



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS

MATEMÁTICAS

FACULTAD DE CIENCIAS

**ANÁLISIS DE UNA ECUACIÓN Y UN
SISTEMA DE REACCIÓN-DIFUSIÓN**

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE

MAESTRA EN CIENCIAS

PRESENTA

MIRIAM SOSA DIAZ

DIRECTOR DE LA TESINA: DR. PEDRO MIRAMONTES VIDAL

MÉXICO, D.F.

MARZO, 2012



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Índice general

Introducción	1
1. Ecuación de reacción-difusión	3
1.1. Un modelo para el proceso de la autocatálisis	8
2. Análisis de una ecuación de reacción-difusión	11
2.1. Un sistema de reacción-difusión	15
3. Resultados numéricos	17
Conclusiones	25
Bibliografía	27

Introducción

En 1937 Ronald Fisher publicó un modelo que describe como se lleva a cabo el cambio en la proporción de un gen en una población usando una ecuación de reacción-difusión, (ver [7]).

Posteriormente se siguieron aplicando las ecuaciones de reacción-difusión para modelar fenómenos específicos como son: el crecimiento de poblaciones, o el potencial de acción en la transmisión nerviosa, el cual es modelado por las ecuaciones de Hodgkin y Huxley, (ver [5]).

Para 1952 en [9], Alan Turing propuso el primer modelo de un esquema de reacciones químicas basado en las ecuaciones de reacción-difusión orientado en la emergencia de patrones; en este modelo la inestabilidad es causada por la difusión, es decir un sistema presenta inestabilidad por difusión (o inestabilidad de Turing) si el estado estacionario es estable a pequeñas perturbaciones en ausencia de difusión, pero inestable a pequeñas perturbaciones cuando la difusión está presente, (ver [6]). “Una característica de la inestabilidad de Turing en un sistema de reacción-difusión es, por presentar un estado temporal estable a medida que evoluciona en el tiempo y un patrón espacial heterogéneo debido a pequeñas perturbaciones de las concentraciones químicas” como se indica en [11].

El presente trabajo se divide en tres capítulos, que se abordan de la manera siguiente:

El capítulo 1 se inicia con una explicación de como deducir la ecuación de reacción-difusión, (ver [5]) y a partir de esta ecuación se muestra como obtener la ecuación de Fisher, de la cual damos una interpretación física. De igual manera se presenta una ecuación que modela un proceso de autocatálisis, (ver [3]).

En el capítulo 2 se realiza el análisis analítico a una ecuación de reacción-difusión, con un término difusivo no lineal y con un orden cinético arbitrario en el término reactante tal como es presentado en [4]; donde se demostró la existencia de ondas viajeras monótonas. Asimismo se revisa un sistema de reacción-difusión

conocido con el nombre de Gierer-Meinhardt, el cual fue propuesto para modelar la dinámica de algunos procesos químicos.

Finalmente en el capítulo 3 se presentan los retratos fase para algunos valores particulares de la ecuación de reacción-difusión con un término difusivo no lineal y con un orden cinético arbitrario. También se muestran las soluciones asociadas a estas trayectorias en las que se puede observar la forma de las ondas monótonas y oscilatorias. De igual forma se muestra de que manera las soluciones dependen del tiempo. Por último se grafica el retrato fase para el sistema de reacción-difusión sin el término difusivo, el cual tiene un comportamiento oscilatorio. Todas las gráficas se obtuvieron utilizando el método de Runge-Kutta de cuarto orden.

Los sistemas, que se presentaron en este trabajo, pertenecen a una familia de modelos en ecuaciones diferenciales parciales no lineales, los cuales se conocen como sistemas de reacción-difusión, que de manera general, explican, describen y permiten entender fenómenos que se encuentran en la Naturaleza, (ver [5]). Posteriormente la aplicación de estos modelos ha dado lugar al desarrollo de disciplinas asociadas a la formulación matemática de diversos procesos como la descripción de la acción oscilatoria.

Capítulo 1

Ecuación de reacción-difusión

Si se refiere a una densidad de individuos, animales, bacterias, moléculas, partículas o inclusive una concentración de sustancias químicas en la cual se quiere describir el cambio de las variables de estado de algun fenómeno que ocurre, se pueden utilizar las ecuaciones de reacción-difusión, lo cual permite entender la dinámica del sistema. De aquí en adelante vamos a pensar que las variables son sustancias químicas.

Se entiende a la *difusión* como el movimiento de las sustancias involucradas en el proceso a lo largo del dominio espacial y la *reacción* como el proceso de interacción mediante la cual se transforman las sustancias involucradas en el fenómeno.

Se denomina comunmente *patrón* a las distribuciones espacio temporales de las sustancias involucradas, en un fenómeno regido por los procesos de reacción y difusión.

Supongase que se tiene una sustancia en una región con una superficie cerrada S cuyo volumen es V y que se quiere describir su dinámica, se nota que resulta mucho más difícil proponer un modelo para describir la dinámica de la sustancia conociendo el comportamiento de cada compuesto o elemento, que proponer un modelo basado en la densidad o en la concentración; es decir, queremos entender como es el movimiento de los componentes o elementos químicos que forman la sustancia, ya que su interacción da lugar a un nuevo estado.

Si $u(x, t)$ es la función de concentración de la sustancia, se trata de saber como cambia esta función de acuerdo a las leyes preestablecidas; este principio es conocido como la ecuación de conservación general que afirma lo siguiente:

La razón de cambio de la cantidad de materia es igual a la razón neta a la cual la materia fluye a través de las fronteras de S más la razón neta de creación de materia.

Esto es

$$\frac{\partial}{\partial t} \int u(x, t) dv = - \int_v J \cdot ds + \int_v f dv \quad (1.1)$$

donde f es la fuente del material, que puede ser función de u , x y t . Aplicando el teorema de la divergencia y suponiendo que $u(x, t)$ es continua, la última ecuación se convierte en:

$$\int_v \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot J - f(u, x, t) \right] dv = 0 \quad (1.2)$$

Como el volumen de V es arbitrario, entonces la integral debe ser cero y así la ecuación de conservación para u es

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot J = f(u, x, t) \quad (1.3)$$

Esta ecuación es válida para cualquier flujo de transporte en general J , si es por difusión, entonces la generalización de (1.1) para este ejemplo es:

$$J = -D \cdot \nabla u \quad (1.4)$$

y la ecuación (1.3) se convierte en

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f + \nabla \cdot (D \cdot \nabla u) \quad (1.5)$$

donde D puede ser una función de x y u .

Por ejemplo, f podría representar el proceso de muerte y nacimientos y u la densidad poblacional. Si el crecimiento poblacional es logístico, entonces f es:

$$f = \alpha \tilde{u}(\beta - \tilde{u}) \quad (1.6)$$

donde $\alpha > 0$ y $\beta > 0$, se tiene que

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = D \nabla^2 \tilde{u} + \alpha \tilde{u}(\beta - \tilde{u}) \quad (1.7)$$

CAPÍTULO 1. ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

La ecuación (1.7) conviene escribirla en términos de variables adimensionales, para ello se define:

$$\tilde{u}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \mu u(x, t), \quad \tilde{x} = Lx, \quad \tilde{t} = Tt \quad (1.8)$$

y se elige

$$\mu = \beta, \quad t = \frac{1}{\alpha\beta}, \quad L^2 = \frac{D}{\alpha\beta} \quad (1.9)$$

entonces

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} \cdot \frac{d\tilde{t}}{dt}, \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{t}} \cdot \frac{1}{\alpha\beta}, \\ \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} \cdot \frac{d\tilde{x}}{dx} \\ &= \mu \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \tilde{x}} L \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \tilde{u}}{\partial \tilde{x}^2} L^2 \end{aligned}$$

sustituyendo en la ecuación (1.7)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + u(1 - u) \quad (1.10)$$

y ésta es una manera de obtener la ecuación de Fisher (1.10), la cual no tiene una solución analítica, (ver [10]).

Al plantear la ecuación anterior nos interesa saber como se propaga la concentración al ser perturbada, en el medio, dicha propagación describe normalmente una onda.

Una *onda viajera* es aquella onda la cual viaja sin cambiar de forma en el tiempo.

Se quiere saber si la ecuación de Fisher (1.10) tiene como solución a una onda viajera que corresponde a una distribución de la sustancia, de forma fija que se

propaga en un universo unidimensional, así que se propone buscar una solución de la forma:

$$u(x, t) = w(z), \quad z = x - kt \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{dw}{dz}k, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{dw}{dz}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{d^2 w}{dz^2} \quad (1.12)$$

observese que w representa una onda viajera, entonces la forma de la solución será la misma para todo el tiempo y la velocidad de propagación es constante; sustituyendo (1.11) y (1.12) en la ecuación de Fisher

$$-w'k = w'' + w(1 - w) \quad (1.13)$$

es decir

$$w'' + kw' + w(1 - w) = 0 \quad (1.14)$$

entonces hay que determinar los valores k de tal manera que w no tenga soluciones negativas, pues se trata de la concentración de una sustancia,

$$\lim_{z \rightarrow \infty} w(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} w(z) = 1 \quad (1.15)$$

la ecuación (1.14) es equivalente a el sistema de ecuaciones (1.16)

$$\begin{aligned} w' &= v \\ v' &= -w(1 - w) - kv \end{aligned} \quad (1.16)$$

los puntos críticos del sistema (1.16) son: $(0, 0)$ y $(1, 0)$; la matriz asociada a dicho sistema es:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -(1 - 2w) & -k \end{bmatrix}$$

El punto $(0, 0)$ tiene asociado el polinomio característico $p(\lambda) = \lambda^2 + k\lambda + 1$. Si $k \geq 2$, entonces los valores propios son negativos, lo cual indica que el punto es estable. Si $k = 2$, entonces se tendrá un nodo degenerado. Si $k < 2$, entonces los valores propios son complejos.

El punto $(1, 0)$ tiene asociado el polinomio característico $p(\lambda) = \lambda^2 + k\lambda - 1$; de donde se tiene que para cualquier valor de k se tendrá un valor propio positivo y otro negativo. Por lo tanto el punto $(1, 0)$ es un punto silla.

Si $k < 2$ se tendrán valores negativos de la trayectoria contradiciendo el requerimiento de que $u(z) \geq 0$. Así se tiene que las soluciones $w(z)$ para la ecuación de Fisher (1.10) deben satisfacer: (1.14), $w(-\infty) = 1$ y $w(\infty) = 0$ con $k \geq 2$, de donde se ve que una trayectoria que inicia en $(1, 0)$ tiene que llegar a $(0, 0)$, dicha trayectoria recibe el nombre de trayectoria heteroclínica.

La ecuación de Fisher aparece en muchas situaciones similares, por ejemplo si se vierte una pequeña cantidad de tinta en un vaso de agua se puede ver como la tinta se difunde por toda el agua, por medio de la difusión molecular. Esta situación puede ser modelada por la ecuación de Fisher, (ver [10]), donde la ley de Fick se aplica, para afirmar que el flujo de la tinta va de zonas de alta concentración a zonas de baja concentración, similarmente si se considera una varilla uniforme y se comienza a calentar en algún punto fijo se puede pensar que hay un flujo de calor de las zonas calientes a las zonas frías. Así mismo podemos entender que si se está modelando la densidad poblacional se puede decir que hay una migración de las áreas de alta densidad poblacional a las áreas de baja densidad, (ver [10]).

Considerese nuevamente la ecuación de Fisher (1.10), si se supone que u es pequeño, entonces u^2 será más pequeño en comparación con u . Si se desprecia el término cuadrático en (1.10), se tiene la ecuación linealizada de (1.10)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + u \quad (1.17)$$

Supongase que $u(x, 0) \sim Ae^{-ax}$ cuando $x \rightarrow \infty$ donde $a > 0$ y $A > 0$, entonces se buscan soluciones infinitas para (1.17) de la forma:

$$u(x, t) = Ae^{-a(x-kt)} \quad (1.18)$$

Si se sustituye la expresión (1.18) en la ecuación (1.17), se obtiene una relación entre k y a conocida con el nombre de *dispersión*

$$ka = 1 + a^2 \implies k = a + \frac{1}{a} \quad (1.19)$$

De esta manera se tiene que k se puede escribir en función de a y de aquí se desprende el hecho de que el valor mínimo para k se alcanza en $k = 2$.

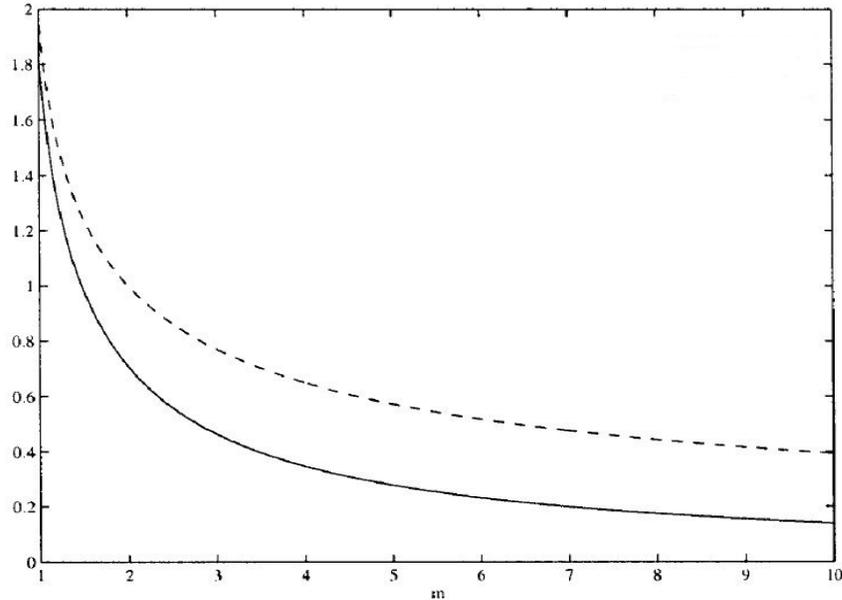


Figura 1.1: Velocidad para la autocatálisis.

Por otro lado, si una condición inicial satisface $u(x, 0) = Ae^{-ax}$, cuando $x \rightarrow \infty$, entonces la velocidad de la onda asintótica de la solución de la onda viajera de (1.10) es:

$$k = a + \frac{1}{a}, \quad 0 < a \leq 1; \quad k = 2, \quad a \geq 2 \quad (1.20)$$

como se afirma en [5].

1.1. Un modelo para el proceso de la autocatálisis

La ecuación unidimensional que modela el proceso de la autocatálisis, esta dada por

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla^2 u + u^m(1 - u) \quad (1.21)$$

donde $m > 1$ es el orden de reacción; éste modelo se aplica cuando el coeficiente de difusión de la autocatálisis y el reactante son iguales, (ver [3]). Notese que cuando $m = 1$, se tiene la ecuación de Fisher (1.10).

CAPÍTULO 1. ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

Se observa que la ecuación (1.21) se puede ver como un caso particular de la ecuación (1.5) con el término de difusión constante y $f(u, x, t) = u^m(1 - u)$.

Nuevamente se quiere ver si la ecuación (1.21) tiene como solución una onda viajera, es decir, se quiere encontrar soluciones de la forma (1.11), entonces (1.21) se transforma en la ecuación diferencial ordinaria

$$w'' + kw' + w^m(1 - w) = 0 \quad (1.22)$$

la cual es equivalente al sistema de ecuaciones siguiente:

$$\begin{aligned} w' &= v \\ v' &= -w^m(1 - w) - kv \end{aligned} \quad (1.23)$$

cuya matriz asociada al sistema es:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ w^{m-1}((m+1)w - m) & -k \end{bmatrix} \quad (1.24)$$

la cual tiene sus puntos críticos en $(0, 0)$ y $(1, 0)$. A continuación se realizará el análisis lineal al rededor de estos puntos.

El punto $(0, 0)$ tiene asociado el polinomio característico $p(\lambda) = \lambda^2 + \lambda k$ y sus valores propios son: 0 y $-k$; por lo tanto es un punto no hiperbólico. El punto $(1, 0)$ tiene asociado el polinomio característico $p(\lambda) = \lambda^2 + \lambda k - 1$ y sus valores propios son: $\frac{-k - \sqrt{k^2 + 4}}{2}$ y $\frac{-k + \sqrt{k^2 + 4}}{2}$; de donde el punto es hiperbólico.

John Billingham demostró, en [3], la existencia de la velocidad mínima de onda, para un sistemas de reacción-difusión, en particular para la ecuación (1.21).

Las cotas superior e inferior para la velocidad mínima son:

$$k = 2\sqrt{\frac{1}{m} \left(\frac{m-1}{m}\right)^{m-1}} \quad (1.25)$$

$$k_0 = 4 \left\{ \sup_{0 < u < 1} \frac{f(u, -\frac{1}{2}u)}{u} \right\} \quad (1.26)$$

respectivamente. En la figura 1.1, (tomada de [3]) se muestra la gráfica de las cotas superior e inferior para la velocidad mínima, también se nota que cuando $m = 1$, entonces $k = 2$, y además obtenemos la ecuación (1.14), en la cual el punto $(0, 0)$ es un punto hiperbólico.

Otra característica de los sistemas de reacción-difusión son las ondas viajeras, ésta es una característica casi universal de los sistemas de reacción-difusión. La existencia de dichos frentes de onda fue verificada con el análisis numérico en una y dos dimensiones, (ver [2]). Desde el punto de vista físico, este tipo de soluciones describen procesos de transición de un equilibrio a otro, y generando un patrón de onda que se desplaza desde las condiciones iniciales.

Como por ejemplo en los modelos de reacción-difusión de algunos procesos químicos, las interacciones químicas generan patrones complejos en el espacio debido a que se encuentran términos de transporte, síntesis y degradación que dependen de todas las sustancias químicas presentes en el dominio de análisis.

Capítulo 2

Análisis de una ecuación de reacción-difusión

Ya se han mencionado algunos ejemplos en donde se presenta la difusión, el cual es un fenómeno que ocurre constantemente en la naturaleza y es fundamentalmente un mecanismo de que depende de las propiedades físicas del medio en el cual se lleva a cabo. Algunas de estas propiedades son: la temperatura, la dimensión y la estructura geométrica del espacio o la sustancia en el cual se lleva a cabo la difusión ó el tipo de interacción entre las sustancias que se difunden y la sustancia en la cual ocurre este fenómeno.

Se considerara nuevamente la ecuación (1.5) con $D = D(u)$ en una dimensión, entonces ésta ecuación la podemos reescribir como:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = f(u) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.1)$$

Específicamente vamos a considerar

$$\begin{aligned} f(u) &= \kappa u^p (1 - u^q) \\ D(u) &= D_0 u^m \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde D_0 , m , p y q son constantes positivas, $f(u)$ tiene dos ceros uno en $u = 0$ y otro en $u = 1$, (ver[5]). Escribiendo (2.1) junto con (2.2) en variables adimensionalizadas obtenemos la ecuación siguiente

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u^p (1 - u^q) + \frac{\partial}{\partial x} \left(u^m \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.3)$$

CAPÍTULO 2. ANÁLISIS DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

donde p , q y m son parámetros positivos.

En la ecuación (2.3) el término de la difusión no es lineal y el término reactivo es de un orden arbitrario; esta ecuación es muy importante debido a sus aplicaciones en la biología o en la química, (ver [4] o [5]).

Si reescribimos el término de difusión, entonces la ecuación (2.3) queda

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u^p(1 - u^q) + mu^{m-1} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + u^m \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.4)$$

en la cual se observa un término de difusión no lineal, que puede pensarse como una contribución equivalente a la convección con “velocidad” $-mu^{m-1} \frac{\partial u}{\partial x}$.

Mencionaré algunos casos particulares de la ecuación (2.3), los cuales tienen como solución a una onda viajera; para ello primero consideremos cuando $m = 0$ y $p = 1$, entonces la ecuación (2.3) se convierte en

$$\frac{\partial u}{\partial x} = u(1 - u^q) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

la cual tiene como solución exacta:

$$u(x, t) = \frac{1}{(1 + ae^{(b(x-ct))})^s} \quad (2.6)$$

donde a , b y s son constantes positivas.

Otra solución exacta que se puede encontrar de (2.3) es cuando $m = 0$, $p = q + 1$ con $q > 0$ con lo cual se obtiene la ecuación siguiente

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u^{q+1}(1 - u^q) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.7)$$

Una solución mas interesante y útil es el caso cuando $p = q = 1$, $m = 1$, en (2.3) da la ecuación siguiente:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1 - u) + \frac{\partial}{\partial x} \left(u \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.8)$$

la cual representa un modelo de un crecimiento poblacional logístico con un coeficiente que depende de la densidad; es decir que la dispersión de una población a

CAPÍTULO 2. ANÁLISIS DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

regiones de baja densidad es más rápida cuando la población aumenta, (ver [5]).

Ahora se realizará un estudio más general de la ecuación (2.3) unidimensional; para ello sea $qq = p + q$, entonces la ecuación (2.3) queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u^p - u^{qq} + \frac{\partial}{\partial x} \left(u^m \frac{\partial u}{\partial x} \right), x \in R \quad (2.9)$$

donde p y qq son ambos positivos.

En [4] se afirma que el término de reacción es conocido porque causa un comportamiento oscilatorio en la solución.

Ahora se quiere ver si la ecuación (2.9) tiene como solución a una onda viajera, dicho de otra manera, estamos buscando soluciones que sean de la forma (1.11), donde k es la constante de velocidad de la onda. Sustituyendo (1.12) en la ecuación (2.9), esta se reduce a la ecuación diferencial ordinaria siguiente:

$$-k \frac{dw}{dz} = \frac{d}{dz} \left(w^m \frac{dw}{dz} \right) + w^p - w^{qq} \quad (2.10)$$

Reescribiendo esta ecuación, nos queda

$$-kw^{m-1} \frac{dw}{dz} = w^m \frac{d}{dz} \left(w^{m-1} \frac{dw}{dz} \right) + \left(w^{m-1} \frac{dw}{dz} \right) + w^{m-1}(w^p - w^{qq}) \quad (2.11)$$

y definimos

$$v = w^{m-1} \frac{dw}{dz} \quad (2.12)$$

obtenemos el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{dw}{dz} &= \frac{v}{w^{m-1}} \\ \frac{dv}{dz} &= -\frac{(k+v)v + w^{m-1}(w^p - w^{qq})}{w^m} \end{aligned} \quad (2.13)$$

para resolver la singularidad del sistema (2.13) que se genera cuando $w \rightarrow 0$ suponemos que $m > 1$ y definimos una transformación de la variable $\tau = \tau(z)$

CAPÍTULO 2. ANÁLISIS DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

en (2.13) tal que $d\tau/dz = 1/w^m(z)$ y el sistema nos queda de la forma:

$$\begin{aligned}\frac{dw}{d\tau} &= wv \\ \frac{dv}{d\tau} &= -(k+v)v - w^{m-1}(w^p - w^{qq})\end{aligned}\quad (2.14)$$

Nótese que los sistemas (2.13) y (2.14) son topológicamente equivalentes en el plano superior positivos $\{(w, v) \mid w > 0, -\infty < v < +\infty\}$.

La matriz asociada al sistema (2.14) es:

$$\begin{bmatrix} v & w \\ w^{m-2}[(m+qq-1)w^{qq} - (p+m-1)w^p] & -(k+2v) \end{bmatrix}$$

El sistema (2.14) tiene tres puntos críticos: $(0, 0)$; $(0, -k)$ y $(1, 0)$, entonces la búsqueda de soluciones de ondas viajeras de (2.1) es equivalente a buscar trayectorias heteroclínicas de (2.14), las cuales conectan los puntos estacionarios de arriba.

La linealización alrededor de $(0, 0)$ muestra que es un punto no hiperbólico y que los valores propios de la matriz asociada al sistema (2.14) en $(0, 0)$ son: 0 y $-k$, los correspondientes vectores propios son $V_1 = (1, 0)^T$ y $V_2 = (0, 1)^T$ respectivamente. Usando el teorema de la variedad central y la expansión de Taylor con $p > qq$ obtenemos una aproximación de la trayectoria local alrededor de $(0, 0)$ y encontramos que

$$v(\theta) = \frac{w^m}{k} + O(w^{m+1}) \quad (2.15)$$

En [4] se encuentra que la variedad central del sistema (2.14) tiene la forma:

$$\begin{aligned}\frac{dw}{d\tau} &= \frac{w^{m+1}}{k} + O(w^{m+2}) \\ \frac{dv}{d\tau} &= \frac{m}{k^2}w^{2m-1} + O(w^{2m})\end{aligned}\quad (2.16)$$

Por lo tanto $(0, 0)$ es un nodo degenerado inestable.

La linealización alrededor de $(1, 0)$ muestra que es un nodo estable si $k \geq k_*$ con $k_* = 2\sqrt{p-qq}$ y es un foco estable si $k < k_*$, mientras que la linealización

alrededor de $(0, -k)$ nuestra que es un punto silla.

El análisis lineal que se realizó muestra que sólo se admiten trayectorias heteroclínicas, las cuales conectan el punto $(0, 0)$ con el punto $(1, 0)$ y que corresponde a las ondas viajeras.

Una propiedad que me parece importante mencionar que la ecuación de Fisher pertenece a una familia más general propuesta por Barrio en [1], cuyo modelo no fue pensado para modelar un fenómeno o una reacción química específica, sino que fue desarrollado para estudiar el compartamiento general de las ciencias químicas en presencia de difusión.

Apesar de que para ciertos valores la ecuación (2.1) es una generalización de la ecuación de Fisher; ésta no pertenece a la familia de ecuaciones propuesta por Barrio en [1].

2.1. Un sistema de reacción-difusión

Supongase que se tienen dos sustancias y se quiere describir como interactúan entre ellas; para describir esta dinámica, el modelo general (2.9) no es de mucha ayuda puesto que sólo describe la dinámica de una sola sustancia; en su lugar se pueden usar el sistema de ecuaciones propuesto por Gierer y Meinhardt, en [1972], quienes basados en las ideas de Turing proponen:

$$\begin{aligned}u_t &= k_1 - k_2u + \frac{k_3u^2}{v(k_6 + k_7u^2)} + D_1 \nabla^2 u \\v_t &= k_4u^2 - k_5v + D_2 \nabla^2 v\end{aligned}\tag{2.17}$$

donde u es la sustancia química activadora, que inicia la producción de la segunda sustancia química v que es el inhibidor, el cual detiene la producción del activador. En tanto que el inhibidor disminuye la velocidad de la reacción, el activador produce un aumento en la velocidad de la reacción. El sistema de ecuaciones es conocido como reacción-inhibición.

Adimensionalizando el sistema de ecuaciones (2.17) tenemos

$$u_t = \gamma \left[a - bu + \frac{u^2}{v(1 + ku^2)} \right] + \nabla^2 u$$

CAPÍTULO 2. ANÁLISIS DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN

$$v_t = \gamma(u^2 - v) + d \nabla^2 v \quad (2.18)$$

Se observa que el sistema de ecuaciones (2.18) tiene términos no lineales. Ahora supongase que no existe el término de difusión, entonces sistema de ecuaciones (2.18) se convierte en:

$$\begin{aligned} u_t &= a - bu + \frac{u^2}{v(1 + ku^2)} \\ v_t &= u^2 - v \end{aligned} \quad (2.19)$$

Las ceroclinas de este sistema son:

$$\begin{aligned} f(u, v) &= a - bu + \frac{u^2}{v(1 + ku^2)} \\ g(u, v) &= u^2 - v \end{aligned} \quad (2.20)$$

para u y v respectivamente. Los puntos de intersección de f y g , si es que los hay, son los punto de equilibrio para el sistema.

Aún sin el término difusivo el sistema de ecuaciones (2.19) es complicado de tratar.

Sekimura y otros en [8], realizaron la simulación numérica del sistema de reacción-difusión (2.18), sobre el dominio de las alas de una mariposa, usando el método del elemento finito y obtuvieron algunos patrones de coloración de las alas de la mariposa. Los resultados de la simulación numérica que obtuvieron, resultaron ser muy similar a las alas de la mariposa *Papilio Dardanus* y con ello proponen que la coloración de las alas de la mariposa se debe a que algunas sustancias químicas que se difunden en el medio tiene como resultado la formación de patrones de la coloración de las alas de la mariposa, ver [8].

Al analizar las conclusiones que se obtuvieron de los resultados numéricos y los resultados experimentales, (ver por ejemplo [1], [8] o [11]), sobre la dinámica que se lleva a cabo en un sistema, me parece importante mencionar a Vicsek quien realiza algunas observaciones, en [12], donde él “acepta el hecho de que los procesos que ocurren simultáneamente en diferentes escalas o niveles son importantes y el comportamiento intrínseco de todo el sistema depende de su unidad en una manera no trivial. La descripción del comportamiento total del sistema requiere cualitativamente nueva teoría, porque las leyes que describen su comportamiento son cualitativamente diferentes de estas que gobiernan sus unidades individuales”.

Capítulo 3

Resultados numéricos

Una parte del estudio de las ecuaciones de reacción-difusión se realiza utilizando diversos métodos numéricos, debido a las no linealidades que se encuentran en algunos términos, no es posible encontrar una solución exacta de las ecuaciones.

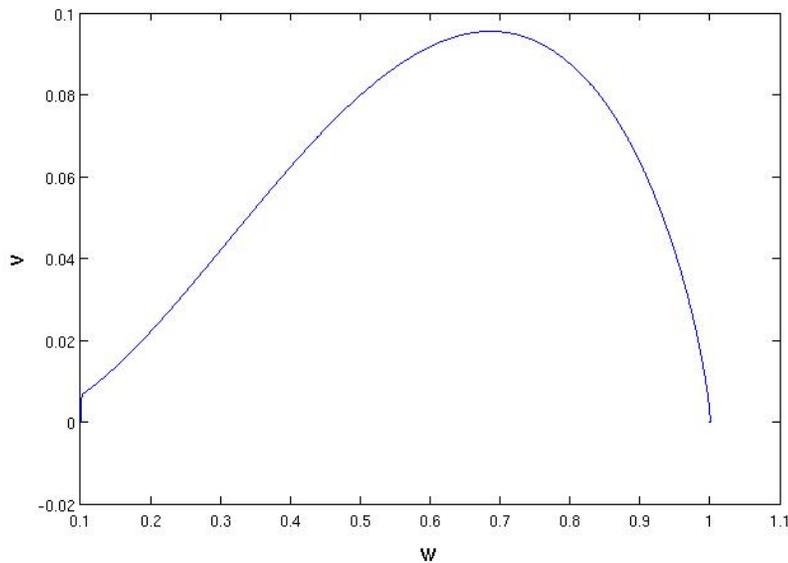


Figura 3.1: Trayectoria heteroclínica que conecta los puntos estacionarios $(0, 0)$ y $(1, 0)$.

Se estudiarán las soluciones de la ecuación (2.13) con $m = p = 2$ y $qq = 1$

por medio del esquema de Runge-Kutta de cuarto orden.

En la figura 3.1 se muestra el retrato fase (θ, v) que contiene una solución que conecta los puntos estacionarios $(0, 0)$ y $(1, 0)$, con una velocidad de $k = 1.4$. En la figura 3.2 se observa el retrato fase (θ, v) que contiene una trayectoria oscilatoria que conecta el punto $(0, 0)$ con $(1, 0)$, con una velocidad $k = 0.5$.

En la figura 3.3 se puede ver la solución de la onda viajera que corresponde a la trayectoria de la figura 3.1, con una velocidad de $k = 1.4$ y en la figura 3.4 notamos el comportamiento oscilatorio de la solución de la onda viajera que corresponde a la trayectoria de la figura 3.2. Para aproximar tales ondas se resolvió el sistema de ecuaciones (2.14).

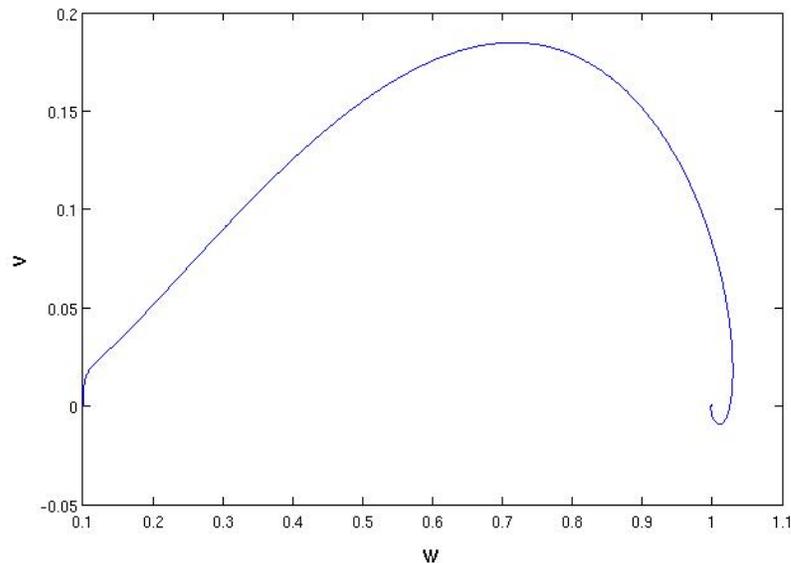


Figura 3.2: Trayectoria heteroclínica oscilatoria que conecta los puntos $(0, 0)$ y $(1, 0)$.

A continuación se estudia como se desarrollan en el tiempo las ondas viajeras y su forma; para ello resolvemos el problema (2.6) que depende del tiempo, con $m = p = 2$ y $qq = 1$ utilizando la discretización siguiente:

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{J_i - J_{i-1}}{dx} + u_i(u_i - 1) \quad i = 0, 1, 2, \dots, N \quad (3.1)$$

que fue deducida en [4]; donde

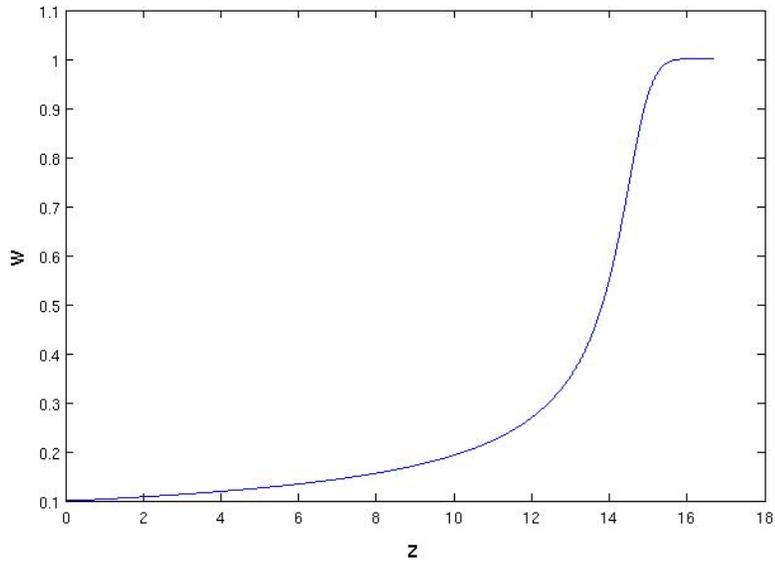


Figura 3.3: Solución de la onda viajera correspondiente a la figura 3.1

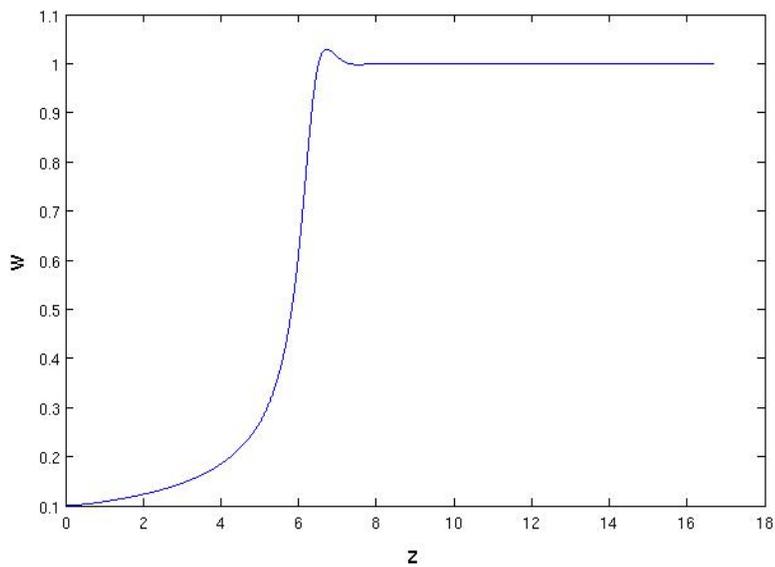


Figura 3.4: Solución de la onda viajera correspondiente a la figura 3.2

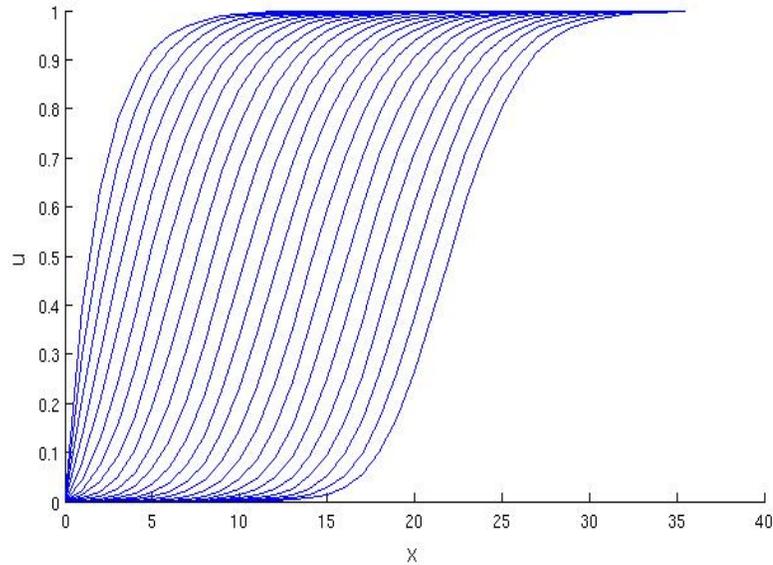


Figura 3.5: Soluciones que dependen del tiempo

$$J_i = \left(\frac{u_{i+1} + u_i}{2} \right)^2 \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{dx} \right) \quad (3.2)$$

con condiciones iniciales

$$u(x, 0) = 1 - e^{(-\alpha x)}, \quad \alpha > 0 \quad (3.3)$$

Para la implementación de la solución numérica se aplicaron las condiciones iniciales de (3.3).

En las figuras 3.5 y 3.6 se muestra como evolucionan las ondas viajeras en el tiempo con diferentes velocidades y que emergen como una solución a lo largo del tiempo.

Claramente en estas figuras la solución numérica muestra la evolución de las ondas viajeras con diferentes velocidades, en la figura 3.6 se muestra una onda rápida. Notemos también que la forma de la velocidad de la onda depende de las condiciones iniciales, (ver [4]).

Por lo tanto el resultado numéricos reafirma el resultado analítico. Finalmente notamos que la simulación numérica realizada en el problema de la ecuación di-

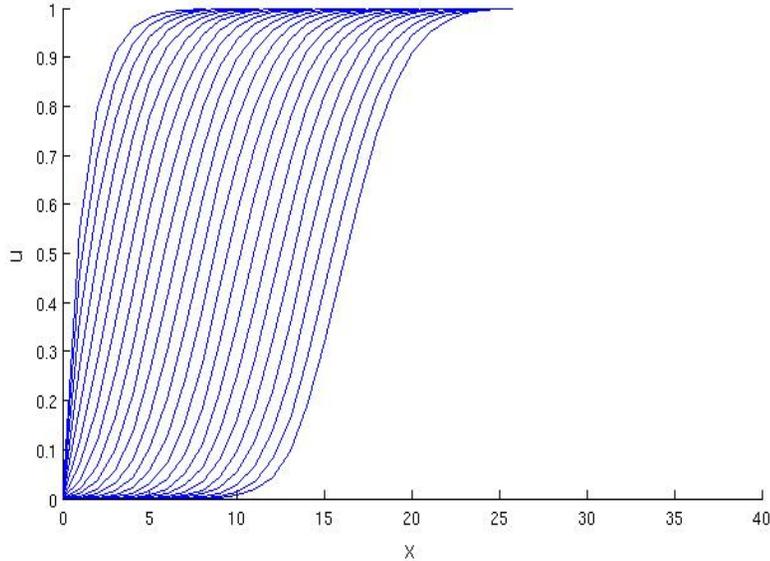


Figura 3.6: Soluciones que dependen del tiempo

ferencial parcial indica estabilidad de estas ondas viajeras, (ver [4]).

La figura 3.7 muestra la gráfica de las ceroclinas del sistema de ecuaciones (2.19), en el cual se observa que hay un punto de equilibrio con $a = 0.1$, $b = 1.0$ y $k = 0.5$.

El sistema de ecuaciones (2.19) presenta un comportamiento oscilatorio en el retrato fase (u, v) sin el término difusivo cuando $a = 0.1$, $b = 1.0$ y $k = 0.5$; el cual se puede observar en la figura 3.8 que las trayectorias convergen al punto $(0,839456; 0,704687)$ de equilibrio, el cual fue calculado con una precisión de seis dígitos. Es importante mencionar que el término difusivo también puede causar un comportamiento oscilatorio.

Una de las características del modelo de Gierer-Meinhardt es el hecho de que describe patrones, debido a la no linealidad que se genera cuando las sustancias interactúan entre ellas [6]; lo cual permite explicar la coloración de las alas de algunas mariposas. En [8] se resolvió de manera numérica las ecuaciones de Gierer-Meinhardt y uno de los resultados se muestra en la figura 3.10, la cual muestra un parecido con la mariposa de la figura 3.9, ambas figuras fueron tomadas de [8].

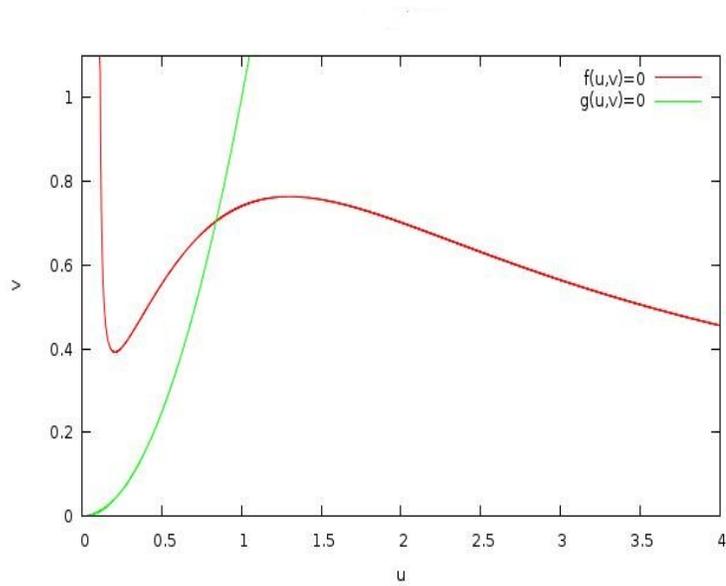


Figura 3.7: Ceroclinas

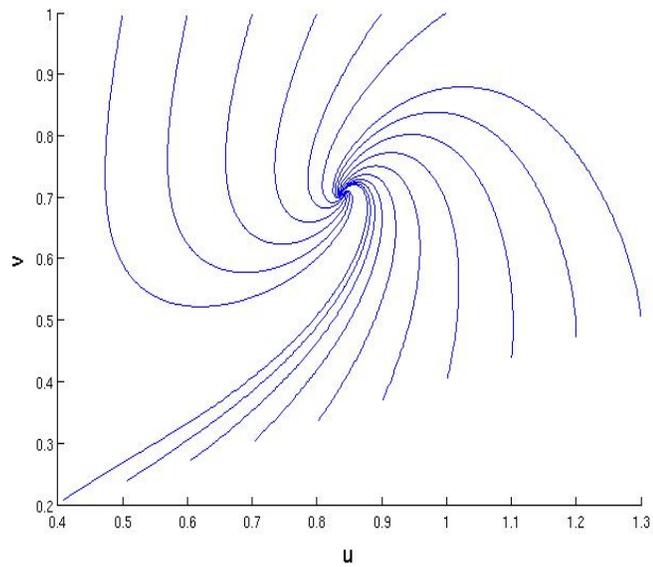


Figura 3.8: Retrato fase



Figura 3.9: *Hippoconides*

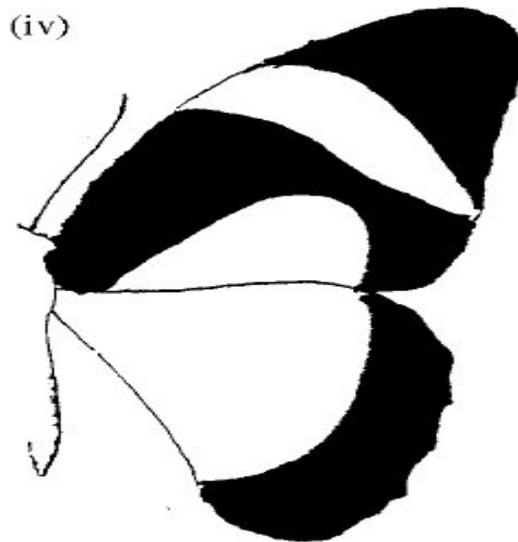


Figura 3.10: Simulación numérica de la *hippoconides*

Conclusiones

Este trabajo inició con la deducción de la ecuación de reacción-difusión para una sustancia. Sin embargo este resultado se puede extender a varias sustancias o poblaciones de individuos denotados por $u(t, x)$ o un vector de densidad como se puede ver en [5].

Asimismo se analizó de manera analítica y numérica una ecuación de reacción-difusión con un término no lineal de difusión y un término de reacción de orden arbitrario cinético, la importancia de dicha ecuación radica en el hecho de que el término no difusivo no lineal causa un comportamiento oscilatorio y por ello ha tenido varias aplicaciones, ver [3]. Aplicando algunos métodos numéricos reproducimos las ondas oscilatorias y monótonas que se obtuvieron en [4] en la cual mostramos que dependen del tiempo.

La ecuación que se analizó puede verse como una generalización de la ecuación de Fisher la cual es muy importante, ya que algunas de sus aplicaciones se centra en el estudio de la dinámica de bacterias y en las epidemias.

Por otra lado también se revisó un sistema de reacción-difusión con un término no lineal, el cual es muy útil debido a que modela la dinámica que se lleva a cabo entre sustancias químicas conocido con el nombre de Gierer- Meinhardt, (ver [8] o [6]).

Es importante mencionar que la longitud de onda está determinada entre las moléculas y las tasas de difusión, lo cual es un hecho fundamental, ya que permite realizar modelos que se asemejan más a la realidad.

En ambos modelos sólo nos interesa estudiar el comportamiento cualitativo del modelo, lo cual nos permite predecir la evolución del sistema.

Observe que los sistemas de reacción-difusión permiten modelar, simular y describir una amplia variedad de fenómenos que se encuentran en la naturaleza tal como la formación de patrones en diversos procesos físicos y químicos; la formación de la coloración de la piel de algunos animales, la formación de huesos, órganos, tejidos y tumores; la fisiología del corazón; las formaciones geológicas; la distribución de poblaciones de animales; a partir de la formación de patrones espacio temporales, ver [1].

Por otra parte vemos que el estudio de los modelos empleando las ecuaciones de reacción-difusión se lleva a cabo usando diversas técnicas numéricas debido a las formas complejas de los dominios comúnmente tratadas y a las no linealidades de los términos, lo cual en algunas ocasiones nos permite tener una visualización de la dinámica que se está llevando a cabo.

Bibliografía

- [1] Barrio, R. A., Turing Systems: a general model for complex patterns in nature, *Electronic Journal of Theoretical Physics*, vol 4, pp. 1-26.
- [2] Barrio, R. A., Aplicaciones del modelo BVAM a sistemas complejos, *Revista Dígital Universitaria*, 2010, vol. 11, pp. 1-16.
- [3] Billingham, J., Phase plane analysis of one-dimensional reaction diffusion waves with degenerate reaction terms., *Dynamics and Stability of Systems*, 2000, vol. 15, pp. 23-33.
- [4] Mansour M. B. A., Traveling wave patterns in nonlinear reaction-diffusion equations, *Journal of Mathematical Chemistry*, 2010, vol. 48, pp. 558-565.
- [5] Murray, J. D., *Mathematical Biology*, Springer, 1989.
- [6] Philip K. M., Using mathematical model to help understand biological pattern formation, *Comptes Rendus Biologies*, 2004, vol. 327, pp. 225-234.
- [7] Sánchez G., Miramontes V. P., Gutiérrez S., *Clásicos de la biología matemática, Siglo veintiuno*, 2002.
- [8] Sekimura T., Madzvamuse A., Wathen A. J., Maini P. K., A model for colour pattern formation in the butterfly wing of *Papilio dardanus*, *Proceedings the Royal Society*, 2000, vol. 267, pp. 851-859.
- [9] Turing A. M., The chemical basis of morphogenesis, 1952, vol. 237, pp. 37-72.
- [10] Tveito A. y Winther R., *Introduction to partial differential equation*, Springer, 1998.

- [11] Venegas A. J. C., Landinez D. A. N. S. y Garzón A. D. A., Solución computacional de modelos biológicos de formación de patrones espacio-temporales, *Revista Chilena de Ingenieria* 2009, vol. 17, pp. 182-194.
- [12] Vicsek T., The bigger picture, *Nature*, 2002, vol. 418, pp. 131.