



UNIVERSIDAD DE SONORA

DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Programa de Licenciatura en Matemáticas

Estudio de la propagación de ondas en el
modelo de Gray-Scott

T E S I S

Que para obtener el título de:

Licenciado en Matemáticas

Presenta:

César Alberto Rosales Alcantar

Director de tesis: Dr. Daniel Olmos Liceaga

Hermosillo, Sonora, México, 12 de septiembre de 2014

SINODALES

Dr. Francisco Armando Carrillo Navarro

Universidad de Sonora, Hermosillo, México

Dr. Roberto Nuñez González

Universidad de Sonora, Hermosillo, México

Dr. Israel Segundo Caballero

Universidad de Sonora, Hermosillo, México

Dr. Daniel Olmos Liceaga

Universidad de Sonora, Hermosillo, México

“Nadie es capaz de llegar al conocimiento de asuntos divinos y humanos si no ha aprendido previamente a fondo las matemáticas.”

San Agustín

Agradecimientos

“Entre Dios y la ciencia no encontramos jamás una contradicción. No se excluyen, como algunos piensan hoy, se complementan y se condicionan mutuamente.”

Max Planck

Quisiera comenzar este agradecimiento dando gracias a Dios, por fortalecerme en los momentos de debilidad, enseñarme el camino de la rectitud, lealtad, fidelidad y perseverancia.

Quiero agradecer a todo el personal administrativo y académico del Departamento de Matemáticas de la Universidad de Sonora, mis agradecimientos por que siempre se mostraron solidarios con el trabajo, ya sea brindando una sonrisa o una risa, con la cual poder levantar el ánimo y proseguir la investigación. En especial, agradezco al M.C. Jose María Bravo Tapia, al Dr. Fernando Luque Vázquez, al Dr. Misael Avendaño Camacho y al Dr. Jose Luis Soto, pues la confianza y el conocimiento que me brindaron en su momento, han sido determinantes en la elaboración del presente trabajo.

A mis compañeros de generación, que mas que compañeros son mis amigos, mis agradecimientos por esas tardes que disfrutamos aprendiendo y discutiendo los conocimientos.

A mi director de tesis, al Dr. Daniel Olmos Liceaga, el cual sin conocerme me brindó su amistad y hasta la oportunidad de aprender junto con él a lo largo de ésta investigación. La búsqueda de material, las correcciones de éste trabajo (que no fueron pocas) y el cartel son los recuerdos que me brindan seguridad para continuar.

Al comité revisor del presente trabajo: Dr. Francisco Armando Carrillo Navarro, Dr. Roberto Nuñez Gonzalez y Dr. Israel Segundo Caballero, por sus numerosas aclaraciones y correcciones, para poder orientar a buen término la investigación.

Además, quiero hacer un agradecimiento particular a 3 personas que colaboraron de manera distinta en mi formación escolar: Dir. Enrique Rangel, Profr. Alejandro Moreno y

Profra. Eva Barrón. Sin lugar a dudas, el empuje que cada uno de ustedes me dió en mi educación básica fue fundamental para animarme a estudiar esta carrera.

A mi familia, le doy las gracias por todo el apoyo incondicional que he tenido. A mi madre, Prudencia Alcantar Encinas y a mi padre, Francisco Javier Rosales Navarro, les doy todas las gracias por la formación tanto escolar, social y personal que me han brindado. Han sido, son y siempre serán mi inspiración. También quiero agradecer a la familia Anduaga Alcantar, por abrirme las puertas de su casa para tener la oportunidad de estudiar en Hermosillo y apoyarme en mis estudios. A mis tios, Gloria Alcantar, Maria Elena Alcantar, Jose Alcantar, Alfredo Rosales y Teresa Rosales, mi mas sincera gratitud con todo mi corazón.

A mis amigos Arturo, Roberto, Jose David, Kenji, Jose Luis, Yoshio y Justy, por ser amigos incondicionales, por todas las risas, por ayudarme a liberar mis malas tardes con una sencilla plática, por demostrarme que la distancia no es impedimento para tener una amistad sincera. Al Pbro. Francisco Javier Anguiano y sus valiosas lecciones de vida, por ser mi guía espiritual y un muy buen amigo.

A todas las personas y amigos que he conocido a lo largo de estos años a lo largo del país, en mis viajes matemáticos, les dedico este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por brindarme la oportunidad de recibir un incentivo durante la realización de este trabajo, con el cual logre solventar gastos de hospedaje y alimentación.

Por último pero no menos importante, quiero agradecer la compañía de la Srita. Guadalupe Morales Ramirez. Gracias por todas las alegrías has llevado a mi vida, por siempre apoyarme y alentarme a continuar y no rendirme, a esforzarme cada día más aunque no se apreciará el final. Por todo el cariño, alegrías y abrazos.

César Alberto Rosales Alcantar

Hermosillo, Sonora, México a 12 de septiembre de 2014.

Índice general

Agradecimientos	II
Índice general	IV
Índice de figuras	VII
0. Introducción	1
1. Autocatálisis sin decaimiento	5
1.1. Introducción	5
1.2. Modelo Cuadrático	6
1.2.1. Caso $\beta_0 = 0$	9
1.2.1.1. Resultado General	11
1.2.1.2. Interpretación química	11
1.2.2. Caso $\beta_0 > 0$	12
1.2.2.1. Resultado General	13
1.2.2.2. Interpretación química	13
1.3. Modelo Cúbico	14
1.3.1. Caso $\beta_0 = 0$	16
1.3.1.1. Resultado General	17
1.3.1.2. Interpretación química	18
1.3.2. Caso $\beta_0 > 0$	19
1.3.2.1. Resultado General	21
1.3.2.2. Interpretación química	21
2. Autocatálisis con decaimiento	24
2.1. Introducción	24
2.2. Estudio del Modelo S	26
2.2.1. Puntos de Equilibrio	26
2.2.1.1. Bifurcación Silla-Nodo	27
2.2.2. Estabilidad de puntos de equilibrio	30
2.2.2.1. Comportamiento de E_3	32
2.2.2.2. Retratos fase	34
2.2.3. Oscilaciones periódicas	36
2.2.3.1. Exhibición Numérica	37

2.2.3.2. Exhibición Analítica	38
2.3. Estudio del Modelo C	40
2.3.1. Puntos fijos	41
2.3.1.1. Determinación de raíces dobles	41
2.3.2. Condiciones de degeneración	43
2.4. Excitabilidad	45
2.5. Conclusión	47
3. Autocatálisis en medio heterogéneo: Soluciones invariantes en el tiempo.	49
3.1. Introducción	49
3.2. Modelo matemático	50
3.3. Análisis de Puntos Fijos	52
3.4. Soluciones estacionarias del sistema (3.5)	52
3.4.1. Cálculo analítico de las órbitas homoclínicas y heteroclínicas	53
3.4.1.1. Caso $0 < \gamma < \frac{2}{9}$	55
3.4.1.2. Caso $\frac{2}{9} < \gamma < \frac{1}{4}$	59
3.4.1.3. Caso $\gamma = \frac{2}{9}$	61
3.5. Propiedades de las órbitas	62
3.6. Conclusión	68
4. Frentes de propagación en autocatálisis con decaimiento	69
4.1. Introducción	69
4.2. Caso de estudio 1	70
4.2.1. Resultado de la simulación	71
4.2.1.1. Descripción de los pulsos encontrados	71
4.2.2. Explicación del resultado	72
4.2.2.1. Desplazamiento de los pulsos en la dirección del gradiente mayor	72
4.2.2.2. Reflexión respecto a bordes	74
4.3. Caso de estudio 2	76
4.3.1. Resultado de la simulación	76
4.3.2. Explicación del resultado	77
4.3.3. Conclusión	78
4.4. Caso de estudio 3	78
4.4.1. Resultado de la simulación	78
4.4.2. Explicación del fenómeno	79
A. Reacción-Difusión	81
A.1. Difusión	81
A.1.1. Idea intuitiva	81
A.1.2. Expresión matemática	82
A.1.2.1. Primer Ley de Fick	82

A.1.2.2. Segunda Ley de Fick	82
A.2. Reacción-Difusión	84
A.2.1. Expresión matemática	84
Bibliografía	86

Índice de figuras

1.	Figura tomada de [6]. (a) Onda viajera que presenta el fenómeno wave-reflection , respecto a los bordes. (b) Ondas viajeras que presentan el wave-reflection entre sí y con los bordes.	3
2.	Figura tomada de [6]. (a) Onda viajera que presenta el wave-splitting . (b) Panorama general que presenta el wave-splitting , al saturar el medio.	3
1.1.	Imagen de un reactor CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor). Tomada de [8].	6
1.2.	En esta gráfica, la curva C_1 tiene pendiente 4, la curva C_2 tiene pendiente mayor a 4 y la curva C_3 tiene pendiente menor a 4.	9
1.3.	Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables	10
1.4.	Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables	11
1.5.	Bosquejo de comparación entre $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ con $\beta_0 = 0.001$	12
1.6.	Retrafo fase del sistema (1.17) cuando $\beta_0 > 0$. En azul, se muestra el equilibrio γ_+ . Con línea punteadas se muestran los bordes del sentido químico $\gamma = 1$ y $\gamma = -\beta_0$	14
1.7.	En esta gráfica, la curva C_1 tiene pendiente $\frac{27}{16}$, la curva C_2 tiene pendiente mayor a $\frac{27}{16}$ y la curva C_3 tiene pendiente menor a $\frac{27}{16}$	16
1.8.	Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables	18
1.9.	Retrato fase del sistema (1.17) cuando $\beta_0 = 0$. En color azul, se denotan los equilibrios estables. En color rojo, se denota el equilibrio inestable. Las flechas indican la dirección del flujo.	18
1.10.	Diagrama de bifurcación del sistema (1.17) para el caso 1 del Resultado 1.6, con $\beta_0 = 0.05$. En color azul se denotan los equilibrios estables y en color rojo, el equilibrio inestable.	21
1.11.	Diagrama de bifurcación del sistema (1.17) para el caso 2 del Resultado 1.6, con $\beta_0 = 0.25$. La curva sólida de color azul representa el equilibrio estable.	22
1.12.	Retrato fase del sistema (1.17) para $\beta_0 \geq 0.125$. En color azul se denota el equilibrio estable. Las flechas indican la dirección del flujo en cada región.	22
1.13.	Retrato fase del sistema (1.17) para $\beta_0 = 0.05$. En color azul se denotan los equilibrios estables y en color rojo, el equilibrio inestable. Las flechas indican la dirección del flujo en cada región.	23

2.1. (a) Muestra el espacio de parámetros $\beta_0 - \kappa_2$ donde se observan las 11 regiones que narra la literatura. (b) Muestra las dinámicas que presentan los puntos fijos, cuando τ_r es el parámetro de dinámica. Figuras tomadas de [8]	25
2.2. Regiones determinadas por la condición (2.8). (a) Sombreada se observa la región X: $4\tau_r\kappa_2^2 > 1$, (b) La línea sólida representa la región Y: $4\tau_r\kappa_2^2 = 1$, (c) Sombreada se muestra la región Z: $4\tau_r\kappa_2^2 < 1$	28
2.3. Bosquejo de la bifurcación de silla-nodo en el sistema (2.2a) y (2.2b).	28
2.4. Región en el espacio de parámetros, donde se cumple la relación $Tr[J] = 0$ y la relación $Tr[J]^2 - 4Det[J] = 0$	34
2.5. Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_1 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$	35
2.6. Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_2 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$	35
2.7. Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_3 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$	36
2.8. Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_4 . Se tomaron 3 distintas condiciones iniciales: $C_1 = (0.05, 0.1)$, $C_2 = (0.4, 0.1)$ y $C_3 = (0.9, 0.3)$. En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$	37
2.9. (a) Soluciones del PVI (2.5) con la condición inicial $C_1 = (0.004, 0.29)$ (línea punteada) y con la condición inicial $C_2 = (0.004, 0.3)$ (línea sólida), respecto al tiempo τ . (b) Trayectorias de las soluciones T_1 y T_2 del PVI (2.5) con condiciones iniciales C_1 y C_2 , respectivamente, en el plano $\alpha\beta$	38
2.10. Regiones del plano $\alpha - \beta$. La curva azul representa $\dot{\alpha} = 0$ y la curva roja $\dot{\beta} = 0$	38
2.11. Regiones cerrada alrededor de E_3	39
2.12. Los 5 escenarios posibles. (a) Para cada τ_r existe un equilibrio. (b) Para $\tau_r = \frac{1}{\kappa_2}$ existen 2 equilibrios, y para cualquier otro valor de τ_r , existe un equilibrio. (c) Existencia de una isola. (d) Intersección de la isola con el punto fijo que siempre existe. (e) Existencia de un hongo.	43
2.13. En negro se observa la recta $\beta_0 = 0.125$ y en azul se observa la curva $\kappa_2 = \frac{1}{32} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right]$. Ambas están graficadas en el plano $\kappa_2 - \beta_0$	43
2.14. En negro se observa la recta $\beta_0 = 0.125$ y en azul se observa la curva $\kappa_2 = \frac{1}{32} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right]$. En rojo se observa la curva Δ . Estas curvas están graficadas en el plano $\kappa_2 - \beta_0$	45
2.15. Respuesta de sistema a las perturbaciones $\beta_1 = 0.016$, $\beta_2 = 0.017$ y $\beta_3 = 0.018$. En azul se observa la curva nula de α y en rojo se observa la curva nula de β	47

2.16. Respuesta al sistema de Gray-Scott con flujo de entrada para la perturbación $\beta_3 = 0.018$	47
2.17. Respuesta del sistema de Gray-Scott a distintas perturbaciones. Con líneas punteadas, se representa la perturbación $\beta_2 = 0.017$ y con líneas sólidas, se representa la perturbación $\beta_3 = 0.018$	48
3.1. (a) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 2$ (b) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 4$ (c) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 8$	52
3.2. (a) Gráfica de $G_\mu(v)$ con $\mu = 0$. (b) Gráfica de $G_\mu(v)$ con $\mu \in (-M_2, 0)$ (c) Gráfica de la curva de nivel de (a) en el plano $v - v'$. (d) Gráfica de la curva de nivel en el plano $v - v'$	57
3.3. (a) Curvas de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$. (b) Gráfica de $\varepsilon(v, v') = \mu$	57
3.4. (a) Curvas de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$. (b) Gráfica de $\varepsilon(v, v') = \mu$	59
3.5. (a) Gráfica de $G_0(v)$ y $G_\mu(v)$ con $\mu \in (0, M_2)$ (b) Gráfica de las curva de nivel de (a) en el plano $v - v'$	61
3.6. En rojo se exhibe la curva $u(x, \gamma)$ y 4n azul se exhibe la curva $v(x, \gamma)$. (a) Solución estacionaria homoclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = 0.15$. (b) Solución estacionaria heteroclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = \frac{2}{9}$. (c) Solución estacionaria homoclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = 0.23$	68
4.1. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados al tiempo $\tau = 7$	71
4.2. (a) Pulso propagandose de izquierda a derecha en un tiempo $\tau^* = 5$. Perfil de las variables $\alpha(y, \tau^*)$ y $\beta(y, \tau^*)$. (b) Dinámica del sistema sin difusión en el régimen excitable. En el sistema completo (de Reacción-Difusión) cada valor y en el espacio, experimenta el comportamiento mostrado en las dinámicas mostradas arriba.	73
4.3. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados al tiempo $\tau = 6$	74
4.4. Perfiles de los pulsos $\alpha(y, \tau)$ en azul, y $\beta(y, \tau)$ en rojo. (a) Perfiles en $\tau = 7$. (b) Perfiles en $\tau = 13$. (c) Perfiles en $\tau = 15$. (d) Perfiles en $\tau = 18$	74
4.5. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 5$	76
4.6. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. En negro se muestra la recta $y = 500$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 20$	77
4.7. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. (a) Perfiles al tiempo $\tau = 5$ (b) Perfiles al tiempo $\tau = 7$ (c) Perfiles al tiempo $\tau = 10$ (d) Perfiles al tiempo $\tau = 15$	79
4.8. En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Estos perfiles muestran el fenómeno de saturación de ondas.	80
A.1. Bosquejo de un proceso de difusión. El área debajo de cada una de las curvas en azul, es igual a una constante.	81

*A mis 5 angeles,
que me cuidan y protegen desde los cielos.
Esto va por ustedes...*

Capítulo 0

Introducción

El modelo de Gray-Scott [1], llamado así en honor a Peter Gray y Stephen Scott, representa el modelo matemático que describe la reacción química autocatalítica



cuando ésta ocurre en un reactor CSTR, el cual es un reactor de flujo constante con agitación homogénea. En la reacción autocatalítica, B es un catalizador, A es una especie química que reacciona con B , y C representa los productos inertes en los que se convierte B .

Estos investigadores, comenzaron interesados en buscar la relación que existía en esta reacción química entre estados únicos y múltiples de equilibrio, así como analizar los fenómenos de ignición, extinción e histéresis. Como se puede observar en [2], utilizando herramientas de EDO's y álgebra básica, lograron determinar estos hallazgos, así como la existencia de regiones oscilatorias.

Tal fue el impacto de sus artículos, que rápidamente se popularizó entre el medio matemático, y comenzaron a surgir generalizaciones del problema, así como comparaciones con otros modelos matemáticos contemporáneos, como el Brusselator y el Oregonator.

Actualmente, este modelo matemático, tiene una gran cantidad de referencias y además, tiene la propiedad de que es el modelo químico **más sencillo** que posee una riqueza en términos matemáticos de escenarios, patrones y oscilaciones. Algunos investigadores como Hale([3],[4]), Peletier([5]), Petrov y Showalter([6]) y Doelman([7]) han trabajado en el modelo, modificando la hipótesis de homogeneidad por la hipótesis de heterogeneidad, logrando tener un modelo de Reacción-Difusión, la cual se suscita en reactores tipo CFUR (Continuous Fed Unstirred Reactor).

Los resultados obtenidos por ellos han sido muy importantes, pues han determinado la existencia de ondas viajeras en el sistema, que poseen características y propiedades interesantes. Han encontrado regiones donde se suscitan oscilaciones, tanto en el espacio como en el tiempo ([6],[7]), pero también han encontrado ondas estacionarias ([3]) y estudiado su estabilidad ([4]).

De todo esto, hay un resultado importante, mostrado por Petrov, Scott y Showalter en [6], el cual indica que el modelo de Gray-Scott en reactores CSTR sufre el fenómeno de excitabilidad y que, cuando se cambia la hipótesis de homogeneidad por la hipótesis de heterogeneidad, en la región de excitabilidad, el sistema de reacción-difusión presenta ondas viajeras. Éstas ondas viajeras presentan fenómenos interesantes, como el **wave-reflection** ó **reflexión de onda** y el **wave-splitting** ó **desprendimiento de onda**, como se puede apreciar en las figuras 1 y 2. Dado este interesante hallazgo, el objetivo de este trabajo es tratar de completar y explicar porque suceden estos fenómenos, comprobar los resultados encontrados en [6] y lograr reproducir estos fenómenos. Bajo esta premisa, el modelo matemático a utilizar es el siguiente:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{a_0 - a}{t_r} - k_1 ab^2 \quad (3)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + \frac{b_0 - b}{t_r} + k_1 ab^2 - k_2 b. \quad (4)$$

donde $a(x, t)$ y $b(x, t)$ representan las concentraciones de las especies químicas de A y B , en la posición x al tiempo t . Ambas especies químicas son introducidas al reactor con una

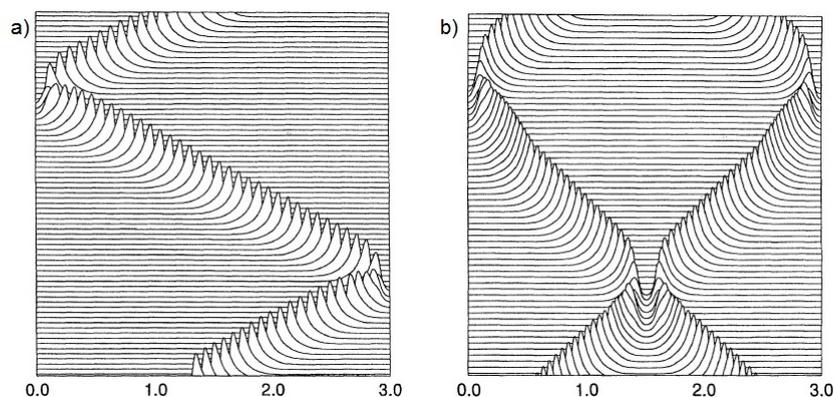


FIGURA 1: Figura tomada de [6]. (a) Onda viajera que presenta el **wave-reflection**, respecto a los bordes. (b) Ondas viajeras que presentan el **wave-reflection** entre sí y con los bordes.

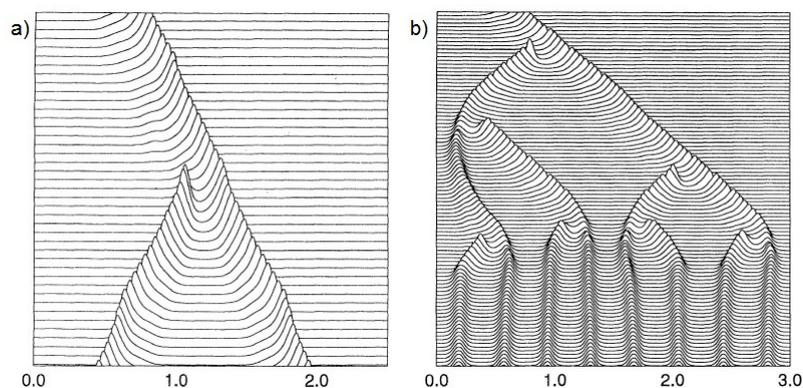


FIGURA 2: Figura tomada de [6]. (a) Onda viajera que presenta el **wave-splitting**. (b) Panorama general que presenta el **wave-splitting**, al saturar el medio.

tasa $\frac{1}{t_r}$, mientras que a_0 y b_0 representan los flujos de entrada al reactor por parte de las especies químicas A y B respectivamente. Así mismo, k_1 representa la tasa con la cual se suscita la reacción (1) y k_2 representa la tasa con la cual sucede la reacción (2). Además, D_A y D_B representan los coeficientes de difusividad de A y B , respectivamente.

Esquema del trabajo

Para lograr el objetivo trasado, realizaremos un recorrido histórico por el modelo de Gray-Scott, a fin de ir comprendiendo el fenómeno y lograr explicarlo. El contenido de los capítulos será el siguiente:

1. En el capítulo 1, el objetivo será entender la matemática detrás de la reacción química (1) y explicar los posibles escenarios que sucedan. Así mismo, se trabajará con la reacción



y realizar analogías entre (1) y (5), buscando generalizar criterios. Se estudiarán los casos cuando el compuesto B presenta un flujo de entrada nulo y cuando éste es no nulo.

2. Una vez determinados y entendidos los posibles escenarios de la reacción (1), el capítulo 2 mostrará el análisis del sistema de reacciones químicas (1) y (2). Se estudiarán por separado los casos cuando el flujo de entrada de B es nulo y cuando es no nulo, ya que cada uno nos servirá como preámbulo para los estudios con difusión. Así mismo, se mostrará que el modelo de Gray-Scott con flujo de entrada presenta el fenómeno de excitabilidad.
3. El capítulo 3 se enfoca en plantear el modelo de Gray-Scott mediante un proceso de difusión, pero con la hipótesis de que el flujo de entrada de B es nulo. Esto nos llevará a encontrar que el modelo presenta 2 soluciones homoclínicas y 1 solución heteroclínica en el espacio, y más aún, que tenemos explícitamente su expresión algebraica. Así mismo, se estudiará el comportamiento límite de las soluciones homoclínicas y como éstas convergen a la solución heteroclínica.
4. En el capítulo 4, está dedicado a explicar porque suceden los fenómenos de **reflexión de onda** cuando $\frac{D_A}{D_B} = 7$ y **desprendimiento de onda** cuando $\frac{D_A}{D_B} = 17$, en la región donde se presenta el fenómeno de excitabilidad, mostrado en el capítulo 3. Esto se va a realizar mediante simulaciones numéricas bajo el esquema de diferencias finitas explícito, con un malla uniformemente distribuido.

Capítulo 1

Autocatálisis sin decaimiento

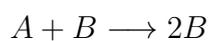
1.1. Introducción

El objetivo de este capítulo es entender el comportamiento de la autocatálisis cúbica



donde A representa el reactante químico y B representa el catalizador de la reacción. Esta reacción se modela en un reactor tipo CSTR (ver figura 1.1), el cual posee las condiciones de llenado continuo, volumen constante y agitación constante. Por tanto, la mezcla será idealmente homogénea.

Para lograr el entendimiento completo de esta reacción, primero estudiaremos la autocatálisis cuadrática



la cual, en apariencia, parece ser más sencilla que la cúbica. Esto nos brindará un camino de como estudiar el escenario cúbico, e imaginar los resultados que se pueden suscitar.

Otro punto importante que se tratará en este capítulo, con cada una de las reacciones, será estudiar por separado los escenarios cuando existe un flujo de entrada por parte

del compuesto autocatalítico B y cuando no existe este flujo de entrada. Realizaremos un contraste al término de cada sección.

Por último, daremos un resumen de lo visto en este capítulo, que sirve de preámbulo para el estudio del modelo autocatalítico con decaimiento, que se estudia en el siguiente capítulo.

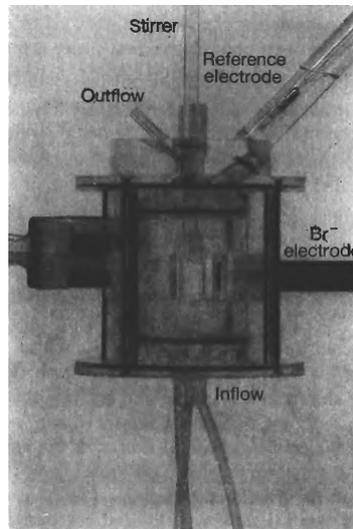


FIGURA 1.1: Imagen de un reactor CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor). Tomada de [8].

1.2. Modelo Cuadrático

El primer modelo químico a estudiar es:



donde A es el reactante y B es el catalizador. Para ello, estudiaremos el cambio de A y de B , respecto al tiempo.

El cambio del reactante A en función del tiempo se puede modelar matemáticamente,

introduciendo las propiedades del reactor CSTR, de la siguiente manera:

$$\frac{da}{dt} = \frac{(a_0 - a)}{t_r} - kab \quad (1.2)$$

donde a y b representan las concentraciones de las especies químicas A y B , respectivamente. De la misma manera, k es la velocidad de la reacción química (1.1), t_r representa el tiempo de residencia de la concentración A en el reactor y a_0 representa el flujo de entrada de A .

El primer término de (1.2) representa la relación entre las tasas de entrada y salida al reactor, por parte del reactante A . En éste término, $\frac{a_0}{t_r}$ representa la velocidad a la que se introduce el reactante A , mientras que el término $\frac{a}{t_r}$ modela la velocidad a la que sale el reactante A del reactor. Las unidades de estos términos son $\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{dm}^3}$.

Mientras tanto, el término kab de (1.2) representa la parte reactiva del modelo, que se obtiene por medio de la ley de acción de masas. Además, el parámetro k tiene por unidades $\frac{1}{\text{s} \cdot \text{mol} \cdot \text{dm}^3}$.

Además, considerando la hipótesis de tener un reactor CSTR con volumen constante, tenemos la siguiente razón:

$$a + b = a_0 + b_0 \quad (1.3)$$

donde a_0 y b_0 representan los flujos de entrada al reactor del químico A y del catalizador B , respectivamente. Esta condición nos permite notar que las variables a y b no son independientes, ya que su suma es constante. Por tal motivo, se puede expresar b en términos de a , de la siguiente forma:

$$b = a_0 + b_0 - a \quad (1.4)$$

Sustituyendo (1.4) en (1.2), obtenemos la siguiente ecuación diferencial de primer orden

$$\frac{da}{dt} = \frac{(a_0 - a)}{t_r} - ka(a_0 + b_0 - a) \quad (1.5)$$

que representa el cambio de A en el reactor, en función del tiempo y de las constantes de entrada a_0 , b_0 y t_r .

Para estudiar las dinámicas de esta ecuación con más facilidad, procederemos a realizar el siguiente cambio de variable para simplificar los cálculos,

$$\gamma = \frac{a_0 - a}{a_0}, \quad \tau = \frac{1}{4}ka_0t \quad (1.6)$$

junto con:

$$\tau_r = \frac{1}{4}ka_0t_r, \quad \beta_0 = \frac{b_0}{a_0} \quad (1.7)$$

Nuestra ecuación diferencial (1.5), escrita en términos del cambio de variable, es

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = 4(1 - \gamma)(\gamma + \beta_0) - \frac{\gamma}{\tau_r}. \quad (1.8)$$

Los puntos fijos de (1.8) son

$$\gamma_{1,2} = \frac{1}{2} \left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r} \right)^2 + 4\beta_0}$$

Es fácil observar que $\gamma_1 > 0$ para cualesquiera valores de τ_r y de β_0 . Así mismo, $\gamma_2 = 0$ cuando $\beta_0 = 0$ y $\gamma_2 < 0$ para $\beta_0 > 0$. Por ello, el estudio de la estabilidad de los puntos fijos de (1.8), lo realizaremos en 2 casos, cuando $\beta_0 = 0$ y cuando $\beta_0 > 0$.

Para ello, analizemos los términos de nuestra ecuación (1.8).

- Definimos $P(\gamma) := 4(1 - \gamma)(\gamma + \beta_0)$. Notemos que esta función es cuadrática, cuyos ceros están en $\gamma_1 = 1$ y $\gamma = -\beta_0$, tiene su máximo en $\frac{1-\beta_0}{2}$.
- Definamos $C(\gamma) := \frac{\gamma}{\tau_r}$. Notemos que esta función lineal representa el consumo de γ en (1.8). Así mismo, la pendiente de esta función depende del parámetro τ_r .

Relación de γ con a , b

Se puede observar directamente, de la definición de γ y la propiedad de volumen constante (1.4), que

$$a = a_0 - a_0\gamma \quad (1.9)$$

$$b = b_0 + a_0\gamma \quad (1.10)$$

Dado estas relaciones, se observa que cuando $\gamma > 1$, se tiene que $a < 0$. Por tal motivo, la variable γ tiene sentido químico cuando $\gamma < 1$. Por otro lado, se observa que cuando $\gamma < -\frac{b_0}{a_0}$, el valor de b es negativo. Por tanto, la variable γ tiene sentido químico cuando $\gamma > -\frac{b_0}{a_0}$.

Así, concluimos que γ tiene sentido químico cuando $\gamma \in [-\frac{b_0}{a_0}, 1]$.

1.2.1. Caso $\beta_0 = 0$

La figura 1.2 bosqueja las gráficas de $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ cuando $\beta_0 = 0$. En ella, se muestran diversas $C(\gamma)$. De aquí, podemos concluir intuitivamente que existen valores de τ_r , para los cuales, las curvas $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ se intersecan 1 o 2 veces. Las intersecciones de estas

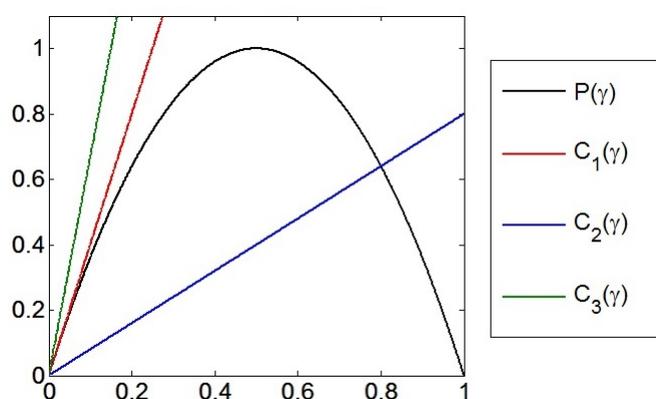


FIGURA 1.2: En esta gráfica, la curva C_1 tiene pendiente 4, la curva C_2 tiene pendiente mayor a 4 y la curva C_3 tiene pendiente menor a 4

curvas están dadas por los puntos fijos de (1.8). Así, los puntos fijos en este caso son:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 1 - \frac{1}{4\tau_r} \\ \gamma_2 &= 0\end{aligned}$$

Para ello, evaluemos estos puntos fijos en el jacobiano de (1.8) en este caso.

$$J(\gamma) = 4 - 8\gamma - \frac{1}{\tau_r} \quad (1.11)$$

Veamos cada uno de los casos.

- $\gamma_1 = 1 - \frac{1}{4\tau_r}$. Tenemos que $J(\gamma_1) = \frac{1}{\tau_r} - 4$. Así, γ_1 es estable cuando $\tau_r > \frac{1}{4}$, mientras que es inestable cuando $\tau_r < \frac{1}{4}$.
- $\gamma_2 = 0$. Tenemos que $J(\gamma_2) = 4 - \frac{1}{\tau_r}$. Así, γ_2 es estable cuando $\tau_r < \frac{1}{4}$, mientras que es inestable cuando $\tau_r > \frac{1}{4}$.

De aquí, se sigue que cuando $\tau_r = \frac{1}{4}$, se suscita un cambio en la estabilidad de los puntos de equilibrio. La figura 1.3 muestra este resultado de manera gráfica.

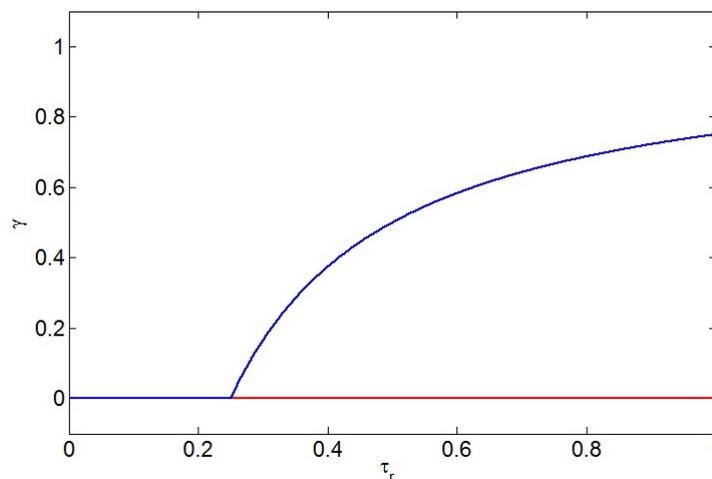


FIGURA 1.3: Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables

1.2.1.1. Resultado General

A manera de conclusión de la sección, tenemos el siguiente resultado:

Resultado 1.1. *Cuando $\beta_0 = 0$, el sistema (1.8) tiene puntos fijos en*

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 0 \\ \gamma_2 &= 1 - \frac{1}{4\tau_r}\end{aligned}$$

Además, en $\tau_r = \frac{1}{4}$ el sistema sufre una bifurcación transcítica y la estabilidad de las soluciones son:

- Para $\tau_r < \frac{1}{4}$, γ_1 es inestable y γ_2 es asintóticamente estable.
- Para $\tau_r > \frac{1}{4}$, γ_1 es asintóticamente estable y γ_2 es inestable.

1.2.1.2. Interpretación química

Una vez determinada la estabilidad de γ en términos de τ_r , analicemos que significa este resultado en términos de las variables de estado a y b . Para ello, analicemos el retrato fase del sistema: En este caso, se puede observar que la variable γ tiene sentido químico

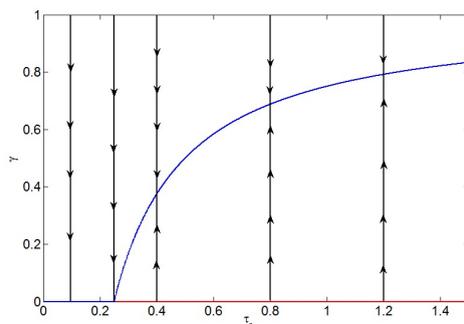
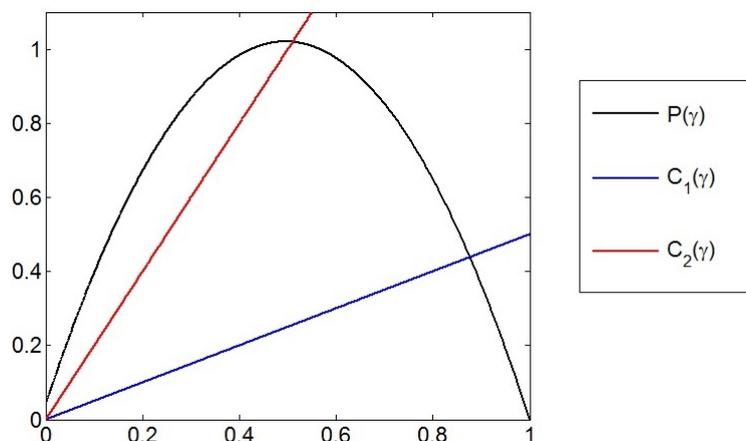


FIGURA 1.4: Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables

en el intervalo $I = [0, 1]$. Estudiemos los casos cuando $\tau_r < \frac{1}{4}$ y cuando $\tau_r > \frac{1}{4}$.

- Caso 1. $\tau_r < \frac{1}{4}$.

En este caso, al tomar una condición inicial $\gamma_0 \in I$, el flujo del sistema lleva a la


 FIGURA 1.5: Bosquejo de comparación entre $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ con $\beta_0 = 0.001$.

condición inicial al valor $\gamma = 0$. Esto, en términos de las variables de estado a y b , significa que $a = a_0$ y $b = b_0$. Pero como estamos en el caso que $b_0 = 0$, entonces $a = a_0$ y $b = 0$.

■ Caso 2. $\tau_r > \frac{1}{4}$.

En este caso, se observa que γ_1 es estable y $\gamma_2 = 0$ es inestable. Por tal motivo, al tomar cualquier condición inicial en el intervalo $\gamma_0 \in [0, 1] - \{\gamma_1\}$, el flujo del sistema lleva a la condición inicial γ_0 al valor de γ_1 para la τ_r específica.

En términos de las variables originales, tenemos que $a = a_0(1 - \gamma_1)$ y $b = a_0\gamma_1$, es decir, ninguna especie química desaparece del reactor.

1.2.2. Caso $\beta_0 > 0$

La figura 1.5 bosqueja la gráfica $P(\gamma)$ vs. $C(\gamma)$ cuando $\beta_0 > 0$. En ella, se muestran diversas $C(\gamma)$. De aquí, podemos concluir intuitivamente que para todo valor de τ_r , las curvas $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ se intersecan en una ocasión dentro del primer cuadrante. Curiosamente, este hecho viene dado ya que, los puntos fijos de (1.8) son

$$\gamma_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r} \right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r} \right)^2 + 4\beta_0}$$

de donde es fácil observar que $\gamma_+ > 0$ y $\gamma_- < 0$, independientemente del valor de τ_r y β_0 . Más aún, como $\gamma_- < -\beta_0$, entonces γ_- carece de interpretación química en este escenario. Por tanto, realizaremos el análisis de estabilidad únicamente para γ_+ .

El jacobiano de (1.8) en este caso es

$$J(\gamma) = 4 - 8\gamma - 4\beta_0 - \frac{1}{\tau_r}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} \gamma_+ \text{ es estable} &\iff J(\gamma_+) < 0 \\ &\iff 0 < \sqrt{\left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r}\right)^2 + 4\beta_0} \end{aligned}$$

lo cual se cumple cuando para todo valor de τ_r en el intervalo $(0, \infty)$. Por tal motivo, γ_+ es estable.

1.2.2.1. Resultado General

A manera de conclusión de la sección, tenemos el siguiente resultado:

Resultado 1.2. *Para $\beta_0 > 0$, el sistema (1.8) tiene un punto fijo estable en el rectángulo $(0, \infty) \times [-\beta_0, 1]$, determinado por la siguiente expresión:*

$$\gamma_+ = \frac{1}{2} \left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r}\right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(1 - \beta_0 - \frac{1}{4\tau_r}\right)^2 + 4\beta_0}$$

1.2.2.2. Interpretación química

Para analizar el sentido químico del Resultado 1.2, observemos el retrafo fase del sistema. Ya que, en el rectángulo $R = (0, \infty) \times [-\beta_0, 1]$, el único equilibrio estable es γ_+ , entonces para cualquier condición inicial γ_0 que tomemos en R , fijando antes τ_r , entonces el flujo del sistema lo llevará hacia el equilibrio γ_+ que depende del τ_r ya elegido.

En términos de las variables originales, esto significa que, al tomar una condición inicial

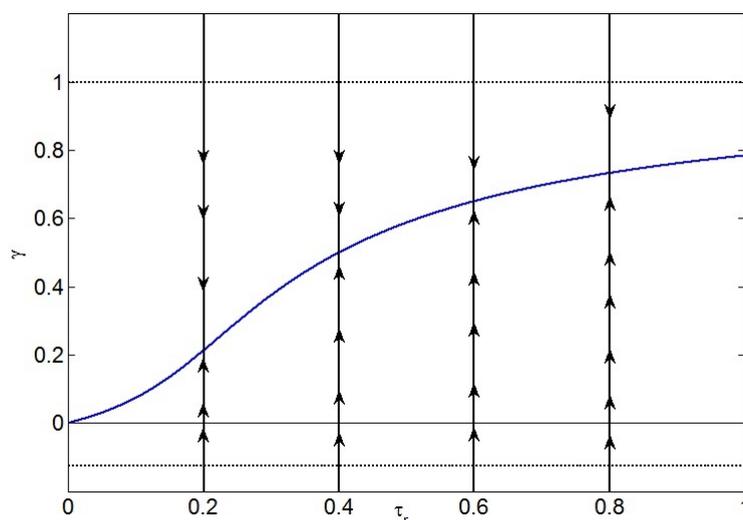


FIGURA 1.6: Retrafo fase del sistema (1.17) cuando $\beta_0 > 0$. En azul, se muestra el equilibrio γ_+ . Con línea punteadas se muestran los bordes del sentido químico $\gamma = 1$ y $\gamma = -\beta_0$.

$a(0) = a_0 - a_0\gamma_0$ y $b(0) = b_0 + a_0\gamma_0$, el sistema terminará en el equilibrio $a = a_0 - a_0\gamma_+$ y $b = b_0 + a_0\gamma_+$.

Además, como $-\beta_0 < \gamma_+ < 1$ para $\tau_r > 0$, entonces el sistema presenta un equilibrio químico donde ninguna de las especies químicas A y B desaparece. Así mismo, si comenzamos con $\gamma_0 = -\beta_0$, es decir, $a(0) = a_0 + b_0$ y $b(0) = 0$, entonces vamos a terminar con una cantidad no nula de B . De igual forma, si $\gamma_0 = 1$, es decir, $a = 0$ y $b = a_0 + b_0$, entonces vamos a terminar con una cantidad no nula de A .

1.3. Modelo Cúbico

El segundo modelo químico a estudiar en este capítulo es



donde A es el reactante y B es el catalizador. Además, llamaremos k a la velocidad de la reacción química.

Usando la ley de acción de masas en (1.12), obtenemos la siguiente ecuación para el

cambio de A respecto al tiempo t .

$$\frac{da}{dt} = \frac{(a_0 - a)}{t_r} - kab^2 \quad (1.13)$$

donde a y b representan las concentraciones de A y B , respectivamente. De la misma manera, t_r representa el tiempo de residencia de A en el reactor y a_0 representa el flujo de entrada de A .

Dado que el reactor CSTR tiene la propiedad de volumen constante, la relación (1.3) es válida. Por ende, sustituyendo (1.3) en (1.13), obtenemos la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{da}{dt} = \frac{(a_0 - a)}{t_r} - ka(a_0 + b_0 - a)^2 \quad (1.14)$$

que representa el cambio de la concentración de A en el reactor, en función del tiempo y de las constantes de entrada a_0 , b_0 , la velocidad de reacción k y el flujo de consumo t_r .

Para estudiar las dinámicas de esta ecuación con más facilidad, procederemos a realizar el siguiente cambio de variable para simplificar los cálculos,

$$\gamma = \frac{a_0 - a}{a_0}, \quad \tau = \frac{4}{27}ka_0^2t \quad (1.15)$$

y llamaremos

$$\tau_r = \frac{4}{27}ka_0^2t_r, \quad \beta_0 = \frac{b_0}{a_0}. \quad (1.16)$$

Nuestra ecuación diferencial (1.14), escrita en términos del cambio de variable, es

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = \frac{27}{4}(1 - \gamma)(\gamma + \beta_0)^2 - \frac{\gamma}{\tau_r} \quad (1.17)$$

Los puntos fijos de (1.17) no son fáciles de determinar, pues son las raíces del polinomio

$$-\frac{27}{4}\gamma^3 + \frac{27}{4}(1 - 2\beta_0)\gamma^2 + \frac{27}{4}\left(2\beta_0 - \beta_0^2 - \frac{4}{27\tau_r}\right)\gamma + \frac{27}{4}\beta_0^2 = 0$$

Por tal motivo, analicemos los términos de nuestra ecuación (1.17) y realizemos un análisis similar al modelo cuadrático, es decir, estudiar los casos cuando $\beta_0 = 0$ y cuando $\beta_0 > 0$.

- Definimos $P(\gamma) := \frac{27}{4}(1-\gamma)(\gamma+\beta_0)^2$. Notemos que esta función es cúbica, cuyos ceros están en $\gamma_1 = 1$ y $\gamma = -\beta_0$, tiene su máximo en $\frac{2-\beta_0}{3}$.
- Definamos $C(\gamma) := \frac{\gamma}{\tau_r}$. Notemos que esta función lineal representa el consumo de γ en (1.17). Así mismo, la pendiente de esta función depende del parámetro τ_r .

1.3.1. Caso $\beta_0 = 0$

Cuando $\beta_0 = 0$, las gráficas de $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ se pueden intersectar en una ocasión, en 2 y hasta en 3 ocasiones. La figura 1.7 bosqueja este suceso.

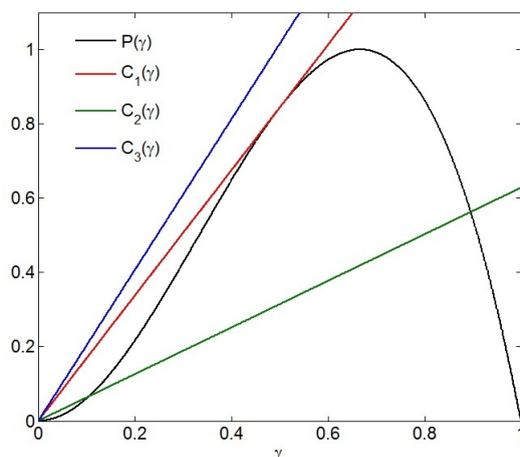


FIGURA 1.7: En esta gráfica, la curva C_1 tiene pendiente $\frac{27}{16}$, la curva C_2 tiene pendiente mayor a $\frac{27}{16}$ y la curva C_3 tiene pendiente menor a $\frac{27}{16}$

Ahora bien, en este caso, los puntos fijos de (1.17) están bien determinados y son:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= 0 \\ \gamma_2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}} \right) \\ \gamma_3 &= \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}} \right)\end{aligned}$$

los cuales, son las intersecciones de $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$. Notemos que $\gamma_{2,3}$ existen cuando

$$1 - \frac{16}{27\tau_r} \geq 0.$$

Procedamos a estudiar la estabilidad de cada uno de ellos. Para ellos, evaluemos estos puntos en el jacobiano del sistema (1.17).

$$J(\gamma) = \frac{27}{2}\gamma - \frac{81}{4}\gamma^2 - \frac{1}{\tau_r} \quad (1.18)$$

Analizemos ahora cada uno de los casos.

- $\gamma_1 = 0$. Tenemos que $J(\gamma_1) = -\frac{1}{\tau_r}$ para todo valor de τ_r , por tanto, $J(\gamma_1) < 0$.
- $\gamma_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right)$. Tenemos que $J(\gamma_2) = \frac{2}{\tau_r} - \frac{27}{8} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right)$. Por tanto, realizando operaciones elementales, tenemos que $J(\gamma_2) > 0$ para $\tau_r > \frac{16}{27}$.
- $\gamma_3 = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right)$. Tenemos que $J(\gamma_3) = \frac{2}{\tau_r} - \frac{27}{8} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right)$. Por tanto, realizando operaciones elementales, tenemos que $J(\gamma_3) < 0$ para $\tau_r > \frac{16}{27}$.

1.3.1.1. Resultado General

Dado el resultado anterior, se desprende el siguiente teorema

Resultado 1.3. Si $\beta_0 = 0$, el sistema (1.17) tiene puntos fijos en

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= 0 \\ \gamma_2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right) \\ \gamma_3 &= \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}}\right) \end{aligned}$$

La estabilidad de las soluciones es:

- Para $\tau_r < \frac{16}{27}$ se tiene que γ_1 es estable.
- Para $\tau_r > \frac{16}{27}$ se tiene que γ_1 es estable, γ_2 es inestable y γ_3 es estable.

Además, para $\tau_r = \frac{16}{27}$, el sistema sufre una bifurcación silla-nodo.

La figura ?? nos muestra este resultado graficamente.

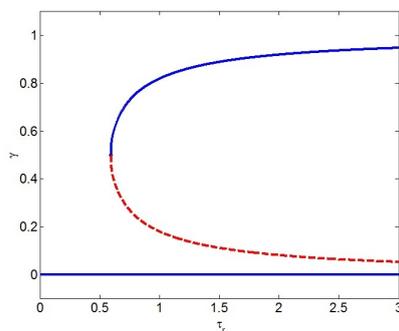


FIGURA 1.8: Con color azul se denotan los equilibrios estables y con rojo, los equilibrios inestables

1.3.1.2. Interpretación química

Para analizar la interpretación química del sistema (1.17) cuando $\beta_0 = 0$, analicemos el retrato fase del sistema, mostrado en la figura 1.9. En esta figura, se puede observar

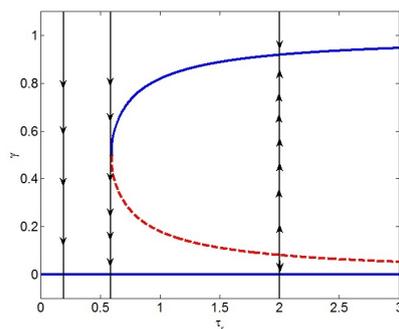


FIGURA 1.9: Retrato fase del sistema (1.17) cuando $\beta_0 = 0$. En color azul, se denotan los equilibrios estables. En color rojo, se denota el equilibrio inestable. Las flechas indican la dirección del flujo.

que cuando $\tau_r < \frac{16}{27}$, solo existe un equilibrio, el cual es estable. Por tanto, al tomar una condición inicial γ_0 en el intervalo $(0, 1]$, el flujo del sistema nos llevará a $\gamma = 0$. Por tal motivo, para $\tau_r < \frac{16}{27}$, el sistema original llega al equilibrio $a = a_0$ y $b = 0$.

Por otro lado, si $\tau_r > \frac{16}{27}$, entonces existen 2 equilibrios, $\gamma_1 = 0$ y γ_3 , estables y un equilibrio inestable, γ_2 . Por tanto, si tomamos una condición inicial en el intervalo $[0, \gamma_2)$, por el flujo del sistema, ésta terminará en el equilibrio estable $\gamma_1 = 0$. En tanto, si tomamos una condición inicial en el intervalo $(\gamma_2, 1]$, el flujo del sistema la moverá hacia el equilibrio estable γ_3 .

1.3.2. Caso $\beta_0 > 0$

Cuando $\beta_0 > 0$, surgen varios problemas, en el sentido de obtener expresiones concretas de los puntos fijos de (1.17). Realizando un estudio gráfico entre $P(\gamma)$ y $C(\gamma)$ para distintos valores de τ_r , se observa que éstas curvas se pueden intersectar 1, 2 o 3 veces, según el valor de τ_r . El lema que viene a continuación nos indica las regiones donde suceden estos casos.

Lema 1.4. *El sistema (1.17) puede presentar 1, 2 o 3 equilibrios, según el valor de τ_r y β_0 . Precisamente, cuando $0 < \beta_0 < 0.125$, se tiene que*

1. *Existe 1 punto fijo para*

$$\tau_r \in \left(-\infty, \frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) - \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3} \right) \cup \left(\frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) + \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3}, \infty \right).$$

2. *Existen 2 puntos fijos para*

$$\tau_r = \frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) \mp \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3}.$$

3. *Existen 3 puntos fijos para*

$$\tau_r \in \left(\frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) - \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3}, \frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) + \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3} \right).$$

Más aún, cuando (1.17) tiene exactamente 2 puntos fijos, la expresión de los puntos fijos es la siguiente:

- $\gamma_1 = \frac{1}{2} (1 - 4\beta_0 \mp \sqrt{1 - 8\beta_0})$
- $\gamma_2 = \frac{1}{4} (1 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0})$

De igual forma, cuando $\beta_0 \geq 0.125$ el sistema (1.17) presenta solo un punto fijo, el cual es estable para $\tau_r > 0$.

De esta lema, se puede observar que la multiestabilidad surge cuando $\beta_0 < 0.125$. Además, el hecho de tener bien determinados los valores del parámetro τ_r para el cual existen 2 puntos fijos, nos brinda la pauta para pensar que en ellos, surge alguna bifurcación. Y en efecto, surge una bifurcación silla-nodo, como se menciona en el siguiente teorema,

Teorema 1.5. *Cuando $0 < \beta_0 < 0.125$, el sistema (1.17) sufre una bifurcación del tipo silla nodo en los puntos*

$$(\gamma, \tau_r) = \left(\frac{1}{4} \left(1 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0} \right), \frac{(1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2) \mp \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3} \right) \quad (1.19)$$

Demostración. Las condiciones que aseguran que surge una bifurcación silla-nodo son las siguientes:

- $\frac{d}{d\tau_r} \left[\frac{d\gamma}{d\tau} \right] \neq 0$
- $\frac{d^2}{d\gamma^2} \left[\frac{d\gamma}{d\tau} \right] \neq 0$

Así, procedamos a probar cada una de ellas.

1. Tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau_r} \left[\frac{d\gamma}{d\tau} \right] \neq 0 &\iff \frac{\gamma}{\tau_r^2} \neq 0 \\ &\iff \frac{1}{4} (1 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0}) \left(-\frac{(8\beta_0^2 - 20\beta_0 - 1) \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3}}{54\beta_0(1 + \beta_0)^3} \right)^{-2} \neq 0 \\ &\iff \left((8\beta_0^2 - 20\beta_0 - 1) \mp \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right)^2 \neq 0 \\ &\iff (8\beta_0^2 - 20\beta_0 - 1) \mp \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \neq 0 \\ &\iff \beta_0 \neq -1 \end{aligned}$$

lo cual es cierto $\forall \beta_0 \in (0, \frac{1}{8})$.

2. Tenemos que

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\gamma^2} \left[\frac{d\gamma}{d\tau} \right] \neq 0 &\iff 3\gamma + 2\gamma_0 - 1 \neq 0 \\ &\iff \frac{3}{4} (1 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0}) + 2\beta_0 - 1 \neq 0 \\ &\iff \beta_0 \neq -1 \text{ y } \beta_0 \neq \frac{1}{8} \end{aligned}$$

lo cual es cierto, pues estamos tomando $\beta_0 \in (0, \frac{1}{8})$.

Como ambas condiciones se cumplen, hemos terminado. \square

1.3.2.1. Resultado General

Y como resultado general de la sección, tenemos el siguiente teorema

Resultado 1.6. 1. Si $\beta_0 \in (0, 0.125)$, el sistema (1.17) presenta 1, 2 o 3 puntos fijos, según el valor de τ_r determinado por el lema 1.4.

2. Si $\beta_0 \geq 0.125$, el sistema (1.17) presenta 1 punto fijo, el cual será estable.

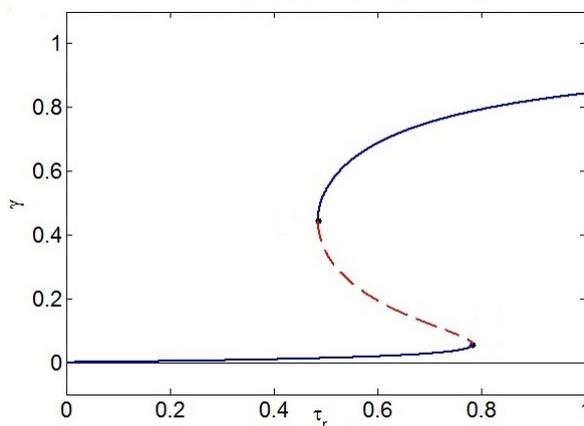


FIGURA 1.10: Diagrama de bifurcación del sistema (1.17) para el caso 1 del Resultado 1.6, con $\beta_0 = 0.05$. En color azul se denotan los equilibrios estables y en color rojo, el equilibrio inestable.

Notemos que la estabilidad es muy similar a la presentada en el caso cuando $\beta_0 = 0$. Esto tiene que ver con el hecho que, al perturbar el sistema (1.17) con $\beta_0 > 0$, el punto fijo $\gamma_1 = 0$ toca al segundo equilibrio γ_2 y eso genera una bifurcación silla-nodo, pero no altera las estabilidades de los puntos.

1.3.2.2. Interpretación química

Analizemos la interpretación química del sistema (1.17) cuando $\beta_0 > 0$. Para ello, estudiemos los retratos fases del sistema cuando $\beta_0 \geq 0.125$ (ver figura 1.13) y cuando $0 < \beta_0 < 0.125$ (ver figura 1.13).

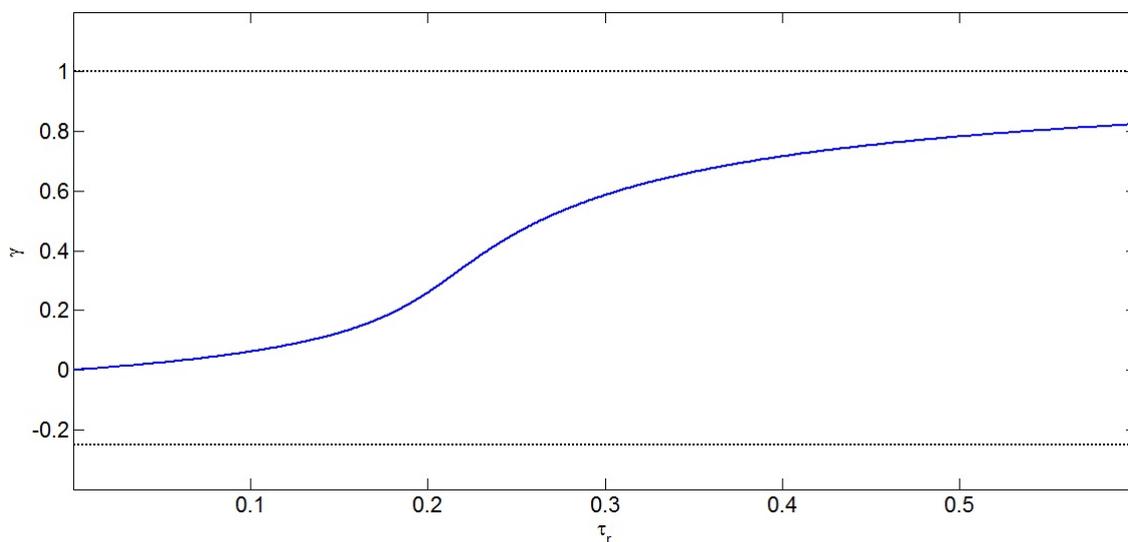


FIGURA 1.11: Diagrama de bifurcación del sistema (1.17) para el caso 2 del Resultado 1.6, con $\beta_0 = 0.25$. La curva sólida de color azul representa el equilibrio estable.

- Caso $\beta_0 \geq 0.125$. Al tener sólo un equilibrio estable, entonces toda condición inicial

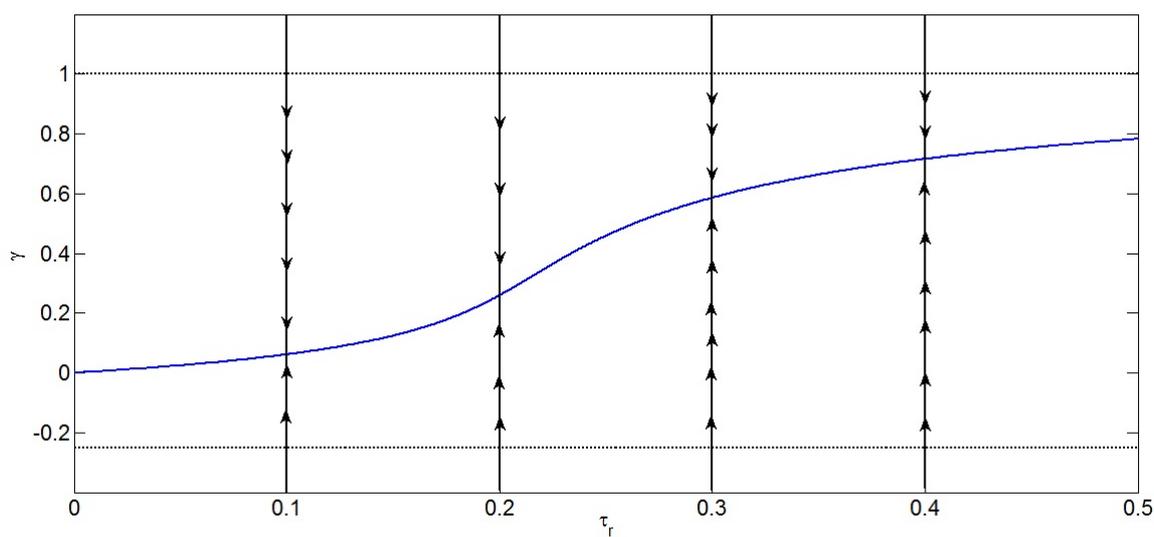


FIGURA 1.12: Retrato fase del sistema (1.17) para $\beta_0 \geq 0.125$. En color azul se denota el equilibrio estable. Las flechas indican la dirección del flujo en cada región.

γ_0 que tomemos en el intervalo $[-\beta_0, 1]$, va a tender al equilibrio. En terminos de las variables originales a y b , quiere decir que sin importar la condición inicial que se tome, el flujo del sistema no permitirá que una de las especies químicas desaparezca.

- Caso $0 < \beta_0 < 0.125$. Si tomamos τ_r que cumpla (1) del lema 1.4, entonces solo existe un equilibrio. Por tanto, al tomar cualquier condición inicial $\gamma_0 \in [-\beta_0, 1]$, el

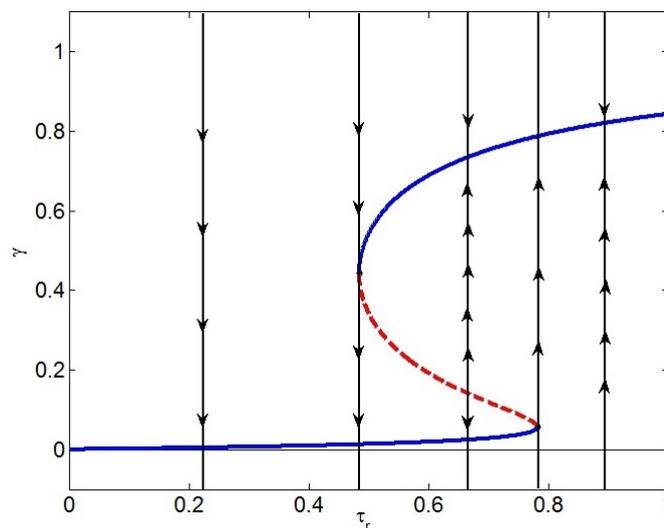


FIGURA 1.13: Retrato fase del sistema (1.17) para $\beta_0 = 0.05$. En color azul se denotan los equilibrios estables y en color rojo, el equilibrio inestable. Las flechas indican la dirección del flujo en cada región.

flujo del sistema llevará a la condición inicial al equilibrio determinado.

En cambio, sea elegimos τ_r que cumpla (3) del lema 1.4, entonces hay 3 equilibrios. En este caso, el valor de la condición inicial γ_0 determinará hacia que equilibrio se dirigirá el flujo.

Cuando elegimos τ_r que cumpla (2) del lema 1.4, suceden los fenómenos químicos conocidos como ignición y extinción. Estos fenómenos indican que, si perturbamos el parámetro que determina las estabilidades (en este caso, τ_r), el sistema puede ir de un equilibrio estable a otro, en un instante de tiempo muy corto. Este fenómeno se observa en los puntos fijos donde sucede la bifurcación silla-nodo.

Capítulo 2

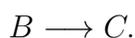
Autocatálisis con decaimiento

2.1. Introducción

Los modelos estudiados en el capítulo anterior, que se refieren a reacciones autocatalíticas, se realizaron considerando la condición de equilibrio (1.3), que enuncia que la concentración del reactante A y la concentración del catalizador B a cualquier tiempo t de la reacción es constante, e igual al flujo de entrada del reactante A y del catalizador B . En términos matemáticos, se quiere ejemplificar que $a + b = a_0 + b_0$.

Por tanto, una vez que se determinaron todos los escenarios que pueden suceder con la reacción autocatalítica cúbica bajo las condiciones anteriormente mencionadas, procederemos a añadir una hipótesis al modelo cúbico, que anula esta condición de equilibrio (1.3). Esta hipótesis es la característica de decaimiento del catalizador B .

El decaimiento de un catalizador B consiste en la reacción que convierte a B en compuestos inertes C , lo cual ocurre con una tasa k_2 . En términos de reacciones químicas, esto se escribe como



En palabras concretas, las variables a y b son independientes. Así, el modelo químico a considerar en este capítulo será



El estudio de este modelo químico se realizará en 2 etapas:

1. La primera de ellas consiste en analizar el modelo (2.1) cuando el catalizador B no presenta flujo de entrada; a este modelo le llamaremos **Modelo S**. Éste análisis se realizará mediante un sistema de EDO's en 2 dimensiones, en el cual se buscará estudiar el comportamiento del modelo y decir cuando existen equilibrios químicos. Así mismo, se exhibirá la existencia de órbitas periódicas y se explicará cada uno de los escenarios que se lleguen a encontrar.
2. La segunda etapa consiste en estudiar el modelo (2.1) cuando el catalizador B presenta flujo de entrada; a este modelo le llamaremos **Modelo C**. La literatura (ver [8]) nos dice que existen 11 distintos escenarios, como se puede observar en las figura 2.1. Aún con todo esto, no es del interés de éste trabajo mostrar la existencia de todas estas regiones. El interés de este capítulo va centrado en estudiar las regiones donde suceden los comportamientos del tipo hongo ya que, en estos escenarios, sucede el fenómeno de excitabilidad, mostrado al final del capítulo, el cual será de suma importancia para el estudio de las ondas viajeras en el capítulo 4.

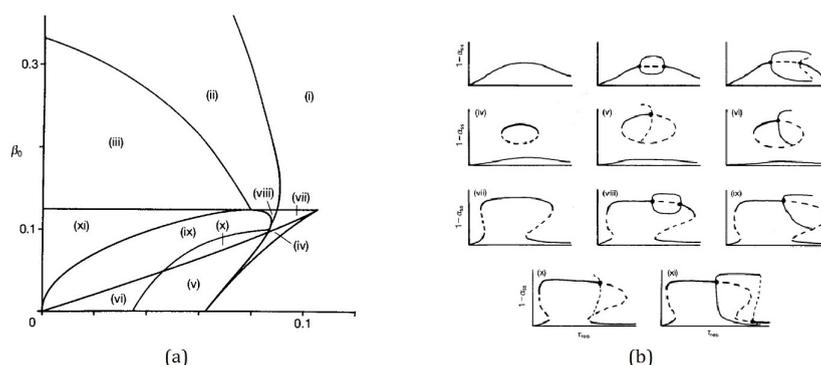


FIGURA 2.1: (a) Muestra el espacio de parámetros $\beta_0 - \kappa_2$ donde se observan las 11 regiones que narra la literatura. (b) Muestra las dinámicas que presentan los puntos fijos, cuando τ_r es el parámetro de dinámica. Figuras tomadas de [8]

2.2. Estudio del Modelo S

Dado el modelo químico (2.1), el sistema de EDO's que lo define, con la hipótesis que el catalizador B no tiene flujo de entrada, es el siguiente

$$\frac{da}{dt} = \frac{a_0 - a}{t_r} - k_1 ab^2 \quad (2.2a)$$

$$\frac{db}{dt} = k_1 ab^2 - k_2 b \quad (2.2b)$$

Aquí, se tiene que k_1 representa la tasa de reacción de (2.1a), k_2 representa la tasa de reacción de (2.1b), a_0 representa el flujo de entrada del reactante A y t_r representa el tiempo de residencia, que servirá como parámetro indicador del modelo.

Para facilitar el trabajo, realizaremos el cambio de variable

$$\alpha = \frac{a}{a_0}, \quad \beta = \frac{b}{a_0}, \quad \tau = k_1 a_0^2 t \quad (2.3)$$

junto con:

$$\tau_r = k_1 a_0^2 t_r, \quad \kappa_2 = \frac{k_2}{k_1 a_0^2} \quad (2.4)$$

en el sistema (2.2), con el fin de facilitar las operaciones. Así, el modelo en términos de las nuevas variables es

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 \quad (2.5a)$$

$$\frac{d\beta}{d\tau} = \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta \quad (2.5b)$$

2.2.1. Puntos de Equilibrio

Para poder determinar los puntos de equilibrio del sistema (2.5), se tiene que resolver el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{d\tau} &= 0 \\ \frac{d\beta}{d\tau} &= 0 \end{aligned}$$

es decir,

$$\frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 = 0 \quad (2.6a)$$

$$\alpha\beta^2 - \kappa_2\beta = 0 \quad (2.6b)$$

Sumando las ecuaciones (2.6a) y (2.6b), tenemos la relación

$$\frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \kappa_2\beta = 0 \quad (2.7)$$

Ahora, los puntos de equilibrio del sistema (2.5) son las siguientes:

1. $E_1 = (1, 0)$.
2. $E_2 = \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\kappa_2^2\tau_r}}{2}, \frac{1 - \sqrt{1 - 4\kappa_2^2\tau_r}}{2\kappa_2\tau_r} \right)$.
3. $E_3 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 4\kappa_2^2\tau_r}}{2}, \frac{1 + \sqrt{1 - 4\kappa_2^2\tau_r}}{2\kappa_2\tau_r} \right)$.

Notemos que E_2 y E_3 existen en el plano $\alpha\beta$ cuando se cumple la siguiente condición

$$1 - 4\kappa_2^2\tau_r \geq 0 \quad (2.8)$$

Ésta condición de existencia nos determina 3 regiones de estudio dentro del espacio de parámetros $\tau_r - \kappa_2$ en \mathbb{R}^2 :

- Región X: $1 - 4\tau_r\kappa_2^2 < 0$. Aquí existe sólo 1 punto fijo.
- Región Y: $1 - 4\tau_r\kappa_2^2 = 0$. Aquí existen 2 puntos fijos.
- Región Z: $1 - 4\tau_r\kappa_2^2 > 0$. Aquí existen 3 puntos fijos.

Estas regiones pueden ser apreciadas en la figura 2.2.

2.2.1.1. Bifurcación Silla-Nodo

Sean $\tilde{\kappa}_2$ y $\tilde{\tau}_r$ de tal forma que el punto $P = (\tilde{\tau}_r, \tilde{\kappa}_2)$ este en la región X. Al fijar $\tilde{\kappa}_2$ y disminuir $\tilde{\tau}_r$, el punto P transita de la región X a la región Y y posteriormente, llega a la

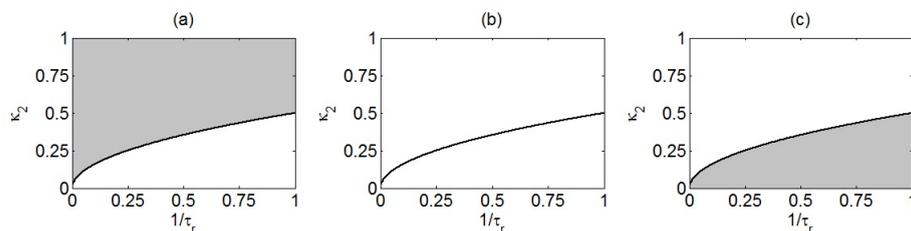


FIGURA 2.2: Regiones determinadas por la condición (2.8). (a) Sombreada se observa la región X: $4\tau_r\kappa_2^2 > 1$, (b) La línea sólida representa la región Y: $4\tau_r\kappa_2^2 = 1$, (c) Sombreada se muestra la región Z: $4\tau_r\kappa_2^2 < 1$

región Y.

En el momento en que el punto P llega a la región Y, el sistema cumple con las hipótesis para que ocurra una bifurcación del tipo silla-nodo. Esto explica el motivo por el cual, se pasa de tener un punto fijo en la región X a tener tres puntos fijos en la región Z. A continuación, mostramos esta prueba. La figura 2.3 ejemplifica este caso.

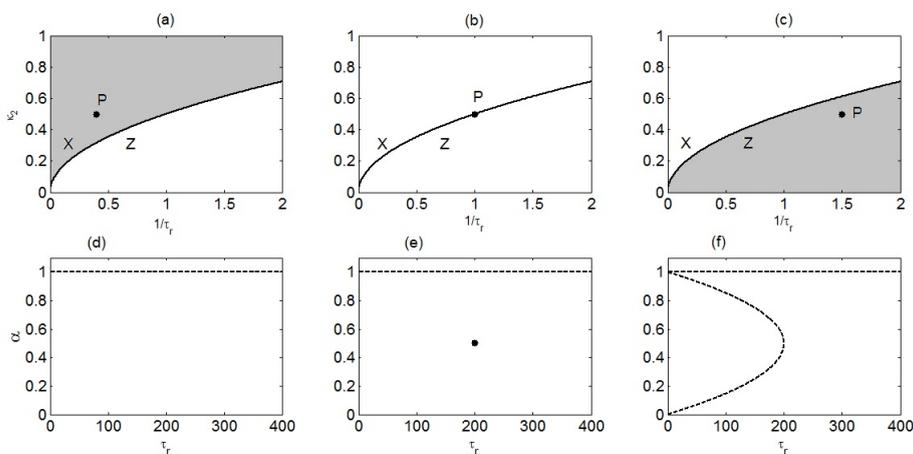


FIGURA 2.3: Bosquejo de la bifurcación de silla-nodo en el sistema (2.2a) y (2.2b).

Proposición 2.1. Sea $x = (\alpha, \beta)$ y $\mu = (\tau_r, \kappa_2)$. El sistema

$$f(x, \mu) = \left(\frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2, \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta \right) \quad (2.9)$$

presenta una bifurcación del tipo silla-nodo sobre los puntos (x_0, μ_0) tales que $\frac{1}{\tau_r} = 4\kappa_2^2$, es decir, sobre aquellos puntos $\left(\frac{1}{\tau_r}, \kappa_2\right)$ tales que la condición (2.8) se vuelve una igualdad.

Demostración. Para ver que sucede una bifurcación del tipo silla nodo, se tienen que cumplir las siguientes 4 condiciones:

1. $f(x_0, \mu_0) = 0$.
2. $J = Df(x_0, \mu_0)$ tiene un eigenvalor 0.
3. $w^T f_\mu(x_0, \mu_0) \neq 0$ con w eigenvector del eigenvalor 0 de J^T .
4. $w^T (D^2 f(x_0, \mu_0)(v, v)) \neq 0$ con v eigenvector del eigenvalor 0 de J .

Pasemos a verificar cada una de las condiciones.

Los puntos que consideramos como (x_0, μ_0) son $\left(\frac{1}{2}, 2\kappa_2, \kappa_2, \frac{1}{4\kappa_2^2}\right)$. Ahora, tenemos que:

1. $f(x_0, \mu_0) = 0$ es evidente.
2. $J = Df(x_0, \mu_0) = \begin{pmatrix} -8\kappa_2^2 & -2\kappa_2 \\ 4\kappa_2^2 & \kappa_2 \end{pmatrix}$. Luego, $\text{Det}(J) = -8\kappa_2^3 + 8\kappa_2^3 = 0$. De aquí, se sigue que J tiene un eigenvalor 0.
3. $f_\mu(x_0, \mu_0) = \begin{pmatrix} -8\kappa_2^4 & 0 \\ 0 & -2\kappa_2 \end{pmatrix}$ y $w^T = (1, 2)$. Así,

$$\begin{aligned} w^T f_\mu(x_0, \mu_0) &= (1, 2) \begin{pmatrix} -8\kappa_2^4 & 0 \\ 0 & -2\kappa_2 \end{pmatrix} \\ &= (-8\kappa_2^4, -4\kappa_2) \end{aligned}$$

lo cual es distinto de 0, cuando $\kappa_2 \neq 0$.

$$4. D^2 f(x_0, \mu_0) = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -4\kappa_2 & 0 \\ 4\kappa_2 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \text{ y } v = (1, -4\kappa_2). \text{ Luego,}$$

$$\begin{aligned} w^T (D^2 f(x_0, \mu_0)(v, v)) &= (1, 2) \left[\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -4\kappa_2 & 0 \\ 4\kappa_2 & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ -4\kappa_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -4\kappa_2 \end{pmatrix} \right) \right] \\ &= (1, 2) \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -4\kappa_2 & 4\kappa_2 \end{pmatrix} \\ &= (-8\kappa_2, 8\kappa_2) \end{aligned}$$

lo cual es distinto de 0 cuando $\kappa_2 \neq 0$.

Por lo tanto, al probar las 4 condiciones, tenemos que (2.9) sufre una bifurcación silla-nodo sobre la curva

$$4\tau_r \kappa_2^2 = 1.$$

□

Ahora que se han determinado los puntos de equilibrio y la región de parámetros que nos permite que existan, realizemos el análisis de estabilidad.

2.2.2. Estabilidad de puntos de equilibrio

Para estudiar la estabilidad de los puntos de equilibrio, calculemos el jacobiano del sistema (2.5).

$$J(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_r} - \beta^2 & -2\alpha\beta \\ \beta^2 & 2\alpha\beta - \kappa_2 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Ahora, evaluemos cada equilibrio en el Jacobiano.

1. $E_1 = (1, 0)$.

$$J(E_1) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\tau_r} & 0 \\ 0 & -\kappa_2 \end{pmatrix}.$$

De aquí, es evidente que E_1 es estable ya que τ_r y κ_2 son ambas positivas. Esto quiere decir que este punto fijo es un equilibrio del tipo nodo estable.

2. $E_2 = \left(\frac{1 + \sqrt{1 - 4\kappa_2^2 \tau_r}}{2}, \frac{1 - \sqrt{1 - 4\kappa_2^2 \tau_r}}{2\kappa_2 \tau_r} \right)$.

$$J(E_2) = \begin{pmatrix} -\frac{1 - \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2}}{2\tau_r^2 \kappa_2^2} & -2\kappa_2 \\ \frac{1 - \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2}}{2\tau_r^2 \kappa_2^2} - \frac{1}{\tau_r} & \kappa_2 \end{pmatrix}$$

3. $E_3 = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 4\kappa_2^2 \tau_r}}{2}, \frac{1 + \sqrt{1 - 4\kappa_2^2 \tau_r}}{2\kappa_2 \tau_r} \right)$.

$$J(E_3) = \begin{pmatrix} -\frac{1 + \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2}}{2\tau_r^2 \kappa_2^2} & -2\kappa_2 \\ \frac{1 + \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2}}{2\tau_r^2 \kappa_2^2} - \frac{1}{\tau_r} & \kappa_2 \end{pmatrix}$$

De la configuración resultante de E_2 y E_3 se tiene el siguiente resultado:

Proposición 2.2. *Para cualquier pareja (τ_r, κ_2) que cumple la relación (2.8) de manera estricta, se tiene que:*

- E_2 es un punto silla.
- E_3 no es un punto silla.

Demostración. Para ver que E_2 es un punto silla, probemos que $\text{Det}(J(E_2)) < 0$. Entonces,

$$\begin{aligned} \text{Det}(J(E_2)) < 0 &\iff \frac{\beta_2 - 2\kappa_2}{\tau_r} < 0 \\ &\iff \beta_2 < 2\kappa_2 \\ &\iff 1 - \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2} < 4\tau_r \kappa_2^2 \\ &\iff 1 - 4\tau_r \kappa_2^2 < \sqrt{1 - 4\tau_r \kappa_2^2} \\ &\iff 1 - 4\tau_r \kappa_2^2 < 1 \\ &\iff 0 < 4\tau_r \kappa_2^2 \end{aligned}$$

lo cual es cierto. Luego, para ver que E_3 no es un punto silla, probemos que $Det(J(E_3)) > 0$. Así,

$$\begin{aligned} Det(J(E_3)) > 0 &\iff \frac{\beta_3 - 2\kappa_2}{\tau_r} > 0 \\ &\iff \beta_3 > 2\kappa_2 \\ &\iff 1 + \sqrt{1 - 4\tau_r\kappa_2^2} > 4\tau_r\kappa_2^2 \\ &\iff (1 - 4\tau_r\kappa_2^2) + \sqrt{1 - 4\tau_r\kappa_2^2} > 0 \end{aligned}$$

lo cual es cierto, pues ambos términos del lado izquierdo son positivos. \square

La información que nos brinda el resultado anterior nos indica que, para cualquier pareja (τ_r, κ_2) de parámetros que se tenga en la región Z, la estabilidad local de E_1 y E_2 es invariante. Por tal motivo, determinemos las posibles estabilidades locales de E_3 .

2.2.2.1. Comportamiento de E_3

A continuación, se muestran 4 parejas de parámetros de la región Z: P_1, P_2, P_3 y P_4 . Estos 4 puntos están sobre la recta $\kappa_2 = \frac{1}{40}$. Apoyándonos en el análisis traza-determinante para la estabilidad de puntos de equilibrio (ver [9], pág.73), determinemos la estabilidad local de E_3 en cada caso.

- Para $P_1 = (80, \frac{1}{40})$, se tiene que $Tr[J(E_3)] < 0$ y $Dis[J(E_3)] > 0$. Por tanto, E_3 cumple las condiciones para tener un comportamiento del tipo sumidero.
- Para $P_2 = (170, \frac{1}{40})$, se tiene que $Tr[J(E_3)] < 0$ y $Dis[J(E_3)] < 0$. Por tanto, E_3 cumple las condiciones para tener un comportamiento del tipo espiral estable.
- Para $P_3 = (300, \frac{1}{40})$, se tiene que $Tr[J(E_3)] > 0$ y $Dis[J(E_3)] < 0$. Por tanto, E_3 cumple las condiciones para tener un comportamiento del tipo espiral inestable.
- Para $P_4 = (380, \frac{1}{40})$, se tiene que $Tr[J(E_3)] > 0$ y $Dis[J(E_3)] > 0$. Por tanto, E_3 cumple las condiciones para tener un comportamiento del tipo fuente.

donde $Dis(J) := Tr[J]^2 - 4Det[J]$. Estos resultados nos indican que E_3 tiene todos los comportamientos posibles del semiplano superior del análisis traza-determinante. Por tanto, llamemos:

1. Región Z_1 a la región donde $Tr[J(E_3)] < 0$ y $Dis[J(E_3)] > 0$.
2. Región Z_2 a la región donde $Tr[J(E_3)] < 0$ y $Dis[J(E_3)] < 0$.
3. Región Z_3 a la región donde $Tr[J(E_3)] > 0$ y $Dis[J(E_3)] < 0$.
4. Región Z_4 a la región donde $Tr[J(E_3)] > 0$ y $Dis[J(E_3)] > 0$.

El análisis que se presenta a continuación, busca determinar con exactitud las regiones que determinan estos casos. Estas regiones se ubican dentro de la región Z del espacio de parámetros y son análogas a las 4 regiones en las que se divide el semiplano superior del plano Traza-Determinante (ver [9], pág. 73), que se utiliza para determinar la estabilidad de un punto fijo. Por tanto, procedamos a calcular las regiones $Tr[J] = 0$ y $Dis[J] = 0$.

Región $Tr[J] = 0$

Los puntos (τ_r, κ_2) tales que $Tr[J] = 0$ son aquellos que cumplen:

$$\kappa_2^4 + \frac{1}{\tau_r^3} = \frac{\kappa_2}{\tau_r^2}. \quad (2.11)$$

Por tanto, realizando una parametrización, tenemos que:

$$\{(\tau_r, \kappa_2) / (2.11) \text{ se cumple}\} = \{(\frac{1}{m^3 - m^4}, m^2 - m^3) / m \in (0, 0.5)\}.$$

Región $Dis[J] = 0$

Los puntos (τ_r, κ_2) tales que $Dis[J] = 0$ son aquellos que cumplen:

$$\kappa_2^6 \left(\kappa_2 + \frac{8}{\tau_r} \right)^2 - \frac{2}{\tau_r^2} \kappa_2^3 \left(\frac{8}{\tau_r^2} + \frac{7\kappa_2}{\tau_r} + 3\kappa_2^2 \right) + \frac{1}{\tau_r^4} \left(\frac{1}{\tau_r} + \kappa_2 \right)^2 = 0. \quad (2.12)$$

Como se está interesado en encontrar los puntos $(\frac{1}{\tau_r}, \kappa_2)$ tales que (2.12) este en el primer cuadrante, tenemos que

$$\{(\tau_r, \kappa_2) \in \mathbb{R}^+ / Dis[J] = 0\} = \{(\tau_r, \kappa_2) / \frac{1}{\tau_r} = T(m)m^3, \kappa_2 = T(m)m^2\}$$

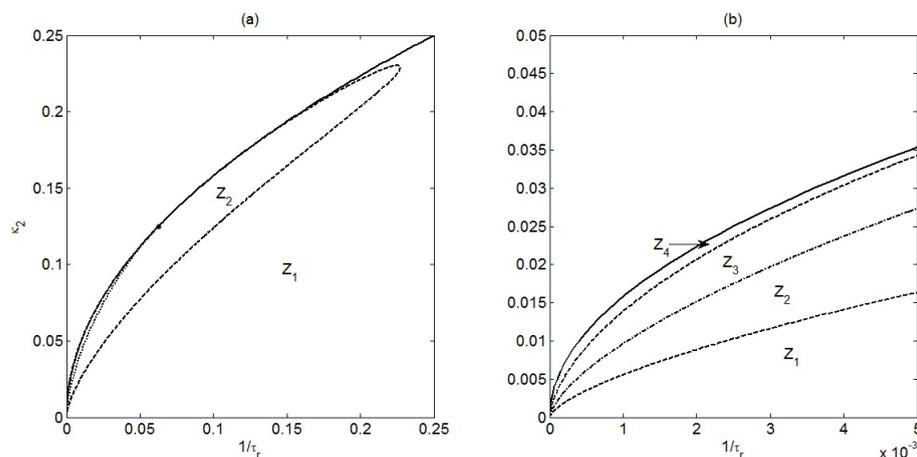


FIGURA 2.4: Región en el espacio de parámetros, donde se cumple la relación $Tr[J] = 0$ y la relación $Tr[J]^2 - 4Det[J] = 0$.

con

$$T(m) = \frac{3 + 7m + 8m^2 \pm 2(1 + 2m)\sqrt{2 - 2m}}{(1 + 8m)^2}$$

y $m \in (0, 1]$.

La figura 2.4 nos muestra como se ve esta curvas en el espacio de parámetros.

2.2.2.2. Retratos fase

Los retratos fase del sistema vamos a exhibir los retratos fase para los parámetros P_1 , P_2 , P_3 y P_4 .

- $P_1 = (80, \frac{1}{40})$. En este caso, la estabilidad local de E_1 y E_3 es del tipo sumidero, por tanto, el conjunto $[0, 1] \times \mathbb{R}^+$ en 2 cuencas de atracción W_1 y W_3 , las cuales si $C_0 = (\alpha_0, \beta_0)$ es una condición inicial para el sistema (2.5), entonces su solución converge a E_1 si $C_0 \in W_1$ y converge a E_3 si $C_0 \in W_3$.

La figura 2.5 muestra 2 condiciones iniciales: $(0.01, 0.1)$ y $(0.01, 0.01)$, y su trayectoria respectiva como solución del PVI (2.5).

- $P_2 = (170, \frac{1}{40})$. En este caso, la estabilidad de E_3 es del tipo espiral estable, por tanto, al igual que el caso anterior, existen 2 cuencas de atracción disjuntas y una

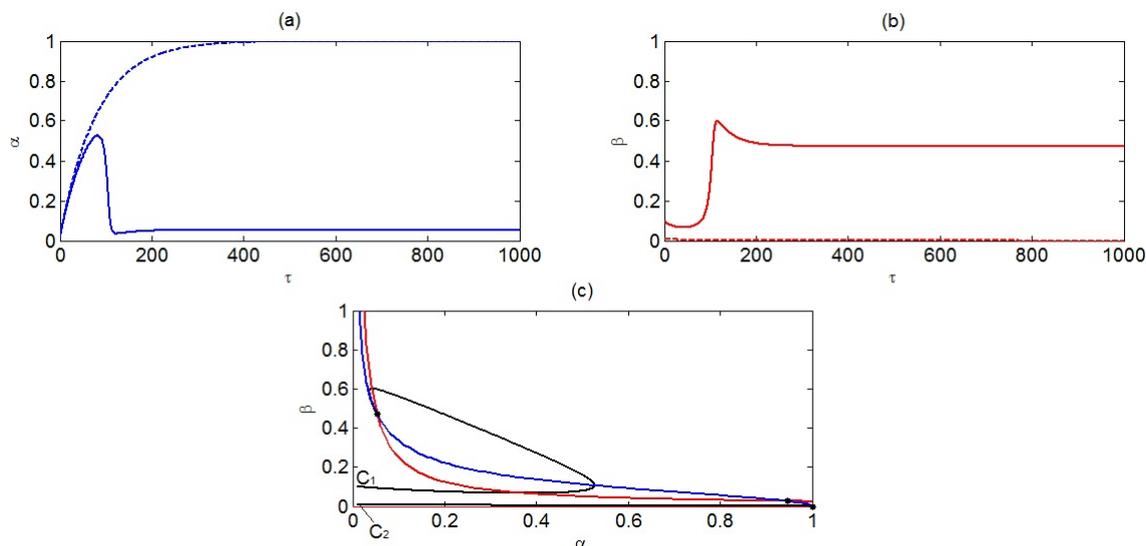


FIGURA 2.5: Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_1 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$.

separatriz que las divide. Para exhibir ésto, en la figura 2.6 se muestra las soluciones de (2.5) con condiciones iniciales $(0.05, 0.1)$, $(0.1, 0.1)$, $(0.4, 0.1)$ y $(0.9, 0.3)$. Las trayectorias con condiciones iniciales 1 y 2 convergen a E_1 , mientras que las trayectorias con condiciones iniciales 3 y 4 convergen a E_3 . De aquí, se deduce que existe una separatriz que divide a las cuencas de atracción de E_1 y E_3 .

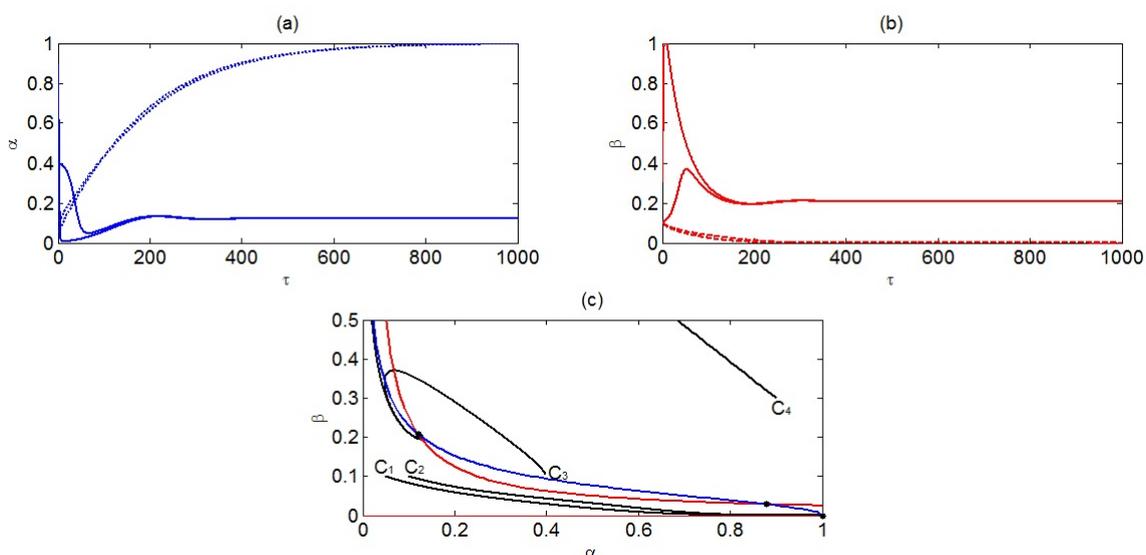


FIGURA 2.6: Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_2 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$.

- $P_3 = (300, \frac{1}{40})$. Para éstos parámetros, se tiene que la estabilidad local de E_3 es inestable. Por tanto, el único equilibrio estable es E_1 . Así, cualquier condición inicial tomada converge a E_1 en un tiempo finito. Para ejemplo de ello, tomaremos tres condiciones iniciales: $C_1 = (0.05, 0.1)$, $C_2 = (0.4, 0.1)$ y $C_3 = (0.9, 0.3)$. Observemos este hecho en la figura 2.7.

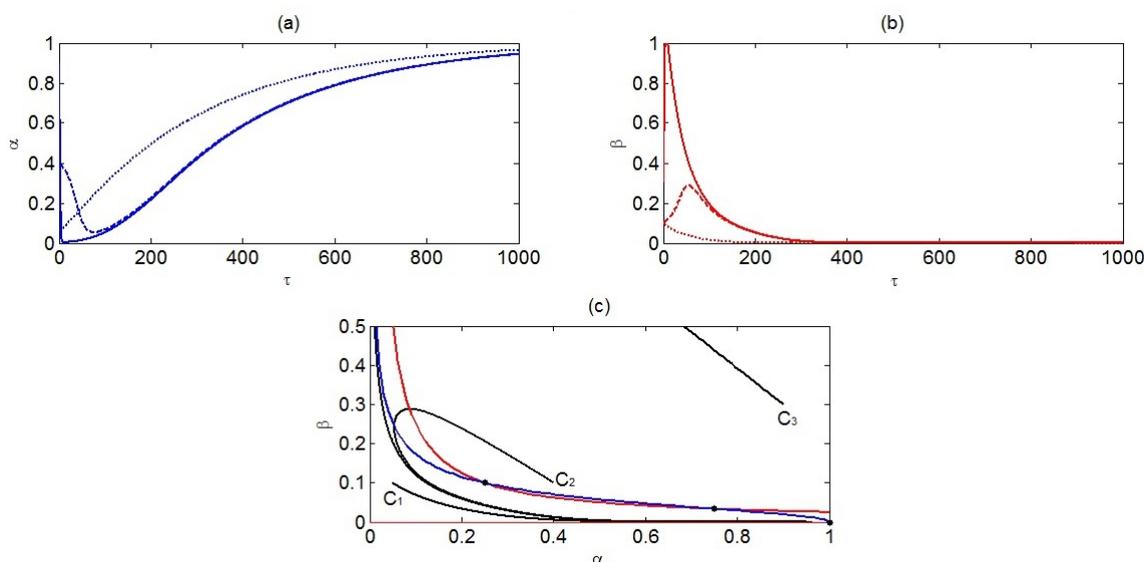


FIGURA 2.7: Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_3 . En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$.

- $P_4 = (380, \frac{1}{40})$. En este caso, la estabilidad local de E_3 es del tipo fuente. Por tanto, toda trayectoria que pase cerca de E_3 tiende a alejarse. De esta manera, la solución del sistema (2.5) para cualquier condición inicial $C_0 = (\alpha_0, \beta_0)$ tiende a E_1 . Esto se puede observar en la figura 2.8.

2.2.3. Oscilaciones periódicas

Una de las principales características de éste modelo, es que presenta regímenes para los cuales suceden oscilaciones periódicas. En la literatura ([2],[11],[8]) se pueden encontrar condiciones necesarias y suficientes para decir que la reacción (2.1) sufre oscilaciones y alcanza una órbita periódica. La explicación química de este fenómeno indica que la concentración no llega a un equilibrio constante, pero se mantiene oscilando periódicamente.

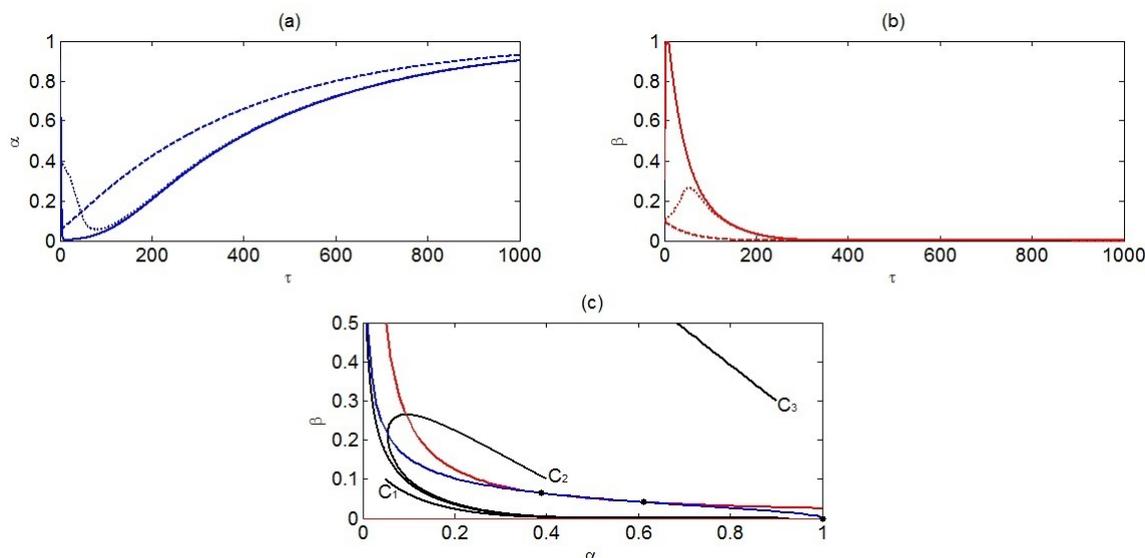


FIGURA 2.8: Soluciones al PVI (2.5) con parámetros P_4 . Se tomaron 3 distintas condiciones iniciales: $C_1 = (0.05, 0.1)$, $C_2 = (0.4, 0.1)$ y $C_3 = (0.9, 0.3)$. En (a) se grafican las soluciones de α vs. τ . En (b) se grafican las soluciones de β vs. τ . En (c) se grafican las soluciones en el plano $\alpha\beta$.

Matemáticamente, esto sucede al momento en que el equilibrio E_3 cambia su estabilidad de estable a inestable.

2.2.3.1. Exhibición Numérica

Exhibiremos la existencia de órbitas periódicas de forma numérica, pero no daremos la región en el espacio de parámetros donde sucede, ya que se sale del objetivo del trabajo. Para ello, sea $P \in Z_3$ tal que $P = (230, \frac{1}{40})$. Así, se tiene garantizado que la estabilidad de E_3 será inestable. Analicemos las trayectorias de las condiciones iniciales $C_1 = (0.004, 0.29)$ y $C_2 = (0.004, 0.30)$.

La simulación numérica muestra que la solución T_1 del sistema (2.5) con condición inicial C_1 tiende al equilibrio $E_1 = (1, 0)$. En cambio, la solución T_2 del sistema (2.5) con condición inicial C_2 comienza a enroscarse alrededor de E_3 , como se aprecia en la figura 2.9(b).

Ahora bien, la solución T_2 comienza a oscilar, sin llegar al equilibrio E_3 , el cual es inestable. De aquí, se deduce intuitivamente que existe una órbita periódica estable en la cual, se enrosca la solución T_2 cuando $\tau \rightarrow \infty$.

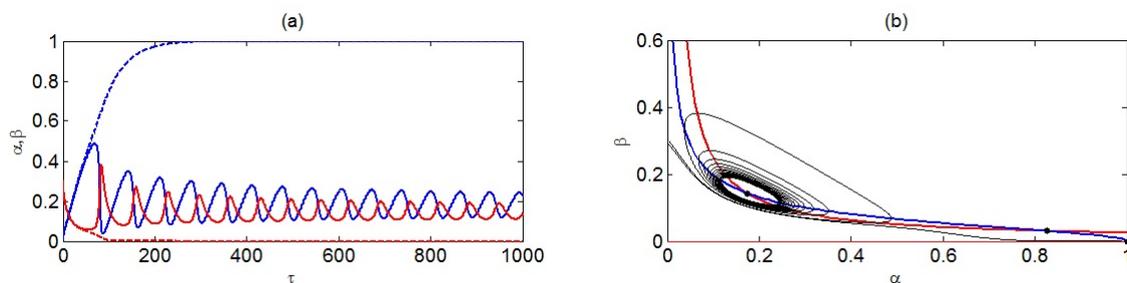


FIGURA 2.9: (a) Soluciones del PVI (2.5) con la condición inicial $C_1 = (0.004, 0.29)$ (línea punteada) y con la condición inicial $C_2 = (0.004, 0.3)$ (línea sólida), respecto al tiempo τ . (b) Trayectorias de las soluciones T_1 y T_2 del PVI (2.5) con condiciones iniciales C_1 y C_2 , respectivamente, en el plano $\alpha\beta$.

2.2.3.2. Exhibición Analítica

Para exhibir este fenómeno en general, realizemos un análisis del campo vectorial del sistema (2.5). Las curvas nulas del sistema, $\dot{\alpha} = 0$ y $\dot{\beta} = 0$, dividen a nuestra región de estudio en 5 regiones, como se puede observar en la figura 2.10. La siguiente tabla muestra la

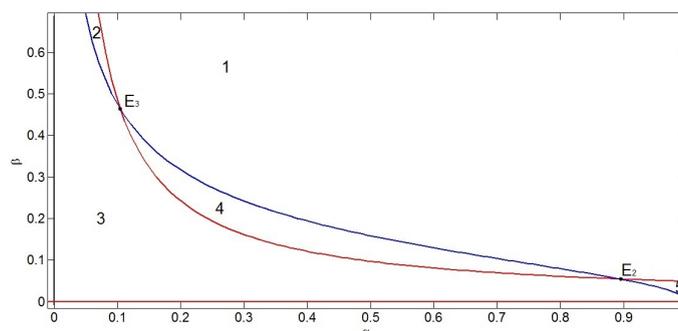


FIGURA 2.10: Regiones del plano $\alpha - \beta$. La curva azul representa $\dot{\alpha} = 0$ y la curva roja $\dot{\beta} = 0$

dirección del campo vectorial sobre cada región.

Región	$\dot{\alpha}$	$\dot{\beta}$
1	-	+
2	-	-
3	+	-
4	+	+
5	-	-

De aquí, podemos observar que el campo vectorial en la Región 5 es el mismo que en la región 2. Ahora bien, observemos el campo vectorial alrededor del punto fijo E_3 . Si tomamos la región cerrada (representada gráficamente en la figura 2.11) alrededor de E_3 , tenemos que cualquier trayectoria que nace dentro o entra, permanece allí.

Esta región esta delimitada por:

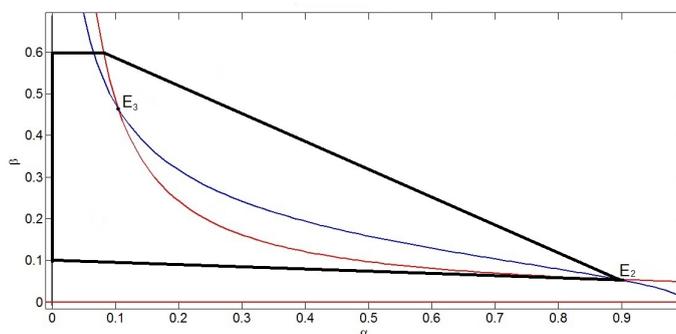


FIGURA 2.11: Regiones cerrada alrededor de E_3 .

- Tomamos un segmento de E_2 a $Q = (\alpha_Q, \beta_Q)$ el cual tiene la misma coordenada en α que E_2 y β_Q mayor que la coordenada en β de E_2 . Después, la trayectoria que pasa por Q y que toca en un punto $\tilde{\beta}$ a $\dot{\beta} = 0$.
- Un segmento de recta horizontal, que va de $\dot{\beta} = 0$ al eje β con altura $\tilde{\beta}$.
- Un segmento del eje β , que comienza en $(0, \tilde{\beta})$ y termina en un punto $(0, \tilde{\beta}_1)$, que es la intersección de la variedad estable de E_2 con el eje β .
- El segmento de la variedad estable de E_2 , desde el eje β hasta E_2 .

Ahora bien, si consideramos el escenario cuando E_3 es estable (ya sea como espiral o como nodo), esta región esta bien definida. Pero, cuando consideramos el escenario donde E_3 es inestable, sucede lo siguiente:

- En un primer momento, al pasar de estable a inestable, sucede una bifurcación de Hopf, lo que genera una órbita periódica.

- En un segundo momento, esta órbita llega a crecer tanto que, choca con la variedad estable de E_2 y llega a formar una bifurcación global del tipo Andronov-Leontovich, dando como resultado que el equilibrio E_2 tenga una órbita homoclínica (se colapsan las variedades estables e inestables de él).
- En un tercer momento, la órbita homoclínica desaparece, dando como resultado que las variedades inestables de E_2 terminen en E_1 , y que E_3 se comunique con E_2 por medio de la variedad estable de E_2 .

Puesto que el escenario anterior sucede siempre y cuando $\tau_r > 16$ y $\kappa_2 < \frac{1}{8}$, puesto que en esta región del plano $\tau_r \kappa_2$ es donde se presentan las condiciones para que E_3 exista y sea inestable.

2.3. Estudio del Modelo C

El segundo modelo a estudiar en este capítulo, el modelo C, considera la hipótesis de que el catalizador B tiene un flujo de entrada constante. Así, el modelo, vía ley de acción de masas, de (2.1) se observa como:

$$\frac{da}{dt} = \frac{a_0 - a}{t_r} - k_1 ab^2 \quad (2.13a)$$

$$\frac{db}{dt} = \frac{b_0 - b}{t_r} + k_1 ab^2 - k_2 b \quad (2.13b)$$

donde k_1 , k_2 , a_0 y t_r están definidas como en el modelo anterior (Ver Sección 3.1) y b_0 es el flujo de entrada de B .

El término $\frac{b_0 - b}{t_r}$ de (2.13b) influye de manera muy notable en la dinámica del sistema. Se incrementan los distintos escenarios al modificar los parámetros del sistema, como por ejemplo, sistemas con 2 órbitas periódicas. (ver [8].)

De nueva cuenta, para facilitar el trabajo, realizemos el siguiente cambio de variable (2.3) y (2.4), añadiendo también

$$\beta_0 = \frac{b_0}{a_0}.$$

De esta forma, el sistema (2.13) se vuelve

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 \quad (2.14a)$$

$$\frac{d\beta}{d\tau} = \frac{\beta_0 - \beta}{\tau_r} + \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta \quad (2.14b)$$

2.3.1. Puntos fijos

Para obtener los puntos fijos de (2.14), basta resolver el sistema

$$\frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 = 0 \quad (2.15a)$$

$$\frac{\beta_0 - \beta}{\tau_r} + \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta = 0 \quad (2.15b)$$

Al sumar las ecuaciones de (2.15), se obtiene la siguiente recta,

$$\frac{1 + \beta_0 - \alpha - \beta}{\tau_r} - \kappa_2\beta = 0 \quad (2.16)$$

que es análoga a la recta (2.7) del modelo S. Ahora bien, las soluciones de (2.15) son análogas a las soluciones del siguiente sistema

$$\frac{(1 + \kappa_2\tau_r)^2}{\tau_r} (1 - \alpha) - \alpha(1 + \beta_0 - \alpha)^2 = 0 \quad (2.17a)$$

$$\frac{1 + \beta_0 - \alpha}{1 + \kappa_2\tau_r} = \beta \quad (2.17b)$$

el cual, es complicado ya que, la primera de ellas es un polinomio cúbico de α en términos de 3 parámetros: τ_r , κ_2 y β_0 . Por tal motivo, realizaremos un análisis similar al mostrado en el capítulo 2, en la sección 2.3.2.

2.3.1.1. Determinación de raíces dobles

Para poder determinar la forma de la gráfica de α vs. τ_r nos enfocaremos en estudiar los valores de α donde existe una raíz doble. Es decir, buscaremos aquellos α donde se

satisface el siguiente sistema de ecuaciones:

$$R(\alpha) = L(\alpha) \quad (2.18a)$$

$$\frac{dR(\alpha)}{d\alpha} = \frac{dL(\alpha)}{d\alpha} \quad (2.18b)$$

donde

$$\begin{aligned} R(\alpha) &= \alpha(1 + \beta_0 - \alpha)^2 \\ L(\alpha) &= \frac{(1 + \kappa_2 \tau_r)^2}{\tau_r} (1 - \alpha) \end{aligned}$$

Las soluciones obtenidos del sistema de ecuaciones (2.18) son

$$\alpha = \frac{3 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0}}{4} \quad (2.19)$$

Ahora, sustituyendo este valor en (2.18b), tenemos:

$$\frac{(1 + \kappa_2 \tau_r)^2}{\tau_r} = \frac{1}{8} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right]. \quad (2.20)$$

Al observar con detalle (2.20), observamos que es una cuadrática de τ_r en función de κ_2 y β_0 . Por tanto, si llamamos

$$S^\pm = \frac{1}{8} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right],$$

tenemos que

$$\tau_r = \frac{S^\pm - 2\kappa_2 \pm \sqrt{S^\pm (S^\pm - 4\kappa_2)}}{2\kappa_2^2}.$$

Por tanto, en el plano $\tau_r - \alpha$, existen hasta 4 puntos donde surge la tangencialidad (o bien, bifurcaciones silla-nodo). Todo esto depende de los valores de β_0 y de κ_2 . El análisis gráfico, se puede observar en la figura (2.12)

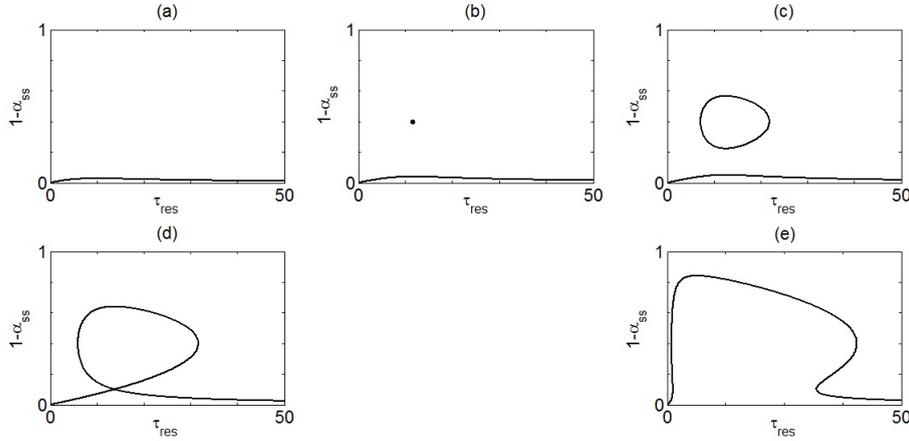


FIGURA 2.12: Los 5 escenarios posibles. (a) Para cada τ_r existe un equilibrio. (b) Para $\tau_r = \frac{1}{\kappa_2}$ existen 2 equilibrios, y para cualquier otro valor de τ_r , existe un equilibrio. (c) Existencia de una isla. (d) Intersección de la isla con el punto fijo que siempre existe. (e) Existencia de un hongo.

2.3.2. Condiciones de degeneración

Ahora que tenemos determinados los 5 escenarios posibles para la curva (2.17) en función de β_0 y κ_2 , el siguiente punto será determinar en el plano de parámetros $\kappa_2\beta_0$ las regiones que corresponden a cada escenario.

Ahora notemos que $\tau_r \in \mathbb{R}$ si $S^\pm \geq 4\kappa_2$. Además, $\alpha \in \mathbb{R}$ si $\beta_0 \leq \frac{1}{8}$. De estos 2 hechos, tenemos que el espacio de parámetros $\kappa_2\beta_0$ se divide en 3 regiones: una donde se forman las islas, una donde se forman los hongos y una donde hay solamente un equilibrio (ver figura 2.13). Por tanto, el propósito de esta sección es mostrar el camino a

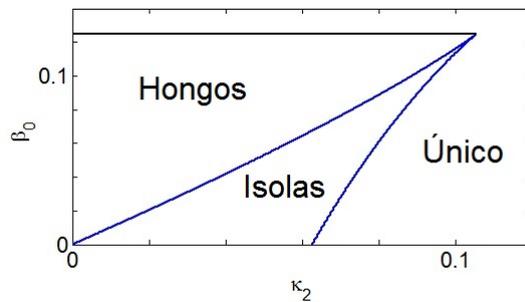


FIGURA 2.13: En negro se observa la recta $\beta_0 = 0.125$ y en azul se observa la curva $\kappa_2 = \frac{1}{32} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right]$. Ambas están graficadas en el plano $\kappa_2\text{-}\beta_0$.

seguir para encontrar las distintas posibilidades de estabilidad de equilibrios. Para ello, se

planea determinar las condiciones en el plano $\kappa_2\beta_0$ para que coexistan órbitas periódicas, órbitas homoclínicas, etc.. Éstas condiciones son las siguientes

- Condición 1. Eigenvalores idénticos a 0.

$$Tr(\mathbf{J}) = Det(\mathbf{J}) = 0.$$

- Condición 2. Transversalidad.

$$Tr(\mathbf{J}) = \frac{dTr(\mathbf{J})}{d\tau_r} = 0.$$

- Condición 3. Estabilidad de ciclos límite.

$$Tr(\mathbf{J}) = \beta_2 = 0$$

donde β_2 representa la estabilidad del ciclo límite que existe en tal caso.

donde

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} -\beta - \frac{1}{\tau_r} & -2\alpha\beta \\ \beta & 2\alpha\beta - \kappa_2 - \frac{1}{\tau_r} \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

A continuación, abordaremos la primer condición. Las otras 2, dada su complejidad al momento de trabajar los sistemas de ecuaciones que las define, se dejan abiertas para un próximo trabajo. Se puede consultar [8] para obtener una panorámica más amplia de esto.

Condición 1.

Para determinar los parámetros κ_2 y β_0 donde suceden eigenvalores 0, hay que resolver el siguiente sistema de ecuaciones

$$Det(\mathbf{J}) = Tr(\mathbf{J}) = 0$$

además de las ecuaciones 2.15. Explícitamente, hay que resolver el sistema (2.22):

$$\left(\frac{1}{\tau_r}\right) \left[(1 + \kappa_2 \tau_r) \left(\beta^2 + \frac{1}{\tau_r} \right) - 2\alpha\beta \right] = 0 \quad (2.22a)$$

$$2\alpha\beta - \left(\beta^2 + \kappa_2 + \frac{2}{\tau_r} \right) = 0 \quad (2.22b)$$

$$\frac{(1 + \kappa_2 \tau_r)^2}{\tau_r} (1 - \alpha) - \alpha (1 + \beta_0 - \alpha)^2 = 0 \quad (2.22c)$$

$$\beta = \frac{1 + \beta_0 - \alpha}{1 + \kappa_2 \tau_r} = 0 \quad (2.22d)$$

Cabe decir que la ecuación (2.22d) se deriva de despejar β de $\dot{\beta} = 0$ y sustituirla en $\dot{\alpha} = 0$.

De esta forma, la solución de (2.22) esta determinada por

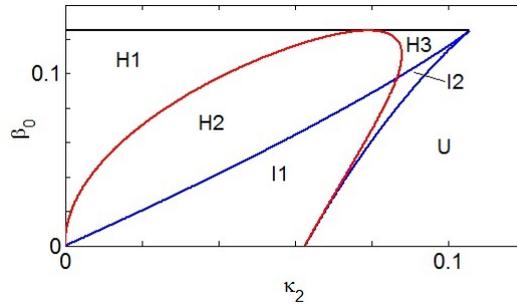


FIGURA 2.14: En negro se observa la recta $\beta_0 = 0.125$ y en azul se observa la curva $\kappa_2 = \frac{1}{32} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right]$. En rojo se observa la curva Δ . Estas curvas están graficadas en el plano κ_2 - β_0 .

$$\beta_0 = x(1 - 2x) \quad (2.23)$$

$$\kappa_2 = 4x^2(1 - x)^4 \quad (2.24)$$

con $x = 1 - \alpha$ y $0 \leq x \leq 0.5$. En la figura 2.14 se puede observar esta curva, denotada por Δ .

2.4. Excitabilidad

Para finalizar, vamos a destinarlo en mostrar que el modelo de Gray-Scott muestra excitabilidad, para los parámetros $\tau_r = 315$, $\kappa_2 = \frac{1}{40}$ y $\beta_0 = \frac{1}{15}$. Se dice que un sistema es

excitable cuando existe un valor umbral β_{um} para el cual se cumple que el tiempo que tardan en llegar las soluciones al equilibrio por debajo de ese umbral es mucho menor que cuando las soluciones están por encima de ese umbral.

Para estos valores en el espacio de parámetros, el sistema presenta 3 equilibrios:

- $I = (0.29660075538769, 0.086767989009102)$, el cual tiene comportamiento inestable.
- $S = (0.89977755808206, 0.018804406964091)$, el cual tiene comportamiento de punto silla.
- $E = (0.93695506371563, 0.014615398177042)$, el cual tiene comportamiento estable.

Ahora, analicemos que sucede cuando perturbamos ligeramente el equilibrio estable E para valores mayores de β . Como se observa en la figura 2.15, la respuesta del sistema a la perturbación en $\beta_1 = 0.016$ es nula, por tanto, el sistema tiende rápidamente al equilibrio. Esto mismo sucede cuando el sistema se perturba a $\beta_2 = 0.017$, aunque tarda ligeramente más tiempo en llegar al equilibrio.

El análisis interesante sucede cuando se vuelve a perturbar el equilibrio para $\beta_3 = 0.018$. En este caso, la respuesta del sistema es más drástica. En la figura 2.15 se observa que la solución comienza a diverger, pero no es así. En la figura 2.16 se puede observar la respuesta del sistema a esta perturbación. Esta respuesta comienza como una recta, en dirección noroeste, es decir, decayendo α y creciendo β . Luego, al alcanzar su máximo en β , comienza a decaer lentamente, obteniendo el mínimo de α . Después de esto, la trayectoria comienza a volver a crecer en α y decrecer en β paulatinamente, hasta llegar de nuevo al equilibrio E .

Por tanto, podemos decir que el umbral $\beta_{um} \in (0.017, 0.018)$. En la figura 2.17 se observa el cambio de α y β en base a las perturbaciones $\beta_2 = 0.017$ y $\beta_3 = 0.018$.

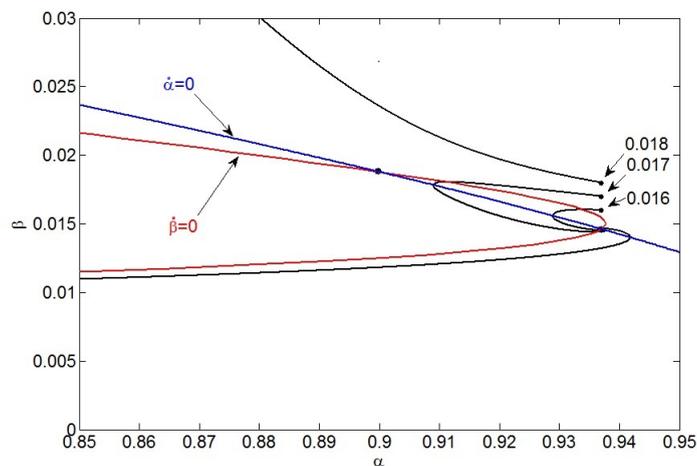


FIGURA 2.15: Respuesta de sistema a las perturbaciones $\beta_1 = 0.016$, $\beta_2 = 0.017$ y $\beta_3 = 0.018$. En azul se observa la curva nula de α y en rojo se observa la curva nula de β .

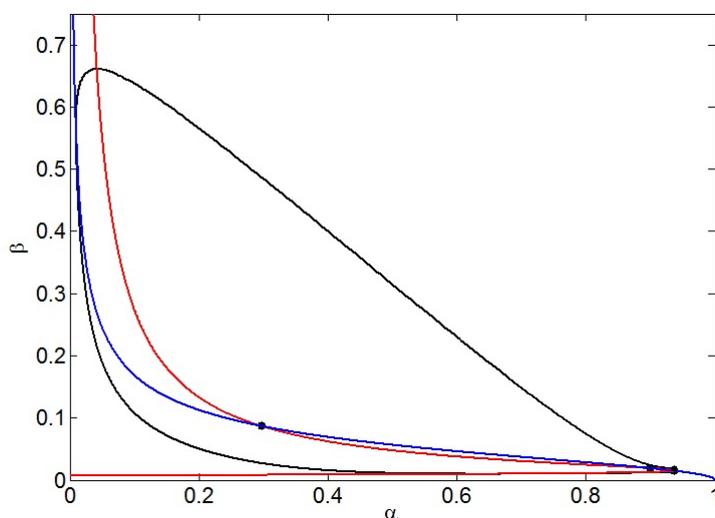


FIGURA 2.16: Respuesta al sistema de Gray-Scott con flujo de entrada para la perturbación $\beta_3 = 0.018$.

2.5. Conclusión

Recapitulando, el resultado principal de la primera parte de este capítulo fue lograr el análisis de la estabilidad de los puntos fijos. Así mismo, se logró determinar con exactitud cuando EQ_3 es estable e inestable y por tanto, la pauta para poder obtener órbitas homoclínicas en EQ_2 .

Un punto importante a notar, es la existencia de regímenes en el espacio de parámetros donde suceden oscilaciones periódicas. Estas oscilaciones tienen una gran importancia ya

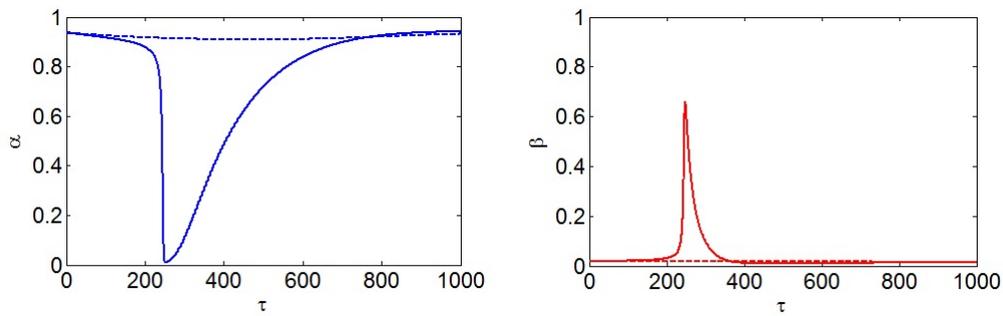


FIGURA 2.17: Respuesta del sistema de Gray-Scott a distintas perturbaciones. Con líneas punteadas, se representa la perturbación $\beta_2 = 0.017$ y con líneas sólidas, se representa la perturbación $\beta_3 = 0.018$.

que, evitan que las concentraciones de A y de B tiendan a un equilibrio químico; así mismo, no permiten ni que la concentración de A ni de B desaparezcan.

En tanto, el resultado principal de la segunda parte de este capítulo, fue determinar las regiones de parámetros donde suceden isolas y honos. Esto es motivado pues, en la región donde suceden los hongos, sucede el fenómeno de excitabilidad.

Capítulo 3

Autocatálisis en medio heterogéneo: Soluciones invariantes en el tiempo.

3.1. Introducción

El análisis realizado en los capítulos anteriores, ha tenido como principal objetivo determinar y estudiar los comportamientos que se obtienen en el modelo de Gray-Scott cuando la reacción química es homogénea. Ahora bien, la hipótesis de trabajar en un reactor CSTR, nos indica que el sistema está "bien agitado", es decir, implica que todo punto dentro del reactor tiene la misma composición química, es decir, la reacción autocatalítica es homogénea. De aquí surge una interrogante, ¿cuál será la diferencia de estudiar el modelo de Gray-Scott "sin agitarse", es decir, al retirar la hipótesis de homogeneidad del sistema?

La respuesta a esta interrogante es sencilla: Si la mezcla no se agita, al vertir los químicos A y B en el reactor, suceden 2 procesos:

- El primer proceso es la interacción química entre las especies A y B , que ya se tenía con el modelo anterior.
- El segundo proceso es la difusión de la mezcla resultante de A y B en el reactor.

A esta nueva interacción que entre las especies químicas, se denomina proceso de reacción-difusión, el cual sucede en reactores CFUR (Continuous Fed Unstirred Reactor).

Por lo tanto, el objetivo de este capítulo es entender el modelo de Gray-Scott sin flujo de entrada del catalizador B , estudiado en el capítulo 2, bajo estas nuevas hipótesis. Recordando, la reacción a estudiar en este capítulo interactúan 2 químicos, A y B , cuyos coeficientes de difusión son D_A y D_B respectivamente. Así mismo, el químico A ingresa al reactor con una tasa $\frac{1}{t_r}$, reacciona con una tasa k_1 con el catalizador B y el catalizador decae con una tasa k_2 . Bajo estos parámetros, se explicará que cuando la relación

$$t_r D_A = \frac{D_B}{k_2} \quad (3.1)$$

se satisface, entonces el modelo presenta soluciones estacionarias, en forma de frentes y pulsos, que son órbitas homoclínicas y heteroclínicas en un sistema donde se consideran soluciones invariantes en el tiempo. Así mismo, se estudiara la estabilidad de estas soluciones y sus principales propiedades.

3.2. Modelo matemático

El modelo de Gray-Scott sin flujo de entrada de B , bajo reacción-difusión, es el siguiente:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{a_0 - a}{t_r} - k_1 a b^2 \quad (3.2a)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} + k_1 a b^2 - k_2 b. \quad (3.2b)$$

donde $a(x, t)$ y $b(x, t)$ representan las concentraciones de A y B , respectivamente, en el tiempo t y la posición x . Así mismo, D_A y D_B representan los coeficientes de difusión de A y B , respectivamente. Además, los parámetros k_1 , k_2 , $\frac{1}{t_r}$ y a_0 están definidas como en el capítulo anterior.

Ya que el modelo a trabajar consta de 6 parámetros y 4 variables, procederemos a realizar el cambio de variable, presentado a continuación, con el fin de adimensionalizar el sistema.

$$\alpha = \frac{a}{a_0}, \quad \beta = \frac{b}{a_0}, \quad \tau = k_1 a_0^2, \quad y = \sqrt{\frac{k_1 a_0^2}{D_A}} x$$

junto con:

$$\tau_r = k_1 a_0^2 t_r, \quad \kappa_2 = \frac{k_2}{k_1 a_0^2}, \quad d = \frac{D_B}{D_A}$$

lo que nos lleva a expresar el sistema (3.2) de la siguiente forma

$$\alpha_\tau = \alpha_{yy} + \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 \quad (3.3a)$$

$$\beta_\tau = d\beta_{yy} + \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta \quad (3.3b)$$

donde el subíndice τ representa la derivada parcial respecto al tiempo adimensional, y el subíndice yy representa la segunda derivada parcial respecto a la posición adimensionalizada.

Ahora bien, como estamos buscando estudiar las soluciones estacionarias invariantes del tiempo, realizaremos un segundo cambio de variable. Esto con el fin de plantear un sistema, invariante en el tiempo. Así, el cambio de variable será el siguiente:

$$u(\tilde{x}) = \alpha(y, \tau), \quad v(\tilde{x}) = \frac{1}{\kappa_2} \beta(y, \tau), \quad \tilde{x} = \kappa_2 y \quad (3.4)$$

junto con:

$$\lambda = \frac{1}{\tau_r \kappa_2^2}, \quad \gamma = d\kappa_2$$

donde λ representa la comparación entre la velocidad de entrada al reactor del químico A y de reacción entre A y B, con respecto a la velocidad de decaimiento de B. En tanto, γ representa el cociente de las velocidades con la cual cada químico se difunde y reacciona. De este modo, quitando las tildes, el modelo a estudiar en este capítulo, invariante en el tiempo y adimensionalizado de (3.2) es el siguiente

$$u'' = uv^2 - \lambda(1 - u) \quad (3.5a)$$

$$\gamma v'' = v - uv^2 \quad (3.5b)$$

donde u'' y v'' representan las derivadas de segundo orden de u y v (definidas en (3.4)) respecto a \tilde{x} .

3.3. Análisis de Puntos Fijos

Para poder determinar los puntos fijos del sistema (3.5), determinemos los puntos nulos de cada ecuación. Sea $\mathbf{K} = \{(u, v) : u'' = 0\}$ y $\mathbf{L} = \{(u, v) : v'' = 0\}$. Por tanto, busquemos los puntos (u, v) tales que $\mathbf{K} \cap \mathbf{L} \neq \emptyset$.

Es fácil observar que $\mathbf{K} \cap \mathbf{L} \neq \emptyset$ pues $(u, v) = (1, 0)$ está en $\mathbf{K} \cap \mathbf{L}$. Ahora bien, si $\lambda \geq 4$, entonces hay más elementos en $\mathbf{K} \cap \mathbf{L}$. La figura 3.1 ejemplifica este hecho.

La expresión de los elementos de $\mathbf{K} \cap \mathbf{L}$ es la siguiente:

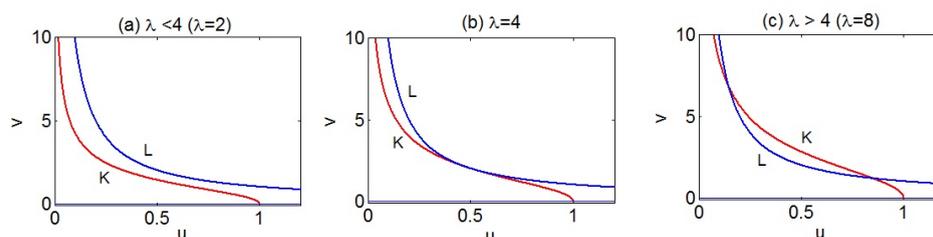


FIGURA 3.1: (a) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 2$ (b) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 4$ (c) Gráfica de \mathbf{K} y \mathbf{L} con $\lambda = 8$

- $P_1 = (1, 0)$.
- $P_2 = \left(\frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4\lambda}}{2\lambda}, \frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4\lambda}}{2} \right)$
- $P_3 = \left(\frac{\lambda - \sqrt{\lambda^2 - 4\lambda}}{2\lambda}, \frac{\lambda + \sqrt{\lambda^2 - 4\lambda}}{2} \right)$

3.4. Soluciones estacionarias del sistema (3.5)

Una vez determinados los puntos fijos del sistema, procedamos a buscar las órbitas estacionarias que posee el sistema. Para ello, mencionemos las características que estamos buscando en nuestras órbitas.

Órbitas Homoclínicas	Órbitas Heteroclínicas
$u(-x) = u(x)$	$\tilde{u}(-x) = -\tilde{u}(x)$
$v(-x) = v(x)$	$\tilde{v}(-x) = -\tilde{v}(x)$

donde $\tilde{u}(x) = u(x) - u(0)$ y $\tilde{v}(x) = v(x) - v(0)$. Así mismo, por las condiciones anteriores en las órbitas homoclínicas, tenemos que $u'(0) = 0$ y $v'(0) = 0$.

3.4.1. Cálculo analítico de las órbitas homoclínicas y heteroclínicas

Para determinar explícitamente estas órbitas, definamos la función auxiliar

$$p(x) := u(x) - 1 + \gamma v(x) \quad (3.6)$$

Cuando se buscan las órbitas homoclínicas, tenemos que la función (3.6) cumple el siguiente PVI

$$\begin{aligned} p'' - \lambda p &= (1 - \lambda\gamma)v & (3.7) \\ p(0) &= u(0) - 1 + \gamma v(0) \\ p'(0) &= 0 \end{aligned}$$

Es evidente que, si consideramos que

$$\lambda\gamma = 1, \quad (3.8)$$

el PVI reduce su dificultad. En términos químicos, el parámetro $1 - \lambda\gamma$ representa la relación que hay entre la difusión de cada uno de los químicos del sistema, con respecto a su flujo de entrada o salida. Esto es,

$$1 - \lambda\gamma = \frac{\frac{D_A}{k_r} - \frac{D_B}{k_2}}{\frac{D_A}{k_r}}. \quad (3.9)$$

La fracción $\frac{D_A}{k_r}$ nos determina que tan rápido se difunde A por el reactor en función a la velocidad con la cual es introducido al sistema (para facilitarlos términos, usaremos $k_r = \frac{1}{t_r}$) y la fracción $\frac{D_B}{k_2}$ nos determina que tan rápido se difunde B por el reactor en función a la velocidad con la cual éste decae. Así, se tiene la relación (3.8), significa que se los químicos A y B reaccionan de manera similar en difusión.

Regresando al PVI (3.7), si se cumple la relación (3.8), tenemos el siguiente PVI:

$$\begin{aligned} p'' - \lambda p &= 0 & (3.10) \\ p(0) &= u(0) - 1 + \gamma v(0) \\ p'(0) &= 0 \end{aligned}$$

el cual, tiene por solución $p(x) = Ce^{\sqrt{\lambda}x} + Ce^{-\sqrt{\lambda}x}$, con $2C = p(0)$. Así, $p(x) = p(0) \cosh(\sqrt{\lambda}x)$. De aquí se tiene que la siguiente observación

Observación 3.1. *Notese que si $p(0) \neq 0$ entonces*

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} p(x) = \infty.$$

Pero esto no puede suceder, ya que los puntos P_1 , P_2 y P_3 (que son los valores a donde se anclarán las órbitas homoclínicas y heteroclínicas) tienen entradas finitas para cada pareja (λ, γ) que cumple (3.8). Así, $p(0) = 0$ y en tanto, $p(x) = 0 \forall x \in \mathbb{R}$.

De la observación 3.1 se tiene que

$$u(x) = 1 - \gamma v(x) \quad \forall x \geq 0. \quad (3.11)$$

Esta expresión de $u(x)$ en términos de $v(x)$, nos brinda la oportunidad de escribir (3.5b) como una ecuación diferencial de segundo orden de $v(x)$:

$$\gamma v'' = v(1 - v + \gamma v^2). \quad (3.12)$$

Esta ecuación diferencial tiene integral primera. Por tanto, al multiplicar ambos lados por v' e integrar, obtenemos lo siguiente:

$$\frac{\gamma}{2}(v') - F(v) = \mu \quad (3.13)$$

donde μ es constante y $F(v) = \frac{v^2}{2} \left(1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2\right)$. Llamemos

$$\varepsilon(v, v') := \frac{\gamma}{2}(v') - F(v).$$

Es natural observar que, la ecuación diferencial

$$\varepsilon(v, v') = \mu \quad (3.14)$$

tiene soluciones, en función de γ y de μ . Busquemos obtener los valores de μ para los cuales, la solución obtenida en (3.14) sean órbitas homoclínicas y heteroclínicas. Para ello, notemos que $F(v)$ tiene ceros en $v = 0$ y $v_{\pm} = \frac{2}{3\gamma} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{9}{2}\gamma}\right)$. Así, que esto nos implica que tenemos 3 casos por estudiar:

- $0 < \gamma < \frac{2}{9}$
- $\gamma = \frac{2}{9}$
- $\frac{2}{9} < \gamma < \frac{1}{4}$

3.4.1.1. Caso $0 < \gamma < \frac{2}{9}$

Comenzemos analizando los puntos críticos de $G_{\mu}(v) := F(v) + \mu$. Estos puntos críticos son

- $c_1 = 0$
- $c_2 = \frac{1 - \sqrt{1 - 4\gamma}}{2\gamma}$
- $c_3 = \frac{1 + \sqrt{1 - 4\gamma}}{2\gamma}$

Ya que $\gamma < \frac{2}{9}$, se tiene que c_1 es mínimo relativo, c_2 es máximo relativo y c_3 es mínimo global. Ahora bien, llamemos $M_1 = G_0(c_1)$, $M_2 = G_0(c_2)$ y $M_3 = G_0(c_3)$. Es fácil notar que $M_1 = 0$, $M_2 > 0$ y $M_3 < 0$. Entonces, el número de ceros de $G_\mu(v)$ depende del valor de μ . El siguiente lema nos especifica esto.

Lema 3.2. *El número de ceros de $G_\mu(v)$ es*

- 0 si $\mu > -M_3$
- 1 si $\mu = -M_3$
- 2 si $\mu \in (0, -M_3)$ ó $\mu < -M_2$
- 3 si $\mu = 0$ ó $\mu = -M_2$
- 4 si $\mu \in (-M_2, 0)$.

Cuando graficamos las curvas de nivel de (3.14) en el plano $v - v'$, se puede observar lo siguiente:

- Para $\mu = 0$, la curva de nivel refleja una órbita cerrada que pasa por $(0, 0)$.
- Para $\mu \in (-M_2, 0)$, la curva de nivel presenta órbitas periódicas cuyo centro aparente es $(c_2, 0)$.

La figura 3.2(a) muestra la gráfica de $G(v)_\mu$ cuando $\mu = 0$. Aquí, se observa que $v = 0$ es raíz doble de $G(v)_\mu$ con $\mu = 0$. En tanto, la figura ??(b) muestra la gráfica de la función $G(v)_\mu$ con $\mu \in (-M_2, 0)$. En ella, se observa que $v = 0$ es un mínimo relativo. Las figuras 3.2(c) y 3.2(d) muestran las gráficas de las curva de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$ para el caso $\mu = 0$ y para el caso $\mu \in (-M_2, 0)$, respectivamente.

Ahora bien, cuando graficamos todas las curvas de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$ (ver figura 3.3(a)), se observa que alrededor de $F = (c_2, 0)$ hay órbitas cerradas y que éstas están dentro de la curva de nivel que contiene al $(0, 0)$. Además, en la figura 3.3(b) se observa que el punto $(c_2, 0, \varepsilon(c_2, 0))$ es un mínimo relativo de $\varepsilon(v, v') = \mu$. Aplicando el teorema 6.5.1 de [10] se concluye que éste punto tiene órbitas cerradas alrededor de él.

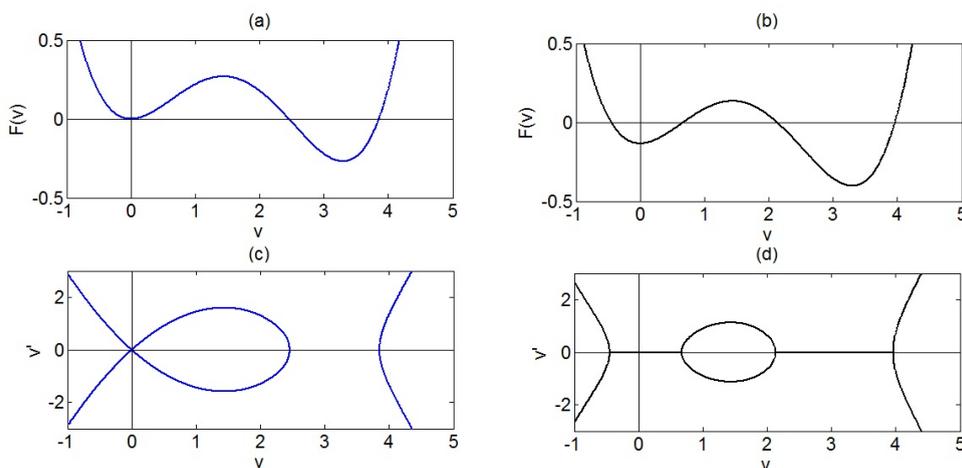


FIGURA 3.2: (a) Gráfica de $G_\mu(v)$ con $\mu = 0$. (b) Gráfica de $G_\mu(v)$ con $\mu \in (-M_2, 0)$ (c) Gráfica de la curva de nivel de (a) en el plano $v - v'$. (d) Gráfica de la curva de nivel en el plano $v - v'$.

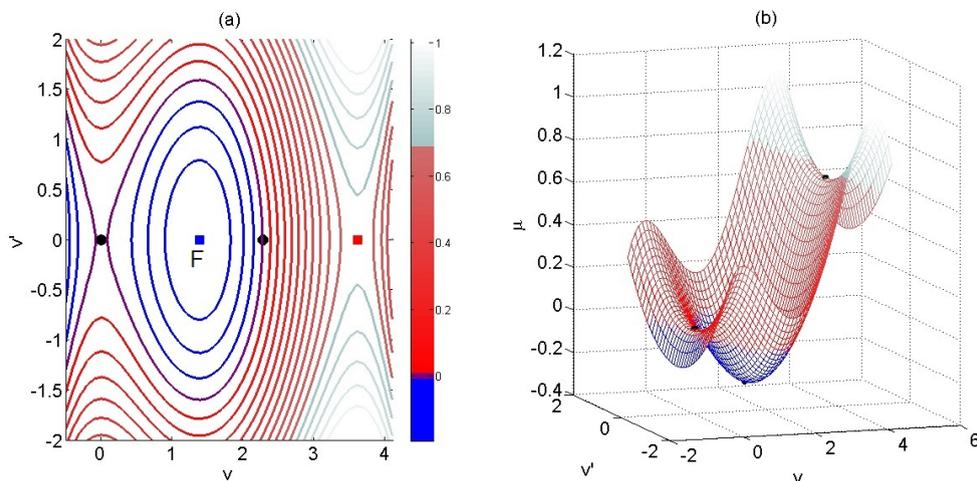


FIGURA 3.3: (a) Curvas de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$. (b) Gráfica de $\varepsilon(v, v') = \mu$.

Éstos sucesos se pueden probar realizando el siguiente cambio de variable: $w = v'$, y convirtiendo (3.12) en el siguiente sistema diferencial (3.15).

$$v' = w \tag{3.15a}$$

$$\gamma w' = v(1 - v + \gamma v^2) \tag{3.15b}$$

Este sistema tiene por puntos fijos a $P_1 = (c_1, 0)$, $P_2 = (c_2, 0)$ y $P_3 = (c_3, 0)$. Además, la linealización alrededor de P_2 indica que es un centro. Luego, es evidente que

$$(v_{\pm}, 0) \in \{(v, v') : \varepsilon(v, v') = 0\}.$$

Por tanto, si consideramos a (3.15) como un PVI con condiciones iniciales $(v(0), w(0)) = (v_-, 0)$, entonces la solución a éste PVI será la órbita homoclínica anclada al origen, ya que cualquier pareja (v, w) de ésta solución cumple que $\{(v, w) : \varepsilon(v, w) = 0\}$.

Por último, dada la condición (3.11), la órbita homoclínica se suscita en el sistema (3.5). Para concluir, éstos hallazgos se resumen en la siguiente proposición:

Proposición 3.3. *Sea $\gamma \in (0, \frac{2}{9})$ y $\lambda\gamma = 1$. Sean $u(x)$ y $v(x)$ soluciones al PVI (3.5a), (3.5b) sujeto a las condiciones iniciales siguientes:*

$$\begin{aligned} u(0) &= \frac{1}{3} + \frac{2}{3}\sqrt{1 - \frac{9\gamma}{2}} \\ v(0) &= \frac{2}{3\gamma} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{9\gamma}{2}}\right) \\ u'(0) &= 0 \\ v'(0) &= 0. \end{aligned}$$

Entonces, la expresión algebraica de $u(x)$ y $v(x)$ es la siguiente:

$$\begin{aligned} u(x) &= 1 - \frac{3\gamma}{1 + Q \cosh\left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}}\right)} \\ v(x) &= \frac{3}{1 + Q \cosh\left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}}\right)} \end{aligned}$$

con $Q = \sqrt{1 - \frac{9\gamma}{2}}$. Además, $u(x)$ y $v(x)$ tienen las siguientes propiedades:

1. $u(-x) = u(x)$, $v(-x) = v(x)$, $u(x) = 1 - \gamma v(x)$ para $x \in \mathbb{R}$
2. $u'(x) > 0$ y $v'(x) < 0$ para toda $x > 0$
3. $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} (u(x), u'(x), v(x), v'(x)) = (1, 0, 0, 0)$

3.4.1.2. Caso $\frac{2}{9} < \gamma < \frac{1}{4}$

Este caso tiene muchas similitudes al caso anterior. Se puede llegar a decir que es un reflejo del caso anterior. Es fácil notar que, para $G_\mu(v)$, c_1 es mínimo global, c_2 es máximo relativo y c_3 es mínimo relativo. Por tanto, la intuición indica que la órbita homoclínica estará con c_3 . ¿Cómo se asegura esto? Veamos adelante.

Escogamos μ de forma que $G_\mu(v)$ tenga exactamente 3 ceros. Es evidente que c_3 será el más grande de ellos. Y dado que $\varepsilon(v_+, 0) = \frac{1}{12}v_+^2(v_+ - 3)$, definamos el conjunto

$$L = \{(v, v') : \varepsilon(v, v') = \frac{v_+^2}{12}(v_+ - 3)\}.$$

Dado que P_2 es un centro en el sistema (3.15), alrededor de él existen órbitas periódicas. Cabe decir que, de igual forma que en el caso $0 < \gamma < \frac{2}{9}$, usando el teorema 6.5.1 de [10] se confirma este hecho, ya que $(c_2, 0, \varepsilon(c_2, 0))$ es un punto mínimo. La figura 3.4 muestra este hecho gráficamente.

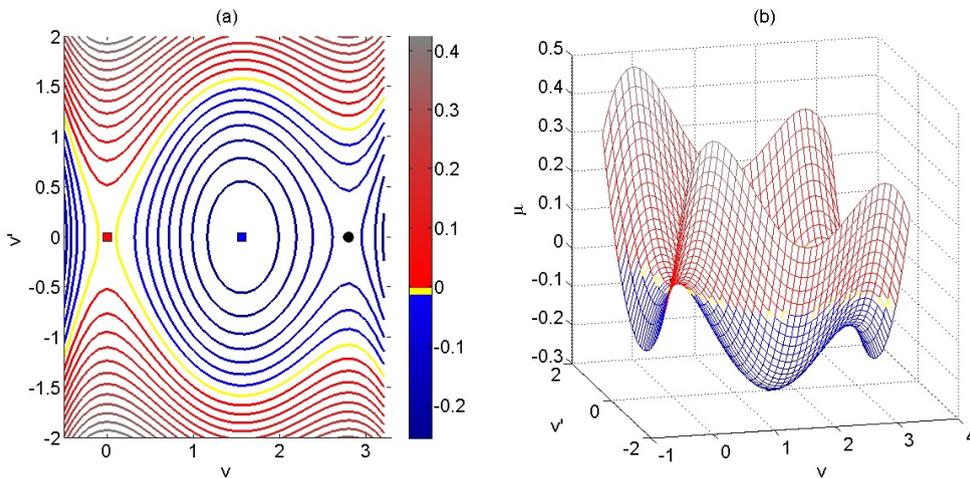


FIGURA 3.4: (a) Curvas de nivel de $\varepsilon(v, v') = \mu$. (b) Gráfica de $\varepsilon(v, v') = \mu$.

Como en algún momento las órbitas cerradas alrededor de P_2 desaparecerán, entonces se suscitará una órbita homoclínica. Ahora bien, como $\frac{1}{4} > \gamma > \frac{2}{9}$, entonces $v_+ < 3$ y por tanto, $\varepsilon(v_+, 0) < 0$. De esta manera, L es una curva cerrada dentro de la banda $\mathbf{S} = \{(v, v') : 0 < v < v_+\}$, simétrica respecto al eje v . Esta curva L engloba todas las órbitas periódicas que oscilan alrededor de P_2 en el plano $v - v'$.

El hecho de que L es simétrica, respecto al eje v , exhibe que esta curva es una órbita homoclínica, alrededor de $P_3 = (c_3, 0)$. Y en resumen, tenemos el siguiente teorema

Proposición 3.4. *Sea $\gamma \in (\frac{2}{9}, \frac{1}{4})$ y $\lambda\gamma = 1$. Sean $u(x)$ y $v(x)$ soluciones al PVI (3.5a), (3.5b) sujeto a las condiciones iniciales siguientes:*

$$\begin{aligned} u(0) &= \frac{1 + 8\omega + 3\omega^2 + (1 - \omega)\sqrt{1 - 3\omega}}{2(1 + 3\omega + \sqrt{1 - 3\omega})}, \\ v(0) &= \frac{2\sqrt{1 - 3\omega}(1 + \sqrt{1 - 3\omega})}{(1 - \omega)[1 + 3\omega + \sqrt{1 - 3\omega}]}, \\ u'(0) &= 0, \\ v'(0) &= 0, \end{aligned}$$

donde $\omega = \sqrt{1 - 4\gamma}$. Entonces, la expresión algebraica de $u(x)$ y $v(x)$ es la siguiente:

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1 - \omega}{2} + \frac{p\gamma}{1 + q \cosh(rx)} \\ v(x) &= \frac{1 + \omega}{2\gamma} - \frac{p}{1 + q \cosh(rx)} \end{aligned}$$

con $p = \frac{3\omega(1+\omega)}{\gamma(1+3\omega)}$, $q = \frac{\sqrt{1-3\omega}}{1+3\omega}$ y $r = \frac{\sqrt{\omega(1+\omega)}}{\gamma\sqrt{2}}$. Además, $u(x)$ y $v(x)$ tienen las siguientes propiedades:

1. $u(-x) = u(x)$, $v(-x) = v(x)$, $u(x) = 1 - \gamma v(x)$ para $x \in \mathbb{R}$
2. $u'(x) > 0$ y $v'(x) < 0$ para toda $x > 0$
3. $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} (u(x), u'(x), v(x), v'(x)) = (\bar{u}, 0, \bar{v}, 0)$

donde

$$\bar{u} = \frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\gamma} \right) \quad y \quad \bar{v} = \frac{1}{2\gamma} \left(1 + \sqrt{1 - 4\gamma} \right) \quad (3.16)$$

3.4.1.3. Caso $\gamma = \frac{2}{9}$

Para este caso, el análisis de las curvas de nivel de (3.13) nos muestra que, se exhibe una órbita heteroclínica, entre $(0, 0)$ y $(3, 0)$. Esto se debe a que, $G_0(v)$ tiene 2 ceros: $C_1 = 0$ y $C_2 = 3$. Además, el número de ceros de $G_\mu(v)$ esta determinado por el siguiente lema

Lema 3.5. *El número de ceros de $G_\mu(v)$ es*

- 0 si $\mu > 0$
- 2 si $\mu = 0$ o $\mu > M_2$
- 3 si $\mu = M_2$
- 4 si $\mu \in (0, M_2)$

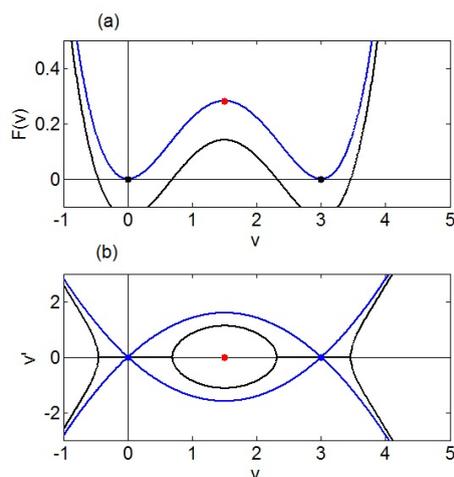


FIGURA 3.5: (a) Gráfica de $G_0(v)$ y $G_\mu(v)$ con $\mu \in (0, M_2)$ (b) Gráfica de las curvas de nivel de (a) en el plano $v - v'$.

Las curvas de nivel para algunos casos se exhiben en la figura 3.5. Sea $L_1 = \{(v, v') : \varepsilon(v, v') = \varepsilon(0, 0)\}$ y $L_2 = \{(v, v') : \varepsilon(v, v') = \varepsilon(3, 0)\}$. Como $\varepsilon(0, 0) = 0$ y $\varepsilon(3, 0) = 0$, se concluye que $L_1 = L_2$. Por tanto, como $(0, 0)$ y $(3, 0)$ son puntos sillan en el sistema (3.15), tenemos que la variedad estable de $(0, 0)$ se conecta con la variedad inestable de $(3, 0)$ y viceversa. Éstas conexiones se dan en los puntos $(\frac{3}{2}, \pm \frac{9}{8}\sqrt{2})$. De esta forma, obtenemos una órbita heteroclínica. En la figura 3.5 (a), la curva en azul muestra $G_0(v)$ y en 3.5 (b), la curva azul representa L_1 .

En resumen, se tiene la siguiente proposición

Proposición 3.6. *Sea $\gamma = \frac{2}{9}$ y $\lambda\gamma = 1$. Sean $u(x)$ y $v(x)$ soluciones al PVI (3.5a), (3.5b) sujeto a las condiciones iniciales siguientes:*

$$\begin{aligned} u(0) &= \frac{2}{3}, \\ v(0) &= \frac{3}{2}, \\ u'(0) &= -\frac{\sqrt{2}}{4}, \\ v'(0) &= \frac{9\sqrt{2}}{8}. \end{aligned}$$

Entonces, la expresión algebraica de $u(x)$ y $v(x)$ es la siguiente:

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{1}{3} \left[2 - \tanh \left(\frac{3x}{2\sqrt{2}} \right) \right] \\ v(x) &= \frac{3}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{3x}{2\sqrt{2}} \right) \right] \end{aligned}$$

Además, $u(x)$ y $v(x)$ tienen las siguientes propiedades:

- $\lim_{x \rightarrow -\infty} (u(x), v(x)) = (1, 0)$
- $\lim_{x \rightarrow \infty} (u(x), v(x)) = \left(\frac{1}{3}, 3\right)$

Observación 3.7. *Es importante notar que, aunque las funciones $u(x)$ y $v(x)$ obtenidas en la proposición 3.6 no cumplen que $u'(0) = 0$ y $v'(0) = 0$. Sin embargo, cumplen la relación $p'(0) = u'(0) + \frac{2}{9}v'(0) = 0$. Por tanto, la órbita heteroclínica hallada cumple con el PVI (3.10).*

3.5. Propiedades de las órbitas

Las familias de órbitas homoclínicas, halladas como solución a los Teoremas 3.3 y 3.4, tienen ciertas propiedades muy interesantes, cuando consideramos comportamientos al límite en 4 escenarios: cuando γ tiende a 0, cuando γ tiende crecientemente a $\frac{2}{9}$, cuando

γ tiende decrecientemente a $\frac{2}{9}$ y cuando γ tiende crecientemente a $\frac{1}{4}$. En el primer caso, tenemos que la órbita homoclínica se encoge a una singularidad, en el segundo y tercer límite, las órbitas homoclínicas se expanden a un frente, mientras que en el último de ellos, la órbita homoclínica tiende a un valor constante. A continuación, enunciaremos y demostraremos los comportamientos límite.

Proposición 3.8. *Sea $\{(u(x, \gamma), v(x, \gamma)) : 0 < \gamma < \frac{2}{9}, \lambda\gamma = 1\}$ la familia de órbitas homoclínicas obtenidas en la proposición 3.3. Entonces*

1. $\lim_{y \rightarrow 0^+} u(t\sqrt{\gamma}, \gamma) = 1$ y $\lim_{y \rightarrow 0^+} v(t\sqrt{\gamma}, \gamma) = \frac{3}{1+\cosh(t)}$ de forma uniformemente con respecto a $t \in \mathbb{R}$.
2. $\lim_{y \rightarrow 0^+} u(x, \gamma) = 1$ y $\lim_{y \rightarrow 0^+} v(x, \gamma) = 0$ para cualquier $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

Demostración. Para probar 1) y 2), haremos uso de la relación (3.11), ya que al probar la convergencia para $v(x, \gamma)$, se tendrá por continuidad la convergencia de $u(x, \gamma)$. Por la relación (3.11) dice que

$$u = 1 - \gamma v.$$

Sea $W(t) := \frac{3}{1+\cosh(t)}$, $t \in \mathbb{R}$. Es claro que $W(t)$ satisface el siguiente P.V.I.,

$$\begin{aligned} W'' &= W(1 - W) \\ W(0) &= \frac{3}{2} \\ W'(0) &= 0 \end{aligned}$$

Por otro lado, reescalemos la variable x mediante la variable t definida por

$$t = \frac{x}{\sqrt{\gamma}}.$$

Dado este cambio de variable, tenemos que

$$\begin{aligned} v(x, \gamma) &= \frac{3}{1 + Q \cosh\left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}}\right)} \\ &= \frac{3}{1 + Q \cosh(t)}. \end{aligned}$$

Entonces, definimos

$$\tilde{v}(t, \gamma) := \frac{3}{1 + Q \cosh(t)}.$$

Es fácil notar que $\tilde{v}(t, \gamma)$ cumple el siguiente P.V.I.,

$$\begin{aligned}\tilde{v}'' &= \tilde{v}(1 - \tilde{v} + \gamma \tilde{v}^2) \\ \tilde{v}(0, \gamma) &= v(0, \gamma) \\ \tilde{v}'(0, \gamma) &= 0\end{aligned}$$

Ahora, pasaremos a probar que $\tilde{v}(t, \gamma) \rightarrow W(t)$ cuando $\gamma \rightarrow 0$ de forma uniforme en espacios compactos.

- Probar que $\tilde{v}(t, \gamma) \rightarrow W(t)$ cuando $\gamma \rightarrow 0$.

Sea $t_0 > 0$ fijo. Así,

$$\begin{aligned}|\tilde{v}(t_0, \gamma) - W(t_0)| &= \left| \frac{3}{1 + Q \cosh(t_0)} - \frac{3}{1 + \cosh(t_0)} \right| \\ &= \frac{3 \cosh(t_0)}{1 + \cosh(t_0)} \left| \frac{1 - Q}{1 + Q \cosh(t_0)} \right|\end{aligned}$$

Definamos la función auxiliar $A(\gamma)$ como

$$A(\gamma) = \frac{1 - Q(\gamma)}{1 + Q(\gamma) \cosh(t_0)}.$$

Cuando $\gamma \rightarrow 0$, tenemos que $Q(\gamma) \rightarrow 1$. Así, $1 - Q(\gamma) \rightarrow 0$ y $1 + Q(\gamma) \cosh(t) \rightarrow 1 + \cosh(t)$. Por tanto,

$$\begin{aligned}\lim_{\gamma \rightarrow 0} A(\gamma) &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1 - Q(\gamma)}{1 + Q(\gamma) \cosh(t_0)} \\ &= \frac{1 - \lim_{\gamma \rightarrow 0} Q(\gamma)}{1 + \cosh(t_0) \lim_{\gamma \rightarrow 0} Q(\gamma)} \\ &= \frac{1 - 1}{1 + \cosh(t)} \\ &= 0.\end{aligned}$$

Por tanto, tenemos que $A(\gamma) \rightarrow 0$ cuando $\gamma \rightarrow 0$. Así,

$$\begin{aligned} \lim_{\gamma \rightarrow 0} |\tilde{v}(t_0, \gamma) - W(t_0)| &= \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{3 \cosh(t_0)}{1 + \cosh(t_0)} |A(\gamma)| \\ &= \frac{3 \cosh(t_0)}{1 + \cosh(t_0)} \left[\lim_{\gamma \rightarrow 0} |A(\gamma)| \right] \\ &= \frac{3 \cosh(t_0)}{1 + \cosh(t_0)} [0] \\ &= 0. \end{aligned}$$

Así, $\tilde{v}(t, \gamma) \rightarrow W(t)$ cuando $\gamma \rightarrow 0$, con t fijo.

- Probar que la convergencia es uniforme, es decir, no depende de la elección de t .

Sea $\{\gamma_n\}_{n=1}^{\infty} \subset (0, \frac{2}{9})$ una sucesión tal que $\gamma_n \rightarrow 0$. Definimos

$$\begin{aligned} f_n(t) &= \tilde{v}(t, \gamma_n) \\ f(t) &= W(t) \end{aligned}$$

Luego, ya que f_n es continua y f también es continua, tenemos que dado $\epsilon > 0$,

$$\begin{aligned} |f_n(t) - f(t)| &\leq |f_n(t) - f_n(t_0)| + |f_n(t_0) - f(t_0)| + |f(t_0) - f(t)| \\ &\leq \frac{\epsilon}{3} + \frac{\epsilon}{3} + \frac{\epsilon}{3} \\ &= \epsilon \end{aligned}$$

Así, concluimos la convergencia es uniforme.

Ahora, para probar 2), tomemos $x > 0$. El caso $x < 0$ será análogo. Como $\tilde{v}(t, \gamma) \rightarrow W(t)$, entonces, dado $\epsilon > 0$ existe $\gamma_1 > 0$ tal que si $\gamma \in (0, \gamma_1)$, se cumple que

$$|\tilde{v}(t, \gamma) - W(t)| < \frac{\epsilon}{2} \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Por otro lado, como $W(t) \rightarrow 0$ cuando $t \rightarrow \infty$, entonces existe $T > 0$ tal que

$$W(t) < \frac{\epsilon}{2} \quad \forall t \geq T.$$

Así, sea $\gamma_2 > 0$ tal que $t \geq T$ si $\gamma \in (0, \gamma_2)$. Entonces, si $\gamma \in (0, m)$ con $m = \min(\gamma_1, \gamma_2)$, se tiene que

$$\begin{aligned} v(x, \gamma) &\leq \left| \tilde{v} \left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}}, \gamma \right) - W \left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}} \right) \right| + W \left(\frac{x}{\sqrt{\gamma}} \right) \\ &\leq \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} \\ &\leq \epsilon. \end{aligned}$$

Por tanto, $v(x, \gamma) \rightarrow 0$ cuando $\gamma \rightarrow 0$ y $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. □

Proposición 3.9. *Sea $\{(u(x, \gamma), v(x, \gamma)) : 0 < \gamma < \frac{2}{9}, \lambda\gamma = 1\}$ la familia de órbitas homoclínicas obtenidas en la proposición 3.3, y sea $x(v, \gamma)$ la función inversa de $v(x, \gamma)$ sobre \mathbb{R}^- , tal que $x(\frac{3}{2}, \gamma) = 0$. Entonces para cada $v \in (0, 3)$, se tiene que*

$$\lim_{\gamma \rightarrow \frac{2}{9}^-} x(v, \gamma) = \frac{\sqrt{2}}{3} \log \left(\frac{v}{3-v} \right). \quad (3.17)$$

Demostración. Recordemos que

$$\frac{\gamma}{2}(v')^2 = \frac{1}{2}v^2 \left(1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2 \right). \quad (3.18)$$

Así, como el lado derecho de (3.18) es positivo $\forall v \in \mathbb{R}^-$, podemos despejar v' de (3.18), obteniendo la siguiente expresión:

$$v' = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \sqrt{1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2}$$

Despejando e integrando a ambos lados, con $x_0 = 0$ y $v_0 = \frac{3}{2}$, tenemos que

$$x(v, \gamma) = \sqrt{\gamma} \int_{\frac{3}{2}}^v \frac{ds}{s \sqrt{1 - \frac{2}{3}s + \frac{\gamma}{2}s^2}}$$

$$\begin{aligned}
 x(v, \gamma) &= \sqrt{\gamma} \int_{\frac{2}{3}}^v \frac{ds}{s \sqrt{1 - \frac{2}{3}s + \frac{\gamma}{2}s^2}} \\
 &= -\sqrt{\gamma} \log \left| \frac{2\sqrt{1 - \frac{2}{3}s + \frac{\gamma}{2}s^2} + 2}{s} - \frac{2}{3} \right|_{\frac{2}{3}}^v \\
 &= \log \left| \frac{(3\sqrt{2\gamma} + 2)v}{6 - 2v + 6\sqrt{1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2}} \right|
 \end{aligned}$$

Sea

$$\tilde{x}(v) = \log \left| \frac{v}{3 - v} \right|.$$

Basta probar que

$$\lim_{\gamma \rightarrow \frac{2}{9}} x(v, \gamma) = \tilde{x}(v).$$

Por la continuidad de $\log(v)$, tenemos que

$$\begin{aligned}
 \lim_{\gamma \rightarrow \frac{2}{9}} x(v, \gamma) &= \lim_{\gamma \rightarrow \frac{2}{9}} \log \left| \frac{(3\sqrt{2\gamma} + 2)v}{6 - 2v + 6\sqrt{1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2}} \right| \\
 &= \lim_{\gamma \rightarrow \frac{2}{9}} \log \left| (3\sqrt{2\gamma} + 2)v \right| - \log \left| 6 - 2v + 6\sqrt{1 - \frac{2}{3}v + \frac{\gamma}{2}v^2} \right| \\
 &= \log |4v| - \log |4(3 - v)| \\
 &= \log \left| \frac{v}{3 - v} \right| \\
 &= \tilde{x}(v)
 \end{aligned}$$

Por tanto, se cumple la convergencia. □

La tercer proposición, mostrada a continuación, se enfoca en estudiar el comportamiento límite, de las curvas que son presentadas como soluciones en la proposición 3.4. Las demostraciones son análogas a las presentadas anteriormente, por tanto, solo enunciaremos la proposición.

Proposición 3.10. *Sea $\{(u(x, \gamma), v(x, \gamma)) : \frac{2}{9} < \gamma < \frac{1}{4}, \lambda\gamma = 1\}$ la familia de órbitas homoclínicas obtenidas en la proposición 3.4. Entonces,*

1. Si $x(v, \gamma)$ es la función inversa de $v(x, \gamma)$ sobre \mathbb{R}^+ , escogida tal que $x(\frac{3}{2}, \gamma) = 0$, se tiene que para cada $v \in (0, 3)$,

$$\lim_{y \rightarrow \frac{2}{9}^+} x(v, \gamma) \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{3} \log \left(\frac{v}{3-v} \right), \quad (3.19)$$

2. $\lim_{y \rightarrow \frac{1}{4}^-} u(x, \gamma) = \frac{1}{2}$ y $\lim_{y \rightarrow \frac{1}{4}^-} v(x, \gamma) = 2$. Además, la convergencia es uniforme.

3.6. Conclusión

En este capítulo se presentó un estudio acerca de las soluciones estacionarias que presenta el sistema (3.2), cuando se cumple la relación (3.1). Se encontró la existencia de 3 órbitas estacionarias: 2 son homoclínicas y una es heteroclínica (ver figura 3.6). Cabe mencionar que estas soluciones estacionarias son ondas viajeras de velocidad $c = 0$.

Según el trabajo de Hale en [4], las órbitas homoclínicas son inestables y la órbita heteroclínica es asintóticamente estable. Este resultado, el cual por su contenido se sale de los alcances de este trabajo, termina por enriquecer la teoría aquí mostrada.

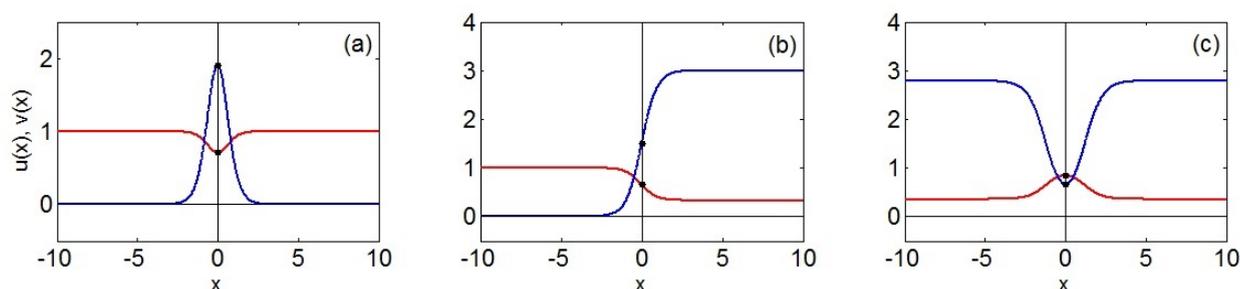


FIGURA 3.6: En rojo se exhibe la curva $u(x, \gamma)$ y en azul se exhibe la curva $v(x, \gamma)$. (a) Solución estacionaria homoclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = 0.15$. (b) Solución estacionaria heteroclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = \frac{2}{9}$. (c) Solución estacionaria homoclínica $u(x, \gamma)$ y $v(x, \gamma)$ cuando $\gamma = 0.23$.

Capítulo 4

Frentes de propagación en autocatálisis con decaimiento

4.1. Introducción

En el capítulo 2, se observó que el modelo de Gray-Scott con flujo de entrada (2.13) presenta el fenómeno de excitabilidad para los valores $\tau_r = 315$, $\kappa_2 = \frac{1}{40}$ y $\beta_0 = \frac{1}{15}$. Una pregunta que resulta natural hacerse es, ¿cuál será el resultado, al introducir difusión en el modelo autocatalítico con flujo de entrada, estudiado en el capítulo 2?

De ésta interrogante, surge el objetivo de este capítulo, el cual se enfoca en estudiar el modelo de Gray-Scott con flujo de entrada del catalizador B , bajo la hipótesis de heterogeneidad. Éste estudio se realizará mediante simulaciones numéricas bajo el esquema de diferencias finitas. Por conveniencia, usaremos el modelo adimensionalizado (2.14). Así, el modelo a utilizar será el siguiente:

$$\alpha_\tau = \delta \nabla^2 \alpha + \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha \beta^2, \quad (4.1a)$$

$$\beta_\tau = \nabla^2 \beta + \frac{\beta_0 - \beta}{\tau_r} + \alpha \beta^2 - \kappa_2 \beta, \quad (4.1b)$$

donde $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ representan las concentraciones de A y B , respectivamente, en el tiempo τ y la posición y . Así mismo, $\delta = \frac{D_A}{D_B}$ representa la razón entre los coeficientes de difusión D_A y D_B . Además, los parámetros κ_2 , τ_r y β_0 están definidas como en el capítulo 2.

Los casos donde pondremos énfasis para estudiar, serán cuando $\delta = 7$ y $\delta = 17$, es decir, casos donde $D_A \gg D_B$. Éstas soluciones ya han sido estudiados en [6]. Así, tan solo daremos una breve explicación acerca de por que suceden.

Las simulaciones numéricas se realizarán utilizando el esquema de diferencias finitas explícitas. Se considerará el espacio $[0, 1000] \times [0, 10000]$ y los tamaños de paso serán $dy = 3\bar{3}$ y $d\tau = 0.01$. Además, tomaremos condiciones de frontera de Neumann de cero-flujo:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad y \quad \frac{\partial \beta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (4.2)$$

donde \mathbf{n} es el vector normal a $\partial[0, 1000]$; y en cada caso de estudio, plantearemos la condición inicial a usar.

4.2. Caso de estudio 1

El primer caso de estudio consiste en observar el comportamiento de las soluciones del sistema (4.1) bajo el esquema de diferencias finitas ya mencionado, considerando $\delta = 7$ y la siguiente condición inicial:

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta_0(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \\ b_0 & \text{si } y > 100 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$. Estos valores de a_0 y b_0 son los valores aproximados del punto fijo E , analizado en la sección 2.4, con el cual se mostró que la parte reactiva de (4.1) presenta el fenómeno de excitabilidad.

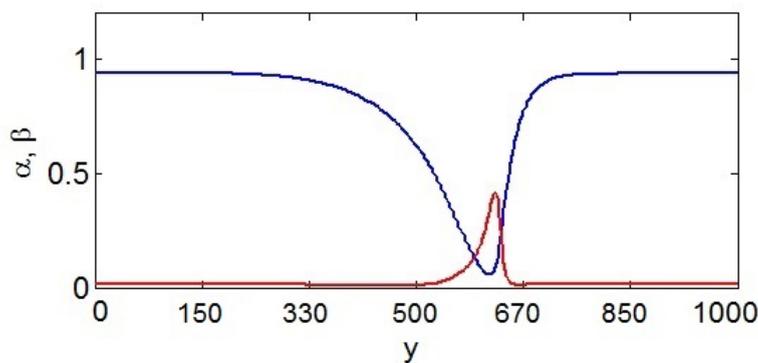


FIGURA 4.1: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados al tiempo $\tau = 7$.

4.2.1. Resultado de la simulación

Se observa que la condición inicial α_0 y β_0 evoluciona a los pulsos mostrados en la figura 4.1. Estos pulsos tienen un gradiente alto en la parte frontal de la onda y en la parte trasera de ésta, tienen un gradiente bajo. Ésto (los valores de los gradientes) se debe a la difusión que tiene el sistema (4.1) y, además, da la pauta para que las ondas se desplacen en la dirección donde se encuentra el gradiente mayor.

Otra propiedad que tienen los pulsos mostrados en la figura 4.1, es que ellos rebotan con los bordes $y = 0$ y $y = 1000$, alternando en cada rebote la ubicación del gradiente alto y del gradiente bajo en el pulso.

4.2.1.1. Descripción de los pulsos encontrados

El pulso $\alpha(y, \tau)$, mostrado en la figura 4.1 para un valor específico de $\tau = \tau^*$, que en el tiempo se desplaza de izquierda a derecha sobre el eje y preservando su forma, tiene la siguiente descripción: La variable α comienza en su parte derecha en un valor que asintóticamente se acerca a a_0 . Al movernos sobre la curva $\alpha(y, \tau^*)$ en la dirección y a la izquierda, notamos que el valor de alpha comienza a disminuir hasta alcanzar un mínimo a_m , el cual coincide con el valor mínimo que alcanza la variable α durante el fenómeno de excitabilidad mostrada en la figura 2.16 en la sección 2.4. Finalmente, al movernos aún más en la dirección hacia la izquierda, el valor de alpha aumenta para regresar al nivel

de a_0 .

El pulso $\beta(y, \tau)$, mostrado en la figura 4.1 para un valor específico de $\tau = \tau^*$, también se desplaza de izquierda a derecha sobre el eje y preservando su forma. Su descripción es la siguiente: La variable β comienza en su parte derecha en un valor asintóticamente cercano a b_0 . Al moverse sobre la curva $\beta(y, \tau^*)$ en la dirección y a la izquierda, se observa que el valor de β comienza a crecer hasta alcanzar un máximo b_M , el cual coincide con el valor máximo que alcanza la variable β durante el fenómeno de excitabilidad. Finalmente, al movernos aún mas hacia la izquierda, el valor de β disminuye para regresar al valor b_0 .

4.2.2. Explicación del resultado

4.2.2.1. Desplazamiento de los pulsos en la dirección del gradiente mayor

Como se mencionó en la sección anterior, la onda se propaga de izquierda a derecha a velocidad constante, mientras se encuentra alejada de la frontera. El perfil de los pulsos, se encuentra íntimamente ligado al proceso de reacción dado por la ecuación (2.14), como se describe en la figura 4.2. Para ello, tomemos los perfiles de $\alpha(y, \tau), \beta(y, \tau)$ en $\tau = 5$.

En la Figura 4.2(a), se muestran diferentes posiciones (indicadas con las letras, A, B, C, D y E). Para comprender como es la propagación del pulso, es necesario saber que cada una de las posiciones indicadas, son únicas en el sentido de que corresponden a diferentes tiempos que ocurre la reacción mostrada en la figura 4.2(b). Por ejemplo, en E, se puede observar que ambos valores de α y β son casi a_0 y b_0 , respectivamente¹, que corresponde al caso en que α y β están en el punto de equilibrio (Punto E en la figura 4.2(b)). En D se puede observar que β está cerca de b_0 , en tanto α ha comenzado a disminuir, con respecto a a_0 ; aquí decimos que D ya comenzó a recorrer la trayectoria de excitabilidad, donde el Punto D de la figura 4.2(b) lo representa.

En C, se observa que la variable β no se encuentra en su valor máximo, mientras que la

¹El valor de a_0 y b_0 se alcanzan cuando y tiende a infinito, sin embargo, como trabajamos en un dominio finito, solo podemos considerar que estamos muy cercanos a esos valores.

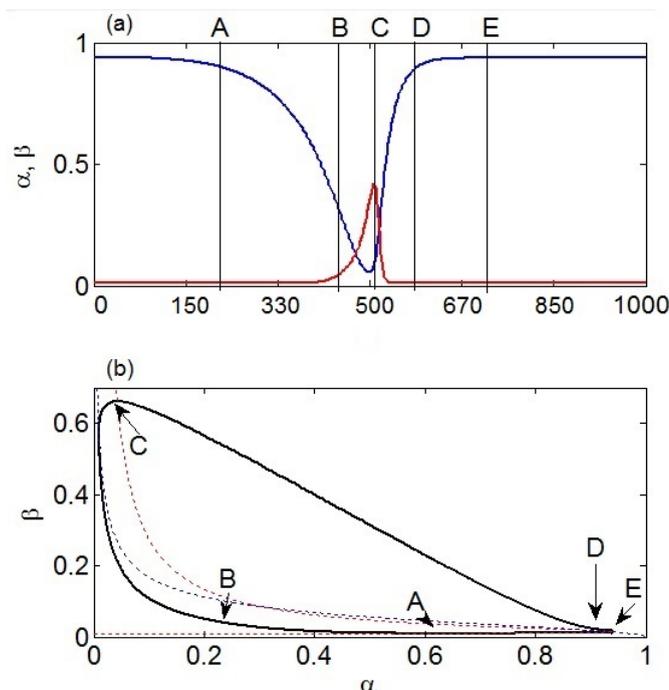


FIGURA 4.2: (a) Pulso propagándose de izquierda a derecha en un tiempo $\tau^* = 5$. Perfil de las variables $\alpha(y, \tau^*)$ y $\beta(y, \tau^*)$. (b) Dinámica del sistema sin difusión en el régimen excitable. En el sistema completo (de Reacción-Difusión) cada valor y en el espacio, experimenta el comportamiento mostrado en las dinámicas mostradas arriba.

variable α se encuentra en su valor mínimo. En este caso vemos que en dicho punto la reacción está experimentando lo que sucede en el punto C de la figura 4.2(b). Por tanto, se espera que la evolución de la variable β en C respecto al tiempo sea reducirse hasta llegar al valor de b_0 .

De la misma forma, se puede observar que, al pasar los perfiles por A en la figura 4.2(a), el valor de $\alpha(A, \tau)$ comienza a aumentar hasta llegar a a_0 . Esto se logra ya que, en la figura 4.2(b), el punto A está casi al final de la trayectoria de excitabilidad. Por tanto, como no hay una perturbación lo suficientemente grande como para mandarlo por encima del umbral (ya que en los alrededores de A en la figura 4.2(a), los valores de $\beta(y, \tau)$ son muy pequeños), se mantiene avanzando hacia el punto fijo E.

En el caso del punto B de la figura 4.2(b), se observa que al avanzar el tiempo, este punto va a pasar por la ubicación de A acercándose al equilibrio E. Por tanto, el valor de $\alpha(B, \tau)$ comienza a aumentar lentamente hasta a_0 . Así, determinamos que los pulsos avanzan en dirección al gradiente mayor; en este caso, de izquierda a derecha. La figura

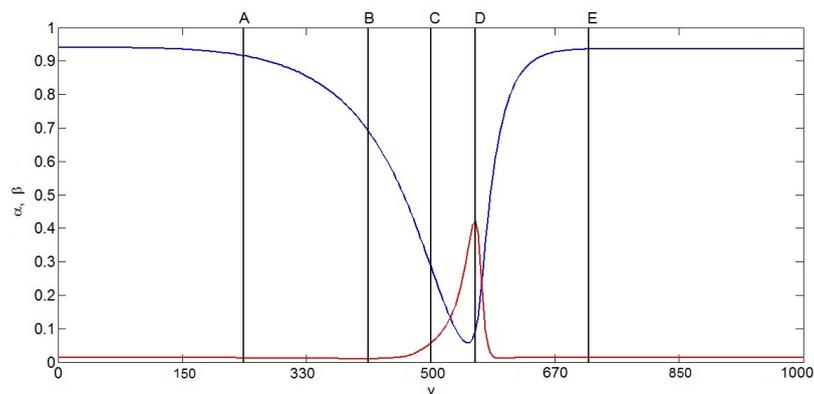


FIGURA 4.3: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados al tiempo $\tau = 6$.

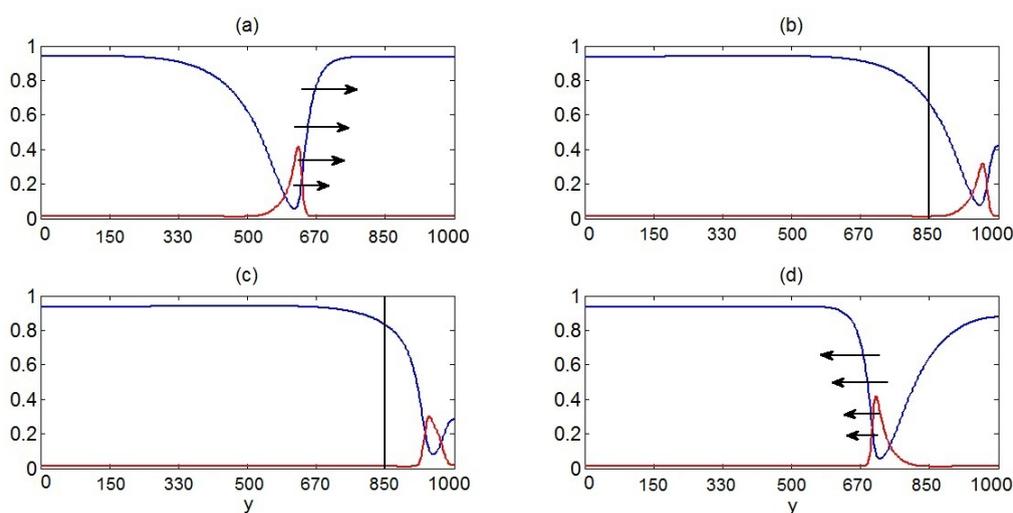


FIGURA 4.4: Perfiles de los pulsos $\alpha(y, \tau)$ en azul, y $\beta(y, \tau)$ en rojo. (a) Perfiles en $\tau = 7$. (b) Perfiles en $\tau = 13$. (c) Perfiles en $\tau = 15$. (d) Perfiles en $\tau = 18$.

4.3 nos muestra el avance de los pulsos, al tiempo $\tau = 6$.

4.2.2.2. Reflexión respecto a bordes

Para explicar el fenómeno de rebote respecto a los bordes $y = 0$ y $y = 1000$, vamos a recurrir a la figura 4.4. La figura 4.4(a) muestra los pulsos, que se propagan de izquierda a derecha. Estos perfiles, correspondientes a α en azul y β en rojo, muestran una curvatura aguda en la parte frontal de éstas y una curvatura suave en la parte posterior de éstas. Conforme las ondas se acercan al borde $y = 1000$, como se aprecia en la figura 4.4(b), la cantidad de reactante A en los alrededores de la parte frontal de la onda α no es consumida totalmente. Una parte de ella pasa a la parte posterior del pulso (debido a la

condición de cero flujo (4.2)), ocasionando que el gradiente de la parte posterior aumente.

Esto también se puede notar, comparar los escenarios 4.4(b) y 4.4(c) en $y = 850$. Como ya mencionamos, los pulsos se mueven en dirección de izquierda a derecha. Así, el valor de la concentración de α en 850 aumenta conforme avanza el tiempo. Así, comienza a acercarse a a_0 y esto provoca que, para valores mayores a 850, también aumente el valor de la concentración de α , ocasionando que el gradiente en esta parte del pulso sea más grande.

A su vez, esto implica que la concentración de α al frente de la parte frontal del pulso decrezca significativamente (sin llegar a 0), el máximo de β decrece también y la curvatura de α en la parte frontal se torna menos pronunciada. La velocidad de propagación tiende a decaer a la par que decaen la cantidad de reactante disponible y el grado de conversión.

Esto continúa de manera que, en algún momento, la velocidad de propagación llega a 0. Aquí, los perfiles son casi simétricos, con respecto a su máximo valor. Precisamente aquí, la curvatura de α al frente y en la parte posterior son muy similares. Esto mismo sucede para el perfil de β . Al avanzar el recorrido, los perfiles se vuelven más pronunciados en la parte posterior y más suaves en la parte frontal de ellos. Esto debido a la influencia de la cantidad de reactante A en la parte posterior de la onda, ver figura 4.4(c), lo que posibilita que aumente el grado de conversión.

Gracias a este cambio en la dinámica de los perfiles, se puede concluir que ahora, la onda viajará de derecha a izquierda. Es decir, la onda ha dado una reversa en su dirección de propagación. La figura 4.4(d) nos muestra la onda avanzando de derecha a izquierda. Se puede decir también, que en la parte frontal de la onda, la curvatura es más pronunciada y en la parte posterior es más suave. Una vez que la onda llegue al borde $y = 0$, la interacción que sostendrá, será idéntica a la tenida con el borde $y = 1000$, solo que en sentido contrario.

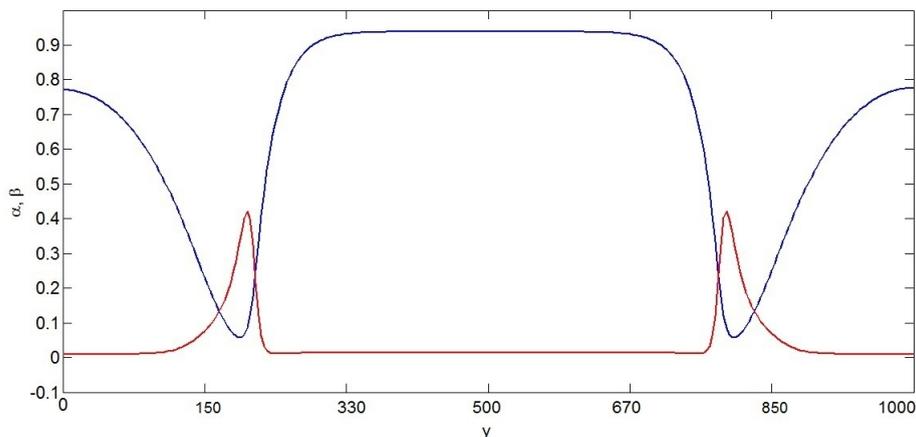


FIGURA 4.5: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 5$.

4.3. Caso de estudio 2

El segundo caso de estudio consiste en observar el comportamiento de las soluciones del sistema (4.1) bajo el esquema de diferencias finitas ya mencionado, considerando $\delta = 7$ y la siguiente condición inicial:

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \text{ o } y \geq 900 \\ b_0 & \text{si } 100 < y < 900 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$.

4.3.1. Resultado de la simulación

La evolución del sistema (4.1) al tiempo $\tau = 5$ se puede observar en la figura 4.5. Los resultados obtenidos, muestran que las perturbaciones realizadas generan 2 pulsos, los cuales viajan en direcciones opuestas. Conforme τ crece, los frentes llegan a encontrarse en $y = 500$, donde notamos que las ondas no se condensan en una sola, sino que se repelen una a la otra, motivando que cambien de dirección. Éste hallazgo nos indica que la recta $y = 500$ es un eje de simetría, el cual a su vez funciona como borde de reflexión para cada

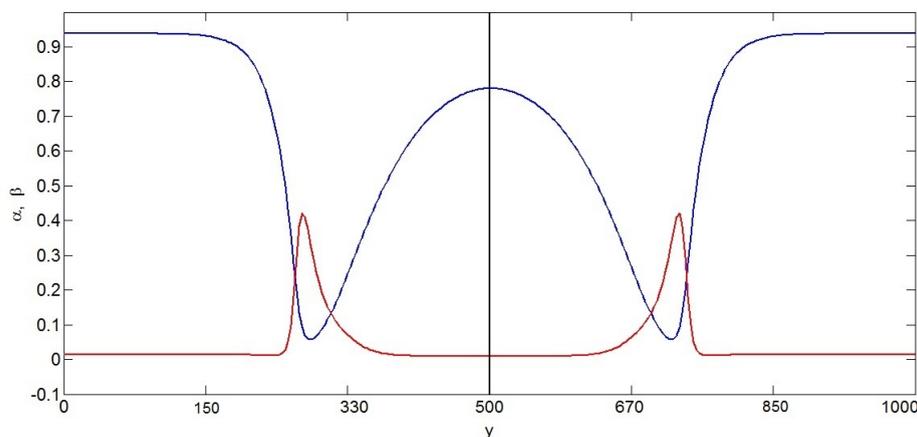


FIGURA 4.6: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. En negro se muestra la recta $y = 500$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 20$.

una de las ondas viajeras, además de los bordes en $y = 0$ y $y = 1000$. De aquí, obtenemos las siguientes conclusiones:

- La recta $y = 500$ tiene propiedades de cero-flujo, con respecto a ambas ondas viajeras.
- Cuando las perturbaciones realizadas en la condición inicial son iguales, entonces el eje de reflexión será el punto medio entre las perturbaciones.

La figura 4.6 muestra las ondas viajeras avanzando en dirección opuesta a como aparecen en la figura 4.5, después de haber chocado entre sí y rebotar.

4.3.2. Explicación del resultado

Conforme los pulsos se acercan a $y = 500$, por la difusión del reactante y su cambio dado por la reacción química, la cantidad de reactante activo que existe entre los pulsos disminuye más rápidamente que cuando solo existe un pulso. Además, por el flujo de entrada y la difusión del reactante, éste se acumula en la parte trasera de cada pulso.

Como el agotamiento que tiene el reactante en la parte frontal de los pulsos es mayor que el repuesto que éste tiene por el flujo de entrada, se observa la disminución de

reactante en $y = 500$. Está cambio en la cantidad de reactante en la parte frontal y en la parte trasera de los pulsos, da pie a que los gradientes también cambien, logrando así que la parte trasera adquiriera un gradiente más grande que el de la parte frontal.

Este cambio tiene como consecuencia el cambio en la dirección de desplazamiento de los pulsos.

4.3.3. Conclusión

La conclusión final de este caso, es la siguiente: *Cada una de las perturbaciones realizadas en la condición inicial, genera una onda onda viajera. Cada una de ellas no llega a recorrer todo el dominio en y . Más bien, al ser simétricas respecto a la recta $y = 500$, entonces el dominio de movimiento de cada una de las ondas es la mitad del dominio en y , es decir, la primer onda viajera se mueve entre $[0, 500]$ y la segunda onda viajera se mueve entre $[500, 1000]$. La primer ondas viajera rebota en $y = 0$ y en $y = 500$, mientras que la segunda rebota en $y = 500$ y $y = 1000$.*

4.4. Caso de estudio 3

El tercer caso de estudio será cuando $\delta = 17$, con las condiciones iniciales

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \\ b_0 & \text{si } y > 100 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$.

4.4.1. Resultado de la simulación

Las simulaciones numéricas muestran que la parte trasera de los pulsos se excitan, de forma que surge el nacimiento de otro pulso. El cambio en los perfiles se puede observar

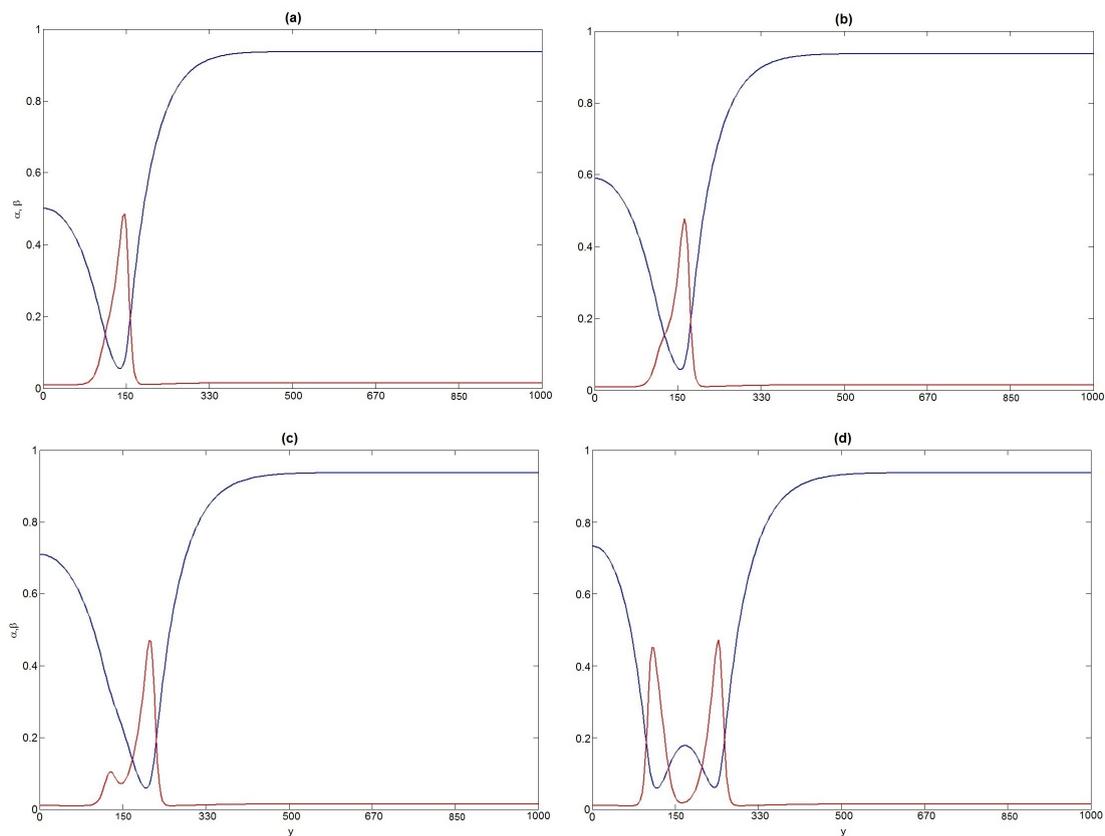


FIGURA 4.7: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. (a) Perfiles al tiempo $\tau = 5$ (b) Perfiles al tiempo $\tau = 7$ (c) Perfiles al tiempo $\tau = 10$ (d) Perfiles al tiempo $\tau = 15$.

en la figura 4.7.

Este proceso continua sucediendo hasta que se satura el sistema, tal como se puede apreciar en la figura 4.8.

4.4.2. Explicación del fenómeno

Como se puede observar en las gráficas 4.7 y 4.8 en comparación a los casos anteriores, es que ahora no sólo se tiene un efecto de reflexión con respecto a los bordes, sino además, sucede el fenómeno de **nacimiento de onda**. ¿A qué se debe esto? La alta difusividad que se tiene del reactante A respecto a la difusividad del compuesto catalítico B , en este caso, es la causante de este fenómeno.

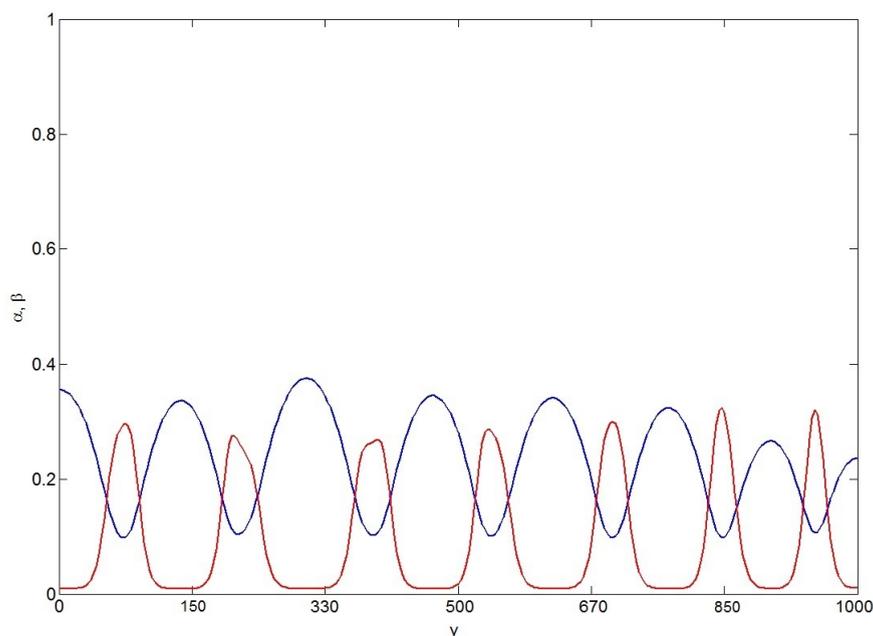


FIGURA 4.8: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Estos perfiles muestran el fenómeno de saturación de ondas.

Recordemos que en el caso cuando $\delta = 7$, cuando fijabamos un valor sobre el eje y y la onda pasaba a través de él, los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ parece que recorren la órbita de excitabilidad, terminando en el equilibrio estable. Ahora bien, el valor de δ en este caso de estudio es 17. Esto quiere decir que, conforme los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ se acercan al valor del equilibrio estable, la alta difusión provoca que los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ salten por encima del umbral de excitabilidad. Así, el punto vuelve a recorrer la trayectoria de excitabilidad y, por ende, se crea otra onda en la parte trasera de la onda que ya teníamos.

Apéndice A

Reacción-Difusión

A.1. Difusión

A.1.1. Idea intuitiva

La difusión de una sustancia consiste en el proceso de transporte mediante el cual las partículas tienden a moverse de lugares donde existe alta concentración a lugares donde existe baja concentración. Esto es posible observarlo en la figura A.1.

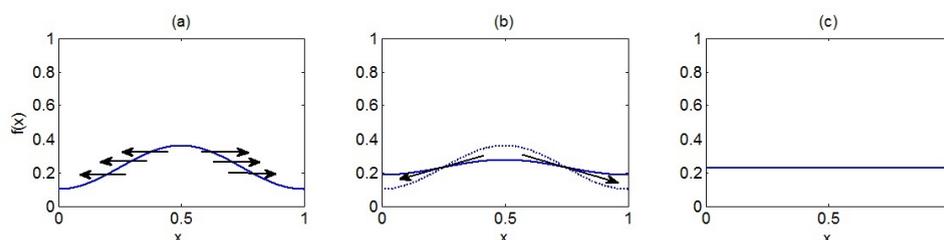


FIGURA A.1: Bosquejo de un proceso de difusión. El área debajo de cada una de las curvas en azul, es igual a una constante.

En A.1(a), se muestra una función tipo senoidal $f(x, t_0)$, que tiene bajo ella, un área A . Al aplicarle el proceso de difusión, las flechas indican las direcciones en las que se mueven las partículas. Conforme transcurre el tiempo, la función $f(x, t_k)$ comienza a verse más achatada, como se ve en A.1(b). Las flechas indican el lugar hacia donde se han desplazado las partículas, recordando que el proceso de difusión mantiene áreas constantes cuando

se tienen condiciones de flujo nulo.

Para un tiempo lo suficientemente largo, la función $f(x, t_N)$ ($t_N \gg 1$), se ve como una constante. Aquí, el proceso de difusión logró su cometido, tener en todos los lugares, la misma concentración. Aquí se denomina que se ha llegado al equilibrio. La figura A.1(c) muestra este hecho.

A.1.2. Expresión matemática

Para poder determinar la expresión matemática de un proceso de difusión, vamos a recurrir a las leyes de Fick.

A.1.2.1. Primer Ley de Fick

Es una ley fenomenológica que establece que el flujo difusivo va de las regiones de alta concentración a las regiones de baja concentración. La magnitud del flujo es proporcional al gradiente de la concentración, a saber, si \mathbf{J} es el vector de flujo de difusión, D el coeficiente de difusión y w es la concentración, entonces

$$\mathbf{J} = -D\nabla w \quad (\text{A.1})$$

A.1.2.2. Segunda Ley de Fick

La segunda ley de Fick es una ecuación de balance o conservación de la masa que indica que la concentración local de una especie cambia debido al movimiento de las moléculas que entran o salen por difusión. Para ello, sea Ω una región en el espacio con frontera Λ .

El cambio de concentración dentro de Ω debe ser igual al flujo que entra o sale por la frontera. Suponiendo que no hay fuentes de entrada, tenemos que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} w d\Omega = - \int_{\Lambda} \mathbf{J} \cdot \vec{n} d\Lambda \quad (\text{A.2})$$

Sustituyendo (A.1) en el término de la derecha de (A.2), tenemos que

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} w d\Omega = - \int_{\Lambda} [-D\nabla w] \cdot \vec{n} d\Lambda \quad (\text{A.3})$$

$$= \int_{\Lambda} [D\nabla w] \cdot \vec{n} d\Lambda \quad (\text{A.4})$$

Ahora, si suponemos que la región no cambia en el tiempo y además, se cumple el teorema de la divergencia, tenemos que

$$\int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial t} d\Omega = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} w d\Omega \quad (\text{A.5})$$

$$= \int_{\Omega} \nabla \cdot (D\nabla w) d\Omega \quad (\text{A.6})$$

y como la relación (A.6) es válida para cualquier región Ω , y las derivadas de w son continuas, entonces tenemos que

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D\nabla^2 w \quad (\text{A.7})$$

A esta ecuación, le llamaremos **ecuación de difusión** o **ecuación de calor**. Para casos más generales, donde \mathbf{C} es el vector de especies químicas $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_n)^t$, la expresión matemática de un proceso de difusión es la siguiente:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t}(x, t) = D\nabla^2 \mathbf{C} \quad (\text{A.8})$$

con D es la matriz diagonal de difusividad

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & D_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & D_n \end{pmatrix}$$

y D_i es el coeficiente de difusión de la i -ésima especie química $C_i(x, t)$ (con $i = 1, 2, \dots, n$).

A.2. Reacción-Difusión

A.2.1. Expresión matemática

En el caso de un proceso de reacción-difusión, tenemos que la ecuación de balance (A.2) se modifica, siendo ahora

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} w d\Omega = \int_{\Omega} R(w) d\Omega - \int_{\Lambda} \mathbf{J} \cdot \vec{n} d\Lambda \quad (\text{A.9})$$

donde $R(w)$ es la función que describe el cambio químico que tiene w en función a la posición y al tiempo. Por tanto, realizando un cálculo similar al proceso de difusión, tenemos que

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D \nabla^2 w + R(w) \quad (\text{A.10})$$

la cual es conocida como la **ecuación de reacción-difusión**. Cuando generalizamos para n especies químicas que interactúan entre sí y con el medio, tenemos que, si \mathbf{C} es el vector de especies químicas $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_n)^t$, entonces la expresión matemática de un proceso de Reacción-Difusión es la siguiente:

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t}(x, t) = D \nabla^2 \mathbf{C} + R(\mathbf{C}) \quad (\text{A.11})$$

donde D es la matriz diagonal de difusividad

$$D = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & D_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & D_n \end{pmatrix}$$

donde D_i es el coeficiente de difusión de la i -ésima especie química $C_i(x, t)$ (con $i = 1, 2, \dots, n$). Además, $R(\mathbf{C}) = R(\mathbf{C}, x, t)$ es la función que describe la cinética química de la mezcla en función de la concentración, la posición y el tiempo.

Cuando $D = 0$, tenemos que la ecuación (A.11) se convierte en la ecuación

$$\frac{d\mathbf{C}}{dt} = R(\mathbf{C})$$

la cual describe la cinética química del sistema. Mientras que cuando $R(\mathbf{C}) = 0$, tenemos que (A.11) se convierte en

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t}(x, t) = D \nabla^2 \mathbf{C},$$

la cual es conocida como la ecuación de calor o ecuación de difusión, en la teoría de EDP's.

Bibliografía

- [1] P. Gray and S.K. Scott. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: isolas and other forms of multistability. *Chemical Engineering Science*, 38(1):29–43, 1983.
- [2] P. Gray and S.K. Scott. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: Oscillations and instabilities in the system $a+2b \rightarrow 3b; b \rightarrow c$. *Chemical Engineering Science*, 39(6):1087–1097, 1984.
- [3] J.K. Hale, L.A. Peletier, and W.C. Troy. Exact homoclinic and heteroclinic solutions of the gray-scott model for autocatalysis. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 61(1):102–130, 2000.
- [4] J.K. Hale, L.A. Peletier, and W.C. Troy. Stability and instability in the gray-scott model: the case of equal diffusivities. *Applied mathematics letters*, 12(4):59–65, 1999.
- [5] L.A. Peletier. Pulses, kinks and fronts in the gray-scott model (nonlinear diffusive systems: Dynamics and asymptotics). 1178:16–28, 2000.
- [6] Valery Petrov, Stephen K. Scott, and Kenneth Showalter. Excitability, wave reflection, and wave splitting in a cubic autocatalysis reaction-diffusion system. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*, 347(1685):631–642, 1994.
- [7] Arjen Doelman, Tasso J Kaper, and Paul A Zegeling. Pattern formation in the one-dimensional gray - scott model. *Nonlinearity*, 10(2):523, 1997.
- [8] Peter Gray and Stephen K Scott. *Chemical oscillations and instabilities: non-linear chemical kinetics*. Clarendon Press. Oxford University Press, 1990.

-
- [9] Gerda De Vries, Thomas Hillen, Mark Lewis, Johannes Müller, and Birgitt Schönfisch. *A course in mathematical biology: Quantitative modeling with mathematical and computational methods*, volume 12. Siam, 2006.
- [10] Steven H Strogatz. *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology and chemistry*. Perseus publishing, 2001.
- [11] P. Gray and S.K. Scott. Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, 89(1):22–32, 1985.
- [12] Norihiro Sato. Some nonexistence results of stationary solutions for the gray–scott model. *Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications*, 65(8):1644–1653, 2006.
- [13] J.M. Chaidez Félix. Tesis de licenciatura: *Formación de patrones mediante el mecanismo de Turing*.
- [14] A. Ledesma Durán. Tesis de maestría: *Patrones de Turing en Sistemas Biológicos*.
- [15] J. Vanegas, N. Ladinez, and D. Garzón. Análisis de la inestabilidad de turing en modelos biológicos. *Dyna*, 76(158):123–134, 2009.
- [16] I.A. Kuznetsov. *Elements of applied bifurcation theory*, volume 112. Springer, 1998.
- [17] James P Keener and James Sneyd. *Mathematical physiology*, volume 8. Springer, 1998.
- [18] Irving Robert Epstein and John Anthony Pojman. *An introduction to nonlinear chemical dynamics: oscillations, waves, patterns, and chaos*. Oxford University Press New York, 1998.