

Morfogénesis

JUAN DANIEL RIVERA BAUTISTA

Licenciatura en Física, UAM-I, CBI.

Matrícula: 2123043043

Asesor: Leonardo Dagdug Lima (Profesor titular tipo "C")

Lugar: Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa

Periodo de realización: 15/11/2019 al 12/04/2020

1. Introducción

Se le conoce como morfogénesis al proceso biológico que tiene un organismo para desarrollar su forma. A lo largo de la historia, se ha buscado describir este desarrollo por medio de las matemáticas. La formación de patrones en las formas físicas de la naturaleza es un proceso complejo.

Este tema se puede ver como un sistema dinámico ya que hablamos, matemáticamente, de sistemas de ecuaciones diferenciales para poder reproducir los patrones en las formas físicas de los seres vivos. Dicho problema planteado de esa forma, fué propuesto por el matemático Alan M. Turing, él propuso un sistema de ecuaciones diferenciales parciales de reacción-difusión.

La ecuación de difusión se usa normalmente para describir el movimiento de partículas en un coloide, pero en este caso, al agregarle el término de reacción, también puede describir la difusión y reacción de varios elementos químicos. Para poder hacer un modelo matemático sobre éste fenómeno, a la ecuación de difusión para una sola dimensión le agregamos un término más:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \quad (1.1)$$

donde $u(t, x)$ es la concentración de algún químico, D_u es el coeficiente de difusión y $f(u)$ es una función que describe como crece o como decae $u(t, x)$ dependiendo de su concentración y se conoce como el término de reacción.

2. OBJETIVO

El objetivo general de este servicio social es aprender a resolver las ecuaciones de Turing de forma básica.

Como objetivos particulares se tienen:

- Desarrollar el tema de **Reacción**. Dicho tema se basa en la descripción con un modelo matemático de la reacción química que hay entre dos o más sustancias.
- Desarrollar el tema de **Difusión**. Dicho tema se desarrollará partiendo de la deducción de la ecuación de difusión y resolviéndola.
- Resolver de forma básica las ecuaciones de Turing, graficarlas, explicarlas y sacar conclusiones.

En la bibliografía vienen los textos que sirvieron como apoyo para este escrito.

3. Reacción

Comunmente se refieren a una reacción a la forma en que interactúan dos o más químicos (reacción química). Para describir el caso más sencillo, el cual es donde sólo se tiene una sola sustancia, podemos definir una ecuación diferencial donde solamente decae la concentración (la cual se definió como u).

La ecuación queda escrita de la siguiente forma:

$$\frac{du}{dt} = -u \quad (3.1)$$

Prácticamente es la ecuación de Malthus, la cual describía el crecimiento poblacional en la sociedad. En el caso del decaimiento, el término del lado derecho es negativo. También se usa para describir el caimiento radiactivo.

3.1. Descripción de un sistema de una reacción

Un ejemplo muy claro para un sistema que tenga una reacción por una interacción entre dos elementos, es el modelo depredador presa de Lotka-Volterra.

El sistema consiste en dos especies, una es la presa y la otra es el depredador de la primera. La presa sólo crecerá en ausencia de su depredador y el depredador decrecerá en ausencia de la presa. Ambas especies tendrán otro comportamiento debido a su interacción entre ellas (reacción), la presa va a disminuir en proporción a dicha interacción y el depredador aumentará en proporción también debido a la interacción.

El sistema queda descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales, ya que se está hablando de dos especies. Dicho sistema tiene la siguiente forma:

$$\frac{dx}{dt} = x\lambda - bxy \quad (3.2)$$

$$\frac{dy}{dt} = -y\mu + cyx \quad (3.3)$$

donde la función x representa a la presa y y representa al depredador. Las constantes λ , b , μ y c son las constantes de crecimiento y decaimiento.

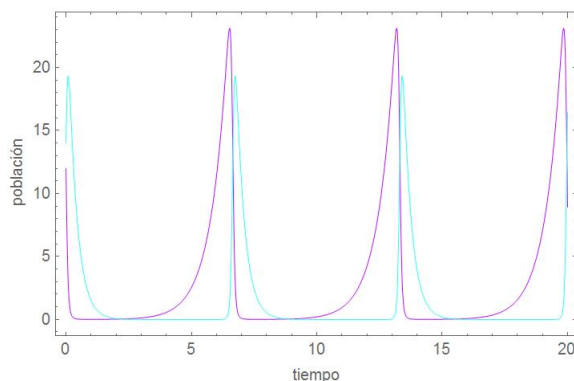


Figura 1: Los valores utilizados para resolver el sistema de ecuaciones fueron $\lambda = \frac{3}{2}$, $b = 1$, $\mu = 3$ y $c = 1$, tomando las condiciones iniciales $x_0 = 12$ y $y_0 = 14$. La curva de color azul representa la población de tiburones y la morada a la de los peces.

Dicho sistema se puede resolver de forma numérica, después de resolverlas y obtener las gráficas, se puede hacer un análisis. En este caso, se puede observar la dinámica en la figura 1. En dicha figura se logra ver como incrementa la presa cuando son pocos los depredadores y como se dispara la población de los depredadores cuando la presa está llegando a su máximo. También es muy notorio como ambas especies logran un patrón en su dinámica y ninguna llega a la extinción.

También se puede obtener información graficando el espacio fase. Se elimina t y se busca la relación entre x e y en el plano fase. Esto se puede hacer al dividir la ecuación 3.3 entre la 3.2 para obtener:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y(-\mu + cx)}{x(\lambda - by)} \quad (3.4)$$

La cual se puede resolver de la siguiente forma:

$$\int_{x_0}^x \frac{-\mu + cx}{x} dx = \int_{y_0}^y \frac{\lambda - by}{y} dy \quad (3.5)$$

$$-\mu \ln x + \mu \ln x_0 + cx - cx_0 = \lambda \ln y - \lambda \ln y_0 - by + by_0 \quad (3.6)$$

Donde todo lo que sea constante se pasa al lado derecho

$$-\mu \ln x - \lambda \ln y + cx + by = -\mu \ln x_0 - \lambda \ln y_0 + cx_0 + by_0 \quad (3.7)$$

luego, todo lo igualamos a h

$$-\mu \ln x_0 - \lambda \ln y_0 + cx_0 + by_0 = h \quad (3.8)$$

y sustituimos

$$-\mu \ln x - \lambda \ln y + cx + by = h \quad (3.9)$$

Si se hubieran resuelto de forma indeterminada las integrales, hubiera quedado una constante de integración, la cual sería h . Aquí se resolvió con límites para saber los valores de los cual depende esa constante.

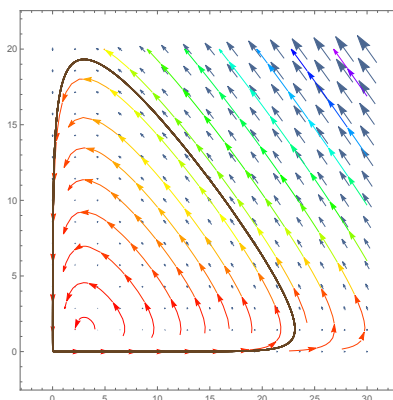


Figura 2: Espacio fase de la dinámica "depredador-presa". La curva café muestra como cambia la población en cuanto a cantidad y los vectores muestran la dirección del ciclo.

En la figura 1 se muestra la dinámica de la solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales que se plantea con 3.2 y 3.3. Se nota que al crecer la población de la presa (curva morada) también crece la población del depredador (curva azul) pero, cuando los depredadores empiezan a alcanzar su máximo, las presas comienzan a disminuir. También se puede ver como disminuye la población de los depredadores cuando la población de la presa es mínima.

Es evidente que la solución es una dinámica cíclica, la cual es más notoria en la figura 2, la cual es una gráfica del espacio fase. La curva oscura muestra los cambios de la población en dicho espacio y los vectores muestran la dirección del ciclo.

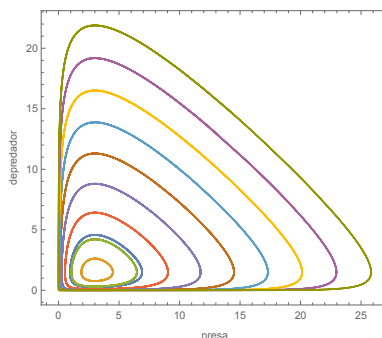


Figura 3: Dinámica poblacional en espacio fase variando la constante h .

La dinámica de las poblaciones no depende de sus condiciones iniciales. Para observar de mejor manera esto, se puede ver, en la figura 3, como se está variando h en la solución con la que se está trabajando. Hay que recordar que h depende de las condiciones iniciales.

4. Difusión

Este fenómeno se comenzó a estudiar en partículas muy pequeñas sumergidas en un fluido, a dichas partículas se les conoce como *partículas brownianas* y al fluido como *coloide*. Las partículas brownianas se mueven de forma aleatoria en el coloide debido a las colisiones que tiene con las moléculas del fluido, esto sucede gracias a la energía que pueden llegar a tener dichas moléculas. En este texto, partiremos de una concentración de partículas en un punto inicial y se analizará la difusión que pueden llegar a tener en el coloide.

4.1. Características de la difusión en una dimensión

Describiendo la situación para el análisis en una dimensión, se parte de suponer que, en un sistema coordenado, se tiene un conjunto de partículas brownianas en el origen ($x = 0$) a un tiempo inicial ($t_0 = 0$), luego se les permite moverse de forma aleatoria siguiendo las siguientes reglas:

- 1) Cada partícula browniana se moverá una longitud Δx en un tiempo Δt por cada paso que dé y ambas serán constantes. Cabe recordar que se pueden mover para cualquier lado, izquierda o derecha. Estas cantidades pueden variar ya que dependen de las características de las partículas, de la estructura del fluido y de la temperatura absoluta.
- 2) Una de las características del movimiento browniano es que se produce por el choque de la partícula browniana con las moléculas del fluido (las cuales se encuentran en equilibrio),

además de no guardar memoria de lo que hizo en el paso anterior, esto quiere decir que su siguiente paso no depende de como dió el anterior. Dicho esto se obtiene que la partícula browniana se puede mover en dos sentidos (derecha e izquierda) y se tendrá la misma probabilidad para ambos casos (1/2).

- 3) Las partículas brownianas no interactúan entre sí y cada partícula se mueve independientemente de las otras. Esto sólo se cumple a bajas densidades.

La posición de la i -ésima partícula de un conjunto de N partículas brownianas se denotará como $x_i(n)$ después de n pasos. Ahora, suponga un paso anterior a n , o sea $n - 1$, la posición se denotará como $x_i(n - 1)$, la diferencia de la posición de n con $n - 1$ es $\pm\Delta x$, eso nos da la siguiente ecuación:

$$x_i(n) - x_i(n - 1) = \pm\Delta x \quad (4.1)$$

la cual puede ser reescrita de la siguiente forma:

$$x_i(n) = x_i(n - 1) \pm \Delta x \quad (4.2)$$

Según 2), se tiene una probabilidad de 1/2 de que se mueva $+\Delta x$ y $-\Delta x$ respectivamente, eso nos indica que después de un tiempo la mitad se habrá movido una distancia $+\Delta x$ y la otra mitad $-\Delta x$. Para calcular el desplazamiento **promedio** de las partículas después de n pasos, se puede calcular sumando los desplazamientos de todas las partículas y dividiendo entre el número total de ellas, esto queda descrito en la siguiente ecuación:

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(n) \quad (4.3)$$

si sustituimos 4.3 en 4.2 y tomamos en cuenta que $\langle \pm\Delta x \rangle = 0$, obtenemos:

$$\langle x(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i(n - 1) = \langle x(n - 1) \rangle \quad (4.4)$$

La ecuación 4.4 nos describe que el promedio de las posiciones de las partículas no cambia entre pasos sucesivos al haber iniciado todo en el origen después de n pasos.

Como conclusión, para éste caso, tenemos que las partículas se distribuirán de forma simétrica respecto al origen y permanecerán así a todo tiempo.

Otra forma de describir el desplazamiento promedio de las partículas brownianas, consiste en tomar la raíz cuadrada del desplazamiento cuadrático medio, o sea $\langle x^2(n) \rangle^{1/2}$.

Primero, se calcula el cuadrado de la ecuación 4.2,

$$x_i^2(n) = x_i^2(n - 1) \pm \Delta x x_i(n - 1) + \Delta x^2 \quad (4.5)$$

ahora el resultado se sustituye en 4.3,

$$\langle x^2(n) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [x_i^2(n - 1) \pm \Delta x x_i(n - 1) + \Delta x^2] \quad (4.6)$$

del lado derecho, el segundo término da cero, por lo tanto tenemos:

$$\langle x^2(n) \rangle = \langle x_i^2(n - 1) \rangle + \Delta x^2 \quad (4.7)$$

Se puede calcular una solución particular, cuando $n = 1$, sustituimos el valor en la ecuación 4.7 y se obtiene :

$$\begin{aligned}\langle x^2(1) \rangle &= \langle x^2(1-1) \rangle + \Delta x^2 \\ \langle x^2(1) \rangle &= \langle x^2(0) \rangle + \Delta x^2 \\ \langle x^2(1) \rangle &= \Delta x^2\end{aligned}$$

Para $n = 2$:

$$\begin{aligned}\langle x^2(2) \rangle &= \langle x^2(2-1) \rangle + \Delta x^2 \\ \langle x^2(2) \rangle &= \langle x^2(1) \rangle + \Delta x^2\end{aligned}$$

sustituimos $\langle x^2(1) \rangle = \Delta x^2$

$$\begin{aligned}\langle x^2(2) \rangle &= \Delta x^2 + \Delta x^2 \\ \langle x^2(2) \rangle &= 2\Delta x^2\end{aligned}$$

De aquí se puede deducir que la solución para n desplazamientos es:

$$\langle x^2(n) \rangle = n\Delta x^2 \quad (4.8)$$

Se sabe que cada paso se realiza en un lapso de tiempo Δt , eso nos da que $n\Delta t$ es el tiempo para n pasos y se denota como $t = n\Delta t$, por lo tanto, se tiene que $n = t/\Delta t$, entonces se reescribe 4.8 de la siguiente forma:

$$\langle x^2(n) \rangle = \Delta x^2 \frac{t}{\Delta t} \quad (4.9)$$

Si se define el coeficiente de difusión como,

$$D = \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} \quad (4.10)$$

Se obtiene que

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt \quad (4.11)$$

La ecuación 4.11 describe que el desplazamiento cuadrático medio incrementa con el tiempo siendo proporcional a $2D$. De la misma ecuación se puede hacer un análisis para saber cuanto tardaría en recorrer distancias más largas. Suponga un t_1 , esto nos daría que el desplazamiento cuadrático medio es $\langle x^2(t_1) \rangle = 2Dt_1$, ahora se supondrá que ésta cantidad es igual al desplazamiento (promedio de los datos = todos los datos) ¿ Cuánto tardaría en desplazarse el doble de la distancia al tiempo t ?

Creamos la expresión matemática que lo describa, primero se despeja x

$$x(t) = (2Dt)^{1/2} \quad (4.12)$$

Se multiplica por 2 ya que queremos el doble

$$\begin{aligned} 2x(t_1) &= 2(2Dt_1)^{1/2} \\ 2x(t_1) &= (2D[(4)t_1])^{1/2} \end{aligned}$$

La última expresión nos indica que, para recorrer el doble de una distancia, se tardará el cuádruple del tiempo. La conclusión es que la partícula browniana tarda poco en recorrer distancias cortas y tarda mucho en recorrer distancias largas.

4.1.1. Ejemplo

Suponga una partícula browniana esférica en un fluido con coeficiente de difusión $D \approx 10^{-5} \text{cm}^2/\text{s}$. Calcule el tiempo que tarda en recorrer $1 \times 10^{-4} \text{cm}$ y compárelo con el tiempo de un recorrido de 1cm .

Para resolver el ejercicio usaremos la ecuación 4.12, de la cual despejamos t

$$t = \frac{(x(t))^2}{2D} \quad (4.13)$$

se sustituyen los datos y obtenemos:

$$t = \frac{(x(t))^2}{2D} = \frac{(1 \times 10^{-4} \text{cm})^2}{2(10^{-5} \text{cm}^2/\text{s})} = 5 \times 10^{-4} \text{segundos}$$

hacemos lo mismo pero ahora para 1cm

$$t = \frac{(x(t))^2}{2D} = \frac{(1 \text{cm})^2}{2(10^{-5} \text{cm}^2/\text{s})} = 5 \times 10^4 \text{segundos}$$

La diferencia es muy grande, en el primer recorrido no tarda ni un segundo, mientras que en el otro recorrido tarda casi 14 horas.

4.2. Deducción de la ecuación de difusión

Hay que estar conscientes que se debe hacer una expresión matemática que describa de una manera más general el fenómeno del movimiento browniano. Se puede suponer una partícula browniana que tiene restringido su movimiento a una sola dimensión, esto nos indica que sólo puede dar un paso a los puntos vecinos sobre eje x . También se supondrá que sólo las reglas 1) y 3) se cumplen, la 2) no ya que se hará esto de forma más general.

Se denotará como a a la probabilidad de que la partícula pase del punto $j + 1$ al j y se denotará como b a la posibilidad de que pase del punto $j - 1$ al j , donde a y b son constantes y cumplen con la condición de $a + b = 1$. Se define como $\phi_n(j)$ a la probabilidad de que la partícula se encuentre en el punto j al n -ésimo paso. La multiplicación de la probabilidad de que la partícula browniana esté en $j + 1$ con la probabilidad de que se mueva a la izquierda ($a\phi_n(j + 1)$) más la multiplicación de la probabilidad de que esté en $j - 1$ con la probabilidad que se mueva a la derecha ($b\phi_n(j - 1)$), nos dice que la partícula estará en j en el paso $n + 1$. Dadas estas condiciones, la expresión matemática queda de la siguiente forma:

$$\phi_{n+1}(j) = a\phi_n(j + 1) + b\phi_n(j - 1) \quad (4.14)$$

La ecuación indica que el punto de partida puede ser $j + 1$ o $j - 1$ y también indica que siempre llegará al punto j si partes de los mencionados.

Se calculó las posibles posiciones de 10 partículas bajo éstas condiciones. Las curvas representan el camino que siguió la partícula a lo largo del tiempo. Para hacer la figura 4 se usó el método estocástico el cual consiste en iterar.

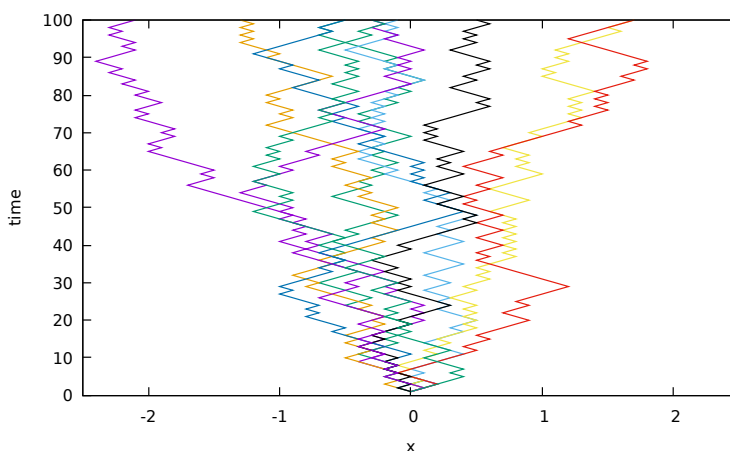


Figura 4: Aquí se ilustra el movimiento browniano en una dimensión. Cada línea describe el movimiento en el eje "X" de cada partícula. La gráfica fué construida iterando y repitiendo el proceso 10 veces. Es evidente una tendencia central.

Para pasar de lo discreto a lo continuo, se debe hacer un cambio de variable, se pasará de las variables discretas n y j a las variables continuas t y x . Para poder hacer ese cambio, se debe tomar en cuenta que el tiempo que le toma a la partícula browniana moverse de un punto a otro es de Δt y la distancia entre estos puntos es de Δx , reescribiendo 4.14 queda:

$$\phi(j\Delta x, (n + 1)\Delta t) = a\phi((j + 1)\Delta x, n\Delta t) + b\phi((j - 1)\Delta x, n\Delta t) \quad (4.15)$$

dadas las condiciones mencionadas, queda que $t = n\Delta t$ y $x = j\Delta x$, con esto podemos reescribir 4.15 y queda de la siguiente forma:

$$\phi(x, t + \Delta t) = a\phi(x + \Delta x, t) + b\phi(x - \Delta x, t) \quad (4.16)$$

donde $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$

Se hace un desarrollo en serie de Taylor del elemento de la parte izquierda de la ecuación,

$$\phi(x, t + \Delta t) \approx \phi(x, t) + \Delta t \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} + \dots$$

también hacemos el desarrollo de Taylor de los elementos del lado derecho,

$$\phi(x \pm \Delta x) \approx \phi(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} + \dots$$

Sustituimos todo en 4.16 y se obtiene:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = (a - b) \frac{\Delta x}{\Delta t} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} + \dots \quad (4.17)$$

Si se toma en cuenta el caso límite cuando Δx y Δt tienden a cero y también consideramos las definiciones:

$$D \equiv \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \quad (4.18)$$

$$v \equiv - \lim_{\Delta x, \Delta t \rightarrow 0} (a - b) \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (4.19)$$

entonces podemos reescribir 4.17 de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \quad (4.20)$$

Como resultado se obtuvo la ecuación de difusión con arrastre. El segundo término del lado derecho describe el arrastre y es consecuencia de que $a \neq b$, eso quiere decir que es más probable que se mueva en alguna dirección. Un caso particular es cuando $a = b$, eso recupera la regla 2) y hace que $v = 0$, por lo tanto recuperamos la ecuación de Fick y la ecuación 4.20 queda como:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \quad (4.21)$$

La solución a esta ecuación nos dice la probabilidad de encontrar a la partícula en cada posición a todo tiempo. Más adelante se resolverá con detalle, pero en la figura 5 se puede observar que es más probable encontrar a la partícula cerca de donde partió, a esto se le llama probabilidad bajo el enfoque de frecuencia relativa, ya que se calcula la probabilidad con los resultados del experimento o, como en este caso, alguna simulación.

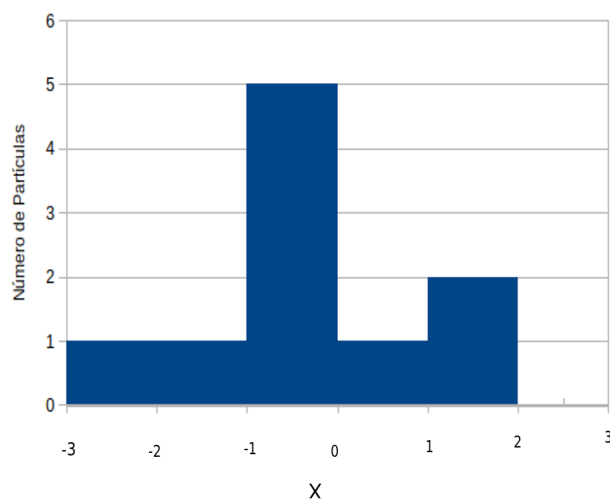


Figura 5: Este histograma está hecho con los mismo resultados de la figura 4 y se puede observar una tendencia central, o sea, una mayor concentración en el origen, lugar del cual parten las partículas brownianas simuladas.

4.3. Solución general de la ecuación de difusión

Una forma de resolver la ecuación de difusión sin condiciones a la frontera es usando la transformada de Fourier. Esto reduce una ecuación de derivadas parciales a una de ecuación diferencial ordinaria que sólo depende del tiempo. La definición de la transformada de Fourier de la función $f(\vec{r})$ se define como:

$$\tilde{f}(\omega) \equiv \tilde{F}\{f(\vec{r})\} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f(\vec{r})e^{-i\omega\vec{r}} d\vec{r} \quad (4.22)$$

Para hacerlo de la manera más general, se le aplicará la transformada de fourier a la ecuación 4.20 que es la ecuación de difusión con arrastre.

$$\tilde{F}\left\{\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t}\right\} = \tilde{F}\left\{D\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2}\right\} - \tilde{F}\left\{v\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right\} \quad (4.23)$$

Los operadores integral y diferencial conmutan, eso hace que el término de la izquierda se pueda reescribir de la siguiente manera:

$$\tilde{F}\left\{\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t}\right\} = \frac{\partial}{\partial t}\left(\tilde{F}\{\phi(x,t)\}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\phi(x,t)e^{-i\omega x}dx\right) \quad (4.24)$$

La integral que aparece en 4.24 es la definición de la transformada de la función,

$$\tilde{F}\left\{\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t}\right\} = \frac{\partial\tilde{\phi}(\omega,t)}{\partial t} \quad (4.25)$$

Ahora, del lado derecho, se le aplica también la transformada de fourier al segundo término,

$$\tilde{F}\left\{v\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right\} = v\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}e^{-i\omega x}dx \quad (4.26)$$

Se calculará por partes la integral, dicho método se describe de la siguiente forma:

$$\int u dv = uv - \int v du$$

donde $u = e^{-i\omega x}$ y $dv = \frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}dx$, lo cual da como resultado:

$$\tilde{F}\left\{v\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right\} = v\left[e^{-i\omega x}\phi(x,t)\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}i\omega e^{-i\omega x}\phi(x,t)dx\right] \quad (4.27)$$

si $e^{-i\omega x}\phi(x,t)\Big|_{-\infty}^{\infty} \rightarrow 0$, entonces :

$$\begin{aligned} \tilde{F}\left\{v\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right\} &= -v\int_{-\infty}^{\infty}i\omega e^{-i\omega x}\phi(x,t)dx \\ &= -i\omega v\int_{-\infty}^{\infty}i\omega e^{-i\omega x}\phi(x,t)dx \end{aligned}$$

Lo anterior da como resultado:

$$\tilde{F}\left\{v\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right\} = -i\omega v\tilde{\phi}(\omega,t) \quad (4.28)$$

Se repite el procedimiento con el primer término del lado derecho de la ecuación 4.23 dos veces, lo que dará un factor de $D\omega^2 i^2 = -\omega^2 D$ y por lo tanto se obtiene:

$$\tilde{F} \left\{ D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \right\} = -\omega^2 D \tilde{\phi}(\omega, t) \quad (4.29)$$

Al sustituir 4.28 y 4.29 en la ecuación 4.23, se obtiene como ecuación final:

$$\frac{\partial \tilde{\phi}(\omega, t)}{\partial t} = (i\omega v - D\omega^2) \tilde{\phi}(\omega, t) \quad (4.30)$$

Ahora se resolverá separando variables.

$$\int_{\tilde{\phi}_0}^{\tilde{\phi}(\omega, t)} \frac{1}{\tilde{\phi}(\omega, t)} \partial \tilde{\phi}(\omega, t) = (i\omega v - D\omega^2) \partial t$$

$$\ln \left(\frac{\tilde{\phi}(\omega, t)}{\tilde{\phi}_0} \right) = (i\omega v - D\omega^2) t$$

La cual se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\tilde{\phi}(\omega, t) = \tilde{\phi}_0 e^{(i\omega v - D\omega^2)t} \quad (4.31)$$

Ahora se tiene que calcular la solución aplicando la transformada de Fourier inversa, la cual queda descrita por :

$$f(\vec{r}) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) e^{i\omega \vec{r}} d\omega \quad (4.32)$$

Para llegar a la solución general sólo faltaría calcular la siguiente integral:

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}_0 e^{(i\omega v - D\omega^2)t} e^{i\omega x} d\omega \quad (4.33)$$

Es evidente que la integral debe ser evaluada en el plano de los complejos, pero primero debemos manipular un poco la expresión del lado derecho de 4.33.

Primero se suman los exponentes, el resultado se puede reescribir, primero se factoriza $x - vt$, luego se factoriza $-Dt$, se completa el cuadrado de la expresión y se obtiene:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{2\pi} e^{Dt \left[\frac{i}{2D\bar{i}}(x-vt) \right]^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[\omega + \frac{i}{2D\bar{i}}(x-vt) \right]^2} d\omega \quad (4.34)$$

Si se reescribe el primer factor queda:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{2\pi} e^{\frac{-(x-vt)}{4D\bar{i}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt \left[\omega + \frac{i}{2D\bar{i}}(x-vt) \right]^2} d\omega \quad (4.35)$$

Se hace el siguiente cambio de variable $z = \omega + \frac{i}{2D\bar{i}}(x - vt)$ y la expresión 4.35 queda de la siguiente forma:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{2\pi} e^{\frac{-(x-vt)}{4D\bar{i}}} \int_{-\infty + \frac{i}{2D\bar{i}}(x-vt)}^{\infty + \frac{i}{2D\bar{i}}(x-vt)} e^{-Dt z^2} dz \quad (4.36)$$

Ahora, para calcular la integral se tomara en cuenta el teorema de Cauchy que establece que la integral de línea de alguna función de variable compleja sobre una trayectoria cerrada se anula si dicha función es analítica de $z = x + iy$, o sea:

$$\oint_C f(z) dz = 0 \quad (4.37)$$

Al hallar la trayectoria adecuada y aplicando el teorema de Cauchy, se llega a la siguiente expresión:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{2\pi} e^{-\frac{(x-vt)}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-Dt^2} d\omega \quad (4.38)$$

Resolviendo la integral, nos da la solución general:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-(x-vt)^2/4Dt} \quad (4.39)$$

En este caso, no utilizaremos la ecuación con arrastre, eso quiere decir que $vt = 0$, lo que nos daría como ecuación final:

$$\phi(x, t) = \frac{\phi_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-x^2/4Dt} \quad (4.40)$$

La expresión 4.40 es la función que describe la difusión en una dimensión, donde D es la constante de difusión y t el tiempo.

5. Una combinación de difusión y reacción

Para hacer un modelo matemático que describa algún fenómeno, se debe observar lo que sucede alrededor de éste. Tomando en cuenta el fenómeno de formación de patrones, se observa que esto depende de las diversas concentraciones de químicos y de la forma que reaccionan entre sí.

Al querer hacer un modelo para describir como crece un embrión formando células que terminan siendo organos se optó por hacer uno de difusión y reacción. A la ecuación de difusión se le agregan dos términos, uno que describe como se produce y otro que describe como se degrada.

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\tau} \phi(x, t) + \rho \phi(x, t) \quad (5.1)$$

Donde τ y ρ son la tasa de degradación y la tasa de síntesis respectivamente. El modelo más simple es:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\tau} \phi(x, t) \quad (5.2)$$

La solución para un gradiente estable se calcula haciendo cero la parte de la derivada temporal y luego se calcula la ecuación diferencial que queda del lado derecho,

$$D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\tau} \phi(x, t) = 0 \quad (5.3)$$

Se propone una función que sea la suma de dos exponenciales,

$$\phi(x, t) = C_1 e^{x\alpha} + C_2 e^{-x\alpha} \quad (5.4)$$

Ahora sólo se tiene que calcular la constante α , primero se calculan las derivadas:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (C_1 e^{x\alpha}) = C_1 \alpha^2 e^{x\alpha}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} (C_2 e^{-x\alpha}) = C_2 \alpha^2 e^{-x\alpha}$$

Si sustituyen las derivadas en la ecuación 5.3, quedará la siguiente expresión:

$$D\tau (C_1 \alpha^2 e^{x\alpha} + C_2 \alpha^2 e^{-x\alpha}) - (C_1 e^{x\alpha} + C_2 e^{-x\alpha}) = 0 \quad (5.5)$$

Multiplicamos todo por $\frac{1}{C_2} e^{x\alpha}$ y factorizamos,

$$D\tau \frac{C_1}{C_2} \alpha^2 e^{2x\alpha} + D\tau \alpha^2 - \frac{C_1}{C_2} e^{2x\alpha} - 1 = 0$$

$$\frac{C_1}{C_2} e^{2x\alpha} (D\tau \alpha^2 - 1) + (D\tau \alpha^2 - 1) = 0$$

$$(D\tau \alpha^2 - 1) \left(\frac{C_1}{C_2} e^{2x\alpha} + 1 \right) = 0$$

$$(D\tau \alpha^2 - 1) = 0$$

$$D\tau \alpha^2 = 1$$

Al despejar α queda:

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{D\tau}} \quad (5.6)$$

Por lo tanto, la solución es:

$$\phi(x, t) = C_1 e^{\frac{x}{\sqrt{D\tau}}} + C_2 e^{-\frac{x}{\sqrt{D\tau}}} \quad (5.7)$$

La ecuación 5.7 es la solución general, pero se deben poner condiciones a la frontera para tener una solución más particular. Para éste caso, las condiciones a la frontera son dos:

- En el origen debe haber la mayor concentración y debe ser constante ($\phi(0, t) = C_0$)
- En el infinito debe ser cero ($\phi(L, t) = 0$ cuando $L \rightarrow \infty$)

El primer término de la ecuación 5.7 se hace cero por la segunda condición, ya que cuando $L \rightarrow \infty$ sólo el segundo término se hace cero. Para la primera condición se sustituye $x = 0$ y se despeja C_2 ,

$$\phi(0, t) = C_2 e^{-\frac{0}{\sqrt{D\tau}}} = C_0$$

$$\phi(0, t) = C_2 = C_0$$

por lo tanto la solución para las condiciones dadas es:

$$\phi(x, t) = C_0 e^{-\frac{x}{\sqrt{D\tau}}} \quad (5.8)$$

Se usará la ecuación de difusión junto con la parte de reacción dependiendo del tipo de fenómeno que se quiera describir, en éste caso, es lo más conveniente para hacer un modelo biológico.

5.1. Ecuaciones de reacción-difusión y dominios espaciales

Para estudiar la formación de patrones, primero hay que estudiar las propiedades espaciales de las ecuaciones de reacción-difusión. Para hacer eso se estudiará la supervivencia de una población de fitoplancton en un cuerpo de agua. El fitoplancton puede vivir en el agua bajo ciertas condiciones, si estas no se cumplen morirá. Se supondrá que la parte donde se encuentra el fitoplancton está rodeada de cuerpos de agua donde no se cumplen las condiciones. El objetivo es ver si hay un tamaño de masa de agua mínima donde nuestra población sobrevivirá.

Para resolver el caso más sencillo, que es el de una dimensión, se supondrá que se tiene a la población en un pequeño tubo y se pondrán las condiciones de frontera. La primera es que la concentración poblacional p es constante cuando $t = 0$ y la segunda será que en cuanto toque los bordes se destruirá. Las condiciones se expresan en forma matemática de la siguiente forma:

$$\phi(0, t) = 0 = \phi(L, t) \quad (5.9)$$

$$\phi(x, 0) = C_0 \quad (5.10)$$

Primero, una de las condiciones es que el fitoplancton no puede nadar, sólo se moverá por medio de la difusión, si se tomara en cuenta que el fitoplancton no crece ni decrece su población, la solución sería la ecuación de difusión,

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \quad (5.11)$$

pero se tomará en cuenta que la población crece, eso hace que se tenga que agregar un nuevo término, uno de reacción que describa el crecimiento poblacional. Por lo tanto, la nueva ecuación que describe el fenómeno es:

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} + K\phi(x, t) \quad (5.12)$$

donde K es la constante de crecimiento.

Una forma de resolver ésta ecuación diferencial, es proponiendo una solución de la siguiente forma:

$$\phi(x, t) = f(x, t)e^{Kt} \quad (5.13)$$

Al sustituir 5.13 en 5.12 se obtiene lo siguiente:

$$\frac{\partial f e^{Kt}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f e^{Kt}}{\partial x^2} + K f e^{Kt} \quad (5.14)$$

Se calculan las derivadas con la siguiente notación: un punto arriba de la función es derivada temporal (\dot{f}) y una comilla en la parte superior derecha de la función significa derivada espacial (f').

$$\begin{aligned} \dot{f} e^{Kt} + K f e^{Kt} &= D f'' e^{Kt} + K f e^{Kt} \\ \dot{f} e^{Kt} &= D f'' e^{Kt} \\ \dot{f} &= D f'' \end{aligned}$$

Por último se reescribe para hacer más notorio que la función f debe ser solución de la ecuación de difusión,

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (5.15)$$

Proponemos una solución de la forma: $f(x, t) = \chi(x)\tau(t)$. La ecuación diferencial resultante se resuelve por separación de variables.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi \tau}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 \chi \tau}{\partial x^2} \\ \frac{1}{D\tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} &= \frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} \end{aligned}$$

Igualamos a una constante la parte izquierda de la ecuación y resolvemos,

$$\begin{aligned} \frac{1}{D\tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} &= -\lambda \\ \frac{\partial \tau}{\partial t} &= -\lambda D\tau \\ \int \frac{\partial \tau}{\tau} &= \int -\lambda D dt \\ \ln(\tau) &= -\lambda D t \end{aligned}$$

Por último, la primera solución es:

$$\tau = e^{-\lambda D t} \quad (5.16)$$

Ahora hacemos lo mismo con la parte derecha de la ecuación,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} &= -\lambda \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} &= -\lambda \chi \end{aligned}$$

Entonces proponemos una solución de una suma de senos y cosenos,

$$\chi = A \cos(\alpha x) + B \sin(\alpha x) \quad (5.17)$$

Al calcular las derivadas se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi}{\partial x} &= -A \alpha \sin(\alpha x) + B \alpha \cos(\alpha x) \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} &= -A \alpha^2 \cos(\alpha x) - B \alpha^2 \sin(\alpha x) \\ \frac{\partial^2 \chi}{\partial x^2} &= -\alpha^2 \chi \end{aligned}$$

Sustituyendo se obtiene la siguiente igualdad:

$$-\alpha^2 (A \cos(\alpha x) + B \operatorname{sen}(\alpha x)) = -\lambda (A \cos(\alpha x) + B \operatorname{sen}(\alpha x))$$

$$\alpha^2 = \lambda$$

Ahora se establecen las condiciones de frontera. Primero, la función debe valer cero cuando $x = 0$, en ese punto el coseno se hace uno y el seno se hace cero, eso nos da que $A = 0$.

Ahora, cuando $x = L$ también debe hacerse cero la función,

$$\operatorname{sen}(\alpha L) = 0$$

El seno se hace cero sólo en múltiplos de π , entonces el argumento deben ser múltiplos de π ,

$$\begin{aligned} \alpha L &= n\pi \\ \alpha &= \frac{n\pi}{L} \end{aligned}$$

Para $n = 1, 2, 3, \dots$

Por último, usando técnicas de sumas de Fourier, nuestra solución queda de la forma:

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-\left(\frac{n^2\pi^2 D}{L^2}\right)t} \quad (5.18)$$

donde la constante se calcula de la siguiente forma:

$$B_n = \frac{2}{L} \int_0^L C_0 \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \quad (5.19)$$

donde C_0 es la concentración inicial, al sustituir esto en la solución inicial propuesta se obtiene:

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{\left(K - \frac{n^2\pi^2 D}{L^2}\right)t} \quad (5.20)$$

De la ecuación 5.12 se hace un análisis para el estado estacionario, la forma en que crece o decrece viene descrito en el argumento de la exponencial.

Si dicho argumento es positivo, entonces tendremos un crecimiento, pero si se tiene un argumento negadito, el fitoplancton decrece, ambas cosas pueden pasar cuando transcurre el tiempo. Cuando dicho argumento sea cero, entonces tendremos el estado estacionario, eso quiere decir que:

$$\begin{aligned} K - \frac{n^2\pi^2 D}{L_c^2} &= 0 \\ K &= \frac{n^2\pi^2 D}{L_c^2} \\ L_c &= \sqrt{\frac{n^2\pi^2 D}{K}} \\ L_c &= \pi \sqrt{\frac{D}{K}} \end{aligned}$$

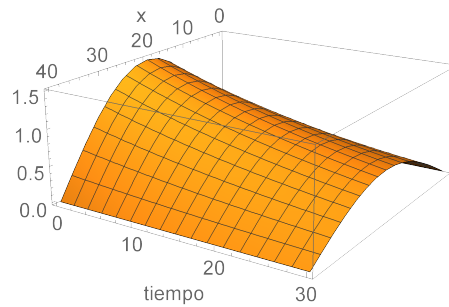


Figura 6: En ésta figura se puede apreciar todas las posibles combinaciones cuando tenemos que $L < L_c$, con $n = 1$.

para $n = 1$ y se denota a la L crítica como L_c , ya que el crecimiento o decrecimiento puede tomar como referencia a ésta longitud. Si $L > L_c$ (figura 7), entonces la población crecerá pero, si $L < L_c$ (figura 6), entonces la población decrecerá. Otro comportamiento descrito es, si $L > L_c$, el término de la reacción (K) domina la ecuación pero, si $L < L_c$, entonces dominará el término de la difusión (D). Si $L = L_c$ entonces están balanceadas la parte de difusión y de reacción.

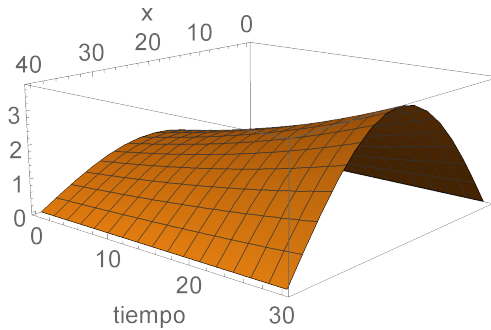


Figura 7: Aquí se ilustran todas las posibles combinaciones cuando $L > L_c$, con $n = 1$.

Para lograr un comportamiento diferente, se tuvo que poner una diferencia entre las partes del argumento de la exponencial de 30 unidades, de lo contrario muestran un comportamiento muy similar, de hecho sólo se observa el comportamiento de la función seno como en la figura 8.

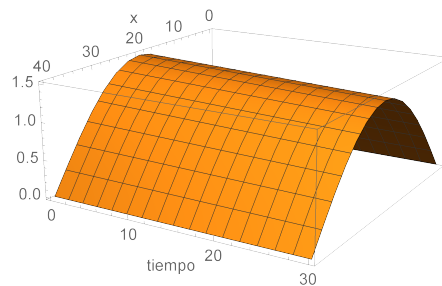


Figura 8

6. MORFOGÉNESIS

La naturaleza puede presumir de simetría en algunas cosas, en otras, puede mostrar patrones que parecen hechos al azar, como las rayas de una cebra o de un tigre, las líneas en los peces o los patrones que tienen algunas conchas de mar pero, en la naturaleza, todo tiene una explicación y la ciencia se dedica a buscarla. Mientras se sigue investigando como el ADN puede tener la información sobre la forma de los animales, se pudieron hacer expresiones matemáticas que logran describir los patrones en algunas características.



Figura 9: En esta fotografía se pueden ver los patrones que tienen peces.

A lo largo de la historia, las matemáticas han sido un apoyo en las ciencias para poder describir los fenómenos, desde Química hasta Economía, todos han avanzado de forma eficiente cuando se apoyan en ellas. La Biología no es la excepción, hay modelos matemáticos que ayudan a describir fenómenos biológicos.

Se le conoce como morfogénesis al proceso biológico que tiene un organismo para desarrollar su forma. Antes no se sabía como se podía tener patrones no simétricos en las pieles de los animales, entonces a Alan Turing se le ocurrió como describir ese fenómeno que carecía de simetría.



Figura 10: Esta es una foto de una cebra donde se puede ver que los patrones de su piel no tienen simetría

Al hablar de morfogénesis, es inevitable hablar sobre Alan Turing, ya que él puso las bases para los modelos matemáticos que describen a éste fenómeno.

Alan Turing nació en Reino Unido de Gran Bretaña el 23 de Junio de 1912 y, entre varias cosas, se le considera uno de los padres de la ciencia de la computación. Gracias a sus conocimientos, trabajó decifrando códigos de los nazis en la segunda guerra mundial, también tiene como aporte la máquina de Turing y el test de Turing (éste último es sobre inteligencia artificial) pero, en éste texto, se verá más a fondo su trabajo en la Biología teórica.

En el artículo llamado «The chemical basis of morphogenesis», Turing habla de como se crean los patrones en los animales en un desarrollo embrionario. Las manchas en los animales parten de un pre-patrón que luego es un patrón de pigmentos y proteínas. En dicho artículo, argumenta que esto se debe a una reacción entre sustancias químicas a las cuales llamó «morfógenos», menciona que al interactuar las sustancias al final terminan siendo piel en el animal, entonces los patrones son el resultado de la interacción entre ellas. También dice que la simetría se pierde (hay inestabilidad) en el momento que hay difusión. Esto da como resultado un modelo matemático de reacción y difusión.

7. INESTABILIDADES DE TURING

Turing propone que el modelo reacción-difusión es el que puede describir patrones, argumentando que la parte de difusión es la que causa inestabilidad. Primero se van a considerar dos sustancias químicas, de las cuales su concentración quedará descrita por las funciones $v(\vec{x}, t)$ y $u(\vec{x}, t)$. La forma en que interactúan es representada por las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$. El sistema queda descrito por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v) \quad (7.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v) \quad (7.2)$$

Donde D_u y D_v son las constantes de difusión de cada sustancia.

Se tienen dos definiciones:

- Los patrones son estables, el tiempo es independiente y soluciones espacialmente heterogéneas
- Una inestabilidad de Turing ocurre cuando el estado estacionario es estable en ausencia de difusión e inestable cuando hay difusión.

Habrán estabilidad cuando la difusión sea cero, o sea cuando no hay difusión o cuando tengan la misma velocidad de difusión las dos sustancias. Habrá inestabilidad cuando se tenga difusión, de tal manera que cualquier pequeña perturbación fuera del equilibrio provocará un cambio drástico en los patrones que se formarán.

Se asumirá un estado estacionario uniforme donde la concentración de las sustancias será (u_0, v_0) , en esos valores las funciones que describen la interacción serán cero ($f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$).

Se propondrán las funciones de las concentraciones de las sustancias químicas, donde para la primera será $u(x, t) = u_0 + \tilde{u}$ y para la segunda será $v(x, t) = v_0 + \tilde{v}$. Donde \tilde{u} y \tilde{v} son pequeñas. Se hará un desarrollo de Taylor para las funciones que describen las reacciones químicas. El método para dicho desarrollo de una función, a primer orden, de dos variables es el siguiente:

$$h(\vec{z}) \approx h(\vec{a}) + \frac{\partial h(\vec{a})}{\partial x} (x - a_1) + \frac{\partial h(\vec{a})}{\partial y} (y - a_2) \quad (7.3)$$

donde $\vec{z} = (x, y)$ y se calcula en el punto $\vec{a} = (a_1, a_2)$.

Al hacer los desarrollos se obtiene:

$$f(u, v) \approx f(u_0, v_0) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial u}(u - u_0) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial v}(v - v_0)$$

$$f(u, v) \approx f(u_0, v_0) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial u}(u_0 + \tilde{u} - u_0) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial v}(v_0 + \tilde{v} - v_0)$$

por lo tanto para f se tiene:

$$f(u, v) \approx f(u_0, v_0) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial u}(\tilde{u}) + \frac{\partial f(u_0, v_0)}{\partial v}(\tilde{v}) \quad (7.4)$$

Se hace el otro desarrollo de Taylor,

$$g(u, v) \approx g(u_0, v_0) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial u}(u - u_0) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial v}(v - v_0)$$

$$g(u, v) \approx g(u_0, v_0) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial u}(u_0 + \tilde{u} - u_0) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial v}(v_0 + \tilde{v} - v_0)$$

por lo tanto para g se tiene:

$$g(u, v) \approx g(u_0, v_0) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial u}(\tilde{u}) + \frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial v}(\tilde{v}) \quad (7.5)$$

Por comodidad se cambiará la notación, sólo se escribirá la función que describe la interacción, se omitirá la dependencias y como subíndice estará la variable respecto a la cual se derivó . Por ejemplo $\frac{\partial g(u_0, v_0)}{\partial v}(\tilde{v}) = g_v \tilde{v}$. Retomando las soluciones que se propusieron y que $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$, reescribimos 7.1 y 7.2,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = f_u \tilde{u} + f_v \tilde{v} + \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial x^2} \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = g_u \tilde{u} + g_v \tilde{v} + \frac{\partial^2 \tilde{v}}{\partial x^2} \quad (7.7)$$

Los pasos anteriores hicieron que ahora las ecuaciones 7.6 y 7.7 sean lineales El sistema de ecuaciones diferenciales planteado se puede reescribir de forma matricial con la siguiente notación:

$$J_1 = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

$$D = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

Con ambas expresiones, se pueden reescribir las ecuaciones 7.6 y 7.7 en una sola:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} = \left(D \frac{\partial^2}{\partial x^2} + J_1 \right) \begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{v} \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

Para los estados estacionarios se necesita calcular la traza del Jacobiano $\tau = \lambda_1 + \lambda_2$ y el determinante $\Delta = \lambda_1 \cdot \lambda_2$, donde $\lambda_{1,2}$ son los eigenvalores de J_1 y también se requiere que $Re(\lambda_{1,2}) < 0$. Una calculado todo se necesitan las siguiente condiciones para tener estabilidad:

$$\tau = f_u + g_v < 0 \quad (7.11)$$

$$\Delta = f_u g_v - f_v g_u > 0 \quad (7.12)$$

Como la solución es independiente del tiempo y espacialmente heterogénea, asumimos las siguientes soluciones:

$$\delta\tilde{u}(x, t) = A(t)e^{iqx} \quad (7.13)$$

$$\delta\tilde{v}(x, t) = B(t)e^{iqx} \quad (7.14)$$

donde q es el número de onda del modo de Fourier. Al reescribir los terminos de difusión quedan de la siguiente forma:

$$D_u \frac{\partial^2 A(t)e^{iqx}}{\partial x^2} = -q^2 D_u A(t)e^{iqx} \quad (7.15)$$

$$D_v \frac{\partial^2 B(t)e^{iqx}}{\partial x^2} = -q^2 D_v B(t)e^{iqx} \quad (7.16)$$

Ahora se reescribe el sistema perturbado:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta\tilde{u} \\ \delta\tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_u - q^2 D_u & f_v \\ g_u & g_v - q^2 D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\tilde{u} \\ \delta\tilde{v} \end{pmatrix} \quad (7.17)$$

Ahora se tomarán en cuenta las condiciones para que la ecuación 7.17 sea inestable,

$$\tau = f_u + g_v - q^2(D_u + D_v) > 0 \quad (7.18)$$

$$\Delta = (f_u - q^2 D_u)(g_v - q^2 D_v) - f_v g_u < 0 \quad (7.19)$$

Basta con que se cumpla una de las condiciones anteriores para tener inestabilidad, pero 7.18 es imposible porque D_u y D_v son positivas y porque se cumple la condición 7.11. Eso hace que la q^2 quede definida por la segunda condición 12. Usando ésa ecuación, se puede calcular la q_{min} que es el valor mínimo para generar inestabilidad.

Desarrollamos,

$$f_u g_v - q_{min}^2 D_v f_u - q_{min}^2 D_u g_v + (q_{min}^2)^2 D_u D_v - f_v g_u < 0 \quad (7.20)$$

Lo que está de rojo es una función cuadrática tomando como base q^2 pero se tiene que completar el trinomio cuadrado perfecto. Ahora se trabajará sólo con la parte que se resaltó en rojo, primero se agruparán términos semejantes y se va a dividir entre la parte que es constante que multiplica al término cuadrático:

$$(q_{min}^2)^2 D_u D_v - q_{min}^2 (D_v f_u + D_u g_v) + (q_{min}^2)^2 - q_{min}^2 \left(\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{D_u D_v} \right)$$

Se acompleta el trinomio cuadrado perfecto y se factoriza:

$$(q_{min}^2)^2 - q_{min}^2 \left(\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{D_u D_v} \right) + \left(-\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{2D_u D_v} \right)^2 - \left(-\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{2D_u D_v} \right)^2$$

$$\left(q_{min}^2 - \left(\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{2D_u D_v} \right) \right)^2 - \left(-\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{2D_u D_v} \right)^2$$

De lo anterior se obtiene la q_{min}^2

$$q_{min}^2 = \left(\frac{(D_v f_u + D_u g_v)}{2D_u D_v} \right) \quad (7.21)$$

Sustituyendo la q_{min}^2 en 7.20, da como resultado la siguiente relación:

$$2D_v D_u \sqrt{f_u g_v - f_v g_u} < D_v f_u + D_u g_v \quad (7.22)$$

8. MODELO DE GIERER-MEINHARDT

El modelo de Gierer-Meinhardt es del tipo reacción-difusión. Dicho modelo tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^2}{v} - bu + D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (8.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = u^2 - v + D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (8.2)$$

donde u es el activador, v el inhibidor, b es la tasa con la cual u se degradará de forma natural y D_u y D_v son las constantes de difusión.

A continuación se hará todo un análisis para ver si cumple con las condiciones para inestabilidad de Turing y luego se resolverá de forma numérica.

8.1. Estabilidad sin difusión

Primero se calculan las constantes de los valores iniciales, para esto se tomará en cuenta que las funciones que describen la forma en que interactúan las concentraciones químicas, evaluadas en u_0, v_0 valen cero.

$$f(u_0, v_0) \approx \frac{u_0^2}{v_0} - bu_0 = 0 \quad (8.3)$$

$$g(u_0, v_0) \approx u_0^2 - v_0 = 0 \quad (8.4)$$

De 8.3 se despeja v_0 , donde se obtiene $v_0 = \frac{u_0}{b}$, eso se sustituye en 8.4 y sale que $u_0 = \frac{1}{b}$, ese valor hace que la otra constante valga $v_0 = \frac{1}{b^2}$

Ahora, usando las expresiones equivalentes a 7.4 y 7.5 que son los desarrollos de Taylor, se obtiene el sistema de ecuaciones que representa la estabilidad sin difusión,

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = \tilde{u}b - \tilde{v}b^2 \quad (8.5)$$

$$\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} = \tilde{u} \frac{2}{b} - \tilde{v} \quad (8.6)$$

El siguiente paso es calcular la trace, el Jacobiano y resolver las inecuaciones con las condiciones necesarias para que se tenga estabilidad.

La Trace debe ser negativa:

$$\tau = b - 1 < 0 \quad (8.7)$$

Eso da como resultado que $b < 1$.

El Jacobiano debe ser positivo:

$$\Delta = -b + 2b > 0 \quad (8.8)$$

Lo que da como resultado que $b > 0$. Ambos cálculos dan un interbalo que se debe cumplir para tener estabilidad $0 < b < 1$.

8.2. Condiciones para inestabilidad de Turing

Las funciones con tilde son muy pequeñas y tienen la forma de 7.13 y de 7.14, eso haría que la expresión equivalente a 7.17 sea la siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \delta \tilde{u} \\ \delta \tilde{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b - q^2 D_u & -b^2 \\ \frac{2}{b} & -1 - q^2 D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \tilde{u} \\ \delta \tilde{v} \end{pmatrix} \quad (8.9)$$

Hay que recordar la expresión 7.21 que da la q_{min} y la expresión 7.22, que son producto de una de las condiciones para la inestabilidad y esquirbir sus equivalentes para éste sistema,

$$q_{min}^2 = \left(\frac{(D_v b - D_u)}{2D_u D_v} \right) \quad (8.10)$$

$$2D_v D_u \sqrt{b} < D_v b - D_u \quad (8.11)$$

La expresión 8.11 sale de las condiciones para tener inestabilidad, lo siguiente es proponer valores a las constantes y ver que se sigan cumpliendo las condiciones.

8.3. Propuesta de valores numéricos para D_u, D_v y b .

Para tener inestabilidad de Turing primero se busca tener estabilidad cuando no hay difusión. Para eso se deben cumplir las condiciones de las inecuaciones (8.7) y (8.8), tomando en cuenta ambas, se debe cumplir el intervalo ya mencionado, el cual es $0 < b < 1$. Si b vale 0.99 se cumple la condición para estabilidad, entonces elegimos ése valor y sólo falta asignarle valores a las constantes de difusión para que se cumpla, por lo menos, una condición para la inestabilidad de Turing.

Partiendo de (8.11), se puede escribir una relación para poder definir las constantes de difusión a partir del valor de b . Sólo se debe resolver la inecuación para D_u y sugerir posibles valores para D_v respetando el dominio y que debe ser positivo. Resolviendo (8.11) para D_v queda

$$D_u < \frac{D_v b}{(2D_v \sqrt{b}) + 1} \quad (8.12)$$

El dominio de la expresión que está a la derecha son todos los reales excepto donde $D_v = \frac{-1}{2\sqrt{b}}$, lo cual no significa problema porque ya se mencionó que D_v tiene que ser positivo. En éste caso, se va a proponer que $D_v = 0.93$, eso provoca que $D_u < 0.32$, entonces se puede proponer $D_u = 0.31$.

8.4. Solución numérica e interpretación de resultados

Se buscó una solución de forma numérica utilizando los valores acordados en la sección anterior. Usando dichos valores, el sistema de ecuaciones diferenciales queda de la siguiente forma

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u^2}{v} - 0.99u + 0.31 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (8.13)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = u^2 - v + 0.93 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (8.14)$$

De 8.3 se despeja v_0 , donde se obtiene $v_0 = \frac{u_0}{b}$, eso se sustituye en 8.4 y sale que $u_0 = \frac{1}{b}$, ése valor hace que la otra constante valga $v_0 = \frac{1}{b^2}$ pero, para asignar los valores, abusaremos de la notación donde dice que el sistema de ecuaciones formado por 8.3 y , los valores son aproximados, entonces podemos asignar los siguientes valores: $u_0 = 0.9$ y $v_0 = 0.85$.

El sistema de ecuaciones diferenciales se resolvió con el software Mathematica y se obtuvieron las gráficas mostradas en las figuras 11 y 12, donde la función $u(x, t)$ está representada de color naranja y la función $v(x, t)$ está representada de color azul.

En la figura 11 se tiene una vista desde la parte superior de las gráficas donde se puede observar claramente la dinámica de las funciones y en qué momento alguno de ellas es mayor a la otra. Hay que tomar muy en cuenta que nos interesa la evolución de éste fenómeno mientras fluye el tiempo, entonces los resultados que nos interesan son los que están en diagonal, teniendo como punto de partida el origen (las coordenadas $(0, 0, 0)$) hasta el otro extremo.

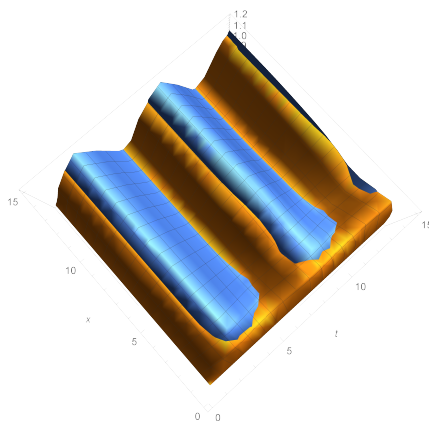


Figura 11: Aquí se muestran, desde la parte superior, las gráficas de la solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales. Se nota claramente en que momento es mayor cada función que justamente es lo que se estaba buscando, saber en que momento una función es superior a la otra. La función $u(x, t)$ está representada por el color naranja y la función $v(x, t)$ está representada por el color azul.

En la figura 12 se puede ver desde otra perspectiva la evolución de las dos funciones. Aquí se logra apreciar como aumentan y disminuye cada función mientras fluye el tiempo. Desde ésta perspectiva se percibe mejor la dinámica de como en ciertos puntos, mientras ya empieza a

disminuir $u(x,t)$, la otra función apenas está llegando a su valor máximo local pero, también se ve como $v(x,t)$ decae más rápido su valor.

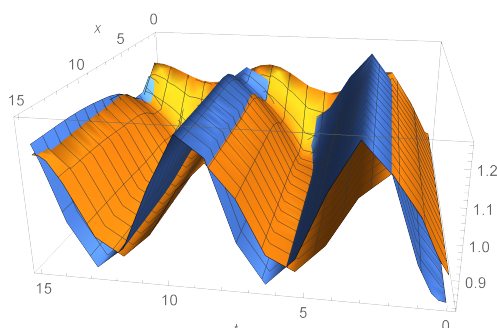


Figura 12: En esta figura se puede ver la dinámica de ambas funciones y como aumentan y disminuyen mientras transcurre el tiempo.

La forma en que se tomaron las condiciones iniciales se debe a que la forma en que interactúan las funciones cambian dependiendo de ellas. Si las condiciones iniciales eran mayores a 1, entonces las gráficas quedaban muy separadas y no se cortaban entre sí, quedaban tan separadas que al graficarlas juntas no se veía como variaban con el tiempo, dichos resultados no nos interesaban tanto, se buscaba una dinámica entre concentraciones químicas.

9. CÓDIGO

El sistema de ecuaciones diferenciales se resolvió en el software Mathematica. En esta sección sólo se verá el código.

```
sol=
NDSolve[
{D[u[t,x],t]== ((u[t,x])^2/v[t,x]) - 0.99*u[t,x] + 0.31D[u[t,x]x,x],
D[v[t,x],t]==(u[t,x])^2 - v[t,x] + 0.93D[v[t,x]x,x],
u[0,x]==0.9,v[0,x]==0.82
u[t,0]==0.9,v[t,0]==0.82},
{u,v},{t,15},{x,15}]
```

Para graficar la solución se escribe de la siguiente manera:

```
Plot3d[
Evaluate[
{u[t,x],v[t,x]}/.sol],
{t,0,15},{x,0,15},
PlotRange->All, AxesLabel->Automatic, PlotStyle->{Thickness[0.008]}
]
```

10. CONCLUSIONES

En éste texto primero se desarrolló por separado los temas de *reacción* y *difusión*. Ambos modelos matemáticos fueron usados por Turing para poder recrear los patrones en la piel de los

animales. Al final se pudo resolver de forma numérica un sistema de ecuaciones diferenciales que cumplía con las condiciones para tener la inestabilidad de Turing que produce los patrones.

Hay que recordar que estos modelos no se hacen para saber números concretos o cantidades reales que se tengan en la vida diaria, normalmente se usan para saber comportamientos y números aproximados, pero lo más importante son los comportamientos. En morfogénesis esto no es muy distinto, lo que interesa es poder recrear los patrones y así entender mejor lo que sucede.

Al resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, se logró notar que las condiciones iniciales no afectaban mucho en el comportamiento, de hecho, lo que afectaba más era la tasa de degradación de u , o sea, el valor de b .

Al buscar un comportamiento más interesante, se llegó a la propuesta de poner un valor un poco más bajo en las condiciones iniciales, tomando muy en cuenta la notación que dice *aproximadamente* en las expresiones que nos ayudan a calcularlas. De esto, se puede concluir que las condiciones iniciales afectan en la cantidad de la sustancia, eso podía provocar que los planos (las soluciones de las ED) no se cortaran pero el comportamiento no cambiaba.

Los resultados se pueden interpretar como los patrones que se estaban esperando.

11. BIBLIOGRAFÍA

[1] Brauer, F. and Castillo-Chavez, C., *Mathematical models in population biology and epidemiology*, 2nd ed., Heidelberg, Alemania, Springer International Publishing AG.

[2] Leonardo Dagdug Lima, *Notas para la clase de Biofísica*.

[3] Editores. Leopoldo García-Colín, Leonardo Dagdug, Michel Piquart y Edgar Vázquez. *Introducción a la Física Biológica*, Tomo II, México, 2010, Editorial, El Colegio Nacional.

[4] Stewart, I., *Las matemáticas de la vida*, Barcelona, España, Editorial Crítica, capítulo 13 *Lunares y rayas*.

[5] A.M. Turing, *The chemical basis of morphogenesis*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London B 237 (1952), 37-72.

[6] Gierer, A. y Meinhardt, H. (1972). *A theory of biological pattern formation*. *Kybernetik*.

[7] Yuyoi Teramoto Kimura, *The Mathematics of Patterns: The modeling and analysis of reaction-diffusion equations*. Maestria. Princeton University.

Juan Daniel Rivera Bautista
Alumno

Dr. Leonardo Dagdug Lima
Asesor

Dr. Marco Antonio Maceda Santamaria
Coordinador de la licenciatura