

**Sistemas de ecuaciones de reacción
y difusión cuyas soluciones son
frentes que se propagan en espiral.**

Patricia Hernández Martínez.

16 de julio de 2001

Agradecimientos.

A mis padres, *Teresa y Jorge Aurelio.*

A mis hermanos, *Ana Luisa, Velia y Jorge Luis.*

A mi sobrina, *Velia Romina.*

A Héctor.

A mi asesora, Dra. Catherine García Reimbert, por su ayuda, paciencia, confianza y comprensión durante mi carrera y el desarrollo de la tesis.

A Fundación UNAM por la beca que me otorgo en el inicio de este trabajo.

A FENOMECC proyecto G25427-E, “Matemáticas No lineales en la Física y la ingeniería”, por apoyarme para concluir este trabajo.

Al departamento de Matemáticas y Mecánica, en especial, al Dr. Arturo Vargas y al Dr. Jorge Ize.

A mis sinodales, Dra. María del Carmen Jorge y Jorge, Dr. Antonmaria Minzoni Alessio, Dr. Gilberto Flores Gallegos y Dr. Julio Herrera Velázquez, por el tiempo que dedicaron en revisar esta tesis y por las sugerencias tan valiosas que la enriquecieron.

A Ana C. Pérez Arteaga y Oscar Valdiviezo Mijangos por su ayuda en las cuestiones de cómputo.

A Lourdes y Alma, por resolver mis dudas de LATEX y por las veces que me

auxiliaron en trámites para la Facultad y el CONACyT.

A mis compañeros, en especial a Lucía Doval, Edilia Higuera, Silvia Madrid, Norma Soriano, Sara Zambrano y Lirio Aparicio, por hacer tan agradable mi estancia en el Departamento.

A la Maestra Susana Castillo por aclarar mis dudas de bioquímica.

A la Maestra Elenita de Oteyza por agilizar mis trámites de titulación.

Índice General

Introducción.	7
1 Sistemas de ecuaciones de reacción y difusión.	9
1.1 La ecuación de difusión: el movimiento browniano en una dimensión.	9
1.2 La ecuación de reacción y difusión.	13
1.3 Un modelo con una ecuación de reacción y difusión en una dimensión: la ecuación de Fisher.	14
1.4 Un modelo de un sistema de reacción y difusión: envenenamiento con monóxido de carbono.	17
2 Condiciones para la existencia de frentes que se propaguen en espi- ral en sistemas de reacción y difusión.	23
2.1 Sistemas $\lambda - \omega$	23
2.2 Sistemas $\lambda - \omega$ para sistemas de reacción y difusión.	25
3 Propagación de frentes en espiral.	29
3.1 ¿Qué es la óptica geométrica?	29
3.2 Una teoría geométrica para ondas espirales en medios activos.	30
3.2.1 La ecuación de la iconal en dos dimensiones.	35
3.2.2 Soluciones en espiral.	38
4 Ejemplos de sistemas cuyas soluciones son frentes que se propagan	

en espiral.	45
4.1 La reacción de Belousov-Zhabotinsky.	45
4.2 Ondas espirales y la diferencia en el potencial eléctrico del corazón. .	52
4.3 Las amibas Dictyostelium Discoideum.	54
Conclusiones.	59
A Teorema de bifurcación de Poincaré-Andronov-Hopf.	61
A.1 Ejemplo:	61
B El ciclo de Krebs o el ciclo del ácido cítrico	63
Bibliografía.	67

Introducción.

El objetivo del presente trabajo es estudiar sistemas de reacción y difusión, cuyas soluciones son ondas que se propagan en espiral.

En el capítulo 1, se obtendrán la ecuación de difusión a partir del movimiento browniano en una dimensión; la ecuación de Fisher para ejemplificar un modelo de una ecuación de reacción y difusión en una dimensión y se desarrollará un modelo para el envenenamiento con monóxido de carbono, el cual es un sistema de ecuaciones de reacción y difusión.

En el capítulo 2, se estudiarán los sistemas $\lambda - \omega$ y su relación con los sistemas de reacción y difusión; a partir de lo cual se establecerán las condiciones para la existencia de soluciones en espiral.

En el capítulo 3, se desarrollará una teoría geométrica propuesta por J. Keener, en la que retoma algunas ideas utilizadas en óptica geométrica, para analizar cualitativamente la propagación de frentes en espiral para un tipo particular de sistemas de reacción y difusión.

En el capítulo 4, se abordarán tres ejemplos de fenómenos cuyos modelos son sistemas de ecuaciones de reacción y difusión del tipo de los analizados por J. Keener y en los que se aplican sus cálculos para llegar a resultados concretos. Los ejemplos son: la reacción de Belousov-Zhabotinsky, la diferencia en el potencial eléctrico del corazón y el comportamiento de las amibas *Dictyostelium Discoideum*.

Finalmente, se concluye que el método desarrollado por Keener es aplicable sólo a sistemas de reacción y difusión con una cinética como la utilizada en la ecuación de FitzHugh-Nagumo, ya que ésta sirve para modelar interacción química entre dos sustancias, una activadora y otra inhibidora de un proceso.

Capítulo 1

Sistemas de ecuaciones de reacción y difusión.

Cuando se tiene un conjunto de partículas (sean células, bacterias, partículas químicas o animales) con un movimiento aleatorio individual, pero que a nivel macroscópico o en grupo tienen un movimiento regular, se habla de un proceso de difusión. Para que se dé ese movimiento regular puede haber interacción entre partículas e incluso con el medio, en cuyo caso el proceso también es de reacción.

Matemáticamente este tipo de comportamiento se modela mediante una o más ecuaciones diferenciales parciales de tipo parabólico. Si son más de una estarán acopladas formando un sistema de difusión o de reacción y difusión.

Antes de estudiar las ecuaciones de reacción y difusión, se obtendrá la ecuación de difusión como un modelo aleatorio discretizado de partículas en un fluido debido a colisiones entre ellas, conocido como el movimiento browniano.

1.1 La ecuación de difusión: el movimiento browniano en una dimensión.

Empecemos considerando una partícula en movimiento aleatorio de longitud δ , llamado paso, hacia la derecha o izquierda, en una dimensión partiendo del origen, donde la probabilidad de que se mueva a la izquierda es q y se denota por:

$$P(x_i = -\delta) = q$$

donde x_i , con $i = 1, 2, \dots, n$ son variables aleatorias independientes (es decir, $P(x_i = \delta, x_{i+1} = \delta) = P(x_i = \delta) \cdot P(x_{i+1} = \delta)$) que toman el valor δ ó $-\delta$, dependiendo del

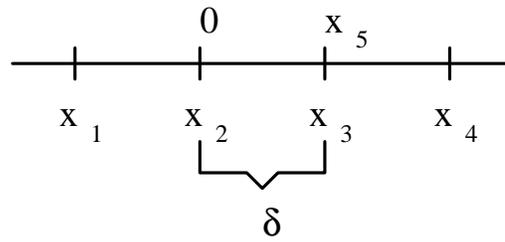


Figura 1.1:

movimiento de la partícula; análogamente

$$P(x_i = \delta) = p$$

con $q + p = 1$. Además suponemos que $p = \frac{1}{2}$ y $q = \frac{1}{2}$, es decir, la probabilidad de que la partícula se mueva a la izquierda o a la derecha es la misma.¹

La posición de la partícula al n -ésimo paso se denota con

$$X_n = x_1 + x_2 + \dots + x_n.$$

Por ejemplo, en la Figura 1.1, partimos del origen y describimos la trayectoria de una partícula con la sucesión de sus posiciones:

x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 ; donde $x_1 = -\delta, x_2 = \delta, x_3 = \delta, x_4 = \delta$ y $x_5 = -\delta$; así la posición de la partícula en el quinto paso es:

$$X_5 = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = +\delta,$$

es decir, se ha movido una longitud δ hacia la derecha.

A continuación definiremos la esperanza matemática y la varianza para el movimiento de la partícula [20].

Para un valor de una variable aleatoria discreta x_i con $i = 1, 2, \dots, n$, que toma un valor a_m con probabilidad p_m , el valor esperado o esperanza matemática es:

$$\langle x_i \rangle = \sum_m a_m p_m$$

por lo anterior, se tiene

$$\langle x_i \rangle = +\delta P(x_i = \delta) + (-\delta)P(x_i = -\delta) = \delta(p - q)$$

¹Lo anterior se puede afirmar gracias a la ley de los grandes números que dice lo siguiente: “Si una situación, una prueba o un experimento se repite una y otra vez, la proporción de éxitos tenderá a aproximarse a la probabilidad de que cualquier resultado sea un éxito”.

$$\Rightarrow \langle X_n \rangle = n\delta(p - q) \quad (1.1)$$

y la varianza se define como:

$$V(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

y como $\langle x \rangle$ es una función lineal, entonces

$$V(X_n) = \sum_{i=1}^n [\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2]$$

además

$$\langle x_i^2 \rangle = (\delta)^2 P(x_i = \delta) + (-\delta)^2 P(x_i = -\delta) = \delta^2(p + q) = \delta^2$$

así

$$\begin{aligned} V(X_n) &= \sum_{i=1}^n [\delta^2 - (p - q)^2 \delta^2] \\ &= \sum_{i=1}^n \delta^2 [(p + q)^2 - (p - q)^2] \\ &= \sum_{i=1}^n \delta^2 (4pq) \\ &= 4pq\delta^2 n. \end{aligned}$$

Experimentalmente, si suponemos que hay r colisiones por unidad de tiempo, podemos interpretar (1.1) como el desplazamiento promedio de una partícula. Su velocidad, llamémosla c , es entonces $\frac{\text{desplazamiento}}{\text{tiempo}} = \frac{n\delta(p-q)}{\frac{n}{r}} = r\delta(p - q)$ y la varianza del desplazamiento está relacionada con $D > 0$, que es el coeficiente de difusión, a través de:

$$4pq\delta^2 r = D.$$

Para describir el movimiento de una partícula que está inicialmente en $(x, t) = (0, 0)$, definiremos la probabilidad de que la partícula esté en la posición x al tiempo t de la siguiente manera:

Si $X_n = k\delta$ y $\frac{n}{r} = t$, donde $\frac{1}{r}$ es el tiempo que tarda en realizarse cada paso, es decir, ocurren n pasos en el intervalo $[0, t]$, entonces

$$u(x, t) = P(X_n = x), \quad \text{con} \quad \frac{n}{r} = t \quad \text{y} \quad x = k\delta, \quad (1.2)$$

es la probabilidad de que al tiempo t la partícula se encuentre en la posición x .

Como las variables son independientes, la distribución de probabilidad (1.2) satisface la siguiente ecuación en diferencias:

$$u(x, t + \frac{1}{r}) = p \cdot u(x - \delta, t) + q \cdot u(x + \delta, t), \quad (1.3)$$

en palabras, la probabilidad de que la partícula esté en x al tiempo $t + \frac{1}{r}$ es igual a p veces la probabilidad de que en el paso anterior esté en $x - \delta$ más q veces la probabilidad de que en el paso anterior esté en $x + \delta$.

Expandiendo (1.3) en series de Taylor, tenemos

en t :

$$u\left(x, t + \frac{1}{r}\right) = u(x, t) + \frac{1}{r}u_t(x, t) + O\left[\left(\frac{1}{r}\right)^2\right]$$

en x :

$$u(x \pm \delta, t) = u(x, t) \pm \delta u_x(x, t) + \frac{1}{2}\delta^2 u_{xx}(x, t) + O(\delta^3). \quad (1.4)$$

Sustituyendo (1.4) en (1.3), tenemos:

$$\begin{aligned} & u(x, t) + \frac{1}{r}u_t(x, t) + O\left[\left(\frac{1}{r}\right)^2\right] \\ &= p\left[u(x, t) - \delta u_x(x, t) + \frac{1}{2}\delta^2 u_{xx}(x, t) + O(\delta^3)\right] \\ &+ q\left[u(x, t) + \delta u_x(x, t) + \frac{1}{2}\delta^2 u_{xx}(x, t) + O(\delta^3)\right] \end{aligned}$$

lo anterior implica que:

$$\begin{aligned} & u[1 - (p + q)] + u_x r \delta (p - q) - u_{xx} \frac{\delta^2}{2} r (p + q) \\ &= -u_t + r O\left[\left(\frac{1}{r}\right)^2\right] + r O(\delta^3)(p + q) \end{aligned}$$

Y como $c = r\delta(p - q) = 0$ y $D = 4pq\delta^2 r = \delta^2 r$, de acuerdo a lo obtenido en la página 11; entonces se tiene:

$$-\frac{1}{2}Du_{xx} = -u_t + r O\left[\left(\frac{1}{r}\right)^2\right] + r O(\delta^3)(p + q)$$

Si $\delta \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$, entonces

$$\frac{1}{2}Du_{xx} = u_t.$$

donde D es el coeficiente de difusión.

1.2 La ecuación de reacción y difusión.

Ahora bien, es importante estudiar los sistemas de reacción y difusión, porque tienen una amplia aplicación como modelos de fenómenos naturales, tales como: formación de patrones en morfogénesis, en modelos de presa y depredador y otros sistemas ecológicos, en la conducción de pulsos eléctricos en los nervios, en la propagación de epidemias, en el envenenamiento con monóxido de carbono, en las reacciones químicas oscilantes, entre otros.

En su forma más simple un sistema de reacción y difusión se puede escribir de la siguiente forma:

$$u_t = D \nabla^2 u + f(u) \quad (1.5)$$

donde $\frac{\partial u}{\partial t} = u_t$ y $u = u(\bar{x}, t)$ con $\bar{x} \in \mathcal{R}^3$ es el vector de variables dependientes, $f(u)$ es una función vectorial, en general no lineal a la que se le conoce como el término de reacción y D es la matriz de los coeficientes de difusión [17].

Para justificar la obtención de la ecuación (1.5) consideremos una superficie arbitraria S que envuelve a un volumen V , y utilicemos la ecuación general de conservación que dice que “la razón de cambio del material en V es igual a la razón de flujo de material a través de S más el material creado en V ”, es decir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V u(\bar{x}, t) dV = - \int_S J \cdot ds + \int_V f(u) dV = 0$$

donde J es el flujo de material en S y f es la fuente de material en V , la cual puede depender de u , \bar{x} y t ; pero nosotros la consideraremos dependiente de u solamente.

Suponiendo que u es continua y aplicando el teorema de la divergencia, tenemos:

$$\int_V [u_t(\bar{x}, t) + \nabla \cdot J - f(u)] dV = 0.$$

Como el volumen V es arbitrario, el integrando en la ecuación anterior debe anularse, quedando así:

$$u_t + \nabla \cdot J = f(u). \quad (1.6)$$

En un proceso de difusión clásico, el flujo de material es proporcional al gradiente de concentración del material, esto es:

$$J \propto - \nabla u$$

es decir,

$$J = -D \nabla u \quad (1.7)$$

donde D es el coeficiente de difusión, el signo negativo indica que la difusión de materia va de una concentración alta a una baja; finalmente sustituyendo la expresión (1.7) en (1.6) se obtiene (1.5).

1.3 Un modelo con una ecuación de reacción y difusión en una dimensión: la ecuación de Fisher.

La ecuación de Fisher (1937) es el caso más simple de una ecuación de reacción y difusión en una dimensión y modela la propagación espacial de un gene favorecido en una población [17]. La ecuación es:

$$u_t = ku(1 - u) + Du_{xx} \quad (1.8)$$

que podemos identificar como la ecuación logística más un término de difusión. En esta última ecuación, el término de reacción es $ku(1 - u)$, donde k es la tasa de encuentro entre los individuos u portadores del gene con los individuos $1 - u$ no portadores.

La ecuación de Fisher es un buen ejemplo para estudiar las soluciones de tipo onda viajera (frentes que se propagan sin cambiar de forma) que se encuentran al resolver la ecuación ordinaria resultante de hacer el cambio de variable $z = x - ct$ en la ecuación (1.8); lo que significa que para cada valor fijo z_0 , la solución sobre la recta $x = z_0 + ct$ es constante, esto es:

$$u_t = \frac{du}{dz} \cdot \frac{\partial z}{\partial t} = -cu'$$

$$u_{xx} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{du}{dz} \cdot \frac{\partial z}{\partial t} \right] = u''$$

donde $u' = \frac{du}{dz}$.

Así la ecuación (1.8) queda escrita como:

$$DU'' + cU' + kU(1 - U) = 0$$

que puede reescribirse como el sistema:

$$U' = V,$$

$$V' = \frac{-c}{D}V - \frac{k}{D}U(1 - U),$$

el cual tiene a $(0, 0)$ y $(1, 0)$ como puntos críticos. Para analizar su estabilidad procedemos de la siguiente manera:

Para el punto $(0, 0)$ el determinante del sistema para hallar los valores propios es:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\frac{k}{D} & -\frac{c}{D} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + \frac{c}{D}\lambda + \frac{k}{D} = 0.$$

Lo anterior implica que:

$$\lambda = \frac{-c \pm \sqrt{c^2 - 4kD}}{2D}.$$

Si $c^2 \geq 4kD$, entonces $(0, 0)$ es un nodo estable, si no, es una espiral estable.

Para el punto $(1, 0)$, el sistema linealizado es:

$$U' = V,$$

$$V' = \frac{k}{D}U - \frac{c}{D}V,$$

y el determinante asociado para calcular sus valores propios es:

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ \frac{k}{D} & -\frac{c}{D} - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + \frac{c}{D}\lambda - \frac{k}{D} = 0.$$

Así:

$$\lambda = \frac{-c \pm \sqrt{c^2 + 4kD}}{2D}.$$

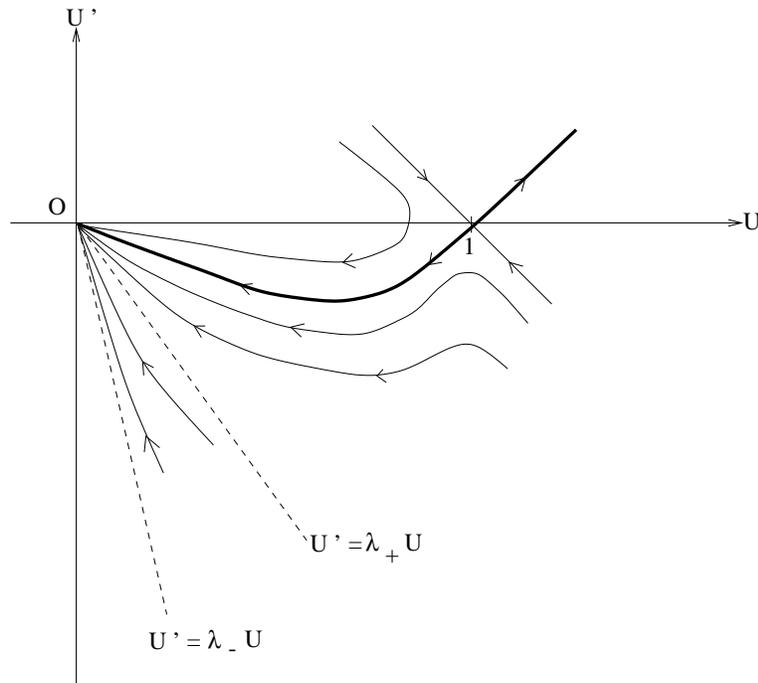


Figura 1.2: La órbita remarcada corresponde a la onda viajera.

Por lo que concluimos que $(1, 0)$ es un punto silla.

Podemos visualizar lo anterior en el plano fase de la Figura 1.2.

El comportamiento de las soluciones en la ecuación de Fisher se puede comprender mejor con una situación concreta. Supongamos que existe una población a la que llega un grupo de inmigrantes con cierta característica inexistente en la población inicial, luego de que hay mestizaje esa característica (gene dominante) aparece en la descendencia, de tal modo que después de cierto tiempo el número de habitantes que la tiene aumenta con una velocidad c que depende de la tasa de encuentro k y del coeficiente de difusión D . En el lenguaje matemático, lo anterior corresponde a resolver la ecuación (1.8) con una condición inicial dada.

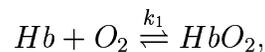
La onda viajera para la ecuación de Fisher proviene de la inestabilidad del término u y del término de saturación $-u^2$, pues la ecuación $u_t = Du_{xx}$, por si misma no posee una solución de tipo onda viajera. También es importante señalar que en este modelo, hay una onda viajera para cada $c \geq 2\sqrt{kD}$ [21] y [22].

$$u_t = Du_{xx} + u(1-u)$$

término de saturación
 ↓
 término inestable

1.4 Un modelo de un sistema de reacción y difusión: envenenamiento con monóxido de carbono.

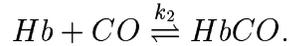
La sangre humana está compuesta por leucocitos, eritrocitos y plaquetas. Los eritrocitos tienen como función principal llevar el oxígeno molecular a todas las células y tejidos del cuerpo. Este transporte de oxígeno en el cuerpo se debe básicamente a un proceso de difusión que facilita la renovación molecular, el cual se lleva a cabo gracias a la diferencia de presiones parciales de los componentes moleculares en la sangre. Los eritrocitos además, regulan el equilibrio ácido-básico de la sangre y transportan parte del bióxido de carbono (CO_2); están formados a base de lípidos, proteínas y hemoglobina (28 por ciento del eritrocito aproximadamente); esta última, a su vez, es una combinación de hierro, protoporfiriana, heme² y globina. En la hemoglobina el hierro se encuentra en su forma reducida de ion ferroso (Fe^{2+}); su estructura, de un modo muy simplificado, podemos explicarla como una proteína globina con cuatro hemes adheridos, cada uno de los cuales contiene un átomo de hierro que sirve como punto débil de adhesión física para una sola molécula de oxígeno; así, cada molécula de hemoglobina transporta a lo más cuatro moléculas de oxígeno molecular, cuando esto sucede el compuesto recibe el nombre de oxihemoglobina (HbO_2) y podemos describir la reacción como:



la cual es reversible, ya que el oxígeno se adhiere a la Hb en su paso por los alveolos del pulmón y se libera posteriormente en distintos tejidos del cuerpo. Ahora bien, el monóxido de carbono, (CO), se liga fuertemente al hierro de la hemoglobina, teniendo más afinidad con él que el oxígeno, por lo que puede desplazar a éste de la oxihemoglobina; formando un compuesto muy estable, llamado carboxihemoglobina,

²Un heme es una metaloporfiriana que tiende a unirse a una proteína que contiene un metal, para el caso de la hemoglobina, es el hierro. Una porfiriana es una estructura anular, formada a su vez de cuatro anillos; que sin el hierro dan el pigmento de la bilis.

($HbCO$), descrita como:



La presencia de 0.5 por ciento de CO en el aire inutilizaría más de la mitad de la hemoglobina del torrente sanguíneo al menos cinco horas después de la exposición al gas.

Por lo anterior, cuando una persona sufre envenenamiento por CO se debe transferir a un ambiente donde el oxígeno tenga una presión alta, de modo tal que, el O remplace al CO en la Hb y para no incurrir en envenenamiento por oxígeno [2] se debe conocer el tiempo en el que el torrente sanguíneo disminuye el nivel de $HbCO$.

La importancia del siguiente modelo está en determinar el tiempo durante el cual ha de administrarse O a alta presión a un paciente envenenado por CO sin incurrir en envenenamiento por oxígeno.

En las reacciones para la oxihemoglobina y la carboxihemoglobina, k_1 y k_2 dependen de la saturación de las moléculas de hemoglobina (a lo más cuatro moléculas de oxígeno por una de hemoglobina) y ocurren en las capilaridades pulmonares, las que supondremos con sección transversa rectangular, por conveniencia geométrica solamente, y entre dos alveolos. También supondremos que la sangre es homogénea, que está bien mezclada y se filtra de modo constante a través de las capilaridades pulmonares o que algunos efectos de no homogeneidad o inestabilidad del flujo son despreciables.

En el planteamiento del modelo se considera el caso de un hombre recuperándose de envenenamiento con monóxido de carbono. En este caso, las concentraciones de monóxido de carbono en la sangre y el resto del cuerpo han llegado al equilibrio y por tanto se descarta alguna pérdida de monóxido de carbono de la sangre al cuerpo. Como las concentraciones de carboxihemoglobina están reducidas, el cuerpo cederá su monóxido de carbono a la sangre, pero en un proceso lento y en consecuencia sin interés, para el modelo. La simplificación de este modelo puede producir errores en la última etapa de recuperación, cuando la concentración de carboxihemoglobina es muy baja, pero es una buena aproximación cuando la concentración es alta y cambia rápidamente. ³

Las condiciones de frontera en las paredes de los capilares son:

- No hay flujo de hemoglobina, ni de sus componentes a través de las paredes y las concentraciones de oxígeno y monóxido de carbono son iguales en los alveolos; es decir, la pared capilar es permeable a los gases, pero impermeable a la hemoglobina.

- La concentración de oxígeno alveolar se supone linealmente dependiente de la cantidad en la atmósfera; esta suposición cambia al considerar el oxígeno en el pulmón

³Es un ejemplo de escalas lentas y rápidas.

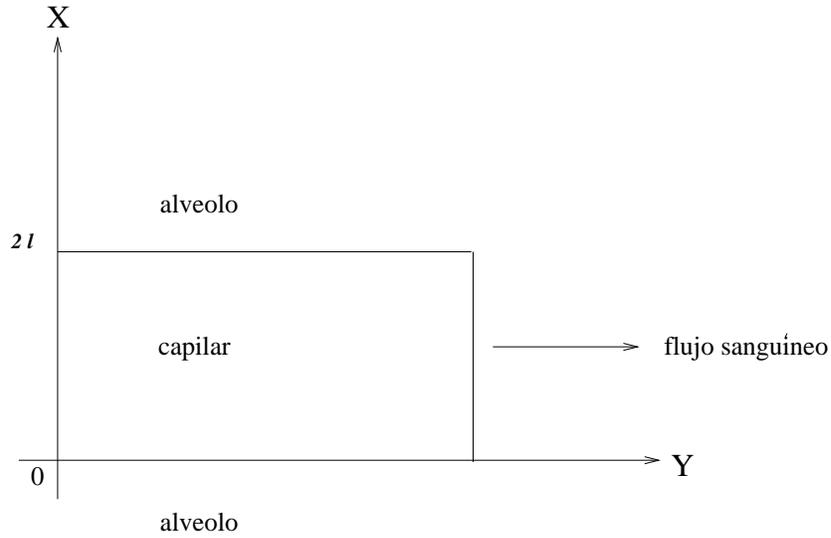


Figura 1.3: l es del orden de 4×10^{-4} cm.

donde la presión del oxígeno alveolar se calcula por consideraciones teóricas. La tasa de absorción del oxígeno en los capilares es igual a:

$$\dot{V} \frac{P_{aO_2} - P_{iO_2}}{P_b - P_{H_2O}} = D(\bar{P}_{cO_2} - P_{aO_2})$$

donde P_{aO_2} es la presión alveolar, P_{iO_2} es la presión inspirada, P_b es la presión barométrica, P_{H_2O} es la presión del agua, \dot{V} es la ventilación alveolar, D es la difusión constante en el pulmón y \bar{P}_{cO_2} es el promedio de la presión del oxígeno en las capilaridades.

El sistema de coordenadas se tomará como se muestra en la Figura 1.3.

Si el flujo sanguíneo tiene rapidez s , entonces las ecuaciones son:

$$\frac{\partial [O_2]}{\partial \tau} + s \frac{\partial [O_2]}{\partial Y} = -k_1 [O_2][Hb] + k_{-1} [HbO_2] + D_1 \nabla^2 [O_2]$$

$$\frac{\partial [CO]}{\partial \tau} + s \frac{\partial [CO]}{\partial Y} = -k_2 [CO][Hb] + k_{-2} [HbCO] + D_2 \nabla^2 [CO]$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial [Hb]}{\partial \tau} + s \frac{\partial [Hb]}{\partial Y} = & -k_1 [O_2][Hb] + k_{-1} [HbO_2] - k_2 [CO][Hb] \\ & + k_{-2} [HbCO] + D \nabla^2 [Hb] \end{aligned}$$

$$\frac{\partial [HbO_2]}{\partial \tau} + s \frac{\partial [HbO_2]}{\partial Y} = k_1 [O_2][Hb] - k_{-1} [HbO_2] + D \nabla^2 [HbO_2]$$

$$\frac{\partial[HbCO]}{\partial\tau} + s\frac{\partial[HbCO]}{\partial Y} = k_2[CO][Hb] - k_{-2}[HbCO] + D\nabla^2[HbCO]$$

donde D_1 , D_2 y D son los coeficientes de difusión del oxígeno, del monóxido de carbono y de la hemoglobina y sus componentes, respectivamente. Para hallar la solución estacionaria tomamos $\frac{\partial}{\partial\tau} \equiv 0$ y sumamos las últimas tres ecuaciones para obtener:

$$\left(s\frac{\partial}{\partial Y} - D\nabla^2\right) ([Hb] + [HbO_2] + [HbCO]) = 0$$

y utilizando condiciones de frontera apropiadas e integrando, obtenemos una ecuación de conservación para la Hb , ésta es:

$$[Hb] + [HbO_2] + [HbCO] = c, \quad c = c(\tau) \text{ es una constante espacial.}$$

Ahora para simplificar los cálculos reescalamos las variables para volverlas adimensionales, definiendo:

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{[O_2]}{\gamma_1}, & u_2 &= \frac{[CO]}{\gamma_2}, \\ v &= \frac{[Hb]}{c}, & v_1 &= \frac{[HbO_2]}{c}, & v_2 &= \frac{[HbCO]}{c}, \\ y &= \frac{Y}{l}, & x &= \frac{X}{l}, \end{aligned}$$

donde γ_1 y γ_2 son concentraciones típicas del O y del CO y l es la longitud del alveolo; mediante esta sustitución las ecuaciones se transforman en ⁴:

$$\delta_1 \frac{\partial u_1}{\partial y} = -u_1 v + K_{-1} v_1 + \varepsilon_1 \nabla^2 u_1$$

$$\delta_2 \frac{\partial u_2}{\partial y} = -u_2 v + K_{-2} v_2 + \varepsilon_2 \nabla^2 u_2$$

$$\delta'_1 \frac{\partial v_1}{\partial y} = u_1 v + K_{-1} v_1 + \varepsilon'_1 \nabla^2 v_1$$

$$\delta'_2 \frac{\partial v_2}{\partial y} = u_2 v - K_{-2} v_2 + \varepsilon'_2 \nabla^2 v_2$$

$$v + v_1 + v_2 = 1$$

donde

$$\delta_1 = \frac{s}{k_1 c l} = O(10^{-4}), \quad \delta_2 = \frac{s}{k_2 c l} = O(10^{-3}),$$

⁴Notese que el problema es lineal y si $\varepsilon \rightarrow 0$, se tiene un sistema de ecuaciones ordinarias

$$\begin{aligned}\delta'_1 &= \frac{s}{k_1 \gamma_1 l} = O(10^{-2}), & \delta'_2 &= \frac{s}{k_1 \gamma_2 l} = O(10^{-1} \lambda^{-1}), \\ \varepsilon'_1 &= \frac{D_1}{k_1 c l^2} = O(10^{-3}), & \varepsilon'_2 &= \frac{D_2}{k_2 c l^2} = O(10^{-2}) \\ \varepsilon_1 &= \frac{D}{k_1 \gamma_1 l^2} = O(10^{-2}), & \varepsilon_2 &= \frac{D}{k_2 \gamma_2 l^2} = O(10^{-2} \lambda^{-1}) \\ K_{-1} &= \frac{k_{-1}}{k_1 \gamma_1} = \frac{1}{14 \cdot 25}, & K_{-2} &= \frac{k_{-2}}{k_2 \gamma_2} = 2 \cdot 10^{-4} \lambda^{-1}.\end{aligned}$$

Los valores específicos de los parámetros se pueden consultar en [2]. El valor para la concentración del monóxido de carbono se toma con base en un nivel de $HbCO$ del setenta y cinco por ciento del total de Hb ó a un caso severo de envenenamiento por CO .

Las condiciones de frontera son:

(i) La sangre está bien mezclada al llegar a los capilares y está en equilibrio, es decir;

$$\begin{aligned}u_i(x, 0) &= u_i^0, & i &= 1, 2 \\ v(x, 0) &= v^0, \\ v_i(x, 0) &= v_i^0, & i &= 1, 2\end{aligned}$$

donde u_i^0 , v^0 y v_i^0 son constantes y

$$k_i u_i^0 v^0 - k_{-i} v_i^0 = 0, \quad i = 1, 2$$

(ii) No hay cambios frecuentes en alguna concentración en la salida de los capilares.

(iii) No hay flujo de Hb ó de sus componentes a través de las paredes de los capilares, es decir;

$$\frac{\partial v}{\partial x}(0, y) = 0, \quad \frac{\partial v_i}{\partial x}(0, y) = 0, \quad i = 1, 2.$$

(iv) Las concentraciones de O y CO en las paredes son iguales a las concentraciones alveolares, es decir;

$$u_1(0, y) = u_1^a, \quad u_2(0, y) = u_2^a = 0, \quad i = 1, 2$$

donde u_1^a es constante.

(v) Por simetría, en el punto medio del capilar,

$$\frac{\partial u_i}{\partial x}(1, y) = \frac{\partial v}{\partial x}(1, y) = \frac{\partial v_i}{\partial x}(1, y) = 0, \quad i = 1, 2.$$

Este es un problema de perturbaciones singulares que no resolveremos aquí para no desviar la atención del objetivo principal que son las ondas espirales, así que lo tomaremos sólo como un ejemplo de un modelo que involucra un sistema de ecuaciones de reacción y difusión, cuya solución puede consultarse en [2], en donde las conclusiones a las que se llegan son:

Suponiendo que la presión es igual a n atmósferas, entonces

$$u_1^a = 4.6n - 0.25$$

de este modo, el tiempo de administración de oxígeno puede ser hallado.

Si la concentración inicial de $HbCO$ no es demasiado alta (menos del 30 por ciento), entonces el tiempo aproximado es:

$$bt\sqrt{u_1^a} = \log \frac{V_2^1}{V_2^2}$$

y el tiempo requerido para que el nivel de $HbCO$ alcance la mitad de su valor inicial se fija para una presión dada de oxígeno y es:

$$bt_{\frac{1}{2}}\sqrt{u_1^a} = \log 2$$

donde $t_{\frac{1}{2}}$ es la mitad del tiempo de recuperación.

Capítulo 2

Condiciones para la existencia de frentes que se propaguen en espiral en sistemas de reacción y difusión.

Los sistemas de reacción y difusión admiten distintos tipos de soluciones (onda viajera, onda plana, ondas espirales, etc.). Pero son los únicos que con una cinética apropiada tienen solución de tipo onda espiral que rota.

Las condiciones para la existencia de frentes que se propaguen en espiral en sistemas de reacción y difusión se pueden resumir en la siguiente afirmación:

“Los sistemas de reacción y difusión cuya cinética posee una bifurcación de Hopf supercrítica y pueden aproximarse por sistemas $\lambda - \omega$, tienen solución de tipo onda espiral.”

Para entender el significado de la afirmación anterior, primero se debe aclarar que, para que un sistema de reacción y difusión tenga dinámica de tipo ciclo límite, el sistema sin términos de difusión debe exhibir una bifurcación de Hopf supercrítica (Ver apéndice A). Por otro lado, se deben definir a los sistemas $\lambda - \omega$, lo cual se hará a continuación.

2.1 Sistemas $\lambda - \omega$.

Los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias que pueden escribirse de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} &= \lambda(r)u - \omega(r)v, \\ \frac{dv}{dt} &= \omega(r)u + \lambda(r)v \\ \text{con } r &= (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

donde λ es una función positiva de r para $0 \leq r \leq r_0$, y $\lambda(r_0) = 0$ y $\omega(r)$ es una función positiva de r ; son llamados sistemas $\lambda - \omega$ [17].

La principal ventaja de estos sistemas es que se pueden obtener soluciones aproximadas de sistemas de reacción y difusión cuando forman parte de la cinética del modelo.

También poseen la propiedad de tener solución de tipo ciclo límite; lo cual se justifica fácilmente de la siguiente forma.

Si cambiamos a coordenadas polares tomando $u = r \cos \theta$ y $v = r \sin \theta$ y sustituimos en nuestro sistema $\lambda - \omega$, obtenemos:

$$\begin{aligned} -r\theta_t \sin \theta + r_t \cos \theta &= r\lambda(r) \cos \theta - r\omega(r) \sin \theta, \\ r\theta_t \cos \theta + r_t \sin \theta &= r\omega(r) \cos \theta + r\lambda(r) \sin \theta. \end{aligned}$$

Agrupando términos con $\sin \theta$ y $\cos \theta$, sumando los cuadrados de las ecuaciones anteriores y haciéndolas idénticamente cero, llegamos a:

$$r\theta_t - r\omega(r) = r\lambda(r) - r_t \equiv 0.$$

De donde obtenemos que:

$$\theta_t = \omega(r) \quad \text{y} \quad r_t = r\lambda(r)$$

lo cual implica que si $r = r_0$ en la ecuación de θ , integrando se tiene:

$$\theta(t) = \omega(r_0)t + \theta_0 \quad \text{y} \quad \theta_0 = \text{constante},$$

es solución tipo ciclo límite.

O en su forma compleja, si $c = u + iv$, entonces la solución es:

$$c = r_0 e^{i(\omega(r_0)t + \theta_0)}.$$

Notemos que $r_0 = \lambda^{-1}(0)$ da la amplitud de la onda y $\omega(r_0)$ la frecuencia.

Lo anterior, muestra que los sistemas $\lambda - \omega$ tienen una solución periódica estable.

Lo siguiente es encontrar la forma general de los sistemas $\lambda - \omega$ para los sistemas de reacción y difusión. Para ello se efectuará básicamente el mismo procedimiento de esta sección.

2.2 Sistemas $\lambda - \omega$ para sistemas de reacción y difusión.

Partiremos de un sistema de dos ecuaciones diferenciales parciales de reacción y difusión de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} u_t &= \nabla^2 u + F(u, v, r) \\ v_t &= \nabla^2 v + G(u, v, r) \end{aligned} \tag{2.1}$$

donde $r = r_0$ es un punto de bifurcación supercrítica en el sistema sin difusión y $(u, v) = (0, 0)$ corresponde a un punto de equilibrio.

Desarrollando F y G a primer orden alrededor de $(u, v) = (0, 0)$ el sistema aproximado es ¹:

$$\begin{aligned} u_t &= \nabla^2 u + \lambda(r)u - \omega(r)v + f(u, v, r) \\ v_t &= \nabla^2 v + \omega(r)u + \lambda(r)v + g(u, v, r) \end{aligned}$$

donde, f y g son de segundo orden en u y v y $r^2 = u^2 + v^2$.

Los coeficientes λ , ω y las funciones f y g satisfacen las siguientes condiciones:

1. λ y ω son funciones suaves de r que satisfacen que $\lambda(r_0) = 0$ y $\lambda(r) > 0$ para $r > r_0$ y $\omega(r) > 0$ para toda r .

2. $f(u, v, r)$ y $g(u, v, r)$ son funciones suaves de u, v y r que satisfacen $f(u, v, r), g(u, v, r)$ son $o(|u| + |v|)$ cuando $|u| + |v| \rightarrow 0$.

La condición (1) asegura que la matriz lineal con coeficientes de reacción es puramente oscilatoria para $r = r_0$ e inestable para $r > r_0$. Esta condición es similar a la del teorema de bifurcación de Hopf y es para que aparezca una solución periódica estable.

¹Es importante notar que $f(u, v, r)$ y $g(u, v, r)$ no dependen de θ .

La condición (2) asegura que la aproximación del sistema se hará alrededor del origen, que es el punto de bifurcación.

Considerando únicamente los términos a primer orden en el sistema anterior, tenemos:

$$u_t = \nabla^2 u + \lambda(r)u - \omega(r)v, \tag{2.2}$$

$$v_t = \nabla^2 v + \omega(r)u + \lambda(r)v.$$

Introduciendo el cambio de variables $u = R\cos\Theta, v = R\sin\Theta$ con $R = R(t, \bar{x})$ y $\Theta = \Theta(t, \bar{x})$, donde $\bar{x} = (x, y)$, tenemos:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u &= R \nabla^2 (\cos\Theta) + 2 \nabla R \cdot \nabla (\cos\Theta) + \cos\Theta \nabla^2 R \\ &= -R\cos\Theta |\nabla \Theta|^2 - R\sin\Theta \nabla^2 \Theta - 2\sin\Theta \nabla R \cdot \nabla \Theta + \cos\Theta \nabla^2 R. \end{aligned}$$

Análogamente

$$\nabla^2 v = -R\sin\Theta |\nabla \Theta|^2 + R\cos\Theta \nabla^2 \Theta + 2\cos\Theta \nabla R \cdot \nabla \Theta + \sin\Theta \nabla^2 R$$

y como

$$\begin{aligned} u_t &= R_t \cos\Theta - R \sin\Theta \cdot \Theta_t, \\ v_t &= R_t \sin\Theta + R \cos\Theta \cdot \Theta_t, \end{aligned}$$

el sistema (2.2) se transforma en:

$$\begin{aligned} R_t \cos\Theta - R \sin\Theta \cdot \Theta_t &= [-R |\nabla \Theta|^2 + \nabla^2 R + R\lambda(R)] \cos\Theta \\ &\quad - [R \nabla^2 \Theta + 2 \nabla R \cdot \nabla \Theta + R\omega(R)] \sin\Theta, \\ R_t \sin\Theta + R \cos\Theta \cdot \Theta_t &= [-R |\nabla \Theta|^2 + \nabla^2 R + R\lambda(R)] \sin\Theta \\ &\quad + [R \nabla^2 \Theta + 2 \nabla R \cdot \nabla \Theta + R\omega(R)] \cos\Theta. \end{aligned}$$

De estas dos últimas ecuaciones llegamos a:

$$R\Theta_t = R \nabla^2 \Theta + 2 \nabla R \cdot \nabla \Theta + R\omega(R), \tag{2.3}$$

$$R_t = \nabla^2 R - R \nabla \Theta \cdot \nabla \Theta + R\lambda(R).$$

Cuyas soluciones están dadas por:

$$\begin{aligned} R &= \rho(r) \quad y \\ \Theta &= \Omega t + \theta + \psi(r) \end{aligned}$$

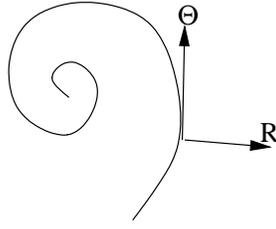


Figura 2.1:

donde Ω da la frecuencia de la onda (indica la rotación), θ es la fase y da el sentido en el que empieza la espiral (levogiro o destrogiro) y ψ indica el corrimiento.

$\rho(r)$ y $\psi(r)$ determinan el tipo de espiral (logarítmica o arquimidiiana) dependiendo de condiciones de frontera impuestas correctamente.

Las soluciones R y Θ son coordenadas ortogonales que avanzan con el frente de la onda (Figura 2.1) y (r, θ) son coordenadas polares en el plano.

Tales soluciones corresponden a ondas espirales rotando, las cuales se pueden escribir como:

$$u(r, \theta, t) = \rho(r) \cos(\Omega t + \theta + \psi(r)) \quad y, \quad (2.4)$$

$$v(r, \theta, t) = \rho(r) \sin(\Omega t + \theta + \psi(r))$$

Hay que aclarar que estas soluciones se proponen y no se obtienen de resolver el sistema (2.3). De hecho, [3],[4],[6] y [7], sustituyen las soluciones propuestas en el sistema (2.3) y llegan al sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias siguiente:

$$\begin{aligned} \rho'' + \frac{\rho'}{r} - \rho \left(\psi'^2 + \frac{1}{r^2} \right) + \rho \lambda(\rho) &= 0, \\ \psi'' + \left(\frac{1}{r} + \frac{2\rho'}{\rho} \right) \psi' &= \Omega - \omega(\rho). \end{aligned}$$

El cual se resuelve numéricamente, y se demuestra que satisfacen un sistema parecido al (2.3) y de este modo se concluye que también son soluciones aproximadas del sistema (2.1).

También observemos que estas soluciones no surgen como un modelo de un fenómeno en particular, sino de resolver en general un sistema de reacción y difusión que deseamos tenga soluciones en espiral que rota.

28 Condiciones para la existencia de frentes que se propaguen en
espiral en sistemas de reacción y difusión.

En el siguiente capítulo se desarrollará un método alternativo, utilizando las ideas de la óptica geométrica para resolver sistemas de ecuaciones particulares que sí se plantean como modelo de un fenómeno.

Capítulo 3

Propagación de frentes en espiral.

3.1 ¿Qué es la óptica geométrica?

Históricamente, la óptica geométrica surge al estudiar la propagación de frentes de luz en un medio, que puede ser no homogéneo.

La teoría de la óptica geométrica se ha utilizado con éxito para encontrar soluciones aproximadas a problemas de propagación de ondas en sistemas hiperbólicos principalmente provenientes de la teoría electromagnética y de problemas de geofísica, como la propagación de ondas sísmicas.

Sin embargo, a mediados de la década de 1980 se encontraron sistemas parabólicos no lineales que podían tener ondas solitarias y trenes de onda periódicos; los ejemplos típicos son: la reacción de Belousov-Zhabotinsky y la propagación de actividad eléctrica en el tejido nervioso; cuyos modelos matemáticos son complicados y las soluciones exactas son difíciles de obtener.

La ventaja de la óptica geométrica, sobre otros métodos, es que provee información directa de cómo se propaga el frente de onda en diversos medios para ondas de alta frecuencia y que el método puede aplicarse a una ecuación o a un sistema de ellas.

Esta teoría es útil principalmente para estudiar la dispersión de ondas planas no lineales y los efectos de la curvatura sobre la propagación de frentes de onda en un medio bidimensional.

El método es una extensión del método de las características empleado para determinar el comportamiento de cierto fenómeno modelado por una ecuación diferencial parcial de primer orden en una dimensión, donde lo que se analiza es la propagación de discontinuidades; pues como se sabe, las características nos indican solución con-

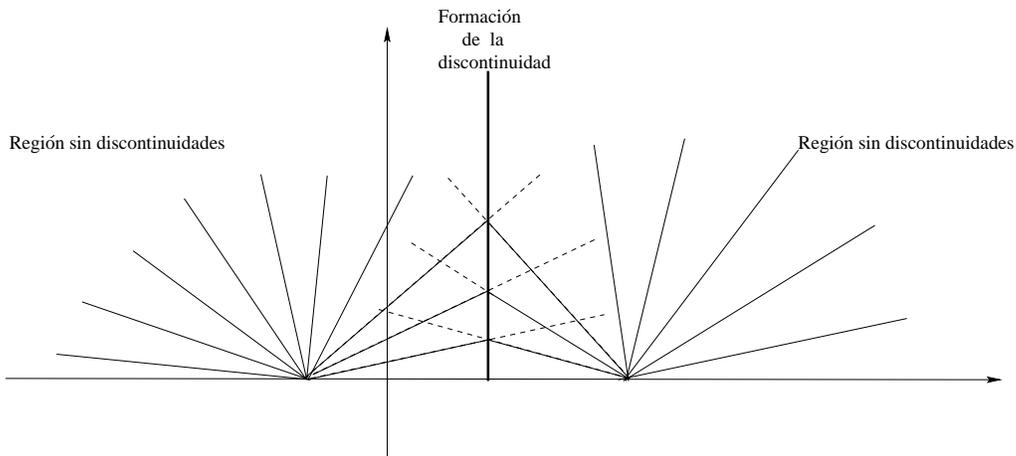


Figura 3.1:

stante a lo largo de ellas y un cambio abrupto de éstas o más aún, hallar una región de choque (una solución débil), señalará la región donde se propaga una discontinuidad. Figura 3.1.

Al intentar extender este tipo de análisis a dos dimensiones se encontrará la ecuación de la iconal, que surge de estudiar cómo viaja un rayo de luz normal al frente de propagación, en un tiempo mínimo [15].

3.2 Una teoría geométrica para ondas espirales en medios activos.

En esta sección, a diferencia del capítulo anterior, se considera un sistema de reacción y difusión en particular, en él se analizará la propagación de sus frentes [11] y [12].

El tipo de modelo con el que se trabajará es interesante, porque a pesar de que sirve para modelar fenómenos, que en una primera impresión podrían parecer diferentes, tienen una dinámica muy semejante, pues todos ellos surgen de reacciones químicas parecidas. Algunos ejemplos se abordarán en el siguiente capítulo.

El sistema a analizar es el siguiente:

$$\begin{aligned} \varepsilon u_t &= \varepsilon^2 D \nabla^2 u + f(u, v), \\ v_t &= g(u, v), \end{aligned} \tag{3.1}$$

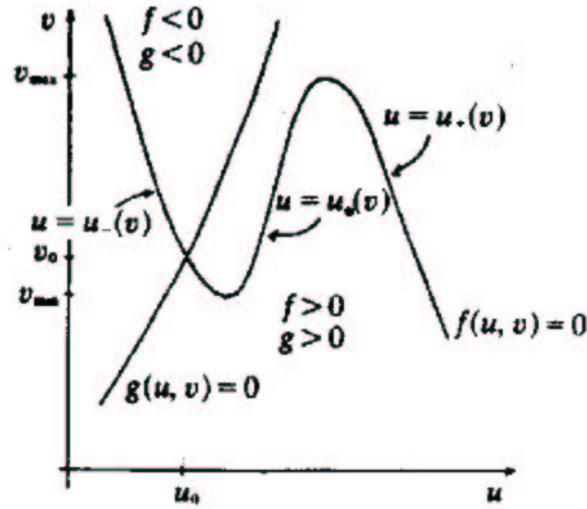


Figura 3.2: La función $f(u, v) = 0$ con $v_{\min} < v < v_{\max}$, se divide en tres funciones: U_- en el intervalo donde la función es decreciente antes del mínimo, U_* en el intervalo donde la función es creciente, comprendido entre el mínimo y el máximo de la función y U_+ en el intervalo donde la función es decreciente después del máximo.

donde $u = u(x, t)$ y $v = v(x, t)$ con $x \in \mathbb{R}$, $t \geq 0$, $\varepsilon \in \mathbb{R}$ tal que $\varepsilon \ll 1$ y D constante. Además $f(u, v) = A(u - u_-)(u - u_*)(u - u_+) = 0$ con $u_- < u_* < u_+$ y $g(u, v) = 0$ son como se muestran en la Figura 3.2, y A constante.

El hecho de que $f(u, v) = 0$ sea cúbica no es arbitrario. FitzHugh y Nagumo la propusieron de ese modo en su ecuación para la transmisión de pulsos eléctricos en las neuronas, porque las funciones cúbicas son justamente las que sirven para modelar la interacción de sustancias químicas, una inhibidora y otra activadora, de cierto tipo de comportamiento.

Como una observación importante, notamos que el sistema (3.1.) tiene reacción rápida y difusión lenta [1]. También notemos que el punto de intersección (u_0, v_0) de $f(u, v) = 0$ con $g(u, v) = 0$ determina la estabilidad de la solución, pues de las raíces de $f(u, v) = 0$, u_- y u_+ son estables y u_* es inestable (lo anterior se afirma a partir del análisis del plano fase), por lo que será importante que $g(u, v) = 0$ interseque a $f(u, v) = 0$ en los intervalos donde la última es decreciente, que llamaremos U_- ó U_+ y se muestran en la Figura 3.2.

El sistema (3.1.) se resolverá por teoría de perturbaciones singulares.

Comparando los términos de orden cero en ε , obtenemos el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} f(u, v) &= 0, \\ y \\ v_t &= g(u, v), \end{aligned} \quad (3.2)$$

este sistema indica que a orden cero en ε , se está en una región de variación lenta, pues no aparecen términos de difusión.

Por la estabilidad de $u = U_-$ y $u = U_+$, se tiene que

$$v_t = g(U_{\pm}(v), v) \equiv G_{\pm}(v)$$

esto es, u puede caer sobre $u = U_-$ ó $u = U_+$, lo cual significa que pueden existir discontinuidades espaciales en u . La difusión de estas discontinuidades es importante y las regiones correspondientes a las tres funciones en las que se divide $f(u, v) = 0$ son “unidas” mediante el movimiento de capas límite, las cuales se hallan haciendo el siguiente cambio de variables:

$$\xi = \frac{x}{\varepsilon} - \frac{y(t)}{\varepsilon}$$

para analizar las soluciones constantes en ξ . Se sustituye en:

$$\varepsilon u_t = \varepsilon^2 D \nabla^2 u + f(u, v)$$

donde:

$$\begin{aligned} u_t &= u' \cdot \xi_t = u' \cdot \left(-\frac{y'(t)}{\varepsilon} \right) \\ u_x &= u' \cdot \xi_x = u' \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon} \right) \\ u_{xx} &= u' \cdot \xi_{xx} + (\xi_x)^2 \cdot u'' = \frac{1}{\varepsilon^2} u'' \end{aligned}$$

se obtiene:

$$D u'' + y'(t) \cdot u' + f(u, v_0) = 0 \quad (3.3)$$

con v_0 fija para poder resolver la ecuación, $u = u(\xi)$. Si definimos $y'(t) = \mu(v_0)$, se convierte en un problema de valores propios, con las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow -\infty} u(\xi) &= U_-(v_0), \\ \lim_{\xi \rightarrow +\infty} u(\xi) &= U_+(v_0), \end{aligned} \quad (3.4)$$

para considerar las soluciones de tipo onda viajera que tienden asintóticamente a la solución estacionaria.

Supongamos que $u' = \alpha(u - u_-)(u - u_+)$, ¹y sustituyendo en (3.3):

$$\alpha D[(u - u_-)(u - u_+)]' + \alpha y'(t)(u - u_-)(u - u_+) - A(u - u_-)(u - u_*)(u - u_+) = 0,$$

$$\alpha D[(u - u_-)u' + (u - u_+)u'] + \alpha y'(t)(u - u_-)(u - u_+) - A(u - u_-)(u - u_*)(u - u_+) = 0,$$

$$(u - u_-)(u - u_+)[\alpha^2 D(u - u_-) + \alpha^2 D(u - u_+) + \alpha y'(t) - A(u - u_*)] = 0,$$

$$(u - u_-)(u - u_+)[(2\alpha^2 D - A)u - \alpha^2 D(u_- + u_+) + \alpha y'(t) + Au_*] = 0.$$

Para hallar $y'(t)$ se impone que $2\alpha^2 D - A = 0$; así

$$-\alpha^2 D(u_- + u_+) + \alpha y'(t) + Au_* = 0$$

lo cual implica que:

$$\begin{aligned} y'(t) &= \frac{\frac{A}{2}(u_- + u_+) - Au_1}{\sqrt{\frac{A}{2D}}} \\ &= \frac{A\sqrt{2D}}{2\sqrt{A}}(u_- + u_+) - \frac{A\sqrt{2D}u_1}{\sqrt{A}} \\ &= \frac{\sqrt{AD}(u_- - 2u_* + u_+)}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

donde $y'(t) = \mu(v_0)$ es la velocidad del frente que depende de la posición de las raíces.

¹Se propone u' de ese modo, porque al resolverla (por separación de variables y utilizando fracciones parciales) se obtiene que

$$u = \frac{u_+ - e^{\xi\alpha(u_- - u_+)}u_-}{1 - e^{\xi\alpha(u_- - u_+)}}$$

la cual satisface las condiciones requeridas en (3.4)

El signo de μ se obtiene al integrar (3.3), con respecto a ξ ; para ello se utiliza u' como factor integrante.

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \left[D \left(\frac{u'^2}{2} \right)' + \mu u'^2 \right] d\xi &= - \int_{-\infty}^{\infty} f(u, v_0) u' d\xi \\ &= - \int_{U_-}^{U_+} f(u, v_0) du \end{aligned}$$

lo cual implica

$$D \left(\frac{u'^2}{2} \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} + \mu \int_{-\infty}^{\infty} (u')^2 d\xi = - \int_{U_-}^{U_+} f(u, v_0) du$$

pero u_- y u_+ son U_- y U_+ , por (3.4), entonces u' en (3.3) anula la contribución de u'^2 , por lo que

$$\mu = \frac{- \int_{U_-}^{U_+} f(u, v_0) du}{\int_{-\infty}^{\infty} (u')^2 d\xi} \quad (3.5)$$

es la velocidad de propagación de la capa límite, la cual no es constante, ya que v_0 cambia en el tiempo, es decir $\mu = \mu(v_0)$.

Para encontrar la relación de dispersión para este problema, además de la velocidad μ , se debe conocer el periodo, éste se obtiene al integrar la ecuación (3.2).

Pero antes, notemos que si se busca una onda viajera que corresponda a v evaluada en v_0 , su velocidad será la expresión obtenida en (3.5) y el periodo podría ser consistente con la dinámica externa. Sin embargo, si existe v_1 un valor de v para el cual $\mu(v_1) = -\mu(v_0)$ o si no existe tal valor se toma $v_1 = v_+$, donde v_+ es el máximo local de $f(u, v) = 0$; entonces el periodo temporal del tren de onda será $T = T(v_0)$, como sigue:

$$T(v_0) = \int_{v_0}^{v_1} \left[\frac{1}{g(u_+(v), v)} - \frac{1}{g(u_-(v), v)} \right] dv \quad (3.6)$$

para orden cero en ε .

La relación entre μ (velocidad) y $\omega = \frac{2\pi}{T}$ (frecuencia) define la curva de dispersión del problema.

Para $\varepsilon \neq 0$ fija, la curva de dispersión tiene dos ramas, una que se obtendría con (3.5) y (3.6) ya calculadas, correspondiente a la propagación de la onda estable y la otra a las ondas periódicas inestables lentas [12], pero estos últimos hechos no serán utilizados para analizar los frentes que se propagan en espiral en dos dimensiones, para ello se emplearán las expresiones desarrolladas hasta aquí.

3.2.1 La ecuación de la iconal en dos dimensiones.

Para hallar la capa límite en dos dimensiones se introduce un sistema de coordenadas ortogonales locales de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} x &= X(\zeta, \eta, \tau), \\ y &= Y(\zeta, \eta, \tau) \quad \text{con} \quad \zeta = \varepsilon\xi, \\ t &= \tau. \end{aligned}$$

Así $u = u(x, y, t)$, también puede verse como $u = u(\zeta, \eta, \tau)$, por lo que:

$$u_t = u_\zeta \zeta_t + u_\eta \eta_t + u_\tau. \quad (3.7)$$

Se necesita conocer ζ_t y η_t , para ello derivamos X y Y con respecto a t , tomando en cuenta que x, y, t son variables independientes, se obtiene:

$$\begin{aligned} x_t &= X_\zeta \zeta_t + X_\eta \eta_t + X_\tau = 0, \\ y_t &= Y_\zeta \zeta_t + Y_\eta \eta_t + Y_\tau = 0. \end{aligned}$$

El sistema anterior se puede reescribir como:

$$\begin{pmatrix} X_\zeta & X_\eta \\ Y_\zeta & Y_\eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta_t \\ \eta_t \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} X_\tau \\ Y_\tau \end{pmatrix}.$$

Si

$$J^* = \begin{pmatrix} X_\zeta & X_\eta \\ Y_\zeta & Y_\eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} X_\xi & X_\eta \\ \frac{1}{\varepsilon} Y_\xi & Y_\eta \end{pmatrix}$$

podemos obtener ζ_t y η_t de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \zeta_t \\ \eta_t \end{pmatrix} = -\frac{1}{|J^*|} \begin{pmatrix} Y_\eta & -X_\eta \\ -Y_\zeta & X_\zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_\tau \\ Y_\tau \end{pmatrix}$$

de donde

$$\begin{aligned}\zeta_t &= \frac{1}{|J^*|}(X_\eta Y_\tau - X_\tau Y_\eta) \Rightarrow \xi_t = \frac{1}{|J|}(X_\eta Y_\tau - X_\tau Y_\eta), \\ \eta_t &= \frac{1}{|J^*|}(X_\tau Y_\zeta - X_\zeta Y_\tau) \Rightarrow \eta_t = \frac{1}{|J|}(X_\tau Y_\xi - X_\xi Y_\tau),\end{aligned}$$

con $|J| = X_\xi Y_\eta - X_\eta Y_\xi$.

Sustituyendo en (3.7), tenemos:

$$u_t = \frac{1}{|J|} \left[\frac{1}{\varepsilon}(X_\eta Y_\tau - X_\tau Y_\eta)u_\xi + (X_\tau Y_\xi - X_\xi Y_\tau)u_\eta \right] + u_\tau. \quad (3.8)$$

Además

$$|J|^2 = X_\xi^2 Y_\eta^2 + X_\eta^2 Y_\xi^2 - 2X_\xi Y_\eta X_\eta Y_\xi \quad (3.9)$$

pero como ξ y η son ortogonales, entonces $\begin{pmatrix} X_\eta \\ Y_\eta \end{pmatrix}$ es ortogonal a $\begin{pmatrix} X_\xi \\ Y_\xi \end{pmatrix}$, es decir, $X_\eta X_\xi + Y_\eta Y_\xi = 0$; así $(X_\eta X_\xi + Y_\eta Y_\xi)^2 = 0$, por lo que sumando esta última expresión a (3.9) se tiene que

$$\begin{aligned}|J|^2 &= X_\xi^2 Y_\eta^2 + X_\eta^2 Y_\xi^2 + X_\xi^2 X_\eta^2 + Y_\eta^2 Y_\xi^2 \\ &= (X_\xi^2 + Y_\xi^2)(X_\eta^2 + Y_\eta^2)\end{aligned}$$

Con lo anterior (3.8) es:

$$\begin{aligned}u_t &= \frac{1}{\sqrt{(X_\xi^2 + Y_\xi^2)(X_\eta^2 + Y_\eta^2)}} \left[\frac{1}{\varepsilon}(X_\eta Y_\tau - X_\tau Y_\eta)u_\xi + (X_\tau Y_\xi - X_\xi Y_\tau)u_\eta \right] \\ &\quad + u_\tau.\end{aligned}$$

Del mismo modo se obtiene que:

$$\begin{aligned}\nabla^2 u &= \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{1}{\sqrt{(X_\xi^2 + Y_\xi^2)}} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{\sqrt{X_\xi^2 + Y_\xi^2}} \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \varepsilon K_\eta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right] \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{(X_\eta^2 + Y_\eta^2)}} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{\sqrt{X_\xi^2 + Y_\xi^2}} \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) - \varepsilon K_\xi \frac{\partial u}{\partial \eta} \right]\end{aligned}$$

donde

$$K_i = \frac{X_i Y_{ii} - Y_i X_{ii}}{(X_i^2 + Y_i^2)^{\frac{3}{2}}}$$

con $i = \xi, \eta$

Sustituyendo las expresiones anteriores en (3.1) y suponiendo que $u_\eta = u_\tau = 0$, se obtiene:

$$\frac{D}{X_\xi^2 + Y_\xi^2} u_{\xi\xi} - \left[\frac{X_\xi X_{\xi\xi} + Y_\xi Y_{\xi\xi}}{(X_\xi^2 + Y_\xi^2)^{\frac{3}{2}}} - \frac{(X_\tau Y_\eta - Y_\tau X_\eta)}{\sqrt{(X_\xi^2 + Y_\xi^2)(X_\eta^2 + Y_\eta^2)}} \right] u_\xi + \varepsilon K_\eta u_\xi + f(u, v) = 0,$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \frac{(X_\tau Y_\eta - Y_\tau X_\eta)}{\sqrt{X_\eta^2 + Y_\eta^2}} v_\xi = \frac{(X_\tau Y_\xi - Y_\tau X_\xi)}{\sqrt{X_\eta^2 + Y_\eta^2}} v_\eta - v_\tau + g(u, v).$$

Si se supone que $X_\xi^2 + Y_\xi^2 = 1$ y como $(X_\xi, Y_\xi) \cdot (X_{\xi\xi}, Y_{\xi\xi}) = 0$, el sistema anterior es:

$$D u_{\xi\xi} + (N_\eta + \varepsilon K_\eta) u_\xi + f(u, v) = 0 \quad (3.10)$$

$$N_\eta v_\xi = \frac{\varepsilon N_\xi}{\sqrt{X_\eta^2 + Y_\eta^2}} v_\eta - \varepsilon v_\tau + \varepsilon g(u, v) \quad (3.11)$$

donde

$$N_i = \frac{(X_\tau Y_i - Y_\tau X_i)}{\sqrt{X_i^2 + Y_i^2}} \quad \text{con} \quad i = \xi, \eta.$$

es la velocidad normal del sistema de coordenadas local.

De la ecuación (3.11) se induce que $v = v_0 + O(\varepsilon)$.

Si K_η y N_η son independientes de ξ y comparamos las ecuaciones (3.10) y (3.3) se tiene ²:

²La variación en ξ no afecta significativamente esta aproximación. Esto último se comprueba representando el sistema coordenado localmente por:

$$X(\xi, \eta, \tau) = X_0(\eta, \tau) + \frac{\xi X_{0\eta}}{\sqrt{X_{0\eta}^2 + Y_{0\eta}^2}} + O(\xi^2),$$

$$N_\eta + \varepsilon DK_\eta = \mu(v_0). \quad (3.12)$$

En general, el valor de v_0 cambia con la posición espacial y temporal del frente de onda, pero si sólo se consideran ondas periódicas o solitarias y existe la función inversa $T^{-1}(v_0)$, se tiene que

$$N_\eta + \varepsilon DK_\eta = \mu^*(T) \quad (3.13)$$

donde $\mu^*(T) = \mu(T(v_0))$ denota la relación de dispersión para la velocidad de la onda como función del periodo $T = T(v_0)$.

3.2.2 Soluciones en espiral.

El objetivo de esta sección es verificar que una onda espiral de k brazos, cuyas coordenadas en el frente son:

$$\begin{aligned} X_j &= r \cos\left(\theta(r) - \omega t + \frac{2\pi j}{k}\right) \\ Y_j &= r \left(\theta(r) - \omega t + \frac{2\pi j}{k}\right) \quad \text{con } j = 1, 2, \dots, k. \end{aligned} \quad (3.14)$$

es solución del sistema 3.1. en dos dimensiones.

Para mostrarlo se procederá de la siguiente forma:

$$Y(\xi, \eta, \tau) = Y_0(\eta, \tau) + \frac{\xi Y_{0\eta}}{\sqrt{X_{0\eta}^2 + Y_{0\eta}^2}} + O(\xi^2)$$

y sustituyendo en (3.1), al final se obtiene que:

$$N_\eta = N_\eta|_{\xi=0} + O(\xi^2)$$

Así, para orden ε^2 , $N_\eta + \varepsilon DK_\eta$ es independiente de ξ , por lo que:

$$N_\eta + \varepsilon DK_\eta = \mu(v_0) + 0(\varepsilon)$$

- Se encontrarán las expresiones para la normal y la curvatura con el sistema de coordenadas propuesto, para hallar la ecuación de la iconal.

- Aprovechando la pequeñez de ε , se mostrará que los parámetros que determinan la onda espiral están definidos por los valores que satisfacen simultáneamente la relación de dispersión, análoga a la expresión (3.6), y una relación crítica para ondas espirales.

Las condiciones que se imponen a (3.14) son: que $\theta > 0$, esto es, que la espiral se abra en sentido levógiro; se buscarán soluciones en un anillo $r_0 \leq r \leq r_1$, donde $r_0 \rightarrow 0$. Las condiciones de frontera son $\theta'(r_0) = 0$ y $\theta'(r_1) = 0$, es decir, que no halla flujo en las fronteras ³. Si $r_1 \rightarrow \infty$, se espera que $\theta(r)$ sea asintóticamente lineal, esto es, que (3.14) sea asintóticamente arquimideana.

Para calcular N notamos que las coordenadas (η, τ) son equivalentes a (r, t) , por lo que:

$$N = \frac{X_t Y_r - Y_t X_r}{\sqrt{X_r^2 + Y_r^2}}.$$

A continuación sustituiremos las siguientes derivadas parciales en la expresión anterior para N , considerando $\alpha = \theta(r) - \omega t + \frac{2\pi j}{k}$.

$$X_t = -r \sin \alpha \cdot (-\omega) = r\omega \sin \alpha$$

$$X_r = \cos \alpha - r \sin \alpha \cdot \theta'(r)$$

$$Y_t = -\omega r \cos \alpha$$

$$Y_r = \sin \alpha + r \cos \alpha \cdot \theta'(r)$$

De donde

$$\begin{aligned} N &= (r\omega \sin^2 \alpha + r^2 \omega \theta' \sin \alpha \cdot \cos \alpha + \omega r \cos^2 \alpha \\ &- \omega r^2 \theta' \sin \alpha \cdot \cos \alpha) \cdot (\cos^2 \alpha - 2r \theta' \cos \alpha \cdot \sin \alpha \\ &+ r^2 \theta'^2 \sin^2 \alpha + \sin^2 \alpha + 2r \theta' \cos \alpha \cdot \sin \alpha + r^2 \theta'^2 \cos^2 \alpha)^{\frac{-1}{2}}. \end{aligned}$$

Así

$$N = \frac{\omega r}{\sqrt{1 + [r\theta'(r)]^2}}.$$

³La naturaleza de estas condiciones de frontera proviene del tipo de fenómenos que se modelan con sistemas como el (3.1). Ejemplos de éstos se abordarán en el siguiente capítulo.

Si se denota a $\Psi = r\theta'(r)$, entonces $N = \frac{\omega r}{\sqrt{1+\Psi^2}}$. Además conocemos una forma de obtener la curvatura; sustituyendo

$$\begin{aligned} X_{rr} &= -\theta'(r) \sin \alpha - \{r[\theta'(r)]^2 \cos \alpha + [r\theta''(r) + \theta'(r)] \sin \alpha\} \\ &= -2\theta'(r) \sin \alpha - r\theta''(r) \sin \alpha - r[\theta'(r)]^2 \cos \alpha \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_{rr} &= \theta'(r) \cos \alpha + \{-r[\theta'(r)]^2 \sin \alpha + [r\theta''(r) + \theta'(r)] \cos \alpha\} \\ &= 2\theta'(r) \cos \alpha + r\theta''(r) \cos \alpha - r[\theta'(r)]^2 \sin \alpha \end{aligned}$$

$$\text{en } K = \frac{X_r Y_{rr} - Y_r X_{rr}}{\sqrt{(X_r^2 + Y_r^2)}}.$$

Por tanto

$$\begin{aligned} K &= \{2\theta'(r) \cos^2 \alpha + r\theta''(r) \cos^2 \alpha - r[\theta'(r)]^2 \cos \alpha \cdot \sin \alpha \\ &\quad - 2r[\theta'(r)]^2 \cos \alpha \cdot \sin \alpha - r^2\theta'(r) \cdot \theta''(r) \cos \alpha \cdot \sin \alpha \\ &\quad + r^2[\theta'(r)]^3 \sin^2 \alpha + 2\theta'(r) \sin^2 \alpha + r\theta''(r) \sin^2 \alpha \\ &\quad + r[\theta'(r)]^2 \sin \alpha \cdot \cos \alpha + 2r[\theta'(r)]^2 \cos \alpha \cdot \sin \alpha \\ &\quad + r^2\theta'(r) \cdot \theta''(r) \cos \alpha \cdot \sin \alpha + r^2[\theta'(r)]^3 \cos^2 \alpha\} (1 + \Psi^2)^{-\frac{3}{2}} \\ &= \frac{2\theta'(r) + r\theta''(r) + r^2(\theta'(r))^3}{(1 + \Psi^2)^{\frac{3}{2}}} \\ &= \frac{r\theta''(r) + \theta'(r)}{(1 + \Psi^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{r\theta'(r)[1 + r^2(\theta'(r))^2]}{r(1 + \Psi^2)^{\frac{3}{2}}} \end{aligned}$$

Notemos que $\Psi' = r\theta''(r) + \theta'(r)$, así:

$$K = \frac{\Psi'}{(1 + \Psi^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{\Psi}{r(1 + \Psi^2)^{\frac{1}{2}}}$$

El siguiente paso es resolver la ecuación $N = \mu^*(T)$ para estudiar el frente de onda plana, se tiene :

$$\mu^* = \frac{\omega r}{\sqrt{1 + \Psi^2}} = \frac{\omega r}{\sqrt{1 + [r\theta'(r)]^2}}$$

lo cual implica que

$$\theta'(r) = \frac{\sqrt{\left(\frac{\omega r}{\mu^*}\right)^2 - 1}}{r}$$

por lo que

$$\theta(r) = \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)^{\frac{1}{2}} - \tan^{-1} \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{con} \quad r_0 = \frac{\mu^*}{\omega}.$$

Si se toma $s = \left(\frac{r^2}{r_0^2} - 1\right)^{\frac{1}{2}}$ y se sustituye en 3.14, se tiene:

$$\begin{aligned} X(s) &= r_0 \cos s + r_0 s \sin s, \\ Y(s) &= r_0 \sin s - r_0 s \cos s \end{aligned}$$

que es la ecuación de la involuta de un círculo de radio r_0 , es decir, la involuta es la solución de onda plana para nuestro problema.

Por consistencia, se toma $\omega = \frac{2\pi}{T}$, donde T es el periodo calculado de acuerdo a la ecuación (3.6), es decir, la relación de dispersión para la onda plana es $\mu^* = \frac{r_0 2\pi}{T}$, la cual es válida si $r_1 \rightarrow \infty$ y r_0 no se aproxima a cero.

Lo siguiente es resolver la ecuación $N = \mu^*(T) - \varepsilon DK$ para estudiar el frente de la onda espiral, después de sustituir N y K se tiene:

$$\frac{\omega r}{\sqrt{1 + \Psi^2}} = \mu^* - \varepsilon D \left[\frac{\Psi'}{(1 + \Psi^2)^{\frac{3}{2}}} + \frac{\Psi}{r(1 + \Psi^2)^{\frac{1}{2}}} \right]$$

Si se toma $D = 1$, se obtiene el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} \Psi'(r) &= \frac{1}{r}(1 + \Psi^2) \left[\frac{r\mu^*}{\varepsilon}(1 + \Psi^2)^{\frac{1}{2}} - \frac{\omega r^2}{\varepsilon} - \Psi \right] \\ \theta'(r) &= \frac{1}{r}\Psi \end{aligned} \tag{3.15}$$

Además si se supone que $r_1 \rightarrow \infty$, entonces $\theta(r) \sim r$. De este modo, los puntos críticos del sistema son: $(r_1^*, \Psi_1^*) = (0, 0)$ y $(r_2^*, \Psi_2^*) = \left(\frac{\mu^*}{\omega}, 0\right)$.

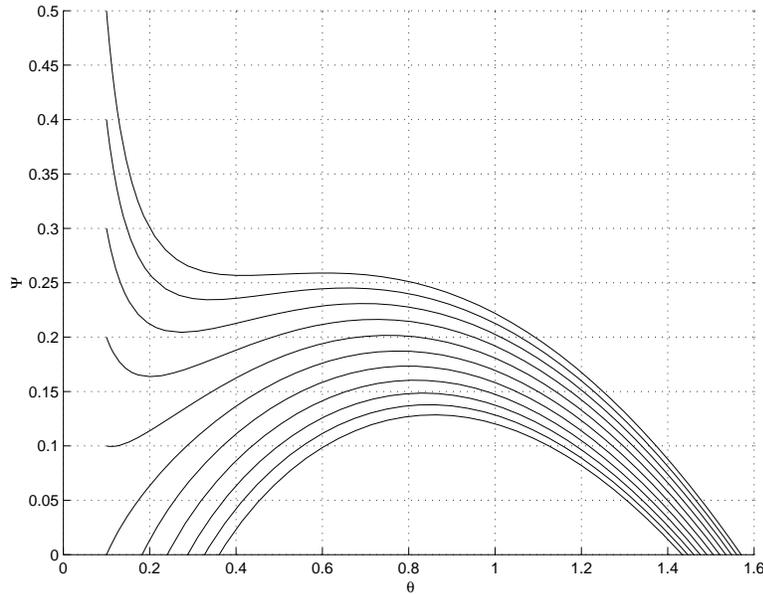


Figura 3.3: Plano fase del sistema (3.15) con $\frac{\omega}{\varepsilon} = 1$, $\frac{\mu^*}{\varepsilon} = 1$ y r_1 con distintos valores entre 1.4 y 1.6.

Al graficar el plano fase dando diferentes valores a r_1 y fijando valores constantes para ω , ε y μ^* , se obtienen las trayectorias tal como se muestran en la Figura 3.3.

A partir de observaciones sobre la forma de las trayectorias del plano fase, Keener[12] hizo experimentos numéricos y estableció la siguiente relación crítica⁴ para ω y μ^* :

$$\frac{\omega}{\varepsilon} = \frac{1}{r_1^2} \Omega(x, y) \quad \text{con} \quad x = \frac{r_1 \mu^*}{\varepsilon}, \quad y = \frac{r_0}{r_1} \quad (3.16)$$

donde $\Omega(x, y) = 0.330958x^2 - 0.097x^4y^2 + O(y^4)$ para $x \geq 10$ y y pequeña.

Es importante notar que la ecuación (3.16), indica que este análisis es válido sólo para ondas con alta frecuencia.

Para la relación de dispersión se asume que está dada por $\mu^* = \mu^*(\frac{2\pi}{\omega})$, donde $\omega = \frac{2\pi}{T}$ y T se calcula a partir de la expresión (3.6).

Lo anterior es posible, porque $\xi = \text{constante}$, es decir, en la superficie $G(\xi, \eta, \tau)$ se toman en cuenta sólo las curvas de nivel en el plano $\eta - \tau$, trabajando con $G = G(\eta, \tau)$ como si fuera una función en una dimensión espacial (τ es la variable temporal) y

⁴La relación crítica depende de μ^* , r y el parámetro ε , mientras que la de dispersión sólo relaciona μ^* con T

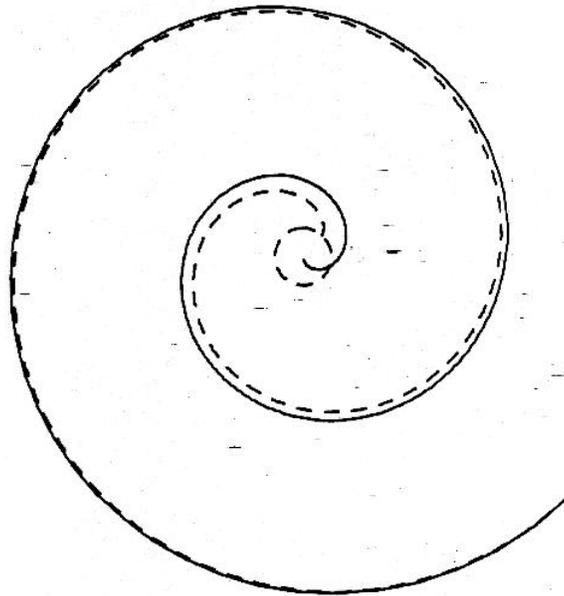


Figura 3.4: En esta figura se muestran la gráfica de una involuta, en línea discontinua, y la de una espiral.

así se puede aplicar directamente la ecuación (3.6) para hallar el periodo.

Al encontrar la intersección de la relación de dispersión, con la relación crítica, se pueden encontrar valores para μ^* y ω que si se aplican a la solución de onda espiral propuesta se obtendrá una solución espiral válida, excepto cerca del núcleo.

En el siguiente capítulo se encontrarán explícitamente valores para μ^* y ω de los ejemplos específicos con el procedimiento descrito anteriormente.

Capítulo 4

Ejemplos de sistemas cuyas soluciones son frentes que se propagan en espiral.

Los tres ejemplos que se mostrarán en este capítulo tienen algunas similitudes fenomenológicas y están gobernados por ecuaciones similares, que son de reacción y difusión en espacios bidimensionales con cinética singular y no lineal.

4.1 La reacción de Belousov-Zhabotinsky.

En 1950 Boris P. Belousov desarrolló un modelo químico de la oxidación de organismos moleculares en células vivas, lo más importante para este modelo fue la comprensión del ciclo de Krebs (ver apéndice B), donde los ácidos orgánicos son oxidados por bióxido de carbono (CO_2) y agua (H_2O). Belousov usó ácido cítrico como un sustrato orgánico, iones de bromato como agentes oxidantes e iones de cerio como catalizadores y esperaba que la reacción fuera monotónamente estable; sin embargo no fue así, ya que la reacción cambiaba de una solución incolora (cerio en el estado reducido, Ce^{3+}) a una amarilla pálida (cerio en el estado oxidado, Ce^{4+}) y después a una incolora nuevamente; realizando este comportamiento cíclico por 3 ó 4 horas aproximadamente, es decir, yendo de un estado oxidado a otro reducido hasta que las concentraciones de los productos intermediarios fueran consumidos en cantidad suficiente como para que el equilibrio se alcanzara y la oscilación desapareciera [16] y [18].

En 1961, Anatol Zhabotinsky confirmó los descubrimientos de Belousov y logró que el trabajo fuera publicado (por lo que actualmente se le conoce como la reacción

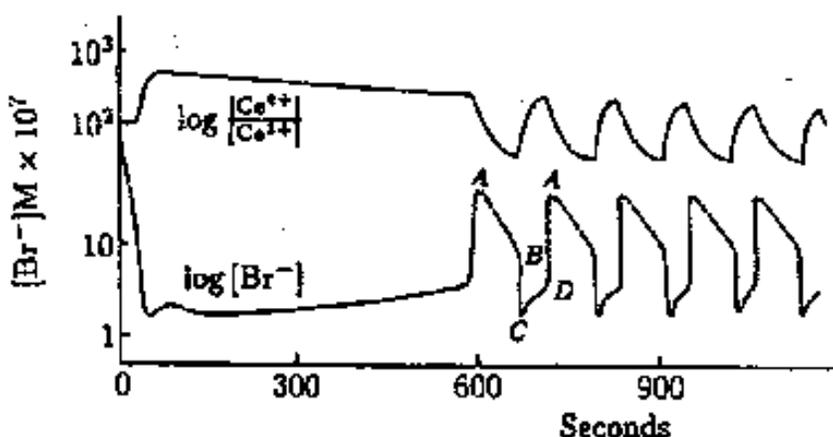


Figura 4.1: Oscilaciones en la reacción de Belousov-Zhabotinsky: En la gráfica notamos que la razón entre $[Ce]^{4+}$ y $[Ce]^{3+}$ siempre es menor que uno, por lo que en los máximos hay estado de oxidación y de reducción en los mínimos. También se observa que el período es de 2 min. aproximadamente.

BZ), ya que anteriormente los editores de publicaciones científicas habían considerado imposible la existencia de una reacción homogénea oscilante, y por tanto el trabajo no se había publicado.

En 1970, Zaikin y Zhabotinsky describieron la propagación de ondas de oxidación en una película de la reacción *BZ*. Estas ondas se organizan en círculos concéntricos (patrones de tiro al blanco) que se expanden desde la zona central de iniciación periódica. El período temporal varía de un patrón a otro. La velocidad de propagación de la onda depende del período del patrón (relación de dispersión del medio).

Generalmente la velocidad de la onda decrece cuando su frecuencia crece, porque las ondas de alta frecuencia viajan superponiéndose a otras de tal modo que las ondas de oxidación son forzadas a propagarse en un medio que está recubierto de ondas en estado reducido las cuales viajan más lentamente.

También la velocidad de la onda depende de la curvatura del frente de onda. La relación de la velocidad normal N con la curvatura del frente de onda K es aproximadamente lineal, y podemos escribirla como:

$$N = \mu + DK$$

donde μ es la velocidad de las ondas planas y D es un coeficiente de difusión.

Winfree y Zhabotinsky descubrieron de modo independiente la existencia de on-

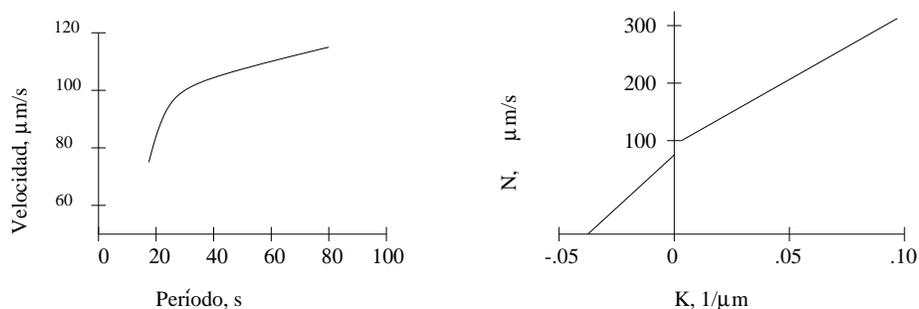


Figura 4.2: Gráficas de las relaciones de dispersión y curvatura en la reacción *BZ*.

das espirales en películas de la reacción *BZ*. Todas las ondas espirales tienen la misma frecuencia de rotación; en otras palabras, existe sólo una onda espiral para cada medio activo[14].

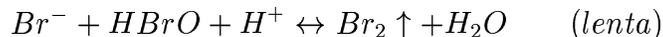
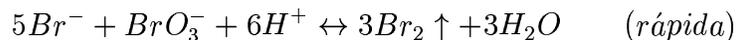
En una capa delgada de la solución de la reacción *BZ* en un disco de Petri se producen patrones de concentración en espiral, los cuales rotan con frecuencia constante alrededor de un centro fijo. Winfree [23] propone que estas ondas resultan de la interacción entre el proceso químico de reacción y el proceso físico de difusión molecular. Por otro lado, se supone que estas ondas surgen cuando la reacción es perturbada por una impureza.

Ahora, nos ocuparemos de la obtención del modelo para la reacción *BZ*.

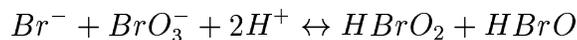
Para producir la reacción *BZ* el ácido cítrico puede ser sustituido por una variedad de compuestos orgánicos que tengan un hidrógeno metilénico activo o por grupos metilénicos que se formarán fácilmente por oxidación (por ejemplo: ácido malónico, ácido bromomalónico, ácido acetoacético, ácido oxalacético, ácido málico; algunos de ellos involucrados en el ciclo de Krebs) y también se puede sustituir el catalizador ión cerio por ión manganeso o ferroína ($Fe(phen)_3^{2+}$).

A continuación se describirá en cinco pasos la reacción *BZ*:

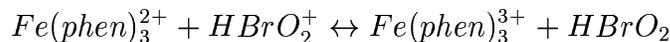
a) Primero se señalan dos reacciones que conducen a la producción de bromo:



b) La segunda reacción implica que tiene que haber una reacción que genere el ácido hipobromoso y que puede estar dada por:



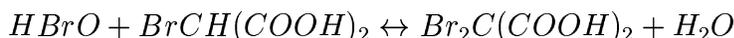
c) Zhabotinsky propone que la especie $HBrO_2^+$ reacciona con la forma reducida del indicador representado por la siguiente ecuación:



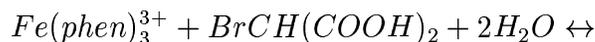
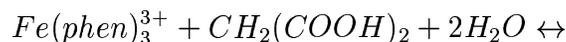
y éste a su vez se genera por la reacción,



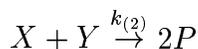
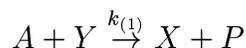
d) Otro paso importante es la bromación del ácido malónico que se explica a través de las siguientes reacciones:

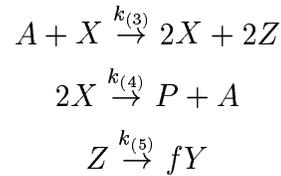


e) Finalmente el indicador en la forma oxidada obtenida por la reacción anterior en el paso c), reacciona con el ácido malónico y con el ácido bromomalónico para producir nuevamente ferroína. En estas últimas reacciones se muestran la descarboxilación del material orgánico y la generación del CO_2 .



Para obtener el modelo matemático a partir del modelo químico anteriormente descrito, se representan con A al ión bromato (BrO_3^-), con P al ácido hipobromoso ($HBrO$), con X al ácido bromoso ($HBrO_2$), con Y al ión bromuro (Br^-), con Z al ión complejo de hierro (III) o ferroína ($Fe(phen)_3^{3+}$) y con f a un factor estequiométrico; obteniendo las siguientes reacciones:





Usando “la ley de acción de masas”¹ en estas reacciones se obtienen las ecuaciones con las que se describe al sistema:

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= k_1AY - k_2XY + k_3AX - k_4X^2 \\
 \frac{dy}{dt} &= -k_1AY - k_2XY + fk_5Z \\
 \frac{dz}{dt} &= 2k_3AX - k_5Z \\
 \frac{dp}{dt} &= k_1AY + 2k_2XY + k_4X^2 \\
 \frac{da}{dt} &= -k_1AY - k_3AX + k_4X^2
 \end{aligned}$$

en este sistema podemos ignorar las últimas dos ecuaciones, porque A es constante en la escala de tiempo del experimento y porque P no aparece en las tres primeras ecuaciones, por lo que no afecta el cambio de estos productos intermedios, con lo que el sistema se simplifica a uno de tres ecuaciones.

Además podemos re-escalar el sistema tomando:

$$\begin{aligned}
 x &= \frac{2k_4}{k_3A}X, & y &= \frac{k_2}{k_3A}Y, & z &= \frac{(k_3A)^2}{k_4k_5}Z, \\
 t &= \frac{1}{k_5}T, & \varepsilon &= \frac{k_5}{k_3A} = 10^{-3}, & \varepsilon' &= \frac{2k_4}{k_2} = 5 \times 10^{-6} \\
 & & q &= \frac{2k_1k_4}{k_2k_3} = 10^{-3}, & \hat{f} &= 2f = 3,
 \end{aligned}$$

\hat{f} en la práctica es un valor próximo a $1 + \sqrt{2}$ y $A = 0.5 \text{ moles}$. De donde se obtiene:

$$\varepsilon \frac{dx}{dt} = qy - xy + x(1 - x),$$

¹La ley de acción de masas establece que la tasa de reacción es proporcional al producto de sus concentraciones.

$$\begin{aligned}\varepsilon' \frac{dy}{dt} &= -qy - xy + \hat{f}z, \\ \frac{dz}{dt} &= x - z.\end{aligned}$$

Suponiendo que las relaciones de orden $\varepsilon' < \varepsilon < 1$ y $\varepsilon' < q < 1$ son válidas y que y está casi en equilibrio, es decir

$$y = \frac{\hat{f}z}{x + q}$$

y sustituyendo estas expresiones en el último sistema, se tiene:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{dx}{dt} &= x - x^2 - \hat{f}z \left(\frac{x - q}{x + q} \right) = f(x, z), \\ \frac{dz}{dt} &= x - z = g(x, z),\end{aligned}$$

el cual describe la reacción química en una película de la reacción. Cuando las especies químicas se difunden libremente se pueden incluir términos de difusión en el modelo de tal modo que el sistema a analizar es:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{\partial x}{\partial t} &= \varepsilon^2 \nabla^2 x + f(x, z), \\ \frac{\partial z}{\partial t} &= \varepsilon \nabla^2 z + g(x, z),\end{aligned}\tag{4.1}$$

en el que se supone que el coeficiente de difusión para x , D_x , y el coeficiente de difusión para z , D_z son iguales a ε . De modo que el sistema representa una reacción química con difusión lenta y reacción rápida [13].

Ahora, se verificará que este sistema tiene soluciones aproximadas que se propagan en espiral.

Al comparar el sistema (4.1) con el (3.1) se observa que la segunda ecuación del sistema (4.1) tiene un término de difusión pequeño, por lo que se puede despreciar, quedando un sistema del tipo (3.1) para aplicar el análisis efectuado en el capítulo anterior y obtener una solución aproximada para éste.

Al encontrar numéricamente las relaciones crítica (3.16) y de dispersión para este modelo, se pueden hallar los valores de ω y μ^* , con lo que se determinan los parámetros de la solución en espiral.

En la siguiente tabla se muestran valores para espirales con diferente longitud de onda para la reacción BZ:

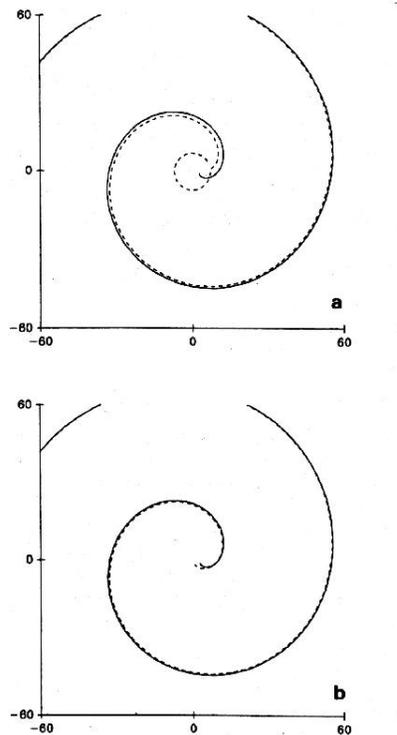


Figura 4.3: En a) se compara el frente en espiral (línea continua) con la involuta de una espiral. En b) se compara el frente en espiral (línea continua) con una espiral de Arquímedes.

Longitud de onda (cm)	Periodo (s)	Velocidad (cm/s)
0.2	30	7×10^{-3}
0.15	50	3×10^{-3}
0.1	15	7×10^{-3}

Las gráficas obtenidas no difieren mucho, básicamente todas tienen el comportamiento que se muestra en la Figura 4.3; en ésta se compara el frente de onda en espiral hallado numéricamente con la involuta de una espiral y con una espiral de Arquímedes.

4.2 Ondas espirales y la diferencia en el potencial eléctrico del corazón.

El tejido del miocardio es un medio activo a través del cual se difunden ondas de estimulación eléctrica y contracción muscular. En él se propagan radialmente ondas de actividad neuromuscular que caracterizan el latido normal del corazón; pero también pueden observarse, en condiciones particulares, ondas espirales, de alta frecuencia, asociadas con patologías cardíacas (fibrilación o latidos irregulares).

Si se estudia al miocardio como un tejido bidimensional formado de elementos neuromusculares activos, acoplados eléctricamente; entonces puede describirse de manera confiable, desde un punto de vista biofísico, por un conjunto de ocho ecuaciones ordinarias y parciales, las ecuaciones de Beeler-Reuter, las cuales son una versión modificada de las ecuaciones de Hodgkin-Huxley para transmisión del impulso nervioso a lo largo del axón de una neurona. Sin embargo, también se puede trabajar con una versión modificada del modelo de FitzHugh-Nagumo, que toma características claves del modelo de Hodgkin-Huxley, pero es más simple.

Las modificaciones necesarias se discuten en [14]. El modelo es:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \Delta E + F(E) - I \tag{4.2}$$

$$\frac{\partial I}{\partial t} = \frac{(E - I)}{\tau(E)} \tag{4.3}$$

con

- t = tiempo.
- (r, θ) = coordenadas polares en el espacio.
- $E(r, \theta, t)$ = desviación local del potencial del estado base o de reposo.
- $I(r, \theta, t)$ = corriente iónica hacia afuera a través de la membrana.
- $\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$
- $F(E)$ = función lineal por partes que describe la excitabilidad de la membrana.
- $\tau(E)$ = una función positiva que describe la separación de escalas de tiempo para los cambios de corriente iónica relativa a los cambios de potencial de la membrana.

Para $F(E)$ y $\tau(E)$ se toman las funciones

$$F(E) = \begin{cases} -30E, & E < E_1, \\ gE - 0.12, & E_1 < E < E_2, \\ -30(E - 1), & E_2 < E. \end{cases}$$

$$\tau(E) = \begin{cases} 2, & E < E_1, \\ 16.6, & E_1 < E. \end{cases}$$

donde $E_1 = 0.12/(30 + g)$ y $E_2 = 30.12/(30 + g)$.

Con estas elecciones, $E = 0, I = 0$, es un punto de equilibrio estable (nodo), pero activo. Es decir, para perturbaciones pequeñas fuera del origen decae inmediata y exponencialmente, pero para perturbaciones suficientemente grandes ($E > 0.12/g$ para $I = 0$) son primero amplificadas para valores relativamente grandes de E e I antes de regresar exponencialmente al equilibrio.

El parámetro g representa corriente iónica lenta hacia dentro que dirige el potencial de la membrana rápidamente al estado activo ($E \cong 1$). La magnitud de g determina la actividad del tejido: cuando g decrece, el umbral de actividad ($0.12/g$) crece.

El sistema (4.1) está relacionado con las ecuaciones de FitzHugh-Nagumo con dos modificaciones mayores. La primera, la no linealidad cúbica de $F(E)$ es remplazada por una función lineal por partes. La segunda, la dinámica de la membrana está modificada.

En el estado activo la corriente iónica hacia afuera crece lentamente ($\tau(1) = 16.6$) hasta ser suficiente para causar repolarización en la membrana ($E \cong 0$), después la corriente iónica hacia afuera decrece relativamente rápido ($\tau(0) = 2$) para regresar al medio de prueba ($E = 0, I = 0$). El cambio en las escalas de tiempo, de un incremento lento en I en el estado activo para un decrecimiento rápido en I en el estado refractario; hace que el sistema (4.1) sea un buen modelo del tejido cardiaco, el cual gasta un tiempo relativamente grande (~ 100 milisegundos) en el estado activo y entonces se relaja rápidamente para permanecer en el estado refractario.

Para el sistema (4.1) se toman las condiciones de frontera con flujo cero sobre un disco ($0 \leq r \leq R \equiv 17.4$) y sobre un anillo ($r_h \leq r \leq R$)

$$\frac{\partial E}{\partial r} \Big|_R = 0,$$

$$\frac{\partial E}{\partial r} \Big|_{r_h} = 0.$$

El sistema (4.1) pertenece a la siguiente clase general de modelos de propagación de ondas en tejido neuromuscular:

$$\varepsilon u_t = \varepsilon^2 \Delta u + f(u, v),$$

$$u_t = g(u, v). \quad (4.4)$$

Y notamos que es del mismo tipo que se estudió en el capítulo 3, por lo que se puede afirmar que tiene soluciones que se propagan en espiral.

4.3 Las amibas *Dictyostelium Discoideum*.

A diferencia de las bacterias y otros microbios, las amibas *Dictyostelium Discoideum* cuentan con una estructura que se parece a la de las células humanas. Mientras que en las bacterias, el ADN flota dentro de la membrana celular, las *Dictyostelium* lo tienen concentrado en el núcleo (célula eucariota).

Se cree que hace mil millones de años aproximadamente, algunas células eucariotas evolucionaron en estructuras multicelulares y que fueron los antecesores comunes de plantas, hongos y animales. Aquí lo importante es que se pasó de la reproducción por división celular a la reproducción por “embrión”.

En 1933, Ken Raper aisló por primera vez la amiba *Dictyostelium Discoideum* y a principios de la década de 1950, John Tyler Bonner de la Universidad de Princeton filmó la conducta de esta amiba.

El ciclo vital de la *Dictyostelium Discoideum* consiste en perseguir, deglutir, digerir las bacterias a su alrededor y reproducirse mediante división celular. Pero cuando carecen de alimento su conducta cambia radicalmente; antes de que el alimento se agote, unas cuantas células empiezan a emitir pulsaciones de una molécula comunicante, el ciclo AMP (Adenosin Monofosfato); para ejemplificar, imaginemos esa señal como la sensación que sentimos al tener hambre. Cuando las amibas vecinas captan la señal, se acercan a la fuente y a su vez envían pulsos a células más distantes; así se crean ondas expansivas de cAMP por las que se guían hasta terminar conformando un montículo. Luego se desplazan como si fuera un organismo pluricelular, parecido a una babosa. Horas después los extremos de esta babosa se tocan y producen un tallo rígido de celulosa, en cuyo extremo superior forman un globo, lleno de amibas vivas cubierto con una capa de celulosa, a manera de espora que se mantendrá así hasta que un evento externo (el viento, la lluvia o algún animal) la transporte a otro lugar rico en bacterias donde recomenzarán su ciclo vital.²

²Además de la conducta descrita anteriormente y que es la más estudiada, las *Dictyostelium Discoideum* al carecer de alimento también pueden enquistarse individualmente en espera de ser transportadas a otro lugar rico en bacterias o dos amibas pueden “aparearse” (fusionarse mezclando sus genes), luego emiten señales cAMP a sus vecinas y cuando llegan las engullen y digieren, después caen en un estado de aletargamiento en espera de condiciones apropiadas para dividirse en miles de replicas más pequeñas, cada una con los genes combinados de la pareja inicial.

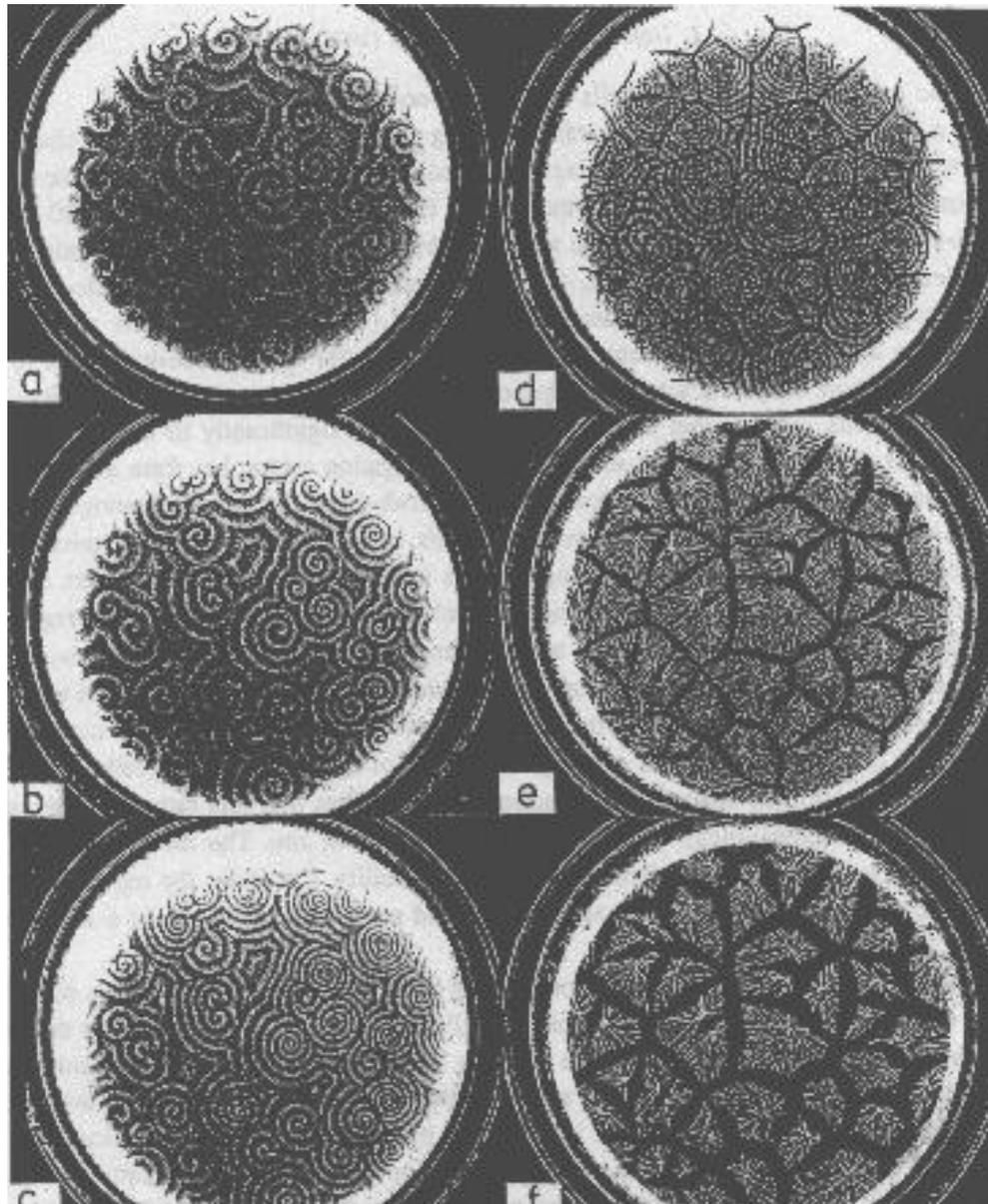


Figura 4.4: En los incisos a), b) y c) las *Dictyostelium Discoideum* empiezan a aglutinarse a lo largo de la señal cAMP en espiral. En los incisos c), d) y f) empiezan a formar un montículo.

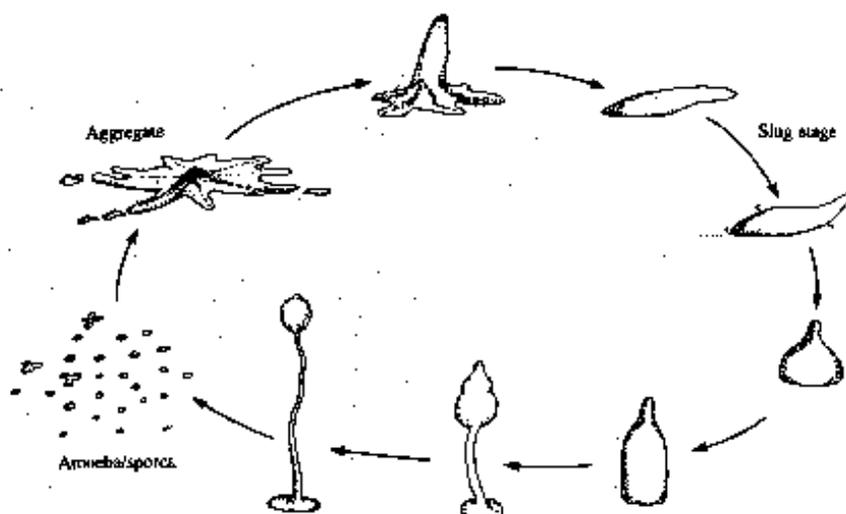


Figura 4.5: Aquí se muestra esquemáticamente la conducta que sigue la *Dictyostelium Discoideum* cuando carece de alimento.

Estas amibas son importantes, porque al ser eucariotas, igual que las humanas, es más fácil estudiar cómo funcionan sus genes y las proteínas mal configuradas que fabrican a partir de casos disfuncionales ³, que hacerlo con organismos más complejos.

Se han identificado proteínas STAT en las *Dictyostelium Discoideum*, que en el embrión humano son responsables de su desarrollo y en el adulto humano llevan información en las células del sistema inmunológico. También se piensa que en la enfermedad de Alzheimer, algunas neuronas imperfectas presentan una alteración en el conducto vinculado a la proteína G (Guanina), la cual funciona como receptor de señales y está presente en la superficie de la *Dictyostelium Discoideum* [8], [9] y [19].

En la Figura 4.5. se muestra esquemáticamente la conducta que sigue la *Dictyostelium Discoideum* cuando carece de alimento.

Su comportamiento es complejo y el modelo matemático que se dará a continuación describe la propagación del ciclo AMP en la fase de agregación únicamente.

Experimentalmente, se requiere que haya una capa monouniforme de células (del orden de 10^5 células por cm^2) que se propaguen en una película delgada de fluido.

Cuando se priva de alimento a las células, éstas permanecen sin movimiento al principio, pero al cabo de 8 horas aproximadamente, algunas empiezan a emitir la señal química cAMP, a modo de marcapasos ⁴, y si son muchas amibas, dicha señal

³las cuales inhiben ciertas reacciones químicas causantes de mutaciones

⁴alrededor de cada marcapasos se congregan células.

es retransmitida, por algunas repetidoras a otras más lejanas.

Esta señal aparece en círculos concéntricos en el marcapasos con una velocidad de propagación de alrededor de $350\mu m/min$ y con periodo de 3 a 10 minutos. Y aparece en espirales con una velocidad menor de propagación, de alrededor de $300\mu m/min$.

El modelo propuesto por P.B. Monk [10] para describir la fase de agregación de las *Dictyostelium Discoideum* (ciclo AMP extracelular) supone lo siguiente:

- Hay suficientes células presentes y la escala del fenómeno de interés es tal que el campo de las células puede ser tratado como continuo.

- La concentración de calcio en la región exterior a las células es uniforme en el espacio y constante en el tiempo.

- La concentración de fosfodiesterasa es uniforme en tiempo y espacio.

Con las suposiciones anteriores el modelo propuesto es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial \tau} = & D\Delta x_1 + R_c \left(\frac{\rho}{1-\rho} \right) \left[R_H f_2(x_2) - V_{PO} \left(\frac{x_1}{1+x_1} \right) \right] \\ & + HR_H(R_H x_2 - x_1) - V_{PE} \left(\frac{x_1}{R_e + x_1} \right) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Y para la dinámica intracelular, propone:

$$\begin{aligned} \frac{dx_2}{d\tau} = & V(x_1, x_2) + H(x_1 - R_H x_2) - f_2(x_2) - V_{PI} \left(\frac{x_2}{1+x_2} \right) \\ \frac{dx_3}{d\tau} = & R_1(x_1) \left(\frac{x_6}{K_F + x_6} \right) - V_{PU} \left(\frac{x_3}{K_{PU} + x_3} \right) \\ & + V_s \left(\frac{R_s + K_s x_2}{1 + K_s x_2} \right) (x_4 - x_3) - V_{SA} \left(\frac{x_3}{1+x_3} \right) \\ \frac{dx_4}{d\tau} = & \frac{R_c}{1-R_c} \left[V_{SA} \left(\frac{x_3}{1+x_3} \right) - V_s \left(\frac{R_s + K_s x_2}{1 + K_s x_2} \right) (x_4 - x_3) \right] \end{aligned} \quad (4.6)$$

donde x_1 representa la concentración de cAMP extracelular, x_2 la concentración de cAMP intracelular, x_3 la concentración de calcio en el citoplasma, x_4 el calcio separado y $f_2(x_2)$, $R_1(x_1)$ y $V(x_1, x_3)$ están definida como sigue:

$$f_2(x_2) = \begin{cases} V_{VP} \left(\frac{(x_2 - x_{sw})}{K_{VP} + (x_2 - x_{sw})} \right) + V_{sw} & \text{si } x_2 \geq x_{sw} \\ \left(\frac{V_{sw}}{x_{sw}} \right) x_2 & \text{si } x_2 < x_{sw} \end{cases}$$

$$R_1(x_1) = V_1 \left(\frac{R_I + K_I x_1}{1 + K_I x_1} \right) \left(\frac{R_{I1} + K_{I1} x_1}{1 + K_{I1} x_1} \right)$$

$$V(x_1, x_3) = V_1 \left(\frac{ax_1^2 + bx_1 + c}{(dx_1^2 + ex_1 + f)x_3 + g(x_1^2 + hx_1 + 1)} \right)$$

Los valores de los parámetros son como se muestran en la siguiente tabla:

parámetro	valor	parámetro	valor
H	1.5×10^{-6}	ρ	1.0×10^{-1}
K_s	3.3×10^3	R_I	1.5×10^{-1}
V_{PU}	1.25	V_{PI}	6.0×10^{-1}
V_{SA}	1.2×10^4	V_s	3.0×10^2
R_C	9.8×10^{-1}	R_e	2.0×10^3
R_H	2.0×10^1	V_{PE}	5.0×10^3
V_{PO}	1.0×10^2	V_{sw}	3.0×10^2
V_{VP}	5.0	x_{sw}	$2.5 \times 10_{-1}$

Los parámetros a, b, c, f, g, h son constantes de acuerdo a [10].

Para modelar la propagación de la onda espiral, se resuelve el sistema formado por las ecuaciones (4.5) y (4.6) en un cuadrado de $1\text{cm} \times 1\text{cm}$ con condiciones de no flujo en la frontera sobre x_1 . La constante de difusión para el cAMP se toma como $5 \times 10^6 \text{cm}^2/\text{s}$ y las condiciones iniciales para x_1, \dots, x_4 es que sean lineales por pedazos. El tiempo se supone $t = 0.5\tau$.

Como el modelo descrito anteriormente no puede resolverse ana-líticamente, se resuelve numéricamente observando que tiene la estructura general del sistema de Hodgkin-Huxley, el cual se estudió en el capítulo 3, por lo que se puede afirmar que el sistema que sirve como modelo para la propagación del cAMP de la Dictyostelium Discoideum tiene solución en espiral.

Conclusiones.

En este trabajo se plantean dos enfoques diferentes para obtener soluciones que se propaguen en espiral en sistemas de reacción y difusión.

El primero de ellos, es el propuesto en el capítulo 2, donde se trata de aproximar el sistema sin los términos de difusión por uno del tipo $\lambda - \omega$, que se sabe tiene solución periódica; además se pide que la cinética del problema tenga una bifurcación de Hopf supercrítica. Si la aproximación anterior es posible, entonces se propone una solución en espiral en el sistema con los términos de difusión y se verifica que satisface las ecuaciones.

En resumen, los sistemas de reacción y difusión cuya cinética pose una bifurcación de Hopf supercrítica y pueden aproximarse por sistemas $\lambda - \omega$, tienen solución de tipo onda espiral.

La desventaja de este enfoque es que estos sistemas no son necesariamente modelos de algún fenómeno en particular, aquí el interés es más bien teórico, en el sentido de que se buscan las condiciones que debe satisfacer un sistema de ecuaciones de reacción y difusión para que tenga solución en espiral.

En contraste, el segundo enfoque que se aborda en este trabajo si parte de un tipo de sistema que es modelo de distintos fenómenos con una dinámica semejante, este es el propuesto por J. Keener que retoma las ideas de la óptica geométrica y el método de las características empleado en EDP lineales en una dimensión e intenta extenderlo a dos dimensiones. Para ello, primero aborda el problema en una dimensión y haciendo una analogía con el método de las características, mediante un cambio de variables considera soluciones constantes a lo largo de curvas de nivel y estudia las regiones en donde pueden propagarse discontinuidades, al mismo tiempo, encuentra el periodo de la onda y determina la velocidad del frente, que está dado por la ecuación de la iconal, con lo que se puede analizar la relación de dispersión.

Luego, en su análisis en dos dimensiones, realiza el mismo procedimiento y encuentra que la ecuación de la iconal da la velocidad del frente de onda y el periodo

se calcula exactamente de la misma forma que para la ecuación en una dimensión. Entonces supone que una espiral es solución del sistema con el que trabaja, por lo que tendrá que satisfacer la ecuación de la iconal.

Cuando efectúa los cambios de variables obtiene un sistema de ecuaciones ordinarias que deben resolverse numéricamente y se logra obtener la velocidad y la frecuencia de la onda.

Es importante señalar que el método de Keener es válido sólo para ondas de alta frecuencia.

La diferencia más notable de ambos enfoques es que con los sistemas $\lambda - \omega$ se aproxima un sistema a otro cuya solución es conocida y con el enfoque de Keener se resuelve un tipo de sistema particular y se halla una solución aproximada.

Finalmente, se plantean tres ejemplos, en donde se aplican los resultados obtenidos por Keener para justificar que las soluciones son espirales. En los tres ejemplos, las variables representan concentraciones químicas, por lo que las curvas de nivel del método de Keener, representan líneas de concentración constante.

Apéndice A

Teorema de bifurcación de Poincaré-Andronov-Hopf.

Dado $\dot{\bar{x}} = A(q)\bar{x} + F(q, \bar{x})$ en C^k con $k \geq 2$ un campo vectorial plano que depende de un parámetro $q \in \mathfrak{R}$ tal que $F(q, \bar{0}) = 0$ y $F_x(q, \bar{0}) = 0$ para todo $|q|$ suficientemente pequeño. Supongamos que la parte lineal $A(q)$ en el origen tiene valores propios $\alpha(q) \pm i\beta(q)$ con $\alpha(0) = 0$ y $\beta(0) \neq 0$. Además supongamos que los valores propios cruzan el eje imaginario con velocidad distinta de cero, es decir,

$$\frac{d\alpha(0)}{dq} \neq 0.$$

Entonces, en alguna vecindad U del origen en \mathfrak{R}^2 y algún $q_0 > 0$ dado, existe \bar{q} con $|\bar{q}| < q_0$ tal que la ecuación diferencial $\dot{\bar{x}} = A(q)\bar{x} + F(q, \bar{x})$ tiene una órbita periódica no trivial en U .

A.1 Ejemplo:

Tomemos el siguiente sistema autónomo de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{pmatrix} \frac{dx_1}{dt} \\ \frac{dx_2}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ -x_1 + qx_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = A(q)\bar{x} \quad \text{con} \quad q \in \mathfrak{R}$$

Notamos que el único punto de equilibrio es $(0, 0)$. En este caso, $F(q, \bar{x}) \equiv 0$; así que de manera trivial se satisfacen las condiciones $F(q, \bar{0}) = 0$ y $F_x(q, \bar{0}) = 0$ para todo $|q|$ suficientemente pequeño y $\alpha(0) = 0$ y $\beta(0) = -i \neq 0$. Los valores propios de $A(q)$ son:

$$|A - \mu I| = \mu^2 - q\mu + 1 = 0$$

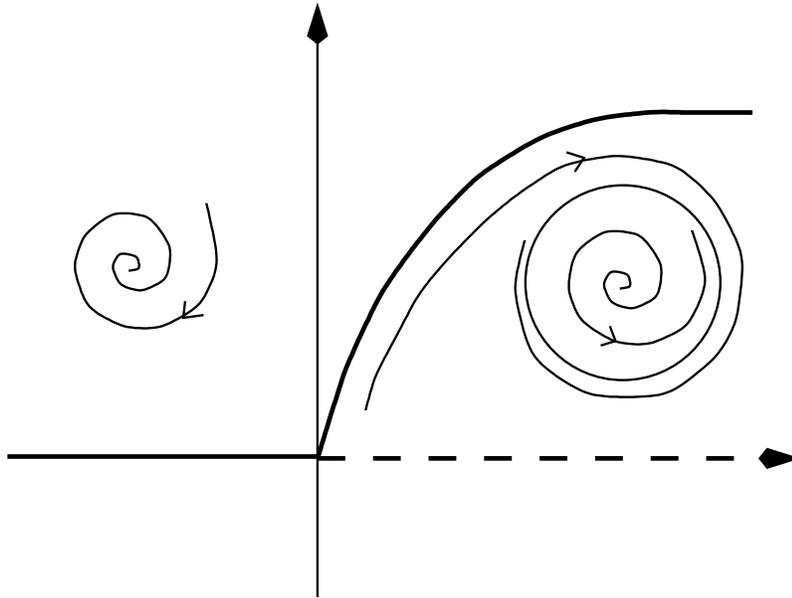


Figura A.1: Como la bifurcación surge a la derecha del origen, es supercrítica.

es decir,

$$\mu_{1,2} = \frac{q}{2} \pm \frac{\sqrt{q^2 - 4}}{2}$$

Por esta última expresión sabemos que $\frac{d\alpha(0)}{dq} = \frac{1}{2}$ y también que para $-2 < q < 0$ la solución es una espiral estable; para $2 > q > 0$ la solución es una espiral inestable y para $q = 0$ la solución es periódica; por lo que $q = 0$ es un punto de bifurcación supercrítico.

Apéndice B

El ciclo de Krebs o el ciclo del ácido cítrico

Las reacciones químicas y los cambios energéticos concomitantes que se efectúan en las células vivientes reciben el nombre de metabolismo y aunque no es posible separarlo en distintas fases, para comprenderlo mejor se habla del metabolismo de carbohidratos, de proteínas, de lípidos y de ácidos nucleicos.

En este caso nos interesa el metabolismo de los carbohidratos que interviene en el mecanismo de respiración y liberación de energía.

Básicamente hay dos tipos de respiración:

- la anaeróbica o glicólisis o fermentación o proceso de Embden-Meyerhof, que es independiente del oxígeno y que es la principal en varios tipos de bacterias y
- la aeróbica efectuada con oxígeno molecular.

La respiración aerobia puede subdividirse en dos secuencias de reacciones conocidas como:

- el ciclo del ácido cítrico o ciclo de Krebs (en honor al bioquímico británico Hans Krebs) y
- el mecanismo del citocromo o mecanismo terminal respiratorio.

En todos los organismos la respiración anaerobia antecede a la respiración aerobia; de las reacciones químicas efectuadas en la primera se obtienen varios productos intermedios de los cuales nos interesa el ácido pirúvico para iniciar la respiración aerobia, en particular el ciclo de Krebs. Ver figura B.2 y figura B.3.

Los cambios bioquímicos fundamentales que se presentan en el ciclo del ácido cítrico usando el ácido pirúvico como material inicial puede resumirse como sigue:

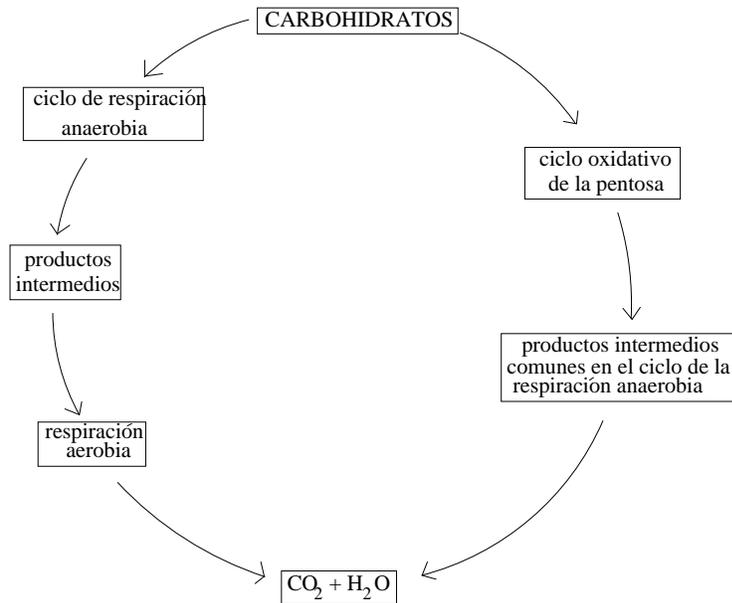


Figura B.1: En el esquema, a la izquierda, se muestran las interrelaciones de la respiración anaerobia y aerobia y a la derecha el ciclo oxidativo de la pentosa como mecanismo alternativo para oxidar los carbohidratos y liberar energía en los tejidos.

1. El ácido pirúvico es oxidado (liberando bióxido de carbono) para formar un derivado activo del ácido acético de dos carbonos (acetilcoenzima A).
2. El derivado de dos carbonos se combina enzimáticamente con un ácido orgánico particular de cuatro carbonos llamado ácido oxaloacético para formar una molécula más grande y más compleja, el ácido cítrico. Este último se reorganiza (vía ácido aconítico) a su isómero, ácido isocítrico.
3. El ácido isocítrico (y sus productos intermedios) sufre después una serie de reacciones enzimáticas en las cuales las coenzimas *DPN* (difosfopiridinnucleótido) y *TPN* (trifosfopiridinnucleótido) reciben hidrógenos o electrones liberados, eliminándose bióxido de carbono. Los otros ácidos orgánicos, los cuales aparecen como intermediarios durante el curso de la oxidación y descarboxilación en el ciclo del ácido cítrico son: ácido cetoglutárico, ácido succínico, ácido fumárico, ácido málico y ácido oxaloacético, en este orden.
4. El ácido oxaloacético resultante puede ahora ser usado y condensar otra vez con otro derivado activo del ácido acético repiéndose así el ciclo.

Por consiguiente, el ciclo del ácido acético en forma de cadenas cíclicas de reacciones enzimáticas, efectúa la degradación del ácido pirúvico hasta bióxido

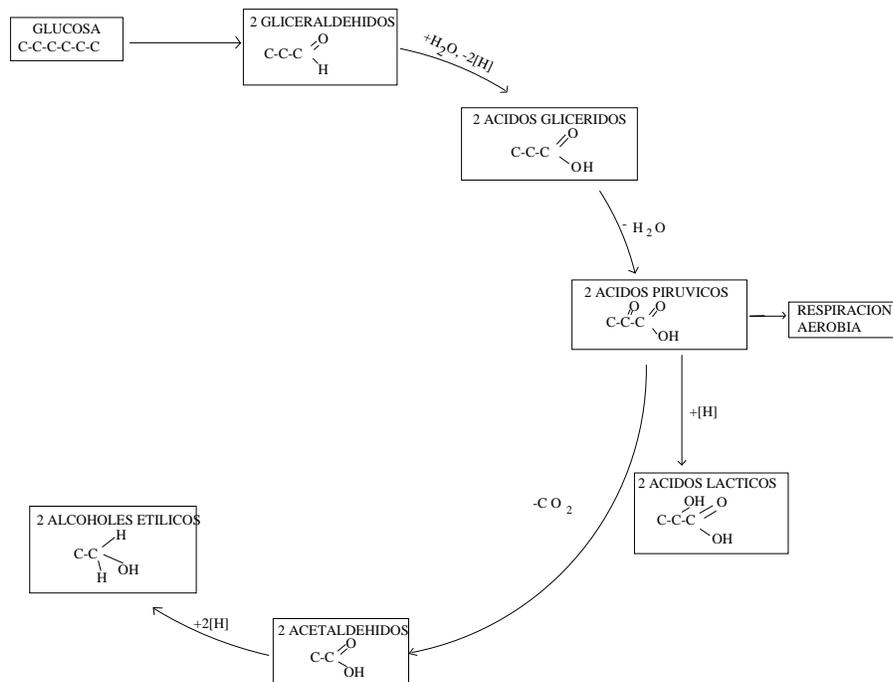


Figura B.2: Mecanismo de respiración anaerobia.

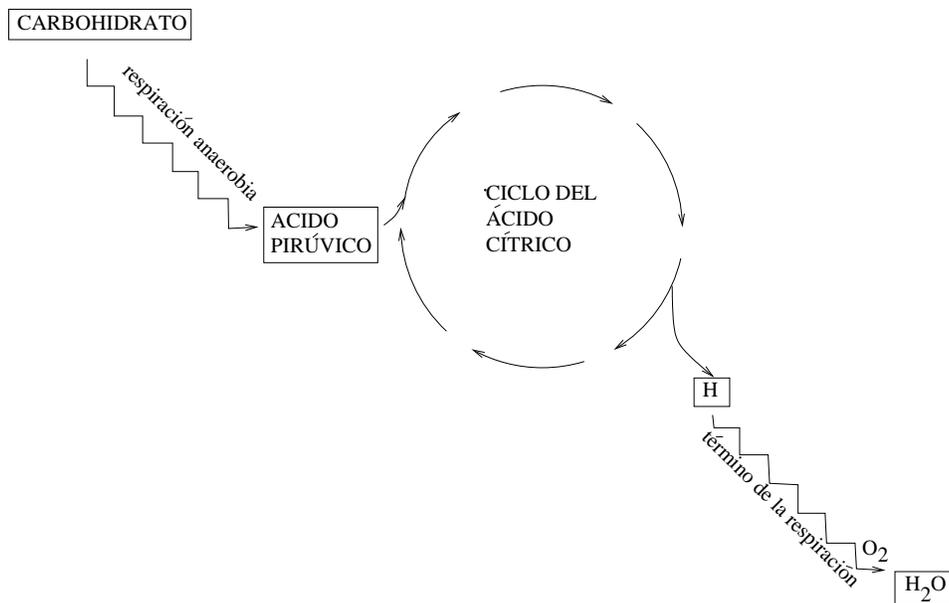


Figura B.3: Mecanismo general anaerobio y aerobio.

de carbono e hidrógeno, éstos son aprovechables a través de la acción del ciclo, apareciendo primero en forma de DPNH, TPNH y ácido succínico y son transferidos por medio de pasos enzimáticos al oxígeno molecular en el proceso respiratorio terminal.

Bibliografía

1. Bernoff, A. J. *Spiral wave solutions for reaction-diffusion equations in a fast reaction/slow diffusion limit*. Physica D 53, North-Holland, Amsterdam, 1991, pp. 125-150.
2. Britton, N. F. **Reaction-diffusion equations and their applications to biology**. Academic Press, Gran Bretaña, 1986, pp. 247-258.
3. Cohen, D. S; Neu, J. C. y Rosales, R. R. *Rotating spiral wave solutions of reaction-diffusion equations*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 35, No. 3, noviembre 1978, pp. 8-13.
4. Duffy, M. R; Britton, N. F. y Murray, J. D. *Spiral wave solutions of practical reaction-diffusion systems*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 39, No. 1, agosto 1980, pp. 536-547.
5. Edelstein-Keshet, L. **Mathematical models in biology**. McGraw-Hill, México, 1988, pp.341-345, 498-501.
6. Greenberg, J. M. *Spiral waves for $\lambda - \omega$ systems*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 39, No. 2, octubre 1980, pp. 301-309.
7. Hagan, P. S. *Spiral waves in reaction-diffusion equations*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 42, No. 4, agosto 1982, pp. 762-787.
8. Hofer, T; Sherratt, J. A. y Maini, P. K. *Dictyostelium discoideum: cellular self-organization in an excitable biological medium*. Proc. R. Soc. Lond. B (1995) **259**, pp. 249-257. Gran Bretaña.
9. Hofer, T; Sherratt, J. A. y Maini, P. K. *Cellular pattern formation during Dictyostelium aggregation*. Physica D 85, North-Holland, Amsterdam, 1995, pp. 425-444.
10. Holden, et. al.(Editor). **Nonlinear waves processes in excitable media**. (Monk, P. B. *Capítulo 23:Two dimensional wave propagation in a model of Dictyostelium Discoideum.*) Plenum Press, New York. pp. 245-258.

11. Keener, J. P. *Waves in excitable media*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 39, No. 3, diciembre 1980, pp. 528-548.
12. Keener, J. P. *A geometrical theory for spiral waves in excitable media*. SIAM-J. Appl. Math. Vol. 46, No. 6, diciembre 1986, pp. 1039-1056.
13. Keener, J. P. y Tyson, J. J. *Spiral waves in the Belousov-Zhabotinskii reaction*. Physica 21D, North-Holland, Amsterdam, 1986, pp. 307-324.
14. Keener, J. P. y Tyson, J. J. *Spiral waves in a model of myocardium*. Physica 21D, North-Holland, Amsterdam, 1987, pp. 215-222.
15. Kevorkian, . **Partial differential equations**. Wadsworth and Brooks, California, 1989, pp. 323-331.
16. Levin, S. A. (editor) **Frontiers in mathematical biology**.(Tyson, J. J. *What everyone should know about the Belousov-Zhabotinsky reaction*.) Springer-Verlag, Alemania, 1994. pp. 569-588.
17. Murray, D. **Mathematical biology**. Springer-Verlag, Estados Unidos, 1989.
18. **Memorias de coloquios:** García C; Castillo, S. y Herrera, J. *La reacción de Belousov-Zhabotinsky*. UAM-Azcapotzalco, México, 1994, pp. 313-326.
19. Siegert, F. y Weijer, C. J. *Analysis of optical wave propagation and cell movement in the cellular slime mould Dictyostelium discoideum*. Physica D, North-Holland, Amsterdam, 1991, pp. 224-232.
20. Zauderer, E. **Partial differential equations of applied mathematics**., Editorial Wiley, New York.
21. Kolmogorov, A; Petrovskii, I y Piskunov, N. *Étude de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de la nature et son application à un problème biologique*. Moscow University. Bull. Math. 1, 1937, pp.398-418.
22. Diekmann, O y Temme N. M.(Eds.) *Nonlinear diffusion problems*. MC Syldabus No. 28. Mathematish Centram, Amsterdam, 1976.