



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

UNIVERSIDAD DE VALLADOLID

ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

Grado en Ingeniería en Tecnologías Industriales

**Formación de patrones en la dinámica
espacio-temporal de sistemas de
Reacción-Difusión de dos variables.**

Autor:

Herguedas Sanz, Cristina

Tutor:

**Portillo de la Fuente, Ana María
Departamento Matemática Aplicada**

Valladolid, Junio 2024

AGRADECIMIENTOS

En primer lugar, me gustaría agradecer a mi tutora, Ana, por la constante disponibilidad, el tiempo y la ayuda prestadas. Su guía a lo largo de todo el trabajo ha sido fundamental para el éxito del mismo.

También me gustaría agradecer a todas las personas, tanto profesores como compañeros, que me han acompañado a lo largo de todos estos años de carrera y han contribuido en mi formación.

Por otra parte me gustaría dar las gracias a mi familia, en especial a mis padres y a mi hermana, por su paciencia y apoyo incondicional a lo largo de toda mi educación y mi vida.

Para terminar, agradecer a mis amigos por su preocupación sincera, por su inmensa comprensión y por cuidar siempre tanto de mí.

Por todo ello, muchas gracias.

Resumen

Este Trabajo de Fin de Grado se centra en estudiar y analizar los patrones que surgen como consecuencia de la dinámica de dos variables. Estas variables están modeladas como sistemas de reacción-difusión y en el caso de este trabajo describen el funcionamiento de un reactor en el primer problema y el comportamiento de dos especies depredadora y presa en el segundo. Para llevar a cabo estos estudios primero se ha realizado una evaluación de las condiciones necesarias para que se den las bifurcaciones de Hopf, Turing y Onda. Después, se ha escogido el mejor método para la discretización del sistema y se ha elaborado el programa para la simulación en MATLAB. Por último, se han simulado, dibujado y analizado los patrones obtenidos.

Palabras clave

Sistemas de reacción-difusión, patrones de Turing, bifurcación de Hopf, bifurcación de onda, bifurcación de Turing, reactor sin agitación de flujo continuo, sistemas depredador-presa.

Abstract

This Bachelor's Thesis aims to study and analyse the different patterns that appear as a consequence to the dynamic of two variables. This variables are modelled as reaction-diffusion systems and in this work they describe how a reactor works in the first problem and how two species, predator and prey, behave in the second one.

To accomplish this studies, in the first place an evaluation of the required conditions for Hopf, Turing and Wave bifurcations to happen has been done. Then, the best discretization method has been selected and used to elaborate the simulation program in MATLAB. Lastly, simulations have been performed and consequently patterns have been drawn and analysed.

Key Words

Reaction-diffusion systems, Turing patterns, Hopf bifurcation, wave bifurcation, Turing bifurcation, continuous-flow unstirred reactor, predator-prey

systems.

Índice general

1. Introducción y objetivos	9
1.1. Introducción	9
1.2. Antecedentes y motivación	12
1.3. Objetivos	14
2. Problema general	16
2.1. Introducción	16
2.2. Cálculo de los puntos críticos	17
2.3. Evaluación del Jacobiano	17
2.4. Estudio de los tipos de bifurcación	19
2.4.1. Bifurcación de Hopf	19
2.4.2. Bifurcación de Turing	20
2.4.3. Bifurcación de Onda	22
3. Discretización espacial y temporal para la simulación de los problemas	24
3.1. Introducción	24
3.2. Discretización espacial	26
3.3. Discretización temporal	29
3.4. Simulación en MATLAB	31
4. Caso I: Caos inducido por onda en un reactor sin agitación de flujo continuo	33
4.1. Introducción	33
4.2. Adimensionalización de ecuaciones	35
4.3. Análisis bifurcaciones	37
4.3.1. Cálculo de puntos críticos	37
4.3.2. Evaluación del Jacobiano, traza y determinante	37

4.4.	Simulación del problema con MATLAB	40
4.4.1.	Simulaciones en 1D	40
4.4.2.	Simulaciones en 2D	48
4.5.	Conclusiones	67
5.	Caso II: Complejidad espacio-temporal de sistemas radio-	
	dependientes depredador-presa	69
5.1.	Introducción	69
5.2.	Adimensionalización de ecuaciones	73
5.3.	Análisis bifurcaciones	75
5.3.1.	Cálculo de puntos críticos	75
5.3.2.	Evaluación del Jacobiano, traza y determinante	76
5.4.	Simulaciones.	79
5.5.	Conclusiones	86
6.	Conclusiones y líneas futuras	87
6.1.	Conclusiones	87
6.2.	Líneas futuras	88

Índice de figuras

1.1.	Distintos patrones de pelaje que presentan los felinos: a) rose- ta, b) rayas, c)manchas, d)liso [6]	10
1.2.	Pez cebra [12]	13
3.1.	Rejilla para la aplicación del método de diferencias finitas en distintos nodos.	28
3.2.	Regiones de estabilidad de métodos RK.	30
3.3.	Región de estabilidad para los métodos de Adams-Bashforth de k pasos.	30
4.1.	Respuesta caótica con parámetros $\phi=2.8$ y $\mu=33.3$	41
4.2.	Respuesta caótica con parámetros $\phi=3$ y $\mu=38$	42
4.3.	Respuesta caótica con parámetros $\phi=3$ y $\mu=40.5$	43
4.4.	Respuesta de frente de onda con parámetros $\phi=2$ y $\mu=16$	43
4.5.	Patrones espacio temporales para la evolución de la concen- tración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=40$	44
4.6.	Patrones espacio temporales para la evolución de la concen- tración de las especies en la región caótica $\phi=2.8$ y $\mu=33.3$	45
4.7.	Patrones espacio temporales para la evolución de la concen- tración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=38$	46
4.8.	Patrones espacio temporales para la evolución de la concen- tración de las especies en la región caótica $\phi=3.4$ y $\mu=53$	47
4.9.	Patrones espacio temporales para la evolución de la concen- tración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=40.5$	48
4.10.	Patrón en el instante inicial para el reactivo u con los paráme- tros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$	49
4.11.	Patrón en el instante inicial para el reactivo v con los paráme- tros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$	50
4.12.	Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo u con los paráme- tros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$	51

4.13. Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 16, \mu = 2$	52
4.14. Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 16, \mu = 2$	53
4.15. Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 16, \mu = 2$	54
4.16. Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 16, \mu = 2$	55
4.17. Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 16, \mu = 2$	56
4.18. Patrón en el instante $t = 0,5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$	57
4.19. Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$	58
4.20. Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$	59
4.21. Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 44$	60
4.22. Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 44$	61
4.23. Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 44$	62
4.24. Mapa de fases para un sistema con $\mu < \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$).	63
4.25. Mapa de fases para un sistema con $\mu = \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 2, \mu = 16$).	64
4.26. Mapa de fases para un sistema con $\mu > \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 44$).	65
4.27. Evolución temporal de un punto fijo de u . (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$).	66
4.28. Evolución temporal de un punto fijo de v . (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1, \phi = 3, \mu = 38$).	67
5.1. Diagrama de bifurcación para el sistema de estudio [7]	78
5.2. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=0$.	79
5.3. Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=0$.	80
5.4. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=50$	81
5.5. Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=50$	81

- 5.6. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$ 82
- 5.7. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$ 83
- 5.8. Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=450$ 83
- 5.9. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$ 84
- 5.10. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$ 85
- 5.11. Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$ 85

Capítulo 1

Introducción y objetivos

1.1. Introducción

La formación espontánea de estructuras es más habitual de lo que cabría esperar. Basta con observar el entorno para descubrir la infinidad de ellas que nos rodean y a pesar de ser fenómenos distintos a nivel microscópico como consecuencia de su naturaleza, sus principios son compartidos. Todos ellos se dan en sistemas no lineales que reciben un aporte continuo de energía y/o materia, es decir, se encuentran fuera del equilibrio [1].

Un ejemplo de la aparición de patrones en la naturaleza son los patrones en el pelaje de los felinos (Figura 1.1).



Figura 1.1: Distintos patrones de pelaje que presentan los felinos: a) roseta, b) rayas, c)manchas, d)liso [6]

Este trabajo se va a centrar en aquellos sistemas que se pueden modelar como sistemas de reacción-difusión. En estos la parte difusiva representa la dispersión y la parte reactiva la interacción de las especies involucradas. Estos sistemas se pueden estudiar mediante la observación de la distribución espacial de las especies que interactúan en un espacio definido, lo que es sinónimo de estudiar los patrones espacio-temporales que se forman. Estos patrones pueden comportarse de manera estable o inestable tanto en el espacio como en el tiempo, dependiendo del sistema que se esté estudiando [2]. Un patrón es la formulación generalizada de sistemas basada en una serie de procesos o eventos observables que suceden de manera recurrente bajo unas ciertas condiciones, es decir, una tendencia ampliamente observable. Algunos de los procesos que los provocan son: la primera y segunda ley de la termodinámica, los principios físicos de difusión y transporte de líquidos y gases o la selección natural de Darwin [3]. En cuanto a los modelos de simulación, los patrones son características definitorias de un sistema y habitualmente por ello, indicadores de procesos y estructuras internas esenciales. Los patrones contienen información de la organización subyacente del sistema pero de una manera codificada [4].

Un tipo particular de estos patrones son los conocidos como patrones de Turing. Alan Turing, en 1952, propuso un mecanismo para la generación, a partir de sistemas homogéneos de heterogeneidad, a través de sistemas de reacción difusión. Estos sistemas, a los que él denominó morfogenéticos, estaban formados por sustancias químicas reaccionando entre ellas y difundiendo [5]. Gracias a sus conclusiones es posible estudiar los sistemas con inestabilidades por difusión asociándolos a los procesos físicos y químicos que los provocan.

Los sistemas que se pueden estudiar son muy diversos y abarcan multitud de campos como son la biología, la física o la química. Algunas de las aplicaciones biológicas más importantes son aquellas que estudian el crecimiento de órganos y tejidos o las dinámicas poblacionales. En cuanto a la física se usan para modelar el comportamiento de semiconductores, láseres y cosmología. Y por último en la rama química estudian la formación de estructuras espaciales y la corrosión.

Para el estudio de estos sistemas se va a realizar tanto un análisis numérico como gráfico. En primer lugar, se estudiarán las posibles bifurcaciones que se pueden obtener y las condiciones para que cada una de ellas tenga lugar. Estas pueden ser bifurcaciones de Hopf, de onda o de Turing.

Las bifurcaciones de Hopf son aquellas independientes del espacio. Estas rompen la simetría temporal del sistema y la altura de las oscilaciones es uniforme en el espacio y periódica en el tiempo [7].

Las bifurcaciones de Turing son aquellas independientes del tiempo, es decir, estacionarias. Estas rompen la simetría espacial, llevando a la formación de patrones que son estacionarios en tiempo y oscilatorios en espacio [7].

Por último, cuando se rompen tanto la simetría espacial como la temporal se producen bifurcaciones de onda. Estas forman patrones que son oscilatorios en espacio y en tiempo [7].

En segundo lugar, se realizarán diversas simulaciones para obtener la solución numérica de los sistemas para distintas condiciones iniciales y valores de los parámetros y por último se representarán gráficamente estas soluciones para el estudio de los patrones obtenidos. Las simulaciones se llevarán a cabo utilizando el programa de cálculo MATLAB con el que se realizará la discretización del sistema primero espacial y después temporal. Por último con los resultados obtenidos se dibujarán distintas gráficas entre las que se encuentran los denominados patrones de Turing que se utilizarán para el estudio y análisis de los sistemas.

1.2. Antecedentes y motivación

Alan Turing en 1952 publicó ‘Bases químicas de la morfogénesis’ sobre la formación espontánea de patrones en sistemas modelados con ecuaciones de reacción-difusión y a pesar de no ser ni biólogo ni químico ha tenido un gran impacto en ambas áreas de conocimiento. Estudiando cómo un embrión esférico puede convertirse en un organismo no esférico como es el ser humano, elaboró un modelo matemático que explicaba cómo fluctuaciones aleatorias pueden llevar a la aparición de patrones y estructuras a partir de una uniformidad inicial. La relevancia de estos patrones reside en el hecho de que tienen lugar en multitud de procesos naturales y el modelo que diseñó Turing es uno de los que ofrece una de las respuestas más versátiles [8].

En su publicación sugería que los sistemas de sustancias químicas, denominadas morfogenéticas, reaccionando juntas y difundiéndose a través de un tejido son adecuados para tener en cuenta el fenómeno principal de la morfogénesis. Estos sistemas, a pesar de ser inicialmente homogéneos, desarrollan patrones o estructuras a lo largo del tiempo debido a las inestabilidades que existen en el equilibrio homogéneo y que alteran el sistema induciendo alteraciones aleatorias [9].

La intención de esta publicación y su investigación era presentar un mecanismo capaz de producir patrones utilizando únicamente procesos bioquímicos, sin ninguna necesidad de usar otras influencias mecánicas o externas. En definitiva, intentaba demostrar cómo los patrones biológicos podían aparecer gracias a la auto-organización. A pesar de ser un intento ingenioso fue desestimado en favor de un mecanismo denominado *Modelo Bandera Francesa* propuesto por el biólogo Lewis Wolpert. Este defendía que la formación de patrones moleculares se debe principalmente a un mecanismo universal de traducción de la información genética en patrones espaciales. Para ello, las células de un sistema que se está desarrollando tienen su posición definida con respecto a uno o varios puntos del sistema. Y esta información posicional es independiente de la difusión [10]. Con el tiempo, ambos modelos son aceptados como válidos y ambos permiten considerar y explorar cómo el fenómeno de la embriogénesis ocurre.

A pesar de esto, desde el planteamiento de la teoría de Turing hasta que se tomó en cuenta tuvieron que pasar 20 años ya que hasta ese momento no fue posible simular computacionalmente los sistemas y demostrar la aparición de dichos patrones. Aun así, los biólogos más experimentalistas no aceptaron la idea al principio debido a que no consideraban que existiesen suficientes

pruebas experimentales como sí lo hacían otros modelos como el modelo de información posicional (*Modelo Bandera Francesa*) o el modelo de gradiente morfogénico. Este último, explicaba de manera muy eficiente un gran número de fenómenos, pero no era universal. Es el caso de la regeneración de algunas partes del cuerpo que sufren algunas especies como la hidra o la planaria. Este hecho sugiere que debe intervenir un sistema autónomo como sugería Turing. La forma más rápida de probar la existencia de estos patrones era observar la piel de los peces o los anfibios. El pez más utilizado para observar estos patrones es el pez cebra, el cual muestra franjas de distinto color a lo largo de todo su cuerpo [11].



Figura 1.2: Pez cebra [12]

Los patrones espacio temporales en los sistemas poblacionales son siempre un fenómeno interesante y valioso para la futura investigación debido a su extendida existencia en el mundo real. Puede ser usado para describir cambios en la estructura poblacional de especies que interactúan o reactivas de la ecología en la naturaleza [13]. En el campo de la ecología, conocer su funcionamiento resulta muy importante para conocer la distribución poblacional de las especies pudiendo evitar o prevenir la extinción de algunas de ellas o tratar invasiones ecológicas. En particular, son de gran interés los

modelos ratio-dependientes que respetan la conservación de la masa (o la energía) para el modelado biológico [7].

En el campo de la medicina también es de gran utilidad ya que permite estudiar la propagación de epidemias o adaptar el tratamiento a distintas enfermedades en base al desarrollo histológico, pudiendo así centrar el uso de la medicina en frenar el crecimiento de las células dañinas en lugar de combatir las cuando estas ya están extendidas. Algún ejemplo de estos estudios se puede encontrar en [14], [15], [16].

Por último, también tiene aplicaciones físicas ya que si las ondas de transmisión se autoestabilizan permiten que las ondas de fisión se autopropaguen. Mientras algunos sistemas de reacción-difusión son conocidos por sus inestabilidades, se asume de manera frecuente que las ondas de fisión son asintóticamente estables. Esto podría resultar en la creación de reactores de autorregulado rápido diseñados en base a este fenómeno [17].

En cuanto a los sistemas de reacción-difusión su estudio también resulta muy interesante ya que, aunque son ecuaciones en derivadas parciales no lineales, a menudo hay posibilidades de un tratamiento analítico.

1.3. Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es estudiar el comportamiento y la formación de patrones en sistemas de reacción-difusión de dos variables, es decir, sistemas que involucran dos especies (depredador y presa) en competencia en un espacio definido y en un tiempo finito.

A través de la revisión de distintos artículos, se pretende elaborar unas condiciones generales que poder aplicar a cualquier problema para conocer los puntos de bifurcación de estos. Para ello se realiza un estudio de los requisitos que deben cumplir los autovalores de la matriz Jacobiana del sistema para que el sistema sufra las consecuencias de una u otra bifurcación.

Este estudio, no solo se realizará de manera analítica por lo que para poder examinar la formación de patrones se va a realizar un análisis de los distintos métodos de discretización escogiendo el más adecuado para esta tarea. Una vez escogido, se llevará a cabo la discretización tanto espacial como temporal del sistema.

Este proceso se realizará a través del código que se diseñará en MATLAB. Este deberá no solo discretizar el sistema, sino también realizar las iteraciones necesarias para alcanzar la solución numérica del sistema y representarlas

de tal forma que los patrones sean apreciables.

Los patrones, a continuación, serán estudiados para el caso concreto de cada problema. Es decir, se observará el significado y la relevancia de conocer el funcionamiento de cada uno de ellos en su contexto.

Por último, se concluirá con una enumeración de las ventajas de conocer los patrones y por consiguiente el funcionamiento de multitud de sistemas. Esto dará una visión de la importancia de su estudio y ayudará a conocer otros posibles problemas y campos de aplicación.

Capítulo 2

Problema general

2.1. Introducción

Las ecuaciones y sistemas de reacción-difusión son modelos matemáticos que describen el comportamiento de una o varias poblaciones en el espacio. Esta distribución se puede ver afectada tanto por reacción química como por difusión, por ello reciben este nombre.

El objetivo final del trabajo es el estudio de distintos casos modelados con sistemas de reacción-difusión en los que se forman distintos patrones en el dominio espacial, derivados de bifurcaciones de Hopf, Turing y onda, dependiendo de las condiciones de partida, los parámetros y las ecuaciones. Por ello, antes de analizar cada caso se va a realizar el estudio de un problema general con el objetivo de establecer las condiciones necesarias y suficientes de cada uno de los distintos casos que pueden tener lugar.

En los siguientes apartados se va a realizar el estudio del problema general modelizado por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} u_t = f(u, v, \vec{\mu}) + D_1 \nabla^2 u \\ v_t = g(u, v, \vec{\mu}) + D_2 \nabla^2 v \end{cases} \quad (2.1)$$

donde u y v representan las densidades de población de un activador (presa) y un inhibidor (depredador) respectivamente, $\vec{\mu}$ representa los distintos parámetros del problema, D_1 y D_2 son los coeficientes de difusión de cada población y por último $\nabla^2 u$ y $\nabla^2 v$ representan el laplaciano de u y v .

Para el estudio se va a realizar el cálculo de los puntos críticos, se va a evaluar el jacobiano en dichos puntos y por último se va a estudiar la traza

y el determinante de dicha matriz con el objetivo de ver qué características corresponden a cada tipo de bifurcación.

2.2. Cálculo de los puntos críticos

En primer lugar, para estudiar un sistema de ecuaciones de reacción-difusión se deben calcular los puntos críticos de la reacción. Este caso se da cuando ambos coeficientes de difusión son nulos, es decir, se estudia la parte dependiente únicamente del tiempo, sin incluir la variable del espacio. El sistema de estudio es el siguiente:

$$\begin{cases} u_t = f(u, v, \vec{\mu}) \\ v_t = g(u, v, \vec{\mu}) \end{cases}$$

Y los puntos críticos del mismo son los valores que se obtienen de resolver las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned} f(u, v, \vec{\mu}) &= 0, \\ g(u, v, \vec{\mu}) &= 0. \end{aligned}$$

A estos puntos críticos se los denominará: u^* y v^* y sobre ellos se evaluará el determinante Jacobiano del sistema problema.

2.3. Evaluación del Jacobiano

Tras calcular los puntos críticos, se debe evaluar la matriz Jacobiana en ellos para estudiar la estabilidad del sistema que depende de los valores de la traza y el determinante.

Para estudiar la estabilidad lineal, se linealiza (2.1) en torno al punto fijo (u^*, v^*) para pequeñas variaciones en espacio y tiempo y se expanden al espacio de Fourier:

$$\begin{aligned} u(\vec{x}, t) &\approx u^* e^{\lambda t} e^{ik\vec{x}}, \\ v(\vec{x}, t) &\approx v^* e^{\lambda t} e^{ik\vec{x}}, \end{aligned}$$

con ello se obtiene la ecuación característica:

$$|\mathbf{A} - k^2 \mathbf{D} - \lambda \mathbf{I}| = 0.$$

A continuación, se aplica lo desarrollado al problema general que se está estudiando en el que la matriz de estudio, no es una matriz diagonalizada, sino que depende de las derivadas parciales de la reacción cinética evaluadas en el punto crítico.

$$J(k) = \begin{pmatrix} f_u - D_1 k^2 & f_v \\ g_u & g_v - D_2 k^2 \end{pmatrix}.$$

Como para el estudio primero se va a analizar el caso sin difusión, $k = 0$, la matriz Jacobiana es la siguiente:

$$J(0) = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

En el análisis de la estabilidad se van a utilizar como elementos de estudio la traza y el determinante. Estos se obtienen tras el siguiente desarrollo.

En una matriz diagonalizada como la siguiente:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

los autovalores son las raíces del siguiente polinomio característico:

$$\lambda^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)\lambda + \lambda_1\lambda_2,$$

donde $(\lambda_1 + \lambda_2)$ representa la traza y $\lambda_1\lambda_2$ el determinante.

Sabiendo esto, la ecuación queda de la siguiente forma:

$$\lambda^2 - tr(k)\lambda + det(k),$$

y los autovalores calculados tras igualar esta ecuación a cero son los siguientes:

$$\lambda_{1,2}(k) = \frac{1}{2} \left(tr(k) \pm \sqrt{tr^2(k) - 4det(k)} \right). \quad (2.3)$$

Tras realizar el cálculo de los puntos críticos y evaluar la matriz Jacobiana en dichos puntos, el siguiente paso en el análisis del problema consiste en calcular la traza y el determinante cuando no existe difusión, es decir, para el caso $k = 0$:

$$\begin{aligned} tr(0) &= f_u + g_v, \\ det(0) &= f_u g_v - f_v g_u. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Para el caso general en el que existe difusión, su traza y su determinante son los siguientes:

$$\begin{aligned} tr(k) &= f_u - D_1k^2 + g_v - D_2k^2 = tr(0) - (D_1 + D_2)k^2, \\ det(k) &= (f_u - D_1k^2)(g_v - D_2k^2) - g_u f_v = det(0) - (D_1g_v + D_2f_u)k^2 + D_1D_2k^4. \end{aligned}$$

Por último, una vez calculadas la traza y el determinante del problema que se está estudiando se pueden calcular los autovalores con (2.3).

2.4. Estudio de los tipos de bifurcación

Los sistemas de reacción-difusión se pueden clasificar en base al tipo de bifurcación que se produce. Estas bifurcaciones son rupturas de la simetría del sistema que conllevan la aparición de patrones espacio-temporales. En los siguientes apartados se van a estudiar tres tipos de ellas: de Hopf, de Turing y de onda.

2.4.1. Bifurcación de Hopf

El primer caso de estudio es el del problema sin difusión, en caso de que $tr(0) < 0$ y $det(0) > 0$ el sistema es estable y no se produce ninguna bifurcación, ya que los dos autovalores tienen su parte real negativa.

Para que se produzca una bifurcación, debe romperse la simetría del sistema. Por ello, la bifurcación de Hopf ocurrirá a partir del punto donde $tr(0) = 0$, ya que es el punto donde se rompe la simetría temporal.

Por todo ello, las condiciones para que una bifurcación de Hopf tenga lugar son las siguientes:

$$\text{Im}(\lambda(0)) \neq 0; \quad \text{Re}(\lambda(0)) = 0.$$

Estas bifurcaciones son independientes del espacio, cuando se producen se rompe la simetría temporal del sistema. Esta ruptura da lugar a las oscilaciones que se producen. Estas son, por tanto, uniformes en el espacio y periódicas en el tiempo.

2.4.2. Bifurcación de Turing

A continuación se estudian aquellos casos donde $k \neq 0$, es decir, se introduce la dependencia espacial en el problema. Estos casos se producen cuando partiendo de un problema estable sin difusión, cuando esta aparece se rompe la simetría espacial y/o temporal del sistema provocando por tanto una bifurcación en el sistema [1].

Antes de analizar los resultados es necesario enunciar el siguiente teorema.

Teorema de Routh-Hurwitz

El número de raíces de un polinomio real $f(x) = x^N + b_0x^{N-1} + a_0x^{N-2} + b_1x^{N-3} + \dots$ que tienen su parte real positiva se calcula como:

$$m = V\left(1, \Delta_1, \frac{\Delta_2}{\Delta_1}, \dots, \frac{\Delta_N}{\Delta_{N-1}}\right) = V(1, \Delta_1, \Delta_3, \dots) + V(1, \Delta_2, \Delta_4, \dots),$$

Δ_i :

$$\begin{pmatrix} b_0 & b_1 & b_2 & \dots & 0 \\ 1 & a_0 & a_1 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & a_0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Criterio de Routh-Hurwitz

Para que todas las raíces tengan su parte real negativa es necesario y suficiente que se cumpla: $\Delta_i > 0$, $i = 1, N$

Aplicando lo anterior al problema general y teniendo en cuenta el polinomio característico que se obtiene de la matriz Jacobiana (2.2) del sistema, se obtiene la siguiente ecuación:

$$x^N + b_0x^{N-1} + a_0x^{N-2} \quad \text{donde} \quad N = 2, \quad b_0 = -\text{tr}(k) \quad \text{y} \quad a_0 = \det(k).$$

Para poder aplicar el criterio de Routh-Hurwitz al problema que se está estudiando hay que trabajar con la matriz de Hurwitz [1]:

$$H = \begin{pmatrix} -\text{tr}(k) & 0 \\ 1 & \det(k) \end{pmatrix}.$$

En ella los menores principales y sobre los que se va a trabajar son los siguientes:

$$\Delta_1 = -\text{tr}(k), \Delta_2 = \det(H) = -\text{tr}(k)\det(k).$$

Si estos menores principales son mayores que cero, entonces el punto fijo es estable. Por tanto del primero se deduce: $\text{tr}(0) < 0$ y por tanto:

$$f_u + g_v < 0. \quad (2.6)$$

Sabiendo esto, del segundo se deduce:

$$\det(0) > 0 \Rightarrow f_u g_v - f_v g_u > 0. \quad (2.7)$$

Estos resultados se deben dar para el problema sin difusión. En el problema con difusión, para que se dé una inestabilidad de Turing se debe desestabilizar el sistema sin difusión mediante el cambio de un autovalor de negativo a positivo. Esto se deduce del teorema de Routh-Hurwitz donde si se sustituyen los datos del problema se obtiene lo siguiente:

$$m = V(1, -\text{tr}(J)) + V(1, \det(J)) = 1 + 0 = 1. \quad (2.8)$$

V representa el número de cambios de signo de los miembros adyacentes de una secuencia finita, por tanto para que se produzca una bifurcación de Turing se debe producir un cambio de signo.

Al añadir la difusión, esta disminuye la traza ya que esta sigue la siguiente fórmula:

$$\text{tr}(k) = \text{tr}(0) - (D_1 + D_2)k^2.$$

Por lo que como se parte de un caso estable ($\text{tr}(0) < 0$) al añadir la difusión la traza se hace aún más negativa y no existe la posibilidad de que en ella se produzca el cambio de signo. Este deberá tener lugar en el determinante.

$$\det(k) = \det(0) - (D_1 g_v + D_2 f_u)k^2 + D_1 D_2 k^4.$$

De esta ecuación se deduce la primera condición que debe cumplirse:

$$D_1 g_v + D_2 f_u > 0.$$

De la condición de partir de un punto estable se deduce que solo se cumplen si f_u o g_v tienen signos distintos, solo una de las especies (el activador) es autocatalítica.

Suponiendo que u es el activador ($f_u > 0$) y v el inhibidor ($g_v < 0$) de (2.4) se puede deducir lo siguiente:

$$f_u < -g_v \Rightarrow -\frac{f_u}{g_v} < 1. \quad (2.9)$$

Sabiendo esto se puede deducir lo siguiente:

$$\begin{aligned}
D_1g_v + D_2f_u &> 0, \\
D_2f_u &> -D_1g_v, \\
-\frac{f_u}{g_v} &> \frac{D_1}{D_2}, \\
\text{Aplicando (2.8):} \\
1 &> \frac{D_1}{D_2}, \\
D_2 &> D_1.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Por último, para que se produzca una bifurcación de Turing, al resolver la ecuación:

$$\det(0) - (D_1g_v + D_2f_u)k^2 + D_1D_2k^4 = 0,$$

el valor de k debe ser un número entero positivo para que se cumpla $\det(k) < 0$.

De esta ecuación se deduce la última condición que se debe cumplir:

$$(D_1g_v + D_2f_u)^2 - 4D_1D_2(f_ug_v - g_uf_v) > 0. \tag{2.11}$$

Como conclusión, las condiciones que se deben cumplir para una bifurcación de Turing se pueden resumir de la siguiente manera:

$$\text{Im}(\lambda(k)) = 0 \quad \text{y} \quad \text{Re}(\lambda(k)) = 0 \quad \text{en} \quad k \neq 0.$$

Estas bifurcaciones son estacionarias, por lo que cuando se producen se rompe la simetría espacial llevando a la formación de patrones que son estacionarios en tiempo y oscilatorios en espacio. Y para concluir, destacar que para que se produzca una bifurcación de Turing deben cumplirse las condiciones (2.6), (2.7), (2.9), (2.10) y (2.11).

2.4.3. Bifurcación de Onda

La bifurcación de onda depende del espacio y el tiempo y, por tanto, rompe ambas simetrías, y sus patrones son oscilatorios en tiempo y espacio. Por ello, recibe también el nombre de bifurcación de Turing oscilatoria o bifurcación de longitud de onda finita de Hopf.

Las condiciones para que se dé una bifurcación de onda son las siguientes: $\text{tr}(k) = 0$ y $\det(k) > 0$. Esto se debe a que para que se produzca en este caso $m = 2$, tanto la traza como el determinante en $k \neq 0$ deben cambiar de signo. Esto dará como resultado dos autovalores complejos conjugados cuya parte real sea igual a cero, es decir, autovalores imaginarios puros.

De la condición $\text{tr}(k) = 0$ se deduce el valor de k crítico:

$$\text{tr}(k) = 0 \Rightarrow \text{tr}(0) - (D_1 + D_2)k^2 = 0 \Rightarrow k^2 = \frac{\text{tr}(0)}{D_1 + D_2}. \quad (2.12)$$

Sabiendo que $\text{tr}(0) = f_u + g_v > 0$

Por tanto, las condiciones para que se produzca una bifurcación de onda son las siguientes:

$$\text{Im}(\lambda(k)) \neq 0; \quad \text{Re}(\lambda(k)) = 0 \quad \text{en} \quad k \neq 0.$$

Capítulo 3

Discretización espacial y temporal para la simulación de los problemas

3.1. Introducción

La discretización es un proceso que consiste en convertir datos continuos en datos discretos, es decir datos nominales o categóricos. Para ello se asignan rangos de valores reales a un valor nominal o lo que es lo mismo, se realizan particiones de los valores continuos que se asocian a una categoría o intervalo. Por tanto, la discretización de datos continuos produce una generalización inherente debido a la agrupación de los datos, los cuales se pueden representar de distintas maneras. Esta tarea es muy necesaria por ejemplo cuando se realiza un análisis numérico como es el caso del problema, ya que facilita y permite el análisis computacional del mismo, habilitando la posibilidad de estudio por ejemplo gracias a la representación gráfica de las soluciones. Pero este mecanismo es mucho más habitual de lo que puede parecer ya que en muchos casos los humanos realizamos este preprocesamiento de los datos de manera natural como por ejemplo con la temperatura o la velocidad [18],[19],[20].

Existen infinidad de métodos de discretización que han sido desarrollados en función de las distintas necesidades de los problemas a solucionar. La principal clasificación es la siguiente: supervisados y no supervisados, dinámicos y estáticos, globales y locales, directos e incrementales.

Los métodos supervisados y no supervisados se diferencian en el uso de la información de la clase del conjunto de datos. Mientras que la discretización supervisada se caracteriza por ser basada en el error o las estadísticas, la no supervisada se basa en la equidad de la longitud de los intervalos o la frecuencia. Es decir, el usuario realizando el estudio es quien decide la longitud de los intervalos apoyandose en la clase de información que está estudiando [21].

En el caso de los dos problemas que se van a estudiar se ha utilizado un modelo no supervisado, es decir, el espaciado de los intervalos es regular. El método de discretización utilizado en concreto es el método de líneas. Este un método se utiliza para la resolución de ecuaciones en derivadas parciales, las cuales son esenciales para el estudio del comportamiento del sistema ya que aportan información tanto de la evolución espacial del sistema como la temporal [22]. Estas ecuaciones en derivadas parciales se utilizan en multitud de modelos físicos, biológicos e ingenieriles y para resolverlas es necesario conocer las condiciones de frontera y/o las iniciales [25]. Consiste en la discretización de una ecuación en derivadas parciales en una o varias dimensiones a la vez que conduce a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en la dirección restante [23].

Estas ecuaciones diferenciales ordinarias son ecuaciones que contienen derivadas en función de una incógnita. Estas ecuaciones aparecen siempre que un modelo matemático implique la razón de cambio de una variable con respecto de otra [24]. Por tanto el proceso consiste en discretizar todos los términos diferenciales correspondientes a ciertas variables independientes de la ecuación, dejando continuos los términos que corresponden a una sola variable. En nuestro caso se discretiza primero el problema respecto de las variables espaciales, usando diferencias finitas para aproximar las derivadas respecto de estas variables. Así se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en la variable tiempo. A continuación se discretiza el sistema respecto del tiempo por medio de un integrador temporal, por ejemplo un método de Runge-Kutta.

Además, el método de líneas tiene las siguientes propiedades que justifican su uso[23]:

- Estabilidad numérica: gracias a la separación de la discretización del espacio y del tiempo es más fácil establecer estabilidad y convergencia para un mayor rango de problemas.

- Menor esfuerzo de programación: permite utilizar métodos diferentes en las variables espaciales y temporal.

Por último, se programará el método de líneas para que pueda introducirse en MATLAB como un algoritmo con el que se realizarán las distintas simulaciones con el objetivo de representar el resultado de manera gráfica.

3.2. Discretización espacial

La discretización espacial consiste en un proceso en el que se transforma un sistema de ecuaciones en derivadas parciales en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Los problemas continuos que se van a estudiar están definidos por sistemas de una o dos dimensiones espaciales y se van a resolver en el dominio discreto utilizando una rejilla de nodos equiespaciados.

En una dimensión espacial, $x \in [a, b]$, el espaciado de los nodos de la rejilla, es decir, la distancia que existe entre los distintos puntos de esta se define por el tamaño de paso, $h = (b - a)/n$ [7]. Con él se calculan la posición de los nodos siguiendo la fórmula: $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$. En el sistema discreto, el operador Laplaciano que describe la difusión se calcula usando diferencias finitas centradas de orden 2. Para h suficientemente pequeño, las derivadas se aproximan por las diferencias finitas de la siguiente manera: $u_{xx}(x_i, t) \approx \frac{u_{i-1}(t) - 2u_i(t) + u_{i+1}(t)}{h^2}$, siendo $u_i(t) = u(x_i, t)$ [28]. Además, como se imponen condiciones frontera Neumann homogéneas, los nodos límites no se incluyen en la discretización sino que se aproximan usando diferencias finitas de la derivada primera en función de los nodos adyacentes.

$$\begin{aligned} u_x(0, t) = 0, & \rightarrow u_0(t) \simeq \frac{4}{3}u_1(t) - \frac{1}{3}u_2(t), \\ u_x(L, t) = 0, & \rightarrow u_n(t) \simeq \frac{4}{3}u_{n-1}(t) - \frac{1}{3}u_{n-2}(t). \end{aligned}$$

Sabiendo todo esto la matriz de la discretización se calcula de la siguiente manera:

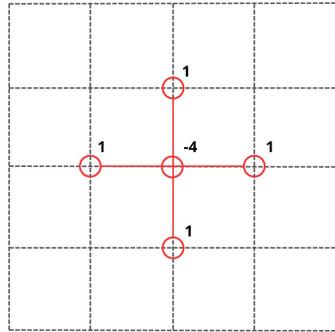
$$\begin{pmatrix} u_{xx,1} \\ u_{xx,2} \\ \vdots \\ u_{xx,n-2} \\ u_{xx,n-1} \end{pmatrix} \simeq \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{n-2} \\ u_{n-1} \end{pmatrix} + \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \frac{4}{3}u_1 - \frac{1}{3}u_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{4}{3}u_{n-1} - \frac{1}{3}u_{n-2} \end{pmatrix}$$

Haciendo la suma se obtiene la matriz de la discretización A_h :

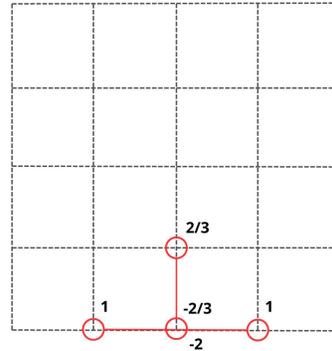
$$A_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Esta matriz es válida para sistemas de una dimensión espacial. Cuando se está tratando con un sistema de dos dimensiones espaciales entonces la matriz para la discretización es distinta. Si $y \in [c, d]$ y consideramos el mismo tamaño de paso que antes también en la dirección y , el número de nodos en esa dirección será $m = (d - c)/h$.

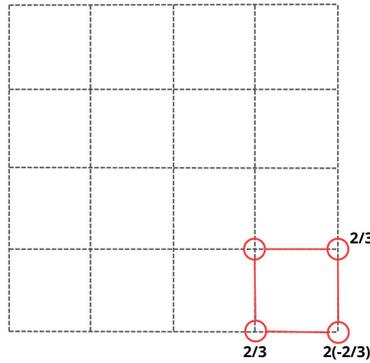
Teniendo en cuenta las condiciones frontera Neumann homogéneas y usando diferencias finitas similares a las del caso unidimensional la plantilla de la discretización sería:



(a) Nodo interior



(b) Nodo borde



(c) Nodo esquina

Figura 3.1: Rejilla para la aplicación del método de diferencias finitas en distintos nodos.

Colocando, de izquierda a derecha y de abajo a arriba, las variables de la malla en un vector la matriz de la discretización del laplaciano, quedaría

$$B_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} B_1 & \frac{2}{3}I & 0 & 0 & 0 \\ I & B_2 & I & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & I & B_2 & I \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}I & B_1 \end{pmatrix},$$

donde I representa la matriz identidad, la matriz para la discretización de

los nodos adyacentes a la frontera

$$B_1 = \begin{pmatrix} -\frac{4}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -\frac{8}{3} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{8}{3} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{4}{3} \end{pmatrix},$$

la matriz para la discretización de los nodos interiores

$$B_2 = \begin{pmatrix} -\frac{8}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{8}{3} \end{pmatrix}.$$

3.3. Discretización temporal

El siguiente paso del método de líneas consiste en la discretización temporal. Como en la discretización espacial usamos un tamaño de paso fijo, k , y elegimos un integrador temporal. Los problemas que vamos a resolver son problemas rígidos y la discretización espacial va a llevar a sistemas de dimensión bastante alta. Si queremos resolverlos con un método explícito tendremos que tener en cuenta que su región de estabilidad es acotada y que nos obligará a tomar tamaños de paso en tiempo pequeños. Comparando las regiones de estabilidad de los métodos de Runge-Kutta explícitos y de los métodos lineales multipaso explícitos (ver Figura 3.2 y Figura 3.3) nos quedamos con los métodos de Runge-Kutta.

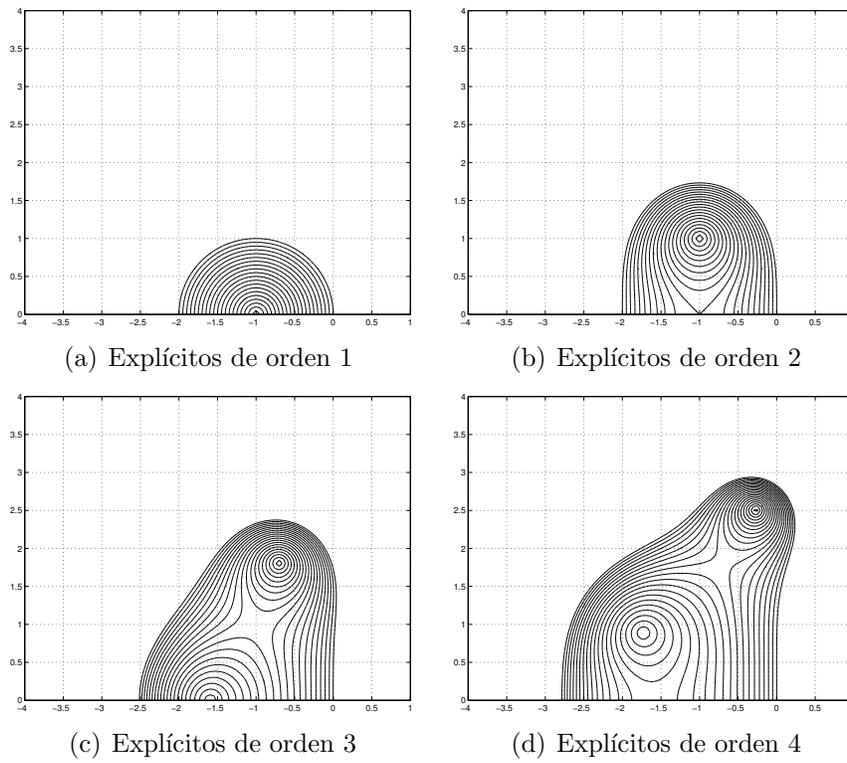


Figura 3.2: Regiones de estabilidad de métodos RK.

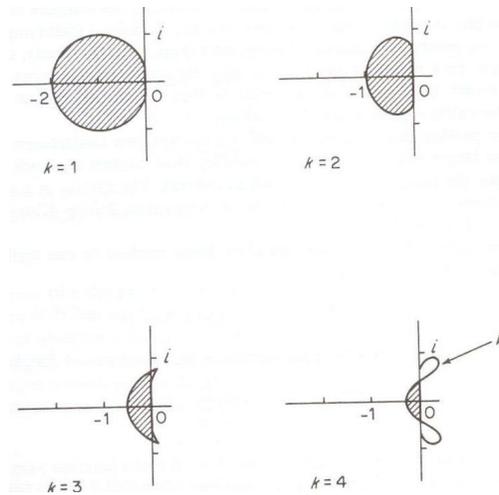


Figura 3.3: Región de estabilidad para los métodos de Adams-Bashforth de k pasos.

Dentro de los métodos de Runge-Kutta las regiones de estabilidad no crecen significativamente con el orden del método, pero sí aumenta el número de etapas. Como solución de compromiso elegimos el método de Euler que aunque tiene orden uno solo necesita una evaluación funcional por paso. Dado un problema de valor inicial

$$\begin{cases} u' = f(t, u), \\ u(t_0) = u_0. \end{cases}$$

el método de Euler proporciona una aproximación (t_1, u_1) a la solución a partir de la condición inicial, (t_0, u_0) , mediante la fórmula

$$\begin{aligned} u_1 &= u_0 + hf(t_0, u_0), \\ t_1 &= t_0 + h, \end{aligned}$$

y así sucesivamente. La expresión de la aproximación del n-ésimo valor a partir del anterior es

$$\begin{aligned} u_n &= u_{n-1} + hf(t_{n-1}, u_{n-1}), \\ t_n &= t_{n-1} + h. \end{aligned}$$

Este método calcula una aproximación de un problema bien planteado de valor inicial. Es decir, se obtienen en primer lugar los llamados puntos de red, que son aquellos puntos que se aproximan a la solución. Con estos puntos se puede obtener por interpolación la solución aproximada en otros puntos del intervalo [30].

3.4. Simulación en MATLAB

Para la simulación de los sistemas se ha utilizado MATLAB que es un programa interactivo de ordenador que sirve de manera conveniente como un “Laboratorio” para la experimentación que involucra matrices[31], como es el caso de los problemas que se van a estudiar.

En cuanto al estudio de estos, en primer lugar se han programado las funciones introduciendo los parámetros como variables globales ya que de esta manera se puede acceder a ellas y cambiarlas en cualquier función, permitiendo así unificar la nomenclatura. En segundo lugar se ha dado valor a los distintos parámetros en función de la simulación que se estuviese llevando a cabo. A continuación se han introducido las matrices utilizando el

comando `sparce` para transformarlas de manera que solo se almacenasen los datos distintos de cero con el objetivo de ahorrar espacio de almacenamiento aumentando la velocidad computacional. Por último, se introduce un bucle iterativo que lleva a cabo el método de Euler guardando los resultados obtenidos para poder posteriormente representarlos gráficamente obteniendo así los patrones de comportamiento que se quieren analizar.

. *Proceedings of the ACM on Programming Languages*, 4 (HOPL), 1-67.

Capítulo 4

Caso I: Caos inducido por onda en un reactor sin agitación de flujo continuo

4.1. Introducción

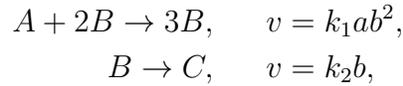
En los últimos años, se han hecho grandes esfuerzos por relacionar reacciones químicas complejas con procesos de transporte molecular. Esto se debe a que los sistemas químicos agitados han mostrado algunos de los ejemplos más bonitos y precisos del fenómeno que se da cuando los sistemas en reacción forman estructuras temporales lejos del equilibrio [32]. Prueba de ello, los distintos sistemas de reacción-difusión que se van a estudiar. En este primer problema, el sistema modelizado corresponde con un reactor sin agitación de flujo continuo.

A pesar de la amplia variedad de patrones de Turing que se pueden encontrar en la naturaleza, los estudios experimentales de dichos sucesos son complicados debido a la dificultad implícita de los procesos biológicos. Sin embargo, estos reactores son muy adecuados para el estudio de la aparición de patrones en sistemas químicos ya que sus dinámicas y funcionamiento son sencillos de comprender [33]. En estos reactores se aporta una corriente continua de reactivos frescos que no interfiere con los procesos de transporte por difusión molecular. Se crea una zona de reacción, que habitualmente implica un medio gelificado que está contenido entre paredes impermeables. Esta zona de reacción está en contacto con una reserva de reactivos frescos, los

cuales pueden ser atraídos por difusión a través de las membranas permeables. Gracias a estas también se pueden eliminar los productos de la zona de reacción. La composición química de la reserva se mantiene constante lo que permite que estados estables y otras estructuras puedan ser mantenidos a lo largo del tiempo para ser observados [34]. Además, presentan grandes ventajas como su fácil construcción o la gran conversión que ofrecen, motivo por el cual, estos reactores han sido utilizados para estos estudios desde la década de 1980.

El modelo de estudio es un sistema químico de retroalimentación en el que los coeficientes de difusión son iguales para las dos especies que participan. La respuesta depende tanto del espacio como del tiempo y el sistema se inicia mediante una onda viajera que se sostiene indefinidamente.

El modelo de ecuaciones consiste en una ecuación química que representa la retroalimentación (autocatálisis cúbica) y un segundo paso de descomposición:



donde a y b son las concentraciones del reactivo A y del autocatalizador B . Si se considera que ambas reacciones están teniendo lugar en el tanque de un reactor que está siendo continuamente alimentado con corrientes entrantes tanto de A como de B , los balances de masa que gobiernan los ratios de cambio de las dos concentraciones se pueden escribir como [35]

$$\begin{aligned} \frac{\partial a}{\partial t} &= \frac{(a_0 - a)}{t_{res}} - k_1 ab^2, \\ \frac{\partial b}{\partial t} &= \frac{(b_0 - b)}{t_{res}} + k_1 ab^2 - k_2 b. \end{aligned}$$

Conocido el modelo y el funcionamiento del reactor se obtienen las siguientes ecuaciones de reacción difusión para la evolución de las concentraciones en el reactor:

$$\begin{aligned} a_\tau(X, \tau) &= D_1 \Delta a + k_f(a_0 - a) - k_1 ab^2, & 0 < X < L, \tau \geq \tau_0 \\ b_\tau(X, \tau) &= D_2 \Delta b + k_f(b_0 - b) + k_1 ab^2 - k_2 b, & 0 < X < L, \tau \geq \tau_0 \end{aligned}$$

En estas ecuaciones, el primer término se corresponde con la ley de difusión de Fick, el segundo término se corresponde con el intercambio donde k_f es el

tiempo de residencia inverso. El término final corresponde con la cinética de la reacción.

Además del modelo de ecuaciones se establecen las siguientes condiciones de flujo cero en la frontera:

$$\frac{\partial a}{\partial X}(0, \tau) = \frac{\partial a}{\partial X}(L, \tau) = 0, \quad \frac{\partial b}{\partial X}(0, \tau) = \frac{\partial b}{\partial X}(L, \tau) = 0.$$

Es necesario también establecer condiciones iniciales. En este caso se va a considerar que no se proporcionan autocatalizadores a la reserva por lo que $b_0 = 0$, tampoco se tiene en la zona de reacción en el instante inicial, por lo que las condiciones iniciales son las siguientes:

$$\begin{aligned} a(X, 0) &= a_0, & 0 < X < L, \\ b(X, 0) &= 0, & S < X < L, \\ b(X, 0) &= g_0(X), & 0 < X < S, \end{aligned}$$

donde g_0 es una pequeña constante de iniciación.

Para facilitar el uso de las ecuaciones se van a adimensionalizar como se muestra en el siguiente apartado.

4.2. Adimensionalización de ecuaciones

Adimensionalizar las ecuaciones es un paso fundamental para resolver el problema ya que reduce el número de variables de trabajo por lo que facilita el estudio del problema. En este caso se escogen las concentraciones iniciales, ya que son conocidas, para dividir por las variables de estudio obteniendo así los parámetros adimensionales.

$$\begin{aligned} u &= \frac{a}{a_0}, \\ v &= \frac{b}{b_0}, \\ t &= \frac{\tau}{\tau_0}, \\ x &= \frac{X}{L}. \end{aligned}$$

para que al final queden ecuaciones en $u(x, t)$ y $v(x, t)$.

Para el caso de la primera ecuación tras introducir los parámetros adimensionales se obtiene:

$$\frac{ua_0}{t\tau_0} = D_1 \frac{a_0}{L^2} \Delta u + k_f(a_0 - ua_0) - k_1 ua_0 v^2 a_0^2.$$

Aislado los parámetros dimensionales de los no dimensionales la ecuación se reorganiza de la siguiente manera:

$$\left(\frac{a_0}{\tau_0}\right) \frac{\partial u}{\partial t} = \left(D_1 \frac{a_0}{L}\right) \Delta u + (k_f a_0)(1 - u) - (k_1 a_0)^3 v^2 u.$$

Para que esta ecuación dependa tan solo de parámetros adimensionales se dividen todos los términos entre paréntesis por: $\frac{a_0}{\tau_0} = k_f a_0$, de donde se obtiene la primera ecuación adimensional:

$$u_t = \delta \Delta u + 1 - u - \mu v^2.$$

cuyos parámetros adimensionales son:

$$\delta = \frac{D_1}{D_2},$$

$$\mu = \frac{k_1 (a_0)^2}{k_f}.$$

Para la segunda ecuación el proceso es el mismo:

$$\left(\frac{a_0}{\tau_0}\right) v_t = \left(\frac{a_0}{\tau_0}\right) \Delta v + k_f v_0 a_0 - v a_0 (k_f + k_2) + (k_1 a_0)^3 v^2.$$

Dividiendo todo por $\frac{a_0}{\tau_0} = k_f a_0$ se obtiene la segunda ecuación adimensionalizada:

$$v_t = \Delta v + v_0 - v\phi + \mu v^2,$$

cuyo parámetro adimensional es:

$$\phi = \frac{k_f + k_2}{k_f}.$$

4.3. Análisis bifurcaciones

4.3.1. Cálculo de puntos críticos

En primer lugar, para comenzar con el análisis de las bifurcaciones se calculan los puntos críticos del sistema sin difusión. Para ello, se considera que $\beta_0 = 0$, es decir; que la concentración inicial del autocatalizador es cero, y se igualan $f(u, v)$ y $g(u, v)$ a cero:

$$f(u, v) = 1 - u - \mu v^2 = 0, \quad (4.1)$$

$$g(u, v) = -v\phi + \mu v^2 = 0. \quad (4.2)$$

Despejando u en (4.1) se obtiene:

$$u = \frac{1}{1 + \mu v^2}. \quad (4.3)$$

De la ec. (4.2) se deducen dos posibles situaciones:

1) $v = 0 \Rightarrow u = 1$

2) $v \neq 0$

Sustituyendo $v = \frac{\phi}{\mu u}$ en (4.3) se obtiene el valor de u crítico para este caso:

$$u = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu}}{2\mu},$$
$$v = \frac{\mu \mp \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu}}{2\mu\phi}.$$

4.3.2. Evaluación del Jacobiano, traza y determinante

En primer lugar se evalúa el Jacobiano para el caso sin difusión ($k=0$) donde f_u, f_v, g_u, g_v representan las derivadas de las funciones $f(u, v)$ y $g(u, v)$ respecto de la correspondiente variable en cada caso.

$$J(0) = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 - \mu v^2 & -2\mu v \\ \mu v^2 & 2\mu v - \phi \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

A continuación se estudia el caso con difusión ($k \neq 0$):

$$J(k) = \begin{pmatrix} f_u - D_1 k^2 & f_v \\ g_u & g_v - D_2 k^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 - \mu v^2 - D_1 k^2 & -2\mu v \\ \mu v^2 & 2\mu v - \phi - D_2 k^2 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Caso I: $(u, v) = (1, 0)$

Sustituyendo el punto crítico en (4.4) se obtiene:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -\phi \end{pmatrix}.$$

Como los autovalores son negativos se deduce que este caso es estable y se descarta, por tanto, que tenga lugar una bifurcación de Hopf ni una bifurcación de Onda. Sustituyendo el punto crítico en (4.5) se obtiene:

$$J(k) = \begin{pmatrix} -1 - D_1 k^2 & 0 \\ 0 & -\phi - D_2 k^2 \end{pmatrix}.$$

Igual que en el caso sin difusión este caso es estable y no se produce bifurcación de Turing.

Casos II y III: $(u, v) = \left(\frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2 \mu}}{2\mu}, \frac{\mu \mp \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2 \mu}}{2\mu\phi} \right)$

En este caso en primer lugar se deben estudiar los distintos valores que pueden adoptar los parámetros de los que dependen u y v , ya que estas variables representan concentraciones y los valores negativos o imaginarios no tienen sentido. La naturaleza de esta solución depende de $\sqrt{\mu^2 - 4\phi^2 \mu}$ y las tres posibilidades que existen son:

- a) $\mu^2 - 4\phi^2 \mu = 0$: raíz doble real.
- b) $\mu^2 - 4\phi^2 \mu > 0$: dos raíces reales positivas.
- c) $\mu^2 - 4\phi^2 \mu < 0$: dos raíces imaginarias conjugadas (solución no válida).

Para el caso a) el punto crítico adopta el siguiente valor: $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\phi})$ y por tanto el Jacobiano (4.4) tiene la siguiente expresión:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -1 - \frac{\mu}{4\phi^2} & -\frac{\mu}{2\phi} \\ \frac{\mu}{4\phi^2} & \frac{\mu}{2\phi} - \phi \end{pmatrix}.$$

Además en este caso se puede sustituir $\mu = 4\phi^2$:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -2 & -2\phi \\ 1 & \phi \end{pmatrix}.$$

cuyos autovalores son 0 y $\phi - 2$. Con ello se deducen tres posibilidades, en caso de $\phi < 2$ el sistema es estable, en el caso contrario, es decir; $\phi > 2$

el sistema es inestable. Por último, puede darse que $\phi = 2 \Rightarrow \mu = 16$. En este punto es donde se produce el paso de sistema estable a inestable y se produce la bifurcación de Hopf.

Para el caso b) :

$$J(0) = \begin{pmatrix} \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2}}{2\phi} & 2\phi \\ \frac{\mu - 2\phi^2 + \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2}}{2\phi^2} & -3\phi \end{pmatrix}.$$

Si en esta matriz se sustituye la condición: $\phi = \mu v$ se obtiene la siguiente matriz con la que se va a trabajar:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -1 - \mu v^2 & -2\phi \\ \mu v^2 & \phi \end{pmatrix}.$$

Se calculan la traza y el determinante:

$$\begin{aligned} tr(0) &= -1 - \mu v^2 + \phi, \\ det(0) &= \phi(1 - \mu v^2) + 2\phi\mu v^2 = \phi(\mu v^2 - 1). \end{aligned}$$

En primer lugar se estudia el determinante para el caso de $v = \frac{\mu - \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu}}{2\mu\phi}$. En el $det(0)$, ϕ siempre será positivo, por lo que el signo de este dependerá del valor de $\mu v^2 - 1$. Sustituyendo el valor de v se obtiene lo siguiente:

$$\mu v^2 - 1 = \frac{\mu - 4\phi^2 - \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2}}{2\phi^2}.$$

El denominador siempre será positivo por lo que el resultado positivo o negativo depende del numerador. Para estudiar su signo se supondrá que es negativo:

$$\begin{aligned} \mu - 4\phi^2 - \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2} &< 0, \\ (\mu - 4\phi^2)^2 &< (\sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2})^2, \\ \mu^2 - 8\mu\phi^2 + 16\phi^4 &< \mu^2 - 4\mu\phi^2, \\ \mu &> 4\phi^2. \end{aligned}$$

Como se llega al supuesto inicial, se verifica la hipótesis inicial y por tanto $det(0) < 0$ y el caso es inestable. Por este motivo, para este caso no se estudiará la aparición de bifurcaciones.

En segundo lugar se estudiará el caso de $v = \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu}}{2\mu\phi}$, por lo que sustituyendo en la expresión antes mencionada se obtiene la siguiente expresión:

$$\mu v^2 - 1 = \frac{\mu - 4\phi^2 + \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2}}{2\phi^2}.$$

Igual que en el caso anterior se supone que el denominador es negativo:

$$\begin{aligned}\mu - 4\phi^2 + \sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2} &< 0, \\ (\sqrt{\mu^2 - 4\mu\phi^2})^2 &< (4\phi^2 - \mu)^2, \\ \mu^2 - 4\mu\phi^2 &< \mu^2 - 8\mu\phi^2 + 16\phi^4, \\ \mu &< 4\phi^2.\end{aligned}$$

Con esto se llega a un absurdo ya que la desigualdad final es opuesta a la hipótesis inicial. Esto indica que el supuesto de que el numerador es negativo es incorrecto y por tanto $\det(0) > 0$. Para este caso es posible la aparición de bifurcaciones y por ello a continuación se va a estudiar el valor de la traza en 0.

$$tr(0) = -1 - \mu v^2 + \phi = \frac{-\mu + 2\phi^3 - \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu}}{2\phi^2}.$$

Para que se de una bifurcación de Hopf se debe cumplir $tr(0)=0$ por lo que se debe cumplir la siguiente condición:

$$-\mu + 2\phi^3 - \sqrt{\mu^2 - 4\phi^2\mu} = 0 \Rightarrow \mu_H = \frac{\phi^4}{\phi - 1}.$$

4.4. Simulación del problema con MATLAB

Con el objetivo de comprobar gráficamente las deducciones hechas analíticamente en el apartado anterior, además de proporcionar una solución numérica al problema se han llevado a cabo una serie de simulaciones siguiendo el procedimiento indicado en el Capítulo Método de Líneas. En este caso se han realizado simulaciones tanto en una como en dos dimensiones espaciales.

4.4.1. Simulaciones en 1D

Para estudiar el sistema en primer lugar se han realizado simulaciones en una dimensión espacial. Para ello se ha programado el correspondiente código

en MATLAB con el objetivo de finalizar representando la solución numérica obtenida tras múltiples iteraciones.

En primer lugar se va a analizar el comportamiento espacio-temporal de los sistemas de reactores sin agitación de flujo continuo. Para ello se van a comparar sistemas con μ mayor, menor e igual que μ_H .

Los sistemas con $\mu < \mu_H$ que parten de un sistema inestable pueden comportarse de dos maneras, ambas comenzando con la vuelta a la estabilidad tras la perturbación. En esta vuelta al punto estable pueden darse dos situaciones: que se estabilice el sistema o bien que se sostenga el comportamiento espacio temporal gracias a la autocatálisis. Esto quiere decir que los estados inestables adyacentes a estados estables los reactivan propagando las ondas de reacción difusión como se puede ver en las siguientes figuras.

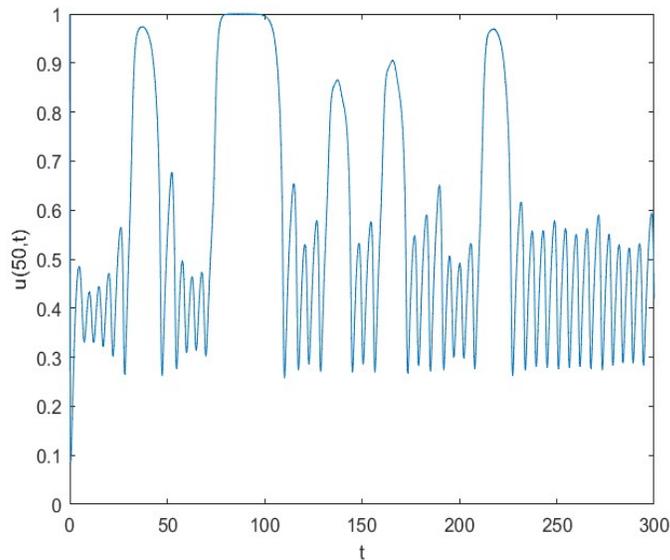


Figura 4.1: Respuesta caótica con parámetros $\phi=2.8$ y $\mu=33.3$

En este caso el valor de μ es ligeramente menor que el de μ_H mientras que en el siguiente existe una mayor diferencia, por ello, como se puede observar el comportamiento es ligeramente distinto ya que en el segundo caso el sistema presenta una mayor simetría en las oscilaciones mientras que en el primero el comportamiento es más caótico. Esto se debe a que al estar más cerca del punto de bifurcación de Hopf el sistema se aleja más de la simetría temporal.

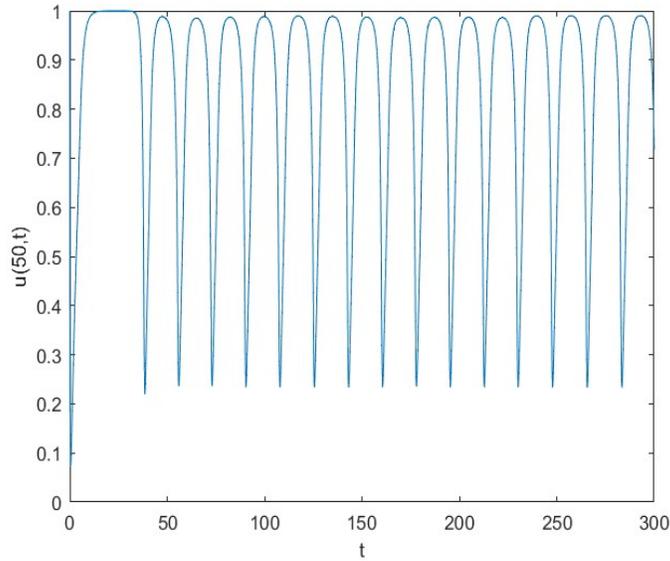


Figura 4.2: Respuesta caótica con parámetros $\phi=3$ y $\mu=38$

Para los casos en los que $\mu = \mu_H$ se produce una bifurcación de Hopf pura y también se han observado dos tipos de respuestas distintas. La primera es la que se alcanza el punto estable y no se sufren más perturbaciones por lo que el sistema se mantiene estabilizado, y la segunda es la que se dan oscilaciones con saltos menos bruscos que los estudiados en el caso anterior.

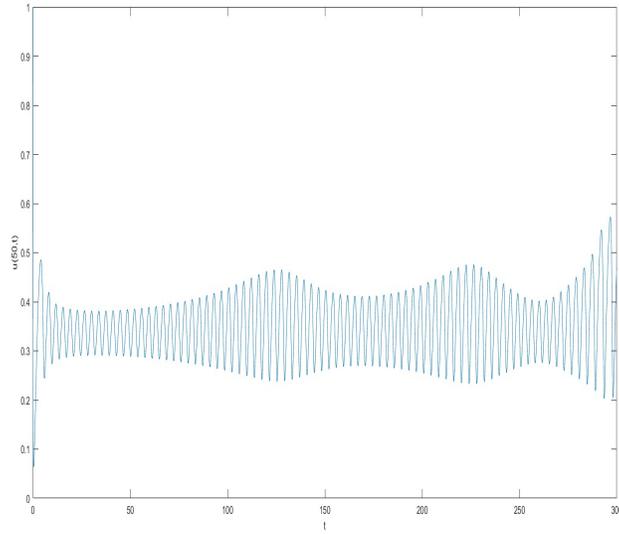


Figura 4.3: Respuesta caótica con parámetros $\phi=3$ y $\mu=40.5$

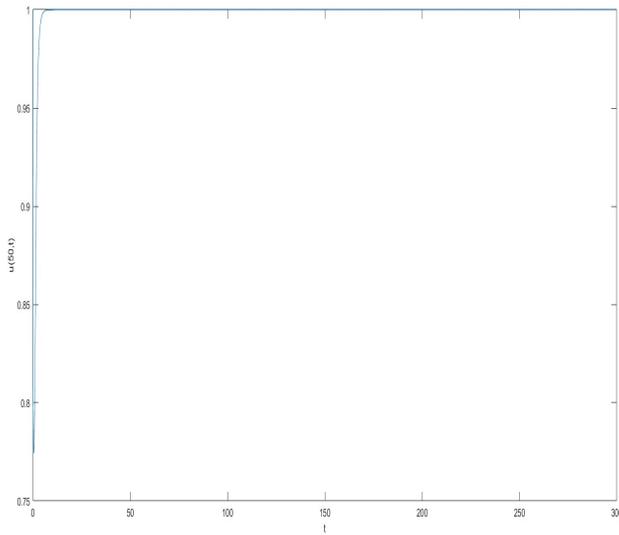


Figura 4.4: Respuesta de frente de onda con parámetros $\phi=2$ y $\mu=16$

Por otro lado, se ha estudiado la evolución espacio temporal del sistema representando la interacción entre sus variables, es decir, entre las dos especies en competencia. La zona azul se corresponde con aquellas áreas donde la concentración del reactivo u es menor y por tanto mayor es la de v quien provoca la autocatálisis. Mientras que las zonas amarillas se corresponden con la casi extinción del reactivo v y por tanto son más cercanas al punto de equilibrio. En este caso se han estudiado también sistemas con μ cercano a la bifurcación de Hopf, alejado del μ_H e igual a este. En aquellos sistemas donde μ está muy alejado de la bifurcación de Hopf, el comportamiento es más inestable, como se puede ver en las siguientes figuras:

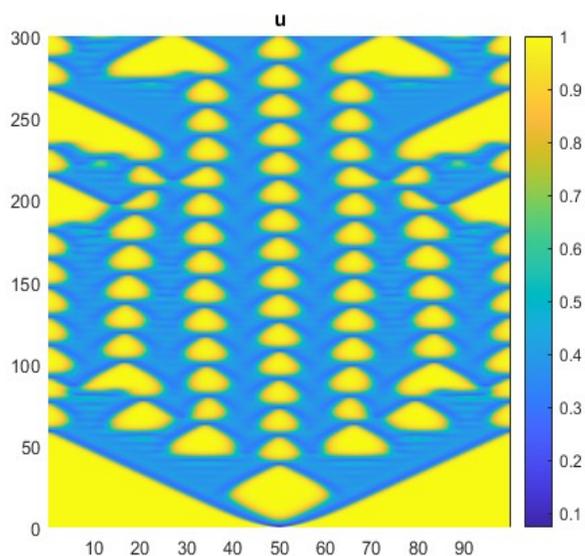


Figura 4.5: Patrones espacio temporales para la evolución de la concentración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=40$

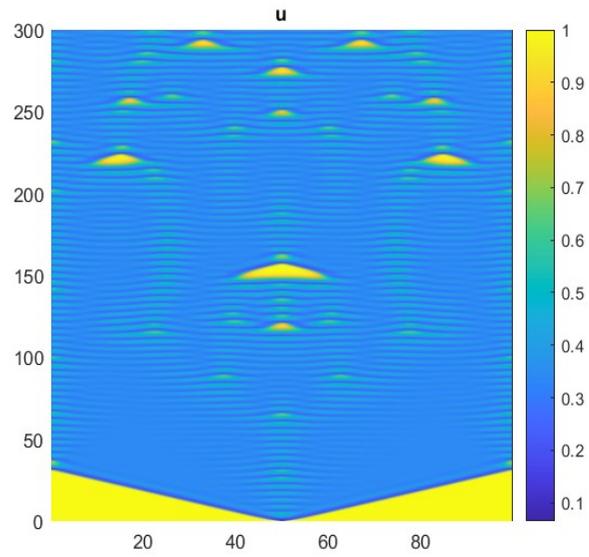


Figura 4.6: Patrones espacio temporales para la evolución de la concentración de las especies en la región caótica $\phi=2.8$ y $\mu=33.3$

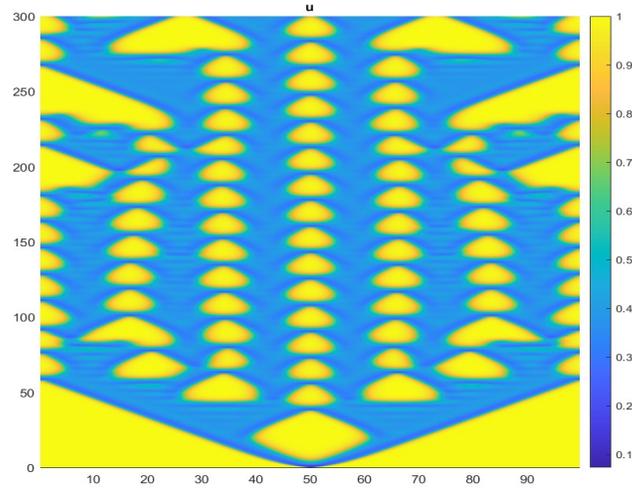


Figura 4.7: Patrones espacio temporales para la evolución de la concentración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=38$

Para aquellos casos donde se está más cerca del punto de bifurcación de Hopf el sistema rápidamente se vuelve estable, obteniéndose un patrón plano que representa la extinción de la especie v para los casos cercanos a μ_H y la extinción de u para los casos $\mu = \mu_H$.

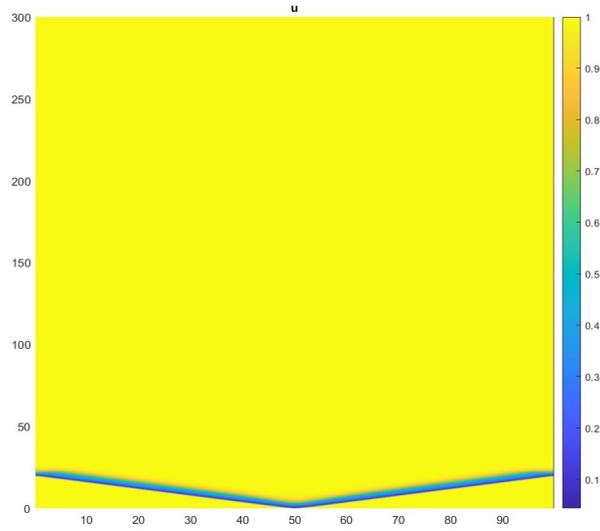


Figura 4.8: Patrones espacio temporales para la evolución de la concentración de las especies en la región caótica $\phi=3.4$ y $\mu=53$

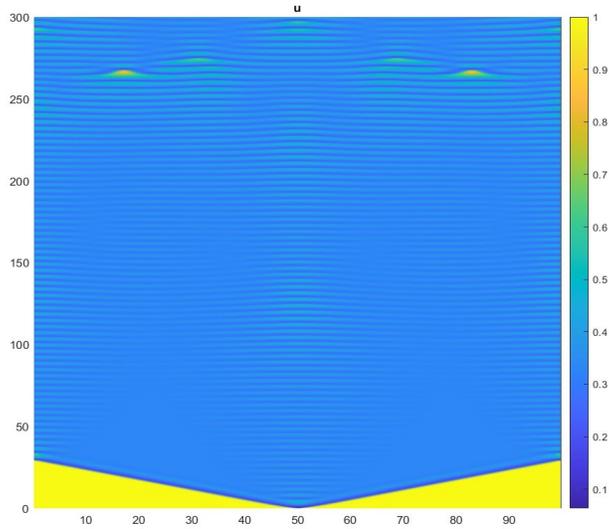


Figura 4.9: Patrones espacio temporales para la evolución de la concentración de las especies en la región caótica $\phi=3$ y $\mu=40.5$

Con el objetivo de comprobar que los resultados no son consecuencia de las restricciones asociadas a la simulación en una dimensión espacial se han realizado simulaciones en dos dimensiones.

4.4.2. Simulaciones en 2D

Para trabajar en dos dimensiones espaciales ha sido necesario fijar una rejilla de dimensiones 100×100 . Para la simulación de los casos de estudio el código de MATLAB utilizado ha sido similar al usado en una dimensión, con las adaptaciones necesarias para poder simular con las nuevas condiciones. Estas incluyen la matriz de discretización en 2D explicada en el Capítulo Método de Líneas y los distintos comandos para dibujar las gráficas.

En primer lugar se ha representado la situación inicial tanto para el reactivo u como el v , obteniéndose las siguientes gráficas:

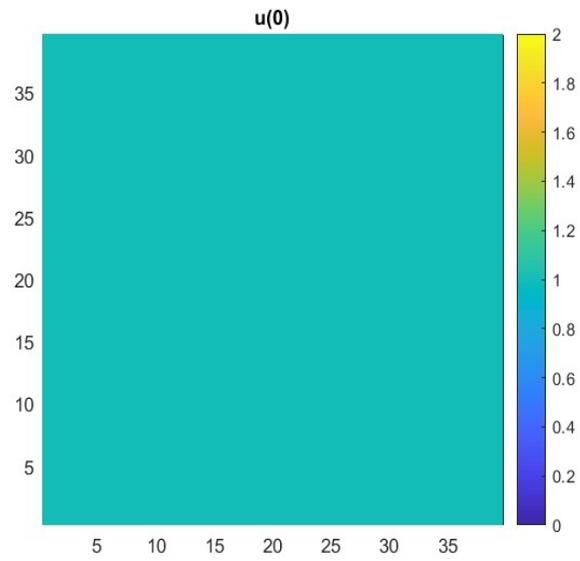


Figura 4.10: Patrón en el instante inicial para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

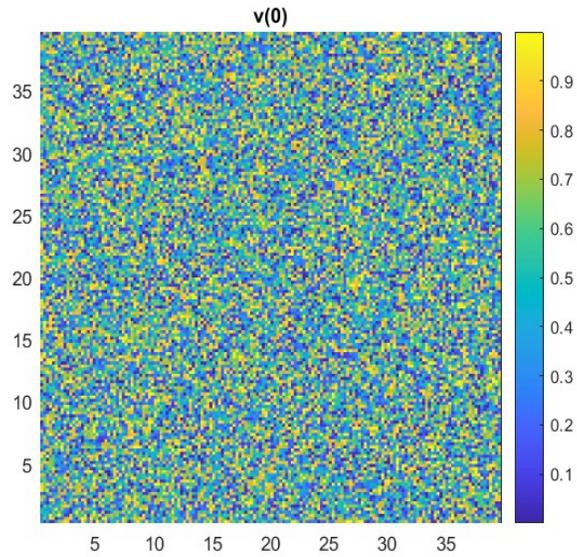


Figura 4.11: Patrón en el instante inicial para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

Como se puede observar la concentración inicial del reactivo u es 1 por lo que el patrón es plano o liso, mientras que para el reactivo v se ha introducido una concentración inicial de cero a la que se le ha sumado una pequeña perturbación aleatoria por lo que el patrón inicial que se muestra es caótico.

A partir de este punto inicial se van a estudiar distintos casos variando los distintos parámetros. Estos se han escogido de manera que se estudien aquellos puntos por encima, por debajo y en el punto de bifurcación de Hopf. Para el caso en el que $\mu = \mu_H$ se han obtenido las siguientes gráficas:

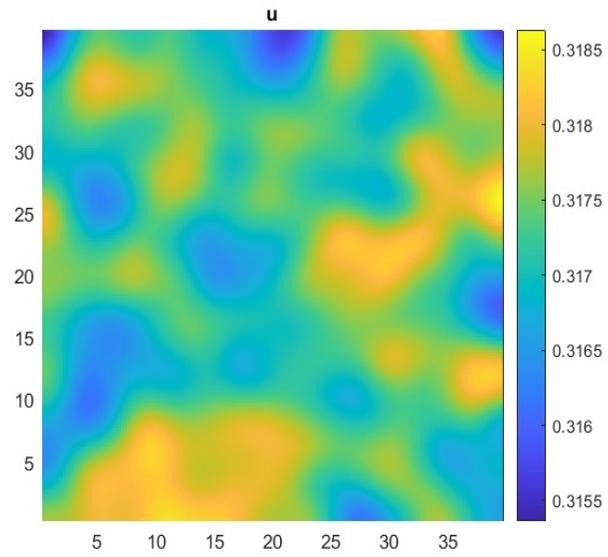


Figura 4.12: Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

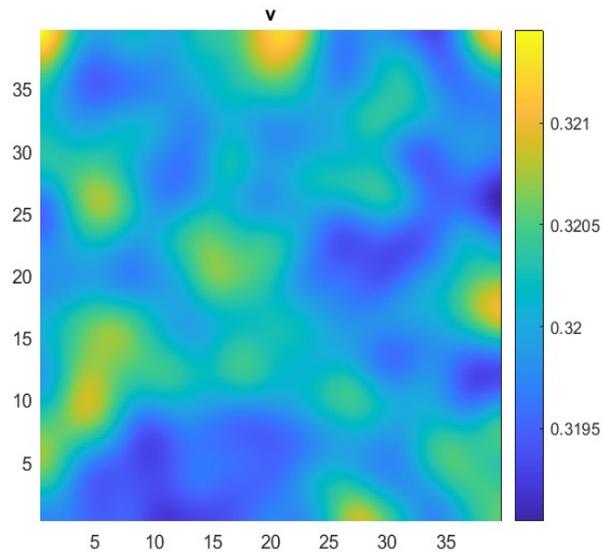


Figura 4.13: Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

En este primer instante de simulación se puede observar como empiezan a distribuirse las concentraciones de los distintos reactivos. Mientras que el reactivo u muestra grandes zonas amarillas que representan la inestabilidad, el reactivo v tiene grandes zonas coloreadas de azul, lo que representa los lugares donde la reacción se ha extinguido y por tanto se aproxima al punto estable $(1,0)$. Si se continúa simulando aumentando el tiempo se ve cómo esto cambia y el reactivo u es quien cada vez se aproxima más al punto estable y el reactivo v cada vez se aleja más. Esto se debe a que las pequeñas zonas amarillas que se ven en esta primera gráfica son puntos inestables que están generando nuevas reacciones trasladando su efecto a las partículas próximas de manera que el efecto acaba extendiéndose reinyectándose la inestabilidad.

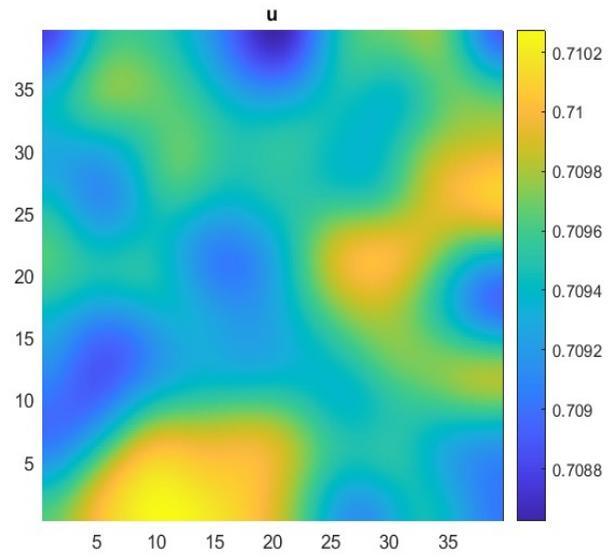


Figura 4.14: Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

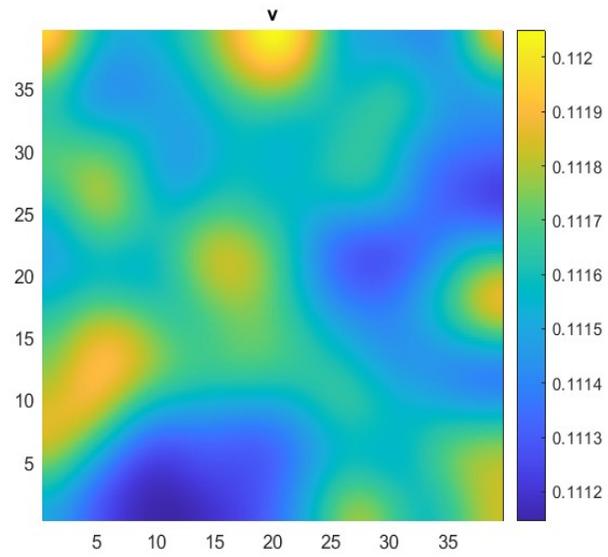


Figura 4.15: Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

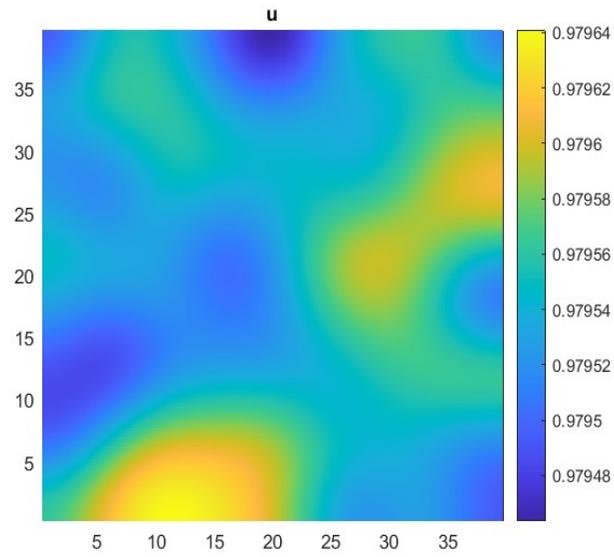


Figura 4.16: Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo u con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

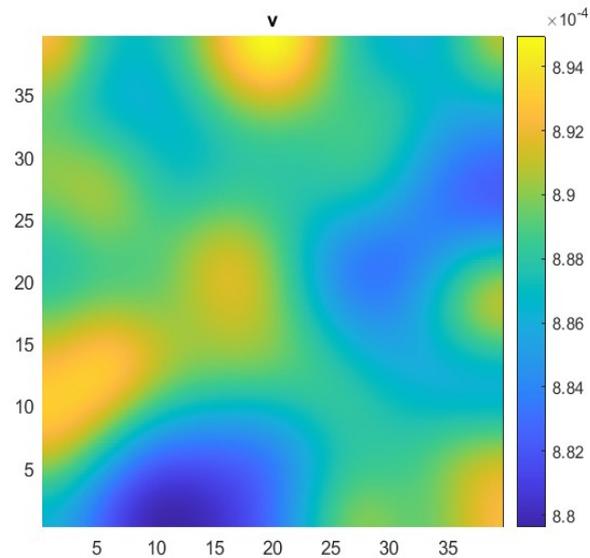


Figura 4.17: Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 16$, $\mu = 2$.

Es importante subrayar que, como cabe esperar las zonas sin reacción en el reactivo u coinciden con aquellas donde sí se está produciendo la reacción para v .

A continuación, se ha reducido el valor de la variable temporal para observar qué sucede en los primeros instantes de la reacción. Además se ha simulado un punto próximo a la bifurcación de Hopf. En este caso solo se mostrarán las gráficas del reactivo u ya que como se ha demostrado para el caso anterior, los patrones que aparecen son paralelos.

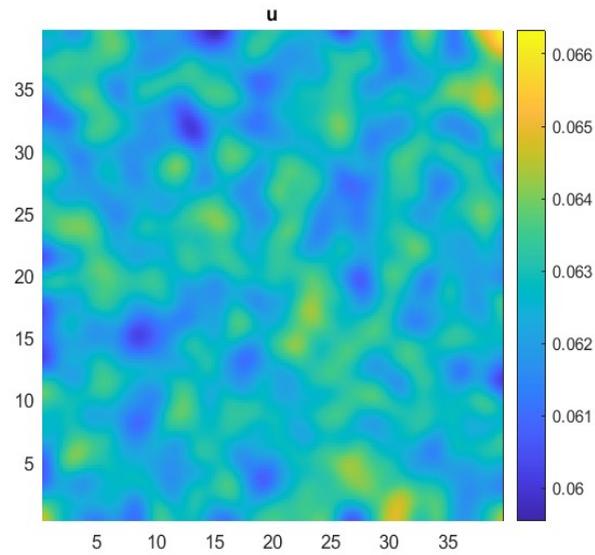


Figura 4.18: Patrón en el instante $t = 0,5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$.

En los primeros instantes se observa que la reacción comienza a suceder en diferentes puntos expandiéndose de manera circular en la mayoría de los casos. Pero como se ha indicado anteriormente el sistema busca volver al punto estable representado por el color azul como se muestra en las siguientes figuras.

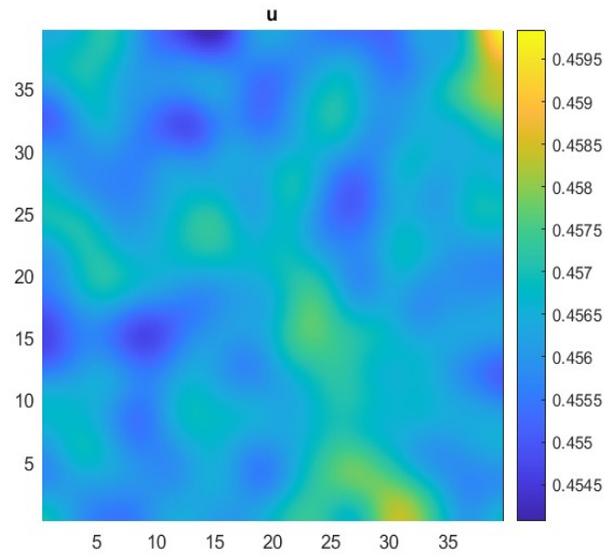


Figura 4.19: Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$.

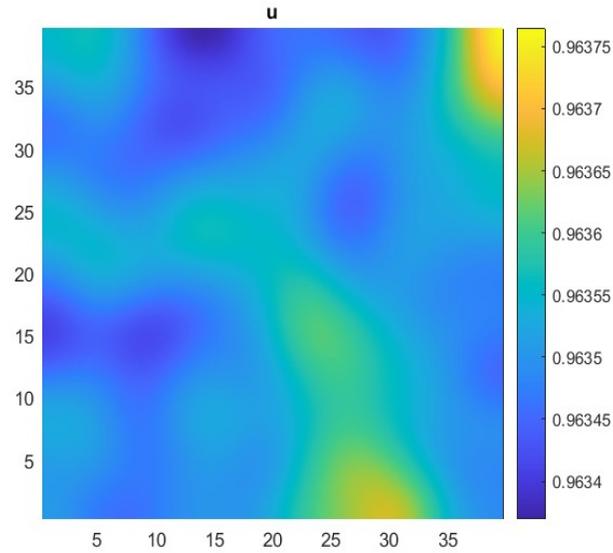


Figura 4.20: Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$.

Debido a que en ningún momento se alcanza la estabilidad completa del sistema, las zonas de reacción siempre reinyectan el sistema obteniéndose figuras como las ya mencionadas anteriormente en figuras como (4.16), (4.17).

Para puntos por encima de la bifurcación de Hopf, es decir $\mu > \mu_H$ se observa que el aumento de las zonas de reacción se realiza de manera menos uniforme y más concentrada en un punto que se va expandiendo aumentando su radio.

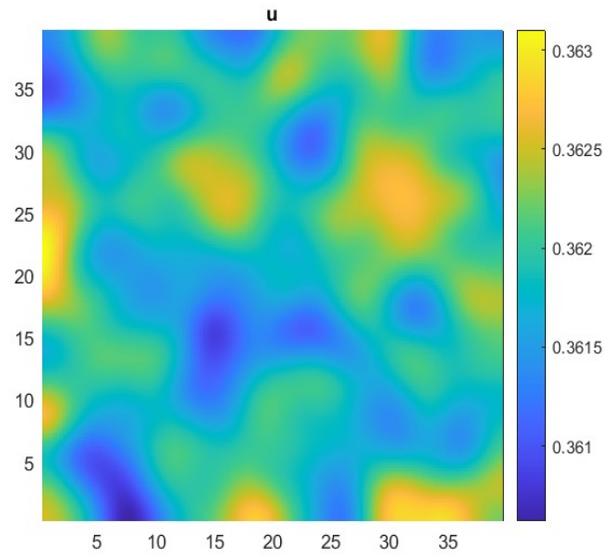


Figura 4.21: Patrón en el instante $t = 2$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 44$.

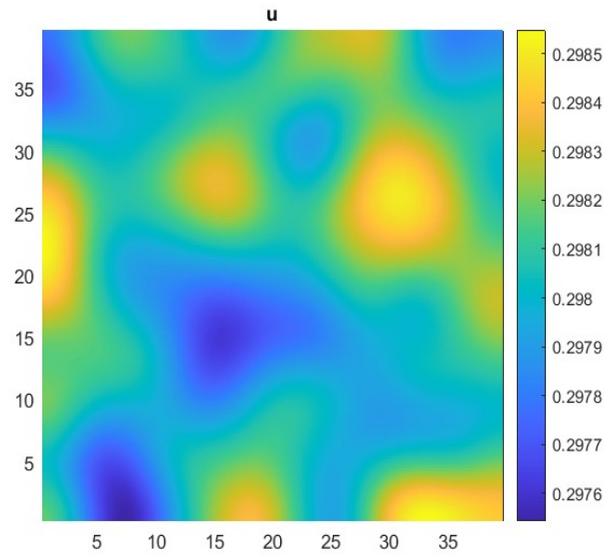


Figura 4.22: Patrón en el instante $t = 5$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 44$.

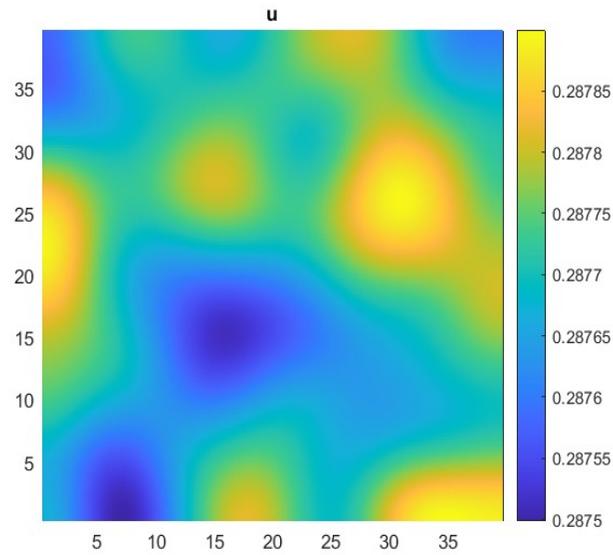


Figura 4.23: Patrón en el instante $t = 8$ para el reactivo v con los parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 44$.

Para entender estas diferencias de comportamiento se han dibujado los mapas de fase de todos ellos. Estos mapas de fases representan la evolución temporal de la concentración de reactivos u y v en un punto fijo en el espacio. El punto rojo representa la posición inicial y el azul la final.

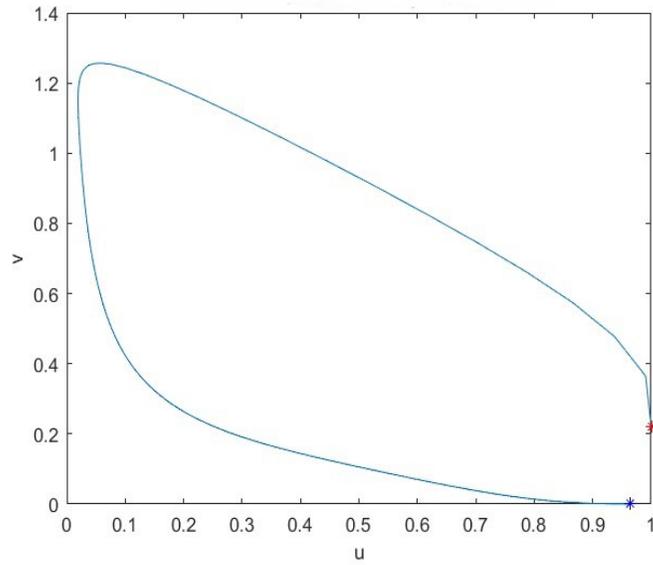


Figura 4.24: Mapa de fases para un sistema con $\mu < \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$).

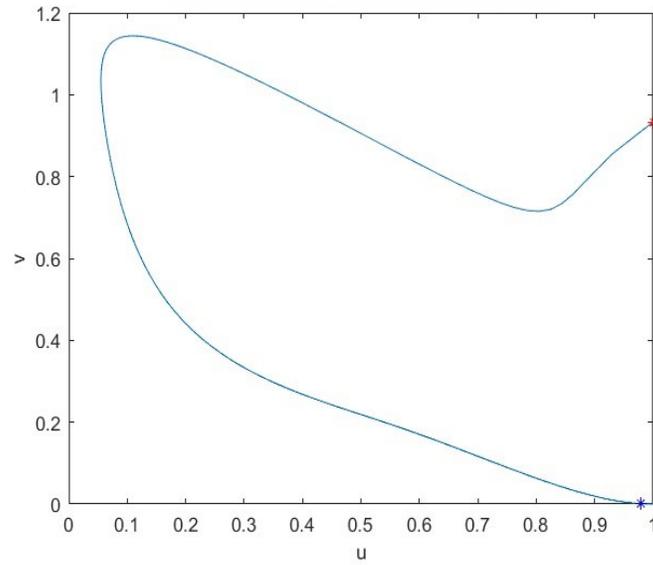


Figura 4.25: Mapa de fases para un sistema con $\mu = \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 2$, $\mu = 16$).

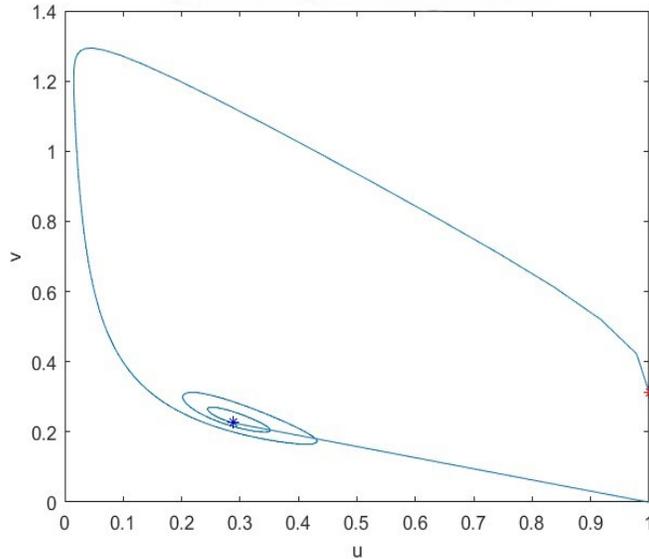


Figura 4.26: Mapa de fases para un sistema con $\mu > \mu_H$. (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 44$).

Como se puede ver, el comportamiento del sistema en puntos cercanos pero menores a la bifurcación de Hopf y aquellos donde se da esta es similar. Sin embargo, para puntos con μ superior a μ_H el comportamiento es bastante diferente ya que antes de volver al punto estable donde ha desaparecido todo el reactivo v presenta un comportamiento más oscilatorio en cuanto a las concentraciones. Es por esto que las figuras (4.21), (4.22) y (4.23) son distintas a las anteriores y su evolución temporal también lo es. Además esto explica por qué en este caso la distribución espacial es más equitativa ya que como se ve en la figura (4.26) la concentración de ambos reactivos es similar. A pesar de las diferencias nombradas, para todos los casos se demuestra que la bifurcación de Hopf produce un comportamiento asimétrico temporalmente. Por último, se ha representado la evolución temporal que sufren un punto fijado de u y de v :

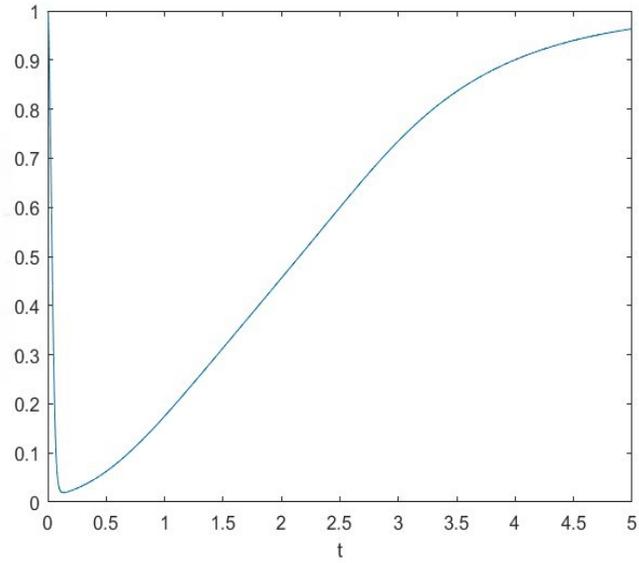


Figura 4.27: Evolución temporal de un punto fijo de u . (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$).

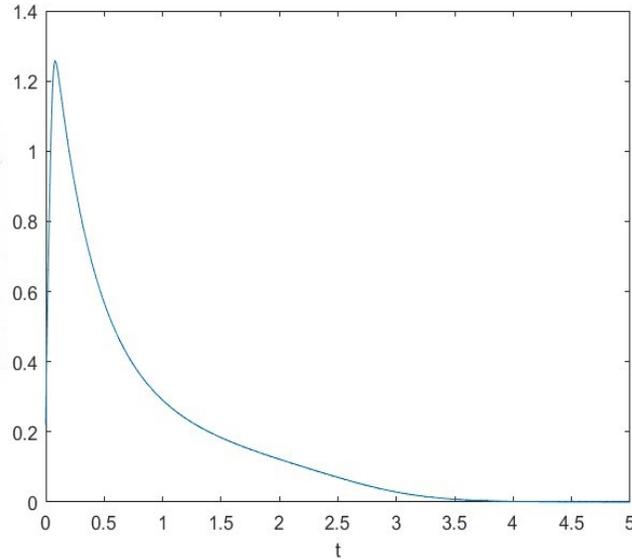


Figura 4.28: Evolución temporal de un punto fijo de v . (Parámetros: $D_1 = D_2 = 1$, $\phi = 3$, $\mu = 38$).

En ellas se puede ver como los reactivos u y v sufren comportamientos opuestos y que el aumento de la concentración de uno de ellos supone la reducción del contrario.

4.5. Conclusiones

En vistas de todo lo anterior se puede concluir en primer lugar que el comportamiento de los reactivos en el reactor será caótico para puntos tanto por encima como por debajo de la bifurcación de Hopf. Otro de los aspectos más importantes a considerar es la gran sensibilidad demostrada por el sistema ante las condiciones iniciales, ya que estas condicionan la mayor parte de la respuesta. Y en cuanto a la respuesta, es importante destacar el hecho de que esta pierde la correlación espacio temporal como se ha demostrado en las distintas simulaciones. Por último, el aspecto más revelador de las simulaciones es el modo de realimentación del sistema, es decir, la forma en la que la evolución del sistema se mantiene gracias a frentes de onda que inducen la dependencia espacial a una fase inestable u oscilatoria. Gracias a estos

frentes de onda el sistema se desestabiliza de manera local, trasladando la perturbación a las zonas contiguas.

En cuanto a las consecuencias implícitas de este funcionamiento en el sistema de estudio destaca la última mencionada ya que gracias a la capacidad del propio sistema de prolongar su actividad en el tiempo de manera indefinida sin necesidad de cambiar las condiciones de la reacción o la cantidad de reactivo. Esto tiene como consecuencia un gran abaratamiento del proceso ya que reduce la cantidad de reactivos necesitada por ejemplo. Además, actualmente la búsqueda de formas de energía más verdes y más respetuosas con el medio ambiente es prioritaria. Por ello, comprender de manera precisa la forma de trabajo de estos reactores es fundamental ya que al contrario que los reactores de tanque agitado, los de flujo continuo presentan ventajas significativas en cuanto al proceso. Algunas de estas incluyen un mejor manejo térmico, un mayor control de las mezclas y la aplicación de condiciones extremas. Gracias a todas ellas, los procesos sintéticos se pueden intensificar reduciendo el volumen de disolvente empleado mientras se mantiene el control sobre la temperatura de la reacción. Esto no es solo beneficioso en el plano productivo sino que contribuye en el avance hacia una química más verde ya que reduce la creación de residuos y economiza el uso de materiales ya que gracias al estudio de la interacción entre reactivos se puede potenciar la máxima incorporación de los reactivos en el producto final [36].

Capítulo 5

Caso II: Complejidad espacio-temporal de sistemas radio-dependientes depredador-presa

5.1. Introducción

La ecología es la rama de la biología que estudia las relaciones de los organismos entre ellos y con el entorno. Un caso particular de esta interacción, en el que se basa este estudio, es la relación entre depredadores y presas en competencia de recursos. Esta interacción se puede ver influida por diversos factores tales como las variaciones medioambientales o la localización demográfica del entorno donde se relacionan [37]. Estas interacciones tienen lugar en un amplio rango de valores espacio-temporales, y la dinámica de predación afecta enormemente a las poblaciones. Es por ello que el estudio de estos sistemas ha estado en el foco de las investigaciones ecológicas desde los comienzos en el aprendizaje de esta disciplina. Con los años y tras numerosos estudios se puede concluir que los sistemas depredador-presa pueden mostrar comportamientos estacionarios, oscilatorios o caóticos dependiendo de los valores de los parámetros del modelo [38].

Las ecuaciones que modelan estos sucesos deben su nombre a dos científicos: Lotka y Volterra. A pesar de haber vivido en países distintos y haber tenido distintas trayectorias tanto vitales como laborales, sus vidas se han

visto altamente entrelazadas debido a su interés y resultados en el modelado matemático. En concreto su trabajo se solapó gracias a la discusión de las interacciones depredador-presa. Ambos llegaron a la misma conclusión y es que la interacción entre las dos especies daría lugar a oscilaciones periódicas en sus poblaciones. Es por ello que las ecuaciones que modelan los sistemas de solución periódica se denominan ecuaciones de Lotka-Volterra [39].

Para comprender las ecuaciones del modelo Lotka-Volterra en primer lugar hay que estudiar el modelado del crecimiento de una sola población. Para ello, la mayoría de los modelos descienden directamente del modelo de crecimiento malthusiano. Este propone que el ratio de crecimiento de la población es directamente proporcional al tamaño de la población.

$$\frac{du}{dt} = ru, \quad (5.1)$$

donde u representa el número de miembros en la población y r es una constante que indica el ratio de crecimiento. Usando esta ecuación se está asumiendo que el ratio de crecimiento es independiente del tamaño de la población. Para corregir este hecho, se descomponer de manera que cumpla $r = (b - d)$ donde b es el ratio de nacimiento y d el de fallecimiento. De esta manera, la constante r se convierte en el ratio intrínseco del crecimiento natural, el cual es una propiedad de las especies. Debido a que el crecimiento de la población depende tanto de la genética de la especie como de la calidad ambiental, no se puede asumir que este ratio sea específico de una especie o población, sino que es único para cada experimento [40].

Asumiendo que el ratio de nacimiento por individuo se mantiene constante, mientras que el ratio de muerte por individuo es directamente proporcional a la población existente entonces se obtiene la siguiente ecuación [39]

$$\frac{du}{dt} = (b - du)u,$$

donde b y d son constantes y positivas. Para escribir la ecuación de manera más sencilla, se saca factor común a b

$$\frac{du}{dt} = (1 - \frac{d}{b}u)ub,$$

e introduciendo el parámetro $k = \frac{b}{d}$ se reescribe como

$$\frac{du}{dt} = (1 - \frac{u}{k})ub. \quad (5.2)$$

La ecuación (5.2) es una ecuación de Bernouilli y suponiendo que $u(0) = u_0$ su solución es

$$u(t) = \frac{ku_0}{u_0 + (k - u_0)e^{-bt}}.$$

Para el caso del modelo Lotka-Volterra, en lugar de una sola especie se tienen dos especies interactuando entre sí. Una de las cuales, el depredador, se alimenta de la otra, la presa, quien se alimenta de otra comida disponible alrededor. Las asunciones que se hacen sobre el entorno y la evolución de las poblaciones son las siguientes [39]:

- La población presa tiene abastecimiento de alimento ilimitado.
- En ausencia de depredadores, la población de las presas crece de manera proporcional a su tamaño, igual que se ha explicado en la ecuación (5.1). Al coeficiente de crecimiento en este caso se le denomina coeficiente de autocrecimiento.
- En ausencia de presas, la población depredadora disminuirá proporcionalmente su tamaño siguiendo una ecuación similar a la del caso anterior

$$\frac{dv}{dt} = -sv,$$

solo que en este caso, al ser un crecimiento negativo, termina con la extinción de la especie.

- Cuando están depredadores y presas ambos presentes, tendrá lugar un decrecimiento en la población de presas y un crecimiento en el de depredadores que será proporcional a la frecuencia de encuentros entre ambas especies.

Además de esto, se considera que los modelos depredador-presa siguen dos principios generales: la dinámica poblacional se puede descomponer en procesos de nacimiento y muerte, y el principio de conservación de la masa, por el que se sabe que los depredadores pueden crecer solamente en base a lo que han comido, se puede modelar el sistema de la siguiente manera [7]

$$\begin{aligned}\dot{u}(t) &= ug(u) - f(u, v)v - \mu_u(u)u, \\ \dot{v}(t) &= \gamma f(u, v)v - \mu_v(v)v,\end{aligned}$$

donde t representa el tiempo, u y v la densidad de población de presas y depredadores respectivamente, $g(u)$ es el crecimiento per capita de las presas

en ausencia de depredadores, μ_u y μ_v la mortalidad natural de presas y depredadores respectivamente, $f(u, v)$ es la respuesta funcional y $\gamma f(u, v)$ es la producción de depredadores como consecuencia de la depredación. A este último parámetro habitualmente se le conoce como respuesta numérica. En este caso, se va a considerar la depredación el motivo mayoritario para la muerte de las presas por lo que, mientras exista población depredadora se puede asumir $\mu_u = 0$. En las dinámicas poblacionales, la respuesta funcional de la densidad de depredadores hacia la de presas se refiere al cambio en la densidad de la presa por unidad de tiempo y de depredadores relacionado con los cambios de densidad de la población depredadora [41].

La respuesta funcional, $f(u, v)$, se puede clasificar en tres categorías. La primera de ellas es la dependiente de la presa, la cual se da cuando solamente la densidad de presas determina la respuesta. La segunda es la que depende de los depredadores, por lo que ambas poblaciones, depredadora y presa, influyen en la respuesta. De manera particular, cuando $f(u, v) = p(\frac{u}{v})$ el modelo se denomina estrictamente ratio-dependiente. Estos modelos sugieren que el ratio de presas por depredador disminuye impulsado por el aumento de la población de depredadores [42]. Y por último, la dependiente multiespecie que tiene lugar cuando una especie, distinta del depredador y la presa en estudio, influye en la respuesta [43].

Particularizando en los sistemas depredador-presa ratio dependientes, los distintos sistemas se pueden clasificar en dos predicciones principales: (a) la abundancia de equilibrio está correlacionada positivamente con el gradiente de enriquecimiento y (b) la “paradoja del enriquecimiento” la cual consiste o en la completa desaparición o en la asociación del enriquecimiento con la estabilidad de una manera más compleja. Estas diferencias se deben a que se dice que no se puede explicar la existencia de sistemas estables con bajas densidades de población de presas o el fracaso del enriquecimiento como el único motivo para desestabilizar los sistemas depredador-presa [42].

Por último, destacar la importancia del estudio de patrones en la ecología. Estos ayudan a comprender la evolución de la distribución espacial de las poblaciones, tal y como se ve en [44], donde se estudia la dinámica entre el placton y los peces. También resulta muy interesante en el estudio de las plantas ya que la distribución espacial de estas juega un papel esencial en sus dinámicas [45].

5.2. Adimensionalización de ecuaciones

En este problema, el estudio se va a centrar en un sistema ratio-dependiente depredador-presa con una respuesta funcional del tipo Michaelis-Menten (o Michaelis-Menten-Holling). En general, los organismos muestran una de las siguientes respuestas funcionales [46]:

- Tipo I, característica de aquellos animales que consumen la comida en un ratio proporcional al ratio de encuentro de comida, hasta un nivel de saturación a partir del cual no hay cambios en el ratio de alimentación a pesar de un aumento en la densidad de comida.
- Tipo II: aquellos organismos que toman cierto tiempo para la ingesta y captura de su comida.
- Tipo III: aquellas especies que muestran algún tipo de aprendizaje conductual, gracias al cual bajo un cierto nivel de umbral de densidad, las especies no utilizarán la presa como alimento con una gran intensidad.

Holling razonó que la tendencia animal es tanto aprender despacio como olvidar el valor de la comida, a no ser que se la encuentren lo suficientemente a menudo. Por consiguiente, cuando un alimento habitual escasea, este será comido proporcionalmente de manera menos frecuente y una disminución aparecerá en la respuesta funcional. Esta la modeló de la siguiente manera

$$u_A = \frac{\alpha T_t u_0}{1 + \alpha T_h u_0},$$

donde u_A es la cantidad de comida consumida, u_0 la cantidad de comida ofrecida, T_t el tiempo total que el animal requiere para comer y T_h el tiempo requerido para sostener un elemento de comida y α es una constante proporcional relacionada con el ratio de ataque [46].

Por tanto, el sistema de ecuaciones de estudio es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{u}}{\partial \tau} &= r \left(1 - \frac{\hat{u}}{K}\right) \hat{u} - \frac{\alpha \hat{u}}{\hat{v} + \alpha h \hat{u}} \hat{v} + \hat{D}_1 \Delta \hat{u}, \\ \frac{\partial \hat{v}}{\partial \tau} &= \gamma \frac{\alpha \hat{u}}{\hat{v} + \alpha h \hat{u}} P - \mu \hat{v} + \hat{D}_2 \Delta \hat{v}, \end{aligned}$$

donde \hat{u} y \hat{v} representan la densidad de población de presa y depredador respectivamente, por lo que son parámetros positivos siempre. \hat{D}_1 y \hat{D}_2 son

los coeficientes de difusión y Δ es el operador laplaciano en dos dimensiones espaciales. El resto de parámetros son constantes positivas, r representa el ratio máximo de crecimiento de la presa, γ la eficiencia de la conversión, μ el ratio de muerte de los depredadores, K la capacidad de carga, α el ratio de captura y h el tiempo de proceso.

Igual que en el problema anterior, el primer paso para estudiar el sistema será adimensionalizar las ecuaciones. Para ello se escogen los siguientes parámetros adimensionales

$$\begin{aligned} u &= \frac{\alpha h \hat{u}}{\gamma K}, \\ v &= \frac{\alpha h \hat{v}}{\gamma^2 K}, \\ t &= \frac{\gamma \tau}{h}. \end{aligned}$$

Para la primera ecuación, tras introducir los parámetros adimensionales y separarlos de aquellos dimensionales reorganizando la ecuación se obtiene:

$$\left(\frac{\gamma^2 K}{\alpha h^2}\right) \frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{r \gamma K}{\alpha h}\right) u - \left(\frac{r \gamma^2 K}{(\alpha h)^2}\right) u^2 - \frac{\gamma^2 K}{h} \left(\frac{1}{\gamma v + \alpha h u}\right) uv.$$

Para que esta ecuación dependa tan solo de los parámetros adimensionales se dividen todos los términos entre paréntesis por $\frac{\gamma^2 K}{\alpha h^2}$ ya que así la variación poblacional en el tiempo queda multiplicada por uno. Se obtiene así la primera ecuación adimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t} = R \left(1 - \frac{u}{S}\right) u - \frac{S u}{v + S u} v + D_1 \Delta u, \quad (5.3)$$

cuyos parámetros adimensionales son:

$$\begin{aligned} R &= \frac{r h}{\gamma}, \\ S &= \frac{\alpha h}{\gamma}, \end{aligned}$$

y representan el ratio de crecimiento de la presa y el ratio de captura.

Para la segunda ecuación el proceso es el mismo:

$$\left(\frac{\gamma^3 K}{\alpha h^2}\right) \frac{\partial v}{\partial t} = \left(\frac{\gamma^3 \alpha K}{\alpha h}\right) \left(\frac{1}{\gamma v + \alpha h u}\right) uv - \left(\frac{\mu \gamma^2 K}{\alpha h}\right) v + D_2 \Delta v.$$

Dividiendo todos los términos entre $\frac{\gamma^3 K}{\alpha k^2}$:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{Su}{v + Su}v - Qv + D_2\Delta v, \quad (5.4)$$

donde el parámetro adimensional además de los anteriores es:

$$Q = \frac{\mu h}{\gamma},$$

el cual representa el ratio de muerte del depredador.

5.3. Análisis bifurcaciones

5.3.1. Cálculo de puntos críticos

Para el cálculo de los puntos críticos sin difusión, igual que en el problema anterior, se igualan a cero las funciones correspondientes a la reacción $f(u, v)$ de la ecuación (5.3) y $g(u, v)$ de la ecuación (5.4).

$$f(u, v) = R\left(1 - \frac{u}{S}\right)u - \frac{Su}{v + Su}v = 0, \quad (5.5)$$

$$g(u, v) = \frac{Su}{v + Su}v - Qv = 0. \quad (5.6)$$

Despejando de (5.6) se obtienen dos casos a estudiar:

$$v = 0 \quad (5.7)$$

$$\frac{Su}{v + Su} - Q = 0 \quad (5.8)$$

Para el caso (5.7) cuando $v = 0$ existen dos puntos críticos. El primero de ellos, $(0, 0)$, en el que se produce la extinción total. El segundo, $u = S$, y por tanto $(S, 0)$, extinción del depredador.

Para el caso (5.8) se obtiene el punto crítico $\left(\frac{S(R+(Q-1)S)}{R}, \frac{S^2(1-Q)(R-S+QS)}{RQ}\right)$, el cual representa la coexistencia de la población depredadora y la presa.

5.3.2. Evaluación del Jacobiano, traza y determinante

En primer lugar se calcula el Jacobiano para el problema sin sustituir los puntos críticos y después se estudian los tres casos distintos. Por tanto, los elementos de la matriz toman los siguientes valores

$$J(k=0) = \begin{pmatrix} f_u & f_v \\ g_u & g_v \end{pmatrix},$$
$$f_u = R - \frac{2R}{S}u - \frac{Sv^2}{(v+Su)^2},$$
$$f_v = -\frac{S^2u^2}{(v+Su)^2},$$
$$g_u = \frac{Sv^2}{(v+Su)^2},$$
$$g_v = \frac{S^2u^2}{(v+Su)^2} - Q.$$

Caso I: $(u, v) = (0, 0)$.

Sustituyendo el punto crítico, el Jacobiano de estudio es el siguiente:

$$J(0) = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & -Q \end{pmatrix}.$$

Los autovalores son R y $-Q$. Como R y Q son valores positivos, la matriz tiene un autovalor positivo y otro negativo. Se puede concluir que este punto es inestable y por tanto no se estudiará el caso $k \neq 0$.

Caso II: $(u, v) = (S, 0)$.

El Jacobiano de estudio para este punto crítico es:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -R & -1 \\ 0 & 1 - Q \end{pmatrix}.$$

Los autovalores son $-R$ y $1 - Q$. Como $Q < 1$ hay un autovalor positivo y por tanto el punto es inestable.

Caso III: $(u, v) = \left(\frac{S(R+(Q-1)S)}{R}, \frac{S^2(1-Q)(R-S+QS)}{RQ}\right)$.

Sustituyendo este punto crítico en la matriz Jacobiana y operando se obtiene

el siguiente resultado:

$$J(0) = \begin{pmatrix} -R + 2(1-Q)S - S(1-Q)^2 & -Q^2 \\ S(1-Q)^2 & Q(Q-1) \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

A continuación, se calcula la traza y el determinante

$$\begin{aligned} tr(0) &= -R + S(1-Q^2) + Q^2 - Q, \\ det(0) &= Q(1-Q)(R - S(1-Q)). \end{aligned}$$

Para el caso $tr(0) = 0$, se obtiene $S = \frac{R+Q-Q^2}{1-Q^2}$. Si $det(0) > 0$ y se obtiene una bifurcación de Hopf.

Para aquellos puntos que son estables en $k=0$, es decir, aquellos con traza negativa y determinante positivo se estudiará el caso con difusión ($k \neq 0$).

En primer lugar, se calcula el Jacobiano:

$$J(k) = \begin{pmatrix} -R + 2(1-Q)S - S(1-Q^2) - D_1k^2 & -Q^2 \\ S(1-Q)^2 & Q(Q-1) - D_2k^2 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Para esta matriz la traza y el determinante son los siguientes:

$$\begin{aligned} tr(k) &= -R + S(1-Q^2) + Q^2 - Q - (D_1 + D_2)k^2, \\ det(k) &= det(0) - k^2(D_1(Q^2 - Q) + D_2(-R + S(1-Q)^2)) + k^4D_1D_2 \\ &= (-2S)Q^3 + (3S - R - D_1k^2 - D_2k^2S)Q^2 + (R - S + D_1k^2)Q \\ &\quad + (D_2k^2R - D_2k^2S + D_1D_2k^4). \end{aligned}$$

Analizando la traza, para que se produzca una bifurcación de onda se debe satisfacer la condición $tr(k) = 0$, por lo que se deduce la siguiente condición:

$$S_w = \frac{R + Q - Q^2 + (D_1 + D_2)k_w^2}{1 - Q^2},$$

donde

$$k_w^2 = \frac{Q}{2D_2^2(Q+1)} \left((D_1 - D_2)^2 Q^4 - 2(D_1^2 + D_2^2) Q^3 + (D_1^2 + D_2^2 + 6D_1D_2 - 4D_2^2R) Q^2 - 4D_1D_2Q + 4D_2^2R \right)^{1/2}.$$

Por otro lado, para que tenga lugar una bifurcación de Turing la condición para la traza es la siguiente: $tr(0) < 0$ y $tr(k) < 0$. En cuanto al determinante

$det(0) > 0$ y $det(k) < 0$. Observando la expresión de $det(k)$ la bifurcación de Turing se produce cuando $D_1(Q^2 - Q) + D_2(-R + S(1 - Q)^2) = 0$, y $det(k) = 0$ en cuyo caso

$$k_T^2 = \sqrt{\frac{det(0)}{D_1 D_2}},$$

y el valor crítico de la bifurcación es

$$S_T = \frac{D_1 D_2 k_T^4 + (D_2 R + D_1 Q(1 - Q)k_T^2 + RQ(1 - Q))}{Q^3 - (k_T^2 D_2 + 2)Q^2 + Q + k_T^2 D_2}.$$

Para conocer los valores más adecuados para simular, se fijan los parámetros $R=0.5$, $Q=0.6$ y $D_2=0.2$ y se calcula la ecuación de la curva que limita las distintas bifurcaciones. Para la bifurcación de Hopf se obtiene $S_H = \frac{37}{32}$. Para la de onda $S_W = (\frac{25}{16}D_1 + \frac{5}{16})k_W^2 + \frac{37}{32}$ con $k_W = 0,334$. Y por último para la bifurcación de Turing, $S_T = -\frac{15}{32}D_1 + \frac{375}{64}\sqrt{-\frac{12}{125}D_1^2 + \frac{8}{125}D_1 + \frac{25}{32}}$ con $k_T^2 = 1.29615$. Conocidas estas ecuaciones se puede dibujar la siguiente gráfica:

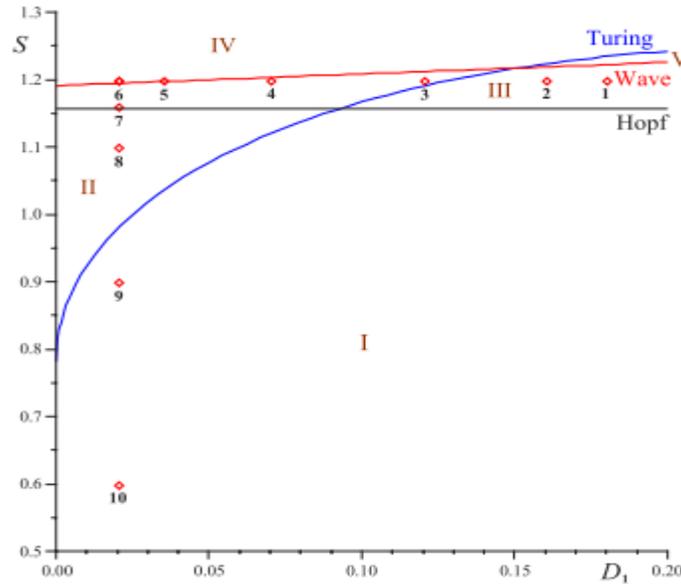


Figura 5.1: Diagrama de bifurcación para el sistema de estudio [7]

Basandose en esta gráfica se han decido los distintos valores para las simulaciones que a continuación se exponen.

5.4. Simulaciones.

Tras todo lo calculado en el apartado anterior y con el propósito de estudiar los distintos patrones de manera gráfica se han llevado a cabo distintas simulaciones fijando el valor de D_1 a 0.02 y escogiendo valores de S distintos acorde con la bifurcación estudiada en cada momento. Además, se han aplicado condiciones de flujo nulo en la frontera. El estado inicial de partida para todas las simulaciones es aquel en el que la distribución de depredador y presa es aleatorio en el espacio.

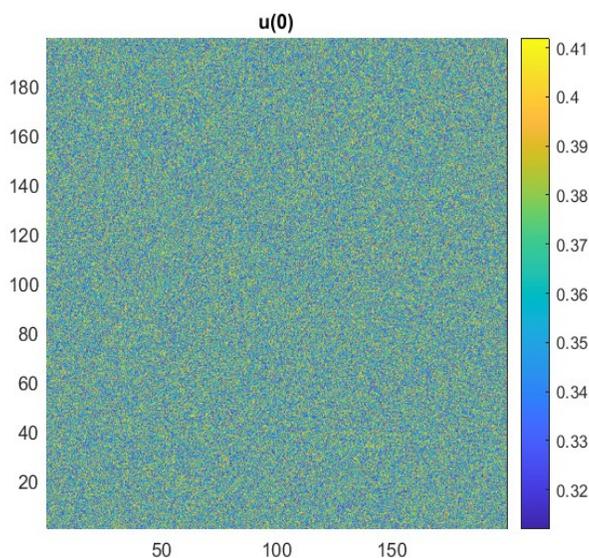


Figura 5.2: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=0$

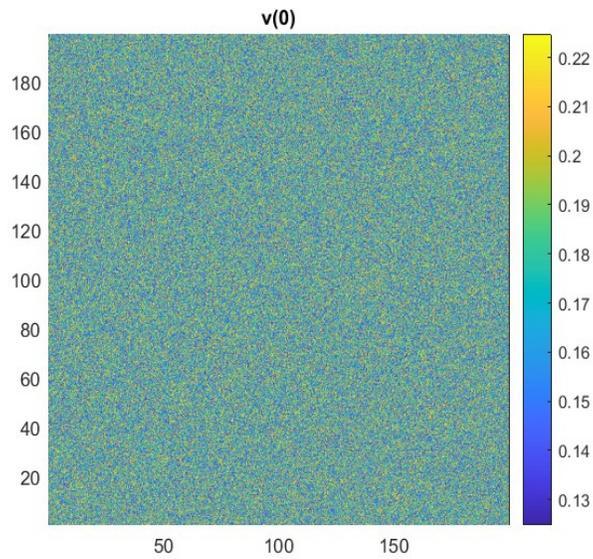


Figura 5.3: Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=0$

En primer lugar, se ha estudiado la bifurcación de Turing, la cual, observando la gráfica (5.1) se da para valores de S menores que 0.95, por ello la simulación se ha realizado para $S_T = 0.6$.

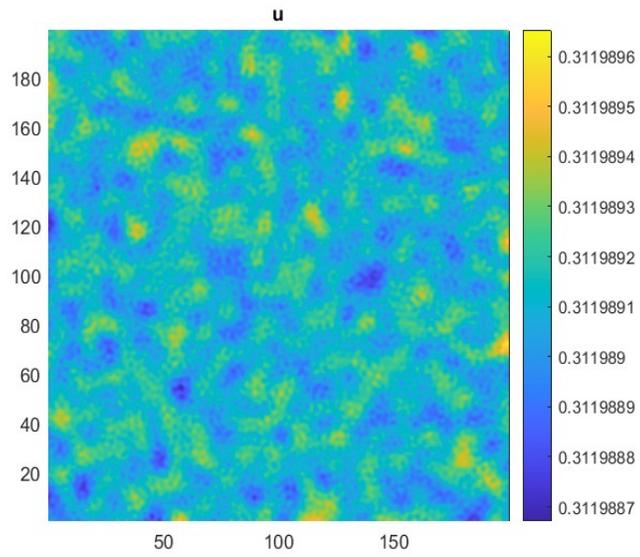


Figura 5.4: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=50$

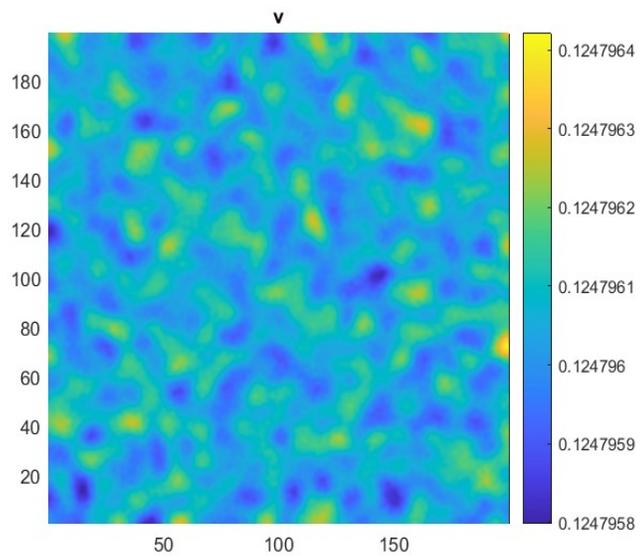


Figura 5.5: Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=50$

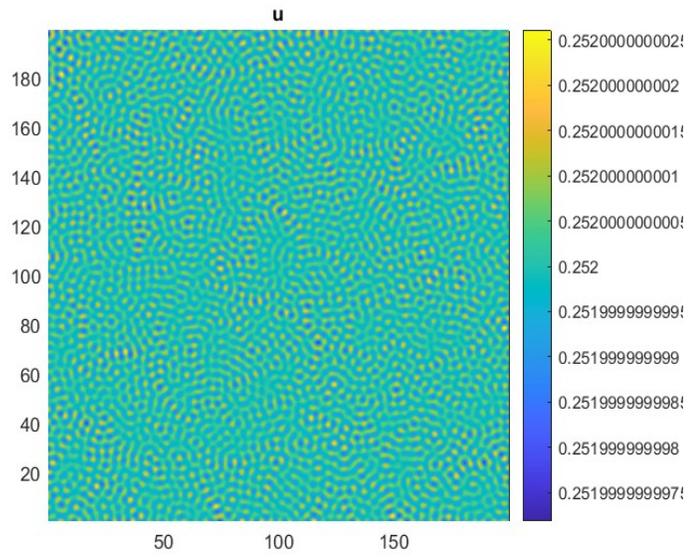


Figura 5.7: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$

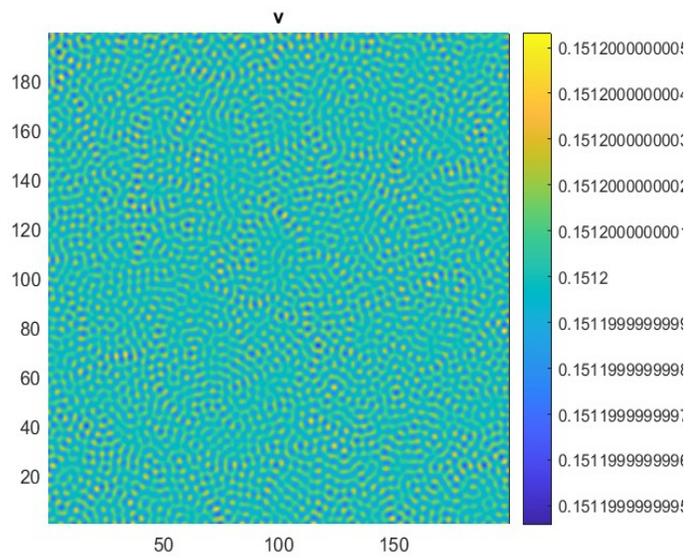


Figura 5.8: Patrón espacio temporal para la variable v en el instante $t=450$

A continuación se ha simulado con $S=1.1$ que representa un punto entre la bifurcación de Turing y la de Hopf. Después, $S=1.16$ que es un punto entre S_H y S_W y por último $S = 1,2 > S_W$.

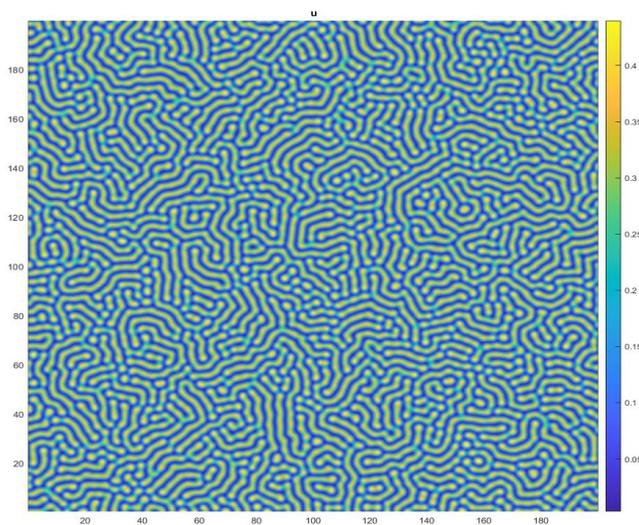


Figura 5.9: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$

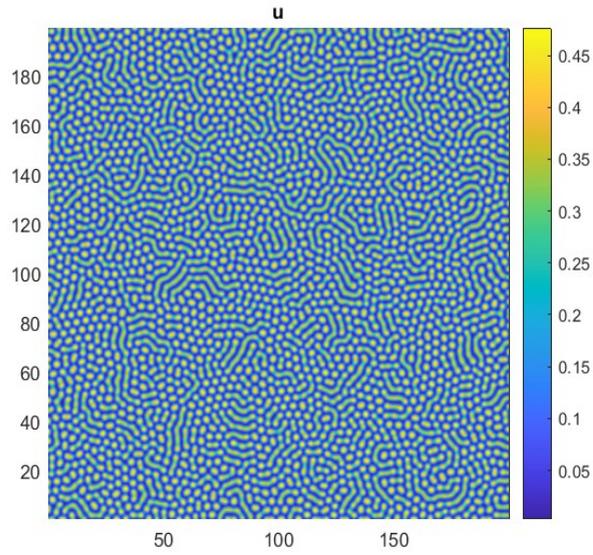


Figura 5.10: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$

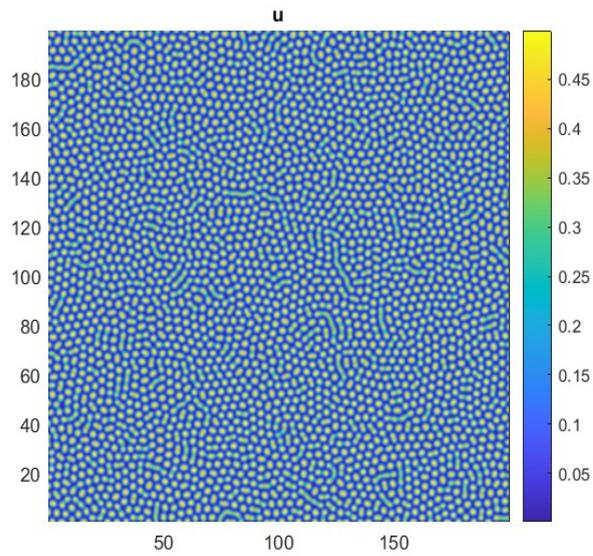


Figura 5.11: Patrón espacio temporal para la variable u en el instante $t=450$

Estos patrones son desde punteados hasta a rayas, existiendo patrones que son combinación de ambos. De hecho, cuanto mayor es el valor de S menos estructuras rayadas aparecen y más punteados son los patrones. Esto se debe a que la bifurcación de onda rompe tanto la simetría temporal como la espacial y esto hace que sea más difícil la aparición de patrones más complejos.

Este hecho plantea que cuanto mayor es el ratio de captura, más separadas están las presas lo que realimenta este funcionamiento facilitando la deprecación y reduciendo la densidad de población presa. Mientras que cuando el ratio de captura es menor, las presas se organizan en grupos más compactos y más grandes lo que dificulta la actividad de las presas.

5.5. Conclusiones

Después de realizar las simulaciones, la conclusión más interesante que se obtiene es la relacionada con el comportamiento de las presas. En todos los patrones se ve como se disponen de forma organizada conformando grupos cada vez más pequeños a medida que aumenta el ratio de captura. Por tanto, en relación con las bifurcaciones, antes de llegar a la línea de Turing en la gráfica, las presas se organizan formando franjas más alargadas de las que forman en la zona entre Turing y Hopf. En la zona entre las bifurcaciones de Hopf y Onda los patrones empiezan a ser mixtos mezclando zonas rayadas con zonas punteadas, hasta que finalmente cuando el valor del ratio de captura es mayor al asociado con la bifurcación de onda los patrones son punteados. En cuanto a la dependencia del sistema frente a las condiciones iniciales se observa que tras unas pocas iteraciones el comportamiento es distinto pero a largo plazo, los patrones que aparecen son los mismos.

Estas deducciones tienen importantes aplicaciones en el mundo de la biología ya que conociendo la distribución de las distintas especies se puede intervenir en su actividad protegiendo, por ejemplo, especies en peligro de extinción o controlando el crecimiento de plagas. La importancia de estos estudios se puede ver en [47], [48], [49].

Capítulo 6

Conclusiones y líneas futuras

6.1. Conclusiones

Teniendo en cuenta todo lo expuesto a lo largo de este trabajo, se puede concluir que la relevancia del estudio de patrones en sistemas de reacción-difusión es fundamental no solo para comprender el funcionamiento de infinidad de procesos naturales sino para que gracias a los conocimientos adquiridos se pueda alcanzar un gran desarrollo en el futuro en una gran diversidad de áreas como pueden ser la ingeniería, la medicina, la ecología, la física o la química.

A lo largo de este estudio y gracias a la revisión de diversos artículos sobre el tema se ha elaborado una lista de condiciones necesarias en relación con los autovalores (traza y determinante) de la matriz Jacobiana del sistema que se deben cumplir para que se den los distintos tipos de bifurcaciones. Este análisis general es de gran utilidad ya que permite conocer el valor necesario de los distintos parámetros del sistema para que se den un tipo de bifurcación u otra. Esto permite poder intervenir en los sistemas, modificando su comportamiento según las distintas necesidades o los objetivos que se busquen. En segundo lugar, como se puede ver en el Capítulo 3 se ha realizado una valoración sobre los distintos métodos de discretización escogiendo el más adecuado para este tipo de problemas. Para ello se han comparado las características de cada uno de los métodos decidiendo por motivos como el coste computacional o la estabilidad numérica.

Siendo el método de líneas el seleccionado para llevar a cabo la discretización espacial y temporal se ha programado en MATLAB el código necesario tanto

para discretizar los sistemas de estudio como para dibujar los patrones. Estos programas se han elaborado de manera individualizada para cada uno de los problemas que se han estudiado. Además, en primer lugar se ha escrito el código para una variable espacial y tras comprobar el correcto funcionamiento del mismo, se ha adaptado el código para dos variables espaciales.

Por último, se han ejecutado varias simulaciones variando las condiciones iniciales y/o el valor de los parámetros del sistema con la finalidad de obtener la solución numérica y poder dibujarla para estudiar los patrones. Estos han sido finalmente evaluados en el contexto correspondiente a su problema obteniéndose como conclusiones para el primer problema estudiado en el Capítulo 4 el comportamiento de los reactivos en el reactor de flujo continuo sin agitación. De ellas destaca la capacidad autocatalítica que muestran los sistemas cuando se encuentran en puntos cercanos a la bifurcación de Hopf. En cuanto al segundo problema, estudiado en el Capítulo 5 la conclusión más relevante es la del comportamiento de las presas ante el aumento del valor del parámetro S , ratio de captura, las cuales muestran cada vez formaciones más reducidas espacialmente, mientras que cuando el ratio de captura es bajo, las presas muestran una organización espacial en la que los grupos son más numerosos y en forma de líneas.

En vistas de todo ello, se puede concluir que los patrones dan una gran cantidad de información con respecto al comportamiento de las dos especies que están interactuando, y que este comportamiento se puede modificar variando los parámetros del sistema. Es por esto que realizar este estudio en otros sistemas de reacción-difusión puede aportar nueva información con respecto al comportamiento de las especies involucradas.

6.2. Líneas futuras

Una de las limitaciones de este trabajo es el hecho de que solo se ha aplicado el análisis general a dos problemas concretos. Es por ello, que una de las actividades que es posible llevar a cabo en el futuro es estudiar otros problemas cuyo modelo matemático se corresponda con el de los sistemas de reacción-difusión. Solamente haciendo eso será posible alcanzar nuevas formas de desarrollo en los campos ya mencionados anteriormente.

Otra de las posibles mejoras que se podrían llevar a cabo es la programación de un método de resolución específico para el problema que se esté estudiando

en lugar de utilizar el método de Euler. Esto reduciría el tiempo de cálculo, permitiendo que fuera posible llevar a cabo un mayor número de simulaciones lo que ampliaría el conocimiento sobre los sistemas.

En último lugar, este estudio no es posible sin el modelado matemático de comportamientos naturales, por lo que a medida que avance el conocimiento en cuando al modelado de estos sistemas se alcanzarán también mayores posibilidades de estudio de los patrones asociados a estos sistemas, pudiéndose así estudiar un mayor número de fenómenos de la naturaleza.

Bibliografía

- [1] PELLICER, B. P. (2002). *Inestabilidades de turing en sistemas de reacción-difusión* (Doctoral dissertation, Universidad de Navarra).
- [2] GONZÁLEZ, L. A., VANEGAS, J. C., & GARZÓN, D. A. (2009). Formación de patrones en sistemas de reacción-difusión en dominios crecientes. *Revista Internacional de Métodos Numéricos*, 25(2), 145-161.
- [3] LAWTON, J. H. (1999). Are there general laws in ecology? *Oikos*, 177-192.
- [4] GRIMM, V., REVILLA, E., BERGER, U., JELTSCH, F., MOOIJ, W. M., RAILSBACK, S. F., ... & DEANGELIS, D. L. (2005). Pattern-oriented modeling of agent-based complex systems: lessons from ecology *science*, 310(5750), 987-991.
- [5] BALL, P. (2015). Forging patterns and making waves from biology to geology: a commentary on Turing (1952)'The chemical basis of morphogenesis'. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 370(1666), 20140218.
- [6] GUTIÉRREZ, I. C. R., & CHUMACERO, L. M. G. (2017). Variación en la coloración y los patrones del pelaje en los felinos. *Investigación y Ciencia: de la Universidad Autónoma de Aguascalientes*, (71), 94-101.
- [7] WANG, W., LIU, Q. X., & JIN, Z. (2007). Spatiotemporal complexity of a ratio-dependent predator-prey system. *Physical Review E*, 75(5), 051913.
- [8] BALL, P. (2015). Forging patterns and making waves from biology to geology: a commentary on Turing (1952)'The chemical basis of morpho-

- genesis'. *Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, 370(1666), 20140218.
- [9] TURING, A. M. (1990). The chemical basis of morphogenesis. *Bulletin of mathematical biology*, 52, 153-197.
- [10] WOLPERT, L. (1969). Positional information and the spatial pattern of cellular differentiation. *Journal of theoretical biology*, 25(1), 1-47.
- [11] KONDO, S., WATANABE, M., & MIYAZAWA, S. (2021). Studies of Turing pattern formation in zebrafish skin. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 379(2213), 20200274.
- [12] Danio rerio. (20 de abril de 2024). En *Wikipedia*. https://es.wikipedia.org/wiki/Danio_rerio#/media/Archivo:Zebrafisch.jpg
- [13] CHEN, M., WU, R., & CHEN, L. (2020). Spatiotemporal patterns induced by Turing and Turing-Hopf bifurcations in a predator-prey system. *Applied Mathematics and Computation*, 380, 125300.
- [14] SHI, Y., LUO, X. F., ZHANG, Y. X., & SUN, G. Q. (2023). An indicator of Crohn's disease severity based on Turing patterns. *Chaos, Solitons & Fractals*, 171, 113455.
- [15] NADIN, G., OGIER-DENIS, E., TOLEDO, A. I., & ZAAG, H. (2021). A Turing mechanism in order to explain the patchy nature of Crohn's disease. *Journal of Mathematical Biology*, 83, 1-17.
- [16] CHAPLAIN, M. A., GANESH, M., & GRAHAM, I. G. (2001). Spatio-temporal pattern formation on spherical surfaces: numerical simulation and application to solid tumour growth. *Journal of mathematical biology*, 42, 387-423.
- [17] OSBORNE, A. G., & DEINERT, M. R. (2021). Stability instability and Hopf bifurcation in fission waves. *Cell Reports Physical Science*, 2(10).
- [18] LAVANGNANANDA, K., & CHATTANACHOT, S. (2017, FEBRUARY). Study of discretization methods in classification. In *2017 9th International Conference on Knowledge and Smart Technology (KST)* (pp. 50-55). IEEE.

- [19] VENTURA, D., & MARTINEZ, T. R. (1995). An empirical comparison of discretization methods. *In Proceedings of the Tenth International Symposium on Computer and Information Sciences* (pp. 443-450).
- [20] KOTSIANTIS, S., & KANELLOPOULOS, D. (2006). Discretization techniques: A recent survey. *GESTS International Transactions on Computer Science and Engineering*, 32(1), 47-58.
- [21] PENG, L., QING, W., & YUJIA, G. (2009, NOVEMBER). Study on comparison of discretization methods. *In 2009 international conference on artificial intelligence and computational intelligence* (Vol. 4, pp. 380-384). IEEE.
- [22] SCHIESSER, W. E. (2012). *The numerical method of lines: integration of partial differential equations*. Elsevier.
- [23] SADIKU, M. N. O., & OBIOZOR, C. N. (2000). A simple introduction to the method of lines. *International journal of electrical engineering education*, 37(3), 282-296.
- [24] NAGLE, R. K., NAGLE, R. K., & SAFF, E. B. (1992). *Fundamentos de ecuaciones diferenciales*.
- [25] HILLEN, T., LEONARD, I. E., & VAN ROESSEL, H. (2019). *Partial differential equations: theory and completely solved problems*. Friesen-Press.
- [26] PÉREZ, C., & CAMPO, A. (1987). El método de las líneas aplicado al desarrollo termohidráulico en tubos isotérmicos.
- [27] FU, L. S., & MALIK, S. N. (1979). The method of lines applied to crack problems including plasticity effect. *Computers & Structures*, 10(3), 447-456.
- [28] LEPPANEN, T. (2004). Computational studies of pattern formation in turing systems [Ph. D. thesis]. *Helsinki University of Technology, Espoo, Finland*.
- [29] BISWAS, B. N., CHATTERJEE, S., MUKHERJEE, S. P., & PAL, S. (2013). A discussion on Euler method: A review. *Electronic Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 1(2), 2090-2792.

- [30] BURDEN, R. L., & FAIRES, J. D. (2002). Análisis Numérico. Séptima edición, Thomson Learning.
- [31] MOLER, C., & LITTLE, J. (2020). A history of MATLAB. *Proceedings of the ACM on Programming Languages*, 4(HOPL), 1-67.
- [32] KAPRAL, R., & SHOWALTER, K. (EDS.). (2012). *Chemical waves and patterns* (Vol. 10). Springer Science & Business Media.
- [33] KONOW, C., SOMBERG, N. H., CHAVEZ, J., EPSTEIN, I. R., & DOLNIK, M. (2019). Turing patterns on radially growing domains: experiments and simulations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(12), 6718-6724.
- [34] FINLAYSON, A. B., & MERKIN, J. H. (1997). Travelling waves in an open quadratic autocatalytic chemical system. *Journal of Mathematical Chemistry*, 21, 305-321.
- [35] PETROV, V., SCOTT, S. K., & SHOWALTER, K. (1994). 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.
- [36] WILES, C., & WATTS, P. (2012). Continuous flow reactors: a perspective. *Green Chemistry*, 14(1), 38-54.
- [37] NEUHAUSER, C. (2001). Mathematical challenges in spatial ecology. *Notices of the AMS*, 48(11), 1304-1314.
- [38] BAURMANN, M., GROSS, T., & FEUDEL, U. (2007). Instabilities in spatially extended predator-prey systems: Spatio-temporal patterns in the neighborhood of Turing-Hopf bifurcations. *Journal of Theoretical Biology*, 245(2), 220-229.
- [39] ANISIU, M. C. (2014). Lotka, Volterra and their model. *Didáctica matemática*, 32(01).
- [40] WANGERSKY, P. J. (1978). Lotka-Volterra population models. *Annual Review of Ecology and Systematics*, 9(1), 189-218.

- [41] XIAO, D., & RUAN, S. (2001). Global analysis in a predator-prey system with nonmonotonic functional response. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 61(4), 1445-1472.
- [42] MÉDOC, V., SPATARO, T., & ARDITI, R. (2013). Prey: predator ratio dependence in the functional response of a freshwater amphipod. *Freshwater Biology*, 58(5), 858-865.
- [43] ABRAMS, P. A., & GINZBURG, L. R. (2000). The nature of predation: prey dependent, ratio dependent or neither?. *Trends in Ecology & Evolution*, 15(8), 337-341.
- [44] MEDVINSKY, A. B., PETROVSKII, S. V., TIKHONOVA, I. A., MALCHOW, H., & LI, B. L. (2002). Spatiotemporal complexity of plankton and fish dynamics. *SIAM review*, 44(3), 311-370.
- [45] DIECKMANN, U., HERBEN, T., & LAW, R. (1999). Spatio-temporal processes in ecological communities. *CWI Quarterly*, 12(3&4), 213-238.
- [46] REAL, L. A. (1977). The kinetics of functional response. *The American Naturalist*, 111(978), 289-300.
- [47] PARSHAD, R. D., KUMARI, N., KASIMOV, A. R., & ABDERRAHMANE, H. A. (2014). Turing patterns and long-time behavior in a three-species food-chain model. *Mathematical biosciences*, 254, 83-102.
- [48] THUILLER, W., RICHARDSON, D. M., PYŠEK, P., MIDGLEY, G. F., HUGHES, G. O., & ROUGET, M. (2005). Niche-based modelling as a tool for predicting the risk of alien plant invasions at a global scale. *Global change biology*, 11(12), 2234-2250.
- [49] PEARCE, J., & LINDENMAYER, D. (1998). Bioclimatic analysis to enhance reintroduction biology of the endangered helmeted honeyeater (*Lichenostomus melanops cassidix*) in southeastern Australia. *Restoration ecology*, 6(3), 238-243.