D_{u_2}$  constantes. Bajo estas hipótesis, el sistema (24) se convierte en

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} (u_1)_t \\ (u_2)_t \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} D_{u_1} & 0 \\ 0 & D_{u_2} \end{pmatrix}}^{\mathbb{D}} \begin{pmatrix} \Delta u_1 \\ \Delta u_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_1(u_1, u_2) \\ f_2(u_1, u_2) \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial \mathbf{n}} \\ \frac{\partial u_2}{\partial \mathbf{n}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \\ \begin{pmatrix} u_1(\mathbf{x}, 0) \\ u_2(\mathbf{x}, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (u_1)_0(\mathbf{x}) \\ (u_2)_0(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \end{array} \right. \quad (25)$$

donde  $f_1$  y  $f_2$  corresponden a los términos de reacción en función de las concentraciones  $u_1$  y  $u_2$ . Una vez considerado el sistema de reacción-difusión para dos sustancias químicas como el presentado en (25), el siguiente paso es definir el tipo de cinética de reacción que regirá la formación de patrones de Turing. Dependiendo del tipo de cinética de reacción que se utilice, se obtendrán distintos patrones y diferentes interpretaciones, no solo biológicas sino físicas. Algunas de las cinéticas de reacción más relevantes son la reacción de Schnakenberg<sup>7</sup>, la reacción Gierer-Meinhardt<sup>8</sup> y la reacción de Thomas<sup>9</sup>. A continuación, establecemos las expresiones que rigen cada una de estas reacciones.

## 2.2. Reacción de Schnakenberg

El modelo de Schnakenberg es uno de los más utilizados para el modelado de patrones en sistemas de reacción-difusión. Este modelo es candidato para presentar comportamiento de ciclo limite, es decir, es candidato para tener una trayectoria cerrada hacia la cual otras soluciones divergen o convergen, como se explicó en la Sección 1.6. En el año 1979, en el artículo<sup>7</sup>, Schnakenberg consideró la cinética de dos sustancias químicas que participan en tres reacciones químicas y presentan un comportamiento sencillo de analizar algebraicamente alrededor de su punto de equilibrio. El mecanismo de reacción es el siguiente:



donde se puede observar que la sustancia  $u_1$  se consume con un coeficiente de velocidad  $k_1$  para convertirse en la sustancia  $C$ . A su vez, la sustancia  $u_1$  es producida con un coeficiente de velocidad  $k_{-1}$ . Por otro lado, el doble de su concentración reac-

---

<sup>7</sup> Schnakenberg Joseph. «Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour». En: *Journal of theoretical biology* 3 (1979), págs. 389-400.

<sup>8</sup> Gonpot Preethee, Collet Joseph y Sookia Noor. «Gierer-Meinhardt Model: Bifurcation Analysis and Pattern Formation». En: *Trends in Applied Sciences Research* 3 (feb. de 2008), págs. 115-128.

<sup>9</sup> Murray James. *Mathematical biology: I. An introduction*. Vol. 17. Springer Science & Business Media, 2007.

ciona con la sustancia  $u_2$  para convertirse en la sustancia  $3u_1$ , con un coeficiente de velocidad  $k_3$ . En el caso de la sustancia  $u_2$ , esta es producida con un coeficiente de velocidad  $k_2$ , cuando la sustancia  $D$  es consumida. Por último, la sustancia  $u_2$  reacciona con la sustancia  $2u_1$  con un coeficiente de velocidad  $k_3$  para producir la sustancia  $3u_1$ . Cabe aclarar que en el modelo (26) las sustancias  $C$  y  $D$  se consideran en abundancia, es decir, se desprecia el cambio en sus concentraciones durante la reacción. Para obtener la expresión analítica del cambio de las concentraciones  $u_1$  y  $u_2$  respecto al tiempo, se implementan las formulas obtenidas a partir de la sección 1.2.

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = k_{-1}C - k_1u_1 + k_3u_1^2u_2 := f_1(u_1, u_2), \\ \frac{du_2}{dt} = k_2D - k_3u_1^2u_2 := f_2(u_1, u_2). \end{cases} \quad (27)$$

Este modelo determina el comportamiento de un químico activador en presencia de un químico inhibidor. En este modelo,  $k_3u_1^2u_2$  representa la producción autocatalítica de  $u_1$  en presencia de  $u_2$ , mientras que en la reacción  $f_2(u_1, u_2)$  representa el consumo de  $u_2$  en presencia de  $u_1$ . El término  $-k_1u_1$  representa la degradación de  $u_1$ , y los términos constantes  $k_{-1}C$  y  $k_2D$  denotan la producción de las sustancias  $u_1$  y  $u_2$  respectivamente. En la sección de adimensionalización (sección 2.5), se dará una interpretación de la reacción de Schnakenberg para parámetros definidos.

### 2.3. Reacción de Gierer-Meinhardt

En 1972, en el artículo de Gierer y Meinhardt<sup>8</sup>, se propuso un modelo de cinética química compuesto por dos sustancias químicas. La primera sustancia, denominada activador, inicia la producción de una segunda sustancia, mientras que la segunda sustancia, conocida como inhibidor, detiene la producción de la primera. En otras palabras, si consideramos un par de sustancias o especies químicas denotadas como  $u_1$  y  $u_2$ , la especie  $u_2$  inhibe el crecimiento de la especie  $u_1$ , mientras que la especie  $u_1$  activa el crecimiento de la especie  $u_2$ . El modelo de Gierer-Meinhardt está definido de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = k_1 - k_2u_1 + \frac{k_3u_1^2}{u_2} := f_1(u_1, u_2), \\ \frac{du_2}{dt} = k_4u_1^2 - k_5u_2 := f_2(u_1, u_2). \end{cases} \quad (28)$$

Este modelo describe a  $u_1$  y  $u_2$  como activador e inhibidor, respectivamente. En la reacción  $f_2(u_1, u_2)$ , el término  $k_4u_1^2$  activa el crecimiento de  $u_2$ , mientras que en el término  $\frac{k_3u_1^2}{u_2}$ , la sustancia  $u_2$  inhibe la producción autocatalítica de la sustancia  $u_1$ . Los términos  $-k_2u_1$  y  $-k_5u_2$  representan la degradación de las sustancias  $u_1$  y  $u_2$  en las reacciones  $f_1(u_1, u_2)$  y  $f_2(u_1, u_2)$ , respectivamente.

## 2.4. Reacción de Thomas

En 1975, en el libro<sup>9</sup> Thomas propuso un mecanismo de cinética química basado en la reacción que involucra oxígeno y ácido úrico en presencia de la enzima uricasa, donde el oxígeno y el ácido úrico actúan como sustratos. Denotando  $u_1$  al ácido úrico y  $u_2$  al oxígeno, la reacción de Thomas se expresa de la siguiente manera:

$$\begin{cases} \frac{du_1}{dt} = k_1 - k_2u_1 - R(u_1, u_2) := f_1(u_1, u_2), \\ \frac{du_2}{dt} = k_3 - k_4u_2 - R(u_1, u_2) := f_2(u_1, u_2), \\ R(u_1, u_2) = \frac{k_5u_1u_2}{k_6 + k_7u_1 + k_8u_1^2}. \end{cases} \quad (29)$$

En este modelo, los términos  $-k_2u_1$  y  $-k_4u_2$  representan la degradación de las sustancias en proporción a sus concentraciones,  $u_1$  y  $u_2$  respectivamente. Los términos  $k_1$  y  $k_3$  indican la producción constante de las sustancias  $u_1$  y  $u_2$  respectivamente. Además, el término  $R(u_1, u_2)$  describe el fenómeno de inhibición de sustrato que afecta a ambas sustancias  $u_1$  y  $u_2$ .

## 2.5. Adimensionalización

A continuación, se presentará un cambio de variable para adimensionalizar el sistema (25) con las cinéticas de reacción (27),(28) y (29). El proceso de adimensionalización ofrece ventajas computacionales y facilita la introducción de términos complejos de cinética de reacción sin dimensiones, como se verá más adelante. Además, permite incorporar nuevas interpretaciones tanto en el ámbito físico como biológico.

**2.5.1. Reacción de Schnakenberg.** Para adimensionalizar la reacción de Schnakenberg considérese el cambio de variables, sugerido por Murray en <sup>5</sup>. Este cambio de variables permite que el nuevo sistema adimensional tenga un número menor de parámetros que el sistema original, como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} u &= u_1 \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{1/2}, & v &= u_2 \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{1/2}, & \bar{t} &= \frac{D_{u_1} t}{L_c^2}, & \bar{\mathbf{x}} &= \frac{\mathbf{x}}{L_c} \\ d &= \frac{D_{u_2}}{D_{u_1}}, & a &= \frac{k_{-1} C}{k_1} \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{1/2}, & b &= \frac{k_2 D}{k_1} \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{1/2}, & \gamma &= \frac{L_c^2 k_1}{D_{u_1}}, \end{aligned} \quad (30)$$

donde  $L_c$  representa la longitud característica, una constante que caracteriza la escala del sistema físico de interés. En otras palabras,  $L_c$  es un valor que contiene información acerca de la geometría y las dimensiones del sistema. Para obtener el sistema adimensional, realizamos los cambios de variables correspondientes, que se presentan en (30), y aplicamos la regla de la cadena, como se muestra a continuación. Para el caso de la sustancia  $u_1$  en el sistema (25), utilizando el modelo de reacción de Schnakenberg, el proceso se desarrolla de la siguiente manera:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_{u_1} \Delta u_1 + (k_{-1} C - k_1 u_1 + k_3 u_1^2 u_2), \quad (31)$$

se obtiene que

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \frac{\partial u \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{-1/2}}{\partial \bar{t}} \frac{d\bar{t}}{dt} = \frac{\partial u \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{-1/2}}{\partial \bar{t}} \left( \frac{D_{u_1}}{L_c^2} \right). \quad (32)$$

Por otro lado, al considerar el cambio de concentración de la sustancia  $u_1$  en relación a la posición, debe tenerse en cuenta cómo se presenta la longitud característica, esto es, si  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ . Entonces el término  $\Delta u_1$  se transforma en

$$\begin{aligned} \Delta u_1 &= \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_N^2} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial x_N} \left( \frac{\partial u_1}{\partial x_N} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \bar{x}_1} \left( \frac{\partial u \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{-1/2}}{\partial \bar{x}_1} \left( \frac{d\bar{x}_1}{dx_1} \right) \right) \left( \frac{d\bar{x}_1}{dx_1} \right) + \dots + \frac{\partial}{\partial \bar{x}_N} \left( \frac{\partial u \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{-1/2}}{\partial \bar{x}_N} \left( \frac{d\bar{x}_N}{dx_N} \right) \right) \left( \frac{d\bar{x}_N}{dx_N} \right) \\ &= \left( \frac{\partial^2 u}{\partial \bar{x}_1^2} \frac{1}{L_c^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial \bar{x}_N^2} \frac{1}{L_c^2} \right) \left( \frac{k_3}{k_1} \right)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (33)$$

en donde se puede observar que el término  $L_c$  es una representación de la dimen-

sión para cada variable en el espacio. De manera similar, se desarrolla una expresión adimensional para la sustancia  $u_2$ , obteniendo el siguiente sistema adimensional:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + \gamma(a - u + u^2v) = \Delta u + \gamma f(u, v), \\ v_t = d\Delta v + \gamma(b - u^2v) = d\Delta v + \gamma g(u, v), \end{cases} \quad (34)$$

donde las variables independientes  $\bar{t}$  y  $\bar{\mathbf{x}}$  se sustituyen por  $t$  y  $\mathbf{x}$  respectivamente, para simplificar la notación. Las cinéticas de reacción para las sustancias  $u$  y  $v$  dadas como  $f(u, v) = a - u + u^2v$  y  $g(u, v) = b - u^2v$ , denotan un comportamiento como se muestra a continuación:

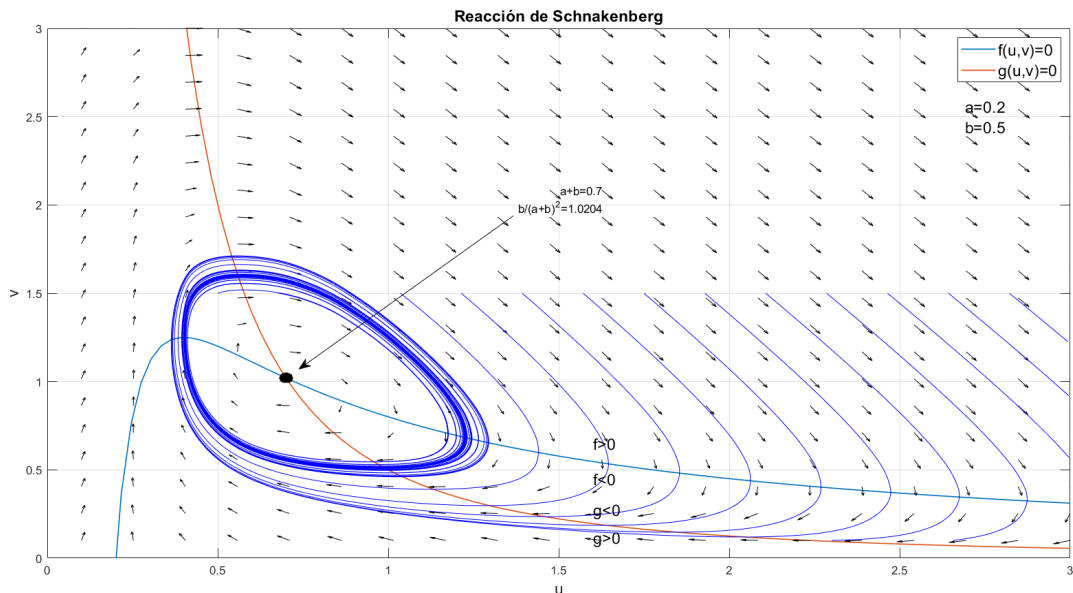


Figura 3. Reacción de Schnakenberg para parámetros  $a = 0.2$  y  $b = 0.5$ .

A modo de ejemplo, en la Figura 3, se describe el comportamiento del modelo de Schnakenberg para los parámetros  $a = 0.2$  y  $b = 0.5$  cuando se imponen las condiciones  $f(u, v) = 0$  y  $g(u, v) = 0$ , es decir, cuando no hay reacciones químicas. Es importante comprender la estabilidad de un sistema, ya que esto permite determinar si posee puntos de convergencia. Una forma de analizar este tipo de comportamientos es a través de campos vectoriales, los cuales nos ayudan a identificar soluciones, así como puntos de convergencia o divergencia en el sistema. Además, esta técnica nos facilita la generación de condiciones iniciales cercanas a un punto de equilibrio, lo que resulta útil para determinar si las soluciones asociadas a la aproximación lineal del problema

(34) convergen o no. En las secciones siguientes se explicará con más detalle cómo se utiliza esta información.

Es importante destacar que el punto de equilibrio presentado en la Figura 3 es convergente, pero también muestra un comportamiento de ciclo límite, lo que se denomina ciclo límite semi estable. Además, se observa que para altas concentraciones de  $u$ , los valores de  $v$  que satisfacen  $f(u, v) = 0$  y  $g(u, v) = 0$  tienden a cero, mientras que para concentraciones muy bajas de  $u$ , los valores de  $v$  que satisfacen  $f(u, v) = 0$  y  $g(u, v) = 0$  tienden hacia menos infinito y más infinito, respectivamente.

**2.5.2. Reacción de Gierer-Meinhardt** Para adimensionalizar la reacción de Gierer-Meinhardt considérese el siguiente cambio de variables, dado por:

$$\begin{aligned} u &= \left(\frac{k_4}{k_3}\right) u_1, & v &= \left(\frac{k_5 k_4}{k_3^2}\right) u_2, & \bar{t} &= \frac{D_{u_1} t}{L_c^2}, & \bar{\mathbf{x}} &= \frac{\mathbf{x}}{L_c} \\ a &= \frac{k_1 k_4}{k_3 k_5}, & b &= \frac{k_2}{k_5}, & \gamma &= \frac{k_5 L_c^2}{D_{u_1}}, & d &= \frac{D_{u_2}}{D_{u_1}}, \end{aligned} \quad (35)$$

donde  $L_c$  es la longitud característica y se cumple que  $k_i > 0$  para  $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ . De manera similar a lo que se realizó en la sección 2.5.1, el modelo adimensional de reacción-difusión para la reacción de Gierer-Meinhardt se expresa como sigue:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + \gamma(a - bu + \frac{u^2}{v}) = \Delta u + \gamma f(u, v), \\ v_t = d\Delta v + \gamma(u^2 - v) = d\Delta v + \gamma g(u, v). \end{cases} \quad (36)$$

La reacción de Gierer-Meinhardt denota un comportamiento como se presenta a continuación:

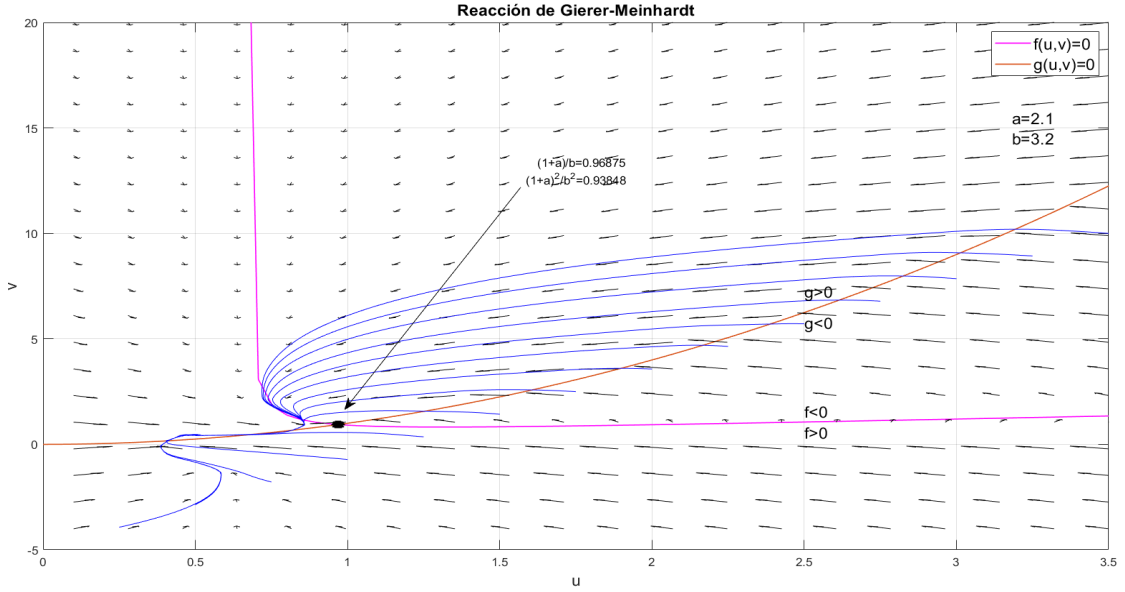


Figura 4. Reacción de Gierer-Meinhardt para parámetros  $a = 2.1$  y  $b = 3.2$ .

A modo de ejemplo, en la Figura 4, se describe el comportamiento del modelo de Gierer-Meinhardt para los parámetros  $a = 2.1$  y  $b = 3.2$  bajo las condiciones  $f(u, v) = 0$  y  $g(u, v) = 0$ . Se puede observar que debido a los valores seleccionados para  $a$  y  $b$ , el sistema presenta convergencia, aunque esto ocurre con ciertas restricciones en los valores de difusión, las cuales se discutirán en próximas secciones.

**2.5.3. Reacción de Thomas** Para adimensionalizar la reacción Thomas se escoge el siguiente cambio de variables, dado por:

$$\begin{aligned} u &= \left(\frac{k_7}{k_6}\right) u_1, & v &= \left(\frac{k_7}{k_6}\right) u_2, & \bar{t} &= \frac{D_{u_1} t}{L_c^2}, & \bar{\mathbf{x}} &= \frac{\mathbf{x}}{L_c}, & K &= \frac{k_8 k_6}{k_7^2}, \\ a &= \frac{k_1 k_7}{k_2 k_6}, & b &= \frac{k_3 k_7}{k_4 k_6}, & \rho &= \frac{k_5}{k_2 k_7}, & \alpha &= \frac{k_4}{k_2}, & \gamma &= \frac{k_2 L_c^2}{D_{u_1}}, & d &= \frac{D_{u_2}}{D_{u_1}}, \end{aligned} \quad (37)$$

obteniendo el modelo adimensional para la reacción de Thomas dado por:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + \gamma(a - u - h(u, v)) = \Delta u + \gamma f(u, v), \\ v_t = d\Delta v + \gamma(\alpha(b - v) - h(u, v)) = d\Delta v + \gamma g(u, v), \\ h(u, v) = \frac{\rho uv}{1 + u + Ku^2}. \end{cases} \quad (38)$$

El término  $h(u, v)$  en la ecuación representa el fenómeno de inhibición que ocurre para ciertas concentraciones de las sustancias  $u$  y  $v$ . Para comprender mejor su comporta-

miento, se puede analizar manteniendo constante una de las sustancias mientras se varía la otra. Por ejemplo, si se fija el parámetro  $K$  (que mide la severidad de la inhibición y cuya inversa de la raíz cuadrada representa el máximo de  $h(u, v)$  en función de  $u$ ) y se mantiene la concentración de  $v$  en un valor específico, como  $v = 3$ , entonces el término  $h(u, v)$  se comporta como una recta para concentraciones pequeñas de  $u$ . Por otro lado, para concentraciones altas de  $u$ , el término  $h(u, v)$  decrece, actuando como un inhibidor.

De manera similar, si se mantiene constante la concentración de  $u$ , por ejemplo,  $u = 3$ , el término  $h(u, v)$  se comporta como una recta en función de la concentración de  $v$ . Todos estos comportamientos se pueden representar gráficamente de la siguiente manera:

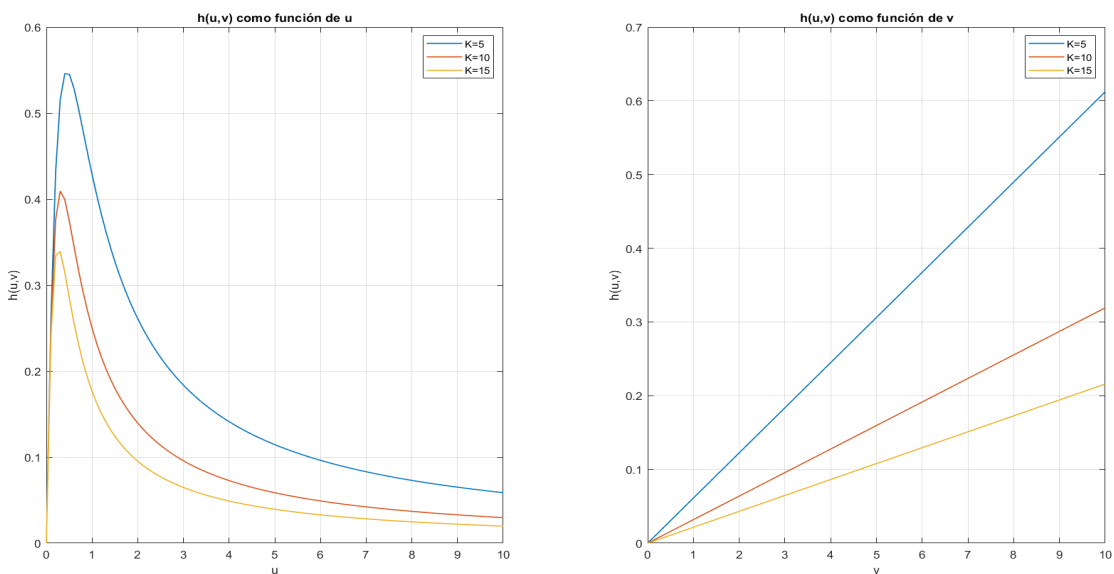


Figura 5. Secciones de  $h(u, v)$ .

En la Figura 5, se representa el comportamiento del término  $h(u, v)$  y sus diferentes máximos, que están dados por  $\frac{1}{\sqrt{K}}$  para valores de  $K$  de 5, 10 y 15. A continuación, se describe el comportamiento del punto de equilibrio para la reacción de Thomas:

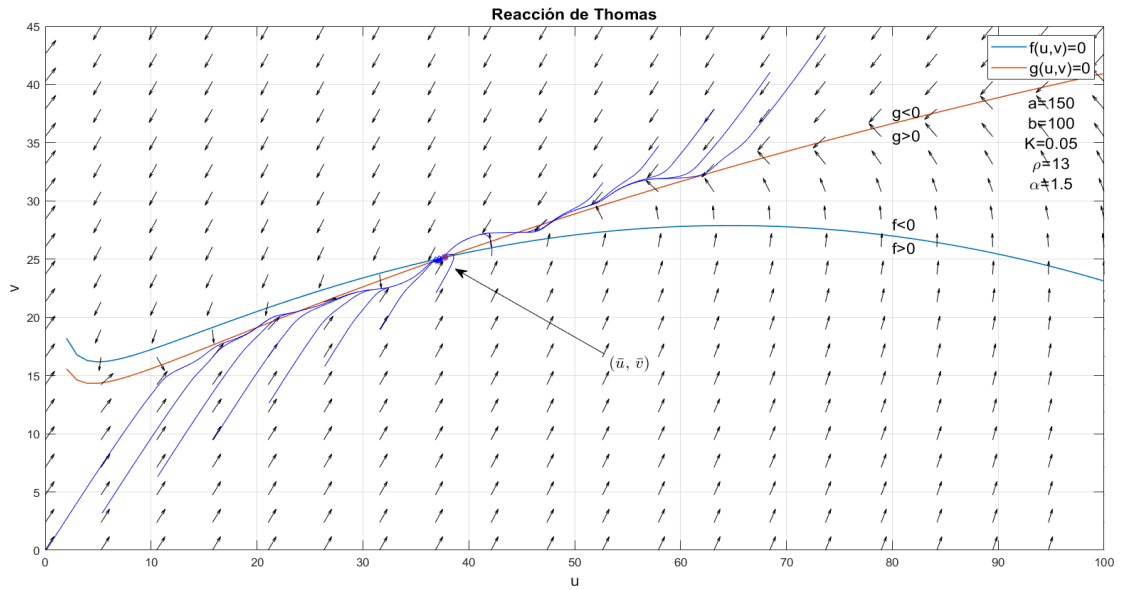


Figura 6. Reacción de Thomas.

En la Figura 6, se presenta el punto de equilibrio para la reacción de Thomas, junto con su respectivo campo vectorial y trayectorias. Los parámetros de esta representación se definen como  $a = 150$ ,  $b = 100$ ,  $K = 0.05$ ,  $\rho = 13$  y  $\alpha = 1.5$ . El punto de equilibrio  $(\bar{u}, \bar{v})$  para la reacción de Thomas se define como:

$$\begin{cases} K\alpha\bar{u}^3 + (\alpha + \rho - Ka\alpha)\bar{u}^2 + (\alpha + \alpha b\rho - a\rho - a\alpha)\bar{u} - a\alpha = 0, \\ \bar{v} = b - \frac{a-\bar{u}}{\alpha}, \end{cases} \quad (39)$$

por lo tanto, dependiendo de los valores de los parámetros  $a$ ,  $b$ ,  $K$ ,  $\rho$ , y  $\alpha$ , se pueden obtener uno o tres puntos de equilibrio. En el caso de la Figura 6, se observa que solo se ha obtenido un punto de equilibrio para la reacción de Thomas.

## 2.6. Inestabilidad de Turing

La inestabilidad de Turing, también conocida como inestabilidad debido a la difusión, se refiere al hecho de que, en ausencia del fenómeno de difusión, el punto de equilibrio del sistema es estable ante pequeñas perturbaciones, pero este mismo punto de equilibrio se vuelve inestable en presencia de la difusión. La inestabilidad de Turing se origina cuando la parte difusiva del sistema está presente; en otras palabras, es el mecanismo que permite la aparición y evolución de patrones. En primer lugar, se

analizarán las condiciones clave que aseguran la estabilidad en ausencia de difusión y las condiciones clave que generan inestabilidad en presencia de la difusión, a través de un análisis lineal.

**2.6.1. Estabilidad sin difusión** Considere el sistema de reacción-difusión en el que participan dos sustancias químicas

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{array}{l} \left( \begin{array}{l} u_t \\ v_t \end{array} \right) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta v \end{pmatrix} + \gamma \begin{pmatrix} f(u, v) \\ g(u, v) \end{pmatrix}, \\ \left( \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \\ \frac{\partial v}{\partial \mathbf{n}} \end{array} \right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \left( \begin{array}{l} u(\mathbf{x}, 0) \\ v(\mathbf{x}, 0) \end{array} \right) = \begin{pmatrix} u_0(\mathbf{x}) \\ v_0(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, \infty), \\ (\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{x} \in \Omega. \end{array} \quad (40)$$

Si se desprecia el término difusivo del sistema (40), es decir, si se considera que el sistema está bien mezclado, se puede obtener una aproximación más simple. En este escenario, se obtiene lo siguiente:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t = \gamma f(u, v), \\ v_t = \gamma g(u, v). \end{array} \right. \quad (41)$$

Los puntos de equilibrio de (41) corresponden a los puntos  $(\bar{u}, \bar{v})$  tales que

$$f(\bar{u}, \bar{v}) = 0, \quad g(\bar{u}, \bar{v}) = 0. \quad (42)$$

Al linealizar la cinética de reacción en torno a un punto de equilibrio  $(\bar{u}, \bar{v})$  y asumiendo que  $f$  y  $g$  son funciones de clase  $C^1$ , como resultado de la expansión de Taylor de  $f$  y  $g$  alrededor de  $(\bar{u}, \bar{v})$ , se obtiene que

$$\begin{pmatrix} f(u, v) \\ g(u, v) \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} f(\bar{u}, \bar{v}) \\ g(\bar{u}, \bar{v}) \end{pmatrix} + \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \begin{pmatrix} u - \bar{u} \\ v - \bar{v} \end{pmatrix}, \quad (43)$$

donde  $\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v})$  es la jacobiana asociada a las funciones de reacción, esto es,

$$\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) = \begin{pmatrix} f_u(\bar{u}, \bar{v}) & f_v(\bar{u}, \bar{v}) \\ g_u(\bar{u}, \bar{v}) & g_v(\bar{u}, \bar{v}) \end{pmatrix}. \quad (44)$$

Usando la condición de estabilidad (42), el sistema (41) se aproxima localmente por

$$\begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} = \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \begin{pmatrix} u - \bar{u} \\ v - \bar{v} \end{pmatrix}. \quad (45)$$

El sistema (45) se puede expresar en forma vectorial realizando la sustitución  $\mathbf{w} = (u - \bar{u}, v - \bar{v})^T$ , para obtener

$$\mathbf{w}_t = \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \mathbf{w}. \quad (46)$$

El sistema (46) corresponde a un problema lineal de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias con coeficientes constantes. Por lo tanto, sus soluciones tienen la forma

$$\mathbf{w} = e^{\lambda t} \mathbf{K}, \quad (47)$$

la cual transforma el problema (46) en un problema de valores propios, dado por

$$(\gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) - \lambda I) \mathbf{K} = 0, \quad (48)$$

siendo  $\lambda$  el valor propio,  $\mathbf{K}$  el autovector y  $I$  la matriz identidad. La existencia de soluciones no triviales requiere que el determinante de la matriz  $(\gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) - \lambda I)$  sea igual a cero. Una vez conocido el vector de valores propios, se regresa a (47) con el fin de analizar el comportamiento de los puntos de equilibrio y determinar si estos corresponden a nodos, focos o puntos de silla. En este punto, es relevante recordar el Teorema de Liapunov, presentado en el Capítulo 1, el cual establece que los valores propios de la matriz  $\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v})$  asociados al punto de equilibrio deben tener parte real negativa para que dicho punto sea estable. Por lo tanto, para que el punto de equilibrio  $(\bar{u}, \bar{v})$  sea linealmente estable, se requiere que la parte real de cada valor propio sea menor que cero. Esto implica que, cuando  $t \rightarrow \infty$ , la solución  $\mathbf{w}$  converge a cero.

Continuando, primero se calcula el polinomio característico de (48), el cual está dado por

$$\begin{aligned}
\det(\gamma\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) - \lambda I) &= \det \begin{pmatrix} \gamma f_u - \lambda & \gamma f_v \\ \gamma g_u & \gamma g_v - \lambda \end{pmatrix} \\
&= \lambda^2 - \lambda\gamma(f_u + g_v) + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) \\
&= 0,
\end{aligned} \tag{49}$$

cuyas soluciones se expresan como

$$\lambda = \frac{\gamma}{2} \left[ (f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)} \right]. \tag{50}$$

Para que se cumpla la condición  $\text{Re } \lambda < 0$ , es necesario que  $f_u + g_v < 0$ , lo cual sería suficiente si se tratara únicamente de soluciones complejas. Sin embargo, cuando se trata de soluciones reales, además de garantizar que  $f_u + g_v < 0$ , se debe cumplir lo siguiente:

$$\begin{aligned}
&(f_u + g_v) \pm \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)} < 0 \\
&\Leftrightarrow -(f_u + g_v) > \sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)} > (f_u + g_v) \\
&\Leftrightarrow 0 < |\sqrt{(f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u)}| < -(f_u + g_v) \\
&\Leftrightarrow (f_u + g_v)^2 - 4(f_u g_v - f_v g_u) < (f_u + g_v)^2 \\
&\Leftrightarrow -4(f_u g_v - f_v g_u) < 0 \\
&\Leftrightarrow 0 < (f_u g_v - f_v g_u),
\end{aligned} \tag{51}$$

Luego, las condiciones para garantizar la estabilidad ante perturbaciones del punto de equilibrio en ausencia del fenómeno de difusión son las siguientes:

$$\begin{cases} \text{tr}(\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v})) = f_u + g_v < 0, \\ \det(\mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v})) = f_u g_v - f_v g_u > 0. \end{cases} \tag{52}$$

Observe que no hay condición impuesta sobre  $\gamma$  debido a que es una cantidad siempre positiva y no afecta el signo de  $\lambda$ .

**2.6.2. Inestabilidad en presencia de difusión.** El objetivo de esta sección es analizar cómo la presencia de la difusión en el sistema linealizado puede generar inestabilidades en pequeñas perturbaciones espaciales. El enfoque se centra en determinar las condiciones necesarias y suficientes para que la inclusión de la difusión provoque la inestabilidad del punto de equilibrio del sistema, lo que a su vez determina los patrones espacio-temporales que evolucionarán en el tiempo. Para alcanzar este objetivo, se considera el sistema total (40) y se procede a linealizarlo alrededor del punto de equilibrio  $\mathbf{w} = 0$ , utilizando el mismo cambio de variable  $\mathbf{w}$ . De esta manera, se obtiene una aproximación del sistema en las cercanías del punto de equilibrio, que viene dada por

$$\mathbf{w}_t = \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \mathbf{w} + \mathbf{D} \Delta \mathbf{w}, \quad (53)$$

teniendo en cuenta que  $\mathbf{D} = \frac{1}{D_{u_1}} \mathbb{D}$ , donde  $\mathbb{D} = \begin{pmatrix} D_{u_1} & 0 \\ 0 & D_{u_2} \end{pmatrix}$ .

Para resolver este problema recurrimos, en primer lugar, a resolver la ecuación de Helmholtz con condiciones de Neumann homogéneas, es decir,

$$(\Delta + k^2)\phi = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (54)$$

donde  $\phi = \phi(\mathbf{x})$  depende exclusivamente de la posición  $\mathbf{x}$  y  $k$  es una constante que corresponde a los autovalores del operador laplaciano. La solución de este problema depende de la geometría del dominio, con lo cual, en dominios acotados,  $k$  asume valores discretos. Las soluciones de éste problema son de naturaleza oscilatoria, razón por la cual,  $k$  es usualmente referido como *número de onda*. Una vez resuelto el problema (54), se propone una solución para (53) en la siguiente forma:

$$\mathbf{w}(\mathbf{x}, t) = \sum_k c_k e^{\lambda_k t} \phi_k(\mathbf{x}), \quad (55)$$

donde  $\phi_k(\mathbf{x})$  representa la solución del problema (54),  $c_k$  son algunas constantes que se determinarán a *posteriori*, a partir de las condiciones iniciales impuestas sobre  $\phi_k(\mathbf{x})$  y  $\lambda_k$  es un valor propio que depende del número de onda  $k$ , como se explicara

mas adelante. Si se implementa la solución (55) en el problema (53) y se utiliza (54), se obtiene para cada  $k$ , lo siguiente

$$\begin{aligned}
(\mathbf{w}_k)_t &= \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \mathbf{w}_k + \mathbf{D} \Delta \mathbf{w}_k \\
\Leftrightarrow \lambda_k e^{\lambda_k t} \phi_k(\mathbf{x}) &= \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) e^{\lambda_k t} \phi_k(\mathbf{x}) + \mathbf{D} e^{\lambda_k t} \Delta \phi_k(\mathbf{x}) \\
\Leftrightarrow 0 &= e^{\lambda_k t} \{ \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}) - \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \phi_k(\mathbf{x}) - \mathbf{D} \Delta \phi_k(\mathbf{x}) \} \\
\Leftrightarrow 0 &= e^{\lambda_k t} \{ \lambda_k \phi_k(\mathbf{x}) - \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) \phi_k(\mathbf{x}) + k^2 \mathbf{D} \phi_k(\mathbf{x}) \}.
\end{aligned} \tag{56}$$

Se obtiene la siguiente condición para cada  $k$

$$(\lambda_k \mathbf{I} - \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) + k^2 \mathbf{D}) \phi_k = 0, \tag{57}$$

con lo cual, el problema (53) se convierte en un problema de valores y vectores propios. Para encontrar soluciones no triviales, se deben determinar los valores propios  $\lambda_k$  que satisfagan la condición

$$\det(\lambda_k \mathbf{I} - \gamma \mathbb{J}(\bar{u}, \bar{v}) + k^2 \mathbf{D}) = \det \begin{pmatrix} \lambda_k - \gamma f_u + k^2 & -\gamma f_v \\ -\gamma g_u & \lambda_k - \gamma g_v + dk^2 \end{pmatrix} = 0. \tag{58}$$

La ecuación característica asociada a (58) está dada por

$$\lambda_k^2 + \lambda_k(k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)) + \text{Aux}(k^2), \tag{59}$$

donde,  $\text{Aux}(k^2) = dk^4 - k^2\gamma(df_u + g_v) + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)$ .

Note que si  $k = 0$  la ecuación (59) se transforma en (49). Entonces, para lograr la estabilidad en ausencia de difusión,  $k = 0$ , se establecen condiciones en las que  $\text{Re } \lambda < 0$  para que el sistema sea estable ante pequeñas perturbaciones. Sin embargo, cuando se considera la difusión,  $k \neq 0$ , para que se genere inestabilidad en el sistema y, por lo tanto, surjan patrones, es necesario establecer  $\text{Re } \lambda_k > 0$  para algún valor de  $k$ . Por lo tanto, se procede a calcular las soluciones para los valores propios  $\lambda_k$ , que están dadas por

$$\lambda_k = \frac{1}{2} \left\{ - [k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)] \pm \sqrt{[k^2(1+d) - \gamma(f_u + g_v)]^2 - 4 \text{Aux}(k^2)} \right\}. \tag{60}$$

Se debe recordar, según (52), que la condición que debe cumplirse es  $f_u + g_v < 0$ . Entonces

$$k^2(1 + d) - \gamma(f_u + g_v) > 0, \quad (61)$$

por lo tanto, para que  $\text{Re } \lambda_k > 0$  se debe cumplir que

$$\text{Aux}(k^2) < 0, \quad (62)$$

y además solo se toma la raíz positiva en (60); de otra forma  $\text{Re } \lambda_k < 0$ . Ahora, se observa una consecuencia importante al asumir que  $\text{Aux}(k^2) < 0$ :

$$\begin{aligned} \text{Aux}(k^2) < 0 \\ \Rightarrow dk^4 - k^2\gamma(f_u d + g_v) + \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) < 0 \\ \Rightarrow dk^4 - k^2\gamma(f_u d + g_v) < -\gamma^2(f_u g_v - f_v g_u) < 0 \\ \Rightarrow dk^4 - k^2\gamma(f_u d + g_v) < 0 \\ \Rightarrow 0 < dk^2 < \gamma(f_u d + g_v) \\ \Rightarrow 0 < f_u d + g_v, \end{aligned} \quad (63)$$

por lo tanto, si se cumplen las condiciones  $0 < f_u d + g_v$  y  $f_u + g_v < 0$ , como se presenta en (52), esto implica que  $d$  no es igual a 1. Además, es necesario que  $d > 1$ ; es decir, que el inhibidor se difunda más rápidamente en el medio que el activador. En caso contrario, el inhibidor suprimirá completamente la presencia del activador en la región, lo que llevará al final de la reacción. Esto, a su vez, implica que no se alcanzará un estado heterogéneo estable, como se explicó en la Sección 1.4.

Es importante destacar que si  $\text{Re } \lambda > 0$ , entonces  $f_u d + g_v > 0$ . Sin embargo, es importante tener en cuenta que  $f_u d + g_v > 0$  no es suficiente para garantizar que  $\text{Re } \lambda > 0$ . Esto se debe a que la función  $\text{Aux}(k^2)$  tiene la forma  $\text{Aux}(k^2) = a_1 k^4 + a_2 k^2 + a_3$ , donde  $a_1 = d$ ,  $a_2 = -\gamma(f_u d + g_v)$ , y  $a_3 = \gamma^2(f_u g_v - f_v g_u)$ . Por lo tanto, si se eligen diferentes coeficientes  $a_1$ ,  $a_2$ , y  $a_3$  de manera que  $a_1 > 0$ ,  $a_2 < 0$ , y  $a_3 > 0$ , no se garantiza que la función  $\text{Aux}(k^2)$  tome valores negativos, como se muestra a continuación

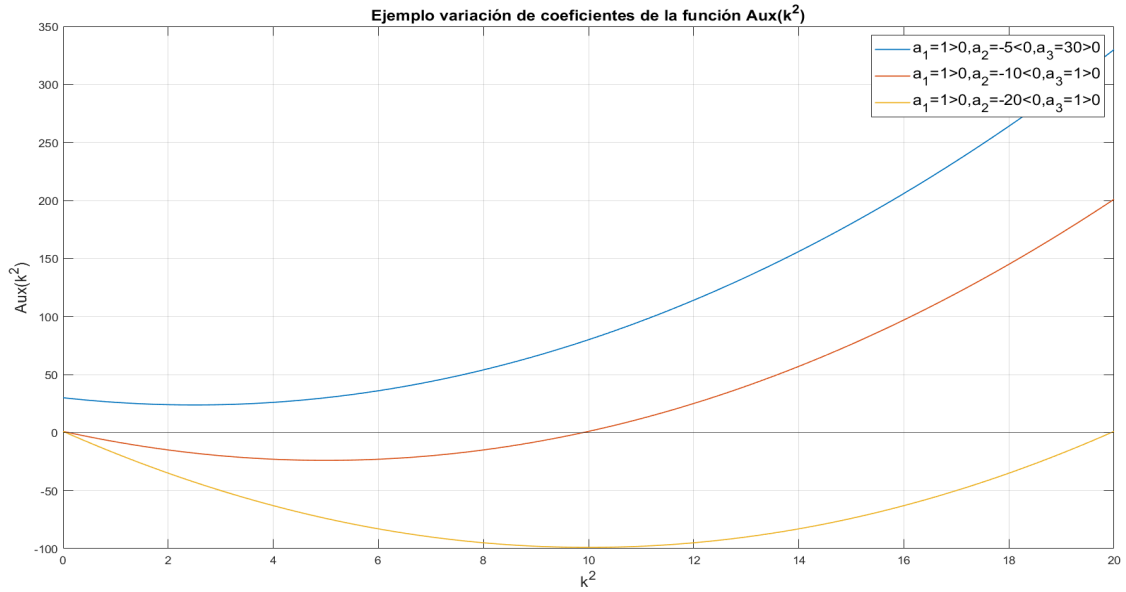


Figura 7. Variación de parámetros  $\gamma$  y  $d$ .

Para garantizar que la función  $Aux(k^2)$  adquiera valores negativos para algún número de onda  $k$ , se debe exigir que su valor mínimo sea estrictamente inferior a cero, o, de manera equivalente, que presente raíces reales distintas, es decir, que las raíces sean diferentes entre sí, es decir,

$$(f_u d + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0. \quad (64)$$

En conclusión, las condiciones para la generación de patrones de dos sustancias involucradas en el sistema son

$$\begin{cases} f_u + g_v < 0; \\ f_u g_v - f_v g_u > 0; \\ f_u d + g_v > 0; \\ (f_u d + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0. \end{cases} \quad (65)$$

Basándose en las condiciones propuestas en (65), es posible que los signos de la matriz jacobiana presenten las siguientes combinaciones:

$$\overbrace{\begin{pmatrix} + & + \\ - & - \end{pmatrix}}^{d>1}, \quad \overbrace{\begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix}}^{d>1}. \quad (66)$$

(a)                      (b)

Esto se debe a que la primera condición en (65) implica que los signos de  $f_u$  y  $g_v$  deben ser ambos negativos o tener signos diferentes. Sin embargo, debido a que  $d > 1$  y junto con la tercera condición, se deduce que  $f_u > 0$  y  $g_v < 0$ . Además, es importante notar que la segunda condición implica que  $f_v$  y  $g_u$  deben tener signos opuestos.

## 2.7. Relación de dispersión

La relación de dispersión se refiere a la relación entre el valor propio  $\lambda_k$  y el número de onda  $k$ . Esta relación es de gran importancia, ya que a través de ella es posible determinar si se obtienen soluciones estables o inestables, además de permitir la identificación de parámetros críticos como la relación crítica entre el activador e inhibidor, denotada como  $d_c$ . Esta relación se puede analizar en términos de bifurcaciones, es decir, cuando se cumple la siguiente igualdad:

$$(f_u d_c + g_v)^2 = 4d_c(f_u g_v - f_v g_u). \quad (67)$$

A partir de este punto, surgen números de onda  $k$  que permiten satisfacer las condiciones de Turing. En el punto de bifurcación, es decir, cuando la función  $A_{UX}(k^2)$  alcanza su mínimo en cero, se satisface la igualdad (67). Esto indica que la parábola  $A_{UX}(k^2)$ , que abre hacia arriba, tiene solamente una raíz real, o dicho de otro modo, la función  $A_{UX}(k^2)$  no toma valores negativos. A partir de la ecuación (67), es posible obtener la expresión analítica de la relación crítica de difusión  $d_c$  entre el inhibidor y el activador, como se presenta a continuación:

$$\begin{aligned}
(f_u d_c + g_v)^2 &= 4d_c(f_u g_v - f_v g_u), \\
\Leftrightarrow f_u^2 d_c^2 + 2f_u g_v d_c + g_v^2 - 4f_u g_v d_c + 4f_v g_u d_c &= 0, \\
\Leftrightarrow f_u^2 d_c^2 + 2(2f_v g_u - f_u g_v)d_c + g_v^2 &= 0, \\
\Leftrightarrow d_c = \frac{1}{f_u^2} \left\{ -(2f_v g_u - f_u g_v) \pm \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2} \right\}.
\end{aligned} \tag{68}$$

Note que el valor de  $d_c$  es real; en efecto de (65) y (66) se tiene que

$$\begin{aligned}
f_u g_v - f_v g_u &= -(f_v g_u - f_u g_v), \\
&= -(2f_v g_u - f_u g_v - f_v g_u), \\
&> 0,
\end{aligned} \tag{69}$$

obteniendo

$$\begin{aligned}
2f_v g_u - f_u g_v &< f_v g_u, \\
&< f_u g_v, \\
&< 0,
\end{aligned} \tag{70}$$

lo que nos permite concluir que

$$(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2 > 0. \tag{71}$$

El valor de  $d_c$  debe seleccionarse de tal forma que satisfaga la condición  $d_c > 1$  y las condiciones de Turing establecidas en (65). Por lo tanto, se elige la raíz mayor  $d_c$  proporcionada en (68), ya que la raíz menor  $d_c$  no cumple con la tercera condición de Turing, que establece  $f_u d_c + g_v > 0$ . Para ver esto, suponga por contradicción que el menor valor de  $d_c$  cumple la tercera condición de Turing. En tal caso,

$$\begin{aligned}
d_c &> -g_v/f_u \\
\Rightarrow \frac{1}{f_u^2} \left\{ -(2f_v g_u - f_u g_v) - \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2} \right\} &> -\frac{g_v}{f_u} > 0 \\
\Rightarrow -(2f_v g_u - f_u g_v) - \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2} &> -f_u g_v > 0 \\
\Rightarrow 2(f_u g_v - f_v g_u) &> \sqrt{(2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2} > 0 \\
\Rightarrow 4(f_u g_v - f_v g_u)^2 &> (2f_v g_u - f_u g_v)^2 - (f_u g_v)^2 \\
\Rightarrow (f_u g_v)^2 &> f_u f_v g_u g_v > 0 \\
\Rightarrow f_u g_v &< f_v g_u,
\end{aligned} \tag{72}$$

llegando a una contradicción, dado que por (65) se debe tener que  $f_u g_v > f_v g_u$ . Para

el valor crítico  $d_c$ , el número de onda  $k_c$  se puede calcular como el valor  $k_c^2$  tal que hace que el mínimo de la función  $A_{UX}(k^2)$  sea cero, esto es,

$$k_c^2 = \frac{\gamma(f_u d_c + g_v)}{2d_c} = \gamma \sqrt{\frac{f_u g_v - f_v g_u}{d_c}}. \quad (73)$$

Noté que a partir de (73) se puede obtener la siguiente expresión para el parámetro  $\gamma$  dada por

$$\gamma \approx \frac{2dk^2}{df_u + g_c}, \quad (74)$$

esto es, si se está interesado en excitar un número de onda en específico, este puede aislarse al seleccionar el tamaño del intervalo que permite números de onda que generen inestabilidad. De esta manera, el intervalo estará centrado en el número de onda deseado. Por lo tanto, para un número de onda particular, es posible obtener un valor apropiado de  $\gamma$  donde  $d = d_c + \epsilon$ , con  $0 < \epsilon < 1$  según (74). Cabe recordar que para obtener la cuarta condición en (65), fue necesario que la función  $A_{UX}(k^2)$  tuviera un mínimo negativo, o, de manera equivalente, dos raíces reales, las cuales están dadas por:

$$\begin{cases} k_{\mathbf{a}}^2 = \frac{\gamma}{2d} \left\{ (f_u d + g_v) + \sqrt{(f_u d + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u)} \right\}, \\ k_{\mathbf{b}}^2 = \frac{\gamma}{2d} \left\{ (f_u d + g_v) - \sqrt{(f_u d + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u)} \right\}, \end{cases} \quad (75)$$

en donde se puede observar que cualquier número de onda  $k$  que cumple con (75), es decir, que se encuentra en el intervalo  $(k_{\mathbf{a}}, k_{\mathbf{b}})$  que permite números de onda que generen inestabilidad, garantiza que  $A_{UX}(k^2) < 0$ , consiguiendo así inestabilidad en presencia de difusión.

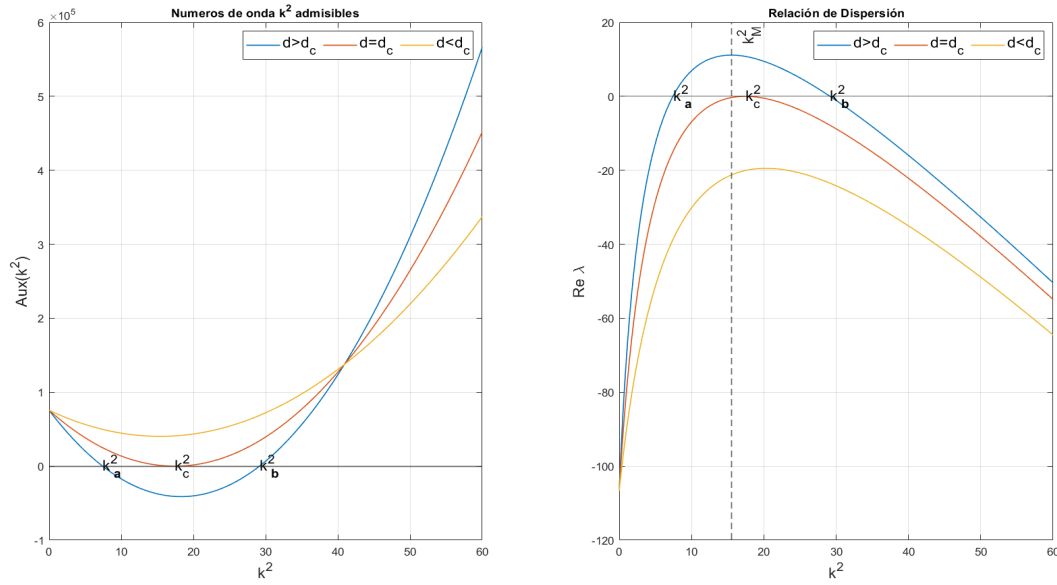


Figura 8. Relación de dispersión.

A partir de la Figura 8, se puede observar el punto de bifurcación cuando  $d = d_c$ . En este punto, corresponde a una única raíz  $k_c^2$  para la función  $Aux(k^2)$ . De igual manera, se muestra el comportamiento cuando  $d > d_c > 1$ , lo que implica que la función  $Aux(k^2)$  toma valores negativos. También se muestra el comportamiento para  $d < d_c$ , lo que significa que no existen números de onda  $k$  que generen inestabilidad. Además, se señala el valor máximo  $k_M^2$  de la relación de dispersión  $\lambda_k$ , el cual está determinado por

$$k_M^2 = \frac{\gamma}{d(d-1)} \left\{ \sqrt{-df_v g_u (d+1) + d(g_v - f_u)} \right\}. \quad (76)$$

El valor máximo  $k_M^2$  no necesariamente debe corresponder a un número de onda  $k^2$ . Es por esta razón que el número de onda  $k^2$  más cercano a  $k_M^2$  será el que haga que el término exponencial crezca más rápido y, por lo tanto, será el que prevalezca sobre los otros números de onda. Es importante señalar nuevamente que el número de onda  $k^2$  toma valores discretos debido a que el dominio estudiado está acotado.

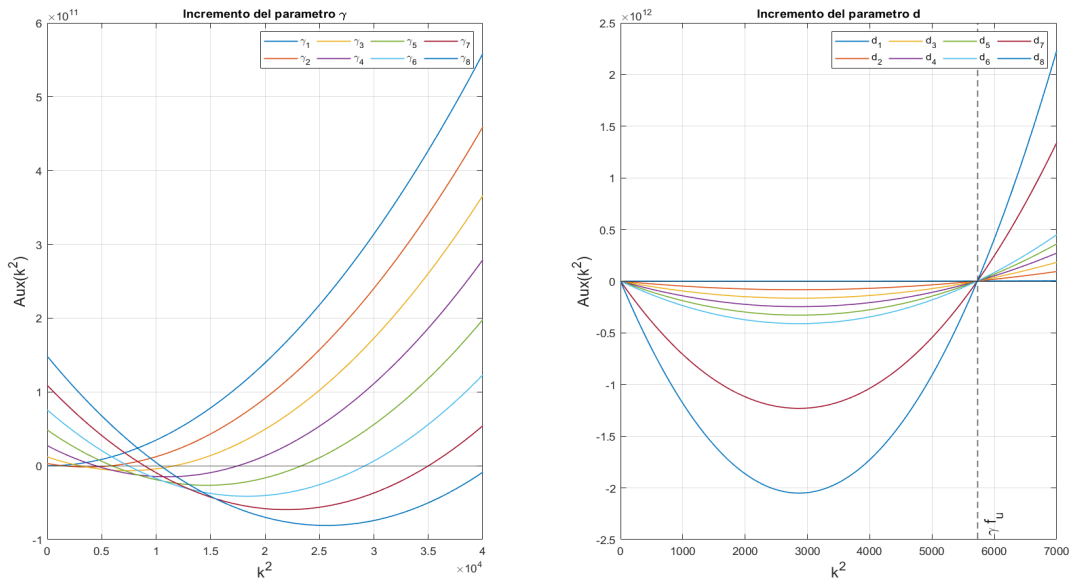


Figura 9. Variación de parámetros  $\gamma$  y  $d$ .

Una vez definida la cinética de reacción y su estado estable, la relación de dispersión queda exclusivamente en función de los parámetros  $d$  y  $\gamma$ , al igual que la parábola  $Aux(k^2)$ . Por lo tanto, dependiendo de estos parámetros, puede haber o no números de onda para los cuales la función  $Aux(k^2)$  adquiera valores negativos.

Por ejemplo, si se fija el parámetro de difusión cerca del valor crítico, es decir,  $d = d_c + \epsilon$  con  $\epsilon \rightarrow 0$ , y se varía el parámetro  $\gamma$ , se obtiene la Figura 9. En consecuencia, a pesar de que el parámetro de difusión esté cercano a su valor crítico, si se incrementa suficientemente el valor de  $\gamma$ , pueden existir números de onda para los cuales  $Aux(k^2)$  adopte valores negativos.

Por otro lado, si se mantiene  $\gamma$  constante y se varía  $d$  desde su valor crítico hasta un valor muy grande, como se muestra en la Figura 9, se obtienen las siguientes cotas para los números de onda

$$k_a^2 \rightarrow 0, \quad k_b^2 \rightarrow \gamma f_u, \quad \text{para } d \rightarrow \infty. \quad (77)$$

Por lo tanto, cuando se fija  $\gamma$  y se aumenta considerablemente el valor de  $d$ , se obtiene un intervalo de valores en el cual se garantiza que los números de onda que estén dentro de dicho intervalo provocarán inestabilidad en presencia de difusión.

## 2.8. Condiciones de Turing aplicadas al modelo de cinética de reacción de Schnakenberg

En esta sección, se llevará a cabo un análisis ilustrativo de las ecuaciones de reacción-difusión utilizando la cinética de reacción de Schnakenberg. El objetivo es establecer las condiciones necesarias para la generación de patrones, conforme se describe en (65). Para llevar a cabo este análisis, se considerará el sistema presentado en (34), el cual se define de la siguiente manera:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + \gamma \overbrace{(a - u + u^2 v)}^{f(u,v)} \\ v_t = d\Delta v + \gamma \overbrace{(b - u^2 v)}^{g(u,v)}. \end{cases} \quad (78)$$

El punto de equilibrio  $(\bar{u}, \bar{v})$  de la reacción ocurre cuando  $f(\bar{u}, \bar{v}) = 0$  y  $g(\bar{u}, \bar{v}) = 0$ . Esto conduce a la siguiente solución:

$$\bar{u} = a + b, \quad \bar{v} = \frac{b}{(a + b)^2}, \quad a > 0, \quad b > 0. \quad (79)$$

Al reemplazar estos valores en las derivadas  $f_u, f_v, g_u$  y  $g_v$ , se obtiene que

$$\begin{cases} f_u(\bar{u}, \bar{v}) = -1 + 2\bar{u}\bar{v} = \frac{b-a}{a+b}; \\ f_v(\bar{u}, \bar{v}) = \bar{u}^2 = (a + b)^2; \\ g_u(\bar{u}, \bar{v}) = -2\bar{u}\bar{v} = \frac{-2b}{a+b}; \\ g_v(\bar{u}, \bar{v}) = -\bar{u}^2 = -(a + b)^2. \end{cases} \quad (80)$$

Por lo tanto, las condiciones para la formación de patrones de Turing dadas en (65) son:

$$\begin{aligned} f_u + g_v < 0 &\Leftrightarrow b - a < (a + b)^3, \\ f_u g_v - f_v g_u > 0 &\Leftrightarrow (a + b)^2 > 0, \\ f_u d + g_v > 0 &\Leftrightarrow (b - a)d > (a + b)^3, \\ (f_u d + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0 &\Leftrightarrow ((b - a)d - (a + b)^3)^2 > 4d(a + b)^4, \end{aligned} \quad (81)$$

Note que a partir de (80) se puede concluir que  $b > a$ ; esto se debe a que  $f_u(\bar{u}, \bar{v}) > 0$  como se explicó anteriormente en (66), además de que  $a$  y  $b$  son parámetros positivos se obtiene que  $f_v(\bar{u}, \bar{v}) > 0$ ,  $g_u(\bar{u}, \bar{v}) < 0$  y  $g_v(\bar{u}, \bar{v}) < 0$ , es decir, se tiene la combinación (a) presentada en (66). Note que a partir de la Figura (3) se puede observar que

$$\frac{dv}{du}|_{g=0} < \frac{dv}{du}|_{f=0} < 0. \quad (82)$$

Usando la regla de la cadena para las curvas  $f = 0$  y  $g = 0$ , se obtiene que

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial v} \frac{dv}{du} = 0, \\ \frac{\partial g}{\partial u} + \frac{\partial g}{\partial v} \frac{dv}{du} = 0, \end{cases} \quad (83)$$

lo que confirma la segunda condición de (65) para el caso de la reacción de Schnakenberg, ya que a partir de (83) se obtiene

$$-\frac{g_u}{g_v} < -\frac{f_u}{f_v} < 0, \quad (84)$$

la cual satisface  $f_u g_v - f_v g_u > 0$ . El conjunto de puntos  $(a, b, d)$  es fundamental en la teoría de sistemas dinámicos, ya que estos puntos generan lo que se conoce como el espacio de Turing. A través de este espacio, se puede lograr una mejor comprensión sobre cómo los parámetros de reacción y difusión afectan la estabilidad e inestabilidad del sistema.

Como se observa en (81), la estabilidad del punto de equilibrio depende únicamente de los parámetros de reacción y de la relación entre los coeficientes de difusión. Por lo tanto, se puede enfocar en determinar si el punto de equilibrio es estable o inestable en ausencia de difusión, ya que para lograr inestabilidad en presencia de difusión, solo se necesita seleccionar un coeficiente  $d$  que cumpla con (81). Esto se ilustra a continuación:

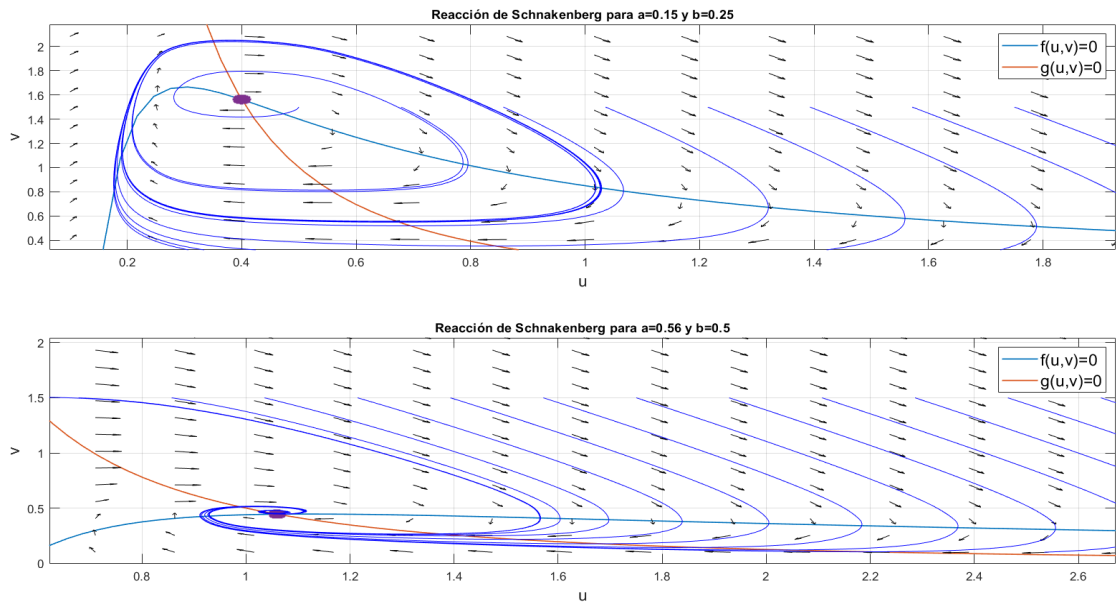


Figura 10. Variación de parámetros para la reacción de Schnakenberg.

A modo de ejemplo, en la Figura 10 se presenta el comportamiento del sistema de Schnakenberg para diferentes valores de los parámetros  $a$  y  $b$ . Específicamente, se muestran dos casos: uno en el que los parámetros no satisfacen la condición de estabilidad en ausencia de difusión ( $a = 0.15$  y  $b = 0.25$ ) y otro en el que los parámetros sí cumplen con la condición de estabilidad en ausencia de difusión ( $a = 0.56$  y  $b = 0.5$ ). En el caso de los parámetros que no cumplen la condición de estabilidad en ausencia de difusión, se puede observar que las soluciones divergen en la vecindad del punto de equilibrio, lo que indica la presencia de inestabilidades en el sistema. Por otro lado, en el caso de los parámetros que sí cumplen con la condición de estabilidad en ausencia de difusión, se observa una convergencia hacia el punto de equilibrio. Estos resultados ilustran la relevancia de la relación entre los parámetros del sistema y la influencia de la difusión en su estabilidad, así como cómo esta relación puede afectar la formación de patrones espaciales.

## 2.9. Número de onda para el modelo de Schnakenberg

Considere el sistema unidimensional implementando la reacción de Schnakenberg:

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + \gamma \overbrace{(a - u + u^2v)}^{f(u,v)}, \\ v_t = dv_{xx} + \gamma \overbrace{(b - u^2v)}^{g(u,v)}, \end{cases} \quad (85)$$

donde  $x \in (0, r)$ . Para encontrar la solución al problema (85) se plantea primero la solución al problema (54), dada por

$$\phi_n(x) = c_n \cos\left(\frac{\pi n}{r}x\right), \quad \phi_n'(0) = \phi_n'(r) = 0, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (86)$$

Se observa que el número de onda  $k$  se expresa como  $k = \frac{\pi n}{r}$  debido a la forma de  $\phi_n(x)$ . Como se mencionó previamente en la Sección 2.7, no todos los números de onda generan patrones; solo aquellos que cumplen con la condición  $A_{\text{UX}}(k^2) < 0$  o inducen inestabilidad en presencia de la difusión, es decir, aquellos valores de  $k^2$  tales que:

$$\begin{cases} k_{\mathbf{a}}^2 < k^2 = \left(\frac{\pi n}{r}\right)^2 < k_{\mathbf{b}}^2, \\ k_{\mathbf{a}}^2 = \frac{\gamma}{2d(a+b)} \left\{ (d(b-a) - (a+b)^3) - \sqrt{(d(b-a) - (a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4} \right\}, \\ k_{\mathbf{b}}^2 = \frac{\gamma}{2d(a+b)} \left\{ (d(b-a) - (a+b)^3) + \sqrt{(d(b-a) - (a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4} \right\}. \end{cases} \quad (87)$$

La ecuación (87) establece un rango de valores para el número de onda  $k$ , donde los límites  $k_{\mathbf{a}}^2$  y  $k_{\mathbf{b}}^2$  dependen de los parámetros  $a$ ,  $b$ ,  $d$  y  $\gamma$ . En otras palabras, para que se produzcan patrones en el sistema descrito por (34), es necesario que el número de onda esté dentro de este rango.

El parámetro  $\gamma$  juega un papel crucial en esta relación, ya que si es suficientemente pequeño, no existirá un número de onda  $k^2$  que cumpla con (87), lo que implicaría que el sistema sería estable en presencia de difusión.

Como se planteó en (30), el parámetro  $\gamma$  depende de la longitud característica  $L_c$ , la cual representa las dimensiones del sistema que se esté estudiando; por lo tanto, dada la cinética química entre dos sustancias, la existencia de números de onda que generen inestabilidad en presencia de difusión dependerá de las dimensiones del sistema. Considere los enteros  $n_1 \geq rk_{\mathbf{a}}/\pi$  y  $n_2 \leq rk_{\mathbf{b}}/\pi$  que admiten números de onda

$k$  generar soluciones inestables siempre que  $n_1$  y  $n_2$  sean los enteros más próximos a  $rk_{\mathbf{a}}/\pi$  y  $rk_{\mathbf{b}}/\pi$  respectivamente, y tales que definen la solución para  $t$  suficientemente grande como

$$\mathbf{w}(x, t) \approx \sum_{n_1}^{n_2} c_n e^{\lambda_k t} \cos\left(\frac{\pi n}{r} x\right). \quad (88)$$

La solución presentada en (88) es la solución que permite inestabilidad ante perturbaciones, es decir, para un tiempo suficientemente grande dicha solución no convergerá a cero, al contrario que las demás soluciones cuyos números de onda no cumplan la condición (87). Para el caso de dos dimensiones considere el siguiente problema

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + u_{yy} + \gamma \overbrace{(a - u + u^2 v)}^{f(u,v)} \\ v_t = d(v_{xx} + v_{yy}) + \gamma \overbrace{(b - u^2 v)}^{g(u,v)}, \end{cases} \quad (89)$$

donde  $x \in (0, r_1)$  y  $y \in (0, r_2)$ . Como se realizó para el caso de una dimensión, primero se resuelve el problema (54) para dos dimensiones, encontrando soluciones de la forma

$$\phi_{n,m}(x, y) = c_{n,m} \cos\left(\frac{n\pi x}{r_1}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{r_2}\right), \quad (90)$$

donde  $\phi'_{n,m}(x, 0) = \phi'_{n,m}(x, r_2) = \phi'_{n,m}(0, y) = \phi'_{n,m}(r_1, y) = 0$  para  $n, m \in \mathbb{Z}$  y el número de onda se representa como  $k^2 = \pi^2 \left( \frac{n^2}{r_1^2} + \frac{m^2}{r_2^2} \right)$ . Los números de onda  $k$  para el caso de dos dimensiones quedan acotados como

$$\begin{cases} k_{\mathbf{a}}^2 < k^2 = \pi^2 \left( \frac{n^2}{r_1^2} + \frac{m^2}{r_2^2} \right) < k_{\mathbf{b}}^2, \\ k_{\mathbf{a}}^2 = \frac{\gamma}{2d(a+b)} \left\{ (d(b-a) - (a+b)^3) - \sqrt{(d(b-a) - (a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4} \right\}, \\ k_{\mathbf{b}}^2 = \frac{\gamma}{2d(a+b)} \left\{ (d(b-a) - (a+b)^3) + \sqrt{(d(b-a) - (a+b)^3)^2 - 4d(a+b)^4} \right\}, \end{cases} \quad (91)$$

entonces la solución inestable está dada por

$$\mathbf{w}(x, y, t) \approx \sum_{n,m} c_{n,m} e^{\lambda_k t} \cos\left(\frac{n\pi x}{r_1}\right) \cos\left(\frac{m\pi y}{r_2}\right), \quad (92)$$

donde los  $n$  y  $m$  que satisfagan (91) permitirán inestabilidad en presencia de difusión. Cabe aclarar que aquí se presentan geometrías muy sencillas de analizar, pero si se cuenta con geometrías más complejas, este tipo de problemas se deben resolver numéricamente.

## 2.10. Inexistencia de patrones de Turing

El objetivo de esta sección es mostrar que, en el proceso de formación de patrones, los coeficientes de difusión, además de cumplir con la restricción  $d > d_c > 1$ , no deben ser excesivamente grandes, ya que en caso contrario, los patrones mencionados desaparecerían. Se comienza con el siguiente sistema de reacción-difusión:

$$\begin{cases} u_t = D_u u_{xx} + f(u, v), \\ v_t = D_v v_{xx} + g(u, v), \end{cases} \quad (93)$$

con condiciones de flujo Neumann homogéneas y condiciones iniciales dadas, esto es,

$$\begin{aligned} u_x(0, t) = u_x(1, t) = v_x(0, t) = v_x(1, t) &= 0, \\ u(x, 0) = u_0, \quad v(x, 0) &= v_0. \end{aligned} \quad (94)$$

El sistema descrito en (93) tiene una energía asociada  $E(t)$ , la cual se define como

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_0^1 (u_x^2 + v_x^2) dx. \quad (95)$$

Definida la función  $E(t)$ , estamos interesados en obtener algunas estimaciones uniformes. Derivando  $E(t)$  con respecto al tiempo, se obtiene

$$\frac{dE(t)}{dt} = \int_0^1 (u_x u_{xt} + v_x v_{xt}) dx. \quad (96)$$

De (93), (94) y usando integración por partes, se encuentra que

$$\begin{aligned}
\frac{dE(t)}{dt} &= \int_0^1 \{u_x [f_u u_x + f_v v_x + (D_u u_{xx})_x] + v_x [g_u u_x + g_v v_x + (D_v v_{xx})_x]\} dx \\
&= \int_0^1 (u_x (D_u u_{xx})_x + v_x (D_v v_{xx})_x) dx + \int_0^1 (f_u u_x^2 + g_v v_x^2 + (f_v + g_u) u_x v_x) dx \\
&= [u_x (D_u u_{xx}) + v_x (D_v v_{xx})]_0^1 - \int_0^1 (D_u u_{xx}^2 + D_v v_{xx}^2) dx \\
&\quad + \int_0^1 (f_u u_x^2 + g_v v_x^2 + (f_v + g_u) u_x v_x) dx \\
&= \int_0^1 (f_u u_x^2 + g_v v_x^2 + (f_v + g_u) u_x v_x) dx - \int_0^1 (D_u u_{xx}^2 + D_v v_{xx}^2) dx.
\end{aligned} \tag{97}$$

Denotemos por

$$\mathbf{d} = \min(D_u, D_v), \quad \mathbf{m} = \max_{u,v} (f_u(u, v)^2 + f_v(u, v)^2 + g_u(u, v)^2 + g_v(u, v)^2)^{1/2}. \tag{98}$$

Entonces, de (97), y usando la desigualdad  $ab \leq \frac{a^2}{2} + \frac{b^2}{2}$ , se obtiene que

$$\begin{aligned}
\frac{dE(t)}{dt} &\leq \int_0^1 (f_u u_x^2 + g_v v_x^2 + |(f_v + g_u) u_x v_x|) dx - \int_0^1 (D_u u_{xx}^2 + D_v v_{xx}^2) dx \\
&\leq \mathbf{m} \int_0^1 (u_x^2 + v_x^2) dx + \int_0^1 |(f_v + g_u)| \left( \frac{u_x^2}{2} + \frac{v_x^2}{2} \right) dx - \int_0^1 (D_u u_{xx}^2 + D_v v_{xx}^2) dx \\
&\leq 2\mathbf{m} \int_0^1 (u_x^2 + v_x^2) dx - \mathbf{d} \int_0^1 (u_{xx}^2 + v_{xx}^2) dx.
\end{aligned} \tag{99}$$

Teniendo en cuenta la desigualdad de Poincaré<sup>10</sup>, se tiene que

$$\int_0^1 u_{xx}^2 dx \geq \pi^2 \int_0^1 u_x^2 dx. \tag{100}$$

por lo tanto, de (99) y (100) se obtiene que

$$\frac{dE(t)}{dt} \leq (4\mathbf{m} - 2\mathbf{d}\pi^2)E(t). \tag{101}$$

---

<sup>10</sup> Galdi Giovanni. *An introduction to the mathematical theory of the Navier-Stokes equations: Steady-state problems*. Springer Science & Business Media, 2011.

Usando la desigualdad de Gronwall, de (101) se deduce que

$$E(t) \leq E(0)e^{(4\mathbf{m}-2\mathbf{d}\pi^2)t}. \quad (102)$$

Observando que si el coeficiente de difusión menor,  $\mathbf{d}$ , es suficientemente grande de manera que  $4\mathbf{m} - 2\mathbf{d}\pi^2 < 0$ , entonces la función  $E(t)$  disminuye exponencialmente hacia cero con una tasa de decaimiento igual o menor a  $2\mathbf{d}\pi^2 - 4\mathbf{m}$  a medida que  $t \rightarrow \infty$ . Como resultado,  $u_x \rightarrow 0$  y  $v_x \rightarrow 0$  cuando  $t \rightarrow \infty$ . Este hecho implica una propiedad de homogeneidad espacial, es decir, una disminución de los patrones, lo que puede interpretarse como que a lo largo del dominio no habrá variación en la concentración química de la sustancia.

En el caso general en el que existen  $m$  sustancias en un dominio  $N$ -dimensional  $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ , se considera el sistema

$$\frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \mathbb{D}\Delta \mathbf{c}(\mathbf{x}, t) + \mathbf{f}(\mathbf{c}(\mathbf{x}, t)). \quad (103)$$

La función de energía asociada al sistema, está dada por

$$E(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{c}\|^2 d\mathbf{x}, \quad \text{donde} \quad \|\nabla \mathbf{c}\|^2 = \sum_{i=1}^m |\nabla u_i|^2. \quad (104)$$

Nuevamente se define

$$\mathbf{m} = \max_{\mathbf{c}} \|\nabla_{\mathbf{c}} \mathbf{f}(\mathbf{c})\|, \quad (105)$$

y  $\mathbf{d}$  como el mínimo valor propio de la matriz  $\mathbb{D}$ . Para acotar la derivada temporal de  $E(t)$  note que

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left( \sum_{i=1}^m |\nabla u_i|^2 \right) d\mathbf{x} &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left( \sum_{i=1}^m [(u_i)_{x_1}^2 + \cdots + (u_i)_{x_N}^2] \right) d\mathbf{x} \\
&= 2 \int_{\Omega} \sum_{i=1}^m [(u_i)_{x_1} (u_i)_{x_1 t} + \cdots + (u_i)_{x_N} (u_i)_{x_N t}] d\mathbf{x} \\
&= 2 \int_{\Omega} \sum_{i=1}^m [((u_i)_{x_1}, \cdots, (u_i)_{x_N}) \cdot ((u_i)_{x_1 t}, \cdots, (u_i)_{x_N t})] d\mathbf{x} \\
&= 2 \int_{\Omega} \sum_{i=1}^m (\nabla u_i \cdot \nabla (u_i)_t) d\mathbf{x} \\
&= 2 \int_{\Omega} \left( \begin{pmatrix} (u_1)_{x_1} & \cdots & (u_1)_{x_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (u_m)_{x_1} & \cdots & (u_m)_{x_N} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (u_1)_{x_1 t} & \cdots & (u_1)_{x_N t} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (u_m)_{x_1 t} & \cdots & (u_m)_{x_N t} \end{pmatrix} \right) d\mathbf{x} \\
&= 2 (\nabla \mathbf{c}, \nabla \mathbf{c}_t),
\end{aligned} \tag{106}$$

donde  $(\cdot, \cdot)$  denota el producto punto en  $L^2(\Omega)$ . Usando (106), las condiciones de frontera y la fórmula de integración por partes se obtiene

$$\begin{aligned}
\frac{dE(t)}{dt} &= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{c}_t) d\mathbf{x} \\
&= \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{c} \cdot \nabla (\mathbb{D} \Delta \mathbf{c})) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{f}(\mathbf{c})) d\mathbf{x} \\
&= \int_{\partial \Omega} (\mathbb{D} \Delta \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \mathbf{n})) dS - \int_{\Omega} (\mathbb{D} \Delta \mathbf{c} \cdot \Delta \mathbf{c}) d\mathbf{x} + \int_{\Omega} (\nabla \mathbf{c} \cdot (\nabla \mathbf{c} \cdot \nabla \mathbf{c}_t)) d\mathbf{x} \\
&\leq -\mathbf{d} \int_{\Omega} |\Delta \mathbf{c}|^2 d\mathbf{x} + \mathbf{m} \int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{c}\|^2 d\mathbf{x},
\end{aligned} \tag{107}$$

donde  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\mathbf{x})$  es el vector normal a la frontera  $\partial \Omega$ , y  $dS$  es el diferencial de área. Usando la desigualdad Poincaré<sup>10</sup>

$$\int_{\Omega} |\Delta \mathbf{c}|^2 d\mathbf{x} \geq \mu \int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{c}\|^2 d\mathbf{x}, \tag{108}$$

con  $\mu$  el menor valor propio positivo de

$$\Delta \phi + \mu \phi = 0, \quad \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad \mathbf{x} \in \partial \Omega, \tag{109}$$

la derivada temporal de  $E(t)$  queda acotada por

$$\frac{dE(t)}{dt} \leq (\mathbf{m} - \mu \mathbf{d})E(t). \quad (110)$$

A partir de (110) y siguiendo un procedimiento similar al caso unidimensional, se tiene que  $E(t)$  tiende a cero con un decaimiento exponencial a medida que  $t \rightarrow \infty$  cuando el valor de  $\mathbf{d}$  es lo suficientemente grande. Por lo tanto,  $\nabla \mathbf{c} \rightarrow 0$  a medida que  $t \rightarrow \infty$ . A partir de este razonamiento, se concluye que cuando  $\mathbf{d}$  es suficientemente grande, los patrones espaciales desaparecen en el infinito y, por lo tanto, se alcanza una propiedad de homogeneidad espacial.

### 3. APROXIMACIÓN NUMÉRICA

El objetivo de este capítulo es presentar algunos esquemas de aproximación numérica para las soluciones débiles del sistema de reacción-difusión (40), teniendo en cuenta las dinámicas de reacción de Schnakenberg, de Gierer-Meinhardt y de Thomas. Estos esquemas de aproximación implican la discretización de las derivadas temporales mediante diferencias finitas y la utilización del método de elementos finitos para la discretización espacial.

Para la formulación de los esquemas de aproximación, es necesario establecer una formulación variacional del sistema (40). De manera explícita, se considera la siguiente formulación:

$$\begin{cases} (\partial_t u, w_1) + (\nabla u, \nabla w_1) = \gamma(f(u, v), w_1), & \forall w_1 \in H^1(\Omega), \\ (\partial_t v, w_2) + d(\nabla v, \nabla w_2) = \gamma(g(u, v), w_2), & \forall w_2 \in H^1(\Omega), \end{cases} \quad (111)$$

donde  $H^1(\Omega)$  denota el espacio de Hilbert formado por las funciones  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  que junto con su gradiente, en el sentido débil, son cuadrado integrales, con norma dada por

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} = \|u\|_{L^2(\Omega)} + \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)} = \left( \int_{\Omega} |u|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2} + \left( \int_{\Omega} |\nabla u|^2 d\mathbf{x} \right)^{1/2}, \quad (112)$$

y producto interno  $(u, w_1)_{H^1} = (u, w_1) + (\nabla u, \nabla w_1)$ , siendo  $(\cdot, \cdot)$  el producto interno usual de  $L^2(\Omega)$ , dado por

$$(u, w_1) = \int_{\Omega} u w_1 d\mathbf{x}. \quad (113)$$

#### 3.1. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Schnakenberg

En esta sección se presenta un esquema de aproximación numérica para las soluciones débiles del sistema de reacción-difusión (34), con el objetivo de que se preserve la positividad en cada una de las variables discretas.

Se asume una partición uniforme del intervalo temporal fijo  $[0, T]$  con partición dada

por  $t_n = n\Delta t$ , siendo  $\Delta t = \frac{T}{N}$  el tamaño del paso,  $n = 0, 1, \dots, N$ . Se denota por  $u^n(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}, t_n)$ . Para la discretización espacial, se considera una triangulación regular y cuasi-uniforme  $\{\tau_h\}_{h>0}$  de  $\bar{\Omega}$ , constituida por triángulos con ángulos interiores menores o iguales a  $\pi/2$ , y tal que la unión de todos los triángulos formen  $\bar{\Omega}$  y que dados dos triángulos de la subdivisión, o bien no se intersecan, o cuando se intersecan lo hacen en una arista ó vértice común. El subíndice  $h$  denota el parámetro de la discretización espacial y se define como  $h = \max\{h_K : K \in \tau_h\}$ , con  $h_K$  el diámetro de  $K$ . Una triangulación  $\{\tau_h\}_{h>0}$  se dice que es cuasi-uniforme, si existen constantes positivas  $C_1, C_2$ , tales que para cada  $K \in \{\tau_h\}_{h>0}$

$$C_1 h \leq \theta(K) \text{ y } \text{diam}(K) \leq C_2 h, \quad (114)$$

donde  $\theta(K)$  es el diámetro del mayor círculo inscrito en  $K$  y  $\text{diam}(K)$  es el diámetro del menor círculo que contiene a  $K$ .

Se denota por  $\mathcal{N} = \{a_i\}_{i \in I}$  el conjunto de todos los nodos de  $\tau_h$ . Se escoge el siguiente espacio de elementos finitos continuos para  $u$  y  $v$ :  $\mathcal{U}_h \subset H^1(\Omega)$  generado por elementos  $\mathbb{P}_1$ . El conjunto de funciones base para  $\mathcal{U}_h$  se denota por  $\{\varphi_{a_i}\}_{i \in I}$ . Considere el operador de proyección  $\mathbb{P}$  sobre  $\mathcal{U}_h$  tal que  $\mathbb{P}u \geq 0$  si  $u \geq 0$ .

Se denota el interpolador de Lagrange  $\Pi_h : C(\bar{\Omega}) \rightarrow \mathcal{U}_h$  definido por  $\Pi_h(u(\mathbf{x})) = \sum_{i \in I} u(a_i) \varphi_{a_i}(\mathbf{x})$ . Finalmente, dado que se pretende plantear un esquema numérico que preserve la no negatividad de las variables discretas, siguiendo<sup>11</sup>, se considera el semiproducto interno discreto sobre  $C(\bar{\Omega})$ , el cual es un producto interno en  $\mathcal{U}_h$ , y su seminorma discreta inducida, la cual es una norma en  $\mathcal{U}_h$ . Estos se definen respectivamente por

$$(u_1, u_2)^h := \int_{\Omega} \Pi_h(u_1 u_2) = \sum_{i \in I} u_1(a_i) u_2(a_i) \int_{\Omega} \varphi_{a_i}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (115)$$

$$|u|_h := \sqrt{(u, u)^h}.$$

---

<sup>11</sup> Niño-Celis Viviana, Rueda-Gómez Diego Armando y Villamizar-Roa Élder Jesús. «Convergence and positivity of finite element methods for a haptotaxis model of tumoral invasion». En: *Computers & Mathematics with Applications* 89 (2021), págs. 20-33.

Se define el siguiente esquema de aproximación, que lo referiremos como “esquema S” para el sistema (34);

**Inicialización:** Sea  $[u_h^0, v_h^0] = [\mathbb{P}u_0, \mathbb{P}v_0] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ .

**Paso de tiempo n:** Dado el vector  $[u_h^{n-1}, v_h^{n-1}] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , calcular  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , tal que:

$$(I) \quad (\delta_t u_h^n, w_1)^h + (\nabla u_h^n, \nabla w_1) + \gamma(u_h^n, w_1)^h = \gamma(a + (u_h^{n-1})^2 v_h^n, w_1), \quad \forall w_1 \in \mathcal{U}_h,$$

$$(II) \quad (\delta_t v_h^n, w_2)^h + d(\nabla v_h^n, \nabla w_2) = \gamma(b, w_2) - \gamma((u_h^{n-1})^2 v_h^n, w_2)^h, \quad \forall w_2 \in \mathcal{U}_h,$$

$$\text{donde } \delta_t u_h^n = \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\Delta t} \text{ y } \delta_t v_h^n = \frac{v_h^n - v_h^{n-1}}{\Delta t}.$$

**Proposición 3.1. (Positividad).** Sea  $([u_h^n, v_h^n])_{n \in \mathbb{N}}$  la sucesión generada por el esquema S. Si  $u_h^{n-1} \geq 0$  y  $v_h^{n-1} \geq 0$ , entonces  $u_h^n \geq 0$  y  $v_h^n \geq 0$ .

**Demostración.** Denote por  $a_- = \min\{a, 0\} \leq 0$ . Considere  $w_2 = \Pi_h([v_h^n]_-) \in \mathcal{U}_h$  en (II). Entonces,

$$(\delta v_h^n, \Pi_h([v_h^n]_-))^h + d(\nabla v_h^n, \nabla \Pi_h([v_h^n]_-)) + \gamma(u_h^{n-1} v_h^n, \Pi_h([v_h^n]_-))^h = \gamma(b, \Pi_h([v_h^n]_-)). \quad (116)$$

De la definición del interpolador  $\Pi_h$ , el semiproducto interno  $(\cdot, \cdot)^h$ , usando la propiedad que establece que  $(\Pi_h(u))^2 \leq \Pi_h(u^2)$  (ver<sup>11</sup>) para toda  $u \in C(\bar{\Omega})$ , y teniendo en cuenta que  $u_h^{n-1} \geq 0$ , se tiene que

$$\begin{aligned} (\delta_t v_h^n, \Pi_h([v_h^n]_-))^h &= \frac{1}{\Delta t} (v_h^n, \Pi_h([v_h^n]_-))^h - \frac{1}{\Delta t} (v_h^{n-1}, \Pi_h([v_h^n]_-))^h \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \Pi_h([v_h^n]_-^2) d\mathbf{x} - \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} \Pi_h(v_h^{n-1} [v_h^n]_-) d\mathbf{x} \\ &\geq \frac{1}{\Delta t} \|\Pi_h([v_h^n]_-)\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (117)$$

Además,

$$\begin{aligned} \gamma(u_h^{n-1} v_h^n, \Pi_h([v_h^n]_-))^h &= \gamma \int_{\Omega} \Pi_h(u_h^{n-1} v_h^n [v_h^n]_-) d\mathbf{x} \\ &= \gamma \int_{\Omega} \Pi_h \left( \sqrt{u_h^{n-1} [v_h^n]_-} \right)^2 \\ &\geq \gamma \|\Pi_h \left( \sqrt{u_h^{n-1} [v_h^n]_-} \right)\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (118)$$

Por otro lado, recordando que  $v_h^n = \Pi_h([v_h^n]_+) + \Pi_h([v_h^n]_-)$  y usando que todos los elementos de la triangulación poseen un ángulo no obtuso, se puede mostrar que (ver proposición 2.5 de<sup>12</sup>)

$$\begin{aligned} (\nabla v_h^n, \nabla \Pi_h([v_h^n]_-)) &= (\nabla \Pi_h([v_h^n]_+), \nabla \Pi_h([v_h^n]_-)) + (\nabla \Pi_h([v_h^n]_-), \nabla \Pi_h([v_h^n]_-)) \\ &\geq \|\nabla \Pi_h([v_h^n]_-)\|_{L^2}^2. \end{aligned} \quad (119)$$

Por lo tanto,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta t} \|\Pi_h([v_h^n]_-)\|_{L^2}^2 + \|\nabla \Pi_h([v_h^n]_-)\|_{L^2}^2 + \gamma \|\Pi_h(\sqrt{u_h^{n-1}}[v_h^n]_-)\|_{L^2}^2 \\ \leq \gamma \int_{\Omega} b \Pi_h([v_h^n]_-) \leq 0, \end{aligned} \quad (120)$$

lo que implica que  $[v_h^n]_- = 0$  y así,  $v_h^n \geq 0$ .

Por otro lado, tomando  $w_1 = \Pi_h([u_h^n]_-) \in \mathcal{U}_h$  en (I), se obtiene que

$$\begin{aligned} (\delta_t u_h^n, \Pi_h([u_h^n]_-))^h + (\nabla u_h^n, \nabla \Pi_h([u_h^n]_-)) + \gamma (u_h^n, \Pi_h([u_h^n]_-))^h \\ = \gamma (a + (u_h^{n-1})^2 v_h^n, \Pi_h([u_h^n]_-)). \end{aligned} \quad (121)$$

Siguiendo los mismos pasos de la prueba de la no negatividad de  $v_h^n$ , y teniendo en cuenta que ya  $v_h^n \geq 0$ , es posible ver que

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\Delta t} + \gamma\right) \|\Pi_h([u_h^n]_-)\|_{L^2}^2 + \|\nabla \Pi_h([u_h^n]_-)\|_{L^2}^2 \\ \leq \gamma \int_{\Omega} (a + (u_h^{n-1})^2 v_h^n) \Pi_h([u_h^n]_-) d\mathbf{x} \leq 0, \end{aligned} \quad (122)$$

lo que implica que  $[u_h^n]_- = 0$  y así,  $u_h^n \geq 0$ .

**Proposición 3.2.** (Buena postura). Existe una única solución  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$  del esquema S.

**Demostración.** Observe que el esquema S es lineal, por lo tanto, para mostrar la existencia y unicidad de solución, es suficiente mostrar la unicidad. Para esto, suponga

---

<sup>12</sup> Guillén-González Francisco y Gutiérrez-Santacreu Juan Vicente. «From a cell model with active motion to a Hele–Shaw-like system: a numerical approach». En: *Numerische Mathematik* 143.1 (2019), págs. 107-137.

que existen  $[u_{h,1}^n, v_{h,1}^n]$  y  $[u_{h,2}^n, v_{h,2}^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , dos soluciones de  $S$ , y denote por  $u_h^n = u_{h,1}^n - u_{h,2}^n$  y  $v_h^n = v_{h,1}^n - v_{h,2}^n$ . Entonces, de la ecuación (11) se tiene que

$$(v_h^n, w_2)^h + \Delta t d (\nabla v_h^n, \nabla w_2) = -\gamma \Delta t ((u_h^{n-1})^2 v_h^n, w_2)^h, \quad \forall w_2 \in \mathcal{U}_h. \quad (123)$$

Tomando  $w_2 = v_h^n$  en (123) y usando el hecho de que  $|\cdot|_h$  y  $\|\cdot\|_{L^2}$  en  $\mathcal{U}_h$  son normas uniformemente equivalentes con respecto a  $h$  (ver<sup>13</sup>), se obtiene que

$$\|v_h^n\|_{L^2}^2 + \Delta t d \|\nabla v_h^n\|_{L^2}^2 + \gamma \Delta t \|u_h^{n-1} v_h^n\|_{L^2}^2 = 0, \quad (124)$$

lo que implica que  $v_h^n = 0$ , y así,  $v_{h,1}^n = v_{h,2}^n$ . Sabiendo que  $v_{h,1}^n = v_{h,2}^n$ , tomando la diferencia de las ecuaciones (1) satisfechas por  $u_{h,1}^n$  y  $u_{h,2}^n$ , y tomando  $w_1 = u_h^n$ , se obtiene que

$$\|u_h^n\|_{L^2}^2 + \|\nabla u_h^n\|_{L^2}^2 = 0, \quad (125)$$

lo que implica que  $u_h^n = 0$ , y así,  $u_{h,1}^n = u_{h,2}^n$ .

**3.1.1. Resultados de simulación para la reacción de Schnakenberg.** A continuación se validaran los resultados de simulación numérica de la reacción de Schnakenberg por medio los resultados obtenidos en la referencia<sup>14</sup>. Considere los parámetros de reacción y difusión específicos  $a = 0.2$ ,  $b = 0.5$ ,  $d = 14$ , y  $\gamma = 200$ , por lo que el sistema de reacción-difusión de Schnakenberg está dado por

$$\begin{aligned} u_t &= \Delta u + 200(0.2 - u + u^2 v), \\ v_t &= 14\Delta v + 200(0.5 - u^2 v), \end{aligned} \quad (126)$$

considerando como dominio un cuadrado de lado igual a la unidad. Usando los resultados presentados en la Sección 2.8, se puede verificar si los parámetros dados

---

<sup>13</sup> Becker Roland, Feng Xiaobing y Prohl Andreas. «Finite element approximations of the Ericksen–Leslie model for nematic liquid crystal flow». En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 46.4 (2008), págs. 1704-1731.

<sup>14</sup> Chaidez Jesús. «Formación de patrones mediante el mecanismo de Turing». En: *Tesis* (2010).

cumplen las condiciones de estabilidad en ausencia de difusión, así como las condiciones de inestabilidad en presencia de la difusión, lo que da origen a las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
b - a < (a + b)^3 &\Rightarrow 0.3 < 0.343, \\
(a + b)^2 > 0 &\Rightarrow 0.49 > 0, \\
(b - a)d > (a + b)^3 &\Rightarrow 4.2 > 0.343, \\
((b - a)d - (a + b)^3)^2 > 4d(a + b)^4 &\Rightarrow 14.8764 > 13.4555.
\end{aligned} \tag{127}$$

Para verificar si el parámetro  $\gamma$  permite encontrar números de onda  $k$  que generen inestabilidad en presencia de difusión, primero se deben validar las condiciones de Turing. Una vez validadas, se procede a utilizar la desigualdad (91) presentada en la Sección 2.9, para los parámetros  $a, b, d$  y  $\gamma$  dados.

Esto resultará en la relación entre el número de onda  $k$  y los parámetros del sistema, la cual puede ser utilizada para encontrar valores de  $k$  que produzcan inestabilidad, la cual está dada por

$$k_{\mathbf{a}}^2 = 27.1512 < \pi^2 \left( \frac{n^2}{(1)^2} + \frac{m^2}{(1)^2} \right) < k_{\mathbf{b}}^2 = 51.56, \tag{128}$$

en donde se pueden escoger valores de  $n$  y  $m$  tales que satisfagan (128), como por ejemplo  $(\pm 1, \pm 2)$  y  $(\pm 2, 0)$ . Con lo presentado anteriormente se puede asegurar que los parámetros  $a = 0.2, b = 0.5, d = 14$  y  $\gamma = 200$  son capaces de generar patrones espacio-temporales.

Por último, se necesitan condiciones iniciales para completar el “esquema S”; para esto se pueden escoger condiciones iniciales de tipo senoidal alrededor del punto de equilibrio, como se presenta en la ecuación (92). Considerando las siguientes condiciones iniciales

$$\begin{cases} u(x, y, 0) = \bar{u} - 0.001 \cos(n\pi x) \cos(m\pi y), \\ v(x, y, 0) = \bar{v} + 0.001 \cos(n\pi x) \cos(m\pi y), \end{cases} \tag{129}$$

en donde  $(\bar{u}, \bar{v}) = (0.7, 50/49)$ . A continuación, se presentan los resultados obtenidos para la sustancia  $u$  (en donde se seleccionaron los enteros  $(n, m) = (1, 2)$ ).

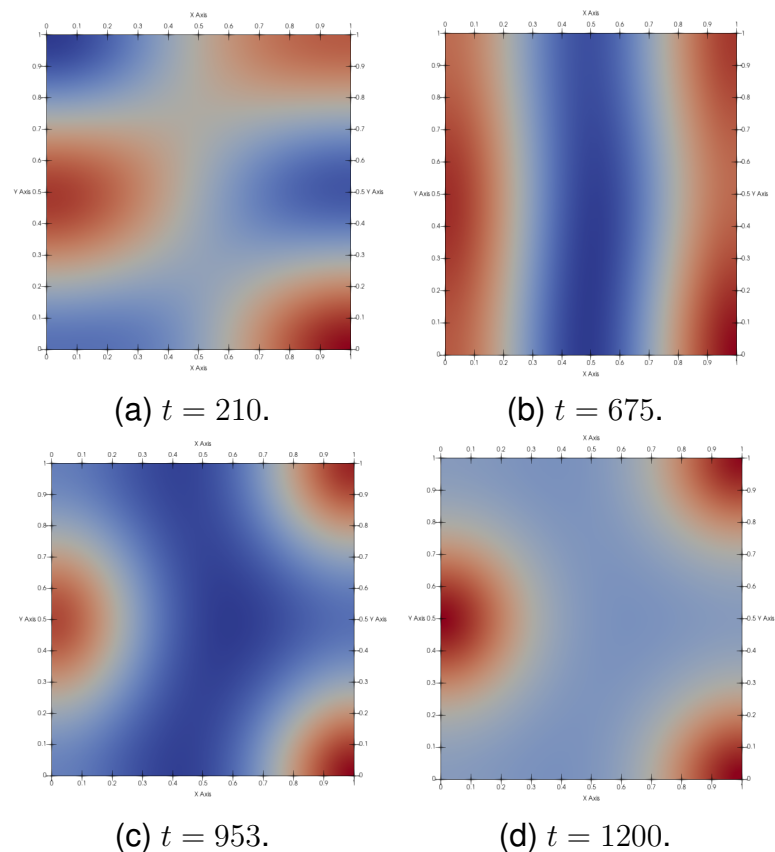
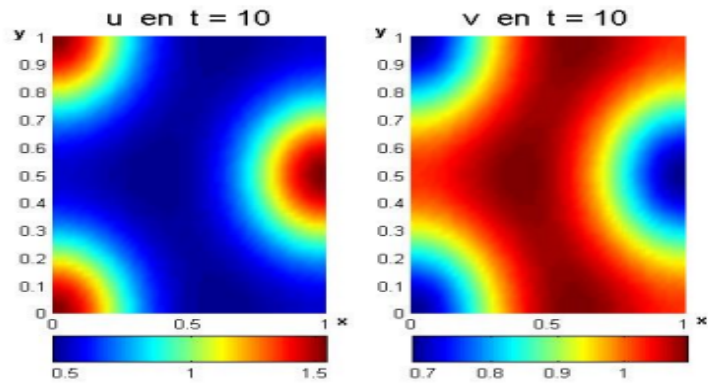
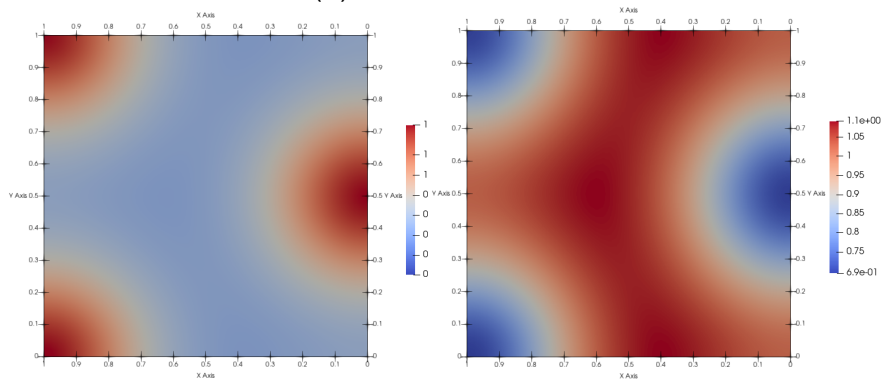


Figura 11. Formación de patrones para la sustancia  $u$  a partir de la reacción de Schnakenberg.

En la Figura 11, se presenta la evolución de los patrones de Turing generados por la reacción de Schnakenberg para la solución  $u$ , por medio de las imágenes (a), (b), (c) y (d), las cuales representan los instantes de tiempo  $t = 210, 675, 953$  y  $1200$  respectivamente, en donde  $\Delta t = 1$ . Posterior al tiempo  $t = 1200$ , no se observó variación alguna en la simulación, lo que revela la convergencia a un estado heterogéneo estable, es decir, se generó la formación de un patrón de Turing. Para comparar los resultados obtenidos en esta simulación<sup>14</sup>, se presenta el resultado final obtenido para las sustancias  $u$  y  $v$  en la misma figura. Cabe resaltar que los resultados de las simulaciones numéricas reportados en<sup>14</sup> se basan en el software “reacdiff.m”, sin describir algún tipo de esquema de aproximación.



(a) Referencia<sup>14</sup>.



(b) Sustancia  $u$ .

(c) Sustancia  $v$ .

Figura 12. Formación de patrones para la reacción de Schnakenberg obtenida de la referencia<sup>14</sup>.

En la Figura 12 se muestra la solución obtenida en la referencia<sup>14</sup>, junto con las soluciones obtenidas a partir del “esquema S” para las variables  $u$  y  $v$ , representadas mediante las imágenes (a), (b) y (c), respectivamente. Es posible concluir que se generan los mismos patrones de Turing. La solución del patrón espacio-temporal generado anteriormente también se puede presentar en tres dimensiones.

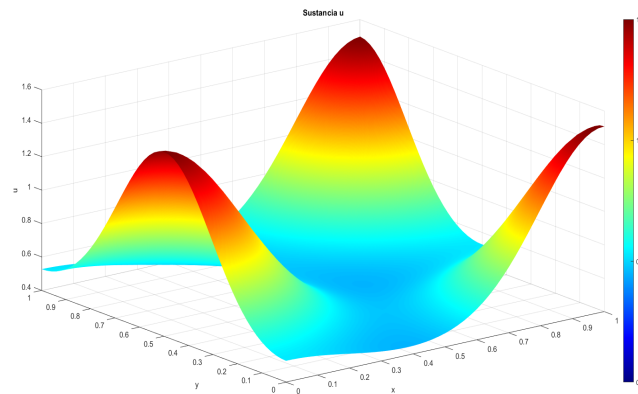


Figura 13. Solución del “esquema S” para la sustancia  $u$ .

A partir de la Figura 13 se puede generar una mejor interpretación de la positividad de la solución  $u$ , así como de sus valores mínimos y máximos.

En la Figura 12, se puede observar que los valores elevados de la sustancia  $u$  se corresponden con valores bajos de la sustancia  $v$ , y viceversa. Este fenómeno representa un posible desfase entre la sustancia  $u$  y  $v$ . Esto se puede ilustrar de forma sencilla para el caso de la solución unidimensional, en donde se escoge  $(n, m) = (2, 0)$  de tal forma que se cumpla (128) en una dimensión.

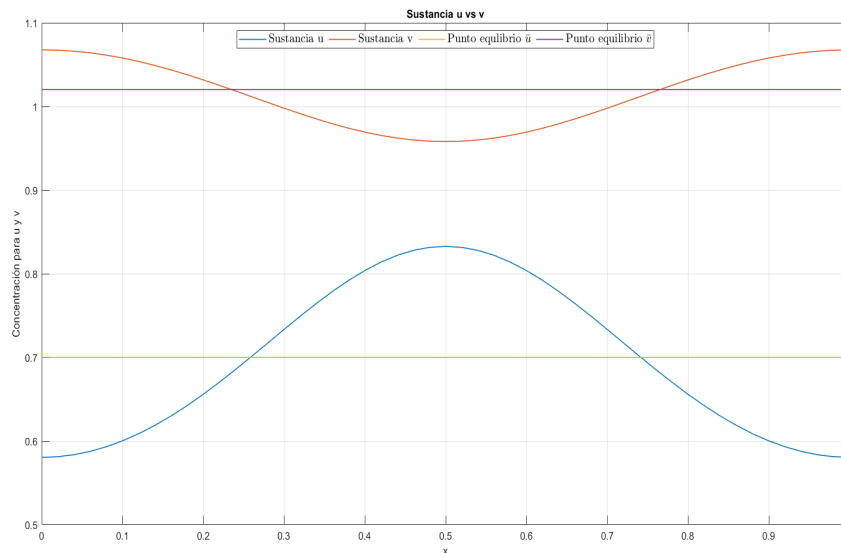


Figura 14. Desfase entre  $u$  y  $v$  soluciones de el “esquema S”.

La Figura 14 muestra el desfase entre las sustancias  $u$  y  $v$ , el cual explica su comportamiento autocatalítico e inhibitorio mutuo representando la configuración de signos

(a) presentada en (66).

Así como se validó previamente la solución del “esquema S” en relación a la referencia<sup>14</sup>, es posible comparar la solución unidimensional del “esquema S” para  $(n, m) = (2, 0)$  con el solucionador de Matlab para ecuaciones diferenciales parciales en una dimensión, que se basa en el artículo<sup>15</sup>. Esta comparación se puede apreciar en la Figura 15, donde se muestra el resultado final para ambos tipos de soluciones.

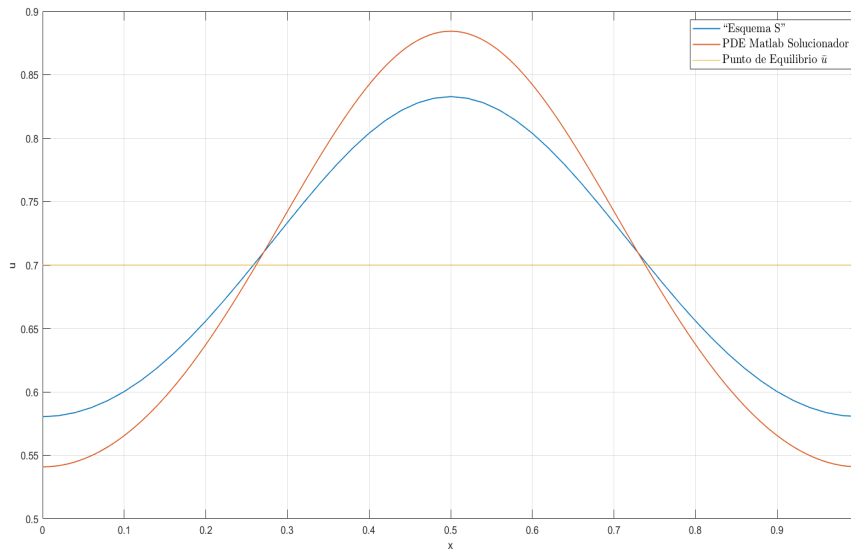


Figura 15. Solución del “esquema S” vs solución de Matlab para la sustancia  $u$ .

En la Figura 15 se puede apreciar una buena aproximación entre la solución obtenida mediante el “esquema S” y la solución obtenida usando Matlab. Vale la pena destacar que el “esquema S”, no solo exhibe convergencia al implementar condiciones iniciales y parámetros de reacción-difusión, sino que también nos asegura que la solución obtenida es no negativa (vea Proposición 3.1). Esto es fundamental por tratarse de sustancias químicas, es decir, concentraciones negativas no tienen un sentido físico. Queriendo resaltar la propiedad de no negatividad en las soluciones discretas que produce el “esquema S”, se considera un esquema discreto básico, que se denomina “esquema Z”, el cual está dado por:

**Inicialización:** Sea  $[u_h^0, v_h^0] = [\mathbb{P}u_0, \mathbb{P}v_0] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ .

<sup>15</sup> Skeel Robert y Berzins Martin. «A method for the spatial discretization of parabolic equations in one space variable». En: *SIAM journal on scientific and statistical computing* 11.1 (1990), págs. 1-32.

**Paso de tiempo n:** Dado el vector  $[u_h^{n-1}, v_h^{n-1}] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , calcular  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , tal que:

$$(I) \quad (\delta_t u_h^n, w_1) + (\nabla u_h^n, \nabla w_1) + \gamma(u_h^n, w_1) = \gamma(a + (u_h^{n-1})^2 v_h^n, w_1), \quad \forall w_1 \in \mathcal{U}_h,$$

$$(II) \quad (\delta_t v_h^n, w_2) + d(\nabla v_h^n, \nabla w_2) = \gamma(b, w_2) - \gamma((u_h^{n-1})^2 v_h^n, w_2), \quad \forall w_2 \in \mathcal{U}_h,$$

donde  $\delta_t u_h^n = \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\Delta t}$  y  $\delta_t v_h^n = \frac{v_h^n - v_h^{n-1}}{\Delta t}$ .

Considerando los parámetros  $a = 0.1$ ,  $b = 0.9$ ,  $d = 1000$  y  $\gamma = 10000$ , los cuales satisfacen las condiciones de Turing (65), y la geometría del cardioide, se obtiene el siguiente resultado:

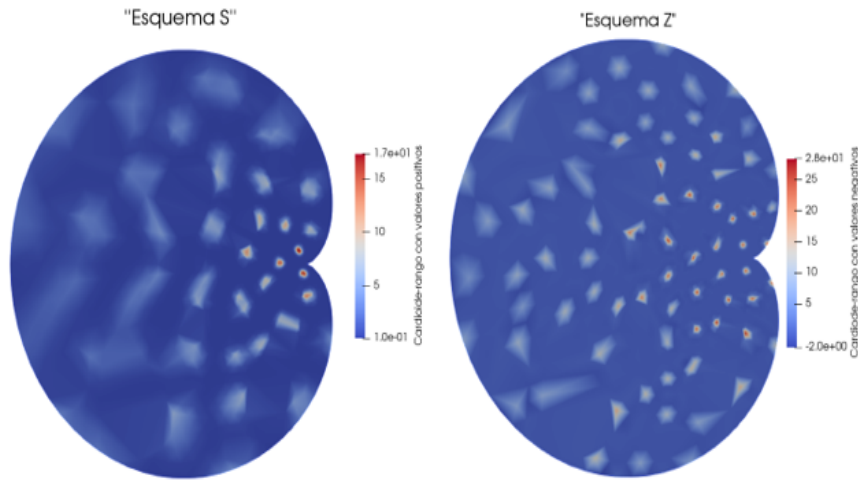


Figura 16. Comparación de la positividad del “esquema S” y del “esquema Z” para la sustancia  $u$ .

En la Figura 16 se presenta la solución para la concentración de la sustancia  $u$  a través del “esquema S” y el “esquema Z”. Se observa que el rango de valores para la solución obtenida a partir del “esquema S” se encuentra en el intervalo  $[0.1030, 17.2998]$ , mientras que para el “esquema Z” se encuentra en  $[-2.0003, 28.258]$ . Estos resultados ilustran claramente por qué se escogió “esquema S” y no el “esquema Z” para dar solución numérica a las ecuaciones de reacción-difusión presentadas en (25).

Resulta fascinante mostrar como al variar parámetros de reacción y difusión, así como al implementar nuevas geometrías, se pueden generar diversos patrones de Turing, los

cuales intentan reproducir formas y figuras que se pueden encontrar en la naturaleza. La implementación de nuevos tipos de condiciones iniciales afecta el comportamiento final de los resultados; algunas condiciones iniciales que se usaron en este trabajo son:

$$\begin{aligned}
 c(x, y, 0) &= \bar{c} \pm 0.001 \cos(n\pi x) \cos(m\pi y), \\
 c(x, y, 0) &= e^{-(x-\frac{l^2}{4})-(y-\frac{l^2}{4})}, \\
 c(x, y, 0) &= \bar{c} \pm 0.05 \text{rand}(x, y),
 \end{aligned}
 \tag{130}$$

en donde  $c$  es la representación vectorial de las concentraciones  $u$  y  $v$ ,  $l \in \mathbb{R}$  y  $\text{rand}(x, y)$  representa un numero aleatorio. A continuación se presentan algunos resultados obtenidos en este trabajo para los patrones de Turing, usando la reacción de Schnakenberg.

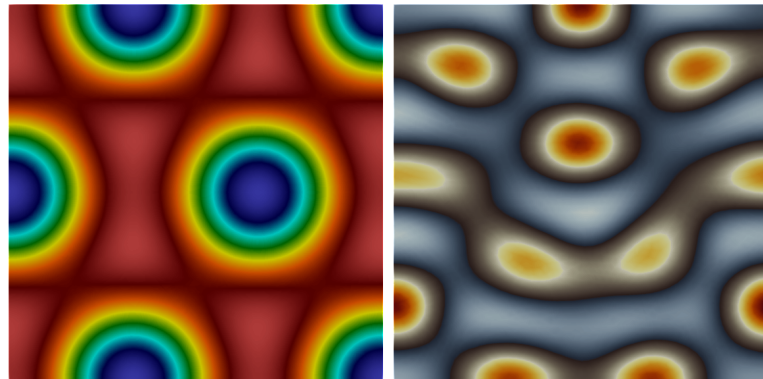


Figura 17. Formación de patrones adicionales para la reacción de Schnakenberg.

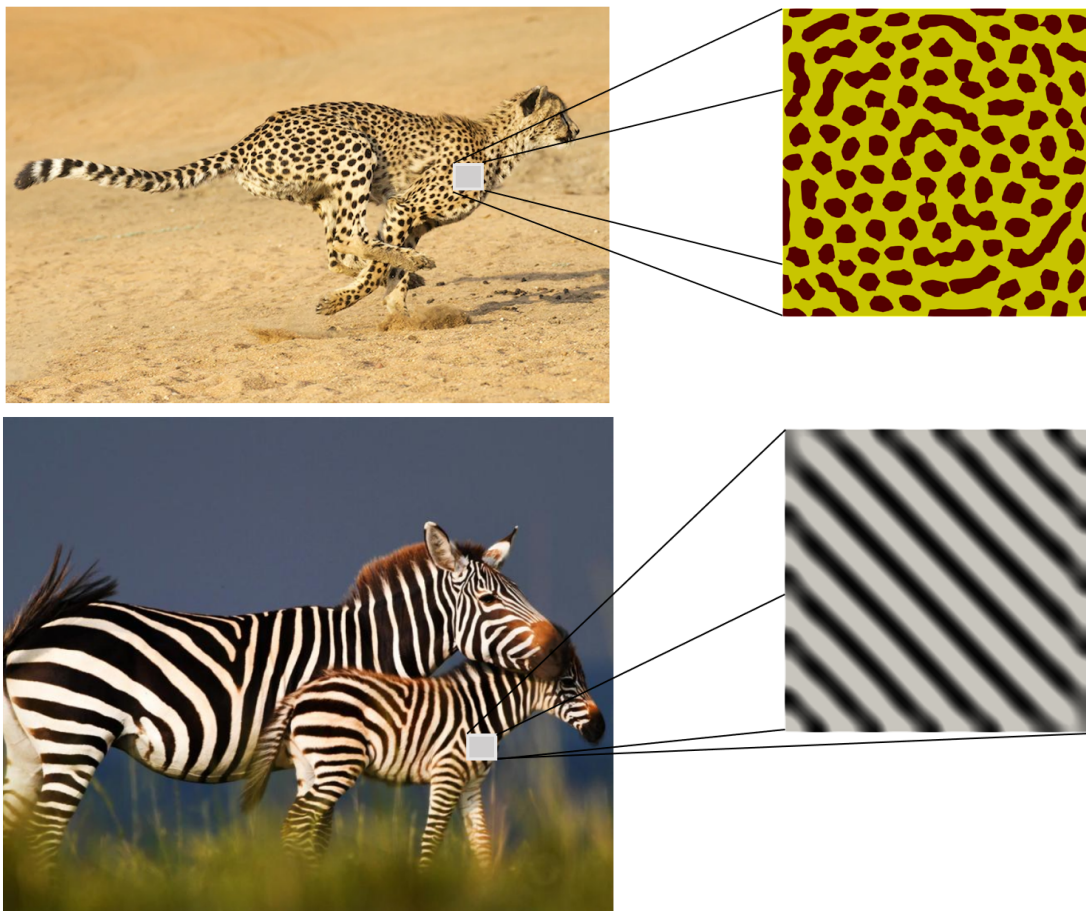


Figura 18. Similitud de patrones de Turing con los observados en la naturaleza usando la reacción de Schnakenberg.

En las Figuras 17 y 18, se pueden apreciar diversos patrones de Turing, tales como rayas de cebra, manchas de guepardo y otras posibles geometrías observadas en la naturaleza. Como ya se mencionó, estos patrones fueron generados mediante la implementación de la reacción de Schnakenberg en las ecuaciones de reacción-difusión en su forma clásica (34). Sin embargo, es importante resaltar que existen variantes de la reacción de Schnakenberg que son de reciente investigación, una de ellas se conoce como el sistema de Sel'kov-Schnakenberg<sup>16</sup>, el cual es dado por:

---

<sup>16</sup> Wang Yong et al. «Turing instability and pattern formation in a diffusive Sel'kov–Schnakenberg system». En: *Journal of Mathematical Chemistry* 61.5 (2023), págs. 1036-1062.

$$\begin{cases} u_t = d_u \Delta u + a - u + u^2 v + cv, \\ v_t = d_v \Delta v + b - u^2 v - cv, \end{cases} \quad (131)$$

en donde se añade el término  $\pm cv$ , con un ligero ajuste en la adimensionalización del sistema (34). A continuación, se presentan los patrones generados por el sistema de Sel'kov-Schnakenberg para parámetros  $a = 0.01$ ,  $b = 1.3$ ,  $c = 0.01$ ,  $d_u = 1.5$  y  $d_v = 25$ .

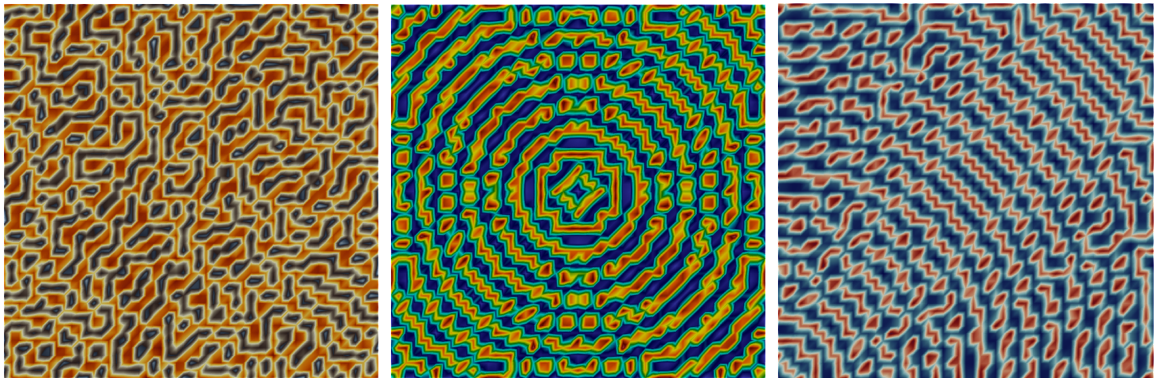


Figura 19. Formación de patrones para el sistema Sel'kov-Schnakenberg.

Por otro lado, recordemos que a lo largo de este trabajo se ha considerado la matriz  $\mathbb{D}$  en el sistema (25) siendo una matriz diagonal. Recientemente, la literatura científica ha reportado modelos biológicos en los que además de la auto-difusión, consideran efectos de la difusión cruzada<sup>17</sup>, y considerando diversos tipos de reacción, en particular, la reacción de Schnakenberg. El análisis cualitativo sobre estas variantes muestra la generación de patrones de Turing. Una de estas variantes está dada por el siguiente sistema<sup>17</sup>, en donde como se puede observar, la matriz de coeficientes de difusión, ya no es diagonal.

$$\begin{cases} u_t = d_{11} \Delta u + d_{12} \Delta v + a - u + u^2 v, \\ v_t = d_{21} \Delta u + d_{22} \Delta v + b - u^2 v, \end{cases} \quad (132)$$

en donde  $d_{11}$  y  $d_{22}$  son los coeficientes de auto-difusión, mientras que  $d_{12}$  y  $d_{21}$  son los coeficientes de difusión cruzada. El sistema de difusión cruzada para la reacción de

---

<sup>17</sup> Yang Rui. «Cross-diffusion induced spatiotemporal patterns in Schnakenberg reaction–diffusion model». En: *Nonlinear Dynamics* 110.2 (2022), págs. 1753-1766.

Schnakenberg genera los siguientes patrones:

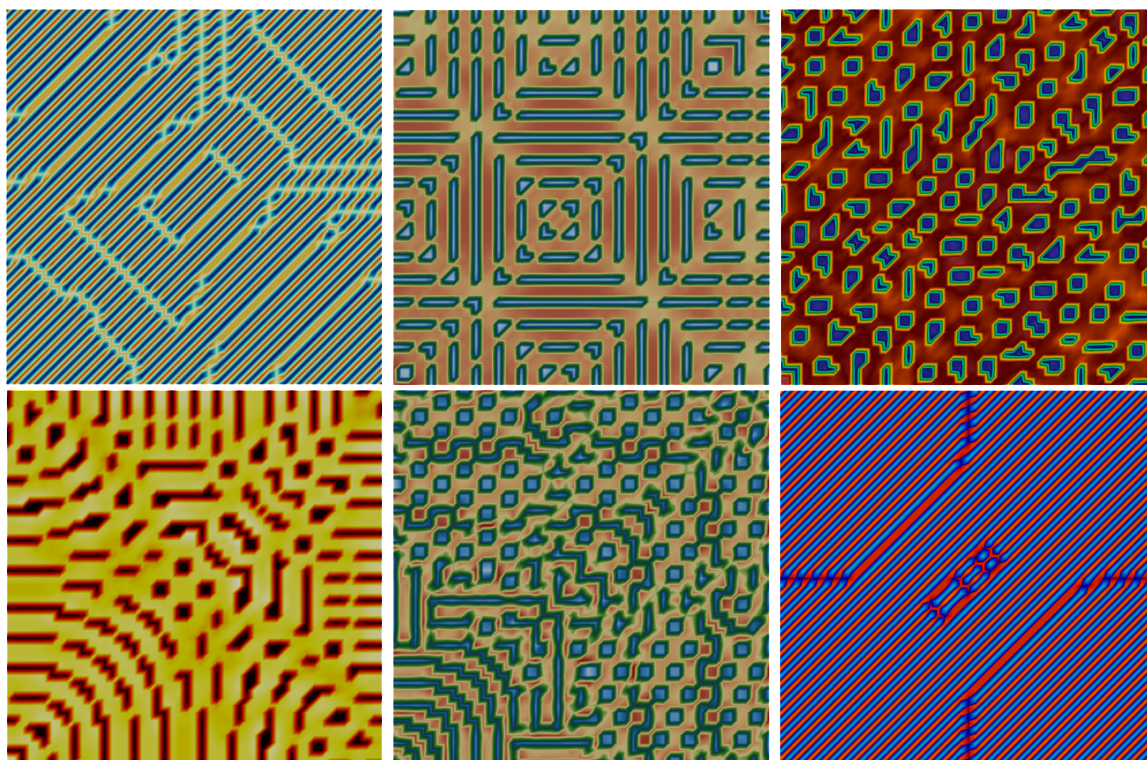


Figura 20. Formación de patrones para el sistema de difusión cruzada para la reacción de Schnakenberg.

En la Figura 20, se puede apreciar una amplia variedad de patrones de Turing obtenidos a partir de la introducción de los efectos de la difusión cruzada descrita en (132). La incorporación de la difusión cruzada en las ecuaciones de reacción-difusión tiene un impacto significativo en la capacidad de predecir patrones de Turing encontrados en la naturaleza y nos brinda la posibilidad de modelar geometrías complejas de manera más precisa, esto permite mejorar nuestra capacidad para predecir y comprender mejor los procesos químicos y biológicos que dan lugar a estos patrones.

Este tipo de modelos de difusión cruzada no solo se implementa en el contexto de sustancias químicas; también tiene importantes aplicaciones en sistemas sociales, como el comercio de drogas ilícitas<sup>18</sup>, donde nuevamente se utilizan coeficientes de auto-difusión y difusión cruzada constantes. Estos sistemas implican tres incógnitas que

---

<sup>18</sup> Vanag Vladimir y Epstein Irving. «Cross-diffusion and pattern formation in reaction–diffusion systems». En: *Physical Chemistry Chemical Physics* 11.6 (2009), págs. 897-912.

pueden denominarse como ciudadanos ordinarios, consumidores de drogas y personal antidrogas.

Continuando con el proceso de modificación de la forma clásica de la reacción de Schnakenberg, esta reacción también se ha venido explorando recientemente, desde otros puntos de vista. Una de estas alternativas es la de considerar difusiones anómalas, que matemáticamente son descritas por potencias fraccionarias del laplaciano. La difusión clásica se caracteriza por el movimiento aleatorio de partículas y puede ser modelada mediante un proceso estocástico Gaussiano<sup>19</sup>. El promedio cuadrático medio para un conjunto de partículas en un instante  $t$  está dado por

$$\langle |x(t) - x_0| \rangle \sim t^\alpha. \quad (133)$$

En esta relación,  $x(t)$  representa la posición de la partícula en el instante de tiempo  $t$ ,  $x_0$  es la posición inicial de la partícula, y  $\alpha$  es un parámetro que determina el tipo de difusión. En el caso de la difusión clásica, se tiene que  $\alpha = 1$ .

Para el caso de la difusión anómala, existen dos posibilidades para el valor de  $\alpha$ : si  $\alpha < 1$ , se tiene el caso de sub-difusión, mientras que si  $\alpha > 1$ , se obtiene el caso de súper-difusión. Estos procesos difieren significativamente de la difusión clásica descrita por la *Ley de Fick* (16). Por lo tanto, las ecuaciones de reacción y difusión fraccionaria en el espacio para la reacción de Schnakenberg están dadas por:

$$\begin{cases} u_t = -d_u(-\Delta)^{\frac{\beta_1}{2}}u + a - u + u^2v, \\ v_t = -d_v(-\Delta)^{\frac{\beta_2}{2}}v + b - u^2v, \end{cases} \quad (134)$$

en donde  $\beta_1, \beta_2 \in (1, 2]$ <sup>20</sup>, y el laplaciano fraccionario  $(-\Delta)^{\frac{\beta}{2}}$  se define como

---

<sup>19</sup> Del-Castillo-Negrete Diego, Carreras Benjamin Andres y Vickie Lynch. «Front dynamics in reaction-diffusion systems with Levy flights: a fractional diffusion approach». En: *Physical Review Letters* 91.1 (2003), pág. 018302.

<sup>20</sup> Khudhair Hatim, Zhang Yanzhi y Fukawa Nobuyuki. «Pattern selection in the Schnakenberg equations: From normal to anomalous diffusion». En: *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 38.6 (2022), págs. 1843-1860.

$$\mathcal{F} \left[ (-\Delta)^{\frac{\beta}{2}} u \right] = |\mathbf{K}|^{\beta} \mathcal{F} [u], \quad (135)$$

en donde  $\mathcal{F}$  representa la transformada de Fourier y  $|\mathbf{K}|^{\beta}$  representa el símbolo del operador diferencial. Sin embargo, en el presente trabajo, no se presentan los patrones generados a partir de las ecuaciones de reacción y difusión fraccionaria en el espacio debido a que esto implica la implementación de un esquema numérico distinto, lo cual puede ser objeto de futuras investigaciones y estudios adicionales. Sin embargo, cabe resaltar que para considerar modelos con difusión anómala, lo usual es considerar condiciones iniciales periódicas.

### 3.2. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Gierer-Meinhardt

En esta sección se presenta un esquema de aproximación numérica para las soluciones débiles del sistema de reacción-difusión (36), que preserve la positividad en cada una de las variables discretas. Análogamente al caso de la reacción de Schnakenberg, se define el siguiente esquema de aproximación, que se refiere por “esquema G” para el sistema (36):

**Inicialización:** Sea  $[u_h^0, v_h^0] = [\mathbb{P}u_0, \mathbb{P}v_0] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ .

**Paso de tiempo n:** Dado el vector  $[u_h^{n-1}, v_h^{n-1}] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , computar  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , tal que:

$$(I) \quad (\delta_t u_h^n, w_1)^h + (\nabla u_h^n, \nabla w_1) = \gamma(a, w_1) - \gamma b(u_h^n, w_1)^h + \gamma \left( \frac{(u_h^{n-1})^2}{v_h^n}, w_1 \right)^h, \quad \forall w_1 \in \mathcal{U}_h,$$

$$(II) \quad (\delta_t v_h^n, w_2)^h + d(\nabla v_h^n, \nabla w_2) = \gamma((u_h^{n-1})^2, w_2) - \gamma(v_h^n, w_2)^h, \quad \forall w_2 \in \mathcal{U}_h,$$

donde  $\delta_t u_h^n = \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\Delta t}$  y  $\delta_t v_h^n = \frac{v_h^n - v_h^{n-1}}{\Delta t}$ .

**Proposición 3.3.** (Buena postura). Existe una única solución  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$  del “esquema G”.

(Positividad). Sea  $([u_h^n, v_h^n])_{n \in \mathbb{N}}$  la sucesión generada por el “esquema G”. Entonces, si  $u_h^{n-1} \geq 0$  y  $v_h^{n-1} \geq 0$ , entonces  $u_h^n \geq 0$  y  $v_h^n \geq 0$ .

**Demostración.** La prueba es análoga a la demostración de Schnakenberg para la Proposición 3.1 y 3.2.

**3.2.1. Resultados de simulación para reacción de Gierer-Meinhardt.** A continuación se validaran los resultados de simulación de la reacción de Gierer-Meinhardt, como se realizó anteriormente, estos resultados se validan con la referencia<sup>14</sup>, usando parámetros de reacción dados por  $a = 0.5$ ,  $b = 1.5$ ,  $d = 30$  y  $\gamma = 4000$ , obteniendo la siguiente forma para la reacción de Gierer-Meinhardt:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + 4000(0.5 - 1.5u + \frac{u^2}{v}), \\ v_t = 30\Delta v + 4000(u^2 - v), \end{cases}$$

(136)

en donde de igual forma al caso de la reacción de Schnakenberg, se considera como dominio un cuadrado de lado igual a la unidad. Se verifica que los parámetros dados cumplan con las condiciones de estabilidad en ausencia de difusión, así como las condiciones de inestabilidad en presencia de la difusión, y por último se consideran las condiciones iniciales presentadas en (129) en donde  $(\bar{u}, \bar{v}) = (1, 1)$ . A continuación se presentan los resultados obtenidos para la sustancia  $u$  en donde se seleccionaron los enteros  $(n, m) = (9, 4)$ .

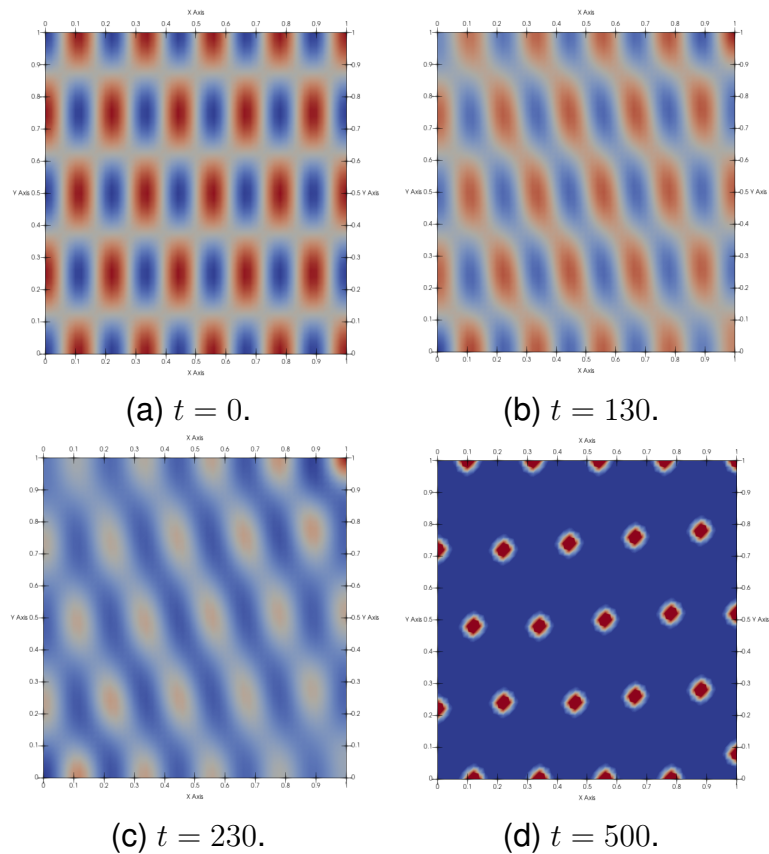
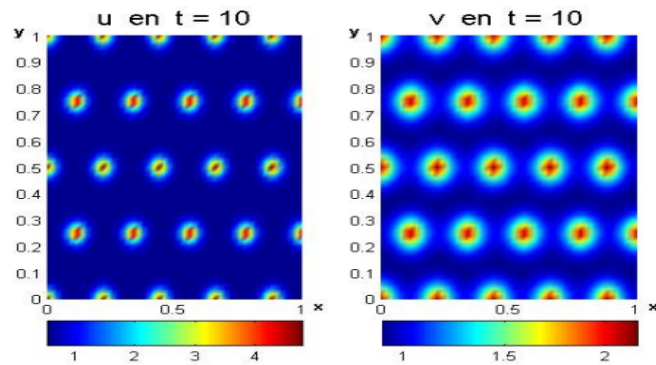
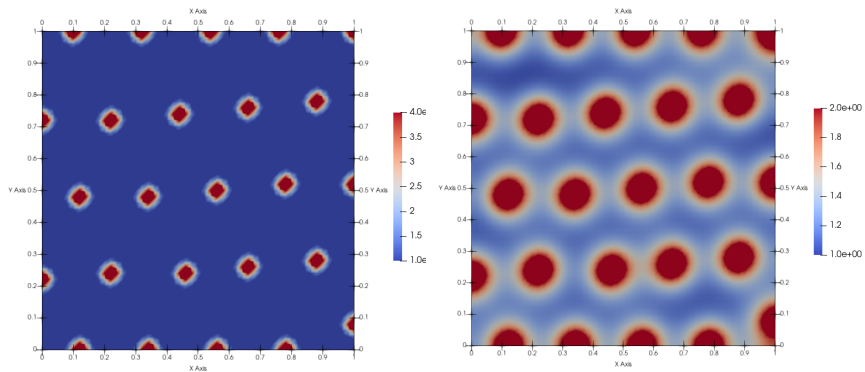


Figura 21. Formación de patrones para la sustancia  $u$  a partir de la reacción de Gierer-Meinhardt.

En la Figura 21, se presenta la evolución de los patrones de Turing generados por la reacción de Gierer-Meinhardt para la sustancia  $u$ , por medio de las imágenes (a), (b), (c) y (d), las cuales representan los instantes de tiempo  $t = 0$ , 130, 230 y 500 respectivamente, en donde  $\Delta t = 1$ . Para tiempos posteriores a  $t = 500$ , no se observó variación alguna en la simulación, lo que sugiere que la solución generada a partir del “esquema G” presenta convergencia. Para comparar los resultados obtenidos en esta simulación con los obtenidos en la referencia<sup>14</sup>, se presenta el resultado final obtenido para las sustancias  $u$  y  $v$  en la misma figura.



(a) Referencia<sup>14</sup>.



(b) Sustancia  $u$ .

(c) Sustancia  $v$ .

Figura 22. Formación de patrones para la reacción de Gierer-Meinhardt obtenida de la referencia<sup>14</sup>.

En la Figura 22 se observa la solución obtenida a partir de la referencia<sup>14</sup>, junto a las soluciones obtenidas a partir del “esquema G” para las sustancias  $u$  y  $v$ , representadas mediante las imágenes (a), (b) y (c), respectivamente. Es posible concluir que se generan los mismos patrones de Turing debido a la gran similitud de los resultados, lo que sugiere que la simulación presentada en la Figura 22 se puede considerar como válida. Vale la pena mencionar la diferencia entre las soluciones  $u$  y  $v$ , ya que a diferencia de la reacción de Schnakenberg, en este caso no se observa un posible desfase entre ellas. En cambio, los valores máximos y mínimos de las concentraciones se presentan en el mismo lugar, como se ilustra a continuación para el caso unidimensional con  $(n, m) = (4, 0)$ .

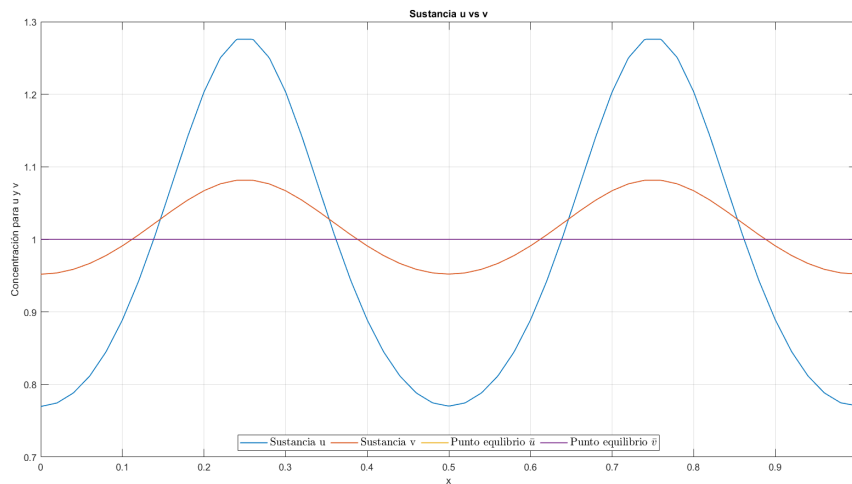


Figura 23. Solución del “esquema G” para las concentraciones  $u$  y  $v$ .

La Figura 23 muestra el comportamiento activador y autocatalítico de la sustancia  $u$ , así como el comportamiento inhibitor y autoinhibidor de la sustancia  $v$ . Como se mencionó anteriormente, esto corresponde a la configuración de signos (b) presentada en (66). A continuación se presentan algunos patrones obtenidos a partir de las ecuaciones de reacción-difusión para la reacción de Gierer-Meinhardt.

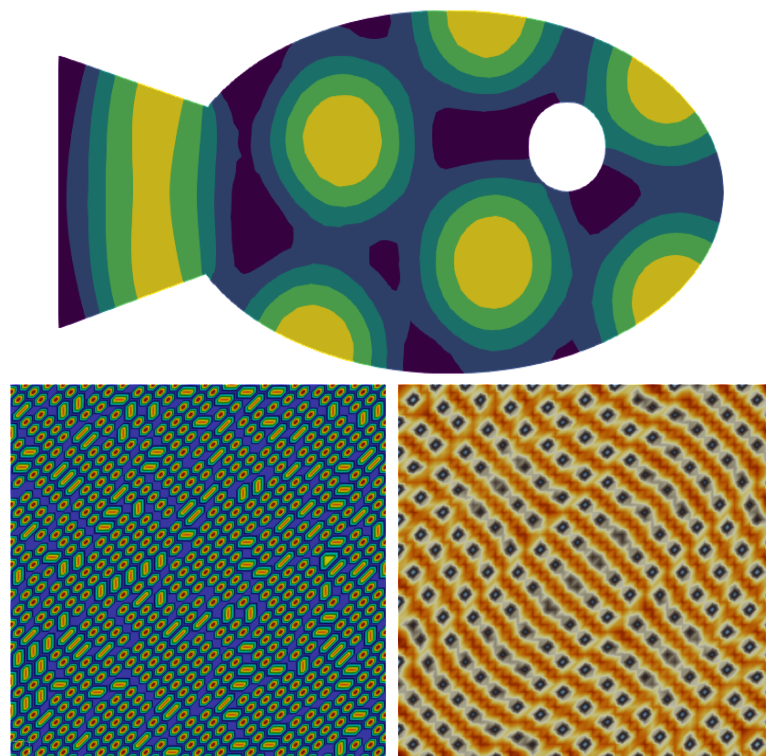


Figura 24. Formación de patrones adicionales para la reacción de Gierer-Meinhardt.

De forma similar a cómo se ha trabajado con la reacción de Schnakenberg, se pueden realizar modificaciones en la reacción de Gierer-Meinhardt(36). Un ejemplo de estas modificaciones es la inclusión del término de saturación en la reacción de Gierer-Meinhardt<sup>21</sup>, como se describe a continuación

$$\begin{cases} u_t = d_u \Delta u + \gamma \left( -bu + \frac{u^2}{v(1+pu^2)} \right), \\ v_t = d_v \Delta v + \gamma(u^2 - av), \end{cases} \quad (137)$$

en donde  $p$  gobierna el nivel de saturación de la reacción auto-catalítica. Los patrones que genera la inclusión de el termino de saturación en la reacción de Gierer-Meinhardt se presenta a continuación:

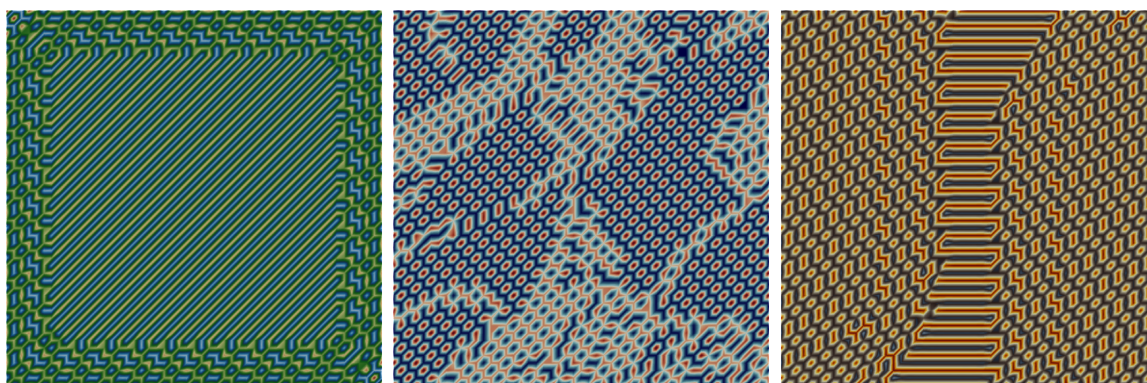


Figura 25. Formación de patrones para la reacción de Gierer-Meinhardt incluyendo el termino de saturación.

En la Figura 25 se pueden apreciar geometrías más variadas y complejas debido a la inclusión del término de saturación, como se mencionó anteriormente. Esto era de esperarse, ya que la ecuación de Gierer-Meinhardt que se ha utilizado hasta ahora es solo un caso particular de la ecuación de Gierer-Meinhardt que incluye el término de saturación ( $p = 0$ ).

---

<sup>21</sup> Song Yongli, Yang Rui y Sun Guiquan. «Pattern dynamics in a Gierer–Meinhardt model with a saturating term». En: *Applied Mathematical Modelling* 46 (2017), págs. 476-491.

### 3.3. Aproximación numérica para el sistema de reacción de Thomas

En esta sección se presenta un esquema de aproximación numérica para las soluciones débiles del sistema de reacción-difusión (38), que preserve la positividad en cada una de las variables discretas. Análogamente al caso de la reacción de Schnakenberg y Gierer-Meinhardt, se define el siguiente esquema de aproximación, que se refiere por “esquema T” para el sistema (38):

**Inicialización:** Sea  $[u_h^0, v_h^0] = [\mathbb{P}u_0, \mathbb{P}v_0] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ .

**Paso de tiempo n:** Dado el vector  $[u_h^{n-1}, v_h^{n-1}] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , computar  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$ , tal que:

$$(I) \quad (\delta_t u_h^n, w_1)^h + (\nabla u_h^n, \nabla w_1) = \gamma(a, w_1) - \gamma(u_h^n, w_1)^h - \gamma\rho\left(\frac{u_h^n v_h^n}{1+u_h^{n-1}+K(u_h^{n-1})^2}, w_1\right)^h, \quad \forall w_1 \in \mathcal{U}_h,$$

$$(II) \quad (\delta_t v_h^n, w_2)^h + d(\nabla v_h^n, \nabla w_2) = \gamma\alpha(b, w_2) - \gamma\alpha(v_h^n, w_2)^h - \gamma\rho\left(\frac{u_h^{n-1} v_h^n}{1+u_h^{n-1}+K(u_h^{n-1})^2}, w_2\right)^h, \quad \forall w_2 \in \mathcal{U}_h,$$

donde  $\delta_t u_h^n = \frac{u_h^n - u_h^{n-1}}{\Delta t}$  y  $\delta_t v_h^n = \frac{v_h^n - v_h^{n-1}}{\Delta t}$ .

**Proposición 3.4.** (Buena postura). Existe una única solución  $[u_h^n, v_h^n] \in \mathcal{U}_h \times \mathcal{U}_h$  del “esquema T”.

(Positividad). Sea  $([u_h^n, v_h^n])_{n \in \mathbb{N}}$  la sucesión generada por el “esquema T”. Entonces, si  $u_h^{n-1} \geq 0$  y  $v_h^{n-1} \geq 0$ , entonces  $u_h^n \geq 0$  y  $v_h^n \geq 0$ .

**Demostración.** La prueba es análoga a la demostración de Schnakenberg para la Proposición 3.1 y 3.2.

**3.3.1. Resultados de simulación para reacción de Thomas.** A continuación se muestran resultados de simulación para la reacción de Thomas. Los resultados de simulación para la reacción de Thomas se validan con aquellos presentados en la referencia<sup>22</sup>. Se escogen los parámetros de reacción dados por  $a = 92$ ,  $b = 64$ ,  $d = 10$ ,

<sup>22</sup> Charó Gisela Daniela. «Simulación de patrones de Turing por elementos finitos». En: *Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Hemendik eskuratua.* (2020), págs. 10-04.

$\alpha = 1.5$ ,  $\rho = 18.5$ ,  $K = 0.1$  y  $\gamma = 9$ , obteniendo el siguiente sistema para la reacción de Thomas

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + 9(92 - u - h(u, v)), \\ v_t = 10\Delta v + 9(1.5(64 - v) - h(u, v)), \\ h(u, v) = \frac{18.5uv}{1+u+0.1u^2}, \end{cases} \quad (138)$$

en donde se considera como dominio un círculo de radio igual a la unidad. Se verifica que los parámetros dados cumplan con las condiciones de estabilidad en ausencia de difusión, así como las condiciones de inestabilidad en presencia de la difusión, y por ultimo se consideran las condiciones iniciales presentadas en (129), en donde  $(\bar{u}, \bar{v}) = (9.9338, 9.2892)$ . Para ilustrar los resultados de la simulación de la reacción de Thomas se aplica la siguiente regla de “coloreo”: si  $u(x) \geq \bar{u}$ , la sustancia  $u$  se representa en rojo, en caso contrario se representa en azul. A continuación, se presentan los resultados obtenidos para la sustancia  $u$  en donde se seleccionaron los enteros  $(n, m) = (1, 0)$ .

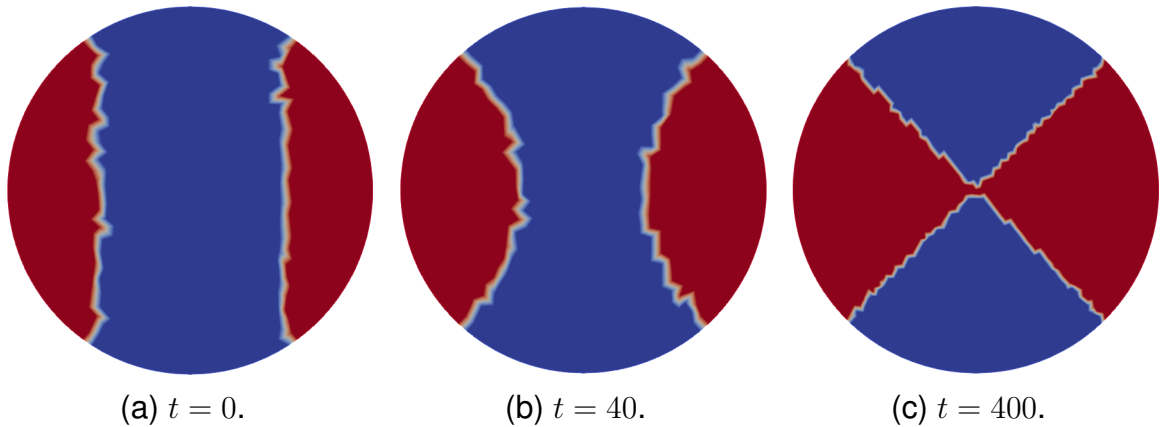


Figura 26. Formación de patrones para la sustancia  $u$  a partir de la reacción de Thomas.

En la Figura 26, se presenta la evolución de los patrones de Turing generados por la reacción de Thomas para la sustancia  $u$ , por medio de las imágenes (a), (b) y (c), las cuales representan los instantes de tiempo  $t = 0$ , 40 y 400 respectivamente, en donde  $\Delta t = 1$ . Para tiempos posteriores a  $t = 400$ , no se observó variación alguna en la simulación, lo que sugiere que el “esquema T” seleccionado para dar solución a

las ecuaciones de reacción-difusión usando la reacción de Thomas presenta convergencia. Para comparar los resultados obtenidos de simulación a partir del “esquema T” con los obtenidos en la referencia<sup>22</sup>, se presenta el resultado final obtenido para la sustancia  $u$  en la misma figura.

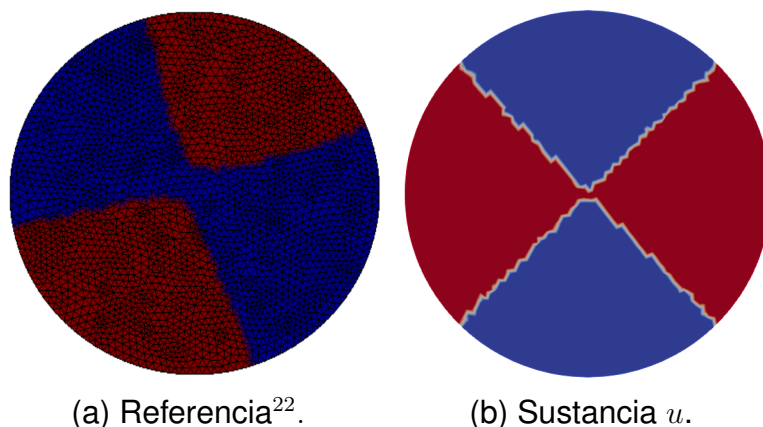


Figura 27. Formación de patrones para la reacción de Thomas obtenida de la referencia<sup>22</sup>.

En la Figura 27 se observa la solución obtenida a partir de la referencia<sup>22</sup> y la solución obtenida a partir del “esquema T” para la sustancia  $u$ , representado mediante las imágenes (a) y (b), respectivamente. Se evidencian los mismos patrones de Turing. De manera similar a lo realizado anteriormente, la configuración de signos correspondiente a la reacción de Thomas para los parámetros seleccionados es la (b), tal como se muestra en (66). Esto implica que presenta un comportamiento similar al de la reacción de Gierer-Meinhardt. A continuación se presentan algunos patrones obtenidos a partir de las ecuaciones de reacción-difusión para la reacción de Thomas.

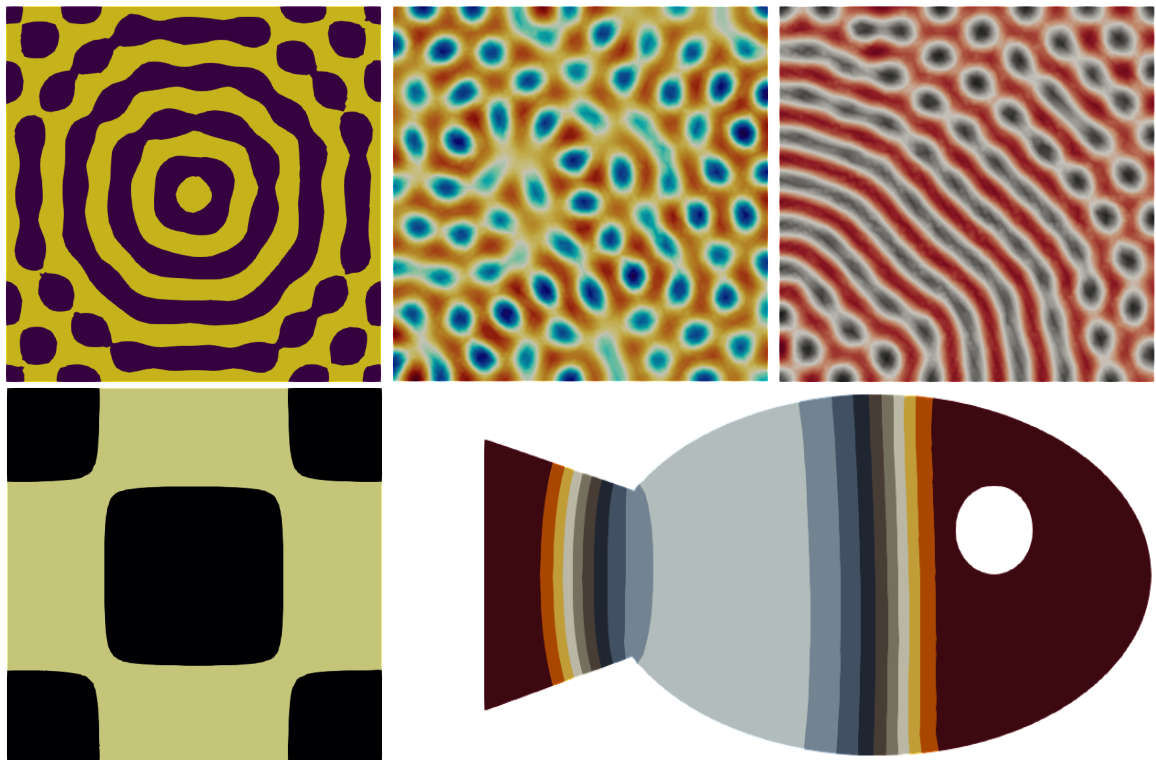


Figura 28. Formación de patrones adicionales para la reacción de Thomas.

En la Figura 28 se pueden observar diversos patrones de Turing, como por ejemplo círculos concéntricos, manchas de puntos localizadas de forma aleatoria, manchas de puntos dispuestas en forma de onda, cuadrados, y posiblemente una ilustración simplificada de lo que podrían ser las escamas de un pez.

## BIBLIOGRAFÍA

- Becker Roland, Feng Xiaobing y Prohl Andreas. «Finite element approximations of the Ericksen–Leslie model for nematic liquid crystal flow». En: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 46.4 (2008), págs. 1704-1731 (vid. pág. 61).
- Çengel Yunus-Ali. *Transferencia de calor y masa: un enfoque práctico*. McGraw-Hill, 2007 (vid. pág. 18).
- Chaidez Jesús. «Formación de patrones mediante el mecanismo de Turing». En: *Tesis* (2010) (vid. págs. 61, 63, 64, 66, 74-76).
- Charó Gisela Daniela. «Simulación de patrones de Turing por elementos finitos». En: *Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Hemendik eskuratua*. (2020), págs. 10-04 (vid. págs. 79, 81).
- Del-Castillo-Negrete Diego, Carreras Benjamin Andres y Vickie Lynch. «Front dynamics in reaction-diffusion systems with Levy flights: a fractional diffusion approach». En: *Physical Review Letters* 91.1 (2003), pág. 018302 (vid. pág. 72).
- Galdi Giovanni. *An introduction to the mathematical theory of the Navier-Stokes equations: Steady-state problems*. Springer Science & Business Media, 2011 (vid. págs. 53, 55).
- Gonpot Preethee, Collet Joseph y Sookia Noor. «Gierer-Meinhardt Model: Bifurcation Analysis and Pattern Formation». En: *Trends in Applied Sciences Research* 3 (feb. de 2008), págs. 115-128 (vid. págs. 26, 27).
- Guillén-González Francisco y Gutiérrez-Santacreu Juan Vicente. «From a cell model with active motion to a Hele–Shaw-like system: a numerical approach». En: *Numerische Mathematik* 143.1 (2019), págs. 107-137 (vid. pág. 60).

- Khudhair Hatim, Zhang Yanzhi y Fukawa Nobuyuki. «Pattern selection in the Schnakenberg equations: From normal to anomalous diffusion». En: *Numerical Methods for Partial Differential Equations* 38.6 (2022), págs. 1843-1860 (vid. pág. 72).
- Murray James. *Mathematical biology: I. An introduction*. Vol. 17. Springer Science & Business Media, 2007 (vid. págs. 26, 28).
- *Mathematical biology II: spatial models and biomedical applications*. Vol. 3. Springer-Verlag, 2001 (vid. págs. 18, 29).
- Niño-Celis Viviana, Rueda-Gómez Diego Armando y Villamizar-Roa Élder Jesús. «Convergence and positivity of finite element methods for a haptotaxis model of tumoral invasion». En: *Computers & Mathematics with Applications* 89 (2021), págs. 20-33 (vid. págs. 58, 59).
- Péter Érdi y Tóth János. *Mathematical models of chemical reactions: theory and applications of deterministic and stochastic models*. Manchester University Press, 1989 (vid. pág. 16).
- Schnakenberg Joseph. «Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour». En: *Journal of theoretical biology* 3 (1979), págs. 389-400 (vid. pág. 26).
- Skeel Robert y Berzins Martin. «A method for the spatial discretization of parabolic equations in one space variable». En: *SIAM journal on scientific and statistical computing* 11.1 (1990), págs. 1-32 (vid. pág. 66).
- Song Yongli, Yang Rui y Sun Guiquan. «Pattern dynamics in a Gierer–Meinhardt model with a saturating term». En: *Applied Mathematical Modelling* 46 (2017), págs. 476-491 (vid. pág. 78).
- Steinfeld Jeffrey, Salvadore-Francisco Joseph y Hase William. *Chemical kinetics and dynamics*. Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 1999 (vid. pág. 14).

Strogatz Steven Henry. *Nonlinear dynamics and chaos with student solutions manual: With applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. CRC press, 2018 (vid. pág. 22).

Upadhyay Santosh. *Reaction dynamics*. Springer, 2006 (vid. pág. 16).

Vanag Vladimir y Epstein Irving. «Cross-diffusion and pattern formation in reaction–diffusion systems». En: *Physical Chemistry Chemical Physics* 11.6 (2009), págs. 897-912 (vid. pág. 71).

Wang Yong et al. «Turing instability and pattern formation in a diffusive Sel'kov–Schnakenberg system». En: *Journal of Mathematical Chemistry* 61.5 (2023), págs. 1036-1062 (vid. pág. 69).

Yang Rui. «Cross-diffusion induced spatiotemporal patterns in Schnakenberg reaction–diffusion model». En: *Nonlinear Dynamics* 110.2 (2022), págs. 1753-1766 (vid. pág. 70).