



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS MATEMÁTICAS Y DE LA
ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA APLICADA**

**PATRONES DE TURING EN SISTEMAS CON DIFUSIÓN NO
HOMOGÉNEA**

**TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN CIENCIAS**

**PRESENTA:
ELKINN ADRIÁN CALDERÓN BARRETO**

**DIRECTOR DE TESIS:
DR. JOSÉ LUIS ARAGÓN VERA**
CENTRO DE FÍSICA APLICADA Y TECNOLOGÍA AVANZADA CFATA

**COMITÉ TUTOR:
DR. JORGE XICOTENCATL VELASCO HERNANDEZ**
INSTITUTO DE MATEMÁTICAS JURIQUILLA
DR. GUILLERMO RAMIREZ SANTIAGO
INSTITUTO DE MATEMÁTICAS JURIQUILLA

CIUDAD DE MÉXICO, 2024.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Patrones de Turing en Sistemas con Difusión no Homogénea

Elkinn Adrián Calderón Barreto

Tesis para optar por el título de:
Doctor en Ciencias Matemáticas

Director:
Dr. José Luis Aragón Vera

Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada

Universidad Nacional Autónoma de México
Doctorado en Ciencias Matemáticas
Juriquilla, Querétaro, México
2023

La única constante que no cambia es la incertidumbre de la vida.

La Metamorfosis

Franz Kafka.

Agradecimientos

Quiero expresar un agradecimiento especial a México y a la Universidad Nacional Autónoma de México por brindarme la oportunidad de formar parte de esta prestigiosa institución. Esta experiencia no solo me ha permitido sumergirme en su rica cultura, sino también compartir conocimientos con destacados investigadores que forman parte de esta comunidad. Estos encuentros han enriquecido mi trabajo de investigación al llenarme de nuevas ideas, cuestionamientos y una inmensa motivación para seguir desarrollando mi labor académica. Estoy profundamente agradecido por esta experiencia enriquecedora.

Quiero expresar mi profundo agradecimiento al Dr. José Luis Aragón Vera, mi tutor y un distinguido investigador. Su apoyo invaluable se ha manifestado a través del generoso intercambio de conocimientos y experiencias en el campo de los patrones de Turing. Además, siempre me ha brindado un espacio para expresar mis ideas y me ha dado la confianza necesaria para plasmarlas en papel. Su constante estímulo y orientación han sido fundamentales para desarrollar no solo mis habilidades de escritura, sino también una disciplina sólida en mi trabajo investigativo. Estoy sinceramente agradecido por su orientación y apoyo inquebrantable durante este proceso.

Deseo expresar mi sincero agradecimiento a mis sinodales, el Dr. Jorge Velazco y Dr Guillermo Ramírez. Su constante apoyo y los cuestionamientos profundos que plantearon durante este proceso no solo fueron motivadores, sino también fundamentales para enriquecer mi investigación. Su acompañamiento cercano y orientación han sido una fuente inagotable de motivación, impulsándome a alcanzar un nivel más profundo de desarrollo en mi trabajo. Estoy verdaderamente agradecido por su valioso aporte y dedicación en esta travesía académica.

Agradezco especialmente al Dr. Julián Bravo Castillero por sus valiosas contribuciones, sugerencias y constante acompañamiento en los temas de aproximaciones asintóticas. Sus ideas no solo establecieron un nuevo enfoque en el desarrollo de esta tesis sobre los patrones de Turing, sino que también continúan permitiendo futuros trabajos de investigación.

Quiero expresar mi profunda gratitud a los distinguidos miembros del jurado de mi tesis doctoral: la Dra. María del Carmen Jorge, el Dr. Ramón Plaza Villegas, el Dr. Víctor Francisco Breña Medina y el Dr. Faustino Sánchez Garduño. Sus valiosas críticas, orientaciones y dedicación han sido esenciales para el desarrollo y la culminación de este trabajo. Agradezco sinceramente su tiempo, esfuerzo y compromiso en la revisión de mi tesis, lo que ha enriquecido significativamente mi investigación.

Un agradecimiento especial a mi pareja, la Dra. Erika Jessenia Morena, ha sido mi fuente inagotable de inspiración. Su presencia, junto con la de Lowen, Astra, Canela, Galilea, Turing y Paps, me han levantado en los momentos más difíciles.

A mis amigos mexicanos, Marisol, Cristian, Ricardo, Alejandra e Ibeth, su amabilidad y generosidad han hecho que mi experiencia sea aún más significativa y memorable. Estoy profundamente agradecido por su cálida hospitalidad y por compartir conmigo la riqueza de su cultura y amistad.

Quiero concluir expresando mi sincero agradecimiento a mi familia: a mi madre, María Isabel Barreto Daza, a mi padre, Héctor Manuel Calderón Avendaño, a mi hermana, Heissy Jhoana, y a mi hermano junto con su esposa e hija, Jhonatan Leandro, Dina Londoño y Gabriela. Cada una de mis ideas, desarrollos y logros, en todas las facetas de mi vida, está impregnada con el amor y el apoyo incondicional que proviene de ellos. Su influencia ha sido esencial en mi viaje y estoy profundamente agradecido por su constante respaldo y aliento.

Resumen

En el estudio de fenómenos con estructuras auto-organizadas, se han propuesto diversos modelos matemáticos, entre los cuales destaca el modelo de reacción-difusión, propuesto por Alan M. Turing en 1952, que es capaz de generar patrones espaciales. A pesar de las simplificaciones inherentes a estos modelos, se han logrado explicar una amplia gama de fenómenos, principalmente en sistemas biológicos, pero las aplicaciones han trascendido esta área. Sin embargo, es importante destacar la sensibilidad que presentan estos sistemas ante las condiciones iniciales, las propiedades geométricas de los dominios y los coeficientes de difusión no homogéneos. Estas características se manifiestan en la forma de los patrones generados, con variaciones en las longitudes de onda y amplitudes.

En el presente estudio, se estudia el problema de la generación de patrones de Turing en operadores diferenciales con coeficientes de difusión no homogéneos, es decir, que dependen explícitamente de las coordenadas espaciales. Con base en los métodos de múltiples escalas, se logran establecer dos metodologías importantes para este problema:

- La primera metodología consiste en deducir las ecuaciones de amplitud de Stuart-Landau, con lo que se puede caracterizar los tipos de patrones que obtienen. Esta metodología es ampliamente utilizada en problemas con difusión homogénea usando la base de Fourier (como eigenfunciones del operador Laplaciano), pero el aporte de este trabajo consiste en generalizar esta metodología, relacionando el problema no homogéneo con la teoría de Sturm-Liouville, proponiendo bases de funciones propias distintas a la base de Fourier. Con esto no sólo pueden establecerse regiones de parámetros en las que se obtendrán patrones de franjas o manchas, sino que también predicen transiciones de manchas a franjas al aumentar el tamaño del dominio. Estos resultados se reportaron en la Ref. [1].
- La segunda metodología consiste en aplicar la técnica de homogeneización, al caso en que se tiene difusión no homogénea periódica y rápidamente oscilante. En este caso, se muestra que las soluciones del problema no homogéneo convergen al problema homogeneizado a medida que el parámetro de periodicidad tiende a cero. Con esto, se muestra que las condiciones de inestabilidad del sistema homogeneizado son similares a las del problema no homogéneo, lo que se respalda tanto analítica como numéricamente. Estos resultados se reportaron en la Ref. [2].

Con estos resultados, se ofrece una metodología lo suficientemente sólida para analizar una amplia variedad de fenómenos con difusión no homogénea, expandiendo tanto las ideas del análisis lineal clásico de sistemas de reacción-difusión como el análisis no lineal.

Palabras clave: Patrones de Turing, operadores diferenciales no-homogéneos, método multiescala, homogeneización.

Contenido

Resumen	IX
Notación	XII
Lista de Figuras	XIII
Lista de Tablas	1
1 Introducción	2
2 Inestabilidad de Turing	8
2.1 Modelos cinéticos activador-inhibidor	9
2.2 Bifurcación de Turing	11
2.2.1 Modelo de Schnakenberg	14
2.2.2 Modelo de Barrio-Varea-Aragon-Maini (BVAM)	15
2.3 Difusión no homogénea	16
3 Modelo de reacción-difusión con operador de Sturm-Liouville	21
3.1 Problema de Sturm-Liouville	22
3.2 Condiciones de Turing	24
3.3 Análisis no lineal	27
3.3.1 Solución al problema $\mathcal{O}(\mu)$	30
3.3.2 Solución al problema $\mathcal{O}(\mu^2)$	30
3.3.3 Solución para el problema $\mathcal{O}(\mu^3)$	32
3.4 Casos Particulares	33
3.4.1 Una función propia	34
3.4.2 Dos funciones propias	34
4 Resultados: Sturm-Liouville	36
4.1 Operador de Legendre	36
4.1.1 Análisis no lineal para la difusión espacialmente variable: el caso de las funciones propias de Legendre	38
4.1.2 Estabilidad de las ecuaciones de Stuart-Landau	42
4.1.3 Simulaciones Numéricas	43
5 Operadores periódicos; metodología de homogeneización	50
5.1 El problema	51
5.2 Expansiones asintóticas	55

5.3	Caso 1: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 = \varepsilon$	56
5.3.1	$\mathfrak{D}_{ij}^k \in C^\infty(\Omega)$	56
5.3.2	$\mathfrak{D}_{ij}^k$ suave a trozos, $\mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathfrak{D}(\mathbf{y})$	58
5.4	Caso 2: $\varepsilon_1 = \varepsilon$, $\varepsilon_2 = \varepsilon^2$ y $\mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z})$	59
5.5	Análisis de Turing estudio del problema homogeneizado	66
5.5.1	Análisis lineal	66
6	Resultados: difusión con propiedades periódicas	67
6.1	Difusión periódica continuamente diferenciable	68
6.1.1	Problema en una dimensión	69
6.1.2	Problemas bidimensionales	73
7	Discusión y Conclusiones	81
	Bibliografía	83

Notación

Símbolo	Definición
ε, δ, μ	Parámetros positivos pequeños
$\mathbb{R}^N$	Espacio vectorial de listas ordenadas de N escalares $(u_1, u_2, \dots, u_N)$, sobre el cuerpo de los números reales
Ω	Dominio en $\mathbb{R}^n$, es decir, un conjunto abierto y conexo (generalmente acotado)
$\partial\Omega$	Frontera del dominio Ω
$\bar{\Omega}$	Cerradura del dominio Ω , es decir, $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$
$\mathbf{x}$	Vector en $\mathbb{R}^N$, que se usará para describir la variable lenta o macroscópica
$\mathbf{y}, \mathbf{z}$	Variables rápidas o microscópicas, $\mathbf{y} = \frac{1}{\varepsilon_1}$, $\mathbf{z} = \frac{1}{\varepsilon_2}$
$C^\infty(\bar{\Omega})$	Espacio de funciones infinitamente diferenciables en $\bar{\Omega}$
f^ε	Función de periodo ε o ε -periódica
i, j, n, m	Índices mudos
k	Índice libre
$\langle \mid \rangle$	Producto interno
$\langle f \mid g \rangle_{w(\mathbf{x})}$	Producto interno de funciones con peso $w(\mathbf{x})$, es decir, $\langle f \mid g \rangle_{w(\mathbf{x})} = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})w(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
$\langle f \rangle_{\Omega}$	Promedio del campo escalar f en el dominio Ω , es decir, $\langle f \rangle_{\Omega} = \frac{1}{ \Omega } \int_{\Omega} f(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \text{ con } \Omega \text{ el volumen de } \Omega.$
$[[\cdot]]_{\Gamma_Y}$	Diferencia entre los valores internos $^{(i)}$ y los valores en la matriz $^{(m)}$, sobre la interfaz Γ_Y , es decir, $[[\cdot]]_{\Gamma_Y} = (\cdot)^{(m)} - (\cdot)^{(i)}$.
$\mathfrak{D}^k$	Matriz de difusión de la k -ésima ecuación.
$\mathfrak{D}_{ij}^k$	Componente de difusión i, j de la Matriz de difusión de la k -ésima ecuación.
$\mathfrak{L}()$	Operador elíptico en forma divergente.

Lista de Figuras

1-1.	patrones en la piel de algunos animales. Es de notar la variación en el ancho de las franjas de las cebras y los peces. También se puede notar la variación del tamaño de las manchas, que parece depender de la distancia al centro de la mantarraya. . .	3
1-2.	Ejemplos de estructuras heterogéneas naturales (a, b, c) y hechas por el Hombre (d,e,f).	4
2-1.	Gráfica de la relación de dispersión λ como función del cuadrado del número de onda k^2 . En el umbral de la inestabilidad (línea continua), $\frac{d_u}{d_v} = d_c$, la parte real de la relación de dispersión tiene un corte con el eje de números de onda. Modos inestables (línea discontinua), $\frac{d_u}{d_v} > d_c$, la relación de dispersión corta en dos puntos al eje de números de onda, lo que indica un cambio de signo en una región acotada en el dominio de números de onda. Finalmente, en el caso que produce modos estables (línea punteada), $\frac{d_u}{d_v} < d_c$, la curva de relaciones de dispersión no tiene cortes, manteniéndose negativa para todo número de onda.	13
2-2.	Regiones en el espacio de parámetros a vs b del modelo de Schnakenberg donde ocurre inestabilidad de Turing para diferentes valores de difusión d . Región azul no ocurre inestabilidad de Turing, región amarilla inestabilidad para valores d entre 1 y 50, región naranja clara inestabilidad para valores d entre 50 y 200 y región naranja inestabilidad para valores d entre 200 y 500.	14
2-3.	Regiones en el espacio parámetros a vs b del modelo de BVAM donde ocurre inestabilidad de Turing para diferentes valores del coeficiente de difusión d . En la región azul no ocurre inestabilidad de Turing, en la región amarilla se produce inestabilidad para valores de d entre 1 y 50, y en región naranja se produce la inestabilidad para valores de d entre 50 y 200. Finalmente, en la región naranja se produce la inestabilidad para valores de d entre 200 y 500.	15
2-4.	a) Celda unitaria cuadrada que representa un material fibroso ($\Omega = \Omega_1^\varepsilon \cup \Omega_2^\varepsilon \cup \Gamma^\varepsilon$) organizado periódicamente con periodo ε . b) Celda periódica en coordenadas $\mathbf{y}$. . .	18
2-5.	Deformación de un elemento de volumen por efectos del campo τ	20
3-1.	Desplazamiento horizontal de orden μ^2 de la relación de dispersión crítica por efectos de perturbación de algún parámetro crítico.	28

- 4-1.** Una interpretación gráfica de la difusión producida por (4-1); para cada (x, y) , se representa en una escala de colores la diferencia en los coeficientes de difusión, $(1 - x^2) - (1 - y^2)$. Los valores positivos (colores claros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje x , mientras que los valores negativos (colores oscuros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje y . 37
- 4-2.** Comparación de los patrones obtenidos a $T = 1000$ unidades de tiempo con difusión de Legendre (línea continua negra) con los obtenidos con difusión homogénea (puntos verdes). Además, se muestra la aproximación de segundo orden del análisis no lineal, $\mathbf{u}_0 = a(t)W_{i_c}(x)$ (puntos azules). Para los valores $\eta = 1.11571$ (a), $\eta = 12.2729$ (b) y $\eta = 35.3310$ (c). 44
- 4-3.** Espacio de parámetros (a, b) del modelo de Schnakenberg con difusión homogénea (a) y difusión de Legendre (b). El color rojo representa franjas, el color naranja representa manchas, el color amarillo representa patrones que no pueden predecirse mediante el análisis no lineal, y los colores azul claro y oscuro representan la región donde no se cumplen las condiciones de estabilidad e inestabilidad de Turing, respectivamente. 46
- 4-4.** patrones bidimensionales obtenidos numéricamente para tres conjuntos de parámetros (a, b) y dos valores de k_c . Los gráficos izquierdos corresponden a $k_c = 3$ y los gráficos derechos corresponden a $k_c = 14$. Las tres filas corresponden a diferentes valores de (a, b) : **(a)** $(0.1, 1.0)$ en la región de franjas, **(b)** $(0.3, 1.0)$ en la región de manchas y **(c)** $(0.375, 1.0)$ en la región donde nuestro análisis lineal no puede predecir el tipo de patrón; en todos los casos se representa la concentración u del modelo Schnakenberg. Los valores de los parámetros se presentan en la Tabla **4-2**. 47
- 4-5.** **a)** Región de patrones para el modelo BVAM con difusión de Legendre y número de onda 3. **b)** condición β/α de Tabla **4-1** al aumentar el número de onda con $(a = 3.0, b = -2.0, c = 0.0$ y $h = -1.0)$. Códigos de colores: amarillo: franjas; naranja: manchas; rojo: el método no decide; morado: no es Turing inestable; negro: el punto de equilibrio no es estable. 48
- 5-1.** Coeficientes de difusión, azul; difusión del activador y amarillo; difusión del inhibidor 51
- 5-2.** Estructura heterogénea periódica con dos interfaces Γ_Y y Γ_Z 53
- 5-3.** Representación de agregación para diferentes valores de σ 54
- 6-1.** a) Espacio de parámetros (d, ρ_2) del modelo de Schnakenberg (2-17), con $a = 0.1$ y $b = 1.5$, donde se identifican tres regiones de inestabilidad de Turing: $\rho_1 = 0.1$, $\rho_1 = 0.7$ y $\rho_1 = 0.9$. Abajo, se muestran las soluciones G^1 de la ecuación (6-5) para los valores correspondientes de ρ_1 : b) $\rho_1 = 0.1$, c) $\rho_1 = 0.7$ y d) $\rho_1 = 0.9$ 71

- 6-2.** Se obtuvieron soluciones numéricas $\mathbf{u}^{\varepsilon,d}$ del problema no homogéneo (6-1), utilizando el software *COMSOL Multiphysics*[®], con la cinética de Schnakenberg (2.2.1). Estas soluciones se representan mediante líneas negras en el gráfico, donde se han considerado varios valores de ε (1/16, 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512), cada uno indicado por la variación en el grosor de la línea, según se especifica en el recuadro. Para una comparación visual, se incluyen también las soluciones asintóticas formales (6-13), representadas por líneas azules en el mismo gráfico. Se han explorado diferentes escenarios, incluyendo casos con $\rho_1 = 0.1$, $\rho_1 = 0.7$, y $\rho_1 = 0.9$ 72
- 6-3.** Campos vectoriales (6-37) para $\varepsilon = 0.1$, 0.5 y 0.25, respectivamente. 78
- 6-4.** Gráfico de las superficies definidas por cada entrada de la matriz de difusión (6-22), con (6-37), $\sigma_k^l = 1$, $\sigma_k^t = 0.5$, y $\varepsilon = 1$. a) $\mathfrak{D}_{11}^k(\mathbf{y})$, b) $\mathfrak{D}_{12}^k(\mathbf{y}) = \mathfrak{D}_{21}^k(\mathbf{y})$ y c) $\mathfrak{D}_{22}^k(\mathbf{y})$. 79
- 6-5.** Función Propia correspondiente al decimosexto valor propio $l_{(16)} = 105.1118462$, del operador $\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}} \nabla$ donde $\hat{\mathfrak{D}}$ está definido en (6-39) 79

Lista de Tablas

4-1	Estados estacionarios y condiciones para la estabilidad lineal de las funciones de amplitud.	43
4-2	Los parámetros del modelo del sistema de Schnakenberg (4-48) utilizados en la Figura 4-4. Se eligieron (a, b) en diferentes regiones de la Figura 4-3b. Para cada (a, b) , se calculó d_c usando (4-46). Se utilizaron dos valores de k_c : $k_c = 3$ y $k_c = 14$. Los valores correspondientes de η se obtuvieron mediante (4-47).	48
6-1	Estados estacionarios y condiciones para la estabilidad lineal de las funciones de amplitud.	74
6-2	Valores del parámetro a utilizados para generar franjas o manchas ($b = 1.5$), y sus correspondientes valores críticos. El tipo de patrón para cada valor de a se determinó a partir de las Referencias. [3] y [1].	74
6-3	Solución $\mathbf{u}^{\varepsilon, d}$ numérica del problema no homogéneo para los valores del parámetro a listados en la Tabla 6-2, y $b = 1.5$, para diferentes valores de ε	75
6-4	Soluciones $\mathbf{u}^{\varepsilon, d}$ de los dos ejemplos considerados en esta Sección, con los valores dados en la Tabla 6-5, usando cinética de Schnakenberg con $a = 0.4$ y $b = 1.5$. . .	77
6-5	Valores críticos para los dos ejemplos considerados, usando cinética de Schnakenberg con $a = 0.4$ y $b = 1.5$	78
6-6	Solución numérica $\mathbf{u}^{\varepsilon, d}$ del sistema no homogéneo en $t = 20000$, para algunos valores de ε . Los valores de los parámetros de la cinética de Schnakenberg son $a = 0.3$, y $b = 1.5$	80

1 Introducción

La piel de los animales exhiben detallados caminos de colores, algunos compuestos por franjas paralelas intercalando colores, como se ve en las zebras o en los Angelfish. Otros presentan una compleja red de caminos altamente conectados, donde se encuentran áreas aisladas o manchas, como los patrones observados en los leopardos. Sorprenden también estructuras que crecen a partir de una semilla creando caminos con una organización extremadamente compleja como las ramificaciones en los árboles que se asemejan a los relámpagos, fracturas en la tierra, bifurcaciones de ríos, crecimiento de extremidades en los animales. Estas estructuras naturales no solo son admiradas por su belleza, sino también por su complejidad. Para los humanos, ha sido una fuente inagotable de inspiración en importantes desarrollos tecnológicos. Por ejemplo, la morfología de aves y peces fue fundamental para entender el mecanismo de desplazamiento en el aire y en el agua. Las redes de arañas y las estructuras de los huesos son inspiración para el diseño de diversos materiales compuestos, como las fibras de carbono. La distribución de colores en las alas de las mariposas se estudió como un modelo eficiente para distribuir la temperatura. La comprensión de la interacción de estas estructuras geométricas con el medio ambiente no solo genera ideas para nuevos desarrollos tecnológicos, sino que también permite entender el comportamiento de los compuestos químicos que subyacen a la formación de estas estructuras.

Rayas, espirales, manchas con estructura cuadrangular y hexagonal son patrones espaciales o espaciotemporales bastante regulares vistos en sistemas naturales (desiertos, puntas de los dedos, pelaje de animales, estrellas) [4], y resulta común que un patrón dado aparezca en diferentes sistemas, siendo independientes de los pequeños detalles de su entorno, lo que nos lleva a pensar que en la naturaleza hay patrones universales. Alan Turing ya había comprendido esto en 1952 al presentar su artículo “The Chemical Basis of Morphogenesis” [5], donde plantea que los patrones encontrados en las pieles de animales, están relacionados con la forma en que los compuestos químicos interactúan bajo activación-inhibición y se mueven por difusión. Se puede considerar esa teoría de la Morfogénesis como uno de estos ejemplos de matemática aplicada que, a pesar de tener una motivación en la naturaleza, los supuestos con los que es construida no necesariamente son justificados desde la biología y química. Sin embargo, la teoría de Turing después de ser cuestionada durante mucho tiempo como una teoría que no explicara correctamente los procesos biológicos que intervienen en la formación de patrones, gradualmente se han encontrado ejemplos convincentes que la verifican [6, 7, 8]. Entre los supuestos fundamentales se encuentra en primer lugar que la cinética debe incluir una retroalimentación positiva, como la autocatálisis, que involucre una especie llamada activador y un proceso inhibitorio. Estas condiciones se cumplen de manera más sencilla en las reacciones que exhiben comportamientos biestables u oscilatorios.

Alan M. Turing planteó la idea de que los genes actúan como catalizadores en reacciones químicas espontáneas, regulando la producción de morfógenos. Turing demostró que un simple modelo matemático podía explicar la formación de patrones espaciales en concentraciones químicas, sugiriendo que las leyes físicas básicas pueden dar cuenta de comportamientos complejos, de esta manera explica que los morfógenos interactúan entre sí y se difunden a través de las células. Con esta observación, construyó un modelo matemático de reacción-difusión (R-D), en el cual los morfógenos reaccionan y se difunden adecuadamente para generar un patrón a partir de un estado inicial de distribuciones de concentración uniforme en un conjunto de células.

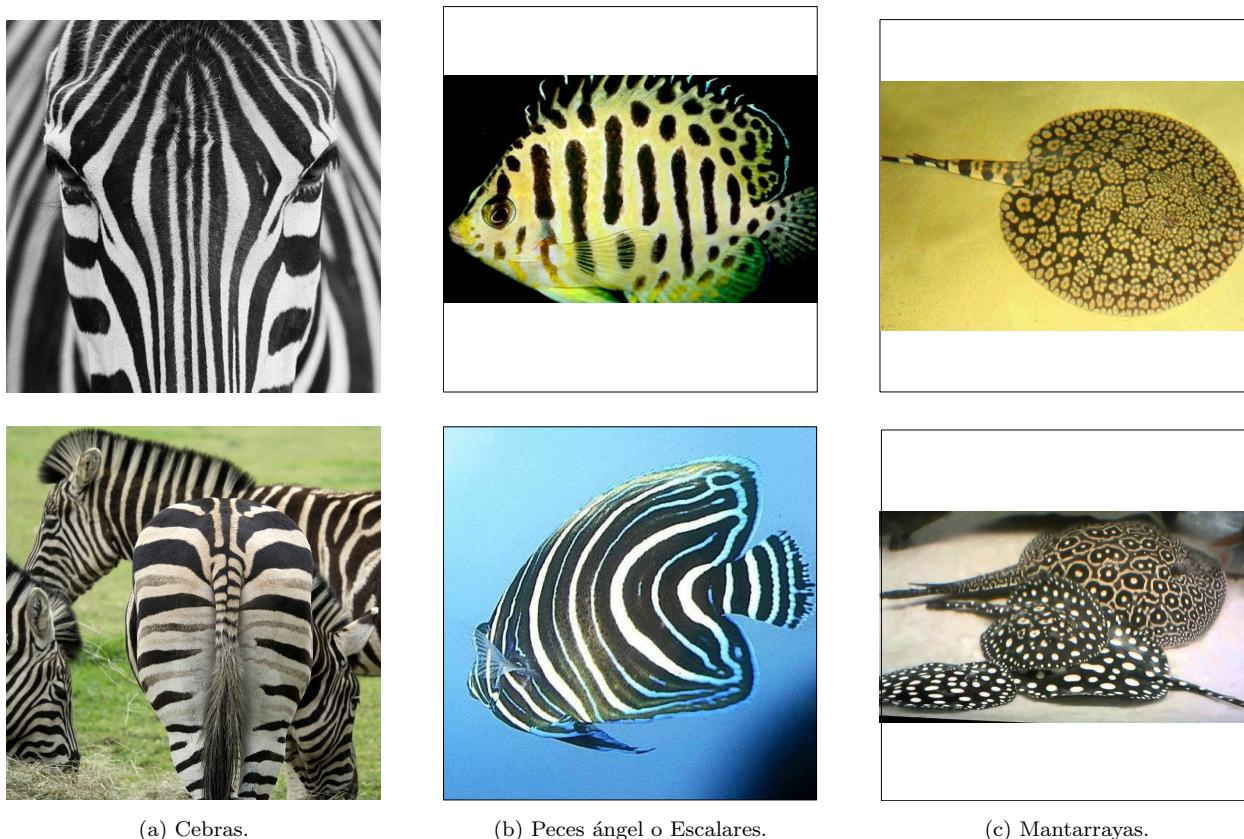
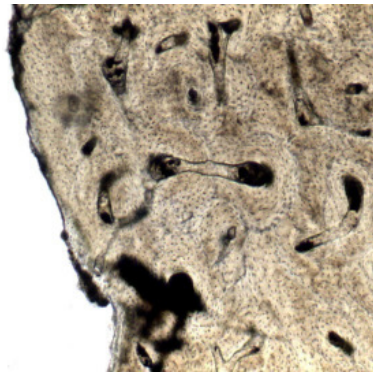


Figura 1-1: patrones en la piel de algunos animales. Es de notar la variación en el ancho de las franjas de las cebras y los peces. También se puede notar la variación del tamaño de las manchas, que parece depender de la distancia al centro de la mantarraya.

En diversas especies animales, la piel exhibe patrones intrigantes, tales como franjas, manchas o mosaicos de color, que varían según la ubicación en el cuerpo del animal. Estos patrones revelan una heterogeneidad evidente, manifestándose en variaciones en el ancho de las franjas o el tamaño de las manchas, como se ilustra en la Figura 1-1. Los procesos que impulsan la formación de estos patrones residen en las células encargadas de producir pigmentos y en aquellas que regulan dicha producción. Las complejas interacciones entre estas células y las moléculas señalizadoras que generan, crean gradientes locales que dan origen a estos patrones visuales en la piel. Esta heterogeneidad no es simplemente un fenómeno estético, va más allá y constituye una ventana

intrigante hacia la biología del desarrollo. La importancia de comprender estos procesos radica en su conexión con los tejidos musculares subyacentes, que a su vez están influenciados por una interacción compleja entre factores genéticos y ambientales. Estudiar la variabilidad en estos patrones no solo nos brinda un mayor entendimiento sobre la diversidad morfológica en el reino animal, sino que también arroja luz sobre los fundamentos de la morfogénesis animal.



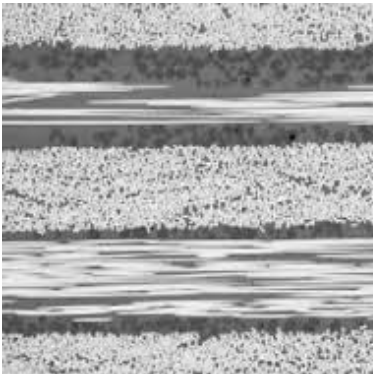
(a) Hueso.



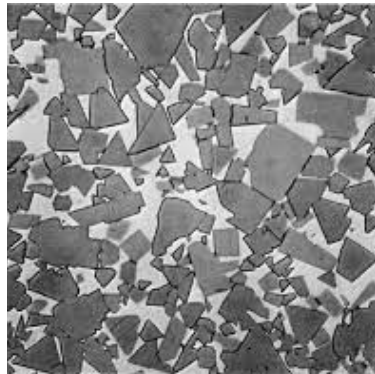
(b) Suelo.



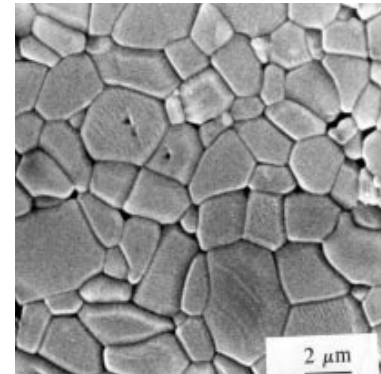
(c) Madera.



(d) Material compuesto laminado de titanio.



(e) Material compuesto particulado de aluminio.



(f) Material compuesto de cerámica sinterizada.

Figura 1-2: Ejemplos de estructuras heterogéneas naturales (a, b, c) y hechas por el Hombre (d,e,f).

Cuando se aborda el fenómeno de la difusión de concentraciones en tejidos celulares, es crucial considerar la compleja interacción entre una amplia gama de células y fibras celulares. Esta diversidad estructural no solo implica que las concentraciones se desplacen de manera variable según los grupos celulares, sino también dependiendo de la orientación de las fibras en el tejido. Un ejemplo de este comportamiento se observa en las corrientes eléctricas del corazón, donde diferentes tipos de células con coeficientes de difusión distintos están involucradas. Además, estas corrientes se desplazan con mayor rapidez en la dirección de las fibras en comparación con la dirección transversal a estas, lo que confirma la naturaleza anisotrópica y no homogénea de la difusión en estos casos particulares. Esta variabilidad en la movilidad de las concentraciones es esencial para comprender fenómenos biológicos complejos y subraya la importancia de estudiar tanto la composición celular como la disposición estructural en la investigación de procesos de difusión en los tejidos.

La homogeneidad y la heterogeneidad desempeñan papeles fundamentales en la creación, configuración y expansión de los patrones observados en los procesos de difusión. La heterogeneidad se refiere a la presencia de propiedades físicas variables en un medio específico, originándose a partir de las características inherentes del material donde ocurre la difusión de sustancias concentradas. Esta variabilidad se manifiesta en una relación espacial o incluso en la magnitud misma del coeficiente de difusión. Ambientes heterogéneos son comunes tanto en la naturaleza como en productos manufacturados. Por ejemplo, en el mundo natural, estructuras como huesos, atmósfera, suelo, arena, madera, pulmones, tejidos vegetales y animales, conglomerados celulares y tumores exhiben heterogeneidad. En el ámbito humano, productos manufacturados como compuestos laminados, sustancias granuladas, sólidos celulares, geles, espumas, aleaciones metálicas, microemulsiones y cerámicas también son ejemplos de heterogeneidad.

Esta diversidad en la heterogeneidad influye significativamente en los procesos de difusión y sus resultados, como se ilustra en la Figura 1-2. Además, la combinación de heterogeneidad y periodicidad se convierte en un aspecto crucial en muchos materiales, especialmente en compuestos, donde dos o más componentes se integran para proporcionar propiedades únicas y mejoradas en comparación con los materiales individuales. Esta estructura periódica ofrece ventajas significativas en diversas aplicaciones al permitir una distribución uniforme de cargas, mejorando así las propiedades mecánicas del material. Este fenómeno puede aumentar tanto la resistencia como la rigidez del material, y también puede influir en las propiedades térmicas, ópticas y eléctricas, ampliando el rango de aplicaciones y destacando su importancia en el desarrollo de tecnologías innovadoras.

Recientemente, se ha encontrado que las heterogeneidades espaciales en el coeficiente de difusión son trascendentales en la biología y pueden modificar drásticamente las condiciones de Turing para la formación de patrones. Un ejemplo se encuentra en dos especies de peces *Genicanthus* que durante la conversión sexual comparten propiedades morfológicas casi idénticas excepto por la dirección de sus franjas; en ambas especies surgen manchas transitoriamente en posiciones aleatorias y luego se combinan y reorganizan para formar franjas direccionales. Al respecto, se ha demostrado que la anisotropía de la difusión es eficaz para especificar la dirección de las franjas formadas por el modelo de R-D [9]. El grosor de la superficie se desprecia en la mayoría de los estudios, por ejemplo, la difusión de proteínas en las bicapas lipídicas puede verse como una difusión en una superficie curva bidimensional. El efecto de espesor y curvatura puede desempeñar un papel importante en la generación de patrones espaciales [10], por ejemplo, por la geometría del sustrato donde se difunde la especie (plano-esfera) [11] se ha encontrado la modificación en el rango del número de onda. Otro factor está relacionado con la difusión confinada; los canales iónicos tienen sitios activos donde las reacciones químicas ocurren, similar a la catálisis heterogénea en los poros irregulares de las zeolitas. Las condiciones de inestabilidad de Turing pueden modificarse debido a la geometría del canal [12]. También se ha reconocido la importancia de la difusión no homogénea en sistemas biológicos, particularmente en el problema de la filotaxia (formación de órganos laterales en las plantas), en donde es bien sabido que la difusión de la fito-hormona auxina (principal promotora de la formación de los órganos de las plantas) es no homogénea y, aún más, su difusión se ve afectada por las propiedades elásticas del domo apical. Como consecuencia, recientemente se ha propuesto un modelo mecano-químico para describir la formación de los órganos laterales de las plantas, en donde la matriz de difusión del sistema de R-D depende de un tensor de esfuerzos [13]. En ese

modelo, las condiciones para la formación de un patrón espacial no están establecidas de manera analítica, y los resultados se obtienen mediante simulaciones numéricas para valores muy específicos en los parámetros.

Objetivos del presente trabajo

Estudiar sistemas de reacción-difusión bajo condiciones de difusión no homogénea, es decir, cuando el coeficiente de difusión tiene una dependencia explícita de las variables espaciales, estableciendo las características más importantes y su aplicación en la biología. En particular se estudiará a detalle el caso cuando el problema de difusión puede plantearse como un problema de Sturm-Liouville.

1. Investigar las posibilidades para coeficientes de difusión no homogénea que permitan un tratamiento analítico del problema.
2. Hacer uso de los métodos multiescala y otros métodos de análisis no lineal para comprender el comportamiento de los patrones de Turing en sistemas de reacción difusión no homogénea.
3. Establecer las bases de la difusión de Sturm-Liouville en la generación de patrones de Turing en 2D y encontrar posibles aplicaciones.

Contribuciones originales

1. Estudio de sistemas reacción difusión con operadores diferenciales de Sturm-Liouville.
2. Desarrollo de una metodología multiescala para aproximar soluciones cerca de los parámetros críticos que permite la caracterización de la región de parámetros dependiendo de una estructura geométrica predefinida.
3. Desarrollo de una metodología de homogeneización para sistemas de reacción difusión con operador diferencial periódico.
4. Derivación de condiciones de inestabilidad de Turing en sistemas reacción difusión con coeficiente de difusión periódica junto a una metodología no lineal para la predicción de patrones en el sistemas no homogéneo.

Organización del trabajo

Capítulo 1: Se presentan conceptos generales en torno a la bifurcación de Turing, poniendo énfasis en el proceso de difusión, que extiende la idea de Fick y aborda la heterogeneidad en la difusión, incluyendo aspectos como la difusión anisotrópica, dependiente del espacio y periódica. Además, se introduce el concepto de activador-inhibidor y la teoría se aplicará en dos modelos: el modelo de Schnakenberg y el de Barrio-Varea-Aragón-Maini (conocido como BVAM).

Capítulo 2: Se plantea un modelo de reacción-difusión con un operador diferencial de Sturm-Liouville, derivando las condiciones de Turing y realizando un análisis no lineal para la aproximación de amplitudes de las funciones propias críticas como soluciones de sistemas de reacción-difusión cerca de los parámetros críticos.

Capítulo 3: Se presentan ejemplos en donde se utilizan las metodologías presentadas en el Capítulo 2, usando como caso particular el operador de Legendre. Para este caso, se derivan las condiciones de Turing y se desarrolla un análisis débilmente no lineal para obtener la caracterización de las regiones de parámetros, en función de la forma de los patrones. Finalmente, se muestra el hallazgo de una transición de franjas a manchas que se produce al aumentar el valor de un parámetro relacionado con el tamaño del dominio.

Capítulo 4: Se plantean modelos con coeficientes de difusión periódicos, que se abordan usando la técnica de homogeneización. Mediante esta técnica, el problema original, no homogéneo, puede transformarse en uno homogéneo con un coeficiente de difusión efectivo. Esto permite aplicar el análisis no lineal conocido para sistemas con coeficientes de difusión homogéneos.

Capítulo 5: Se aplica la teoría desarrollada en el Capítulo 4 a problemas con coeficientes diferenciales continuamente diferenciables y periódicos en una y dos dimensiones, utilizando la técnica de homogeneización para obtener coeficientes de difusión efectivos y, de esta manera, obtener las condiciones de inestabilidad de Turing para la ε -familia de problemas.

2 Inestabilidad de Turing

Una de las motivaciones del trabajo de Alan Turing es analizar el efecto de pequeñas desviaciones aleatorias de la simetría esférica en los óvulos fecundados y su impacto en el desarrollo y la estructura de organismos complejos. Aunque se espera que un óvulo mantenga su simetría, Turing argumenta que estas desviaciones son fundamentales, pues pueden llevar a estados de inestabilidad donde las irregularidades crecen, permitiendo así la formación de estructuras biológicas complejas.

En su modelo de morfogénesis, Alan Turing consideró varios criterios clave en la forma continua de la teoría [5]. Primero, destacó la importancia de las concentraciones y difusibilidades de cada sustancia en cada punto del sistema. Para determinar los cambios de estado, Turing incorporó los principios fundamentales de las leyes del movimiento de Newton (ley conservación de materia), en donde se asume que el problema es esencialmente químico. Además, tuvo en cuenta los esfuerzos resultantes de las elasticidades y movimientos, considerando también las presiones osmóticas derivadas de datos químicos. En tercer lugar, Turing incluyó las reacciones químicas como un elemento esencial para comprender la dinámica del sistema. Por último, se ocupó de la difusión de las sustancias químicas, definiendo la región donde esta difusión es posible a partir de datos mecánicos. Estos criterios abordaron aspectos mecánicos y químicos.

En estos sistemas, las pequeñas perturbaciones son esenciales, ya que el flujo y producción neta de sustancias químicas dentro del dominio no son uniformes. Estas variaciones se representan mediante un vector de concentraciones químicas $\mathbf{u} = (u, v)^T$, ilustrando cómo las diferencias locales son clave para entender la dinámica de los sistemas químicos y biológicos. A partir de la ley de conservación de la materia para $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, se derivan las siguientes relaciones.

$$(2-1) \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{u} d\mathbf{x} = - \int_{\partial\Omega} \mathbf{D}\mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} + \int_{\Omega} \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}; p) d\mathbf{x},$$

donde $\mathbf{j} = (j_u, j_v)^T$ es el flujo de concentraciones químicas por unidad de área, $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p)$ es un campo vectorial que describe las tasas de producción química neta por unidad de volumen, dependiente de un conjunto específico de parámetros p , y η es un factor de escala. En este contexto, se trabaja con un campo vectorial bidimensional relacionado con los mecanismos de activación e inhibición, expresado como $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p) = (f(\mathbf{u}; p), g(\mathbf{v}; p))^T$ y $\mathbf{D}$ es una matriz de coeficientes de difusión. Cambiando variables en la integral de línea a lo largo de $\partial\Omega$ y aplicando el teorema de Gauss a la integral, a lo largo de la frontera $\partial\Omega \subset \mathbb{R}^{n-1}$, se obtiene que la ecuación (2-1), se transforma en

$$(2-2) \quad \int_{\Omega} \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{D} \nabla \mathbf{u} - \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}; p) \right] d\mathbf{x} = \mathbf{0},$$

donde el operador diferencial $\mathfrak{L}$ está relacionado con el flujo $\mathbf{j}$ y la geometría del dominio. Suponiendo que Ω es un conjunto simplemente conexo, se obtiene que

$$(2-3) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{D}\mathfrak{L}\mathbf{u} + \eta\mathbf{F}(\mathbf{u}; p).$$

En este caso $\mathbf{D}$ se representa como una matriz de coeficientes constantes, mientras que el operador $\mathfrak{L}(\cdot)$ se emplea para describir las variaciones espaciales en las concentraciones de las sustancias involucradas.

Recientemente, se ha descubierto que varios factores espaciales fundamentales en biología pueden alterar el operador $\mathfrak{L}(\cdot)$, lo que a su vez modifica las condiciones de Turing para la formación de patrones. Estos cambios en el operador tienen un impacto significativo en la manera en que los patrones se desarrollan y evolucionan en sistemas biológicos. A continuación, se presentarán algunos ejemplos de operadores de difusión $\mathfrak{L}$ para ilustrar estas modificaciones y su relevancia en el estudio de fenómenos complejos en biología y disciplinas relacionadas.

A continuación, se discutirán tres modelos cinéticos del tipo activador-inhibidor, con los que describiremos el procedimiento involucrado para deducir las condiciones de la inestabilidad que produce patrones espaciales, también conocida como inestabilidad de Turing.

2.1. Modelos cinéticos activador-inhibidor

Para entender la idea de activación e inhibición, en [8] se ilustra con un ejemplo que consiste en describir la interacción entre saltamontes y el fuego en un campo de hierba seca. Los saltamontes actúan como inhibidores y el fuego como activador. Si los saltamontes se calientan lo suficiente, la sudoración genera humedad que impide la propagación del fuego. Este proceso crea patrones espaciales, limitando el área quemada a zonas no humedecidas. La distribución final de áreas quemadas y no quemadas, así como la ubicación de los saltamontes, dependen de los coeficientes de difusión y otros parámetros de la reacción. La analogía destaca cómo las diferencias en las tasas de difusión conducen a patrones espaciales específicos en este sistema.

Los modelos activador-inhibidor son fundamentales en diversos campos científicos, como biología, química y física, para entender una variedad de fenómenos. Estos modelos implican la interacción entre dos sustancias químicas: el activador estimula cierta actividad o proceso, mientras que el inhibidor la suprime o detiene. Además de estos efectos, existe un proceso llamado autocatálisis, donde las sustancias químicas se autoinducen a través de reacciones químicas específicas, es decir, una sustancia química se genera a sí misma a través de una reacción autocatalítica, lo que significa que a medida que su concentración aumenta, también aumenta la tasa de producción de esa sustancia. Cuando se combinan estos procesos de interacción activador-inhibidor y autocatálisis, se crean patrones espaciales complejos y dinámicas no lineales en el sistema. Esta combinación da lugar a comportamientos emergentes que son esenciales para comprender una variedad de fenómenos biológicos y físicos.

En el planteamiento original de Turing, a las sustancias que constituyen el activador y el inhibidor les llamó **morfógenos**. Si $\mathbf{u} = (u, v)$ es el vector de concentraciones de esos morfógenos, $\mathfrak{L} = \Delta$, $\mathbf{D} = \text{diag}[d_u, d_v]$ son sus respectivos coeficientes de difusión y $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p) = (f(\mathbf{u}; p), g(\mathbf{u}; p))$ contiene la cinética química de esos morfógenos con p un parámetro un conjunto de parámetros asociado con la cinética química, entonces, usando (2-3) se obtiene el siguiente problema de condiciones iniciales y de frontera:

$$(2-4) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \Delta u + \eta f(u, v; p), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_v \Delta v + \eta g(u, v; p), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } u \text{ y } v, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ u(\mathbf{x}, 0) = rnd(\mathbf{x}) + u_0, & \text{en } \Omega, \\ v(\mathbf{x}, 0) = rnd(\mathbf{x}) + v_0, & \text{en } \Omega. \end{array} \right.$$

donde $rnd(\mathbf{x})$ son valores aleatorios en el intervalo $(-\epsilon, \epsilon)$ para un valor pequeño ϵ , $\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0)$ es un punto de equilibrio, el cual define una solución estacionaria y homogénea del sistema de reacción-difusión, es decir, $\mathbf{F}(\mathbf{u}_0) = \mathbf{0}$.

La dinámica del sistema está contenida en las funciones f y g , que son importantes para comprender la evolución y el comportamiento de los morfógenos u y v . Estas funciones controlan la producción, la atenuación y disminución de los morfógenos, de manera no lineal, y están estrechamente ligadas a los procesos de activación, inhibición y autocatálisis. Esta conexión implica que las interacciones entre u y v son altamente complejas y dinámicas.

La diferencia fundamental entre los modelos matemáticos radica en las propiedades específicas de las funciones f y g . Una de estas propiedades se encuentra en los puntos de equilibrio y su estabilidad, ya que proporcionan información sobre cómo el sistema responde a pequeñas perturbaciones alrededor de un estado estacionario. Los puntos de equilibrio estables indican estados hacia los cuales el sistema tiende, mientras que los puntos inestables pueden dar lugar a dinámicas más complejas, como ciclos límite.

La inclusión de los coeficientes de difusión d_u y d_v adecuados en el modelo nos permite explorar los conceptos de activación local e inhibición lateral, con raíces históricas que se remontan, al menos, a Ernst Mach en 1885 con sus estudios sobre las bandas de Mach [8]. La activación local se refiere a la estimulación de áreas específicas en presencia de un estímulo, mientras que la inhibición lateral implica la supresión de áreas circundantes. Los umbrales de d_u y d_v dan lugar a lo que se conoce como bifurcación de Turing, asegurando que, como solución del sistema de reacción-difusión, se obtengan valores que oscilan alrededor del equilibrio, pero que en ciertos puntos espaciales permanecerán constantes para períodos de tiempo prolongados, lo que genera un patrón espacial.

2.2. Bifurcación de Turing

En el estudio de sistemas dinámicos, las bifurcaciones son puntos críticos donde ocurren cambios cualitativos en el comportamiento del sistema a medida que un parámetro de control p varía. Estos cambios pueden involucrar alteraciones en el número y la estabilidad de las soluciones del sistema. En sistemas dinámicos espaciales, como los descritos por ecuaciones de reacción-difusión (2-4), las bifurcaciones pueden manifestarse como transformaciones en la estructura de las soluciones y los patrones emergentes. En pocas palabras, la variación del parámetro p puede dar lugar a cambios drásticos en la dinámica del sistema.

Para ilustrar la bifurcación de Turing, se estudia la dinámica de sistemas de la forma (2-4) en una dimensión $\Omega = (a, b)^N$. Considerando inicialmente que $d_u = d_v = 0$, el sistema dinámico libre de difusión es:

$$(2-5) \quad \frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{u}; p).$$

Dada una solución $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ del sistema (2-5), es posible examinar las propiedades de estabilidad de esa solución, perturbando ligeramente un punto de equilibrio $\mathbf{u}_0(p)$, es decir:

$$(2-6) \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_0(p) + \kappa \mathbf{v}(\mathbf{x}, t),$$

donde $0 < \kappa \ll 1$. En los sistemas de reacción-difusión los patrones de Turing son un tipo de atractor asintótico (cuando t tiende a infinito), para que un punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$ sea asintóticamente estable ante perturbaciones temporales, se necesita que se cumplan dos cosas:

1. Que $\mathbf{u}_0$ sea estable (en el sentido de Lyapunov)
2. Que si $\mathbf{u}(t)$ es otra solución cercana a $\mathbf{u}_0$, ocurra

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \|\mathbf{u}(t) - \mathbf{u}_0\| = 0$$

Sustituyendo (2-6) en (2-5) y agrupando a primer orden en potencias de κ se obtiene la ecuación que gobierna a la perturbación $\mathbf{v}$:

$$(2-7) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \eta \mathbf{J}(p) \mathbf{v}, & \text{en } t \in (0, \infty), \\ \mathbf{v}(x, 0) = rnd(\mathbf{x}), & \text{en } t = 0. \end{cases}$$

Aquí $\mathbf{J} = \mathbf{J}(p)$ es la matriz jacobiana asociada con $\mathbf{F}$, evaluada en el punto de equilibrio $\mathbf{u}_0(p)$. Entonces, si todos los valores propios de la matriz $\mathbf{J}$ son negativos, $\mathbf{v}$ decae con el tiempo y se dice que $\mathbf{u}_0$ es linealmente estable. La linealización que conduce a (2-7) es adecuada para perturbaciones iniciales infinitesimales de orden $\mathcal{O}(\kappa)$.

Al extender espacialmente el sistema, considerando los coeficientes de difusión d_u y d_v de las concentraciones en el dominio $\Omega = (a, b)^N$, el problema (2-4) linealizado tiene la forma

$$(2-8) \quad \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{D} \Delta \mathbf{v} + \eta \mathbf{J}(p) \mathbf{v},$$

donde $\mathbf{D} = \text{diag}[d_u, d_v]$, junto a las condiciones de frontera y condiciones iniciales aleatorias alrededor del punto de equilibrio.

Considerando ahora el problema independiente del tiempo asociado a (2-8):

$$(2-9) \quad \begin{cases} \Delta W + k^2 W = 0, & \text{en } \Omega, \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } W, & \text{en } \partial\Omega. \end{cases}$$

Por ser un sistema traslacionalmente invariante, es natural analizar la estabilidad o inestabilidad de los modos de Fourier $W = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, en términos del número de onda $k = \|\mathbf{k}\|$. Dado el problema espectral planteado en (2-9), parece lógico considerar una solución que sea una combinación lineal de las funciones propias del operador Δ (modos de Fourier), esto es

$$(2-10) \quad \mathbf{v} = \sum_k V_k e^{\lambda t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}},$$

donde $V_k \in \mathbb{R}^2$. Sustituyendo (2-10) en (2-8), se obtiene

$$(2-11) \quad \sum_k \lambda V_k e^{\lambda t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = - \sum_k \mathbf{D} V_k k^2 e^{\lambda t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \sum_k \eta \mathbf{J} V_k e^{\lambda t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}},$$

Entonces, para obtener soluciones no triviales se requiere

$$(2-12) \quad \det(\lambda \mathbf{I} + k^2 \mathbf{D} - \eta \mathbf{J}) = 0,$$

donde $\mathbf{I}$ denota la matriz identidad de 2×2 . Las soluciones de (2-12), también conocida como relación de dispersión, produce los valores propios $\lambda(k^2)$ como función del cuadrado del número de onda k^2 , de la siguiente manera:

$$(2-13) \quad \lambda(k^2) = \frac{1}{2}[-h_1(k^2) \pm \sqrt{[h_1(k^2)]^2 - 4h_2(k^2)}],$$

donde

$$(2-14) \quad h_1(k^2) = k^2(d_u + d_v) - \eta \text{Tr}(\mathbf{J}),$$

$$(2-15) \quad h_2(k^2) = d_u d_v k^4 - \eta(d_v f_u + d_u g_v)k^2 + \eta^2 |\mathbf{J}|.$$

El estado estable $\mathbf{u}_0$ es linealmente estable si y solo si tanto $h_1(k^2)$ como $h_2(k^2)$ son positivos para todo k . Esta condición de estabilidad puede no cumplirse de cualquiera de las siguientes dos maneras:

1. $h_1(k_c^2) = 0$ para algún k_c , pero tanto $h_1(k^2)$ como $h_2(k^2)$ permanecen positivos para todo k .
2. $h_2(k_c^2) = 0$ para algún k_c , pero tanto $h_1(k^2)$ como $h_2(k^2)$ permanecen positivos para todo k .

En la inestabilidad de Tipo 1, la condición $h_1(k^2) > 0$ para todo $k \neq k_c$ implica que $k_c^2 = 0$. Por lo tanto, el parámetro de bifurcación, denotado como p , debe asegurar la condición $\text{Tr}(\mathbf{J}) = f_u + g_v = 0$. Inicialmente, esta situación indica que el punto de equilibrio no cumple con la condición de estabilidad. Sin embargo, es posible analizar este fenómeno mediante lo que se conoce como bifurcación de Turing-Hopf (Kuramoto, 1984), que establece una relación entre el parámetro

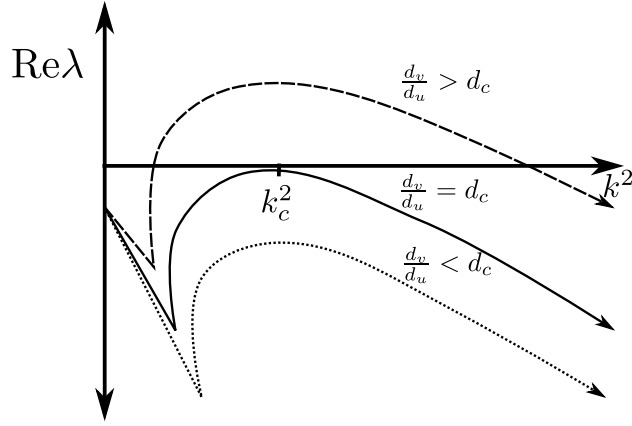


Figura 2-1: Gráfica de la relación de dispersión λ como función del cuadrado del número de onda k^2 . En el umbral de la inestabilidad (línea continua), $\frac{d_u}{d_v} = d_c$, la parte real de la relación de dispersión tiene un corte con el eje de números de onda. Modos inestables (línea discontinua), $\frac{d_u}{d_v} > d_c$, la relación de dispersión corta en dos puntos al eje de números de onda, lo que indica un cambio de signo en una región acotada en el dominio de números de onda. Finalmente, en el caso que produce modos estables (línea punteada), $\frac{d_u}{d_v} < d_c$, la curva de relaciones de dispersión no tiene cortes, manteniéndose negativa para todo número de onda.

de bifurcación de Tipo 1 y el de Tipo 2.

En este estudio, se enfocará en la inestabilidad de Tipo 2 en sistemas de reacción-difusión, un concepto introducido por Turing en 1952 [5]. Normalmente, el parámetro de bifurcación se define como el cociente de los dos coeficientes de difusión, $d = \frac{d_u}{d_v}$, y su valor, junto con el número de onda crítico k_c^2 , se determina a partir de las condiciones $h_2(k) = 0$ y $\frac{dh_2(k)}{dk^2} = 0$. Así, cuando $\frac{d_u}{d_v} = d_c$, la relación de dispersión $\lambda(k^2)$ se encuentra en el umbral de la inestabilidad con un valor de λ crítico, denotado como λ_c . Al variar d_c , se obtienen los modos de Fourier inestables, como se muestra en la Figura 2-1. La garantía de la inestabilidad de Turing o cambio de signo de λ para ciertos valores de k^2 se resume en las condiciones de Turing, que son [5]:

$$(2-16) \quad \begin{cases} \text{Tr}(\mathbf{J}) < 0, \\ \det(\mathbf{J}) > 0, \\ \frac{d_v}{d_u} f_u + g_v > 0, \\ \left(\frac{d_v}{d_u} f_u + g_v\right)^2 - 4 \frac{d_v}{d_u} |\mathbf{J}| > 0. \end{cases}$$

Las dos primeras condiciones en (2-16) hacen referencia a la estabilidad del punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$, mientras que las dos últimas condiciones hacen parte de la desestabilización del punto de equilibrio por efecto de la difusión. A continuación estudiamos estas dos condiciones en dos modelos muy usados en la literatura para estudiar fenómenos químicos o biológicos en una, dos o tres dimensiones.

2.2.1. Modelo de Schnakenberg

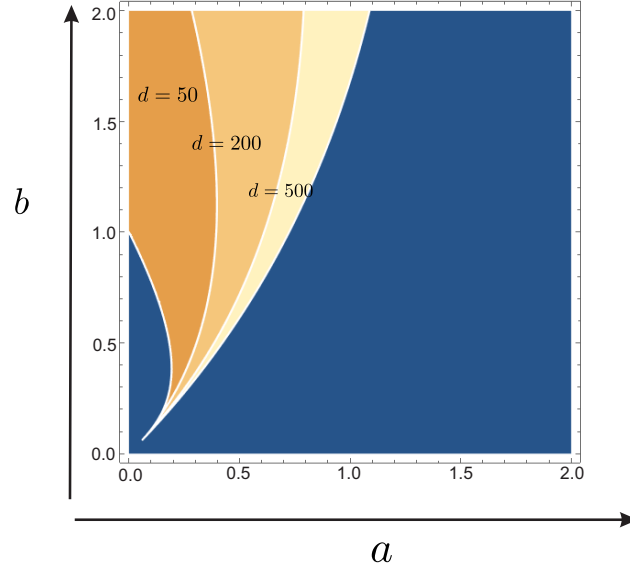


Figura 2-2: Regiones en el espacio de parámetros a vs b del modelo de Schnakenberg donde ocurre inestabilidad de Turing para diferentes valores de difusión d . Región azul no ocurre inestabilidad de Turing, región amarilla inestabilidad para valores d entre 1 y 50, región naranja clara inestabilidad para valores d entre 50 y 200 y región naranja inestabilidad para valores d entre 200 y 500.

El sistema de reacción-difusión de Schnakenberg ha sido una herramienta fundamental en el estudio de patrones espaciales y dinámicas no lineales en sistemas biológicos y químicos. Su popularidad radica en su simplicidad y capacidad para modelar una amplia gama de fenómenos complejos. Se considerará el sistema en su forma adimensional como sigue

$$(2-17a) \quad \frac{du}{dt} = \Delta u + \eta (a - u + u^2v),$$

$$(2-17b) \quad \frac{dv}{dt} = d\Delta v + \eta (b - u^2v),$$

donde a y b son constantes positivas. El sistema tiene un único estado de equilibrio en $(u_0, v_0) = (a + b, b/(a + b)^2)$ y las condiciones de inestabilidad de Turing (2-16) son

$$(2-18) \quad \begin{cases} \frac{b-a}{a+b} - (a+b)^2 < 0, \\ (a+b)^2 > 0, \\ \frac{b-a}{a+b} - d(a+b)^2 > 0, \\ \left(\frac{b-a}{a+b} - d(a+b)^2 \right) - 4d(a+b)^2 > 0. \end{cases}$$

Los valores críticos son

$$(2-19) \quad d_c = \frac{(a+b)(a+3b) - 2\sqrt{2b(a+b)^3}}{(a+b)^4},$$

y

$$(2-20) \quad k_c^2 = \frac{\eta(a+b) \left((a+b)^2 + \sqrt{2} \sqrt{b(a+b)^3} \right)}{b-a}.$$

2.2.2. Modelo de Barrio-Varea-Aragon-Maini (BVAM)

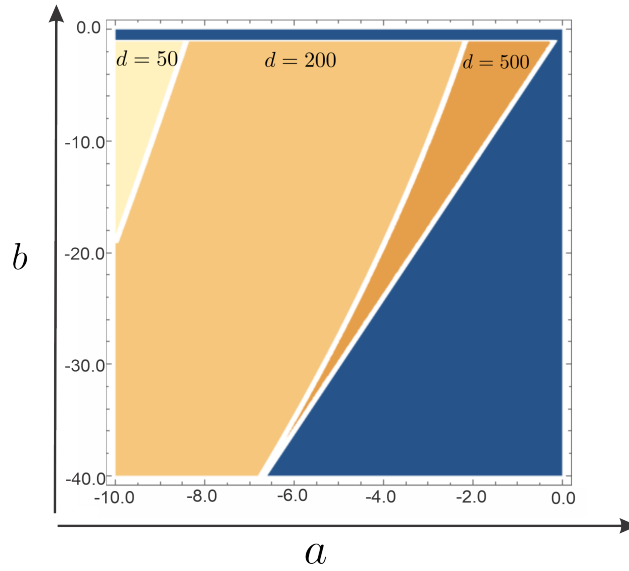


Figura 2-3: Regiones en el espacio parámetros a vs b del modelo de BVAM donde ocurre inestabilidad de Turing para diferentes valores del coeficiente de difusión d . En la región azul no ocurre inestabilidad de Turing, en la región amarilla se produce inestabilidad para valores de d entre 1 y 50, y en región naranja se produce la inestabilidad para valores de d entre 50 y 200. Finalmente, en la región naranja se produce la inestabilidad para valores de d entre 200 y 500.

El modelo de BVAM es un sistema de R-D de propósitos generales que se ha usado para modelar una diversidad de patrones en sistemas biológicos, que tiene la siguiente forma [14]:

$$(2-21) \quad \begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \Delta u + \eta(u + av - cuv - uv^2), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d\Delta v + \eta(hu + bv + cuv + uv^2), \end{aligned}$$

donde $a > 0$, $h < 0$, b y c son parámetros de la cinética y η es un factor de escala. Este sistema tiene tres puntos de equilibrio [14], pero para la finalidad de este capítulo consideraremos sólo el punto de equilibrio $(u_0, v_0) = (0, 0)$, con el que las condiciones de Turing (2-16) para la generación de patrones son [14]:

$$(2-22) \quad \begin{cases} ah < b < -1, \\ 1 + db > 0, \\ (1 + db)^2 - 4d(b - ah) > 0. \end{cases}$$

Para concluir este capítulo, es importante recalcar la importancia las Figuras **2-2** y **2-3**, que muestran las regiones de inestabilidad correspondientes a diferentes valores de difusión en el espacio de parámetros a versus b , de ambos modelos, respectivamente. Estas áreas de inestabilidad se determinan mediante la búsqueda de condiciones que satisfacen los criterios de inestabilidad de Turing, expresados explícitamente en (2-18) y (2-22) para los modelos de Schnakenberg y BVAM, respectivamente.

En ambos casos, se observa que a medida que el coeficiente de difusión aumenta, la región en la que ocurre la inestabilidad de Turing se amplía. Este aumento en el coeficiente de difusión guarda una relación directa con el incremento en el número de onda, indicando una mayor variabilidad entre los máximos y mínimos de concentración. Este fenómeno subraya la importancia de la difusión en la generación de patrones de inestabilidad de Turing, y destaca cómo ajustes en los parámetros de difusión pueden influir significativamente en la complejidad de los patrones resultantes.

2.3. Difusión no homogénea

La difusión molecular es el movimiento térmico de partículas en líquidos o gases, causado por la temperatura y tamaño de las partículas. Este proceso aleatorio conduce al flujo de moléculas desde áreas con más concentración hacia áreas con menos concentración, resultando una mezcla uniforme de material. Cuando las concentraciones se igualan, las moléculas continúan moviéndose en un equilibrio dinámico, llevando eventualmente a una mezcla completa en ausencia de fuerzas externas. Las leyes de Fick son fundamentales para comprender el proceso de difusión; la primera Ley de Fick establece que el flujo de materia, representado por el vector j_u , es proporcional al gradiente de concentración, y se puede expresar como:

$$j_u = -\mathfrak{D}\nabla u,$$

donde $\mathfrak{D}$ es una función de proporcionalidad, en este caso es el coeficiente de difusión.

La segunda Ley de Fick se relaciona con la ley de conservación de masa y describe cómo cambia la concentración local de una especie en el tiempo, debido a las moléculas que entran o salen de un volumen finito por difusión. Esta ley se expresa como

$$\frac{\partial}{\partial t}u = \nabla \cdot \mathfrak{D}\nabla u.$$

En este caso el operador $\mathfrak{L}(\cdot) = \nabla \cdot \mathfrak{D}\nabla(\cdot) = d\Delta(\cdot)$ no es más que el operador de Laplace (Δ) siempre y cuando $\mathfrak{D} = d$ constante y se utiliza para describir cómo las variaciones espaciales en la concentración de una sustancia conducen a cambios en su distribución temporal. Esta formulación matemática es esencial para entender cómo las sustancias se difunden y se distribuyen en sistemas físicos y biológicos.

La heterogeneidad en la difusión se refiere a las variaciones en el coeficiente de difusión $\mathfrak{D}$ de las concentraciones en diferentes posiciones. En este sentido, la función $\mathfrak{D}$ varía espacialmente, es

decir, $\mathfrak{D} = \mathfrak{D}(\mathbf{x})$. Si bien el operador $\mathfrak{L}(\cdot) = \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla(\cdot)$ no se puede simplificar en un laplaciano convencional, se puede relacionar con problemas de Sturm-Liouville [15] y, a partir de esta relación, las soluciones se obtienen mediante expansiones en funciones propias, un proceso que se explicará detalladamente en el siguiente capítulo. En el contexto de patrones de Turing, es necesario que el problema de Sturm-Liouville tenga una solución conocida y este no es siempre el caso. Entre las funciones $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ que se han estudiado en la literatura, destaca el trabajo [16], en donde se usa la perturbación espacial en el coeficiente de difusión $\mathfrak{D}(x) = d + \delta x^2$, controlada por el parámetro δ . En ese trabajo, logran eliminar la degeneración del operador diferencial homogéneo¹ en regiones rectangulares, y adicionalmente explican las transiciones de manchas a franjas que se produce al aumentar los valores de d . También cabe mencionar el trabajo [17], en donde se obtienen patrones autosimilares, o semejantes a diferentes escalas, en un dominio circular, al estudiar un modelo con super difusión generada por $\mathfrak{D}(r) = r^{-\lambda}$, donde r denota al radio de la región circular y λ es un parámetro que controla la superdifusión.

También en [18] se introduce una metodología basada en expansiones de Galerkin, para generalizar el acoplamiento de modos de Turing, para así poder abordar diversos tipos de heterogeneidad espacial, es decir en presencia de operadores con coeficientes de difusión $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ en términos generales. Además, esta metodología permite identificar lo que el autor denomina “múltiples modos de Turing inestables”, los cuales compiten por la dominancia en el sistema. Esto conduce a la formación de patrones que exhiben estructuras correspondientes a varios modos de Turing con diferentes longitudes de onda, en contraposición a la presencia de solo uno o unos pocos modos.

Un conjunto específico de operadores diferenciales surge cuando la función $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ es periódica. En el caso particular de los materiales compuestos reforzados unidireccionalmente con fibras, las fibras se organizan de manera periódica en una matriz (medio aglutinador) para formar una estructura regular $\Omega = \Omega_1^\varepsilon \cup \Omega_2^\varepsilon \cup \Gamma^\varepsilon$, como se describe en [19]. Esta estructura se caracteriza por un espaciado uniforme entre las fibras, del mismo orden de magnitud que el radio de cada fibra R_ε . En este contexto, se considera un dominio compuesto por dos materiales, Ω_1^ε y Ω_2^ε , que son disjuntos ($\Omega_1^\varepsilon \cap \Omega_2^\varepsilon = \emptyset$) y conectados a lo largo de la frontera $\Gamma^\varepsilon = \partial\Omega_2^\varepsilon$. Aquí, Ω_1 representa la matriz o conjunto conexo, mientras que Ω_2 es la fibra o conjunto disconexo. Se define L como la longitud del cuadrado Ω y l como la longitud de la celda periódica Ω_l . Además, se considera que $0 < \varepsilon = \frac{l}{L} \ll 1$ es un parámetro adimensional, lo que permite introducir coordenadas locales $\mathbf{y} = \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{x}$ en términos de las coordenadas globales $\mathbf{x}$.

En un material fibroso, como se describe anteriormente y se ilustra en la Figura 6-1, los coeficientes de difusión se caracterizan mediante un tensor simétrico de segundo orden. Este tensor varía dependiendo de si se encuentra dentro o fuera de la fibra, y se define de la siguiente manera:

$$(2-23) \quad \mathfrak{D}_{jl}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathfrak{D}_{jl}^{(1)}, & \text{sobre } \Omega_1^\varepsilon, \\ \mathfrak{D}_{jl}^{(2)}, & \text{sobre } \Omega_2^\varepsilon. \end{cases}$$

¹Si bien en matemáticas el concepto de degeneración se da en diversos contextos, en este trabajo nos referiremos al problema de valores propios, y un operador es degenerado si un valor propio de ese operador está asociado con más de una función propia.

Estas ideas sobre operadores periódicos se extenderán en el Capítulo 3, con un análisis más detallado, utilizando un enfoque de homogenización en varias escalas.

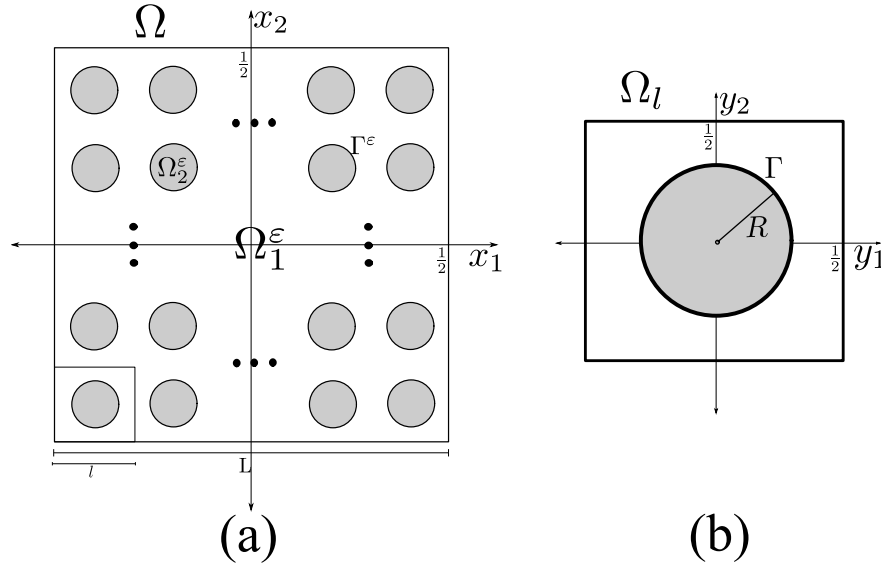


Figura 2-4: a) Celda unitaria cuadrada que representa un material fibroso ($\Omega = \Omega_1^\varepsilon \cup \Omega_2^\varepsilon \cup \Gamma^\varepsilon$) organizado periódicamente con periodo ε . b) Celda periódica en coordenadas $\mathbf{y}$.

Un fenómeno como el anterior se manifiesta en la difusión confinada, en el que los canales iónicos cuentan con sitios activos en donde ocurren reacciones químicas, similar a la catálisis heterogénea en los poros irregulares de las zeolitas. Las condiciones de inestabilidad de Turing pueden alterarse debido a la geometría del canal, como se ha explorado en investigaciones recientes [12]. Este fenómeno se analiza comúnmente utilizando el **operador Fick-Jacobs-Zwanzig**, que se aplica para estudiar la difusión de partículas puntuales dentro de un canal estrecho con límites definidos por funciones diferenciables $y_1(x)$ y $y_2(x)$, donde su longitud es considerablemente mayor que su ancho, determinado por $w(x) = y_2(x) - y_1(x)$:

$$(2-24) \quad \mathfrak{L}(\cdot) = L_{FJZ}(\cdot) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\mathfrak{D}(x) w(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{(\cdot)}{w(x)} \right) \right].$$

El coeficiente $\mathfrak{D}$ también se puede considerar como un tensor de orden alto, cuando la difusión dependa de las direcciones espaciales, lo que se conoce como difusión anisotrópica. Este fenómeno es común en arreglos celulares con estructura de fibras, donde el coeficiente de difusión $\mathfrak{D}$ es mayor en la dirección de las fibras que en la dirección transversal. Esta anisotropía puede representarse mediante el siguiente operador tensorial:

$$(2-25) \quad \mathfrak{L}(\cdot) = \nabla \cdot \mathfrak{D}(x) \nabla(\cdot) = \nabla(\sigma^l \mathbf{g}_{ij} + (\sigma^l - \sigma^t) \tau \otimes \tau^T) \nabla(\cdot),$$

donde $\mathbf{g}_{ij}$ denota al tensor métrico que se reduce a la matriz identidad en un sistema de coordenadas ortogonales. Además, el campo vectorial τ , junto con los coeficientes de difusión σ^l y σ^t , representa las tasas de difusión a lo largo y transversal al campo vectorial, respectivamente. A modo de ejemplo, en un estudio realizado en [9], se mostró que en dos especies de peces *Genicanthus*, durante

su conversión sexual, comparten propiedades morfológicas casi idénticas, excepto por la dirección de sus franjas. En ambas especies, aparecen manchas de forma transitoria en posiciones aleatorias, las cuales luego se combinan y reorganizan para formar franjas direccionales. Este estudio concluyó que la anisotropía en la difusión es eficaz para especificar la dirección de las franjas formadas por el modelo de reacción-difusión (R-D).

Cabe destacar que en la mayoría de los estudios se desprecia el grosor de la superficie. Por ejemplo, la difusión de proteínas en las bicapas lipídicas puede considerarse como una difusión en una superficie curva bidimensional. Se ha demostrado que el efecto del espesor y la curvatura puede desempeñar un papel importante en la generación de patrones espaciales [20, 10, 11]. Dependiendo de la geometría del sustrato donde se difunde la especie (plano o esfera), se ha observado una modificación en el rango del número de onda. Estas características geométricas de la difusión superficial están codificadas en el **operador Laplace-Beltrami**, definido, para una superficie regular $X(\xi, \zeta)$, en $\mathbb{R}^3$, como

$$(2-26) \quad \mathfrak{L}(\cdot) = \Delta_{LB}(\cdot) = \frac{1}{h_1 h_2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_2}{h_1} \frac{\partial}{\partial \xi}(\cdot) \right) + \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{h_1}{h_2} \frac{\partial}{\partial \zeta}(\cdot) \right) \right],$$

donde $h_1 = |X_\xi|$ y $h_2 = |X_\zeta|$ están determinados por el tensor métrico.

Se ha reconocido la importancia de la difusión no homogénea en sistemas biológicos, especialmente en el problema de la filotaxia, que se refiere a la formación de órganos laterales en las plantas. En este contexto, se sabe que la difusión de la fito-hormona auxina, que es esencial para la formación de los órganos de las plantas, no es homogénea y además, su difusión se ve influenciada por las propiedades elásticas del domo apical. Como resultado, se ha propuesto un modelo mecano-químico para describir la formación de los órganos laterales en las plantas, en el cual la matriz de difusión del sistema de reacción-difusión depende de un tensor de esfuerzos [13]. En este tipo de modelos la ley de conservación en forma integral en una sección $\Omega(\mathbf{X}, t)$ queda formulada de la siguiente manera

$$(2-27) \quad \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega(t)} C(\Gamma(s, t)) dV = \int_{\Omega(t)} [-\nabla \cdot \mathbf{j} + F(C)] ds,$$

donde aplicamos la ley de Fick $\mathbf{j} = -D \mathfrak{D} \nabla C$. Suponiendo que conocemos el campo vectorial de deformación τ de $\Omega(\mathbf{X}, t)$, podemos utilizar el teorema de transporte de Reynolds y el teorema de la divergencia, para deducir el modelo de reacción-difusión en dominios con crecimiento, como sigue [21]:

$$(2-28) \quad \int_{\Omega(t)} \left[\frac{\partial C}{\partial t} dV + \nabla \cdot (C \tau) \right] dV = \int_{\Omega(t)} [D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla C + F(C)] dV.$$

Con esto, el operador diferencia toma la forma

$$(2-29) \quad \mathfrak{L}(\cdot) = D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla(\cdot) - \tau \cdot \nabla(\cdot) - \nabla \cdot \tau(\cdot).$$

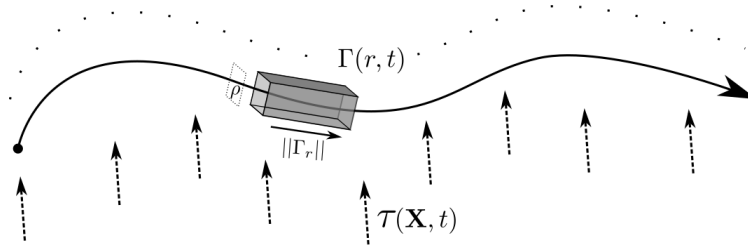


Figura 2-5: Deformación de un elemento de volumen por efectos del campo τ

En el contexto de dominios unidimensionales curvos deformables, asumidos en la Figura 2-5, el dominio $\Omega(s, t)$ se transforma en $\Gamma(r, t)$, que define una curva para cada instante t y está parametrizada por r . Al simplificar así el problema, se introduce una formulación más adecuada, descrita en [20], que conduce a la siguiente expresión compacta:

$$(2-30) \quad \mathfrak{L}(\cdot) = \frac{1}{(\sigma_r)^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}(\cdot) + \frac{\sigma_{rr}}{\sigma_r} \frac{\partial}{\partial r}(\cdot) \right) - \frac{\sigma_{rt}}{\sigma_r}(\cdot),$$

esta formulación se deriva de la longitud de arco $\sigma(r, t) = \int_0^r \sqrt{(\Gamma_s^1)^2 + (\Gamma_s^2)^2 + (\Gamma_s^3)^2} ds$ y el campo vectorial $\tau(\mathbf{X}, t)$ de deformación queda determinado por Γ_t .

En los párrafos anteriores, se introdujeron diversos operadores diferenciales, algunos de los cuales se emplearán en los próximos capítulos para analizar cómo la no homogeneidad y la anisotropía contribuyen a la formación de patrones de Turing.

3 Modelo de reacción-difusión con operador de Sturm-Liouville

Entre los modelos matemáticos para representar fenómenos con estructuras auto-organizadas se encuentran los sistemas de reacción difusión que, a pesar de las simplificaciones que contienen, constituyen un buen modelo para una gran variedad de fenómenos. Desde la propuesta de Turing, en 1952, han habido muchos avances en la generalización del modelo original para incluir situaciones más realistas. En este trabajo es de interés la generalización a dominios que contienen inhomogeneidades de origen espacial, y una de las maneras de modelar esta situación es considerar coeficientes de difusión que dependan de las coordenadas espaciales. Entonces, en este capítulo se presenta la teoría de la generación de patrones, por medio de ecuaciones de reacción-difusión, en donde los coeficientes de difusión dependen de las coordenadas espaciales. Para ello, se hará uso de la Teoría de Sturm-Liouville para deducir las condiciones de inestabilidad de Turing y las ecuaciones de amplitud de Stuart-Landau, extendiendo los resultados al caso de operadores a dos dimensiones. El análisis no lineal que se propone permite predecir las amplitudes de los patrones, para pequeñas perturbaciones en los parámetros del sistema, así como caracterizar las regiones de los parámetros por el tipo de patrón que se genera (manchas o franjas en el caso 2D).

Como una generalización a los sistemas reacción difusión se usará la forma presentada en [15], en términos de operadores de Sturm-Liouville, y se extiende esa forma a varias dimensiones. Suponiendo que $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times [0, \infty) \subset \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, un modelo de reacción difusión en la forma divergente de Sturm-Liouville se puede plantear de la siguiente forma

$$(3-1) \quad \begin{cases} \frac{d(w(\mathbf{x})\mathbf{u})}{dt} = \mathbf{D}\nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x})\nabla \mathbf{u} + \eta w(\mathbf{x})\mathbf{F}(\mathbf{u}; p), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } \mathbf{u}, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = rnd(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega, \end{cases}$$

En esta formulación, como se especificó previamente, $rnd(\mathbf{x})$ representa valores aleatorios en el intervalo $(-\epsilon, \epsilon)$, donde ϵ es pequeño. $\mathbf{u}_0$ denota un estado crítico ($\mathbf{F}(\mathbf{u}_0) = 0$), y $w(\mathbf{x})$ es una función de peso, con la propiedad $w(\mathbf{x}) > 0$ en Ω . En general, el vector de morfógenos $\mathbf{u}$ puede tener $m > 0$ componentes, pero en este trabajo nos limitaremos a considerar únicamente dos de ellas, denotadas como $\mathbf{u} = (u, v)^T$. Similarmente, para el campo vectorial no lineal $\mathbf{F}$, que representa la cinética química, se utilizará la notación $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p) = (f(\mathbf{u}; p), g(\mathbf{u}; p))^T$. Aquí, p representa un conjunto de parámetros de bifurcación de la cinética química, η es un parámetro positivo de escala, y $\mathbf{D}$ es una matriz de 2×2 que se fijará como una matriz diagonal $\mathbf{D} = \text{diag}[d, 1]$. Es importante destacar que $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ corresponde a un tensor simétrico y definido positivo.

3.1. Problema de Sturm-Liouville

La relevancia de los problemas de Sturm-Liouville reside en su capacidad para generar una base de funciones propias vinculadas a un conjunto de valores propios, los cuales constituyen un espacio de funciones definido. Esta característica permite representar el sistema de ecuaciones (3-1) mediante estas funciones y valores propios, aprovechando además las propiedades de ortogonalidad que poseen. En el contexto de la teoría de patrones de Turing, estos problemas emergen al investigar la relación de dispersión del problema lineal asociado a los sistemas de reacción-difusión, como se explorará en la próxima sección.

En particular, en una dimensión, en el intervalo $\Omega = (a, b)$, un problema de Sturm-Liouville se describe como un problema de valores propios con la siguiente estructura:

$$(3-2) \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \mathfrak{D}(x) \frac{\partial}{\partial x} q(x) = -l w(x) q(x), & \text{en } \Omega, \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } q, & \text{en } \partial\Omega. \end{cases}$$

Cuando los límites del dominio, marcados como a y b , están definidos de manera finita, y las funciones $\mathfrak{D}(x)$, $\mathfrak{D}'(x)$ y $w(x)$ muestran continuidad en el intervalo $[a, b]$, junto con $\mathfrak{D}(x)$ y $w(x)$ siendo positivas en dicho intervalo, se clasifica el problema como Sturm-Liouville regular. En caso de que alguna de estas condiciones no se cumpla, se denomina como un problema Sturm-Liouville no regular. Dentro de esta categoría, destacan dos tipos particulares: los problemas Sturm-Liouville periódicos, que se caracterizan por tener condiciones de contorno periódicas, y los problemas Sturm-Liouville singulares, donde la función $\mathfrak{D}(x)$ e incluso $w(x)$ pueden anularse en uno o en ambos extremos del intervalo.

Suponiendo que el problema es regular, es decir $\mathfrak{D}(x) > 0$ y $w(x) > 0$, $\forall x \in \Omega = [a, b]$, se tienen las siguientes condiciones de Robin

$$(3-3) \quad \begin{cases} \chi_1 q(a) + \chi_2 q'(a) = 0, \\ \chi_3 q(b) + \chi_4 q'(b) = 0, \end{cases} \quad \chi_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, 4, \quad |\chi_1| + |\chi_2| > 0, \quad |\chi_3| + |\chi_4| > 0,$$

o, en el caso singular, es decir $\mathfrak{D}(a) = 0$ o $\mathfrak{D}(b) = 0$, se consideran condiciones de Neumann en el límite

$$(3-4) \quad \lim_{x \rightarrow a^+, b^-} \mathfrak{D}(x) q'(x) = 0.$$

Bajo estas condiciones de frontera el Teorema de Sturm-Liouville [22, Theorem 2.14] no solo garantiza la existencia de un conjunto numerable de valores propios reales $\{l_n\}_{n=0}^\infty$, sino también la de un base ortogonal completa con función de peso $\omega(\mathbf{x})$ de funciones propias $\{W_n\}_{n=0}^\infty$ para el espacio $L^2_{w(x)}(a, b)$.

En general, y para $\mathbb{R}^n$, se garantiza la existencia de valores y funciones propias asociadas a un operador elíptico en su forma divergente cuando se cumplen ciertas condiciones, como $w(\mathbf{x}) = 1$ y condiciones de Dirichlet $q = 0$ en la frontera $\partial\Omega$ de un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Este resultado está respaldado por el siguiente Teorema [23, Theorem 1, p. 335]:

Teorema 1 *Suponga que cada componente del tensor $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ de (3-2), satisface*

- *Diferenciable. $\mathfrak{D}_{ij} \in C^\infty(\bar{\Omega})$.*
- *Simétrica: $\mathfrak{D}_{ij} = \mathfrak{D}_{ji}$.*
- *Definida positiva: $\mathfrak{D}_{ij}\xi_i\xi_j \geq \varkappa\xi_j\xi_j$, para todos los $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \in \mathbb{R}^N$, donde $\varkappa > 0$ es una constante positiva,*

entonces

1. *Cada valor propio l es real.*
2. *Si cada valor propio se repite, según su multiplicidad finita, se tiene $\Sigma = \{l_k\}_{k=1}^\infty$, donde*

$$0 < l_1 \geq l_2 \geq l_3 \geq \dots,$$

y

$$l_k \rightarrow \infty \text{ cuando } k \rightarrow \infty$$

3. *Finalmente, existe una base ortonormal $\{W_k\}_{k=1}^\infty$ de $L^2(\Omega)$, donde $W_k \in H_0^1(\Omega)$ (H_0^1 es el espacio de Hilbert de funciones diferenciables y de traza cero) es una función propia correspondiente a l_k .*

$$(3-5) \quad \begin{cases} \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla W_k = -l_k W_k & \text{en } \Omega, \\ W_k = 0 & \text{sobre } \partial\Omega, \end{cases}$$

para $k = 1, 2, 3, \dots$.

Las funciones ortogonormales con respecto al peso $w(\mathbf{x})$ tienen una propiedad crucial que permite representar cualquier función cuadrado integrable en el espacio de Hilbert asociado a w . En términos precisos, una función $f(\mathbf{x})$ es cuadrado integrable con respecto al peso $w(\mathbf{x})$ si satisface:

$$\int_{\Omega} |f(\mathbf{x})|^2 w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} < \infty.$$

En este contexto, una colección de funciones $\{W_n(\mathbf{x})\}$ se denomina ortogonal con respecto al peso $w(\mathbf{x})$ si cumple con la condición de ortogonalidad:

$$(3-6) \quad \int_{\Omega} W_n(\mathbf{x}) W_m(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 0 \quad \text{para } n \neq m.$$

Además, si estas funciones están normalizadas, es decir,

$$\int_{\Omega} W_n(\mathbf{x}) W_n(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1,$$

entonces se dice que son ortonormales con respecto al peso $w(\mathbf{x})$.

La capacidad de representar funciones cuadrado integrables se basa en la expansión en términos de estas funciones ortonormales. Cualquier función $f(\mathbf{x})$ cuadrado integrable con respecto a $w(\mathbf{x})$ puede ser expresada como una serie infinita de estas funciones ortonormales:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n W_n(\mathbf{x}),$$

donde los coeficientes c_n están dados por

$$c_n = \int_a^b f(\mathbf{x}) W_n(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Esta representación es poderosa porque convierte el problema de estudiar $f(\mathbf{x})$ en el problema de estudiar los coeficientes c_n y las funciones base $W_n(\mathbf{x})$. La propiedad de ortogonalidad asegura que estos coeficientes se pueden calcular de manera independiente, simplificando significativamente el análisis y manipulación de las funciones en el espacio de Hilbert ponderado.

3.2. Condiciones de Turing

Siguiendo el procedimiento estándar en $\Omega = [a, b]^n$, si $\mathbf{u}_0$ es un punto de equilibrio asintóticamente estable del sistema homogéneo $\mathbf{F}(\mathbf{u}_0; p) = \mathbf{0}$, se considera una perturbación de la forma

$$(3-7) \quad \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_0 + \mu \mathbf{v}(\mathbf{x}, t),$$

donde $0 < \mu \ll 1$. Sustituyendo (3-7) en (3-1), y agrupando a primer orden en potencias de μ , se obtiene la ecuación que gobierna a la perturbación $\mathbf{v}$:

$$(3-8) \quad \begin{cases} \frac{d(w(\mathbf{x})\mathbf{v})}{dt} = \mathbf{D}\nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x})\nabla \mathbf{v} + \eta w(\mathbf{x})\mathbf{J}\mathbf{v}, & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } \mathbf{v}, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{v}(\mathbf{x}, 0) = r\mathbf{nd}(\mathbf{x}), & \text{en } \Omega, \end{cases}$$

donde, $\mathbf{J}$ es la matriz jacobiana asociada a $\mathbf{F}$ evaluada en el punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$, de aquí en adelante se dará por hecho que estas dependen del conjunto de parámetros p . Tomando en cuenta el problema espectral planteado en (3-2), con condiciones de frontera adecuadas que aseguran la existencia de valores propios l_n y funciones propias W_n en el contexto de la teoría de Sturm-Liouville, es plausible considerar la solución como una combinación lineal de las funciones propias W_n , esto es

$$(3-9) \quad \mathbf{v} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathbf{c}_n(t) W_n(\mathbf{x}),$$

donde $\mathbf{c}(t) \in \mathbb{R}^2$. Sustituyendo (3-9) en (3-8), se obtiene

$$(3-10) \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\mathbf{c}_n}{dt} w W_n = \sum_{n=0}^{\infty} [\mathbf{D}\mathbf{c}_n \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla W_n + \eta \mathbf{J}\mathbf{c}_n w W_n],$$

en donde, en adelante, se entiende que $\mathfrak{D} = \mathfrak{D}(\mathbf{x})$, $w = w(\mathbf{x})$, $W_n = W_n(\mathbf{x})$ y $\mathbf{c} = \mathbf{c}(t)$, pero se omiten las variables independientes para simplificar las expresiones. Ahora, usando (3-2) en (3-10) se obtiene

$$(3-11) \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\mathbf{c}_n}{dt} w W_n = \sum_{n=0}^{\infty} [-\mathbf{D}\mathbf{c}_n l_n w W_n + \eta \mathbf{J}\mathbf{c}_n w W_n].$$

Al multiplicar la ecuación (3-11) por W_k , integrando en el dominio Ω , y aplicando la propiedad de ortogonalidad (3-6), se llega a:

$$(3-12) \quad \frac{d\mathbf{c}_k}{dt} = (-\mathbf{D}l_k + \eta \mathbf{J})\mathbf{c}_k.$$

Tomando $\mathbf{c}_k(t) = (c_1, c_2)^T e^{\lambda t}$, la condición para que el sistema algebraico (3-12) tenga solución distinta de la trivial es que se cumpla

$$(3-13) \quad \det(\lambda \mathbf{I} + l_k \mathbf{D} - \eta \mathbf{J}) = 0,$$

lo que produce

$$(3-14) \quad \lambda^2 + (l_k(1+d) - \eta(f_u + g_v))\lambda + h(l_k) = 0,$$

donde

$$(3-15) \quad h(l_k) = dl_k^2 - \eta(f_u + dg_v)l_k + \eta^2 \det(\mathbf{J}).$$

La ecuación (3-14) establece una relación entre los valores propios temporales λ y los espaciales l_k , que se conoce como relación de dispersión, cuyo análisis de esta relación proporciona valiosa información acerca de la estabilidad del sistema en presencia de perturbaciones espaciales.

El siguiente paso en el análisis de Turing es, una vez impuesto que $\mathbf{u}_0$ sea un punto de equilibrio asintóticamente estable, en ausencia de difusión, ahora debe ser inestable ante perturbaciones espaciales. Dado que las variables espaciales aparecen al introducir la difusión, este tipo de inestabilidad también se conoce como *inestabilidad impulsada por la difusión*. En otras palabras, a fin de desestabilizar la solución estacionaria y homogénea que proviene del punto de equilibrio asintóticamente estable se requiere que $Re(\lambda(l_k)) > 0$ para algún l_k , que a su vez requiere que $h(l_k)$ sea negativo para algún valor l_k distinto de cero. Esto es inmediato de la solución de (3-14), a saber

$$(3-16) \quad \lambda(l_k) = \frac{1}{2}[-(l_k(1+d) - \eta(f_u + g_v)) \pm \sqrt{[l_k(1+d) - \eta(f_u + g_v)]^2 - 4h(l_k)}].$$

Es de notar que si $l_{1,2}$ son raíces de h , es decir $h(l_{1,2}) = 0$, la relación de dispersión $\lambda(l_{1,2})^+ = 0$, lo que indica que las raíces de h son las raíces de λ^+ , por tanto, es suficiente analizar las variaciones de signo en la función $h(l_k)$. De la ecuación (3-15), es evidente que $h(l_k)$ representa una parábola que abre hacia arriba, lo que implica la existencia de un mínimo o vértice de la parábola en las coordenadas $(l_{k_m}, h_{min} = h(l_{k_m}))$. Realizando el cálculo de la abscisa del vértice o, como lo llamaremos en adelante, valor propio crítico l_{k_m} , se obtiene:

$$(3-17) \quad l_{k_m} = \eta \frac{(f_u + dg_v)}{2d}.$$

En la teoría de Sturm-Liouville los valores propios l_k deben ser positivos, en este sentido, esto se garantiza en (3-17) con la condición

$$(3-18) \quad f_u + dg_v > 0.$$

Entonces, la bifurcación tiene lugar cuando se satisface la condición $h_{min} = 0$. Sustituyendo (3-17) en la ecuación de $h(l_k)$, se obtiene $h_{min} = \eta^2(\det(\mathbf{J}) - (f_u + dg_v)^2/(4d))$, con lo que podemos asegurar que $h(l_k) < 0$, para algunos valores l_k , con la condición

$$(3-19) \quad (f_u + dg_v)^2 - 4d \det(\mathbf{J}) > 0.$$

Por otro lado, el valor de bifurcación $h_{min} = 0$ está determinado por la igualdad $\det(\mathbf{J}) = (f_u + dg_v)^2/(4d)$, despejando de esta expresión d se obtiene el valor umbral para el coeficiente de difusión crítica, que es

$$(3-20) \quad d_c = \frac{-2(2f_v g_u - f_u g_v) + \sqrt{(2(2f_v g_u - f_u g_v))^2 - 4f_u^2 g_v^2}}{2g_v^2}.$$

El valor propio crítico l_{k_c} está dado por,

$$(3-21) \quad l_c = l_{k_c} = \eta(\det(\mathbf{J})/d_c)^{1/2},$$

y el rango de inestabilidad $l_1 < l < l_2$ es obtenido de los ceros de la función $h(l) = 0$, que son

$$(3-22) \quad l_{1,2} = \frac{\eta}{2} \left((f_u + dg_v) \mp \sqrt{(f_u + dg_v)^2 - 4d \det(\mathbf{J})} \right),$$

En resumen, se han deducido las condiciones necesarias para la generación de patrones espaciales en un sistema de reacción-difusión con dos especies (3-1), que contiene un operador de Sturm-Liouville (3-2). Es importante observar que las dos primeras condiciones hacen referencia a la estabilidad asintótica del punto de equilibrio (basadas en los criterios de traza $\text{Tr}(\cdot)$ y determinante $\det(\cdot)$), mientras que las otras dos condiciones se refieren a su desestabilización debido a la difusión. Estas condiciones son las siguientes:

$$(3-23) \quad \begin{cases} \text{Tr}(\mathbf{J}) < 0, \\ \det(\mathbf{J}) > 0, \\ f_u + dg_v > 0, \\ (f_u + dg_v)^2 - 4d \det(\mathbf{J}) > 0. \end{cases}$$

Tal como se detalló en el capítulo previo, las funciones que describen la cinética del modelo satisfacen las relaciones $f_u > 0$ y $g_v < 0$. De este modo, la primera y tercera condiciones de (3-23) implican que el coeficiente de difusión debe cumplir $d < 1$.

Las soluciones derivadas del análisis lineal descrito en esta sección conducen a la identificación de una función propia crítica inestable, denotada como $W_{l_{k_c}}$, la cual experimenta un crecimiento exponencial en el tiempo. Sin embargo, es importante destacar que este incremento será eventualmente contrarrestado por los términos no lineales inherentes del sistema original. Como resultado

de esta interacción, emerge un estado de equilibrio que presenta heterogeneidad espacial.

El conocimiento encapsulado en la función propia crítica $W_{l_{k_c}}$ está estrechamente vinculado con la forma del patrón. Más específicamente, las raíces de estas funciones propias críticas $\{x_j \mid W_{l_{k_c}}(x_j) = 0\}$ determinan las longitudes de onda del patrón $x_{j+1} - x_j$, las cuales pueden variar en relación con las coordenadas espaciales. Este fenómeno es una consecuencia directa de las características del tensor de difusión $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$.

A pesar de haber abordado la problemática de la forma del patrón en las proximidades de los valores críticos, aún falta por determinar la amplitud de la función propia crítica $W_{l_{k_c}}$. La solución a este interrogante se logra a través de un enfoque que aborda las no linealidades de manera más sutil. En las referencias [3, 24, 25], se establece una metodología para estimar el valor de las amplitudes $\mathbf{c}_k(t)$ en el sistema (3-1), pero con $\mathfrak{D}(\mathbf{x}) = 1$ y $w(\mathbf{x}) = 1$. Esta aproximación consiste en aplicar un análisis débilmente no lineal, para obtener las ecuaciones de las amplitudes, llamadas ecuaciones de Stuart-Landau.

El procedimiento del análisis débilmente no lineal aplicado en [3, 24, 25], es estándar y utiliza el método de las múltiples escalas, que se basa en desarrollos en términos de las funciones propias del operador laplaciano, es decir, $\mathbf{c}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \bar{\mathbf{c}}(t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. En nuestro problema (3-1), el operador involucrado no es el laplaciano, por lo que proponemos una generalización del análisis débilmente no lineal, a operadores de Sturm-Liouville, proponiendo que el desarrollo puede hacerse usando algunas funciones propias que provengan del problema de Sturm-Liouville (3-2). Esto se presenta en la siguiente sección.

3.3. Análisis no lineal

Para comenzar se supone una solución de la forma

$$(3-24) \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_0 + (\mu\mathbf{u}_1 + \mu^2\mathbf{u}_2 + \mu^3\mathbf{u}_3 + \cdots),$$

donde $0 < \mu < 1$. También se introduce una escala temporal:

$$(3-25) \quad T = \hat{\omega}t,$$

donde

$$(3-26) \quad \hat{w} = \mu\omega_1 + \mu^2\omega_2 + \cdots.$$

La expansión de Taylor de la cinética $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p)$, en las dos variables $\mathbf{u} = (u, v)$, alrededor de $\mathbf{u}_0$ es:

$$(3-27) \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}; p) = \mathbf{F}_0 + \eta\mathbf{J}\mathbf{u} + \mathbf{Q}(\mathbf{u}, \mathbf{u}) + \mathbf{C}(\mathbf{u}, \mathbf{u}, \mathbf{u}) + \cdots,$$

en donde $\mathbf{F}_0 = \mathbf{0}$, y los términos $\mathbf{J}$, $\mathbf{Q}$ y $\mathbf{C}$, son el término lineal, cuadrático y cúbico, respectivamente, de la expansión, que están dados por:

$$(3-28) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} f_{uu}^* u_1 u_2 + f_{uv}^* u_1 v_2 + f_{vu}^* v_1 u_2 + f_{vv}^* v_1 v_2 \\ g_{uu}^* u_1 u_2 + g_{uv}^* u_1 v_2 + g_{vu}^* v_1 u_2 + g_{vv}^* v_1 v_2 \end{pmatrix},$$

$$(3-29) \quad \mathbf{C}(\mathbf{u}) = \frac{\eta}{6} \begin{pmatrix} f_{u^3}^* u^3 + 3f_{u^2v}^* u^2 v + 3f_{uv^2}^* u v^2 + f_{v^3}^* v^3 \\ g_{u^3}^* u^3 + 3g_{u^2v}^* u^2 v + 3g_{uv^2}^* u v^2 + g_{v^3}^* v^3 \end{pmatrix},$$

donde $\mathbf{u} = (u, v)$, $\mathbf{u}_1 = (u_1, v_1)$, $\mathbf{u}_2 = (u_2, v_2)$, y $*$ denota evaluación de las funciones en el punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$.

Al perturbar uno de los parámetros p , cerca de los valores críticos, la relación de dispersión se puede expandir en serie de Taylor alrededor de esos valores críticos, como

$$(3-30) \quad \begin{aligned} \lambda(p_c + \Delta p) &= \lambda(p_c) + \left. \frac{\partial \lambda}{\partial p} \right|_{p_c} \Delta p + \dots, \\ &= \left. \frac{\partial \lambda}{\partial p} \right|_{p_c} \Delta p + \dots, \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que la relación de dispersión se anula cuando se evalúa en los parámetros críticos y en el valor propio crítico l_c , es decir, $\lambda(l_c; p_c) = 0$, como se ilustra en la Figura **3-1**. Es deseable que el desplazamiento de λ , causado por la perturbación de los parámetros críticos, sea vertical para mantener el máximo de la relación de dispersión en el valor propio l_c . De esta manera, la forma del patrón se conserva y solo varía en amplitud. Esta condición se puede resumir como:

$$(3-31) \quad \left. \frac{\partial l_c}{\partial p} \right|_{p_c} = 0$$

En otras palabras, la perturbación no cambia el valor del valor propio crítico y, por tanto, el cambio en la solución depende únicamente de la amplitud $\mathbf{c}(t)$.

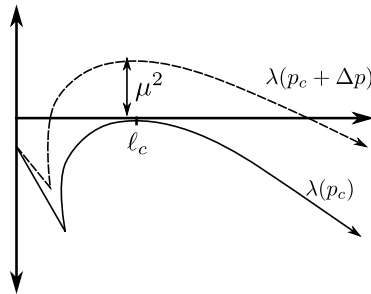


Figura 3-1: Desplazamiento horizontal de orden μ^2 de la relación de dispersión crítica por efectos de perturbación de algún parámetro crítico.

Sustituyendo (3-24), (3-25) y (3-27) en (3-1), se obtiene

$$(3-32) \quad \hat{w} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial T} = D \nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{x}) \nabla \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J} \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{C}(\hat{\mathbf{u}}) + \dots$$

Si adicionalmente el parámetro p es perturbado alrededor de su valor crítico

$$p = p_c + \hat{p} = p_c + (\mu p_1 + \mu^2 p_2 + \cdots),$$

entonces (3-32) expandido en serie de Taylor alrededor de p_c , produce

$$(3-33) \quad \begin{aligned} \hat{w} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial T} &= (D\nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla)^c \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J}^c \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{C}^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots + \\ &\hat{p}((D\nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla)_p^c \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J}_p^c \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}_p^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots), \end{aligned}$$

donde el subíndice p se refiere a la derivada con respecto a p y el superíndice c significa la evaluación en p_c .

Proponer una solución de la forma (3-24), es la base del método de perturbación usado en este trabajo, y produce la siguiente jerarquía de ecuaciones diferenciales lineales

$$(3-34) \quad \mathcal{O}(\mu) : \mathcal{L}\mathbf{u}_1 = \mathbf{0},$$

$$(3-35) \quad \mathcal{O}(\mu^2) : \mathcal{L}\mathbf{u}_2 = \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) - p_1 \mathcal{L}\mathbf{u}_1 - w_1 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial T},$$

$$(3-36) \quad \begin{aligned} \mathcal{O}(\mu^3) : \mathcal{L}\mathbf{u}_3 &= \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_1) - p_2 \mathcal{L}_p^c \mathbf{u}_1 - p_1 \mathcal{L}_p^c \mathbf{u}_2 + \\ &p_1 \mathbf{Q}^c(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) - w_1 \frac{\partial \mathbf{u}_2}{\partial T} - w_2 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial T}, \end{aligned}$$

donde

$$(3-37) \quad \mathcal{L} = (-\eta \mathbf{J} - D\nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla).$$

La existencia de una solución en $L^2_{w(\mathbf{x})}(\Omega)$ de los problemas (3-34), (3-35) y (3-36), se garantiza con la alternativa de Fredholm [23, Theorem 4, p. 303]:

Teorema 2 (Alternativa de Fredholm) *Si $\mathcal{L}$ es un operador lineal en un espacio de Hilbert, entonces $\mathcal{L}q = F$ tiene una solución si y solo si $\langle F | q \rangle = 0$ para todo q que satisface el problema adjunto homogéneo $\mathcal{L}^T q = 0$.*

Aquí $\langle | \rangle$ es el producto interno en $L^2(\Omega)$:

$$(3-38) \quad \langle f | g \rangle = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})g(\mathbf{x})d\mathbf{x}.$$

Para el análisis de la ecuación de reacción difusión planteada en su forma divergencia en (3-1), necesitaremos más adelante un producto interno pesado por una función $w(\mathbf{x})$, positiva en el dominio de integración:

Definición 1 *El producto interno pesado $\langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_2 \rangle_{w(\mathbf{x})}$, con peso $w(\mathbf{x})$, entre $\mathbf{f}_1 = (f_1, g_1)$ y $\mathbf{f}_2 = (f_2, g_2)$ donde $f_i \in L^2_{w(x)}(\Omega)$ y $g_i \in L^2_{w(x)}(\Omega)$ $i = 1, 2$, está definido por*

$$(3-39) \quad \langle \mathbf{f}_1 | \mathbf{f}_2 \rangle_{w(\mathbf{x})} = \langle (f_1, g_1) \cdot (f_2, g_2) \rangle_{w(\mathbf{x})} = \int_{\Omega} (f_1 f_2 + g_1 g_2) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

Para el caso de problemas con valores en la frontera, se puede encontrar una variación de la Alternativa de Fredholm como se describe en [23, Remark, p. 297] aplicando integración por partes, es decir $\langle \mathcal{L}p \mid q \rangle = S(p, q) + \langle p \mid \mathcal{L}^\dagger q \rangle$, donde $\dagger$ es el adjunto y $S(p, q)$ involucra las condiciones de límite en p y q , con lo que se obtiene

Teorema 3 *La solución del problema de valor límite $\mathcal{L}p = F$, con las condiciones de contorno $\mathcal{B}p = g$, existe si y solo si*

$$(3-40) \quad \langle F \mid q \rangle - S(p, q) = 0.$$

para todo q que satisfaga $\mathcal{L}^\dagger q = 0$ y $\mathcal{B}^\dagger q = 0$, donde $\dagger$ denota el adjunto.

3.3.1. Solución al problema $\mathcal{O}(\mu)$

El problema (3-34) se satisface en los valores críticos, cuando $\lambda(l_c) = 0$, por lo que la solución $\mathbf{u}_1$ debe estar en términos de las funciones propias asociadas al valor propio crítico l_c . En este sentido, la degeneración del operador diferencial $\mathfrak{L}$ toma un papel muy relevante en la forma del patrón que se desea explorar. Supondremos que la solución $\mathbf{u}_1$ es una combinación lineal de m funciones propias asociadas a l_c :

$$(3-41) \quad \mathbf{u}_1 = \mathbf{V} \sum_{n=1}^m a_n(t) W_{i_n}(\mathbf{x}), \quad i_n \in S = \{i_1, i_2, \dots, i_m\},$$

donde S corresponde al conjunto de posiciones de las funciones propias en la base contable generada por la resolución del problema de Sturm-Liouville. Sustituyendo (3-41) en (3-34), se obtiene

$$(3-42) \quad (-\eta \mathbf{J} + l_c D) \mathbf{V} = \mathbf{0},$$

que tiene solución:

$$(3-43) \quad \mathbf{V} = \frac{1}{\sqrt{(-\eta g_v + d_c l_c)^2 + \eta^2 g_u^2}} \begin{pmatrix} -\eta g_v + d_c l_c \\ \eta g_u \end{pmatrix}.$$

3.3.2. Solución al problema $\mathcal{O}(\mu^2)$

La alternativa de Fredholm, Teroema 2, para (3-35) produce

$$(3-44) \quad \left\langle \mathbf{u}^* \left| \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + p_1 \mathcal{L}_p^c \mathbf{u}_1 - \omega_1 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial T} \right. \right\rangle = 0,$$

donde $\mathbf{u}^*$ es un elemento del espacio nulo del operador adjunto, es decir $\mathcal{L}^\dagger \mathbf{u}^* = 0$, y $\mathcal{L}_p^c$ es (3-37) derivado con respecto a p y evaluado en p_c . El operador adjunto $\mathcal{L}^\dagger$ es definido como

$$\langle \mathbf{F} \mid \mathcal{L} \mathbf{G} \rangle = \langle \mathcal{L}^\dagger \mathbf{F} \mid \mathbf{G} \rangle.$$

De la Definición 1, se obtiene:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{F} | \mathcal{L} \mathbf{G} \rangle_w &= \left\langle (f_1, f_2) \cdot \mathcal{L}(g_1, g_2)^\dagger \right\rangle_w, \\
&\left\langle (f_1, f_2) \cdot (-\eta \mathbf{J} - D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla) (g_1, g_2)^\dagger \right\rangle_w, \\
&\left\langle (-(f_1, f_2) \eta \mathbf{J} - (f_1, f_2) D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla) \cdot (g_1, g_2)^\dagger \right\rangle_w, \\
&\left\langle \left((-\eta \mathbf{J}^\dagger (f_1, f_2)^\dagger - D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla (f_1, f_2)^\dagger)^\dagger \cdot (g_1, g_2)^\dagger \right) \right\rangle_w, \\
&\left\langle \left((-\eta \mathbf{J}^\dagger - D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla) (f_1, f_2)^\dagger \right)^\dagger \cdot (g_1, g_2)^\dagger \right\rangle_w,
\end{aligned}$$

o bien:

$$(3-45) \quad \mathcal{L}^\dagger \mathbf{u} = -\eta \mathbf{J}^\dagger \mathbf{u} - D \nabla \cdot \mathfrak{D} \nabla \mathbf{u}.$$

Se puede comprobar que la relación de dispersión λ del operador adjunto $\mathcal{L}^\dagger$ es igual a la relación de dispersión del operador $\mathcal{L}$, por lo que el espacio nulo se puede generar con las funciones propias del valor propio crítico l_c

$$(3-46) \quad \mathbf{u}^* = \mathbf{V}^* W_n.$$

Continuando con (3-44), el cálculo de una forma explícita de $\mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1)$ se puede lograr haciendo uso del siguiente Teorema [26]:

Teorema 4 *Teorema multinomial: Sea $q_1, q_2, \dots, q_m$ variables y n un número entero no negativo. Entonces, la expansión del binomio $(q_1 + q_2 + \dots + q_m)^n$ se puede expresar como:*

$$(3-47) \quad \left(\sum_{i=1}^m q_i \right)^n = \sum_{\sum_{i=1}^m k_i = n} \frac{n!}{k_1 k_2 \dots k_m} \prod_{s=1}^m q_s^{k_s}.$$

Así, al sustituir (3-41) en (3-28) y aplicar el Teorema 4, se obtiene

$$(3-48) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \sum_{\sum_{i=1}^m k_i = 2} \frac{2}{k_1 \cdot k_2 \dots k_m} \prod_{s=1}^m a_s^{k_s} W_{i_s}^{k_s}.$$

Ahora, expresamos el producto de funciones propias como expansión de Fourier de las mismas funciones propias, es decir

$$(3-49) \quad \prod_{s=1}^m W_{i_s}^{k_s} = \sum_{s=0}^{m_2} \rho_s^{(i_1^{k_1}, i_2^{k_2}, \dots, i_m^{k_m})} W_s,$$

donde los superíndices $(i_1^{k_1}, i_2^{k_2}, \dots, i_m^{k_m})$ indican el producto de funciones propias al que pertenece el coeficiente de Fourier, adicionalmente, en caso de $k_s = 0$ simplemente no se agrega este índice a la notación. Por ejemplo, el producto $W_{i_1} W_{i_3}$ se podría escribir como $W_{i_1} W_{i_2}^0 W_{i_3} \dots W_{i_m}^0$, sin embargo

los índices de funciones propias con exponente cero no se agregan, y los coeficientes de Fourier en este caso serían $\rho_s^{(i_1, i_3)}$. Con respecto a la cantidad m_2 , ésta depende de la base de funciones propias y puede llegar a ser infinito. En particular

$$(3-50) \quad W_{i_l}^{k_l} = \sum_{s=0}^{m_2} \rho_s^{(i_l, k_l)} W_s,$$

De esta manera (3-48) se transforma en

$$(3-51) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \sum_{n=0}^{m_2} c_n^{(1)}(\mathbf{a}) W_n,$$

donde $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_m)$, y

$$(3-52) \quad c_n^{(1)}(\mathbf{a}) = \sum_{\sum_{i=1}^m k_i=2} \frac{2}{k_1 \cdot k_2 \cdots k_m} \prod_{s=1}^m a_s^{k_s} \rho_n^{(i_s, k_s)}.$$

Haciendo $p_1 = 0$ y $\omega_1 = 0$ en (3-44), la alternativa de Fredholm se simplifica como

$$(3-53) \quad \langle V^* | \mathbf{Q}(V_1, V_1) \rangle c_k^{(1)}(\mathbf{a}) N_k = 0,$$

donde $N_k = \langle W_k | W_k \rangle_w$. Representando $\mathbf{Q}(V_1, V_1)$ en la base $\{V^*, (V^*)^\perp\}$ produce

$$(3-54) \quad \mathbf{Q}(V_1, V_1) = \frac{\mathbf{Q}(V_1, V_1) \cdot (V^*)^\perp}{|(V^*)^\perp|^2} (V^*)^\perp + \frac{\mathbf{Q}(V_1, V_1) \cdot V^*}{|V^*|^2} V^*.$$

De esta manera, para garantizar la alternativa de Fredholm, aproximamos $\mathbf{Q}(V_1, V_1)$ por medio de los términos W_k^{lc} , proyectados sobre $(V^*)^\perp$. Tomando todo esto en cuenta, las soluciones $\mathbf{u}_2$ toman la forma

$$(3-55) \quad \mathbf{u}_2 = \sum_{n=0}^{m_2} c_n^{(1)}(\mathbf{a}) \mathbf{V}_n^{(2)} W_n.$$

Las soluciones $V_k^{(2)}$ son

$$(3-56) \quad \mathbf{V}_k^{(2)} = (-\eta \mathbf{J} + l_k D)^{-1} \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}), \text{ si } k \notin S.$$

3.3.3. Solución para el problema $\mathcal{O}(\mu^3)$

Nuevamente se aplica la alternativa de Fredholm en la ecuación (3-35), resultando

$$(3-57) \quad \left\langle \mathbf{u}^* \left| \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_1) + p_2 \mathcal{L}_p^c \mathbf{u}_1 - w_2 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial T} \right. \right\rangle = 0.$$

Usando (3-28), (3-29), (3-55) y (3-41) en los términos cuadráticos y cúbicos (3-57), se obtiene:

$$(3-58) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = \sum_{n=0}^{m_2} \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \sum_{s=1}^m a_s c_n^{(1)}(\mathbf{a}) W_{i_s} W_n.$$

Nuevamente aplicamos (3-49) en (3-58), lo que produce:

$$(3-59) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = \sum_{j=0}^{m_3} \sum_{n=0}^{m_2} \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \sum_{s=1}^m a_s c_n^{(1)}(\mathbf{a}) \rho_j^{(i_s, n)} W_j.$$

El término cúbico $\mathbf{C}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1)$ de (3-57) se puede expresar usando el Teorema 4 de la siguiente manera

$$(3-60) \quad \mathbf{C}(\mathbf{u}_1) = \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \sum_{\sum_{i=1}^m k_i=3} \frac{3!}{k_1 \cdot k_2 \cdots k_m} \prod_{s=1}^m a_s^{k_s} W_{i_s}^{k_s}.$$

Usando (3-49) para expandir en Fourier $W_{i_s}^{k_s}$, se obtiene

$$(3-61) \quad \mathbf{C}(\mathbf{u}_1) = \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \sum_{j=0}^{m_3} c_j^{(2)}(\mathbf{a}) W_j,$$

donde

$$(3-62) \quad c_j^{(2)}(\mathbf{a}) = \sum_{\sum_{i=1}^m k_i=3} \frac{3!}{k_1 \cdot k_2 \cdots k_m} \prod_{s=1}^m a_s^{k_s} \rho_j^{(i_s, k_s)}.$$

Finalmente, las ecuaciones de Stuart-Landau se obtienen sustituyendo (3-41), (3-59), (3-61) en (3-57), resultando

$$(3-63) \quad \begin{aligned} & \left\langle \mathbf{V}^* \middle| \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \right\rangle c_k^{(2)}(\mathbf{a}) + \sum_{n=0}^{m_2} \left\langle \mathbf{V}^* \middle| \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \right\rangle \sum_{s=1}^m a_s c_n^{(1)}(\mathbf{a}) \rho_k^{(i_s, n)} \\ & + \left\langle \mathbf{V}^* \middle| p_2(-\eta \mathbf{J} + l_c D)_p^c \mathbf{V}^{(1)} \right\rangle a_k - \left\langle \mathbf{V}^* \middle| \mathbf{V}^{(1)} \right\rangle \frac{da_k}{dT} = 0. \end{aligned}$$

3.4. Casos Particulares

En esta sección, se presentarán casos específicos, para resaltar la utilidad de la aproximación de amplitudes mediante la solución de las ecuaciones de Stuart-Landau (3-63). Estos casos se categorizarán en función de la cantidad de funciones propias que comparten el mismo valor propio. Por ejemplo, al abordar la aproximación de amplitudes en problemas unidimensionales, se empleará una única función propia para aproximar $\mathbf{u}_1$. En situaciones donde se emplean dos funciones propias para aproximar $\mathbf{u}_1$, se incluyen aplicaciones como la clasificación de regiones de parámetros en patrones de manchas con estructuras cuadrangulares y franjas en dominios cuadrados, ambas en dos dimensiones. Para la clasificación de patrones hexagonales, se requerirá la consideración de tres funciones propias.

3.4.1. Una función propia

Suponiendo que con l_c solo está asociada una función propia, de (3-41), (3-52) y (3-62), se obtiene que los términos de la ecuación de Stuart-Landau son

$$(3-64) \quad \mathbf{u}_1 = VaW_i,$$

$$(3-65) \quad c_n^{(1)} = a^2 \rho_n^{(i^2)},$$

$$(3-66) \quad c_n^{(2)} = a^3 \rho_n^{(i^3)},$$

con lo que la ecuación de Stuart-Landau (3-63) se simplifica a

$$(3-67) \quad \frac{da}{dT} = \alpha a^3 + \theta a,$$

donde

$$(3-68) \quad \alpha = \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \right. \right\rangle \rho_i^{(i^3)} + \sum_{n=0}^{m_2} \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \right. \right\rangle \rho_n^{(i^2)} \rho_i^{(i,n)},$$

$$(3-69) \quad \theta = \left\langle \mathbf{V}^* \left| p_2(-\eta \mathbf{J} + l_c D)_p \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle,$$

$$(3-70) \quad \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle = 1.$$

La ecuación (3-67) tiene tres puntos críticos $a = 0$ y $a = \pm \sqrt{\frac{-\theta}{\alpha}}$. Se busca que las soluciones se alejen de la solución homogénea $a = 0$, lo que se logra si $\theta > 0$. Mientras que $a = \pm \sqrt{\frac{-\theta}{\alpha}}$ es estable si $\alpha < 0$.

3.4.2. Dos funciones propias

Suponiendo que con l_c están asociadas dos funciones propias, en este caso, los términos Stuart-Landau son

$$(3-71) \quad \mathbf{u}_1 = V(a_1 W_{i_1} + a_2 W_{i_2}),$$

$$(3-72) \quad c_n^{(1)} = a_1^2 \rho_n^{(i_1^2)} + 2a_1 a_2 \rho_n^{(i_1, i_2)} + a_2^2 \rho_n^{(i_2^2)}$$

$$(3-73) \quad c_n^{(2)} = a_1^3 \rho_n^{(i_1^3)} + 3a_1^2 a_2 \rho_n^{(i_1^2, i_2)} + 3a_1 a_2^2 \rho_n^{(i_1, i_2^2)} + a_2^3 \rho_n^{(i_2^3)}$$

las ecuaciones de Stuart-Landau (3-63) se transforman en

$$(3-74) \quad \frac{da_1}{dT} = \alpha_1^{(1)} a_1^3 + \beta_1^{(1)} a_1^2 a_2 + \beta_1^{(2)} a_1 a_2^2 + \alpha_1^{(2)} a_2^3 + \theta a_1,$$

$$(3-75) \quad \frac{da_2}{dT} = \alpha_2^{(1)} a_1^3 + \beta_2^{(1)} a_1^2 a_2 + \beta_2^{(2)} a_1 a_2^2 + \alpha_2^{(2)} a_2^3 + \theta a_2,$$

donde

$$(3-76) \quad \alpha_k^{(1)} = \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \rangle \rho_k^{(i_1^3)} + \sum_{n=0}^{m_2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \rangle \rho_n^{(i_1^2)} \rho_k^{(i_1, n)},$$

$$(3-77) \quad \alpha_k^{(2)} = \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \rangle \rho_k^{(i_2^3)} + \sum_{n=0}^{m_2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \rangle \rho_n^{(i_2^2)} \rho_k^{(i_2, n)},$$

$$(3-78) \quad \beta_k^{(1)} = \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \rangle 3\rho_k^{(i_1^2, i_2)} + \sum_{n=0}^{m_2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \rangle (2\rho_n^{(i_1, i_2)} + \rho_n^{(i_1^2)}) \rho_k^{(i_1, n)},$$

$$(3-79) \quad \beta_k^{(2)} = \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \rangle 3\rho_k^{(i_1, i_2^2)} + \sum_{n=0}^{m_2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{Q}(V, V_n^{(2)}) \rangle (2\rho_n^{(i_1, i_2)} + \rho_n^{(i_1^2)}) \rho_k^{(i_2, n)},$$

$$(3-80) \quad \theta = \langle \mathbf{V}^* | p_2 (-\eta \mathbf{J} + l_c D)_p^c \mathbf{V}^{(1)} \rangle.$$

Los resultados expuestos en este capítulo representan una generalización significativa y novedosa de la metodología propuesta estándar que se ha usado hasta ahora [24, 3, 25]. La aplicación de esta metodología en el contexto específico de la presente investigación, nos ha permitido avanzar en la comprensión de la dinámica de los sistemas de reacción-difusión. En el próximo capítulo, vamos a profundizar en la importancia de los coeficientes de Fourier $\rho_s^{(i_1^{k_1}, i_2^{k_2}, \dots, i_m^{k_m})}$. Estos coeficientes desempeñan un papel fundamental para establecer la influencia no lineal de las funciones propias críticas del sistema. Al modificar el tamaño del dominio, se espera observar cómo estos coeficientes responden y afectan la dinámica del sistema. Este enfoque permitirá comprender más a fondo cómo las propiedades no lineales de las funciones propias críticas, capturadas por estos coeficientes, inciden en la formación y estabilidad de patrones en sistemas de reacción-difusión.

4 Resultados: Sturm-Liouville

4.1. Operador de Legendre

En el Capítulo 3, se dedujeron las condiciones de inestabilidad de Turing para sistemas con difusión no homogénea. Las condiciones (3-23) revelan que no hay una discrepancia directa con el caso homogéneo (2-16), más allá de la redefinición del número de onda mediante las funciones propias del operador de Sturm-Liouville. La contribución de la no homogeneidad es más clara en las deducciones de las ecuaciones de Stuart-Landau (3-63) donde los coeficientes de este sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias quedan dependiendo de los coeficientes de Fourier $\rho_s^{(i_1^{k_1}, i_2^{k_2}, \dots, i_m^{k_m})}$ de los productos de las funciones propias críticas.

En esta sección, se lleva a cabo una comparación entre un sistema homogéneo y otro con difusión no homogénea $\mathfrak{D}(x) = (1 - x^2)$. A pesar de que las condiciones de inestabilidad se satisfacen con el mismo conjunto de parámetros, las soluciones divergen y provocan cambios significativos en los patrones como se mostrará más adelante.

Para la variación espacial de la tasa de difusión, $\mathfrak{D}(x, y)$, se propone la siguiente expresión de tensor anisotrópico:

$$(4-1) \quad \mathfrak{D}(x, y) = \begin{pmatrix} 1 - x^2 & 0 \\ 0 & 1 - y^2 \end{pmatrix}.$$

Con esto, el problema espectral (3-2), en el dominio espacial $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$, se convierte en

$$(4-2a) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left((1 - x^2) \frac{\partial \Phi_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial \Phi_1}{\partial y} \right) = -\rho \Phi_1,$$

$$(4-2b) \quad \frac{\partial}{\partial x} \left((1 - x^2) \frac{\partial \Phi_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((1 - y^2) \frac{\partial \Phi_2}{\partial y} \right) = -\rho \Phi_2.$$

Mediante el método de separación de variables, se puede demostrar que las funciones propias de este problema son

$$(4-3) \quad \Phi_m = \Phi_{ij}(x, y) = P_i(x)P_j(y),$$

donde $m = 1, 2$, y los valores propios son

$$(4-4) \quad \rho = k_{ij} = i(i + 1) + j(j + 1).$$

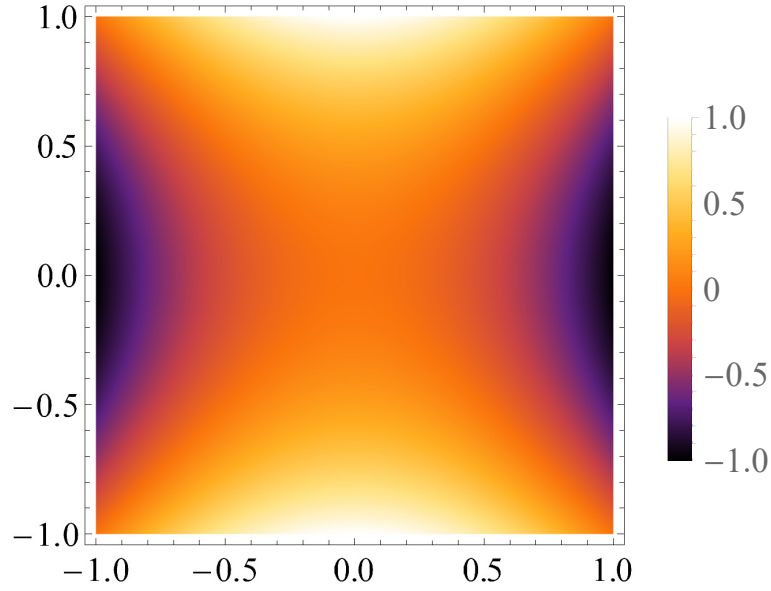


Figura 4-1: Una interpretación gráfica de la difusión producida por (4-1); para cada (x, y) , se representa en una escala de colores la diferencia en los coeficientes de difusión, $(1 - x^2) - (1 - y^2)$. Los valores positivos (colores claros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje x , mientras que los valores negativos (colores oscuros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje y .

La elección de (4-1) se hace por simplicidad matemática, ya que cualquier otra elección podría llevar a un problema espectral que no se pueda resolver, como es el caso con una elección más simple, como $\mathcal{D}_{11} = \mathcal{D}_{22} = (1 - x^2)(1 - y^2)$. Sin embargo, la forma (4-1) es interesante por sí misma porque, por un lado, produce una difusión altamente anisotrópica, como se describe en la Fig. 4-1, en donde se interpreta la variación espacial de la difusión (4-1); para cada (x, y) , se representa, en una escala de colores, la diferencia en los coeficientes de difusión $(1 - x^2) - (1 - y^2)$. Por lo tanto, los valores positivos (colores claros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje x , mientras que los valores negativos (colores oscuros) indican que las concentraciones se mueven más rápido a lo largo del eje y . Así, una concentración inicial ubicada cerca de la parte central del borde derecho (o izquierdo), se mueve más rápido a lo largo del eje y que a lo largo del eje x . En contraste, una concentración inicial ubicada cerca de la parte central del borde superior (o inferior), se mueve más rápido a lo largo del eje x . Sin embargo, con (4-1), el operador en (4-2) es degenerado en el cuadrado $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$. Por ejemplo, el número de onda $k_{i0} = k_{0i}$ en (4-4) tiene asociadas las funciones propias Φ_{i0} , Φ_{0i} y la combinación lineal de ambas. Esto es necesario para generar patrones compuestos de franjas y con manchas cerca de los valores en parámetros críticos.

Dado que el análisis lineal presentado en la Sección 3.2 es independiente de la dimensión espacial, los valores críticos d_c y l_{kc} están dados por (3-20) y (3-21), respectivamente. Algunos patrones bidimensionales obtenidos numéricamente se mostrarán y explicarán en la Sección 4.1.3.

4.1.1. Análisis no lineal para la difusión espacialmente variable: el caso de las funciones propias de Legendre

En esta parte, se seguirá el procedimiento general descrito en la Sección 3.3, que se repetirá nuevamente para que el material sea autocontenido. Para iniciar, se considera el sistema de reacción-difusión escrito de la siguiente manera:

$$(4-5) \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D \nabla \cdot (\mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{u}) + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}; p), \quad \text{en } \Omega,$$

donde $\mathbf{F}(\mathbf{u}; p) = \eta(f(\mathbf{u}; p), g(\mathbf{u}; p))^T$, p es un parámetro del sistema y η es un factor de escala. El dominio es $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$, y se consideran condiciones de contorno de Neumann (cero flujo):

$$(4-6) \quad \mathbf{n} \cdot (\mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{u}) = 0, \quad \text{en } \partial\Omega.$$

Ahora λ se perturba alrededor de su valor de bifurcación λ_c , como $\lambda = \lambda_c + \mu^2$, y cerca del punto de bifurcación se asume que la solución de la ecuación es

$$(4-7) \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_0 + \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{u}_0 + (\mu \mathbf{u}_1 + \mu^2 \mathbf{u}_2 + \mu^3 \mathbf{u}_3 + \cdots).$$

Se considera $0 < \mu \leq 1$ y se introduce una escala de tiempo lenta:

$$(4-8) \quad T = \hat{w}t,$$

donde

$$(4-9) \quad \hat{w} = \mu w_1 + \mu^2 w_2 + \cdots.$$

Una expansión en series de Taylor de $\mathbf{F}$ en (4-5), alrededor del punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$, produce

$$(4-10) \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}) = \eta \mathbf{J} \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{C}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots,$$

donde $\eta \mathbf{J}$, $\mathbf{Q}$ y $\mathbf{C}$ son, respectivamente, los términos lineales, cuadráticos y cúbicos.

Sustituyendo (4-7) y (4-8) en (4-5), se obtiene

$$(4-11) \quad \hat{w} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial T} = D \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J} \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{C}(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots.$$

Si además el parámetro p del modelo se perturba alrededor de su valor en un conjunto crítico:

$$p = p_c + \hat{p} = p_c + (\mu p_1 + \mu^2 p_2 + \cdots),$$

entonces la expansión de (4-11) en una serie de Taylor alrededor de p_c produce

$$(4-12) \quad \begin{aligned} \hat{w} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}}{\partial T} = & (D \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla)^c \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J}^c \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \mathbf{C}^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots + \\ & \hat{p} \left((D \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla)_p^c \hat{\mathbf{u}} + \eta \mathbf{J}_p^c \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{Q}_p^c(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) + \cdots \right), \end{aligned}$$

donde los subíndices indican derivadas respecto a p y los superíndices indican la evaluación en p_c .

Al proponer una solución de la forma (4-7), este método de perturbación produce una jerarquía de ecuaciones diferenciales lineales:

$$(4-13) \quad \mathcal{O}(\mu) : \mathcal{L}\mathbf{u}_1 = \mathbf{0},$$

$$(4-14) \quad \mathcal{O}(\mu^2) : \mathcal{L}\mathbf{u}_2 = \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + p_1\eta\mathbf{J}_p^c\mathbf{u}_1 - w_1\frac{\partial\mathbf{u}_1}{\partial T},$$

$$(4-15) \quad \mathcal{O}(\mu^3) : \mathcal{L}\mathbf{u}_3 = \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + p_2\eta\mathbf{J}_p^c\mathbf{u}_1 + p_1\eta\mathbf{J}_p^c\mathbf{u}_2 + p_1\mathbf{Q}^c(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) - w_1\frac{\partial\mathbf{u}_2}{\partial T} - w_2\frac{\partial\mathbf{u}_1}{\partial T},$$

donde $\mathcal{L} = (-\eta\mathbf{J} - D\nabla \cdot \mathcal{D}(\mathbf{x})\nabla)$. Cada una de estas ecuaciones se resuelven a continuación.

Ecuaciones de $\mathcal{O}(\mu)$

En presencia de una inestabilidad de Turing $\rho_{k_c} = k_{i_c0} = k_{0j_c}$ (ver Ecuación 4-4), y la solución del problema lineal se puede escribir como la suma de N modos espaciales. Consideramos el caso especial cuando hay dos modos espaciales presentes ($N = 2$):

$$(4-16) \quad \mathbf{u}_1 = \mathbf{V}^{(1)}a(T)P_{i_c}(x) + \bar{\mathbf{V}}^{(1)}\bar{a}(T)P_{j_c}(y),$$

donde P_k es el polinomio de Legendre de grado k , y $k_{i_cj_c}$ satisface las condiciones de inestabilidad impulsada por la difusión.

De (4-13) tenemos:

$$(4-17) \quad (-\eta\mathbf{J} + k_{i_cj_c}D)\mathbf{V}^{(1)} = \mathbf{0},$$

y lo mismo para $\bar{\mathbf{V}}^{(1)}$. La ecuación anterior se resuelve y su solución se normaliza para obtener

$$(4-18) \quad \mathbf{V}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{(-\eta g_v + d k_{i_cj_c})^2 + \eta^2 g_u^2}} \begin{pmatrix} -\eta g_v + d k_{i_cj_c} \\ \eta g_u \end{pmatrix}.$$

Dado que $i_c = j_c$, entonces $\mathbf{V}^{(1)} = \bar{\mathbf{V}}^{(1)}$.

En lo que sigue, para simplificar la notación, asumimos que $P_{i_c} = P_{i_c}(x)$, $\bar{P}_{j_c} = P_{j_c}(y)$, $a = a(T)$ y $\bar{a} = \bar{a}(T)$.

Ecuaciones de $\mathcal{O}(\mu^2)$

Para resolver (4-14), se aplica la alternativa de Fredholm (Teorema 2):

$$(4-19) \quad \left\langle \mathbf{u}^* \left| \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + p_1\eta\mathbf{J}_p^c\mathbf{u}_1 - w_1\frac{\partial\mathbf{u}_1}{\partial T} \right. \right\rangle = 0,$$

donde $\mathbf{u}^*$ está en el núcleo del adjunto. Dado que la solución del problema adjunto tiene la misma forma que la solución del caso lineal, proponemos

$$(4-20) \quad \mathbf{u}^* = \mathbf{V}^*aP_{i_c},$$

o

$$(4-21) \quad \mathbf{u}^* = \bar{\mathbf{V}}^* \bar{a} \bar{P}_{j_c}.$$

La forma explícita de $Q(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1)$ se puede obtener a partir de (3-28), usando (4-16). Al hacer esto, obtenemos:

$$(4-22) \quad \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) a^2 P_{i_c}^2 + 2\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) \bar{a} a P_{i_c} \bar{P}_{j_c} + \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) \bar{a}^2 \bar{P}_{j_c}^2.$$

Un paso clave es expandir las potencias y productos de P_{i_c} usando las mismas funciones base, para lo que usamos un resultado conocido [27]:

$$(4-23) \quad P_q^2 = \sum_{n=0}^{2q} \xi_n P_n.$$

donde ξ_n es el n -ésimo coeficiente de Fourier de la función. Primero se considera $\mathbf{u}^*$, dado por (4-20), luego se reemplaza (4-23) en (4-22), y el resultado en (4-19), junto con (4-16), se aplica las propiedades de ortogonalidad de las funciones propias de los polinomios de Legendre, obteniendo

$$(4-24) \quad \xi_{i_c} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \rangle a^3 + p_1 \eta \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{J}_p^c \mathbf{V}_1 \rangle a^2 - w_1 \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{V}_1 \rangle a \frac{\partial a}{\partial T} = 0.$$

En el caso de los polinomios de Legendre impares, se tiene que $\xi_{i_c} = 0$. Por lo tanto, es suficiente garantizar que el parámetro de perturbación y la escala de tiempo se anulen para asegurar patrones no nulos estables, es decir, $p_1 = 0$ y $w_1 = 0$. De esta manera, se asegura la alternativa de Fredholm.

Una vez que se cumple la alternativa de Fredholm, para la solución del sistema de segundo orden se supone la siguiente forma:

$$(4-25) \quad \mathbf{u}_2 = \sum_{s=0}^{2i_c} \left(\mathbf{V}_s^{(2)} a^2 P_s + \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)} \bar{a}^2 \bar{P}_s \right) + \mathbf{V}_{ij} a \bar{a} P_{i_c} \bar{P}_{j_c},$$

donde $\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_{ij}(x, y)$.

Sustituyendo (4-25) y (4-16) en (4-14), y recopilando términos, se obtienen los siguientes coeficientes:

$$(4-26) \quad \mathbf{V}_s^{(2)} = (-\eta \mathbf{J} + k_{s0} D)^{-1} \xi_s \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}),$$

$$(4-27) \quad \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)} = (-\eta \mathbf{J} + k_{0s} D)^{-1} \xi_s \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}),$$

$$(4-28) \quad \mathbf{V}_{ij} = 2(-\eta \mathbf{J} + k_{ij} D)^{-1} \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}).$$

Ecuaciones de $\mathcal{O}(\mu^3)$

Nuevamente se aplica la alternativa de Fredholm, de la siguiente manera:

$$(4-29) \quad \left\langle \mathbf{u}^* \left| \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) + \mathbf{C}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + p_2 \eta \mathbf{J}_p^c \mathbf{u}_1 - w_2 \frac{\partial \mathbf{u}_1}{\partial T} \right. \right\rangle = 0.$$

Usando (3-28) y (3-29), (4-25) y (4-16), los términos cuadráticos y cúbicos de (4-29) resultan ser

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = & \sum_{s=0}^{2i_c} \left(\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) a^3 P_{i_c} P_s + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)}) a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_s + \right. \\
 & \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \bar{a} a^2 \bar{P}_{j_c} P_s + \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)}) \bar{a}^3 \bar{P}_{j_c} \bar{P}_s \Big) + \\
 & \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) a^2 \bar{a} P_{i_c}^2 \bar{P}_{j_c} + \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_{j_c}^2,
 \end{aligned}
 \tag{4-30}$$

y

$$\begin{aligned}
 \mathbf{C}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = & \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) a^3 P_{i_c}^3 + 3\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) a^2 \bar{a} P_{i_c}^2 \bar{P}_{j_c} + \\
 & 3\mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_{j_c}^2 + \mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) \bar{a}^3 \bar{P}_{j_c}^3.
 \end{aligned}
 \tag{4-31}$$

Nuevamente, el producto de las funciones propias se puede representar como una expansión de las mismas funciones propias [27]:

$$P_q P_{i_c} = \sum_n^{q+i_c} \zeta_n^{(q)} P_n, \quad P_{i_c}^3 = \sum_n^{3i_c} \chi_n P_n,
 \tag{4-32}$$

donde el superíndice q en la primera expresión indica que el coeficiente de Fourier depende de la q -ésima función propia.

Así, sustituyendo (4-32) y (4-23) en (4-30) y (4-31), se obtiene

$$\begin{aligned}
 \mathbf{Q}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = & \sum_{s=0}^{2i_c} \sum_{n=0}^{s+i_c} \left(\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \zeta_n^{(s)} a^3 P_n + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)}) a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_s + \right. \\
 & \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \bar{a} a^2 \bar{P}_{j_c} P_s + \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_s^{(2)}) \zeta_n^{(s)} \bar{a}^3 \bar{P}_n + \\
 & \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) \xi_s a^2 \bar{a} P_s \bar{P}_{j_c} + \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) \xi_s a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_s \Big),
 \end{aligned}
 \tag{4-33}$$

y

$$\begin{aligned}
 \mathbf{C}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = & \sum_{n=0}^{3i_c} \left(\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \chi_n a^3 P_n + 3\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) \xi_n a^2 \bar{a} P_n \bar{P}_{j_c} + \right. \\
 & 3\mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \xi_n a \bar{a}^2 P_{i_c} \bar{P}_n + \mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}^{(1)}) \chi_n \bar{a}^3 \bar{P}_n \Big).
 \end{aligned}
 \tag{4-34}$$

Ahora, (4-33), (4-34) y $\mathbf{u}^*$ dado por (4-20) se sustituyen en (4-29), y teniendo en cuenta que $\zeta_{i_c}^{(q)} = 0$ para $q \leq i_c$, se obtiene

$$\begin{aligned}
 \left\langle \mathbf{V}^* \left| \sum_{s=i_c+1}^{2i_c} \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \zeta_{i_c}^{(s)} \right. \right\rangle a^4 \delta_{i0} + \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_0^{(2)}) \right. \right\rangle a^2 \bar{a}^2 \delta_{i0} + \\
 \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) \xi_0 \right. \right\rangle a^2 \bar{a}^2 \delta_{i0} + \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \chi_{i_c} \right. \right\rangle a^4 \delta_{i0} + \\
 \left\langle \mathbf{V}^* \left| 3\mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \xi_0 \right. \right\rangle a^2 \bar{a}^2 \delta_{i0} + \left\langle \mathbf{V}^* \left| p_2 \eta \mathbf{J}_p^c \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle a^2 \delta_{i0} - \\
 \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle a \frac{da}{dT} \delta_{i0} = 0,
 \end{aligned}
 \tag{4-35}$$

donde $\delta_{i0} = \int_{\Omega} (P_i \bar{P}_0)^2 dx dy$.

La ecuación 4-35 se puede reescribir como

$$(4-36) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{V}^{(1)} \rangle \frac{d|a|^2}{dT} &= \left\langle \mathbf{V}^* \left| \sum_{s=i_c+1}^{2i_c} \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \zeta_{i_c}^{(s)} + \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \chi_{i_c} \right. \right\rangle a^4 + \\ &\quad \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) \xi_0 + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_0^{(2)}) + 3\mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \xi_0 \right. \right\rangle_w a^2 \bar{a}^2 + \\ &\quad \left\langle \mathbf{V}^* \left| p_2 \eta \mathbf{J}_p^c \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle a^2. \end{aligned}$$

Finalmente, al repetir el mismo procedimiento, pero para el segundo vector nulo (4-21), se obtienen las ecuaciones de amplitud de Stuart-Landau:

$$(4-37a) \quad \frac{d|a|^2}{dT} = \alpha |a|^4 + \beta |a|^2 |\bar{a}|^2 + \theta |a|^2,$$

$$(4-37b) \quad \frac{d|\bar{a}|^2}{dT} = \alpha |\bar{a}|^4 + \beta |a|^2 |\bar{a}|^2 + \theta |\bar{a}|^2,$$

donde

$$(4-38) \quad \begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{V}^* | \mathbf{V}^{(1)} \rangle, \\ \alpha &= \frac{1}{E} \left\langle \mathbf{V}^* \left| \sum_{s=i_c+1}^{2i_c} \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_s^{(2)}) \zeta_{i_c}^{(s)} + \mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \chi_{i_c} \right. \right\rangle, \end{aligned}$$

$$(4-39) \quad \beta = \frac{1}{E} \left\langle \mathbf{V}^* \left| \mathbf{Q}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) \xi_0 + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \bar{\mathbf{V}}_0^{(2)}) + 3\mathbf{C}(\bar{\mathbf{V}}^{(1)}, \mathbf{V}^{(1)}) \xi_0 \right. \right\rangle,$$

$$(4-40) \quad \theta = \frac{1}{E} \left\langle \mathbf{V}^* \left| p_2 \eta \mathbf{J}_p^c \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle.$$

4.1.2. Estabilidad de las ecuaciones de Stuart-Landau

El sistema (4-37) tiene 4 puntos de equilibrio:

$$(4-41) \quad 1) \quad |a|^2 = 0, \quad |\bar{a}|^2 = 0$$

$$(4-42) \quad 2) \quad |a|^2 = 0, \quad |\bar{a}|^2 = -\frac{\theta}{\alpha}$$

$$(4-43) \quad 3) \quad |a|^2 = -\frac{\theta}{\alpha}, \quad |\bar{a}|^2 = 0$$

$$(4-44) \quad 4) \quad |a|^2 = -\frac{\theta}{\alpha + \beta}, \quad |\bar{a}|^2 = -\frac{\theta}{\alpha + \beta}$$

Nos interesan las regiones de los parámetros donde los puntos de equilibrio son estables, de modo que los patrones de Turing sean estacionarios. Usando las matrices Jacobianas correspondientes, se pueden establecer las condiciones para la estabilidad lineal de cada punto de equilibrio para obtener los resultados resumidos en la Tabla 4-1.

Tabla 4-1: Estados estacionarios y condiciones para la estabilidad lineal de las funciones de amplitud.

Estado estacionario	Condiciones para la estabilidad lineal	patrón espacial
$ a ^2 = \bar{a} ^2 = 0$	$\theta < 0$	Ninguno
$ a ^2 = 0, \bar{a} ^2 = \frac{-\theta}{\alpha}$	$\theta > 0$ y $\frac{\beta}{\alpha} > 1$	Franjas
$ a ^2 = \frac{-\theta}{\alpha}, \bar{a} ^2 = 0$	$\theta > 0$ y $\frac{\beta}{\alpha} > 1$	Franjas
$ a ^2 = \bar{a} ^2 = -\frac{\theta}{\alpha+\beta}$	$\theta > 0$ y $\alpha < - \beta < 0$	Manchas

4.1.3. Simulaciones Numéricas

Todas las simulaciones numéricas en este estudio se realizaron con el software basado en el método de elementos finitos *COMSOL Multiphysics*® [28], utilizando elementos cuadráticos de Lagrange. Se utilizó un paso de tiempo de $\delta t = 0.001$, y las condiciones iniciales se generaron aleatoriamente de forma uniforme alrededor del estado estacionario, con un rango de 0.1. Para problemas unidimensionales, se consideró una malla altamente refinada con 100 nodos espaciales equiespaciados, y para problemas bidimensionales, la malla refinada contenía 24,912 elementos de dominio y 400 elementos de frontera. Se probaron tanto la discretización espacial como la temporal comenzando con valores más grandes y verificando que decrementos adicionales no modificaran la forma final de la solución.

Modelo de Schnakenberg

Este modelo se presentó en la Sección 2.2.1 (ecuaciones 2-17).

Problema en 1D

En este caso el problema espectral (3-2,4-2), es el problema de Sturm-Liouville:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} \left(\mathfrak{D}(x) \frac{d\Phi}{dx} \right) &= -\rho\Phi, \quad \text{en } \Omega = (-1, 1) \\
 \mathfrak{D}(x) \frac{d\Phi}{dx} &= 0, \quad \text{en } x \in \{-1, 1\}.
 \end{aligned}
 \tag{4-45}$$

Se considera primero el caso de difusión homogénea $\mathfrak{D}(x) = 1$. En este caso, se tiene $\Phi_k = \cos(kx)$ y $\rho_k = k^2 = (n\pi)^2$. El sistema (2-17) tiene un único estado de equilibrio en $(u_0, v_0) = (a + b, b/(a + b)^2)$, y los valores críticos son

$$d_c = \frac{(a + b)(a + 3b) - 2\sqrt{2b(a + b)^3}}{(a + b)^4},
 \tag{4-46}$$

Ahora, para difusión de Legendre, $\mathfrak{D}(x) = 1 - x^2$, las eigenfunciones del problema de Sturm-Liouville (4-45) $\Phi_k = P_k(x)$ son los Polinomios de Legendre de grado $k \in \mathbb{N}$, con valores propios

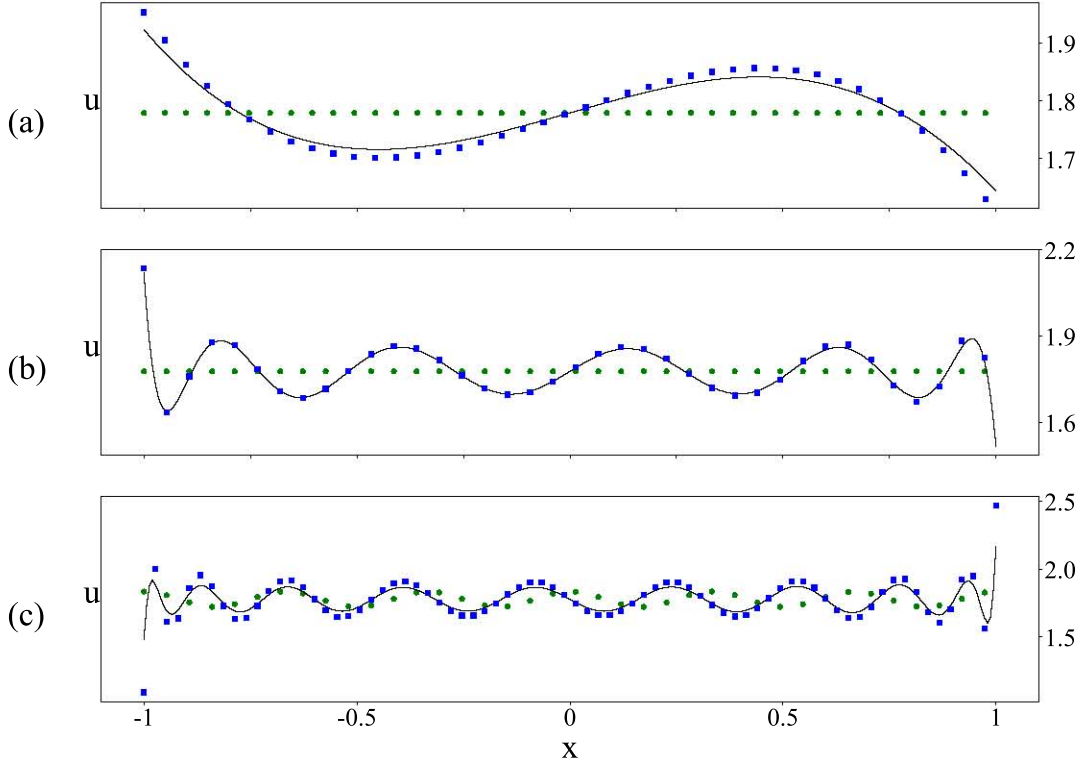


Figura 4-2: Comparación de los patrones obtenidos a $T = 1000$ unidades de tiempo con difusión de Legendre (línea continua negra) con los obtenidos con difusión homogénea (puntos verdes). Además, se muestra la aproximación de segundo orden del análisis no lineal, $\mathbf{u}_0 = a(t)W_{i_c}(x)$ (puntos azules). Para los valores $\eta = 1.11571$ (a), $\eta = 12.2729$ (b) y $\eta = 35.3310$ (c).

$\rho_k = k(k+1)$. En este caso, d_c también es (4-46), y

$$(4-47) \quad k_c(k_c + 1) = \frac{(a+b)^4 \eta}{\sqrt{2b(a+b)^3 - (a+b)^2}}.$$

Resolvemos numéricamente (2-17) con $a = 0.289$ y $b = 1.49$, y con (4-46) calculamos d_c obteniendo $d_c = 0.02735$. Para la difusión de Legendre, k es un número entero; elegimos $k_c = 3, 11, 19$ y usando (4-47) calculamos el valor correspondiente del parámetro de escala η . Esto da como resultado $\eta = 1.11571$, $\eta = 12.2729$ y $\eta = 35.3311$. Se observa que para la difusión homogénea, k_c está dada por (2-20), para lo cual tenemos $k_c = 3.4641$, $k_c = 11.4891$ y $k_c = 19.4936$, respectivamente. En la Figura 4-2, se comparan los patrones obtenidos a $T = 1000$ segundos con difusión de Legendre con aquellos obtenidos con difusión homogénea para los valores dados anteriormente.

Se observa que para los dos primeros valores de η , no se forma ningún patrón con difusión homogénea, sin embargo, para difusión de Legendre, se producen patrones con los modos espaciales

esperados. Para $\eta = 35.3310$, ambos patrones se forman con el modo espacial esperado y también se observan los cambios en la longitud de onda en el caso de la difusión de Legendre.

Problema en 2D

En el caso bidimensional, para el modelo de Schnakenberg se considera el sistema:

$$(4-48a) \quad \frac{\partial u}{\partial t} = d \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}) (\nabla u) + \eta (a - u + u^2 v),$$

$$(4-48b) \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla v) + \eta (b - u^2 v),$$

en el dominio espacial $\Omega = (-1, 1) \times (-1, 1)$, y

$$(4-49) \quad \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla u \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \text{y} \quad \mathfrak{D}(\mathbf{x}) \nabla v \cdot \mathbf{n} = 0,$$

en los bordes del cuadrado Ω .

En este caso nos centraremos en el análisis no lineal, para obtener regiones del espacio de parámetros que producen manchas y franjas, y comparar los resultados obtenidos en el caso de difusión homogénea ($\mathfrak{D}(x, y) = 1$), con el caso de la difusión de Legendre propuesta en (4-1).

Se consideran el sistema (4-48) con condiciones de contorno de flujo nulo (4-49). Los resultados del análisis no lineal, resumidos en la Tabla 4-1, se pueden usar para dividir el espacio de parámetros (a, b) en dominios correspondientes a diferentes patrones espaciales. A efectos de comparación, se considera la difusión homogénea, $\mathfrak{D}(x, y) = 1$, y la difusión de Legendre, donde $\mathfrak{D}(\mathbf{x})$ está dada por (4-1).

Los resultados se muestran en la Figura 4-3, donde se indican las regiones donde los patrones espaciales son franjas, manchas, cuando el análisis no lineal no puede predecir un patrón particular y cuando las condiciones para una inestabilidad de Turing no se cumplen, mediante regiones coloreadas. El color rojo representa franjas, el color naranja representa manchas, el color amarillo representa patrones que no pueden predecirse mediante el análisis no lineal y los colores azul claro y oscuro representan la región donde no se cumplen las condiciones para la estabilidad e inestabilidad de Turing, respectivamente. La Figura 4-3a corresponde al caso de difusión homogénea, donde se eligió un modo espacial $k_c = 4\pi$, es decir, $n = 4$. La Figura 4-3b corresponde al caso de difusión de Legendre con modos espaciales $k_c = 3$, que corresponde a $k_{30} = k_{03} = 12$ en (4-4). El procedimiento para generar los gráficos es el siguiente. Para cada uno de los dos casos, con el valor establecido de k_c , para un punto mapeado dado (a, b) , se calcula un valor adecuado de η usando (2-20) y d_c se calcula usando (4-46). Con estos valores, se evaluaron los parámetros α , β y θ , y se utilizaron las condiciones enumeradas en la segunda columna de la Tabla 4-1 para determinar el tipo de patrón que se generó. Las regiones en rojo son para patrones que no pueden predecirse mediante el presente análisis no lineal, lo que significa que para (a, b) en estas regiones no se satisface ninguna de las cuatro condiciones para la estabilidad lineal de las ecuaciones de Stuart-Landau, en la segunda

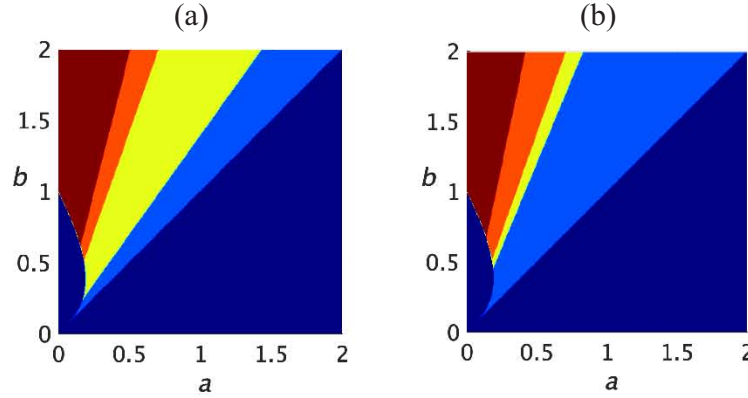


Figura 4-3: Espacio de parámetros (a, b) del modelo de Schnakenberg con difusión homogénea (a) y difusión de Legendre (b). El color rojo representa franjas, el color naranja representa manchas, el color amarillo representa patrones que no pueden predecirse mediante el análisis no lineal, y los colores azul claro y oscuro representan la región donde no se cumplen las condiciones de estabilidad e inestabilidad de Turing, respectivamente.

columna de la Tabla 4-1. Sin embargo, debido a que para estos valores de (a, b) se cumplen las condiciones para la inestabilidad de Turing, se forma un patrón. Este patrón se observa típicamente con una distribución irregular de manchas.

Se observa que la región de patrones que no pueden preverse mediante el análisis lineal se reduce en el caso de la difusión de Legendre en comparación con la difusión homogénea. Por otro lado, la región donde no se cumplen las condiciones de estabilidad de Turing se amplía.

Para verificar las predicciones del análisis no lineal, mostradas en la Figura 4-3, se usa *COMSOL Multiphysics*® para resolver numéricamente (4-48), escogiendo adecuadamente el par de parámetros (a, b) , dependiendo de la zona de interés. Nos enfocaremos en el caso de la difusión no homogénea, de Legendre, ya que para la difusión homogénea, la Figura 4-3a ya se obtuvo para el sistema de Schnakenberg en [3] (Figura 8b en ese trabajo) y las gráficas coinciden.

Dado que el análisis no lineal se realiza para valores críticos, una vez seleccionado un par (a, b) , se elige d para satisfacer (4-46) y η se obtiene de (2-20) o (4-47) para satisfacer un valor dado de k_c . Para generar un crecimiento inicial del patrón espacial, los parámetros a y b se perturbaron con $\delta a = 0.001$ y $\delta b = 0.01$.

Se seleccionaron tres conjuntos de parámetros (a, b) en diferentes regiones de la Figura 4-3b, que se presentan en la Tabla 4-2. Se consideraron dos casos, $k_c = 3$ (como en la Figura 4-3b) y $k_c = 14$. Los patrones resultantes se muestran en la Figura 4-4. Observamos que las predicciones del análisis no lineal fueron validadas numéricamente. Además, la variación espacial en la tasa de difusión, de acuerdo con la Figura 4-1, se observa claramente en las figuras de la derecha.

Es de interés el efecto del parámetro de escala η , porque en el caso de la difusión homogénea,

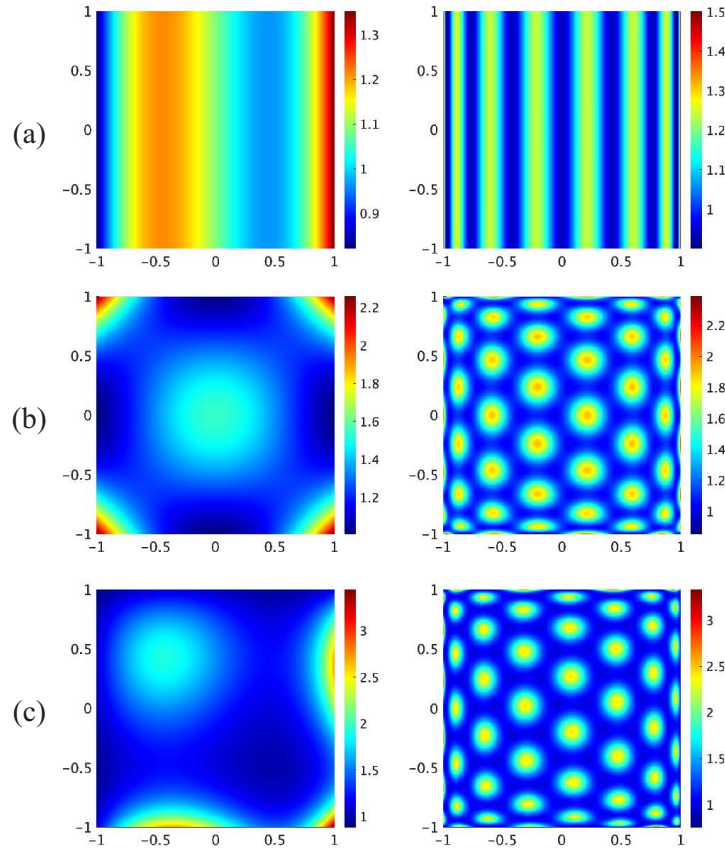


Figura 4-4: patrones bidimensionales obtenidos numéricamente para tres conjuntos de parámetros (a, b) y dos valores de k_c . Los gráficos izquierdos corresponden a $k_c = 3$ y los gráficos derechos corresponden a $k_c = 14$. Las tres filas corresponden a diferentes valores de (a, b) : **(a)** $(0.1, 1.0)$ en la región de franjas, **(b)** $(0.3, 1.0)$ en la región de manchas y **(c)** $(0.375, 1.0)$ en la región donde nuestro análisis lineal no puede predecir el tipo de patrón; en todos los casos se representa la concentración u del modelo Schnakenberg. Los valores de los parámetros se presentan en la Tabla 4-2.

para predecir el tipo de patrón, es posible reescalar el dominio a números de onda crítico bajos [24, 3]. Esta característica de la difusión homogénea se puede ver reflejada en las ecuaciones de amplitud (4-37), con respecto al parámetro η , ya que los coeficientes de Fourier ρ_q , $\rho_h^{(q)}$ y $\rho_h^{(c)}$ son constantes al usar la base de Fourier. En la Figura 4-3 se muestra el efecto del difusión de Legendre y el aumento de el parámetro η en las regiones de patrones.

Modelo BVAM

A continuación, se presentan con mayor detalle los resultados obtenidos para el modelo BVAM (2-21). El parámetro c en el modelo BVAM juega un papel crucial en las dinámicas observadas. Inicialmente, se destaca que los valores críticos η_c y d_c permanecen constantes en relación con c .

(a, b)	Región	d_c	k_c	η
(0.1, 1.0)	Franjas	0.1003	3	3.4552
			14	60.466
(0.3, 1.0)	Manchas	0.0342	3	1.7066
			14	29.866
(0.375, 1.0)	No predicho	0.0224	3	1.3078
			14	22.866

Tabla 4-2: Los parámetros del modelo del sistema de Schnakenberg (4-48) utilizados en la Figura 4-4. Se eligieron (a, b) en diferentes regiones de la Figura 4-3b. Para cada (a, b) , se calculó d_c usando (4-46). Se utilizaron dos valores de k_c : $k_c = 3$ y $k_c = 14$. Los valores correspondientes de η se obtuvieron mediante (4-47).

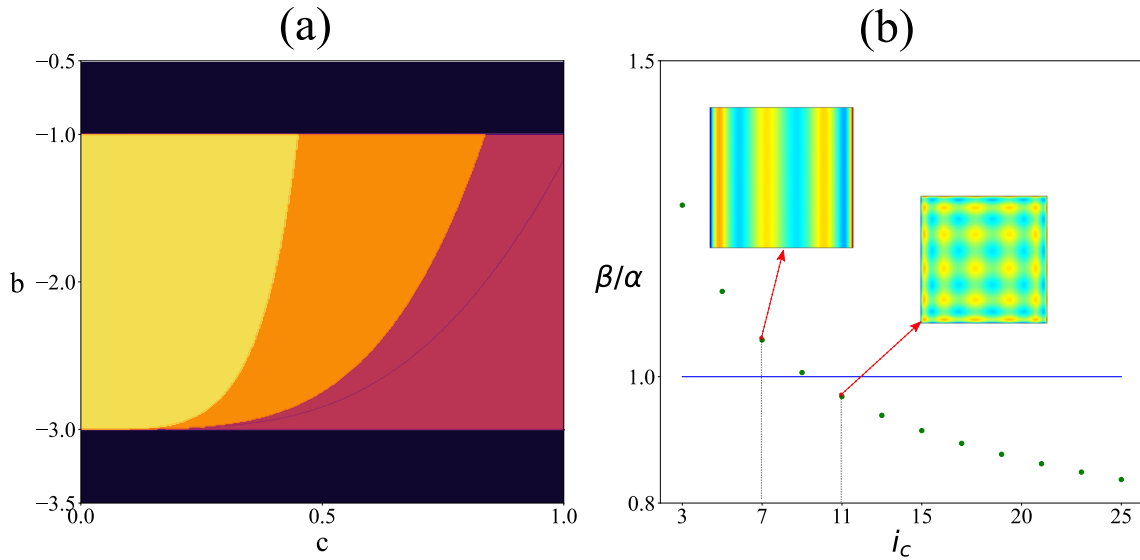


Figura 4-5: a) Región de patrones para el modelo BVAM con difusión de Legendre y número de onda 3. b) condición β/α de Tabla 4-1 al aumentar el número de onda con $(a = 3.0, b = -2.0, c = 0.0$ y $h = -1.0)$. Códigos de colores: amarillo: franjas; naranja: manchas; rojo: el método no decide; morado: no es Turing inestable; negro: el punto de equilibrio no es estable.

Sin embargo, su relevancia se amplifica al realizar el análisis no lineal.

En la Figura 4-5a, se muestran las regiones de patrones del modelo BVAM al variar el parámetro c para un número de onda específico, en este caso, $k = 3$. Esta representación gráfica permite apreciar las transiciones de patrones a medida que se modifica el valor de c . Para complementar este análisis, en la Figura 4-5b, se presenta la función $\frac{\beta}{\alpha}(i_c)$ en función del número de onda i_c para un conjunto específico de parámetros $(a = 3.0, b = 2.0, c = 0.0, h = -1.0)$. Cabe recordar, según

la Tabla **4-1**, que si $0 < \frac{\beta}{\alpha} < 1$ se generan manchas, mientras que si $\frac{\beta}{\alpha} > 1$, se generan franjas. En la Figura **4-5b**, se observa claramente una transición de franjas a manchas al aumentar el número de onda.

5 Operadores periódicos; metodología de homogeneización

La problemática de transformar un material heterogéneo en uno homogéneo ha sido objeto de estudio durante muchas décadas. Los primeros indicios de esta investigación se remontan al siglo XIX con las contribuciones de Maxwell y Rayleigh, y posteriormente, ingenieros desarrollaron técnicas de expansión asintótica para abordar este problema [29]. Los estudios analizados se centran en la homogeneización de sistemas de transporte de masa y reacción-difusión en medios con estructuras periódicas o microestructuras heterogéneas. Para ello, emplean técnicas sofisticadas como la convergencia de dos escalas y métodos de entropía, que les permiten deducir modelos macroscópicos a partir de descripciones microscópicas detalladas [29, 30].

Estos estudios se enfocan especialmente en sistemas de difusión cruzada con coeficientes variables y en sistemas parabólicos no lineales, enfrentando desafíos inherentes a estructuras degeneradas y acoplamientos no lineales [29]. Además, aplican estos enfoques a ecuaciones parabólicas semilineales con condiciones de interfaz Robin, que son pertinentes en contextos como flujos en canales porosos fisurados y medios con estructuras periódicas [31]. Es muy importante mencionar que la estructura periódica en materiales compuestos desempeña un papel fundamental, ya que mejora significativamente las propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas del material. Esta característica confiere ventajas notables en diversas aplicaciones tecnológicas [29, 31, 32].

El propósito será buscar condiciones para la existencia de patrones de Turing para una familia de sistemas de reacción-difusión no lineales, con coeficientes de difusión no homogéneos periódicos y rápidamente oscilantes, a partir del análisis de un sistema “equivalente” con coeficientes de difusión homogéneos. La familia de problemas originales depende de un pequeño parámetro relacionado con la microestructura periódica. El problema equivalente homogeneizado es el problema límite cuando el parámetro pequeño tiende a cero. Los métodos matemáticos que permiten este paso se denominan métodos de homogeneización, y los coeficientes del problema límite son los coeficientes efectivos. La mencionada equivalencia significa que la solución del problema original converge a la solución del problema homogeneizado, en un espacio funcional apropiado. Existen diferentes métodos matemáticos de homogeneización, de entre los que podemos mencionar el método formal de expansiones asintóticas conocido como método de homogeneización asintótica (AHM) [33, 34, 35], el método de convergencia de dos escalas (TSCM) [36, 37], y el método de desdoblamiento periódico (PUM) [38].

Durante los últimos años, estos métodos se han aplicado con éxito a diferentes situaciones

físicas modeladas por sistemas de reacción-difusión no lineales (ver, por ejemplo, [30], [31], [39], [29], [32] [40] y las referencias citadas en estos trabajos).

Se adoptó un enfoque basado en la consideración de un medio heterodisperso bimodal de carácter real, el cual exhibe una estructura periódica. En este escenario, coexisten inclusiones caracterizadas por dos geometrías y tamaños distintos, los cuales muestran patrones repetitivos en su distribución espacial. Además, establecemos la premisa de que los períodos correspondientes a cada modo de inclusión guardan una relación proporcional entre sí. En este sentido, se introduce una característica distintiva que consiste en la incorporación de disparidades geométricas en los coeficientes de difusión tanto del activador como del inhibidor (Figura 5-1). Estas disparidades se refieren a diferencias en las propiedades de periodicidad, geometría de regiones periódicas y amplitudes de las funciones periódicas. Este tipo de materiales se puede observar en fenómenos como la actividad eléctrica en tejidos musculares donde se divide el material en intra y extracelular, cada uno de ellos con características de conductividad distintas. En particular, en la actividad eléctrica cardíaca, el modelo bidominio (un sistema de reacción difusión) integra estas características en sus ecuaciones.

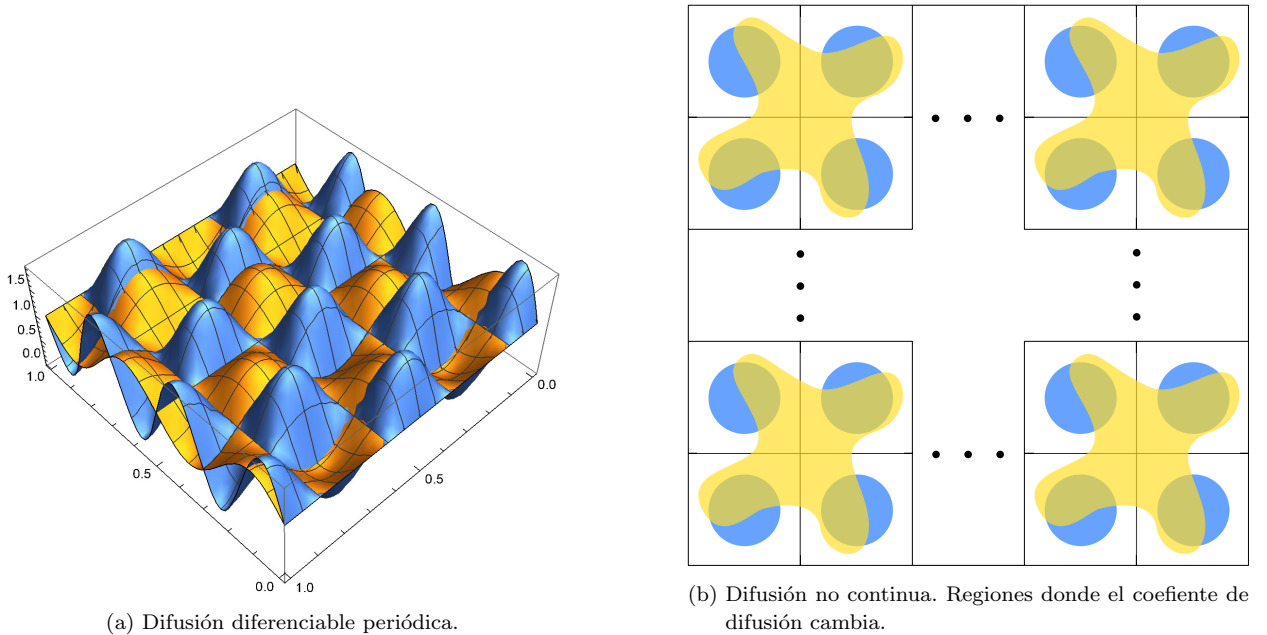


Figura 5-1: Coeficientes de difusión, azul; difusión del activador y amarillo; difusión del inhibidor

5.1. El problema

Consideremos un dominio o medio $\Omega =]0, L[^N \subset \mathbb{R}^N$ con una estratificación periódica, es decir, un dominio en el que los subdominios (inhomogeneidades), con diferentes propiedades de transporte, están dispuestos de manera periódica. Supongamos que este arreglo periódico se describe con dos celdas de tamaño ε_1 y ε_2 , que son pequeñas en el sentido de que si L es el tamaño

característico del dominio Ω , entonces $0 < \varepsilon_2 \ll \varepsilon_1 \ll L$. Sin pérdida de generalidad, en todo este estudio consideraremos $L = 1$, es decir, $\Omega =]0, 1[^N$, y $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ son parámetros adimensionales.

La presencia de dos escalas está relacionada con la identificación de dos celdas periódicas, Y y Z , que representan una fracción de Ω , esto es

$$Y =]0, \varepsilon_1[^N, \quad Z =]0, \varepsilon_2[^N.$$

Se considera un vector de dos sustancias químicas $\mathbf{u}^{\varepsilon, p} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; \varepsilon, p) = (u_1^{\varepsilon, p}, u_2^{\varepsilon, p})$, y una cinética de reacción $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\varepsilon, p}; p) = (f_1(\mathbf{u}^{\varepsilon, p}; p), f_2(\mathbf{u}^{\varepsilon, p}; p))$, donde p es un parámetro del sistema que será considerado como el parámetro de bifurcación. Un sistema general de reacción-difusión de dos componentes es

$$(5-1) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{u}^{\varepsilon, p}}{dt} = D \nabla \cdot \mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{u}^{\varepsilon, p} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\varepsilon, p}; p), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera y flujo adecuadas para } \mathbf{u}, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = \text{rnd}(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega. \end{cases}$$

donde η es un parámetro de escala, $D = \text{diag}[d_1, d_2]$ es la matriz diagonal que contiene los coeficientes de difusión escalares de u_1 y u_2 , respectivamente, y $\mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \text{diag}[\mathfrak{D}^{1\varepsilon_1}(\mathbf{x}), \mathfrak{D}^{2\varepsilon_2}(\mathbf{x})]$ es una función dependiente del espacio y ε -periódica que describe la variación espacial de la tasa de difusión de $\mathbf{u}^{\varepsilon, p}$; en N dimensiones, cada $\mathfrak{D}^{k\varepsilon}(\mathbf{x})$ puede ser a su vez una matriz de $N \times N$.

Se identifican tres escalas espaciales en el análisis: las coordenadas globales o lentas representadas por $\mathbf{x}$, la escala de las pequeñas inhomogeneidades mediante coordenadas locales o rápidas denotadas por $\mathbf{y} = \frac{1}{\varepsilon_1}\mathbf{x}$ y $\mathbf{z} = \frac{1}{\varepsilon_2}\mathbf{x}$. La matriz $\mathfrak{D}^{k\varepsilon}(\mathbf{x})$ de tamaño $N \times N$ se define como $\mathfrak{D}^k(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$, donde $k \in \{1, 2\}$ y $i, j \in \{1, \dots, N\}$.

Las propiedades de $\mathfrak{D}$ son las siguientes:

- **Periodicidad:** Es ε_1 -periódica o ε_2 -periódica.
- **Simetría:** $\mathfrak{D}_{ij}^k = \mathfrak{D}_{ji}^k$.
- **Definida positiva:** $\mathfrak{D}_{ij}^k \xi_i \xi_j \geq \varkappa \xi_j \xi_j$, para todo $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \in \mathbb{R}^N$, donde $\varkappa > 0$ es una constante positiva.

Una de las propiedades que no se incluyeron en la lista anterior es la diferenciabilidad y continuidad de $\mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$. En este contexto, resulta relevante examinar detalladamente diversos casos para comprender mejor las posibles variaciones y comportamientos de $\mathfrak{D}$ en función de estas propiedades. Entre los casos a considerar se encuentran:

1. **$\mathfrak{D}$ es infinitamente diferenciable $\mathfrak{D}_{ij}^k \in C^\infty(\Omega)$:** en este caso, la matriz $\mathfrak{D}$ es suave y posee derivadas continuas en todo su dominio. La diferenciabilidad continua implica que pequeñas variaciones en las entradas de $\mathfrak{D}$ resultan en variaciones suaves en sus elementos y, por ende, en su comportamiento.

2. **$\mathfrak{D}$ es una función continua a trozos:** Esto implica la necesidad de establecer condiciones de flujo y continuidad de concentración en el límite entre las regiones donde se produce un cambio abrupto en el coeficiente de difusión (interfaz). Para abordar esto, suponga que existen tres tipos de regiones, como se observa en la Figura

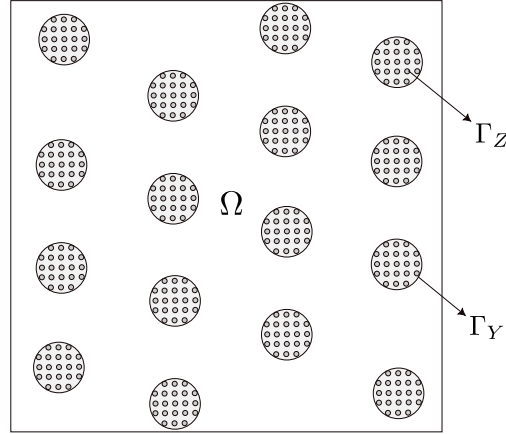


Figura 5-2: Estructura heterogénea periódica con dos interfaces Γ_Y y Γ_Z .

Teniendo en cuenta los resultados [41] donde se proporciona una explicación detallada de los fenómenos multiescala en el ámbito de la conductividad térmica, aquí, se realizará una analogía en el contexto de la difusión. En el estudio de la difusión con una configuración periódica de inclusiones en una matriz, con lo que se considerará un proceso de agregación. Las inclusiones a una escala ε_2 se agrupan en agregados distribuidos periódicamente a una escala mayor ε_1 , dando lugar a medios periódicos de dos escalas. La estructura más grande está formada por inclusiones más pequeñas $Y^{(\varepsilon_1)}$, y a su vez, estas están compuestas por inclusiones mucho más pequeñas $Z^{(\varepsilon_2)}$.

Para distinguir un medio que está completamente agregado, completamente disperso o en una fase intermedia, se define un parámetro de agregación σ . Este parámetro representa la naturaleza del medio en términos de su dispersión o agregación y es crucial para entender el comportamiento del sistema. Para el modelo descrito, se establece

$$(5-2) \quad \sigma = \frac{\phi_c}{\phi} = 1 - \frac{\phi_{nc}}{\phi},$$

donde ϕ es la fracción de volumen de las inclusiones en el medio, ϕ_c es la fracción de volumen de los agregados y ϕ_{nc} es la fracción de volumen de las inclusiones que no están agrupadas en un agregado ($\phi = \phi_c + \phi_{nc}$). De esta manera, cuando $\sigma = 0$, se tiene un medio completamente disperso con una sola escala formada por inclusiones a escala ε_2 en la matriz, y cuando $\sigma = 1$, se tiene un medio completamente agregado con una sola escala formada por agregados a escala ε_1 en la matriz.

El término de difusión $\hat{\mathfrak{D}}$ se presenta como el tensor efectivo global en la macroescala. A diferencia de $\mathfrak{D}^\varepsilon$, este tensor es constante, simétrico y definido positivo. Para su definición,

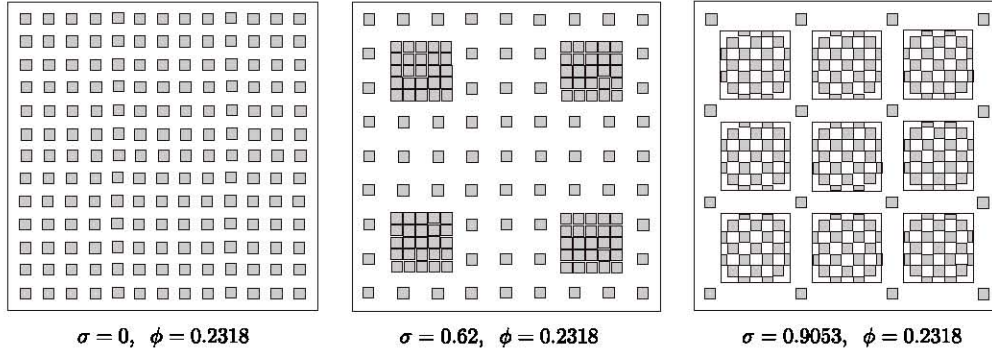


Figura 5-3: Representación de agregación para diferentes valores de σ .

se observa que $\mathfrak{D}^\varepsilon$ oscila rápidamente, y se expresa de la siguiente manera:

$$\mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) = \begin{cases} \mathfrak{D}^{(m)}, & \text{si } \mathbf{z} \in Z^{(m)}, \mathbf{y} \in Y^{(m)}, \text{ en la matriz,} \\ \mathfrak{D}^{(i)}, & \text{si } \mathbf{z} \in Z^{(i)}, \mathbf{y} \in Y^{(m)}, \text{ en una inclusión aislada,} \\ \mathfrak{D}^{(i)}, & \text{si } \mathbf{y} \in Y^{(i)}, \text{ en los agregados.} \end{cases}$$

- a) **Condiciones de contacto perfecto:** Se garantiza continuidad en el flujo como en las concentraciones, esto es:

$$(5-3a) \quad [[u_k^\varepsilon]]_{\Gamma_s} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_s,$$

$$(5-3b) \quad \left[[\mathfrak{D}^{k\varepsilon} \nabla u_k^\varepsilon \cdot \mathbf{n}] \right]_{\Gamma_s} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_s,$$

$$(5-3c) \quad \mathbf{u}^\varepsilon = \mathbf{u}_0, \quad \text{sobre } \partial\Omega,$$

La interfaz entre las fases constituyentes se denota por $\Gamma_s = \Gamma_Y \cup \Gamma_Z$ Figura 5-2, y $\mathbf{n}$ es el vector unitario localmente normal a Γ_s , apuntando hacia afuera de una fase hacia la otra. La notación $[[\phi]]_{\Gamma_s}$ indica el salto de ϕ a través de la superficie Γ_s . Así, la continuidad del flujo de concentraciones a través de Γ_s se impone mediante la Ecuación (5-4b). El contacto perfecto entre las fases implica la continuidad de la concentración a lo largo de Γ_s .

- b) **Condiciones de contacto imperfecto:** En este caso se garantiza continuidad del flujo en la interfaz mientras que en la concentración no, esto es

$$(5-4a) \quad \mathfrak{D}^{k\varepsilon} \nabla u_k^\varepsilon \cdot \mathbf{n}^k = B_k^\varepsilon [[u_k^\varepsilon]]_{\Gamma_s}, \quad \text{sobre } \Gamma_s,$$

$$(5-4b) \quad \left[[\mathfrak{D}^{k\varepsilon} \nabla u_k^\varepsilon \cdot \mathbf{n}] \right]_{\Gamma_s} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_s,$$

$$(5-4c) \quad \mathbf{u}^\varepsilon = \mathbf{u}_0, \quad \text{sobre } \partial\Omega$$

La dependencia del término $B_i^{\varepsilon_j}$ como un parámetro que representa la razón de la resistencia interna entre la externa al difundir la concentración. En el problema de conducción del calor, se conoce como número de Biot y, en ese contexto, un número de Biot pequeño representa poca resistencia a la conducción del calor y, por tanto,

gradientes pequeños de temperatura dentro del cuerpo. Definimos B_k^ε de la siguiente manera

$$(5-5) \quad B_k^\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_1^{-1} \beta_1^k & \text{sobre } \Gamma_Y, \\ \varepsilon_2^{-1} \beta_2^k & \text{sobre } \Gamma_Z. \end{cases}$$

5.2. Expansiones asintóticas

El propósito del método de homogeneización es obtener una ecuación límite de (5-1), conocida como la ecuación efectiva o homogeneizada, que describe el comportamiento global del dominio no homogéneo, con un coeficiente de difusión efectivo $\hat{\mathbf{D}}$. Para calcular los elementos de la matriz de este coeficiente de difusión efectivo, se utilizará el método de expansión asintótica de la solución $\mathbf{u}^{\varepsilon,p}$ del problema (5-1) [35, 19]. Cabe mencionar que el método de homogeneización ya se ha aplicado a ecuaciones generales de reacción-difusión [32, 29] en un contexto más matemático. Uno de los intereses principales en el estudio de la formación de patrones en sistemas homogeneizados es la inestabilidad de Turing. Con este propósito, a continuación se describen los pasos principales del método de homogeneización asintótica, siguiendo el procedimiento descrito en las referencias [42, 19].

Utilizando la convención de suma de Einstein, una solución asintótica formal de (5-1) hasta el orden $O(\varepsilon^2)$ tiene la forma:

$$u_k^{\varepsilon,p} = u^{(0)} + \varepsilon_1^i u_k^{(i)} + \varepsilon_2^j v_k^{(j)} \cdots = u^{(0)} + \varepsilon_1 \hat{u}_k + \varepsilon_2 \hat{v}_k,$$

donde $u_k^{(i)} = u_k^{(i)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t; p)$ y $v_k^{(j)} = v_k^{(j)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t; p)$ son funciones 1-periódicas e infinitamente diferenciables, y $\hat{u}_k = \varepsilon_1^{i-1} u_k^{(i)}$, $\hat{v}_k = \varepsilon_2^{j-1} v_k^{(j)}$. En cuanto a los índices, estos pertenecerán a los siguientes conjuntos:

$$\begin{aligned} i, j, n, m &\in \{1, 2, \dots, N\}, \text{ índices mudos.} \\ k &\in \{1, 2\} \text{ índice libre.} \end{aligned}$$

Reescribiendo en forma vectorial la solución asintótica formal

$$(5-6) \quad \mathbf{u}^{\varepsilon,p} = \mathbf{u}^{(0)} + \varepsilon_1 \hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_2 \hat{\mathbf{v}}.$$

Expandiendo un componente f de $\mathbf{F}$ en Taylor alrededor de $(\varepsilon_1 = 0, \varepsilon_2 = 0)$, resulta

$$(5-7) \quad \begin{aligned} f(\mathbf{u}^\varepsilon) &= f^0 + \varepsilon_1 (f_{u_1}^0 \hat{u}_1 + f_{u_2}^0 \hat{u}_2) + \frac{1}{2} \varepsilon_1^2 (f_{u_1 u_1}^0 \hat{u}_1^2 + 2f_{u_1 u_2}^0 \hat{u}_1 \hat{u}_2 + f_{u_2 u_2}^0 \hat{u}_2^2) \\ &\quad + \varepsilon_2 (f_{u_1}^0 \hat{v}_1 + f_{u_2}^0 \hat{v}_2) + \frac{1}{2} \varepsilon_2^2 (f_{u_1 u_1}^0 \hat{v}_1^2 + 2f_{u_1 u_2}^0 \hat{v}_1 \hat{v}_2 + f_{u_2 u_2}^0 \hat{v}_2^2) + \cdots, \end{aligned}$$

donde el superíndice 0 indica la evaluación en $\mathbf{u}^{(0)}$. Igualmente, para cada f_k , se escribe $\mathbf{F}$ de la siguiente manera

$$(5-8) \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}^\varepsilon) = \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) + \varepsilon_1 A \hat{\mathbf{u}} + \varepsilon_2 A \hat{\mathbf{v}} + \varepsilon_1^2 Q(\hat{\mathbf{u}}) + \varepsilon_2^2 Q(\hat{\mathbf{v}}) + \varepsilon_1^3 C(\hat{\mathbf{u}}) + \varepsilon_2^3 C(\hat{\mathbf{v}}) + \cdots,$$

donde A , Q y C son el término Lineal, cuadrático y cúbico, respectivamente, evaluados en $\mathbf{u}^{(0)}$.

5.3. Caso 1: $\varepsilon_2 = \varepsilon_1 = \varepsilon$

En este caso, se presenta una única celda periódica denominada Y . Además, se asume que $\mathfrak{D}$ depende exclusivamente de $\mathbf{y}$, es decir, $\mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}/\varepsilon) = \mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{y})$. Para iniciar la derivación del sistema homogeneizado, se procede a obtener las derivadas de los operadores diferenciales con respecto a las variables lentas $\mathbf{x}$ y las variables rápidas $\mathbf{y}$, partiendo de la premisa de que estas son independientes. Se define el operador de gradiente como $\nabla_\alpha = \frac{\partial}{\partial \alpha_i}$ mediante la aplicación de la regla de la cadena, se logra expresar la derivada de $\nabla \mathfrak{D}(\mathbf{y}) \nabla$ en términos de ε , como sigue:

$$(5-9) \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{y}) \nabla &= (\nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) \cdot \mathfrak{D}(\nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon^{-1} \nabla_{\mathbf{y}}) \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon^{-1} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) + \varepsilon^{-2} \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}. \end{aligned}$$

Sustituyendo en (5-1) las expansiones de $\mathbf{u}$, $\mathbf{F}$ y $\nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{y}) \nabla$ presentadas en (5-6), (5-8) y (5-9), se obtiene la jerarquía de ecuaciones

$$(5-10a) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^{-2}) : -\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{0},$$

$$(5-10b) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}) : -\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(1)} = (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(0)},$$

$$(5-10c) \quad \begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^0) : -D \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(2)} &= D(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) - \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt}, \end{aligned}$$

donde $\mathbf{x}$ y $\mathbf{y}$ se consideran variables independientes.

5.3.1. $\mathfrak{D}_{ij}^k \in C^\infty(\Omega)$

Considerando la suavidad de $\mathfrak{D}_{ij}^k$ en Ω , la existencia de soluciones 1-periódicas para los problemas de la jerarquía de ecuaciones (5-10) se asegura mediante el siguiente lema [35, Lema 1, Cap. 4]:

Lema 1 Dadas $\mathfrak{D}_{ij}(\xi)$ y $f(\xi)$, funciones diferenciables 1-periódicas, y suponiendo que

$$(5-11) \quad \begin{cases} \mathfrak{D}_{ij}(\xi) &= \mathfrak{D}_{ji}(\xi), \\ \mathfrak{D}_{ij}(\xi) \eta_i \eta_j &\geq x_1 \eta_i \eta_i, \end{cases}$$

entonces, una condición necesaria y suficiente para que exista una solución 1-periódica de la ecuación

$$(5-12) \quad \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\mathfrak{D}_{ij} \frac{\partial}{\partial \xi_j} G(\xi) \right) = f(\xi),$$

es

$$(5-13) \quad \langle f \rangle = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(\xi) d\xi_1 \dots d\xi_n = 0.$$

Aquí la solución general 1-periódica de la ecuación (5-12) se escribe como $G(\xi) = \bar{G}(\xi) + C$, donde $\bar{G}(\xi)$ es una solución 1-periódica con promedio cero, y C es una constante arbitraria.

El Lema 1 y (5-10a) implican que la solución 1-periódica $\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; p)$ es independiente de $\mathbf{y}$, es decir

$$(5-14) \quad \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; p) = \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, t; p),$$

entonces, (5-10b) puede ser escrita como

$$(5-15) \quad -\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(1)} = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)}, \quad \text{en } Y.$$

Para esta ecuación, tomando en cuenta el Lema 1, se obtiene que la condición necesaria y suficiente para la existencia de una solución periódica $\mathbf{u}^{(1)}$ es

$$(5-16) \quad \left\langle \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} \right\rangle_Y = \mathbf{0}.$$

que se satisface por la 1-periodicidad de $\mathfrak{D}(\mathbf{y})$. La solución del problema (5-15) puede ser representada como

$$(5-17) \quad u_k^{(1)} = G_i^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_i},$$

donde $\mathbf{G}_i(\mathbf{y}) = (G_i^1(\mathbf{y}), G_i^2(\mathbf{y}))$ son soluciones Y -periódicas del problema siguiente

$$(5-18) \quad -\frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} \left(G_n^k \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) = \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)}, \quad \text{en } Y.$$

Usando la convención de suma de Einstein, la ecuación (5-18) puede agruparse como

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right) \frac{\partial}{\partial x_n} u_k^{(0)} = 0, \quad \text{en } Y,$$

o bien

$$(5-19) \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} \left(G_n^k + y_n \right) = 0, \quad \text{en } Y,$$

que es llamada ecuación sobre la celda periódica o problema local. Con ayuda del Lema 1, puede encontrarse una solución de la ecuación (5-19), hasta una constante arbitraria. La elección de la constante está determinada por la condición $\langle G_n^k(\mathbf{y}) \rangle_Y = 0$.

Sustituyendo (5-14) y (5-17) en (5-10c), se obtiene

$$(5-20) \quad d_k \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(2)} = d_k \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \frac{\partial}{\partial y_j} \mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_i \partial x_n} + \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) - \frac{du_k^{(0)}}{dt}.$$

El Lema 1 establece que la condición para la existencia de una solución al problema (5-20) es

$$(5-21) \quad \left\langle d_k \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \frac{\partial}{\partial y_j} \mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right) \right\rangle \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_i \partial x_n} + \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) - \frac{du_k^{(0)}}{dt} = 0,$$

Tomando en cuenta que $\left\langle \frac{\partial}{\partial y_j} \mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k(\mathbf{y}) \right\rangle = 0$ debido a que $\mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k(\mathbf{y})$ es 1-periódica, la ecuación (5-21) se puede representar en la forma divergente como

$$(5-22) \quad \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = D \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathfrak{D}} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}),$$

que, formalmente, tomando en cuenta las condiciones de frontera e iniciales, se plantea como

$$(5-23) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = D\nabla_{\mathbf{x}}\hat{\mathfrak{D}}\nabla_{\mathbf{x}}\mathbf{u}^{(0)} + \eta\mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } \mathbf{u}, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, 0) = rnd(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega. \end{cases}$$

donde

$$(5-24) \quad \hat{\mathfrak{D}}_{in}^k = \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right\rangle$$

El problema (5-23) se denomina *problema homogeneizado* asociado con el problema no homogéneo (5-1). Las soluciones $\mathbf{u}^\varepsilon \rightarrow \mathbf{u}^{(0)}$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, lo que sugiere que las condiciones de Turing y las aproximaciones de amplitud del problema homogeneizado tienen lugar en el estudio de Turing del problema no homogéneo. Los coeficientes $\hat{\mathfrak{D}}_{in}^k$ son matrices con entradas constantes, simétricas y definidas positivas.

5.3.2. $\mathfrak{D}_{ij}^k$ suave a trozos, $\mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathfrak{D}(\mathbf{y})$

En presencia de discontinuidades en los coeficientes de difusión $\mathfrak{D}_{ij}^k$, como se mencionó anteriormente, es necesario establecer condiciones de contacto en los puntos de discontinuidad, conocidos como interfaces, que en este caso se denotarán como Γ_Y . La formulación implica que la difusión toma valores distintos en una región interna de la celda periódica, identificada como $Y^{(i)}$, y en el resto de la celda periódica o región externa, señalada como $Y^{(m)}$. Estas dos regiones son mutuamente excluyentes y ocupan completamente la celda periódica.

$$(5-25) \quad Y = Y^{(i)} \cup Y^{(m)}, \quad Y^{(i)} \cap Y^{(m)} = \emptyset$$

De esta manera para el sistema de reacción difusión (5-1) con condición de frontera de Dirichlet y condiciones de contacto perfecto, toma la forma

$$(5-26) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{u}^{\varepsilon,p}}{dt} = D\nabla \cdot \mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x})\nabla \mathbf{u}^{\varepsilon,p} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\varepsilon,p}; p), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ [[u_k^\varepsilon]]_{\Gamma_s} = 0, & \text{sobre } \Gamma_s \times [0, \infty), \\ [[\mathfrak{D}^{k\varepsilon}\nabla u_k^\varepsilon \cdot \mathbf{n}]]_{\Gamma_s} = 0, & \text{sobre } \Gamma_s \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}^\varepsilon = \mathbf{u}_0, & \text{sobre } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}(\mathbf{x}, 0) = rnd(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega. \end{cases}$$

Para asegurar la existencia y unicidad de la jerarquía de ecuaciones 5-10, se requiere ajustar el Lema 1 en el contexto de funciones suaves a trozos con condiciones de contacto perfecto. La modificación es [35, Lema 2, Cap. 4]:

Lema 2 Dadas $\mathfrak{D}_{ij}^k(\xi)$, $f_0(\xi)$ y $f_k(\xi)$ son funciones 1-periódicas y infinitamente diferenciables a trozos, suponiendo que $\mathfrak{D}^k$ cumple la condiciones 5-11. Para el problema siguiente

$$(5-27) \quad \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial \xi_j} G(\xi) \right) = f_0(\xi) + \frac{\partial}{\partial \xi_j} f_j(\xi),$$

con condiciones de contacto

$$(5-28a) \quad [[G]]_{\Gamma_Y} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_Y,$$

$$(5-28b) \quad \left[\left[\left(\mathfrak{D}_{ij}^{k\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \xi_j} G(\xi) - f_i \right) n_i \right] \right]_{\Gamma_Y} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_Y,$$

la condición necesario y suficiente para que exista una solución 1-periódica es

$$(5-29) \quad \langle f \rangle_Y = 0.$$

Aquí la solución general 1-periódica de la ecuación (5-12) se escribe como $G(\xi) = \bar{G}(\xi) + C$, donde $\bar{G}(\xi)$ es una solución con promedio cero, y C es una constante arbitraria.

Utilizando este Lema y siguiendo un procedimiento similar al caso infinitamente diferenciable presentado en la subsección anterior, se obtiene la formulación del problema local y su correspondiente problema homogeneizado de la siguiente manera.

$$(5-30) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right) = 0, & \text{en } Y - \Gamma_Y, \\ [[G_n^k]]_{\Gamma_Y} = 0, & \text{sobre } \Gamma_Y, \\ \left[\left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} (G_n^k(\mathbf{y}) + y_n) \right) n_i \right]_{\Gamma_Y} = 0, & \text{sobre } \Gamma_Y, \\ \langle G_n^k(\mathbf{y}) \rangle_Y = 0. \end{array} \right.$$

Aplicando un procedimiento similar al descrito en la sección anterior, el cual no se detallará aquí por redundancia, se consigue homogeneizar el sistema para el caso de difusión periódica suave a trozos, logrando así

$$(5-31) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = D \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathfrak{D}} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{u}_0, & \text{sobre } \partial\Omega, \\ \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, 0) = r n d(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega. \end{array} \right.,$$

donde

$$(5-32) \quad \hat{\mathfrak{D}}_{in}^k = \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} G_n^k + \mathfrak{D}_{in}^k \right\rangle$$

5.4. Caso 2: $\varepsilon_1 = \varepsilon$, $\varepsilon_2 = \varepsilon^2$ y $\mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z})$

En el caso de tener dos escalas $\varepsilon_1 = \varepsilon$ y $\varepsilon_2 = \varepsilon^2$ el procedimiento matemático de homogeneización, para el cálculo de la difusión efectiva se realiza en dos etapas. En la primera etapa, se calcula una difusión efectiva “intermedia” sobre una celda periódica formada por una fibra aislada, representada como un círculo pequeño (celda Z), ver Figura 5-2. Finalmente, se calcula la difusión efectiva sobre una celda periódica formada por un agregado, representada como un círculo grande (celda Y) incrustado en una matriz cuya difusividad es la obtenida en el primer paso. Ambas celdas

periódicas se consideran cuadrados unitarios. En la primera etapa de homogeneización, la fracción de volumen de la inclusión aislada (celda Z) se relaciona con el parámetro de agregación σ mediante la fórmula.

Considerando el operador $\nabla_\alpha = \frac{\partial}{\partial \alpha_i}$, y asumiendo que $\mathbf{y}$ y $\mathbf{z}$ son variables independientes, por medio de la regla de la cadena, podemos obtener la expresión del operador $\nabla \mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \nabla$ en términos de ε_1 y ε_2 como sigue

$$(5-33) \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \nabla &= (\nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon_1^{-1} \nabla_{\mathbf{y}} + \varepsilon_2^{-1} \nabla_{\mathbf{z}}) \cdot \mathfrak{D}(\nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon_1^{-1} \nabla_{\mathbf{y}} + \varepsilon_2^{-1} \nabla_{\mathbf{z}}), \\ &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon_1^{-1} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) + \varepsilon_1^{-2} \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \\ &\quad + \varepsilon_2^{-1} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) + \varepsilon_2^{-2} \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \\ &\quad + \varepsilon_1^{-1} \varepsilon_2^{-1} (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}). \end{aligned}$$

En este trabajo, se aborda el caso específico donde $\varepsilon_1 = \varepsilon$ y $\varepsilon_2 = \varepsilon^2$, lo cual conduce a una simplificación de la expresión (5-33), como sigue

$$(5-34) \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \nabla &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} + \varepsilon^{-1} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) + \varepsilon^{-2} (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) + \varepsilon^{-3} (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \\ &\quad + \varepsilon^{-4} \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}}. \end{aligned}$$

Sustituyendo en (5-1) las expansiones de $\mathbf{u}$, $\mathbf{F}$ y $\nabla \cdot \mathfrak{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) \nabla$ presentadas en (5-6), (5-8) y (5-34), se obtiene la jerarquía de ecuaciones

$$(5-35) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^{-4}) : -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{0},$$

$$(5-36) \quad \mathcal{O}(\varepsilon^{-3}) : -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(1)} = (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(0)},$$

$$(5-37) \quad \begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^{-2}) : -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(2)} &= (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(0)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(1)}, \end{aligned}$$

$$(5-38) \quad \begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^{-1}) : -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(3)} &= (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(0)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(2)}, \end{aligned}$$

$$(5-39) \quad \begin{aligned} \mathcal{O}(\varepsilon^0) : -D \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(4)} &= D \left(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \right. \\ &\quad \left. + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(2)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(3)} \right) \\ &\quad + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) - \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt}, \end{aligned}$$

donde $\mathbf{x}$ y $\mathbf{z}$ se consideran variables independientes. La existencia de soluciones a los problemas (5-35)-(5-39) está garantizada por el Lema 2.

El Lema 2 y (5-35) implica que la solución 1-periodica $\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t; p)$ es independiente de $\mathbf{z}$, esto es

$$(5-40) \quad \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, t; p) = \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; p).$$

Entonces, tomando en cuenta esto, (5-36) puede ser escrita como

$$\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(1)} = (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(0)},$$

que se simplifica como

$$(5-41) \quad \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(1)} = \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(0)}.$$

También el Lema 2 establece que la condición necesaria y suficiente para la existencia de una solución periódica $\mathbf{u}^{(1)}$ de (5-36) es

$$(5-42) \quad \left\langle \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(0)} \right\rangle_Z = \mathbf{0},$$

que se satisface debido a la periodicidad de $\mathfrak{D}$.

Se propone la siguiente expresión como solución al problema (5-36):

$$(5-43) \quad u_k^{(1)} = G_n^k(\mathbf{z}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial y_n} + v_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

donde $\mathbf{G}_n(\mathbf{z}) = (G_n^1(\mathbf{z}), G_n^2(\mathbf{z}))$ representa una solución Z -periódica del problema local (5-44) sobre la celda periódica Z . A su vez, $\mathbf{v}^{(1)}$ constituye un campo vectorial independiente de $\mathbf{z}$. Sustituyendo (5-43) en (5-41) se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial z_i} \left(\mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + \mathfrak{D}_{in}^k \right) \frac{\partial}{\partial x_n} u_k^{(0)} = \mathbf{0},$$

o bien

$$(5-44) \quad \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \left(G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) + z_n \right) = 0.$$

Esta última ecuación es llamada ecuación sobre la celda periódica Z o problema local sobre $\mathbf{z}$. Por el Lema 2, se puede construir una solución $\mathbf{G}_k(\mathbf{y}, \mathbf{z})$, Z -periódica, de (5-44), con una constante arbitraria. La elección de la constante está determinada por la condición $\langle G_n^k(\mathbf{z}) \rangle = 0$.

Sustituyendo las expresiones (5-40) y (5-43) en el término de orden ε^{-2} de la jerarquía de ecuaciones (5-37), se obtiene:

$$(5-45) \quad -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(2)} = (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(0)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(1)}.$$

Nuevamente, del Lema 2 se tiene que el problema (5-45) tiene una solución Z -periódica si se satisface que

$$(5-46) \quad \left\langle \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(1)} \right\rangle_Z = 0,$$

en donde se tomó en cuenta que $\left\langle \frac{\partial}{\partial z_j} \mathfrak{D}_{ji}^k \right\rangle_{\mathbf{z}} = 0$ y $\left\langle \frac{\partial}{\partial z_j} \mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k(\mathbf{z}) \right\rangle_Z = 0$, debido a que $\mathfrak{D}_{ji}^k G_n^k(\mathbf{z})$ es Z -periódico. A (5-46) se le pueden aplicar las siguientes simplificaciones:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} \mathbf{u}^{(0)} + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \mathbf{u}^{(1)} \right\rangle_Z = \mathbf{0},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{in} + \mathfrak{D}_{ij} \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k \right\rangle_Z \frac{\partial}{\partial y_k} \mathbf{u}^{(0)} &= \mathbf{0}, \\ \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\mathfrak{D}}_{ik} \frac{\partial}{\partial y_k} \mathbf{u}^{(0)} &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Es decir:

$$(5-47) \quad \nabla_{\mathbf{y}} \tilde{\mathfrak{D}} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{0},$$

donde

$$(5-48) \quad \tilde{\mathfrak{D}}_{ij}^k(\mathbf{y}) = \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k + \mathfrak{D}_{in}^k \frac{\partial}{\partial z_n} G_j^k \right\rangle_Z.$$

Puede verificarse que $\tilde{\mathfrak{D}}^k$ es simétrica y definida positiva. Adicionalmente, del Lemma 2 y el resultado (5-47) se concluye que

$$(5-49) \quad \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t; p) = \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, t; p).$$

Sustituyendo (5-45) en (5-43), se obtiene que

$$(5-50) \quad \mathbf{u}^{(1)} = \mathbf{v}^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Entonces se propone como solución $u_k^{(2)}$ de (5-45) la siguiente expresión

$$(5-51) \quad u_k^{(2)} = G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) + v_k^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

Sustituyendo (5-51), (5-43) y (5-40) en (5-45), se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \left(G_n^k \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) + v_k^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right) + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(1)} = 0.$$

ue se simplifica de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} (5-52) \quad & \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \left(G_n^k \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} = 0, \\ & \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} (G_n^k) \left(\frac{\partial v_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{in}^k \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial v_k^{(1)}}{\partial y_n} \right) = 0, \\ & \left(\frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{in}^k \right) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial v_k^{(1)}}{\partial y_n} \right) = 0. \end{aligned}$$

Agrupando, se obtiene:

$$(5-53) \quad \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} (G_n^k + z_n) \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} + \frac{\partial v_k^{(1)}}{\partial y_n} \right) = 0.$$

Se observa que la expresión

$$(5-54) \quad \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} (G_n^k + z_n) = 0,$$

es equivalente a (5-44), lo que justifica mantener la notación de G_n^k para $\mathbf{u}^{(2)}$.

Ahora, sustituyendo (5-49)-(5-51) en (5-38), se obtiene

$$(5-55) \quad -\nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(3)} = \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \\ + (\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(2)}.$$

Del Lema 2, se tiene que la condición necesaria y suficiente para que $\mathbf{u}^{(3)}$ sea Z -periódica es

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \left(\frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} \right) u_k^{(1)} + \left(\frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} \right) u_k^{(2)} \right\rangle_Z = 0.$$

Tomando en cuenta que $\mathbf{u}^{(1)}$ y $\mathbf{u}^{(2)}$ no dependen de $\mathbf{z}$, la expresión anterior se reduce a

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(2)} \right\rangle_Z = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(2)} \right\rangle_Z = 0.$$

Sustituyendo (5-51) en la ecuación anterior, se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} \right) + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(2)} \right\rangle_Z = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} \right) + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \left(G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) + v_k^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \right) \right\rangle_Z = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} \right) + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} \left(G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) \right\rangle_Z = 0,$$

que puede simplificarse para obtener la siguiente relación entre $\mathbf{u}^{(0)}$ y $\mathbf{u}^{(1)}$:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left\langle \mathfrak{D}_{in}^k + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right\rangle_Z \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) = 0.$$

Tomando en cuenta el coeficiente de difusión efectiva (5-48), se obtiene

$$(5-56) \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} = - \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n}.$$

Sustituyendo (5-49) y (5-50) en la expresión anterior, se obtiene

$$(5-57) \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial v_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial y_n} = - \frac{\partial}{\partial y_i} \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_n}.$$

Proponiendo una solución $v_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, de la forma

$$(5-58) \quad u_k^{(1)} = v_k^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = H_n^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} + \tilde{v}_k^{(1)}(\mathbf{x})$$

que, al sustituirla en (5-57), resulta

$$(5-59) \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\tilde{\mathfrak{D}}_{i,j}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_j} H_n^k(\mathbf{y}) + \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \right) \frac{\partial u_k^{(0)}(\mathbf{x})}{\partial x_n} = 0.$$

Entonces $H_n^k(\mathbf{y})$ es una solución Y -periódica de la ecuación sobre Y :

$$(5-60) \quad \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\tilde{\mathfrak{D}}_{i,j}^k(\mathbf{y}) \frac{\partial}{\partial y_j} H_n^k(\mathbf{y}) + \tilde{\mathfrak{D}}_{i,n}^k(\mathbf{y}) \right) = 0.$$

Para garantizar la unicidad debe cumplirse que

$$(5-61) \quad \left\langle H_n^k \right\rangle_Y = 0.$$

Encontrar una solución Y -periódica H_n^k a la ecuación (5-60), junto con la condición (5-61), se conoce como el problema local sobre Y .

Aplicando el Lema 2 a (5-39) se tiene que para que exista una solución Z -periódica se debe cumplir:

$$(5-62) \quad \begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = & \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) + \left\langle D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} \right\rangle_Z + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \right\rangle_Z \\ & + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(2)} \right\rangle_Z + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} + \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}}) \mathbf{u}^{(3)} \right\rangle_Z. \end{aligned}$$

Tomando en cuenta que $\left\langle \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(2)} \right\rangle_Z = 0$ y $\left\langle \nabla_{\mathbf{z}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(3)} \right\rangle_Z = 0$, se obtiene

$$(5-63) \quad \begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = & \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) + \left\langle D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} \right\rangle_Z + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \right\rangle_Z \\ & + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}}) \mathbf{u}^{(2)} \right\rangle_Z + \left\langle D \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(3)} \right\rangle_Z. \end{aligned}$$

De igual manera, se requiere que la solución sea $\mathbf{y}$ -periódica, se obtiene

$$(5-64) \quad \begin{aligned} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = & \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) + \left\langle D \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} \right\rangle_{ZY} + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}}) \mathbf{u}^{(1)} \right\rangle_{ZY} \\ & + \left\langle D(\nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}}) \mathbf{u}^{(2)} \right\rangle_{ZY} + \left\langle D \nabla_{\mathbf{y}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(3)} \right\rangle_{ZY}. \end{aligned}$$

Dado que $\mathfrak{D}$ y $\mathbf{u}^{(3)}$ son Y -periódicas, la anterior expresión se simplifica en

$$\frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}) + D \left\langle \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u}^{(1)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathfrak{D} \nabla_{\mathbf{z}} \mathbf{u}^{(2)} \right\rangle_{ZY}.$$

Usando la notación de índices, se pueden hacer las siguientes simplificaciones:

$$\begin{aligned} \frac{du_k^{(0)}}{dt} &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} + \frac{\partial}{\partial x_i} \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(2)} \right\rangle_{ZY}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial x_j} u_k^{(0)} + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial y_j} u_k^{(1)} + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} u_k^{(2)} \right\rangle_{ZY}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \mathfrak{D}_{ij}^k \left(\frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_j} \right) + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) \right\rangle_{ZY}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left(\mathfrak{D}_{in}^k + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right) \left(\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial y_n} + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) \right\rangle_{ZY}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left(\mathfrak{D}_{in}^k + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right) \left(\frac{\partial}{\partial y_n} \left(H_m^k(\mathbf{y}) \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_m} \right) + \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_n} \right) \right\rangle_{ZY}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left(\mathfrak{D}_{in}^k + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right) \left(\frac{\partial}{\partial y_n} H_m^k(\mathbf{y}) + \delta_{nm} \right) \right\rangle_{ZY} \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_m}, \\ &= \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \left\langle \mathfrak{D}_{in}^k + \mathfrak{D}_{ij}^k \frac{\partial}{\partial z_j} G_n^k(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \right\rangle_Z \left(\frac{\partial}{\partial y_n} H_m^k(\mathbf{y}) + \delta_{nm} \right) \right\rangle_Y \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_m}. \end{aligned}$$

Agrupando términos y sustituyendo (5-54), se obtiene

$$(5-65) \quad \frac{du_k^{(0)}}{dt} = \eta f_k(\mathbf{u}^{(0)}) + d_k \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \tilde{\mathfrak{D}}_{in}^k(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial}{\partial y_n} H_m^k(\mathbf{y}) + \delta_{nm} \right) \right\rangle_Y \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_m}.$$

Esta ecuación puede escribirse en la forma divergente como

$$(5-66) \quad \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = D \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathfrak{D}} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)})$$

que, junto a las condiciones de frontera e iniciales, resulta

$$(5-67) \quad \begin{cases} \frac{d\mathbf{u}^{(0)}}{dt} = D \nabla_{\mathbf{x}} \hat{\mathfrak{D}} \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}^{(0)} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{(0)}), & \text{en } \Omega \times [0, \infty), \\ + \text{condiciones de frontera adecuadas para } \mathbf{u}, & \text{en } \partial\Omega \times [0, \infty), \\ \mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, 0) = r n d(\mathbf{x}) + \mathbf{u}_0, & \text{en } \Omega. \end{cases}$$

donde

$$(5-68) \quad \hat{\mathfrak{D}}_{in} = \left\langle \tilde{\mathfrak{D}}_{in}^k(\mathbf{y}) \left(\frac{\partial}{\partial y_n} H_m^k(\mathbf{y}) + \delta_{nm} \right) \right\rangle_Y.$$

El problema (5-67) se denomina el problema homogeneizado relacionado con el problema no homogéneo (5-1). Las soluciones son tales que $\mathbf{u}^\varepsilon \rightarrow \mathbf{u}^{(0)}$ cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, lo que sugiere que las condiciones de Turing y las aproximaciones de amplitud del problema homogeneizado tienen lugar en el estudio de Turing del problema no homogéneo. Los componentes $\hat{\mathfrak{D}}_{ij}^k$ son contantes y $\hat{\mathfrak{D}}^k$ son matrices simétricas y definidas positivas.

5.5. Análisis de Turing estudio del problema homogeneizado

5.5.1. Análisis lineal

Siguiendo el procedimiento estándar [8], sea $\mathbf{u}_0$ un punto de equilibrio de (5-23) o (5-67), es decir, $\mathbf{F}(\mathbf{u}_0; p) = \mathbf{0}$, y consideremos una perturbación de la forma $\mathbf{u}^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{u}_0 + \delta \mathbf{W}$. La perturbación $\mathbf{W}$ está gobernada por el problema lineal:

$$(5-69) \quad \frac{d\mathbf{W}}{dt} = D\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}}\nabla \mathbf{W} + \eta \mathbb{A} \mathbf{W},$$

donde $\mathbb{A}$ es la matriz Jacobiana asociada a $\mathbf{F}$, evaluada en el punto de equilibrio $\mathbf{u}_0$.

Ahora supongamos, como en las referencias [18] y [1], que existe un conjunto de funciones propias $\mathbf{W}_n$ que forman una base completa para las funciones en Ω , y que hay un conjunto infinito pero numerable de valores propios reales $\mathbf{l}_n = (l_n^1, l_n^2)$ que satisfacen el siguiente problema de valores propios:

$$(5-70) \quad \begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}}\nabla \mathbf{W}_n &= \mathbf{l}_n \mathbf{W}_n, \quad \text{in } \Omega, \\ (\hat{\mathfrak{D}}\nabla \mathbf{W}_n) \cdot \mathbf{n} &= 0, \quad \text{on } \partial\Omega. \end{aligned}$$

En este caso, es razonable proponer una solución de (5-69) como

$$(5-71) \quad \mathbf{W}(\mathbf{x}, t) = \sum_n \mathbf{c}_n e^{\lambda t} \mathbf{W}_n(\mathbf{x}),$$

donde $\mathbf{c}_n = (c_n^1, c_n^2)$ son los coeficientes de Fourier de la condición inicial. Al sustituir (5-71) en (5-69), teniendo en cuenta (5-67), se concluye que soluciones no triviales de los coeficientes de Fourier se obtienen si se cumple la siguiente condición:

$$(5-72) \quad \det(\lambda \mathbb{I} - \eta \mathbb{A} + D \mathbf{l}_n) = 0,$$

de donde se obtiene que los valores de λ para una inestabilidad de Turing están dados por las soluciones de la relación de dispersión:

$$(5-73) \quad \lambda^2 - \alpha(l_n^1, l_n^2) \lambda + \beta(l_n^1, l_n^2) = 0,$$

donde

$$(5-74) \quad \alpha(l_n^1, l_n^2) = \text{tr}(\eta \mathbb{A} - D \mathbf{l}_n),$$

$$(5-75) \quad \beta(l_n^1, l_n^2) = \det(\eta \mathbb{A} - D \mathbf{l}_n).$$

La estabilidad lineal está garantizada si $\text{tr}(\mathbb{A}) < 0$ y $\det(\mathbb{A}) > 0$. Por otro lado, el estado estacionario es inestable ante perturbaciones espaciales si $\text{Re}(\lambda) > 0$, lo cual se logra si y solo si $\beta(l_n^1, l_n^2) < 0$ para algún n . A partir de las condiciones $\beta(l_n^1, l_n^2) = 0$ y $\frac{d\beta(l_n^1, l_n^2)}{dn} = 0$, se pueden obtener los valores críticos de D y $\mathbf{l}_n$ [43].

6 Resultados: difusión con propiedades periódicas

En este estudio, se enfocaron los esfuerzos en abordar la problemática de la estratificación periódica del entorno, la cual está modelada mediante un coeficiente de difusión periódico. Este es el caso de la difusión en medios porosos periódicos (dominios perforados) o la difusión de productos químicos a lo largo de fibras dispuestas según un campo vectorial, como ocurre en la filotaxia, donde la difusión de la fitohormona auxina está dictada por la orientación de microtúbulos, que a su vez están dispuestos a lo largo de campos de estrés [44]. Desde una perspectiva matemática, el problema consiste en un operador de difusión con un coeficiente de difusión dependiente del espacio (periódico) y términos de reacción no lineales. En lo que respecta al problema relacionado únicamente con el operador de difusión, como la conductividad térmica, se utilizan varias técnicas matemáticas para manejarlo, y el método más potente y general es la homogeneización [35], que ha sido descrito en el Capítulo anterior y cuya idea principal es considerar un sistema equivalente con coeficientes de difusión homogéneos.

Durante los últimos años, estos métodos se han aplicado con éxito a diferentes situaciones físicas modeladas por sistemas de reacción-difusión no lineales (ver, por ejemplo, [30, 45, 46, 47, 32, 40] y las referencias allí citadas). En esta tesis, se lleva este enfoque un paso más allá encontrando condiciones para la existencia de inestabilidad de Turing, con coeficientes de difusión no homogéneos periódicos y rápidamente oscilantes, en términos de los coeficientes efectivos del sistema homogeneizado equivalente. En este capítulo, se aplica los resultados del capítulo anterior a un sistema de reacción-difusión con cinética de Schnakenberg, y se realizarán cálculos numéricos exhaustivos para validar los resultados predichos por el procedimiento de homogeneización, en una y dos dimensiones. En este último caso, se considera un problema en el cual los productos químicos se difunden en un dominio en 2D que contiene fibras con una disposición descrita por un campo vectorial dado.

En lo que sigue, se considera un dominio o medio $\Omega =]0, L[^N \subset \mathbb{R}^N$ con estratificación periódica, es decir, un dominio donde subdominios (inhomogeneidades) con diferentes propiedades de transporte están dispuestos de manera periódica. Suponemos que esta disposición periódica está descrita por una celda unitaria de tamaño ε , que es pequeña en el sentido de que si L es el tamaño característico del dominio Ω , entonces $\varepsilon \ll L$. Sin pérdida de generalidad, en este estudio se considera $L = 1$; es decir, $\Omega =]0, 1[^N$, y ε es un parámetro adimensional tal que $\varepsilon \ll 1$. El objetivo aquí será encontrar las condiciones de Turing para la formación de patrones del sistema (5-1) con condiciones de contorno de Neumann, considerando el problema homogeneizado o el comportamiento efectivo cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, es decir, el sistema (5-23), con (5-24) y con la condición de contorno

Neumann. Para ello, utilizaremos el la cinética de Schnakenberg y resolveremos numéricamente los problemas unidimensional y bidimensional utilizando el software de elementos finitos COMSOL Multiphysics® [28]. Finalmente, los resultados numéricos del problema homogeneizado, (5-23) con (5-24), se compararán con los del problema general, sin homogeneizar (5-1).

6.1. Difusión periódica continuamente diferenciable

En lo siguiente, se considera un dominio o medio $\Omega =]0, L[^N \subset \mathbb{R}^N$ con estratificación periódica; es decir, un dominio donde subdominios (inhomogeneidades) con diferentes propiedades de transporte están dispuestos de manera periódica. Se supone que esta disposición periódica está descrita por una celda unitaria de tamaño ε , que es pequeña en el sentido de que si L es el tamaño característico del dominio Ω , entonces $\varepsilon \ll L$. Sin pérdida de generalidad, en este estudio se considera $L = 1$; es decir, $\Omega =]0, 1[^N$, y ε es un parámetro adimensional tal que $\varepsilon \ll 1$. Se considera un vector de dos sustancias químicas $\mathbf{u}^{\varepsilon,p} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t; \varepsilon, p) = (u_1^{\varepsilon,p}, u_2^{\varepsilon,p})$, y una cinética de reacción $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\varepsilon,p}; p) = (f^1(\mathbf{u}^{\varepsilon,p}; p), f^2(\mathbf{u}^{\varepsilon,p}; p))$, donde p es un parámetro del sistema que se considerará como el parámetro de bifurcación. Un sistema general de reacción-difusión de dos componentes es

$$(6-1) \quad \frac{d\mathbf{u}^{\varepsilon,p}}{dt} = D \nabla \cdot \mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{u}^{\varepsilon,p} + \eta \mathbf{F}(\mathbf{u}^{\varepsilon,p}; p), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, \infty) \times \Omega,$$

donde η es un parámetro de escala, $D = \text{diag}[d_1, d_2]$ es la matriz diagonal que contiene los coeficientes de difusión escalares de u_1^ε y u_2^ε , respectivamente, y $\mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) = \text{diag}[\mathfrak{D}^{1\varepsilon}(\mathbf{x}), \mathfrak{D}^{2\varepsilon}(\mathbf{x})]$ es una función ε -periódica dependiente del espacio que describe la variación espacial de la tasa de difusión de $\mathbf{u}^{\varepsilon,p}$; en dimensiones, cada $\mathfrak{D}^{k\varepsilon}(\mathbf{x})$ puede ser una matriz $N \times N$ a su vez.

Se asume que el sistema (6-1) está sujeto a condiciones de contorno de Neumann o de flujo nulo:

$$(6-2) \quad (\mathfrak{D}^\varepsilon(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{u}^{\varepsilon,p}) \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{n} \text{ es normal a } \partial\Omega.$$

Se distinguirán dos escalas espaciales; además de las coordenadas globales o lentas $\mathbf{x}$, se considera la escala de las pequeñas inhomogeneidades mediante coordenadas locales o rápidas $\mathbf{y} = \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{x}$. Entonces, $\mathfrak{D}^{k\varepsilon}(\mathbf{x}) = \mathfrak{D}^k(\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{x}) = \mathfrak{D}^k(\mathbf{y})$ es una matriz $N \times N$, tal que para $i, j \in \{1, \dots, N\}$ y $k \in \{1, 2\}$, $\mathfrak{D}$ es:

- ε -periódica en $\mathbf{x}$ y 1-periódica en $\mathbf{y}$.
- Diferenciable: $\mathfrak{D}_{ij}^k \in C^\infty(\Omega)$.
- Simétrica: $\mathfrak{D}_{ij}^k = \mathfrak{D}_{ji}^k$.
- Definida positiva: $\mathfrak{D}_{ij}^k \xi_i \xi_j \geq \varkappa \xi_j \xi_j$, para todos los $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \in \mathbb{R}^N$, donde $\varkappa > 0$ es una constante positiva.

El objetivo es encontrar las condiciones de Turing para la formación de patrones del sistema (6-1) con condiciones de contorno (6-2) al considerar el problema homogeneizado o el comportamiento efectivo cuando $\varepsilon \rightarrow 0$.

6.1.1. Problema en una dimensión

La solución asintótica de primer orden formal de (6-8) se convierte en

$$(6-3) \quad \mathbf{u}^{\varepsilon, d} = \mathbf{u}^{(0)}(x, t) + \varepsilon \mathbf{N}(y) \frac{d\mathbf{u}^{(0)}(x, t)}{dx} + \dots$$

En una dimensión, definiendo $G^k = G_1^k$, el problema local (5-19) se convierte en

$$(6-4) \quad \frac{d}{dy} \left(\mathfrak{D}^k(y) \frac{dG^k(y)}{dy} + \mathfrak{D}^k(y) \right) = 0,$$

cuya solución es

$$G^k(y) = \int_0^y \left(\frac{C}{\mathfrak{D}^k(s)} - 1 \right) ds.$$

La constante C se puede determinar mediante la condición de periodicidad en $G^k(y)$, es decir, $K^k(1) - G^k(0) = 0$. Entonces, $0 = \int_0^1 \left(\frac{C}{\mathfrak{D}^k(s)} \right) ds - 1$, y $C = \langle \mathfrak{D}^k(y)^{-1} \rangle^{-1}$. Por lo tanto,

$$(6-5) \quad G^k(y) = \int_0^y \left(\frac{1}{\langle \mathfrak{D}^k(s)^{-1} \rangle \mathfrak{D}^k(s)} - 1 \right) ds.$$

Al reemplazarlo en (5-24), se obtiene el coeficiente efectivo

$$(6-6) \quad \hat{\mathfrak{D}}^k = \langle \mathfrak{D}^k(y)^{-1} \rangle^{-1}.$$

Consecuentemente,

$$(6-7) \quad G^k(y) = \int_0^y \left(\frac{\hat{\mathfrak{D}}^k}{\mathfrak{D}^k(s)} - 1 \right) ds.$$

Para el análisis que sigue, el sistema de reacción-difusión homogeneizado (5-23) se puede escribir de manera más adecuada definiendo $T = \hat{\mathfrak{D}}^2 t$ y $\eta_e = \frac{1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} \eta$. Haciendo esto, (5-23) se convierte en

$$(6-8a) \quad \frac{\partial u_1^{(0)}}{\partial T} = d \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} \frac{\partial^2 u_1^{(0)}}{\partial x^2} + \eta_e f(\mathbf{u}^{(0)}),$$

$$(6-8b) \quad \frac{\partial u_2^{(0)}}{\partial T} = \frac{\partial^2 u_2^{(0)}}{\partial x^2} + \eta_e g(\mathbf{u}^{(0)}),$$

donde se está asumiendo que $f^1 = f$, $f^2 = g$, $d_1 = d$ y $d_2 = 1$, entonces $D = \text{diag}[d, 1]$. Aquí, se considera que el parámetro de bifurcación es d , es decir, $p = d$, pero el superíndice se omite para simplificar la notación.

Las condiciones para la inestabilidad de Turing del sistema (6-8) son bien conocidas [8]. Considerando un punto de equilibrio estable, en términos de los coeficientes de difusión d y $\hat{\mathfrak{D}}^k$, obtenemos que estas condiciones son:

$$(6-9) \quad f_u + \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} dg_v > 0,$$

$$(6-10) \quad \left(f_u + \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} dg_v \right)^2 - 4 \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} d (f_u g_v - g_v g_u) > 0.$$

Los valores críticos d_c y k_c se pueden encontrar [8], y buscamos condiciones en $d \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2}$, de modo que

$$(6-11) \quad d \frac{\hat{\mathfrak{D}}^1}{\hat{\mathfrak{D}}^2} < d_c = \frac{-2(2f_v g_u - f_u g_v) + \sqrt{(2(2f_v g_u - f_u g_v))^2 - 4f_u^2 g_v^2}}{2f_u^2},$$

$$(6-12) \quad l_{k_c} = \eta(|\mathbb{A}|/d_c)^{1/2}.$$

Para el análisis débilmente no lineal, se propone una solución asintótica de primer orden de (6-8), que satisface las condiciones de contorno de Neumann, como

$$(6-13) \quad \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{U}_0 + \mathbf{V}^{(1)} a(T) \cos(\omega_n x),$$

donde $\mathbf{U}_0$ es un punto equilibrio estable, $l_n = (\omega_n)^2 = (2\pi n)^2$ y $a(T)$ es la solución de la ecuación de Stuart-Landau [3, 1]:

$$(6-14) \quad \frac{da^2(T)}{dT} = \alpha a^4(T) + \theta a^2(T).$$

Esta ecuación tiene dos puntos de equilibrio, $a = 0$ y $a = -\frac{\theta}{\alpha}$, por lo tanto la condición para una solución no trivial e inestable es $\theta > 0$.

Aplicación a la cinética de Schnakenberg

Los resultados anteriores se aplicarán a la cinética de Schnakenberg (2-17), presentada en la Sección 2.2.1. En este caso, si $\mathbf{u}^{(0)*} = \mathbf{V}^* a(T) \cos(\omega_n x)$ es un elemento del núcleo del problema adjunto, siguiendo el procedimiento descrito en [3, 1], obtenemos (sin mostrar los detalles) que los coeficientes en la ecuación de Stuart-Landau (6-14), son

$$(6-15) \quad \alpha = \left\langle \mathbf{V}^* \left| 2\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_1^{(2)}) + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_2^{(2)}) + \frac{3}{4}\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \right. \right\rangle,$$

$$(6-16) \quad \theta = \left\langle \mathbf{V}^* \left| \left(\Delta d \mathbf{I}_n + \Delta a \frac{\eta}{2} \mathbb{A}_a + \Delta b \frac{\eta}{2} \mathbb{A}_b \right) \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle,$$

donde Δ representa una perturbación de la variable correspondiente, y los subíndices del Jacobiano $\mathbb{A}$ representan derivadas respecto a la variable correspondiente.

Como ejemplo, consideremos las siguientes funciones ε -periódicas que describen la variación espacial de las tasas de difusión de $\mathbf{u}^{(0)}$:

$$(6-17) \quad \mathfrak{D}^{1\varepsilon}(x) = 1.0 + \rho_1 \sin((2\pi/\varepsilon)x),$$

$$(6-18) \quad \mathfrak{D}^{2\varepsilon}(x) = 1.0 + \rho_2 \cos((2\pi/\varepsilon)x),$$

donde $0 < \rho_1 < 1$ y $0 < \rho_2 < 1$.

Con las funciones (6-17) y (6-18), es posible encontrar expresiones analíticas para las soluciones del problema local (6-7) en términos de las siguientes funciones

$$(6-19) \quad H_1(y) = \frac{\arctan \left[\frac{\rho_1 + \tan(\phi y)}{\sqrt{1 - (\rho_1)^2}} \right]}{\phi \sqrt{1 - (\rho_1)^2}}, \quad H_2(y) = \frac{\arctan \left[\frac{(-1 + \rho_2) \tan(\phi y)}{\sqrt{1 - (\rho_2)^2}} \right]}{\phi \sqrt{1 - (\rho_2)^2}},$$

con las cuales las soluciones del problema local (6-7) son

$$(6-20) \quad G^k(y) = \begin{cases} H_k(y) - H_k(0) - y, & \text{si } 0 < x \leq 0.5, \\ H_k(y) - H_k(0) + 2H_k(0.5) - y, & \text{si } 0.5 < x \leq 1. \end{cases}$$

Con lo que los coeficientes efectivos (6-6) están dados por

$$(6-21) \quad \hat{\mathfrak{D}}^k = (H_k(1) - H_k(0) + 2H_k(0.5))^{-1}.$$

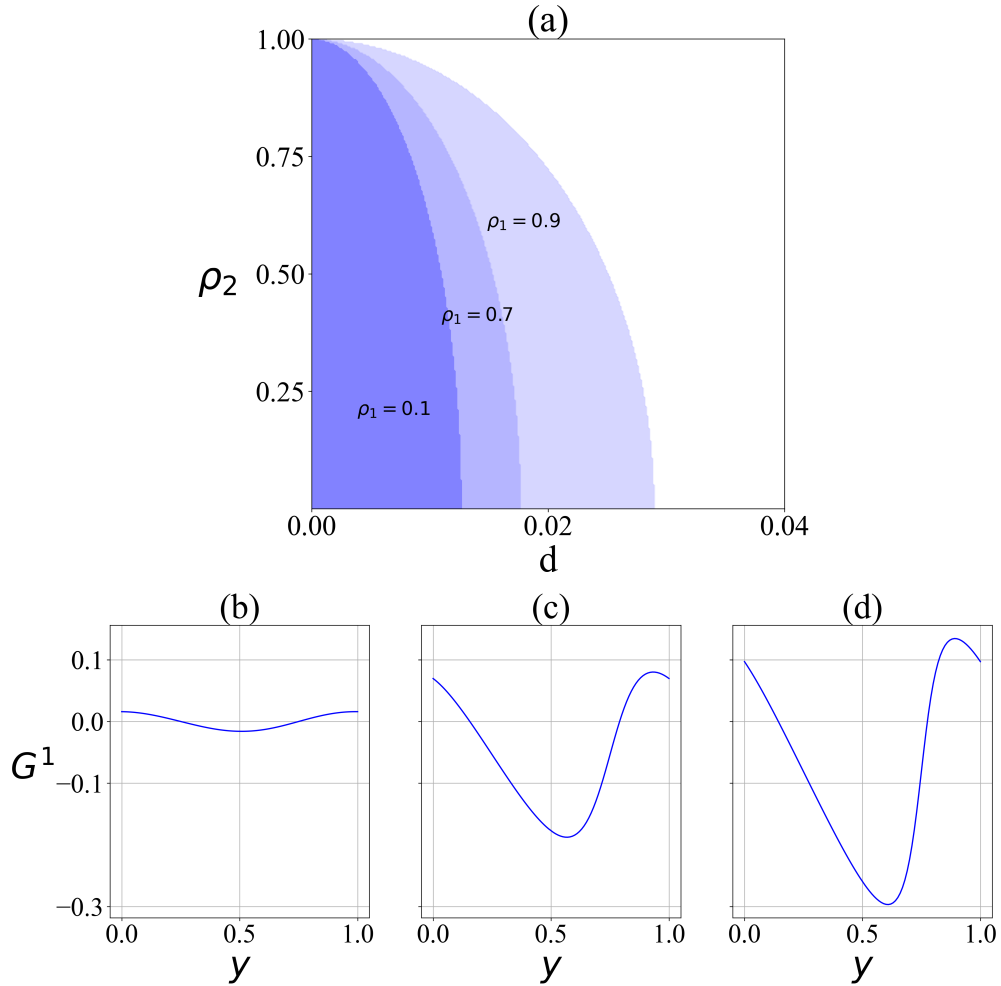


Figura 6-1: a) Espacio de parámetros (d, ρ_2) del modelo de Schnakenberg (2-17), con $a = 0.1$ y $b = 1.5$, donde se identifican tres regiones de inestabilidad de Turing: $\rho_1 = 0.1$, $\rho_1 = 0.7$ y $\rho_1 = 0.9$. Abajo, se muestran las soluciones G^1 de la ecuación (6-5) para los valores correspondientes de ρ_1 : b) $\rho_1 = 0.1$, c) $\rho_1 = 0.7$ y d) $\rho_1 = 0.9$.

A partir de las condiciones de Turing (6-9) y (6-10), es posible determinar las condiciones de ρ_1 , ρ_2 y d para la formación de patrones espaciales. En la Figura 6-1 se muestra el espacio de parámetros (d, ρ_2) para los valores de los parámetros $a = 0.1$ y $b = 1.5$ (que da como resultado

$d_c = 0.0126275643$), donde se identifican tres regiones de inestabilidad de Turing: $\rho_1 = 0.1$, $\rho_1 = 0.7$ y $\rho_1 = 0.9$. Observamos que las regiones de inestabilidad crecen a medida que ρ_1 se acerca a 1, y observamos que a partir de (6-20) y (6-19), las amplitudes del problema local aumentan con ρ_1 . En consecuencia, los patrones dados por (6-3) se deforman cada vez más, como se muestra en la parte inferior de la Figura 6-1.

Para examinar cómo la solución del problema no homogéneo (6-1), junto con la cinética de Schnakenberg (2-17), se acerca a la solución asintótica (6-3) al variar el parámetro ε , se llevó a cabo una resolución numérica de (6-1) utilizando la cinética de Schnakenberg según (2.2.1). Para este propósito, se empleó el software *COMSOL Multiphysics*®, una herramienta basada en elementos finitos diseñada para la solución de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales.

En la Figura 6-2, se comparan las soluciones numéricas obtenidas con las soluciones asintóticas correspondientes, dadas por (6-3), para seis valores de ε (1/16, 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512), y los tres valores de ρ_1 considerados en la Figura 6-1. Como era de esperar, la solución numérica se aproxima a la solución asintótica a medida que ε disminuye, y también observamos que la aproximación es menos precisa a medida que ρ_1 se aproxima a 1. Es interesante notar que para valores grandes de ε , los patrones conservan la forma de la función propia crítica con una amplitud más grande que la predicha por la solución asintótica, porque la forma de la función propia crítica se conserva, y solo la amplitud del problema no homogéneo es mayor. Esto sugiere una metodología empírica para identificar regiones de parámetros asociadas con diferentes patrones bidimensionales como franjas y manchas.

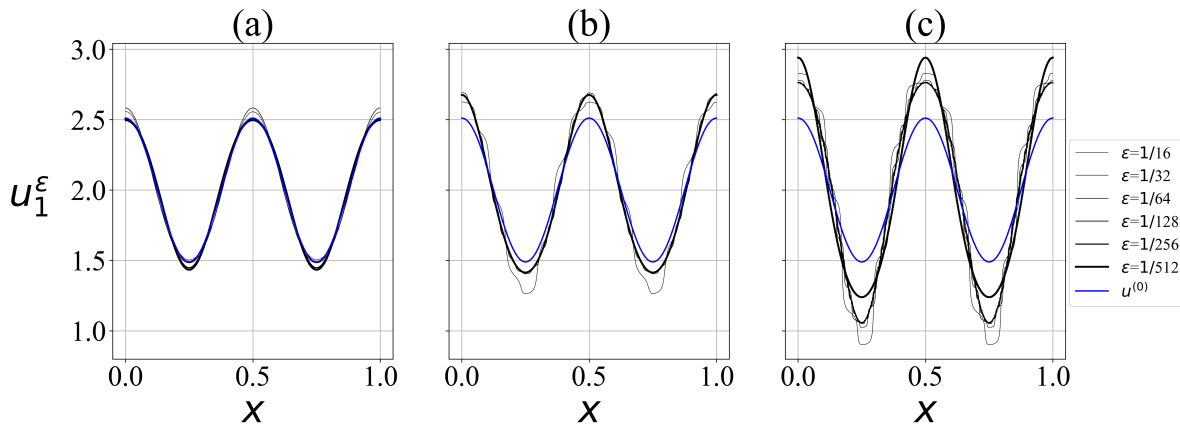


Figura 6-2: Se obtuvieron soluciones numéricas $u^{\varepsilon,d}$ del problema no homogéneo (6-1), utilizando el software *COMSOL Multiphysics*®, con la cinética de Schnakenberg (2.2.1). Estas soluciones se representan mediante líneas negras en el gráfico, donde se han considerado varios valores de ε (1/16, 1/32, 1/64, 1/128, 1/256, 1/512), cada uno indicado por la variación en el grosor de la línea, según se especifica en el recuadro. Para una comparación visual, se incluyen también las soluciones asintóticas formales (6-13), representadas por líneas azules en el mismo gráfico. Se han explorado diferentes escenarios, incluyendo casos con $\rho_1 = 0.1$, $\rho_1 = 0.7$, y $\rho_1 = 0.9$.

6.1.2. Problemas bidimensionales

En esta sección, se considera el problema (6-1) en dos dimensiones espaciales, con la cinética de Schnakenberg (2.2.1), y el proceso de homogeneización en problemas bidimensionales se ilustrará con un problema donde las sustancias químicas se difunden en un dominio que contiene fibras con un arreglo descrito por un campo vectorial τ , de tal manera que la difusión a lo largo de las fibras puede diferenciarse de la difusión en una dirección transversal. Para modelar estos tipos de problemas, proponemos

$$(6-22) \quad \mathfrak{D}^k = \sigma_k^t \mathbf{g} + (\sigma_k^l - \sigma_k^t) \tau^k \otimes (\tau^k)^T,$$

donde $\mathbf{g}$ es el tensor métrico, el superíndice T representa la transpuesta, σ_k^l y σ_k^t son coeficientes de difusión longitudinal y transversal, respectivamente, que pueden depender de las coordenadas espaciales, pero aquí se considerarán constantes.

Se asumirá que los coeficientes efectivos tienen la siguiente estructura

$$(6-23) \quad \hat{\mathfrak{D}}^k = \begin{bmatrix} \hat{\mathfrak{D}}_{11}^k & \hat{\mathfrak{D}}_{12}^k \\ \hat{\mathfrak{D}}_{21}^k & \hat{\mathfrak{D}}_{22}^k \end{bmatrix}.$$

Dado que (6-22) es simétrico, entonces (6-23) también es una matriz simétrica.

Suponga que la difusión longitudinal y transversal es la misma, es decir, $\sigma_k^l = \sigma_k^t$. En este caso, $\nabla \cdot (\hat{\mathfrak{D}}^k \nabla) = \hat{\mathfrak{D}}^k \nabla^2$, y nuestro objetivo es identificar regiones del espacio de parámetros donde los patrones generados son franjas o manchas. Para este propósito, se propone la siguiente solución asintótica de primer orden formal de (6-1):

$$(6-24) \quad \mathbf{u}^{(0)} = \mathbf{U}_0 + \mathbf{V}^{(1)} (a^x(T) \cos(\omega_n^x x) + a^y(T) \cos(\omega_n^y y)),$$

donde a^x y a^y son soluciones de la ecuación de Stuart-Landau

$$(6-25a) \quad \frac{da^x(T)^2}{dT} = \alpha a^x(T)^4 + \beta a^x(T)^2 a^y(T)^2 + \theta a^x(T)^2,$$

$$(6-25b) \quad \frac{da^y(T)^2}{dT} = \alpha a^y(T)^4 + \beta a^x(T)^2 a^y(T)^2 + \theta a^y(T)^2.$$

Podemos verificar que $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}^* a^x(T) \cos(\omega_n x)$ y $\mathbf{U}^* = \mathbf{V}^* a^y(T) \cos(\omega_n y)$, pertenecen al núcleo del problema adjunto. En este caso, los coeficientes de la ecuación de Stuart-Landau (6-25) son [3, 1]:

$$(6-26) \quad \alpha = \left\langle \mathbf{V}^* \left| 2\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_1^{(2)}) + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_2^{(2)}) + \frac{3}{4}\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \right. \right\rangle,$$

$$(6-27) \quad \beta = \left\langle \mathbf{V}^* \left| \frac{1}{2}\mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_{ij}) + \mathbf{Q}(\mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}_0^{(2)}) + \frac{3}{2}\mathbf{C}(\mathbf{V}^{(1)}) \right. \right\rangle,$$

$$(6-28) \quad \theta = \left\langle \mathbf{V}^* \left| \left(\Delta d \mathbf{l}_n + \Delta a \frac{\eta}{2} \mathbb{A}_a + \Delta b \frac{\eta}{2} \mathbb{A}_b \right) \mathbf{V}^{(1)} \right. \right\rangle.$$

La ecuación (6-25) tiene 4 puntos de equilibrio que se enumeran en la Tabla **6-1**, incluyendo sus condiciones de estabilidad correspondientes. Debido a que requerimos la inestabilidad del punto crítico $(0, 0)$, esto implica $\theta > 0$.

Estado estacionario	Condiciones para la estabilidad lineal	Patrón espacial
$ a^x ^2 = a^y ^2 = 0$	$\theta < 0$	Ninguno
$ a^x ^2 = 0, a^y ^2 = \frac{-\theta}{\alpha}$	$\theta > 0$ y $\frac{\beta}{\alpha} > 1$	Franjas
$ a^x ^2 = \frac{-\theta}{\alpha}, a^y ^2 = 0$	$\theta > 0$ y $\frac{\beta}{\alpha} > 1$	Franjas
$ a^x ^2 = a^y ^2 = \frac{-\theta}{\alpha+\beta}$	$\theta > 0$ y $\alpha < - \beta < 0$	Manchas

Tabla 6-1: Estados estacionarios y condiciones para la estabilidad lineal de las funciones de amplitud.

Ejemplo 1: difusión isotrópica

Considere el coeficiente de difusión dependiente del espacio (6-23), donde los coeficientes transversales y longitudinales están dados por

$$(6-29) \quad \sigma_k^l = \sigma_k^t = 1 + \rho_k \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}y\right),$$

y el campo vectorial está definido por $\tau^T = (1, 0)$.

Para calcular los coeficientes efectivos, se especifican los valores de ρ_k y ε , y se resuelve numéricamente la ecuación (5-24). Al considerar $\rho_1 = 0.9$ y $\rho_2 = 0.5$, se obtiene $\hat{\mathfrak{D}}^1 = 0.920324$ y $\hat{\mathfrak{D}}^2 = 0.977919$. Una vez que se fijan los valores de a , se pueden calcular d_c y η_c , y se puede garantizar una inestabilidad de Turing alrededor de las funciones propias con $\omega_i^x = \omega_i^y = 2\pi$. Sin embargo, nos centraremos en la solución numérica del problema no homogéneo (6-1), con la dinámica de Schnakenberg y el coeficiente de difusión definido en (6-22) y (6-29). El objetivo es verificar la convergencia de la solución a medida que el parámetro ε tiende a valores pequeños. Establecemos $b = 1.5$ en (2.2.1) y en la Tabla 6-2 se listan diferentes valores del parámetro a , que producen franjas o manchas según el análisis en las Refs. [3] y [1] (Figura 8(a) en la primera referencia y Figura 3(a) en la segunda), junto con sus valores críticos correspondientes.

a	(d_c, η_c)	Patrón
0.1	(0.053276, 5.69516876)	Franjas
0.2	(0.037322, 4.4863646)	Franjas
0.3	(0.026135, 3.5456791)	Franjas
0.4	(0.018233, 2.8057204)	Manchas
0.5	(0.012627, 2.21814297)	Manchas

Tabla 6-2: Valores del parámetro a utilizados para generar franjas o manchas ($b = 1.5$), y sus correspondientes valores críticos. El tipo de patrón para cada valor de a se determinó a partir de las Referencias. [3] y [1].

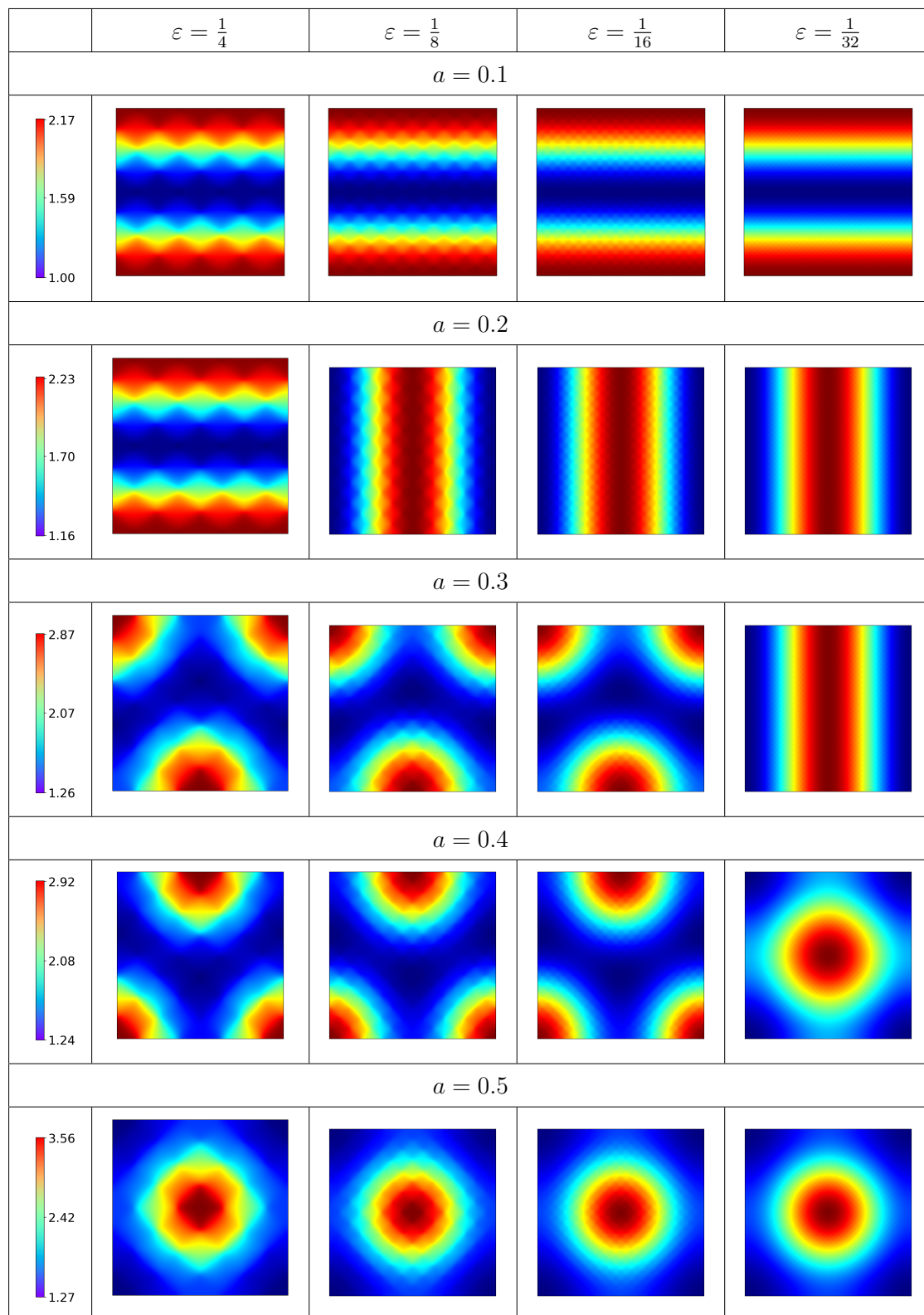


Tabla 6-3: Solución $u^{\varepsilon,d}$ numérica del problema no homogéneo para los valores del parámetro a listados en la Tabla 6-2, y $b = 1.5$, para diferentes valores de ε .

En la Tabla **6-3**, se valida la convergencia hacia las predicciones reportadas en [3] y [1] a medida que ε se aproxima a cero. Para los casos de $a = 0.1$ y $a = 0.2$, se predice y forma franjas a partir de $\varepsilon = \frac{1}{4}$. Sin embargo, para $a = 0.3$, las predicciones se mantienen hasta $\varepsilon = \frac{1}{32}$. Para $a = 0.4$, el patrón predicho se obtiene para valores pequeños de ε , específicamente para $\varepsilon = \frac{1}{32}$. Finalmente, cuando $a = 0.5$, el patrón predicho se obtiene desde el principio, es decir, $\varepsilon = \frac{1}{4}$. A medida que los parámetros (a, b) se acercan al límite entre franjas y manchas, se requiere un valor menor de ε para lograr los patrones predichos con el problema homogeneizado. La distorsión en las franjas o manchas observadas en los patrones obtenidos con valores de $a = 0.1$, $a = 0.2$ y $a = 0.5$ con $\varepsilon = \frac{1}{4}$ sugiere la posibilidad de un nuevo rango de patrones vinculado a estos operadores de difusión periódicos. Por otro lado, la falta de aproximación a la predicción para valores grandes de ε en los casos de $a = 0.3$ y $a = 0.4$ podría interpretarse como un efecto de ruido en los coeficientes de difusión, causando alteraciones en la generación del patrón esperado. Esto indica la sensibilidad del modelo a los efectos no homogéneos del coeficiente de difusión.

Ejemplo 2: difusión anisotrópica

Supongamos ahora que la difusión a lo largo de las fibras es diferente que en una dirección transversal, es decir, $\sigma_k^l \neq \sigma_k^t$, y definimos:

$$(6-30) \quad \sigma_k^l = 1 + \rho_k^l \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}x\right) \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}y\right),$$

$$(6-31) \quad \sigma_k^t = 1 + \rho_k^t \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}y\right),$$

donde el campo vectorial está definido por $\tau^T = (1, 0)$. Con estas definiciones, el coeficiente de difusión (6-22) se puede usar para modelar la difusión en medios anisotrópicos no homogéneos, y se usará este caso para mostrar la aplicabilidad del proceso de homogeneización en dos dimensiones. Con este propósito, se define $\rho_1^l = 0.9$, $\rho_1^t = 0.8$, $\rho_2^l = 0.5$ y $\rho_2^t = 0.4$. Con estos valores, la solución numérica de (5-24) da como resultado:

$$(6-32a) \quad \hat{\mathfrak{D}}^1 = \text{diag}(0.9214071058, 0.9388128827),$$

$$(6-32b) \quad \hat{\mathfrak{D}}^2 = \text{diag}(0.9677920623, 0.9896479165).$$

Las funciones propias del operador diagonal $\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}}^k \nabla$, con condiciones de contorno de Neumann son:

$$(6-33) \quad W_{ij} = \cos(\omega_i^x x) \cos(\omega_j^y y),$$

y los valores propios son:

$$(6-34) \quad l_{ij}^k = (\omega_i^x)^2 \hat{\mathfrak{D}}_{11}^k + (\omega_j^y)^2 \hat{\mathfrak{D}}_{22}^k,$$

donde $\omega_i = \frac{2\pi}{L^x}i$, $\omega_j = \frac{2\pi}{L^y}j$ y $\hat{\mathfrak{D}}_{ij}^k$ ($k = 1, 2$) son las entradas correspondientes de las matrices (6-32). Al definir:

$$(6-35) \quad l_{ii}^k = \left(\left(\frac{2\pi}{L^x} \right)^2 \hat{\mathfrak{D}}_{11}^k + \left(\frac{2\pi}{L^y} \right)^2 \hat{\mathfrak{D}}_{22}^k \right) i^2 = l^k i^2,$$

y

$$(6-36) \quad l_{i0}^k = \left(\frac{2\pi}{L^x} \right)^2 \hat{\mathfrak{D}}_{11}^k i^2 = l^k i^2,$$

la matriz de valores propios que determina la relación de dispersión (5-73) es $\mathbf{l}_i = \text{diag}[l^1, l^2]i^2$.

En general, el operador asociado con este problema es no degenerado; así, las regiones identificadas en un gráfico (a, b) no tienen sentido. Sin embargo, es posible desestabilizar la relación de dispersión crítica asociada con una función propia crítica particular cuya forma es conocida. Para esto, los valores propios y las funciones propias del operador $\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}}^k \nabla$ se expresan como en (6-33) y (6-34), en términos de los índices i y j en (6-34), y se presentan dos ejemplos, $i = 2, j = 0$ y $i = j = 2$. Para cada uno de estos ejemplos, se usó $a = 0.4$ y $b = 1.5$, y los valores críticos correspondientes se muestran en la Tabla 6-5. En el primer caso, el propósito es obtener un patrón a franjas correspondiente a $i = 2$ y $j = 0$, y este patrón se obtiene con éxito cuando $\varepsilon = 1/64$. En la segunda simulación, el objetivo es crear un patrón de manchas rectangulares cuando $i = j = 2$; notablemente, este patrón se logra en todo el rango de valores de ε , como se muestra en las Tablas 6-5 y 6-4.

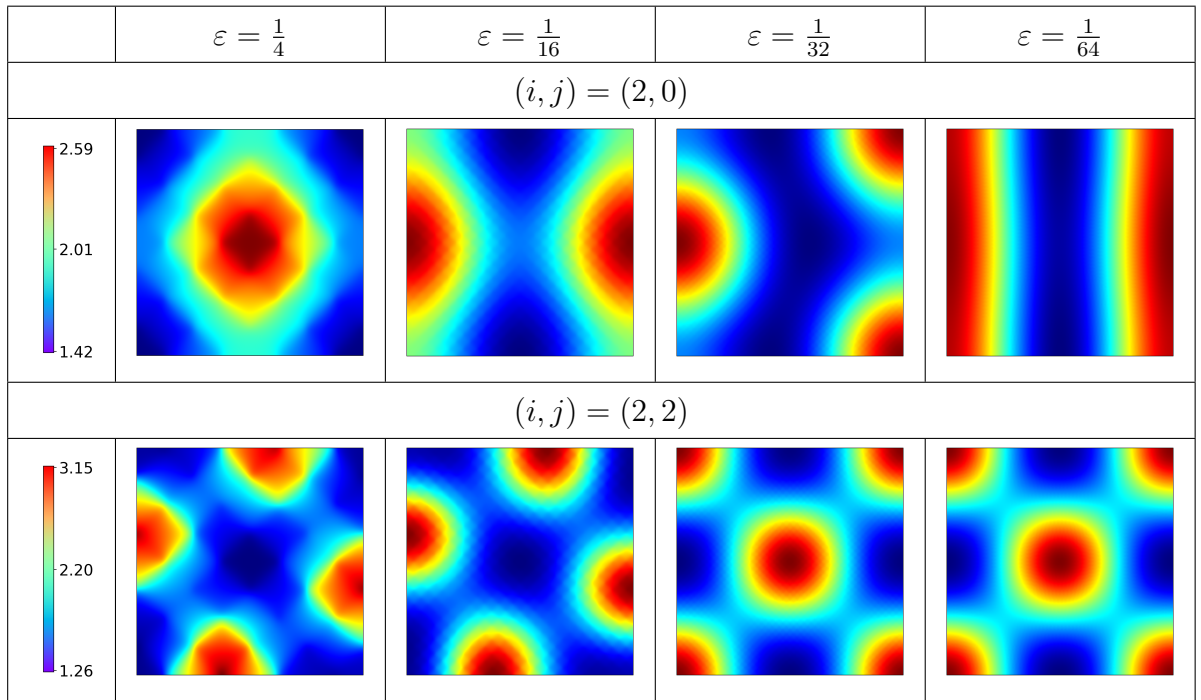


Tabla 6-4: Soluciones $\mathbf{u}^{\varepsilon, d}$ de los dos ejemplos considerados en esta Sección, con los valores dados en la Tabla 6-5, usando cinética de Schnakenberg con $a = 0.4$ y $b = 1.5$.

(i, j)	(d_c, η_c)
$(2, 0)$	$(0.01915168677, 2.715353668)$
$(2, 2)$	$(0.0191867174, 5.492029428)$

Tabla 6-5: Valores críticos para los dos ejemplos considerados, usando cinética de Schnakenberg con $a = 0.4$ y $b = 1.5$.

Ejemplo 3: campo vectorial irregular

En los ejemplos anteriores, utilizamos un campo vectorial a lo largo de una sola dirección $(0, 1)$; aquí consideraremos que el campo vectorial que define las fibras del dominio no homogéneo está definido por

$$(6-37) \quad \tau^k(x, y) = \frac{(H(y), H(x))^T}{\sqrt{H(x)^2 + H(y)^2}},$$

donde

$$(6-38) \quad H(x) = 1 + 0.5 \cos\left(\frac{2\pi}{\varepsilon}x\right).$$

En la Figura 6-3, se muestran gráficos del campo vectorial (6-37) para tres valores diferentes de ε .

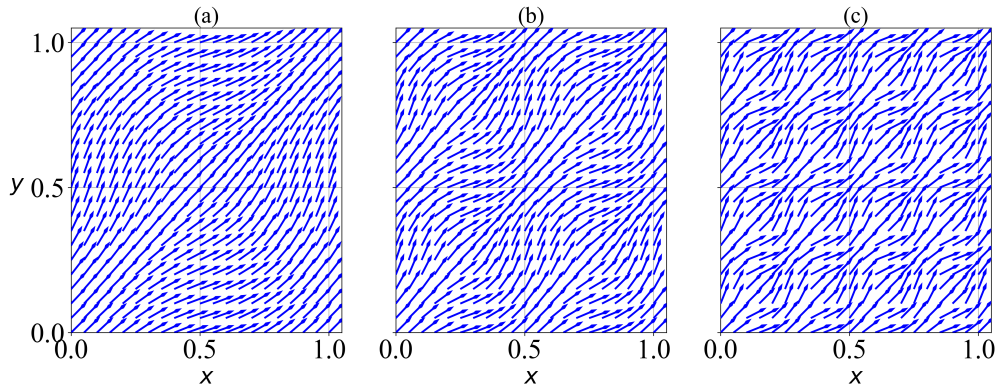


Figura 6-3: Campos vectoriales (6-37) para $\varepsilon = 0.1, 0.5$ y 0.25 , respectivamente.

También suponemos que los coeficientes de difusión longitudinales y transversales son constantes, en particular: $\sigma_k^l = 1$ y $\sigma_k^t = 0.5$. Así, los coeficientes de difusión no homogéneos (6-22) son superficies periódicas y diferenciables, como se muestra en la Figura 6-4, donde se muestran las cuatro entradas de la matriz de difusión para $\varepsilon = 1$.

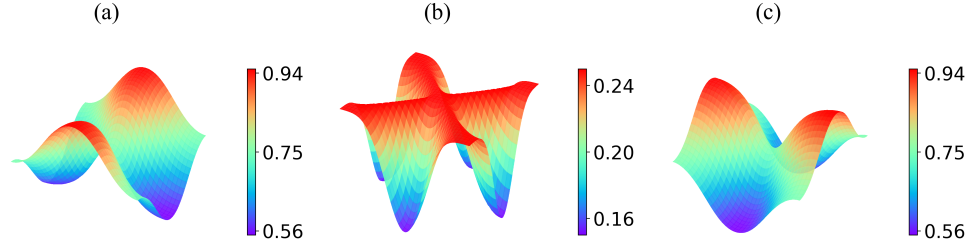


Figura 6-4: Gráfico de las superficies definidas por cada entrada de la matriz de difusión (6-22), con (6-37), $\sigma_k^l = 1$, $\sigma_k^t = 0.5$, y $\varepsilon = 1$. a) $\mathfrak{D}_{11}^k(\mathbf{y})$, b) $\mathfrak{D}_{12}^k(\mathbf{y}) = \mathfrak{D}_{21}^k(\mathbf{y})$ y c) $\mathfrak{D}_{22}^k(\mathbf{y})$

La matriz de difusión efectiva se obtiene resolviendo numéricamente (5-24), lo que da como resultado:

$$(6-39) \quad \hat{\mathfrak{D}} = \begin{pmatrix} 0.7435736694 & 0.2208391643 \\ 0.2208391643 & 0.7435736694 \end{pmatrix}$$

Una matriz de difusión como la presentada anteriormente esta relacionada con difusión anisotrópica, lo que indica que las concentración se difunden dependiendo de la dirección en particular es.

Usando esta matriz de difusión efectiva, se calculan numéricamente los valores y las funciones propias del operador $\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}} \nabla$. Los valores propios l_i se ordenan según la magnitud creciente, y seleccionamos el valor 16, $l_{(16)} = 105.1118462$, para el cual se muestra la correspondiente función propia en la Figura 6-5.

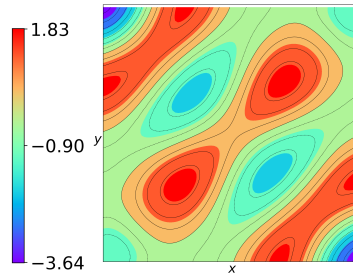


Figura 6-5: Función Propia correspondiente al decimosexto valor propio $l_{(16)} = 105.1118462$, del operador $\nabla \cdot \hat{\mathfrak{D}} \nabla$ donde $\hat{\mathfrak{D}}$ está definido en (6-39)

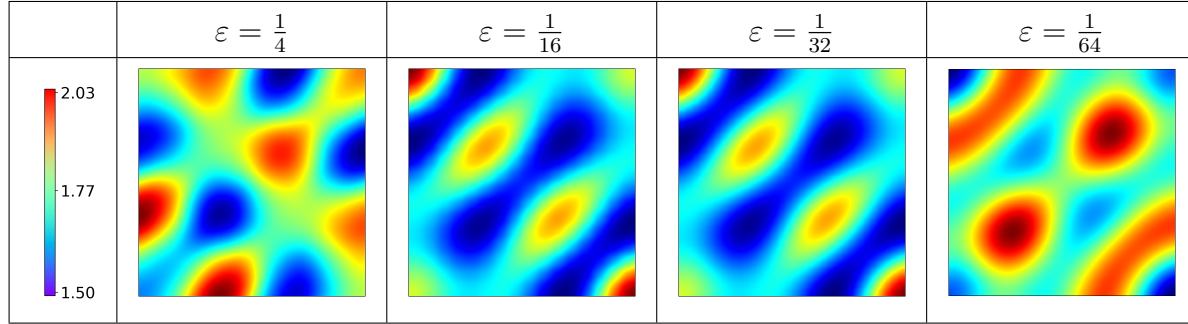


Tabla 6-6: Solución numérica $\mathbf{u}^{\varepsilon,d}$ del sistema no homogéneo en $t = 20000$, para algunos valores de ε . Los valores de los parámetros de la cinética de Schnakenberg son $a = 0.3$, y $b = 1.5$.

Finalmente, el sistema (5-1) se resuelve numéricamente usando cinética de Schnakenberg (2-17), y el valor $l_{(16)}$ se utiliza para determinar los valores críticos. En la Tabla (6-6) se muestra la solución numérica para algunos valores de ε ; se observa que a partir de $\varepsilon = 1/32$, el patrón coincide con la forma de la función propia predicha por el problema homogeneizado, como se muestra en la Figura 6-5.

7 Discusión y Conclusiones

En este documento, se proponen dos enfoques, complementarios, que se entrelazan para abordar el problema de la generación de patrones de Turing en sistemas con difusión no homogénea, es decir, cuando los coeficientes de difusión dependen explícitamente de las variables espaciales. Estos enfoques se destacan por su capacidad para aplicar tanto el análisis lineal como el análisis no lineal, proporcionando así una perspectiva completa sobre las ecuaciones de reacción-difusión con difusión no homogénea. El primer enfoque consiste en generalizar tanto el análisis lineal como el débilmente no lineal con base en la descomposición por funciones propias y el segundo enfoque se basa en la aplicación del método de homogeneización para estudiar la difusión en dominios con inhomogeneidades distribuidas de manera periódica.

En el primer caso, en lo que respecta al análisis lineal, proponiendo una solución que consiste de una serie de las funciones propias de un problema de Sturm-Liouville asociado, se derivan las condiciones de inestabilidad de Turing en sistemas no homogéneos. Cabe señalar que este enfoque también es usado en [18], de lo que nos percatamos después de avanzado el trabajo. A pesar de esto, la contribución novedosa e importante de este trabajo se encuentra en el análisis no lineal. Por un lado, siguiendo el enfoque del análisis lineal, de la descomposición por funciones propias, para el análisis no lineal se requiere una generalización del procedimiento estándar para funciones propias diferentes a los modos de Fourier; para ello, en este trabajo se considera el caso particular del operador $\partial_x((1-x^2)\partial_x)$, cuyas funciones propias son los polinomios de Legendre $P_n(x)$ y los valores propios $n(n+1)$. Para el problema bidimensional, se propone una forma tensorial para la variación espacial de la tasa de difusión, lo que conduce a un problema de Sturm-Liouville con eigenfunciones dadas por $P_{ij}(x, y) = P_i(x)P_j(y)$ y eigenvalores $i(i+1) + j(j+1)$. Con estas funciones, se propone una generalización del análisis débilmente no lineal. Esta generalización nos permite encontrar condiciones para la formación de patrones de franjas o manchas, que se verifican numéricamente y se comparan con el caso de difusión homogénea, utilizando el sistema de reacción-difusión de Schnakenberg como ejemplo.

Por otro lado, para operadores con coeficientes de difusión periódicos se propone y se implementa la técnica de homogeneización, una herramienta fundamental que transforma un sistema con difusión no homogénea periódica en un sistema homogeneizado, con coeficientes de difusión constantes conocidos como coeficientes de difusión efectiva, simplificando así el análisis y permitiendo una comprensión más clara de los mecanismos subyacentes en la formación de patrones. Como el objetivo fundamental del método de homogeneización es obtener un coeficiente de difusión efectivo, transformando así el problema original en uno caracterizado por una difusión homogénea, mostramos cómo se pueden emplear métodos bien establecidos para determinar las condiciones que

conducen a la inestabilidad de Turing. De esta manera, se logra identificar valores críticos y aplicar los resultados derivados del análisis débilmente no lineal para prever las amplitudes y tipologías de los patrones generados. Los resultados se muestran en la Sección 6.1, para dominios en una y en dos dimensiones. En este último caso, como una aplicación del método de homogeneización, se considera el caso en el que los productos químicos experimentan procesos de difusión en un dominio que contiene fibras, cuya disposición está determinada por un campo vectorial τ . En un primer ejemplo, la difusión ocurre a lo largo de dicho campo vectorial, dando lugar a un patrón de dispersión alineado con la orientación de las fibras. En el segundo ejemplo, la difusión se desarrolla de manera transversal al campo vectorial, generando un comportamiento distinto que se refleja en la distribución de los productos químicos con respecto a la disposición de las fibras en el dominio 2D. Este análisis detallado de las orientaciones de difusión proporciona una comprensión más profunda de cómo la disposición espacial de las fibras influye en los patrones resultantes, ofreciendo valiosas percepciones sobre los fenómenos observados en sistemas de reacción-difusión en entornos 2D complejos.

Los resultados obtenidos en este trabajo enriquecen el campo de la formación de patrones y la generalización del análisis no lineal desarrollado aquí puede también ser de interés en otros campos como la modelización del clima [48, 49] y, en general, a diversos problemas de difusión en medios estructurados.

Las perspectivas futuras del trabajo presentado son muy prometedoras. Como ejemplo mencionamos que, en el primer enfoque que presentamos, es tentador intentar una generalización del análisis no lineal para eigenfunciones ortogonales de cualquier problema de Sturm-Liouville, donde las funciones de Legendre son un caso particular. Este enfoque general enfrenta varias dificultades, principalmente con la alternativa de Fredholm, en las que estamos trabajando actualmente. En cuanto al segundo enfoque, el método de homogenización, puede extenderse al estudio de sistemas de reacción difusión con coeficientes de difusión diferenciables a trozos (periódicos o no), condiciones de frontera más generales entre las interfaces de un dominio estructurado y, finalmente, a dominios estructurados con inhomogeneidades distribuidas de manera jerárquica.

Bibliografía

- [1] E Calderón-Barreto and J Aragón. Turing patterns with space varying diffusion coefficients: Eigenfunctions satisfying the legendre equation. *Chaos Solitons Fractals*, 165:112869, 2022.
- [2] E. Calderón-Barreto, J Bravo-Castillero, and J. Aragón. Turing patterns in domains with periodic inhomogeneities; a homogenization approach. *Chaos Solitons Fractals*, 179:114433, 2024.
- [3] M Zhu and J Murray. Parameter domains for generating spatial pattern: a comparison of reaction–diffusion and cell-chemotaxis models. *Int. J. Bifurcation Chaos*, 5(06):1503–1524, 1995.
- [4] R Hoyle. *Pattern formation: an introduction to methods*. Cambridge University Press, 2006.
- [5] A. M. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Philos Trans R Soc Lond Ser B Biol Sci*, 237:37–72, 1952.
- [6] V Castets, E Dulos, J Boissonade, and P De Kepper. Experimental evidence of a sustained standing turing-type nonequilibrium chemical pattern. *Phys. Rev. Lett.*, 64(24):2953, 1990.
- [7] L Yang, M Dolnik, A Zhabotinsky, and I Epstein. Spatial resonances and superposition patterns in a reaction-diffusion model with interacting turing modes. *Phys. Rev. Lett.*, 88(20):208303, 2002.
- [8] J. D. Murray. *Mathematical Biology vol. II. Spatial Models and Biomedical Applications*. Springer, New York, third edition, 2003.
- [9] H Shoji, A Mochizuki, Y Iwasa, M Hirata, T Watanabe, S Hioki, and S Kondo. Origin of directionality in the fish stripe pattern. *Developmental dynamics: an official publication of the American Association of Anatomists*, 226(4):627–633, 2003.
- [10] S Nampoothiri. Stability of patterns on thin curved surfaces. *Phys. Rev. E*, 94(2):022403, 2016.
- [11] M Núñez-López, G Chacón-Acosta, and JA Santiago. Diffusion-driven instability on a curved surface: spherical case revisited. *Braz. J. Phys.*, 47(2):231–238, 2017.
- [12] G Chacón-Acosta, M Núñez-López, and I Pineda. Turing instability conditions in confined systems with an effective position-dependent diffusion coefficient. *J. Chem. Phys.*, 152(2):024101, 2020.

- [13] M Rueda-Contreras, J Romero-Arias, J Aragón, and R Barrio. Curvature-driven spatial patterns in growing 3d domains: A mechanochemical model for phyllotaxis. *PLoS One*, 13(8):1–23, 08 2018.
- [14] C Varea, R Barrio, JL Aragón, and P Maini. A two-dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting Turing systems. *Bull. Math. Biol.*, 61(3):483 – 505, 01 1999.
- [15] V Klika, M Kozák, and E Gaffney. Domain size driven instability: self-organization in systems with advection. *SIAM J. Appl. Math.*, 78(5):2298–2322, 2018.
- [16] D Benson, P Maini, and J Sherratt. Unravelling the turing bifurcation using spatially varying diffusion coefficients. *J. Math. Biol.*, 37:381–417, 1998.
- [17] D Hernández, E Herrera-Hernández, M Nunez-Lopez, and H Hernández-Coronado. Self-similar turing patterns: An anomalous diffusion consequence. *Phys. Rev. E*, 95(2):022210, 2017.
- [18] R Van Gorder. Pattern formation from spatially heterogeneous reaction–diffusion systems. *Philos. Trans. R. Soc. Lond. Ser. A-Math. Phys. Eng. Sci.*, 379(2213):20210001, 2021.
- [19] J Bravo-Castillero, A Ramírez-Torres, F Sabina, C García-Reimbert, R Guinovart-Díaz, and R Rodríguez-Ramos. Analytical formulas for complex permittivity of periodic composites. estimation of gain and loss enhancement in active and passive composites. *Waves Random Complex Media*, 30(4):593–613, 2020.
- [20] R Plaza, F Sanchez-Garduno, P Padilla, R Barrio, and P Maini. The effect of growth and curvature on pattern formation. *J. Dyn. Differ. Equ.*, 16:1093–1121, 2004.
- [21] E Crampin, E Gaffney, and P Maini. Reaction and diffusion on growing domains: scenarios for robust pattern formation. *Bull. Math. Biol.*, 61(6):1093–1120, 1999.
- [22] M. A. Al-Gwaiz. *Sturm-Liouville Theory and its Applications*. Springer Undergraduate Mathematics Series. Springer, London, 2007.
- [23] Lawrence C Evans. *Partial differential equations*, volume 19 of *Graduate Studies in Mathematics*. American Mathematical Society, 1998.
- [24] B. Ermentrout. Stripes or spots? nonlinear effects in bifurcation of reaction-diffusion equations on the square. *Proc. R. Soc. London Ser. A-Math. Phys. Eng. Sci.*, 434:413–417, 1991.
- [25] Rebecca C Tyson. *Pattern formation by E. coli - mathematical and numerical investigation of a biological phenomenon*. PhD thesis, University of Washington, 1996.
- [26] Richard Earl and James Nicholson. *The Concise Oxford Dictionary of Mathematics*. Oxford University Press, Oxford, 6 edition, 2021.
- [27] J Dougall. The product of two legendre polynomials. *Proc. Glasg. Math. Assn.*, 1(3):121–125, 1953.

-
- [28] Sweden. COMSOL AB, Stockholm. Comsol multiphysics® v.6.0. www.comsol.com, 2022.
- [29] A Jüngel and M Ptashnyk. Homogenization of degenerate cross-diffusion systems. *J. Differ. Equ.*, 267(9):5543–5575, 2019.
- [30] Alexander Mielke, Sina Reichelt, and Marita Thomas. Two-scale homogenization of nonlinear reaction-diffusion systems with slow diffusion. *Netw. Heterog. Media*, 9(2):353–382, 2014.
- [31] B Amaziane and L Pankratov. Homogenization of a reaction–diffusion equation with robin interface conditions. *Appl. Math. Lett.*, 19(11):1175–1179, 2006.
- [32] G Cardone, C Perugia, and C Timofte. Homogenization results for a coupled system of reaction–diffusion equations. *Nonlinear Anal.-Theory Methods Appl.*, 188:236–264, 2019.
- [33] A Bensoussan, J Lions, and G Papanicolaou. *Asymptotic analysis for periodic structures*, volume 374. American Mathematical Soc., 2011.
- [34] E Sánchez-Palencia. *Non-homogeneous media and vibration theory*. Lecture Note in Physics. Springer Berlin, 1980.
- [35] N Bakhvalov and N Panasenko. *Homogenisation: averaging processes in periodic media*, volume 36 of *Mathematics and its Applications*. Springer Dordrecht, 1989.
- [36] G Nguetseng. A general convergence result for a functional related to the theory of homogenization. *SIAM J. Math. Anal.*, 20(3):608–623, 1989.
- [37] G Allaire. Homogenization and two-scale convergence. *SIAM J. Math. Anal.*, 23(6):1482–1518, 1992.
- [38] D Cioranescu, A Damlamian, and G Griso. Periodic unfolding and homogenization. *C. R. Math.*, 335(1):99–104, 2002.
- [39] M Gahn, M Neuss-Radu, and P Knabner. Homogenization of reaction–diffusion processes in a two-component porous medium with nonlinear flux conditions at the interface. *SIAM J. Appl. Math.*, 76(5):1819–1843, 2016.
- [40] C Mocenni, E Sparacino, and JP Zubelli. Effective rough boundary parametrization for reaction-diffusion systems. *Appl. Anal. Discret. Math.*, pages 33–59, 2014.
- [41] E Iglesias-Rodríguez, J Bravo-Castillero, M Cruz, and R Guinovart-Díaz. Conductivity gain predictions for multiscale fibrous composites with interfacial thermal barrier resistance. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 46(6):6613–6638, 2023.
- [42] L Sixto-Camacho, J Bravo-Castillero, R Brenner, G Raúl Díaz, H Mechkour, R Rodríguez, and F Sabina. Asymptotic homogenization of periodic thermo-magneto-electro-elastic heterogeneous media. *Comput. Math. Appl.*, 66(10):2056–2074, 2013.

-
- [43] Y Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*. Springer Berlin, Heidelberg, 1984.
 - [44] M Heisler, O Hamant, P Krupinski, M Uyttewaal, C Ohno, H Jönsson, J Traas, and E Meyerowitz. Alignment between pin1 polarity and microtubule orientation in the shoot apical meristem reveals a tight coupling between morphogenesis and auxin transport. *PLoS Biol*, 8(10):e1000516, 10 2010.
 - [45] B Amaziane and L Pankratov. Homogenization of a reaction–diffusion equation with robin interface conditions. *Applied Mathematics Letters*, 19(11):1175–1179, 2006.
 - [46] M Gahn, M Neuss-Radu, and P Knabner. Homogenization of reaction-diffusion processes in a two-component porous medium with nonlinear flux conditions at the interface. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 76(5):1819–1843, 2016.
 - [47] A Jüngel and M Ptashnyk. Homogenization of degenerate cross-diffusion systems. *Journal of Differential Equations*, 267(9):5543–5575, 2019.
 - [48] G North. Theory of energy-balance climate models. *J. Atmos. Sci.*, 32(11):2033–2043, 1975.
 - [49] G Hetzer. The number of stationary solutions for a one-dimensional budyko-type climate model. *Nonlinear Anal.-Real World Appl.*, 2:259–272, 2001.