



Influencia de la curvatura en la formación de patrones: el mecanismo de Turing en el círculo

Influence of curvature on pattern formation: Turing mechanism in the circle

M. Núñez-López ^{a,*}, G. Chacón-Acosta ^b

^aDepartamento de Matemáticas, Instituto Tecnológico Autónomo de México, Rio Hondo No. 1, 01080, Ciudad de México, México.

^bDepartamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas, Universidad Autónoma Metropolitana-Cuajimalpa. Av. Vasco de Quiroga No. 4871, 05348, Ciudad de México, México.

Resumen

En este trabajo estudiamos la influencia de la curvatura del medio sobre la formación de patrones mediante el mecanismo de inestabilidad de Turing generada por difusión. Para analizar el efecto de la curvatura consideramos la variedad curva cerrada más simple, una circunferencia. Presentamos el operador de Laplace-Beltrami, que es la generalización del Laplaciano sobre variedades, con el fin de resolver la ecuación de difusión y describir las modificaciones que induce la curvatura en la función de distribución y en el camino cuadrático medio. Como un caso particular de estudio empleamos el modelo de Gierer-Meinhardt. Se muestra que el rango de modos inestables donde será posible hallar los patrones espacio-temporales depende del radio y, por lo tanto, de la curvatura del círculo específico.

Palabras Clave: Patrones de Turing, reacción-difusión, variedades de curvas

Abstract

In this work, we study the influence of the curvature of the medium on the formation of patterns through the Turing mechanism of instability guided by diffusion. To analyze the effect of the curvature, we consider the simplest closed curve variety, a circumference. We present the Laplace-Beltrami operator, which is the generalization of the Laplacian on manifolds, to solve the diffusion equation and describe the modifications that the curvature induces on the distribution function and the mean square displacement. As a particular case of study, we use the Gierer-Meinhardt model. It is shown that the range of unstable modes where it will be possible to find the spatio-temporal patterns depends on the radius and, therefore, on the specific circle's curvature.

Keywords: Turing patterns, reaction-diffusion, curve manifolds

1. Introducción

Los patrones ordenados, ya sean espaciales o temporales se han observado en una gran variedad de sistemas y en la literatura podemos encontrar muchos modelos matemáticos que se han planteado para describir este tipo de fenómenos. Turing (Turing, 1952) fue quién propuso el primer modelo para explicar la aparición de patrones estacionarios en el contexto de la morfogénesis, es decir, el desarrollo de órganos en el crecimiento celular. En este proceso se asume la existencia de sustancias químicas, llamados morfógenos, que pueden reaccionar y que se transportan por difusión en el medio correspondiente. Se requiere de dos especies, una de ellas es el llamado activador que se produce a partir de una reacción autocatalítica, y su difusión

en el medio es lenta, el otro agente es llamado inhibidor ya que su efecto es detener la producción del activador, pero su difusión es más rápida que la del activador. Turing mostró que un sistema de reacción-difusión con estas características, definido en un dominio espacial cerrado y con ciertos valores apropiados de sus parámetros, evoluciona hacia un patrón espacial heterogéneo dadas pequeñas perturbaciones a las concentraciones del estado estacionario. A este mecanismo se le conoce como *inestabilidad impulsada por la difusión*. En este sentido, el proceso de difusión adopta un nuevo papel, contrario a la concepción clásica de estabilidad, donde la difusión lleva al sistema hacia el estado estacionario homogéneo. En los sistemas reacción-difusión el estado estacionario del sistema se mantiene,

*Autor para correspondencia: mayra.nunez@itam.mx.

Correo electrónico: mayra.nunez@itam.mx (Mayra Núñez-López), gchacon@cua.uam.mx (Guillermo Chacón-Acosta).

incluso ante pequeñas perturbaciones, si el proceso de difusión no es relevante, pero se vuelve inestable cuando la difusión es importante (Murray, 2003). Los modelos de reacción-difusión se han estudiado en biología del desarrollo, ya que explican varios fenómenos naturales como la formación de tejidos, crecimiento de tumores (Chaplain et al., 2001; Gatenby and Gawlinski, 1996), también en dinámica de poblaciones a través de las interacciones presa-depredador (Brigatti et al., 2011), o en la propagación de epidemias (Webb, 1981; Capasso and Wilson, 1997; Liu et al., 2011), entre otros. Asimismo, el mecanismo de Turing ha demostrado tener una influencia que va más allá de los sistemas biológicos, logrando aplicarse con éxito en sistemas geológicos (Ball, 2015), en formaciones vegetales en los desiertos (Getzin et al., 2016), en sistemas nanométricos (Fussey et al., 2021) e incluso en sistemas sobre redes complejas tales como las redes sociales (Mimar et al., 2019).

Por lo general, el análisis de la formación de estos patrones se realiza en un plano con ciertas fronteras definidas, por ejemplo, en un cuadrado. Sin embargo, cuando el dominio de definición del sistema es una superficie que no es plana, su curvatura influye en la evolución de los fenómenos que ocurren sobre ella. De hecho, hay estudios de cómo la curvatura de una membrana celular influye en la funcionalidad de los procesos específicos que se producen en ella y también la reacción inversa, es decir, cómo los procesos de la membrana influyen en la forma y curvatura de la misma (Ramakrishnan et al., 2014). De esta manera, el hecho de que el sustrato esté curvado inducirá un efecto sobre el mecanismo con el cual interactúan los morfógenos, dando como resultado la modificación visible de las condiciones de inestabilidad impulsada por la difusión, del rango de modos inestables (Núñez-López et al., 2017), de los patrones mismos, el tiempo que tardan en emerger, su forma, extensión y demás características, (León-Velasco and Chacón-Acosta, 2021). Ciertamente, los sistemas que presentan patrones en superficies curvas son bastante comunes tanto en la física de materia condensada como en biología celular en la dinámica de vesículas elásticas (van Meer et al., 2008; Sens and Turner, 2011; Amazon et al., 2013).

Este problema fue abordado por primera vez por el propio Turing en 1952 (Turing, 1954), donde muestra la importancia de este tipo de sistemas en superficies curvas. Según Turing, entre los posibles organismos que exhiben patrones de simetría esférica está el microorganismo unicelular marino llamado *radiolaria*, que tiene alrededor de un milímetro de diámetro, y presenta pequeñas espinas radiales que sobresalen de su esqueleto. Estos modelos podrían determinar el orden y la disposición de las formas y patrones del esqueleto y las espinas de este organismo. En algunas referencias como en (Varea et al., 1999; Liaw et al., 2001) se muestra que, para superficies curvas cerradas como la esfera, la geometría impone algunas restricciones sobre la forma del patrón, donde la posición de los patrones está fuertemente relacionada con la curvatura de la superficie. A través de experimentos numéricos también se ha visto que ciertos patrones prefieren regiones del dominio que tengan cierta curvatura, cuando existe un acoplamiento mínimo entre la dinámica de la superficie y las sustancias que se difunden. Por ejemplo, la aparición de manchas o lunares ocurre en regiones de baja curvatura, mientras que las rayas se favorecen en regiones con curvatura más alta (Vandin et al., 2016).

Además de la curvatura del dominio se han estudiado otros procesos, como la advección y el crecimiento, que influyen en la formación de patrones con el mecanismo de inestabilidad guiada por difusión. Por ejemplo, en el transporte de los morfógenos puede sumarse un flujo advectivo, cuyo efecto es la aparición de fuentes y sumideros que contribuyen a la formación de patrones sobre la esfera, (Krause et al., 2018). Un proceso que ha demostrado ser biológicamente relevante es el crecimiento del dominio y su interacción con la curvatura. En (Plaza et al., 2004; Gjorgjieva and Jacobsen, 2007) se analizaron regiones curvas generales en una y dos dimensiones con crecimiento exponencial, esto implica que todos los parámetros del modelo, incluida la curvatura, cambian con el tiempo y, por tanto, es importante el uso de soluciones numéricas. Se encontró que la forma en que los patrones cambian, aparecen o permanecen estables depende de la curvatura de la superficie y de la tasa de crecimiento, de hecho se ha visto que la tasa y el tipo de crecimiento pueden cambiar significativamente el patrón final, (Krause et al., 2019). Para dominios curvos crecientes se ha estudiado más allá de la teoría lineal, por ejemplo, como la inestabilidad de Hopf que da lugar a patrones espaciales y oscilantes, (Sánchez-Garduño et al., 2019).

También se han estudiado membranas delgadas modeladas como objetos tridimensionales, donde la curvatura y el espesor están acoplados entre sí y con las constantes de reacción, lo que da lugar a una cinética compleja dependiente del espacio.

En este caso se ha visto que un cambio en el espesor puede estabilizar los modos inestables (Nampoothiri, 2016). De hecho, se ha realizado un esfuerzo considerable para resolver ecuaciones de reacción-difusión en superficies curvas desarrollando diferentes métodos numéricos, particularmente en métodos basados en kernels que evitan algunos problemas de singularidad en las coordenadas, con el fin de resolver ecuaciones de formación de patrones en superficies lisas no regulares (Fuselier and Wright, 2013). La predicción teórica y la caracterización experimental de las transiciones que rompen la simetría asociadas con la curvatura de las superficies elásticas bicapa se han realizado recientemente, esta describe la morfología de los patrones y cómo se pueden seleccionar diferentes patrones de arrugas en términos de la tensión que curva la superficie (Stoop et al., 2015; Zhu et al., 2021).

Por otra parte, si la función de distribución de una de las especies del sistema de reacción-difusión se reemplaza por una función que modela la curvatura de la superficie, entonces se ha observado que también se generan patrones espacio-temporales, pero considerando que las regiones donde aparece el patrón químico inducen cambios en la curvatura de la superficie. Estos efectos se han visto experimentalmente en la mecánica de los tejidos celulares. A estos sistemas se les ha llamado patrones mecano-químicos (Brinkmann et al., 2018), y es una de las aplicaciones más prometedoras de esta interacción de la curvatura con los sistemas reacción-difusión.

Dada la relevancia que tiene la curvatura en los procesos de formación de patrones, en este trabajo presentamos el mecanismo de inestabilidad de Turing generada por difusión sobre la variedad curva cerrada más simple, una circunferencia. Esperamos que el lector interesado en estos temas pueda encontrar en este trabajo una introducción al mecanismo de formación de patrones, a los procesos de difusión sobre variedades curvas, y

al efecto que introducen los efectos geométricos sobre los sistemas reacción-difusión.

La estructura de este trabajo es la siguiente. En la sección 2 se estudia la ecuación de difusión en variedades curvas. Se deriva primero el operador de Laplace-Beltrami que reemplaza al Laplaciano ordinario, en seguida, se estudia el caso de la circunferencia y se resuelve la ecuación de difusión encontrando los primeros efectos de la curvatura, tanto en la función de distribución, como en el camino cuadrático medio. En la sección 3 se estudian los sistemas reacción-difusión en general y sobre el círculo. Aquí se presenta una reacción específica, la de Gierer-Meinhardt. Se encuentran las condiciones de Turing y se muestra que el rango de modos inestables, donde será posible hallar los patrones espacio-temporales, depende de las características del círculo donde se lleva a cabo el proceso, en específico, depende de su curvatura. Esto se discute más a fondo en la última sección donde se presentan las conclusiones.

2. Difusión en una circunferencia

La posición de una partícula que experimenta un movimiento browniano puede describirse aproximadamente por su función de densidad de probabilidad, que es la solución de la ecuación de difusión. Cuando la partícula browniana se mueve sobre una superficie curva encajada en 3 dimensiones, el operador de Laplace en la ecuación de difusión cambia debido a la métrica inducida en la superficie. Pensemos en una partícula que está restringida a moverse sobre una superficie $\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^3$ parametrizada por $\vec{\sigma}(\xi^1, \xi^2)$, donde ξ^1 y ξ^2 son las coordenadas sobre la superficie; estas se pueden agrupar en un vector que denotaremos ξ^a , tal que $a = 1, 2$. Con esta notación es posible escribir los vectores tangentes a la superficie en cada una de las coordenadas de la misma como $\vec{\sigma}_a$. El índice en este caso indica la derivada de la parametrización en las coordenadas de la superficie, es decir, $\vec{\sigma}_a = \partial\vec{\sigma}/\partial\xi^a$. Es bien sabido (do Carmo, 1976), que las componentes de la métrica de la superficie se calculan con el producto interno de los vectores tangentes $g_{ab} = \vec{\sigma}_a \cdot \vec{\sigma}_b$, en este caso $a, b = 1, 2$. Con la métrica puede calcularse el cuadrado de la distancia infinitesimal sobre la superficie \mathcal{S} como $ds^2 = \sum_a \sum_b g_{ab} d\xi^a d\xi^b$. Podemos reescribir esta expresión en una forma más compacta utilizando la convención de suma de Einstein donde índices repetidos arriba y abajo indican suma sobre ese índice. Así la expresión anterior resulta $ds^2 = g_{ab} d\xi^a d\xi^b$. Utilizaremos esta notación a lo largo de este trabajo, de forma que todo índice latino tomará los mismos valores que a y b .

Dado un campo vectorial arbitrario definido sobre la superficie $\vec{V}(\xi^1, \xi^2)$, sus componentes *contravariantes* en la base $\{\vec{\sigma}_a\}$ son las siguientes $\vec{V} = V^a \vec{\sigma}_a$. Se puede introducir la base dual a través de la relación $\vec{\sigma}^b = g^{ab} \vec{\sigma}_a$, con g^{ab} la inversa de la métrica y así es posible definir las componentes *covariantes* del campo vectorial $\vec{V} = V_a \vec{\sigma}^a$. Con esto podemos obtener las componentes del gradiente en la base $\{\vec{\sigma}_a\}$ de una función escalar $f(\xi^1, \xi^2)$ definida sobre la superficie \mathcal{S}

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial \xi^a} g^{ab} \vec{\sigma}_b. \quad (1)$$

De esta forma, el operador Laplaciano en la superficie se calcula como la divergencia del gradiente. Sin embargo, la diver-

gencia se generaliza utilizando la llamada *derivada covariante*. Consideremos al campo \vec{V} su derivada en la dirección ξ^a es

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial \xi^a} = \frac{\partial}{\partial \xi^a} (V^b \vec{\sigma}_b) = \frac{\partial V^b}{\partial \xi^a} \vec{\sigma}_b + V^b \frac{\partial \vec{\sigma}_b}{\partial \xi^a}, \quad (2)$$

ya que $\vec{\sigma}_b$ depende también de las coordenadas de la superficie. El segundo término de (2) se expresa en la misma base como

$$\frac{\partial \vec{\sigma}_b}{\partial \xi^a} = \Gamma_{ba}^c \vec{\sigma}_c. \quad (3)$$

A los coeficientes Γ_{ba}^c se les conoce como símbolos de Christoffel (do Carmo, 1976), y pueden expresarse en términos de derivadas de la métrica como

$$\Gamma_{bc}^a = \frac{1}{2} g^{ad} \left(\frac{\partial g_{db}}{\partial x^c} + \frac{\partial g_{dc}}{\partial x^b} - \frac{\partial g_{bc}}{\partial x^d} \right). \quad (4)$$

Las componentes de la llamada derivada covariante

$$V_{;a}^b := \frac{\partial V^b}{\partial \xi^a} + V^c \Gamma_{ca}^b, \quad (5)$$

son objetos con dos índices libres, es decir, que no se suman. Recordemos que la divergencia es la suma de las derivadas de las componentes del campo \vec{V} en cada dirección. En esta notación esto se obtiene al considerar en (5) los dos índices iguales, ya que la repetición implica una suma, es decir,

$$V_{;a}^a := \frac{\partial V^a}{\partial \xi^a} + V^c \Gamma_{ca}^a. \quad (6)$$

Directamente de la definición (4) es posible obtener que $\Gamma_{ca}^a = \frac{g^{ba}}{2} \frac{\partial g_{ba}}{\partial \xi^c}$. Además, utilizando resultados bien conocidos de álgebra lineal, la inversa de la métrica se puede escribir como $g^{ba} = \frac{1}{g} \frac{\partial g}{\partial g_{ba}}$, donde g es el determinante positivo de la métrica. De esta forma se puede verificar que

$$\Gamma_{ca}^a = \frac{1}{2g} \frac{\partial g}{\partial g_{ba}} \frac{\partial g_{ba}}{\partial \xi^c} = \frac{1}{2g} \frac{\partial g}{\partial \xi^c} = \frac{\partial}{\partial \xi^c} \ln \sqrt{g}. \quad (7)$$

Con lo que la divergencia resulta

$$V_{;a}^a := \frac{\partial V^a}{\partial \xi^a} + V^c \frac{\partial}{\partial \xi^c} \ln \sqrt{g}. \quad (8)$$

Nótese que la expresión (8) es escalar y que al estar sumados los índices en cada término en realidad no importa que etiqueta escribamos. Además, es claro que el último término en (8) desaparece en el caso en que estuviéramos en un espacio plano donde la métrica es constante, por tanto, es justamente este término el que toma en cuenta la curvatura de la superficie \mathcal{S} . Con esta expresión, el Laplaciano se puede escribir reemplazando en (8) al campo vectorial \vec{V} , por el gradiente ∇f definido en (1), que después de factorizar resulta de la siguiente forma

$$\nabla_{LB}^2 f = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \xi^a} \left(\sqrt{g} g^{ab} \frac{\partial f}{\partial \xi^b} \right). \quad (9)$$

Este operador es conocido como el operador de Laplace-Beltrami y reemplaza al Laplaciano cartesiano cuando el proceso difusivo se lleva a cabo en una superficie curva. Sin embargo, aunque derivamos este operador para una superficie embebida en el espacio tridimensional, las expresiones que encontramos,

dada la generalidad que permite la notación tensorial, son válidas para cualquier variedad diferenciable n -dimensional, incluso variedades de dimensión 1.

Para ejemplificar el efecto de las componentes de la métrica y , en general, de la curvatura de la variedad donde se lleva a cabo la difusión, consideraremos la variedad curva más sencilla, un círculo \mathbb{S}^1 , encajado en \mathbb{R}^2 . En este caso la parametrización es bien conocida y sólo dependerá de una coordenada $\vec{\sigma}(\theta) = r(\text{sen } \theta, \text{cos } \theta)$, con $\theta \in [-\pi, \pi]$. Consideraremos el radio r del círculo, como constante, lo que nos define una familia de circunferencias. Más adelante veremos la utilidad de esto. En este caso la distancia sobre el círculo es simplemente la longitud de arco $ds = r d\theta$, lo que implica que la métrica sólo tiene una componente $g_{\theta\theta} = r^2$, lo cual simplifica mucho los cálculos ya que el operador de Laplace-Beltrami resulta

$$\nabla_{LB}^2 f = \frac{1}{\sqrt{r^2}} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sqrt{r^2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \theta^2}. \quad (10)$$

Aunque a primera vista el operador (10) es muy parecido al del caso Euclidiano, es decir, la segunda derivada en x , la solución de la ecuación de difusión tiene ciertas diferencias. Consideremos la difusión de una partícula browniana en una circunferencia de radio r , entonces la densidad de probabilidad $P(\theta, t)$ satisface la ecuación de difusión

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{D}{r^2} \frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2}, \quad (11)$$

donde D es el coeficiente de difusión, con $-\pi \leq \theta \leq \pi$. Esta ecuación admite el método de separación de variables $P(\theta, t) = F(\theta)G(t)$, el cual agrupa a la ecuación diferencial parcial en dos ecuaciones ordinarias, una para la parte temporal cuya solución es una exponencial decreciente, y otra para la parte angular que genera soluciones oscilatorias

$$P(\theta, t) = e^{-\lambda^2 \frac{D}{r^2} t} (A \text{sen}(\lambda\theta) + B \text{cos}(\lambda\theta)), \quad (12)$$

donde λ^2 es la constante de separación. En necesario imponer condiciones de frontera periódicas $F(-\pi) = F(\pi)$ y de flujo continuo, $F'(-\pi) = F'(\pi)$. Esto lleva a fijar la constante de separación $\lambda = n \in \mathbb{Z}$. La solución general será la combinación lineal de las soluciones linealmente independientes

$$P(\theta, t) = C + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \frac{D}{r^2} t} (A_n \text{sen}(n\theta) + B_n \text{cos}(n\theta)), \quad (13)$$

con C una constante. Para determinar los coeficientes A_n, B_n y C hay que considerar la condición inicial. En este caso supondremos que las partículas están concentradas en el punto $\theta = 0$, es decir, $P(\theta, 0) = \alpha \delta(\theta)$, con α una amplitud constante y $\delta(\theta)$ la distribución delta de Dirac. Si utilizamos la representación en series de Fourier de la distribución delta, podemos comparar los coeficientes fácilmente, encontrando que $A_n = 0, B_n = \frac{\alpha}{\pi}$ y $C = \frac{\alpha}{2\pi}$. Al considerar la condición de normalización para la probabilidad es posible fijar $\alpha = 1$. Por lo que la solución de la Ec. (11) es

$$P(\theta, t) = \frac{1}{2\pi} \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \frac{D}{r^2} t} \text{cos}(n\theta) \right]. \quad (14)$$

El movimiento browniano usualmente es caracterizado a través del camino cuadrático medio, usualmente denotado MSD por sus siglas en inglés *mean square displacement*. En el caso unidimensional, el MSD se calcula como la varianza de la posición y presenta un comportamiento lineal en el tiempo cuya pendiente es proporcional al coeficiente de difusión. Para la circunferencia, la coordenada relevante es el ángulo θ , que es acotado. Es posible calcular la varianza del ángulo usando directamente la densidad de probabilidad (14), es decir,

$$\langle \theta^2 \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \theta^2 P(\theta, t) d\theta = \frac{\pi^2}{3} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} e^{-n^2 \frac{D}{r^2} t}. \quad (15)$$

El camino cuadrático medio en este caso tiene comportamientos interesantes en distintos regímenes. Para tiempos muy largos en comparación con el tiempo de decaimiento dado por $\frac{D}{r^2}$, la exponencial en (15) tiende a cero y el MSD tiende asintóticamente a la constante $\frac{\pi^2}{3} \approx 3.289$, para cualquier circunferencia. Por otra parte, para tiempos cortos, es posible considerar el desarrollo de Taylor de la exponencial hasta los primeros órdenes. Después de regularizar las sumas resultantes (Arfken and Weber, 2005), es posible aproximar $\langle \theta^2 \rangle \approx \frac{2Dt}{r^2}$. Notemos que si multiplicamos ambos lados por el radio obtenemos, $\langle s^2 \rangle \equiv r^2 \langle \theta^2 \rangle \approx 2Dt$, que es igual al caso unidimensional. Esto es debido a que el tiempo que ha transcurrido desde que la partícula comenzó a moverse es tan corto que aún no le permite darse cuenta que está en una circunferencia. Ahora bien, el hecho de que el MSD en (15) difiera tanto del caso unidimensional recto, es debido a dos factores: por un lado, es consecuencia de que la variedad en donde se difunden las partículas es curva y, por otro, del hecho de que el círculo es cerrado, es decir, es una difusión en un sistema confinado (Chacón-Acosta et al., 2020). En (Castro-Villarreal et al., 2014) se hizo notar que está última es la razón principal de las diferencias; sin embargo, en un régimen aproximado al caso unidimensional las desviaciones correspondientes pueden escribirse en términos de la curvatura de la circunferencia, al menos para fines pedagógicos

$$\langle \theta^2 \rangle \approx \frac{2Dt}{r^2} \left(1 - \frac{Dt}{4r^2} + \dots \right). \quad (16)$$

Recordemos que la curvatura de una curva plana se define como la norma euclidiana de la segunda derivada de su parametrización en términos de la longitud de arco

$$\kappa = \left\| \frac{d^2 \vec{\sigma}}{ds^2} \right\|,$$

para la circunferencia $\frac{d^2 \vec{\sigma}}{ds^2} = -\frac{1}{r}(\text{cos } \theta, \text{sen } \theta)$, por lo que su curvatura es $\kappa = \frac{1}{r}$, y la expresión para el MSD a tiempos cortos en términos de la longitud de arco es

$$\langle s^2 \rangle \approx 2Dt \left(1 - \frac{D\kappa^2}{4} t + \dots \right), \quad (17)$$

donde las primeras desviaciones del caso unidimensional se pueden interpretar como efectos de la curvatura del círculo. Se ha visto que tanto la curvatura (nez López et al., 2017; León-Velasco and Chacón-Acosta, 2021), como el confinamiento (Chacón-Acosta et al., 2020), tienen un efecto al momento de

tener dos especies químicas que reaccionen y, además, se difundan en una región con estas características. Para ejemplificar dichos efectos, en la siguiente sección estudiaremos un sistema reacción-difusión, cuyos activadores e inhibidores se difunden en una circunferencia.

3. Sistemas Reacción-Difusion

Muchos y muy diversos fenómenos que van desde la propagación de una epidemia hasta el flujo de fluidos dentro de un depósito de petróleo se rigen por la difusión, pero a diferentes escalas. La concentración de individuos/partículas se limita a una región que define un volumen V contenido dentro de un dominio espacial Ω dentro del cual tiene lugar el movimiento. La densidad de población puede denotarse como $A(\mathbf{x}, t)$, donde \mathbf{x} es la variable espacial y t el tiempo. Para saber cómo varía la población dentro del dominio espacial \mathbf{x} para un tiempo dado t , es necesario determinar la evolución de $A(\mathbf{x}, t)$. Según la ley de Fick (Crank, 1980), las partículas fluyen desde puntos de mayor a menor concentración (Murray, 2003),

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -D_A \nabla A(\mathbf{x}, t) \quad (18)$$

donde $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$ denota el flujo de partículas en el punto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ al tiempo t , D_A representa un coeficiente de difusión de la especie química cuya concentración local al tiempo t es $A(\mathbf{x}, t)$. En ausencia de reacciones químicas, la concentración de cualquier especie química debe cumplir con la ley de conservación local dada por la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (19)$$

Es preciso señalar que al combinar las ecuaciones (18) y (19), obtenemos precisamente la ecuación de difusión para la densidad u . Cuando la región donde se lleva a cabo este proceso es una circunferencia, entonces la ecuación se reduce a (11). En la presencia de otra especie, habrá entonces una ecuación equivalente para su densidad $B(\mathbf{x}, t)$. Si además, ambas especies interactúan mediante una cinética de reacción, las ecuaciones forman el llamado sistema reacción-difusión que, bajo ciertas condiciones, describen cómo las sustancias químicas pueden reaccionar y difundirse

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = \mathbf{D} \nabla^2 \mathbf{C} + \mathbf{f}(\mathbf{C}). \quad (20)$$

En este sistema $\mathbf{C} = (A, B)$ es el vector de las concentraciones de las especies químicas, $\mathbf{D} = \text{diag}\{D_A, D_B\}$ es la matriz de coeficientes de difusión positivos y $\mathbf{f} = (F(A, B), G(A, B))$ el vector de las reacciones cinéticas.

Turing (Turing, 1952) propone que, en ausencia de difusión, el sistema tiende a un estado estable, entonces bajo ciertas condiciones que se derivarán más adelante, patrones espacialmente no homogéneos pueden aparecer y evolucionar a través de la inestabilidad impulsada por la difusión siempre que $D_A \neq D_B$. Un sistema de reacción-difusión presenta una inestabilidad de Turing si un punto fijo del sistema es estable con una perturbación en ausencia de difusión, pero inestable en presencia de difusión, lo que induce la formación de patrones en el espacio, teniendo así un estado no homogéneo (Murray, 2003).

En el caso en que el proceso de difusión se lleve a cabo en una variedad curva, entonces, como se vio en la sección previa, el operador de Laplace debe reemplazarse por el operador de Laplace-Beltrami (9). Para estudiar el efecto de la curvatura de la variedad en este tipo de sistemas, en este trabajo asumiremos que la variedad donde se difunden las partículas es un círculo y por lo tanto sigue la ecuación (11). Así pues, el sistema reacción-difusión que estudiaremos puede obtenerse de (20), con los cambios mencionados, por lo que se escribirá como sigue

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} &= \frac{D_A}{r^2} \frac{\partial^2 A}{\partial \theta^2} + F(A, B), \\ \frac{\partial B}{\partial t} &= \frac{D_B}{r^2} \frac{\partial^2 B}{\partial \theta^2} + G(A, B). \end{aligned} \quad (21)$$

Para poder abordar este problema lo primero será estudiar una cinética de reacción específica que nos proporcione información sobre la interacción entre las dos especies químicas.

3.1. Reacción de Gierer-Meinhardt

Considerese la siguiente cinética de reacción de Gierer-Meinhardt (Gierer and Meinhardt, 1972) dada por

$$\begin{aligned} F(A, B) &= k_1 - k_2 A + k_3 \frac{A^2}{B}, \\ G(A, B) &= k_4 A^2 - k_5 B, \end{aligned} \quad (22)$$

donde k_i , con $i = 1, \dots, 5$, son tasas constantes positivas y A y B son las concentraciones de las dos especies químicas involucradas en la reacción. El activador A se crea a una tasa constante k_1 , pero es favorecido a través de una reacción autocatalítica a través del término $k_3 A^2/B$. Por otra parte el inhibidor B es generado por A con una tasa k_4 . Nótese que k_2 y k_5 son tasas de consumo. Es posible obtener una descripción adimensional del sistema reacción-difusión (21) con la cinética (22), si se introducen las siguientes definiciones

$$u := A \frac{k_4}{k_3}, \quad v := B \frac{k_4 k_5}{k_3^2}, \quad a := \frac{k_1 k_4}{k_5 k_3}, \quad b := \frac{k_2 k_4}{k_5 k_3}, \quad t \rightarrow t \frac{r^2}{D_A}, \quad (23)$$

donde el tiempo se reescaló en unidades de $\tau := r^2/D_A$, el tiempo característico en que el activador difunde una distancia cuadrática media igual a r^2 . Como resultado la ecuación (21) puede escribirse de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \gamma \left(a - bu + \frac{u^2}{v} \right) = \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \gamma f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \gamma (u^2 - v) = d \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \gamma g(u, v), \end{aligned} \quad (24)$$

donde $d := D_B/D_A$ es el cociente de las difusividades, (Murray, 2003; Plaza et al., 2004) y el factor $\gamma := r^2 k_5/D_A$, representa la intensidad relativa de los términos reactivos, además γ tiene otras interpretaciones. Equivalentemente γ se puede escribir como:

- $\gamma = \frac{\tau}{\tau_k}$, donde $\tau_k := k_5^{-1}$, por lo que puede interpretarse como una medida de la competencia entre la tasa de consumo del inhibidor y el tiempo en que difunde el activador.

- $\gamma = \frac{r^2}{r_d^2}$, donde $r_d := \frac{D_A}{k_s}$. El factor r_d es la escala de distancia, o el radio de la circunferencia típica en la que podría difundirse una partícula en un tiempo igual al necesario para consumir al inhibidor. Por tanto γ proporciona una comparación entre esta escala y el tamaño de la circunferencia.
- Finalmente, es posible interpretar γ en términos de los radios de curvatura

$$\gamma = \left(\frac{\kappa_d}{\kappa}\right)^2, \tag{25}$$

con $\kappa_d := r_d^{-1}$. De esta forma, γ es la relación entre la curvatura local del círculo donde se realiza la difusión y la de la circunferencia característica de radio r_d .

Las condiciones de inestabilidad, que se explican a continuación, dependerán fuertemente de los valores de los cocientes d y γ , por lo que podremos proporcionar una interpretación de la formación de patrones en función de la curvatura de la circunferencia donde se lleva a cabo el proceso.

3.2. Condiciones para la inestabilidad generada por difusión

Las condiciones necesarias y suficientes para generar una inestabilidad del estado estacionario impulsada por la difusión se deducen en (Murray, 2003). En el caso en que el proceso se lleva a cabo en una circunferencia consideraremos el sistema

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} + \gamma f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= d \frac{\partial^2 v}{\partial \theta^2} + \gamma g(u, v), \end{aligned} \tag{26}$$

obviamente con condiciones de frontera periódicas, donde d es el cociente de difusividades definido anteriormente. En general, la condición necesaria es que no haya flujo en las fronteras, es decir, que el material permanezca en la región donde se lleva a cabo el proceso. Se eligen estas condiciones de frontera porque el objeto de estudio de este tipo de sistemas es la caracterización de la auto-organización de patrones y, por tanto, se considera un sistema aislado sin influencias externas. El sistema describe el comportamiento temporal de las concentraciones de dos productos químicos, u y v , que se difunden a diferentes velocidades y reaccionan de acuerdo a los términos no lineales f y g , donde f describe la cinética de u y g la de v . Sea $w_0 = (u_0, v_0)$ una solución homogénea (o solución del estado estacionario) del sistema (26), tal que $f(u_0, v_0) = g(u_0, v_0) = 0$. Supongamos que esta solución es estable en ausencia de difusión, es decir, la parte real de todos los valores propios de la matriz Jacobiana que describen la dinámica local del sistema (26) son menores que cero,

$$A = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}_{w_0},$$

donde A es la matriz de estabilidad y los subíndices indican derivada parcial respecto a la densidad correspondiente. Buscamos soluciones para las perturbaciones de la forma $w = (u - u_0, v - v_0) \propto e^{\lambda t}$ con λ un eigenvalor de la matriz A . El sistema (26) sin difusión puede escribirse de una forma compacta como

$$w_t = \lambda w = \gamma A w, \tag{27}$$

de cuyo polinomio característico se determinan los eigenvalores. Se garantiza la estabilidad lineal si

$$\text{tr } A = f_u + g_v < 0, \quad \det A = f_u g_v - f_v g_u > 0. \tag{28}$$

La presencia de un término de difusión puede cambiar la estabilidad de (u_0, v_0) . Para estudiar este efecto, consideramos el sistema de reacción-difusión completo (26) y lo linealizamos alrededor del estado estable. Proponemos soluciones de la forma $w \propto e^{\lambda t} W_k(\theta)$, donde $W_k(\theta)$ son las funciones propias correspondientes al número de onda k ; cada eigenfunción W_k satisface la ecuación $d^2 W_k / d\theta^2 = -k^2 W_k$ sujeta a condiciones de frontera periódicas. La solución general, en realidad, será una superposición de todos los modos k . Como es bien sabido, W_k suele ser una función periódica, ya que un dominio confinado k se restringe a valores discretos que están directamente relacionados con los patrones periódicos. Puede escribirse la ec. (26) linealizada como sigue

$$w_t = \lambda W_k = D \frac{d^2 w}{d\theta^2} + \gamma A w = -k^2 D W_k + \gamma A W_k, \tag{29}$$

con $D = \text{diag}(1, d)$. Para el análisis se requirieron soluciones no triviales para W_k y se determinaron los valores de λ como las raíces del polinomio característico de (29)

$$\lambda^2 + \lambda[k^2(1 + d) - \gamma(f_u + g_v)] + h(k) = 0, \tag{30}$$

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

El polinomio característico $\lambda(k)$ que esta en función del número de onda k , se le conoce como *relación de dispersión*. Para encontrar la emergencia de patrones espaciales se requiere la condición $\text{Re}[\lambda(k)] > 0$, es decir, las regiones del dominio donde el estado estacionario se vuelve inestable a las perturbaciones espaciales. Finalmente, se obtienen las siguientes condiciones para la generación de patrones espaciales

- $f_u + g_v < 0$;
- $f_u g_v - f_v g_u > 0$;
- $df_u + g_v > 0$;
- $(df_u + g_v)^2 - 4d(f_u g_v - f_v g_u) > 0$.

Las dos primeras relaciones corresponden a condiciones de estabilidad sin difusión, las últimas dos se encuentran en presencia de difusión, en particular la tercera condición requiere $d > 1$, es decir, en términos del mecanismo inhibidor-activador, el inhibidor debe difundirse más rápido que el activador (Murray, 2003). La última condición necesaria es calcular el número de onda crítico k_c . Además, el rango de números de onda inestables se obtiene a partir de los ceros de la función $h(k)$,

$$k_c = \sqrt{\frac{\gamma(df_u + g_v)}{2d}}, \tag{31}$$

donde d_c es el coeficiente crítico de difusión y el rango de número de onda inestable es

$$k_{\max, \min} = \sqrt{\frac{\gamma}{2d} \left((df_u + g_v) \pm \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d \det A} \right)}. \tag{32}$$

Todas las condiciones se rigen por los parámetros de los términos reactivos y la razón d . Las funciones f_u, f_v, g_u y g_v se evalúan en el punto fijo (u_0, v_0) , por lo que el conjunto de desigualdades forma el llamado espacio de Turing. Tomando como referencia la parte reactiva del sistema (24), el estado estacionario y homogéneo está dado por $(u_0, v_0) = \left(\frac{1+a}{b}, \frac{(1+a)^2}{b^2}\right) = (u_0, u_0^2)$, cuando el cociente de difusividades es mayor que uno, obtenemos las condiciones de Turing para la formación de patrones espacio-temporales. La estabilidad lineal se garantiza con las primeras dos condiciones, así que evaluando el Jacobiano del sistema (24) en el punto (u_0, u_0^2) , obtenemos las condiciones para la formación de patrones espaciales

- $f_u + g_v = \frac{2b}{1+a} - (b + 1)$, así $f_u + g_v < 0$, si $b > -1 - \frac{2}{1-a}$;
- $f_u g_v - f_v g_u = b$, por tanto $f_u g_v - f_v g_u > 0$;
- $d\left(\frac{2b}{1+a} - b\right) > 1$;
- $\left(d\left(\frac{2b}{1+a} - b\right) - 1\right)^2 > 4db$.

Por otra parte, el rango de los modos inestables contiene el factor γ relacionado con la curvatura dado por la ecuación (25)

$$k_{max,min} = \frac{\kappa_d}{\kappa} \sqrt{\frac{1}{2d} \left((df_u + g_v) \pm \sqrt{(df_u + g_v)^2 - 4d \det A} \right)}, \quad (33)$$

en particular es inversamente proporcional a κ , lo que quiere decir que entre mayor es la curvatura menor es el tamaño del rango de modos inestables, lo cual se logra haciendo el radio del círculo donde ocurre el proceso suficientemente grande

$$k_{max,min} = \frac{\kappa_d}{\kappa} \sqrt{\frac{1}{2d} \left(db \left(\frac{1-a}{1+a} \right) - 1 \pm \sqrt{\left(db \left(\frac{1-a}{1+a} \right) - 1 \right)^2 - 4db} \right)}, \quad (34)$$

además de estar en términos de los parámetros a y b , propios de la reacción. De esta forma el rango de modos inestables no sólo debe incluir los parámetros de reacción y el cociente de difusividades que satisfacen las condiciones de Turing, sino también, en este caso, la curvatura del medio donde se propagan las especies.

La relación de dispersión $\lambda(k)$ dada por (30), evaluada para el modelo de Gierer-Meinhardt se muestra en la figura 1. La condición para que el estado estacionario sea estable en ausencia de efectos espaciales es $Re[\lambda(k=0)] < 0$. Para que el estado estacionario sea inestable se requiere que $Re[\lambda(k)] > 0$ para algún $k \neq 0$ (Murray, 2003). De esta forma, el inicio de la inestabilidad se puede identificar por aquellos valores de los parámetros para los cuales el máximo de la curva se convierte en cero $\lambda(k_c) = 0$. El análisis de la relación de dispersión $\lambda(k)$ da información cualitativa, es decir, qué patrones espaciales son linealmente inestables y crecen exponencialmente en el rango $k_{min} < k < k_{max}$.

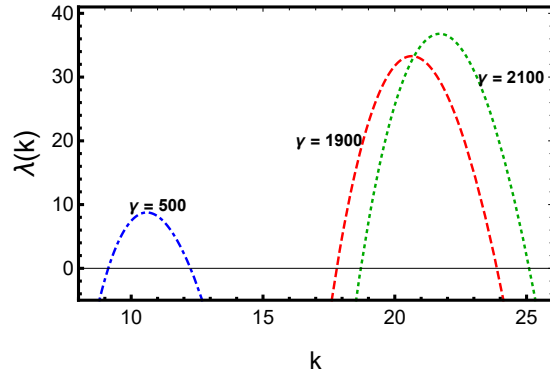


Figura 1: Relación de dispersión para diferentes valores de γ para el modelo de Gierer-Meinhardt con $a=0.5, b=1.5$ y $d=30$.

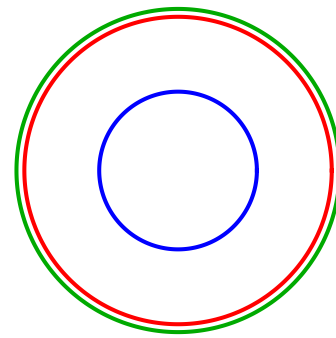


Figura 2: Círculos con diferentes radios/curvaturas correspondientes a distintos valores de γ . Azul corresponde a un radio $r = 22.36$ o una curvatura $\kappa = 0.0447$, el color rojo es para $r = 43.59$ o una curvatura $\kappa = 0.0229$, y el verde para $r = 45.82$ o una curvatura $\kappa = 0.0218$.

En la figura (1) se muestra la relación de dispersión para el modelo de Gierer-Meinhardt en tres escenarios donde únicamente se varía γ . Según la ecuación (25), considerando unidades tales que $\kappa_d = 1$, es decir, para el círculo unitario, se obtiene que para $\gamma = 2100$ le corresponde una curvatura de $\kappa = 0.0218$ con un rango de modos inestables $18.68 < k < 25.05$, cuando $\gamma = 1900$ la curvatura es $\kappa = 0.0229$ con $17.78 < k < 23.8$ y, finalmente, cuando $\gamma = 500, \kappa = 0.0447$ y $9.07 < k < 12.25$. Como se ha indicado en este trabajo, el rango de modos inestables donde es posible hallar patrones espacio-temporales, depende de las características del círculo donde se lleva a cabo el proceso, en específico de su curvatura. De esta forma, como podemos notar, a mayor curvatura del círculo implica un menor rango para la formación patrones.

Como se mencionó en la sección anterior, la solución general del sistema (26), o para las perturbaciones (29), es la superposición de todas las funciones propias correspondientes a los modos que son de la forma

$$w(\theta, t) = \sum_k C_k e^{\lambda(k)t} W_k(\theta), \quad (35)$$

donde los C_k pueden obtenerse a través de un desarrollo de Fourier de las condiciones iniciales en cada caso, y para diversas situaciones de interés, por ejemplo, en sistemas biológicos, todas son distintas de cero. La función $\lambda(k)$, solución de (30), es la relación de dispersión y establece la tasa de crecimiento de las perturbaciones. La función $W_k(\theta)$ es solución de la ecuación

de eigenvalores de la parte angular de (29), y al considerar condiciones de fronteras periódicas toma la forma

$$W_k(\theta) = W_n(\theta) = B_n \cos(n\theta), \quad (36)$$

dado que $k = n$, para n entero y para B_n constantes por determinar. Nótese que la relación de dispersión mostrada en la figura 1 puede mostrarse también de forma discreta como en la figura 3. La solución (36) muestra la forma que tendrán los patrones de los modos linealmente inestables.

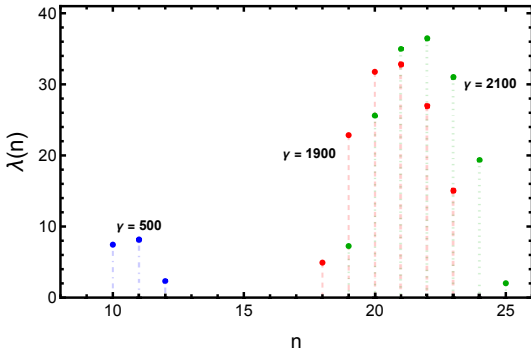


Figura 3: Relación de dispersión para los diferentes valores de γ con los mismos parámetros que en la figura 1, ahora en función de $n \in \mathbb{Z}$. Es claro que, para cada caso, únicamente hay un cierto número de modos inestables posibles.

Por otra parte, podemos notar de la ecuación (35) que, conforme avanza el tiempo, los modos para los que la parte real de la relación de dispersión es positiva crecerán rápidamente, mientras los otros decaerán de manera exponencial. Es decir, para tiempos grandes la suma está acotada por el intervalo de modos inestables, $[k_{min}, k_{max}]$, y por tanto la solución será de la forma

$$w(\theta, t) = \sum_{n=n_{min}}^{n_{max}} \tilde{C}_n e^{\lambda(n)t} \cos(n\theta), \quad (37)$$

donde \tilde{C}_n se obtienen de las condiciones iniciales, n_{min} es el menor entero mayor que k_{min} y n_{max} es el mayor entero menor que k_{max} . Al ser números enteros siempre cabe la posibilidad de que en el rango existan sólo unos pocos números de onda, también es posible que algunos de ellos dominen sobre los demás. Si consideramos un sólo modo n_* , entonces (37) contendrá únicamente un término. Si regresamos a las densidades de las especies químicas, podemos escribir la forma del patrón para la especie $u(\theta, t)$ de la siguiente forma

$$u(\theta, t) \simeq u_0 + \tilde{u} e^{\lambda(n_*)t} \cos(n_*\theta), \quad (38)$$

donde asumimos que \tilde{u} es una amplitud pequeña proveniente de la condición inicial \tilde{C}_{n_*} . Nótese que, para que la formación de patrones se lleve a cabo, es necesario que la solución del sistema (26) sea siempre positiva. La solución (38) se muestra en la figura 4 para circunferencias de distintos radios (o distintas curvaturas), lo cual genera distintos valores del parámetro de la intensidad de la reacción γ . Todos los demás parámetros son los mismos, las correspondientes tasas de reacción $a = 0.5$, $b = 1.5$, el cociente de difusividades $d = 30$, la amplitud inicial que se fijó en $\tilde{C}_{n_*} = 0.0001$ y el tiempo transcurrido en 0.25. El único parámetros que varía es el modo inicial n_* , el cual se tomó como el modo para el cuál $\lambda(n_*)$ se maximiza; de acuerdo

con la figura 3, esto es, cuando $n = 11, 21$ y 22 , en cada caso. Como se observa en la figura 4, alrededor de $\theta = 0$ la concentración de la especie química u es máxima y comienza a disminuir con el ángulo, hasta su mínimo en $\theta = \pi$. El patrón se entiende como ese máximo en la densidad, ya que la especie v tenderá a acomodarse en la región donde u es mínima. Aunque los tres casos son similares cualitativamente, podemos notar que en el círculo con mayor curvatura (el de radio más pequeño) apenas ha comenzado el proceso de formar un patrón, mientras que para el mismo lapso en el círculo rojo llega a casi 1.5, y en el de mayor radio (el de menor curvatura), el patrón está claramente formado con una densidad máxima de alrededor de 2. Esto puede verse también en la figura 5, donde se muestran los tres círculos de distintos radios y se representa la densidad normalizada con una escala de colores, siendo el rojo la densidad máxima y el morado cuando es cero. En esa figura se puede ver que en la circunferencia de menor radio aún el proceso es incipiente, mientras que en los otros se ve como la especie u la ha ocupado la mayor parte de la derecha del círculo, aunque en el de radio mayor la vecindad al rededor de $\theta = \pi$ está casi vacía.

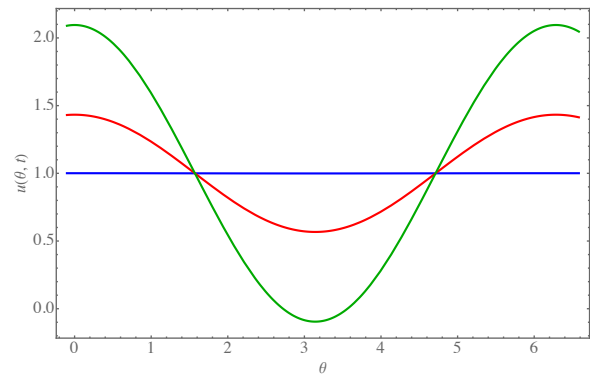


Figura 4: Patrones de Turing para la especie u , ecuación (38). Para $\gamma = 500$ y $\kappa = 0.0447$ (curva azul), $\gamma = 1900$ y $\kappa = 0.0229$ (curva roja), y $\gamma = 2100$ y $\kappa = 0.0218$ (curva verde). Cada una está evaluada al tiempo 0.25, y para los modos $n = 11, 21, 22$, respectivamente.

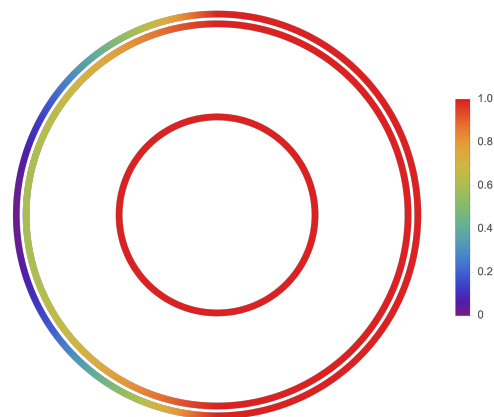


Figura 5: Patrones de Turing para los mismos parámetros al tiempo $t = 0.25$, sobre las tres circunferencias de distintos radios/curvaturas. Se muestra la densidad normalizada con escala de colores.

Hasta aquí se puede afirmar que el efecto de la curvatura, como se muestra en las figuras 1 y 3, es el cambio de la posición

y tamaño del rango de inestabilidad en cada caso, lo cual influye directamente en el número de modos inestables. Sin embargo, otro efecto puede notarse cuando se comparan los dos círculos de radios similares, ya que estos tienen modos inestables en común, evaluados en el mismo modo, lo cuál se puede lograr a través de las condiciones iniciales. Por ejemplo, para las circunferencias de radios 43.59 y 45.82, para el modo $n = 19$, el patrón se forma primero en el círculo de radio menor, en $t \sim 0.4$, como se muestra en la figura 6. Mientras que para el modo $n = 23$, el patrón se forma primero en el círculo de radio mayor, en $t \sim 0.29$, como se observa en la figura 7. Esto se debe a que el eigenvalor temporal, al depender de la curvatura, toma valores distintos en distintos círculos, aunque se evalúen en el mismo número de onda. Esto es un indicio de que la formación de patrones en dos sistemas bajo las mismas condiciones puede modularse utilizando la curvatura del sustrato donde el proceso se lleve a cabo.

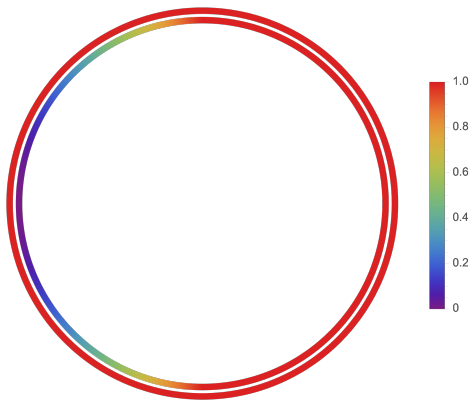


Figura 6: Patrones de Turing para los mismos parámetros en el modo $n = 19$ al tiempo $t = 0.4$. Primero se genera el patrón en el radio menor.

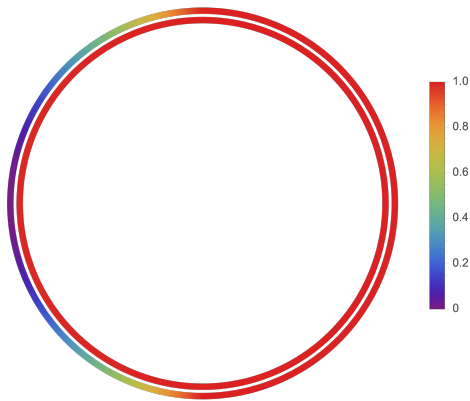


Figura 7: Patrones de Turing para los mismos parámetros en el modo $n = 23$ al tiempo $t = 0.29$. Primero se genera el patrón en el radio mayor.

4. Conclusiones

El mecanismo de inestabilidad de Turing guiada por difusión se ha utilizado para explicar la aparición de patrones espacio-temporales fuera de equilibrio de una variedad de sistemas físicos, químicos, biológicos, ecológicos y demás sistemas

complejos. El estudio de estos sistemas reacción-difusión sobre superficies curvas fue primero propuesto por el mismo Alan Turing en uno de sus manuscritos no publicados de 1954, donde estudiaba el sistema difundiendo sobre la superficie de una esfera para modelar los patrones en el esqueleto de las radiolarias (Turing, 1954). Durante la última década ha habido un creciente interés en el estudio de la formación de patrones en superficies. Se ha encontrado que varias propiedades geométricas del sustrato donde se difunden los reactivos, no solo la curvatura sino también el confinamiento, el espesor y el crecimiento, tienen efectos sobre las condiciones de inestabilidad y sobre la respectiva formación de patrones (nez López et al., 2017; León-Velasco and Chacón-Acosta, 2021; Varea et al., 1999; Liaw et al., 2001; Vandin et al., 2016; Krause et al., 2018; Plaza et al., 2004; Gjorgjieva and Jacobsen, 2007; Krause et al., 2019; Sánchez-Garduño et al., 2019; Nampoothiri, 2016; Stoop et al., 2015; Chacón-Acosta et al., 2020).

Con estas motivaciones en mente, en este documento se presentaron los principales efectos de la curvatura del medio donde reaccionan y se difunden dos especies químicas que forman patrones con el mecanismo de Turing.

Para ejemplificar este efecto, se consideró la curva cerrada más simple, un círculo de radio constante. Como primer paso se reemplazó al operador Laplaciano en un sistema cartesiano por el de Laplace-Beltrami. Al ser nuestro caso de estudio una circunferencia, la distancia sobre el círculo es la longitud de arco, ello simplifica la métrica y el operador puede obtenerse directamente. Además, se muestra la solución de la difusión en el círculo y el cálculo del desplazamiento cuadrático medio, donde puede verse claramente la influencia de la curvatura. Para nuestro análisis se tomó como sistema reactivo al modelo fenomenológico de Gierer-Meinhardt (Gierer and Meinhardt, 1972), en el que una de las sustancias químicas, el activador, inicia su producción y la segunda, el inhibidor, detiene la producción del primero. Además, el inhibidor se difunde usualmente más rápido que el activador, lo que induce la formación de los patrones. Después de una serie de análisis para comprender el efecto de la curvatura, se compararon las relaciones de dispersión para dominios con diferentes curvaturas y se observó un cambio en el tamaño y la posición del rango de inestabilidad, lo cual implica directamente en un cambio en el número de modos inestables, es decir, el número de combinaciones de los parámetros que permiten la formación de los patrones. Se propuso entonces una función inicial para la densidad de las especies que permitió observar la forma explícita de los patrones (oscilaciones espacio-temporales), la cual se muestra en las Figs. 5-7. En estas figuras puede notarse que la formación de patrones en dos sistemas bajo las mismas condiciones puede modularse utilizando la curvatura del sustrato donde el proceso se lleva a cabo. Esto es un claro indicio de cómo la curvatura del dominio donde se lleva a cabo el transporte y las reacciones, afecta a la formación de patrones. Esperamos que este ejemplo sirva para entender el mecanismo de inestabilidad de Turing generada por difusión y las herramientas de geometría diferencial para aquellos que quieran estudiar este tipo de sistemas.

Evidentemente el caso bidimensional es más interesante debido a su aplicación en sistemas biológicos, por lo cual ha sido ampliamente estudiado, como ya se ha hecho mención en la introducción (ver por ejemplo (nez López et al., 2017; León-

Velasco and Chacón-Acosta, 2021) y sus referencias). En este caso la curvatura Gaussiana y la curvatura media de la superficie son propiedades que han sido consideradas, además de que éstas modifican a las funciones relacionadas con el mecanismo de Turing. Extensiones y aplicaciones recientes pueden encontrarse en (Krause et al., 2018, 2019; Sánchez-Garduño et al., 2019) y sus referencias, en membranas o filamentos deformables (Stoop et al., 2015; Zhu et al., 2021), y sobretodo en sistemas mecano-químicos (Brinkmann et al., 2018), cuyo estudio es muy reciente y ha generado gran interés los últimos años.

Agradecimientos

M.N-L agradece el apoyo parcial de la Asociación Mexicana de Cultura A.C.

Referencias

- Amazon, J. J., Goh, S. L., and Feigenson, G. W. (2013). Competition between line tension and curvature stabilizes modulated phase patterns on the surface of giant unilamellar vesicles: A simulation study. *Phys. Rev. E*, 87:022708.
- Arfken, G. and Weber, H., editors (2005). *Mathematical Methods for Physicists*. Elsevier Academic Press.
- Ball, P. (2015). Forging patterns and making waves from biology to geology: a commentary on Turing (1952) the chemical basis of morphogenesis. *Phil. Trans. R. Soc. B*, 370:20140218.
- Brigatti, E., Núñez-López, M., and Oliva, M. (2011). Analysis of a spatial Lotka-Volterra model with a finite range predator-prey interaction. *Eur. Phys. J. B*, 81:321.
- Brinkmann, F., Mercker, M., Richter, T., and Marciniak-Czochra, A. (2018). Post-Turing tissue pattern formation: Advent of mechanochemistry. *PLOS Computational Biology*, 14:e1006259.
- Capasso, V. and Wilson, R. (1997). Analysis of a reaction-diffusion system modeling man–environment–man epidemics. *SIAM J. Appl. Math.*, 57:327–346.
- Castro-Villarreal, P., Villada-Balbuena, A., Méndez-Alcaraz, J. M., Castañeda-Priego, R., and Estrada-Jiménez, S. (2014). A brownian dynamics algorithm for colloids in curved manifolds. *J. Chem. Phys.*, 140:214115.
- Chacón-Acosta, G., nez López, M. N., and Pineda, I. (2020). Turing instability conditions in confined systems with an effective position-dependent diffusion coefficient. *J. Chem. Phys.*, 152.
- Chaplain, M., Ganesh, M., and Graham, I. (2001). Spatio-temporal pattern formation on spherical surfaces: numerical simulation and application to solid tumour growth. *Journal of Mathematical*, 42:387–423.
- Crank, J. (1980). *The Mathematics of Diffusion*. Oxford University Press.
- do Carmo, M., editor (1976). *Differential Geometry of curves and surfaces*. Prentice Hall, Inc., New Jersey.
- Fuselier, E. and Wright, G. (2013). A high-order kernel method for diffusion and reaction-diffusion equations on surfaces. *J. Sci. Comput.*, 56:535.
- Fuseya, Y., Katsuno, H., Behnia, K., and Kapitulnik, A. (2021). Nanoscale Turing patterns in a bismuth monolayer. *Nat. Phys.*, 17:1031–1036.
- Gatenby, R. A. and Gawlinski, E. (1996). A reaction-diffusion model of cancer invasion. *Cancer Research*, 56:5745–5753.
- Getzin, S., Yizhaq, H., Bell, B., Erickson, T. E., Postle, A. C., Ktra, I., Tzuk, O., Zelnik, Y. R., Wiegand, K., Wiegand, T., and Meron, E. (2016). Discovery of fairy circles in Australia supports self-organization theory. *PNAS*, 113:3551–3556.
- Gierer, A. and Meinhardt, H. (1972). A theory of biological pattern formation. *Kybernetik*, 12:30–39.
- Gjorgjieva, J. and Jacobsen, J. (2007). Turing patterns on growing spheres: the exponential case. *DCDS Supplements*, 2007(Special):436–445.
- Krause, A. L., Burton, A. M., Fadaei, N. T., and Gorder, R. A. V. (2018). Emergent structures in reaction-advection-diffusion systems on a sphere. *Phys. Rev. E*, 97:042215.
- Krause, A. L., Ellis, M. A., and Gorder, R. A. V. (2019). Influence of curvature, growth, and anisotropy on the evolution of Turing patterns on growing manifolds. *Bull. Math. Biol.*, 81:759–799.
- León-Velasco, D. A. and Chacón-Acosta, G. (2021). Full finite element scheme for reaction-diffusion systems on embedded curved surfaces in \mathbb{R}^3 . *Adv. Math. Phys.*, page 8898484.
- Liaw, S., Yang, C., Liu, R., and Hong, J. (2001). Turing model for the patterns of lady beetles. *Phys. Rev. E*, 64:041909.
- Liu, Y. J., Zhu, L., Wang, A., and Wang, B. (2011). Dynamical behavior of an epidemic model. *Braz. J. Phys.*, 41:304–308.
- Mimar, S., Juane, M. M., Park, J., Muñuzuri, A. P., and Ghoshal, G. (2019). Turing patterns mediated by network topology in homogeneous active systems. *Phys. Rev. E*, 99:062303.
- Murray, J. D., editor (2003). *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*. Third Edition, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- Nampoothiri, S. (2016). Stability of patterns on thin curved surfaces. *Phys. Rev. E*, 94:022403.
- nez López, M. N., Chacón-Acosta, G., and Santiago, J. A. (2017). Diffusion-driven instability on a curved surface: Spherical case revisited. *Braz. J Phys*, 47:231–238.
- Plaza, R., Sánchez-Garduño, F., Padilla, P., Barrio, R., and Maini, P. (2004). The effect of growth and curvature on pattern formation. *J. Dyn. Diff. Eqs.*, 16:1093.
- Ramakrishnan, N., Kumar, P. S., and Radhakrishnan, R. (2014). Mesoscale computational studies of membrane bilayer remodeling by curvature-inducing proteins. *Phys. Rep.*, 543:1–60.
- Sens, P. and Turner, M. S. (2011). Microphase separation in nonequilibrium biomembranes. *Phys. Rev. Lett.*, 106:238101.
- Stoop, N., Lagrange, R., Terwagne, D., Reis, P., and Dunkel, J. (2015). Curvature-induced symmetry breaking determines elastic surface patterns. *Nature Materials*, 14:337–342.
- Sánchez-Garduño, F., Krause, A. L., Castillo, J. A., and Padilla, P. (2019). Turing-Hopf patterns on growing domains: the torus and the sphere. *J. Theor. Biol.*, 481:136–150.
- Turing, A. M. (1952). The chemical basis of morphogenesis. *Philos. Trans. Roy. Soc.*, 237:37–72.
- Turing, A. M. (1954). Part iii: A solution of the equations morphogenetical for the case of spherical symmetry.
- van Meer, G., Voelker, D. R., and Feigenson, G. W. (2008). Membrane lipids: where they are and how they behave. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.*, 9:112–124.
- Vandin, G., Marenduzzo, D., Giryachev, A. B., and Orlandini, E. (2016). Correction: Curvature-driven positioning of Turing patterns in phase-separating curved membranes. *Soft Matt.*, 12:3888–3896.
- Varea, C., Aragón, J., and Barrio, R. (1999). Turing patterns on a sphere. *Phys. Rev. E*, 60:4588.
- Webb, G. F. (1981). A reaction-diffusion model for a deterministic diffusive epidemic. *J. Math. Anal. Appl.*, 84:150–161.
- Zhu, L., Yuan, H., Wu, K., Wang, X., Liu, G., Sun, J., Liao, X., and Chen, X. (2021). Curvature-controlled delamination patterns of thin films on spherical substrates. *iScience*, 24:102616.