

Universidad Surcolombiana

Facultad de Educación

Programa de Licenciatura en Matemáticas

Aplicaciones de los modelos de oscilación y de reacción - difusión a situaciones reales

> IVÁN GONZALO GARZÓN CALDERÓN JUAN DAVID SILVA CELIS

> > Neiva, Huila 2012



Universidad Surcolombiana

Facultad de Educación

Programa de Licenciatura en Matemáticas

Aplicaciones de los modelos de oscilación y de reacción - difusión a situaciones reales

Trabajo presentado como requisito de grado para optar al título de licenciados en matemáticas

IVÁN GONZALO GARZÓN CALDERÓN 2006262676

JUAN DAVID SILVA CELIS 2006262921

Asesor: LUIS EDUARDO POLANÍA QUIZA

> Neiva, Huila 2012

AGRADECIMIENTOS

Con la mayor gratitud por los esfuerzos realizados para que lograramos terminar nuestras carreras profesionales siendo la mejor herencia, agradecemos a:

A nuestras madres que son los seres más maravillosos de todo el mundo. Gracias por el apoyo moral, cariño y comprensión que desde niño nos han brindado, por guiar el camino en los momentos más difíciles.

A nuestros padres porque desde pequeños han sido para nosotros hombres maravillosos a los que siempre hemos admirado, por su valentia, esfuerzo y apoyo incondicional.

A los profesores que han moldeado las actitudes y aptitudes con sus sabios consejos, logrando que nuestros pensamientos sean flexibles y se adapten a las diferentes condiciones del entorno.

A los compañeros que llevarémos siempre en el corazón por los momentos vividos, las alegrías compartidas, las fiestas que disfrutamos y sobre todo por su amistad.

Con amor, admiración y respeto.

RESUMEN

El presente trabajo de grado se realiza para la obtención de título en Licenciatura en Matemáticas, de la Universidad Surcolombiana. Elaborado bajo la asesoría del docente Luis Eduardo Polanía Quiza. El objetivo principal del proyecto es mostrar las diferentes situaciones de la realidad que se adaptan a los modelos matemáticos de oscilación y de reacción-difusión. Estas situaciones están en el campo de la ecología, biología, la química, la física, la ingeniería y las comunicaciones. Haciendo especial énfasis en los ecosistemas (con ambos modelos).

En los sistemas de reacción-difusión podemos observar la dinámica interactuante entre sistemas difusivos y sistemas receptores (como el agua al recibir una gota de tinta) se puede observar que cada sistema va a tender a conservar su estado, pero por múltiples interacciones entre partículas de ambos sistemas logran que haya un acoplamiento de estos dos. Esto visto cualitativamente origina patrones espacio temporales que describe la dinámica de difusión de las partículas de un sistema en otro, lo que origina una reacción. Existen diversos ejemplos reales tales como: la pigmentación de los peces, las manchas de las cebras, entre otros.

También existen fenómenos que forman patrones temporales como el cantar de una chicharra al atardecer (ritmos circadianos), la presencia de personas en las calles de una ciudad durante las llamadas horas picos, a este tipo de eventos los podemos considerar como pertenecientes a un sistema oscilante, que este a su vez está contenido en un sistema de reacción difusión.

Este Trabajo de Grado titulado "Aplicaciones de los modelos de oscilación y de reacción-difusión a situaciones reales" pretende demostrar la multifuncionalidad de los modelos de oscilación y reacción-difusión con su aplicación en diferentes contextos empleando como herramienta de trabajo la teoría de las ecuaciones diferenciales en la modelación de situaciones particulares de la vida.

Específicamente queremos mostrar algunas situaciones que se adaptan a los modelos mencionados, tales como el comportamiento oscilatorio en el equilibrio de un ecosistema estratégico, el comportamiento de la elasticidad en resortes, el llenado de un lago, el comportamiento de la densidad poblacional de los mosquitos, y el fenómeno de reacción-difusión en los crímenes de una ciudad, en la disolución de sustancias, en la distribución de la información en la población, en las redes sociales, entre otros.

Para lograr esto partiremos de bases de datos de otras investigaciones que nos permitan establecer las diferentes variables y parámetros de las situaciones con comportamiento oscilatorio o de reacción-difusión; de igual forma emplearemos elementos de la física básica, solución de ecuaciones diferenciales, cálculo en varias variables y elementos de la química básica.

OBJETIVOS

Objetivos Generales

- Encontrar nuevas aplicaciones a los modelos de oscilación y reacción-difusión en diferentes situaciones de la vida social, natural, industrial y científica.
- Mostrar la multifuncionalidad de los diferentes modelos matemáticos.

Objetivos Específicos

- Aplicar el modelo de oscilación a los ecosistemas estratégicos.
- Aplicar el modelo de oscilación a los medios elásticos
- Aplicar el modelo de oscilación al comportamiento de la densidad poblacional de los mosquitos.
- Aplicar el modelo de reacción-difusión a las redes sociales.
- Aplicar el modelo de reacción-difusión a los disolventes.
- Mostrar diferentes aplicaciones hechas hasta el momento.

ÍNDICE GENERAL

1.	Ante	ecedentes	13
	1.1.	Sistemas Oscilatorios	14
		1.1.1. Osciladores Lineales	15
		1.1.2. Osciladores No Lineales	18
		1.1.3. Puntos fijos para sistema no-lineales	19
		1.1.4. Oscilador de Van der Pol	19
		1.1.5. Conclusiones	20
	1.2.	Sistemas de reacción-difusión	20
	1.3.	Sistemas homogéneos	22
		1.3.1. Sistema excitable	22
		1.3.2. Sistema oscilante	23
		1.3.3. Sistema biestable	23
	1.4.	Ley de Fick	24
	1.5.	Estructuras espacio-temporales	25
		1.5.1. Medios de reacción-difusión	25
		1.5.2. Tipos de estructuras espacio-temporales	27
		1.5.3. Transporte	28
	1.6.	Entropía	34
		1.6.1. El alcance de la termodinámica y sus enfoques.	35
		1.6.2. La primera ley de la termodinámica	36
		1.6.3. La entropía y segunda ley	36
		1.6.4. Energía libre.	38
	1.7.	Fisión-fusión y su relación con la reacción-difusión.	40
		1.7.1. En los organismos	41
		1.7.2. Árbol filogenético Universal	41
		1.7.3. La evidencia de la evolución	41
	1.8.	Formación de patrones biológicos: sistemas de	
		Reacción-Difusión	42
		1.8.1. Seres vivos y el segundo principio de la termodinámica	42
		1.8.2. Alan M. Turing y la teoría de la morfogénesis.	43
		1.8.3. Pringogine, y las estructuras disipativas	44
		1.8.4. Evidencia experimental del modelo de Turing: Reacciones químicas oscilantes	
		BZ	45
		1.8.5. Koch y Meinhardt	45

		1.8.6. Murray, y la piel de los animales	47	
		1.8.7. Conclusiones	47	
	1.9.	Fractales y biología	49	
		1.9.1. Concepto de fractal	51	
		1.9.2. Definición	51	
		1.9.3. Definición	52	
		1.9.4. Fractales de Julia y Mandelbrot	53	
		1.9.5. Concepto de dimensión fractal	54	
		1.9.6. Tipos de fractales	57	
		1.9.7. Aplicaciones de la geometría fractal	61	
2.	Mod	telos básicos	67	
	2.1.	Oscilador armónico	67	
	2.2	Oscilador armónico y circuito LC	69	
	2.3	Difusión	71	
	2.4.	Bracción	72	
	2.5	Combinación de reacción y difusión	73	
	2.6	Una gota de tinta en el agua	73	
		2.6.1. Difusión bidimensional. Gota de tinta	73	
3.	Мос	lelos aplicados a situaciones concretas	77	
	3.1.	Ecuaciones de reacción-difusión para modelar la delincuencia y la criminalidad	77	
		3.1.1. Modelo	78	
		3.1.2. Resultados	80	
		3.1.3. Discusión	84	
	3.2.	2. Sistema dinámico en el llenado de un lago		
		(Situación Ideal)	86	
		3.2.1. Ecuación de continuidad	80	
		3.2.2. Balance energeuco	87	
	~ ~	3.2.3. Energias cinetica y potencial	88	
	3.3.	2.2.1 Oscilador endémico (Situación ideal)	88 90	
		3.3.1. Oscilador endemico (Situación Ideal)	89	
		3.3.2. Oscilaciones endemicas amortiguadas en una población de mosquitos	90	
		mosquitos	90	
	34	Formación de patrones espaciales en ecosistemas áridos	91	
	3.5	Impacto de los patrones de la actividad humana sobre la Dinámica de Difusión de	01	
	0.01	Información	93	
4	C:	ulación de los modelos de escileción y de respectón difusión	101	
4.	5111	Simulación del modelo de oscilación	101	
	4.1. 1 0	Simulación del modelo de reacción difusión	101	
	4.2.		102	
5.	Frac	ctales y su relación cualitativa con los modelos de oscilación y reacción-difusión.	105	
	5.1.	Un fractal para el modelo de oscilación	105	
	5.2.	fractal para la reacción-difusión	106	

6.	Ane	xos	09
	6.1.	Simuladores	109
		6.1.1. El movimiento browniano en 2D y la ecuación de Fokker-Planck	109
		6.1.2. Ecosistemas del depredador-presa: Una simulación en tiempo real basado en	
		agentes	111
		6.1.3. Depredador-Presa dinámica con el tipo de respuesta funcional Dos	112
		6.1.4. Caos y orden en el péndulo amortiguado forzado en un plano	113
		6.1.5. Oscilador forzado amortiguado	114
		6.1.6. La reacción idealizada Belousov-Zhabotinsky	114
		6.1.7. Pendulo simple	116
		6.1.8. Simulación de un modelo de gas a presión simple	117
		6.1.9. El péndulo no lineal amortiguado	18
		6.1.10. El atractor de Rossler	118
		6.1.11. Trayectoria de un oscilador armónico en el espacio de fase	119
	6.2.	Ecuaciones reacción-difusión en la Genética Poblacional	120
	6.3.	Ecuaciones reacción-difusión en la Dispersión de mamíferos	120
	6.4.	Modelo de Gierer-Meinhardt.	121
	6.5.	Modelo de Schnakenberg	122
	6.6.	Modelo de Glucólisis.	124
	6.7.	Modelo de Quimiotaxis.	126
	6.8.	Solución por el método de los elementos finitos.	129
	6.9.	Conclusiones.	131
Bi	bliog	grafía	33

CAPÍTULO 1

ANTECEDENTES

El modelo de oscilación es uno de los más frecuentes en la naturaleza. Encontramos muchos objetos que lo realizan: La bolita de un péndulo soltada desde una cierta altura, el extremo de un muelle después de haberlo separado de su posición de equilibrio, los puntos de una cuerda de guitarra recién punteada, la superficie de un tambor recién percutido. A escala atómica también se produce de forma masiva este movimiento, puesto que los átomos, los iones y las moléculas habitualmente vibran en torno a posiciones centrales o de equilibrio. Los campos (entidades no materiales portadoras de energía) también realizan oscilaciones. Lo que oscila en este caso es la amplitud del campo.

En la naturaleza es común hallar fenómenos de tipo oscilatorio cuyos periodos cubren una amplia gama de valores que van desde los milisegundos hasta los años (de este último podemos citar como caso el aumento de la actividad de las manchas solares cada once años).

Para la elaboración de este trabajo partiremos de la teoría de las oscilaciones, iniciando por las oscilaciones mecánicas, estudiando primordialmente el péndulo; posteriormente nuestra mirada se centra en las oscilaciones eléctricas, electromecánicas, biológicas, económicas y sociales, del clima y geofísicas, finalmente las oscilaciones en productos químicos.

La experiencia nos muestra que la amplitud de un cuerpo vibrante tal como un resorte o un péndulo, decrece gradualmente hasta que se detiene. Luego se hace necesario mostrar la evolución del modelo idealizado y asemejarlo un poco al mundo real y de allí surgen las oscilaciones amortiguadas, ya sea por la resistencia del aire, la fuerza de gravedad o cualquier otra fuerza que se interponga en el sistema.

Las oscilaciones amortiguadas desaparecen al cabo de cierto tiempo, para mantener la oscilación se puede aplicar una fuerza, originando así una oscilación forzada. Un ejemplo claro de este tipo de oscilación se ve representada por un circuito LCR conectado a una Fuerza Electromecánica Alterna.

Como último ejemplo considérese la existencia de ritmos que tiene un periodo semejante al día y la noche, cuya señal influye, de manera importante, en muchas funciones de los organismos. Estos ritmos se han denominado ritmos circadianos.

Análogamente el modelo de reacción-difusión es un fenómeno por medio del cual un grupo de partículas se mueven como un grupo de acuerdo a la trayectoria irregular de cada una de las partículas, pero estas pueden cambiar su estado, debido por ejemplo a interacciones o de manera espontánea. Aquí estamos hablando de reacciones químicas o procesos biológicos.

La biología moderna es la biología a escala atómica (genoma, transcriptoma, proteoma, metaboloma, etc.). La biología de sistemas es la de lo complicado, de lo inabarcable. Se ha pasado de modelos sencillos, que aunque omiten muchos detalles describen muy bien el resultado observado, a modelos basados en redes cuya cardinalidad abruma hasta a los ordenadores más potentes. El gran maestro del reduccionismo en biología matemática es Alan Turing, cuya obra es una obra maestra del arte del modelado matemático. El reduccionismo como clave para la comprensión.

La observación biológica de la evolución dinámica de los patrones de los modelos de Turing en un ser vivo fue hecha por primera vez por Kondo y Asai en 1995 (lo publicaron en Nature) en el desarrollo embrionario de ciertos peces tropicales (Pomacanthus imperator). Hoy en día sabemos que muchos otros seres vivos comparten estos mismos mecanismos de desarrollo embrionario. Los estudios posteriores demostraron que estos patrones de la piel de este pez se deben a las interacciones moleculares entre células pigmentadas vecinas. Aunque aún no se conocen con detalle todos los mecanismos genéticos implicados en estos procesos, se espera que en los próximos años puedan determinarse.

En la actualidad este modelo también representa fenómenos de tipo social, como el transporte, las redes sociales y difusión de las noticias en una ciudad.

1.1. Sistemas Oscilatorios

Los sistemas oscilatorios o simplemente osciladores se pueden definir como un sistema dinámico con un comportamiento descrito por una ecuacion diferencial de orden *n*, que tiene una solución

$$X = \begin{bmatrix} C_1 v_1 & C_2 v_2 & \dots & C_n v_n \end{bmatrix} e^{\lambda' t}$$
$$\lambda' = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

donde $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ son números complejos y $e^{\lambda' t}$ es la exponencial compleja. En el caso de un oscilador lineal de segundo orden

$$\ddot{x} + b\dot{x} + c = g(t)$$
$$\ddot{x} = \frac{d^2x}{dt^2},$$
$$\dot{x} = \frac{dx}{dt},$$

la solución es de la forma $X = \begin{bmatrix} C_1 v_1 & C_2 v_2 \end{bmatrix} e^{[\lambda_1 \lambda_2]t}$.Los osciladores se pueden clasificar a su vez en osciladores periódicos y no periódicos.

Se define una función periódica como aquella que siendo $f : X \to Y$, tiene una contra-imagen que es de la forma:

$$X = \{[a, b] \cup [a + T, b + T] \dots \cup [a + jT, b + jT] \dots \}$$

con T = b - a y donde cada subconjunto $X_j = [a + T, b + T)$ mapea a la misma imagen Y, es decir, $f : X_j \rightarrow Y$ para $j \in Z$.

Los osciladores no periodicos pueden provenir de *osciladores no lineales* como $\ddot{x} + b\dot{x} + c = \operatorname{sen} x$ y también de *osciladores lineales* como los comportados por un movimiento armónico complejo el cual puede ser analizado como una serie de Fourier o como la superposición de osciladores armónicos simples.

1.1.1. Osciladores Lineales

Los osciladores lineales tal como menciona su nombre son aquellos que llevan un comportamiento dado por la ecuación diferencial lineal de segundo orden $a\ddot{x} + b\dot{x} + c = g(t)$, donde según el valor de a, b, c y g(t) se clasifican por el comportamiento que describen, a los osciladores lineales se les llama también *osciladores armónicos* por que su solución se expresa como funciones senocosoidales, lo cual siendo $a, b, c \in \mathbb{R}$, la frecuencia es una constante y por lo tanto los osciladores armónicos son siempre periódicos.

Armónico Simple

El *oscilador armónico simple* se da cuando a > 0, b = 0, c > 0 y g(t) = 0, es decir,

$$a\ddot{x} + cx = g(t) = 0$$

el comportamiento descrito por esta ecuación diferencial se trata de una oscilación libre de amortiguamiento, es decir el sistema nunca disipa energía, simplemente ésta se transforma continuamente a energía potencial o cinética. El oscilador armónico simple es el caso utópico de osciladores ya que en la realidad todos presentan perdidas de energía y por lo tanto un efecto amortiguado.

Haciendo la consideración de que x(0) = A (Amplitud) y que $\frac{c}{a} = \omega^2$ entonces la solución a la ecuación que describe al oscilador armónico simple es $x(t) = A\cos\omega t$ y su comportamiento mientras transcurre el tiempo se muestra en la figura 1.1.



Figura 1.1: Respuesta en el tiempo de un oscilador armónico simple.

Retomando los conceptos de punto periódico, la órbita del oscilador armónico simple puede ser parametrizada en un plano de fase por dos variables x(t) y el equivalente a su velocidad angular $\dot{x}(t)$.



Figura 1*a*: Plano de fase de un oscilador armónico simple con A = 1 y $\omega = 1,5$. El tiempo queda implicito como el sentido de horario de la órbita girando sobre un punto singular *centyro*.

La órbita de este oscilador es una órbita periódica ya que el conjunto de puntos que la forman, siempre trazan sobre una misma linea mostrada como una elipse donde la magnitud del eje vertical es proporcional a ω y la del eje horizontal lo es con la amplitud *A* (véase la figura anterior).

Armónico Amortiguado

El oscilador armónico amortiguado es el caso generalizado de los osciladores armónicos libres ya que su comportamiento contempla la disipación de energía pero no la intervención de fuerzas externas. Su comportamiento está dado por $a\ddot{x} + b\dot{x} + c = g(t)$ tal que $a > 0, b \neq 0, c > 0$ y g(t) = 0, para todo *t*. Considerando que $\frac{b}{a} = 2\alpha$ y $\frac{c}{a} = \omega^2$ entonces

 $\ddot{x} + 2\alpha \dot{x} + \omega^2 x = 0$

Si x(0) = A la solución queda como la siguiente expresión:

$$\omega' = \sqrt{\omega^2 - \alpha^2}$$
$$x(t) = Ae^{-\alpha t} \cos \omega' t$$

Observese que la respuesta del sistema en el tiempo es una señal cosenosoidal en una envolvente exponencial con una caida negativa de *a*, el oscilador se comportará como amortiguado siempre que a > 0, cuando a = 0 la ecuación diferencial se reduce al caso de un oscilador armónico simple, por otro lado, si a < 0 entonces el sistema se comporta de una manera inestable.



Figura 1*b*: Respuesta en el tiempo de un oscilador armónico simple con $A = 1,7, \omega = 1,5$ y $\alpha = 0,15$

La órbita del oscilador amortiguado puede observarse como una espiral que reduce su radio mientras el tiempo transcurre, haciendo tender al sistema a una estabilidad focal cuando $t \to \infty$ entonces $x \to 0$, para el plano de fase con variables x y $\dot{x} = \frac{dx}{dt}$ la dirección de la orbita siempre es en sentido horario, puede observarse en la órbita (véase figura 1.2) que progresivamente tanto la amplitud |x| como un proporcional de la velocidad angular del oscilador $|\dot{x}|$, se reducen asintoticamente al punto ($x = 0, \dot{x} = 0$).



Figura 1.2: Plano de fase de un oscilador armónico amortiguado con A = 1,7, $\omega = 1,5$ y $\alpha = 0,15$. La propagación de la órbita apróxima el estado del oscilador a la estabilidad focal.

Como ya se mencionó cuando a < 0 el oscilador se comporta con una órbita asintóticamente inestable, si se compara la órbita de la figura 1.2 con la órbita de la figura 1.3 se puede deducir que éstas difieren en el sentido de giro, i.e. mientras ambas siguen la trayectoria según un sentido horario.



Figura 1.3: Plano de fase de un oscilador armónico inestable con $A = 1,7, \omega = 1,5$ y $\alpha = -0,15$.

Armónico Forzado

Un oscilador armónico forzado es la generalización de los osciladores armónicos, su comportamiento se rige por la ecuación $a\ddot{x} + b\dot{x} + c = g(t) \operatorname{con} a > 0, b \neq 0, c > 0$ y $g(t) = F \cos w_e t$

(una función dependiente de *t*), es el caso de $a\ddot{x} + b\dot{x} + c = g(t)$ sea no homogénea, la ecuación expresará el comportamiento de un oscilador armónico amortiguado, el significado físico de un oscilador armónico forzado se puede ejemplificar como el sistema formado por un niño en un columpio, cuando el niño a una frecuencia w_e se balancea, aplica una fuerza que mantiene al columpio en un movimiento oscilatorio, cuando esta fuerza se deja de aplicar el columpio se comporta como un oscilador amortiguado. Éste comportamiento de oscilación se da por la siguiente ecuación diferencial y su solución:

$$\ddot{x} + 2\alpha \dot{x} + \omega^2 x = F \cos w_e t$$
$$x(t) = \frac{F}{G} \operatorname{sen}(w_e t - \delta)$$
$$G = \sqrt{(w_e^2 - \omega^2)^2 + (2\alpha w_e)^2}$$

donde

La característica interesante en los osciladores forzados es un fenómeno que se da por la combinación de la frecuencia intrínseca con la frecuencia externa, el caso más simplificado es cuando no hay amortiguamiento, donde el valor de *G* depende de la diferencia de los cuadrados de ambas frecuencias, véase que con $w_e \rightarrow \omega$, $G \rightarrow 0$ y por lo tanto $\frac{F}{G} \rightarrow \infty$ esto por que el oscilador recibe energía externa y nunca la disipa tendiendo el sistema a la inestabilidad, a éste fenómeno se le llama *resonancia*.

El efecto de la resonancia radica en aumentar la amplitud de las oscilaciones, en la realidad los sistemas son amortiguados asi que siempre existe un límite de amplitud dependiende de su factor de amortiguamiento α , en la figura 1.4 se muestran 7 curvas con diferentes valores siendo $\alpha = 0$ la curva con tendencia a infinito. Observese que los máximos están cercanos a $\frac{w_e}{\omega} = 1$.



Figura 1.4: Curvas de resonancia de un oscilador armónico forzado con valores de $\alpha = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\}$.

1.1.2. Osciladores No Lineales

Los *sistemas oscilatorios no-lineales* se rigen precisamente por ecuaciones diferenciales nolineales, esto es, ecuaciones que no cumplen con la forma $a_0(t)x^n + a_1(t)x^{n-1} + ... + a_{n-1}(t)x' + a_n(t)x = f(t)$ tal que sus eigenvalores son complejos cuya expresión es

$$f^n(x) = f \circ f^{n-1}(x), \quad para \ n \ge 1.$$

Los osciladores no-lineales pueden presentar comportamientos muy diferentes a los osciladores armónicos y que no existen físicamente pero también comportamientos que si lo esten como e.g. los impulsos en un electrocardiograma. Especificamente no hay una forma canónica de representar a los osciladores no-lineales sin que esta ecuación sea tan generalizada como para no tener caracteristicas interesantes. Por éste motivo se delimitará a tratar el caso de oscilador no-lineal de la forma

$$\ddot{x} + g(x)\dot{x} + cx = 0$$

ya que tiene un comportamiento no-lineal de oscilador autosostenido, éste tipo de oscilador se explicará con más detalle posteriormente, pero para ello se tiene que poner la ecuación anterior de tal manera que facilite el cálculo. Así que podemos expresar el comportamiento de éste oscilador no-lineal como un sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden y dos variables

$$\dot{x} = y - f(x)$$
$$\dot{y} = -cx$$

A estas expresiones se le conocen como *ecuaciones de Lienard*. Si derivamos la ecuación $\dot{x} = y - f(x)$ se obtiene $\ddot{x} = \dot{y} - f'(x)\dot{x}$ que al sustituir en $\dot{y} = -cx$ resulta $\ddot{x} + f'(x)\dot{x} + cx = 0$, de aqui si se asume f'(x) = g(x) entonces las ecuaciones de Lienard son equivalentes a la ecuación $\ddot{x} + g(x)\dot{x} + cx = 0$

1.1.3. Puntos fijos para sistema no-lineales

Para los sistemas de ecuaciones diferenciales lineales, la estabilidad asintótica es determinada por la parte real de los eigenvalores. Para un punto fijo de un sistema no lineal, la parte real de los eigenvalores de la derivada también determina la estabilidad, pero considerando que en la cercanía del punto fijo el sistema se comporta linealmente, esto haciendo una discriminación de las componentes no lineales del flujo del sistema.

Asumiendo un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales del tipo $\dot{x} = f(x)$ con $x \in \mathbb{R}^n$. El punto p es un punto fijo si f(p) = 0, para linealizar el flujo del sistema cerca de p, tenemos a Df_p como la matriz de las derivadas parciales de f, evualada en p. Entonces la ecuación diferencial linealizada esta dada por $\dot{x} = Df_p(x - p)$.

Se le llama al punto fijo *p* hiperbólico si $Re(\lambda) \neq 0$ para todos los eigenvalores λ de la matriz Df_p . Hay muchos casos especiales de puntos fijos:

– *U*n punto fijo hiperbólico es llamado *sumidero o atractor* siendo que todas $Re(\lambda) < 0$.

– *U*n punto fijo hiperbólico es llamado *fuente* o *repulsor* siendo que todas $Re(\lambda) > 0$.

– *U*n punto fijo hiperbólico es un punto *silla* si la parte real de los eigenvalores conjugados cumplen con $Re(\lambda_+) > 0$ y $Re(\lambda_-) < 0$.

Un punto fijo no hiperbólico se dice que es un *centro*, es decir, el sistema es una familia de órbitas rodeando el centro ocurriendo como un péndulo sin amortiguamiento.

1.1.4. Oscilador de Van der Pol

El *oscilador de Van der Pol* es un oscilador característico de los sistemas oscilatorios no lineales, ya que éste presenta un comportamiento auto-sostenible, es decir, un comportamiento que lo lleva a siempre a una órbita periódica atractora, esto es importante ya que los osciladores biológicos como el marcapasos cardiaco (Nodo sinoatrial) que genera por si solo una oscilación, que se dice autosostenida por que al aplicarle ruido o condiciones iniciales fuera de la órbita

periódica, el sistema se dirige a ésta por ser estable. El sistema de ecuaciones ligado a este oscilador esta dado por las ecuaciones de Lienard.



Figura 1.5: Retrato de fase de un oscilador de Van der Pol, implementando el método de Runge - Kutta de cuarto orden para obtener sus respuesta parametrizada de las funciones iterativas de cada variable.

1.1.5. Conclusiones

Los sistemas oscilatorios poseen características muy particulares que los definen desde dinámicas simples y regulares como los osciladores armónicos, hasta dinámicas complejas que pueden beneficiar incluso al sistema, esto aparentemente como un mecanismo de regulación observado en los osciladores no lineales auto-sostenibles; estos mecanismos de regulación son una tendencia a órbitas periódicas estables o ciclos funcionales que pueden significar para la biología, el comportamiento de un sistema para mantenerse en homeostasis.

1.2. Sistemas de reacción-difusión

El estudio de las *estructuras espacio-temporales*, o si se quiere de la formación y evolución de patrones tiene gran importancia desde el punto de vista científico pero también técnico. De hecho, la cuestión del origen de la *forma* de la mayoría de los objetos cotidianos que nos rodea es algo que ha intrigado a filósofos y científicos a lo largo de la historia. Desde el relieve de la arena de los desiertos hasta los patrones que caracterizan la piel de muchos animales, los ejemplos son innumerables. Muchos de dichos patrones, además, no son estáticos sino que están sujetos a modificaciones. El propio de la arena de los desiertos cuyos relieves pueden cambiar de un día para otro por efecto del viento, la arena de las playas sujetas a los efectos de las mareas, los sistemas de nubes que cubren el cielo y cambian caprichosamente con las condiciones meteorológicas o simplemente las estructuras que se forman en nuestra taza de café con leche al agitarlo con la cuchara son ejemplos que vemos a diario.

Los avances de las últimas décadas en la *ciencia no lineal*, que ha surgido recientemente como una meta-ciencia que abarca desde la física a las matemáticas pasando por la biología, química y un largo etc, han permitido descubrir que la mayoría de los ejemplos anteriores están relacionados por el hecho de que podemos describirlos usando las mismas herramientas matemáticas. Es decir, aunque aparentemente pertenecientes a campos distintos, muchos de ellos obedecen las mismas leyes.

Como se encargó de demostrar Ilya Prigogine, Premio Nobel de Química en 1977 (Prigogine, 1977), si un sistema está alejado del equilibrio pueden formarse en él estructuras espaciales de tamaño



Figura 1.6: Ejemplos patrones en forma de bandas. De izquierda a derecha: Nubes tipo cirrus sobre la península arábiga (imagen tomada desde el transbordador espacial de la NASA); cebra y arenas en el desierto del Sahara.

macroscópico, dando así un importantísimo impulso a la termodinámica de sistemas fuera del equilibrio. Prigogine bautizó a dichas estructuras como *estructuras disipativas* (Prigogine y Nicolis, 1977) ya que el sistema necesita disipar energía para sustentar su estado. Pero la termodinámica no es la única forma de aproximarse al estudio de la formación de estructuras espacio-temporales. El estudio de otra teoría, la de los *sistemas dinámicos no lineales*, surgida inicialmente como una rama de la mecánica clásica, ha permitido de forma muy importante ayudarnos a avanzar en dicho problema. Es de destacar que aunque dicha teoría es determinista, algunos de los sistemas que describe encierran en su interior un enorme grado de impredecibilidad, y como consecuencia es una herramienta básica para estudiar y entender el *caos determinista*¹. Así los sistemas deterministas se han convertido en una herramienta muy útil con la que poder estudiar las estructuras espacio-temporales, y que generalmente se describen desde un punto de vista matemático mediante ecuaciones no lineales en derivadas parciales. Citemos a modo de ejemplo las ecuaciones de *Navier-Stokes* para los fluidos, o los sistemas *reacción-difusión* para describir gran número de sistemas tanto Químicos como Biológicos. Sobre ambos ejemplos volveremos más adelante.

Hay dos ideas básicas a la hora de abordar las estructuras generadas fuera del equilibrio. Así, a lo largo de este trabajo se usará la terminología de *medio activo (Mikhailov, 1994)* para referirnos a un sistema que puede ser biológico, químico, físico, etc, en el que podemos definir unas estructuras básicas del mismo, constituyentes, en forma de conjuntos de partículas elementales (átomos, moléculas, celdas, etc) agrupadas en elementos de volumen de tal forma que desde el punto de vista de cierto número de propiedades (físicas, químicas, biológicas, etc) dichos *constituyentes* son equivalentes entre sí, y por tanto indiferenciables, estando localmente en equilibrio termodinámico; dicho sistema es espacialmente distribuido y los citados constituyentes tienen una dinámica propia interactuando entre sí mediante algún tipo de *acoplamiento*.

La segunda idea importante es la de *inestabilidad* que definiremos como la respuesta a una perturbación en un medio activo inicialmente homogéneo² Puede suceder que dicha perturbación crezca y se propague por el medio conduciéndolo a un nuevo estado no homogéneo. El mecanismo global que conduce el sistema al nuevo estado es consecuencia del tipo de interacción de los distintos elementos del medio y de la naturaleza de la dinámica de los elementos del sistema.

¹La forma más aceptada de definir matemáticamente el caos es decir que se trata de la propiedad que poseen ciertos sistemas deterministas de que dos estados que inicialmente están infinitamente próximos se separan mutuamente siguiendo una ley exponencial en el tiempo. Esta propiedad es la que nos hace tan difícil poder predecir la evolución futura del sistema (el ejemplo de la meteorología es paradigmático) ya que como consecuencia de la anterior definición una variación infinitesimal en las condiciones iniciales del sistema lo lleva en tiempos no demasiado largos a escenarios absolutamente diferentes.

²Citando a Prigogine la inestabilidad «destruye la equivalencia entre el nivel individual y el nivel estadístico, al extremo de que las probabilidades cobran una significación intrínseca» (Prigogine, 1983).

1.3. Sistemas homogéneos

Desde el punto de vista de un medio activo podemos considerar dos situaciones extremas en cuanto al acoplamiento de las distintas regiones y/o elementos del sistema. Así, hipotéticamente podemos considerar que el sistema está totalmente acoplado, es decir que la interacción entre las distintas partes es la misma e independiente de la distancia entre ellas. O en otras palabras que el medio está totalmente *homogeneizado* por lo que podría ser modelizado por un sistema dinámico de dimensión espacial cero, y, por tanto, su dinámica sería equivalente a la de uno sólo de sus elementos. Es frecuente en la bibliografía utilizar el término *dinámica homogénea* para referirse a su comportamiento temporal. Por otra parte, también podemos imaginar un medio activo en el que la interacción entre elementos es nula con lo que la dinámica global se reduciría a la suma de cada uno de dichos elementos.

Los elementos constituyentes de un medio activo no siempre tienen una fácil caracterización, pero muchas veces es posible describirlos mediante un sistema dinámico determinista, es decir usando ecuaciones diferenciales. Así describiremos su estado mediante un conjunto de variables dependientes del tiempo $c = (c_1, c_2, ..., c_n)$ y su dinámica por un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dc}{dt} = f(c, p)$$

en donde la función f, que describe la dinámica, depende de los parámetros $p = (p_1, p_2, ..., p_m)$. Por ejemplo, en el caso de que la naturaleza del medio sea química f representará la cinética de la reacción. En general, dicha función poseerá términos no lineales y en algunas ocasiones su dimensión será elevada lo que dará lugar a comportamientos realmente complejos (Strogatz, 1994; Verhulst, 1996; Guckenheimer y Holmes, 1990).

Sin embargo, las dinámicas de muchos medios homogéneos de especial importancia práctica pueden describirse con un número pequeño de variables lo que los hace mucho más tratables. A continuación se describen varios ejemplos de sistemas dinámicos que destacan por su simplicidad, bastan dos grados de libertad para representarlos, y por poseer gran importancia en el estudio de patrones espacio-temporales. Así, es frecuente hablar de sistemas dinámicos monoestables, biestables, excitables u oscilantes (Mikhailov, 1994). De ellos el más simple co-rresponde al caso *monoestable* en el que existe un único punto fijo estable en el espacio de fases de tal forma que cuando el elemento activo es perturbado siempre retorna al estado de dicho atractor. Consideremos el siguiente sistema con dos grados de libertad

$$\frac{dc_1}{dt} = f(c_1, c_2)$$
$$\frac{dc_2}{dt} = g(c_1, c_2)$$

en el que se verifica que: La dinámica de la variable c_1 es mucho más rápida que la de la variable c_2 ; y, las curvas implícitas definidas por las componentes del campo de velocidades, $f(c_1, c_2) = 0$ y $g(c_1, c_2) = 0$ a las que nos referiremos como "nullclines", se intersecan en las proximidades de dos extremos relativos de la primera de ellas, como se esquematiza en la figura 1.7 La dinámica que se observa en un sistema así resulta ser muy general y se resume en las siguientes tres posibilidades:

1.3.1. Sistema excitable

Al igual que en el caso monoestable, el sistema excitable también posee un único punto fijo estable de forma que, para pequeñas perturbaciones muy próximas a dicho punto, el sistema decae

rápidamente al estado de equilibrio. Sin embargo, y como consecuencia de la diferencia entre las escalas temporales entre ambas variables, cuando el sistema es alejado del equilibrio por encima de un cierto umbral, éste, realiza una larga excursión por el espacio de fases antes de regresar de nuevo al punto de equilibrio.

El umbral de excitación queda determinado por la rama intermedia (inestable) entre los extremos relativos de la curva $f(c_1, c_2) = 0$, de forma que una vez superado dicho valor, el sistema es atraído por la rama derecha (estable) de la citada curva, lo que da lugar a un desplazamiento por el espacio de fases que se muestra en la figura 1.7 (a). El tiempo necesario para que el sistema se recupere de una excitación recibe el nombre de *periodo de refractoriedad*.



Figura 1.7: Diagrama de fases en el que junto con las curvas definidas por las componentes del campo de velocidad ("nullclines") se esquematiza la dinámica de: (a) un sistema excitable, (b) un sistema oscilante y (c) un sistema biestable. Se ha supuesto que la dinámica de la variable c_1 es mucho más rápida que la de la variable c_2 .

1.3.2. Sistema oscilante

En otras ocasiones el sistema dinámico poseerá un ciclo límite estable³ con un punto de equilibrio inestable en su interior, en ese caso el sistema es *oscilante*. En la figura 1.7 (b) se resume dicho comportamiento, en donde el único punto de intersección de las nullclines es el punto fijo inestable y el ciclo límite se representa por la curva cerrada en la que las flechas indican el sentido del movimiento. Como quiera que dicho ciclo límite es estable, cualquier perturbación del sistema hará que éste regrese al ciclo límite. El tiempo necesario para que el sistema realice una oscilación completa en el espacio de fases recibe el nombre de *periodo natural* del sistema.

Por su naturaleza un sistema oscilante puede ser descrito en términos de variables de amplitud y de fase lo que nos permite descubrir una propiedad importante de dichos medios. Así, mientras la amplitud, periodo y forma orbital son propiedades intrínsecas del sistema, la fase, sin embargo, no lo es. Supongamos que aplicamos una pequeña perturbación a un sistema oscilante, entonces tras un periodo de relajación se recuperan tanto la amplitud como la forma de las oscilaciones; no así la fase que mantendrá un cierto desajuste provocado por la perturbación.

1.3.3. Sistema biestable

Cuando el sistema posee dos puntos fijos estables se dice que es biestable. En la figura 1.7 (c) podemos ver como las nullclines se intersecan en tres puntos, dando lugar a dos puntos fijos estables y entre ambos un tercer punto fijo inestable. Una vez el sistema es desviado del equilibrio

³El teorema de Poincaré-Bendixon garantiza que en el plano toda curva solución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que permanece acotada en cierta región convergerá bien a un punto de equilibrio, bien a un único ciclo límite. La convergencia puede entenderse hacia adelante o hacia atrás en el tiempo, siendo así que el punto o ciclo límite pueden ser estables o inestables, o si se prefiere, atractivos o repulsivos (Verhulst, 1996).

éste retornará a uno de los dos puntos estables dependiendo de si se encuentra en la cuenca de atracción de uno u otro de los puntos estables.

La cuencas de atracción, en general, dependen de las escalas temporales de cada una de las variables pero en las proximidades de la rama inestable ésta representa un valor umbral para que el sistema se decida por uno u otro atractor.

1.4. Ley de Fick

La experiencia nos demuestra que cuando abrimos un frasco de perfume o de cualquier otro líquido volátil, podemos olerlo rápidamente en un recinto cerrado. Decimos que las moléculas del líquido después de evaporarse se difunden por el aire, distribuyéndose en todo el espacio circundante. Lo mismo ocurre si colocamos un terrón de azúcar en un vaso de agua, las moléculas de sacarosa se difunden por todo el agua. Estos y otros ejemplos nos muestran que para que tenga lugar el fenómeno de la difusión, la distribución espacial de moléculas no debe ser homogénea, debe existir una diferencia, o gradiente de concentración entre dos puntos del medio.



Figura 1.8: Ley de Fick.

Supongamos que su concentración varía con la posición a lo largo del eje X. Llamemos J a la densidad de corriente de partículas, es decir, al número efectivo de partículas que atraviesan en la unidad de tiempo un área unitaria perpendicular a la dirección en la que tiene lugar la difusión. La ley de Fick afirma que la densidad de corriente de partículas es proporcional al gradiente de concentración

$$J = -D\frac{\partial n}{\partial x}$$

La constante de proporcionalidad se denomina coeficiente de difusión *D* y es característico tanto del soluto como del medio en el que se disuelve.

La acumulación de partículas en la unidad de tiempo que se produce en el elemento de volumen $S \cdot dx$ es igual a la diferencia entre el flujo entrante *JS*, menos el flujo saliente *J'S*, es decir

$$JS - J'S = \frac{\partial J}{\partial x}S \cdot dx$$

La acumulación de partículas en la unidad de tiempo es

$$(Sdx)\frac{\partial n}{\partial t}$$

Igualando ambas expresiones y utilizando la Ley de Fick se obtiene

$$\frac{D\frac{\partial n}{\partial x}}{\partial x} = \frac{\partial n}{\partial t}$$

Ecuación diferencial en derivadas parciales que describe el fenómeno de la difusión. Si el coeficiente de difusión *D* no depende de la concentración

$$\frac{1}{D}\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

1.5. Estructuras espacio-temporales

1.5.1. Medios de reacción-difusión

Dado un medio activo en el que se ha fijado la dinámica de sus elementos lo siguiente que queda por fijar son los diferentes grados de acoplamiento entre las partes del sistema, independientemente de que éste sea continuo o discreto. El grado de acoplamiento puede medirse en función de su alcance. Así, podemos hablar de acoplamientos locales o globales, en función de su amplitud o fortaleza. En el apartado anterior se han puesto dos ejemplos extremos en los que el acoplamiento era total o nulo. Experimentalmente estos casos extremos no suelen observarse ya que generalmente hay algún tipo de interacción no global entre las distintas partes de los sistemas naturales. Concretamente la *difusión* es un mecanismo universal ya que está presente en la mayoría de los sistemas proporcionando interacción entre distintas partes de los mismos. Los llamados *sistemas reacción-difusión* son por tanto especialmente importantes al describir un número enorme de sistemas naturales.

Desde un punto de vista matemático los sistemas reacción-difusión se pueden modelar como un sistema acoplado de ecuaciones en derivadas parciales

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c, p) + D\Delta c, (1)$$

al que le hemos añadido un término difusivo en el que *D* representa el coeficiente de difusión, que en general puede ser un tensor de orden *n* aun que en la práctica dicho tensor suele reducirse a una matriz diagonal, y Δ es el operador laplaciano.

Así, la ecuación (1) sirve de modelo por ejemplo para un reactor químico no agitado, y en el que por lo tanto las concentraciones de las diferentes especies pueden variar de unas regiones a otras del mismo induciendo flujos difusivos. Otros ejemplos se podrían haber sacado de la biología, oceanografía, etc (Mikhailov, 1994; Murray, 1989).

En muchas ocasiones usando el *principio de esclavitud* (Haken, 1987) el número de variables de (1) se puede reducir a sólo dos que se suelen llamar: *Activador* e *inhibidor*. Dicho principio se basa en despreciar las variables que convergen muy rápidamente hacia el estado estacionario y por tanto tienen poca influencia en la dinámica global. Los sistemas activador-inhibidor se caracterizan por la propiedad de *autocatálisis* del activador, que le permite autogenerarse, y la propiedad del inhibidor de "suprimir" activador. La competencia que se establece por el juego entre ambas especies es el mecanismo que está detrás de la formación de estructuras estables en el medio.

Como ya ha sido dicho, el tipo de estructura que surge en el medio activo depende de la naturaleza de los elementos del sistema y de su acoplamiento. Así en un sistema reacción-difusión si la dinámica local es biestable y el medio activo se encuentra en un estado homogéneo, determinado por uno de los puntos de equili-brio excepto por una pequeña porción o perturbación, con valores



Figura 1.9: Ondas en un medio excitable. Simulación realizada con el modelo del Ore-gonator (ver anexos).

suficientemente grandes del coeficiente de difusión, si la perturbación inicial es suficientemente grande se activará una transición local en los vecinos de los elementos perturbados que los hará saltar al otro punto de equilibrio de forma que la perturbación se propagará por todo el medio en forma de una onda viajera o *onda de activación*. En este caso decimos que el medio activo es biestable y las ondas de activación son las estructuras espacio-temporales típicas que puede sustentar dicho medio.

Análogamente cuando hablamos de medios excitables nos referimos a los medios activos cuyos elementos constituyentes poseen una dinámica excitable. Así, si en un sistema reacción-difusión la dinámica local es excitable, con valores suficientemente grandes del coeficiente de difusión y el medio activo se encuentra en el estado de equilibrio, excepto por una pequeña porción o perturbación, cuando la perturbación supera cierto umbral se producirá una transición local en los vecinos de los elementos perturbados que los excitará a realizar también ellos una transición en el espacio de fases de cada uno de ellos. Al igual que en el medio biestable dicha perturbación se propagará por todo el medio en forma de una onda de excitación. Una vez el medio ha recuperado localmente el punto de equilibrio, tras el paso de la onda de excitación, estará listo para que una nueva onda pase por el mismo sitio. Esto hace que la variedad de las estructuras espaciotemporales observadas en medios excitables sea más rica que la observada en medios biestables. De ellas las más habituales en dos dimensiones son las ondas concéntricas y las ondas espirales, ver figura 1.9. Estas últimas se forman cuando una onda posee extremos libres, que se puede producir, por ejemplo, por la ruptura de una onda concéntrica. En ese caso los extremos comienzan a curvarse y la onda a girar entorno a dichos extremos formando una espiral. La propia dinámica de las espirales puede ser muy rica en función de los movimientos de su centro (Pérez-Muñuzuri et al., 1991; Muñuzuri et al., 1993; JTaboada et al., 1994; Gómez-Gesteira et al., 1996; Ruiz-Villarreal et al., 1997) llegando a observarse transiciones a regímenes caóticos debidos a sucesivas rupturas de dichas ondas espirales (Bär y Eiswirth, 1993).

Al igual que sucede en los medios biestables y excitables los medios activos cuyos elementos constituyentes tienen dinámica oscilatoria, que llamaremos *medios oscilatorios*, también sustentan la propagación de perturbaciones en forma de ondas viajeras de forma similar a la descrita para medios excitables. Además, como ha sido descrito en el apartado anterior la dinámica local puede ser representada por variables de fase y de amplitud, siendo que la fase no depende de los elementos en sí, lo que permite nuevos tipos de estructuras espacio-temporales como las ondas de fase.

Las ondas de fase hacen acto de presencia en un medio oscilante como respuesta a la inestabilidad global que provocan los gradientes de fase. En ese caso, se inducen ondas viajeras mucho

más rápidas que las ondas de excitación, entre otras cosas porque por su naturaleza son casi independientes de la difusión (Epstein y Pojman, 1998). Por ese mismo motivo su periodo está muy próximo al periodo natural de los elementos del medio (Aliev y Biktashev, 1994).

1.5.2. Tipos de estructuras espacio-temporales

Las ondas viajeras que se han descrito en el capítulo anterior no son los únicos tipos de estructuras espacio-temporales que podemos encontrar en los medios activos. De forma general dichas estructuras se suelen clasificar en función de las inestabilidades que las originan. Así, si $q_0 \ge \omega_0$ son el vector de onda y frecuencia de la inestabilidad que genera la estructura espaciotemporal en el sistema, entonces podemos clasificar dichas estructuras en (Cross y Hohenberg, 1993):



Figura 1.10: Patrones de Turing en la reacción CDIMA.

- **Tipo** I_s Son periódicas en el espacio y estacionarias en el tiempo ($q_0 \neq 0$ y $\omega_0 = 0$). La inestabilidad de Turing es un ejemplo típico y está en el origen de, por ejemplo, los patrones que exhiben las pieles de muchos animales. Fue predicha de forma teórica a mediados del siglo pasado por Alan Turing (Turing, 1952) pero no fue hasta 1991 que en el grupo de P. De Kepper se obtuvieron experimentalmente (Castets et al., 1990). Desde entonces y hasta hoy ha tenido mucha atención por parte de los investigadores (Pérez-Muñuzuri et al., 1995; Horváth et al., 1999; Sanz-Anchelergues et al., 2001; Rüdiger et al., 2003; Míguez et al., 2005, 2006b,a; Berenstein y Muñuzuri, 2006). En la figura 1.10 pueden verse unas imágenes de patrones de Turing obtenidas en el laboratorio.
- **Tipo** III_0 Son espacialmente uniformes y periódicas en el tiempo ($q_0 = 0$ y $\omega_0 \neq 0$). Este tipo de patrones no exhiben distribución espacial alguna y únicamente presentan una oscilación temporal periódica. Suelen recibir el nombre de *estados pulsantes*.
- **Tipo** I_0 Son periódicas tanto en el espacio como en el tiempo $(q_0 \neq 0 \text{ y } \omega_0 \neq 0)$. En general suelen recibir el nombre de *ondas no lineales*, aunque también se las conozca como *autoondas* en la literatura soviética (Krinsky, 1984). A este grupo pertenecen los ya mencionados trenes de ondas viajeras que se caracterizan por su relación de dispersión $\omega(q)$. Pertenecen también a este tipo las llamadas *ondas solitarias* que se encuentran en medios no disipativos.

Finalmente, también se pueden formar *ondas estacionarias* como consecuencia de la superposición de frentes contrapuestos lo que incrementa considerablemente la riqueza de las estructuras tipo I_s ya descritas.

Destacar que las ondas no lineales o autoondas poseen una serie de propiedades que las caracterizan y diferencian de las ondas clásicas. En el cuadro se resume dichas diferencias.

Propiedad	Ondas clásicas	Ondas no lineales
Conservan la energía	Sí	No
Conservan la amplitud y la forma	No	Sí
Reflejan	Sí	No
Se aniquilan entre sí	No	Sí
Interfieren	Sí	No
Difractan	Sí	Sí

Tabla 1c: Propiedades de las ondas no lineales en comparación con las ondas clásicas.

1.5.3. Transporte

Advección

A parte de la difusión existen otros mecanismos que proporcionan interacción entre los distintos elementos de un medio activo. Cuando el medio es fluido una de ellas es la presencia de un campo de velocidades convectivo que como consecuencia produce *advección*. Para ser más precisos, cuando hablamos de advección estamos refiriéndonos a la situación en la que una partícula se mueve con el fluido, a veces también se habla de advección pasiva para enfatizar que dicha partícula es tan sumamente ligera e inerte que lo único que es capaz de hacer es precisamente seguir al fluido. Así, ajustará su velocidad de forma instantánea a la del fluido que la circunda, por lo que formalmente podremos escribir:

$$V_{particula} = V_{fluido};$$
 (2)

En particular, la propia cinemática del fluido es en sí misma de tal forma que cada partícula de fluido está sujeta a advección pasiva. La presencia de advección en los medios fluidos es muy difícil de eliminar en el laboratorio, desde gradientes de temperatura hasta pequeñas vibraciones son múltiples las causas que originan su presencia lo que la convierte en una gran relevancia tanto científica como práctica. Uno de esos casos, que es el que nos ocupa en este trabajo, es el de un medio fluido activo en el que hay presente un campo advectivo. Como veremos, la presencia del campo advectivo provoca una inestabilidad en el medio activo que como resultado inducirá la formación de patrones que en algunos casos serán cualitativamente diferentes a los ya presentes en el sistema reacción-difusión.



Figura 1.11: Mezclado de ferroína en una disolución de glicerol.

Desde un punto de vista matemático los sistemas reactivos en los que interviene la difusión y la advección se pueden modelar de la siguiente forma

$$\frac{\partial c}{\partial t} + (V.\nabla)c = f(c, p) + D \bigwedge c$$

en donde al sistema de ecuaciones en derivadas parciales

$$\frac{\partial c}{\partial t} = f(c, p) + D \bigwedge c$$

hemos añadido un término advectivo en el que V es el campo de velocidades y ∇ el operador gradiente.

Mezclados

Comúnmente observamos que cuando una sustancia pasiva es introducida en el interior de un fluido se produce un efecto de mezclado, ver figura 1.11, que consiste en que dicho pasivo se va expandiendo por todo el fluido hasta ocuparlo completamente, de forma que con el transcurso del tiempo se aproximará asintóticamente a una concentración espacialmente uniforme. Sabemos que uno de los procesos fundamentales que intervienen en dicho mezclado es la difusión, pero también sabemos que podemos acelerar dicho proceso si aumentamos la dispersión de las partículas, es decir si agitamos sucede que debido a la colisión de las moléculas presentes en el medio se provoca que intercambien cantidad de movimiento, causado por un gradiente de las variables del sistema. En general, dicho proceso será mucho más lento que el mezclado debido a la agitación, es decir debido a la advección en el fluido.

Así pues, el estudio de los procesos de mezclado inducidos por un campo advectivo tienen una gran importancia para la ingeniería ya que el diseño de utensilios y maquinarias que sirvan para mezclar de una forma eficiente tiene una gran utilidad práctica en la industria química, metalúrgica, y un largo etc.

El mecanismo fundamental que subyace a los procesos de mezclado por agitación se puede reducir a lo siguiente (Ottino, 1989): El campo advectivo ejerce un proceso mecánico sobre la mancha inicial de sustancia pasiva que consiste en estirarla y doblarla repetidamente. Por lo tanto cualquier campo de velocidades presente en el fluido que alterne estos dos mecanismos es de esperar que acelere el proceso de mezclado que podemos lograr por simple difusión. Sin embargo, se ha comprobado (Ottino, 1989) que dicho proceso mecánico es aún más eficiente cuando actúa también a nivel más molecular, y eso se logra cuando las trayectorias de los elementos de fluido son caóticas. En este sentido, al estudio del mezclado le ha proporcionado un gran impulso el desarrollo teórico que se ha producido a finales del siglo pasado en relación con la llamada "advección caótica".

Advección caótica

La idea de *advección caótica* fue formalmente introducida por primera vez por Aref (Aref, 1984) a mediados de la década de los 80 del siglo pasado. Dicha idea ha sido muy exitosa, como lo prueba el número de veces que su artículo ha sido citado desde entonces. Esencialmente viene a establecer que no es necesario que el fluido esté en régimen turbulento para que las partículas advectivas sigan trayectorias caóticas. Concretamente lo que propuso Aref es la existencia de un subrégimen advectivo dentro del laminar, y por tanto no turbulento, que él denominó "advección caótica" Uno de los motivos que ha contribuido al enorme número de trabajos científicos que exploran las implicaciones de dicho régimen advectivo es que, al contrario de lo que sucede con el caso turbulento, es mucho más accesible a ser modelado matemáticamente, de hecho en tres dimensiones ni siquiera es necesario que el flujo sea dependiente del tiempo para obtener caos. Si el flujo es dependiente del tiempo entonces es posible encontrar caos determinista en dos dimensiones.

En el caso de los fluidos incompresibles bidimensionales su tratamiento matemático se hace más accesible al poder tratarse mediante un formalismo Hamiltoniano. Para fijar notación usaremos

$$V_{particula} = \left(\frac{\partial x}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial t}\right)$$

en donde (*x*, *y*) es el vector de posición de la partícula en coordenadas cartesianas; mientras que la velocidad del fluido la denotaremos por

$$V_{fluido} = (u(x, y, t), v(x, y, t))$$

Pues bien, de la condición de incompresibilidad

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$$

se deduce que existe una función ψ , que se suele llamar función de flujo, tal que

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Si combinamos dicha ecuación con la ecuación (2) obtenemos que

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

Es decir, la cinemática del movimiento de las partículas pasivas en un flujo incompresible bidimensional es equivalente a la dinámica de una masa puntual en la formulación Hamiltoniana. O si se quiere, en este caso particular el espacio de fases coincide con el espacio de configuraciones, en donde la función de flujo hace el papel de Hamiltoniano. Gracias a esta correspondencia podemos usar todos los resultados conocidos de la dinámica Hamiltoniana. Por ejemplo, como los Hamiltonianos unidimensionales y no dependientes del tiempo son integrables, lo mismo sucede con los flujos incompresibles, bidimensionales y no dependientes del tiempo (estacionarios). Por la misma analogía concluimos que los flujos no estacionarios, incompresibles y bidimensionales no son en general integrables.

Así pues, resulta, que un sencillo campo de velocidades que es totalmente determinista en la formulación Euleriana puede producir un comportamiento esencialmente estocástico en la dinámica advectiva de un pasivo en la formulación Lagrangiana.

El otro motivo del profundo éxito de la idea de advección caótica es que la posibilidad de que fluidos incomprensibles y no turbulentos puedan producir caos, tiene profundas implicaciones prácticas y muchas de ellas derivan del hecho de que la presencia de caos determinista acelera considerablemente los procesos de mezclado. Así, ya en el trabajo original de Aref se muestran simulaciones hechas en un flujo bidimensional (concretamente el «blinking vortex») en donde se observa que la dispersión de las partículas discretas durante un periodo de tiempo fijo es drásticamente mayor en el régimen caótico que en el régimen integrable o quasi-integrable.



Figura 1.12: Tubos de ensayo rotados.

Eficiencia del mezclado y exponentes de Lyapunov finitos

Cuando un sistema es meramente difusivo una forma natural de cuantificar la eficiencia de mezclado es el coeficiente de difusión. Sin embargo, cuando hablamos de un medio advectivo debemos buscar nuevas formas de determinar dicha eficiencia. Como hemos visto en los apartados anteriores, cuando un fluido se encuentra en un régimen de advección caótica, dos partículas inicialmente próximas aumentan su separación de forma exponencial con el tiempo. Por ello la forma natural de cuantificar el transporte en dichos regímenes es estudiando la dispersión relativa de dichas partículas. En la práctica existen diferentes formas de cuantificar la eficiencia de mezclado en tales situaciones. Una de dichas formas está relacionada con el coeficiente de difusión y consiste en medir la dispersión de una magnitud escalar pasiva, θ . Dichas medidas involucran la varianza de la magnitud escalar, $\langle \theta^2 \rangle$ en donde los promedios se toman en el espacio y en el tiempo (Doering y Thiffeault, 2006).

Existen otras formas que no implican la presencia de una magnitud escalar pasiva. De ellas, la más sencilla consiste en considerar dos partículas elementales de fluido inicialmente separadas una distancia d(0) y medir su separación $d(\tau)$ después de transcurrido el tiempo τ . Entonces se puede definir la eficiencia para cierta escala temporal τ de la siguiente forma:

$$\xi = \frac{d(\tau)}{d(0)}$$

En dicha escala temporal el mezclado será tanto más eficiente cuanto mayor sea la separación final de dos partículas lagrangianas inicialmente próximas, y, por lo tanto, ξ_{τ} aumenta con la eficiencia del mezclado.

Otras formas más elaboradas de medir la eficiencia del mezclado involucran los exponentes de Lyapunov. Así, si consideremos que dos partículas en un instante de tiempo t poseen posiciones R(t) y R(t) + r(t), respectivamente, donde r(t) representa la distancia entre ambas, la evolución en el tiempo de dicha separación viene determinada por el campo de velocidades V de la siguiente manera

$$\frac{dr}{dt} = V(R(t) + r(t), t) - V(R(t), t); (3)$$

si consideramos tiempos suficientemente pequeños⁴ nos permite linealizar la ecuacion (3) en un

⁴Por otra parte, si consideramos tiempos suficientemente grandes la distancia de separación entre las partículas

entorno de R(t). Y como hemos supuesto que el campo advectivo es caótico la separación entre ambas partículas será exponencial, es decir

$$r(t) \cong r(0) \mathrm{e}^{\lambda} t$$

donde λ es el exponente de Lyapunov lagrangiano (Guckenheimer y Holmes, 1990). Dicho exponente es una excelente medida de la eficiencia de mezclado, ya que nos informa del poder de dispersión del campo de velocidades. Ahora bien, en la práctica no suele ser posible alcanzar los intervalos de tiempo que justifiquen la aproximación $r(t) \cong r(0)e^{\lambda}t$. Es más, incluso cuando se conoce analíticamente el campo de velocidades, no suele ser trivial calcular los exponentes de Lyapunov por lo que se suele terminar recurriendo a métodos numéricos. Por todo ello, se hace necesario utilizar magnitudes que no sean asintóticas.

Consideremos la definición de exponente de Lyapunov:

$$\lim_{n \to \infty} \lim_{r(0) \to 0} \frac{l}{t} \ln\left(\frac{r(t)}{r(0)}\right)$$

Existen dos formas de desprendernos de los límites en dichas definiciones. Por una parte podemos fijar un tiempo suficientemente pequeño, τ, y medir la distancia de separación entre dos partículas durante dicho tiempo. Obtenemos así el llamado *exponente de Lyapunov de tiempo finito* (Yoden y Nomura, 1993; Artale et al., 1997; Lapeyre, 2002)

$$\lambda_{\tau} = \frac{1}{\tau} \ln \left(\frac{r(\tau)}{r(0)} \right)$$

cuyo valor será función de la posición y del tiempo contrariamente a lo que sucede con el exponente asintótico. Sus valores se distribuyen en torno a un valor medio que no es otro que el exponente de Lyapunov (Boffetta et al., 2002). Dicho valor, al ser distribuido en el tiempo, es capaz de medir no sólo el grado de eficiencia del mezclado en la escala temporal fijada sino que además arrastra información sobre la persistencia de estructuras que controlan el proceso de mezclado.

Por otra parte, cuando r(t) toma valores finitos, o si se quiere, valores próximos a las longitudes características del sistema, se suelen usar los *exponentes de Lyapunov de espacio finito* (Aurell et al., 1996, 1997)

$$\lambda_d = \frac{1}{t} \ln\left(\frac{r(d)}{d_0}\right)$$

donde *t* es el tiempo necesario para que dos partículas inicialmente separadas una distancia d_0 alcancen una separación umbral d. La magnitud λ_d nos informa del grado de crecimiento (exponencial) de una escala espacial de mezclado d_0 a otra *d*. Es decir, nos informa del grado de crecimiento de la zona de mezclado considerada. Al igual que sucede con los exponentes de tiempo finito su valor será función tanto de la posición como del tiempo.

Difusión anómala

Supongamos una "mancha" de una sustancia pasiva, inicialmente de pequeño tamaño, inmersa en un fluido. Intuitivamente entendemos la difusión como el incremento de tamaño que experimenta dicha mancha en el transcurso del tiempo. Experimentalmente se sabe que en el caso de la difusión normal o browniana la mancha incrementa su tamaño linealmente con el tiempo. Si tomamos la

generalmente vendrá dada por una ley difusiva (Artale et al., 1997), bien browniana o bien anómala, ver apartado siguiente.

varianza de las posiciones de las partículas en el sistema de referencia del centro de masas como una medida de su tamaño, entonces se define el coeficiente de difusión como

$$D = K \frac{S^2}{t}$$

donde S^2 es la varianza de la distribución de posiciones y K es una constante⁵. Sin embargo, resulta conveniente interpretar la difusión matemáticamente. Así, si R es la variable aleatoria que denota la posición de una partícula tras n saltos estocásticos podemos interpretar el conjunto de puntos de la mancha como una realización de dicha variable aleatoria. Cuando n es suficientemente grande el Teorema Central del Límite dice que R seguirá una ley Gaussiana y nos permite identificar la varianza muestral con la poblacional de forma que sustituyendo S_2 por σ^2 y usando la relación $D = K \frac{S^2}{t}$ obtenemos

$$\sigma^2 = \frac{1}{K}Dt.$$

que usando $\sigma^2(t) = \langle R^2(t) \rangle - \langle R(t) \rangle^2$ y dado que en una distibución gaussiana la media es nula

$$\langle R^2(t)\rangle = dDt.$$

La relación $\langle R^2(t) \rangle = dDt$ nos dice que la media temporal del desplazamiento cuadrático de una partícula browniana evoluciona linealmente en función del tiempo. Esta propiedad, y su equivalente $\sigma^2 = \frac{1}{K}Dt$, se suelen usar tanto de forma experimental, como numérica y teórica para determinar si el mecanismo de transporte estudiado es o no browniano.

El desorden añadido por la dispersión puede tener dos tipos de efectos sobre la difusión. Por una parte puede que sólo afecte a los valores de los parámetros de transporte tales como la velocidad, la constante de difusión, etc. Por otra parte, también puede suceder que altere las leyes estocásticas que rigen el movimiento aleatorio de la partícula. Los mecanismos de transporte en los que los movimientos se pueden describir mediante un proceso aleatorio e isotrópico, como el caso de la difusión clásica, pero que violan la ecuación $\sigma^2 = \frac{1}{K}Dt$ y en su lugar verifican

$$\langle R^2(t)\rangle \alpha Dt^{\nu}$$

con $v \neq 1$ se denominan difusión anómala (Montroll y Shlesinger, 1984; Bouchaud y Georges, 1990; Ben-Avraham y Havlin, 2000), en contraposición a la difusión normal o browniana. Existen muchos fenómenos naturales en los que frecuentemente se observan procesos difusivos que se rigen por una ley como la $\langle R^2(t) \rangle \alpha D t^{\nu}$.

Como fue indicado, cuando el exponente dinámico toma el valor v = 1 estamos en el caso de difusión browniana o clásica en el que el movimiento aleatorio del conjunto de las partículas puede ser modelada por una ley de distribución de probabilidad Gaussiana. Si el valor del exponente es v < 1 se dice que el sistema está en un régimen de subdifusión. Este tipo de difusión ha sido observado en medios altamente heterogéneos como por ejemplo en el transporte de soluto en medios porosos (Drazer y Zanette, 1999) o en el movimiento de las proteínas en el núcleo celular (Wachsmuth et al., 2000). Finalmente, cuando los valores del exponente son v > 1 decimos que el medio está en un régimen de superdifusión. Se ha encontrado superdifusión por ejemplo en la migración celular (Thurner et al., 2003), el movimiento de partículas inertes en flujos turbulentos (Richardson, 1926; Shlesinger et al., 1987), disoluciones micelares (Ott et al., 1990), cristales porosos (Stapf et al., 1995), refrigeramiento por láser (Bardou et al., 2002) y flujos caóticos (Solomon et al., 1993; Paoletti et al., 2006).

⁵Dicha constante es igual a 1/2d.

Al igual que sucede con la difusión browniana la difusión anómala puede ser interpretada en términos de paseos aleatorios. Dichos paseos aleatorios cuando el medio es superdifusivo reciben el nombre de vuelos de Lévy (Hughes et al., 1981; Shlesinger et al., 1993) en honor del matemático Paul Lévy que fue el primero en estudiarlos por la década de los años 30 del siglo XX. Una de sus características físicas más importantes es que las partículas elementales que siguen un régimen superdifusivo, junto con periodos de relativo estancamiento, de forma aleatoria experimentan saltos entre partes muy alejadas del sistema, los *vuelos de Lévy*.

Matemáticamente, los vuelos de Lévy se caracterizan porque la varianza (o momentos de segundo orden) de las variables aleatorias que dan la distancia recorrida en cada salto, *l*, por la partícula estocástica diverge (Bouchaud y Georges, 1990; Shlesinger et al., 1993). En este caso, el Teorema Central del Límite ya no es aplicable. Las leyes probabilísticas estudiadas por Lévy son de la forma:

$$p(l) \approx l^{-\mu}$$

con 2 < μ < 3, que poseen media finita pero para las que los momentos de segundo orden

$$\langle l^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} l^2 p(l) dl$$

son divergentes. En este caso la varianza de la distancia recorrida, $\sigma^2 = \langle R^2(t) \rangle$, crece de forma no lineal, concretamente siguiendo la ecuación $\langle R^2(t) \rangle \alpha D t^{\nu}$ con $1 < \nu < 2$, lo que se corresponde con el régimen superdifusivo

Finalmente indicar que cuando se asume que la velocidad de cada salto es constante los trabajos de Klafter et al. (1987); Wang (1992); Geisel et al. (1985) muestran que la relación entre los exponente de la difusión anómala y la distribución de Lévy es de la forma

$$v = 4 - \mu$$

1.6. Entropía

Según la Segunda Ley de la Termodinámica, en un Sistema Aislado, la entropía del Sistema crece a lo largo de su evolución con el fin de encontrar el equilibrio termodinámico.

Recordemos que la Entropía (*S*) es una medida del desorden. Es por tanto cuando el desorden es máximo, cuando se alcanza el equilibrio termodinámico. Boltzman introdujo el concepto de Entropía en relación con el del número de estados mediante su fórmula:

$$S = K \ln(\omega)$$

donde *K* es la constante de Boltzman y ω es el número de microestados posibles, es decir, cada uno de los estados de las partículas que constituyen el sistema. Se observa que el número de microestados y por tanto el desorden, aumenta con la entropía.

Los Sistemas Complejos tratan con sistemas con un gran número de elementos, todos ellos interactuando entre sí, de forma que es posible aplicar las leyes de la física estadística. Estudiando los Procesos Biológicos vemos que presentan dos importantes propiedades: Por un lado involucran a un gran número de elementos que interactúan unos con otros, y tienen por consiguiente muchos grados de libertad. Por otra parte, como se verá posteriormente, son Sistemas Fuera del Equilibrio Termodinámico. Parecen pues, adecuados para ser tratados dentro de los modelos de los sistemas complejos.

Una de las preguntas que más interés ha despertado en la Biología, es sin duda: ¿Cómo es posible que las células, partiendo de un material genético común, se agrupen ordenadamente para formar los distintos órganos?

Además, si se forma orden a partir de homogeneidades, ¿contradice entonces la formación de órganos durante el desarrollo embrionario la segunda ley de la Termodinámica?

1.6.1. El alcance de la termodinámica y sus enfoques.

La termodinámica es quizá el campo más fundamental y exacto de la física y proporciona uno de los métodos más generales para analizar los fenómenos físicos y químicos. Es una ciencia estadística y la exactitud de sus predicciones aumenta con el tamaño del sistema material de estudio. Por otra parte, trata con propiedades relativamente groseras o macroscópicas de la materia, tales como presión, temperatura, volumen y composición química, propiedades que se miden fácilmente con métodos sencillos. El análisis termodinámico de los procesos químicos no requiere de conocimiento detallado de la teoría atómica o de los mecanismos de reacciones; de hecho, es independiente de cualquier concepción que podamos tener acerca de la estructura de la materia.

¿De qué modo procede, exactamente, la ciencia de la termodinámica para analizar intercambios de energía? En primer lugar, debemos especificar la porción de materia en la cual deseamos estudiar los cambios de energía experimentados durante algún proceso químico o físico. Esta porción de materia recibe el nombre de *sistema*; el resto de la materia del universo se llama *medio*. Posteriormente, se debe especificar el contenido total de energía del sistema de que el proceso tenga lugar, es decir, en el estado inicial, y después de que se haya realizado, es decir, en el estado final. A medida que el sistema evoluciona desde su estado inicial hasta su estado de equilibrio, puede absorber energía del medio o cedérsela. La variación en el contenido de energía del sistema originada cuando pasa de un estado a otro, está contrarrestada por un cambio de sentido contrario en el contenido de energía medio. El estado de equilibrio es aquel en que ya no se produce ningún cambio ulterior, en el interior del sistema, o entre el sistema y el medio. En el equilibrio, la temperatura y la presión son uniformes en todo el sistema, y ya no operan en él fuerzas sin equilibrar.

Acabamos de decir que se debe especificar el contenido de energía de los estados inicial y final del sistema en estudio. Sin embargo, en la práctica, medir con exactitud el contenido total del sistema dado constituye una tarea formidable y frecuentemente imposible. Pero muchas veces se puede medir con facilidad la *diferencia* en el contenido de energía entre el estado inicial y el estado de equilibrio del sistema; esto es, la cantidad de energía intercambiada entre sistema y medio durante el proceso. Si conocemos la cantidad y la clase de energía que un sistema dado intercambia con el medio cuando evoluciona desde el estado inicial al estado de equilibrio, tendremos bastante información para llevar a cabo el análisis termodinámico de un proceso.

Las leyes de la termodinámica son independientes del tiempo que un sistema requiere para pasar de su estado inicial a su estado final. De este modo, no importa que un proceso químico o físico necesite segundos o siglos para alcanzar el equilibrio. Por otra parte, la termodinámica no se interesa por el camino o mecanismo seguido por los cambios físicos o químicos. Solamente tiene en cuenta la diferencia de energía entre el estado inicial y el final del sistema, independientemente de cómo ha tenido lugar la transición. Como corolario directo se deduce que los cambios de energía que tienen lugar en cada uno de los paso intermedios de cualquier proceso químico o físico son completamente aditivos. Su suma algebraica es exactamente igual al incremento de energía del proceso global, independientemente de la naturaleza o el número de pasos que integran el camino seguido.

Cuando el termodinámico estudia los cambios de energía durante un proceso, procura reducir al mínimo el número de variables que afectan al sistema, tales como la presión, el volumen o la temperatura. Por ejemplo, si la temperatura de un sistema se mantiene constante, resulta fácil especificar con exactitud las variaciones de energía inherentes al proceso. En las reacciones bioquímicas simples que queremos estudiar, podemos lograr simplificaciones muy grandes, puesto que las reacciones biológicas generalmente tienen lugar en soluciones acuosas diluidas que están en equilibrio con la atmosfera, condiciones en las que no solamente una, sino tres de las variables más importantes, temperatura, presión y volumen permanecen constantes. Por esta razón no necesitamos interesarnos en gran parte del formalismo termodinámico que trata de los gases, de los cambios de presión volumen y de las transiciones entre los diferentes estados de la materia.

1.6.2. La primera ley de la termodinámica.

Todos los sucesos del mundo físico se ajustan y están determinados por los dos principios fundamentales de la termodinámica, conocidos como *primera ley y la segunda ley*.

La primera ley, enunciada por Robert Mayer en 1841, es el principio de la conservación de la energía: *la energía no puede ser creada ni destruida*. Así, en cualquier momento físico o químico la energía total del sistema más el medio, es decir, la energía total del universo, permanece constante.

Sabemos que las diferentes formas de energía pueden convertirse, así la energía térmica del vapor puede ser transformada en energía mecánica mediante una máquina de vapor. La energía mecánica puede ser convertida en energía eléctrica mediante un generador y la energía eléctrica a su vez transformada en energía química, como sucede cuando se carga una batería. La primera ley de la termodinámica impone solamente una limitación sobre estos intercambios de energía: que la energía total del sistema más la del medio debe permanecer constante.

La primera ley implica también una correspondencia cuantitativa entre las diferentes clases de energía. Tales equivalencias cuantitativas de energía han sido establecidas a partir de muchas medidas físicas. La existencia de tales equivalencias entre las diferentes formas de energía parece implicar que son fácil y completamente interconvertibles; sin embargo, no siempre sucede así.

Debido a que el calor es la forma más familiar de energía ya que es fácilmente medible, la mayor parte de las primeras investigaciones sobre la equivalencia de las diferentes formas de energía y sobre los intercambios de energía que tienen lugar en los procesos físicos y químicos, fueron evaluadas sobre la base de los cambios de calor. Por esta razón histórica, a la ciencia que trata de los intercambios de energía se le llamo *termodinámica*. Pero esta ciencia realmente trata y es aplicable a los intercambios de *todos* los tipos de energía; de este modo, podría llamarse exactamente *energética*.

1.6.3. La entropía y segunda ley.

La primera ley nos dice que la energía se conserva; todo cambio físico y químico debe satisfacer este principio. Sin embargo, existe otro aspecto fundamental de los intercambios de energía, no explicado por la primera ley. Un ejemplo sencillo servirá para ilustrar el problema con la figura siguiente.

Supongamos que se colocan juntos dos bloques de cobre, uno caliente y otro frio, los encerramos en un recipiente aislado, y dejamos que se alcance un equilibrio entre ambos. La temperatura del bloque caliente descenderá y la del bloque frio aumentara hasta que ambos alcancen
una temperatura intermedia de equilibrio, que será uniforme a lo largo de ambos bloques. El flujo de calor y por lo tanto de energía desde el bloque caliente al frio es espontaneo. Sin embargo, si introducimos dos bloques idénticos de cobre, ambos a la misma temperatura en el recipiente aislado, sabemos que permanecerán a la misma temperatura. Nunca esperaríamos que la temperatura de un bloque aumente espontáneamente y que la del otro descienda. Sin embargo, aunque esto sucediera, no se violaria la primera ley, porque la energía perdida por un bloque podría ser ganada por el otro; la energía total de los dos bloques permanecería constante.



Las moléculas de soluto fluyen de una zona de concentración elevada a una zona de concentración baja.

Figura 1d: Aumento de entropía o dispersión en algunos sistemas físicos. Tales flujos nunca cambian de sentido espontáneamente.

Es bastante evidente después de considera este ejemplo que los cambios físicos o químicos espontáneos tienen un *sentido* que no puede ser explicado por la primera ley. Hemos visto que todos los procesos tienden hacia un equilibrio, en el que la temperatura, la presión y todas las demás propiedades medibles se han hecho uniformes en todo el sistema y en el medio. Sin embargo, una vez que un proceso ha alcanzado tal equilibrio no volverá espontáneamente al estado inicial. Cuando los bloques de cobre caliente y frio de nuestro ejemplo alcanzan exactamente la misma temperatura, toda la energía térmica originalmente contenida en los dos bloques se encuentra uniformemente distribuida en ambos. La energía se ha dispersado al máximo y nunca por si misma volverá a tener su forma inicial.

La segunda ley nos proporciona un criterio para predecir el sentido de cualquier proceso. En primer lugar reconoce un estado o condición de la materia y de la energía llamado *entropía* que de un modo sencillo puede definirse como dispersión o desorden. Establece entonces que los procesos físicos y químicos se desarrollan en el sentido en que la dispersión o del universo (el sistema más el medio) aumente lo más posible; en este punto tiene lugar el equilibrio. La segunda ley afirma que ningún proceso puede de modo que la entropía disminuya. Los procesos que implican aumento de entropía son, de este modo irreversibles; nunca volverán espontáneamente

a su estado inicial. Desde el punto de vista teórico, la entropía del universo puede permanecer constante durante un proceso, y cuando esto sucede se dice que el proceso es *reversible*. A pesar de que se puede distinguir así entre procesos irreversibles y reversibles, debemos añadir a continuación que los proceso completamente reversibles, en los cuales la entropía del universo permanece constante, son hipotéticos; no existe constancia de ellos en nuestro mundo físico real. ¿Por qué es esto así? Los procesos reales son irreversibles porque una forma de energía no puede ser cuantitativamente convertida en otra sin que produzca alguna pérdida de energía en una forma dispersada o disipada. Por ejemplo, la energía mecánica aplicada a un generador eléctrico no se convierte completamente en energía eléctrica debido a la perdida de energía por rozamiento. Dicha energía se disipa en forma de calor en el medio, en el cual se dispersa. De este modo deja de ser aprovechable para realizar el trabajo. Toda la materia y la energía del universo experimenta una constante dispersión. El destino final del universo, es alcanzar un estado de completa dispersión y desorden, el cual se ha llamado *condena entrópica*.

Si la entropía es dispersión o desorden, lo opuesto es el orden. Podemos proseguir ahora y establecer una relación a la que algunas veces se llama tercera ley de la termodinámica: la entropía de un cristal perfecto de cualquier elemento o compuesto en el cero absoluto de temperatura, es cero. Debido a que no existe ningún movimiento térmico en el cero absoluto, los átomos de un cristal perfecto estarían entonces en un orden absolutamente perfecto. Cualquier otro estado menos ordenado que tal cristal tiene una cantidad finita de entropía o dispersión.

La entropía se expresa en término de *unidades de entropía*, que tiene las dimensiones de calorías por mol por grado. A una temperatura dada, los sólidos tienen una entropía relativamente baja, los líquidos una cantidad intermedia y los gases la entropía mas alta; el estado gaseoso es el más desordenado y caótico de la materia. Además, un gas a una temperatura elevada tiene más entropía que a temperatura baja, por causa del mayor movimiento térmico de sus moléculas. Por esta razón, cuando queramos especificar los cambios de entropía, debe darse la temperatura a la que tiene lugar dichos cambios.

1.6.4. Energía libre.

Acabamos de ver que la energía directriz de un proceso físico o químico es la tendencia que tiene el sistema a buscar aquel estado en el cual la entropía del universo se hace máxima. Pero la entropía o los cambios de entropía no siempre se miden o calculan con facilidad. Sin embargo, bajo condiciones espaciales, la variación de entropía que se produce en un proceso esta cuantitativamente relacionado con el incremento de energía interna del sistema mediante una tercera función llamada *energía libre*. Esta relación es importante en energética bioquímica porque los cambios en energía libre se miden con facilidad y pueden ser utilizados para predecir el sentido y el estado de equilibrio de las reacciones químicas.

La entropía y la energía libre están relacionadas mediante la ecuación que combina las leyes primera y segunda,

$$G = H - TS$$

en la que la G es la energía libre de Willard Gibss, el teórico americano que desarrollo por primera vez esta relación, T es la temperatura absoluta y H y S son, respectivamente, la entalpia y la entropía del sistema. Dicha ecuación se convierte en

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S = \Delta E + P\Delta V - T\Delta S$$

aplicable a cualquier proceso que el sistema lleve a cabo a temperatura (*T*) y presión (*P*) constantes. Si, además, el proceso transcurre a volumen constante, al ser $P\Delta V = 0$, se cumple que la

variación de entalpia es igual al incremento de la energía interna ($\Delta H = \Delta E$) y la ecuación anterior se convierte en

$$\Delta G = \Delta E - T \Delta S$$

debido a que esta ecuación se cumple para las condiciones en las cuales tienen lugar las reacciones celulares, es decir, a temperatura, presión y volumen constante, constituye una relación importante y fundamental en energía bioquímica. Si reagrupamos ahora esta ecuación en la forma

$$\Delta E = \Delta G + T \Delta S$$

Vemos que la variación de energía interna del sistema (ΔE) es igual a la suma algebraica del termino ΔG , siempre negativo en cualquier proceso real, y el termino $T\Delta S$, positivo, nulo o negativo. Podemos, ahora, definir ΔG , para los sistemas celulares que sufren transformaciones a temperatura, presión y volumen constantes, como aquella fracción de la variación de la energía interna que es utilizable para producir trabajo a medida que dichos sistemas evolucionan hacia el equilibrio. (En estas condiciones no existe trabajo de expansión por ser $\Delta V = 0$ y todo el trabajo producido es trabajo útil desde el punto de vista termodinámico y biológico.) Por otra parte, mientras que la entropía del sistema más la del medio (en el universo) evoluciona hacia un máximo cuando un proceso se dirige hacia el equilibrio la energía libre del sistema camina hacia un mínimo.

Con la ayuda de la figura 1e podemos resumir ahora las relaciones de las leyes primera y segunda cuando se aplican a sistemas que evolucionan a temperatura y presión constantes. En primer lugar, vemos que la energía interna del sistema más la del medio permanece siempre constante; sin embargo, la energía interna del sistema puede aumentar, disminuir o permanecer constante. En segundo lugar, la entropía del sistema más el medio siempre aumenta hasta un máximo durante un proceso real. En tercer lugar, la energía del sistema disminuye hasta un mínimo.

Todas estas relaciones se cumplen también en los proceso en que, además, el volumen es también constante. Debido a que la mayor parte de las reacciones de interés biológico transcurra a temperatura, presión y volumen constantes, y puesto que las variaciones de energía libre se miden con facilidad, el sentido de las reacciones bioquímicas, así como su punto de equilibrio, se predicen normalmente a partir de sus cambios de energía libre en lugar de hacerse a partir de sus variaciones de entropía.

Podemos señalar, como digresión importante, que la entropía del sistema no aumenta necesariamente durante un proceso: puede aumentar, disminuir, o permanecer constante. Sin embargo, la segunda ley dice que la entropía del *universo* debe aumentar. Por consiguiente, si la entropía del sistema aislado disminuyera en un proceso dado, la entropía del medio debería aumentaren una cantidad tal que la *suma* del incremento de entropía del sistema *mas* el correspondiente al medio fuera mayor que cero. Este es un punto extremadamente importante en lo que se refiere a los sistemas biológicos. Cuando los organismos vivos se desarrollan disminuyen evidentemente su entropía, por causa de la naturaleza altamente estructurada de materia viva. Pero este descenso de entropía solo puede producirse con la condición de que la entropía del medio ambiente aumente. Dicho de otro modo, los organismos vivos crean su propio orden interno a expensas del orden del medio, el cual se degrada.



Universo = Sistema + medio

Primera ley: la energía total del universo permanece constante

Segunda ley: la entropía del universo aumenta siempre

Figura 1*e*: Relaciones entre los cambios de entropía y energía libre en el sistema y el medio en procesos que tienen lugar a presión y temperaturas constantes.

1.7. Fisión-fusión y su relación con la reacción-difusión.

Los sistemas de reacción difusión se encuentran relacionados con un sistema denominado *fisión fusión*. Este sistema implícito en los mecanismos internos de diversos procesos bioquímicos, implica una de las maravillas biológicas de la historia de la vida en el planeta tierra y en los hechos comunes del universo. La fisión fusión es la responsable de la creación de las especies y más espectacular aun es la originaria de la evolución de estas.

La universalidad de la molécula portadora de la información genética hace que el DNA sea un carácter muy apropiado para el estudio comparativo y filogenético de las especies. Morfológicamente no es posible comparar una bacteria con un hombre, sin embargo sí que es posible establecer una comparación con moléculas de DNA de ambos organismos, ya que están formadas por el mismo lenguaje de bases. Con datos de secuencias podemos comparar cualesquier grupo de organismos, por distantes que sean. Los datos moleculares tienen otras propiedades adicionales que todas juntas los convierten en el carácter ideal de estudios filogenéticos. Muchos trabajos obtienen y analizan las secuencias de genes y proteínas de diferentes especies para resolver cuestiones todavía dudosas de relaciones entre organismos. Los datos moleculares han demostrado que nuestra especie está mucho más cerca del chimpancé y el gorila de lo que creíamos.

El empalme entre el proceso de fisión y el de fusión se da simultáneamente a través del espacio y

del tiempo, una de estas consecuencias es el fenomenal proceso de evolución. Como es de saber la evolución se dio gracias a cambios internos en los organismos originados por la necesidad de adaptarse a cierto ambiente o para superar una necesidad, y las especies con mayor adaptación se difundieron genéticamente hasta llegar a estados de evolución increíbles (propagación genética) y a ocupar o dispersarse en el espacio.

1.7.1. En los organismos

Desde el mismo momento de la fecundación de cada ser, este viene con un código genético escrito, el cual instruye a cada célula para formar tejidos, órganos y finalmente sistemas (respiratorio, renal, digestivo, óseo, etc.).

La fisión se da en el momento en que se divide la célula cargada con la información genética que proporciona una clase de energía para la evolución de las especies. Y la fusión se presenta en los cambios internos dentro de la estructura genética debido alteraciones implicadas por factores externos (ambiente) o internos (organismos). Por ejemplo el cruce de dos especies de guisantes hecha por Gregorio Mendel en el siglo XIX.

1.7.2. Árbol filogenético Universal

El análisis molecular de secuencias también nos ha enseñado que hay una división en la raíz misma del árbol de la vida que es más fundamental que la división de 5 reinos que se enseña normalmente. En lugar de los dos tipos celulares canónicos, los procariotas y eucariotas, hay tres tipos principales de células, las arqueobacterias, las eubacterias y los eucariotas. Este nuevo árbol recibe el nombre de árbol filogenético universal.



Figura 1.13: Árbol filogenético universal.

1.7.3. La evidencia de la evolución

La evolución que se da en una escala reducida, en el interior de una especie y en el intervalo de unas pocas generaciones, se denomina microevolución. La macroevolución es la evolución a gran escala, y abarca periodos considerables de tiempo, y grandes procesos de transformación; en el caso más extremo comprendería toda la evolución de la vida. Se pueden efectuar experimentos y/o observaciones de poblaciones de especies actuales a pequeña escala y obtener evidencia directa de evolución. Hay muchos ejemplos en los que se detecta la evolución en acción. La selección artificial efectuada por el hombre en el perro o el caballo son también claros ejemplos que muestran el potencial de modificación de una especie. Por su propia dimensión temporal, no podemos demostrar la macroevolución directamente, exceptuando los casos de creación de



Figura 1.14: Las diferentes razas de perro que el hombre ha obtenido por selección artificial ilustran el potencial de cambio que tienen las especies.

nuevas especies de plantas mediante cruzamiento de especies distintas por el hombre. Aunque la evidencia evolutiva que suministra el registro fósil, la biología comparada, y la biología molecular es indirecta, no por ello es menos concluyente a la hora de demostrar la comunidad de origen de todos los organismos.

1.8. Formación de patrones biológicos: sistemas de Reacción-Difusión

Basta observar a nuestro alrededor para encontrar fenómenos naturales que exhiben multitud de estructuras que forman patrones regulares. Las bandas en las dunas del desierto, las franjas de algunos peces, la piel moteada o con rayas de algunos mamíferos, los ojos reticulados de algunos insectos, son algunos ejemplos en los que la naturaleza busca un orden extremo de gran complejidad. La naturaleza de estos patrones puede ser de naturaleza exógena, como ocurre en los casos inanimados, o endógena, en los organismos vivos, en los que se forman estructuras auto-organizadas. Nos surge entonces la siguiente pregunta: ¿Obedece la formación de estas estructuras a alguna ley de naturaleza en común?

1.8.1. Seres vivos y el segundo principio de la termodinámica

Según la Segunda Ley de la Termodinámica, en un Sistema Aislado, la entropía del Sistema crece a lo largo de su evolución con el fin de encontrar el equilibrio termodinámico. Recordemos que la Entropía (*S*) es una medida del desorden. Es por tanto cuando el desorden es máximo cuando se alcanza el equilibrio termodinámico. Boltzman introdujo el concepto de Entropía en relación con el del número de estados mediante su fórmula:

$$S = K l n \Omega$$

donde *K* es la constante de Boltzman y Ω es el número de microestados posibles, es decir, cada uno de los estados de las partículas que constituyen el sistema. Se observa que el número de microestados y por tanto el desorden, aumenta con la entropía

Los Sistemas Complejos tratan con sistemas con un gran número de elementos, todos ellos interactuando entre sí, de forma que es posible aplicar las leyes de la física estadística. Estudiando los Procesos Biológicos vemos que presentan dos importantes propiedades: Por un lado involucran a un gran número de elementos que interactúan unos con otros, y tienen por consiguiente muchos grados de libertad. Por otra parte, como se verá posteriormente, son Sistemas Fuera del Equilibrio

Termodinámico. Parecen pues, adecuados para ser tratados dentro de los modelos de los sistemas complejos.

Una de las preguntas que más interés ha despertado en la Biología, es sin duda: ¿Cómo es posible que las células, partiendo de un material genético común, se agrupen ordenadamente para formar los distintos órganos? Además, si se forma orden a partir de homogeneidades, ¿contradice entonces la formación de órganos durante el desarrollo embrionario la segunda ley de la Termodinámica? Expondremos en los siguientes párrafos las teorías más relevantes expuestas hasta la fecha que tratan de explicar estas cuestiones.

1.8.2. Alan M. Turing y la teoría de la morfogénesis.

La morfogénesis (del griego morphê, forma, y génesis, creación) es el proceso por el cual se van desarrollando en un embrión los órganos diferenciados de un adulto a partir de estructuras indiferenciadas. Es junto con el control del crecimiento celular y de la diferenciación celular, uno de los aspectos fundamentales de la biología del desarrollo. La morfogénesis incluye la forma de los tejidos, de los órganos y de los organismos completos.

El británico matemático, Alan M. Turing, conocido como el Padre de la Computación, contribuyó también de manera definitiva en el campo de la Biología Matemática. Su artículo publicado en 1952, *The Chemical Basis of the Morphogenesis* es uno de los artículos científicos clásicos referentes del siglo XX.

En el artículo, Turing, planteó un modelo matemático, mediante el cual un sistema de sustancias Reaccionando y Difundiéndose a través de los tejidos era capaz de explicar la morfogénesis. Según sus palabras, *El propósito del artículo es discutir un posible mecanismo por el cual los genes de un* zigoto pueden determinar la estructura anatómica del organismo resultante. La teoría no asume nuevas hipótesis, solamente sugiere que ciertas leyes físicas bien conocidas son suficientes para dar cuenta de muchos de los hechos del proceso

Concretamente, Turing sugirió que un sistema de sustancias químicas, que el llamó morfógenos, a los que no dió ningún significado biológico concreto, pudiendo ser genes unas veces, otras veces hormonas, otras los pigmentos de la piel, etc., mediante reacciones y difusiones a través de la masa del tejido, formaría la base fundamental para la explicación de la morfogénesis.

Este proceso debía seguir por una parte las leyes ordinarias de la difusión, y por tanto cada morfógeno se movería de la región de mayor concentración a la de menor concentración, respetando así la ley de conservación de la materia.

Y por otra parte, debido al término de reacción, debía obedecer la ley de acción de masas, de forma que la velocidad a la que la reacción tiene lugar es proporcional a la concentración de las sustancias reactivas.

En origen partirán de estructuras bastantes homogéneas, pero debido a una inestabilidad del equilibrio producido por perturbaciones aleatorias, como ruido o movimiento Browniano, se desarrollarán en patrones espaciales.

Así, tomando el caso simple de dos tipos de morfógenos, $X \in Y$ planteó el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{dX_r}{dt} = f(X_r, Y_r) + u(Xr + 1 - 2X_r + Xr - 1)$$
$$\frac{dY_r}{dt} = g(X_r, Y_r) + v(Yr + 1 - 2Y_r + Yr - 1)$$

(r=1,...,N)

Donde, la parte reactiva viene dada por $f(X_r, Y_r)$ y $g(X_r, Y_r)$, siendo además X_r , Y_r , las concentraciones de los reactivos de cada morfógeno, que se suponen constantes en el tiempo.

Lo sorprendente del modelo es que tanto los procesos de Difusión como los de Reacción, tomados independientemente son homogeneizadores, pero considerándolos juntos y bajo determinadas circunstancias podían generar patrones estables

El término de difusión viene dado por el segundo término, siendo u y v los coeficientes de difusión, para el morfógeno X e Y respectivamente.

Sin entrar en detalles matemáticos, Turing resolvió las ecuaciones para una disposición ideal de células alineadas y dispuestas en forma de anillo, donde cada célula podía interactuar con sus vecinas, de forma que los morfógenos se difundieran por los poros de cada célula. Supuso para la resolución, que el sistema no se encontraba muy lejos del equilibrio termodinámico, de forma que las ecuaciones pudieran ser linealizadas.

Tomando a los genes como elementos puramente catalíticos para la reacción de los morfógenos, y considerando distintas velocidades de difusión para cada sustancia, obtuvo que las soluciones podían ser de dos tipos, dependiendo de la naturaleza real o imaginaria de las raíces: Patrón de ondas estacionarias o Patrón de ondas viajeras.

Por tanto, los morfógenos reaccionando y difundiéndose uno más rápido que el otro, eran capaces de formar patrones espaciales.

Dibujando el resultado obtenido en una dimensión, se aprecian tras desestabilizar el sistema mediante una pequeña perturbación, picos y valles que dependen de la concentración de cada morfógeno.

En dos dimensiones, aparecerán ahora puntos donde antes había valles. La forma de los puntos puede ser variada en función de la concentración de los morfógenos. Incluso usando apropiados valores semilla, se pueden conseguir patrones a bandas.

El modelo de Turing estaba planteado para disposiciones geométricas y condiciones iniciales muy concretas, que parecía improbable que ocurrieran de forma natural. Es por ello que, en principio, se hacía dudoso su validez para generalizarse a la mayoría de procesos biológicos. El salto de un estado de equilibrio estable y homogéneo a uno no homogéneo se debía a una pérdida de la simetría espacial, de forma aislada al resto del organismo.

Es por ello que el trabajo de Turing, desde el campo de la biología, se viera con un gran escepticismo y pasase desapercibido durante mucho tiempo.

1.8.3. Pringogine, y las estructuras disipativas

Aún quedaba la contradicción de la segunda ley de la termodinámica. Pringogine propone las *estructuras disipativas* que constituyen la aparición de estructuras coherentes, auto-organizadas en sistemas alejados del equilibrio. Por su trabajo Ilya Prigogine, recibió el Premio Nobel de Química en 1977.

El término *estructura disipativa* busca representar la asociación de las ideas de orden y disipación. Por tanto los Sistemas Biológicos, son sistemas abiertos fuera del equilibrio termodinámico, mantenidos así con un aporte continuo de energía. Por tanto no contradicen ninguna ley termodinámica. Si el aporte de energía cesa, es entonces cuando el orden desaparece.

1.8.4. Evidencia experimental del modelo de Turing: Reacciones químicas oscilantes BZ.

Sin duda, uno de los experimentos que relanzó las ideas de Turing fueron las reacciones de Belousov.



Figura 1.15: Reacción Belousov-Zhabotinski mostrando las espirales que se forman cuando la reacción se desarrolla en una capa de líquido de pocos milímetros. Las fotografías de arriba abajo se toman en intervalos de unos pocos segundos. Las imágenes de la derecha corresponden a una composición menos ácida. A estos patrones se les denomina Ondas Químicas en Reacción BZ.

Boris Belousov, en 1958, encontró que al disolver en agua ácido cítrico y ácido malónico con bromato potásico y una sal de cerio, el color de la mezcla cambiaba periódicamente de incoloro a amarillo pálido. Sin embargo no fue capaz de explicar de una manera convincente sus resultados a la sociedad científica, y sus trabajos no fueron aceptados totalmente.

El nuevo hecho fundamental es que la disipación de energía y de materia, que suele asociarse a la noción de pérdida y evolución hacia el desorden, se convierte, lejos del equilibrio, en fuente de orden

Hubo que esperar a que Zhabotinsky, modificando sutilmente los reactivos, realizara un estudio sistemático de la reacción oscilante, denominándola Reacción BZ.

Zhabotinsky encontró que al dejar en reposo una disolución de BZ, aparecen estructuras periódicas en forma de *ondas viajeras* que se propagan por la superficie. Sus experimentos demostraron las ideas de Turing, de forma que los procesos de Reacción-Difusión dejasen de verse como puros formulismos matemáticos.

1.8.5. Koch y Meinhardt

Turing había planteado su modelo de Reacción-Difusión para que fuera aplicado a la Biología. Sin embargo en su artículo, el modelo es discutido desde una perspectiva mucho más química. Koch y Meinhardt, plantearon sus propios modelos de reacción difusión con aplicación directa a los sistemas biológicos. En sus modelos, los conceptos de Auto- catálisis local y la Inhibición de largo alcance juegan un papel fundamental.

La Auto-catálisis es esencial para amplificar las pequeñas irregularidades, pero por sí sola, no es suficiente para generar patrones estables. La realimentación positiva, de una sustancia activadora,

produciría la activación global de toda la zona. Así la auto-catálisis debe ser contrarrestada por una rápida inhibición.

Acoplando de forma jerárquica los modelos básicos propuestos por Gierer y Meinhardt, de ACTIVADOR - INHIBIDOR, ACTIVADOR SUSTRATO e INTERRUPTORES BIOQUÍMICOS, Koch Meinhardt, son capaces de modelar comportamientos de complejidad elevadísima, tales como la formación de las células fotorreceptoras en los ojos de la mosca Drosophila, y el posicionamiento de las hojas en los brotes axilares durante el crecimiento de una planta.

Los procesos No Lineales de Reacción-Difusión son los responsables de la formación de las estructuras biológicas.

Los autores alemanes, reproducen con modelos sencillos, desde la formación de manchas en la piel de los animales, la formación de venas en las alas de la libélula, la regeneración de órganos en las hidras de agua dulce e incluso las malformaciones producidas durante el estado embrionario.

Veamos a continuación uno de los modelos básicos de *Activador*, *a*, e *Inhibidor* de difusión rápida *h*, planteado mediante el siguiente sistema de ecuaciones en derivadas parciales:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_a \Delta a + \rho_a \frac{a^2}{(1 + k_a a^2)} - \mu_a + \sigma_a$$
$$\frac{\partial h}{\partial t} = D_h \Delta h + \rho_h a^2 - \mu_h + \sigma_h$$

El modelo muestra el cambio de la concentración del activador y del inhibidor por unidad de tiempo, y cuya velocidad de producción del activador, depende de forma no lineal del término antagónico ($\rho_a a^2/h$).

Por otra parte, el término auto-catalítico es debido a la función creciente: $a^2/(1 + k_a a^2)$.

Además, Δ es el operador de Laplace ($\Delta = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$), D_a y D_h son las constantes de difusión, μ_a , μ_h las velocidades de supresión, ρ_a , ρ_h los coeficientes de reacción cruzada, σ_a , σ_h son los términos de producción básicos, y por último k_a es una constante de saturación.

La inhibición lateral de *a* por *h*, requiere que el antagonista *h* se difunda mas rápido que el auto catalítico $D_h > D_a$ y además el inhibidor debe adaptarse rápidamente a cualquier cambio del activador, $\mu_h > \mu_a$.

El término de saturación k_a , aunque no es fundamental para la formación del patrón, sí lo es para el aspecto final. Sin saturación, se obtendría un arreglo de picos irregulares, en los que las distancias entre máximos y mínimos se mantienen. Sin embargo si satura, llega un momento en que los picos no pueden crecer más, y por tanto se extenderá espacialmente. De esta forma se obtiene un patrón de rayas. Sin difusión pero con saturación, se obtiene una distribución granulada.

Con el fin de determinar bajo qué condiciones las distribuciones homogéneas estacionarias se vuelven inestables y provocan patrones no homogéneos, realizaron un estudio de estabilidad lineal.

Se sabe que un sistema es estable si tras perturbarlo, el sistema vuelve a ese estado estable transcurrido un tiempo transitorio. De no ser así, el sistema es inestable.

Las perturbaciones introducidas para su análisis serán pequeñas desviaciones de la solución uniforme. Así, se tomará:

$$a = a_0 + \delta ah = h_0 + \delta h$$



Figura 1.16: Las hidras de agua dulce son conocidas por su capacidad de regeneración. Si se corta una hidra en dos partes, cada una se convierte en un individuo completo; en una parte se generarán los pies y la otra mitad generará la cabeza y los tentáculos.

Resolviendo el sistema con las nuevas variables, se obtiene la condición que debe cumplir la Longitud *L*:

$$L > Lc(n) = n\pi \left[\frac{1+D}{2/a_0 - 1 - \mu}\right]^{1/2}$$

Por tanto la condición necesaria para que el patrón se pueda desarrollar a partir de fluctuaciones asociadas con un número de onda k_n es que sea mayor que una determinada *Longitud Crítica:* $L > L_c$.

Por tanto un organismo en crecimiento desarrollará un patrón no uniforme sólo si su tamaño es mayor que L_c , y su estructura resultante será polar, teniendo un máximo de *a* y *h* en un lado y un mínimo en el otro.

1.8.6. Murray, y la piel de los animales

Murray, basándose en ecuaciones de Reacción Difusión, atribuye la formación de rayas o puntos en los distintos animales, según la geometría del dominio y la etapa embriogénica en que el proceso es activado.

Es así capaz de simular patrones de pigmentación de distintos mamíferos, dependiendo de la geometría del cuerpo. Sus simulaciones en las patas y colas de algunos felinos coinciden de manera excelente con los observados en la naturaleza.

1.8.7. Conclusiones

El modelo de Turing, y en especial la existencia de los morfógenos, ha sido poco aceptado desde el punto de vista de la Biología.



Figura 1.17: Manchas en la piel de una jirafa. La formación de patrones en los mamíferos requiere diferenciación en las fases de desarrollo, entre las regiones que contienen células productoras de pigmentación y las que no. En las figuras se aprecian los dos tipos distintos de marcas en la piel. Murray atribuye la formación de los dos patrones a la diferencia de umbral de concentración de morfógeno dedicado a la actividad de los melanocitos. Los procesos No Lineales de Reacción-Difusión son los responsables de la formación de las estructuras biológicas.

Actualmente, y debido a los últimos avances en biología molecular, es sabido que la formación de los órganos, tejido o cualquier otra estructura biológica obedece a la activación progresiva de un gen. La actividad de un gen a su vez se activa o desactiva, en función de unas proteínas específicas. Sin embargo, esto no explicaría por sí solo el mecanismo por el cual tiene lugar la morfogénesis. Es por tanto poco probable que la biología molecular, por sí sola, sea capaz de explicar el proceso de diferenciación celular.

Turing, siendo consciente de la complejidad de la morfogénesis, simplemente propuso un modelo matemático sencillo que sirviera de base para explicar desde un punto de vista químico la formación de órganos. No contempló a sabiendas otros tipos de interacciones eléctricas o mecánicas ya que hubiera complicado enormemente el modelo.

En química, después de cuarenta años de la publicación de Turing, ya se ha logrado evidenciar experimentalmente la formación de patrones mediante Reacción- Difusión.

Actualmente, los modelos de Turing se utilizan para comprender la transmisión de impulsos cardiacos, el crecimiento de tumores y la aparición de colonias bacterianas. Los sistemas de Reacción-Difusión exhiben una gran riqueza de patrones, desde los ya señalados hasta espirales o periódicos de extrañas simetrías.

Es poco probable que la biología molecular por sí sola sea capaz de explicar el proceso de diferenciación celular.

Además en campos como la ecología matemática, los modelos de Reacción- Difusión, representan fielmente fenómenos como la aparición de vegetación en zonas de recursos hídricos limitados.

En la Vasculogénesis, crecimiento y formación de los vasos sanguíneos durante la fase embrionaria a partir de células precursoras, y la Angiogénesis formación de vasos durante el desarrollo adulto a partir de estructuras vasculares preexistentes, también se están consiguiendo buenos resultados con modelos de Reacción- Difusión.

Incluso en el campo del procesado de imagen digital para segmentación y detección de bordes y para síntesis de textura artificial, se utilizan con éxito los modelos matemáticos de Reacción-Difusión.

En biología del desarrollo, sin embargo, y a pesar que las simulaciones por ordenador de muchos procesos de formación tanto en animales como en plantas, funciona con gran similitud a la realidad, parece que todavía queda un largo camino por recorrer.

1.9. Fractales y biología

Unos de los científicos actuales más importantes en el campo de los fractales, el profesor Michael F. Barnsley, publico en 1993 el libro Fractals everywhere, el cual se ha convertido en la referencia básica de todos aquellos que se ocupan de esta disciplina. En la primera página, dentro del capítulo de introducción, puede leerse:

Fractal geometry will make you everything differently. There is danger in reading further. You risk the loss of your childhood vision of clouds, forests, galaxies, leaves, feathers, flowers, rocks, mountains, torrents of water, carpets, bricks, and much else besides. Never again will your interpretation of these things be quite the same.

Y en efecto, una vez conocidas las nociones básicas de esta teoría, ya nunca más se vuelve a mirar a la naturaleza y al mundo que nos rodea con los mismos ojos.

La geometría fractal como tal nace en 1975, pero muchas de sus aplicaciones y conceptos eran conocidos mucho antes en un contexto muy diferente. En 1875 tiene lugar una crisis importante de los fundamentos de las Matemáticas. Al mismo tiempo, un matemático, *Reymond*, estudio intensamente la función de *Weierstrass*, una curva continua que tiene la particularidad de que no posee derivada en cualquiera de sus puntos,

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^{(s-2)i} \sin(\lambda^{i} x), 1 < s < 2, \lambda < 1$$

Funciones de este tipo, con un gran número de irregularidades, ya eran conocidas en el siglo XVII, antes del descubrimiento del cálculo infinitesimal por *Newton* y *Leibnitz*, pero se pensaba que eran muy escasas y además poco interesantes desde el punto de vista práctico. Los primeros en darse cuenta que estas funciones no eran la excepción sino la norma fueron Cantor y Peano, pero fue Poincaré el primero en hacer un estudio sistemático de todos estos hechos y elaborar una teoría que hoy en día se la conoce con el nombre de Teoría del Caos. El final de la crisis de fundamentos se produce en 1925, y durante su desarrollo aparece un grupo importante de excelentes matemáticos: Cantor, Peano, Lebesgue, Hausdorff, Besicovitch, Bolzano, Koch, Sierpinski.

Sabemos que la Geometría de Euclides es la herramienta adecuada para estudiar las estructuras regulares y la dinámica de Newton. Como hemos indicado, la necesidad de unas nuevas matemáticas se puso de manifiesto al descubrirse estructuras algebraicas, como son la curva de Cantor y la curva de Peano, con un gran número de irregularidades y que además eran capaces de llenar la porción del plano donde se encuentran. En este caso, observemos lo siguiente: al ser una curva tienen dimensión 1, pero al rellenar un cuadrado su dimensión debería ser 2, por tanto, ¿cuál es la dimensión de estos objetos? Estos nuevos elementos no estaban contemplados en la matemática tradicional y en un principio fueron considerados como monstruos matemáticos.

A continuación destacaremos algunos momentos relevantes relacionados con los objetos que presentan un elevado número de irregularidades, con el objetivo de poner de manifiesto la gran inquietud existente en relación a las funciones continuas no diferenciables.

- En el siglo XVII *Richard Bentley* llamó la atención sobre la relación existente entre los objetos regulares y la representación de la naturaleza: " No hemos de creer que las orillas del mar sean realmente deformes por no tener la forma de un baluarte regular; que las montañas no son exactamente como conos o pirámides, ni las estrellas están situadas desmañadamente por no estar a una distancia uniforme..."
- En 1893 *Charles Hermite*, en una carta dirigida al gran matemático T. Stieljes, comentaba: "abandono con espanto y horror esta lamentable plaga de las funciones sin derivada..."

- El premio nobel en 1906 por el descubrimiento del movimiento browniano de las partículas *Jean Perrin*, realizó el siguiente comentario:"los matemáticos son muy conscientes de lo pueril de tratar de demostrar, con dibujos solamente, que toda función continua tiene derivada, aunque las funciones diferenciables son las más simples, y las más fáciles de manejar, son una excepción. Podría darse el caso en los que usar una función no diferenciable fuera más simple que usar una que si lo fuera. Cuando esto ocurra se habrá probado el valor práctico del estudio matemático de los continuos irregulares...pero, por el momento, esta hipótesis no es más que un sueño".
- En 1922 *Lebesgue* escribió un artículo sobre superficies sin planos tangentes, "pañuelos totalmente arrugados", pero el gran matemático Hermite no recomendó su publicación.
- Norbert Wierner en 1956 construyó un modelo no diferenciable del movimiento browniano. Como hecho anecdótico podemos comentar que en su obra aparece por primera vez la palabra caos. "la geometría de la naturaleza es caótica y está mal representada por el orden perfecto de la geometría euclidea o el cálculo diferencial de Newton (no existe recta tangente en ningún punto de una costa)".
- Finalmente, es a partir de 1970 con *Paul Levy* cuando se aceptan de una forma natural aquellas curvas que no presentan derivadas.

Ya hemos puesto de manifiesto la importancia que tenían los objetos irregulares en la primera mitad del siglo XX. Sin embargo, fue necesario el impulso y la creación de estas nuevas estructuras, conocidas como fractales, por parte de *Benoit Mandelbrot*, a partir de un problema de la vida real. En 1958 Mandelbrot trabajaba en IBM en un problema bastante común en las líneas telefónicas como era el ruido de fondo. La cuestión era difícil de resolver debido a la complejidad de construir un modelo matemático que representase fielmente al patrón con el que se difundía el ruido. En 1945 había estudiado los trabajos de Gastón M. Julia, en especial "Mémoire sur líteration des fonctions rationelles", y un poco después los trabajos de Cantor. Aplicando estos conocimientos y partiendo del conjunto de Cantor observó que el nuevo modelo representaba bastante bien al ruido de fondo de las líneas telefónicas.



Figura 1.18: ¿Cuánto mide una costa?

Desde ese instante, su campo de investigación se centró en el análisis de las estructuras que presentaban un elevado número de irregularidades. En su famoso artículo ¿cuánto mide la costa de Gran Bretaña?, planteaba un problema aparentemente fácil: ¿cómo medir la longitud de la curva de la Figura 1.18 a? Podríamos utilizar una determinada unidad de medida y sumar todos los segmentos que aparecen en la Figura 1.18 b, pero es evidente que podemos encontrar una mejor aproximación de la solución si tomamos una unidad de medida más pequeña (Figura 1.18

c). Aunque más adelante volveremos sobre esta cuestión, es importante darse cuenta de un hecho relevante como es que la longitud de la costa dependerá de la escala que utilicemos para medirla.

Desde finales de los años 70 los fractales han estado presentes en la investigación matemática, científicos como Barnsley, Douady, Hubbard, y Sullivan los estudian de manera teórica y práctica. De entre ellos, debemos destacar la labor realizada por el profesor Robert L. Devanay siendo sus libros, referencias básicas para todos los interesados en el tema.

1.9.1. Concepto de fractal

Es muy difícil dar una definición exacta de un fractal, ya que es necesario un nivel muy elevado de abstracción para definirlo rigurosamente. Por otro lado, el número de sus aplicaciones es tan inmenso y en campos tan diversos que según sea la disciplina a estudiar aparecerá una definición u otra. A continuación presentamos algunas de las más usuales:

- Los fractales son los objetos matemáticos que conforman la geometría de la Teoría del Caos.
- Los fractales son objetos cuya dimensión es un número racional.
- Un fractal es aquél objeto donde su dimensión Hausdorff Besicovich es mayor que su dimensión topológica.
- Un objeto fractal es aquél que es autosemejante y su dimensión es racional.

En general, los fractales son objetos matemáticos que se estudian dentro de la teoría geométrica de la medida. Bajo este nombre suelen entenderse ciertos objetos matemáticos con unos rasgos comunes, aunque debemos de aclarar que las definiciones concretas no son aplicables a todos ellos.

El término fractal fue introducido por Benoit Mandelbrot y procede del adjetivo latino fractus que significa fragmentado y también irregular. Existe una gran variedad de fractales siendo los lineales los más simple.

1.9.2. Definición

Un fractal lineal es el producto final que se origina a través de la iteración infinita de un proceso geométrico bien especificado.

Este proceso geométrico elemental, que es generalmente de naturaleza muy simple, determina perfectamente la estructura final, que muy frecuentemente, debido a la repetición infinita que se ha efectuado, tiene una complicación aparente extraordinaria. Normalmente los fractales son autosemejantes, es decir, tienen la propiedad de que una pequeña sección de un fractal puede ser vista como una réplica a menor escala de todo el fractal.

Un ejemplo de fractal lineal es el que aparece en la Figura 1.19 conocido con el nombre de"copo de nieve" curva que se obtiene tomando un triángulo equilátero y colocando sucesivos triángulos, cada vez de menor tamaño, en el tercio medio de los lados, cada vez más pequeños. Notemos que la curva resultante es totalmente irregular y que no puede diferenciarse. Además, en teoría, el resultado es una figura que tiene superficie finita pero con un perímetro de longitud infinita y con un número infinito de vértices.

A pesar de la simplicidad de su construcción la figura resultante es bastante compleja, repitiéndose estas características en el resto de los fractales lineales como, por ejemplo, el *conjunto de Cantor*. Su construcción es la siguiente: se toma un segmento, se divide en tres partes iguales, se elimina



Figura 1.19: Fractal copo de nieve.

el segmento central, y con cada uno de los dos restantes se procede del mismo modo, es decir, se divide en tres partes iguales. Y así infinitas veces. Lo que queda es el conjunto de Cantor.

Los fractales lineales son demasiado "perfectos" para representar los diferentes objetos de la naturaleza, como una hoja, un árbol o una neurona. Por este motivo, es necesario introducir los no lineales.

1.9.3. Definición

Un fractal no lineal es aquel que se obtiene a partir de iterar una función no lineal definida en el cuerpo de los números complejos.

Entre los fractales no lineales más conocidos se encuentran el conjunto de *Julia* y el *conjunto de Mandelbrot*. Antes de seguir adelante es conveniente detenernos un momento y recordar el concepto clave que estudiamos en el tema de los sistemas dinámicos discretos, como es la iteración. La iteración es repetir y volver a repetir sobre sí mismo una cierta cantidad de veces. Por ejemplo, en el caso del conjunto de Mandelbrot la función no lineal con la que se trabaja es $fC(Z) = Z^2 + C$, con Z y C números complejos. Si seleccionamos un número complejo Z_0 , entonces calculamos $Z_1 = fC(Z_0) = Z_0^2 + C$, a continuación $Z_2 = fC(Z_1) = Z_1^2 + C$, $Z_3 = fC(Z^2) = Z_2^2 + C$, y así sucesivamente. Si la sucesión $\{Z_0, Z_1, Z_2, Z_3, ...\}$ permanece a una distancia del origen menor de 2, entonces el punto Z_0 está en el conjunto de *Mandelbrot*. Si la sucesión anterior diverge desde el origen, entonces el punto no pertenece al conjunto.

Dicho de otra forma, el conjunto de *Mandelbrot* es el conjunto de puntos cuya orbita generada con la fórmula dada nunca escapa de un circulo de radio 2. En cuanto a los números incluidos en el conjunto de *Mandelbrot*, el punto correspondiente a la imagen aparece en color negro. En el caso de los números que no están dentro del conjunto, los colores se asignarán de acuerdo a la "rapidez" de incremento de la sucesión de números complejos. Por ejemplo, si la sucesión se incrementa lentamente, el punto inicial aparece de color azul claro, si crece más rápidamente, tendrá color amarillo o rojo, dependiendo de la velocidad de este incremento.

De acuerdo con la definición de fractal no lineal, podemos intuir que la geometría fractal es la herramienta más interesante a la hora de modelizar situaciones reales de gran complejidad originadas por múltiples repeticiones de procesos muy elementales, pues como hemos visto, los fractales nos ofrecen la posibilidad de construir estructuras complicadas a través de procesos simples. De esta manera, es corriente representar de forma simbólica la geometría fractal como un puente que conecta el orden y el caos, utilizando como instrumento los procesos infinitos iterativos.

Llama la atención del elevado número de personas, sin conocimientos matemáticos, que se han acercado a la geometría fractal por motivos únicamente estéticos. Pero aparte de estas cuestiones artística, existen poderosas razones para estudiar estas estructuras fractales, ya que el número de aplicaciones aumenta constantemente en múltiples y diversas ramas del conocimiento, entre ellas la Biología y la Medicina.

Es evidente, que el gran auge que este estudio ha experimentado en los últimos años se debe, en buena parte, a la introducción del ordenador como herramienta auxiliar. Los fractales autosemejantes, la teoría de la iteración, los sistemas dinámicos, se basan en la repetición, en principio infinita, de un cierto proceso bien determinado, y el ordenador es el instrumento ideal para llevar a la práctica estas tareas.

1.9.4. Fractales de Julia y Mandelbrot

En este apartado mostraremos dos de los fractales más importantes, como son el conjunto de Julia y el de Mandelbrot.



Figura 1.20: Izquierda: conjunto de Julia. Derecha: conjunto de Mandelbrot.

Gaston Maurice Julia nació el 3 de Febrero de 1893 en Sidi Bel Abbés (Argelia) y falleció en París el 19 de Marzo de 1978. Con solo 25 años publicó un manuscrito de 199 páginas titulado "Mémoire sur líteration des fonctions rationelles" que es considerado un referente básico en la gestación y posterior desarrollo de los fractales. Luchó en la Primera Guerra Mundial, donde fue herido y mutilado en un ataque en el frente francés que le originó un cambio profundo en su personalidad.

En el artículo que hemos mencionado aparece una descripción precisa de los conjuntos J(f), para los cuales la enésima iteración de un número complejo permanecía acotada cuando el número de iteraciones tendía a infinito. Por este trabajo recibió el gran premio de la Academia de las Ciencias. Durante los años 20 disfrutó de gran fama, siendo nombrado profesor titular en la Escuela Politécnica de Paris, pero posteriormente su trabajo fue olvidado, hasta que B. Mandelbrot lo puso de actualidad con sus experimentos con los ordenadores.

Benoit Mandelbrot, nació en Warsaw, Polonia el 20 de Noviembre de 1924, su familia emigró a Francia en 1936, donde su tío *Szolem Mandelbrot* se encargó de su educación. Después de completar sus estudios en la Escuela Politécnica de París, viajó al Instituto Tecnológico de California en Estados Unidos y al Instituto de Estudios Avanzados de Princeton donde estudió con el gran matemático *John von Neuman*. Regresó a Francia en 1955 y trabajó en el Centro Nacional de Investigaciones Científicas. No permaneció en Francia mucho tiempo, descontento del tipo de Matemáticas que en aquel momento se hacían en este país. De nuevo en Estados Unidos trabajó en el centro de investigación *Watson Research Center* de IBM, donde realizó gran parte de su investigación más relevante. Su dedicación a las matemáticas aplicadas parece ser que fue una reacción de rechazo al tipo de investigaciones en matemática teórica que hacía el grupo Bourbaki donde se encontraba integrado *Szolem Mandelbrot*.

El germen de partida de su investigación puede situarse en torno al año 1945 cuando, a sugerencia de su tío, leyó los trabajos de Julia y decidió resolver los mismos problemas desde un punto de vista diferente. Con la ayuda del ordenador comprobó que en los trabajos de Julia se encuentra el origen

de los fractales que hoy en día conocemos. Su primer estudio, publicado en 1975, es el libro "Les objets fractals, forn, hasard et dimension", el cual completó en 1982 en su libro numerosamente citado "Fractal geometry of nature".

Julia y *Fatou* se dieron cuenta que para la función $fC(Z) = Z^2 + C$, con Z y C números complejos, para cualquier valor de C, el conjunto de Julia asociado resulta ser uno de estos dos tipos:

- Conexo. Formado por una sola pieza
- Completamente disconexo. Formado por una nube de puntos dispersos, similar al conjunto de *Cantor*.

El conjunto de Mandelbrot está formado por aquellos puntos *C* para los cuales el conjunto de Julia asociado al sistema dinámico resulta conexo. En consecuencia: tomamos un valor *C* y calculamos el conjunto de Julia asociado. Si sale conexo lo pintamos de negro, en caso contrario de otro color. ¿Cómo saber si el conjunto de Julia asociado es conexo? Julia probó que basta ver si la órbita del z = 0 está acotada. ¿Cuándo diverge una órbita?, cuando alguno de sus puntos tiene un módulo mayor o igual que 2. (Para ello, es suficiente obtener cien iteraciones para conocer el comportamiento de la órbita).

1.9.5. Concepto de dimensión fractal

La característica principal de un fractal es lo que se conoce con el nombre de dimensión fractal, y en cierto modo este número indica el grado de irregularidad de un objeto.

Dimensión topológica

La dimensión topológica coincide con el número de direcciones ortogonales diferentes que podemos tomar al movernos por el espacio. En este caso, una línea cualquiera es unidimensional, ya que cada uno de sus puntos queda identificado por un número real. La línea no tiene por qué ser recta, pero basta un único valor para situarnos en un camino, por muchas curvas que tenga. El conjunto vacío tiene dimensión -1, un punto tiene dimensión 0, y el plano dimensión 2.

Ahora bien, esta definición de dimensión topológica no es tan elemental. En efecto, sabemos que en el espacio que conocemos contamos con tres direcciones: izquierda - derecha, atrás - delante y arriba - abajo, pero podemos estudiar espacios más caprichosos. Por ejemplo, el espacio formado por dos segmentos que se cruzan sería unidimensional de no ser por el punto de intersección, donde se pueden tomar dos direcciones. A este valor se le conoce como dimensión local, y varían dentro de un mismo espacio cuando este no es homogéneo.

Una propiedad interesante en topología es la conservación del valor de la dimensión cuando se realiza una transformación homotópica. Es decir, si deformamos un objeto, sin romperlo, perforarlo o soldarlo, conservará su dimensión.

En 1890, *Peano* construyó una curva continua que pasa por todos los puntos del cuadrado unidad $[0,1] \times [0,1]$. Era el primer ejemplo de una curva que "llena un espacio". Años más tarde, *Hilbert*, interesado también por este tipo de problemas, ideó otra del mismo tipo con una construcción geométrica más simple de describir. La curva de Hilber se construye de la siguiente manera (véase Figura 1.22). Dividimos el cuadrado unidad en cuatro cuadrados iguales y unimos los centros de dichos cuadrados por segmentos. Cada uno de esos cuadrados se divide de nuevo en cuatro cuadrados y conectamos sus centros comenzando siempre por el cuadrado inferior izquierdo y terminando en el cuadrado inferior derecho. Se continúa de esta forma indefinidamente uniendo



Figura 1.21: Curva de Hilbert.



Figura 1.22: Curva de Hilbert.

los centros de los cuadrados que resultan en cada etapa. La curva límite de tales poligonales "llena" el cuadrado unidad.

Si una curva contiene todos los puntos de una superficie, ¿no sería más lógico decir que su dimensión es la misma que la de la superficie? Más aún: si iterásemos el patrón anterior, la curva resultante tocaría todos los puntos de un cuerpo tridimensional, como muestra la Figura 1.23.



Figura 1.23: Curva de Hilbert en tres dimensiones.

En 1904 Helge von Kock presentó la curva que hoy lleva su nombre. Repitamos ahora el proceso sobre el segmento unidad [0,1]. Se divide en tres partes, sustituyendo la parte central por dos segmentos que junto con dicha parte, formarían un triángulo equilátero. Se obtiene así una poligonal de longitud $\frac{4}{3}$. Con cada uno de los cuatros segmentos que quedan determinados se repite la operación anteriormente descrita, obteniéndose una poligonal de longitud $\frac{16}{9}$. Se procede

indefinidamente de esta forma obteniendo en cada etapa k una poligonal P_k de longitud $\left(\frac{4}{3}\right)^k$. La curva de Koch se define como la curva límite a la cual converge la sucesión $\{P_k\}$ cuando k tiende a infinito. Se trata, por tanto, de una curva de longitud infinita pues $\left(\frac{4}{3}\right)^k$ tiende a infinito cuando k tiende a infinito. Más aún, la longitud de la parte de curva comprendida entre dos puntos cualesquiera de la misma también es infinita.

Para este tipo de nuevos objetos, la longitud es un concepto tremendamente complicado y en cierto modo carente de sentido. Por este motivo tenemos que recurrir al concepto de dimensión, y preguntar no por la longitud de un fractal, sino por su dimensión.

Dimensión fraccionaria

El cálculo de la dimensión fractal es, en general, muy difícil. De hecho, existen muchos fractales que desconocemos su dimensión fractal exacta. Por este motivo, en un principio nos limitaremos a los fractales lineales.

Todos sabemos que si a un cuadrado de lado unidad, dividimos el lado por la mitad, nos aparecen 4 cuadrados de lados $\frac{1}{2}$. Del mismo modo si tomamos como lado $\frac{1}{3}$ nos aparecerán 9 cuadrados, y así sucesivamente. Si en lugar de un cuadrado partimos de un cubo, el factor de multiplicación sería de ocho. Nos encontramos, por tanto, ante un rasgo distintivo de cada dimensión. Precisando más, supongamos que una figura de dimensión entera *d* puede ser descompuesta en *n* copias a escala *r* de sí misma, entonces es fácil ver que $n = \left(\frac{1}{r}\right)^d$. Si el objeto de partida es un cuadrado y dividimos su lado en tres partes iguales, tenemos que n = 9 y $r = \frac{1}{3}$. Es decir $9 = 3^2$.

Si en $n = \left(\frac{1}{r}\right)^d$, despejamos el valor de d,

$$\frac{\ln n}{\ln(1/r)}$$

Para el ejemplo anterior del cuadrado su dimensión será:

$$d = \frac{\ln 9}{\ln 3} = \frac{\ln 3^2}{\ln 3} = \frac{2\ln 3}{\ln 3} = 2$$

De manera similar puede comprobarse que la dimensión fractal del conjunto de Cantor será $d = \frac{\ln 2}{\ln 3} = 0,6309...$ y la correspondiente a la curva de Koch $d = \frac{\ln 4}{\ln 3}$. Observemos que, en general, para este tipo de objetos la dimensión es un número fraccionario y además mayor que la dimensión topológica. Sin embargo, existen algunas patologías. Por ejemplo, la dimensión fractal de la curva de Peano es $d = \frac{\ln 9}{\ln 3} = \frac{\ln 3^2}{\ln 3} = 2$, un número entero. Para un fractal muy conocido como es el triángulo de Sierpinski, (Figura 1.25) tenemos que $d = \frac{\ln 3}{\ln 2} = 1,58496$ menor y no mayor que su dimensión topológica que es 2. Observemos que esto último también ocurre para el conjunto de Cantor ya que su dimensión fraccionaria 0,6309... es menor que su dimensión topológica que es 1.

Dimensión Hausdorff-Besicovich

Para hacer un estudio en profundidad de este apartado es necesario tener cierta base matemática, es particular conocer algo de topología y espacios métricos. Por este motivo, daremos la definición basándonos en la definición fraccionaria de fractal.

Como hemos comentado anteriormente, en el caso de fractales no lineales, cuando no podamos realizar una medición exacta, siempre podemos recurrir a un estudio progresivo. Se trata de cubrir la curva con el número mínimo de cuadrados cada vez más pequeños. Llamamos h al tamaño de cada uno de los cuadrados, y N(h) al número de los cuadrados que cubren la curva en cada caso. El método nos permite obtener una aproximación de la dimensión fractal de cualquier objeto, también conocida como dimensión Hausdorff- Besicovitch, cuya fórmula es

$$D = \lim_{n \to 0} \frac{\ln N(h)}{\ln(1/h)}$$

Es decir, la medida de *Hausdorff - Besicovitch* es la forma de asignar una dimensión fraccionaria a un conjunto. Su cálculo "a mano" es muy complejo y por este motivo lo que se hace es recurrir a diferentes programas de ordenador, que suelen utilizar el método **Box Counting**. Básicamente el método consiste en lo siguiente: a partir de una fotografía del objeto, obtenemos una versión binaria de la imagen. Es decir, a los píxeles brillantes del conjunto se le asocia el valor uno y cero al resto. A continuación se obtiene una imagen del contorno y superponemos sobre esta imagen una malla cuadrada de una tamaño dado. Se cuenta el número de estos cuadrados que contienen al contorno y se repite el proceso con diferentes tamaños de mallas. Finalmente, se realiza un ajuste por mínimos cuadrados y la pendiente de la recta de regresión será la dimensión del objeto fractal.

Por último, llamemos la atención sobre el hecho más importante en el concepto de dimensión fractal como es que el número obtenido es independiente de la escala que estemos utilizando.

1.9.6. Tipos de fractales

En este apartado subdividiremos los dos grandes tipos de fractales que hasta ahora conocemos: lineales y no lineales.





Figura 1.24: Algoritmos de escape.

A grandes rasgos, los fractales podemos clasificarlos en:

- Algoritmos de escape. La Figura 1.24 es un fractal de Mandelbrot, y se genera mediante un algoritmo de escape, básicamente el método consiste en lo siguiente: para cada punto se calculan una serie de valores mediante la repetición de una formula hasta que se cumple una condición, momento en el cual se asigna al punto un color relacionado con el número de repeticiones. Los fractales de este tipo precisan de millones de operaciones, por lo cual sólo pueden dibujarse con la ayuda del ordenador.
- Sistema de Funciones Iteradas (IFS). Es un método creado por *M. Barnsley*, basándose en el principio de autosemejanza. En un fractal IFS siempre se puede encontrar una parte de la figura que guarda una relación de semejanza con la figura completa. Esa relación es a



menudo muy difícil de apreciar, pero en el caso del helecho de la figura siguiente es bastante clara: cualquier hoja es una réplica exacta de la figura completa.

Figura 1.25: Funciones iteradas y Triángulo de Sierpinski.

• L-Systems Este método de construcción de fractales fue creado en 1968 por Aristid Lindemayer, y publicado en el Journal of Theoretical Biology, con el nombre Mathematical Models for Cellular Interaction in Development. En el trabajo Lindemayer proponía un modelo matemático para la creación de un filamento celular de la bacteria Anabaena Catenula. Se supone un sistema celular con dos posibles estados citológicos, *A* y *B*, y la siguiente regla de crecimiento: una célula en el estado *A* se divide y da lugar a una célula en el estado *A* y otra célula en el estado *B*; y lo representaremos por *AB*. Por otro lado, una célula en el estado *B* se divide en una célula en el estado *B* y otra en el estado *A*, es decir *BA*.

Nosotros podemos generar este tipo de fractales utilizando como software FantasticFractalr.



Figura 1.26: Propiedades del fractal.

En la siguiente Figura 1.26 aparecen las propiedades del fractal isla de Koch. El signo + representa un giro de 60 grados en la dirección contraria a las agujas del reloj, y el signo - un giro de 60 grados en la dirección de las agujas del reloj. Para poder dibujar el fractal es necesario indicar la regla, que en nuestro caso viene dada por, F=F-F++F-E Es decir, F estará definida por la figura siguiente: se traza un segmento unitario, en su extremo giramos 60 grados en la dirección de las agujas del reloj y dibujamos un segundo segmento, después giramos 120 grados en la dirección contraria a las agujas del reloj y dibujamos otro segmento, finalmente giramos 60 grados en la dirección de las agujas del reloj y dibujamos el último de

los segmentos. La figura que aparecerá será la que puede verse a continuación:



Figura 1f: Regla para la isla de Koch.

A partir de la regla *F* se define el axioma, que en nuestro ejemplo viene dado por, F++F++F, y cuyo significado es el siguiente: una vez dibujada la Figura 1f, en su extremo giraremos 120 grados en dirección contraria a las agujas del reloj (++) y colocamos de nuevo la figura anterior (*F*), finalmente se gira otros 120 grados (++) y se vuelve a representar la figura (*F*). El resultado final puede verse a la izquierda de la figura 1.27.



Figura 1.27: Izquierda: primera iteración. Derecha: tercera iteración.

Si volvemos al ejemplo inicial de la bacteria *Anabaena Catenula*, podemos definir un algoritmo parecido a la isla de Koch de la manera siguiente:

- Indicamos cuales son los elementos de partida.
 - Existencia de una única célula: A
- Definimos las reglas.
 - La regla de sustitución de la célula A es A = AB
 - La regla de sustitución de la célula B es B = BA

Los L-systems son muy adecuados para modelar muchos sistemas biológicos, especialmente aquellos que presentan bifurcaciones o ramificaciones en su desarrollo. El esquema básico para dibujar una bifurcación con un ángulo dado (por ejemplo 20+) es el siguiente: F = F[+F]F, donde los corchetes indican que al final se debe retroceder a la posición donde empezaba la bifurcación.



Figura 1g: Esquema básico para dibujar una bifurcación con un ángulo de 20+

Naturalmente, podemos definir una regla más complicada y obtener un modelo más realista. Por ejemplo, para representar a un árbol se ha elegido como regla F = F + F + [+F - F -] - [-F + F + F] y un ángulo de 22 grados. En la Figura 1.28 pueden verse los resultados para un número diferentes de iteraciones.



Figura 1.28: Izquierda: segunda iteración. Derecha: quinta iteración.

También podemos dibujar el triángulo de *Sierpinskia* través de este tipo de algoritmo. Recordemos que consiste en un triángulo en el que se aloja otro, uniendo los puntos medios de cada uno de sus lados. Esto se repite con todos y cada uno de los triángulos formados que tengan la misma orientación que el original, y así sucesivamente. El triángulo de *Sierpinski* es uno de los pocos fractales que se puede dibujar con exactitud sin ayuda de un ordenador, siguiendo las instrucciones anteriores. Como curiosidad, si en un triángulo de Pascal coloreamos los números impares, la figura que aparece se parece al triángulo de *Sierpinski*.



Figura 1.29: Fractales caóticos.

- **Orbitas caóticas**. Un ejemplo de este tipo de fractales es el atractor o mariposa de *Lorenz*, y el diagrama de bifurcación correspondiente al modelo discreto logístico.
- Aleatorios y celulares. Ciertas categorías de fractales no encajan del todo dentro de las características que hemos descrito anteriormente. Estructuras como el plasma o las imágenes de difusión dependen en cierta medida del azar, por lo cual son únicas. A este tipo de fractales corresponden los autómatas celulares.



Figura 1.30: Fractal celular.

M. C. Escher y los fractales. Es bastante probable que *Escher* no conociera el concepto de fractal, sin embargo desarrolló con frecuencia estructuras matemáticas muy parecidas a los fractales, ya que en un número considerable de sus obras incluye objetos relacionados con el infinito. Según comentó, su aproximación al infinito surgió del modelo de *Poincaré*, en el cual se puede representar la totalidad de una superficie infinita encerrada en un círculo finito.

1.9.7. Aplicaciones de la geometría fractal

En primer lugar, tenemos que preguntarnos; ¿qué significado tiene decir que un objeto real, tal como una costa o la red capilar del sistema venoso, es un fractal? Lo que queremos decir con ello, siguiendo a Mandelbrot, es que puede definirse un modelo matemático fractal que se aproxima satisfactoriamente al objeto real en toda una franja de escalas limitada por ciertos valores máximo y mínimo que llamaremos corte superior e inferior.



Figura 1.31: Dibujos encajados en un círculo infinito.

Según lo comentado, en el mundo real no existen fractales, como tampoco existen rectas ni esferas. Hablar de la dimensión fractal de una costa no es más absurdo que hablar del radio de la tierra, ya que esta no es exactamente una esfera.

Puede construirse un modelo matemático de naturaleza fractal válido para el estudio del universo tomando un valor inferior del orden del diámetro de una galaxia con tal de considerar valores superiores suficientemente amplios. Tal modelo reproducirá la estructura geométrica de la distribución de las galaxias.

Los fractales y la Teoría del Caos pertenecen a lo que se conoce con el nombre de **Dinámica No Lineal**, la cual nos permite entender el mundo que nos rodea, por ejemplo: la difusión de una epidemia, la cinemática de algunas reacciones químicas, los cambios climáticos,...etc.

• Las fronteras de separación entre diferentes medios físicos biológicos o sociales proporcionan, a menudo, excelentes ejemplos de sistemas que se pueden analizar mediante fractales. Un ejemplo clásico que responde a ciertos modelos de curvas fractales es el de las costas, pero hay numerosos ejemplos de este tipo, como pueden ser los bordes de una nube, una superficie montañosa, la orilla de un río o incluso la frontera entre dos países diferentes. Los célebres conjuntos de Julia son también fronteras, en este caso matemáticas, entre distintas regiones del plano, e igual sucede con las más bellas e interesantes partes del conjunto de Mandelbrot.

El trazado de una costa o de la orilla de un río es un proceso con rasgos comunes al de una frontera. Los dos medios en contacto, agua y tierra, están mutuamente sometidos a largos períodos de interacción que modifican permanentemente los trazados de las costas y orillas en procesos acumulativos que operan sobre un amplio margen de escalas diferentes.

Naturalmente, el proceso perfectamente regular de la formación de la curva de *Koch* es muy diferente al de la formación de una costa, que encierra elementos de tipo aleatorio. A pesar de las diferencias, es asombroso que la dimensión de *Hausdorff* de la curva de *Koch*, igual a 1.26128..., es muy parecida al valor numérico 1.3 obtenido empíricamente por *Richardson* para la dimensión fractal de la costa de Gran Bretaña, y aún más parecido al valor empírico obtenido por el mismo investigador para la dimensión fractal de las fronteras de España y Portugal y para la costa australiana (Mandelbrot, 1977) mientras que *Feder* estima en 1.5 la dimensión fractal de la costa noruega, mucho más accidentada.



Figura 1.32: Costas

La clave que explica la frecuencia con que aparecen de forma espontánea algunas formas geométricas de la geometría clásica, como la recta, la circunferencia o la esfera, es que estas formas tienen propiedades que son utilizadas por la naturaleza. Por ejemplo, el hecho de que la esfera tenga superficie mínima a igualdad de volumen o de que una recta sea la curva de menor longitud entre dos puntos, hace de estas figuras elementos privilegiados en la naturaleza.

Cuando hablamos de árboles, no nos referimos a ellos solamente en su sentido botánico, sino que también entenderemos como árbol un río y todos sus afluentes, el sistema arterial o la red bronquial. Desde un punto de vista matemático, un árbol es un conjunto de puntos o vértices (que serían los nudos de ramificación de los arboles botánicos), unidos entre sí por arcos (ramas), de forma que si caminamos desde un vértice por una sucesión consecutiva de arcos diferentes nunca regresaremos al vértice de partida. Este modelo puede ser aceptable y una primera aproximación para algunos de los objetos enumerados anteriormente.



Figura 1.33: Izquierda: árbol. Derecha: Río.

El proceso de ramificación y subramificación da su naturaleza fractal a los árboles. Pensemos, por ejemplo, en toda la red de afluentes de una determinada cuenca hidrográfica que comprende desde el río principal a las más pequeñas cortaduras por donde resbalan pequeños hilos de agua cuando llueve. Puesto que su función es drenar el agua de toda una cuenca hidrográfica, una red fluvial es un modelo natural de curva que cubre una superficie, una de las propiedades concebidas como aberrantes por los matemáticos de hace cien años y que es característica de conjuntos fractales como la curva de *Peano* o de *Hilbert*.

• La Osteoporosis, es una enfermedad que para poder ser diagnosticada en un paciente tiene que estar en una fase muy avanzada. La enfermedad se detecta analizando la textura

de los huesos, ya que son los que se ven afectados cuando la enfermedad ataca. Muchas veces la alteración tiene que ser muy grande para poder apreciarse y esto obliga a que los tratamientos tengan que ser muy prolongados.



Figura 1.34: Izquierda: Osteoporosis. Derecha: Tumor.

Un grupo de investigadores dirigidos por el profesor José Aranda, realizó un programa de ordenador que ayudaba en la comparación de las texturas de los huesos. El proceso era el siguiente: se toma una muestra de la textura del hueso en su estado normal y se almacenaba en la memoria del ordenador. Luego se hacía lo mismo pero ya con los pacientes a los que se pensaban que eran propensos a sufrir la enfermedad. A continuación el programa comparaba las dos texturas y podía detectarse la presencia de la enfermedad.

- Recordemos que las texturas tienen mucho que ver con los fractales, lo que ha permitido ser incorporados también a otros aspectos muy diferentes como por ejemplo la industria textil. Hoy en día se observan determinados tumores, en forma de texturas, que parece ser se ramifican en forma de un fractal.
- Los fractales también se usan en el tratamiento digital de imágenes para reducir su tamaño de almacenamiento. A este proceso se le conoce con el nombre de proceso de transformación fractal, y fue descubierto en 1987 por el matemático inglés *Michael F. Barnsley*.

Una imagen es considerada como un punto de un espacio métrico completo, con la métrica de Hausdorff. Se define un conjunto de transformaciones que cuando se iteran y se aplican a un punto inicial arbitrario converge hacia un punto que depende únicamente del conjunto de transformaciones y no del punto de partida. A este punto se le conoce con el nombre de atractor.

La cuestión es saber si dada una imagen cualquiera es posible encontrar un conjunto de transformaciones cuyo atractor sea la imagen de partida. La respuesta es afirmativa y se conoce con el nombre de teorema del collage.

 A continuación comentaremos el proceso de digitación viscosa, un fenómeno que ha llamado recientemente la atención de los investigadores. Este fenómeno se produce cuando un líquido de baja viscosidad desplaza a otro viscoso en un medio capilar o poroso. Por ejemplo, cuando se trata de recuperar petróleo mediante la inyección de agua en un campo petrolífero.

Consideremos el siguiente modelo matemático particularmente válido para ciertos procesos de digitación viscosa: el llamado proceso de agregación por difusión limitada (ADL). Consiste



Figura 1.35: Izquierda: Transformación fractal. Derecha: ADL (dimensión 1.71).

en suponer que de un punto elegido al azar de entre los de una circunferencia sale un monómero que describe un movimiento browniano. El monómero vaga al azar hasta que llega al centro de la circunferencia, en cuyo momento se detiene. En este instante, un nuevo monómero se desprende de la circunferencia y camina hasta tropezar con el anterior, y así sucesivamente. Si en su movimiento errático algún monómero se aleja excesivamente, lo eliminamos y generamos uno nuevo. Este proceso resulta muy sencillo de simular en un ordenador, aunque requiere mucho tiempo de cálculo, especialmente en los primeros momentos de formación. El experimento produce estructuras de tipo fractal cuya dimensión de agregación ha sido estimada en 1.71 para el caso bidimensional y en 2.50 para el tridimensional, valores que muestran concordancia con los obtenidos en la digitación viscosa en medios porosos.

- En la actualidad, es posible regenerar tejido, como el de la piel, pero se está en la fase inicial de poder regenerar órganos completos para poderlos utilizar en los trasplantes. El problema fundamental se encuentra en diseñar una estructura, similar al sistema circulatorio, en la que se puede apoyar las células en crecimiento del órgano. Investigadores del Harvard Medical School y el Massachusetts Institute of technology están utilizando patrones fractales generados por ordenador y los están grabando en discos de silicio con el objetivo de formar un molde. A partir de estos discos se fabrican microcanales de polímeros biodegradables y biocompatibles, y posteriormente las redes se apilan para poder construir una estructura tridimensional.
- Por último, existe una gran relación entre el método de *Newton* para encontrar el valor aproximado de las raíces de una ecuación y los fractales. Como sabemos, el método de *Newton* es un método reiterativo, y por lo tanto debemos iniciarlo con valor particular. Si el valor inicial está cerca del verdadero valor de la raíz, entonces el método converge a la raíz. En caso contrario, no existirá convergencia al valor deseado.

MODELOS BÁSICOS

2.1. Oscilador armónico

Un oscilador armónico consiste en una masa que experimenta una fuerza restauradora proporcional a su desplazamiento en posición de equilibrio:

F = -kx

Un ejemplo es una masa unida a un soporte rígido mediante un resorte. La constante de proporcionalidad k se denomina constante de fuerza, y mientras mas rígido sea el resorte, mayor será la constante de fuerza. El signo negativo en la expresión de F significa que la dirección de la fuerza es opuesta al desplazamiento.

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

Una solución es:

$$x(t) = A \operatorname{sen} w$$
$$x'(t) = p(t) = wA \cos wt$$
$$w = \left(\frac{k}{m}\right)^{1/2}$$

Estas soluciones muestran que la posición de la masa varia de forma armónica (es decir como el sen *w t*) con una frecuencia $v = \frac{k}{2\pi}$ también muestra que la masa es estacionaria (*P* = 0) cuando el desplazamiento, *x*, tiene su máximo valor, *A*, que se denomina amplitud de movimiento. Para confirmar esta apreciación basta con observar que la energía cinética es:

$$E_c = \frac{mp^2}{2} = \frac{m(wA\cos wt)^2}{2} = \frac{1}{2}mw^2A^2\cos^2 wt$$

Luego, debido a que $w = \left(\frac{k}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$, esta expresión puede escribirse como:

$$E_c = \frac{1}{2}kA^2\cos^2 wt$$







Figura 2.2: ondas de oscilación

La fuerza sobre el oscilador es F = -kx, por lo que resulta la relación $F = -\frac{dV}{dx}$ que la energía potencial de un oscilador armónico es:

$$V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2 \sin^2 w t$$

Por lo tanto la energía total es:

$$E = \frac{1}{2}kA^{2}\cos^{2}wt + \frac{1}{2}kA^{2}\sin^{2}wt = \frac{1}{2}kA^{2}$$



Figura 4a: Balance de energías

(Se ha utilizado $cos^2 wt + sen^2 wt = 1$). Es decir, la energía del oscilador es constante y para una fuerza constante dada, esta determinada por su desplazamiento máximo. Se deduce que la energía de una masa oscilante puede elevarse hasta cualquier valor al estirar el resorte hasta cualquier amplitud deseada *A*. Nótese que la frecuencia del movimiento depende solo de las propiedades inherentes del oscilador (como se representa mediante *k* y *m*) y es independiente de la energía; la amplitud gobierna la energía, a través de $E = \frac{1}{2}kA^2$, y es independiente a la frecuencia. En otras palabras, la masa oscilará a la misma frecuencia sin importar la amplitud de su movimiento.

2.2. Oscilador armónico y circuito LC

Algunos de los ejemplos más importantes de sistemas oscilantes tiene lugar en la electricidad. La familiaridad de la expresión corriente alterna (*ca*), que es una corriente eléctrica oscilante, muestra la importancia de este ejemplo.



Figura 2.3: Circuito LC.

El voltaje en bornes de la capacidad *C* es:

$$V_c = \frac{Q}{C}$$

En donde *Q* es la carga sobre la capacidad. La corriente en un circuito en serie con esta capacidad es:

$$I = \frac{-dQ}{dt}$$

En donde el signo menos indica que la corriente fluye en aquella dirección en que disminuye la carga depositada sobre la capacidad. El voltaje en los extremos de la inducción *L* es:

$$V_L = -L\frac{dl}{dt}$$

Como la suma de los voltajes a través del circuito es cero, resulta:

$$-L\frac{dl}{dt} + \frac{Q}{C} = 0 = L\frac{d^2Q}{dt^2} + \frac{Q}{C}$$

Esta es justamente la ecuación de desplazamiento de un muelle con:

$$\begin{array}{c} Q \leftrightarrow x \\ L \leftrightarrow m \\ \hline \frac{1}{C} \leftrightarrow C_{muelle} \end{array}$$

Y la solución será:

$$Q = Q_0 \operatorname{sen}(w_0 t + \phi)$$
$$w_0 = \left(\frac{1}{LC}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Energía del circuito LC

El condensador almacena carga eléctrica, debido a la presencia de un campo eléctrico en su interior, cuando aumenta la diferencia de potencial en sus terminales, devolviéndola cuando ésta disminuye. Matemáticamente se puede obtener que la energía E_E , almacenada por un condensador con capacidad *C*, que es conectado a una diferencia de potencial $V_1 - V_2$, viene dada por:

$$E_E = \int \left(\frac{1}{2C}V\right) dV = \frac{1}{2C}(V_1 - V_2)^2 = \frac{Q^2}{2C}$$

La bobina almacena energía eléctrica en forma de campo magnético cuando aumenta la intensidad de corriente, devolviéndola cuando ésta disminuye. Matemáticamente se puede demostrar que la energía, E_B , almacenada por una bobina con inductancia L, que es recorrida por una corriente de intensidad I, viene dada por:

$$E_B = \frac{1}{2}LI^2$$

La energía del circuito en el instante *t* es la suma de la energía del campo eléctrico en el condensador y la energía del campo magnético en la bobina.

$$E = E_E + E_B = \frac{1}{2}\frac{Q^2}{C} + \frac{1}{2}LI^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{Q^2}{C} + LI^2\right)$$

como

$$I = -Q_0\omega_0\cos(\omega_0 t + \phi), \text{ y}, \quad Q = Q_0 \operatorname{sen}(\omega_0 t + \phi),$$

entonces

$$E = \frac{1}{2} \left[\frac{(Q_0 sen(\omega_0 t + \phi))^2}{C} + L(-Q_0 \omega_0 \cos(\omega_0 t + \phi))^2 \right]$$
$$E = \frac{1}{2} C^{-1} Q_0^2$$

2.3. Difusión

Difusión es un fenómeno por medio del cual un grupo de partículas se mueven como un grupo de acuerdo a la trayectoria irregular de cada una de las partículas. Así los movimientos particulares irregulares dan como resultado un movimiento regular como grupo, a este fenómeno se le conoce como proceso de difusión.

Se estudia la ecuación de calor. Para un subconjunto Ω de \mathbb{R}^n con frontera suave, si $u \in C^2(\Omega \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ denota la densidad de las partículas, es decir para $\Omega_1 \subset \Omega$ se tiene que $\int_{\Omega_1} u(x, t) dx \approx$ número de

partículas (si la integral existe), entonces, $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D \Delta u(x,t) = D \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x_j^2}$, $u(0,t) = u_0(t)$ las condiciones de frontera pueden ser:

 $u \mid \partial \Omega(x, t) = 0$ (problema de Dirichlet),

 $\frac{\partial u}{\partial n} \mid \partial \Omega(x, t) = 0$ (problema de Neumann).

En el caso de Neumann sabemos que $\lim_{t\to\infty} u(t,x) = u_0$ donde *f* es una funcion dada que representa el promedio espacial de f(x) en Ω . A continuación podemos observar las figuras 2.4 y 2.5 de procesos de difusión.



Figura 2.4: Difusión



Figura 2.5: Difusión de calor en los oceanos.

2.4. Reacción

Las partículas pueden cambiar su estado, debido por ejemplo a interacciones o de manera espontánea. Aquí estamos hablando de reacciones químicas o procesos biológicos, mas adelante presentaremos algunos ejemplos.



Figura 2.6: Ejemplo de reacción de fusión deuterio y tritio
2.5. Combinación de reacción y difusión

Si sumamos los dos procesos anteriores obtenemos

$$\partial_t u(x,t) = D \bigwedge u(x,t) + f(x,t,U(x,t)), (4)$$
$$u(x,0) = u_o(x), (5)$$

 $u \mid \partial \Omega(x, t) = 0$ (problema de Dirichlet),

 $\frac{\partial u}{\partial n} \mid \partial \Omega(x, t) = 0$ (problema de Neumann).

La ecuación (4) y (5) con alguna de las condiciones de frontera, es una ecuación de reaccióndifusión.



Figura 2.7: Reacción - difusión 2D.

Sistemas de reacción-difusión pueden dar lugar a un sin numero de interesantes fenómenos como comportamiento asintótico, múltiples estados estacionarios, estructuras parciales, pulso o frentes móviles y oscilaciones.

El estudio de estos fenómenos necesita de una variedad de métodos provenientes de muchas áreas de las matemáticas como por ejemplo, análisis numérico, bifurcación, teoría de la estabilidad, teoría de semigrupos, perturbaciones singulares, espacios de fase, métodos topológicos y muchos otros.

2.6. Una gota de tinta en el agua

2.6.1. Difusión bidimensional. Gota de tinta

Una gota de tinta de radio *a* se pone en un recipiente de agua de radio *r*, siendo a < r. La profundidad del agua es pequeña, del orden de 1*cm*, de modo que la gota de tinta alcanza el fondo del recipiente rápidamente y el movimiento de la tinta está determinado por el proceso de difusión

únicamente. El proceso de difusión bidimensional de la tinta en el agua se describe mediante la siguiente ecuación.

$$\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial n}{\partial r} = \frac{1}{D}\frac{\partial n}{\partial t}$$

donde *D* es el coeficiente de difusión de la tinta en agua y *n* es la concentración de tinta.



Figura 2.8: En el instante inicial t = 0, la tinta está distribuida homogéneamente en el agua dentro de un círculo de radio a, donde $n = n_0$ para r = a, y, n = 0 para r > a.

La solución de la ecuación diferencial es

$$n(r,t) = \frac{n_0}{2Dt} exp\left(\frac{-r}{4Dt}\right) \int_0^1 exp\left(\frac{-z}{4Dt}\right) I_0\left(\frac{rz}{2Dt}\right) z dz$$

donde $I_0(x)$ es la función modificada de Bessel de orden cero. Haciendo el cambio de variable

$$x = \frac{r}{a}, \zeta = \frac{z}{a}, \tau = \frac{Dt}{a^2}$$

Obtenemos la ecuación

$$\frac{n(x,\tau)}{n_0} = \frac{1}{2\tau} exp\left(\frac{-x^2}{4\tau}\right) \int_0^1 exp\left(\frac{-\zeta^2}{4\tau}\right) I_0\left(\frac{x\zeta}{2\tau}\right) \zeta d\zeta$$

que es independiente del radio a de la gota y del coeficiente de difusión D de la tinta en el agua (figura 2.9).

Conocido el valor del coeficiente de difusión *D* y el radio inicial de la gota *a*, podemos determinar la concentración n(r, t) de tinta a una distancia r = ax del centro de la gota en el instante $t = a^2 \tau/D$. El programa es incapaz de calcular la concentración en función de la distancia *x* para un tiempo inferior a $\tau = 0,003$.Como comprobación se puede verificar que la cantidad total de tinta permanece constante, de modo que la integral

$$\int_0^1 \frac{n(x,\tau)}{n_0} 2\pi x \, dx = 1^2 \pi = \pi$$

que es proporcional a la cantidad inicial de tinta contenida en un círculo de radio unidad.



Figura 2.9: En la figura, se representa la concentración relativa $n(x, t)/n_0$ en función de x = r/a (en color azul) y se compara con la situación inicial (color rojo) para el instante t = 0,02.

MODELOS APLICADOS A SITUACIONES CONCRETAS

3.1. Ecuaciones de reacción-difusión para modelar la delincuencia y la criminalidad.

Los mecanismos de conducción de la nucleación, propagación y disipación de puntos de acceso de la delincuencia, son poco conocidos. Como consecuencia, la capacidad de los organismos de aplicación de la ley para usar los patrones de la delincuencia asignada para diseñar estrategias de prevención del delito se ve gravemente obstaculizada. También carecen de expectativas sólidas sobre cómo las diferentes intervenciones de la policía debería afectar la delincuencia. Aquí presentamos un marco matemático basado en ecuaciones de reacción-difusión en derivadas parciales para el estudio de la dinámica de los hotspots (puntos calientes) del crimen. El sistema de ecuaciones se basa en la evidencia empírica de cómo los delincuentes se mueven y se mezclan con las posibles víctimas o blancos. El análisis muestra que los puntos calientes del delito se forman cuando el aumento del riesgo de repetición de los crímenes se difunde a nivel local, pero no tan lejos para obligar a que la delincuencia se distancie entre si. Puntos del Delito se pueden formar, ya sea como bifurcaciones supercrítico o subcrítico, este último es el resultado de grandes picos de la delincuencia que reemplazan linealmente distribuciones estables de la delincuencia uniforme. Nuestros métodos matemáticos muestran que los puntos calientes subcríticos del crimen puede ser erradicados de forma permanente con la supresión de la policía, mientras que los puntos de acceso supercríticos son desplazados a raíz de un patrón espacial característico. Nuestros resultados proporcionan una explicación mecanicista de los fallos recientes de observar el desplazamiento del delito en las pruebas de campo experimental del punto de acceso de la policía.

La delincuencia es una característica presente en todas las ciudades modernas, pero no todos los barrios se ven afectados por igual. De hecho, los delitos graves que van desde robo residencial hasta homicidios están fuertemente modelados en tiempo y espacio, la formación de la delincuencialidad "hotspots". Los estudios demuestran que las acciones policiales dirigidas a puntos de acceso del crimen se traducen en reducciones reales de la delincuencia y las llamadas a la policía para el servicio, mientras que el desplazamiento de la delincuencia en las configuraciónes adyacentes pueden ser menos comunes de lo que se pensaba. Sin embargo, las ganancias adicionales en la reducción de la delincuencia dependen de obtener una comprensión cuantitativa de los mecanismos que conducen a la aparición, propagación y disipación de puntos calientes del delito. Modelos de Reacción-difusión, en los que los activadores e inhibidores de la mezcla de movimientos interactuan, proporcionando un marco útil para investigar la formación

de los patrones de la delincuencia y el impacto de estrategias alternativas de actuación policial en la estabilidad de los puntos de acceso de la delincuencia. En este contexto, los delincuentes motivados (activadores) buscan en su entorno a las víctimas como objetivos adecuados, que pueden ser móviles, siguiendo sencillas rutinas de comportamiento. Si un delincuente se encuentra con un objetivo en la ausencia de una medida de seguridad efectiva (inhibidor), entonces él es libre de explotar ese objetivo. La presencia inmediata de la seguridad como la policía es suficiente para impedir la delincuencia. Aquí se muestra que los patrones espaciales a gran escala de la delincuencia, incluida la formación de puntos calientes del delito estacionario, son fuertemente dependientes de la difusión local de riesgo, impulsados por la movilidad delincuencial en el medio ambiente, junto con los fenómenos de repetición y repetición de la próxima victimización.

3.1.1. Modelo

Se estudia un sistema de reacción-difusión en la participación de móviles delincuentes dentro de un ambiente cuadrado con condiciones de frontera periódicas. Objetivos potenciales de la delincuencia, tales como casas, automóviles o personas, dependiendo del tipo de delito, están distribuidos de forma continua en el espacio, y cada posición x = (x, y) se caracteriza por un riesgo de victimización, que se define como un campo A(x, t), lo que representa en general las señales ambientales sobre la viabilidad de la comisión de un delito con éxito y/o los delincuentes poseen conocimientos específicos sobre el objetivo o la vulnerabilidad de las víctimas en la zona. Mientras que A(x, t) es el más fácil de conceptualizar, en referencia a objetivos fijos (como los hogares en el caso de robo), también puede ser usado para representar el riesgo de ataques a las víctimas móvil en cualquier lugar del territorio. Nuestro modelo y sus resultados son por lo tanto independiente del tipo de delito. Riesgos es la suma de un componente fijo $A^0(x)$, que está parado en el tiempo pero potencialmente variable en el espacio, y una dinámica componente B(x, t), que evoluciona en el tiempo de acuerdo a

$$\frac{\partial B}{\partial t} = \eta D \bigvee^{2} B - wB + kpA, (6)$$

donde p(x) es la densidad de agentes criminales. El parámetro k mide el crecimiento del riesgo en el lugar x dada delitos ocurridos allí en una tasa por unidad de área pA. Por lo tanto, k es una fuerza de atracción tirando a los delincuentes de regreso a los lugares donde se han cometido crímenes de éxito, una dinámica a inferir de la evidencia empírica para los crímenes de repetición se concentran en el poco tiempo después del evento inicial (fig. 3.1 A) (SI empírica del Delito de datos). El parámetro w determina la velocidad a la que decae el riesgo elevado hacia el valor ambiental fijo $A^0(x)$, que generalmente se produce en cuestión de días o semanas dependiendo del tipo de delito (fig. 3.1 A). Por último, D, un coeficiente de difusión, y $\eta \in [0, 1]$ controla la velocidad de propagación difusiva del riesgo de la delincuencia en el entorno local, describiendo la llamada "cerca de repeticiones" fenómeno por el cual los objetivos dentro de varios cientos de metros de un crimen inicial son más propensos a ser víctimas y no por azar (fig. 3.1B).

Es más probable que los delincuentes Penales regresen a la misma cerca de lugares para cometer crímenes de repetición. Aquí se ilustra este hecho a través del ejemplo concreto de robo residencial unifamiliar, con datos de Long Beach, California, durante los años 2000-2005 (SI Delito de datos empíricos). (*A*) La probabilidad de observar una separación temporal de t días entre los eventos de residencias individuales robadas es exactamente el doble dentro de una ventana fija temporal de D = 364 días. Se compara la distribución observada con una distribución esperada de los crímenes de repetición asumiendo que son una distribución de Poisson en el tiempo: $p_2(t) = 2(D-t)/D(D+1)(21)$. Para que se repitan los robos es más probable que ocurra en las cuatro semanas después



Figura 3.1: patrones espacio-temporal de la conducta criminal.

del evento inicial que por casualidad, lo que sugiere que los ladrones se predisponen a volver a los mismos lugares, debido a señales ambientales únicas y / o conocimientos específicos adquiridos en el primer robo. (*B*) probabilidad de repetición de robo en las dos semanas siguientes un crimen inicial en función de la distancia del crimen inicial. La expectativa de Poisson se calcula como $\geq 2\vec{B}$. Robos que ocurren dentro de dos semanas de uno al otro separados por más de aproximadamente 2000 m son estadísticamente independientes (Poisson), mientras que las que están más cerca entre sí en el espacio muestran una fuerte dependencia espacial, la interpretación es que los aumentos de robo inicial de la probabilidad de que los vecinos se también víctimas. Delito de riesgo por lo tanto se extiende espacialmente hasta distancias = 2000 m (línea discontinua). repetir similares y la dinámica de corto repetidos casos de victimización son reconocidos por disparos y ataques de los insurgentes, lo que indica que se trata de rasgos genéricos de una amplia gama de tipos de delitos. (*C*) Viaje a la distribución de la delincuencia para los ladrones residenciales medida como la distancia en kilómetros desde la residencia del delincuente en el lugar de un robo. La mayoría de los delincuentes de la búsqueda de objetivos en las inmediaciones de la casa, un nodo de actividad clave en su rutina diaria.

Suponemos que los delincuentes estan en la búsqueda de oportunidades de actuar en los entornos locales que rodean los nodos de las principales actividades en sus rutinas diarias, las cuales pueden incluir su casa, trabajo, o en los sitios de recreación (Fig. 3.1C). Los delincuentes también preferentemente seleccionar objetivos vulnerables, es decir, aquellos con alto riesgo asociadas

A(x, t), por lo general para reducir al mínimo el peligro de la captura o la confrontación. Así, la densidad de los delincuentes p en una localización espacial x evoluciona de acuerdo con

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \vec{\nabla} . (\vec{\nabla} p - 2p \vec{\nabla} \ln A) - pA + \gamma, (7)$$

donde $p_2(t < 14) = \sum_{t=1}^{14} 2(D-t)/D(D+1)$ es el operador gradiente. Los delincuentes se mueven por gradientes de lnA, sino simplemente difusa en la ausencia de un gradiente de riesgo. De este modo, buscar y victimizar a los objetivos de un mayor riesgo cada vez que estas diferencias están presentes en el medio ambiente. Los delincuentes también salir del sistema a la tasa pA, a raíz de la comisión de delitos, y se introducen en una constante, pero posiblemente espacialmente variable, la tasa por unidad de superficie γ .

3.1.2. Resultados

Las ecuaciones 6 y 7 se juntan en ecuaciones de derivadas parciales (EDP), que describe la coevolución del riesgo de la delincuencia en el espacio-tiempo y la población delincuente. Estamos interesados en las condiciones que hacen que el riesgo de la delincuencia, *B*, no uniformemente distribuida en el espacio.

El análisis de estabilidad lineal muestra, de hecho, que el riesgo de la delincuencia formarán puntos densos, bien espaciados cada vez que la difusión de los riesgos producidos por los crímenes individuales en el espacio es lo suficientemente amplio como para obligar a que los crímenes locales esten juntos, pero no tan amplios para que los crímenes lejanos también están conectados. Una ilustración esquemática del mecanismo de formación de patrones de conducción del crimen se muestra en la figura 3.2.

Crímenes individuales se asocian únicamente con una región local espacial conceptualmente similar a un polígono de Voronoi, una zona paramétricamente definida como Cw/γ (Fig. 3.2A). Lo contrario de este término es la densidad media de la delincuencia.

La difusión de los riesgos de los sitios de la delincuencia en coordinación a la cercana ubicación espacial define una segunda región espacial que llamamos la "zona de influencia" de un delito determinado por $\eta k/w$ (ver fig. 3.1B).

Los puntos de acceso del crimen no surgen si las áreas de influencia de los crímenes individuales no se solapen y por lo tanto no forman grupos de riesgo (es decir, $\eta k/w < Cw/\gamma$) (Fig.3.2A), o por el contrario, si las áreas de influencia de cada uno de los crímenes se superponen uniformemente con otros muchos de diferentes riesgos a través del medio ambiente urbano (es decir, $\eta k/w < C_h w/\gamma$) (Fig. 3.2B). Por lo tanto, cada vez surgen puntos de acceso a la delincuencia $C_l w/\gamma < \eta k/w < C_h w/\gamma$ $C_h w/\gamma$ (Fig. 3.2C).

Las condiciones necesarias para las zonas activas del delito para formar la bisagra de la naturaleza geográfica de los delincuentes es el comportamiento de alimentación y subrayan la importancia de la búsqueda del delincuente espacialmente restringidos en la difusión de riesgo en los barrios (ver fig. 3.1C).

La integración numérica de las ecuaciones 6 y 7 confirma que los puntos calientes no se forman cuando la difusión de riesgo, es espacial expansiva o restringida espacialmente (Fig. 3.2D), pero en otro caso emerge con una escala distinta espacialmente fijada por el máximo inestable de la longitud de onda $\gamma_* = 2\pi/|k_*|$ (Fig. 3.2).



Figura 3.2: Las condiciones para la formación de la delincuencia en sus puntos de acceso.

Difusión local de alto riesgo de las fluctuaciones estocásticas en el nucleo de la delincuencia en zonas activas del delito. (A) El espacio urbano puede ser considerado como dividido en áreas exclusivamente asociadas con cada crimen individual (punto negro), aquí se muestra con polígonos de Voronoi (líneas grises) y descrito en el modelo de EDP por superficie media Cw/γ . Los crímenes individuales también producen un elevado riesgo de que se difunda a lo largo de un área (línea de puntos círculos) el centró es la ubicación del delito y se describe en el modelo de EDP por área $\eta k/w$. Si el área abarcada por el riesgo de difusión de un delito no se superpone con el área de riesgo de difusión generado por otro, entonces, no se forman puntos de conexión y un espacio uniforme, donde la distribución de equilibrio esta debajo de los resultados de la delincuencia. (B) Si se difunde el riesgo en una amplia zona, se homogeniza en el espacio, y un espacio uniforme, donde la distribución de equilibrio esta por encima de los resultados de la delincuencia. (C) Sólo cuando el riesgo se difunde a través de distancias relativamente cortas, la unión de crímenes locales juntos, pero no muy distantes, permiten que surgan lo puntos de acceso de delincuencia . (D) y (E) Las simulaciones numéricas del sistema de EDP en una región cuadrada con condiciones de frontera periódicas. (D) Los parámetros son tales que $\eta k/w < C_l w/\gamma$, o $\eta k/w > C_h w/\gamma$ dan una distribución estable del delito uniforme. (E) Los parámetros son tales que $C_l w/\gamma < \eta k/w < C_h w/\gamma$ originan puntos estacionarios del crimen. La separación entre puntos de acceso está determinado por el máximo inestable de la longitud de onda $\lambda_* = 2\pi/|k_*|$. Puntos de acceso se miden como desviaciones de un valor de equilibrio espacial promedio $\eta \vec{\mathbf{B}}$ (verde), con $\eta k^2 = 0.2$ (rojo) el riesgo máximo y es cero el riesgo mínimo (violeta).

Esto es una débil muestra de análisis no lineal, sin embargo, los puntos calientes del delito puede surgir como dos bifurcaciones supercrítica y subcrítica, o grandes cambios cualitativos en el estado homogéneo del equilibrio (Fig. 3.3A). Bifurcaciones supercrítica ($\varepsilon > 0$ en la figura. 3.3A) vemos el nucleo y el crecimiento de los hotspots de la delincuencia en pequeñas espigas del delito debido a la inestabilidad lineal del sistema, mientras que las bifurcaciones subcríticas ($\varepsilon < 0$ en la figura. 3.3A) son el resultado de grandes picos locales de la delincuencia que reemplazan la estabilidad lineal. Refiriéndose a la figura. 3.2A, por ejemplo, los crímenes son lo suficientemente espaciados de tal manera que el área de influencia de un solo delito en general, no se superponga con la de los demás y el sistema es linealmente estable, con una distribución espacial uniforme de la delincuencia. Si en un lugar se experimenta un aumento súbito y extremo de la delincuencia, entonces, el aumento en el riesgo de repente puede extenderse a la zona de influencia de un crimen adyacentes vinculando aquellas áreas en conjunto para crear una zona interactiva subcrítica. Por otra parte, aun cuando todos los delitos están unidos por la amplia difusión espacial del riesgo (Fig. 3.2B), un gran aumento de la delincuencia en un solo lugar puede crear un punto nucleo tirando a los delincuentes lejos de una distribución uniforme y que causa un centro de delincuencia

subcrítico a surgir.



Figura. 3.3. Tipos de delito hotspot.

Los puntos de delito se forman en ambos regímenes linealmente inestable y estable, con estructuras diferentes geoespaciales. (A) El diagrama de bifurcación para el sistema EDP radialmente simétrica donde las líneas discontinuas representan las ramas inestables y las líneas continuas son las ramas estables. El parámetro ε controla la estabilidad del sistema, con $\varepsilon > 0$ que corresponde a los sistemas linealmente inestables y $\varepsilon < 0$ que corresponde a los sistemas linealmente estables. $A_{amp}(\infty)$ mide la intensidad de los punto de acceso. Puntos de acceso supercríticos ($\varepsilon > 0$) están formados por pequeñas perturbaciones de la delincuencia y por el enfoque estable de "golpe" o "anillo" solucion, que se muestra en $A_{amp}(\infty) > 0$ y $A_{amp}(\infty) < 0$, respectivamente. Puntos de acceso subcríticos ($\varepsilon < 0$) se forman sólo por grandes perturbaciones en el crimen y muestran sólo una solución "golpe". Las respuestas esperadas de la supresión de los hotspots supercríticos y subcríticos se muestran con flechas (véase el texto de la discusión). (B) es el espacio de parámetros para la formación de puntos calientes del delito supercríticos y subcríticos para este mismo sistema. ηA^0 es una medida fija (invariante en el tiempo) de riesgo ambiental, $n\vec{\mathbf{B}}$ representa los diferentes valores de equilibrio para el componente dinámico de riesgo. El regímen de parámetros generan puntos subcrítico de delincuencia que forman una envoltura que rodea los regímenes supercríticos, lo que sugiere que el depósito de un régimen inestable de forma lineal en la estabilidad lineal todavía puede facilitar la formación de la delincuencia en los punto de acceso si los eventos de delincuencia en lugares aumenta de tamaño v / o frecuencia. El análisis en ambos casos se basa en un sistema con $\eta \vec{B}$.

Uno de nuestros principales resultados es que los puntos calientes subcríticos se pueden formar en una amplia gama de condiciones, paralelas a las que forman los focos supercríticos (Fig. 3.3B). La combinación de parámetros $\overline{\nabla}$ describe el componente dinámico del riesgo de la delincuencia, aproximadamente la probabilidad de repetición de la victimización que ocurren en cualquier lugar. El ηA^0 variable indica los riesgo fijos ambientales de la delincuencia, aproximadamente la probabilidad de que los crímenes que ocurren de forma independiente en el espacio y el tiempo como resultado de un proceso de Poisson estacionario. Los valores pequeños de ηA^0 describen ambientes caracterizados por muy bajo riesgo ambiental fijo, picos pequeños de la delincuencia se distinguen fácilmente en este contexto y con nucleos en zonas activas supercríticas. A medida que aumenta ηA^0 , convertido en entornos intrínsecamente más arriesgados y el rango de valores para el componente dinámico de la generación de contratos de riesgo de puntos supercríticos. Con aumentos del ηA^0 el sistema atraviesa un umbral de estabilidad lineal. En este punto, los picos pequeños de la delincuencia no son suficientes para generar puntos calientes del delito. Tenga en cuenta, sin embargo, que para cada valor de la capacidad de generar puntos de acceso supercríticos $\eta \vec{\mathbf{B}} = \eta k / w$ hay valores de ηA^0 que describen ambientes marginalmente estables, sin embargo se apoyará en puntos subcríticos dado un aumento bastante grande de la delincuencia. La implicación es que los puntos calientes subcríticos pueden ser comunes en entornos urbanos reales, aunque la proporción del espacio de parámetros se muestran en la figura. 3.3B que es el comportamiento realista que actualmente no se conoce.

Nuestro análisis también muestra que puede haber diferencias significativas entre los puntos de acceso geoespaciales de la delincuencia supercrítica y subcrítica, con implicaciones importantes para la respuesta a los puntos calientes de la delincuencia dirigida por la policia. Fig. 3.3A muestra un diagrama de bifurcación de nuestro sistema en una geometría radial simétrica, donde $A_{amp}(\infty)$ es la intensidad de punto de acceso y ε es un parámetro que nos permite examinar cómo los cambios de comportamiento del sistema cuando este se pasa de forma lineal con regímenes inestables a parámetros estable. Hay dos disposiciones espaciales de los patrones de la delincuencia en forma lineal con condiciones inestables ($\varepsilon > 0$): una simétria "reactiva" de la solución (valores de $A_{amp}(\infty) > 0$) reconocido como un punto de acceso tradicional, y un "anillo"solución (valores de $A_{amp}(\infty) < 0$). Los patrones de la delincuencia se pueden formar como "anillos calientes" en un torno a un lugar donde se supone muchos enfoques de perfiles individuales a escala geográfica de la delincuencia global. Por el contrario, los regímenes linealmente estables ($\varepsilon < 0$) muestran sólo la solución "golpe", lo que corresponde a un patrón de punto de acceso tradicional.

Además, nos esperan puntos de delincuencia supercríticos y subcríticos para responder de manera diferente a las acciones dirigidas por la policial, como punto de acceso por la policía. Fig. 3.3A indica que la supresión de puntos calientes del delito supercríticos, a través de acciones de la policía local que impulsan el punto de acceso intensidad $A_{amp}(\infty)$ a cero, en primer lugar va a generar anillos calientes que posteriormente se rompen para formar puntos de acceso del mismo tamaño y la disposición espacial relativa como los anteriores a la supresión. Por el contrario, esperamos que los puntos calientes subcríticos del delito serán erradicados por la acción ordenada de la policía que es lo suficientemente fuerte para conducir $A_{amp}(\infty)$ en el área gris debajo de la rama inestable (línea discontinua) de la solución que se muestra en la figura 3.3A, y estos puntos se quedan suprimidos incluso después de la eliminación de la presión policial hasta el momento en que un gran pico de la delincuencia anula la estabilidad lineal del sistema para formar un nuevo punto de acceso. La diferencia clave en los resultados refleja el hecho de que la represión se centró en un punto de acceso no tiene impacto sobre las pequeñas fluctuaciones, de los delitos estocástico que ocurren en todo el medio ambiente. En los regímenes linealmente inestables, las fluctuaciones pequeñas se espera que se formen el nucleo rápidamente en nuevos puntos de acceso supercríticos, mientras que en los regímenes estables linealmente la expectativa es que no lo harán.

Para poner a prueba nuestras expectativas teóricas, se realizaron simulaciones de ordenador con amplia participación de la supresión de los puntos calientes del delito supercrítico y subcrítico con el modelo de EDP. La supresión de la delincuencia se presenta después de permitir el desarrollo de los patrones de la delincuencia estable usando combinaciones de parámetros que son supercríticos o subcríticos. La represión es modelada para conducir de forma instantánea la tasa de criminalidad pA(x, t) a cero en la localización de puntos calientes del delito actual y el mantenimiento de esta supresión por un período de tiempo fijo. En la figura. 3.4 se muestra que los diferentes tipos de puntos de acceso del delito responden de manera diferente a la supresión como predice la teoría. Represión de los puntos de acceso supercrítico sólo temporalmente como resultado la interrupción del patrón de la delincuencia, con nuevos puntos de acceso emergentes rápidamente para reemplazar a los suprimidos por la acción policial simulada (Fig. 3.4A). Por otra parte, las simulaciones muestran claramente que la supresión en el área central de un centro de delincuencia conduce el riesgo elevado en un anillo que rodea el área de la represión, lo que corresponde a la solución del anillo en nuestro análisis no lineal. El anillo caliente desplazado a continuación, se rompe para formar puntos de acceso independiente de la solución de golpe estable en el caso de no ser simétrica. Por el contrario, la supresión de puntos calientes del delito subcrítico no produce desplazamiento de la delincuencia en un anillo o cualquier otra estructura (Fig. 3.4B) y, como era de esperar, los puntos de acceso de la delincuencia no reaparecen tras el cese de la represión del delito en este caso.



Figura 3.4. Supresión del punto de acceso del Crimen.

Resultados de la represión para el sistema EDP con los parámetros elegidos para generar puntos calientes del delito supercrítico o subcrítico. (A) La supresión de puntos calientes del delito supercrítico. Se muestra la configuración de puntos de acceso supercrítico a paso de tiempo t = 100, justo antes de la introducción de la supresión de la delincuencia. La supresión de la delincuencia se introduce en el área de cada punto de acceso visible, lo que lleva a la erradicación de los puntos de acceso originales, pero los aumentos correspondientes en el riesgo en las regiones vecinas, visto en t = 120. La estructura transitoria en el instante t = 120 se asemeja a un anillo de solución caliente que rodea la ubicación del punto de acceso central original. En el momento de la supresión siguiente en el instante t = 200, un nuevo estado de equilibrio con puntos en las posiciones adyacentes a los originales que se ha logrado. (B) La supresión de puntos calientes del delito subcrítico. Se muestra que es un punto de acceso central subcrítico en t = 100, justo antes de la introducción de la supresión de la delincuencia. Supresión de la delincuencia se introduce en el área de la zona interactiva, lo que lleva a la erradicación de la zona activa por t = 120. No hay estructuras transitorias que aparezcan en este caso. Con el tiempo la supresión se levanta en el instante t = 200 y el sistema adopta rápidamente el estado estacionario homogéneo. Escala de colores, como se explica en la figura 3.4.

3.1.3. Discusión

Esta investigación tiene implicaciones directas para el estudio de la formación de patrones delictivos y los efectos mecánicos de las intervenciones policiales contra el crimen. Los modelos deterministas desarrollados aquí sugieren que las reducciones observadas empíricamente en el crimen que sigan la aplicación de las estrategias policiales en los puntos de acceso no es un artefacto estadístico, sino más bien puede reflejar la supresión del riesgo de delincuencia por debajo de cierto nivel umbral necesario para mantener un delito subcrítico en los puntos de acceso. El delito debe seguir siendo suprimido en este tipo de situaciones, incluso después de

3.1. ECUACIONES DE REACCIÓN-DIFUSIÓN PARA MODELAR LA DELINCUENCIA Y LA CRIMINALIDAD.

la eliminación de la presión de hacer cumplir la ley, hasta que un grupo importante de delitos empuja el sistema hacia la inestabilidad. Por el contrario, nuestros modelos también sugieren que el desplazamiento de la delincuencia debe ser fruto de las acciones policiales dirigidas a puntos de acceso supercríticos, consistente con una teoría criminológica. Sin embargo, el desplazamiento no se observa comúnmente en las pruebas empíricas de punto de acceso policial.

Una posible explicación para la observación frecuente de los desplazamientos en la configuración empírica es que los ambientes son suficientemente heterogéneos para limitar la viabilidad de los delincuentes en movimiento a favor de los hábitats de las zonas adyacentes que pueden ser privados de los objetivos o víctimas, o pueden tener niveles mucho más altos de la vigilancia. Nuestro análisis se basa en un muy regular medio ambiente homogéneo, en el que el riesgo uniforme de la delincuencia de referencia distribuidos y, por tanto el desplazamiento no se ve limitado por la estructura del medio ambiente. El supuesto de la homogeneidad del medio ambiente podría ser percibido como una debilidad del enfoque de modelado ya que la mayoría, si no todos, los entornos del mundo real será heterogénea en la distribución del riesgo de la delincuencia. Sugerimos, sin embargo, que un supuesto de homogeneidad es útil como punto de partida teórico, precisamente porque es difícil encontrar en los entornos del mundo real. Fueron los ambientes del mundo real tan homogéneo como hizo en el modelo actual, el desplazamiento quizá sería mucho más común.

También es posible que el desplazamiento del delito no se ha observado en la configuración empírica porque los experimentos controlados han buscado sólo el desplazamiento espacial inmediato en una o dos áreas de influencia del bloque alrededor de los sitios de represión al delito. El desplazamiento de puntos de acceso supercríticos en nuestros modelos de continuidad por lo general en una ubicación a medio camino entre los puntos de acceso que se suprime, efectivamente $\lambda_*/2$, lo que sugiere que la preocupación en los estudios empíricos debe ser con el desplazamiento del delito a través de distancias intermedias.

Por último, la rareza de los desplazamientos en las pruebas empíricas de la zona activa de la policía puede significar que la mayoría de puntos de acceso en el mundo real son subcrítico en lugar de supercrítico. Sin embargo, también era de esperar los diferentes tipos de delincuencia para generar diferentes tipos de puntos de acceso y por lo tanto responden de manera diferente a la zona interactiva de las acciones policiales. Por ejemplo, los mercados al aire libre de drogas puede requerir un gran pico, iniciales en las operaciones de drogas que afecta múltiples vendedores para establecerse en una localización espacial fija. El fracaso de los mercados de drogas a resurgir después de la supresión, a pesar de las operaciones continuaron en pequeña escala en la calle, es un comportamiento coherente con la clasificación de estos mercados como lugares críticos subcrítico. Por el contrario, robos a apartamentos o robos de automóviles puede ser más probable que sus nucleos se creen en zonas activas supercríticas, ya que estos delitos son más a menudo cometidos por cualquiera de los individuos que actúan solos o conjuntamente en grupos pequeños. El desplazamiento se puede esperar de estos tipos de delitos ya que los delincuentes involucrados pueden ser más capaces de responder a la represión por la búsqueda de objetivos en las zonas advacentes. Sin embargo, el apoyo a tales distinciones se requiere de la experimentación de campos adicionales.

Se ha demostrado que la EDP de modelos de reacción-difusión proporcionan una explicación mecanicista de la formación de la delincuencia patrón dado supuestos simples sobre la difusión de los riesgos del delito y de búsqueda localizada por los delincuentes. Estos modelos dan lugar a observaciones sutiles acerca de la dinámica fundamental de los hotspots crimen que no se puede obtener a través del estudio empírico directo de los datos de la delincuencia. Las diferencias entre los puntos calientes del delito supercrítico y subcrítico, por ejemplo, explicar los resultados

diferentes de la zona activa de la policía, incluyendo la supresión de puntos de acceso y el desplazamiento de ambos, y sugieren que las estrategias policial deben adaptarse al tipo de la zona interactiva.

3.2. Sistema dinámico en el llenado de un lago (Situación ideal)

El sistema dinámico ideal en el llenado de un lago se puede entender como un proceso oscilatorio en dos vasos comunicantes, donde el primer vaso es el lago y el segundo es el recipiente o lugar que recibe el agua que se filtra por las paredes del lago y a través del suelo, dando origen a un "especie" de tubo comunicante que une los dos vasos (lago y lugar donde llega el agua después de filtrarse).

Sean h_{01} y h_{02} las alturas iniciales del fluido en cada uno de los recipientes, y S_1 y S_2 sus secciones respectivas, la altura de equilibrio h se obtiene de la relación



$$S_1 h_{01} + S_2 h_{02} = (S_1 + S_2) h$$

Figura 3a: Sistema oscilatorio en dos vasos comunicantes.

Cuando el fluido en el lago se desplaza x_1 de la posición de equilibrio, el lugar donde llega el agua después de filtrarse se desplazará x_2 de la posición de equilibrio. Suponiendo que el volumen total del fluido en ambos vasos es constante, la relación entre estos desplazamientos será

$$S_1 x_1 = S_2 x_2$$
, (8)

3.2.1. Ecuación de continuidad

Si v_1 es la velocidad del fluido en el lago, y v_2 es el lugar donde llega el agua después de filtrarse y u es el tubo que comunica ambos recipientes se cumplirá por la ecuación de continuidad que

$$S_1 v_1 = S_2 v_2 = S_u$$
, (9)

3.2.2. Balance energético

Las masas de fluido que hay en cada uno de los recipientes y en el tubo de comunicación en un instante *t* determinado, serán respectivamente:

- Masa en el lugar de llegada del agua filtrada: $m_1 = \rho S_1(h x_1)$
- Masa en el lago: $m_2 = \rho S_2(h + x_2)$
- Masa en el tubo de comunicación: $m = \rho S d$

Donde S es la sección del tubo de comunicación y d su longitud

Variación de energía cinética entre el instante t y el instante t + dt.

$$\Delta E_k = m_1 . v_1 . dv_1 + m_2 . v_2 . dv_2 + m . u . du$$

Variación de energía potencial: una masa dm pasa desde la posición inicial $h + x_2$ a la posición final $h - x_1$.

$$\sum E_p = E_{p(inicial)} - E_{p(final)} = dm.g(h+x_2) - dm.g(h-x_1)$$

donde $dm = -\rho S_1 dx_1$, ya que x_1 disminuye

Principio de conservación de la energía $\triangle E_k = \triangle E_p$

$$m_1.v_1.dv_1 + m_2.v_2.dv_2 + m.u.du = dm.g(x_1 + x_2)$$

A partir de esta ecuación y de las relaciones (8) y (9), escribimos v_1 en función de x_1 .

$$v_1d_1 = -\frac{g.x_1.dx_1}{a+bx_1}$$

con

$$a = h + \frac{d\frac{S_1}{S_2}}{1 + \frac{S_1}{S_2}}$$
$$b = \frac{S_1}{S_2} - 1$$

dividiendo ambos miembros por dt, llegamos a la ecuación diferencial

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} + \frac{g}{a+bx_1}x_1 = 0$$

Para simular el comportamiento de este sistema oscilante, se resuelve la ecuación diferencial de segundo orden mediante el procedimiento numérico de Runge-Kutta con las condiciones iniciales $v_1 = 0$, cuando $x_1 = h - h_{01}$. Siendo h la altura de equilibrio, y h_{01} la altura inicial en el primer recipiente.

El término b es nulo cuando S_1 es igual a S_2 . La ecuación diferencial se convierte en

$$\frac{d^2x_1}{dt^2} + \frac{g}{a}x_1 = 0$$

cuya frecuencia angular $\omega^2 = g/a$ y cuyo periodo es $p = 2\pi \sqrt{\frac{a}{g}}$

3.2.3. Energías cinética y potencial

Volviendo de nuevo al caso general, calculamos la energía potencial y la energía cinética, comprobando que su suma es constante. La energía potencial del fluido contenido en ambos recipientes (la energía potencial del fluido contenido en el tubo de comunicación no cambia) es

$$E_p = m_1 g \frac{h - x_1}{2} + m_2 g \frac{h + x_2}{2}$$

Donde m_1 es la masa de fluido en el primer recipiente y m_2 en el segundo. El centro de masa se encuentra a la mitad de la altura. A partir de la relación (8), y escribiendo la masa como producto de la densidad del fluido ρ por el volumen que la contiene, expresamos E_p en función de x_1 y h.

$$E_p = \frac{\rho g}{2} S_1 \left(1 + \frac{S_1}{S_2} \right) (h^2 + x_1^2)$$

La energía cinética es la suma de la energía cinética del fluido en el lago, en el lugar de llegada del agua filtrada y en el tubo de comunicación.

$$E_k = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 + \frac{1}{2}mu^2$$

A partir de las relaciones (8) y (9), y escribiendo la masa como producto de la densidad del fluido ρ por el volumen que la contiene, expresamos E_k en función de x_1 y h y v_1

$$E_k = \frac{1}{2}\rho S_1 v_1^2 \left(h\left(1 + \frac{S_1}{S_2}\right) + x_1 \left(\frac{S_1^2}{S_2^2} - 1\right) + d\frac{S_1}{S_2} \right)$$

Cuando S_1 es igual a S_2 el término en x_1 desaparece.

Si $x_1 = Asen(wt)$, $v_1 = Awcos(wt)$, sumando los valores de la energía cinética y potencial se tiene que obtener un valor constante de la energía total independiente del tiempo t. Por tanto, los coeficientes del $sen^2(wt)$ y del $cos^2(wt)$ tienen que tener el mismo valor. De ahí, obtenemos el valor del cuadrado de la frecuencia angular ω .

$$\omega^2 = \frac{2g}{2h + d\frac{S_1}{S_2}}$$

que es la mismo que $\omega^2 = g/a$ cuando $S_1 = S_2$

Por lo tanto

$$E = E_K + E_P = \frac{g\rho S_1}{2}(h^2 + A^2)$$

3.3. Oscilador endémico en una población de mosquitos

Una especie es endémica cuando se conoce únicamente de un determinado lugar, ya sea país o región. A medida que se avanza en el conocimiento de la biodiversidad, especies que eran consideradas endémicas dejan de serlo en el momento en que se encuentran en otro país o región. Las áreas de endemismo son regiones donde ciertas poblaciones de flora y fauna evolucionaron en aislamiento, y en las cuales las especies desarrollaron características específicas relacionadas con su entorno. También se les llama centros de endemismo, de distribución o de evolución y áreas núcleo.

El endemismo puede considerarse dentro de un abanico muy amplio de escalas geográficas: así, un organismo puede ser endémico de una cima montañosa o un lago, de una cordillera o un sistema fluvial, de una isla, de un país o incluso de un continente. Los mosquitos son una especie de tipo endémico, su ciclo de vida comprende una etapa acuática, durante la cual se desarrollan los estadios inmaduros, y es el período durante el cual ocurren muchos de los procesos de regulación de las poblaciones. Los mosquitos vuelan de sus criaderos hasta varias millas, ayudados por el viento. Los adultos pueden vivir más de un mes, lo que puede variar a causa de factores ambientales como la temperatura ambiente y el régimen de lluvias.

Debido a que las larvas de los mosquitos son acuáticas, el agua resulta esencial para su desarrollo y sobrevivencia. Los hábitats larvales son diversos, desde artificiales hasta los completamente naturales, como pueden ser las depresiones de las huellas de los animales en extensos campos de cultivo de arroz. Por lo regular prefieren aguas mansas o quietas y no muy profundas. Las larvas no se encuentran uniformemente distribuidas en los sitios de reproducción. En grandes hábitats como pantanos o lagos, tienden a estar agregadas, especialmente en las orillas donde el ambiente es favorable.

Las fuentes de agua varían en su composición, desde casi destiladas, de la lluvia hasta pantanos salados, lagos y lagunas alcalinas. La composición química de las aguas es un factor importante para la adaptación de las larvas, y en parte define las especies de mosquitos que pueden hallarse en un lugar. Cerca de 95% de las especies de mosquitos viven en aguas frescas, aunque muchos han desarrollado mecanismos para adecuarse a situaciones extremas.

3.3.1. Oscilador endémico (Situación ideal)

Un oscilador endémico se puede describir como un oscilador lineal de una tasa de crecimiento $\frac{dN}{dt}$ en una especie determinada, experimentando una fuerza de crecimiento proporcional a las condiciones favorables del espacio donde habita (con tendencia a permanecer en dicho espacio); es decir la densidad de individuos $\frac{d\psi}{dt}$ incrementara a una tasa en un aumento, siempre y cuando las condiciones sean favorables para la especie endémica.

Oscilador endémico en una población de mosquitos

Un ejemplo es una cantidad de mosquitos determinada en un tiempo t_0 y espacio x_0 . Si el régimen de precipitación de lluvias R_p en una región aumenta y la temperatura del ambiente T_e desciende entonces la variación en la densidad poblacional de mosquitos $\frac{dN}{dt}$ aumenta, en cambio si el régimen de lluvias desciende y la temperatura aumenta la variación en la densidad poblacional de mosquitos desciende.

Por el principio de la conservación tenemos que la sumatoria de fuerzas en un sistema es igual a cero $\sum F = 0$, luego:

$$C_{t_1t_2} + C_{t_2t_1} = 0;$$

Donde $C_{t_n t_{n+1}}$: características climatológicas de un tiempo t_n hasta t_{n+1} . La ecuación que describe la oscilación lineal endémica de la población de mosquitos con una temperatura ambiente T_e dada es de la forma

$$R_p \frac{dN}{dt} + \frac{\psi}{T_e} = 0$$

Como $N = \frac{d\psi}{dt}$, obtenemos

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} + \frac{\psi}{R_p T_e} = 0$$

Sea ψ la presencia observada en la cantidad de mosquitos en un espacio a través del tiempo una solución del sistema es $\psi(t) = \lambda sen(W_0 t + \Phi)$, ademas $W_0^2 = \frac{1}{R_p T_e}$.

3.3.2. Oscilaciones endémicas amortiguadas en una población de mosquitos

Sistema endémico de los mosquitos teniendo en cuenta la intervención del hombre

El mosquito habita en todos los lugares donde lo hace el hombre por lo cual es necesario considerar la fuerza que ejerce la intervención del hombre en un sistema endémico de mosquitos. Llamemos Ω a la fuerza que involucra toda acción del hombre dirigida a disminuir la densidad poblacional de los mosquitos en un espacio determinado, por lo cual la sumatoria de todas las fuerzas que intervienen en el sistema debe ser cero, luego $C_{t_1t_2} + C_{t_2t_1} + \Omega = 0$.

La ecuación que describe la oscilación endémica amortiguada de la población de mosquitos con una temperatura ambiente T_e dada es de la forma

$$R_p \frac{d^2 \psi}{dt^2} + \frac{\psi}{T_e} + \xi \frac{d\psi}{dt} = 0$$
$$\frac{d^2 \psi}{dt^2} + \frac{\xi}{R_p} \frac{d\psi}{dt} + \frac{\psi}{R_p T_e} = 0$$

Si se define la constante de amortiguamiento como $\Upsilon = \frac{\xi}{2R_p}$, se obtiene;

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} + 2\Upsilon \frac{d\psi}{dt} + W_0^2 \psi = 0;$$

Donde $W_0 = \sqrt{\frac{1}{R_p T_e}}$ corresponde a la frecuencia propia de las oscilaciones libres (es decir, en ausencia del hombre). Solo en el caso en que $\Upsilon < W_0$, habrá oscilación subamortiguada.

3.3.3. Energía en el oscilador endémico de una población de mosquitos

En un espacio determinado la presencia observada en la cantidad de mosquitos crece a través del tiempo a medida que la temperatura de la región disminuya, esto es, si la temperatura es favorable para la población de mosquitos, dicha población se conserva. Por lo cual la energía β de la población de mosquitos, conservada por la temperatura de la región donde habitan, es:

$$\beta = \frac{1}{2} \left(\frac{\psi^2}{T_e} \right)$$

donde ψ es la presencia observada de mosquitos a través del tiempo y t_e es la temperatura ambiente dada.

Ahora, si el régimen de precipitación de aguas lluvias en un espacio habitado por la población de mosquitos aumenta entonces su densidad poblacional crece por lo cual la energía en el sistema de dicha población se conserva, luego:

$$\delta = \frac{1}{2} (R_p N^2)$$

La energía total del sistema es la suma de la energía β y la energía δ .

$$E = \frac{1}{2} \frac{\psi^2}{T_e} + \frac{1}{2} (R_p N^2) = \frac{1}{2} \lambda T_e^{-1}$$

3.4. Formación de patrones espaciales en ecosistemas áridos

La formación de patrones espaciales regulares de vegetación en zonas áridas o semi-áridas constituye un fenómeno netamente espacial ya que las variables no sólo se distribuyen heterogéneamente en el espacio sino que pueden ordenarse según un patrón regular. Entre las posibles herramientas matemáticas es obvio que hemos de elegir aquellas que incluyan explícitamente el espacio y que permitan describir los patrones más allá de valores estadísticos de correlación. Como comprobaremos han resultado útiles modelos de difusión, modelos con integrales o autómatas celulares.



Figura 3b: Patrones en ecosistemas áridos.

Aunque en estas zonas de déficit hídrico es normal observar mosaicos de vegetación, resulta sorprendente que formen patrones geométricos, incluyendo círculos regularmente espaciados, estructuras en forma de panal o, la que más claramente se muestra, bandas en terrenos de pendiente suave, paralelas entre sí y siguiendo líneas de igual altura. Dicha regularidad provocó que las primeras explicaciones se basaran en causas exógenas tales como regularidades previas en el terreno o dunas fosilizadas. Sin embargo, el uso de modelos matemáticos simples de reacción-difusión para formación de patrones sugiere que mecanismos de auto-organización de la vegetación tales como la redistribución de agua, recurso escaso e irregular que modela estos sistemas pueden ser la causa de los patrones observados.

La formación espontánea de figuras geométricas en sistemas tan diversos como reacciones químicas, morfogénesis o la coloración de la piel de animales como el leopardo o la mariposa, encajan en un mecanismo común conocido como inestabilidades de Turing. Para que un fenómeno así pueda ser modelado con EDP son necesarias al menos dos variables en interacción. Una de ellas juega el papel de un recurso, agua en nuestro caso, que difunde muy rápidamente y permite el crecimiento de la otra variable; la vegetación. La difusión en lugar de igualar la distribución puede llevar a un mayor suministro de recurso a las zonas de mayor crecimiento de la especie consumidora. Esto provoca un reparto desigual del recurso. En el ejemplo considerado el agua entrante es invertida en producir vegetación en unas pocas zonas en detrimento de otras que permanecen desnudas. Sorprendentemente, en muchas situaciones esto aumenta la

productividad del sistema ya que un reparto homogéneo del agua no sería suficiente para mantener una cobertura homogénea en todo el espacio.

Simplificando la estructura interna de las zonas con vegetación, podemos suponer que el sistema está caracterizado por dos variables, vegetación, $n(\vec{x}, t)$, y densidad de agua infiltrada en el terreno, $w(\vec{x}, t)$. El modelo más sencillo es una variación del modelo formulado por Klausmaier (1999) que incorpora los mecanismos básicos del sistema:

$$\dot{n}(\vec{x},t) = w(\vec{x},t).n(\vec{x},t)^2 - \mu.n(\vec{x},t) + D_n. \bigvee^2 n(\vec{x},t)$$
$$\dot{w}(\vec{x},t) = p - w(\vec{x},t) - w(\vec{x},t).n(\vec{x},t)^2 + D_w. \bigvee^2 w(\vec{x},t)$$

La segunda ecuación describe la dinámica del recurso; el valor de *p* representa la entrada de agua en el terreno definida por la tasa de precipitación y la infiltración; *w*, es un término de saturación del terreno (por escorrentía o por percolación profunda); wn^2 es un término de consumo de agua para el crecimiento de la vegetación y D_w . $\nabla^2 w$ es el término difusivo. En la ecuación que describe la dinámica de la vegetación se utiliza la misma función para describir el consumo de agua. El término $\mu.n$ describe una mortalidad lineal y D_n . $\nabla^2 n$ es el término de difusión de la vegetación.

Se observa que para un conjunto representativo de parámetros el sistema tiene dos soluciones homogéneas en el espacio que indican la existencia de zonas con vegetación y zonas desprovistas de ella. Sin embargo, una pequeña perturbación espacial desnivela el sistema y hace que la vegetación se acumule en ciertas zonas, siendo capaz de desequilibrar el reparto de agua al disparar un mecanismo de realimentación positiva implícito en el sistema. Dado que la tasa de crecimiento es cuadrática en la densidad y la mortalidad es lineal, una ligera acumulación de biomasa refuerza su crecimiento e inicia la formación de los patrones. Aunque no mostramos aquí los detalles, estos resultados pueden demostrarse analíticamente y son fácilmente deducibles de las ecuaciones. En realidad, el método de Turing no es más que una ampliación del concepto de linealización, básico en ecuaciones diferenciales, aplicado a modelos espaciales (Murray 1989; HilleRisLambers et al 2001). Simplificando las ecuaciones en torno al estado homogéneo se puede mostrar que perturbaciones básicas (tipo seno o coseno) hacen el sistema inestable, permitiendo además conocer la geometría y distancias características de los patrones que se forman.

De este modo un esquema sencillo pone de manifiesto los dos elementos básicos para explicar los patrones geométricos: la redistribución del agua de zonas desnudas a vegetadas y un mecanismo interno de facilitación que refuerza el crecimiento de la vegetación como consecuencia del un aumento de su propia densidad. Las diferentes modificaciones propuestas son variaciones sobre este esquema general. El balance hídrico puede hacerse más realista desdoblándolo en dos variables: densidad de agua infiltrada en el suelo y densidad de agua superficial, en un capa por encima del terreno. La rápida dinámica de ésta última explicaría la redistribución espacial hacia zonas vegetación, de más rápida absorción (HilleRisLambers et al 2001). También se han propuesto varios mecanismos de facilitación tales como una mortalidad dependiente de la densidad, mayor infiltración (o menor evaporación) de agua en terrenos vegetados debido al aumento de porosidad; incremento del alcance de las raíces con la biomasa para competir mejor por el agua circundante, etc. Todos estos procesos pueden ser eficazmente resumidos en un sencillo modelo integro-diferencial con una única variable para la vegetación $n(\vec{x}, t)$

$$\dot{n}(\vec{x},t) = -\mu . n(\vec{x},t) + \int_{\Omega} w(|\vec{x} - \dot{x}|) n(\dot{x},t) d\dot{x}$$

una mortalidad lineal y un crecimiento en función del entorno local de cada punto. Esta dependencia contempla los dos efectos principales: facilitación de la vegetación en el entorno

cercano (sin especificar el mecanismo) y competencia por el recurso a partir de una cierta distancia. Un análisis similar de la linearización espacial revela la formación de patrones espaciales regulares sólo con este esquema mínimo (D.Odorico et al 2006).

También se están proponiendo modelos con representaciones más completas y detalladas de los mecanismos. Gilad et al. (en preparación) plantean el modelo con tres variables (vegetación, agua superficial y agua subterránea) combinando términos difusivos e integrodiferenciales. Este modelo enfatiza la interacción entre los términos de facilitación inter-vegetación y la degradación del las zonas no vegetadas. En este modelo el crecimiento de cianobacterias en zonas desnudas forma una costra que impide la infiltración y refuerza la facilitación. El modelo así definido reproduce los patrones regulares de vegetación, permite caracterizar los perfiles espaciales de agua e identifica posibles causas de cambios bruscos e irrecuperables de la cobertura vegetal.

Otro enfoque posible es acudir a simulaciones mediante autómatas celulares que permiten una mayor versatilidad en el tipo de interacciones consideradas aunque restringiendo su formulación analítica. En este caso, los estudios se han centrado en la formación de bandas paralelas en zonas con pendiente. Los primeros han sido modelos muy simples de una única variable con estados discretos de suelo desnudo frente a ocupado (Thiery et al 1995; Dunkerley 1997). Mediante la representación de facilitación (celdas no vegetadas ceden agua pendiente abajo y vegetadas difunden agua a sus vecinas laterales) y competencia (las celdas vegetadas frenan el agua de escorrentía que no alcanza a las celdas pendiente abajo) se reproduce la formación de bandas y su dinámica. Por otro lado, el modelo de Esteban y Fairén (2006) incluye detalles de la dinámica de crecimiento de la vegetación y de la transferencia del agua que permite un análisis de la productividad del sistema y de su respuesta a la variabilidad de las precipitaciones anuales.

Aunque el mecanismo fundamental de formación de patrones parece ya identificado en los modelos mencionados, aún quedan muchos aspectos por cubrir. Particularmente crítico resulta la formulación de un modelo espacialmente explícito que incluya la dinámica del recurso hídrico y una fluctuación estocástica de las precipitaciones. Así, la característica fundamental de los climas áridos son la existencia de lluvias puntuales e intermitentes. Si bien existen modelos hidrológicos que estudian la distribución y variación de la humedad en el terreno (Porporato et al. 2002), el análisis de los efectos estocásticos de la precipitación sobre los patrones espaciales de la vegetación no ha sido suficientemente estudiado. Por otro lado, enfoques espacialmente explícitos para varias especies pueden contribuir a identificar los mecanismos de coexistencia, segregación y alternancia observados en comunidades semi-áridas.

3.5. Impacto de los patrones de la actividad humana sobre la Dinámica de Difusión de Información

Se estudia el impacto de los patrones de la actividad humana en la difusión de la información. Para ello nos encontramos con un virus experimento de correo electrónico que incluyó a 31 183 personas en los que hemos sido capaces de rastrear una pieza específica de información a través de la red social. Hemos encontrado que, contrariamente a los modelos tradicionales, la información viaja a un ritmo inesperadamente lento. Mediante el uso de un modelo de ramificación que describa con precisión el experimento, muestran que la gran heterogeneidad en el tiempo de respuesta es responsable de la dinámica lenta de información a nivel colectivo. Dada la generalidad de nuestros resultados, se discute la importancia implicaciones de este hallazgo dando el ejemplo de los fenómenos humanos colectivos dinámicos.

Modelado de fenómenos sociales como las nuevas dinámicas de la interacción de los individuos ha atraído recientemente una gran cantidad de actividad por los físicos estadísticos. Los ejemplos

3.5. IMPACTO DE LOS PATRONES DE LA ACTIVIDAD HUMANA SOBRE LA DINÁMICA DE DIFUSIÓN DE INFORMACIÓN

incluyen epidemias de propagación, la cooperación, la formación de opinión, dinámica cultural, la difusión de las innovaciones, etc. Todos ellos están determinados por la propagación manera los seres humanos o compartir información y por lo tanto dependen de los ritmos y patrones de actividad de los seres humanos. A pesar de su importancia, detallada los datos empíricos sobre cómo los seres humanos difundir una pieza específica de información son escasos o indirecto. La mayoría proviene de la comprensión epidemiológica modelos que se ejecutan en redes sociales empíricos o sintéticos. Estos modelos generalmente los patrones de abandono de actividad humana, suponiendo que el tiempo de respuesta τ_R , es decir, el tiempo que toma para que una persona vuelva a enviar la información, es homogénea o descrito por una distribución exponencial que conduce a una descripción de Poisson para los patrones de la actividad humana. La principal justificación de esta aproximación es que permite que las descripciones teóricas y computacionales a través de simples modelos de Markov. Sin embargo, la investigación reciente muestra que la actividad humana es mucho más heterogéneo que cuenta en total contradicción con la aproximación de Poisson. Por ejemplo, la actividad del correo electrónico, las frecuencias de mercado de comercio, las visitas de páginas Web, o la actividad en línea en los espacios sociales son todos descrito por las distribuciones de cola pesada o la ley de energía. Nosotros muestran cómo la gran heterogeneidad de la actividad humana ritmos controla la dinámica de difusión de la información y cuestionar la validez de los modelos actuales para describirlo.

El mismo tema fue considerado en la referencia (A. Vázquez et al., Phys. Rev. Lett. 98, 158702, 2007) donde los autores investigan el efecto de las distribuciones de cola pesada observado τ_E , el tiempo entre mensajes de correo electrónico consecutivos (el tiempo interevent), en comunicación por correo electrónico. Los autores proponen una relación entre τ_R y τ_E : El tiempo de respuesta se puede aproximar (de abajo) el tiempo transcurrido entre la recepción y el envío de mensajes de correo electrónico $\tau_R S$. Si los correos electrónicos entrantes llegan a veces al azar, el promedio τ_R viene dada por la solución de la paradoja del tiempo de espera en procesos de renovación $\hat{\tau}_R \cong \hat{\tau}_{RS} = \hat{\tau}_E/2(1 + \sigma_E^2/\hat{\tau}_E^2)$. La base de datos (J. P. Eckmann, E. Moses, and D. Sergi, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 101, 14 333, 2004) utilizado en la referencia da $\hat{\tau}_E \cong 1$ día y $\sigma_E \cong 3,3$ días , y entonces $\hat{\tau}_R \cong 6$ días. Así, mientras que la media interevent tiempo es de alrededor de un día, su heterogeneidad hace que el tiempo de respuesta mucho más grande y la información viaja más lenta de lo esperado. Sin embargo, esta es una mala aproximación τ_R desde que recibió un correo electrónico puede desencadenar medidas al respecto que se correlaciona la recepción y expedición eventos. De hecho, la misma base de datos utilizado en la referencia. contiene datos sobre los correos electrónicos entrantes y salientes de donde se puede obtener eso $\hat{\tau}_{RS} \cong 2,5$ horas, y luego la aproximación $\tau_R \cong \tau_{RS}$ utilizada en la referencia da lo contrario conclusión: la información debe viajar mucho más rápido que espera.

Este ejemplo pone de relieve una deficiencia importante de la los datos actualmente disponibles: la incapacidad de resolver la dinámica de un elemento de contenido específico a nivel de los individuos (D. Liben-Nowell and J. Kleinberg, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 105, 4633, 2008). Éste obliga a hacer inferencias acerca de la dinámica de transmisión de datos en línea, o sin el conocimiento de la naturaleza de la información transmitida, o de la población promedio de los resultados. En Para superar esta limitación, se realizó un gran experimento escala para medir la influencia de la actividad humana en la difusión de una pieza específica de información. Los suscriptores de un boletín en línea en 11 países europeos fueron recompensados por recomendarlo. La oferta difusión a través de correo electrónico propagación viral (S. Jurvetson and R. Draper, Viral Marketing, Netscape M-Files, 1997) el seguimiento en la cada paso. Publicidad en la Web impulsado 7.154 personas a iniciar cascadas recomendación (figura siguiente) que, impulsado por 2111 esparcidores de secundaria, creció hasta un total de 31 183 personas recibieron el mensaje, el 77% de ellos a través de mensajes de correo electrónico recomendación. El gráfico contiene la propagación 7188 cascadas de tamaños entre 2 y 146 nodos y diámetros de hasta 8 pasos de propagación.



Figura 3c: Cascada con 122 nodos y 6 pasos de propagación que se encuentran en los experimentos. Empieza de una semilla en el centro (negro) y crece por propagación a través de nodos viral (gris).

Aunque la infección y la propagación de mensajes pueden ser muy involucrados procesos, análisis a nivel de población describir la propagación viral en función de la base reproductiva R_0 número, es decir, el número promedio de casos secundarios generados por cada informado individual. Si $R_0 > 1$, la propagación alcanza el punto de inflexión donde la información llega a una fracción significativa de la población objetivo, pero si $R_0 < 1$, la propagación muere rápidamente. Secundaria esparcidores pasó el mensaje a un $\hat{r} = 2,96$ individuos en promedio. Sólo una fracción $\lambda = 0,0879$ de personas tratadas estaban infectados por los sujetos infectados $R_0 = \lambda \hat{r} \cong 0,26$ está por debajo del depósito punto. Mientras que R_0 es pequeño, la gran heterogeneidad en los valores individuales de $r y \lambda$ (ver fig.3.5) produjo un fuerte variación en el tamaño de la cascada que se encuentran en nuestros experimentos. Esta heterogeneidad no fue suficiente para mantener el difusión, y todas las cascadas se detuvo después de una multiplicación número finito de pasos recomendación. La campaña fue un éxito viral, sin embargo, como el número de personas por el virus se llegó a cuatro veces mayor que la de las semillas.

Una característica notable de las cascadas que se encuentran viral fue el la escasez de los bucles, triángulos, o caminos cerrados (figura anterior). Correo electrónico redundancia (es decir, la fracción de correos electrónicos enviados a las ya personas informadas) era sólo del 0,74% como cascadas se sobre todo en forma arbórea. Este hecho también ha sido encontrada en cascadas de recomendación de los minoristas en línea o la información cascadas en la blogosfera. Sin embargo, sociales las redes son localmente densa, y una gran parte de los enlaces conecta a los miembros de las comunidades o grupos internos anticipando una redundancia de correo electrónico más grande. Una posible explicación es que los difusores virales suponer que el grupo de donde llegó un mensaje que ya sabe y evitar esa comunidad, como se sugiere en la referencia de cartas en cadena. Esta característica de auto-evitando puede reducir el impacto en la información la difusión de la red social estructura local favor de gama media a las propiedades de la topología global.

De acuerdo con los estudios mencionados en la introducción, nuestras campañas de marketing viral muestran también una alta heterogeneidad en la τ_R tiempo de respuesta a nivel individual:

Los participantes reenviar el mensaje después de $\hat{\tau}_R = 1,5$ días en promedio, con una gran desviación estándar de $\sigma_{\tau_R} = 5,5$ días. Algunos de los participantes a enviar la invitación por correo

electrónico tanto como $\tau_R = 69$ días después de recibirlo. Nuestros datos son plenamente compatibles con una distribución logarítmica normal para la distribución de tiempos de respuesta $P(\tau_R)$. De ley de potencia o de distribución exponencial distribuciones sistemáticamente a lo largo y subestiman (respectivamente) la frecuencia de los tiempos de respuesta de gran tamaño (véase Fig. 3.5). Por otra parte, el tiempo de respuesta no muestra estadística correlación con el número de recomendaciones formuladas por los participantes (ver fig. 3.5). Así, el τ_R retraso en el envío de una mensaje y el número de recomendaciones enviadas resultado de la r de las decisiones aparentemente independientes.



Figura 3.5 (línea de color). Complementarias de distribución acumulada de la τ_R tiempo de respuesta en las campañas de marketing viral (círculos).

La línea continua muestra se ajusta a una distribución logarítmica normal con $\hat{\mu} = 5,547$ y $\hat{\sigma}^2 = 4,519$ (negro) y un exponencial distribución (rojo) y una distribución de ley de potencia (azul) con el exponente 1.48. Recuadro: Gráfico de dispersión de la serie de recomendaciones enviados por cada participante r_i frente a su tiempo de respuesta $\tau_{R,i}$ (puntos). La línea roja es un promedio móvil de r en función de la τ_R .

A nivel colectivo, nos encontramos con un comportamiento extraordinario de difusión de la información: Si i(t) es la fracción media (más de todas las cascadas) de reenvío de las personas informadas del mensaje en el tiempo t, su dinámica sigue un inesperadamente lento ritmo (ver fig. 3.6). Esto está en contraste con las tradicionales modelos epidemia donde la dinámica de i(t) en las cascadas es modelada por la ecuación de crecimiento

$$\frac{di}{dt} = \alpha_0 i(t) \Rightarrow i(t) \approx i(0)e^{\alpha_0 t}, (10)$$

donde $\alpha_0 = (R_0 - 1)/\hat{\tau}_R$ es la aproximación ingenua a la Parámetro de tipo malthusiano de la población. La ecuación (10) es la versión más simple de los modelos más complicados, tales como Bajo el modelo de difusión de innovaciones (E. Rogers, Diffusion of Innovations (Free Press, New York, 1995)) o el susceptibles infectados-retirado (SIR), modelo de la epidemia utilizados para la propagación modelo de información en las redes sociales. La ecuación (10) se basa en el supuesto de que la infección, o difusión de la información, sucede principalmente en torno a tiempo $\tau_R \cong \hat{\tau}_R$ y que las nuevas infecciones por individuos que han ya otros infectados es muy poco probable de $\tau_R >> \hat{\tau}_R$.



Figura 3.6:(línea de color). Promedio fracción de nuevos participantes como un función de la hora de inicio en cascada en nuestras campañas (círculos) en comparación con la predicción del modelo Bellman-Harris p(t) la distribución log-normal (línea negro) de la figura 3.5 y con p(t) exponencial de la misma media (rojo). La línea punteada es la aproximación asintótica (14) del modelo Bellman-Harris p(t) log-normal. Recuadro: El tiempo de evolución de la media en cascada tamaño (círculos) predijo con exactitud por el modelo para G(t) lognormal. En rojo es la predicción para exponencial G(t).

Desde $\hat{\tau}_R \cong 1,5$ días, la ecuación (10) implica que la mayoría de las infecciones (nuevas personas informadas) debe ocurrir durante los primeros pocos días. Sin embargo, se observa una fracción significativa de nuevas infecciones, incluso en la escala de tiempo de mes como se muestra en la Fig. 3.6. Por otra parte, la decadencia funcional de los nuevos infectados los individuos no pueden ser explicados por una disminución exponencial como (10) predice. Así, los modelos tradicionales de la epidemia no predecir la velocidad de la información y también la forma funcional de su dinámica.

Para explicar nuestros resultados, los modelos con una ramificación proceso que considera la heterogeneidad de la actividad. Dada la baja redundancia de correo electrónico, se considera sólo el crecimiento de forma de árbol cascadas. Sin embargo, esta aproximación captura la principales características de la dinámica de la difusión en redes sociales. Cada cascada empieza a partir de una semilla que inicia propagación con un número al azar de las recomendaciones cuyo promedio es \hat{r} . Tocado individuos pasan a un segundo separadores con una probabilidad λ propagar el mensaje más. El reenvío de la información ocurre una y otra vez τ , independiente de *r* y distribuido por *P*(τ). Este proceso es el conocido Bellman-Harris ramificación modelo donde la fracción media (más de todas las cascadas) de individuos activos en el tiempo *t* está dada por

$$i(t) = 1 - G(t) + R_0 \int_0^t i(t - \tau) P(\tau) d\tau, (11)$$

donde $G(t) = \int_0^t P(\tau) d\tau$ es la distribución acumulada función (CDF) de $P(\tau)$. La ecuación (11) no es markoviano, ya que el número promedio de casos se i(t) nuevo considerando taz en el tiempo t depende de la historia de las infecciones en los últimos $0 < \tau < t$. Soluciones explícitas de (11) no existen para $P(\tau)$ general y R_0 , pero si hay una solución de la ecuación implícita.

$$R_0 \int_0^\infty e^{-\alpha \tau} P(\tau) d\tau = 1, (12)$$

entonces el comportamiento asintótico de (11) viene dada por

$$i(t) \cong Ce^{\alpha \tau}, C = \frac{R_0 - 1}{\alpha_0 R_0^2 \int_0^\infty e^{-\alpha \tau} P(\tau) d\tau},$$
 (13)

Así, aunque la ecuación (11) no es markoviano, se comporta asintóticamente como las soluciones de los simples markoviano modelo (10) con α dada por la solución de (12). Esta aproximación general P(t) es exacta en el caso de la distribución exponencial sin memoria de las estadísticas

de Poisson: $P(\tau) = \frac{e^{\frac{\tau}{r_R}}}{\tau_R}$, la solución de (12) es $\alpha = \alpha_0$ y Ecuación (11) puede ser escrita en forma diferencial según la ecuación (10).

Sin embargo, para $R_0 < 1$ (es decir, $\alpha < 0$), la Ec. (12) tiene una solución para α sólo si decae p(t) lo suficientemente rápido, en concreto, más rápido que la distribución exponencial en el límite $t \to \infty$. Por lo tanto, modelos de crecimiento similares (10) o aproximaciones similares (13) no son válidos para una gran familia de distribuciones P(t) conocido como distribuciones subexponencial, es decir, aquellos en descomposición más lenta de exponencial cuando $t \to \infty$ Esta familia incluye importantes casos como el registro de lo normal, el poder-ley, o estirado distribución exponencial. En ese caso, el general asintótica comportamiento de la ecuación. (11) está controlada por la cola en lugar de la distribución MID

$$i(t) \approx \frac{1}{1 - R_0} [1 - G(t)], (14)$$

que pone de relieve el carácter no markoviano de las soluciones de la ecuación (11), ya que dependen de las personas cuyo tiempo de respuesta es la más larga. Las distribuciones utilizadas el modelo de la gran heterogeneidad de los tiempos de respuesta humana (ley de potencia, o log-normal) son miembros de esta clase de las distribuciones, y la ecuación (14) muestra el profundo impacto de gran heterogeneidad en los tiempos de respuesta: El muy funcional forma de la dependencia del tiempo ha cambiado, y la dinámica de la información no depende de el valor medio de la tiempo de respuesta, pero en la cola de la distribución, por lo tanto drástica ralentización de la circulación de la información. La Figura 3.4 muestra el acuerdo de huelga de la aproximación (14) con los datos obtenidos en nuestras campañas de asumir que $P(\tau)$ es dada por la distribución log-normal en la figura 3.5.

La disminución de la difusión de la información debido a la subexponencial naturaleza de los tiempos de respuesta humana puede explicar la prevalencia de algunos rumores, campañas virales, cartas en cadena, o de virus informáticos como se sugiere (A. Va´zquez et al., Phys. Rev. Lett. 98, 158702, 2007). Por ejemplo, si asumimos que las semillas son inicialmente N_s infectados y fijar el final de la difusión cuando la fracción de desintegra las personas infectadas con $i(t_f) \approx i/N_s$, entonces el Aproximación de Poisson (10) da $t_f \cong \alpha_0^{-1} lnN_s$, mientras que en el caso log-normal [ecuación (11)] nos $t_f \approx e^{\sqrt{blnN_s}}$, donde *b* es independiente de R_0 . Para grandes N_s suficiente, hay una enorme diferencia entre ambas estimaciones. Por ejemplo, si $N_s = 10^4$ individuos (un valor grande, pero moderada), $t_f = 17$ días (con $R_0 = 0,26$) para los modelos de Poisson, mientras que $t_f = 1$ año si $P(\tau)$ es log-normal.

3.5. IMPACTO DE LOS PATRONES DE LA ACTIVIDAD HUMANA SOBRE LA DINÁMICA DE DIFUSIÓN DE INFORMACIÓN



Figura 3.7:(línea de color). Valor de la inversa de la maltusiana parámetro (en minutos) en función de R_0 para $R_0 \ge 1$. La negro por debajo de la línea es el resultado dado por la ecuación. (12), donde G(t) es la de distribución provista log-normal y corresponde la línea recta en rojo a G(t) una distribución exponencial con el mismo $\hat{\tau}_R = 1,5$ días.

Curiosamente, la gran heterogeneidad que se encuentran en los humanos tiempo de respuesta tiene el efecto contrario sobre la epidemia umbral ($R_0 > 1$) en la ecuación (12) tiene una solución α mucho mayor que α_0 (Fig. 3.7). En este caso el capitán-Harris modelo describe el importante crecimiento inicial exponencial de la epidemia se propague, y vemos que difundir información más rápido de lo esperado con ser incluso un orden de magnitud mayor que α_0 . Por ejemplo, aunque el promedio tiempo de respuesta es del orden del día en el correo electrónico típica cambio, si tiene éxito, la difusión de información a través correo electrónico se producirá en cuestión de horas. El cambio de comportamiento por encima y por debajo del punto de inflexión se debe a el diferente impacto sobre la dinámica de las personas con valores pequeños o grandes de τ_R : Mientras que para $R_0 < 1$ el número de decae personas infectadas en el tiempo hasta un punto donde un sola persona puede detener o reanudar un crecimiento viral en cascada, para $R_0 > 1$, la dinámica se rige por los individuos con un escaso valor de τ_R , más abundantes que los de $\tau_R \cong \hat{\tau}_R$, lo que acelera la difusión.

En resumen, hemos demostrado que la gran heterogeneidad en la actividad humana controla la difusión de información. Su impacto no es meramente cuantitativos (una renormalización simple información de la velocidad), sino que cambia cualitativamente la dinámica de difusión de la información a nivel colectivo. En concreto, por debajo del punto de inflexión, el concepto mismo de información la velocidad se convierte en mal definido como la información avanza en tiempo logarítmico. Este efecto es universal porque que no depende de los detalles específicos de la actividad humana patrones, sino en el carácter subexponencial de su distribución. Dado que la transmisión más información y el intercambio en las redes sociales tiene un alcance limitado, por lo que ocurre a continuación el punto de inflexión, nuestros resultados están obligados a afectar la forma entendemos y modelo de los fenómenos sociales, como el rumor difusión, cooperación, formación de la opinión, la dinámica cultural, difusión de las innovaciones, etc De hecho, hemos demostrado que la ecuación más común y simple para epidemia dinámica de [la ecuación de crecimiento (10)] no se puede utilizar para el modelo de difusión de la información dada la importancia de la heterogeneidad en este proceso dinámico. Puesto que esta ecuación es por lo general el primer elemento en más complicados y los modelos más populares (por ejemplo, el modelo de Bass, el SIR/susceptible- modelos infectados susceptibles, etc), esperamos los modelos de sufrir los mismos problemas que se encuentran aquí. Por último, ya que no Poisson (subexponencial) distribuciones también caracterizan los ritmos individuales y la actividad los patrones de otras acciones humanas, esperamos una influencia similar de la heterogeneidad en el correspondiente dinámica de los comportamientos colectivos. Esperamos que nuestro trabajo se desencadenar nuevas investigaciones sobre el impacto de que la heterogeneidad en la manera de modelar y comprender la dinámica humana. CAPÍTULO 4.

SIMULACIÓN DE LOS MODELOS DE OSCILACIÓN Y DE. REACCIÓN-DIFUSIÓN.

4.1. Simulación del modelo de oscilación



Figura 4.1: Simulador del movimiento de los átomos

Esta demostración simula el movimiento de los "átomos" vibrando alrededor de una fuente llena de vida. Podrían, por ejemplo, representan oscilaciones radiales longitudinales de las ondas sonoras. La fuente oscila sinusoidalmente con una frecuencia elegida y luego el movimiento de los siete círculos de átomos sigue la pulsación de la bola azul con un retraso de fase creciente. Durante un ciclo, la pulsación se produce a una frecuencia elegida (1 a 10 ciclos / seg), con aumento y disminución de la amplitud sinusoidal. El volumen de la bola azul y la posición de los átomos exteriores se pueden leer en el gráfico superior.

También es posible cambiar la inercia del medio por el aumento de la masa de los átomos, lo que cambia la fase de los siete círculos grises. El gráfico superior muestra la relación entre la inercia y la

fase. Si el retraso de fase es pequeño, las frecuencias de todos los átomos que vibran permanecen esencialmente sin cambios.

Sus amplitudes pueden cambiar si el factor de amortiguamiento es mayor. La posición de extrema derecha de los resultados de control deslizante en la amplitud de cero (no hay movimiento alguno) en el anillo exterior.

"Outgoing Waves Generated by a Pulsating Source" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/OutgoingWavesGenerated ByAPulsatingSource/

4.2. Simulación del modelo de reacción-difusión

Esta demostración muestra la concentración de químicos en estado estacionario alrededor y dentro de un reactor químico esférico que consume la sustancia química al llegar a la esfera a través de la difusión. La "vista transversal" muestra la concentración en un plano a través del centro de la esfera, con la superficie de la esfera indicada por el círculo negro. La "visión radial" compara la concentración quimica con una esfera del mismo tamaño que la absorbe por completo, con la zona gris que indica el interior de la esfera. El porcentaje de velocidad de reacción total es la velocidad a la que el reactor consume la sustancia química en relación con la tasa de una esfera totalmente absorbente.



Figura 4.2: Simulación de la concentración de químicos en estado estacionario

La concentración c(r) a la distancia r desde el centro del reactor esférico satisface la ecuación de difusión $D \bigtriangledown^2 c(r) = \gamma c(r)$ si $r \le a$, y 0 si r > a, en coordenadas esféricas, donde D es el coeficiente de difusión, a es el radio del reactor esférico, y γ es el coeficiente de velocidad de reacción. La esfera está en un fluido sin límites. En las unidades se utiliza aquí, la concentración de los enfoques c = 1 lejos de la esfera.

La reacción dentro de la esfera es cinética de primer orden, es decir, la velocidad de reacción es

proporcional a la concentración: el número de moléculas del líquido eliminado por unidad de tiempo y por unidad de volumen es $\gamma c(r)$ en una posición con la distancia $r \leq a$ desde el centro de la esfera. La eliminación de la sustancia química en el reactor crea un gradiente de concentración y por lo tanto la difusión de la química del líquido que rodea a la esfera.

En comparación, la esfera absorbe totalmente satisfaciendo $D \nabla^2 c(r) = 0$ para r > a condición de frontera con c(a) = 0.

La esfera absorbe por completo con la máxima velocidad posible, los productos químicos de difusión. El reactor se acerca a ese máximo por el consumo de moléculas que llegan antes de que tengan la oportunidad de difundirse de nuevo fuera del reactor. Lograr esto requiere la distancia típica de una molécula en el reactor que se difunde antes de ser consumido, $sqrtD/\gamma$, a ser pequeños en comparación con el radio de la esfera, *a*. En este caso, la mayor parte del consumo se produce cerca de la superficie de la esfera.

"Diffusion to a Spherical Reactor" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/DiffusionToASphericalReactor/

CAPÍTULO 5

FRACTALES Y SU RELACIÓN CUALITATIVA CON LOS MODELOS DE OSCILACIÓN Y REACCIÓN-DIFUSIÓN.

Así como *Richard Bentley* llamó la atención sobre la relación existente entre los objetos regulares y la representación de la naturaleza, nosotros llamamos la atención sobre la relación que hay entre estos objetos matemáticos que conforman la geometría de la Teoría del Caos y los modelos de oscilación y de reacción-difusión. Una relación de tipo cualitativo, que exprese de acuerdo a su comportamiento un estado de fase de la iteración que construye el fractal.

Para realizar dicha analogía comportamental es necesario tener en cuenta que se hará con fractales no lineales, recordemos que estos se definen como aquel que se obtiene a partir de iterar una función no lineal definida en el cuerpo de los números complejos. Y lo más importante es que estos proyectan colores y formas al momento de iterarse y son estos los que permitirán relacionar el fractal con el estado del sistema (modelos).

De acuerdo con la definición de fractal no lineal, podemos intuir que la geometría fractal es la herramienta más interesante a la hora de modelizar situaciones reales de gran complejidad originadas por múltiples repeticiones de procesos muy elementales, pues como hemos visto, los fractales nos ofrecen la posibilidad de construir estructuras complicadas a través de procesos simples. De esta manera, es corriente representar de forma simbólica la geometría fractal como un puente que conecta el orden y el caos, utilizando como instrumento los procesos infinitos iterativos.

5.1. Un fractal para el modelo de oscilación

Consideremos una presencia observada de cierta cantidad de mosquitos en un espacio determinado que se comporta de la siguiente manera: $x_{k+i} \rightarrow \sin x_k (1 + \frac{\lambda}{1000}) y_k; y_{k+1} \rightarrow x_k$. Dicha iteración se da a través del tiempo representado por cada fase de la ecuación de transferencia. Donde λ resulta de relacionar las características climatológicas de régimen de precipitación de lluvias y la temperatura ambiente. De esta manera el mapa del hombre de jengibre nos proporciona un grafico en el cual evidenciamos la evolución del modelo.

Esta parcela muestra órbitas del mapa interactivo de dos dimensiones (una variación del mapa Gingerbreadman): $x_{k+i} \rightarrow \sin x_k (1 + \frac{\lambda}{1000}) y_k; y_{k+1} \rightarrow x_k$. Las órbitas son generados por la iteración el mapa 3000 veces utilizando diferentes puntos iniciales. Se trazan seis órbitas inicialmente, a partir de las posiciones marcadas por el localizador de objetos. Puede arrastrar estos puntos iniciales

o agregar y/o eliminar otras nuevas dentro de la parcela. Cada órbita es de color diferente y los colores se repiten cíclicamente.

El fractal del mapa de gingerbreadman y su relación con el endemismo de una población de mosquitos en un habitad: el mapa nos muestran orbitas de colores diferentes, donde cada orbita representa una porción de la presencia observada de mosquitos. Se puede observa que en la evolución del mapa las orbitas oscilan a través del tiempo, es decir, aparecen aumentan y disminuyen, debido a que el parámetro λ (relación entre el régimen de precipitación de lluvias y la temperatura ambiente) cambia gradualmente debido a factores ambientales. Análogamente cuando las condiciones ambientales (parámetro λ) sean favorables para la especie endémica se evidenciara un incremento en la densidad poblacional de los mosquitos.

Variations of the Gingerbreadman Map (Las variaciones de la Hoja de Gingerbreadman)



Figura 5.1: Simulador hombre gengibre

RELATED LINKS

Iterated Map (Wolfram MathWorld) Gingerbreadman Map (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"Variations of the Gingerbreadman Map" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/VariationsOfTheGingerbreadmanMap/ Contributed by: Erik Mahieu

5.2. fractal para la reacción-difusión

Mandelbrot nos representa la difusión y Julia nos representa la reacción dependiendo del valor de *c* complejo podemos decir si el sistema es Homogéneo (excitable, oscilante, biestable) o está en desequilibrio. El sistema es excitable cuando, los puntos *c* en Mandelbrot me originan un conjunto de Julia conexo abierto; cuando en Julia se origina un conjunto convexo, quiere decir que el sistema es oscilante; y por ultimo si en Julia se origina una nube de puntos observamos que el sistema está

en desequilibrio, es decir, cuando hay mayor reacción que difusión o caso contrario cuando hay mayor difusión que reacción.

El fractal de Julia y Mandelbrot y su relación con los ecosistemas áridos: en un ecosistema árido la difusión del agua no puede ser homogénea porque no sería suficiente para mantener una cobertura homogénea del espacio.

Los puntos c representan la relación entre la dinámica y el consumo de agua en un ecosistema árido. Las formas tomadas por el conjunto de Julia nos muestra la intensidad de la reacción difusión, de acuerdo a los valores complejos c que se toman en el conjunto de Mandelbrot. Los puntos c (complejos) a la curva cóncava de Mandelbrot representan una mayor difusión, lo que implica una representación en nubes de puntos que se subdividen cada vez más en el conjunto de Julia. Análogamente los puntos c del interior de la curva cóncava de Mandelbrot representan una mayor reacción lo que implica en julia una curva cóncava.

Julia Sets and the Mandelbrot Set (Conjunto de Julia y el Conjunto de Mandelbrot)



Figura 5.2: sistema excitable



Figura 5.3: sistema oscilante

Cada conjunto de Julia de la derecha corresponde a un polinomio de segundo grado de la forma $f(z) = z^2 + c$. Puede utilizar el localizador para elegir el número complejo c de la imagen del conjunto de Mandelbrot a la izquierda. El conjunto de Julia será un conjunto conectado precisamente cuando c se encuentra en el conjunto de Mandelbrot.

RELATED LINKS

Fractal (Wolfram MathWorld) Julia Set (Wolfram MathWorld) Mandelbrot Set (Wolfram MathWorld)



Figura 5.4: sistema en desequilibrio

PERMANENT CITATION

"Julia Sets and the Mandelbrot Set" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/JuliaSetsAndTheMandelbrotSet/ Contributed by: Mark McClure
ANEXOS

6.1. Simuladores

6.1.1. El movimiento browniano en 2D y la ecuación de Fokker-Planck

Mostramos el movimiento browniano de un conjunto en evolución de las partículas y la densidad de probabilidad correspondiente. La densidad de probabilidad es una solución de la ecuación de Fokker-Planck, que aquí se reduce a una deriva de difusión de la ecuación diferencial parcial. El centro de masa de la partícula se mueve de distribución con una velocidad de desplazamiento constante, mientras que la difusión anisotrópica se determina por los valores principales de la difusión en la matriz, a lo largo de los ejes cartesianos.

SNAPSHOTS



Figura 6.1: Estado uno

El movimiento browniano de una partícula se describe mediante una ecuación diferencial estocástica $dX_t = \mu dt + \sigma dW_t$, donde X_t son las posiciones de las partículas en el espacio R^n , μ es la velocidad de derivación, σ es una matriz $n \ge n \ge dW_T$ representa un proceso normal de dimensiones Wiener. La ecuación de Fokker-Planck (también llamada ecuación de Kolmogorov hacia adelante) describe la evolución temporal de la densidad de probabilidad $p(X_t)$:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \nabla (\mu p) + \nabla (D \nabla p),$$



Figura 6.2: Estado dos





donde $D = \frac{1}{2}\sigma^{T+1}$

Si μ y *D* son constantes, la ecuación de Fokker-Planck se reduce a una ecuación de la deriva de difusión que se puede resolver analíticamente. Las soluciones fundamentales son la distribución de Gauss, que se deriva con respecto el tiempo.

Esta demostración muestra el movimiento browniano de un número de partículas independientes en 2*D* superpuestos a la solución de la ecuación de Fokker-Planck. Para simplificar los controles, los ejes principales de la matriz *D* son siempre los ejes horizontales y verticales de la pantalla.

RELATED LINKS

Wiener Process (Wolfram MathWorld) Random Walk2Dimensional (Wolfram MathWorld) Heat Conduction Equation (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"Brownian Motion in 2D and the Fokker-Planck Equation" from the Wolfram Demonstrations Project

http://demonstrations.wolfram.com/BrownianMotionIn2DAndTheFokker PlanckEquation/ Contributed by: Alejandro Luque Estepa

6.1.2. Ecosistemas del depredador-presa: Una simulación en tiempo real basado en agentes

Esta demostración simula la dinámica de los depredadores (zorros, en color naranja) y presas (conejos, de color morado) en un hábitat limitado 2D cuadrados. Un individuo de cada especie sé simula como una partícula que se mueve en un paseo aleatorio. La condición inicial es tal que hay 100 partículas distribuidas aleatoriamente en el espacio, el 10% de los cuales son los zorros y los conejos el resto. Una partícula de conejo puede replicarse en una determinada tasa de crecimiento. Una partícula zorro tiene que comer (es decir, chocan en) una partícula de conejo con el fin de replicarse, y morirá si no come cualquier partícula de conejo por un período de tiempo determinado. La población máxima de cada especie está limitada a 500. Dependiendo de la configuración de los parámetros, este ecosistema muestra varios comportamientos distintos, incluyendo la extinción de los zorros (o de ambas especies), la oscilación de las poblaciones, y las ondas espaciales de los zorros persiguiendo grupos de conejos. Usted puede detener y reiniciar la simulación en tiempo real utilizando la *simulación de ejecución* casilla de verificación **SNAPSHOTS**



Figura 6.4: Estado uno



Figura 6.5: Estado dos



Figura 6.6: Estado tres

Éste modelo obedece a las ecuaciones de Lotka-Volterra

RELATED LINKS

Lotka-Volterra Equations (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"Predator-Prey Ecosystem: A Real-Time Agent-Based Simulation" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/PredatorPreyEcosystemARealTimeAgent BasedSimulation/ Contributed by: Hiroki Sayama

6.1.3. Depredador-Presa dinámica con el tipo de respuesta funcional Dos

Estable ciclos depredador-presa que son predichos por las ecuaciones simplificadas de Lokta-Volterra, pero si se añade realismo biológico, la dinámica a menudo se convierten en oscilaciones amortiguadas o incluso amortiguación monótona.

Esta demostración muestra el tipo de respuesta funcional dos para el depredador y el crecimiento theta-logístico para la presa. Ciclos estables límite sólo pueden ocurrir si, como una condición necesaria pero no suficiente de la isoclina presa tiene un máximo (local) y su modo está en la densidad de la presa por encima de su punto de cruce con la isoclina depredador.

La dinámica de las interacciones predador-presa pueden predecirse a partir de las isoclinas de crecimiento cero de los depredadores y presas. Estas isoclinas se muestran como líneas rojas y verdes en la figura de la derecha. Las densidades de presa y depredador se miden en relación con la capacidad de carga de la presa (es decir, k = 1 en el modelo). El sencillo modelo de Lotka-Volterra con sus ciclos límite estables se aproxima mediante el establecimiento de *manipulación* del tiempo, la competencia entre los depredadores a cero y la densidad de la presa con dependencia al máximo (Control 1). sea $\theta = 1$ el marco que lleva el crecimiento logístico. Si se utiliza una dependencia de la densidad real (Control 2) o se añade la competencia entre los depredadores (Controles de 3 y 4), se observa a continuación, que las oscilaciones se amortiguan. Un tiempo de tramitación distinto de cero (Control 5) implica que la tasa de consumo del depredador depende de la densidad de las presas en función del tipo de Hollings y de respuesta funcional dos. Esto puede tener un fuerte efecto estabilizador que lleva a amortiguación monotónica (Control 6). Con



Figura 6.7: simulador depredador - presa

la configuración de otros parámetros del punto de cruce de las isoclinas se puede desplazar a los valores por debajo de la presa el modo de la isoclina presa (Control 7 con oscilación amortiguada), por lo que los ciclos estables de carrera (Control 8) pueden ocurrir.

Algunos consejos:

¡Atención! Algunas combinaciones de parámetros puede ser que necesiten un tiempo de cálculo considerable! Los vectores en el plano de fase se puede quitar o poner de tamaño reducido (a escala). Si la ampliación automática de los ejes está desactivada, entonces los ejes longitudes están fijados a 1, 1 para la presa y 0,25 para el depredador. Puede cambiar los valores de partida para el depredador y la presa de forma interactiva con el localizador amarillo. Haga clic en el centro del localizador y cambie su posición con cuidado. Los valores mínimos de partida son 0,00001 y los valores máximos de partida son de 1.5 (o son iguales a las longitudes de los ejes, si la escala automática está desactivada).

RELATED LINKS

Predator-Prey Equations (Wolfram Demonstrations Project)

PERMANENT CITATION

"Predator-Prey Dynamics with Type-Two Functional Response" from the Wolfram Demonstrations Project

http://demonstrations.wolfram.com/PredatorPreyDynamicsWithTypeTwo FunctionalResponse/ Contributed by: Wilfried Gabriel

6.1.4. Caos y orden en el péndulo amortiguado forzado en un plano

Sistemas físicos aparentemente simples a menudo tienen un comportamiento muy complejo, como es el caso del péndulo amortiguado forzado en un plano, que puede tener un comportamiento caótico o no caótico. Para mostrar esto, esta demostración se muestra en un gráfico las trayectorias distintas para distintas condiciones iniciales restringido a una pequeña zona.

En muchos casos, todas las trayectorias tienen la misma forma o tiene una forma regular, en otros casos el comportamiento es caótico, y no es difícil ver la duplicación de periodo en el gráfico.



Figura 6.8: Simulador péndulo amortiguado

PERMANENT CITATION

"Chaos and Order in the Damped Forced Pendulum in a Plane" from the Wolfram Demonstrations Project

http://demonstrations.wolfram.com/ChaosAndOrderInTheDampedForced PendulumInAPlane/ Contributed by: Francisco Javier Sanchez Chapado

6.1.5. Oscilador forzado amortiguado

Esta demostración muestra el movimiento de un amortiguado impulsado sistema masa-resorte, así como un gráfico de la solución.

RELATED LINKS

Damped Simple Harmonic Motion (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"Driven Damped Oscillator" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/DrivenDampedOscillator/ Contributed by: Mark Robertson-Tessi

6.1.6. La reacción idealizada Belousov-Zhabotinsky

Esta demostración muestra una versión idealizada de la reacción Belousov-Zhabotinsky implementado por medio de dos dimensiones, totalitaria autómata celular.

			0
initial position			
spring constant	🖽 3.		
damping friction	-0 = 0.	5	
mass			
forcing amplitude	= 0.		
forcing frequency			
run			
time interval			
		$2.5 x''(t) + 0.65 x'(t) + 3.1 x(t) = 0.7 \cos(2.4 t)$	
		x(t)	
		1.0	
		_1.0 V	

Figura 6.9: Simulador del oscilador forzado amortiguado



Figura 6.10: simulados de la reacción BZ

NKS puede describir la auto-organización del complejo químico y biológico en estructuras espaciales. A veces algunas de estas estructuras pueden compartir el mismo patrón. Por ejemplo, la espiral de las ondas estudiadas en el pasado por Arthur Winfree y otros. Son típicos de muchas reacciones químicas, así como en las colonias de moho de fango. Este patrón también es típico de la ameba Dictyostelium discoideum, en el que las estructuras en espiral surgen de los movimientos de las amebas en respuesta a las ondas de propagación de la AMPC

En esta demostración, el patrón de Belousov-Zhabotinsky reacción química se lleva a cabo a través de dos dimensiones autómata celular totalitario. Esta demostración utiliza un rango de 1 a 20 colores totalitario autómata celular con la regla número 1350851716507335422, pero un gran número de reglas en torno a éste producen patrones similares.

Observando el patrón de formación, dos estructuras espaciales diferentes pueden surgir: ondas concéntricas y ondas espirales. Los dos patrones diferentes dependen de las condiciones iniciales y representan un claro ejemplo de los múltiples modos de auto-organización.

RELATED LINKS

Totalistic Cellular Automaton (Wolfram MathWorld) Implications for Everyday Systems (NKS|Online)

PERMANENT CITATION

"Idealized Belousov-Zhabotinsky Reaction" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/IdealizedBelousovZhabotinskyReaction/ Contributed by: Luca Zammataro

6.1.7. Pendulo simple

El movimiento de un péndulo simple que cae sin velocidad inicial depende no sólo de la altura inicial, sin embargo para las oscilaciones de pequeña amplitud, el periodo es sustancialmente constante. En esta animación, podemos variar la posición inicial. Del período (calculado por una fórmula complicada) se muestra. El gráfico en color es la hodógrafa, una cifra de referencia de la posición de la particula-velocidad. A su izquierda está la curva correspondiente a la posición particular elegida.



Figura 6.11: simulador péndulo simple

El período de pequeñas oscilaciones, cerca de $2\pi = 6,2831...$ Para los pequeños valores iniciales, podemos ver un período cerca de eso. Sin embargo, cuando el ángulo inicial está cerca de $\pi(3,14)$ se extiende indefinidamente el período.

RELATED LINKS

Pendulum (ScienceWorld)

PERMANENT CITATION

"Pendule simple (French)" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/PenduleSimpleFrench/ Contributed by: Emmanuel Amiot

6.1.8. Simulación de un modelo de gas a presión simple

Este modelo es simple de entender, la presión del gas considera el gas como un conjunto de moléculas independientes rebotando dentro de un contenedor y el recuento de la frecuencia de las colisiones en las paredes del contenedor. La presión, es entonces, igual a la fuerza por unidad de área P = F / A. Un mayor número de impulsos discretos de fuerza puede ser como promedio durante un tiempo de observación para dar una presión aparentemente constante.



Figura 6.12: Simulador del modelo de gas a presión simple

Partículas de liberación de gas al aumentar el "número de átomos" de barra de desplazamiento o haciendo clic en el cuadro, y luego ver el gráfico de presión que registra los impactos. El aumento de la "medición del tiempo" permite hacer más suaves cuentas a expensas de la medida menos sensible.

Según lo predicho por la ley del gas ideal y la Ley de Boyle, la presión se puede aumentar mediante la reducción del tamaño del contenedor o por el aumento del número de moléculas o la temperatura (velocidad de los átomos).

La ley de los estados de gases ideales:

$$PV = nRT$$

donde P es la presión, V es el volumen, n es la cantidad de gas, R es la constante de los gases, y T es la temperatura del gas.

La presión puede ser definida como P = F/A, donde F es la fuerza aplicada por el gas y A es el área de la superficie. En esta analogía en dos dimensiones, la presión se toma como F/L, donde L es la longitud.

RELATED LINKS

Ideal Gas Law (ScienceWorld) Boyle's Law (ScienceWorld) Robert Boyle (ScienceWorld) Benoît Paul Émile Clapeyron (ScienceWorld)

PERMANENT CITATION

"Simulation of a Simple Gas Pressure Model" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/SimulationOfASimpleGasPressureModel/ Contributed by: Jon McLoone

6.1.9. El péndulo no lineal amortiguado

Los gráficos muestran el movimiento de un oscilador armónico con amortiguamiento, en el espacio de fase a la izquierda y en función del tiempo a la derecha, con la posición del péndulo en la esquina superior derecha. La ecuación de movimiento es $\theta''(t) + \gamma]\theta'(t) + \omega_0^2 \sin \theta(t) = 0$, donde el Ω_0 es la frecuencia natural y γ es la constante de amortiguamiento. Esta ecuación no toma la forma de la aproximación *sin* habitual sin $\theta \approx \theta$.



Figura 6.13: simulador péndulo no lineal amortiguado

Se puede observar el análogo no lineal de subamortiguamiento y sobreamortiguamiento. La ecuación de segundo orden puede ser resuelta mediante su división en dos ecuaciones de primer orden.

RELATED LINKS

Simple Harmonic Oscillator (ScienceWorld) Damped Simple Harmonic Motion (Wolfram MathWorld) Damped Simple Harmonic Motion–Underdamping (Wolfram MathWorld) Damped Simple Harmonic Motion–Critical Damping (Wolfram MathWorld) Damped Simple Harmonic Motion–Overdamping (Wolfram MathWorld) Phase Space Trajectory (ScienceWorld)

PERMANENT CITATION

"The Damped Nonlinear Pendulum" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/TheDampedNonlinearPendulum/ Contributed by: Enrique Zeleny

6.1.10. El atractor de Rossler

El atractor de Rossler es un tipo simple de un sistema dinámico con un comportamiento interesante. Usted puede variar los parámetros de las constantes *a*, *b*, *c* en el tiempo.

El sistema se define por:



Figura 6.14: Simulador del atractor de Rossler

$$\frac{dx}{dt} = -(y+z),$$
$$\frac{dy}{dt} = x + ay,$$
$$\frac{dz}{dt} = b + xz - cz.$$

RELATED LINKS

Rossler Attractor (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"The Rossler Attractor" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/TheRosslerAttractor/ Contributed by: Daniel de Souza Carvalho Based on a program by: Eric W. Weisstein

6.1.11. Trayectoria de un oscilador armónico en el espacio de fase

Se puede observar cómo la trayectoria de un oscilador armónico en el espacio de fase se desarrolla en el tiempo y la forma en que depende de los valores característicos del oscilador: la amplitud A, la frecuencia f, y la constante de amortiguamiento δ . Además, la energía E en función del tiempo t se muestra.

El espacio de fase es un espacio de dos dimensiones extendido por las variables x y p, el desplazamiento y el impulso del objeto. Debido a que el movimiento armónico simple es periódico, su trayectoria es una curva cerrada, una elipse. En esta demostración, el eje p es escalado por lo que la elipse se muestra como un círculo si la amplitud se ajusta a su valor máximo. El área de la elipse es igual al producto de la energía y la duración del ciclo del oscilador, por lo que en caso de pérdida de energía debido a la amortiguación de la elipse se convierte en una espiral logarítmica.

Los valores mostrados se basan en los valores de los parámetros en sus unidades del SI y la masa del oscilador *m* es de 1kg.





RELATED LINKS

Damped Simple Harmonic Motion (Wolfram MathWorld)

PERMANENT CITATION

"Trajectory of a Harmonic Oscillator in Phase Space" from the Wolfram Demonstrations Project http://demonstrations.wolfram.com/TrajectoryOfAHarmonicOscillatorInPhase Space/

Contributed by: Hans-Joachim Domke

6.2. Ecuaciones reacción-difusión en la Genética Poblacional

Consideremos una población de individuos en donde cada uno porta dos genes, digamos a y A, así, la población se divide en tres genotipos aa, aA y AA. Sea H el hábitat donde vive la población y sean $U_i(x, t)$, i = 1, 2, 3, las densidades de población de *aa*, *aA* y *AA* respectivamente. Supongamos que la población se cruza de manera aleatoria con una tasa de nacimiento r y que la población se mueve con una constante de difusión D. También suponemos que las tasas de muerte dependen de los genotipos y los denotamos respectivamente con $t_i = 1, 2, 3$. Bajo estas condiciones las densidades U_i satisfacen el sistema

$$(U_i)_t - \bigvee (D_i \bigvee U_i) = f_i(x, t, U_1, U_2, U_3)$$

Ecuaciones reacción-difusión en la Dispersión de mamíferos 6.3.

Modelos espaciales para la dispersión de mamíferos en ecología vienen desde Skellam, quien modeló la expansión de la población de muskrats (roedores acuáticos) en Europa. Skellam encontró una relación lineal entre la raíz cuadrada del área habitada por los muskrats y el tiempo, usando un modelo de dos dimensiones con dispersión aleatoria y crecimiento exponencial de



Figura 6.16: reacción difusión de genes

la población en coordenadas polares. Suponiendo que la dispersión se da por igual en todas direcciones (i.e. es isotropica), y que el crecimiento de la población es proporcional a la densidad poblacionales, el modelo es:



Figura 6.17: Dispersión de mamíferos.

6.4. Modelo de Gierer-Meinhardt.

El modelo de Gierer-Meinhardt es un modelo fenomenológico de reacción cinética en el que una de las sustancias químicas, el activador, inicia la producción de la segunda sustancia, el inhibidor, que a su vez detiene la producción del activador. En su forma adimensional, el modelo está dado por las siguientes ecuaciones

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla u + \gamma (a - bu + \frac{u^2}{v(1 + ku^2)})$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = d \nabla v + \gamma (u^2 - v)$$

En las ecuaciones u es la sustancia activadora y v es la sustancia inhibidora. Las constantes a, b, d y γ son todas parámetros positivos adimensionales y k es una medida de la concentración de saturación. El término $\frac{\partial u}{\partial t}$ al igual que $\frac{\partial v}{\partial t}$ representa flujo, ∇u y $d \nabla v^2$ representa difusión, a y u^2 representa producción, bu y v representa consumo. En la primer ecuación, el término $\frac{u^2}{v(1+ku^2)}$ representa tanto autocatálisis en u con saturación para altos valores de concentración, como inhibición de u mediante la producción de v.

El modelo descrito por las ecuaciones fue implementado en el dominio unidimensional [0,1] utilizando 300 elementos cuadráticos lagrangianos y 601 nodos. La figura muestra los resultados para cuatro diferentes modos de vibración de la solución. En todos los casos a = 0,1, b = 1,0 y d = 72. Las condiciones de flujo en el contorno se consideran iguales a cero (flujo nulo). La condición inicial corresponde a una perturbación del 5% alrededor del estado temporal estable. Se usaron 100 iteraciones con pasos de tiempo $\Delta = 0,01$ en todas las simulaciones.



Figura 6.18: Solución del modelo de Gierer-Meinhardt. a) $\gamma = 70$, b) $\gamma = 270$, c) $\gamma = 650$, d) $\gamma = 1,100$.

Los resultados muestran la formación del patrón espacial en cuatro diferentes modos de vibración de acuerdo con los parámetros seleccionados. Estas variaciones del patrón demuestran la dependencia del modelo con respecto a sus parámetros. Los resultados obtenidos concuerdan con los reportados por otros autores.

6.5. Modelo de Schnakenberg.

El modelo de Schnakenberg es ampliamente difundido por ser uno de los modelos de reaccióndifusión más sencillo y utilizado en morfogénesis. Este modelo determina el comportamiento de un químico activador u en presencia de un químico inhibidor v. En su forma adimensional, el modelo está descrito por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \gamma (a - u - u^2 v) + \bigvee^2 u$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = \gamma (b - u^2 v) + d \bigvee^2 v$$

En las ecuaciones el término parcial representa flujo, *a* y *b* representa producción, *u* representa consumo, u^2v representa catálisis no lineal, y $\nabla^2 u$, $d \nabla^2 v$ representan difusión. Las constantes *a*, *b*, *d* y γ son todas parámetros positivos, siendo *a* y *b* valores adimensionales de producción, γ una constante adimensional y *d* un valor de difusión. La reacción cinética es tal que en la primer ecuación el término u^2v representa la producción de *u* en presencia de *v*, en tanto que en la segunda ecuación el mismo término representa el consumo de *v* en presencia de *u*. El modelo se utiliza como base matemática para análisis de estabilidad y formación de patrones,

en la predicción de la interacción entre sistemas químicos moleculares y en la morfogénesis de formación y crecimiento de hueso.

Los resultados para el modelo descrito por las ecuaciones en el dominio unidimensional [0,1] se muestran en las figuras. En la implementación se usaron los siguientes parámetros: a = 0,1, b = 0,9, d = 10, $\gamma = 789$. Las condiciones de flujo en el contorno se consideran iguales a cero (flujo nulo). Se realizan 1,000 iteraciones, con un paso de tiempo $\Delta t = 0,005$, se utilizan 300 elementos cuadráticos lagrangianos y 601 nodos. Las flechas en la figura señalan la dirección hacia la cual evoluciona la respuesta hasta alcanzar el estado espacial estable. La condición inicial corresponde a una perturbación del 5% alrededor del estado temporal estable.



Figura 6.19: Solución del modelo de Schnakenberg. Concentración de químico activador.



Figura 6.20: Solución del modelo de Schnakenberg. Concentración de químico inhibidor.

Los resultados muestran el patrón inestable espacial del modelo. Además, la respuesta en desfase de 180ř del activador respecto al inhibidor muestra la acción de este último sobre la producción del primero. El modelo permite confirmar además que pequeñas perturbaciones son determinantes en la formación de patrones espaciales. Los resultados mostrados están en completa concordancia con los resultados reportados utilizando para la implementación el método de diferencias finitas.

6.6. Modelo de Glucólisis.

Un segundo modelo que predice la formación de patrones de origen biológico es el modelo de glucólisis. La glucólisis o glicólisis es el proceso de síntesis de la molécula de glucosa para proporcionar energía al metabolismo celular. A través de una secuencia de reacciones, la glucosa es transformada en piruvato y en ATP, unidad de intercambio metabólico en el organismo vivo. En su forma adimensional, el modelo está dado por las ecuaciones:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \bigvee^2 u + \delta - ku - u^2 v$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \bigvee^2 v + ku + uv^2 - v$$

En las ecuaciones el término parcial representa flujo, $D_u \bigtriangledown^2 u$ y $D_v \bigtriangledown^2$ representa difusión, δ y ku representa producción, ku representa degradación, u^2v representa consumo no lineal, uv^2 representa activación no lineal, y v representa consumo. La interpretación biológica es similar al modelo de Schnakenberg, siendo u la concentración de glucosa, v la producción de piruvato, D_u y D_v los coeficientes de difusión, el término u^2v representando consumo no lineal de u y el término uv^2 representando la activación no lineal de v. δ es un parámetro positivo que representa la constante de formación de glucosa. El parámetro k, también positivo, representa en u el consumo natural de glucosa, mientras que en v representa la producción, en la misma proporción, de piruvato. Este modelo representa la heterogeneidad de un tejido para la transformación de glucosa en piruvato simulando la realidad del fenómeno.

El modelo descrito por las ecuaciones fue solucionado en el dominio bidimensional $[0, \pi] \ge [0, \pi]$ utilizando los siguientes parámetros: $D_u = 1,0$, $D_v = 0,0518$, $\delta = 1,75$, k = 0,05. Se realizaron 25,000 iteraciones con un paso de tiempo $\Delta t = 0,1$. Se utilizaron 2,500 elementos cuadriláteros bilineales. Las condiciones de flujo en el contorno se consideran iguales a cero. Las figuras muestran los resultados obtenidos donde a) es la condición inicial, dada por un nivel de perturbación del 5% alrededor del estado temporal estable, b) respuesta en t = 750, c) respuesta en t = 1,500, y d) respuesta en t = 2,500.



Figura 6.21: Solución del modelo de glucólisis. Concentración de glucosa.



Figura 6.22: Solución del modelo de glucólisis. Concentración de piruvato.

Se observa el patrón inestable espacial del modelo y la respuesta en desfase de 180ř entre las dos concentraciones debido a la relación consumo-producción entre los agentes químicos. Las diferencias de intensidad se deben a que el consumo de glucosa es mayor que la producción de piruvato.

Utilizando un dominio bidimensional $[0,5\pi] \ge [0,5\pi]$ con una malla de 2,500 elementos cuadriláteros bilineales, los parámetros antes usados, y manteniendo las condiciones de la simulación del caso anterior, se obtiene el patrón de puntos mostrado en la figura , con a) la condición inicial, dada por un nivel de perturbación del 5% alrededor del estado temporal estable, b) respuesta en *t* = 750, c) respuesta en *t* = 1,500, y d) respuesta en *t* = 2,500.



Figura 6.23: Patrón de puntos en la concentración de glucosa.

6.7. Modelo de Quimiotaxis.

El cuarto modelo corresponde a un modelo de movimiento celular que describe la formación de una onda viajera en virtud de un químico o *quimiotaxis*. Aunque este modelo no produce específicamente patrones espacio-temporales, sí proporciona una solución que bien describe el fenómeno biológico, variante en el tiempo y en el espacio. La quimiotaxis es el fenómeno de migración celular en el cual las células dirigen su movimiento de acuerdo a gradientes de concentración en ciertos químicos presentes en el entorno celular denominados *quimioatractantes*. De acuerdo con Painter, el modelo de quimiotaxis más simple consiste en una población celular que responde a gradientes de quimioatractante. Un primer acercamiento al modelo desprecia el crecimiento celular, esto es, considera que el movimiento celular se lleva a cabo más rápidamente que la división celular. El modelo con esta condición está descrito por:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \bigvee [D_n \bigvee n - n\alpha \bigvee u]$$
$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \bigvee^2 u + g(n) + \beta nu - \delta u$$

En las ecuaciones *n* es la densidad celular, *u* es la concentración de qui mioatractante, D_u y D_n son los coeficientes de difusión, α es la sensibilidad al quimioatractante, β es la tasa de degradación química celular, δ es la tasa de degradación natural celular, y g(n) es una función de la producción de quimioatractante por parte de las células. En las ecuaciones, el término parcial representa flujo, $D_n \nabla n$ y $D_u \nabla^2 u$ representa difusión, $n\alpha \nabla u$ representa quimiotaxis, g(n) representa producción dependiente, βnu representa consumo, y δu representa degradación.

Teniendo en cuenta que el desplazamiento celular puede ocurrir conjuntamente con procesos de división mitótica y pérdida celular, situación más semejante a la realidad biológica, el modelo sufre algunas alteraciones y es descrito por:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla [D_n \nabla n - n\alpha \nabla u] + rf(u)n(1 - \frac{n}{n_0}) - \delta_n n$$
$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u + g(n) - \delta_u u$$

En las ecuaciones los parámetros se corresponden con los del modelo anterior. El término $rf(u)n(1 - \frac{n}{n_0})$ en la ecuación de *n* corresponde a una variación del modelo logístico para considerar la mitosis. El término $\delta_n n$ representa pérdida por consumo. δ_n corresponde a pérdida celular por migración hacia zonas distintas a las demarcadas por la acción del quimioatractante. En la siguiente sección se presenta la técnica de solución numérica utilizada para implementar los modelos anteriores mediante el método de los elementos finitos.

El modelo de quimiotaxis con crecimiento celular despreciable, dado por las ecuaciones, fue implementado utilizando un dominio bidimensional de dimensiones [0, 10] x [0, 10] y un mallado de elementos cuadriláteros bilineales de 200 x 20, es decir, un total de 4,000 elementos. Los parámetros utilizados son: $D_u = 0,001$, $D_n = 0,005$, $\beta = 2$, $\beta = 0,1$, $\delta = 0,01$. La función g(n) es un escalón unitario que ha sido aproximado por la expresión:

$$g(n) = \gamma \frac{n^p}{n_0^p}$$

En la siguiente ecuación n_0 es el valor umbral de densidad celular. Los valores utilizados son: $n_0 = 0.01$, $\gamma = 0.001$ y p = 20. Las condiciones de flujo en el contorno se consideran iguales a cero. Se realizaron 500 iteraciones con un paso de tiempo $\Delta t = 0,015$. Las figuras 10 y 11 muestran los resultados obtenidos donde a) es la condición inicial, b) respuesta en t = 0,75, c) respuesta en t = 3,0, y d) respuesta en t = 7,5. La condición inicial en a) está dada por:

$$n(x,0) = \begin{cases} n_i & \text{si } x < x_i \\ 0 & \text{si } x \ge x_i \end{cases}$$

En la ecuación anterior, los parámetros utilizados son: $n_i = 1,0, x_i = 1,0, y u_i = 0,2$.



Figura 6.24: Solución del modelo de quimiotaxis con crecimiento celular nulo. Densidad celular.



Figura 6.25: Solución del modelo de quimiotaxis con crecimiento celular nulo. Concentración de quimioatractante.

Por su parte, el modelo de quimiotaxis que tiene en cuenta el crecimiento y la pérdida celular, descrito por las ecuaciones, fue solucionado utilizando un dominio bidimensional de dimensiones $[0,1] \times [0,1]$ y el mismo mallado que en el modelo anterior. Los parámetros usados son: $D_u = 0,001$, $D_v = 0,005$, $\alpha = 2$, $\beta = 0,1$, $\delta_u = 0,02$, $\delta_v = 0,05$, $\gamma = 0,001$, p = 30, r = 4, $n_i = 0,01$, $x_i = 1,0$, y $u_i = 0,2$. La función f(u) es un escalón unitario que ha sido aproximado por la expresión:

$$f(u) = \frac{u^p}{u^p + u_0^p}$$

En ésta ecuación, $u_0 = 0,0195$ y p = 20. Las condiciones de flujo en el contorno se consideran iguales a cero. Se realizaron 800 iteraciones con un paso de tiempo $\Delta t = 0,01$. Las figuras 6.11 y 6.12 muestran los resultados obtenidos donde a) es la condición inicial, b) es la respuesta en t = 2,5, c) es la respuesta en t = 5,0, y d) es la respuesta en t = 8,0.



Figura 6.26: Solución del modelo de quimiotaxis con mitosis celular. Densidad celular.

Las dos implementaciones del modelo de quimiotaxis se ajustan a los resultados obtenidos mediante el método de diferencias finitas reportado mas adelante. Se comprueba además la formación del patrón de onda viajera que representa el llamado químico que el quimioactractante ejerce sobre las células.



Figura 6.27: Solución del modelo de quimiotaxis con mitosis celular. Concentración de quimioatractante.

Solucionando el modelo de glucólisis que lleva al resultado de la figura 6.8 conjuntamente con el modelo de quimiotaxis con mitosis celular que lleva al resultado de la figura 6.11, se obtiene la

formación de tejido producido por las células en migración mostrado en la figura 6.13. En ella se muestra la aparición del patrón espacio-temporal del modelo de glucólisis a medida que la densidad de células avanza desde el extremo derecho (x = 1) hacia el extremo izquierdo (x = 0) del dominio. La ecuación que gobierna este resultado está dada por la expresión:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \gamma n v - \beta n q$$

En ésta ecuación γ y β son parámetros positivos, q es la densidad del tejido en formación, n es la densidad de células del modelo de quimiotaxis y v es la concentración de químico inhibidor del modelo de glucólisis. La solución de la ecuación se realiza en un dominio bidimensional de dimensiones [0,1] x [0,1] usando 2,500 elementos cuadriláteros bilineales. Los parámetros utilizados son $\gamma = 0,05$ y $\beta = 0,05$. Se realizaron 25,000 iteraciones con un paso de tiempo $\Delta t = 0,1$. Las condiciones iniciales y de contorno para la variable q son todas iguales a cero.



Figura 6.28: Solución conjunta del modelo de glucólisis y el modelo de quimiotaxis con mitosis celular.

Aunque la ecuación no se encuentra reportada por otros autores, su forma es similar a las ecuaciones de reacción-difusión con el término difusivo igual a cero y su resultado es comparable cualitativamente con resultados reportados por otros trabajos en el área de morfogénesis y recuperación tisular.

6.8. Solución por el método de los elementos finitos.

El método de los elementos finitos es un método numérico para resolver problemas complejos que utiliza como principio la simplificación y subdivisión del problema. Si se divide el dominio de solución del problema en pequeñas unidades discretas no intersectantes llamadas *elementos*, compuestos de puntos extremos denominados *nodos*, y se obtiene la respuesta al problema en cada elemento, es posible construir una respuesta general a partir del conocimiento de las respuestas de todos los elementos. El método que se presenta se implementa mediante una rutina de usuario programada en Fortran, de forma particular para cada modelo, cuyo fundamento matemático se encuentra en el método de *ponderación de los residuos*.

Sea un dominio Ω divido en cierto número *NE* de elementos, cada uno definido en un subdominio Ω^e de Ω , como muestra la figura.



Figura 6.29: División del dominio Ω en *NE* subdominios Ω^e .

Para cada Ω^e existe un residuo R^e o error entre la solución numérica local y la solución exacta. Si se toma la suma de los residuos locales, es posible obtener un residuo global R^g y una solución global del problema definido en el dominio Ω . Para el caso unidimensional de la ecuación de reaccióndifusión, se quiere que el error en el dominio Ω cumpla con la relación:

$$\int_{\Omega} R^{g} w dx = 0$$

donde R^g es el residuo en Ω definido como:

$$R^{g} = \frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}} - f = 0$$

En ésta ecuación u := u(t, x), f := f(t, x, u) y w es una función de ponderación. A partir de esta formulación es posible obtener la siguiente ecuación como la forma residual ponderada de la ecuación de reacción difusión:

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - f\right) w \, dx = 0$$

Resolviendo la integral para cada uno de los términos, y haciendo integración por partes en el segundo término, se obtiene:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} w dx + [D\frac{\partial u}{\partial x}w]_T + \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial w}{\partial x} - \int_{\Omega} f w dx = 0$$

En ésta ecuacion *T* es el contorno del dominio Ω . La evaluación de la integral en cada subdominio Ω_e o elemento da lugar a la expresión:

$$\int_{\Omega^e} \frac{\partial u}{\partial t} w dx + \int_{\Omega^e} \frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial w}{\partial x} - \int_{\Omega^e} f w dx = 0$$

La solución de ésta ecuación requiere la introducción del concepto de funciones de forma. Las funciones de forma son funciones de interpolación definidas para cada elemento y constituyen la base para la construcción de una solución continua. Para el caso lineal y unidimensional de un problema con elementos de dos nodos, las funciones de forma normalizadas, definidas en el intervalo $-1 \le \xi \le 1$ se expresan como:

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1-\xi)$$
$$N_2(\xi) = \frac{1}{2}\xi(1+\xi)$$

La figura muestra una representación gráfica de estas funciones de forma, donde los nodos corresponden, en el dominio *T* del elemento, a los puntos 1 y 2, mientras que en el dominio general Ω los mismos nodos son denotados como *i* e *i* + 1 ya que pueden corresponder a los nodos de elementos adyacentes. La solución de las ecuaciones anteriores es válida en *un único elemento*, razón por la cual es necesario aplicar el mismo procedimiento a todos los elementos en Ω .



Figura 6.30: Representación gráfica de las funciones de forma.

Si u_1 y u_2 son los valores de u(t, x) en los nodos 1 y 2 de un elemento cualquiera, la variación lineal o interpolación entre estos dos valores a lo largo de dicho elemento está dada por:

$$u(\xi) = [N_1 N_2]$$

6.9. Conclusiones.

Los modelos matemáticos implementados muestran cómo las ecuaciones de reacción-difusión son de utilidad para representar la formación de patrones en sistemas biológicos. Se ha evidenciado la existencia de inestabilidades espaciales debido a pequeñas perturbaciones del estado temporal estable y las variaciones de dichas inestabilidades conforme a los parámetros de cada modelo.

La implementación unidimensional del modelo de Schnakenberg permite visualizar esta formación de patrones espaciales y la evolución en el tiempo de esta formación. Un análisis de los parámetros podría hacerse para identificar características de la formación del patrón, el modo de la onda, y el valor de estado estable. Por ser similares en formulación, la implementación unidimensional de los modelos de Gierer-Meinhardt y Schnakenberg es complementada con la implementación bidimensional del modelo de glucólisis, con lo que se comprueba la validez del método para la solución de problemas de dimensión superior. En el modelo de glucólisis se hace más evidente la variación del patrón espacial inestable conforme a los valores dados a los parámetros del modelo, como bien puede apreciarse en las figuras 6.6 - 6.8. Se observa además el efecto de la dimensión del dominio en la formación del patrón, especialmente en relación con el dominio bidimensional $[0,\pi] \ge [0,\pi]$ de las figuras 6.6 y 6.7, y el dominio bidimensional [0, 15] x [0, 15] de la figura 6.8, hecho que ha sido ampliamente analizado por. En términos computacionales, estas variaciones del dominio, en conjunto con las dimensiones del mallado utilizado, hacen que la solución requiera de pasos de tiempo ajustados y un número de iteraciones que permita obtener el patrón espacial inestable adecuado, como el caso de los patrones mostrados en las figuras 6.6 - 6.10, visibles sólo después de efectuar 15,000 iteraciones.

El modelo de quimiotaxis, por su parte, se presenta como un ejemplo de fenómenos de movimiento y transporte celular. En particular, los resultados permiten evidenciar la obtención de un patrón espacial que semeja la conformación del frente de onda celular en respuesta a una concentración de quimoatractante. Estos frentes de onda son apreciables en las figuras 6.9 y 6.11. El resultado de este movimiento celular es el marcado consumo de quimioatractante de la figura 6.10, y el regulado consumo que se aprecia en la figura 6.12, consecuencia del químico producido por las células añadidas al sistema por el término de crecimiento celular. Es apreciable además la homogeneidad de la formación del patrón a lo largo de todo el dominio, al conservarse siempre su característica ondulatoria.

La implementación de estos modelos utilizando la formulación matemática y el método numérico por elementos finitos presentados ha permitido reproducir los resultados obtenidos por otros métodos reportados. La técnica empleada permite solucionar modelos complejos con menor costo computacional y mejor aproximación numérica, siempre que el dominio, el mallado y las características temporales sean bien especificados. Se espera que la evidencia de los resultados presentados y la técnica de solución empleada sean de utilidad en la formulación e implementación de modelos matemáticos biológicos complejos de crecimiento y desarrollo celular y tisular, de manera similar al resultado mostrado en la figura 6.13 donde se describe la formación de tejido por parte de las células que migran a lo largo del dominio.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] **GENE MOSCA, PAUL ALLEN TIPLER**, Volume 1 of Fisica. Física para la ciencia y la tecnología, Paul Allen Tipler. Reverte, 2006.
- [2] VANEGAS JUAN, LANDINEZ NANCY, GARZÓN DIEGO, Análisis de la inestabilidad de Turing en modelos biológicos. Redalyc, Sistema de Información Científica, Red de Revistas Científicas de América Latina, el Caribe, España y Portugal,Dyna, Vol. 76, Núm. 158, junio, 2009, pp. 123-134. Universidad Nacional de Colombia.
- [3] PAUL G. HEWITT, Física conceptual, Serie AWLI. Pearson Educación, 2004.
- [4] **ROBERT STEPHEN CANTRELL, CHRIS COSNER**, Spatial ecology via reaction-diffusion equations, Volume 7 of Wiley series in mathematical and computational biology. John Wiley and Sons, 2003.
- [5] TOM M., Apostol. Calculus-Volumen I. Cálculo con funciones de una variable, con una introducción al algebra lineal. Editorial Reverté, S.A., 1984. Segunda Edición. Barcelona-Bogotá-Buenos Aires-Caracas-México.
- [6] ISABEL CARMONA JOVER, Ecuaciones diferenciales, Pearson Educación, 1992.
- [7] **ZHEN MEI**, Numerical bifurcation analysis for reaction-diffusion equations, Volume 28 of Springer series in computational mathematics. Springer, 2000.
- [8] JULIO DE PAULA, Atkins química física, edición número 8. Ed. Médica Panamericana, 2008.
- [9] **ERIC ÁVILA VALES**, Ecuaciones de Reacción-Difusión. Universidad Autónoma de Yucatán, Facultad de Matemáticas. Sociedad Matemática Mexicana 2005.
- [10] CHARLES KITTEL, WATER D. KNIGHT, MALVIN A. RUDERMAN, Mecánica Volume 1 of Berkeley physics course, F. Reif. Edición 2. Reverte, 1996.
- [11] GUILLERMO FERNÁNDEZ GARCÍA, Estructuras espacio-temporales en sistemas de reacción-difusión-advección, Memoria para la obtención del grado de Doctor en Ciencias Físicas. Facultad de Física, Departamento de Física de la Materia Condensada, Grupo de Física no Lineal. Universidad de Santiago de Compostela, Julio de 2008.

- [12] MARTIN B. SHORTA, P. JEFFREY BRANTINGHAMB, ANDREA L. BERTOZZIC, AND GEORGE E. TITAD, Dissipation and displacement of hotspots in reaction-diffusion models of crime, Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, CA 90095; Department of Anthropology, University of California, Los Angeles, CA 90095; Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, CA 90095; and Department of Criminology, Law and Society, University of California, Irvine, CA 92697-7080. Edited by Luc E. Anselin, Arizona State University, Tempe, AZ, and approved January 5, 2010 (received for review September 22, 2009).
- [13] JUAN ANTONIO SÁNCHEZ COLMENAREJO, Formación de patrones biológicos: sistemas de Reacción-Difusión. Licenciado en Ciencias Físicas. Ingeniero Técnico de Telecomunicación. Reportaje Antena de Telecomunicación, JUNIO 2009.
- [14] JUAN C. VANEGAS A, NANCY S. LANDINEZ P, DIEGO A. GARZÓN A., Solución computacional de modelos biológicos de formación de patrones espacio-temporales. Ingeniare. Revista chilena de ingeniería, vol. 17 Nº 2, 2009, pp. 182-194. Recibido 21 de diciembre de 2007, aceptado 16 de junio de 2009.
- [15] RUBÉN DÍAZ-SIERRA Y MIGUEL A. ZAVALA, Modelos espacialmente explícitos. Departamento de Física Matemática y de Fluidos, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Senda del Rey 9, 28040 Madrid, España. Departamento de Ecología, Edificio de Ciencias, Universidad de Alcalá, 28871 Alcalá de Henares (Madrid), España.
- [16] **SIXTO RIOS**, Modelos matemáticos en biología. Universidad de Jaén, Departamento de matemáticas. Jaén, 8 de enero de 2009.
- [17] JOSE LUIS IRIBARREN Y ESTEBAN MORO, Impact of Human Activity Patterns on the Dynamics of Information Diffusion. IBM Corporation, ibm.com e-Relationship Marketing Europe, 28002 Madrid, Spain. Instituto de Ciencias Matematicas CSIC-UAM-UC3M-UCM, Departamento de Matemáticas & GISC, Universidad Carlos III de Madrid, 28911 Leganés (Madrid), Spain. Received 27 January 2009; published 14 July 2009.
- [18] FERNANDEZ ROSALES IVAN YAIR, Fundamentos de sistemas dinámicos oscilatorios. Instituto Politécnico Nacional, XIX Verano de la Investigación Científica, Departamento de Aplicación de Microcomputadoras, Instituto de Ciencias, Universidad Autónoma de Puebla, Agosto 2009.
- [19] NJOCK J., Mechanics of the slow draining of a large tank under gravity. Am. J. Phys. 71 (11) November 2003, pp. 1204-1207
- [20] GRUBELNIK V., MARHL M., Drop formation in a falling stream of liquid. Am. J. Phys. 73 (5) May 2005, pp. 415-419
- [21] MARQUETTI MC, VALDÉS V., AGUILERA L., . Tipificación de hábitats de Aedes albopictus en Cuba y su asociación con otras especies de culícidos, 1995-1998. Revista Cubana de Medicina Tropical 2000;52(3):170-4
- [22] **WITTENBAUER F.**, Problemas de Mecánica General y Aplicada. Tomo III Editorial Labor (1963).
- [23] **WOJLAW Y E. MOUSTAKAS**, Operational Amplifiers: The devices and their Applications. C. John Wiley & Sons, New York 1986.

- [24] **MIYARA FEDERICO**, Osciladores Senoidales. Electronica III. Rosario, 2004. Universidad Nacional de Rosario. Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura. Escuela de Ingeniería Electrónica. Departamento de Electrónica.
- [25] OSSORIO A. ARTURO, Lagunas: La importancia de un buen diseño y construcción. Ecoagua. Revista Tigris. Disponible en el catalogo en línea de la empresa Ecoagua: http://www.ecoaqua.com.ar/seccion.php.seccion-papers &content-construccion-lagos
- [26] IZAZA GABRIEL, Modelación numérica para la optimización del sistema de llenado y vaciado del Tercer Juego de Esclusas del Canal de Panamá. Disponible en línea en: http://laboratorios.fi.uba.ar/lmm/proyectos/Ficha_ Canal_Panama.pdf.
- [27] ARISTIZÁBAL D., RESTREPO **R.**, Notas sobre Fundamentos de Oscilaciones Mecánicas. Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín. [WEB] http://www.unalmed.edu.co/_sica/paginas/cursos/paginas_cursos/_ sica_3/notas /notas_clase_sica_3_1.html.
- [28] **ARISTIZÁBAL D., SOLANO S.**, Lección de Teoría de la Medida. http://www.unalmed.edu.co/sica/paginas/recursos_web/lecciones_sica_universitaria /leccion_teoria_de_la_medida/index.html.
- [29] **TAYLOR J.** An Introduction to Error Analysis: The Study of Uncertainties in PhysicalMeasurements. University Science Books. California. 1997.
- [30] **TAYLOR B., KUYATT C.**, Technical Note 1297: Guidelines for evaluating and Expressing the Uncertainty of NIST Measurement Results. 1994.
- [31] SENA L., Unidades de las Magnitudes Físicas y sus Dimensiones. Editorial MIR. Moscú. 1979.
- [32] SÁEZ S., FONT L., Consultores C.A. Incertidumbre de la Medición: Teoría y Práctica, 2001.
- [33] MAROTO A., BOQUÉ R., RIU J., RIUS F., Estrategias para el Cálculo de la Incertidumbre. http://www.quimica.urv.es/quimo.