



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MATEMÁTICA

GENERACIÓN DE PATRONES EN MODELOS TIPO GIERER-MEINHARDT
MEDIANTE INESTABILIDAD DE TURING

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE
MAGISTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA, MENCIÓN MATEMÁTICAS
APLICADAS

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MATEMÁTICO

FABIÁN ESTEBAN SEPÚLVEDA SOTO

PROFESOR GUÍA:
AXEL OSSES ALVARADO

PROFESOR CO-GUÍA:
CARLOS ROMÁN PARRA

COMISIÓN:
GABRIELLE SALLER NORNBORG

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por CMM ANID BASAL FB210005.

SANTIAGO DE CHILE
2023

Resumen

Se plantea el estudio del modelo de Gierer-Meinhardt en una y dos dimensiones con condiciones de borde Neumann nulas y periódicas, abordándolo desde el punto de vista de los métodos de energía, teoría de perturbaciones y simulaciones numéricas, herramientas útiles para explicar de buena manera la periodicidad que puede apreciarse en los patrones generados por este modelo.

Se llamará patrón a una solución estacionaria no homogénea de un sistema de reacción-difusión. En el modelo estudiado, estos corresponderán a máximos aislados con una distribución uniforme. Se presentarán algunos teoremas conocidos en la literatura sobre regularidad y maximalidad que serán la base para la caracterización de las soluciones estacionarias del sistema, las cuales sustentarán y darán validez a las simulaciones numéricas presentadas.

Posteriormente se analizará el sistema de reacción-difusión desde el punto de vista del análisis perturbativo. Esto dará pie a entender cómo el conjunto de parámetros del modelo es capaz de influir en la estabilidad de las soluciones homogéneas, e impondrá condiciones sobre estos mismos para la aparición o ausencia de patrones como solución estacionaria del sistema. El análisis perturbativo también será utilizado para hacer estimaciones sobre la distancia a la cual deberían estar ubicados los máximos en un patrón, obteniéndose una conjetura con amplio respaldo numérico.

Para abordar el problema de la distribución de máximos que exhiben los patrones del modelo, se propone inicialmente la resolución de un sistema lineal aproximado, cuyas soluciones serán denominadas soluciones de Green aproximadas, las cuales poseen solución explícita en una dimensión. Este procedimiento está fundamentado en el trabajo conjunto de Juncheng Wei y Matthias Winter, quienes hacen uso de la función de Green del sistema (en una dimensión con condiciones de borde Neumann nulas) para demostrar la existencia y regularidad de soluciones correspondientes a máximos aislados que exhibe el modelo ya mencionado. Este procedimiento es generalizado y extendido a condiciones de borde periódicas.

Las soluciones de Green aproximadas dependerán de la posición de los máximos, por lo cual cada solución numérica estacionaria tendrá su función de Green aproximada. Se postula un funcional que dependa de las soluciones de Green aproximadas, convirtiendo el problema de distribución de máximos en el patrón en uno de optimización en dimensión finita (generando una nueva conjetura con amplio respaldo numérico). Las simulaciones numéricas están en buen acuerdo con el funcional propuesto para dimensión uno, tanto para condiciones de borde Neumann nulas como periódicas.

Para mis padres que me han apoyado durante toda mi vida y mis amigos que son la familia que elegí.

Agradecimientos

Debo agradecer encarecidamente a mis padres y amigos quienes me apoyaron durante todo el proceso. A mis profesores guía Axel Osses y Carlos Román, quienes plantearon las directrices de esta tesis y las herramientas utilizadas para abordar las problemáticas. A la profesora Gabrielle Saller por su dedicación y apoyo durante mi formación, y por haber aceptado ser la presidente de esta comisión. A los profesores Claudio Falcón, Rodrigo Vicencio y Sebastián Lopez, con quienes tuve el agrado de trabajar en proyectos de diversa índole científica, nutriendo mi curiosidad y fomentando mis capacidades. Y finalmente a toda persona que desee leer esta tesis incluso por simple curiosidad.

Tabla de Contenido

1. Introducción y motivación	1
1.1. Motivación, aplicabilidad y relevancia de los patrones	1
1.2. Modelos de reacción-difusión	8
1.3. Periodicidad en patrones	9
2. Objetivos y resumen de resultados	11
2.1. Objetivos	11
2.2. Periodicidad en patrones	11
2.3. Distribución de máximos en una dimensión	14
2.4. Propiedades de las soluciones estacionarias	17
3. Modelos de reacción-difusión: propiedades y teoremas relevantes	19
3.1. Modelos de reacción difusión	19
3.1.1. Modelo de Gierer-Meinhardt	20
3.1.2. Modelo de Schnakenberg	28
4. Teoría perturbativa y regularidad en patrones	32
4.1. Análisis perturbativo	32
4.2. Distancias características	38
5. Construcción de soluciones formales y función de Green aproximada	43
5.1. Construcción de soluciones estacionarias tipo <i>spike</i>	43
5.2. Función de Green aproximada	46

5.2.1.	Sistema aproximado mediante funciones de Green	46
5.2.2.	Condiciones de borde Neumann nulas	47
5.2.3.	Condiciones de borde periódico	50
5.2.4.	Comparación: simulación numérica versus solución de Green aproximada	51
5.3.	Reescritura simplificada de funciones de Green aproximadas	52
6.	Explicación de la distribución de máximos desde el punto de vista de la optimalidad	54
6.1.	Funcional no estrictamente convexo	54
6.2.	Comentarios finales	61
7.	Conclusiones y problemas abiertos	62
	Bibliografía	65
	Anexos	66
	Anexo A.	67
A.1.	Soluciones homogéneas no estacionarias	67
A.2.	Casos notables en simulaciones	69
A.3.	Gradiente de $F(u_G, v_G)$	70
	Anexo B.	73
B.1.	Concentraciones en bordes	73
B.1.1.	Función de Green aproximada para sistemas con condiciones de borde Neumann nulas y concentraciones máximas en frontera	73
B.1.2.	Comparación de simulación numérica versus solución de Green aproximada	75
B.1.3.	Funcional $F(u_G, v_G)$ para concentraciones en frontera	75
B.2.	Distancia de coalescencia	79

Capítulo 1

Introducción y motivación

La aparición y reconocimiento de patrones en nuestro entorno siempre conlleva la inherente pregunta de ¿Cómo es que estos se forman? Sin ir más lejos, subsecuentemente surge una interrogante más matemática ¿Existen ecuaciones diferenciales que puedan modelar la aparición de dichos patrones, con multiplicidad de soluciones estacionarias que presente características similares medibles? La mayoría de ecuaciones de evolución que exhiben soluciones tipo patrón poseen un componente no lineal, sin el cual no se podrían generar ese tipo de estructuras. La gran variedad de patrones que pueden ser apreciados en la naturaleza tales como las rayas en las zebras, los círculos de hadas presentes en pastizales o incluso las huellas digitales, su aparición y características que pueden ser efectivamente representadas a través de ecuaciones en derivadas parciales no lineales, fueron lo que motivó el desarrollo de esta tesis.

1.1. Motivación, aplicabilidad y relevancia de los patrones

En la naturaleza, la herramienta principal que ha ayudado a los seres humanos a avanzar como especie, y a los demás animales a sobrevivir a lo largo de los años, es la identificación de patrones. Un ejercicio tan simple, como lo es reconocer a personas con las cuales interactuamos día a día, formando a largo plazo lazos familiares que nos resguardan del peligro, al igual que cómo identificar plantas potencialmente nocivas y venenosas, es una capacidad inherente que se encuentra enraizada en todas las especies. Es por lo anterior que el reconocimiento de patrones es la herramienta primordial sin la cual nuestra supervivencia se vería puesta en peligro de manera inmediata.

El mundo no humano no está ajeno de este tipo de comportamientos y sus características básicas de reconocimiento, tal como muestra Sutherland en [17], convirtiendo al reconocimiento de patrones en una herramienta más útil y robusta de los que podemos imaginar. Sin ir más lejos, las rayas de las cebras, al formar un patrón sobre el pelaje de estos mamíferos (como se aprecia en la Fig. 2.1) les es útil para poder diferenciarse entre ellos, tal cual los seres humanos pueden diferenciar una persona de otra reconociendo su rostro. Las crías recién

nacidas son cercadas continuamente por sus madres y familia para que estas puedan reconocer fácilmente sus líneas y siempre volver a la seguridad de su manada. Esto presenta una manera de abordar los patrones como una organización periódica de estructuras, periodicidad que puede ser cuantificada tal como muestran Mueller y Tarumi en [10].



Figura 1.1: Ejemplo del patrón en el pelaje de una cebrá con el cual estas son capaces de identificarse.

El mecanismo de formación de estos patrones no es tan claro ni universal, dado que involucra diversos sistemas de sustratos, reacciones y saturaciones de nutrientes para que estos se expresen (al menos en la piel animal). En el caso de patrones dérmicos como el de los peces cebrá y peces león, hay modelos de evolución capaces de reproducir patrones similares como muestran Zhu, Zhao y Zhang wn [2]. Siendo Alan Turing [21] el primero en proponer un mecanismo mediante el cual es posible escapar de las soluciones homogéneas triviales formando patrones, es gracias a sus contribuciones que se entiende cómo a partir de perturbaciones en el medio es posible formar estructuras complejas bien definidas. Estos modelos se basan principalmente en esquemas de reacción-difusión, donde existen al menos 2 especies, un activador y un inhibidor (o sustrato, dependiendo del tipo de interacción), entre los cuales debe existir una interacción no lineal para obtener soluciones tipo patrón. Un aumento local en el activador desencadenará en la activación subsecuente del inhibidor, mientras que un aumento local en el inhibidor desencadenará en una disminución local en el activador, como es el ejemplo antes mencionado [2]. Esta competencia entre las dos especies, cuando es mediada por interacciones de largo alcance como difusión, es capaz de formar soluciones no triviales que reconocemos como patrones.

Una de las características principales que poseen esta clase de modelo es que para un conjunto de parámetros fijo y condiciones iniciales distintas, los patrones pueden compartir características medibles similares. En general estos sistemas de ecuaciones siempre exhibe al menos una solución homogénea estacionaria. La inestabilidad de Turing [21] surge cuando, al linealizar el sistema en torno a dicho equilibrio, alguno de los valores propios asociados posee parte real positiva, alejándolo de dicho equilibrio. La interacción no lineal hará que el crecimiento de la perturbación, al ser en un inicio exponencial, hará que las concentraciones saturen, formando estructuras que pueden ser reconocidas como patrones.

De lo anterior, es posible entender un patrón como una estructura que posee máximos locales que se autoorganizan en un dominio, los cuales pueden formar una estructura periódica o cuasi-periódica. Por ejemplo, en las rayas del pelaje de una zebra es posible identificar una

distancia típica correspondiente al ancho de las líneas. En el caso del guepardo, no sólo es posible reconocer una distancia características entre las manchas, sino que estas también poseen un radio característico, por lo cual existen cantidades bastante regulares que pueden ser medidas y cuantificadas.

Un tipo de patrón muy utilizado en el mundo para el reconocimiento de personas, en el mundo policial, y con una evidente importancia para la seguridad en las sociedades actuales, son los patrones de las huellas dactilares. Estos patrones ya no son formados por las diferencias de melanina presente en los melanocitos, como es el caso de las manchas en la piel de los animales, sino que es la misma rugosidad de la piel, la que se autoorganiza para plegarse sobre si misma formando crestas papilares, que en este caso poseen un ancho característico reconocible y repetible entre los seres humanos. A lo largo de los años, se ha podido constatar estadísticamente que no existen 2 huellas dactilares iguales, lo que produce que exista una relación biúnivoca entre una huella digital y la persona a la que le pertenece.



Figura 1.2: Ejemplo del patrón dactilar formado en las huellas digitales.

A diferencia de las manchas del guepardo, el patrón de las huellas digitales presenta líneas, como las que presentan las rayas de una zebra, pero con una mayor riqueza, dado que existen direcciones privilegiadas de plegamiento y características como puntos o islotes de crestas papilares que conviven con bifurcaciones y términos en los pliegues.

Si en la identificación policial se analizaran todos y cada uno de los pliegues buscando coincidencias, la asignación de identidad tardaría demasiado. Es por eso que las policías en el mundo se aprovechan de los accidentes que se encuentran presentes en las huellas dactilares para realizar este trabajo de manera más óptima, dado que se hace menester la identificación pronta, más aún en los sitios de sucesos donde la información es limitada y la calidad de las impresiones decae con el tiempo.

Las huellas dactilares poseen una clasificación básica designada por la presencia o ausencia de una confluencia divergente de las líneas (un triángulo donde las crestas papilares que lo rodean se ordenan tangencialmente en torno a sus lados), la cual se designa como "Delta".

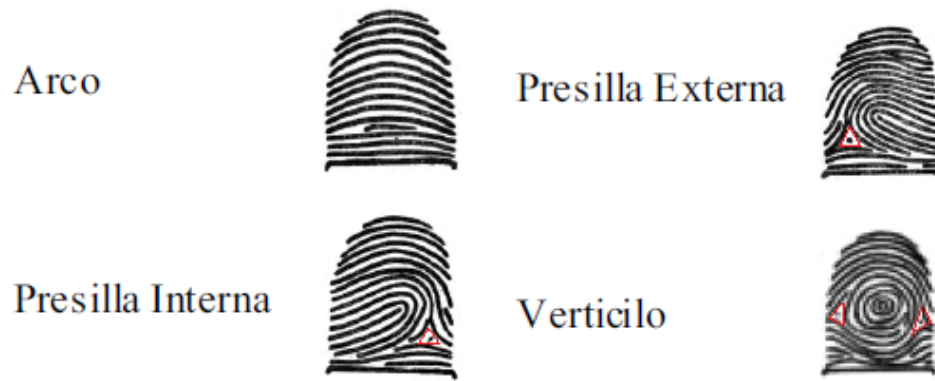


Figura 1.3: Imagen sacada de [1]. En esta imagen se muestra de manera esquemática como la presencia o ausencia de estos Deltas es capaz de modificar el patrón dactilográfico, haciendo que las crestas papilares sigan un orden no trivial. El Delta en cada huella se ha representado con líneas rojas.

La presencia o ausencia de esta delta es capaz de caracterizar cada uno de los dedos de la mano de forma que cada persona en el mundo puede tener asociado un código de acuerdo al número de deltas presentes en cada dedo. La Policía de Investigaciones de Chile posee subclases de esta clasificación, incluso en caso de amputación o cicatriz que no permita la identificación correspondiente, por lo cual la codificación de personas puede verse como un sistema básico de 12 símbolos (clave chilena de identificación descrita más detalladamente por Sosa en [16] y por Silva en [1]) con una ventana de lectura de 10 espacios.

Ahora, en la realidad de los sitios de sucesos no es común encontrar los 10 dedos de una persona para hacer coincidir la presencia de ésta en el lugar. En general es posible levantar trozos de huella, y algunas con incluso pésima calidad que merme el proceso identificación dependiendo de las condiciones ambientales, por lo cual los peritos dactilográficos a nivel mundial han desarrollado técnicas que ayudan a la identificación en estas pericias.

Los accidentes que se buscan para la identificación pueden clasificarse en rasgos generales como términos de líneas (como los surcos en las dunas de arena), bifurcaciones (como los patrones presentes en los pelajes de las zebras) y puntos o islotes (como los patrones presentes en la piel de lo guepardos). Estos accidentes buscados poseen el nombre de puntos característicos, y cada huella dactilar posee un promedio de 60 distribuidos en su totalidad, por lo cual la ubicación espacial de estos accidentes es la clave para resolver el problema de la identificación. Si se consideran las coincidencias de los accidentes de una sola huella digital, mientras más accidentes coincidan, menor probabilidad de error existe de obtener un falso positivo.

En la Fig. 2.4 se pueden apreciar el tipo de accidentes que busca un o una perito dactilográfico al analizar una impresión dactilar. los cuales pueden resumirse en término de línea, bifurcación o isla, como se mencionó anteriormente. La Policía de Investigaciones de Chile, para verificar la identidad de una persona, dictamina que es necesario encontrar al menos 12 de estas coincidencias tanto en la huella de registro del posible sospechoso como en la



Figura 1.4: Imagen sacada de [16]. En esta imagen se aprecian algunos de los tipos de accidentes en los patrones dactilares que se buscan identificar en las impresiones. 1) Término de Línea. 2) Bifurcación 3) Isla. 4) Punto. 5) Encierro. 6) Borde Incipiente o Excrecencia.

impresión obtenida en un sitio de suceso. La interacción entre los puntos característicos, la aparición de los diversos tipos de accidentes en el dominio y la unicidad con que se trata cada huella fue el motivo central que dio forma a esta tesis, siendo su objetivo último la formalización de un modelo de reacción difusión que pueda generar patrones tipo huella digital con las características anteriormente mencionadas.

A su vez, se han hecho esfuerzos por obtener modelos que expliquen el surgimiento de patrones dactilares, principalmente por Kücken en [8, 12], quien plantea un origen mecánico a la aparición y fijación de los pliegues dactilares. Las bases de este modelo se encuentran en que, al fijarse el patrón dactilar en el útero materno durante el período de gestación, la dermis (capa intermedia de la piel) actúa como un resorte no lineal sobre la capa basal de la dermis (que colinda con la epidermis), la cual a su vez es sometida a una alta presión (debido al crecimiento gestacional), y es sometida también a la contención de la epidermis (capa más externa de la piel). Esta presión al superar un umbral crítico genera que, para minimizar la energía elástica almacenada en la capa basal de la dermis, debe plegarse saliendo del plano de forzaje axial generando una rugosidad permanente en la yema de los dedos. Las ecuaciones que describen este fenómeno corresponden a las ecuaciones de von Kármán para superficies curvas, las cuales corresponden a minimizar el siguiente funcional de energía:

$$E(w, F) = \int_A \left(\frac{D}{2} (\nabla^2 w)^2 - \frac{1}{2Eh} (\nabla^2 F)^2 + \frac{(\partial_{yy} F) w}{R_x} + \frac{(\partial_{xx} F) w}{R_y} - w[F, w] + V(w) \right) dx dy$$

donde $[F, w] = \partial_{xx} F \partial_{yy} w - 2\partial_{xy} F \partial_{xy} w + \partial_{yy} F \partial_{xx} w$, w es la deflexión normal a la superficie A , F es la función de estrés de Airy de la superficie, h es el grosor de la superficie, E es el módulo de Young del sistema, $D = \frac{Eh^3}{12(1-\mu^2)}$ es el módulo de flexión, μ es el radio de Poisson del sistema, R_x y R_y son los radios principales de curvatura y $V(w)$ es el potencial elástico no lineal de la superficie que depende sólo de la deflexión normal. El sistema dará ecuaciones

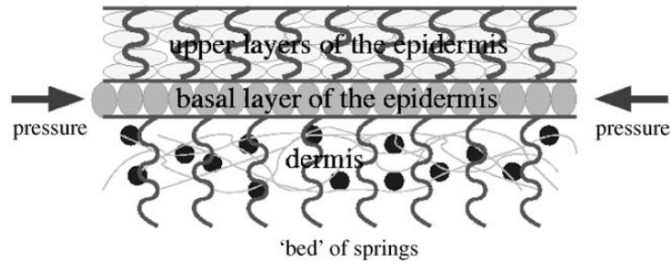


Figura 1.5: Imagen sacada de [12]. Esta imagen representa como la capa basal de la dermis es sometida a distintas fuerzas de forma tal que genera, luego de alcanzar una tensión crítica, un plegamiento para disminuir la energía potencial elástica almacenada.

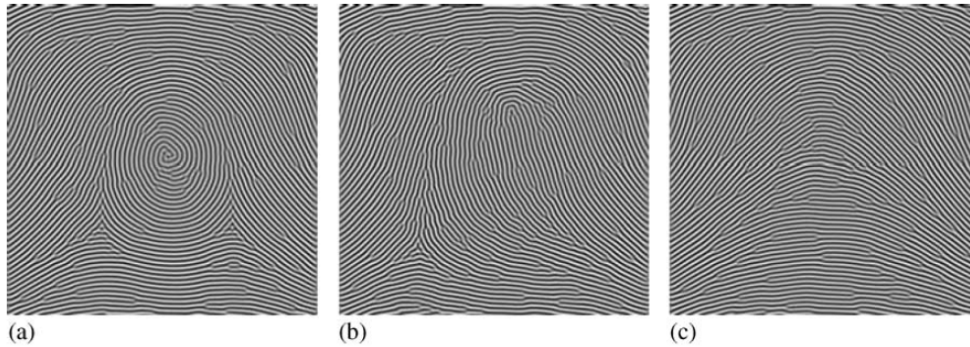


Figura 1.6: Imagen sacada de [8]. Se presentan simulaciones de las ecuaciones de von Karman no lineal con condiciones de borde periódicas y estrés direccionado para obtener patrones tipo a) Verticilo, b) Presilla, c) Arco.

diferenciales en derivadas parciales de orden 4, dos órdenes más de lo que la mayoría de sistema de reacción-difusión presentan. Adicionalmente Kücken aborda el problema de huellas dactilares sólo con condiciones de borde periódico.

El modelo propuesto por Kücken está muy bien fundamentado y da una explicación clara y plausible sobre cuál es el origen de la aparición de las huellas digitales. Sin embargo el minimizar esta energía potencial elástica conlleva resolver un sistema de ecuaciones no lineales acopladas de orden 4, por lo que el costo computacional es alto comparativamente con un modelo de reacción-difusión, modelos típicamente de orden 2. Adicionalmente, las simulaciones realizadas por Kücken fallan al obtener todos los tipos de accidentes que se buscan en una huella o impresión dactilar. Se hace evidente que estas simulaciones no presentan islas, sólo bifurcaciones y términos de líneas, pero da una muy buena idea de cómo los pliegues son capaces de orientarse debido al tipo de huella que se desea simular, según la ubicación del Delta.

Los resultados de Kücken dan pie a preguntarse si es posible encontrar un modelo fenomenológico que simule de manera más completa las huellas dactilares y sus accidentes, y de ser así, cómo los parámetros del modelo son capaces de afectar las estructuras que formarán. Es por lo anterior que se plantea el estudio de los modelos de reacción-difusión como una nueva vía para entender este fenómeno. Debido a las características que muestran las huellas digitales, es necesario tener un control sobre los parámetros de un posible modelo de reac-

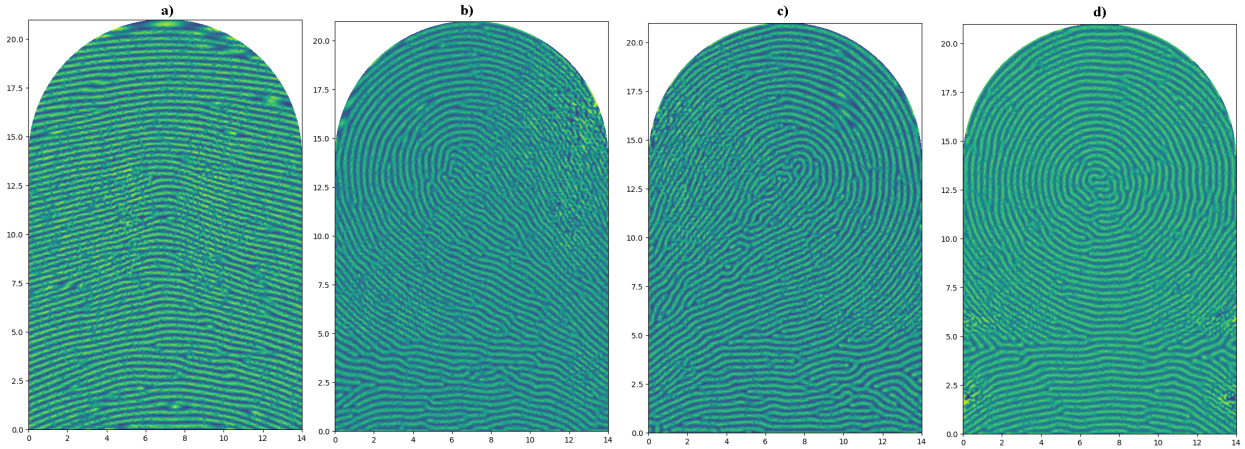


Figura 1.7: Imágenes de patrones tipo huella dactilar obtenida mediante el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada, simuladas mediante elementos finitos. Los tipos de patrones corresponden a: a) Arco, b) Presilla Externa, c) Precilla Interna, d) Verticilo.

ción-difusión capaz de generar patrones tipo huella dactilar para así entender la aparición de las estructuras buscadas. Afortunadamente se pudo llegar a un modelo de evolución de reacción-difusión que a partir de condiciones iniciales aleatorias genera patrones tipo huella digital tal como se muestra en la Fig. 2.7, patrones que son intrínsecamente dependientes de la condición inicial pero preservan características tales como el grosor de pliegue. Esto no es abordado a cabalidad durante la tesis dado que estos resultados surgieron en el periodo final, por lo que únicamente la motivación y las preguntas surgidas fueron abordadas.

Dadas las interrogantes que planteó este problema, es que el objetivo fue puesto en entender cómo las herramientas del análisis lineal pueden aportar para predecir características de patrones más simples y con menos estructuras, propiedades que fueron ampliamente utilizadas para llegar al modelo con que se obtuvo la Fig. 2.7. Dada la alta complejidad que muestran los patrones tipo huella digital, es que se optó en profundizar en el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada, y utilizar los hallazgos y herramientas de éste para la construcción del modelo de huellas dactilares.

Existen estudios, principalmente encabezados por Juncheng Wei y Matthias Winter [3, 4, 5], enfocados en el modelo de Gierer-Meinhardt, el cual genera patrones similares a las manchas de un guepardo o la distribución de colonias de bacterias, los cuales presentan un nivel de matemática muy alto, con demostraciones y propiedades que pueden ser difíciles de entender para personas sin una formación rigurosa en esta área. Es por lo anterior, que el foco de esta tesis irá a la aplicabilidad y alcances que pueda tener la teoría lineal para entender este modelo, el cual no deja de tener preguntas abiertas hasta el día de hoy. A su vez, dado que la mayoría de estos resultados son apoyados por simulaciones numéricas, es que se optó por trabajar en 1 y 2 dimensiones debido al costo computacional que genera.

1.2. Modelos de reacción-difusión

De los modelos más estudiados en el ámbito de la formación de patrones se encuentran los modelos de reacción-difusión de dos especies. En el caso particular tratado en esta tesis, sus ecuaciones pueden ser descritas en su forma más general con las siguientes expresiones

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot (D_{uu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{uv} \nabla v) + f(u, v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = \nabla \cdot (D_{vu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{vv} \nabla v) + g(u, v), & (x, y) \in \Omega. \end{cases}$$

Las condiciones de borde más utilizadas para estudiar estos sistemas corresponden a condiciones de borde Neumann nulas o periódicas, definiéndolas sobre dominios de una o dos dimensiones, siendo estos dominios en una dimensión de la forma $\Omega = (0, L)$ y en dos dimensiones $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y)$ los más utilizados. Durante esta tesis se optó por usar $L = L_x = L_y = 1$ por simplicidad.

De todas las formas que pueden adoptar estos modelos, la familia de modelos de Gierer-Meinhardt de dos especies con difusión homogénea isotrópica y condiciones de borde Neumann nulas, es la que posee un mayor estudio y por tanto mayor cantidad de propiedades de regularidad, maximalidad y existencia de soluciones locales probadas, estudios como lo son el trabajo sobre modelos biológicos de Meinhardt [9], los teoremas de regularidad de Masuda & Takahashi [7], los varios acercamientos para obtener cotas para los máximos y mínimos junto con su descripción formal de Takagi [19, 20, 18], el trabajo completo de existencia de soluciones locales tipo *spike* de Winter & Wei [4, 3, 5] o la existencia de soluciones para todo tiempo de Nkashama & Antwi-Fordjour [6], cuyas ecuaciones quedan simplificadas a

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + a - bu + \frac{u^p}{v^q}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + c - dv + \frac{u^r}{v^s}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & (x, y) \in \partial\Omega \end{cases}$$

En esta tesis se trabajó con un caso particular de esta familia de modelos, el cual lleva por nombre modelo de Gierer-Meinhardt solamente, dado que fue uno de los primeros que exhibió las propiedades de inestabilidad para converger a patrones estacionarios, propiedades demostradas por Alan Turing en [13]. Dado el amplio conjunto de parámetros que exhibe el modelo anterior, se optó por trabajar con sólo 5 parámetros constantes, quedando el sistema reescrito de la siguiente manera

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(-v + u^2), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

donde D_{uu} y D_{vv} son las difusiones de activador e inhibidor correspondientemente, a es la fuente de activador, b es la tasa de consumo de activador y R es un parámetro útil para los calculos relacionado con la tasa de evolución temporal. Una característica importante del modelo presentado, es que la interacción entre las variables u y v provoca que el aumento en la concentración de u afecta positivamente a ambas especies, pero un aumento en la

concentración de v tiene un efecto inhibitor en u . La reescritura de este sistema con el parámetro R será de utilidad cuando se exponga el análisis perturbativo del sistema.

Para abordar el objetivo de encontrar un modelo de reacción-difusión, se estudió el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada, cuyas ecuaciones corresponden a

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + D_{uv}\Delta v + R(a - u + u^2v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vu}\Delta u + D_{vv}\Delta v + R(b - u^2v), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

donde ahora D_{uv} y D_{vu} serán difusiones de las especies inhibidora y activadora pero que afectarán a las especies activadora e inhibidora correspondientemente, a y b corresponden a las fuentes de activador e inhibidor que serán homogéneas en el dominio, u corresponderá al consumo puntual de activador y el término u^2v , debido a que posee signos contrarios en las especies, afecta positivamente en el activador (debido a su signo positivo) y de manera negativa en el inhibidor (debido a su signo negativo) dado que tanto u como v adoptarán valores positivos (esto será justificado más adelante). Este modelo pertenece también a la familia de modelos Gierer-Meinhardt presentada anteriormente.

Este modelo, al contener términos de difusión cruzada, es capaz de formar una variedad de patrones más amplia como bifurcaciones y términos de línea, comparados con las islas que forma el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada. Este modelo no es tan ampliamente estudiado durante esta tesis dada la inherente complejidad para entender los patrones que puede formar, y que la no linealidad de este sistema es de un orden mayor que el de Gierer-Meinhardt antes presentado.

1.3. Periodicidad en patrones

Cuando el surgimiento de patrones aparece como objeto de estudio en las diversas ramas de la ciencia como Biología, Física o Matemática, el nombre más citado es el de Alan Turing y su artículo [21] donde, a partir de las ecuaciones de reacción-difusión a coeficientes constantes antes señaladas, es capaz de mostrar cómo la difusividad de las especies químicas genera una inestabilidad que puede llevar al sistema a soluciones tipo patrón. Dicho mecanismo se conoce como inestabilidad de Turing por esta razón, y es ampliamente utilizada para encontrar conjuntos de parámetros que alejen el sistema del equilibrio.

De acuerdo a la experiencia humana, es fácil reconocer cuándo una distribución de objetos es capaz de generar un patrón, sin ir más lejos, incluso los animales no humanos son capaces de reconocer qué estructuras pueden reconocerse como un patrón, tal como lo describe Sutherland en [17]. A su vez Mueller y Tarumi en [10] son capaces de describir los patrones desde el punto de vista de la periodicidad que adoptan, donde se centran en entender la estructura que poseen los patrones finales desde el punto de vista de las ondas. Es intuitivo pensar que los modelos presentados antes, de converger a soluciones estacionarias, deberían exhibir características similares que sean medibles, como es el ejemplo de la Fig. 2.8.

Como es posible apreciar, la estructura que forma este tipo de patrones es posible compararla con estructuras periódicas, a pesar de que no es tan evidente este hecho. En el caso

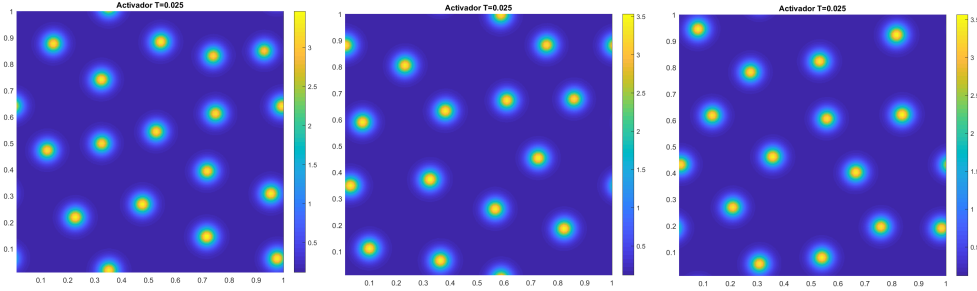


Figura 1.8: Resultado de 3 simulaciones numéricas realizadas en el dominio $(0, 1)^2$ mediante diferencias finitas con 3 condiciones iniciales aleatorias distintas, todas utilizando los mismos parámetros D_{uu}, D_{vv}, a, b, R y condiciones de borde periódica. Se aprecia que la distancia característica (distancia mínima promedio entre 2 máximos) no varía demasiado cuando la condición inicial es una perturbación pequeña del equilibrio, con una distancia promedio entre los máximos de $d_{carac} = 0,25 \pm 0,008$.

de una dimensión es mucho más evidente el surgimiento de una periodicidad mostrado en la Fig. 2.9.

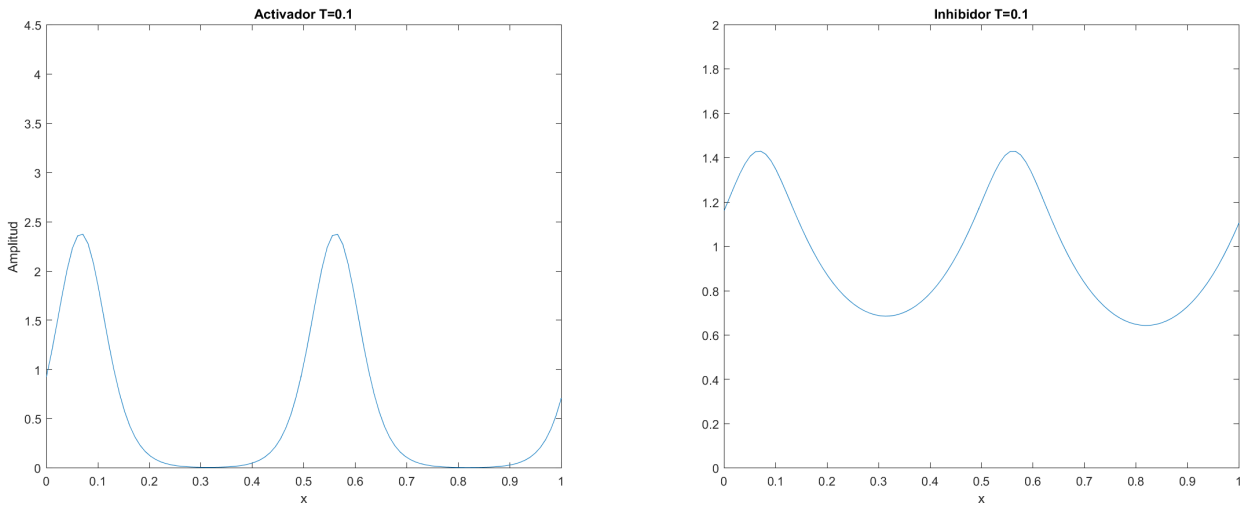


Figura 1.9: Solución estacionaria en 1D para el sistema de Gierer-Meinhardt a partir de condiciones iniciales aleatorias en torno al equilibrio con condiciones de borde periódicas.

Este hecho llevó a que se utilizaran herramientas de la teoría de perturbaciones en el sistema para analizar el sistema, y entender cómo los parámetros del sistema son capaces de modificar los patrones a los cuales pueden converger las soluciones numéricas. La dificultad en definir una periodicidad en el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada fue decidir al momento de profundizar el análisis perturbativo en estos modelos, optando por una mayor profundidad en el modelo de Gierer-Meinhardt.

Capítulo 2

Objetivos y resumen de resultados

En este capítulo se presentarán los objetivos que dieron forma a esta tesis, sus resultados más generales, y las evidencias y metodología utilizadas para abordar los problemas surgidos.

2.1. Objetivos

Se planteó como objetivo general de esta tesis el estudio de los modelos de reacción-difusión para entender que parámetros influyen en la formación y características de los patrones, y los tipos de patrones que estos pueden generar en las simulaciones numéricas dependiendo del tipo de modelo a estudiar. Como objetivo particular se planteó encontrar una manera de predecir el comportamiento de los patrones formados a partir de condiciones iniciales aleatorias en el modelo de Gierer-Meinhardt, y cómo los parámetros del sistema influyen en el patrón final al que puede converger el sistema. La forma de abordar y entender los modelos de reacción-difusión fue usada para sentar las bases y postular un modelo de reacción-difusión que pudiese simular patrones tipo huella dactilar, generando una aplicabilidad del trabajo realizado.

2.2. Periodicidad en patrones

Las soluciones a las cuales las simulaciones numéricas pueden converger en el sistema de Gierer-Meinhardt corresponden a máximos aislados como islotes, tal como se muestra en la Fig. 1.1, y que presentan un espaciamiento casi periódico, lo cual motivó el análisis perturbativo del sistema debido a la facilidad en la aplicación de los métodos perturbativos y el respaldo bibliográfico existente como el mostrado por Meinhardt [9] o Murray [11].

Se encontró inicialmente un conjunto de parámetros para el modelo de Gierer-Meinhardt capaz de generar patrones tanto en una como dos dimensiones, de manera tal de analizarlos conjuntamente y comparados. Al estudiar los modos normales que puede presentar el sistema, el respaldo bibliográfico y las simulaciones numéricas, fue posible formular el siguiente

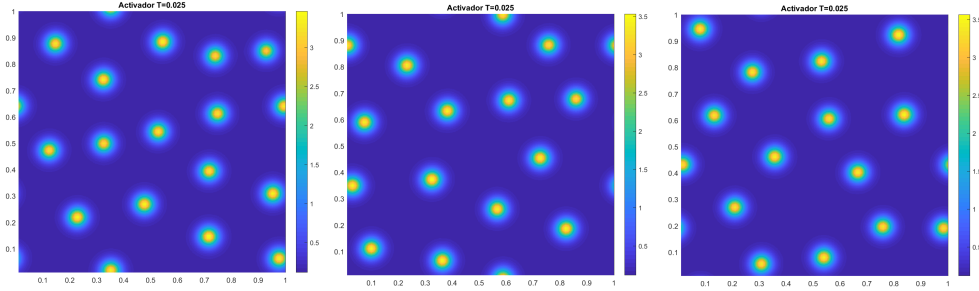


Figura 2.1: Resultado de 3 simulaciones numéricas realizadas en el dominio $(0, 1)^2$ mediante diferencias finitas con 3 condiciones iniciales aleatorias distintas, todas utilizando los mismos parámetros D_{uu}, D_{vv}, a, b, R y condiciones de borde periódica. Se aprecia que la distancia característica (distancia mínima promedio entre 2 máximos) no varía demasiado cuando la condición inicial es una perturbación pequeña del equilibrio, con una distancia promedio entre los máximos de $d_{carac} = 0,25 \pm 0,008$.

teorema que resume el análisis para encontrar conjuntos de parámetros que aleje al sistema del equilibrio homogéneo estacionario mediante inestabilidad inducida por difusión (DII por las siglas en inglés de *diffusion-induced instability*):

Teorema 2.1 (ver Capítulo 4) *Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones correspondiente al modelo de Gierer-Meinhardt*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas en un dominio Ω , y donde las constantes D_{uu}, D_{vv}, R, a y b son positivas. Sea \vec{k} un vector de onda correspondiente a un modo normal del sistema, definiendo

$$k_b^2 = \frac{R \left[b \frac{(1-a)}{(1+a)} - 1 \right]}{(D_{uu} + D_{vv})},$$

y

$$k_{\pm}^2 = \frac{R}{2D_{uu}D_{vv}} \left[(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv}) \pm \sqrt{(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv})^2 - 4bD_{uu}D_{vv}} \right].$$

Entonces \vec{k} corresponderá a un modo normal inestable capaz de generar un patrón estacionario mediante DII si

$$\|\vec{k}\| \leq k_b \text{ o si } k_- \leq \|\vec{k}\| \leq k_+.$$

Por otra parte, si

$$\frac{D_{uu}}{D_{vv}} < b \frac{1-a}{1+a} \quad , \quad y \quad \frac{D_{uu}}{D_{vv}} < \frac{b}{(1+a)} \left[(3+a) - 2\sqrt{2(1+a)} \right],$$

entonces $\exists R > 0$ y $\exists \vec{k}$ vector de onda de un modo normal inestable capaz de inducir DII.

De acuerdo a las simulaciones numéricas, fue posible observar que los patrones generados mediante las ecuaciones descritas anteriormente son capaces de preservar ciertas características independientemente de las condiciones iniciales aleatorias utilizadas, tales como las distancias promedio existente entre máximos denominada d_{Carac} y la distribución espacial de estos mismos. Definiremos d_{Carac} de la siguiente forma:

Definición 2.2 (ver Capítulo 4) *Sea Ω un dominio de dimensión 2 con condiciones de borde periódicas y N máximos. Se definirá d_{Carac} como*

$$d_{Carac} = \sqrt{\frac{|\Omega|}{N}}.$$

Si Ω es un dominio de dimensión 1 con condiciones de borde periódicas y N máximos. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \frac{|\Omega|}{N}.$$

Sea Ω un dominio en 2 dimensiones con condiciones de borde Neumann nulas, con N máximos en el interior, P máximos en las aristas y Q máximos en las esquinas. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \sqrt{\frac{|\Omega|}{N + 0,5P + 0,25Q}}.$$

Si Ω un dominio en 1 dimensiones con condiciones de borde Neumann nulas con N máximos en el interior y P máximos en los bordes. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \frac{|\Omega|}{N + 0,5P}.$$

La distancia promedio entre máximos de un patrón es abordada desde el punto de vista de la teoría lineal perturbativa, para obtener cotas sobre d_{Carac} a partir sólo de los parámetros del sistema. El análisis perturbativo entrega un conjunto de modos normales inestables los cuales poseen una longitud de onda bien definida (dependiendo de la geometría del dominio y sus condiciones de borde, características descritas en el **Teorema 1.1**), los cuales son utilizados para formar la primera conjetura de esta tesis:

Conjetura 2.3 (ver Capítulo 4) *Supongamos Ω un dominio 2D (cuadrado) o 1D (segmento) con condiciones de borde periódicas o Neumann nulas. Consideremos el siguiente sistema de reacción-difusión*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & x \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), & x \in \Omega, \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

donde D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivos. Si la condición inicial corresponde a una perturbación del equilibrio homogéneo estacionario con parámetros D_{uu} , D_{vv} , R , a y b positivos que alejen el sistema del equilibrio homogéneo estacionario, entonces de converger a una solución tipo patrón estacionaria, los máximos poseerán una separación promedio correspondiente a una combinación convexa entre la primera y la última longitud de onda inestable.

Luego se tendrá que

$$\min\left\{\frac{\pi}{k_b}, \frac{\pi}{k_+}\right\} \leq d_{Carac} \leq \max\left\{2L_x, 2L_y, \frac{\pi}{k_-}\right\},$$

para el sistema con condiciones de borde Neumann nulas, y

$$\min\left\{\frac{2\pi}{k_b}, \frac{2\pi}{k_+}\right\} \leq d_{Carac} \leq \max\left\{L_x, L_y, \frac{2\pi}{k_-}\right\},$$

para el sistema con condiciones de borde periódicas.

2.3. Distribución de máximos en una dimensión

Posteriormente a entender la distancia entre los máximos desde el punto de vista del análisis perturbativo, el foco es ahora entender la distribución de estos. De acuerdo al respaldo de las simulaciones numéricas, tanto en 1 como 2 dimensiones, es posible apreciar que los máximos tienden a separarse lo más posible unos de otros, distribuyéndose de manera uniforme en el dominio, tal como se aprecia en Fig. 1.1. Si bien existen construcciones formales de las soluciones estacionarias del sistema tales como las presentadas por Winter y Wei en [4, 3, 5], a nuestro conocimiento hasta el momento de finalización de esta tesis no existe en la literatura una respuesta certera de cuál es la cantidad de máximos a la cual puede converger el sistema partiendo de condiciones iniciales aleatorias.

Para abordar este problema, se propone inicialmente estudiar un sistema estacionario linealizado, correspondiente a tomar el sistema estacionario original y reemplazar los términos u^2 por deltas de Dirac de la forma $\alpha\delta(x - x_i)$ con $i \in [N]$, correspondiendo $\{x_i\}_{i \in [N]}$ al conjunto de puntos en el interior del dominio donde existen concentraciones máximas, y $\alpha > 0$ constante. El sistema que se resolverá por tanto será

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u_G + R\left(a - bu_G + \frac{\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i)}{v_G}\right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \end{cases}$$

tanto con condiciones de borde periódicas como Neumann nulas. Esta forma de abordar el problema está inspirado en el trabajo de Winter y Wei [5] y en las bases de Takagi [20], debido a que utilizan la función de Green del sistema, que será proporcional a v_G , para demostrar la existencia de soluciones estacionarias tipo *spike* (soluciones caracterizadas por un perfil de alta concentración en un área muy reducida) y su estabilidad. Siguiendo un procedimiento similar al de Winter y Wei presentado en [5], se tiene que α deberá cumplir que

$$\alpha = \frac{1}{N} \int_{\Omega} u^2.$$

Esta constante representa un símil de la masa que concentran las *spikes* y es utilizada sólo para ajustar formalmente las funciones de Green aproximadas. Coincidentemente α se ajusta convenientemente para que en torno a los mínimos locales, tanto la solución numérica (u, v) como la solución de Green aproximada (u_G, v_G) alcancen valores similares.

Las soluciones (u_G, v_G) , al provenir de ecuaciones lineales son mucho más fáciles de calcular e incluso, al tener una forma analítica explícita, hacen que el tiempo de resolución sea mucho menor al del sistema original. Este hecho es considerado para entender el problema de distribución de máximos en el patrón estacionario del problema original como uno simplificado a través de la resolución de un sistema lineal.

Las simulaciones tanto en una como en dos dimensiones mostraron que los máximos se distribuían de manera casi uniforme en el dominio, por lo cual se plantea como enfoque del problema que las distancias entre los máximos puedan ser predichas como la minimización de un funcional evaluado en la función de Green aproximada (u_G, v_G) . De las simulaciones numéricas se pudo apreciar una competición entre las dos especies, de manera tal que la distribución final de máximos corresponderá a balancear características de confinamiento y de repulsión entre los máximos. Desde la física, el comportamiento de este fenómeno puede verse como un análogo al caso de los gases de Coulomb, correspondientes a partículas cargadas eléctricamente estudiados por Serfaty [15], donde el funcional de energía a minimizar comprende términos de confinamiento por campos eléctricos externos y propiedades repulsivas internas. Otro ejemplo corresponde a la interacción de vórtices en superconductividad modelados por las ecuaciones de Ginzburg-Landau estudiados por Sandier y Serfaty en [14], donde existe una repulsión entre estos junto con un efecto de confinamiento por potencial, mostrando características similares a la distribución de máximos del problema del sistema de reacción-difusión presentado, donde la distribución uniforme de vórtices es una solución estacionaria del sistema.

Usando la misma lógica, se propone el siguiente funcional que será independiente de α :

$$F(u_G, v_G) = -\|u_G\|_{L^2(\Omega)} + \|\ln\left(\frac{v_G}{N\alpha}\right)\|_{L^2(\Omega)},$$

donde N corresponderá al número de máximos en el interior de dominio.

Sobre este funcional, de acuerdo al amplio respaldo de las simulaciones numéricas, se plantea la siguiente conjetura:

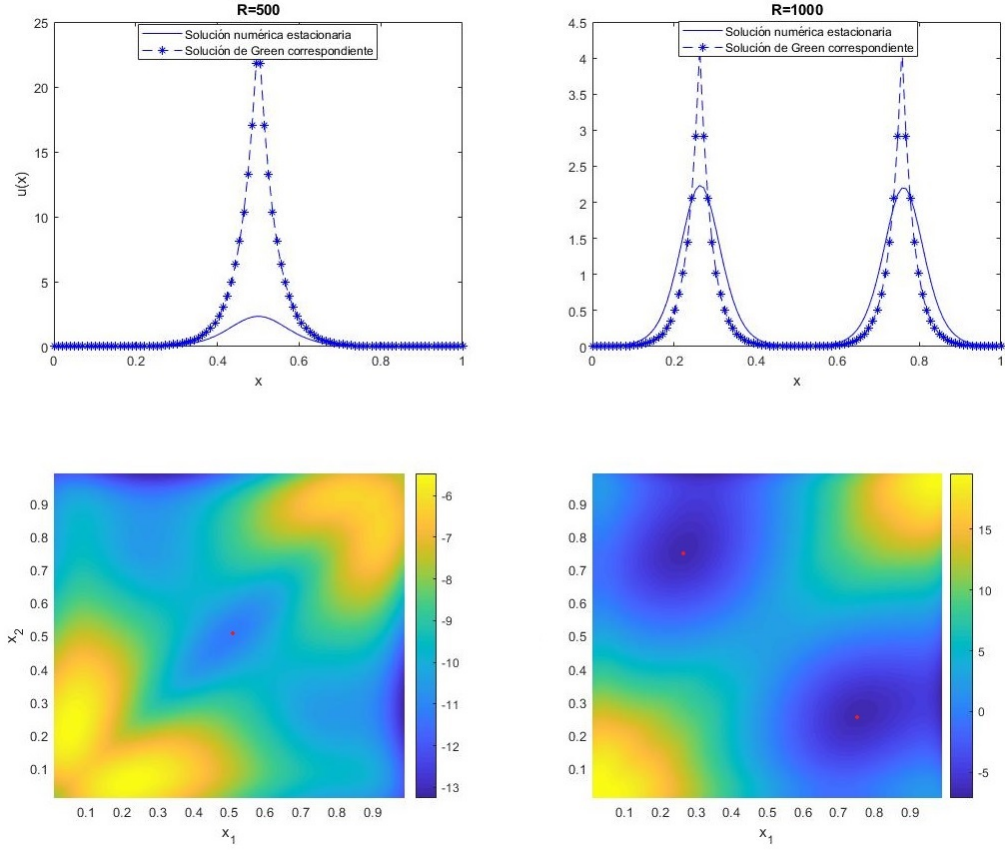


Figura 2.2: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de dos concentraciones máximas libres en el interior (recuadros inferiores) para $R = 500$ (recuadros izquierdos) y $R = 1000$ (recuadros derechos). Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

Conjetura 2.4 (ver Capítulo 6) *Consideremos el sistema de Gierer-Meinhardt sobre un dominio Ω con condiciones de borde periódicas o Neumann nulas.*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), \end{cases}$$

con D_{uu} , D_{vv} , R , a y b constantes positivas.

Si a partir de una condición inicial correspondiente a una perturbación del equilibrio homogéneo estacionario, el sistema converge a una solución estacionaria con N spikes al interior del dominio, la posición de dichas spikes corresponderá al argumento mínimo del funcional

$$F(u_G, v_G) = -\|u_G\|_{L^2(\Omega)} + \|\ln\left(\frac{v_G}{N\alpha}\right)\|_{L^2(\Omega)},$$

donde (u_G, v_G) corresponde a la solución de Green aproximada con N sitios de concentración

del sistema estacionario

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u_G + R \left(a - bu_G + \frac{\sum_{i \in [N]} \alpha \delta(x - x_i)}{v_G} \right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha \delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \end{cases}$$

con $\alpha \in (0, 1)$.

Si dicho funcional no presenta un mínimo local en el interior del dominio, entonces la solución con N spikes no será estable, produciéndose coalescencia de 2 o más concentraciones (Spikes).

La conjetura anterior tiene un amplio respaldo en las simulaciones numéricas en una dimensión. El funcional planteado es capaz a su vez de exhibir multiplicidad de mínimos locales, los cuales están en buen acuerdo con la gama de patrones estacionarios que pueden observarse mediante las simulaciones.

2.4. Propiedades de las soluciones estacionarias

Al ser las simulaciones numéricas la base de esta tesis, es necesario comparar que tan estacionaria es la solución numérica a la que se llega luego de cierto tiempo, y dado que no hay hasta el momento una solución general explícita para el sistema de Gierer-Meinhardt con la cual se pueda comparar, se hace necesario extraer propiedades de las soluciones estacionarias teóricas.

Propiedad 2.5 (ver Capítulo 3) *Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ \partial_t v = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas en un dominio Ω , y donde las constantes D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivas. Si el sistema converge a una solución estacionaria positiva (u, v) , entonces

$$\frac{D_{vv}}{R(1+a)} \|\nabla \ln(v)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{b}{(1+a)} \|u\|_{L^1(\Omega)} = |\Omega|.$$

A su vez, (u, v) cumplirá que

$$\int_{\Omega} v = \int_{\Omega} u^2.$$

Definido el producto escalar

$$(u, v)_{G-M} : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R},$$

$$(u, v)_{G-M} = \frac{b}{(a+1)} \int_{\Omega} uv + \frac{D_{uu}}{R(a+1)} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v,$$

se tendrá que

$$\|v\|_{L^1(\Omega)} = (u, v)_{G-M}.$$

Esta propiedad fue utilizada de la siguiente manera: Dado alguna tolerancia $\varepsilon > 0$ y tiempo de simulación $T > 0$, si la solución numérica $(u(t), v(t))$ para $t > T$ es tal que

$$\left| \frac{D_{vv}}{R(1+a)} \|\nabla \ln(v(t))\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{b}{(1+a)} \|u(t)\|_{L^1(\Omega)} - |\Omega| \right| < \varepsilon$$

y que

$$\left| \|v(t)\|_{L^1(\Omega)} - (u(t), v(t))_{G-M} \right| < \varepsilon$$

entonces la solución numérica puede considerarse lo suficientemente cercana a una solución estacionaria teórica.

Capítulo 3

Modelos de reacción-difusión: propiedades y teoremas relevantes

En este capítulo abordaremos el sistema de ecuaciones de reacción-difusión de manera genérica, donde consideraremos inicialmente el modelo a coeficientes constantes más general con 2 especies interactuantes (siendo posible generalizar las difusiones como tensores de difusión). La primera parte de este capítulo estará dedicada a presentar de manera genérica estos modelos y los tipos de condiciones de borde que serán utilizadas para el análisis posterior. Finalmente nos centraremos en el modelo de Gierer-Meinhardt, se hará mención de algunos de los teoremas más útiles para el desarrollo de esta tesis respecto a regularidad, existencia y positividad de soluciones, para luego caracterizar las soluciones estacionarias del sistema. Se incluye en el Anexo A un análisis similar del modelo de Schnakenberg con difusión cruzada, el cual fue utilizado para la construcción del modelo de huellas dactilares del cual se obtuvo la Fig. 2.7.

3.1. Modelos de reacción difusión

Consideremos un dominio cuadrado de lado L en \mathbb{R}^2 o un segmento en \mathbb{R} de largo L para construir este sistema de ecuaciones (i.e. $\Omega = (0, L)^2$ o $\Omega = (0, L)$). Un modelo de reacción-difusión de 2 especies interactuantes u (activador) y v (inhibidor), puede ser descrito de manera genérica con el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot (D_{uu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{uv} \nabla v) + f(u, v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = \nabla \cdot (D_{vu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{vv} \nabla v) + g(u, v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, \end{cases}$$

cuando se imponen condiciones de borde Neumann nulas, sino

$$\begin{cases} \partial_t u = \nabla \cdot (D_{uu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{uv} \nabla v) + f(u, v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = \nabla \cdot (D_{vu} \nabla u) + \nabla \cdot (D_{vv} \nabla v) + g(u, v), & (x, y) \in \Omega, \\ u(x, 0) = u(x, L), \\ u(0, y) = u(L, y), \\ v(x, 0) = v(x, L), \\ v(0, y) = v(L, y), \end{cases}$$

cuando se imponen condiciones de borde periódicas. Estas 2 condiciones de borde corresponden a las trabajadas durante la tesis. El sistema de ecuaciones expuestas es equivalente si el dominio es unidimensional (i.e. $\Omega = (0, L)$).

Cuando $f(u, v)$ y $g(u, v)$ son funciones no lineales de u y v , las simulaciones numéricas muestran que, a partir de una condición inicial (u_0, v_0) distinta al equilibrio homogéneo estacionario del sistema, estos modelos son capaces de converger soluciones estacionarias tipo patrón. Estos patrones varían dependiendo tanto de los parámetros del sistema como de la dimensionalidad del problema, pero preservan propiedades independiente de las condiciones iniciales tomadas.

De lo anterior, al usar las condiciones de borde, es posible reescribir el sistema de ecuaciones en su forma variacional de la siguiente manera al usar w_1 y w_2 como funciones test

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \partial_t u w_1 + \partial_t v w_2 dV + \int_{\Omega} (D_{uu} \nabla u) \cdot \nabla w_1 + (D_{uv} \nabla v) \cdot \nabla w_1 + (D_{vu} \nabla u) \cdot \nabla w_2 + (D_{vv} \nabla v) \cdot \nabla w_2 dV \\ = \int_{\Omega} f(u, v) w_1 + g(u, v) w_2 dV, \end{aligned}$$

tanto para condiciones de borde Neumann nula como periódica. Ahora, esta es la forma más generica con la que se partió, donde D_{uu} , D_{uv} , D_{vu} y D_{vv} serán matrices de difusión que en principio pueden no ser homogéneas o isotrópicas. Para efectos prácticos, en lo que sigue a D_{uu} y D_{vv} se le denominarán difusiones, y a D_{uv} y D_{vu} difusiones cruzadas y serán constantes independientes del espacio. La forma variacional presentada fue utilizada para lograr la Fig. 2.7 mediante el método de elementos finitos en FEniCS.

3.1.1. Modelo de Gierer-Meinhardt

Uno de los primeros modelos con los que se trabajó fue el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada, donde las funciones de interacción serán de la forma

$$\begin{aligned} f(u, v) &= R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ g(u, v) &= R(u^2 - v), \end{aligned}$$

luego el sistema de ecuaciones queda descrito como

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

para condiciones de borde periódicas o Neumann nulas. Dada la naturaleza en que se utilizan estos modelos de evolución, sólo se trabajará con valores D_{uu} , D_{vv} , R , a y b positivos, y valores de u y v no negativos (los cuales serán fundamentados más adelante). Las cantidades D_{uu} y D_{vv} corresponden a las difusividades del activador y el inhibidor con que afectan a sus propias especies respectivamente, esparciendo y homogenizando sus concentraciones. El término R corresponde a cuan influyentes son los términos de interacción $f(u, v)$ y $g(u, v)$ respecto a las difusiones. También puede entenderse desde el siguiente punto de vista: si cada ecuación es dividida por R , esta constante correspondería a una tasa de evolución temporal respecto a la magnitud de las difusiones. Esta tendrá más impacto al momento de presentar el análisis perturbativo en el Capítulo 4. Las cantidades bu y v respectivamente en cada ecuación corresponde a los consumos lineales de cada una de las especies, y por tanto se encargan de disminuir localmente las concentraciones de activador e inhibidor correspondientemente. La cantidad $\frac{u^2}{v}$ corresponde a la producción de activador en el tiempo que es desacelerada por el inhibidor, y la cantidad u^2 en la 2da ecuación se encarga de aumentar la concentración del inhibidor. Por lo tanto, el aumento de concentración en u afectará positivamente sobre el activador y el inhibidor, pero el aumento de concentración en v afectará negativamente en el activador.

Revisión bibliográfica de teoremas útiles

A priori, como las funciones de interacción poseen términos no lineales, no es una tarea fácil demostrar que a partir de alguna condición inicial esta vaya a converger, pero los esfuerzos de Antwi-Fordjour y Nkashama en 2017 [6] dieron fruto al demostrar que a partir de condiciones iniciales positivas suficientemente regulares, la solución $(u(t, x), v(t, x))$ existe para todo tiempo para el caso $a = 0$ y $b = 1$, lo cual se resume en el siguiente teorema

Teorema 3.1 (Fordjour, Nkashama 2017) *Supongamos que Ω es un dominio suave y acotado de dimensión N , con frontera $\partial\Omega$ suave y compacta, y considere el siguiente modelo de Gierer-Meinhardt*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u - u + \frac{u^p}{v^q}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv}\Delta v - v + \frac{u^r}{v^s}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

donde $0 < \frac{p-1}{r} < \frac{q}{s+1}$ y $\frac{p-1}{r} < \min\{1, \frac{q}{s+1}\}$. D_{uu} y D_{vv} son positivas.

Si, $u_0, v_0 \in W^{2,l}(\Omega)$ con $l > \max\{N, 2\}$, entonces la solución $(u(t, x), v(t, x))$ existe y es de clase $W^{2,l}(\Omega)$ para todo tiempo $t > 0$.

Este teorema ayuda a entender el nivel de regularidad que tendrá el sistema, donde el sistema estudiado en esta tesis presentará $p = 2$, $q = 1$, $r = 2$ y $s = 0$. Más aún, en el caso particular de las simulaciones numéricas, las condiciones iniciales aleatorias, pueden ser vistas como una aproximación de una condición inicial suficientemente regular, sin embargo este caso particular corresponde a parámetros $a = 0$ y $b = 1$.

Por otra parte Masuda y Takahashi en [7] son capaces, bajo hipótesis similares, demostrar la existencia de cotas para máximos y mínimos globales para (u, v) en un caso más general.

Teorema 3.2 (Masuda, Takahashi 1987) *Consideremos el sistema*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + a - bu + \frac{u^p}{v^q}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + c - dv + \frac{u^r}{v^s}, & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

supongamos que $0 < \frac{p-1}{r} < \frac{q}{s+1}$, que D_{uu} , D_{vv} , a , b , c y d son positivas, y que $0 < \frac{p-1}{r} < \frac{2}{n+2}$ donde n es la dimensión de Ω , y que $u_0, v_0 \in W^{2,N}(\Omega)$, con $N > \max\{n, 2\}$. Entonces siempre existirán soluciones positivas (u, v) para el sistema. Más aún existen constante positivas m_u , m_v , M_u y M_v tales que

$$m_u \leq \liminf_{t \rightarrow \infty} \inf_{x \in \Omega} u(t, x) \leq \limsup_{t \rightarrow \infty} \sup_{x \in \Omega} u(t, x) \leq M_u,$$

$$m_v \leq \liminf_{t \rightarrow \infty} \inf_{x \in \Omega} v(t, x) \leq \limsup_{t \rightarrow \infty} \sup_{x \in \Omega} v(t, x) \leq M_v.$$

El teorema anterior nos entrega por tanto, para dimensión $n = 1$, que la solución será positiva y estará acotada uniformemente. La regularidad, en el caso numérico, puede ser obviada, dado que todo vector numérico finito corresponde a la aproximación de una función suficientemente regular, como se había argumentado anteriormente.

Para el caso de dimensión 2, Masuda y Takahashi en [7] nos dan los siguiente resultados

Teorema 3.3 (Masuda, Takahashi 1987) *Consideremos el sistema anteriormente mencionado y que este cumple con $0 < \frac{p-1}{r} < \frac{q}{s+1}$ y que D_{uu} , D_{vv} , a , b , c y d son positivas. Supongamos además que $0 < \frac{p-1}{r} < \min\{\frac{2}{n}, 1\}$. Entonces, toda solución estacionaria (u, v) cumplirá con*

$$m_u \leq u \leq M_u,$$

$$m_v \leq v \leq M_v,$$

siendo m_u , m_v , M_u y M_v las constantes del teorema anterior.

Los teoremas anteriores son suficientes para tratar las soluciones estacionarias del modelo en 1 y 2 dimensiones y explorar propiedades más explícitas. Si bien Masuda y Takagi no entregan específicamente cuales son estas constantes, más adelante se llegará a cotas explícitas respecto a los parámetros del problema.

Características de las soluciones estacionarias

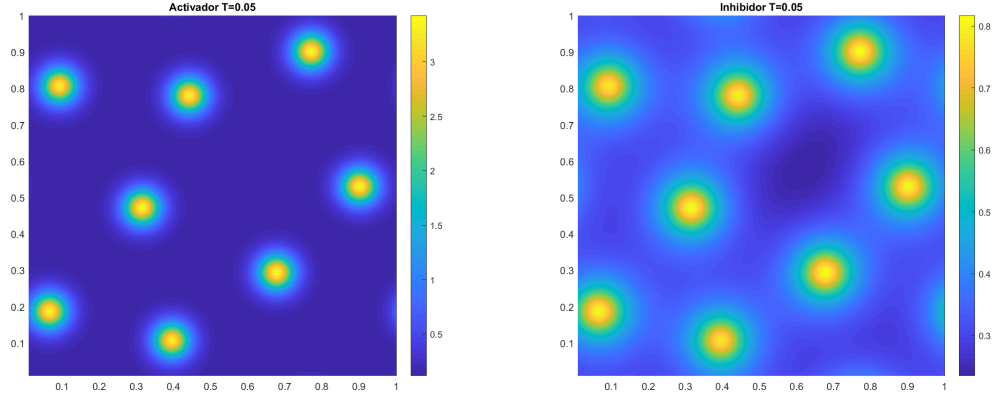


Figura 3.1: Simulación numérica realizada utilizando el modelo de Gierer-Meinhardt descrito en esta sección, utilizando un conjunto de parámetros donde en tiempo finito se obtenga una solución cuasi estacionaria. La condición inicial corresponde a una perturbación pequeña en torno a la solución homogénea estacionaria.

De las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$ es posible encontrar una única solución homogénea estacionaria del sistema que corresponde a

$$u_{eq} = \frac{1+a}{b},$$

$$v_{eq} = \left(\frac{1+a}{b}\right)^2,$$

la cual será muy útil en el capítulo siguiente cuando se analice la estabilidad lineal del modelo, generando que sólo exista una solución trivial al problema.

De acuerdo a las soluciones numéricas estacionarias que pueden calcularse con este modelo, estas muestran que los máximos de u y v se corresponden en las posiciones del dominio. Lo anterior implica que

$$\nabla u \cdot \nabla v \geq 0,$$

en el caso estacionario.

Más aún, los patrones estacionarios que pueden ser generados por este modelo corresponden únicamente a máximos aislados denominados *spikes*, lo cual se ejemplifica en Fig. 3.1 y 3.2.

Se aprecia que estos patrones presentan formas similares a Gaussianas debido a su focalización en la amplitud, donde los máximos son localmente únicos (existe una distancia

positiva desde donde se puede encontrar otro máximo en el dominio). Esta distancia entre los máximos no depende mayormente de las condiciones iniciales como puede apreciarse en la Fig. 3.2, puesto que a partir de condiciones iniciales distintas, dicha distancia parece no variar demasiado.

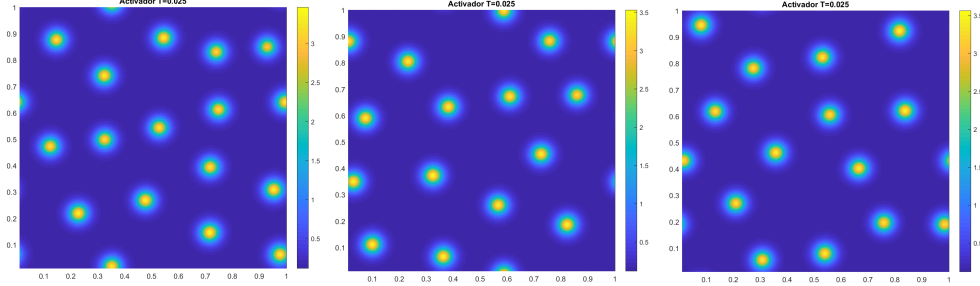


Figura 3.2: Resultado de 3 simulaciones numéricas realizadas en el dominio $(0, 1)^2$ mediante diferencias finitas con 3 condiciones iniciales aleatorias distintas, todas utilizando los mismos parámetros D_{uu}, D_{vv}, a, b, R y condiciones de borde periodica. Se aprecia que la distancia característica (distancia mínima promedio entre 2 máximos) no varía demasiado cuando la condición inicial es una perturbación pequeña del equilibrio, con una distancia promedio entre los máximos de $d_{carac} = 0,25 \pm 0,008$.

Ahora, dado lo encontrado en [6, 7], veamos que características poseen las soluciones estacionarias de este sistema. Reescribiendo el sistema de ecuaciones de la siguiente manera

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t \ln(v) = D_{vv} \Delta \ln(v) + D_{vv} |\nabla \ln(v)|^2 + R\left(-1 + \frac{u^2}{v}\right), & (x, y) \in \Omega. \end{cases}$$

Esta reescritura proviene de dividir la ecuación del inhibidor por v , el cual es no nulo casi seguramente por los resultado de los teoremas expuestos anteriormente. Luego, podemos considerar las soluciones estacionarias del sistema, restar la ecuación del inhibidor a la del activador e integrar sobre el dominio usando las condiciones de borde para deshacernos del término de interacción $\frac{u^2}{v}$, obteniendo

$$0 = -D_{vv} \int_{\Omega} |\nabla \ln(v)|^2 + R(a+1)|\Omega| - Rb \int_{\Omega} u.$$

Reordenando los términos, es posible obtener que

$$\frac{D_{vv}}{R(1+a)} \int_{\Omega} |\nabla \ln(v)|^2 + \frac{b}{(1+a)} \int_{\Omega} u = |\Omega|, \quad (3.1)$$

la cual es una cantidad invariante de los parámetros utilizados

Dado que las soluciones son siempre positivas, se pueden obtener las siguientes cotas

$$\|\nabla \ln(v)\|_{L^2(\Omega)} \leq \sqrt{\frac{R(1+a)|\Omega|}{D_{vv}}},$$

$$\|u\|_{L^1(\Omega)} \leq \frac{(1+a)|\Omega|}{b},$$

obteniéndose cotas explícitas para la norma $L^1(\Omega)$ de u y la norma $L^2(\Omega)$ de $\nabla \ln(v)$. La segunda desigualdad es alcanzada cuando u es la solución homogénea estacionaria.

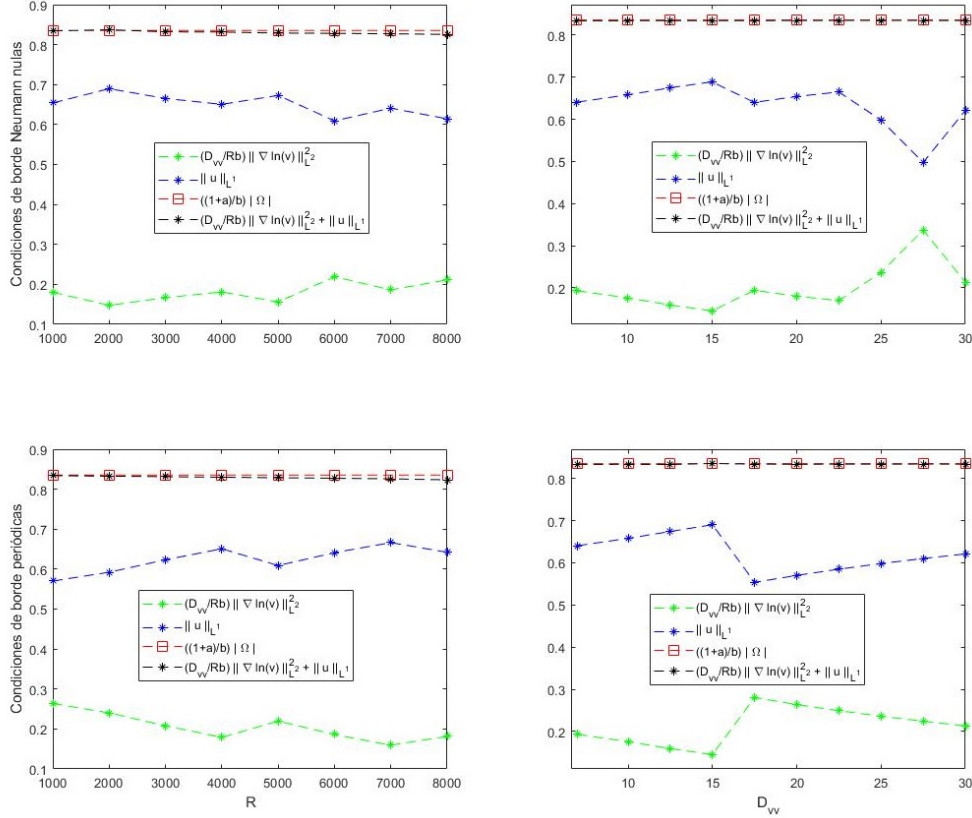


Figura 3.3: Gráfico correspondiente a los términos de la ecuación (3.1). Se aprecia que para diversos parámetros R y D_{vv} dicha ecuación se cumple numéricamente, validando la solución numérica y el método de simulación utilizado, tanto para condiciones de borde Neumann nulas como periódicas. Estos resultados corresponden a simulaciones en una dimensión. En 2 dimensiones las soluciones numéricas pudieron ser validadas de la misma manera.

Las simulaciones numéricas están en buen acuerdo con la ecuación (3.1), lo que valida las soluciones numéricas a las que converge el sistema y el método de simulación usado (diferencias finitas).

Consideremos ahora el sistema estacionario completo, con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega. \end{cases}$$

Si integramos la segunda ecuación sobre el dominio, se obtendrá que

$$\int_{\Omega} u^2 = \int_{\Omega} v,$$

ecuación capaz de relacionar tanto el activador como el inhibidor, pero no da suficientes pistas sobre una solución estacionaria para ambas ecuaciones simultaneamente. Volviendo al sistema estacionario original

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

al multiplicar la primera ecuación por v y restandole la 2da para deshacernos de los términos u^2 , se obtiene que

$$0 = D_{uu}v\Delta u + D_{vv}\Delta v + R(av - buv) + Rv.$$

Por la regla de la multiplicación, queda como

$$0 = D_{uu}\Delta(uv) - 2D_{uu}\nabla u \cdot \nabla v - D_{uu}u\Delta v + D_{vv}\Delta v + R(av - buv) + Rv.$$

Integrando sobre el dominio Ω y ocupando las condiciones de borde, se llega a que

$$0 = -2D_{uu} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v - D_{uu} \int_{\Omega} u\Delta v + R(a+1) \int_{\Omega} v - Rb \int_{\Omega} uv,$$

donde nuevamente integrando por partes, se tiene que

$$R(a+1) \int_{\Omega} v = D_{uu} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v + Rb \int_{\Omega} uv,$$

Reordenando, se obtiene que

$$\int_{\Omega} v = \frac{b}{(a+1)} \int_{\Omega} uv + \frac{D_{uu}}{R(a+1)} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v. \quad (3.2)$$

De acá se puede desprender que, al ser todas las constantes del sistema positivas, podemos definir el siguiente producto interno

$$(\cdot, \cdot)_{G-M} : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R},$$

$$(u, v)_{G-M} = \frac{b}{(a+1)} \int_{\Omega} uv + \frac{D_{uu}}{R(a+1)} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v, \quad (3.3)$$

puediendo caracterizar el conjunto de soluciones estacionarias del sistema propuesto de la siguiente manera

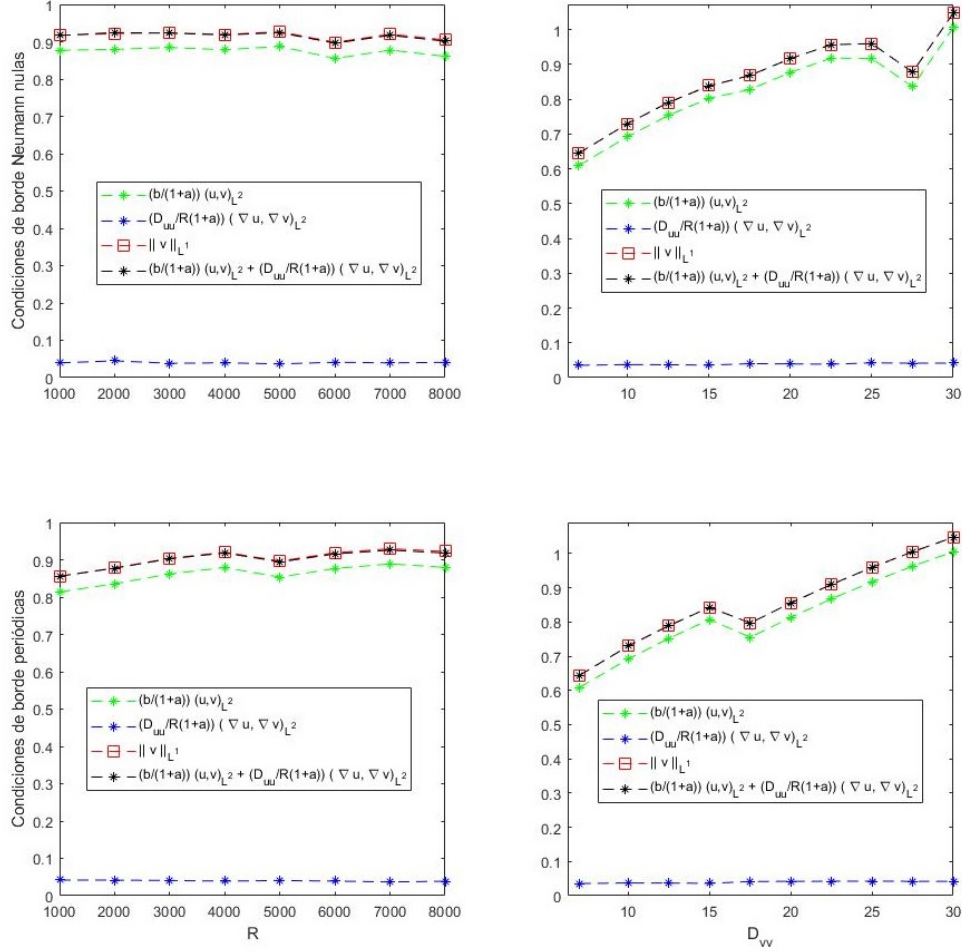


Figura 3.4: Gráfico correspondiente a los términos de la ecuación (3.2). Se aprecia que para diversos parámetros R y D_{vv} dicha ecuación se cumple numéricamente, validando la solución numérica y el método de simulación utilizado, tanto para condiciones de borde Neumann nulas como periódicas. Estos resultados corresponden a simulaciones en una dimensión. En 2 dimensiones las soluciones numéricas pudieron ser validadas de la misma manera.

$$||v||_{L^1(\Omega)} = (u, v)_{G-M},$$

obteniéndose una condición para la norma $L^1(\Omega)$ también de v .

Las ecuaciones (3.1) y (3.2), al contener expresiones clásicas utilizadas en el análisis de EDP's, son fáciles de implementar numéricamente, por lo tanto pueden ser utilizadas para evaluar qué tan avanzado se encuentra el sistema como para dar por terminada una simulación numérica, en vez de escoger un tiempo arbitrariamente grande para asegurar que se ha llegado a una solución estacionaria.

Las propiedades anteriores pueden resumirse en la siguiente propiedad

Propiedad 3.4 Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas en un dominio Ω , y donde las constantes D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivas. Si el sistema converge a una solución estacionaria positiva (u, v) , entonces

$$\frac{D_{vv}}{R(1+a)} \|\nabla \ln(v)\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{b}{(1+a)} \|u\|_{L^1(\Omega)} = |\Omega|.$$

A su vez, (u, v) cumplirá que

$$\int_{\Omega} v = \int_{\Omega} u^2.$$

Definido el producto escalar

$$(u, v)_{G-M} : H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R},$$

$$(u, v)_{G-M} = \frac{b}{(a+1)} \int_{\Omega} uv + \frac{D_{uu}}{R(a+1)} \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v,$$

se tendrá que

$$\|v\|_{L^1(\Omega)} = (u, v)_{G-M}.$$

Esta propiedad fue utilizada de la siguiente manera: Dado alguna tolerancia $\varepsilon > 0$ y tiempo de simulación $T > 0$, si la solución numérica $(u(t), v(t))$ para $t > T$ es tal que

$$\left| \frac{D_{vv}}{R(1+a)} \|\nabla \ln(v(t))\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{b}{(1+a)} \|u(t)\|_{L^1(\Omega)} - |\Omega| \right| < \varepsilon$$

y que

$$|\|v(t)\|_{L^1(\Omega)} - (u(t), v(t))_{G-M}| \varepsilon$$

entonces la solución numérica puede considerarse lo suficientemente cercana a una solución estacionaria teórica.

Nota: La propiedad anterior explicita cotas y ecuaciones que fueron utilizadas posteriormente para bajar los tiempos de simulación numérica tanto para el modelo de Gierer-Meinhardt como de huellas dactilares, y entregan una herramienta de testeo rápido para darle validez al método de integración numérica.

3.1.2. Modelo de Schnakenberg

Para aumentar la complejidad de los patrones que pueden modelarse, se optó por estudiar brevemente el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada, con condiciones de borde

periódicas y Neumann nulas. Este modelo presenta una no linealidad de tipo cúbica, siendo las funciones de interacción de la siguiente manera

$$\begin{aligned} f(u, v) &= R(a - u + u^2v), \\ g(u, v) &= R(b - u^2v), \end{aligned}$$

Nuevamente se supondrá que tanto las difusiones como las difusiones cruzadas sean constantes, para simplificación del problema, siendo estas homogéneas e isotrópicas. El modelo con el que se trabajó se puede describir por tanto con el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + D_{uv}\Delta v + R(a - u + u^2v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vu}\Delta u + D_{vv}\Delta v + R(b - u^2v), & (x, y) \in \Omega, \\ u(x, 0) = u(x, L), \\ u(0, y) = u(L, y), \\ v(x, 0) = v(x, L), \\ v(0, y) = v(L, y), \end{cases}$$

con forma equivalente con condiciones de borde Neumann nulas.

Este sistema posee una única solución homogénea estacionaria al igual que el modelo de Gierer-Meinhardt, correspondiente a

$$\begin{aligned} u_{eq} &= (a + b), \\ v_{eq} &= \frac{b}{(a + b)^2}, \end{aligned}$$

provenientes de las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$.

Al realizar simulaciones numéricas con condiciones iniciales como perturbaciones en torno al equilibrio propuesto, a diferencia del modelo anterior, los máximos del activador u se corresponden con mínimos del inhibidor v cuando la solución converge a una solución estacionaria, y por tanto

$$\nabla u \cdot \nabla v \leq 0,$$

convirtiéndolo en un sistema activador-sustrato.

Adicionalmente, al incluir la difusión cruzada en este modelo, es posible generar patrones estacionarios más complejos que son capaces de exhibir no sólo máximos aislados, sino también patrones tipo laberinto, generando caminos con términos de línea (un máximo que posee una única dirección en la curva de nivel) y bifurcaciones (un máximo que posee tres direcciones en la curva de nivel).

Una restricción importante sobre los modelos con difusión cruzada, es el hecho que la matriz de difusiones generales debe ser definida positiva para que estos modelos converjan numéricamente, lo que quiere decir

$$D_{uu}D_{vv} - D_{uv}D_{vu} \geq 0,$$

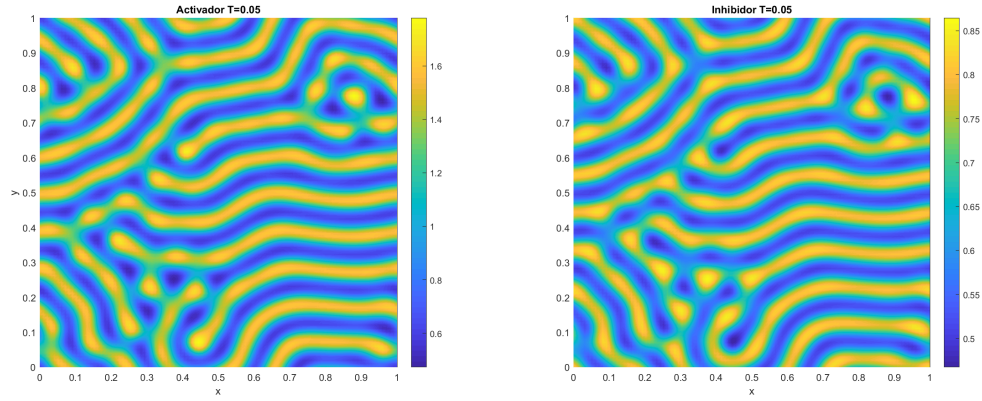


Figura 3.5: Simulación numérica realizada utilizando el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada y condiciones de borde periódico descrito en esta sección, utilizando un conjunto de parámetros donde en tiempo finito converja a una solución cuasi estacionaria. La condición inicial corresponde a una perturbación pequeña en torno a la solución homogénea estacionaria.

tanto si el método utilizado es diferencias finitas o elementos finitos.

Una diferencia importante con el modelo de Gierer-Meinhardt que se puede apreciar, es que la suma de las funciones de interacción

$$f(u, v) + g(u, v) = R(a + b - u),$$

es lineal en u . Luego, es posible realizar el siguiente análisis respecto a la evolución del sistema. Consideremos las ecuaciones que lo gobiernan

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + D_{uv}\Delta v + R(a - u + u^2v), \\ \partial_t v = D_{vu}\Delta u + D_{vv}\Delta v + R(b - u^2v), \end{cases}$$

sumemos ambas e integremos sobre el dominio considerando las condiciones de borde Neumann nulas o periódicas. Se tendrá que

$$\begin{aligned} \partial_t \int_{\Omega} (u + v) &= D_{uu} \int_{\Omega} \Delta u + D_{uv} \int_{\Omega} \Delta v + D_{vu} \int_{\Omega} \Delta u + D_{vv} \int_{\Omega} \Delta v + R(a + b)|\Omega| - \int_{\Omega} u \\ &= D_{uu} \int_{\partial\Omega} \partial_n u + D_{uv} \int_{\partial\Omega} \partial_n v + D_{vu} \int_{\partial\Omega} \partial_n u + D_{vv} \int_{\partial\Omega} \partial_n v + R(a + b)|\Omega| - \int_{\Omega} u \\ &= R(a + b)|\Omega| - \int_{\Omega} u. \end{aligned}$$

Como (u, v) son soluciones débiles positivas del sistema variacional, entonces definiendo

$$\|(u, v)\|_{L^1(\Omega)} = \int_{\Omega} (u + v),$$

se tendrá que

$$\partial_t \|(u, v)\|_{L^1(\Omega)} = R(a + b)|\Omega| - \int_{\Omega} u \leq R(a + b)|\Omega|, \quad (3.4)$$

por tanto la variación de la norma $L^1(\Omega)$ de las soluciones débiles del modelo de Schnakenberg es acotada. Más aún, si (u, v) es una solución estacionaria del sistema, se obtiene que

$$\|u\|_{L^1(\Omega)} = R(a + b)|\Omega|. \quad (3.5)$$

La inecuación (3.4), al relacionar la tasa de cambio de la norma $L^1(\Omega)$ en (u, v) con los parámetros del sistema, es un buen candidato, de forma equivalente a la ecuación (3.2) para comprender cuán cerca de la solución estacionaria puede encontrarse una simulación numérica. El resultado anterior puede ser resumido de la siguiente manera

Propiedad 3.5 *Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + D_{uv}\Delta v + R(a - u + u^2v), \\ \partial_t v = D_{vu}\Delta u + D_{vv}\Delta v + R(b - u^2v), \end{cases}$$

donde D_{uu} , D_{uv} , D_{vu} , D_{vv} , a , b y R son positivos, y que $(D_{uu}D_{vv} - D_{uv}D_{vu}) > 0$, definido en un dominio Ω de 1 o 2 dimensiones, con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas, y condiciones iniciales positivas. De acuerdo a los teoremas de positividad de soluciones de Masuda y Takahashi descritos anteriormente, es posible definir

$$\|(u, v)\|_{L^1(\Omega)} = \int_{\Omega} (u + v),$$

Si $\forall t > 0$, $u, v \in L^1(\Omega)$, entonces

$$\partial_t \|(u, v)\|_{L^1(\Omega)} = R(a + b)|\Omega| - \int_{\Omega} u \leq R(a + b)|\Omega|,$$

Si (u, v) es una solución estacionaria del sistema, entonces

$$\|u\|_{L^1(\Omega)} = R(a + b)|\Omega|.$$

Se aprecia que este modelo es mucho más complejo que el de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada, debido a múltiples factores tales como el orden de la no linealidad, la no nula difusión cruzada que genera una mayor riqueza en el espacio de parámetros, y las estructuras de los patrones finales que pueden ser mucho más complejas que las del modelo anterior, lo que dificulta definir una distancia promedio entre máximos y su distribución, por lo que se opta por seguir profundizando en el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada.

Capítulo 4

Teoría perturbativa y regularidad en patrones

En este capítulo haremos uso de la teoría lineal perturbativa para entender cómo el espacio de parámetros que exhibe el modelo de Gierer-Meinhardt puede influir en la aparición o ausencia de patrones como resultado final en simulaciones numéricas. Desde el análisis perturbativo realizaremos un análisis de los modos normales del sistema que impondrán condiciones sobre la dimensión, los parámetros y las condiciones de bordes del sistema con tal de obtener una solución estacionaria tipo patrón. Posteriormente se describirá la primera conjetura en base a los resultados numéricos que relaciona los modos normales del sistema perturbado y la distancia promedio entre máximos.

4.1. Análisis perturbativo

El análisis perturbativo es una herramienta ampliamente utilizada en ciencia, principalmente en matemática y física, para entender el comportamiento temprano de un sistema de ecuaciones de evolución. El método consiste en obtener inicialmente una solución estacionaria del sistema (en algunos casos estacionaria y homogénea), obteniendo un sistema de ecuaciones lineales usando aproximaciones de Taylor a primer orden que describen su comportamiento temprano. Mediante este método, se pretende encontrar una ecuación que relacione variaciones en el tiempo y en el espacio, denominada relación de dispersión, que muestra si una condición inicial cercana al equilibrio se acercará o alejará de este. El método aplicado a ecuaciones de reacción-difusión fue propuesto inicialmente por Alan Turing en [21], de quien proviene el nombre del mecanismo de inestabilidad de Turing, y ampliamente usado para acuñar el concepto de inestabilidad inducida por difusión (DII por sus siglas en inglés) como lo han hecho los trabajos de Zhu [2], Maini [13] o Meinhardt [9]. El análisis y procedimiento está enfocado en el modelo de Gierer-Meinhardt, pero puede ser replicado de manera análoga para cualquier sistema de reacción-difusión.

Como primer paso, se identificó la solución homogénea estacionaria del sistema, la cual

es entregada por las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$, correspondiendo esta a

$$u_{eq} = \frac{1+a}{b},$$

$$v_{eq} = \left(\frac{1+a}{b}\right)^2.$$

Para encontrar las ecuaciones del sistema perturbado, se suponen soluciones del tipo

$$\vec{u} = (u, v) = \vec{u}_0 + \vec{a}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}+\lambda t} = (u_{eq}, v_{eq}) + \vec{a}e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}+\lambda t},$$

que corresponden a oscilaciones en tiempo y espacio en torno al equilibrio estacionario, en donde no se considerarán los órdenes mayores o iguales a $\mathcal{O}(|\vec{a}|^2)$, obteniéndose una relación entre las cantidades \vec{k} y λ .

De acuerdo al tipo de solución \vec{u} que se busca, si existe un vector \vec{k} de componentes reales para el cual λ posea una parte real positiva, significa que existe en el sistema un modo normal inestable que hará evolucionar el sistema alejándolo del equilibrio homogéneo estacionario, y por tanto, si el sistema parte de una condición inicial cercana a este equilibrio (pero no igual), no podrá volver a éste. Si por el contrario para todo \vec{k} de componentes reales, se tiene que λ posee parte real negativa, entonces siempre convergerá al equilibrio homogéneo estacionario anteriormente mostrado, provocando que la única solución estacionaria de este sistema sea (u_{eq}, v_{eq}) .

Al reemplazar en el sistema original la solución propuesta, simplificando la exponencial, y considerando sólo los términos de orden lineal, se obtiene la siguiente ecuación

$$\lambda \vec{a} = \left[- \begin{pmatrix} D_{uu} & 0 \\ 0 & D_{vv} \end{pmatrix} k^2 + \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} \right] \vec{a},$$

donde f_u, f_v, g_u, g_v corresponden al primer término de la expansión de Taylor en torno a (u_{eq}, v_{eq}) de las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$, convirtiéndolo en un problema de valores propios del operador linealizado. Luego para saber si existe algún modo normal inestable, basta con resolver la siguiente ecuación de 2do grado

$$\lambda_{\pm}(k^2) = \frac{b(k^2) \pm \sqrt{b(k^2)^2 - 4c(k^2)}}{2},$$

donde

$$b(k^2) = R \left[b \frac{1-a}{1+a} - 1 \right] - (D_{uu} + D_{vv})k^2,$$

$$c(k^2) = (D_{uu}D_{vv})k^4 - R(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv})k^2 + bR^2.$$

Debido a que $b(k^2)$ es una recta decreciente en k^2 , esta posee un cero que llamaremos k_b^2

$$k_b^2 = \frac{R \left[b \frac{1-a}{1+a} - 1 \right]}{(D_{uu} + D_{vv})}. \quad (4.1)$$

Por otra parte, al ser $c(k^2)$ una función cuadrática en k^2 , es fácil ver que sus ceros estarán dados por

$$k_{\pm}^2 = \frac{R}{2D_{uu}D_{vv}} \left[\left(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv} \right) \pm \sqrt{\left(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv} \right)^2 - 4bD_{uu}D_{vv}} \right]. \quad (4.2)$$

Tanto k_b^2 como k_{\pm}^2 serán de utilidad para determinar el origen del efecto DII.

El procedimiento anteriormente explicado, está fundamentado el trabajo de Takagi [18], donde considera el problema de evolución formalizándolo de la siguiente manera

$$\begin{cases} F : L^2(\Omega) \times L^2(\Omega) \longrightarrow L^2(\Omega) \times L^2(\Omega), \\ \partial_t U = F(U) = L(U_{eq})U + NL(U_{eq}, U), \end{cases}$$

donde $U = (u, v)$ y $U_{eq} = (u_{eq}, v_{eq})$, siendo $L(U)$ la parte lineal del operador descrito en torno a U_{eq} y $NL(U_{eq}, U)$ su parte no lineal, y donde $F(U)$ corresponde a

$$F(U) = \begin{pmatrix} D_{uu}\Delta U_1 + R(a - bU_1 + \frac{U_1^2}{U_2}) \\ D_{vv}\Delta U_2 + R(U_1^2 - U_2) \end{pmatrix}.$$

En dicho trabajo realiza el análisis de estabilidad e invertibilidad local de $L(U)$ con tal de demostrar que existe un valor propio de $L(U_{eq})$ con parte real positiva (los cuales coinciden con el análisis simplificado mostrado anteriormente) para el cual la solución homogénea estacionaria es inestable y que existen soluciones estacionarias no triviales a las cuales el sistema convergerá.

Como las cantidades k_b^2 como k_{\pm}^2 indican cuando un modo normal es linealmente inestable, dependiendo de las condiciones de borde del problema, es posible cuantificar los modos normales dependiendo del dominio. En el caso particular tratado durante esta tesis se optó por un cuadrado de largo 1 o por un segmento de largo 1, tal como se precisa en el capítulo anterior.

En el caso de condiciones de borde periódica, las componentes de los modos normales serán proporcionales a

$$\chi = \cos\left(\frac{2n\pi x}{L_x} + \phi_x\right) \cos\left(\frac{2m\pi y}{L_y} + \phi_y\right),$$

donde ϕ_x y ϕ_y son fases de la función dada la periodicidad del dominio.

Si las condiciones de borde son Neumann nulas, entonces las componentes de la solución perturbativa serán proporcionales a

$$\chi = \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{m\pi y}{L_y}\right),$$

donde es análogo en caso unidimensional para cada tipo de condición de borde.

Ahora, debido a que no todos los vectores \vec{k} corresponderán a modos normales, debido al tipo de soluciones que se acaban de exponer, se deberán imponer condiciones sobre \vec{k} para que dicho modo normal aleje al sistema del equilibrio, tal como lo fundamenta Takagi. Luego, si \vec{k} es un vector de onda correspondiente a un modo normal inestable debe cumplir que

$$k_-^2 \leq \|\vec{k}\|^2 \leq \max\{k_b^2, k_+^2\},$$

si es que $k_b^2, k_\pm^2 > 0$. Luego, de acuerdo a las soluciones de los modos normales en 2 dimensiones para un rectángulo $\Omega = [L_x, L_y]$, se tendrá que $\|\vec{k}\|^2 = (n\pi)^2 + (m\pi)^2$ para condiciones de borde Neumann nulas y $\|\vec{k}\|^2 = (2n\pi)^2 + (2m\pi)^2$ para condiciones de borde periódicas. Para 1 dimensión, es análogo tomando m o bien n como cero. Luego es posible caracterizar 2 posibilidades para que se desarrolle la inestabilidad buscada:

Para que DII sea generado mediante la función $b(k^2)$, es necesario que se cumpla que $\exists(n, m) \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{(0, 0)\}$ tale que

$$\left(\frac{2n\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{2m\pi}{L_y}\right)^2 < k_b^2, \quad (4.3)$$

para condiciones de borde periódicas o

$$\left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2 < k_b^2, \quad (4.4)$$

para condiciones de borde Neumann nulas.

Para que DII sea generado mediante la función $c(k^2)$, es necesario que se cumpla que $\exists(n, m) \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{(0, 0)\}$ tale que

$$k_-^2 < \left(\frac{2n\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{2m\pi}{L_y}\right)^2 < k_+^2, \quad (4.5)$$

para condiciones de borde periódicas o

$$k_-^2 < \left(\frac{n\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{L_y}\right)^2 < k_+^2, \quad (4.6)$$

para condiciones de borde Neumann nulas.

Analizaremos los casos de $b(k^2) > 0$ y $c(k^2) < 0$ por separado

Caso 1: $\left[b\frac{1-a}{1+a} - 1\right] > 0$

En este caso $\forall k^2 \in [0, k_b^2]$, $b(k^2) > 0$. Luego cualquier modo normal que cumpla (4.3) o (4.4) generará DII.

De acuerdo al diagrama del espacio de parámetros de la Fig. 4.1, si (a, b) se encuentran en el lugar geométrico rojo, para que exista un modo inestable permitido en el sistema, es suficiente imponer que la traza de la matriz de difusiones $(D_{uu} + D_{vv})$ sea lo suficientemente

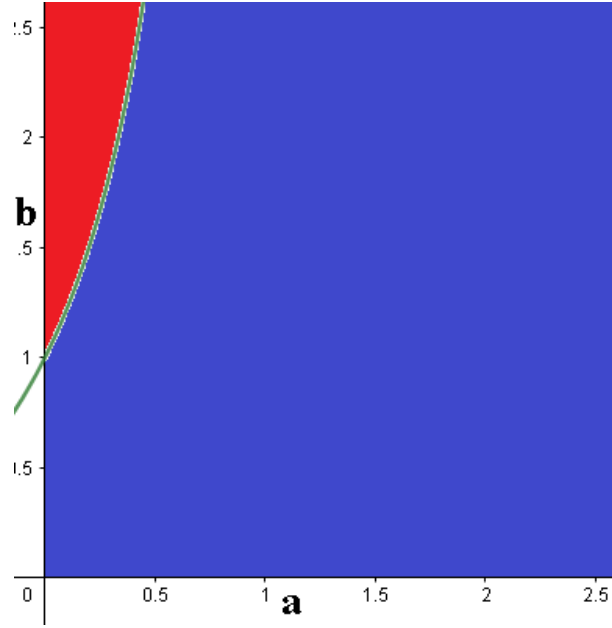


Figura 4.1: Espacio de parámetros donde la componente vertical corresponde a b y la horizontal a a . El lugar geométrico rojo corresponde al lugar de parámetros donde DII puede ser generado por $b(k^2)$. El lugar geométrico azul no satisface la desigualdad expuesta en el **Caso 1**.

pequeña para que se cumplan (4.3) o (4.4) dependiendo del caso, o que R sea lo suficientemente grande.

$$\text{Caso 2.a: } (-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv}) < 0$$

Para esta condición, se tendrá que $k_+^2 < 0$ y $k_-^2 < 0$. En este caso nunca puede haber DII por parte de $c(k^2)$, ya que D_{uu} y D_{vv} serán siempre positivas.

$$\text{Caso 2.b: } (-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv}) > 0$$

En este caso, k_{\pm}^2 tienen parte real positiva. Luego, es el discriminante de k_{\pm}^2 el que dicta si existe o no algún rango de $k^2 > 0$ donde $c(k^2) < 0$.

Analizando el discriminante de $c(k^2)$, para que existan modos inestables es necesario que

$$(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv})^2 - 4bD_{uu}D_{vv} > 0.$$

Definiendo la variable $\alpha = \frac{D_{uu}}{D_{vv}}$ la desigualdad puede ser reescrita como

$$\alpha^2 - 2b \frac{(3+a)}{(1+a)} \alpha + \left[b \frac{(1-a)}{1+a} \right]^2 > 0, \quad (4.7)$$

donde sus ceros están dados por

$$\alpha_{\pm} = \frac{b}{(1+a)} \left[(3+a) \pm \sqrt{8(1+a)} \right].$$

Luego, para que $c(k^2)$ posea raíces reales de acuerdo a la condición de discriminante positivo, es necesario que $\alpha \in (0, \text{máx}\{0, \alpha_-\}]$ o que $\alpha > \alpha_+$. El intervalo donde $\alpha > \alpha_+$ queda descartado dado que estamos analizando cuando $(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv}) > 0$, equivalente a que $\alpha < b \frac{1-a}{1+a} < \alpha_+$ para que ambas raíces de $c(k^2)$ tuviesen parte real positiva.

Luego, si $a < 1$, entonces $\alpha_- > 0$, obteniéndose un rango en la razón de difusividades donde

$$\frac{D_{uu}}{D_{vv}} < \frac{b}{(1+a)} \left[(3+a) - 2\sqrt{2(1+a)} \right],$$

para que $c(k^2)$ genera DII, hipótesis usada en [2, 13, 21].

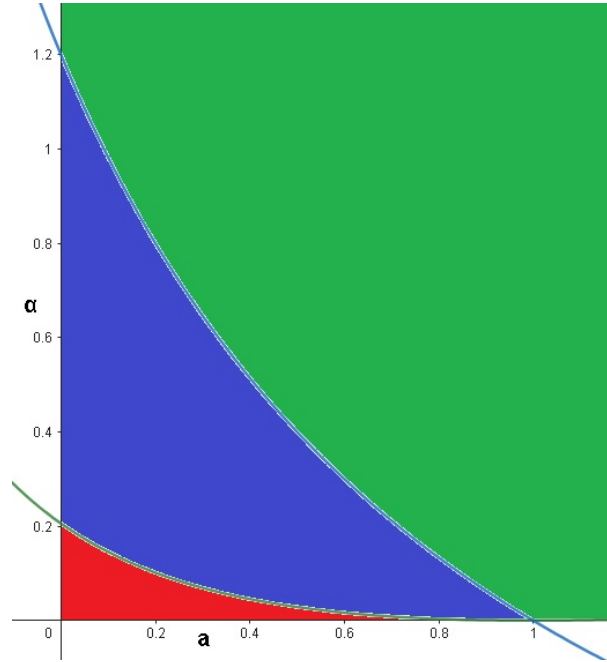


Figura 4.2: Espacio de parámetros donde la componente vertical corresponde a α y la horizontal a a , para el caso de $b = 1,2$. El lugar geométrico rojo corresponde al conjunto de parámetros donde DII puede ser generado por $c(k^2)$, y por tanto satisfaciendo la desigualdad anterior y la descrita en el **Caso 2.b**. El lugar geométrico azul no satisface la desigualdad anterior pero si la descrita en el **Caso 2.b**. El lugar geométrico verde no satisface ninguna de las desigualdades con las que se está trabajando.

El anterior análisis da una estructura de decisión de cómo los parámetros pueden ser elegidos para controlar la existencia o no de DII en una simulación, haciendo esta elección más sencilla mediante este método. Ahora, salta a la vista cualitativamente de las ecuaciones (4.1) y (4.2) que, si R fuese un parámetro lo suficientemente pequeño, tal que $\forall(n, m) \in \mathbb{Z}^2 \setminus \{(0, 0)\}$ no se cumpla alguna de las condiciones (4.3) - (4.6) según sea el caso, el sistema no tendrá más salida que converger al equilibrio homogéneo estacionario, lo cual es apoyado por las simulaciones numéricas. Por otro lado para R suficientemente grande siempre se puede encontrar una un modo normal que produzca DII, siempre y cuando el conjunto de parámetros pueda cumplir el **Caso 1** o el **Caso 2.b**. Los anteriores resultados y procedimientos son extendibles y generalizables a cualquier tipo de sistema de reacción-difusión de dos especies,

tal como muestra Murray en [11] aplicándolo sobre el modelo de Schnakenberg sin difusión cruzada. Los anteriores resultados pueden ser resumidos en el siguiente teorema de manera genérica.

Teorema 4.1 *Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones correspondiente al modelo de Gierer-Meinhardt*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \end{cases}$$

con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas en un dominio Ω , y donde las constantes D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivas. Sea \vec{k} un vector de onda correspondiente a un modo normal del sistema, definiendo

$$k_b^2 = \frac{R \left[b \frac{(1-a)}{(1+a)} - 1 \right]}{(D_{uu} + D_{vv})},$$

y

$$k_{\pm}^2 = \frac{R}{2D_{uu}D_{vv}} \left[(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv}) \pm \sqrt{(-D_{uu} + b \frac{1-a}{1+a} D_{vv})^2 - 4bD_{uu}D_{vv}} \right].$$

Entonces \vec{k} corresponderá a un modo normal inestable capaz de generar un patrón estacionario mediante DII si

$$\|\vec{k}\| \leq k_b \text{ o si } k_- \leq \|\vec{k}\| \leq k_+.$$

Por otra parte, si

$$\frac{D_{uu}}{D_{vv}} < b \frac{1-a}{1+a} \quad , \quad y \quad \frac{D_{uu}}{D_{vv}} < \frac{b}{(1+a)} \left[(3+a) - 2\sqrt{2(1+a)} \right],$$

entonces $\exists R > 0$ y $\exists \vec{k}$ vector de onda de un modo normal inestable capaz de inducir DII.

Nota: Para las simulaciones numéricas efectuadas en esta tesis, el conjunto de parámetros cumplen los **Casos 1** y **2b**, donde tanto la función $b(k^2)$ como $c(k^2)$ serán capaces de generar DII. El conjunto de parámetros corresponde a $D_{uu} = 1$, $a = 0,0025$, $b = 1,2$, $D_{vv} = [7; 10; 12,5; 15; 17,5; 20; 22,5; 25; 27,5; 30]$ y $R = [1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8] \times 10^3$.

4.2. Distancias características

De la sección anterior, se puede extraer cómo se hace presente el mecanismo por el cual el sistema es capaz de alejarse de la solución homogénea estacionaria, pudiendo formar una solución tipo patrón, mediante DII tal como lo ejemplifican Zhu en [2], Maini en [13], Meinhardt en [9] y Turing en [21].

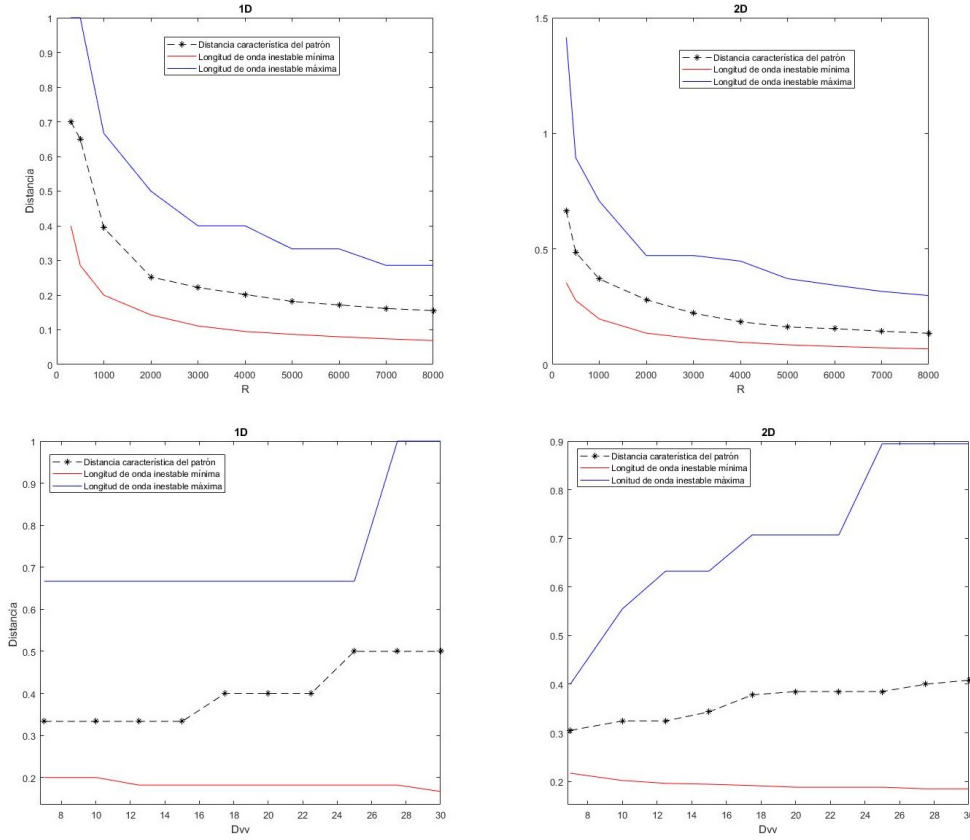


Figura 4.3: d_{Carac} (negro) que presentan los máximos en las soluciones, longitud de onda correspondiente al primer modo normal inestable (azul) y longitud de onda correspondiente al último modo normal inestable (rojo), para simulaciones en 1 (recuadros del lado izquierdo) y 2 (recuadros del lado derecho) dimensiones, dependiendo de la variable R (recuadros superiores) y de la variable D_{vv} (recuadros inferiores), con condiciones de borde Neumann nulas.

Durante esta investigación, se realizaron diversas simulaciones numéricas tanto en 1 como 2 dimensiones, y con diversidad de parámetros D_{vv} y R , con el fin de obtener una intuición de cómo estos afectaban el patrón final. Tal como se aprecia en la Fig. 3.2, las soluciones estacionarias a las que convergen las simulaciones poseen características similares, como es la separación promedio entre sus máximos locales y su distribución aparentemente uniforme.

Dado que la motivación inicial en este proyecto surgió de encontrar un modelo de reacción-difusión que pudiese generar patrones tipo huella digital como muestra la Fig. 2.7, las cuales poseen un ancho de pliegue característico universal en los seres humanos, es que el objetivo es estimar la distancia promedio entre máximos de una solución estacionaria.

Consideremos el siguiente hecho relacionado con los patrones tipo islas: Dado que los patrones que exhibe el modelo de Gierer-Meinhardt corresponde a máximos aislados, cada máximo posee un área de tamaño determinado. Como la suma de todas las áreas es invariante, dado que el dominio Ω en donde se simulará posee medida finita y constante, el área ocupada por cada máximo puede ser calculado como $\frac{|\Omega|}{N}$ con N el número de máximos, lo que lleva a una forma de relacionar esta área ocupada con la distancia promedio entre máximos que se

definirá como d_{Carac} (también llamada distancia característica).

Definición 4.2 *Sea Ω un dominio de dimensión 2 con condiciones de borde periódicas y N máximos. Se definirá d_{Carac} como*

$$d_{Carac} = \sqrt{\frac{|\Omega|}{N}}.$$

Si Ω es un dominio de dimensión 1 con condiciones de borde periódicas y N máximos. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \frac{|\Omega|}{N}.$$

Sea Ω un dominio en 2 dimensiones con condiciones de borde Neumann nulas, con N máximos en el interior, P máximos en las aristas y Q máximos en las esquinas. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \sqrt{\frac{|\Omega|}{N + 0,5P + 0,25Q}}.$$

Si Ω es un dominio en 1 dimensiones con condiciones de borde Neumann nulas con N máximos en el interior y P máximos en los bordes. Se definirá d_{Carac} como

$$d_{Carac} = \frac{|\Omega|}{N + 0,5P}.$$

Recordando que del análisis perturbativo encontramos condiciones sobre los parámetros para que el proceso de DII tuviese lugar, ligaremos las ecuaciones (4.3) - (4.6) con el cálculo de d_{Carac} . Es por lo anterior que al comparar d_{Carac} con las longitudes de onda inestables es posible obtener las Fig. 4.2 y 4.3.

Se aprecia que para los sistemas con condiciones de borde Neumann nulas (Fig. 4.2) o periódicas (Fig. 4.3), tanto en 1 como 2 dimensiones, d_{Carac} se encuentra entre la primera y la última longitud de onda de los modos normales inestables, independiente de los parámetro R o D_{vv} elegidos. No solo se obtiene un rango de posibles distancias características final entre los máximos y que son fáciles de calcular, sino que en el rango donde hay muchos modos normales inestables (parámetros R o D_{vv} muy grandes) estas cotas son estrictas.

Los resultados anteriores llevaron a plantear la siguiente conjetura, la que sólo requiere un análisis lineal del sistema para estimar las distancias promedio entre los máximos de la solución estacionaria, cuando la condición inicial corresponde a una perturbación en torno al equilibrio homogéneo estacionario.

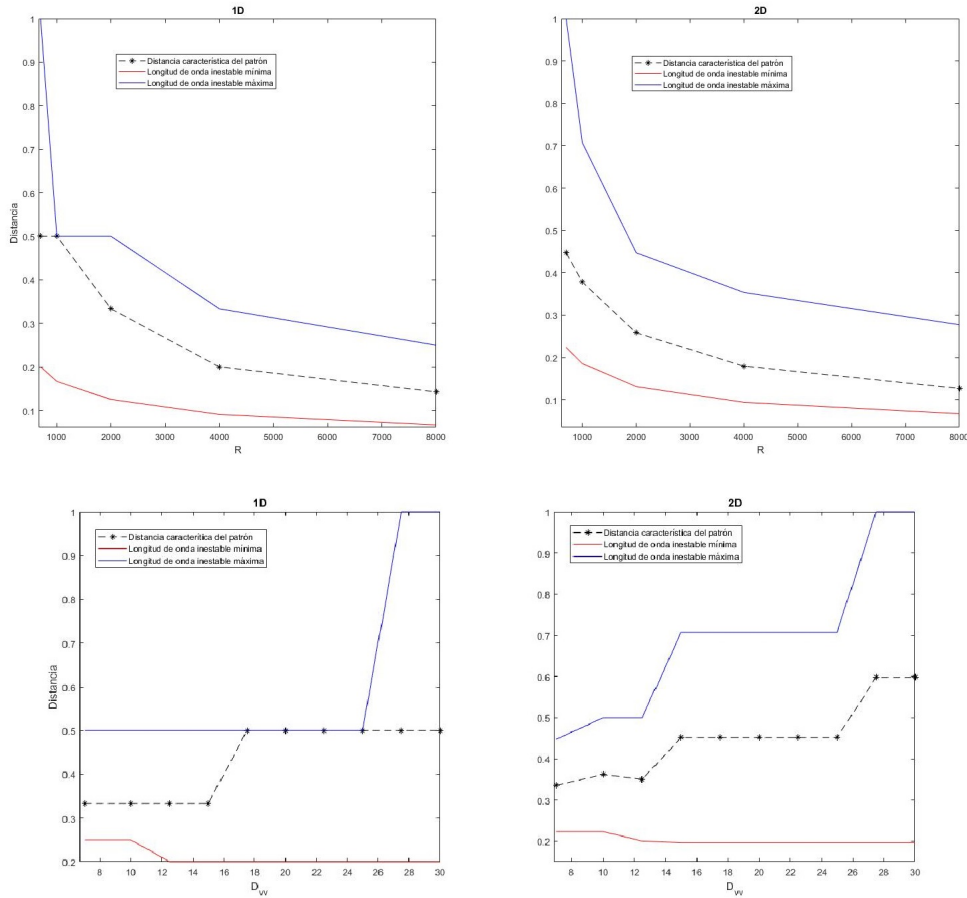


Figura 4.4: Distancia característica (negro) que presentan los máximos en las soluciones, longitud de onda correspondiente al primer modo normal inestable (azul) y longitud de onda correspondiente al último modo normal inestable (rojo), para simulaciones en 1 (recuadros del lado izquierdo) y 2 (recuadros del lado derecho) dimensiones, dependiendo de la variable R (recuadros superiores) y de la variable D_{vv} (recuadros inferiores), con condiciones de borde periódicas.

Conjetura 4.3 *Supongamos Ω un dominio 2D (cuadrado) o 1D (segmento) con condiciones de borde periódicas o Neumann nulas. Consideremos el siguiente sistema de reacción-difusión*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & x \in \Omega, \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), & x \in \Omega, \\ u(0, x) = u_0(x) \geq 0, \\ v(0, x) = v_0(x) > 0, \end{cases}$$

donde D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivos. Si la condición inicial corresponde a una perturbación del equilibrio homogéneo estacionario con parámetros D_{uu} , D_{vv} , R , a y b positivos que alejen el sistema del equilibrio homogéneo estacionario, entonces de converger a una solución tipo patrón estacionaria, los máximos poseerán una separación promedio correspondiente a una combinación convexa entre la primera y la última longitud de onda inestable.

Luego se tendrá que

$$\min\left\{\frac{\pi}{k_b}, \frac{\pi}{k_+}\right\} \leq d_{Carac} \leq \max\{2L_x, 2L_y, \frac{\pi}{k_-}\},$$

para el sistema con condiciones de borde Neumann nulas, y

$$\min\left\{\frac{2\pi}{k_b}, \frac{2\pi}{k_+}\right\} \leq d_{Carac} \leq \max\{L_x, L_y, \frac{2\pi}{k_-}\},$$

para el sistema con condiciones de borde periódicas.

La conjetura anterior entrega una herramienta interesante para el modelamiento de patrones que necesiten distancias específicas, tal como es el caso planteado en el Capítulo 2, donde se menciona el interés de llegar a un modelo de reacción-difusión que pueda generar más cabalmente patrones tipo huella digital, exhibiendo una mayor cantidad de estructuras que las obtenidas por Kucken en [12, 8] ejemplificadas en Fig. 2.6. La conjetura anterior, si bien se basa en un análisis perturbativo equivalente al que muestran autores como Meinhardt [9] o Murray [11], esta no posee una demostración formal respecto al comportamiento asintótico que exhibirán las especies, debido a la dificultad en el análisis de estos sistemas para discernir cuándo convergerán a una solución estacionaria no trivial. Esta herramienta fue utilizada fuertemente para obtener la Fig. 2.7, debido a que fueron los valores de los modos normales del dominio los que entregaron cotas sobre los posibles parámetros a utilizar, pero se hace necesaria una mayor valoración profesional tanto del tipo de patrón que se obtuvo, como una posible demostración de la conjetura propuesta.

Capítulo 5

Construcción de soluciones formales y función de Green aproximada

En este capítulo exploramos la metodología que utilizan Wei y Winter para construir soluciones tipo *spike* de los patrones en el modelo de Gierer-Meinhardt [3, 4, 5] mediante el análisis del sistema estacionario. Se plantea utilizar una metodología basada en lo expuesto por Wei y Winter para construir funciones de Green aproximadas del sistema. Estas serán utilizadas en el Capítulo 6 para abordar el problema de distribución de máximos desde el punto de vista de la optimización.

5.1. Construcción de soluciones estacionarias tipo *spike*

Ya se han visto en ejemplos como en la Fig 3.1 y 3.2 el tipo de patrón final al que puede converger el sistema de Gierer-Meinhardt en 2 dimensiones. Nos referiremos de aquí en adelante a un patrón tipo *spike* (o simplemente *spike*) a una solución estacionaria del sistema que exhiba amplitudes muy concentradas en torno a un conjunto de puntos muy pequeño respecto al tamaño del dominio, tal como los máximos aislados de las figuras antes mencionadas.

Al tratarse de un sistema que no puede estructurarse como

$$\partial_t(u, v) = -\nabla E(u, v),$$

con $E(u, v)$ un funcional clase \mathcal{C}^1 , no es claro que el sistema pueda converger a soluciones estacionarias, o que estas presenten cierta regularidad. Afortunadamente Juncheng Wei y Matthias Winter en [5] son lo suficientemente astutos para abordar esta problemática en el caso de condiciones de borde Neumann nula, metodología que posee una amplia base de los resultados de Izumi Takagi [18, 19, 20].

El primer paso que plantean Wei y Winter para entender estas amplitudes localizadas es

considerar el sistema estacionario

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & (x, y) \in \partial\Omega. \end{cases}$$

Basándose en el trabajo de Takagi [20], al tomar el límite $D_{vv} \rightarrow \infty$, se tendrá que $v \rightarrow \xi_0$, una constante finita no nula, lo cual será primordial para la construcción de estas soluciones aproximadas. Al tomar este límite e integrando la ecuación para el inhibidor sobre el dominio, es posible llegar al siguiente sistema

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{\xi_0}), & (x, y) \in \Omega, \\ 0 = \int_{\Omega} (-\xi_0 + u^2), & (x, y) \in \Omega. \end{cases}$$

Ahora, es posible realizar el siguiente cambio de variable

$$u = \xi_0(P(x) + \kappa),$$

para poder anular el término de fuente a que no aparece en el sistema estudiado por Wei y Winter en [5, 3, 4], por lo cual se debe imponer que

$$\kappa^2 - b\kappa + \bar{a} = 0,$$

donde se evidencia una condición entre a y b para que el marco teórico de Wei y Winter sea aplicable en este caso más general, y donde se ha considerado $\bar{a} = \frac{a}{\xi_0}$, la cual es concordante con la existencia de DII vista en el capítulo anterior, teniéndose que

$$\kappa = \frac{b - \sqrt{b^2 - 4\bar{a}}}{2}.$$

La ecuación del activador pasa a tener la siguiente forma luego de realizar el cambio de variable, y dividiendo por ξ_0 y R

$$0 = \frac{D_{uu}}{R}\Delta P - \beta P + P^2,$$

donde $\beta = \sqrt{b^2 - 4\bar{a}}$. Para que el consumo sea unitario, podemos realizar el siguiente cambio de variable

$$P(x) = \beta S(x),$$

quedando la ecuación descrita de la siguiente manera

$$0 = \frac{D_{uu}}{R\beta}\Delta S - S + S^2.$$

Finalmente podemos reescalar la variable espacial como $S(x) = w(\sqrt{\frac{R\beta}{D_{uu}}}x)$, llegando al siguiente problema

$$\begin{cases} 0 = \Delta w - w + w^2, & x \in \Omega, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x) = 0, \\ \max_{x \in \Omega} w(x) = w(0) > 0, \end{cases}$$

el cual corresponde a un problema semilineal con solución única en $H^1(\Omega)$, donde la concentración máxima de la amplitud se ubicó en $x = 0$ por simplicidad, y posee solución explícita en el caso de 1 dimensión, siendo esta

$$w(y) = \frac{3}{2 \cosh(y/2)^2}.$$

La solución del activador u en el límite $D_{vv} \rightarrow \infty$ corresponderá por tanto

$$u(x) = \xi_0 \left(\sqrt{b^2 - 4\bar{a}w} \left(\sqrt{\frac{R\sqrt{b^2 - 4\bar{a}}}{D_{uu}}}x \right) + \frac{b - \sqrt{b^2 - 4\bar{a}}}{2} \right),$$

en función de los parámetros del sistema original.

Ahora, para determinar ξ_0 en este límite, de la ecuación del inhibidor se tiene que

$$\int_{\Omega} u^2 = |\Omega| \xi_0.$$

Luego, de acuerdo a la relación entre u y w expuesta anteriormente, se tiene que

$$|\Omega| = \xi_0 \int_{\Omega} (\beta w(\sqrt{\frac{R\beta}{D_{uu}}}x) + \kappa)^2.$$

Lo anterior se puede resumir de la siguiente manera.

Lema 5.1 *Consideremos el siguiente sistema estacionario*

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & (x, y) \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & (x, y) \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, \end{cases}$$

donde D_{uu} , D_{vv} , R , a y b son positivos. Para el límite $D_{vv} \rightarrow \infty$, el sistema posee solución única de la forma $(u(x), \xi_0)$, donde ξ_0 es una constante finita no nula, tal que

$$u(x) = \xi_0 \left(\sqrt{b^2 - 4\bar{a}w} \left(\sqrt{\frac{R\sqrt{b^2 - 4\bar{a}}}{D_{uu}}}x \right) + \frac{b - \sqrt{b^2 - 4\bar{a}}}{2} \right),$$

con $\bar{a} = \frac{a}{\xi_0}$ y $w(x)$ es solución del sistema

$$\begin{cases} 0 = \Delta w - w + w^2, & x \in \Omega, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x) = 0, \\ \max_{x \in \Omega} w(x) = w(0) > 0. \end{cases}$$

El valor de ξ_0 puede ser calculado resolviendo

$$\xi_0 = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} u(x)^2 dx.$$

Para demostrar que el sistema para D_{vv} finito posee solución, basandose en los resultados de Takagi [18, 19, 20], Wei y Winter hacen uso de la siguiente función de Green

$$\begin{cases} 0 = D_{vv}\Delta G - G + \delta(x), & x \in \Omega, \\ \partial_n G = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases}$$

La función G solución de este sistema es utilizada en [5] para demostrar que existen soluciones con N *spikes* en el límite de $D_{uu} \rightarrow 0$, construyendo matrices en función de G e imponiendo condiciones de invertibilidad sobre estas, considerando deltas de Dirac ubicadas en las posiciones de los máximos. En base a este procedimiento se plantea construir funciones de Green aproximadas para abordar el problema de distribución de máximos.

5.2. Función de Green aproximada

En la sección anterior resumimos las herramientas que se utilizaron para demostrar la existencia de soluciones tipo *spike* en el sistema de Gierer-Meinhardt con condiciones de borde Neumann nulas. Ahora haremos uso de una generalización de la función de Green ya presentada para entender los alcances de las simulaciones numéricas y de las aproximaciones utilizadas en la teoría lineal, para en el capítulo siguiente dar paso a una posible explicación de la distribución que pueden adoptar los patrones del modelo y la aparición natural de una distancia característica.

5.2.1. Sistema aproximado mediante funciones de Green

Dado que Wei y Winter utilizaron la función de Green G expuesta anteriormente para demostrar la existencia de N soluciones tipo *spike* en un dominio Ω , realizaremos un procedimiento similar para abordar el problema de distribución estacionaria de máximos. Recordando que el sistema estacionario original posee las siguiente ecuaciones

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v + R(u^2 - v), & x \in \Omega, \end{cases}$$

consideraremos la siguiente función de Green aproximada

$$0 = D_{vv}\Delta v_G(x) - v_G(x) + \alpha\delta(x - x_i), \quad x \in \Omega, \quad x_i \in Int(\Omega),$$

que puede ser resuelta con condiciones de borde Neumann nulas o periódicas. Este sistema es muy similar al estudiado por Wei y Winter en [5]. Esta función de Green aproximada

corresponde a considerar el término $u^2 \sim \alpha\delta(x)$ en la ecuación del inhibidor, similar al procedimiento esbozado en la sección anterior donde $u^2 \sim \delta(x)$. Cabe señalar que el conjunto de parámetros es tal que $\frac{D_{uu}}{D_{vv}} < 1$, valores que se encuentran en buen acuerdo con la construcción de soluciones tipo *spike* de acuerdo a los límites tomados por Wei y Winter.

Si consideramos u_G , una función de Green secundaria, obtenida de resolver

$$0 = D_{uu}\Delta u_G(x) + R\left(a - bu_G(x) + \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G(x)}\right), \quad x \in \Omega, \quad x_i \in \text{Int}(\Omega),$$

y dado que se está considerando el sistema original donde $u^2 = \alpha\delta(x)$, α debiendo cumplir que

$$\alpha = \int_{\Omega} u^2,$$

para el caso de una solución *spike* aislada, será posible generalizar para un sistema con N concentraciones máximas en el interior del dominio, y por tanto el sistema aproximado podrá ser descrito como

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\Delta u_G + R\left(a - bu_G + \frac{\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i)}{v_G}\right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\Delta v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \end{cases}$$

siendo $\{x_i\}_{i \in [N]}$ las posiciones de los máximos, tanto para condiciones de borde Neumann nulas o periódicas. Luego, α deberá cumplir que

$$\alpha = \frac{1}{N} \int_{\Omega} u^2, \quad (5.1)$$

condición análoga a la que debe cumplir ξ_0 en el procedimiento de Wei y Winter. De acuerdo al tipo de sistema, es posible resolverlo de manera exacta en una dimensión de la siguiente manera:

- Resolver la ecuación del inhibidor v_G con las condiciones de borde impuestas.
- Utilizar la solución v_G a modo de fuente en la ecuación del activador u_G y resolverla.

Para el caso de N máximos en el interior, el dominio $\Omega = [0, 1]$ queda subdividido en $N + 1$ intervalos de la forma $I_j = [x_j, x_{j+1}]$, y llamaremos $I_0 = [0, x_1]$ y $x_{N+1} = 1$.

5.2.2. Condiciones de borde Neumann nulas

Consideremos el sistema de Green aproximado con condiciones de borde Neumann nulas

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\partial_{xx}u_G + R\left(a - bu_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G}\right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\partial_{xx}v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases}$$

Al simular el sistema original en 1 dimensión a partir de condiciones iniciales aleatorias, correspondientes a perturbaciones del equilibrio, es posible obtener resultados como la Fig. 5.1. Se aprecia que pueden existir concentraciones máximas en los bordes, lo cual dificulta la resolución de este sistema de ecuaciones, debido a que las deltas de Dirac sólo pueden posicionarse en el interior del dominio. Consideraremos en esta sección los N máximos ubicados al interior del dominio, abordando el problema de máximos en los bordes en el Anexo B.

Resolviendo primero la ecuación para el inhibidor v_G , esta será de la forma

$$v_G(x) = \sum_{j=0}^N (A_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right) + B_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right)) 1_{I_j}(x).$$

Ahora, utilizando las condiciones de borde entre los intervalos I_j , se tiene que $\{A_j\}_{j \in [N]}$ y $\{B_j\}_{j \in [N]}$ deben cumplir las siguientes condiciones

$$A_{j+1} \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) + B_{j+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) - A_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) - B_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) = 0,$$

$$A_{j+1} \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) - B_{j+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) - A_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) + B_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x_j\right) = \sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\alpha.$$

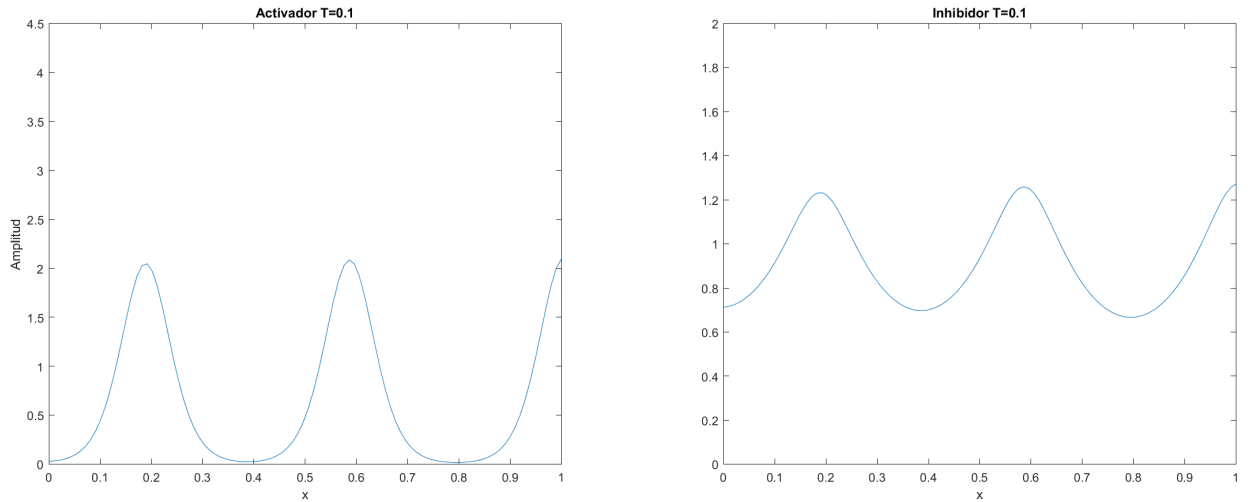


Figura 5.1: Solución estacionaria en 1D para el sistema de Gierer-Meinhardt a partir de condiciones iniciales aleatorias en torno al equilibrio con condiciones de borde Neumann nulas.

Luego el sistema quedará completamente descrito al utilizar las condiciones de borde Neumann nulas, siendo estas

$$\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}(A_0 - B_0) = 0,$$

$$\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}(A_N \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right) - B_N \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right)) = 0.$$

Ahora, teniendo una expresión explícita de $v_G(x)$, es posible desacoplar la ecuación para el activador. Antes se realiza el siguiente cambio de variable para dejar más explícita la EDO a resolver

$$\bar{u}_G = u_G - \frac{a}{b},$$

obteniéndose una ecuación similar a la del inhibidor

$$0 = D_{uu}\partial_{xx}\bar{u}_G + R(-b\bar{u}_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G}).$$

La solución para \bar{u}_G viene dada por

$$\bar{u}_G(x) = \sum_{j=0}^N (E_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) + F_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right)) 1_{I_j}(x),$$

y por lo tanto

$$u_G(x) = \sum_{j=0}^N (E_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) + F_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right)) 1_{I_j}(x) + \frac{a}{b}.$$

Luego al utilizar las condiciones de borde entre los intervalos se tiene que

$$\begin{aligned} E_{j+1} \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) + F_{j+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) - E_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) - F_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) &= 0, \\ E_{j+1} \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) - F_{j+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) - E_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) + F_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x_j\right) &= \\ &= \sqrt{\frac{R}{bD_{uu}}} \frac{\alpha}{v_G(x_j)}. \end{aligned}$$

Utilizando las condiciones de borde en los extremos $x = 0$ y $x = 1$

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}(E_0 - F_0) &= 0, \\ \sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}(E_N \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right) - F_N \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right)) &= 0, \end{aligned}$$

lo cual termina por cerrar el sistema de ecuaciones.

Nota: Las condiciones de borde entre los intervalos $\{I_j\}_{j \in [N], j > 0}$ no varían entre una solución con condiciones de borde Neumann nula sin concentración en la frontera o condiciones de borde periódico.

5.2.3. Condiciones de borde periódico

Consideremos el sistema de Green aproximado condiciones de borde periódicas

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\partial_{xx}u_G + R \left(a - bu_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G} \right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv}\partial_{xx}v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \\ u(0) = u(1), \\ v(0) = v(1), \end{cases}$$

del cual podemos ver un ejemplo de una solución numérica estacionaria en la Fig. 5.2. Como

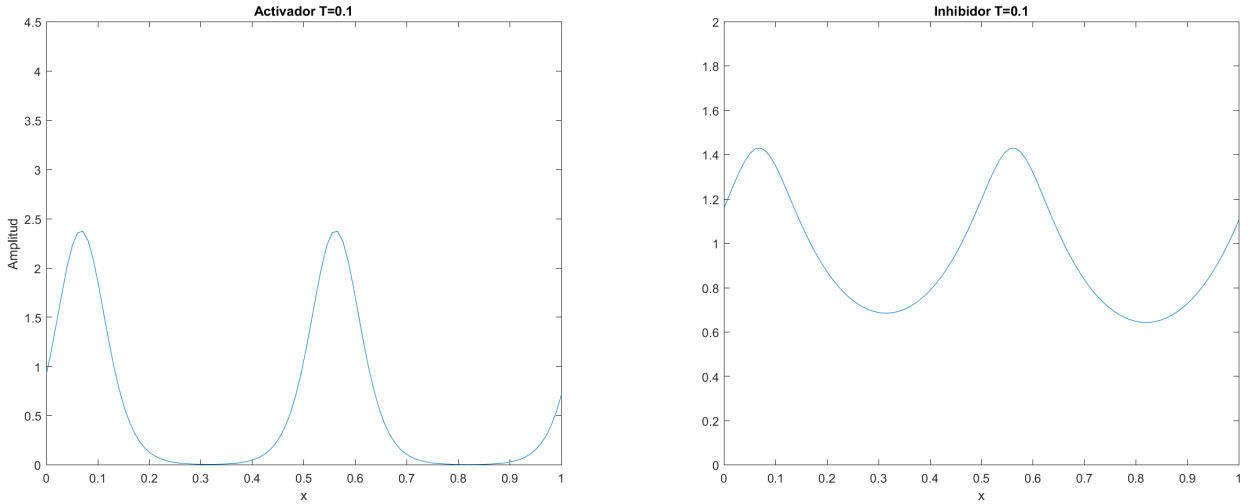


Figura 5.2: Solución estacionaria en 1D para el sistema de Gierer-Meinhardt a partir de condiciones iniciales aleatorias en torno al equilibrio con condiciones de borde periódicas.

se comentó anteriormente, las condiciones de borde entre los intervalos $\{I_j\}_{j \in [N]}$ son las mismas descritas en la subsección sobre condiciones de borde Neumann nulas sin concentraciones en los extremos, solamente cambiarán las condiciones de borde en $x = 0$ y en $x = 1$, siendo para el activador

$$A_0 + B_0 - A_N \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right) - B_N \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right) = 0,$$

$$\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}(A_0 - B_0 - A_N \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right) + B_N \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\right)) = 0,$$

y para el activador

$$E_0 + F_0 - E_N \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right) - F_N \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right) = 0,$$

$$\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}(E_0 - F_0 - E_N \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right) + F_N \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\right)) = 0.$$

5.2.4. Comparación: simulación numérica versus solución de Green aproximada

En las Fig. 5.3 y 5.4 se puede apreciar la comparación entre soluciones numéricas obtenidas de simular mediante el método de diferencias finitas con condición inicial aleatoria en torno al equilibrio (curvas sólidas) y sus funciones de Green aproximadas correspondientes en cada caso (curvas segmentadas).

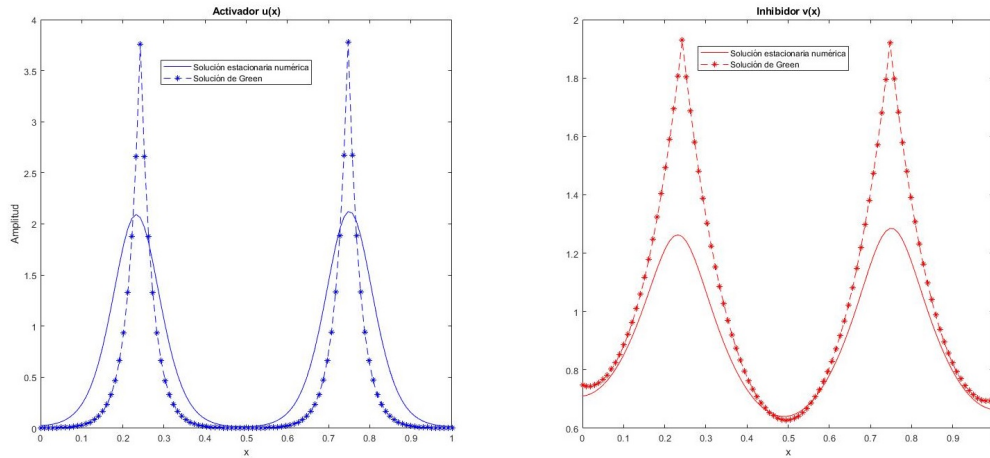


Figura 5.3: Comparación de la solución numérica obtenida de una simulación a partir de condiciones iniciales aleatorias (curvas sólidas) y sus correspondientes funciones de Green aproximadas (curva segmentada), para $R = 700$, $D_{vv} = 20$ y condiciones de borde Neumann nulas. Se obtuvo (u_G, v_G) con las condiciones expuestas en la Sección 5.2.2.

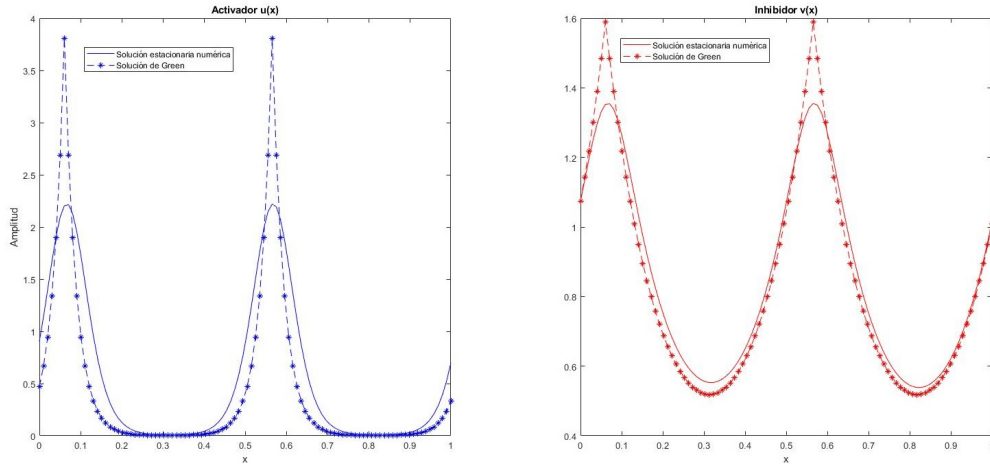


Figura 5.4: Comparación de la solución numérica obtenida de una simulación a partir de condiciones iniciales aleatorias (curvas sólidas) y sus correspondientes funciones de Green aproximadas (curva segmentada), para $R = 700$, $D_{vv} = 20$ y condiciones de borde periódicas. Se obtuvo (u_G, v_G) con las condiciones expuestas en la Sección 5.2.3.

Al ubicar los sitios de concentración $\{x_i\}_{i \in [N]}$ acordes a la solución numérica, se aprecia que lejos de los máximos la solución de Green aproximada se ajusta de buena manera al

resultado numérico del sistema original en 1 dimensión, tanto para condiciones de borde Neumann nulas (Fig. 5.3) como borde periódico (Fig. 5.4)

Para generar las Fig. 5.3 y 5.4 primero se obtuvieron las soluciones estacionarias del sistema y luego se resolvió (u_G, v_G) de acuerdo a la cantidad de máximos obtenidos en el interior, para posteriormente ajustar α como

$$\alpha = \frac{1}{N} \int_{\Omega} u^2,$$

siendo esta sólo una constante de ajuste.

Al imponer la condición anterior, se reportó numéricamente también que

$$\alpha = \frac{1}{N} \int_{\Omega} u_G^2(x),$$

tanto para condiciones de borde Neumann nulas sin concentraciones en los extremos como periódicas.

5.3. Reescritura simplificada de funciones de Green aproximadas

Los sistema de ecuaciones planteados en las subsecciones anteriores pueden ser reescritos de forma genérica como

$$\begin{aligned} A_v \mathcal{V} &= \alpha L_v, \\ A_u \mathcal{U} &= \frac{\alpha}{v_G(x_i)} L_u, \end{aligned}$$

donde A_u y A_v son las matrices de los coeficientes que acompañan a las amplitudes buscadas de las soluciones u y v correspondientemente. L_u y L_v son los vectores cuyos coeficientes corresponden a los lados derechos de las condiciones de borde, y \mathcal{U} y \mathcal{V} los vectores cuyas componentes son las amplitudes de las exponenciales.

Dado que para cada caso el sistema queda bien definido, es posible describir las amplitudes como

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \alpha (A_v^{-1}) L_v, \\ \mathcal{U} &= \frac{\alpha}{v_G(x_i)} (A_u^{-1}) L_u. \end{aligned}$$

Como \mathcal{U} y \mathcal{V} son vectores de largo $2(N + 1)$, es posible reescribir las soluciones u_G y v_G de la siguiente manera

$$\begin{aligned} v_G(x) &= \sum_{k=0}^N (\mathcal{V}_{2k} \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x\right) + \mathcal{V}_{2k+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x\right)) 1_{[x_k, x_{k+1}]}(x) = \\ &= \sum_{k=0}^N (\alpha (A_v^{-1})_{2k,j} (L_v)_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x\right) + \alpha (A_v^{-1})_{2k+1,j} (L_v)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x\right)) 1_{[x_k, x_{k+1}]}(x), \end{aligned}$$

usando notación de Einstein en j .

Definiendo

$$v_k(x) = ((A_v^{-1})_{2k,j}(L_v)_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right) + (A_v^{-1})_{2k+1,j}(L_v)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right))1_{[x_k, x_{k+1}]}(x),$$

se tiene que

$$v_G(x) = \alpha \sum_{k=0}^N v_k(x). \quad (5.2)$$

De acuerdo a las condiciones de continuidad de la familia $\{v_k\}_{k \in [N]}$, se obtiene que $v_G(x_k) = \alpha v_k(x_k)$. Por lo tanto

$$\begin{aligned} u_G(x) &= \sum_{k=0}^N (\mathcal{U}_{2k} \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) + \mathcal{U}_{2k+1} \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right))1_{[x_k, x_{k+1}]}(x) + \frac{a}{b} = \\ &\quad \sum_{k=0}^N \left(\frac{\alpha}{v_G(x_k)} (A_u^{-1})_{2k,j}(L_u)_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{v_G(x_k)} (A_u^{-1})_{2k+1,j}(L_u)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right)\right)1_{[x_k, x_{k+1}]}(x) + \frac{a}{b} = \\ &\quad \sum_{k=0}^N \left(\frac{\alpha}{\alpha v_k(x_k)} (A_u^{-1})_{2k,j}(L_u)_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\alpha}{\alpha v_k(x_k)} (A_u^{-1})_{2k+1,j}(L_u)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right)\right)1_{[x_k, x_{k+1}]}(x) + \frac{a}{b}. \end{aligned}$$

Definiendo

$$u_k(x) = \frac{1}{v_k(x_k)} ((A_u^{-1})_{2k,j}(L_u)_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) + (A_u^{-1})_{2k+1,j}(L_u)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right))1_{[x_k, x_{k+1}]}(x),$$

se tiene que

$$u_G(x) = \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b}. \quad (5.3)$$

por lo tanto, u_G no depende de α .

Capítulo 6

Explicación de la distribución de máximos desde el punto de vista de la optimalidad

En este capítulo se propone una manera de enfrentar el problema de la distribución de máximos en un patrón estacionario del modelo de Gierer-Meinhardt mediante la minimización de un funcional evaluado en las soluciones de Green aproximadas (u_G, v_G) descritas en el capítulo anterior, siendo por tanto esta una minimización en dimensión finita debido a que la única variable a optimizar serán las posiciones de las deltas de Dirac. La optimización del funcional propuesto está en buen acuerdo con las simulaciones numéricas en 1 dimensión, validándolo para postular una conjetura acorde.

6.1. Funcional no estrictamente convexo

Durante la inspección numérica de las soluciones estacionarias, se pudo apreciar que la distribución de las soluciones tipo *spike* tiende a ser homogénea sobre el dominio (tanto en 1 como en 2 dimensiones). Al utilizar los métodos de energía sobre el sistema de Gierer-Meinhardt no es claro el llegar a un funcional que se esté minimizando o que presente características de monotonía, a pesar de que su comportamiento a lo largo de la simulación así lo muestre, pero al revisar la evolución a lo largo del tiempo de las soluciones numéricas $(u(x, t), v(x, t))$ se pudo apreciar que existía una compensación y competencia entre activador e inhibidor cuando aparecía un nuevo máximo o desaparecía alguno ya formado coalesciendo con uno suficientemente cercano, por lo cual se optó por encontrar ejemplos de este tipo.

En física existe el concepto de gas de Coulomb, que consiste en un conjunto de partículas cargadas eléctricamente (que pueden interactuar mediante fuerzas electrostáticas) pero que están confinadas por un campo eléctrico externo. Ampliamente estudiado por Sylvia Serfaty [15], se consideran funcionales de energía que poseen un potencial de confinamiento que crece con el número de partículas cargadas y una interacción repulsoria que crece de manera logarítmica disminuyendo su energía, llegando al equilibrio cuando el gas se distribuye

homogeneamente. Este mismo comportamiento es estudiado por Etienne Sandier y Sylvia Serfaty en [14] sobre la interacción de vórtices en superconductores modelados por ecuaciones de Ginzburg-Landau, los cuales presentan a su vez una interacción repulsora, que frente a un potencial de confinamiento es capaz de converger a una distribución uniforme de dichos vórtices como solución estacionaria. Estos comportamientos fueron considerados al momento de explicar las distribuciones estacionarias de los máximos en los patrones del modelo de Gierer-Meinhardt.

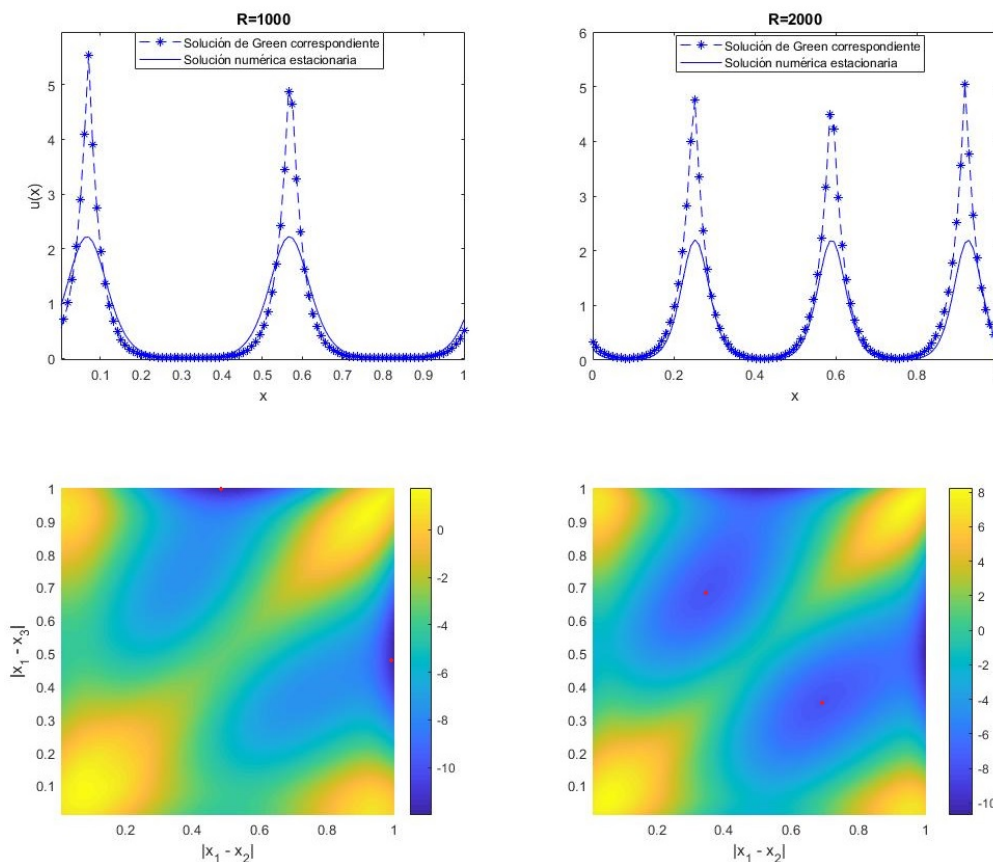


Figura 6.1: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde periódicas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de la posición de dos concentraciones máximas libres y una concentración fija en el interior del dominio (recuadros inferiores) para $R = 1000$ (recuadros izquierdos) y $R = 2000$ (recuadros derechos). Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

A su vez, en el Capítulo 3 se encontró una forma alternativa de escribir el sistema Gierer-Meinhardt que involucraba la cantidad $\ln(v)$, lo cual provocaba que el término de interacción fuese el mismo para ambas ecuaciones. Considerando estos dos precedentes se postuló el siguiente funcional

$$F(u_G, v_G) = -\|u_G\|_{L^2(\Omega)} + \|\ln\left(\frac{v_G}{N_\alpha}\right)\|_{L^2(\Omega)}, \quad (6.1)$$

el cual es independiente de α , que es evaluado en la solución de Green aproximada calculada para N máximos localizados en el interior del dominio en posiciones $\{x_i\}_{i \in [N]}$, el cual exhibe numéricamente mínimos locales al distribuir homogéneamente las N concentraciones máximas en el interior del dominio (en 1 dimensión), tanto para condiciones de borde Neumann nulas como periódicas.

De acuerdo a las ecuaciones (5.2) y (5.3), es posible reescribir el funcional de la siguiente manera

$$F(u_G, v_G) = -\left\| \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \ln \left(\frac{\alpha \sum_{k=0}^N v_k(x)}{N\alpha} \right) \right\|_{L^2(\Omega)} =$$

$$-\left\| \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right) - \ln(N) \right\|_{L^2(\Omega)}.$$

para hacer explícita la independencia de α en el funcional. Dado que no hay una solución general (u, v) del sistema original, se plantea la siguiente conjetura para resolver el problema de distribución de máximos:

Conjetura 6.1 *Consideremos el sistema de Gierer-Meinhardt sobre un dominio Ω con condiciones de borde periódicas o Neumann nulas.*

$$\begin{cases} \partial_t u = D_{uu} \Delta u + R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ \partial_t v = D_{vv} \Delta v + R(u^2 - v), \end{cases}$$

con D_{uu} , D_{vv} , R , a y b constantes positivas.

Si a partir de una condición inicial correspondiente a una perturbación del equilibrio homogéneo estacionario, el sistema converge a una solución estacionaria con N spikes al interior del dominio, la posición de dichas spikes corresponderá al argumento mínimo del funcional

$$F(u_G, v_G) = -\|u_G\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \ln \left(\frac{v_G}{N\alpha} \right) \right\|_{L^2(\Omega)},$$

donde (u_G, v_G) corresponde a la solución de Green aproximada con N sitios de concentración del sistema estacionario

$$\begin{cases} 0 = D_{uu} \Delta u_G + R \left(a - bu_G + \frac{\sum_{i \in [N]} \alpha \delta(x - x_i)}{v_G} \right), & x \in \Omega, \\ 0 = D_{vv} \Delta v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha \delta(x - x_i) - v_G), & x \in \Omega, \end{cases}$$

con $\alpha \in (0, 1)$.

Si dicho funcional no presenta un mínimo local en el interior del dominio, entonces la solución con N spikes no será estable, produciéndose coalescencia de 2 o más concentraciones.

La conjetura anterior plantea que la distancia característica entre los máximos de la solución estacionaria d_{Carac} definida en el Capítulo 4 puede ser entendida como un resultado colateral de un mínimo del funcional (6.1) aplicado sobre la solución de Green aproximada

vista en el capítulo anterior. Dado que dicha solución se puede calcular analíticamente y corresponde a dos EDO's de orden 2, esto reduce en gran medida el encontrar la familia de soluciones estacionarias del problema.

La función logaritmo que aparece en (6.1) se encuentra bien definida de acuerdo a los resultados de maximalidad y minimalidad mostrados por Masuda & Takahashi [7], y Takagi en [18, 19, 20]. La aparición del logaritmo en el funcional cobra sentido dado que surge naturalmente de la ecuación para el inhibidor luego de transformarla de forma tal que ambas ecuaciones tengan el mismo tipo de interacción.

Las simulaciones numéricas apoyan la **Conjetura 6.1** en el caso de 1 dimensión, y debido a que existe una expresión explícita para (u_G, v_G) podemos calcular como esta varía según las posiciones que se escojan para las concentraciones.

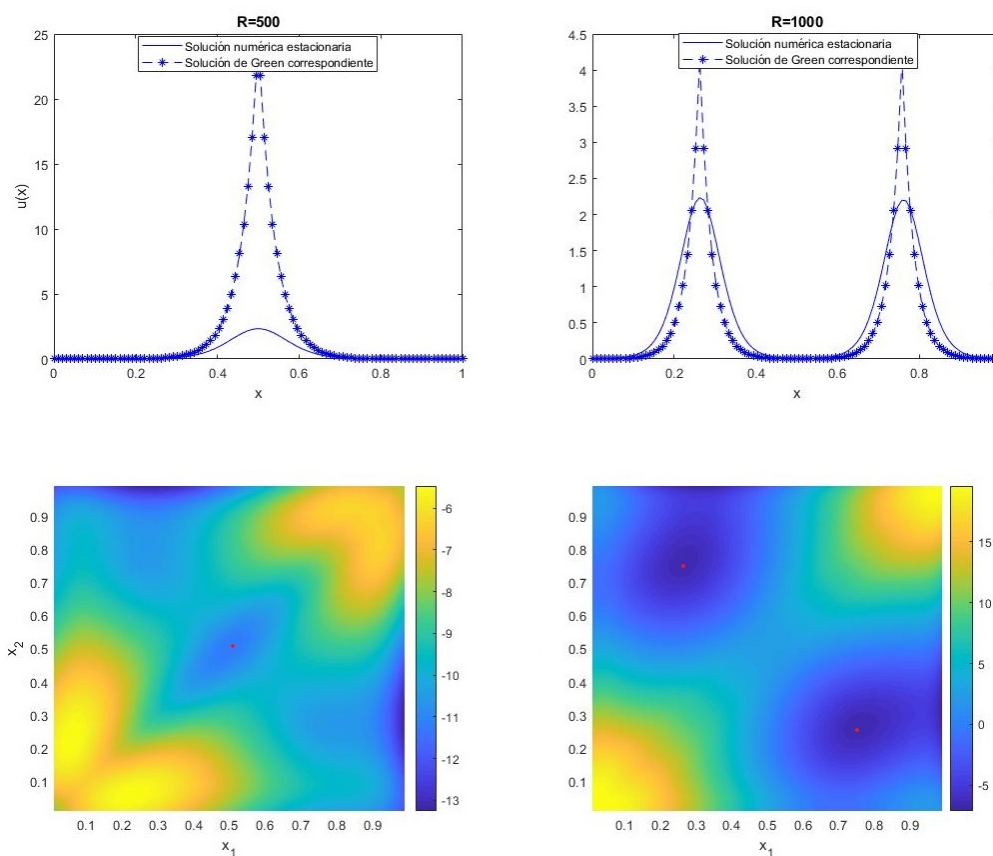


Figura 6.2: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de dos concentraciones máximas libres en el interior (recuadros inferiores) para $R = 500$ (recuadros izquierdos) y $R = 1000$ (recuadros derechos). Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

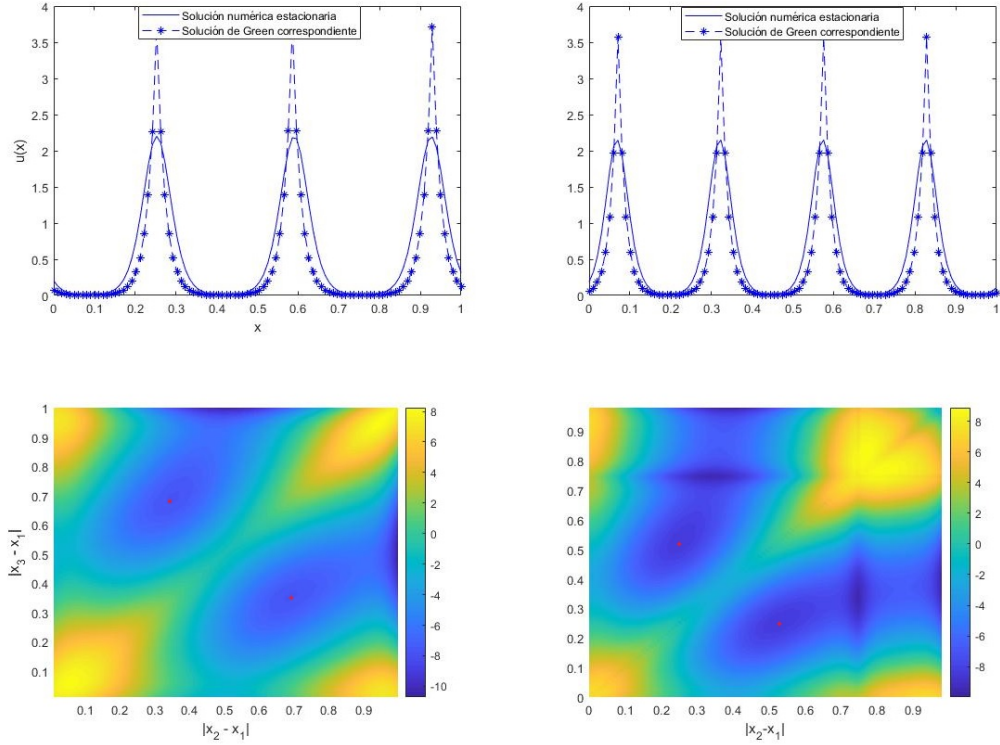


Figura 6.3: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde periódico (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de la posición de las concentraciones máximas libres en el interior (recuadros inferiores) para $R = 3000$ y $D_{vv} = 20$. El recuadro inferior izquierdo corresponde a simular $F(u_G, v_G)$ con 2 concentraciones máximas libres en el interior y una fija ($N = 3$), mientras que el recuadro inferior derecho corresponde a simular $F(u_G, v_G)$ con 3 concentraciones máximas libres en el interior y una fija ($N = 4$, se ha graficado un plano de nivel). Se encontró que el único mínimo local en el interior para $N = 3$ se encuentra cuando $|x_2 - x_1| \sim 0,33$ y $|x_3 - x_1| \sim 0,66$, concordante con la solución estacionaria encontrada. Para $N = 4$ se ha graficado $F(u_G, v_G)$ para un plano de nivel cuando $|x_4 - x_1| = 0,75$. Se aprecia que el funcional exhibe 2 mínimos locales correspondientes a los pares $(|x_2 - x_1|, |x_3 - x_1|) = (0,25, 0,50)$ y $(|x_2 - x_1|, |x_3 - x_1|) = (0,33, 0,75)$, correspondiente este último a una coalescencia de 2 de las concentraciones libres.

Se aprecia en Fig. 6.1 que al aumentar el parámetro R desde 1000 hasta 2000, la solución estacionaria del sistema con condiciones de borde periódica pasa de tener 2 *spike* a tener 3, lo cual es concordante con el gráfico de $F(u_G, v_G)$, debido a que aparece un mínimo local en el interior del dominio de optimización. Los recuadros inferiores muestran que para $R = 1000$ existe sólo un mínimo en la frontera, lo que corresponde a que, al haber 2 concentraciones libres y una fija, una de las concentraciones libres debe coalescer con alguna de las otras, lo cual al ser corroborado por la simulación numérica avala la **Conjetura 6.1**, mientras que para $R = 2000$ existe un mínimo en el interior, indicando que una solución con 2 concentraciones libres y una fija es un mínimo del funcional postulado y por tanto una solución estacionaria plausible según la **Conjetura 6.1**. Desde el punto de vista de la **Conjetura 4.4**, al aumentar R , debido a las ecuaciones (4.3) - (4.6), existe un mayor número de modos normales inestables y de menor longitud de onda, por lo tanto es permitido que la inestabilidad sea inducida por

un modo de mayor frecuencia, aumentando el número de *spikes* y por tanto disminuyendo d_{Carac} .

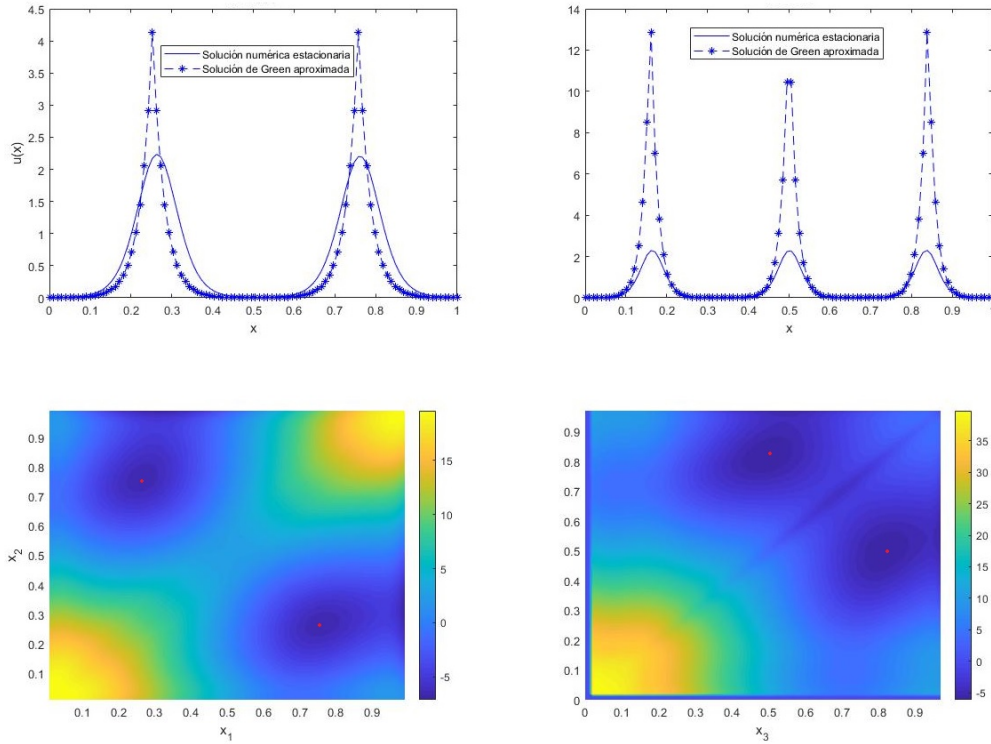


Figura 6.4: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de la posición de las concentraciones máximas libres en el interior (recuadros inferiores) para $R = 3000$ y $D_{vv} = 20$. El recuadro inferior izquierdo corresponde a simular $F(u_G, v_G)$ con 2 concentraciones máximas libres $N = 2$ en el interior, mientras que el recuadro inferior derecho corresponde a simular $F(u_G, v_G)$ con 3 concentraciones máximas libres en el interior $N = 3$. Se encontró que el único mínimo local en el interior para $N = 2$ se encuentra cuando $(x_1, x_2) = (0,24, 0,76)$, concordante con la solución estacionaria encontrada. Para $N = 3$ se ha graficado $F(u_G, v_G)$ para un plano de nivel cuando $x_1 = 0,17$. Se aprecia que el funcional exhibe un único mínimo local en el interior correspondientes a los pares $(x_2, x_3) = (0,50, 0,83)$, lo cual es concordante con la solución estacionaria encontrada.

Los gráficos de los recuadros inferiores de Fig. 6.1 consideran 3 concentraciones máximas, donde se ubica la primera en una posición fija ($x_1 = \frac{1}{3}$), mientras que x_2 y x_3 pueden moverse libremente (ejes horizontal y vertical correspondientemente de los recuadros inferiores). El gráfico del funcional muestra que para el caso de $R = 1000$, la posición de estas 2 concentraciones libres que minimiza $F(u_G, v_G)$ corresponde a que alguna de estas se encuentra a una distancia de 0,5 y la otra a 1,0. Esto último significa, debido a las condiciones de borde periódicas, que 2 de estas concentraciones máximas deben coalescer, dejando el sistema con solamente 2 soluciones tipo *spike* a una distancia característica $d_{Carac} = 0,5$, lo que es consistente con las simulaciones numéricas. Para el caso de $R = 2000$, se aprecia que el funcional

posee un mínimo cuando $|x_2 - x_1| = \frac{1}{3}$ y $|x_3 - x_1| = \frac{2}{3}$, dejando el sistema con 3 soluciones tipo *spike* y una distancia promedio $d_{Carac} = \frac{1}{3}$, lo que también es consistente con las simulaciones.

En la Fig. 6.2 se ha simulado $F(u_G, v_G)$ para 2 concentraciones libres en el interior y condiciones de borde Neumann nulas. En los recuadros inferiores se puede apreciar que, para el caso $R = 500$, existe un único mínimo en el interior, lo que corresponde a $x_1 = 0,5$, y $x_2 = 0,5$. Esto quiere decir que la única configuración donde $F(u_G, v_G)$ se minimice, corresponde a que ambas concentraciones libres coalescan formando una sola, caso similar a lo exhibido por la Fig. 6.1 con condiciones de borde periódicas y $R = 1000$. Para $R = 1000$ y 2 concentraciones libres en el interior, la Fig. 6.2 muestra un mínimo local cuando $x_1 \sim 0,25$ y $x_2 \sim 0,75$, lo que es concordante con el mínimo interior que muestra el funcional $F(u_G, v_G)$, dando una distancia característica $d_{Carac} = 0,5$.

Para corroborar que esta conjetura es válida para $N > 3$, se calculó $F(u_G, v_G)$ tanto para 2 como 3 concentraciones libres en el interior para un dominio con condiciones de borde periódico y una concentración fija, obteniéndose la Fig. 6.3. Los parámetros de la figura corresponden a $R = 3000$ y $D_{vv} = 20$, y sus condiciones iniciales son aleatorias. Se aprecia que para el caso de 2 concentraciones libres y 1 fija, existe un mínimo interior cuando $|x_2 - x_1| \sim 0,33$ y $|x_3 - x_1| \sim 0,66$, correspondiendo al equiespaciamento de las 3 concentraciones totales, y que está en buen acuerdo con las simulaciones numéricas. Para el caso de 3 concentraciones libres en el interior y 1 concentración fija, se estudia por niveles (dado que ahora son 3 las variables libres sobre las cuales se optimizará). En la Fig. 6.3, en el recuadro inferior derecho se ha graficado $F(u_G, v_G)$ en el plano de nivel $|x_4 - x_1| = 0,75$. Se aprecia que en este plano de nivel existe un mínimo local cuando $|x_2 - x_1| = 0,25$ y $|x_3 - x_1| = 0,50$, siendo este el único mínimo local con sus tres componentes distintas. El otro mínimo local que se puede apreciar en la Fig. 6.3 en el recuadro inferior derecho, corresponde a $|x_3 - x_1| = 0,75$ y $|x_2 - x_1| = 0,33$, correspondiente a la coalescencia de 2 concentraciones libres, y por tanto corresponde a otro mínimo local del funcional. Este último aspecto se abordará brevemente en el Anexo B.

La validación de la **Conjetura 6.1** para $N \neq 2$ también se tiene para el sistema con condiciones de borde Neumann nulas. En la Fig. 6.4 en los recuadros superiores se encuentran las soluciones estacionarias a las que converge el sistema a partir de condiciones iniciales aleatorias con parámetros $R = 3000$ y $D_{vv} = 20$, y sus funciones de Green aproximadas correspondientes. Se aprecia que para $N = 2$ (recuadros del lado izquierdo) el mínimo local interior es concordante con las posiciones de concentración máxima de la solución numérica (curva sólida del recuadro superior izquierdo). Para $N = 3$, el recuadro inferior derecho de la Fig. 6.4 se ha graficado el plano de nivel $x_1 = 0,17$ para $F(u_G, v_G)$ que exhibe el mínimo local interior corresponde a $x_1 = 0,17$, $x_2 = 0,50$ y $x_3 = 0,83$, el cual es concordante con la solución numérica correspondiente (curva sólida del recuadro superior derecho).

Los anteriores resultados apoyan la **Conjetura 6.1**, siendo estos útiles para predecir tanto la cantidad como la posición de los máximos de los sitios de concentración en 1 dimensión para una solución estacionaria, y por tanto obteniendo una distancia característica más precisa que las cotas de la **Conjetura 4.4**. Dado que el sistema de Gierer-Meinhardt no posee una solución explícita, esta manera de acercarse al problema a través de la teoría lineal se vuelve

muy útil para obtener propiedades de las soluciones estacionarias.

El funcional expuesto en (6.1) no fue obtenido mediante los métodos clásicos de minimización para llegar a un hamiltoniano del sistema, y por tanto no posee las unidades ni los órdenes que involucra un funcional de energía como los que se usaron de referencia en los trabajos de Sandier y Serfaty antes expuestos. A su vez fueron postulados diversos funcionales que poseyeran características de funcional de energía similares a los expuestos en [14, 15] y que involucraran las características que eran apreciadas en las simulaciones numéricas, los cuales no pudieron explicar la distribución de máximos en una dimensión que se han presentado para respaldar la **Conjetura 6.1**. A su vez, el mismo funcional (6.1) es capaz de predecir la aparición de soluciones estacionarias con menor cantidad de máximos en el dominio mediante coalescencia de estos, característica presentada con más detalle en el Anexo B, aumentando el respaldo de la conjetura.

6.2. Comentarios finales

Los resultados expuestos en esta tesis si bien poseen un respaldo numérico importante, se hace imperativo un análisis más detallado de la naturaleza de las ecuaciones. Si bien el análisis teórico usando métodos de energía fue capaz de generar propiedades de las soluciones estacionarias que fueron muy útiles en las simulaciones numéricas, aún no es suficiente para encontrar condiciones sobre las condiciones iniciales y/o parámetros del sistema que aseguren la convergencia a soluciones estacionarias, ni tampoco que den pistas sobre las tasas de convergencia.

Las cotas de la **Conjetura 4.4** para la distancia característica de los patrones, si bien parecen intuitivas, debido a que de existir una periodicidad emergente en un patrón, esta debe provenir desde los modos inestables, no es claro cómo a partir de una condición inicial aleatoria el sistema es capaz de converger a una distancia característica bien definida que asemeje un modo normal inestable. Más aún, debido a que para un conjunto de parámetros fijo es posible obtener multiplicidad de soluciones estacionarias, no es claro aún cómo la condición inicial interfiere en la elección de una distancia característica que respeta las cotas de inestabilidad lineal del sistema.

La forma novedosa de abordar el problema de distribución de máximos en patrones presentada en la **Conjetura 6.1** muestra ser una herramienta muy útil al momento de encontrar posibles soluciones estacionarias. Debido a que el sistema que se estudió no posee una solución explícita hasta el momento, da pie a una nueva herramienta para predecir las formas que pueden adoptar las soluciones estacionarias del sistema. Sería interesante inicialmente corroborar esta conjetura en dos dimensiones y entender sus alcances numéricos, para así estudiar más a fondo sistemas de ecuaciones que exhiban patrones más complejos.

Capítulo 7

Conclusiones y problemas abiertos

Algunas de las preguntas abiertas que deja esta tesis corresponde a los alcances de las 2 conjeturas que están en buen acuerdo con las simulaciones numéricas expuestas y cuál es el alcance que puede tener la **Conjetura 6.1** en 2 dimensiones, debido a que su respaldo sólo se ha constantado en dimensión 1. La teoría lineal es capaz de explicar de buena manera los fenómenos de reacción-difusión estudiados, tanto para soluciones estacionarias como para los comportamientos periódicos expuestas en el Apéndice. A largo plazo sería interesante llegar a una demostración formal o refutación de dichas conjeturas ya que no fue posible durante el periodo de Tesis.

Una interrogante que no logró ser respondida corresponde a entender por qué el funcional $F(u_G, v_G)$ es un buen candidato para predecir el comportamiento asintótico de la distribución de máximos. Incluso en el caso más simple, con condiciones de borde periódicas y sólo 2 concentraciones máximas, no es obvio como la distribución uniforme de máximos pueda minimizar dicho funcional o que su gradiente se anule en dicha distribución de máximos. El cálculo del gradiente de $F(u_G, v_G)$ se encuentra descrito en el Apéndice A para futuras demostraciones y avances. Adicionalmente, existen soluciones con una menor cantidad de máximos, soluciones mediadas por coalescencia de *spikes* tal como muestran las Fig. B.5 y B.6 que son predichos por el funcional $F(u_G, v_G)$ (como por ejemplo la Fig. 6.3), resultados que apoyan su uso. Queda abierta la posibilidad de seguir profundizando en el comportamiento teórico de las soluciones a lo largo del tiempo, y entender qué condiciones iniciales o conjuntos de parámetros son necesarios para converger a soluciones estacionarias tipo patrón.

Una pregunta que surgió durante la elección entre los modelos de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada o Schnakenberg con difusión cruzada corresponde los tipos de patrones que pueden formarse a partir de las condiciones iniciales. En el Anexo A es posible apreciar simulaciones numéricas con condiciones de borde periódicas para ambos modelos con condiciones iniciales de modos normales inestables de baja amplitud. Las Fig. A.3 y A.4 dejan la pregunta abierta sobre cuál es el mecanismo en que selecciona la periodicidad o distancia característica que obtendrá la solución final. El conjunto de parámetros corresponde a los mismos utilizados en Fig. 3.1 y 3.2, pero a pesar de eso, si el sistema posee una condición inicial correspondiente a un modo normal inestables puede preservar dicha periodicidad según muestra Fig. A.3, pero no es claro aún porqué esta no es preservada en Fig. A.4. Una posibilidad es que

de acuerdo a la **Conjetura 6.1** el funcional $F(u_G, v_G)$ del sistema posea multimplicidad de mínimos locales en 2 dimensiones tal como se muestra en Fig. 6.3, pero que ninguno sea acorde a la periodicidad de la condición inicial mostrada en Fig. A.4, explicación que recae en la demostración o refutación misma de la conjetura.

Similarmente, en Fig. A.5 y A.6, las condiciones iniciales para el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada también corresponden a modos normales inestables de baja amplitud. En Fig. A.6 la periodicidad no es preservada al igual que en Fig. A.4, e incluso es capaz de generar estructuras tipo línea, estructura que puede compararse con la estructura tipo laberinto expuesta en la Fig. 3.5. La pregunta que queda abierta acá es si es posible predecir el tipo de patrón final (sus características y accidentes) al cual puede converger sólo estudiando el comportamiento de sus modos normales inestables. Lo anterior puede entenderse en el siguiente sentido: ¿Es posible descomponer sus estructuras (líneas, términos de líneas, puntos, bifurcaciones, etc.) como una interacción de estructuras más simples a las que convergen los modos normales inestables? Ligado a lo anterior, para patrones más complejos como por ejemplo los obtenidos con el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada en Fig. 3.5, tampoco es conocido cómo el patrón estacionario distribuye sus accidentes (términos de línea, bifurcaciones y puntos) ni como la aparición de estos es afectada por la condiciones iniciales y los parámetros, por lo cual queda abierta la posibilidad de profundizar en este tipo de modelos.

Se encontró de manera fortuita que bajo ciertos conjuntos de parámetros el sistema es capaz de converger a soluciones periódicas homogéneas y que son concordantes con el análisis perturbativo. Sería interesante en un futuro profundizar sobre la aparición de soluciones periódicas homogéneas, estudiando si el lugar geométrico donde convergen las órbitas corresponde a un ciclo límite que pueda exhibir propiedades como doblamiento de periodo o intermitencia, de forma tal de abordar los modelos de reacción-difusión de una manera más amplia.

Queda abierto el problema de estudiar en profundidad el modelo con que se generó la Fig. 2.7 para entender sus propiedades, y posterior validación y perfeccionamiento como modelo de huellas dactilares.

Bibliografía

- [1] J. Silva et al. *Relationship Between the Epidermal and the Dermal Dactyloscopic Pattern*. Number 36(4), 1290-1297. INTERNATIONAL JOURNAL OF MOFPHOLOGY, 2018.
- [2] L. Zhu H. Zhao, Q. Zhang. *The spatial dynamics of a zebrafish model with crossdiffusions*. Mathematical Biosciences & Engineering, 2017.
- [3] M. Winter J. Wei. *Spikes for the two-dimensional Gierer-Meinhardt system: the weak coupling case*. Number 11, 415-458. Journal of Nonlinear Science., 2001.
- [4] M. Winter J. Wei. *Stationary multiple spots for reaction-diffusion systems*. Number 57, 53-89. Journal of mathematical biology., 2008.
- [5] M. Winter J. Wei. *Mathematical aspects of pattern formation in biological systems*. Number (Vol. 189). Springer Science Business Media., 2013.
- [6] M. Nkashama K. Antwi-Fordjour. *Global existence of solutions of the Gierer-Meinhardt system with mixed boundary conditions*. Number 8(06), 857. Applied Mathematics, 2017.
- [7] K. & K. Takahashi K. Masuda. *Reaction-diffusion systems in the Gierer-Meinhardt theory of biological pattern formation*. Number 4, 47-58. Japan Journal of Applied Mathematics., 1987.
- [8] M. Kücken. *Models for fingerprint pattern formation*. Number 171(2-3), 85-96. Forensic science international, 2007.
- [9] H. Meinhardt. *Models of biological pattern formation*. Springer, New York, 1982.
- [10] K. Tarumi & E. Mueller. *Wavelength selection mechanism in the Gierer-Meinhardt model*. Number 51(2), 207-216. Bulletin of mathematical biology., 1989.
- [11] J. D. Murray & J. D. Murray. *Mathematical Biology: II: Spatial Models and Biomedical Applications (Vol. 3)*. Springer., 2003.
- [12] M. Kücken & A. C. Newell. *Fingerprint formation*. Number 235(1), 71-83. Journal of theoretical biology, 2005.
- [13] T. E. Woolley P. K. Maini. *Turing's model for biological pattern formation and the robustness problem*. Number 2(4), 487-496. Interface focus, 2012.
- [14] E. Sandier & S. Serfaty. *Vortices in the magnetic Ginzburg-Landau model*. Springer Science Business Media., 2008.

- [15] S. Serfaty. *Coulomb gases and Ginzburg–Landau vortices*. 2015.
- [16] C. Sosa. *La regla de los doce puntos*.
- [17] N. S. Sutherland. *Outlines of a theory of visual pattern recognition in animals and man*. Number 171(1024), 297-317. Proceedings of the Royal society of London. Series B. Biological sciences, 1968.
- [18] I. Takagi. *Stability of bifurcating solutions of the Gierer-Meinhardt system*. Number 31(2), 221-246. Tohoku Mathematical Journal, Second Series., 1979.
- [19] I. Takagi. *A priori estimates for stationary solutions of an activator-inhibitor model due to Gierer and Meinhardt*. Number 34(1), 113-132. Tohoku Mathematical Journal, Second Series., 1982.
- [20] I. Takagi. *Point-condensation for a reaction-diffusion system*. Number 61(2), 208-249. Journal of differential equations., 1986.
- [21] A. M. Turing. *The chemical basis of morphogenesis*. Number 237, 37-72. Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series B, 1956.

Anexos

Anexo A

A.1. Soluciones homogéneas no estacionarias

Durante la búsqueda de parámetros para las simulaciones, al probar algunos al azar, se pudo apreciar que no siempre es posible converger a una solución estacionaria tipo patrón, sino que el sistema converge a una solución periódica homogénea. Consideremos la forma homogénea de las ecuaciones del modelo de Gierer-Meinhardt

$$\begin{cases} \partial_t u = R(a - bu + \frac{u^2}{v}), \\ \partial_t v = R(u^2 - v). \end{cases}$$

Dividiendo por v la ecuación para el inhibidor y restándola a la primera, se obtiene que

$$\partial_t(u - \ln(v)) = R(a - bu + 1),$$

luego, supondremos que $\bar{u} = u_0 + \bar{u}(t)$, donde

$$u_0 = \frac{(1 + a)}{b},$$

se obtiene la siguiente ecuación

$$\partial_t(\bar{u} - \ln(v)) = -Rb\bar{u}.$$

Reordenando

$$Rb\partial_t\bar{u} + \partial_t\bar{u} - \partial_t \ln(v) = 0,$$

que puede ser reescrita como,

$$e^{-Rbt}\partial_t(e^{Rbt}\bar{u}) = \partial_t(\ln(v)).$$

La Fig. A.1 muestra el comportamiento periódico de una solución homogénea. Se aprecia que la solución posee una periodicidad bien definida, y que \bar{u} oscila en torno a u_0 .

Ahora, también es posible encontrar las órbitas que genera este proceso. Dividiendo ambas ecuaciones, es posible reescribir las condiciones anteriores como órbitas (u, v) de forma que

$$\frac{\partial u}{\partial v} = \frac{a - bu + v}{u^2 - v} + 1.$$

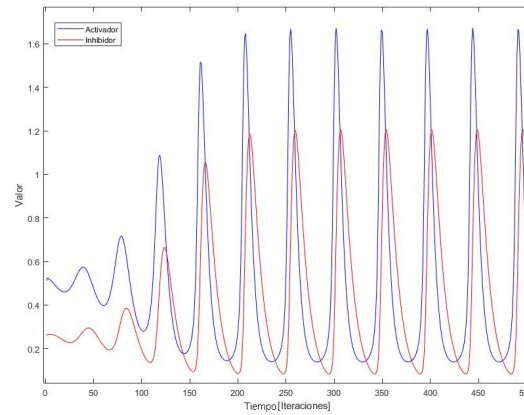


Figura A.1: Valores tomados por el activador u y el inhibidor v en una simulación numérica a través de las iteraciones partiendo de condiciones iniciales aleatorias en torno al equilibrio.

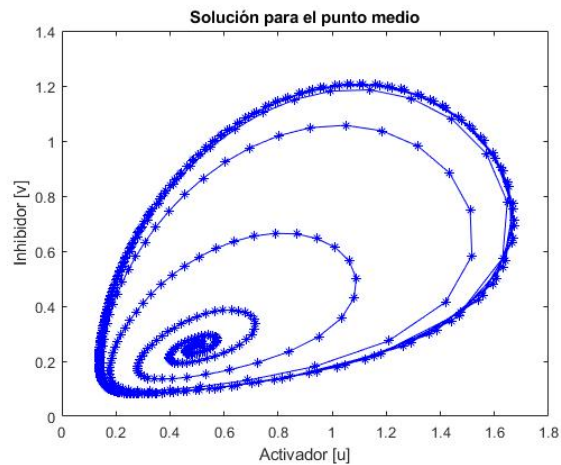


Figura A.2: Resultado de la simulación numérica para un conjunto de parámetros que exhiben soluciones homogéneas periódicas. Se aprecia que luego de alejarse de la condición inicial se acerca a una órbita que recuerda a un ciclo límite.

Esta órbita, está en buen acuerdo con las simulaciones numéricas

Este comportamiento puede ser explicado desde el punto de vista de la teoría lineal, donde el conjunto de parámetros es tal que los modos normales del sistema poseen parte imaginaria.

A.2. Casos notables en simulaciones

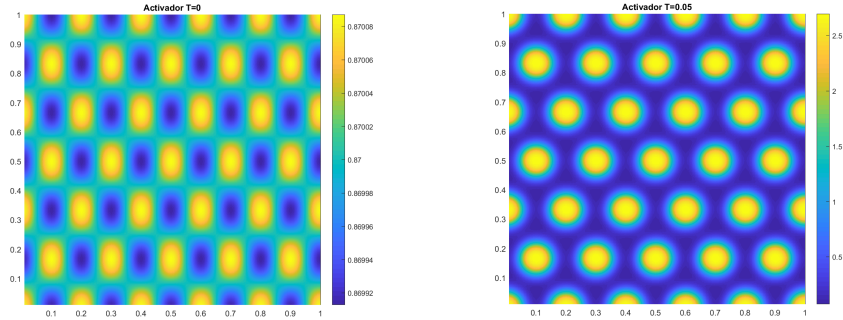


Figura A.3: Comparación entre la condición inicial y la solución final estacionaria a la que converge la simulación numérica con condiciones de borde periódicas para el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada. La condición inicial corresponde a un modo normal inestable del sistema (cumple la condición (4.3)) convergiendo a una solución con la misma periodicidad.

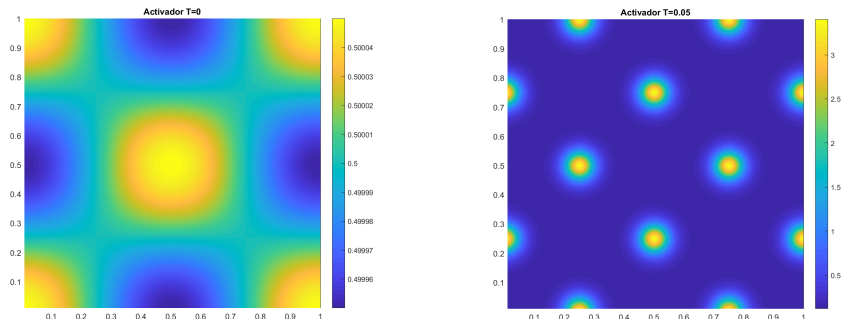


Figura A.4: Comparación entre la condición inicial y la solución final estacionaria a la que converge la simulación numérica con condiciones de borde periódicas para el modelo de Gierer-Meinhardt sin difusión cruzada. La condición inicial corresponde a un modo normal inestable del sistema (cumple la condición (4.3)) convergiendo a una solución con distinta periodicidad.

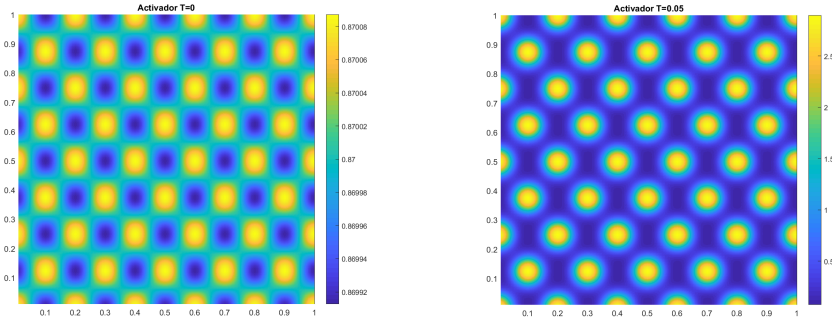


Figura A.5: Comparación entre la condición inicial y la solución final estacionaria a la que converge la simulación numérica con condiciones de borde periódicas para el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada. La condición inicial corresponde a un modo normal inestable del sistema (cumple la condición (4.3)) una solución con la misma periodicidad.

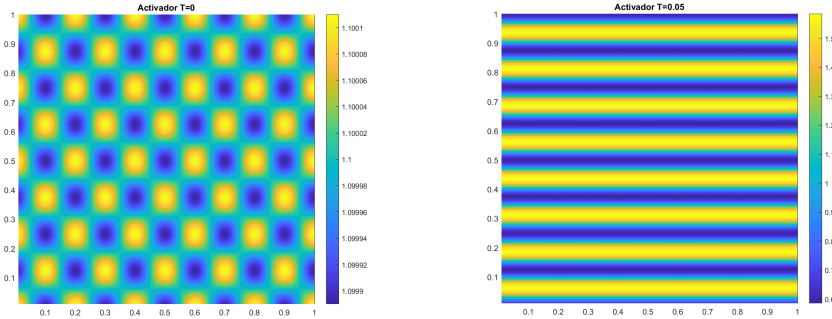


Figura A.6: Comparación entre la condición inicial y la solución final estacionaria a la que converge la simulación numérica con condiciones de borde periódicas para el modelo de Schnakenberg con difusión cruzada. La condición inicial corresponde a un modo normal inestable del sistema (cumple la condición (4.3)) convergiendo a una estructura distinta, y con periodicidad distinta a la inicial.

A.3. Gradiente de $F(u_G, v_G)$

Recordando del Capítulo 5 que las funciones u_G y v_G pueden ser reescritas como

$$v_G(x) = \alpha \sum_{k=0}^N v_k(x), \quad (\text{A.1})$$

donde

$$v_k(x) = ((A_v^{-1})_{2k,j}(L_v)_j \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right) + (A_v^{-1})_{2k+1,j}(L_v)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}x\right))1_{[x_k, x_{k+1}]}(x),$$

y que

$$u_G(x) = \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b}, \quad (\text{A.2})$$

donde

$$u_k(x) = \frac{1}{v_k(x_k)} ((A_u^{-1})_{2k,j}(L_u)_j \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right) + (A_u^{-1})_{2k+1,j}(L_u)_j \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}x\right)) \mathbb{1}_{[x_k, x_{k+1}]}(x),$$

junto con que las constantes

$$\mathcal{V}_p = \sum_{j=0}^{2(N+1)} (A_v^{-1})_{p,j}(L_v)_j,$$

$$\mathcal{U}_p = \sum_{j=0}^{2(N+1)} (A_u^{-1})_{p,j}(L_u)_j,$$

corresponden a las constantes que resuelven el sistema de Green aproximado, por tanto se tendrá que

$$A_p = \mathcal{V}_{2p},$$

$$B_p = \mathcal{V}_{2p+1},$$

$$E_p = \mathcal{U}_{2p},$$

$$F_p = \mathcal{U}_{2p+1},$$

Usaremos lo anterior para explicitar el funcional $F(u_G, v_G)$ y su derivada respecto a x_j

$$F(u_G, v_G) = -\left\| \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b} \right\|_{L^2(\Omega)} + \left\| \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right) - \ln(N) \right\|_{L^2(\Omega)}.$$

Reescribiendo cada una de las normas, se tiene que

$$\begin{aligned} \left\| \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right) - \ln(N) \right\|_{L^2(\Omega)} &= \sqrt{\left(\int_{\Omega} \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right)^2 - 2 \ln(N) \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right) + \ln(N)^2 \right)} \\ &= \sqrt{\left(\sum_{k=0}^N \int_{x_k}^{x_{k+1}} \ln(v_k(x))^2 - 2 \ln(N) \sum_{k=0}^N \int_{x_k}^{x_{k+1}} \ln(v_k(x)) + \ln(N)^2 |\Omega| \right)} \\ \left\| \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b} \right\|_{L^2(\Omega)} &= \sqrt{\left(\int_{\Omega} \left(\sum_{k=0}^N u_k(x) \right)^2 - 2 \frac{a}{b} \left(\sum_{k=0}^N u_k(x) \right) + \left(\frac{a}{b} \right)^2 \right)} \\ &= \sqrt{\left(\sum_{k=0}^N \int_{x_k}^{x_{k+1}} (u_k(x))^2 - 2 \frac{a}{b} \sum_{k=0}^N \int_{x_k}^{x_{k+1}} (u_k(x)) + \left(\frac{a}{b} \right)^2 |\Omega| \right)}. \end{aligned}$$

Al derivar respecto a alguno de los sitios de concentración x_j , usando integración por partes y cambios de variables, se llega a que

$$\partial_{x_j} \left\| \ln \left(\sum_{k=0}^N v_k(x) \right) - \ln(N) \right\|_{L^2(\Omega)} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\|v_G\|_{L^2}} \left(\sum_{k=0}^N \frac{\partial_{x_j} \mathcal{V}_{2k}}{2\mathcal{V}_{2k}} \left\{ \left[\frac{\ln \left(\mathcal{V}_{2k} \exp \left(2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) + \mathcal{V}_{2k+1} \right)}{2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}} \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left. -x \ln \left(\mathcal{V}_{2k} \exp \left(2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) + \mathcal{V}_{2k+1} \right) - \frac{\ln(N)}{\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}} \ln \left(\mathcal{V}_{2k} \exp \left(2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) + \mathcal{V}_{2k+1} \right) \right]_{x_k}^{x_{k+1}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \int_{x_k}^{x_{k+1}} \ln \left(\mathcal{V}_{2k} \exp \left(2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) + \mathcal{V}_{2k+1} \right) \right\} - \frac{\partial_{x_j} \mathcal{V}_{2k+1}}{2\mathcal{V}_{2k+1}} \left\{ \left[\frac{\ln \left(\mathcal{V}_{2k} + \mathcal{V}_{2k+1} \exp \left(-2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) \right)}{2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}} \right]_{x_k}^{x_{k+1}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + x \ln \left(\mathcal{V}_{2k} + \mathcal{V}_{2k+1} \exp \left(-2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) \right) - \frac{\ln(N)}{\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}} \ln \left(\mathcal{V}_{2k} + \mathcal{V}_{2k+1} \exp \left(-2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) \right) \right]_{x_k}^{x_{k+1}} \right. \\
&\quad \left. \left. \int_{x_k}^{x_{k+1}} \ln \left(\mathcal{V}_{2k} + \mathcal{V}_{2k+1} \exp \left(-2\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}} x \right) \right) \right\} \right).
\end{aligned}$$

$$\partial_{x_j} \left\| \sum_{k=0}^N u_k(x) + \frac{a}{b} \right\|_{L^2(\Omega)} =$$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{\|u_G\|_{L^2(\Omega)}} \sum_{k=0}^N \left\{ \partial_{x_j} \mathcal{U}_{2k} \left[\frac{\mathcal{U}_{2k}}{2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}} \exp \left(2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}} x \right) + \mathcal{U}_{2k+1} x + \frac{a \exp \left(2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}} x \right)}{b\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}} \right]_{x_k}^{x_{k+1}} \right. \\
&\quad \left. \partial_{x_j} \mathcal{U}_{2k+1} \left[\frac{\mathcal{U}_{2k+1}}{2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}} \exp \left(-2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}} x \right) - \mathcal{U}_{2k} x + \frac{a \exp \left(-2\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}} x \right)}{b\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}} \right]_{x_k}^{x_{k+1}} \right\}.
\end{aligned}$$

Anexo B

B.1. Concentraciones en bordes

B.1.1. Función de Green aproximada para sistemas con condiciones de borde Neumann nulas y concentraciones máximas en frontera

Una desventaja de las condiciones de borde Neumann nulas es la aparición de concentraciones máximas en los bordes, las cuales pueden ocurrir dado que la solución numérica exhibe la regularidad esperada, regularidad acorde a los teoremas mencionados en el Capítulo 3. Como es el caso mostrado en Fig. 5.1, el sistema de Green aproximado no pueda cerrar su sistema de ecuaciones por falta de condiciones de borde, ya que las deltas de Dirac no pueden posicionarse, de acuerdo a este marco teórico, en la frontera del dominio. Para soslayar este problema, impondremos una condición artificial, pero acorde a las soluciones tipo *spike*. Dado que las soluciones locales son continuas y estarán definidas en todo \mathbb{R} , consideraremos el problema de condiciones de borde Neumann nulas en un dominio reducido y extenderemos los dominios de las funciones de la siguiente manera:

Si existe concentración máxima en $x = 0$, entonces se resolverá el sistema de Green aproximado con condiciones de borde Neumann nulas sobre el dominio $\bar{\Omega} = \left[\frac{x_1}{2}, 1\right]$ y extenderemos las soluciones u_0 y v_0 en el dominio $I_0 = \left[0, \frac{x_1}{2}\right]$.

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\partial_{xx}u_G + R\left(a - bu_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G}\right), & x \in \left[\frac{x_1}{2}, 1\right], \\ 0 = D_{vv}\partial_{xx}v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \left[\frac{x_1}{2}, 1\right], \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & x \in \partial \left[\frac{x_1}{2}, 1\right]. \end{cases}$$

Si en cambio existe concentración máxima en $x = 1$, entonces resolveremos el sistema de Green aproximado con condiciones de borde Neumann nulas en el dominio reducido $\bar{\Omega} = \left[0, \frac{x_N + 1}{2}\right]$ y extenderemos las soluciones u_N y v_N en el intervalo $I_{N+1} = \left[\frac{x_N + 1}{2}, 1\right]$.

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\partial_{xx}u_G + R \left(a - bu_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G} \right), & x \in \left[0, \frac{x_N + 1}{2} \right], \\ 0 = D_{vv}\partial_{xx}v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \left[0, \frac{x_N + 1}{2} \right], \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & x \in \partial \left[0, \frac{x_N + 1}{2} \right]. \end{cases}$$

Se subentiende que si existe concentración en ambos extremos, se resolverá el sistema de Green aproximado con condiciones de borde Neumann nulas sobre $\bar{\Omega} = \left[\frac{x_1}{2}, \frac{x_N + 1}{2} \right]$ y se extenderá de la manera señalada las soluciones u_0 y v_0 en el dominio a $I_0 = \left[0, \frac{x_1}{2} \right]$ y las soluciones u_N y v_N en el intervalo $I_{N+1} = \left[\frac{x_N + 1}{2}, 1 \right]$.

$$\begin{cases} 0 = D_{uu}\partial_{xx}u_G + R \left(a - bu_G + \sum_{i \in [N]} \frac{\alpha\delta(x - x_i)}{v_G} \right), & x \in \left[\frac{x_1}{2}, \frac{x_N + 1}{2} \right], \\ 0 = D_{vv}\partial_{xx}v_G + R(\sum_{i \in [N]} \alpha\delta(x - x_i) - v_G), & x \in \left[\frac{x_1}{2}, \frac{x_N + 1}{2} \right], \\ \partial_n u = \partial_n v = 0, & x \in \partial \left[\frac{x_1}{2}, \frac{x_N + 1}{2} \right]. \end{cases}$$

Por lo tanto, para cerrar el sistema de ecuaciones del inhibidor v_G se impondrá

$$\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}(A_0 \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\frac{x_1}{2}\right) - B_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\frac{x_1}{2}\right)) = 0,$$

si es que existe una concentración máxima en $x = 0$, y

$$\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}(A_N \exp\left(\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\frac{(x_N + 1)}{2}\right) - B_N \exp\left(-\sqrt{\frac{R}{D_{vv}}}\frac{(x_N + 1)}{2}\right)) = 0,$$

si la concentración máxima aparece en $x = 1$.

Para el activador u_G se impondrá de forma equivalente

$$\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}(E_0 \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\frac{x_1}{2}\right) - F_0 \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\frac{x_1}{2}\right)) = 0,$$

si hay concentración máxima en $x = 0$ y

$$\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}(E_N \exp\left(\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\frac{(x_N + 1)}{2}\right) - F_N \exp\left(-\sqrt{\frac{Rb}{D_{uu}}}\frac{(x_N + 1)}{2}\right)) = 0,$$

si hay concentración máxima en $x = 1$.

Nota: Cabe notar que para los dominios reducidos $\bar{\Omega}$ siguen existiendo N deltas de Dirac en su interior.

B.1.2. Comparación de simulación numérica versus solución de Green aproximada

Con la condición de dominio reducido (o frontera móvil), la simulación numérica y la solución analítica (u_G, v_G) , tal como se muestra en Fig. B1, se encuentran en buen acuerdo lejos de la concentración, exhibiendo un comportamiento similar a los mostrados en Fig. 5.3 y Fig. 5.4., por tanto la condición artificial pensada para cerrar el sistema está en buen

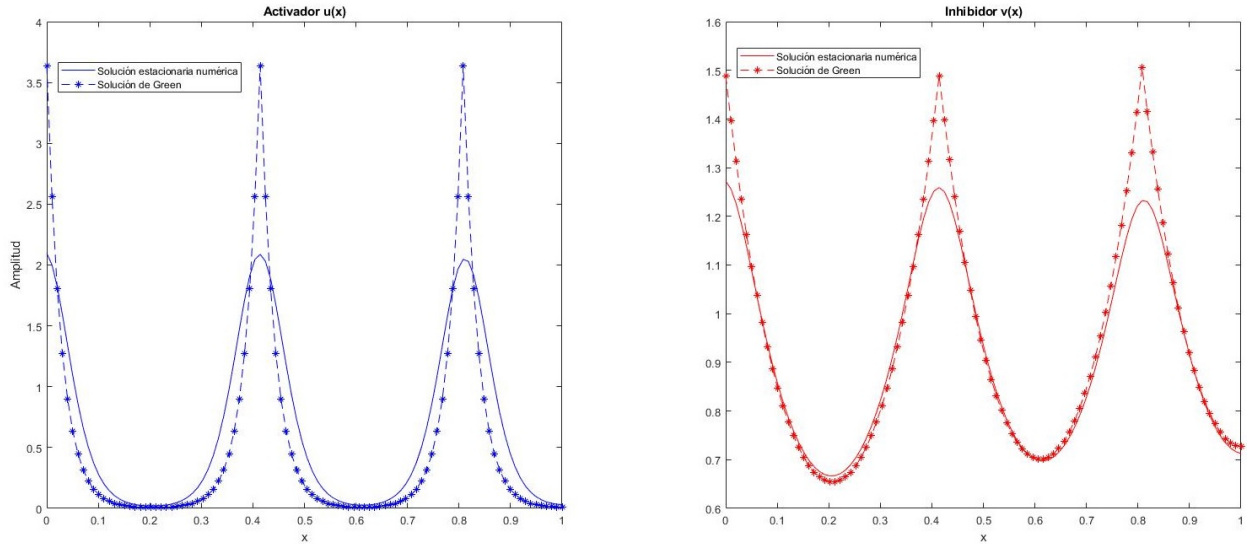


Figura B.1: Comparación de la solución numérica obtenida de una simulación a partir de condiciones iniciales aleatorias (curvas sólidas) y sus correspondientes funciones de Green aproximadas (curva segmentada), para $R = 1000$, $D_{vv} = 20$ y condiciones de borde Neumann nulas. Se obtuvo (u_G, v_G) con las condiciones expuestas en la Sección B.1.1.

acuerdo con el objetivo propuesto. Estas soluciones analíticas serán utilizadas para validar la **Conjetura 6.1** enfocado en sistemas con concentraciones en frontera.

B.1.3. Funcional $F(u_G, v_G)$ para concentraciones en frontera

Dado que el problema de concentraciones en frontera no puede ser tratado directamente con deltas de Dirac en el borde y se ha propuesto una resolución en un dominio reducido, la forma que pueden adoptar las soluciones (u_G, v_G) varía en cada caso, y por tanto se obtienen diferentes funcionales $F(u_G, v_G)$, pero que son capaces de generar muy buenas predicciones sobre la distribución de máximos extendiendo lo desarrollado en los Capítulos 5 y 6.

Los gráficos de los recuadros inferiores de Fig. B.2 corresponden al valor del funcional $F(u_G, v_G)$ calculándose de la siguiente manera: Para resolver el caso $R = 700$ se utilizaron condiciones de borde Neumann nulas en ambos extremos ($x = 0$ y $x = 1$) para calcular (u_G, v_G) , mientras que para $R = 1000$ se utilizaron las condiciones de dominio reducido para calcular (u_G, v_G) , volviéndolo un problema de optimización con frontera móvil, siendo su frontera móvil $x = \frac{x_1}{2}$ y por tanto condiciones de borde Neumann nulas en su dominio

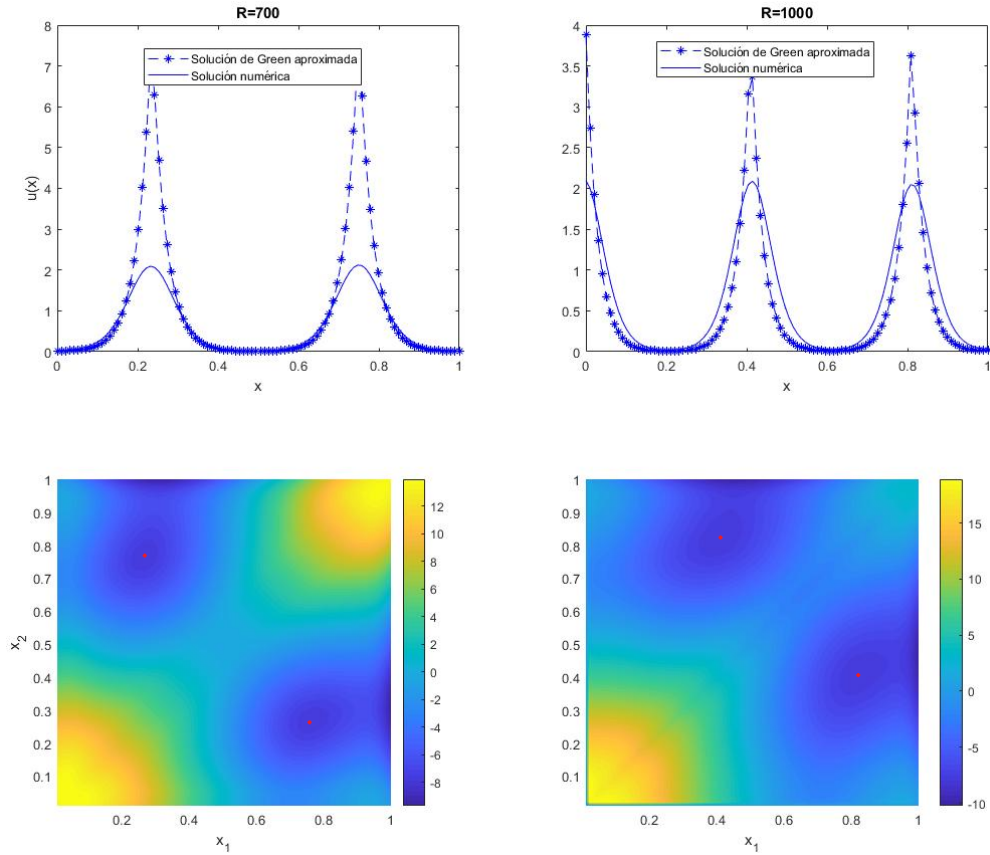


Figura B.2: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de la posición de las concentraciones máximas (recuadros inferiores) para $R = 700$ (recuadros izquierdos) y $R = 1000$ (recuadros derechos). Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

reducido ($x = \frac{x_1}{2}$ y $x = 1$). Las posiciones de las concentraciones x_1 y x_2 están restringidas a moverse sólo en el interior del intervalo en ambos casos. Se aprecia que para $R = 700$, existe un mínimo local cuando $x_1 \sim 0,25$ y $x_2 \sim 0,75$, posiciones que están en buen acuerdo con su recuadro superior correspondiente. Para $R = 1000$, se utilizaron las condiciones descritas en B.1.1, llegando a que el funcional muestra un mínimo local para $x_1 \sim 0,4$ y $x_2 \sim 0,8$, lo cual es concordante con la simulación numérica en el recuadro superior correspondiente. Las soluciones numéricas graficadas con línea sólida en los recuadros superiores fueron obtenidas simulando a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas en $x = 0$ y $x = 1$ en ambos casos.

Para corroborar si el funcional planteado es capaz de predecir el número de concentraciones máximas para un set de parámetros fijo, se resuelve (u_G, v_G) en cada uno de los casos para un set de parámetros fijos:

- 2 concentraciones en el interior sin concentraciones en los bordes
- 2 concentraciones en el interior más 1 en el borde
- 2 concentraciones en el interior más 1 en cada borde

obteniéndose la Fig. B.3.

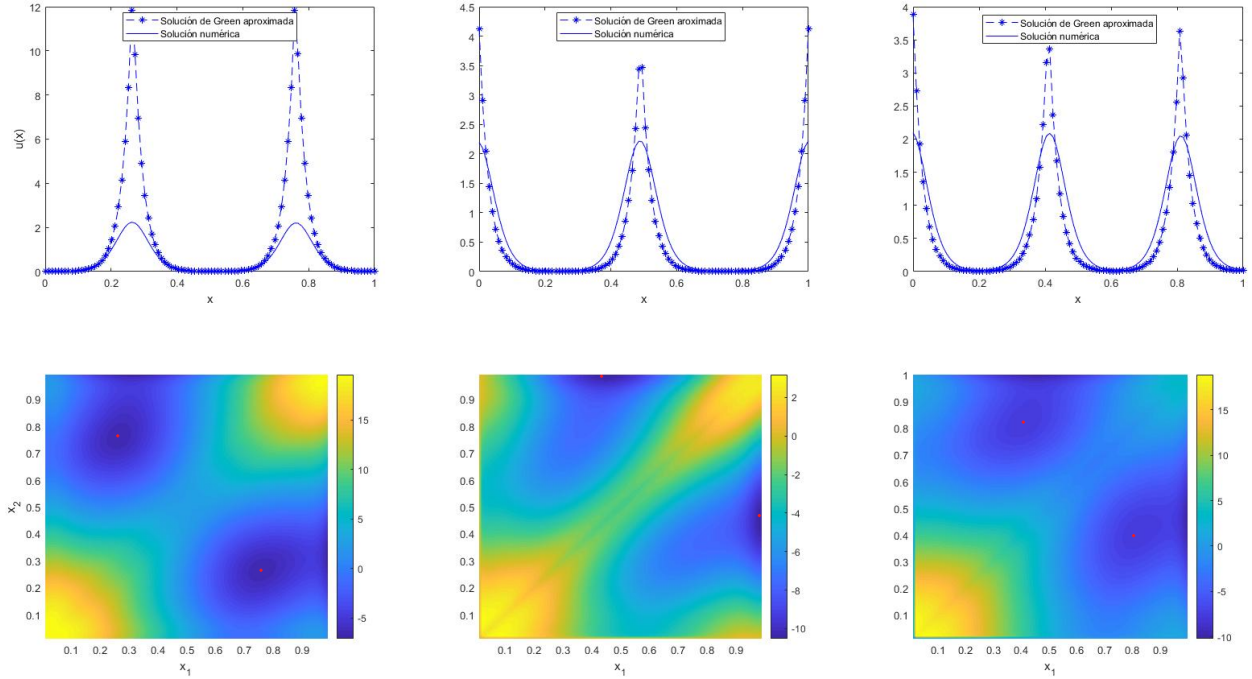


Figura B.3: Recuadros superiores: soluciones estacionarias para el sistema de Gierer-Meinhardt para $R = 1000$ y $D_{vv} = 20$ con condiciones de borde Neumann nulas y condición inicial perturbativa en torno al equilibrio (curvas sólidas) comparadas con sus funciones de Green aproximadas correspondientes en cada caso (curvas segmentadas). Recuadros inferiores: Funcional $F(u_G, v_G)$ para 2 concentraciones máximas libres en el interior resuelto según lo establecido en la subsección 5.2.2 (recuadro izquierdo) y según lo establecido en la subsección B.1.1 (recuadro central y derecho correspondientemente en cada caso de frontera móvil), donde se aprecia que el mínimo local corresponde a las posiciones de los máximos en cada caso. Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

Se aprecia que los argumentos de los mínimos locales, en los casos de ninguna concentración máxima en el borde (recuadros izquierdos) y una concentración máxima en un borde (recuadros derechos), son concordantes con las posiciones de los máximos en las simulaciones numéricas correspondientes, mientras que para el caso de 1 concentración máxima en cada extremo (recuadros centrales) el funcional exhibe un mínimo local cuando una de las concentraciones libres está en $x = 1,0$ y la otra en $x = 0,5$, lo cual quiere decir que una de estas concentraciones libres debe coalescer con otra de los bordes, dejando una única concentración en el interior (similar efecto al reportado en la Fig. 6.1 para condiciones de borde periódica y $R = 1000$).

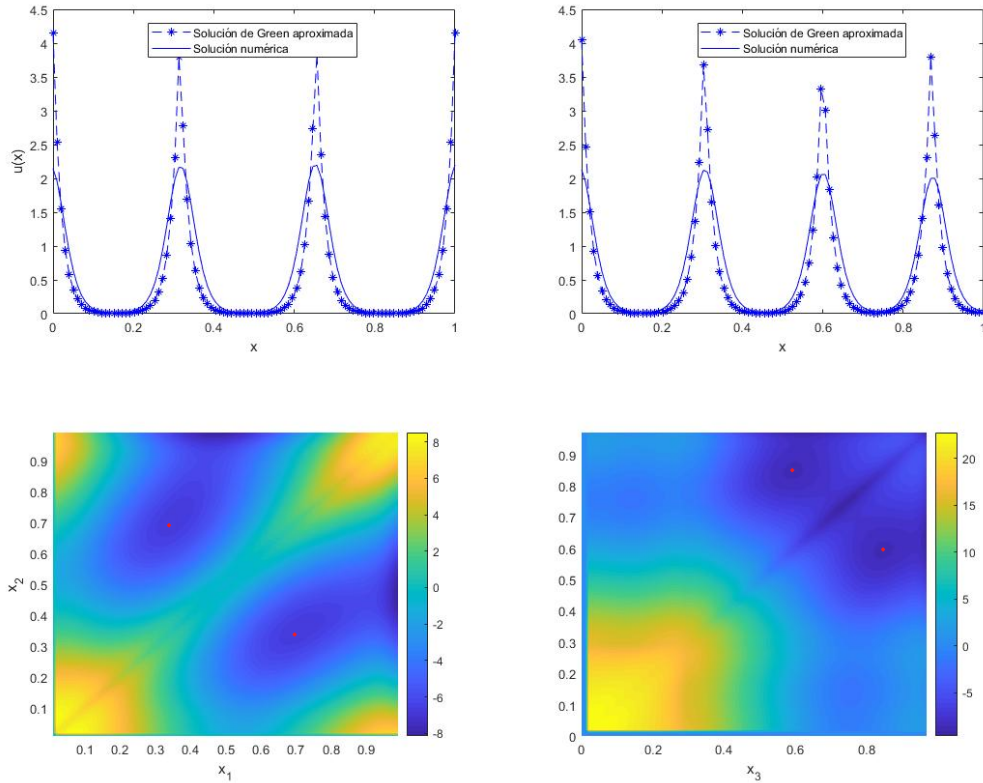


Figura B.4: Soluciones estacionarias simuladas a partir de condiciones iniciales aleatorias y condiciones de borde Neumann nulas (curvas sólidas de los recuadros superiores) comparadas con sus funciones de Green aproximadas (curvas segmentadas de los recuadros superiores) y funcional $F(u_G, v_G)$ en función de la posición de las concentraciones máximas (recuadros inferiores) para $R = 2000$. Los recuadros izquierdos corresponden a simular 2 concentraciones máximas libres en el interior, mientras que los recuadros derechos corresponden a 3 concentraciones máximas libres en el interior, del cual se encontró que el único mínimo local en el interior se encuentra cuando $x_1 = 0,30$, siendo el cuadro inferior derecho un plano de nivel de $F(u_G, v_G)$. Se ha marcado con rojo el mínimo local que ha sido graficado con líneas segmentadas en los recuadros superiores correspondientes, donde se subentiende que la solución es simétrica respecto a intercambio de las concentraciones libres x_i .

Ahora se desea ver si la **Conjetura 6.1** puede predecir distribución de *spikes* para $N > 2$ con concentraciones en frontera. En la Fig. B.4 se muestran soluciones estacionaras para $R = 2000$ y $D_{vv} = 20$, que pueden exhibir 2 máximos interiores con concentraciones máximas en ambos extremos (recuadro superior izquierdo) o 3 máximos interiores con una concentración máxima en uno de los extremos (recuadro superior derecho). El funcional $F(u_G, v_G)$ muestra un mínimo local en $x_1 = 0,31$ y $x_2 = 0,68$ cuando $N = 2$ (recuadro inferior izquierdo), mientras que al minimizar globalmente $F(u_G, v_G)$ para $N = 3$, se aprecia que existe un mínimo global para $x_1 = 0,30$, $x_2 = 0,60$ y $x_3 = 0,87$ (recuadro inferior derecho). En el recuadro inferior derecho se muestra $F(u_G, v_G)$ en un plano de nivel cuando $x_1 = 0,30$, siendo este mínimo consistente con las simulaciones numéricas del recuadro superior. No se observan otros mínimos al interior para $x_1 \neq 0,30$ salvo permutaciones en las posiciones de las concentraciones, validando la **Conjetura 6.1**.

B.2. Distancia de coalescencia

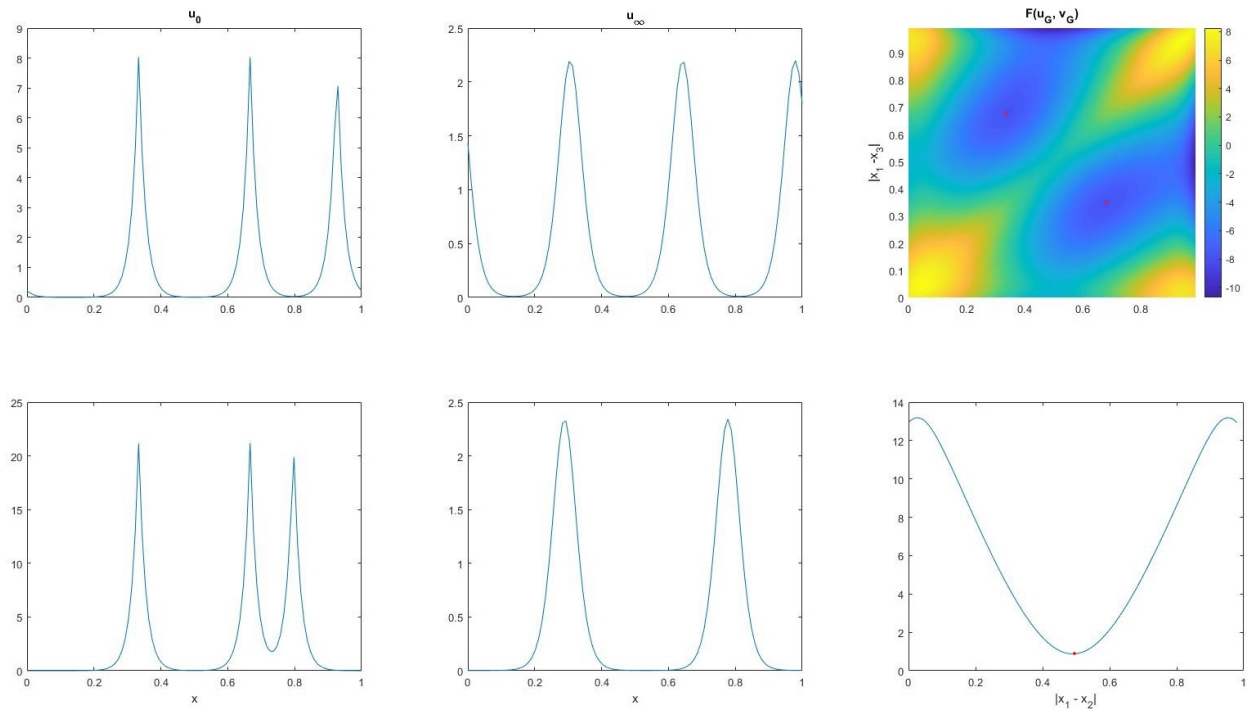


Figura B.5: Condiciones iniciales (gráficos del lado izquierdo), soluciones finales estacionarias (gráficos centrales) y $F(u_G, v_G)$ correspondiente (gráficos del lado derecho). Se aprecia que para el primer caso (paneles superiores) la solución final corresponderá a 3 máximos equidistantes distribuidos de acuerdo a $\operatorname{argmin}_{x_i, i \in [3]} \{F(u_G, v_G)\}$, mientras que para el segundo caso (paneles inferiores) la solución final corresponde a 2 máximos distribuidos de acuerdo a $\operatorname{argmin}_{x_i, i \in [2]} \{F(u_G, v_G)\}$, fusionando los máximos más cercanos.

Después de obtener un amplio espectro de simulaciones, se estudió brevemente la posibilidad de hacer coalescer 2 soluciones tipo *spike*. Dependiendo de los parámetros es posible ver que existe una distancia de coalescencia entre 2 *spikes*, la cual depende del tipo de condición de borde utilizada, el número de *spikes* totales involucradas y la presencia o ausencia de concentraciones en la frontera (la cual es sólo aplicable al caso de condiciones Neumann nulas), formando una solución estacionaria con una menor cantidad de máximos, la cual es también respaldada por el mínimo del funcional $F(u_G, v_G)$. Esta inquietud surge de las simulaciones numéricas en 2 dimensiones, donde se apreció inicialmente que el sistema es capaz, en presencia de una condición inicial con muy pocas (o demasiadas) *spikes* y no correspondiente a una solución estacionaria del sistema, generar (o fusionar) estas *spikes* cuando la distancia entre máximos es muy grande (o muy pequeña). A su vez, el funcional $F(u_G, v_G)$, en los casos estudiados, siempre presenta un mínimo local en la frontera del conjunto de parámetros, haciendo intuir la existencia de una distancia de coalescencia entre máximos.

En Fig. B.5 se aprecia que debe existir una distancia crítica para que 2 máximos coalescan en condiciones de borde periódico, debido a que cuando la condición inicial corresponde a que 2 máximos se encuentren lo suficientemente cerca, el sistema evolucionará a una solución estacionaria con un menor número de máximos, el cual puede ser explicado a través del fun-

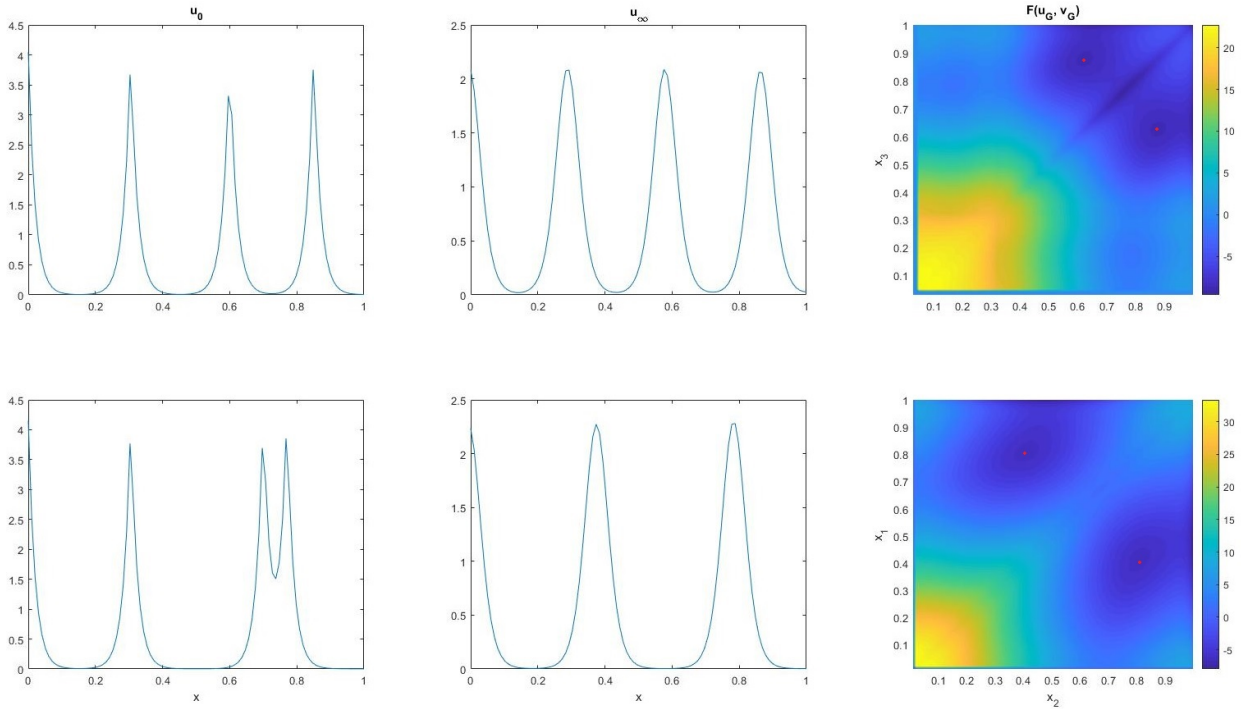


Figura B.6: Condiciones iniciales (gráficos del lado izquierdo) y soluciones finales estacionarias (gráficos de lado derecho) para 4 concentraciones máximas, 2 de estas (las 2 más cercanas a $x = 1$) colocadas a distintas distancias relativas. Se aprecia que para el primer caso (paneles superiores) la solución final preserva la cantidad de máximos iniciales, distribuyéndolos en las posiciones de $\operatorname{argmin}_{x_i, i \in [3]} \{F(u_G, v_G)\}$ con concentración en $x = 0$, mientras que para el segundo caso (paneles inferiores) 2 de los máximos más cercanos coalescen convergiendo a las posiciones de $\operatorname{argmin}_{x_i, i \in [2]} \{F(u_G, v_G)\}$ con concentración en $x = 0$.

cional $F(u_G, v_G)$ propuesto, mientras que, si estos máximos se encuentran lo suficientemente alejados, el sistema evolucionará a una solución estacionaria con sus posiciones correspondiente a una solución estacionaria con 3 máximos tal como se ha visto en las simulaciones. El caso anterior corresponde a parámetros $R = 2000$ y $D_{vv} = 20$ con condiciones de borde periódicas, y condiciones iniciales correspondientes a funciones (u_G, v_G) resueltas como se muestra en el Capítulo 5. Como el funcional $F(u_G, v_G)$ posee también un mínimo local cuando los dos máximos libres coalescen dejando sólo 2 máximos en el interior del dominio, produce que esta evolución del sistema pueda ser explicada a través de la **Conjetura 6.1**.

Al igual que en las condiciones de borde periódicas, debe existir una distancia crítica para que 2 máximos coalescan en el caso de condiciones de borde Neumann nulas, tal como se muestra en la Fig. B.6. En este caso los parámetros son $R = 2000$ y $D_{vv} = 20$, y la condición inicial corresponde a funciones (u_G, v_G) resueltas para el caso de concentración en frontera en $x = 0$. tal como se explicita en la sección B.1.1. Se aprecia que la concentración en frontera se preserva en la solución estacionaria a la que converge el sistema, separando 2 de los máximos y llevándolos a su posición de equilibrio como muestran los recuadros superiores, o haciendolos coalescer en el caso mostrado en los recuadros inferiores. Nuevamente, ambas soluciones estacionarias son concordantes con la **Conjetura 6.1**. La coalescencia de *spikes* es por tanto un comportamiento robusto independiente de las condiciones de borde.