



UNIVERSIDAD DEL PAPALOAPAN

Campus Loma Bonita

LICENCIATURA EN MATEMÁTICAS APLICADAS

COMPORTAMIENTO DINÁMICO DE DIFERENTES
MODELOS DEL BRUSELADOR.

Tesis

Que para obtener el grado de

Licenciada en Matemáticas Aplicadas

PRESENTA:

PATRICIA PÉREZ SÁNCHEZ

DIRECTORA DE TESIS:

DRA. BEATRIZ CARELY LUNA OLIVERA

CODIRECTOR DE TESIS:

DR. VÍCTOR FRANCISCO BREÑA MEDINA

LOMA BONITA, OAXACA,

2017



UNIVERSIDAD DEL PAPALOAPAN
Campus Loma Bonita

LOMA BONITA, OAXACA, 2017

LICENCIATURA EN MATEMÁTICAS APLICADAS

LA PRESENTE TESIS TITULADA

**"COMPORTAMIENTO DINÁMICO DE DIFERENTES MODELOS DEL
BRUSELADOR",**

PRESENTADA POR LA SUSTENTANTE DE LICENCIATURA: **PATRICIA PÉREZ SÁNCHEZ** BAJO LA DIRECCIÓN DE LA **DRA. BEATRIZ CARELY LUNA OLIVERA** Y EL **DR. VICTOR FRANCISCO BREÑA MEDINA**, HA SIDO REVISADA Y ACEPTADA POR EL COMITÉ EXAMINADOR PARA SER DEFENDIDA EN EL EXAMEN PROFESIONAL Y OBTENER EL TÍTULO DE **LICENCIADA EN MATEMÁTICAS APLICADAS**.

DRA. BEATRIZ CARELY LUNA OLIVERA
DIRECTORA

DR. VICTOR FRANCISCO BREÑA MEDINA
CO-DIRECTOR

**DR. JUAN MANUEL PÉREZ
ABARCA**
PRESIDENTE

**DR. JOSÉ GEISER VILLAVICENCIO
PULIDO**
SECRETARIO

DRA. NELDA XANATH MARTÍNEZ GALERO
VOCAL

Índice general

1. Introducción	7
1.1. Planteamiento del problema	7
1.2. Objetivos	7
1.3. Metodología	8
1.4. Conceptos de Química	8
1.5. Panorama histórico del problema	13
1.6. Reacción oscilante Belousov-Zhabotinsky	18
1.7. Bruselador	20
2. Conceptos preliminares de sistemas dinámicos	21
2.1. Introducción a los sistemas dinámicos	21
2.1.1. Órbitas	22
2.1.2. Conjuntos invariantes	23
2.1.3. Estabilidad de sistemas dinámicos discretos	24
2.1.4. Estabilidad de sistemas dinámicos continuos	26
2.2. Equivalencia topológica	27
2.2.1. Caso discreto	27
2.2.2. Caso continuo	28
2.3. Clasificación de puntos fijos y estados estacionarios	30
2.3.1. Puntos fijos hiperbólicos en sistemas de tiempo discreto	30
2.3.2. Estados estacionarios hiperbólicos en sistemas de tiempo continuo	32
2.4. Teorema de Variedad Central	35
2.5. Órbitas periódicas	36
2.6. Introducción a las bifurcaciones	38
2.6.1. Bifurcación de Andronov-Hopf	40
2.6.1.1. Caso discreto	40
2.6.1.2. Caso continuo	41
2.7. Reacciones químicas con retardo	42
2.8. Conceptos matemáticos aplicados a la Química.	43
2.8.1. Matemáticas aplicadas a la Química.	43

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	3
3. Análisis	48
3.1. Análisis con sistemas dinámicos continuos	48
3.2. Análisis con sistemas dinámicos discretos I	57
3.3. Análisis con sistemas dinámicos discretos II.	60
3.4. Análisis con sistemas dinámicos discretos con retardo.	64
4. Discusión y conclusiones	74
A. Método de Runge Kutta de orden 4	78
B. Segunda ley de la termodinámica.	80

Agradecimientos

A mi madre Victoria Pérez Sánchez y a mi tía Margarita Pérez Sánchez porque confiaron en mí y me apoyaron a pesar de que pocas veces sabían lo que estaba haciendo.

A la Dra. Beatriz Carely Luna Olivera que desde el primer día de clases confió en mí, y me motivó a esforzarme para ser una mejor estudiante y una mejor persona cada día.

Al Dr. Sergio Alejandro Muñoz Muratalla por compartir sus conocimientos, por enseñarme a superar cualquier obstáculo con disciplina y seriedad, y por enseñarme a aprender.

A mis directores de tesis la Dra. Beatriz Carely Luna Olivera y al Dr. Víctor Francisco Breña Medina por todo el apoyo que me han dado, por la paciencia que han tenido, por sus consejos y por compartir sus conocimientos.

A mis revisores de tesis a la Dra. Nelda Xanath Martínez Galero, al Dr. José Geiser Villavicencio Pulido y al Dr. Juan Manuel Pérez Abarca por el tiempo invertido en la revisión de este trabajo y por los consejos que me han dado.

A mis profesores Dra. Beatriz Carely Luna Olivera, Dr. Sergio Alejandro Muñoz Muratalla, Dr. Marcelino Ramírez Ibáñez, Dra. María Isabel Hernández, Dr. José Geiser Villavicencio Pulido, M. C. Claudia Nila Luevano, Dr. Jesús Francisco Espinosa Fierro, M. C Ariel López Rodríguez, Dr. Eduardo Sánchez Soto, M. C. Alberto Calixto Simón, Dr. Juan Manuel Pérez Abarca, Dr. Víctor Manuel Méndez Salinas, Dra. Erendira Munguía Villanueva, Dr. Héctor Hugo Sánchez Hernández, Dr. José Luis Juaréz Pérez, M. F José Arturo Martín Almaguer y Cheryl Lynn Gad por contribuir a mi formación y por compartir sus conocimientos.

A Emmanuel Mendoza Trinidad por todo su apoyo y por sus consejos.

A la Universidad del Papaloapan.

Resumen

En este trabajo se busca comprender, analizar y comparar los comportamientos dinámicos del Bruselador sin difusión, modelado mediante ecuaciones diferenciales, ecuaciones en diferencias y ecuaciones en diferencias con retardo.

Para llevar a cabo este análisis hablaremos de las reacciones químicas oscilantes por lo que introduciremos algunos conceptos de cinética química, además haremos una revisión histórica acerca de los intentos de modelación matemática de este fenómeno químico oscilatorio, en particular, hablaremos acerca de la reacción Belousov-Zhabotinsky (BZ) y el modelo matemático del Bruselador, el cual describe el comportamiento de algunas reacciones químicas oscilantes, este modelo fue planteado por Prigogine y Lefever en los años 50.

También haremos una revisión de conceptos relacionados con sistemas dinámicos continuos y discretos, e interpretaremos estos conceptos de sistemas dinámicos en términos de la química.

Usando los conceptos mencionados analizaremos de manera numérica los diferentes modelos del Bruselador para conocer su dinámica y compararla.

Palabras clave: Bruselador, reacciones químicas oscilantes, cinética química.

Abstract

In this study we analyze and compare the dynamical behavior of the Brusselator without diffusion, modeled by differential equations, equations in differences and delay differences equations.

To carry out this analysis we introduce oscillating chemical reactions giving some concepts of chemical kinetics, in addition we present a historical review about the mathematical proposals to model oscillatory chemical phenomenon, in particular we address the Belousov Zhabotinsky reaction and the mathematical model of the Brusselator which generalize the behavior of some oscillating chemical reactions, this model was proposed by Prigogine and Lefever in the 1950s.

We also review concepts related to continuous and discrete dynamical systems, and interpret these concepts in terms of chemistry.

Using the above concepts and numerical methods, we analyze the different models of the Brusselator to understand and compare them.

Keywords: Brusselator, oscillating chemical reactions, chemical kinetics.

Capítulo 1

Introducción

1.1. Planteamiento del problema

Es usual elegir algún tipo de formalismo para modelar un determinado fenómeno, sin embargo, cada formalismo tiene sus particularidades y puede dar lugar a diferentes comportamientos independientemente del fenómeno que se modela, este trabajo busca comprender y analizar los comportamientos dinámicos del Bruselador sin difusión modelado mediante:

- ecuaciones diferenciales ordinarias,
- ecuaciones en diferencias,
- ecuaciones en diferencias con discretización,
- ecuaciones en diferencias con discretización y un retardo.

para comparar las dinámicas obtenidas.

1.2. Objetivos

Objetivo general

Analizar el comportamiento dinámico del Bruselador modelado con diferentes formalismos.

Objetivos específicos

Los objetivos específicos que nos permitirán lograr el objetivo general se describen a continuación:

- Estudiar el Bruselador sin difusión continuo.
- Estudiar el Bruselador sin difusión discreto.

- Estudiar el Bruselador sin difusión discreto con retardo.
- Analizar y comparar la dinámica obtenida bajo cada modelo.

1.3. Metodología

- Conocer algunos conceptos de la Química para comprender las reacciones químicas oscilantes.
- Estudiar la historia de las reacciones químicas oscilantes y sus modelos matemáticos.
- Analizar un modelo matemático que generaliza el comportamiento oscilatorio (Bruselador).
- Introducir los conceptos matemáticos de dinámica continua y discreta necesarios para analizar el modelo del Bruselador.
- Con base en la teoría de sistemas dinámicos continuos y discretos realizar los análisis correspondientes de estabilidad.
- Comparar los comportamientos obtenidos a partir de los diferentes modelos.

1.4. Conceptos de Química

A nuestro alrededor suceden incontables reacciones químicas, algunas de manera natural dependiendo de la presencia de ciertas condiciones como la temperatura, presión atmosférica, cantidad de elementos químicos, entre otros factores presentes en la naturaleza, o por la influencia de actividades humanas, como la elaboración de sustancias químicas en las fábricas.

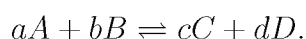
Una **reacción química** es un proceso en el cual una o más sustancias llamadas reactivos se transforman, cambian su estructura molecular y sus enlaces, para transformarse en otras sustancias llamadas productos.

Ejemplos de reacciones químicas son las emisiones de gases, cambios de colores en las sustancias, etc. En el cuerpo humano suceden reacciones químicas, algunos ejemplos ocurren durante la respiración y en la digestión de los alimentos.

Las reacciones químicas tienen como característica que los productos tienen un aspecto muy diferente del que tenían las sustancias que reaccionan, por ejemplo, la sal de mesa (Cloruro de sodio) es un producto que se genera a partir de una reacción química, en esta reacción los reactivos son átomos de sodio en una red cristalina de estado sólido (Na) y moléculas diatómicas de cloro en estado gaseoso (Cl_2).

Ley de acción de masas.

Una característica principal de las reacciones químicas es que se cumple la ley de acción de masas, que indica lo siguiente: La relación del producto de las actividades químicas (se considera la actividad química igual a la concentración en soluciones diluidas) elevadas a los coeficientes estequiométricos en la reacción de productos y reactivos permanece constante al equilibrio. Para cualquier reacción:



Antes de alcanzar el equilibrio tenemos la relación siguiente:

$$Q = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}$$

Donde Q es el valor que disminuye durante la reacción hasta que permanece constante al alcanzar el equilibrio. Una vez en el equilibrio, la ecuación anterior se transforma en

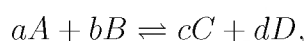
$$K = \frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b}.$$

Donde K = constante de reacción en el equilibrio y es única para cada reacción específica. Las letras entre paréntesis rectangular indican concentración molar de reactivo o producto y los exponentes son los coeficientes estequiométricos respectivos en la reacción. De acuerdo con estas expresiones matemáticas: Si $K \lll 1$, entonces la reacción es reversible y se dice que se encuentra desplazada a la izquierda. Si $K = 1$, es una reacción en la que se obtiene 50 % de reactivos y 50 % de productos. Si $K \ggg 1$, la reacción tiene un rendimiento alto y se dice que esta desplazada a la derecha. Si se utiliza Q se sabe que: Si $Q < K$: la reacción se lleva a cabo hacia los productos (derecha), y Q va a aumentar hasta llegar a K , donde se vuelve constante. Si $Q > K$: la relación entre productos y reactivos es muy grande, entonces los productos se convierten en reactivos y la reacción se lleva a cabo en sentido contrario (izquierda, pero en menor cantidad). Si $Q = K$: el sistema se encuentra en equilibrio.

Cinética química

La cinética química es la rama de la química, encargada del estudio cuantitativo de la rapidez de reacción. Podemos definirla como la encargada de tratar la velocidad de una reacción, los factores que influyen en ella, y del mecanismo a través del cual los reactivos se transforman en productos. Esta transformación de reactivos en productos, puede ser rápida, lenta, e incluso puede llegar a no suceder nunca. Algunas reacciones ocurren en un solo paso, a través de un choque simple de dos moléculas y el reordenamiento de los átomos, pero por lo general, las reacciones suceden mediante etapas intermedias que forman en conjunto el mecanismo de la reacción. El descubrimiento de las reacciones intermedias,

por las cuales los reactivos se convierten en productos, es decir, la descripción de las reacciones con exactitud, es también papel de la cinética química. Algunas reacciones químicas, ocurren de forma prácticamente instantánea a temperatura ambiente, en cambio, otras suceden muy lentamente aún estando en las mismas condiciones, este hecho hace algo difícil definir el concepto de velocidad de reacción que intentamos entenderlo como: La velocidad de reacción representa la rapidez con la que tiene lugar la transformación de unos reactivos, en otras distintas, los productos. En todas las reacciones, con el paso del tiempo, se agotan los reactivos a la vez que se van transformando en productos, de esta manera podemos definir otro término importante en la cinética química: la velocidad media de reacción. Supongamos así teóricamente la reacción:

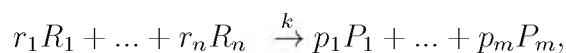


La velocidad en esta reacción se expresa en función de la concentración de los reactivos, en este caso, A y B, es decir: $\frac{d[A]}{dt}$ y $\frac{d[B]}{dt}$. También puede expresarse como el aumento de las concentraciones de los productos C y D, en un espacio de tiempo: $\frac{d[C]}{dt}$ y $\frac{d[D]}{dt}$.

Generalmente las concentraciones se miden en moles por litro ($mol * L^{-1}$), y los espacios de tiempo, en segundos (s). De este modo, la velocidad se medirá en moles por litro por segundo ($mol * L^{-1} s^{-1}$). Para que las variaciones anteriormente citadas sean análogas, debe tenerse en cuenta que: a) Por cada $a mol * L^{-1}$ de A que se agote, desaparecerá también un $b mol * L^{-1}$ de B, a la vez que se producen $c mol * L^{-1}$ de C y $d mol * L^{-1}$ de D.

Es por esto que cada cambio de concentración necesita ser dividido por el coeficiente estequiométrico que corresponda. Como [A] y [B] disminuyen, sus transformaciones son negativas, siendo en cambio las de [C] y [D], positivas. Recordemos que una reacción elemental es aquella que se produce en un solo paso o etapa y las no elementales son aquellas en donde la reacción ocurre en varios pasos.

Veamos de manera general cómo se determinan las velocidades de una reacción química, las cuales se llaman **ecuaciones de velocidad**. Supongamos que tenemos una ecuación química de la forma



donde r_i son los coeficientes estequiométricos que indican el número de moléculas utilizadas de cada reactivo durante la reacción química, R_i son los reactivos, p_j son coeficientes estequiométricos que indican el número de moléculas generadas del producto, y P_j son los productos generados, donde $i = 1, \dots, n$ y $j = 1, \dots, m$.

La velocidad de reacción de esta ecuación química está dada como

$$v = -\frac{1}{r_1} \frac{d[R_1]}{dt} = \dots = -\frac{1}{r_n} \frac{d[R_n]}{dt} = +\frac{1}{p_1} \frac{d[P_1]}{dt} = \dots = +\frac{1}{P_m} \frac{d[P_m]}{dt}$$

y por la ley de la velocidad

$$v = k \prod_{i=1}^n [R_i]^{r_i},$$

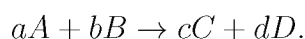
en consecuencia, la ecuación de velocidad se escribe como

$$-\frac{1}{r_i} \frac{d[R_i]}{dt} = k \prod_{i=1}^n [R_i]^{r_i},$$

con $i = 1, \dots, n$.

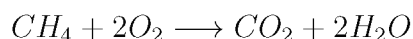
Ahora describiremos algunas de las clasificaciones más importantes que se le hacen a las reacciones químicas. Una primera clasificación se realiza según la naturaleza de los reactivos.

Una reacción irreversible es una reacción química que se verifica en un solo sentido, es decir, se prolonga hasta agotar por completo una o varias de las sustancias reaccionantes y por tanto la reacción inversa no ocurre de manera espontánea. Este tipo de reacción se representa con una flecha con sentido a la derecha, donde la flecha indica el sentido de la reacción; esta ecuación representa una reacción directa (hacia la derecha)



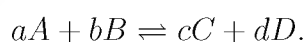
En estas reacciones la variación de entropía ocurre de tal manera que la entropía final es diferente a la inicial, por tanto, no se puede volver al estado inicial de entropía.

Un ejemplo de reacción irreversible es la combustión del gas metano cuya reacción química es la siguiente:



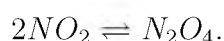
donde el metano reacciona con el oxígeno en presencia de calor para formar dióxido de carbono y agua, en esta reacción no hay un proceso reversible ya que se agotan todos los reactivos.

Las reacciones reversibles, por otra parte, son aquellas en las que los reactivos no se transforman totalmente en productos, ya que éstos vuelven a formar los reactivos, dando lugar así a un proceso de doble sentido que desemboca en equilibrio químico. Este tipo de reacciones se representan con una doble flecha, donde la flecha indica el sentido de la reacción; esta ecuación representa una reacción directa (hacia la derecha) que ocurre simultáneamente con una reacción inversa (hacia la izquierda):



En la sección (2.8) hablaremos con más detalle acerca del equilibrio químico.

Un ejemplo de reacción reversible es el proceso químico entre el dióxido de nitrógeno y el tetróxido de dinitrógeno



El factor importante en la realización de este proceso químico es la temperatura. El dióxido de nitrógeno que es un gas amarillo reacciona a la temperatura baja para formar el tetróxido de dinitrógeno que es un líquido utilizado como comburente de cohetes. Si la temperatura aumenta, ocurre la reacción inversa, la cual da lugar a concentraciones de dióxido de nitrógeno.

Por el tipo de intercambio que se realiza con el medio donde se desarrolla, los sistemas se clasifican como: abiertos, cerrados y aislados.

*Un sistema **abierto** es aquel que puede intercambiar energía y materia con el medio.* Un ejemplo de sistema abierto es un recipiente lleno de agua sin tapar.

*Un sistema **cerrado** es aquel que intercambia sólo energía con el medio, es decir, no hay intercambio de materia.* Creamos un sistema cerrado al cerrar o tapar el recipiente que está lleno de agua de tal manera que el vapor de agua no se escape o condense en el recipiente, en este sistema existe transferencia de energía pero no de masa.

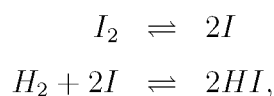
*Un sistema **aislado** es aquel que no realiza intercambio ni de materia ni de energía con el medio.* Estos son sistemas ideales, debido a que no hay manera de aislar un sistema del medio. Un ejemplo posible de este sistema es un termo con agua en su interior, donde el termo es un recipiente totalmente aislado, de esta manera es posible construir un sistema casi aislado.

Otra clasificación de los sistemas es según la naturaleza de los reactivos. *Un sistema es **homogéneo** si está formado por una sola fase (parte).* Es una sustancia de estructura y composición uniforme, es decir, no se pueden observar sus componentes. Un ejemplo de este sistema es la mezcla entre agua y sal, donde no es posible observar sus componentes. *Un sistema es **heterogéneo** si está formado por dos o más fases (partes), su característica fundamental es que se pueden apreciar las distintas partes que componen al sistema.* Un ejemplo de este sistema es la mezcla de agua y arena, donde es posible observar dos fases.

Cuando ocurre una reacción química, generalmente no sucede que todos los reactivos colisionen y formen el producto final en un sólo paso, sino que la formación del producto final pasa por diferentes etapas donde unos reactivos forman un producto intermedio. Este producto intermedio interactúa con otros reactivos, formando otros productos. Este proceso continua hasta formar el producto final. El conjunto de ecuaciones químicas teóricas que intentan explicar este proceso se llama **mecanismo de reacción química**, el cual consta de un conjunto de reacciones químicas elementales que describen de manera ordenada la forma en que los reactivos interactúan entre ellos formando productos intermedios, hasta formar el producto final. Un ejemplo sencillo es la reacción entre hidrógeno (H_2) y yodo (I_2), para producir yoduro de hidrógeno ($2HI$), cuya reacción neta es



Durante muchos años se pensó que la reacción ocurría en un solo paso, pero en la década de 1960 los químicos observaron que el mecanismo de reacción es mucho más complejo, y se propuso un mecanismo de reacción de dos pasos:



donde dos átomos de yoduro (I^-) son los productos intermedios [4].

1.5. Panorama histórico del problema

Como ya mencionamos, la formación del producto final en una reacción química, puede pasar por la formación de productos intermedios, este fenómeno puede tener diferentes comportamientos. En particular la cantidad de sus concentraciones, puede oscilar en el tiempo. Al principio del siglo XIX se consideraban irrelevantes las reacciones químicas donde aparecieran estas oscilaciones, esto se debe a que los químicos creían que las oscilaciones sólo podían ocurrir en sistemas químicos heterogéneos, es decir, no se pensaba que las oscilaciones químicas fueran posibles en sistemas homogéneos.

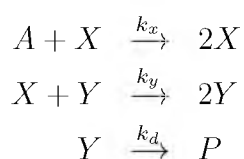
A continuación describiremos los estudios químicos que abrieron paso a la comprensión y aceptación de las oscilaciones químicas en sistemas homogéneos, así como los modelos matemáticos que describen este fenómeno y su avance a través del tiempo.

En 1828, Fechner describió una célula electroquímica que produjo una corriente oscilante. Este es el primer informe publicado de oscilaciones en un sistema químico del que se tiene conocimiento [8].

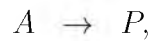
En 1899, Ostwald observó que la tasa de disolución de cromo en un ácido, aumentó y disminuyó periódicamente [8].

Por otro lado, los primeros modelos teóricos que intentaban explicar las oscilaciones químicas fueron realizados por Alfred Lotka. Este matemático dedicó una parte de su vida a estudiar las oscilaciones químicas. En 1910 publicó un artículo donde demostraba que un conjunto de reacciones consecutivas puede dar lugar a oscilaciones amortiguadas antes de alcanzar el equilibrio [8].

En 1920 Lotka continuaba con su búsqueda del comportamiento oscilatorio derivado de la cinética de acción de masas, de la misma manera que Volterra. El modelo de Lotka-Volterra consiste de tres pasos irreversibles



cuya reacción neta es



el comportamiento de X e Y en este modelo se puede describir mediante el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= k_x ax - k_y xy \\ \dot{y} &= k_y xy - k_d y.\end{aligned}$$

Este modelo genera un comportamiento oscilatorio fundamentado a partir de simples reacciones químicas con la cinética de acción de masas. Sin embargo, no es una descripción apropiada de ningún sistema químico real, ya que si el sistema es perturbado ya sea añadiendo un poco más de A o X o Y , este continúa oscilando, pero ahora con un nuevo periodo y amplitud, hasta que es perturbado de nuevo. Esto quiere decir que en presencia de cualquier cantidad significativa de ruido, el comportamiento difícilmente sería reconocible como periódico, ya que estaría saltando constantemente de un comportamiento oscilatorio a otro. Los sistemas químicos reales no se comportan de esta manera, estos oscilan sólo dentro de un rango finito de parámetros, y tienen un modo único (amplitud y frecuencia) de oscilación, a la que retornan si el sistema es perturbado [8]. Su planteamiento no se puede aplicar a ningún sistema químico real, aunque es útil para la descripción de comportamientos ecológicos [8].

En los años 50, Boris Pavlovich Belousov estudiaba el mecanismo del ciclo de Krebs, ver figura (1.1), para lo cual usaba ácido cítrico como sustrato orgánico y reemplazaba el agente oxidante por bromato en medio de ácido sulfúrico y el catalizador organometálico por una sal de cerio IV. El científico ruso observó la decoloración de la solución amarilla (a causa del cerio IV) y la posterior reaparición del color amarillo, este cambio de color continuó por algunas horas [1].

Belousov intentó publicar un artículo relatando su descubrimiento, pero los editores de la revista a la cual envió su manuscrito le contestaron que su supuesto descubrimiento sólo podía ser publicado si se acompañaba de una demostración de que la teoría existente estaba errada. Los editores de esa revista consideraron que no podía haber oscilaciones en sistemas de reacción química (especialmente en medios homogéneos), a pesar de esto Belousov decidió seguir trabajando para aclarar el mecanismo de la reacción que había encontrado, seis años después escribió otro artículo, que también fue rechazado. A sus 64 años, Belousov decidió no publicar más y retirarse; sin embargo, su receta de reacción oscilante circulaba por las aulas de varias universidades de la desaparecida URSS sin

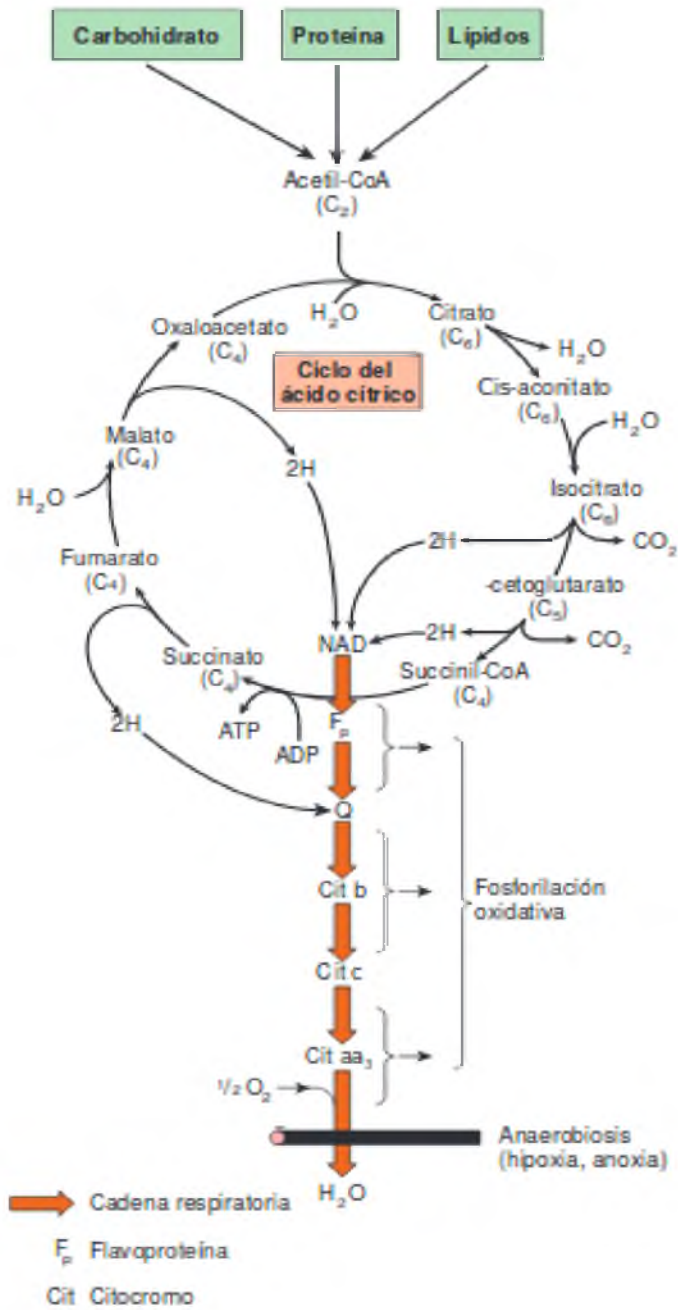


Figura 1.1: El ciclo de Krebs o ciclo del ácido cítrico o ciclo de los ácidos tricarbóxicos es una sucesión de reacciones químicas, que forma parte de la respiración celular en todas las células aeróbicas. Figura tomada de [18].

conocerse su origen. La receta se hizo tan popular que tras una laboriosa búsqueda de su autor se logró que éste publicara el resumen en 1958, que hoy se conoce como el primer reporte escrito de la reacción de Belousov [1].

En 1961, Anatol Markovich Zhabotinsky comenzó un estudio sobre el mecanismo de la reacción de Belousov, realizó sus propios experimentos, y se comunicó con Belousov para que diera su opinión, Zhabotinsky publicó un artículo relatando su descubrimiento en 1964 [1].

H. Degn en Copenhague conoció el trabajo de Zhabotinsky y publicó su propia versión del mecanismo en inglés, pero en occidente la reacción sólo llamó la atención cuando en 1968 Zhabotinsky y sus colaboradores, en compañía de Busse, dieron a conocer sus trabajos en una conferencia internacional celebrada en Praga sobre oscilaciones biológicas y bioquímicas [1]. Debido al importante papel desarrollado por Zhabotinsky en el estudio de la reacción de Belousov, hoy se conoce la reacción como el oscilador BZ. Se sabe que cuando se publicó el primer artículo de oscilaciones químicas en occidente ya se habían publicado más de diez artículos sobre reacciones BZ en ruso [8].

En 1968 fue propuesto un primer modelo matemático que describía las oscilaciones presentes en las reacciones químicas oscilantes de una forma más precisa, éste fue presentado por Prigogine y Lefever. En 1973, Tyson le dio a este modelo el nombre de "Brusselator" (traducido como Bruselador) [8].

Mediante análisis y simulación numérica Prigogine y Lefever demostraron que su modelo presentaba oscilaciones homogéneas y ondas propagadoras como las observadas en el sistema BZ. El Bruselador era extremadamente importante porque mostraba que un mecanismo químicamente razonable podía exhibir la auto-organización. En 1977, Nicolis y Prigogine resumieron el trabajo de la escuela de Bruselas en un libro titulado *Self Organization in Nonequilibrium Systems*. Por sus contribuciones al estudio de los sistemas fuera del equilibrio termodinámico, Ilya Prigogine fue galardonada con el Premio Nobel de Química de 1977 [8].

Después de la década de los setenta comenzaron a surgir muchos trabajos explicando estas oscilaciones químicas. El principal problema en aceptar oscilaciones en sistemas químicos era que parecían contradecir la segunda ley de la termodinámica la cual indica que la entropía de un sistema aislado solo puede aumentar monótonamente, debido a esto, la oscilación en la concentración de especies químicas es una gran violación a esta ley.

Los químicos creían que la oscilación ocurría entre la concentración de los reactivos y los productos, y esto requería que la energía libre del sistema oscilara a medida que los reactivos se convertían en productos, pero la entropía de un sistema aumenta monótonamente solo cuando el sistema de estudio está o aislado o muy cerca del equilibrio termodinámico. Los sistemas que presentan oscilaciones químicas son sistemas abiertos con intercambios grandes de materia y energía con sus alrededores y muy alejados del

equilibrio, veáse el apéndice B [8].

A partir de la década de 1930, Lars Onsager, Ilya Prigogine y otros compañeros de trabajo, se dieron cuenta de que las ideas termodinámicas podían aplicarse a sistemas alejados del equilibrio, pero que se requería una nueva teoría. Prigogine y sus colaboradores en Bruselas se centraron en los sistemas químicos, señalando que un sistema podría organizarse (disminuir su entropía), siempre y cuando el cambio de entropía en el universo fuera positivo, por ejemplo, las concentraciones de los productos intermedios en una reacción pueden aumentar y disminuir con el tiempo mientras que la energía libre disminuye monótonamente como resultado de la conversión continua de reactivos de alta energía libre en productos de baja energía libre [8].

En las siguientes figuras se bosqueja con más detalle esta idea. Para ser consistentes con la segunda ley de la termodinámica la energía libre y la concentración de productos intermedios deben comportarse como se muestra.

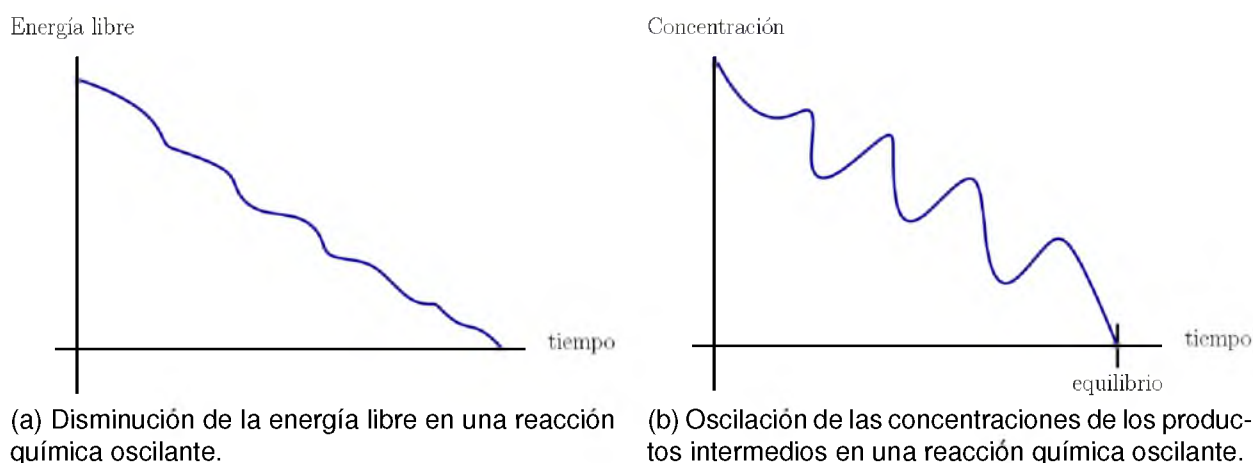


Figura 1.2: Comportamiento de la energía libre y la concentración de productos intermedios en una reacción química oscilante [8].

En 1955, Prigogine señaló que los sistemas abiertos lejos del equilibrio podrían exhibir una auto organización espontánea disipando la energía al entorno para compensar la disminución de la entropía en el sistema, a esas estructuras temporales o espaciales, las denominó estructuras disipativas [8].

Actualmente sabemos que las oscilaciones químicas no violan la segunda ley de la termodinámica, debido a que sólo le ocurren a las concentraciones de productos intermedios y cuando el proceso químico está muy lejos del equilibrio, además de que en la mayoría de los sistemas químicos que muestran oscilaciones los productos intermedios son sustancias que catalizan su propia formación.

1.6. Reacción oscilante Belousov-Zhabotinsky

Las definiciones e ideas principales de esta subsección serán consideradas como en [7]. En la reacción BZ las oscilaciones sucesivas no duran indefinidamente, sino que después de ciertas repeticiones el sistema deja de reaccionar y al alcanzar el equilibrio químico la entropía del sistema es mayor que la que tenía antes de empezar la reacción, en perfecta concordancia con lo establecido por la segunda ley de la termodinámica.

La clave en la reacción BZ es la presencia de sustancias que catalizan su propia formación. En las reacciones BZ hay dos productos intermedios que catalizan su propia formación, X e Y , que aparte de producirse a sí mismos inhiben al otro, dando lugar a un proceso competitivo entre ambos, lo que genera la preponderancia alternada de uno y de otro, esto produce las oscilaciones y los cambios de color de la mezcla.

El proceso que siguen las reacciones tipo BZ es el siguiente:

1. Una vez comenzado el proceso químico se dan las condiciones necesarias para que surja un producto intermedio X , éste rápidamente empieza a catalizar la producción de sí mismo.
2. Un tiempo después, los reactivos que permiten la creación de X comienzan a agotarse hasta caer en picada y en la mezcla abundan solamente los productos de X , que a su vez ayudan a la formación de un nuevo producto intermedio Y .
3. Se dan las condiciones para que el segundo producto intermedio se forme y comience a catalizar su propia formación.
4. La concentración de los reactivos que permiten la creación de Y cae en picada y en la mezcla abundan solamente los productos de Y , que a su vez ayudan a que X se produzca.
5. La competencia entre los dos productos intermedios seguirá dentro de un tiempo, después el sistema químico alcanzará su equilibrio.

En el experimento de Belousov existe un factor externo que mezcla las reacciones, pero en ausencia de mezclado, la única fuente de movilidad de los catalizadores es la difusión molecular.

La difusión molecular lleva a cabo el transporte entre las moléculas de los compuestos y se define como un proceso espontáneo por el cual las moléculas de los reactivos se esparcen en todas las direcciones a causa de los choques con las moléculas del medio o solvente. La difusión controla la cantidad disponible de un reactivo en una región, dando lugar a las variaciones locales y, por lo tanto, a la aparición de patrones. Se ha observado

que estas variaciones no se propagan de manera aleatoria, sino como anillos concéntricos o espirales que irradian hacia afuera, como cuando se tira una piedra en el agua.

Existe una gran cantidad de estudios acerca de oscilaciones químicas en reacciones donde también se toma en cuenta un proceso de difusión. El trabajo pionero donde estos dos ingredientes se consideran fue realizado por Turing.

Patrón de Turing

Alan M. Turing observó que a pesar de que los dos procesos, la reacción química y la difusión molecular, son homogeneizadores por separado, juntos pueden dar lugar a patrones estacionarios cuando se les combina de una forma específica. En el artículo de 1952, *The Chemical Basis of Morphogenesis*, Turing establece cómo se pueden formar patrones químicos espaciales y como relacionar estos patrones con aquellos observados en la naturaleza. Turing propuso que la generación de forma y orden en un ser vivo puede relacionarse directamente con el orden generado por un prepatrón químico de la siguiente manera: supongamos que en el medio celular del cigoto se puede generar un patrón químico mediante algún mecanismo, y que en las células existen sustancias capaces de responder a la concentración local de ese químico (morfógeno), de tal forma que si esa concentración sobrepasa cierto valor, la célula expresa un rasgo y si no sobrepasa ese umbral, entonces expresa otro.

El resultado final es la traducción de un prepatrón químico en una diferenciación de órganos, de tejidos, piel, etc. El mecanismo para establecer el prepatrón químico que Turing encontró se conoce como reacción-difusión.

El esquema de Turing es el siguiente:

1. Un compuesto X lleva a cabo una reacción autocatalítica para generar más de ella misma. La velocidad con la que X se genera depende de la cantidad de X preexistente.
2. X activa la formación de un compuesto Y que inhibe la formación de más X .
3. El inhibidor debe difundirse más rápidamente que el activador, porque de otro modo, el inhibidor agotaría por completo la presencia de X en la región y se terminaría la reacción.

Este mecanismo de Turing no toma en cuenta perturbaciones, la reacción ocurre de manera espontánea, a diferencia del esquema BZ donde debe haber perturbaciones en el medio para que aparezcan diferencias de concentración.

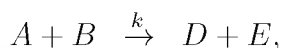
1.7. Bruselador

El Bruselador es conocido como el primer modelo teórico que mostraba oscilaciones que se asemejaban a las oscilaciones que ocurrían en procesos químicos, fue propuesto por Ilya Prigogine y Levefer en 1968, en la Universidad Libre de Bruselas, y se denominó así por el acrónimo de Bruselas y oscilador.

El mecanismo de reacción del Bruselador está dado por cuatro ecuaciones químicas elementales



cuya reacción neta es



este modelo describe paso a paso cómo los reactivos A y B reaccionan para convertirse en productos finales D y E , mediante cuatro pasos, donde se pueden observar la formación y comportamiento de dos productos intermedios, X e Y , los cuales tienen como característica principal la catalización de su propia formación.

En este modelo se ha demostrado la existencia de oscilaciones químicas y ondas viajeras como las encontradas en la reacción BZ [7]. Actualmente existe una gran cantidad de trabajos realizados sobre este modelo, pero en sus inicios se consideró como un modelo irrelevante, debido a que faltaba un mecanismo químico experimental que se comportara como éste. Es decir, sin la aceptación de reacciones como la BZ, tampoco los modelos como el Bruselador serían aceptados.

Capítulo 2

Conceptos preliminares de sistemas dinámicos.

En este capítulo enunciamos los conceptos básicos y los teoremas de sistemas dinámicos continuos y discretos necesarios para analizar el modelo del Bruselador en el capítulo 3. Al final proponemos una interpretación química de los conceptos matemáticos expuestos.

2.1. Introducción a los sistemas dinámicos

La idea intuitiva de un sistema dinámico es la de un proceso determinístico, donde si se conoce el estado presente de un sistema y su regla de evolución, el estado pasado y el futuro pueden ser predecidos bajo ciertas condiciones. Esto ha sido de gran ayuda para explicar fenómenos en la física, química, biología y sociología, entre otras ciencias. Las definiciones y teoremas de esta sección se tomaron como en [15].

Definición 1. *Un sistema dinámico es una tripleta $\{T, X, \varphi^t\}$, donde T es el conjunto de tiempos, X es un espacio de estados y $\varphi^t : X \rightarrow X$ es una familia de operadores de evolución parametrizados por $t \in T$ que satisfacen las siguientes propiedades:*

- $\varphi^0 = Id$, donde $Id(x) = x$ para todo $x \in X$.
- $\varphi^{t+s} = \varphi^t \circ \varphi^s$ para todo $t, s \in T$.

Ahora vamos a definir cada uno de los elementos que componen el sistema dinámico.

- El espacio de estados

Definición 2. *Un conjunto X , se llama **espacio de estados** del sistema, si consiste de todos los posibles estados de un sistema.*

Cada rama de la ciencia proporciona un espacio de estados apropiado. El espacio de estados también se conoce como **espacio fase**, por ejemplo, si modelamos el crecimiento de la población, el número de individuos sería un entero positivo, en este caso el espacio fase es $\mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$.

- El tiempo

La evolución de un sistema dinámico significa un cambio en el estado del sistema respecto a la variable independiente, a la cual nos referimos como **tiempo**, $t \in T$. En esta tesis consideramos dos tipos de sistemas dinámicos determinísticos: aquellos con tiempo continuo, es decir, $T \in \mathbb{R}$, y aquellos con tiempo discreto, donde $T \in \mathbb{Z}$.

- El operador de evolución

Consideramos que un sistema dinámico cambia en el tiempo, ese cambio está indicado por una función llamada operador de evolución.

Definición 3. El mapeo $\varphi^t : X \rightarrow X$ es llamado **operador de evolución del sistema dinámico**, si dado un estado inicial $x_0 \in X$,

$$x_t = \varphi^t(x_0),$$

es decir, el operador de evolución transforma el estado inicial $x_0 \in X$, en algún estado $x_t \in X$ en el tiempo $t \in T$.

Para poder observar las propiedades de un sistema dinámico usamos imágenes geométricas, ya que esto facilita la comprensión de la evolución del sistema. Los objetos geométricos básicos asociados a un sistema dinámico son sus órbitas en el espacio de estados y el retrato fase compuesto por estas órbitas.

2.1.1. Órbitas

Definición 4. Una órbita o trayectoria que comienza en un estado inicial x_0 es un subconjunto ordenado del espacio de estados X ,

$$O(x_0) = \{x \in X : x = \varphi^t(x_0), \text{ para todo } t \in T \text{ tal que } \varphi^t(x_0) \text{ está definido}\}.$$

Las órbitas de un sistema de tiempo continuo con un operador de evolución continuo son curvas en el espacio de estados X parametrizadas por el tiempo t y orientadas por la dirección de incremento en el tiempo.

Las órbitas de un sistema de tiempo discreto son sucesiones de puntos en el espacio de estados X enumeradas por enteros crecientes.

Las órbitas más simples de un sistema dinámico son los puntos de equilibrio.

Definición 5. Un punto $x^* \in X$ es llamado un punto de equilibrio del sistema dinámico si $\varphi^t(x^*) = x^*$ para todo $t \in T$.

Dado que en Química existe el equilibrio químico, en esta tesis llamaremos estado estacionario al punto de equilibrio en dinámica continua y punto fijo al punto de equilibrio en la dinámica discreta. Otro tipo de órbita relativamente simple es un ciclo.

Definición 6. Un ciclo u órbita periódica L_0 es una órbita que no es un estado estacionario o punto fijo, tal que cada punto $x_0 \in L_0$ satisface $\varphi^{t+T_0}(x_0) = \varphi^t(x_0)$ para algún $T_0 > 0$, para todo $t \in T$.

El mínimo T_0 con esta propiedad es llamado el periodo del ciclo L_0 .

Si un sistema comienza su evolución en el punto x_0 en el ciclo, regresará a este punto después de T_0 unidades de tiempo. Este tipo de sistema exhibe oscilaciones periódicas. En el caso continuo un ciclo L_0 es una curva cerrada.

Definición 7. Un ciclo es llamado **ciclo límite** si en su vecindad no hay otros ciclos.

En el caso de tiempo discreto un ciclo (u órbita periódica) es un conjunto finito de puntos

$$x_0, f(x_0), f^2(x_0), \dots, f^{N_0}(x_0) = x_0,$$

donde $f = \varphi^1$ y el periodo $T_0 = N_0 \in \mathbb{Z}$. Note que cada punto de este conjunto es un punto fijo de la N_0 -ésima iteración f^{N_0} del mapeo f .

Podemos clasificar todas las posibles órbitas de un sistema dinámico en: puntos de equilibrios, ciclos (órbitas periódicas) y otros comportamientos. Éstas pueden ser observadas en el retrato fase, donde podemos determinar el número y tipos de estados asintóticos a los que el sistema tiende cuando $t \rightarrow +\infty$. El retrato fase se basa en la representación de órbitas clave que permiten entender la dinámica.

Definición 8. El retrato fase de un sistema dinámico es una partición del espacio de estados en órbitas.

En el caso de tiempo continuo es común usar el término flujo para el operador de evolución. Uno de los conceptos que nos ayuda a caracterizar el comportamiento asintótico de un sistema dinámico es el de conjuntos invariantes.

2.1.2. Conjuntos invariantes

Intuitivamente un conjunto invariante de un sistema dinámico es aquel que bajo el operador de evolución de dicho sistema evoluciona hacia sí mismo.

Definición 9. Un conjunto invariante de un sistema dinámico $\{T, X, \varphi^t\}$ es un subconjunto $S \subset X$ tal que si $x_0 \in S$ implica que $\varphi^t(x_0) \in S$ para todo $t \in T$.

Es decir $\varphi^t(S) \subset S$ para todo $t \in T$. Podemos notar que un conjunto invariante S consta de las órbitas del sistema dinámico, y que cualquier órbita individual $O(x_0)$ es también un conjunto invariante.

Los conjuntos invariantes más simples son los puntos de equilibrio y los ciclos, los siguientes son las variedades invariantes, esto es, hipersuperficies de dimensión finita en algún espacio \mathbb{R}^K .

Si el espacio de estados X está dotado de una métrica ρ , podemos considerar conjuntos invariantes cerrados en X .

Para representar un estado asintótico observable de un sistema dinámico, un conjunto invariante S_0 debe ser estable, es decir, debe "atraer" órbitas cercanas.

Supongamos que tenemos un sistema dinámico $\{T, X, \varphi^t\}$, donde X es un espacio métrico completo. Sea S_0 un conjunto invariante cerrado.

Definición 10. Un conjunto invariante S_0 es llamado estable si:

- Para cualquier vecindad suficientemente pequeña U de S_0 , existe una vecindad V de S_0 tal que $\varphi^t(x) \in U$ para todo $x \in V$ y para todo $t > 0$.
- Existe una vecindad U_0 de S_0 tal que $\varphi^t(x) \rightarrow S_0$ para todo $x \in U_0$, cuando $t \rightarrow +\infty$.

Si S_0 es un punto de equilibrio (estado estacionario o punto fijo) o un ciclo y cumple la definición anterior, decimos que es estable. La primera propiedad se conoce como estabilidad de Lyapunov y la segunda se llama estabilidad asintótica. Si x^* es un punto fijo en un sistema dinámico discreto, suave (continuamente diferenciable) y de dimensión finita, entonces se pueden establecer condiciones suficientes para su estabilidad a partir del Jacobiano evaluado en el punto fijo x^* .

2.1.3. Estabilidad de sistemas dinámicos discretos

Definición 11. Considere un sistema dinámico discreto $x \mapsto f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, donde f es un mapeo continuamente diferenciable. Suponga que tiene un punto fijo x^* , es decir, $f(x^*) = x^*$, y denotamos por A la matriz jacobiana de $f(x)$ evaluada en x^* , $A = f_x(x^*)$.

- El punto fijo x^* es estable si todos los valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A satisfacen $|\mu| < 1$.
- El punto fijo x^* es inestable si uno o más valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A satisfacen $|\mu| > 1$.

Aquellos puntos fijos para los que A tiene uno o varios valores propios tal que $|\mu| = 1$ serán tratados en la sección 2.4, véase [15, 20].

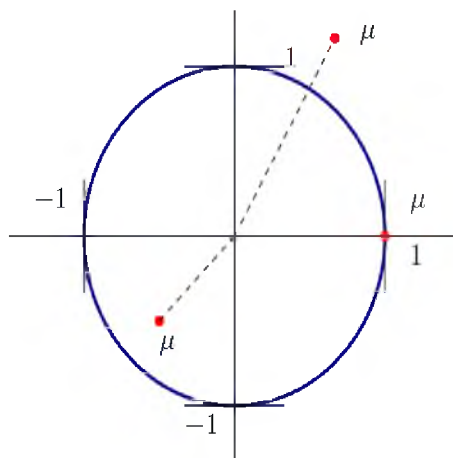


Figura 2.1: La estabilidad de cada punto fijo está determinada por la ubicación de los valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A en el círculo unitario. El punto fijo x^* es estable si todos los valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A están dentro del círculo unitario. El punto fijo x^* es inestable si uno o más de los valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A están fuera del círculo unitario. El punto fijo x^* es no hiperbólico si uno o más valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A están sobre el círculo unitario.

Los valores propios de un punto fijo son usualmente llamados multiplicadores. En el caso lineal la definición tiene su origen en la forma normal de Jordan. Esta definición aplicada a la N_0 -ésima iteración f^{N_0} del mapeo f en cualquier punto de una órbita periódica, también da una condición suficiente para la estabilidad de un N_0 -ciclo.

La estabilidad de un punto fijo de un sistema dinámico discreto también puede determinarse a partir del siguiente teorema:

Teorema 1 (Teorema de contracción de mapeos). *Sea X un espacio métrico completo con norma definida por ρ . Supongamos que existe un mapeo $f : X \rightarrow X$ que es continuo y que satisface, para todo $x, y \in X$,*

$$\rho(f(x), f(y)) \leq \lambda \rho(x, y) \quad (2.1)$$

para algún $0 < \lambda < 1$. Entonces el sistema dinámico discreto $\{\mathbb{Z}_+, X, f^k\}$ tiene un punto fijo estable $x^* \in X$. Además, $f^k(x) \rightarrow x^*$ cuando $k \rightarrow +\infty$, partiendo de cualquier punto $x \in X$.

Demostración. Iterando $\rho(f(x), f(y)) \leq \lambda \rho(x, y)$ obtenemos

$$\rho(f^k(x), f^k(y)) \leq \lambda^k \rho(x, y) \quad (2.2)$$

para $x, y \in X$ y $k \in \mathbb{N}$.

Entonces, $(f^k(x))_{k \in \mathbb{N}}$ es una sucesión de Cauchy, por que

$$\begin{aligned} \rho(f^m(x), f^k(x)) &\leq \sum_{t=0}^{m-k-1} \rho(f^{k+t+1}(x), f^{k+t}(x)) \\ &\leq \sum_{t=0}^{m-k-1} \lambda^{k+t} \rho(f(x), x) \leq \frac{\lambda^k}{1-\lambda} \rho(f(x), x) \end{aligned}$$

Para $m \geq k$, y $\lambda^k \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \infty$. Entonces, $\lim_{k \rightarrow \infty} f^k(x)$ existe, porque la sucesión de Cauchy en un espacio métrico completo converge. El límite es único debido a (2.2). Denotamos ese límite por x_0 . Entonces,

$$\begin{aligned} \rho(x_0, f(x_0)) &\leq \rho(x_0, f^k(x)) + \rho(f^k(x), f^{k+1}(x)) + \rho(f^{k+1}(x), f(x_0)) \\ &\leq (1 + \lambda) \rho(x_0, f^k(x)) + \lambda^k \rho(x, f(x)) \end{aligned}$$

para $x \in X$ y $k \in \mathbb{N}$. Entonces $f(x_0) = x_0$ porque $\rho(x_0, f^k(x)) \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \infty$. \square

2.1.4. Estabilidad de sistemas dinámicos continuos

La manera más común de definir un sistema dinámico continuo es usando ecuaciones diferenciales. Consideramos que el espacio de estados de un sistema es $X = \mathbb{R}^n$ con coordenadas (x_1, x_2, \dots, x_n) , si el sistema está definido en una variedad (líneas, subconjuntos abiertos de \mathbb{R}^n , S^n , superficies como el toro, botella de Klein), estas coordenadas pueden ser consideradas como coordenadas locales en él. Comúnmente la evolución del sistema está dada implícitamente en términos de las velocidades \dot{x}_i como función de las coordenadas (x_1, x_2, \dots, x_n) :

$$\dot{x}_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

o en forma vectorial

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

Esta ecuación representa un sistema de n ecuaciones diferenciales autónomas ordinarias (ODEs) y es conocida como campo vectorial, ya que asigna un vector $f(x)$ a cada punto x . Si $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es continuamente diferenciable el teorema de existencia y unicidad de las ecuaciones diferenciales garantiza la solución de la ecuación y la unicidad de esta.

Los estados estacionarios pueden calcularse a partir de resolver la ecuación $f(x) = 0$, ya que si $f(x) = 0$, entonces, $\varphi^t(x_0) = x_0$ para todo $t \in \mathbb{R}$. La estabilidad de estos estados

estacionarios también puede ser observada a partir del espacio fase, mediante el siguiente teorema:

Teorema 2. *Considere un sistema dinámico definido por $\dot{x} = f(x)$, con $x \in \mathbb{R}^n$ donde f es continuamente diferenciable. Suponga que hay un estado estacionario x^* y denote por A la matriz jacobiana de $f(x)$ evaluada en el estado estacionario x^* , $A = f_x(x^*)$, entonces x^* es estable si todos los valores propios $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de A satisfacen $Re(\lambda_i) < 0$ para $i = 1, 2, \dots, n$.*

Por otra parte, si hay un estado estacionario x^* , y $A = f_x(x^*)$, entonces x^* es inestable si al menos un valor propio $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de A satisface $Re(\lambda_i) > 0$ para algún $i = 1, 2, \dots, n$ y el resto cumple que $Re(\lambda_i) < 0$.

Cabe recordar que los valores propios son las raíces de la ecuación característica o polinomio característico $p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$, donde I es la matriz identidad. El teorema puede ser probado fácilmente para un sistema lineal $\dot{x} = Ax$, $x \in \mathbb{R}^n$, por medio de su solución explícita en una base donde A tiene forma normal de Jordan. Para un sistema no lineal se puede colocar el estado estacionario en el origen por medio de un cambio de coordenadas.

2.2. Equivalencia topológica

Si queremos comparar dos o más sistemas dinámicos y estudiar sus comportamientos en general, debemos definir cuándo son cualitativamente similares o equivalentes. Intuitivamente esperaríamos que dos sistemas equivalentes tengan el mismo número de equilibrios con el mismo tipo de estabilidad, las posiciones relativas de estos conjuntos invariantes y la forma de sus regiones de atracción también deberían ser similares, es decir, deberíamos observar retratos fase que puedan ser obtenidos uno a partir del otro mediante una transformación continua.

Definición 12. *Un sistema dinámico $\{T, X, \varphi^t\}$ es llamado topológicamente equivalente a un sistema dinámico $\{T, X, \psi^t\}$ si hay un homeomorfismo $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ que mapea órbitas del primer sistema en órbitas del segundo sistema, preservando la dirección del tiempo.*

Recordemos que un homeomorfismo f entre dos espacios métricos es una función biyectiva donde f y la función inversa f^{-1} son continuas.

2.2.1. Caso discreto

En este caso podemos obtener una relación explícita entre dos sistemas dinámicos invertibles, topológicamente equivalentes, de tiempo discreto. Sean

$$x \mapsto f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n \tag{2.3}$$

y

$$y \mapsto g(y), \quad y \in \mathbb{R}^n \quad (2.4)$$

dos sistemas dinámicos discretos, considere una órbita del sistema (2.3)

$$\dots, f^{-1}(x), x, f(x), f^2(x), \dots \quad (2.5)$$

comenzando en el punto x y una órbita del sistema (2.4) comenzando en el punto y

$$\dots, g^{-1}(y), y, g(y), g^2(y), \dots \quad (2.6)$$

La equivalencia topológica implica que si x y y están relacionados por el homeomorfismo h , $y = h(x)$, entonces la primera órbita es mapeada en la segunda por h , es decir, $g(y) = h(f(x))$ o $g(h(x)) = h(f(x))$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Definición 13. Dos mapeos f y g que satisfacen $f = h^{-1} \circ g \circ h$ para algún homeomorfismo h son llamados conjugados.

Los sistemas dinámicos de tiempo discreto que son topológicamente equivalentes son comúnmente llamados conjugados.

2.2.2. Caso continuo

Para sistemas dinámicos continuos existen dos formas para indicar que dos sistemas son topológicamente equivalentes.

Sistemas dinámicos difeomorfos.

Consideremos dos sistemas continuos $\dot{x} = f(x)$ y $\dot{y} = g(y)$, con $x, y \in \mathbb{R}^n$, con f y g continuos y sean φ^t y ψ^t sus flujos correspondientes, los sistemas son llamados **difeomorfos** si existe un difeomorfismo $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $y = h(x)$ tal que $f(x) = M^{-1}(x)g(h(x))$ para todo $x \in \mathbb{R}^n$, donde $M(x) = \frac{dh(x)}{dx}$ es la matriz jacobiana de $h(x)$ evaluada en el punto x , de esta manera el sistema $\dot{y} = g(y)$ es obtenido a partir del sistema $\dot{x} = f(x)$ por el cambio de coordenadas $y = h(x)$, entonces, h mapea las soluciones de \dot{x} en soluciones de \dot{y} ,

$$h(\varphi^t(x)) = \psi^t h(x).$$

Recordemos que un difeomorfismo entre dos subconjuntos X e Y de \mathbb{R}^n es una función h diferenciable e invertible, con h^{-1} diferenciable.

Dos sistemas difeomorfos son prácticamente idénticos y pueden ser vistos como el mismo sistema sólo con un cambio de coordenadas. Esto es, si x^* e $y^* = h(x^*)$ son

los estados estacionarios y $A(x^*)$ y $B(y^*)$ son sus correspondientes matrices jacobianas evaluadas en los estados estacionarios, entonces, diferenciando la ecuación $f(x) = M^{-1}(x)g(h(x))$ obtenemos $A(x^*) = M^{-1}(x^*)B(y^*)M(x^*)$, por lo tanto, los polinomios característicos de las matrices $A(x^*)$ y $B(y^*)$ coinciden. Además, los ciclos límite difeomorfos tienen los mismos multiplicadores y periodos.

Sistemas dinámicos orbitalmente equivalentes.

Ahora consideremos dos sistemas dinámicos continuos $\dot{x} = f(x)$ y $\dot{y} = g(y)$, $x, y \in \mathbb{R}^n$ estos sistemas son llamados **orbitalmente equivalentes** si existe una función $\mu : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ continuamente diferenciable y positiva ($\mu(x) > 0$) tal que

$$f(x) = \mu(x)g(x)$$

para todo $x \in \mathbb{R}^n$.

Si f y g son orbitalmente equivalentes, entonces son homeomorfos, ya que sus órbitas son idénticas y sólo son diferentes por el tiempo de parametrización. El homeomorfismo h es el mapeo identidad $h(x) = x$. Dos sistemas orbitalmente equivalentes pueden no ser difeomorfos, teniendo ciclos que parecen la misma curva cerrada en el espacio fase, pero tienen diferentes periodos.

La dinámica no lineal es un campo de estudio relevante en muchas áreas, que incluyen matemáticas, mecánica, aeronáutica, circuitos eléctricos, sistemas de control, problemas de población y ecología, entre otros. En general, cualquier sistema dinámico contiene ciertos parámetros que deben analizarse para entender cómo cambia la dinámica del sistema cuando estos parámetros cambian. Los estudios de los sistemas dinámicos no lineales pueden ser divididos en dos categorías principales: análisis locales y análisis globales, estas dos categorías necesitan ser tratadas con diferentes teorías y metodologías. Los estudios locales están relacionados con el estudio en la vecindad de un punto crítico, es decir, no en \mathbb{R}^n sino en alguna región $U \subset \mathbb{R}^n$, tal región puede ser por ejemplo la vecindad de un estado estacionario (o un punto fijo), o un ciclo, ejemplos de análisis local son el estudio de las bifurcaciones silla-nodo y Hopf. El primer paso para realizar este tipo de análisis es la simplificación del sistema, esta simplificación debe ser tal que mantenga el comportamiento dinámico del sistema original, es decir, el sistema simplificado será topológicamente equivalente al sistema original. Por otra parte, ejemplos de análisis globales son la búsqueda de órbitas heteroclínicas, homoclínicas, o el caos. En este trabajo nos enfocamos en análisis locales.

En la clasificación topológica de los retratos fase cercanos a puntos de equilibrio la siguiente definición es útil.

Definición 14. Un sistema dinámico $\{T, \mathbb{R}^n, \varphi^t\}$ es llamado localmente equivalente topológicamente cerca de un estado estacionario x^* a otro sistema dinámico $\{T, \mathbb{R}^n, \psi^t\}$ cerca de un estado estacionario y^* si existe un homeomorfismo $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que:

- está definido en una pequeña vecindad $U \subset \mathbb{R}^n$ de x^* ;
- satisface $y^* = h(x^*)$;
- envía órbitas del primer sistema en U a órbitas del segundo sistema en $V = h(U) \subset \mathbb{R}^n$, preservando la dirección del tiempo.

Si U es una vecindad abierta de x^* , entonces V es una vecindad abierta de y^* , y los estados estacionarios x^* y y^* , al igual que las regiones U y V coinciden.

Definición 15. Dos sistemas $\dot{x} = f(x)$ y $\dot{y} = g(y)$ son llamados orbitalmente difeomorfos si $\dot{y} = g(y)$ es difeomorfo al sistema que es orbitalmente equivalente a $\dot{x} = f(x)$.

De acuerdo a esta definición, dos sistemas son equivalentes (en \mathbb{R}^n o en alguna región $U \subset \mathbb{R}^n$) si podemos transformar uno de ellos en otro por un cambio de coordenadas (dado por una función invertible y diferenciable) y una multiplicación por una función diferenciable positiva de las coordenadas. Dos sistemas orbitalmente difeomorfos son topológicamente equivalentes, la inversa no es verdad.

2.3. Clasificación de puntos fijos y estados estacionarios

A continuación estudiamos la geometría del espacio fase cerca de los puntos hiperbólicos en sistemas dinámicos discretos y continuos.

2.3.1. Puntos fijos hiperbólicos en sistemas de tiempo discreto

Considere un sistema dinámico de tiempo discreto $x \mapsto f(x)$, con $x \in \mathbb{R}^n$, donde el mapeo f es un difeomorfismo. Sea x^* un punto fijo del sistema (es decir, $f(x^*) = x^*$) y sea A la matriz jacobiana $\frac{df}{dx}$ evaluada en x^* . Los valores propios $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$ de A son llamados multiplicadores del punto fijo.

Sean m_-, m_0 y m_+ los números de multiplicadores de x^* fuera, sobre y dentro del círculo unidad respectivamente.

Definición 16. Un punto fijo es llamado hiperbólico si $m_0 = 0$, esto es, si no hay multiplicadores sobre el círculo unidad.

Definición 17. Un punto fijo hiperbólico es llamado de tipo silla si $m_-, m_+ \neq 0$.

Para un punto fijo x^* (no necesariamente hiperbólico) introducimos los siguientes conjuntos invariantes $W^s(x^*) = \{x : f^k(x) \rightarrow x^*, k \rightarrow +\infty\}$, llamado el conjunto estable de x^* y $W^u(x^*) = \{x : f^k(x) \rightarrow x^*, k \rightarrow -\infty\}$ llamado el conjunto inestable de x^* , donde $k \in \mathbb{Z}$ y $f^k(x)$ denota la k iteración de x^* bajo f .

Teorema 3 (Variedades estables locales). *Sea x^* un punto fijo hiperbólico (es decir $m_0 = 0, m_- + m_+ = n$), entonces las intersecciones de $W^s(x^*)$ y $W^u(x^*)$ con una vecindad suficientemente pequeña de x^* contiene subvariedades continuamente diferenciables $W_{loc}^s(x^*)$ y $W_{loc}^u(x^*)$ de dimensión m_- y m_+ respectivamente.*

Más aún $W_{loc}^s(x^)$ es tangente en x^* a T^s , donde T^s es el espacio propio generado por los vectores propios de todos los valores propios μ de A con $|\mu| < 1$. Similarmente, $W_{loc}^u(x^*)$ es tangente en x^* a T^u , donde T^u es el espacio propio generado por los vectores propios de todos los valores propios μ de A con $|\mu| > 1$.*

La idea de la prueba de este teorema es como sigue: para la variedad inestable $W^u(x^*)$, tomamos la variedad lineal T^u que pasa a través de un punto fijo y le aplicamos el mapeo f^1 , la imagen de T^u es alguna variedad no lineal de dimensión m_+ tangente a T^u en x^* . Si repetimos el proceso, podemos demostrar que las iteraciones convergen a una subvariedad invariante continuamente diferenciable definida en la vecindad de x^* y tangente a T^u en x^* . El límite es una variedad local inestable $W_{loc}^u(x^*)$. Para el caso de la variedad estable $W^s(x^*)$ a T^s se le aplica el mapeo f^{-1} y la prueba se realiza de la misma manera.

El teorema de Hartman-Grobman es un resultado muy importante en la teoría de los sistemas dinámicos ya que establece que bajo ciertas condiciones, en la vecindad de un punto fijo o estado estacionario hiperbólico, un sistema dinámico planteado por mapeos o ecuaciones diferenciales no lineales tiene la misma estructura y comportamiento cualitativo que su linealización.

Teorema 4 (Teorema de Hartman-Grobman). *Dado un sistema dinámico no lineal $x \rightarrow f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, si x^* es un punto fijo hiperbólico, existen dos vecindades U y V , $x^* \in U$ y un homeomorfismo $h : U \rightarrow V$ tal que: $h \circ f = A \circ h(y)$ para todo $y \in U$. A es la matriz jacobiana evaluada en el punto fijo x^* , es decir h es una conjugación local.*

La prueba de este teorema es la misma que en sistemas dinámicos continuos, para más detalles véase [19].

Los retratos fases de sistemas topológicamente equivalentes también se dice que son topológicamente equivalentes. El siguiente teorema nos proporciona la clasificación topológica de puntos fijos hiperbólicos.

Teorema 5. *Los retratos fase de $x \mapsto f(x)$ cerca de dos puntos fijos hiperbólicos, x^* y y^* , son localmente topológicamente equivalentes si y sólo si estos puntos fijos tienen el mismo*

número m_- y m_+ de multiplicadores con $|\mu| < 1$ y $|\mu| > 1$, respectivamente, y los signos de los productos de todos los multiplicadores con $|\mu| < 1$ y con $|\mu| > 1$ son los mismos para ambos puntos fijos [23].

La prueba del teorema anterior se sigue del teorema de Hartman-Grobman, dado que cerca de un punto fijo hiperbólico el sistema es topológicamente equivalente a su linealización $x \mapsto Ax$ y las condiciones adicionales a los productos se deben al hecho de que los sistemas dinámicos pueden definirse como mapeos que preservan la orientación o mapeos de orientación reversa en las variedades estables e inestables cerca del punto fijo. Un difeomorfismo en \mathbb{R}^l preserva la orientación en \mathbb{R}^l si $\det(J) > 0$, donde J es la matriz jacobiana, y de otra manera invierte la orientación. Dos mapeos topológicamente equivalentes deberían tener las mismas propiedades de orientación. Los productos en el teorema anterior son exactamente los determinantes de las matrices jacobianas del mapeo $x \mapsto f(x)$ restringido a sus variedades locales estables e inestables. Solamente se requiere tomar en cuenta los multiplicadores reales para calcular estos signos, ya que el producto de un par de multiplicadores complejos conjugados es siempre positivo.

2.3.2. Estados estacionarios hiperbólicos en sistemas de tiempo continuo

Considere un sistema dinámico continuo definido como $\dot{x} = f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, donde f es continuamente diferenciable. Sea x^* un estado estacionario del sistema (es decir, $f(x^*) = 0$) y sea A denota la matriz jacobiana $\frac{df}{dx}$ evaluada en x^* .

Sea m_-, m_0 y m_+ los números de valores propios de A (contando multiplicidades) con parte real negativa, cero y positiva respectivamente.

Definición 18. *Un estado estacionario es llamado hiperbólico si $m_0 = 0$, esto es, si no hay valores propios en el eje imaginario.*

Definición 19. *Un estado estacionario hiperbólico es llamado punto silla si la cantidad de $m_-, m_+ \neq 0$.*

Para un estado estacionario x^* (no necesariamente hiperbólico), introducimos dos conjuntos invariantes: $W^s(x^*) = \{x : \varphi \rightarrow x^*, t \rightarrow +\infty\}$ es llamado el conjunto estable de x^* y $W^u(x^*) = \{x : \varphi \rightarrow x^*, t \rightarrow -\infty, \}$ es llamado el conjunto inestable de x^* , donde φ^t es el flujo asociado con $\dot{x} = f(x)$.

Teorema 6 (Variedades estables locales). *Sea x^* un estado estacionario hiperbólico (es decir $m_0 = 0, m_- + m_+ = n$), entonces las intersecciones de $W^s(x^*)$ y $W^u(x^*)$ con una vecindad suficientemente pequeña de x^* contienen subvariedades continuamente diferenciables $W_{loc}^s(x^*)$ y $W_{loc}^u(x^*)$ de dimensión m_- y m_+ respectivamente.*

Más aún $W_{loc}^s(x^*)$ es tangente en x^* a T^s , donde T^s es el espacio propio generado por los vectores propios de todos los valores propios de A con $Re(\lambda) < 0$.

Similarmente, $W_{loc}^u(x^*)$ es tangente en x^* a T^u , donde T^u es el espacio propio generado por los vectores propios de todos los valores propios de A con $Re(\lambda) > 0$.

La idea de la prueba de este teorema es como sigue: para la variedad inestable $W^u(x^*)$, tomamos la variedad lineal T^u que pasa a través de un punto de equilibrio y le aplicamos el mapeo φ^1 , la imagen de T^u es alguna variedad no lineal de dimensión m_+ tangente a T^u en x^* . Si repetimos el proceso, podemos demostrar que las iteraciones convergen a una subvariedad invariante continuamente diferenciable definida en la vecindad de x^* y tangente a T^u en x^* . El límite es una variedad local inestable $W_{loc}^u(x^*)$. Para el caso de la variedad estable $W^s(x^*)$ tomamos la variedad lineal T^s y le aplicamos el mapeo φ^{-1} .

Teorema 7 (Teorema de Harman-Grobman). *Sea x^* un estado estacionario hiperbólico del campo vectorial $f(x)$, entonces el sistema no lineal $\dot{x} = f(x)$ y su linealización $\dot{\zeta} = A\zeta$, donde A es la matriz jacobiana evaluada en el estado estacionario x^* , son topológicamente equivalentes.*

La prueba de este teorema se muestra con detalle en [19].

El siguiente teorema da la clasificación topológica de los estados estacionarios hiperbólicos.

Teorema 8. *Los retratos fase del sistema $\dot{x} = f(x)$ cerca de dos estados estacionarios hiperbólicos x^* y y^* son localmente topológicamente equivalentes si y sólo si estos estados estacionarios tienen los mismos números m_- y m_+ de valores propios con $Re(\lambda) < 0$ y con $Re(\lambda) > 0$, respectivamente.*

La prueba del Teorema está basada en dos ideas. Primero, es posible mostrar por el teorema de Hartman-Grobman que cercano a un estado estacionario hiperbólico el sistema $\dot{x} = f(x)$ es localmente topológicamente equivalente a su linealización $\dot{\zeta} = A\zeta$, este resultado se aplica a ambos estados estacionarios x^* y y^* . Segundo, se aplica el hecho de que dos sistemas lineales topológicamente equivalentes tienen el mismo número de valores propios con $Re(\lambda) < 0$ y $Re(\lambda) > 0$ y no tienen valores propios en el eje imaginario.

Los resultados clásicos conocidos sobre la clasificación de estados estacionarios bidimensionales se muestran en la tabla (2.1). En sistemas de mayores dimensiones los retratos fase son distintos, para más detalle véase [15, 20].

Hay tres clases topológicas de estados estacionarios en el plano: nodos y focos (estables, inestables), sillas y centros.

Por otro lado, otro comportamiento de un flujo son los ciclos límites las cuales se definen como trayectorias aisladas cerradas, es decir, no existen otras trayectorias cerradas en

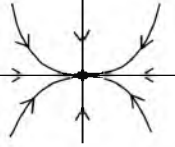

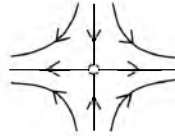
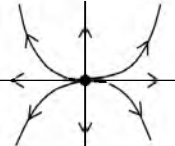

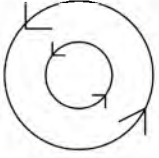
(m_+, m_-)	Valores propios	Retrato fase	Estabilidad
(0,2)	2 reales negativos	 nodo	estable
	2 complejos con parte real negativa	 foco	
(1,1)	2 reales uno negativo y uno positivo	 silla	inestable
(2,0)	2 reales positivos	 nodo	inestable
	2 complejos con parte real positiva	 foco	
(0,0)	2 puramente imaginarios	 centro	neutralmente estable

Tabla 2.1: Clasificación de estados estacionarios en sistemas dinámicos continuos de dos dimensiones.

su vecindad y por lo tanto sus trayectorias vecinas se mueven en espiral acercándose o alejándose a él. El ciclo límite es estable si todas las trayectorias vecinas se acercan al ciclo y es inestable si las trayectorias vecinas se alejan del ciclo; existen casos extraños donde se dice que el ciclo es semiestable y se da cuando algunas trayectorias se alejan del ciclo y otras tienden a él.

Los ciclos límite sólo pueden ocurrir en sistemas no lineales; es imposible que sucedan en sistemas lineales. Aunque un sistema lineal puede tener órbitas cerradas, éstas no son aisladas y corresponden a la dinámica causada por un punto de equilibrio tipo centro.

2.4. Teorema de Variedad Central

Hasta ahora hemos explicado el análisis de la estabilidad de un punto de equilibrio hiperbólico, pero no hemos dicho nada acerca del punto de equilibrio no hiperbólico, un resultado importante para este caso es el Teorema de la Variedad Central, éste teorema demuestra que el comportamiento cualitativo en una vecindad de un punto de equilibrio no hiperbólico es determinado por su comportamiento sobre la variedad central cerca del punto de equilibrio. En esta sección enunciaremos el teorema para sistemas discretos, que también es válido para sistemas dinámicos continuos.

Caso discreto

Considere un sistema dinámico discreto no lineal

$$x \mapsto f(x)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$, f es continuamente diferenciable y $f(0) = 0$. Sean $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ los valores propios de la matriz jacobiana A evaluada en el punto fijo $x^* = 0$. Supongamos que el punto fijo x^* es no hiperbólico, entonces existen valores propios sobre el círculo unidad (algunos valores propios tienen módulo igual uno). Supongamos que hay m_+ valores propios fuera del círculo unitario, m_0 valores propios en el círculo unitario y m_- valores propios dentro del círculo unitario.

Sea T^c el espacio propio generado por los vectores propios de todos los m_0 valores propios de la matriz jacobiana sobre el círculo unidad. Considerando las suposiciones anteriores enunciaremos el siguiente teorema.

Teorema 9 (Teorema de la variedad central). *Existe una variedad invariante $W_{loc}^c(x^*)$, de dimensión m_0 , definida localmente y conocida como la variedad central de $x \mapsto f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$ que es tangente a T^c en x^* . Además existe una vecindad U de x^* tal que si $\varphi(x) \in U$ para todo $t \geq 0$ ($t \leq 0$) entonces $\varphi^t(x) \rightarrow W_{loc}^x(x^*)$ para $t \rightarrow +\infty$ ($-\infty$).*

Ahora considere un sistema dinámico continuo no lineal

$$\dot{x} = f(x),$$

$x \in \mathbb{R}^n$, f es continuamente diferenciable y $f(0) = 0$. Sean $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ valores propios de la matriz jacobiana A evaluada en el estado estacionario $x^* = 0$. Supongamos que el estado estacionario x^* es no hiperbólico, entonces existen valores propios con parte $Re(\lambda) = 0$, supongamos que existen m_+ valores propios con parte $Re(\lambda) > 0$, m_0 valores propios con parte $Re(\lambda) = 0$ y m_- valores propios con parte $Re(\lambda) < 0$. Sea T^c el espacio propio generado por los vectores propios de los m_0 valores propios con parte $Re(\lambda) = 0$. Sea φ^t el flujo asociado a $\dot{x} = f(x)$. El Teorema de la Variedad Central escrito para sistemas discretos es válido también para sistemas dinámicos continuos.

Mientras que las variedades invariantes estable $W^s(x^*)$ e inestable $W^u(x^*)$ son únicas, la variedad central no necesariamente es única. El Teorema de la Variedad Central nos garantiza la existencia de la variedad central pero no nos dice como calcularla, y tampoco nos dice cómo determinar la estabilidad del punto de equilibrio (punto fijo o estado estacionario) no hiperbólico sobre esta variedad.

2.5. Órbitas periódicas

Como dijimos en la sección 2.1 después del punto de equilibrio el siguiente comportamiento más simple en un sistema dinámico son las órbitas periódicas, éstas tienen la característica de dividir el retrato fase en dos partes: una región dentro y la otra región fuera de la órbita periódica. Uno de los criterios más usados e importantes para demostrar la existencia de una órbita periódica es el teorema de Poincaré-Bendixson, el cual no tiene generalización para sistemas de más de dos componentes, y el teorema del Criterio de Bendixson. A continuación escribiremos algunas definiciones que nos permitirán enunciar los teoremas, además describiremos una técnica para analizar la estabilidad de las órbitas periódicas.

Las órbitas se pueden dividir de dos maneras, en órbitas positivas y órbitas negativas. Consideremos un sistema dinámico discreto $x \mapsto f(x)$ o continuo $\dot{x} = f(x)$ tal que $\varphi^t(x_0)$ es una órbita del sistema dinámico que comienza en un estado inicial $x_0 \in X$, donde X es el espacio de estados y $T \in \mathbb{Z}$ si el sistema dinámico es discreto o $T \in \mathbb{R}$ si el sistema dinámico es continuo. Las siguientes definiciones son dadas como en [10, 14].

Definición 20. Una **órbita positiva** es el conjunto

$$O^+(x_0) = \{x \in X : x \in \varphi^t(x_0) \text{ para todo } t \geq 0 \text{ tal que } \varphi^t(x_0) \text{ está definido.}\}$$

Si f es una función continuamente diferenciable e invertible podemos definir una órbita negativa.

Definición 21. Una órbita negativa es el conjunto

$$O^-(x_0) = \{x \in X : x \in \varphi^t(x_0) \text{ para todo } t < 0 \text{ tal que } \varphi^t(x_0) \text{ está definido.}\}$$

De esta manera la órbita de un sistema dinámico es el conjunto $O(x_0) = O^+(x_0) \cup O^-(x_0) = \{x \in X : x \in \varphi^t(x_0) \text{ para todo } t \in T \text{ tal que } \varphi^t(x_0) \text{ está definido}\}$.

Existen dos tipos de puntos dentro del sistema dinámico que son de especial interés al momento de describir la dinámica de un sistema, el punto de equilibrio y el punto límite.

Definición 22. Un punto $p \in X$ es un punto límite positivo (negativo) del flujo $\varphi^t(x_0)$ de un sistema dinámico si existe una sucesión monótona $\{t_n\}_{n=0}^\infty$ de números positivos (negativos) donde $t_n \rightarrow \infty (-\infty)$ cuando $n \rightarrow \infty$ tal que $\varphi^{t_n}(x_0) \rightarrow p$ cuando $n \rightarrow \infty$.

Dos conjuntos importantes son el α -límite y el ω -límite, se puede decir que son los lugares geométricos donde nace o muere la órbita de un sistema dinámico.

Definición 23. Se llama conjunto límite positivo $\omega(x_0)$ del flujo $\varphi^t(x_0)$ o de la órbita $O(x_0)$ del sistema dinámico al conjunto de todos los puntos límite positivos de $\varphi^t(x_0)$ donde $t \geq 0$.

A este conjunto comúnmente se le llama conjunto ω -límite.

Definición 24. Se llama conjunto límite negativo $\alpha(x_0)$ del flujo $\varphi^t(x_0)$ o de la órbita $O(x_0)$ del sistema dinámico al conjunto de todos los puntos límite negativos de $\varphi^t(x_0)$ donde $t < 0$.

A este conjunto se le llama conjunto α -límite. Ahora vamos a establecer una relación entre las órbitas periódicas y los conjuntos ω -límite y α -límite.

Obsérvese que si x^* es un punto de equilibrio de un sistema dinámico el conjunto $\omega(x^*) = \alpha(x^*) = x^*$. A continuación escribiremos el teorema de Poincaré-Bendixson, que nos describe los comportamientos posibles en una región del espacio fase, en particular nos garantiza la existencia de órbitas periódicas. Para sistemas dinámicos continuos se enuncia como:

Teorema 10 (Teorema de Poincaré-Bendixson). Consideremos un sistema dinámico

$$\dot{x} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^2.$$

Sea $O^+(x_0)$ una órbita positiva de $\dot{x} = f(x)$ con el conjunto ω -límite. Si $O^+(x_0)$ está contenida en un subconjunto compacto $M \subset \mathbb{R}^2$ y el conjunto ω -límite no contiene al estado estacionario de $\dot{x} = f(x)$, entonces el conjunto ω -límite es una órbita periódica de $\dot{x} = f(x)$.

La prueba de este teorema toma en cuenta que una curva cerrada en \mathbb{R}^2 que no se interseca a sí misma separa el plano en dos regiones, una adentro y la otra fuera de la curva, para más detalle veáse [10, 14]. El teorema también es válido para el conjunto α -límite.

De este teorema podemos decir que las posibles formas que presenta un sistema dinámico en un conjunto límite compacto o región anular en \mathbb{R}^2 son puntos de equilibrio u órbitas periódicas, y que si asumimos que esta región no contiene un punto de equilibrio del sistema, entonces existe al menos una órbita periódica que atrae todas las trayectorias.

El siguiente criterio es de importancia ya que nos da las condiciones para verificar cuando un sistema dinámico no presenta órbitas periódicas en ciertas regiones de su espacio fase.

Teorema 11 (Criterio negativo de Bendixson). *Si en una región simple conexa $D \subset \mathbb{R}^2$, la expresión $\frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \neq 0$ y no hay cambios de signo, el sistema dinámico $\dot{x} = f(x)$ no tiene órbitas periódicas en D .*

Una forma de demostrar este teorema es por contradicción, suponiendo que en D hay una órbita periódica, para cualquier punto que esté en la órbita periódica, la función vectorial f evaluada en el punto es tangente a la órbita periódica. Ocupando el Teorema de Green y la continuidad de operador de divergencia se llega a una contradicción; véase [10].

Obsérvese que si consideramos un sistema dinámico $\dot{x} = f(x)$, $x \in \mathbb{R}^2$ la expresión $\frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2}$ es la traza de la matriz jacobiana de $\dot{x} = f(x)$.

El teorema de Poincaré-Bendixson solo se aplica para sistemas dinámicos continuos, donde hay muchas maneras de encontrar la región compacta sin el estado estacionario, véase [10, 14]. Y para el caso de sistemas dinámicos discretos se sigue del teorema de bifurcación de Hopf.

2.6. Introducción a las bifurcaciones

Considere un sistema dinámico que depende de sus parámetros. En el caso de tiempo continuo podemos escribirlo como:

$$\dot{x} = f(x, \alpha)$$

mientras que en el caso discreto

$$x \mapsto f(x, \alpha)$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ es la variable de estado y $\alpha \in \mathbb{R}^n$ es un parámetro que no depende del tiempo t . Considere los retratos fase de estos sistemas, al variar los valores del parámetro, el retrato fase también varía, por lo que hay dos posibilidades: o el sistema permanece topológicamente equivalente o su topología cambia.

Definición 25. *La aparición de una topología no equivalente en el retrato fase bajo la variación de parámetros es llamada bifurcación [15].*

Entonces, una bifurcación es un cambio de tipo topológico del sistema cuando sus parámetros pasan por un valor de bifurcación (crítico). Las bifurcaciones se clasifican en globales o locales.

Las bifurcaciones **locales** son aquellas que pueden ser analizadas a través de cambios en la estabilidad local de los puntos de equilibrios, órbitas periódicas u otros conjuntos invariantes cuando los parámetros atraviesan un valor de bifurcación. Ejemplos de bifurcaciones locales son: Bifurcación silla-nodo, tridente, transcítica, Hopf, entre otras.

Y las bifurcaciones **globales** son aquellas que ocurren cuando grandes conjuntos invariantes de un sistema dinámico "chocan" entre sí, o con puntos de equilibrio del sistema. Algunos ejemplos de bifurcaciones globales son: la bifurcación homoclínica, heteroclínica, entre otras.

Una representación útil que nos ayuda a visualizar cómo y dónde ocurren las bifurcaciones es el diagrama de bifurcación.

Definición 26. *Un diagrama de bifurcación del sistema dinámico es una estratificación de su espacio de parámetros inducida por la equivalencia topológica, junto con los retratos fase representativos de cada estrato.*

Si un sistema dinámico tiene dimensión uno o dos y solo depende de un parámetro, el diagrama de bifurcación se representa como un plano donde en uno de los ejes se colocan los valores del parámetro y en el otro eje se indica la estabilidad del sistema. Es común que los equilibrios estables se representen mediante líneas continuas, mientras que los inestables se representen con líneas punteadas.

Intuitivamente esperaríamos que si dos sistemas dinámicos son topológicamente equivalentes, los diagramas de bifurcación serán "equivalentes". Esto se explica usando la forma normal.

Forma normal de una bifurcación.

Una de las herramientas básicas para el estudio del comportamiento dinámico de un sistema cerca de un valor de bifurcación es la teoría de las formas normales topológicas, ésta se utiliza generalmente para verificar si un sistema dinámico presenta un tipo de bifurcación local; en particular, proporciona la forma general de un sistema tal que cualquier otro sistema que cumpla las mismas condiciones de bifurcación sea topológicamente equivalente a él.

Para realizar el análisis de bifurcación de un sistema dinámico con la forma normal, se ocupa una transformación invertible local que depende de un parámetro, este transforma el sistema dinámico original en un nuevo sistema de tipo polinómico, que sea topológicamente equivalente al sistema dinámico dado. Más adelante explicaremos con más detalle la forma normal de la bifurcación de Hopf.

Estabilidad estructural.

Existen sistemas dinámicos tales que su estabilidad y su retrato fase no cambia bajo pequeñas perturbaciones, estos sistemas se conocen como estructuralmente estables bajo perturbaciones.

Ejemplo 1. Sea $\dot{x} = f(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, donde f es una función continuamente diferenciable, a este sistema le aplicamos una pequeña perturbación ε y obtenemos el nuevo sistema $\dot{x} = f(x) + \varepsilon g(x)$, $x \in \mathbb{R}^n$, donde g es una función continuamente diferenciable. Nótese que si $\varepsilon = 0$ obtenemos el sistema original.

El siguiente teorema nos dice bajo que condiciones un sistema dinámico discreto o continuo de dos dimensiones será estructuralmente estable.

Teorema 12 (Andronov-Pontryagin). *Un sistema dinámico $\dot{x} = f(x)$ o $x \mapsto f(x)$, $x \in \mathbb{R}^2$, donde f es continuamente diferenciable, se dice que es **estructuralmente estable** en una región $D_0 \subset \mathbb{R}^2$ si y solo si:*

- Tiene un número finito de equilibrios y ciclos límites en D_0 y todos ellos son hiperbólicos
- No hay separatrices de un punto silla regresando al mismo punto silla o conectando dos puntos sillas diferentes en D_0 .

Recordemos que las separatrices son las órbitas que entran y salen de un punto de equilibrio del tipo silla, éstas órbitas "separan" el comportamiento de las soluciones totalmente distintas.

2.6.1. Bifurcación de Andronov-Hopf

La bifurcación de Hopf se presenta cuando al variar el parámetro de un sistema, un punto estacionario o fijo de dicho sistema cambia su estabilidad al obtenerse un par de valores propios puramente imaginarios, apareciendo un ciclo límite cuya amplitud y frecuencia dependen del valor del parámetro. Es decir, la bifurcación de Hopf es un punto crítico en el que la estabilidad de un sistema cambia y surge una solución periódica. La bifurcación puede ser supercrítica o subcrítica, dando como resultado un ciclo límite estable o inestable. Escribiremos el Teorema de Bifurcación de Hopf para sistemas dinámicos continuos y discretos de manera separada, éstos solo se aplican para sistemas de dos dimensiones.

2.6.1.1. Caso discreto

Teorema 13. *Sea $x \mapsto f(x, a)$, $x \in \mathbb{R}^2$ y $a \in \mathbb{R}^n$ un sistema dinámico discreto donde a es un parámetro del sistema, tal que satisface*

- $f(0, a) = 0$ para todo a .
- La matriz jacobiana A del sistema evaluada en $x = 0$ tiene valores propios $\lambda(a) = \alpha \pm i\beta$ con $|\lambda(0)| = 1$ y $\lambda(0)$ diferente de la k -ésima raíz de la unidad para $k = 1, \dots, 5$.
- $\frac{d}{da}|\lambda(a)| > 0$ cuando $a = 0$.
- En la forma normal

$$\begin{aligned} r_1 &= |\lambda|r + \beta(\lambda)r^3 + O(5) \\ \theta_1 &= \theta + \alpha(\lambda) + \gamma(\lambda)r^2 + O(5) \end{aligned}$$

donde $\lambda = |\lambda|e^{i\alpha}$ y β y γ son constantes y $O(5)$ indica términos de orden cinco, o de mayor potencia, el término $\beta(\lambda(0)) < 0$.

Entonces existe un $\epsilon > 0$ y una curva cerrada $C(a)$ en la forma $r = r(\theta, a)$ definida para $0 < a < \epsilon$ e invariante bajo $f(x, a)$. Además $C(a)$ es estable en una vecindad de $x = 0$ y $C(a) \rightarrow 0$ cuando $a \rightarrow 0$.

La suposición de que $\frac{d}{da}|\lambda(a)| > 0$ cuando $a = 0$ significa que los valores propios cruzan de adentro hacia afuera del círculo unitario cuando a crece.

Si $\frac{d}{da}|\lambda(a)| < 0$ cuando $a = 0$ y de la forma normal el término $\beta(\lambda(0)) > 0$, el teorema es válido. Sin embargo, después de la bifurcación, el círculo invariante es inestable mientras que el origen es estable. Para más detalles de este teorema véase [20].

2.6.1.2. Caso continuo

Teorema 14. Supóngase que el sistema dinámico $\dot{x} = f(x, a)$ con $x \in \mathbb{R}^n$, $a \in \mathbb{R}$ es un parámetro del sistema y tiene un estado estacionario x_0 cuando $a = a_0$ tal que satisface lo siguiente:

- La matriz jacobiana A evaluada en el estado estacionario x_0 tiene un par de valores propios puramente imaginarios
- Sean $\lambda(a)_{1,2} = \alpha \pm i\omega$ los valores propios de la matriz jacobiana que son imaginarios para $a = a_0$ tal que $\frac{d}{da}Re(\lambda(a_0)) = d \neq 0$.

Entonces existe una variedad central que pasa a través de x_0 y un sistema de coordenadas continuamente diferenciables para la cual la expansión de Taylor de grado tres en la variedad central en coordenadas polares está dada como

$$\begin{aligned} \dot{r} &= (da + lr^2)r \\ \dot{\theta} &= \omega + ca + br^2 \end{aligned}$$

donde l es el primer coeficiente de Lyapunov, b y c son constantes. Si $l \neq 0$ existe una región de órbitas periódicas del sistema dinámico sobre la variedad central. Si $l < 0$ entonces estas órbitas periódicas son ciclos límites estables, mientras que si $l > 0$ las órbitas periódicas son inestables. Para sistemas bidimensionales existe una expresión para encontrar el primer coeficiente de Lyapunov.

Considere el sistema dinámico $\dot{x} = Jx + F(x)$ donde $J = \begin{bmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{bmatrix}$, $F(x) = \begin{bmatrix} F_1(x) \\ F_2(x) \end{bmatrix}$, $F(0) = 0$ y la matriz jacobiana A de F evaluada en $x = 0$ es cero. Entonces $l = \frac{1}{16\omega}(R_1 + R_2)$, donde

$$R_1 = F_{1x_1x_2}(F_{1x_1x_1} + F_{1x_2x_2}) - F_{2x_1x_2}(F_{2x_1x_1} + F_{2x_2x_2}) - F_{1x_1x_1}F_{2x_1x_1} + F_{1x_2x_2}F_{2x_2x_2}$$

y

$$R_2 = F_{1x_1x_1x_1} + F_{1x_1x_2x_2} + F_{2x_1x_1x_2} + F_{2x_2x_2x_2}.$$

La prueba de este teorema se sigue como en la demostración del teorema de la Variedad Central, véase [12, 14, 19].

De esta manera podemos decir que una bifurcación de Hopf ocurre cuando una solución periódica o ciclo límite, que rodea un punto de equilibrio, surge o desaparece cuando el parámetro a varía. Cuando un ciclo límite estable rodea un punto de equilibrio inestable, la bifurcación se denomina bifurcación de Hopf supercrítica y si el ciclo límite es inestable y rodea un punto de equilibrio estable, la bifurcación se denomina bifurcación de Hopf subcrítica [17].

2.7. Reacciones químicas con retardo

Los cambios de concentración de los reactivos en una transformación química se representan a través de ecuaciones diferenciales ordinarias de orden n provenientes de las leyes de velocidad.

Para obtener ecuaciones de este tipo hay que hacer una serie de suposiciones clave, algunas de las cuales suelen ser explícitas, otras más ocultas [8], por ejemplo:

- No consideramos la temperatura como una variable, de ser así las leyes de velocidad tendrían la forma de funciones trascendentales no polinomiales.
- Ignoramos las fluctuaciones, de modo que podemos utilizar ecuaciones deterministas en lugar de una formulación estocástica.
- Consideramos que el medio está bien mezclado, con todas las especies uniformemente distribuidas. Cualquier gradiente espacial requeriría la inclusión de términos de difusión y el uso de la teoría de ecuaciones diferenciales parciales.

- Se considera que los fenómenos ocurren instantáneamente, que un cambio en la concentración $[A]$ en el tiempo t genera un cambio en $[B]$ en el tiempo t y no en un tiempo posterior $t + \tau$ [8].

En esta tesis nos interesa observar el comportamiento dinámico de nuestro modelo tomando en cuenta un tiempo de retardo, el retardo puede ser discreto (cuando el retardo toma un valor fijo) o continuo. En algunos modelos puede haber más de un retardo discreto o distribuido, o bien haber combinaciones de ambos tipos de retardo, en particular en esta tesis tomaremos el modelo discreto con retardo discreto, para esto, mencionamos algunos conceptos importantes. Denotaremos un retardo discreto como

$$\mu_\tau = \mu_\tau(t) = \mu(t - \tau),$$

donde $t, \tau \in \mathbb{Z}$, de esta manera escribimos al sistema de ecuaciones en diferencias con un retardo discreto como

$$x_{t+1} = f(x_t, \mu_\tau).$$

Técnica de modelado con ecuaciones en diferencias con retardo.

Sea

$$x_{t+1} = f(x_t) \tag{2.7}$$

un sistema de ecuaciones en diferencias donde $x_t = (x_{1t}, x_{2t}, \dots, x_{nt})$ es un vector del espacio de estados, $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Decimos que el sistema de ecuaciones en diferencias (2.7) tiene un retardo discreto μ_τ en la variable x_{i_t} si $x_{i_t} = \mu_\tau$, con $i = 1, 2, \dots, n$ y el sistema de ecuaciones en diferencias (2.7) se transforma en el sistema $x_{t+1} = f(x_t, \mu_\tau)$ donde $f : \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}^{n+1}$. Obsérvese que al colocar un retardo al sistema de ecuaciones en diferencias su dimensión aumenta una unidad. Una vez que obtenemos el sistema de ecuaciones el análisis cualitativo se realiza de la misma manera que para un sistema de ecuaciones en diferencias.

2.8. Conceptos matemáticos aplicados a la Química.

Como en esta tesis nuestro interés es analizar un modelo matemático que describe un comportamiento químico, a continuación explicaremos a qué corresponden los conceptos matemáticos estudiados en este capítulo interpretados desde la cinética química.

2.8.1. Matemáticas aplicadas a la Química.

En el universo los procesos ocurren a muy distintas escalas de tiempo. Los procesos geológicos, por ejemplo, ocurren a velocidades menores que los procesos evolutivos de los

seres vivos en el planeta Tierra. Los procesos biológicos, a su vez, ocurren comúnmente a velocidades menores con respecto a numerosas reacciones químicas que suceden dentro de los seres vivos. Profundizaremos en la escala de tiempo de las reacciones químicas.

Con el propósito de estudiar y conocer el efecto de diversas condiciones sobre la rapidez de las reacciones químicas (reactantes, productos, cofactores, catalizador, pH, temperatura, etc.), se manipulan las condiciones para que la reacción de interés pueda seguirse con instrumentos como un cronómetro, un colorímetro, un espectrómetro de resonancia magnética nuclear, o un acelerador de partículas para la producción de luz sincrotrón. Además, para que la medición sea posible, el régimen de flujo de la reacción se limita al intervalo en que la cantidad del reactante consumido o producto acumulado cae dentro del intervalo de sensibilidad del método de medición. El régimen de flujo más comúnmente empleado y que cumple con estas condiciones se denomina estado estacionario.

Se dice que un sistema o proceso está en estado estacionario si las variables que definen su comportamiento (las llamadas variables de estado), respecto del tiempo, permanecen invariantes. La expresión matemática expresaría que para aquellas propiedades p del sistema, la derivada parcial de p respecto del tiempo es nula:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0,$$

para todo $t \in T$

El concepto de estado estacionario cobra relevancia en campos como la termodinámica y las ingenierías involucradas con transformaciones. En particular, un sistema físico está en estado estacionario cuando sus características no varían con el tiempo. En este fundamento se basan las teorías de la electrostática y la magnetostática, entre otras. Suele ser la situación a considerar en gran parte de los supuestos de la termodinámica. El estado estacionario también se conoce como el estado en el que se encuentra la naturaleza.

En cinética química el estado estacionario también se puede emplear para determinar la constante de velocidad de una reacción a través de varias experiencias en las cuales se puede suponer que una concentración de algún producto o reactivo no varía. También se dice que un sistema está en estado estacionario si las variaciones con el tiempo de las cantidades físicas son periódicas y se repiten de manera idéntica a cada periodo, una vez que los fenómenos transitorios han desaparecido. Es el caso, por ejemplo de un interferómetro, donde hay ondas cuya amplitud y frecuencia no varía, o como en los circuitos eléctricos alimentados con generadores alternativos.

El estado estacionario es el estado de referencia en termodinámica de procesos irreversibles. En un sistema abierto que está en equilibrio, se define como aquél en el que no varían las variables de estado (temperatura, volumen, presión, etc.) y, por tanto, tampoco se modifican con el tiempo, las funciones de estado (entropía, entalpía, etc.). El estado estacionario es un estado de mínima producción de entropía.

Equilibrio químico.

Es el estado al que se llega al final de cualquier sistema químico. La expresión matemática que representa al Equilibrio Químico, se conoce como Ley de Acción de Masas.

Sea v_d la velocidad de reacción hacia la derecha $aA + bB \rightarrow cC + dD$, y v_i la velocidad de reacción hacia la izquierda $cC + dD \rightarrow aA + bB$, entonces el equilibrio dinámico ocurre cuando $v_d = v_i$; esto quiere decir que el equilibrio se alcanza cuando en la reacción no podemos observar cambios aparentes, aunque la reacción está ocurriendo, esto debido a que en el mismo instante en que un mol del producto se crea, un mol ya creado del producto se consume para volver a ser un reactivo y la relación de concentraciones entre reactivos y productos permanece constante. La figura (2.2) explica con más detalle cómo ocurre este equilibrio.

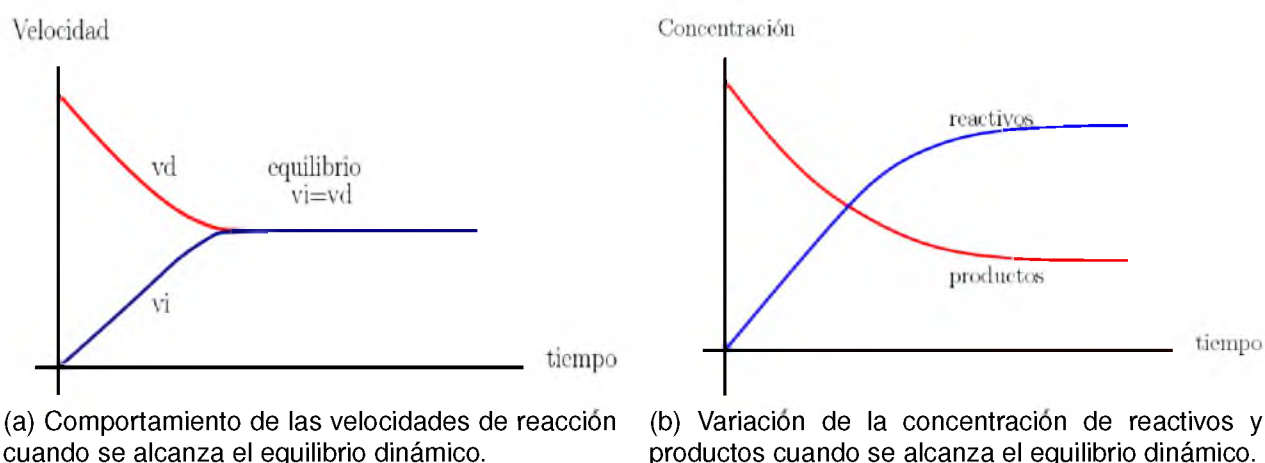
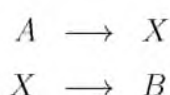


Figura 2.2: (a) Comportamiento de las velocidades en una reacción. (b) Comportamiento de las concentraciones de reactivos y productos.

Interpretación de punto fijo o estado estacionario

En la teoría de sistemas dinámicos un concepto fundamental es el de punto fijo (o estado estacionario). En un sistema de ecuaciones químicas donde existen productos intermedios el estado estacionario o punto fijo ocurre cuando la tasa de formación del producto intermedio es igual a su tasa de desaparición, es decir, si tenemos el siguiente sistema químico



donde el producto intermedio es X , el estado estacionario o punto fijo en este sistema ocurre cuando $\frac{d[X]}{dt} \approx 0$, es decir, no hay acumulación de $[X]$, dado que $[X]$ se forma de $[A]$

tan rápido como se consume para formar $[B]$, en consecuencia la concentración de $[X]$ es casi cero [22]. También en la Química este punto es conocido como estado estacionario.

Relación entre equilibrio y estado estacionario

El equilibrio químico es un caso especial del estado estacionario, debido a que si un sistema químico está en equilibrio está en un estado estacionario, pero un sistema en estado estacionario no necesariamente está en equilibrio, esto es, en un sistema químico cuando se alcanza el equilibrio dinámico las velocidades de formación y desaparición de producto son iguales. Por otro lado, cuando un sistema químico alcanza el estado estacionario, es decir, la cantidad de concentración del producto intermedio no cambia con respecto al tiempo, el sistema puede estar muy lejos o cerca del equilibrio dinámico.

Interpretación química de la estabilidad del estado estacionario o punto fijo

Dado un estado estacionario o punto fijo (α, β) , consideraremos una perturbación como el cambio en cantidad de las concentraciones $(\alpha + \varepsilon, \beta + \varepsilon)$, donde $\varepsilon \in \mathbb{R}$.

Interpretamos un estado estacionario o punto fijo **estable** como aquel que le permite al sistema químico quedarse cerca del estado estacionario o punto fijo ante perturbaciones.

Interpretamos un estado estacionario o punto fijo **inestable** como aquel en el que el sistema químico se aleja del estado estacionario o punto fijo cuando sufre perturbaciones.

Interpretamos un estado estacionario o punto fijo del tipo **punto silla** como aquel en que el sistema químico se aleja o acerca al estado estacionario o punto fijo dependiendo del tipo de perturbación.

En 1990 Peter Gray y Stephen K. Scott [9], hicieron una comparación de la teoría de sistemas dinámicos con sistemas de reacción-difusión de dos componentes. Este sistema captura dos procesos esenciales, la distribución espacial de la concentración de reactivos y el proceso de difusión en un medio bidimensional [8]. A continuación enunciamos algunos de los principales resultados.

- (a) Si el estado estacionario o punto fijo es un nodo estable, cualquier perturbación a este estado estacionario o punto fijo disminuirá y desaparecerá monótonamente.
- (b) Si el estado estacionario o punto fijo es un foco o espiral estable, cualquier perturbación decaerá de nuevo al estado estacionario o punto fijo, como los valores propios son complejos conjugados, la exponencial imaginaria es equivalente a una función seno o coseno, lo que implica que la perturbación oscilará a medida que se desintegra y vuelve al final al estado estacionario o punto fijo.
- (c) Si el estado estacionario o punto fijo es un foco o espiral inestable, las perturbaciones crecerán y girarán en forma de espiral alejándose del estado estacionario o punto fijo.

- (d) Si el estado estacionario o punto fijo es un nodo inestable, cualquier perturbación crecerá exponencialmente lejos del estado estacionario o punto fijo.
- (e) Si el estado estacionario o punto fijo es un punto de silla, los valores propios serán reales: uno positivo y otro negativo, por lo tanto las trayectorias se aproximan al estado estacionario o punto fijo a lo largo del vector propio correspondiente al valor propio negativo, pero luego se alejan del estado estacionario a lo largo de la dirección transversal.
- (f) Si el estado estacionario o punto fijo es un centro, los valores propios se vuelven puramente imaginarios, lo que hace posible que surjan orbitas periódicas o ciclos límites a través de una bifurcación de Hopf. Si el ciclo límite es estable, en cuyo caso se dice que la bifurcación es supercrítica, el estado estacionario o punto fijo pierde su estabilidad y cualquier pequeña perturbación hará que el sistema evolucione hacia un estado de oscilaciones sostenidas. En una bifurcación de Hopf subcrítica, el estado estacionario mantiene su estabilidad, pero queda rodeado por un par de ciclos límite, siendo el interno inestable y el externo estable.

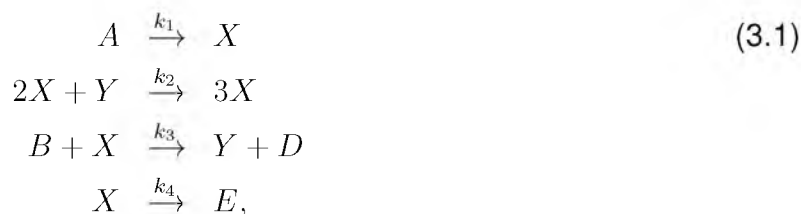
Capítulo 3

Análisis de modelos del Bruselador

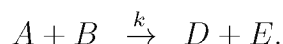
Con las técnicas propuestas en el capítulo anterior, en este capítulo analizaremos la dinámica del Bruselador usando un modelo continuo, dos propuestas de modelo discreto, y una propuesta de modelo discreto con retardo.

3.1. Análisis con sistemas dinámicos continuos

El mecanismo de reacción del Bruselador está dado por cuatro ecuaciones químicas elementales representadas por las siguientes ecuaciones

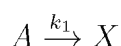


cuya ecuación de reacción neta es



Para cada una de las reacciones químicas que componen este mecanismo calculamos las ecuaciones de velocidad, y aplicamos la ley de velocidad.

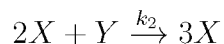
De



la velocidad de la reacción está dada como $v = -[\dot{A}] = +[\dot{X}]$ y por la ley de la velocidad $v = k_1[A]$. A partir de las dos ecuaciones anteriores tenemos entonces que

$$[\dot{A}] = -k_1[A], \quad [\dot{X}] = k_1[A].$$

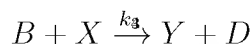
De



la velocidad de la reacción está dada como $v = -\frac{1}{2}[\dot{X}] = -[\dot{Y}] = +\frac{1}{3}[\dot{X}]$ y por la ley de velocidad $v = k_2[X]^2[Y]$. A partir de lo anterior tenemos que

$$[\dot{X}] = k_2[X]^2[Y], \quad [\dot{Y}] = -k_2[X]^2[Y].$$

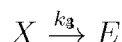
De



la velocidad de la reacción está dada como $v = -[\dot{B}] = -[\dot{X}] = +[\dot{Y}] = +[\dot{D}]$ y por la ley de velocidad $v = k_3[B][X]$. En consecuencia

$$[\dot{B}] = -k_3[B][X], \quad [\dot{X}] = -k_3[B][X], \quad [\dot{Y}] = k_3[B][X], \quad [\dot{D}] = k_3[B][X].$$

De



la velocidad de la reacción está dada como $v = -[\dot{X}] = +[\dot{E}]$ y por la ley de velocidad $v = k_4[X]$, de esta manera

$$[\dot{X}] = -k_4[X], \quad [\dot{E}] = k_4[X],$$

entonces la variación de concentración de los productos intermedios X e Y , dejando como constantes a los reactivos A y B , se expresa como

$$\begin{aligned} [\dot{X}] &= k_1[A] - k_2[X]^2[Y] - k_3[B][X] = -k_4[X] \\ [\dot{Y}] &= -k_2[X]^2[Y] + k_3[B][X] \end{aligned}$$

que se puede escribir como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. En este análisis por simplicidad tomamos las constantes de velocidad $k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = 1$.

El sistema de ecuaciones diferenciales es

$$\begin{aligned} [\dot{X}] &= [A] - [B][X] - [X] + [X]^2[Y] \\ [\dot{Y}] &= [B][X] - [X]^2[Y]. \end{aligned}$$

Escribiendo $[X] = x$, $[Y] = y$, $[\dot{X}] = \dot{x}$, $[\dot{Y}] = \dot{y}$, $[A] = a$ y $[B] = b$ reescribimos el sistema de ecuaciones anterior como,

$$\dot{x} = a - bx - x + x^2y \quad (1) \tag{3.2}$$

$$\dot{y} = bx - x^2y \quad (2)$$

por implicaciones químicas asumimos que $a > 0$ y $b > 0$. Para hallar el estado estacionario consideramos $\dot{x} = 0$ y $\dot{y} = 0$, sumamos ambas ecuaciones (1) y (2), despejamos x y

sustituimos en (2), así determinamos que el único estado estacionario es $x^* = (a, \frac{b}{a})$. Dado que el sistema de ecuaciones (3.2) es no lineal, por el teorema de Hartman-Grobman podemos linealizar el sistema para observar la estabilidad del estado estacionario. De esta manera la matriz jacobiana evaluada en x^* es

$$A = \begin{bmatrix} b-1 & a^2 \\ b & -a^2 \end{bmatrix};$$

en consecuencia, para el sistema linealizado la traza de la matriz jacobiana es $tr(A) = b - (a^2 + 1)$, el determinante es $det(A) = a^2$ y los valores propios son $\lambda_{1,2} = \frac{b - (a^2 + 1) \pm \sqrt{(b - (a^2 + 1))^2 - (2a)^2}}{2}$, obsérvese que el determinante es siempre positivo. De acuerdo con la teoría de sistemas dinámicos continuos sabemos que podemos determinar la estabilidad del estado estacionario analizando la componente real de los valores propios de la matriz jacobiana A .

Si $(a - 1)^2 < b < (a + 1)^2$, el discriminante

$$tr(A)^2 - 4det(A) = (b - (a^2 + 1))^2 - (2a)^2 = (b - (a + 1)^2)(b - (a - 1)^2) < 0,$$

de esta manera la parte real es $Re(\lambda) = \frac{b - (a^2 + 1)}{2}$ y la parte compleja es $Im(\lambda) = \frac{\sqrt{(b - (a^2 + 1))^2 - (2a)^2}}{2}$. Si $b > (a + 1)^2$ o $b < (a - 1)^2$ el discriminante

$$tr(A)^2 - 4det(A) = (b - (a^2 + 1))^2 - (2a)^2 = (b - (a + 1)^2)(b - (a - 1)^2) > 0,$$

en consecuencia la parte real es $Re(\lambda) = \frac{b - (a^2 + 1) \pm \sqrt{(b - (a^2 + 1))^2 - (2a)^2}}{2}$ y no tenemos parte compleja.

Obsérvese que si $b > a^2 + 1$ los valores propios λ_1 y λ_2 son complejos conjugados con parte real mayor que cero, es decir, la traza es positiva, en consecuencia el estado estacionario es inestable.

Por otro lado si $b < a^2 + 1$, los valores propios λ_1 y λ_2 son complejos conjugados con parte real menor que cero, de esta manera, la traza es negativa, y el estado estacionario es estable.

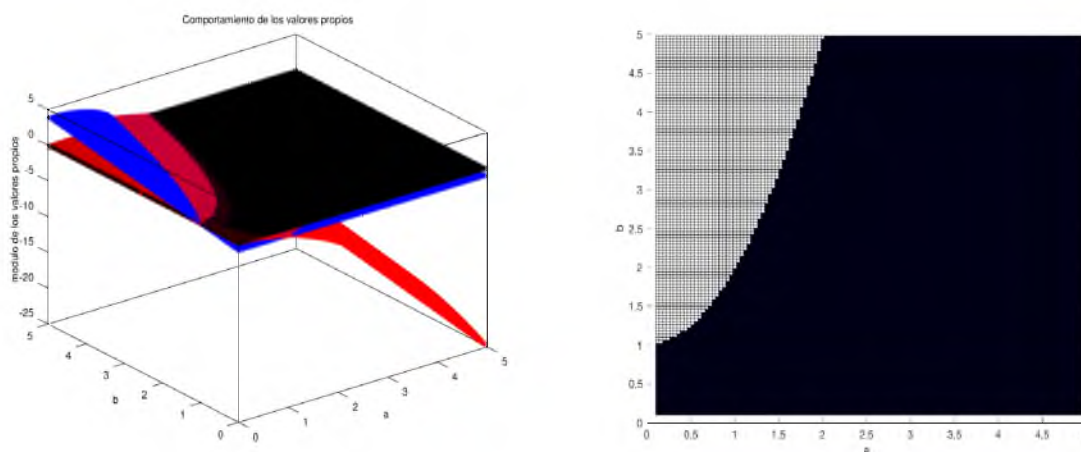
Si $b = a^2 + 1$ los valores propios λ_1 y λ_2 son puramente complejos, de esta manera el estado estacionario es un centro, para mas detalle obsérvese la tabla (2.1). Además para cualquier valor de $b = a^2 + 1$ ocurre una bifurcación de Andronov-Hopf y para $b > a^2 + 1$ ocurre un ciclo límite estable, veáse [21].

En la tabla (3.1) se muestran los comportamientos de las órbitas del sistema al variar los parámetros a y b , obsérvese que el parámetro clave es b .

parámetro b	Discriminante	Traza	Tipo de estado estacionario
$b < (a - 1)^2$	> 0	> 0	nodo inestable
$(a - 1)^2 < b < (a + 1)^2$	< 0	> 0	espiral inestable
$b = a^2 + 1$	< 0	$= 0$	centro
$(a - 1)^2 < b < (a + 1)^2$	< 0	< 0	espiral estable
$b > (a + 1)^2$	> 0	< 0	nodo estable

Tabla 3.1: Comportamiento del retrato fase al variar los valores de los parámetros a y b .

En la figura (3.1) podemos observar las regiones de estabilidad del sistema dinámico (3.2) y el comportamiento de los valores propios para distintos valores de a y b .

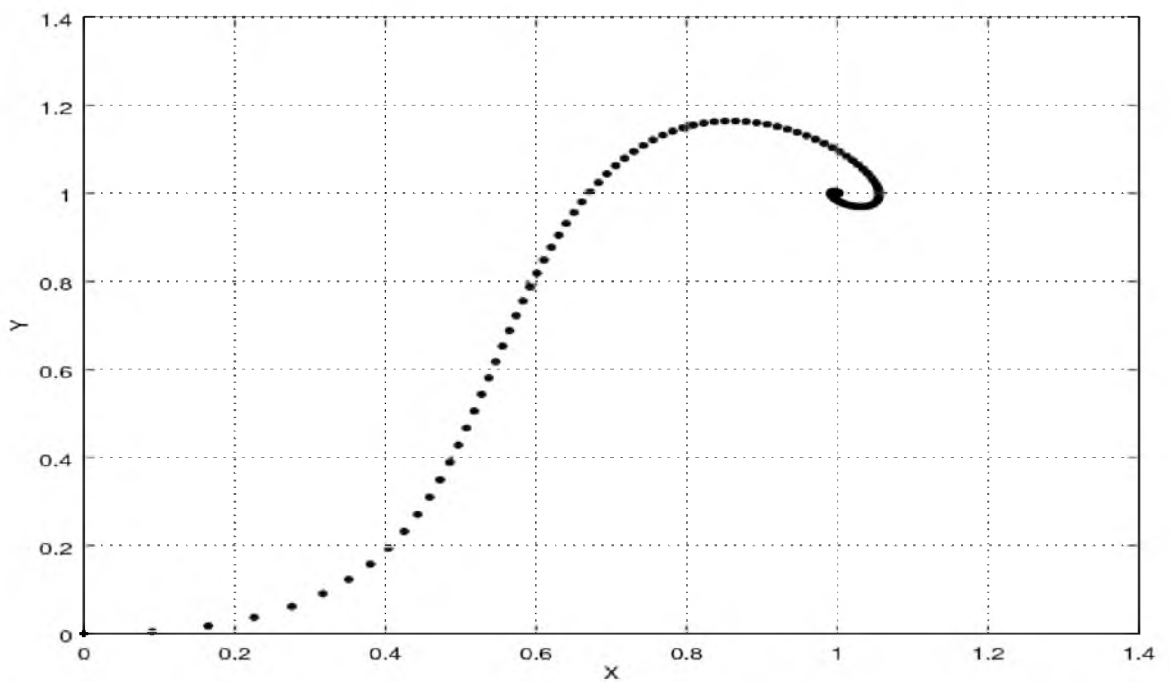


(a) Las superficies de color rojo y azul muestran la parte real de los dos valores propios de A cuando se varían los parámetros a y b . El plano de color negro es el plano cero.

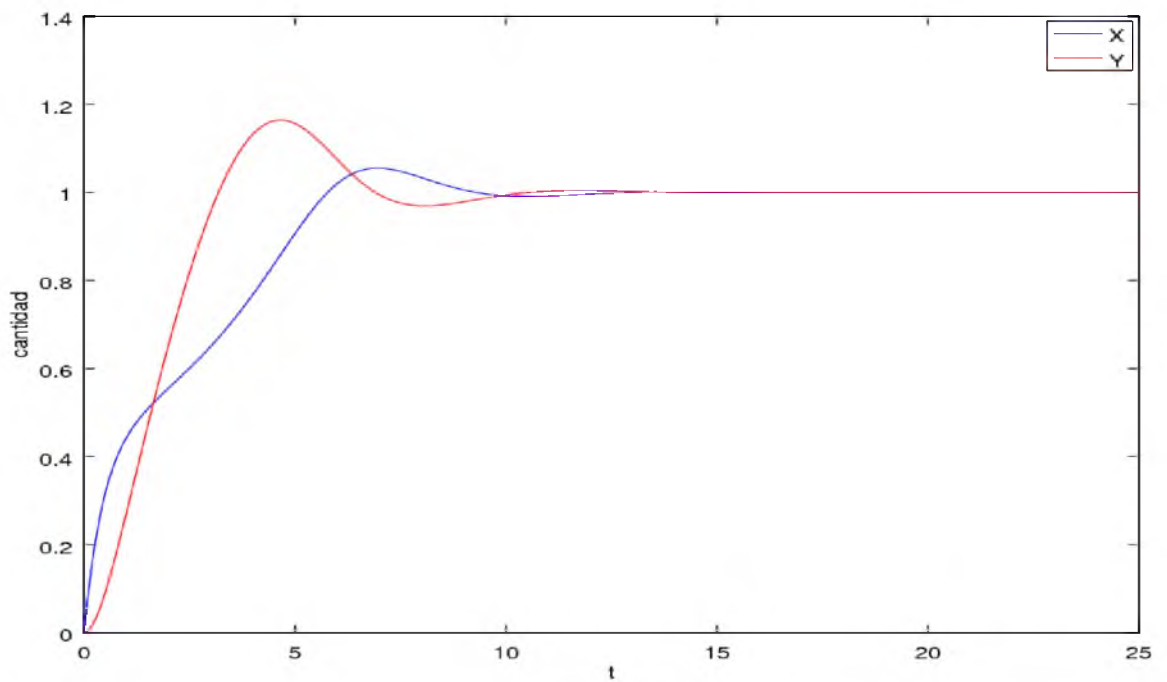
(b) Para cualquier valor de a y b en la región oscura el estado estacionario es estable y en la región gris claro el estado estacionario es inestable.

Figura 3.1: Valores propios y regiones de estabilidad e inestabilidad para el estado estacionario del modelo continuo del Bruselador.

La figura (3.2) muestra el comportamiento del sistema dinámico al tomar algunos valores de a y b específicos, estas figuras se obtuvieron al resolver numéricamente el sistema (3.2) y se utilizó el método de Runge-Kutta de orden 4 programado en Octave, véase el apéndice A.

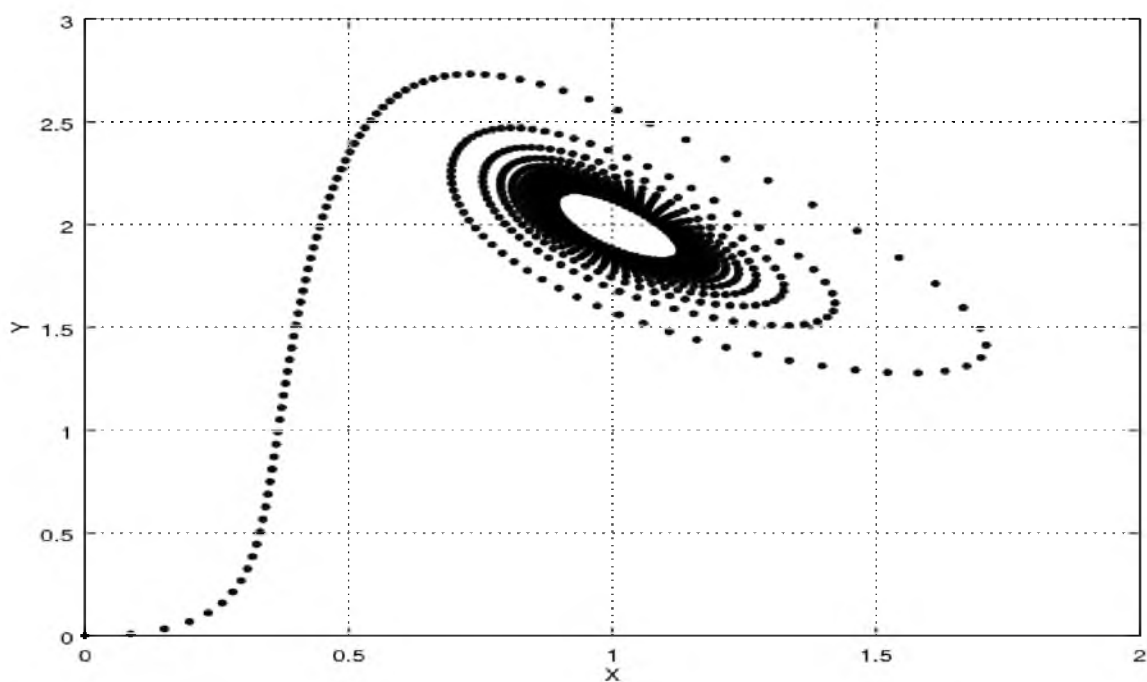


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 1$.

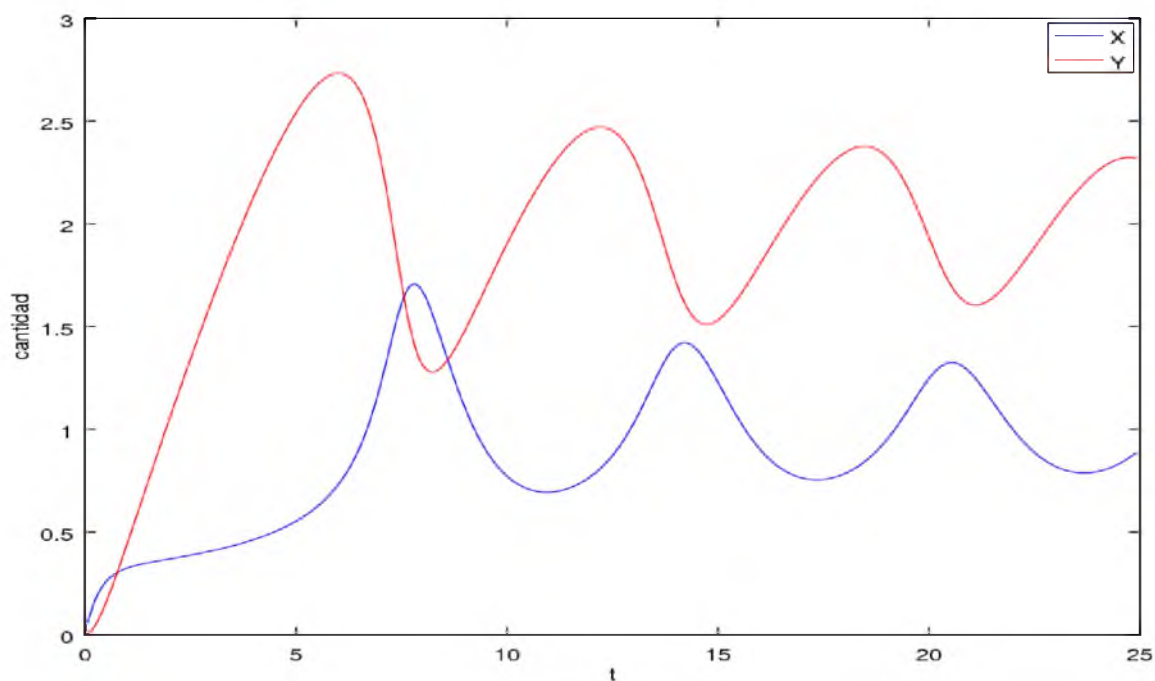


(b) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 1$.

Figura 3.2: Ejemplo de la dinámica del sistema cuando $b > (a^2 + 1)$ y el discriminante es negativo en el modelo continuo.

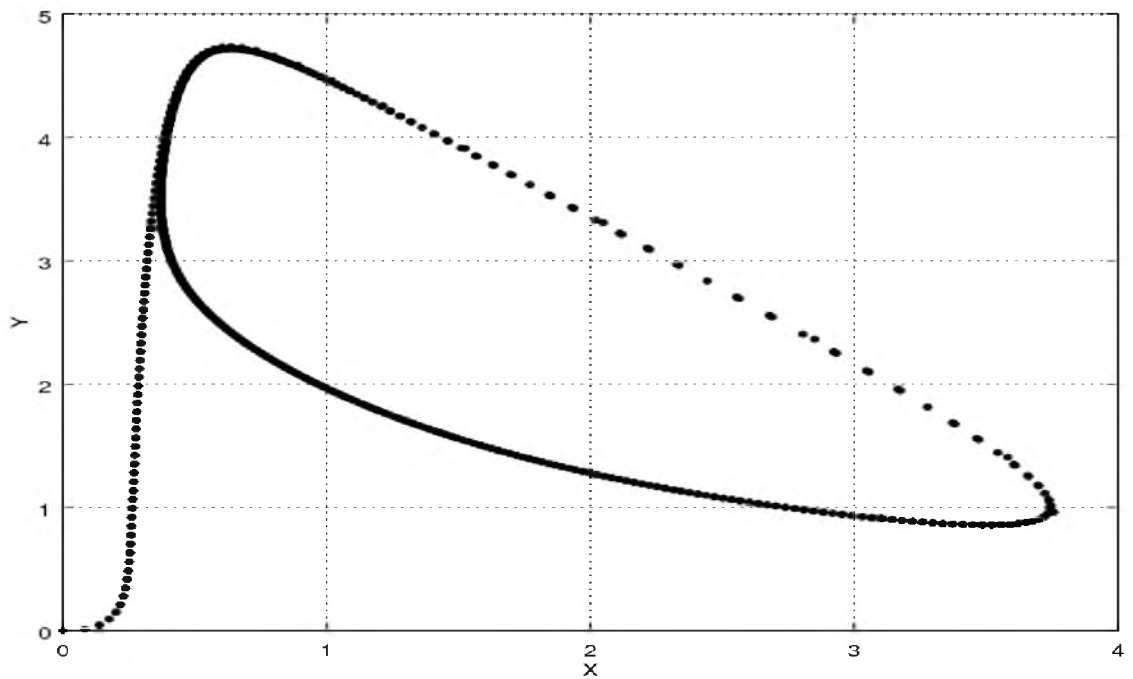


(a) Cuando $a = 1$ y $b = 2$ en el espacio fase se presenta una bifurcación de Andronov-Hopf.

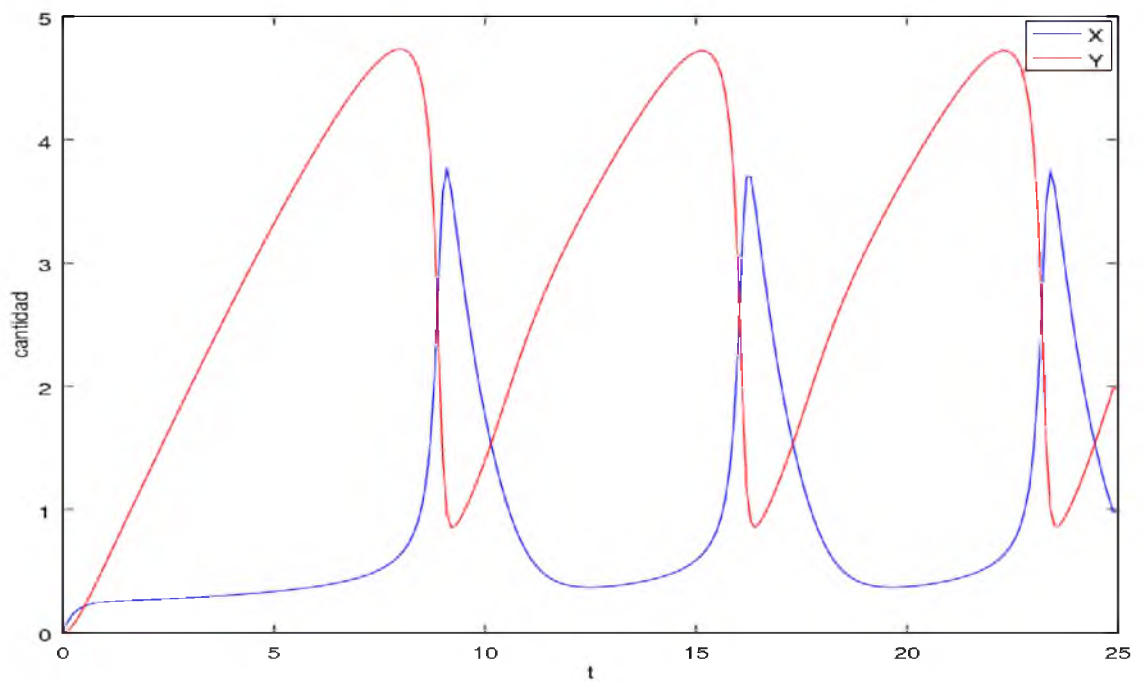


(b) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 2$.

Figura 3.3: Ejemplo de la dinámica del sistema cuando $b = (a^2 + 1)$ y el discriminante es negativo en el modelo continuo.



(a) Cuando $a = 1$ y $b = 3$ en el espacio fase se presenta un ciclo límite.



(b) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 3$.

Figura 3.4: Ejemplo de la dinámica del sistema cuando $b < (a^2 + 1)$ y el discriminante es negativo en el modelo continuo.

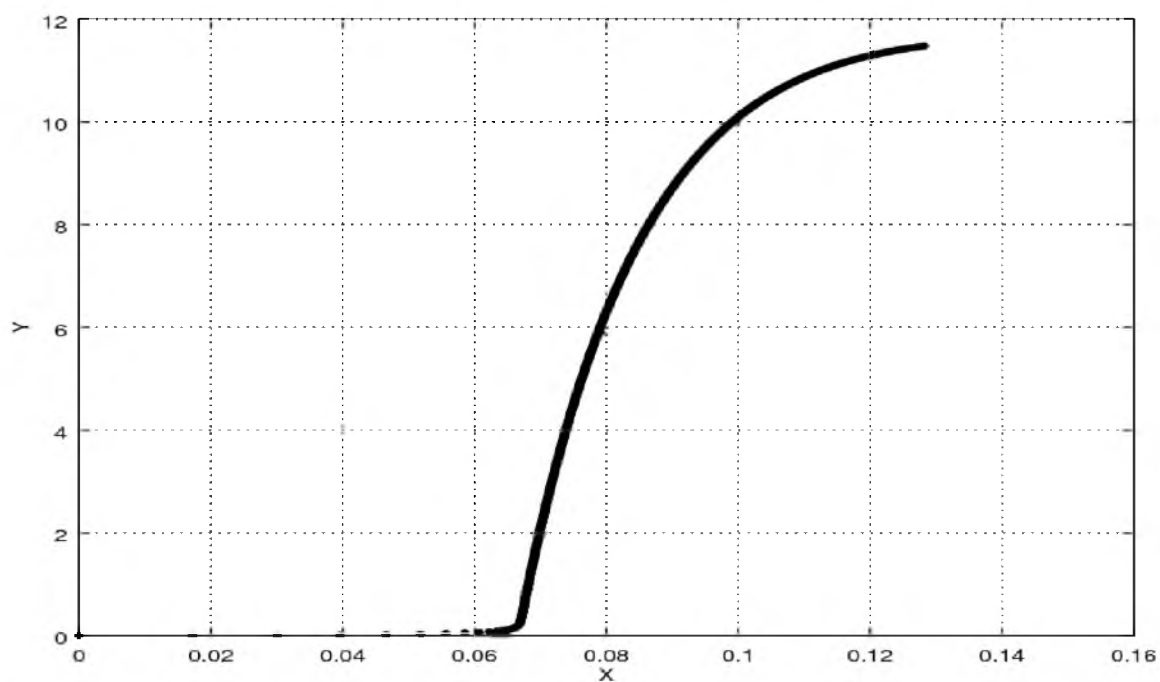
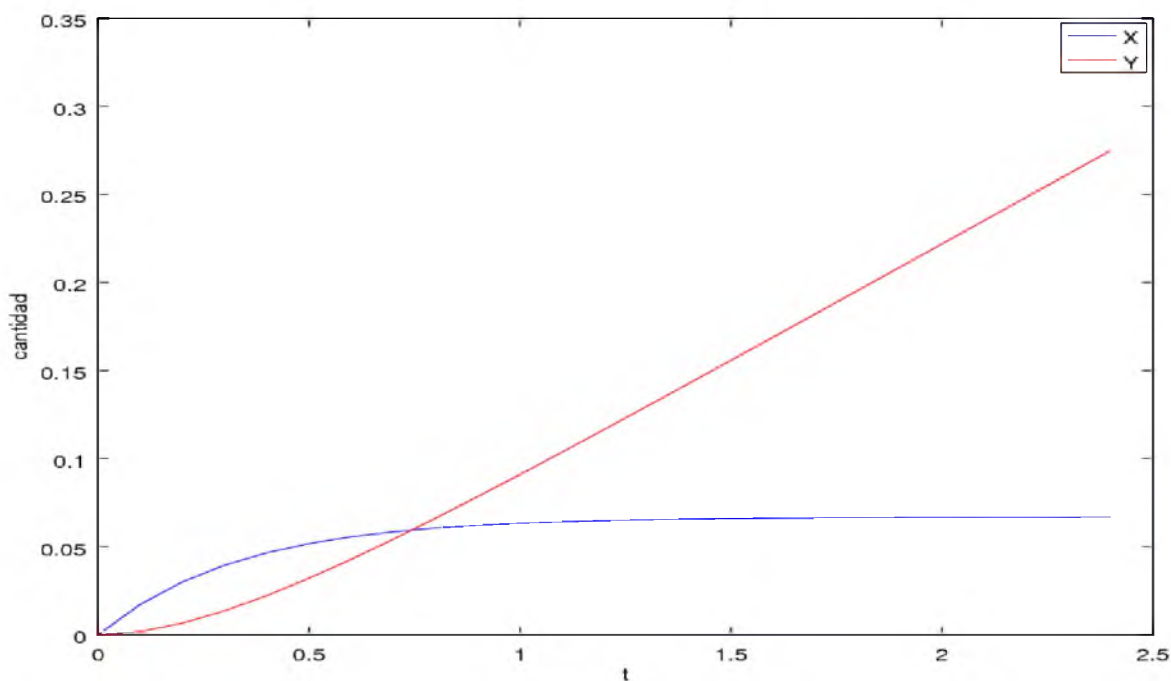
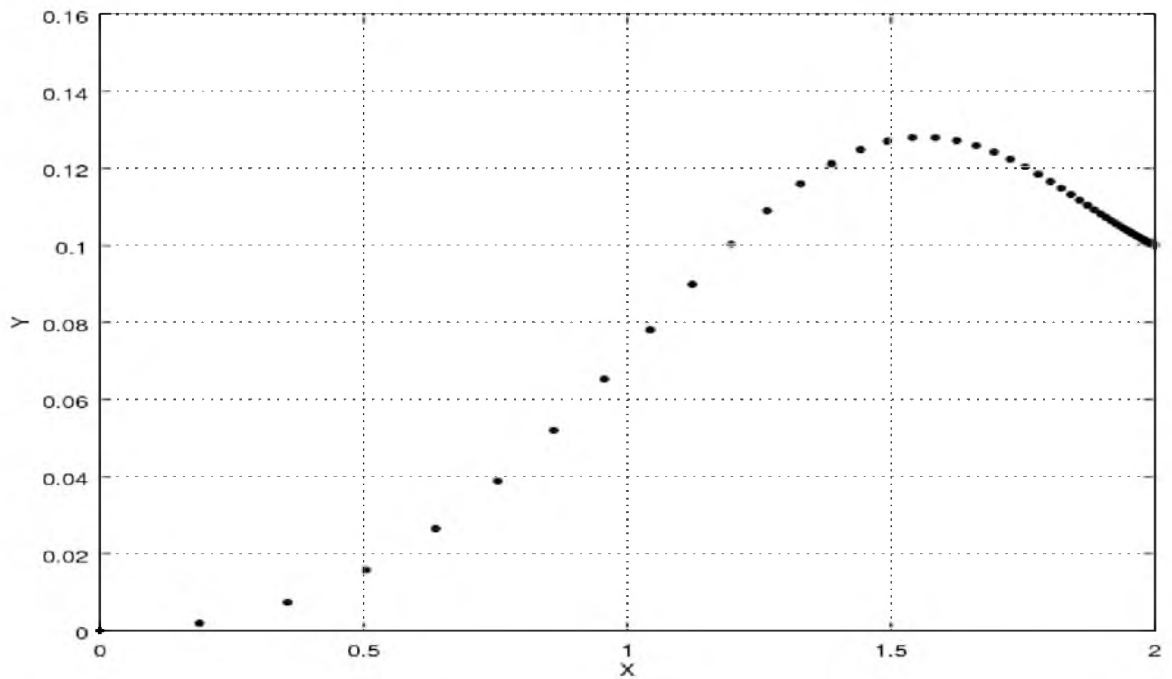
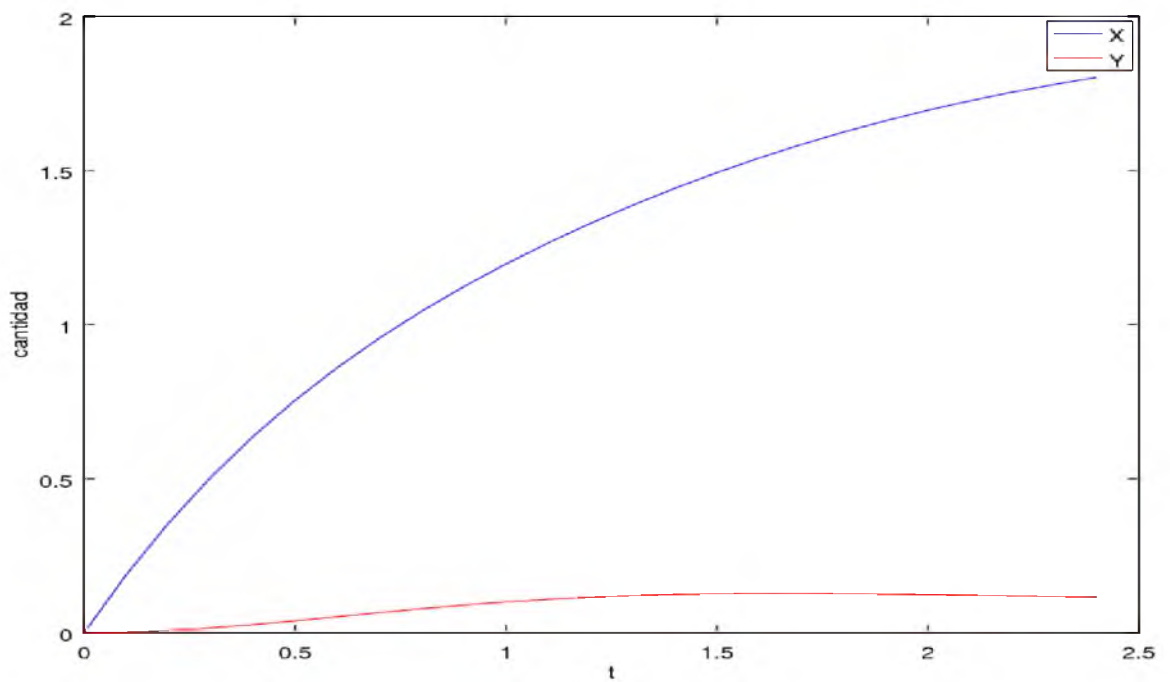
(a) Comportamiento del espacio fase cuando $a = 0.2$ y $b = 2$.(b) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 0.2$ y $b = 2$.

Figura 3.5: Ejemplo de la dinámica del sistema cuando $b > (a + 1)^2$ y el discriminante es positivo en el modelo continuo.



(a) Comportamiento del espacio fase cuando $a = 2$ y $b = 0.2$.



(b) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 2$ y $b = 0.2$.

Figura 3.6: Ejemplo de la dinámica del sistema cuando $b < (a - 1)^2$ y el discriminante es positivo en el modelo continuo.

En la tabla (3.2) resumimos el comportamiento de este sistema cuando el discriminante es menor que cero y se varían los parámetros.

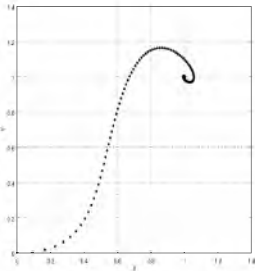
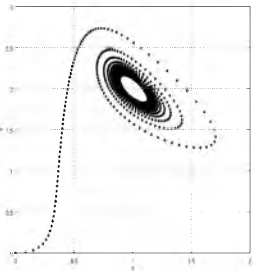
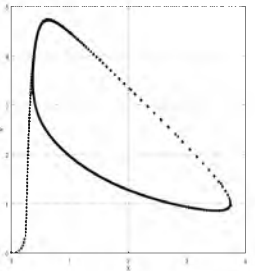
$b < a^2 + 1$	$b = a^2 + 1$	$b > a^2 + 1$
Sistema dinámico estable	Bifurcación de Hopf	Sistema dinámico inestable
		

Tabla 3.2: Variación de la estabilidad del estado estacionario $x^* = (a, \frac{b}{a})$ cuando los parámetros a y b varían, obsérvese que se produce un ciclo límite estable por lo que ocurre una bifurcación de Hopf supercrítica en el modelo continuo.

3.2. Análisis con sistemas dinámicos discretos I

El modelo del Bruselador planteado como un sistema dinámico discreto es un sistema de ecuaciones que escrito como ecuaciones en diferencias es el siguiente

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= a - bx_t - x_t + x_t^2 y_t \\ y_{t+1} &= bx_t - x_t^2 y_t \end{aligned} \tag{3.3}$$

donde $a, b > 0$. Obsérvese que tomamos el sistema (3.2) y solo indicamos que $t \in \mathbb{Z}$. Un punto fijo de este sistema debe satisfacer las ecuaciones

$$\begin{aligned} a - bx_t - x_t + x_t^2 y_t &= x_t \quad (1) \\ bx_t - x_t^2 y_t &= y_t. \quad (2) \end{aligned}$$

Sumando las ecuaciones (1) y (2) obtenemos $y_t = a - 2x_t$. Los puntos fijos del sistema están dados por las parejas (x_t, y_t) , donde x_t se obtiene de las raíces del polinomio cúbico

$$p(x) = -2x^3 + ax^2 - (b + 2)x + a, \tag{3.4}$$

obtenido a partir de la sustitución de $y_t = a - 2x_t$ en (1). Llamemos p_i a las raíces del polinomio p con $i = 1, \dots, 3$, en consecuencia tendremos tres puntos fijos $x^* = (p_i, y)$.

Debido a que buscamos aplicaciones observables, en esta tesis sólo nos interesa observar la estabilidad de los puntos fijos reales. Para determinar cuántos puntos fijos son reales y cuántos son imaginarios utilizaremos el siguiente teorema, que nos permite obtener esta información sin calcularlos explícitamente.

Teorema 15 (Fórmula de Cardano). *Sea $p(x) = x^3 + a_1x^2 + a_2x + a_3 = 0$ un polinomio cúbico, $Q = \frac{3a_2 - a_1^2}{9}$, $R = \frac{9a_1a_2 - 27a_3 - 2a_1^3}{54}$ y $D = Q^3 + R^2$, donde D es comúnmente llamado discriminante.*

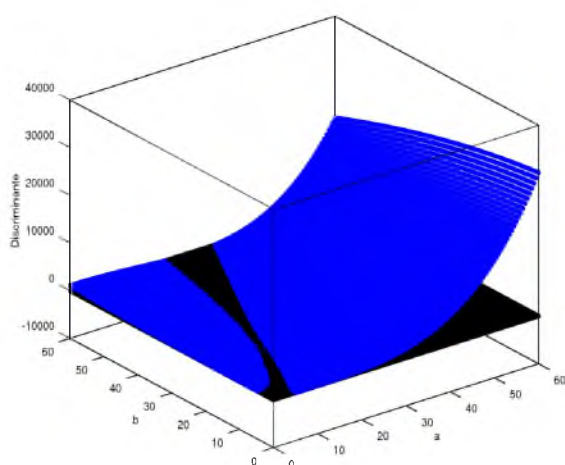
- Si $D > 0$, el polinomio posee una raíz real y las otras son complejas conjugadas.
- Si $D = 0$, las tres raíces son reales, dos son iguales.
- Si $D < 0$, todas las raíces son reales y diferentes.

La demostración de este teorema se realiza mediante un cambio de variable, y luego se sigue como la demostración de la fórmula de solución de ecuaciones de segundo grado. Se puede encontrar en [?].

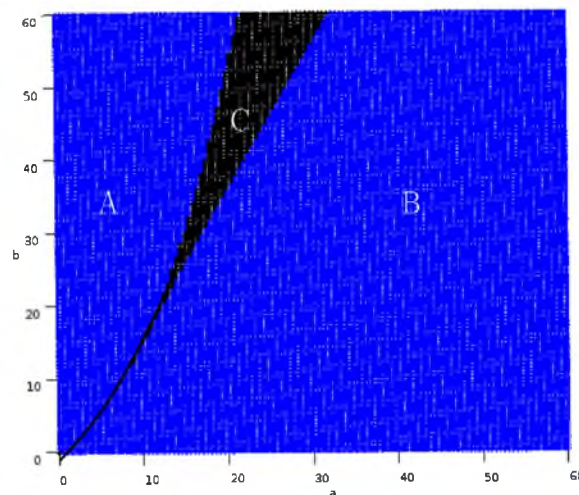
El discriminante del polinomio cúbico (3.4) es

$$D = \left(\frac{6(b+2) - a^2}{36}\right)^3 + \left(\frac{36a - 9ab + a^3}{216}\right)^2,$$

el cual tiene diferentes valores para ciertos valores de parámetros $a > 0$ y $b > 0$.



(a) La superficie de color azul representa el discriminante del polinomio cúbico (3.4) y el plano de color negro es el plano cero.



(b) Las regiones de color azul A y B indican que $D > 0$, la región C de color negro indica que $D < 0$ y en la frontera entre la región negra y azul $D = 0$.

Figura 3.7: Discriminante D del polinomio (3.4) cuando variamos los valores de los parámetros a y b .

Como explicamos anteriormente, en nuestro análisis del comportamiento del Bruselador sólo nos interesa observar la dinámica del sistema (3.3) en los puntos fijos reales. Por lo que analizaremos la estabilidad de los puntos fijos reales en cada región mostrada en la figura (3.7).

El sistema de ecuaciones en diferencias (3.3) es no lineal, por el teorema de Hartman-Grobman podemos linealizar el sistema para observar la estabilidad del punto fijo al variar los parámetros.

La matriz jacobiana del sistema evaluada en el punto fijo x^* tiene la siguiente forma

$$A = \begin{bmatrix} 2xy - (b+1) & (x)^2 \\ b - 2xy & -(x)^2 \end{bmatrix} \Big|_{x^*=(p_i,y)} = \begin{bmatrix} 2p_i(a - 2p_i) - (b+1) & (p_i)^2 \\ b - 2p_i(a - 2p_i) & -(p_i)^2 \end{bmatrix}$$

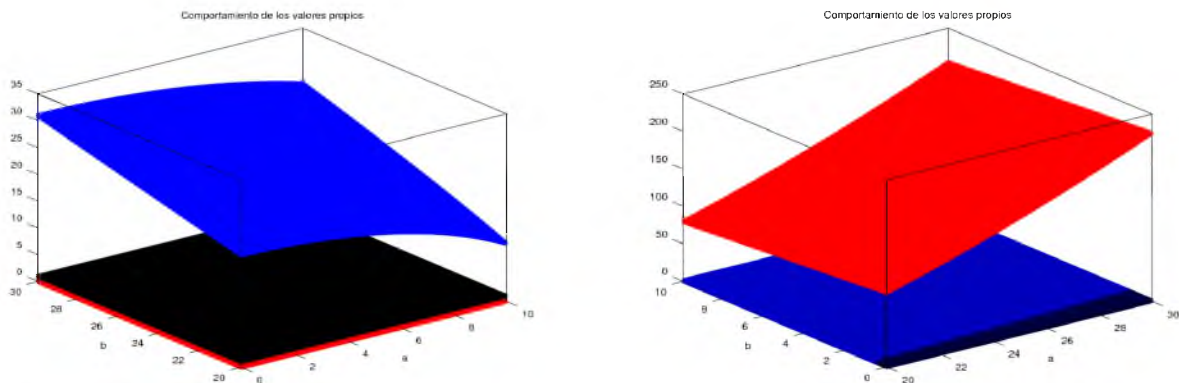
donde la traza es $tr(A) = -5p_i^2 + 2ap_i - (b+1)$, el determinante es $det(A) = 1$ y el valor propio es de la forma

$$\lambda_{1,2} = \frac{(-5p_i^2 + 2ap_i - (b+1)) \pm \sqrt{(-5p_i^2 + 2ap_i - (b+1))^2 - 4}}{2}.$$

Debido a que no podemos indicar de manera explícita para que valores de a y b , el sistema (3.3) es estable o inestable recurrimos a técnicas numéricas, en particular para hallar raíces ocupamos el comando `roots()` de Octave, el cual halla la matriz compañera del polinomio y luego calcula sus valores propios, que son las raíces del polinomio [13]. Después de realizar el análisis numérico hemos observado que los valores propios del punto fijo se comportan de diferentes manera en cada región. En las regiones A y B el discriminante es positivo por lo que tendremos un punto fijo real, pero la estabilidad del punto fijo cambia dependiendo si el discriminante se encuentra en la región A o B, observe la figura (3.8).

En la región C el discriminante es negativo por lo que tendremos tres puntos fijos reales y diferentes. La figura (3.9) muestra la estabilidad de cada punto fijo cuando el discriminante se encuentra en la región C.

Por último si el discriminante se encuentra en la frontera entre la región A y C, C y B, es decir cuando el discriminante es igual a cero, el polinomio (3.4) tiene tres raíces reales, dos de ellas son iguales, eso ocurre por ejemplo en $a = 20$ y $b = 52.08730341302305$ donde los puntos fijos son $x_1^* = (4.78128, 10.457)$, $x_2^* = (4.78128, 10.457)$ y $x_3^* = (0.43743, 19.125)$, los valores propios de la matriz A evaluada en los puntos fijos son: para x_1^* y x_2^* tenemos que $\lambda_1 = 22.86068$ y $\lambda_2 = 1.00003$ los cuales tienen modulo mayor que 1 y para x_3^* los valores propios de la matriz A son $\lambda_1 = -36.542$ y $\lambda_2 = -0.0052364$ de los cuales uno tiene modulo mayor que 1 y otro menor que 1. En conclusión cuando $D = 0$ tenemos dos puntos fijos, donde uno es inestable y uno inestable del tipo punto silla.



(a) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de la matriz A . El plano de color negro es el plano unitario. En consecuencia el punto fijo situado en esta región es inestable del tipo silla.

(b) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios. El plano de color negro es el plano unitario. En consecuencia el punto fijo situado en esta región es inestable.

Figura 3.8: Si el discriminante se encuentra en la región A los valores propios de la matriz A se comportan como en la figura (a), es decir el punto fijo es inestable del tipo punto silla. Si el discriminante se encuentra en la región B los valores propios de la matriz A se comportan como en la figura (b), es decir el punto fijo es inestable.

3.3. Análisis con sistemas dinámicos discretos II.

Ahora planteamos el modelo con sistemas dinámicos discretos de la siguiente manera, primero escribimos las ecuaciones diferenciales del sistema, y luego aplicamos la siguiente técnica de discretización:

$$\dot{x}(t) \approx \frac{x(k+1) - x(k)}{H}$$

donde H es una constante positiva suficientemente pequeña que indica la proporcionalidad entre la diferencia del estado en los tiempos k y $k+1$ y la razón de cambio. No es la única manera de realizar esta discretización, véase [2, 11].

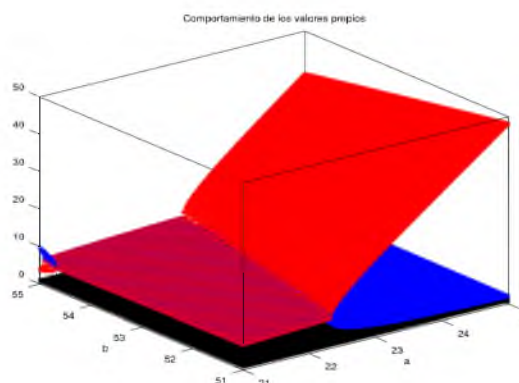
El modelo del Bruselador planteado como un sistema dinámico discreto es un sistema de ecuaciones que escrito como ecuaciones en diferencias es

$$\begin{aligned} x_{t+1} &= (a - bx_t - x_t + x_t^2 y_t)H + x_t \\ y_{t+1} &= (bx_t - x_t^2 y_t)H + y_t \end{aligned} \quad (3.5)$$

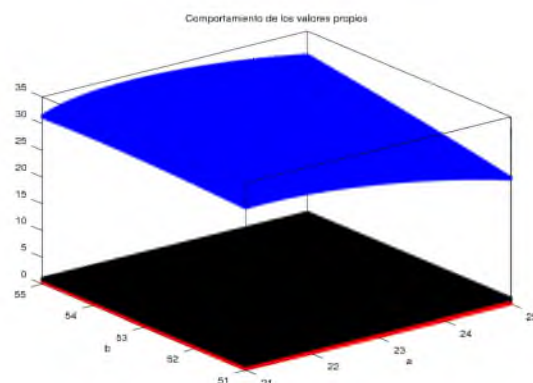
donde $a, b, H > 0$.

Un punto fijo de este sistema satisface

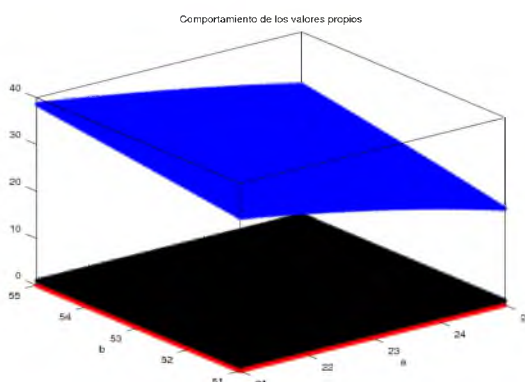
$$\begin{aligned} x_t + H(a - bx_t - x_t + x_t^2 y_t) &= x_t \quad (i) \\ y_t + H(bx_t - x_t^2 y_t) &= y_t \quad (ii), \end{aligned}$$



(a) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de A . El plano de color negro es el plano unitario. Observe que el punto fijo es inestable.



(b) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de A . El plano de color negro es el plano unitario. El punto fijo es del tipo punto silla.



(c) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de A . El plano de color negro es el plano unitario. El punto fijo es del tipo punto silla.

Figura 3.9: Si el discriminante se encuentra en la región C los valores propios de la matriz A evaluada en $x_1^* = (p_1, y)$ se comportan como en la figura (a), es decir, x_1^* es inestable. Los valores propios de la matriz A evaluada en $x_2^* = (p_2, y)$, se comportan como en la figura (b), x_2^* es un punto fijo inestable del tipo punto silla. Si los valores propios de la matriz A evaluada en $x_3^* = (p_3, y)$, se comportan como en la figura (c), x_3^* es un punto fijo inestable del tipo punto silla.

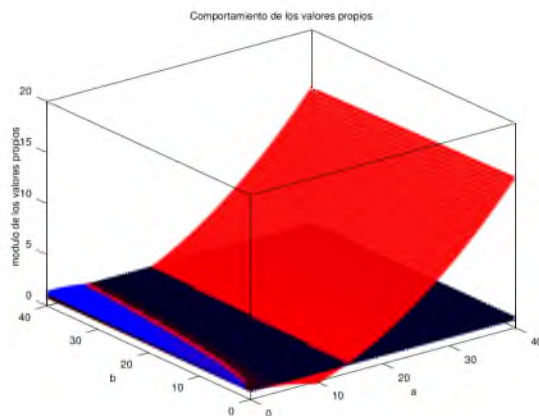
sumando las ecuaciones (i) y (ii), despejando x_t y sustituyendo este valor en y_t , obtenemos el punto fijo $x^* = (a, \frac{b}{a})$ de este sistema de ecuaciones en diferencias. Para observar la estabilidad del sistema (3.5) linealizamos el sistema. La matriz jacobiana evaluada en el punto x^* es

$$xA = \begin{bmatrix} (b-1)H + 1 & a^2H \\ -bH & -a^2H + 1 \end{bmatrix}$$

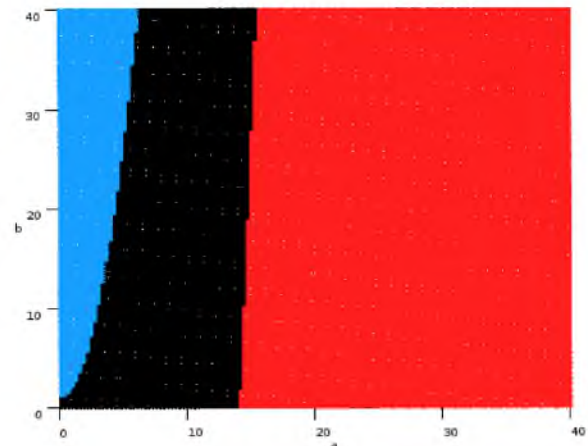
donde la traza es $tr(A) = (b - (a^2 + 1))H + 2$, el determinante es $del(A) = H(b - (a^2 + 1) + a^2H) + 1$ y los valores propios son de la forma

$$\lambda_{1,2} = \frac{(b - (a^2 + 1))H + 2 \pm \sqrt{((b - (a^2 + 1))H + 2)^2 - 4(H(b - (a^2 + 1) + a^2H) + 1)}}{2}$$

Para diferentes valores de H la estabilidad del punto fijo será diferente, para nuestro análisis tomamos $H = 0.01$. En este modelo no podemos decir explícitamente que condiciones deben satisfacer los parámetros a y b para que el punto fijo sea estable o inestable, por lo que haremos el análisis de manera numérica. La figura 3.10 muestra las regiones de estabilidad de los puntos fijos y el comportamiento de sus valores propios al variar los parámetros a y b .



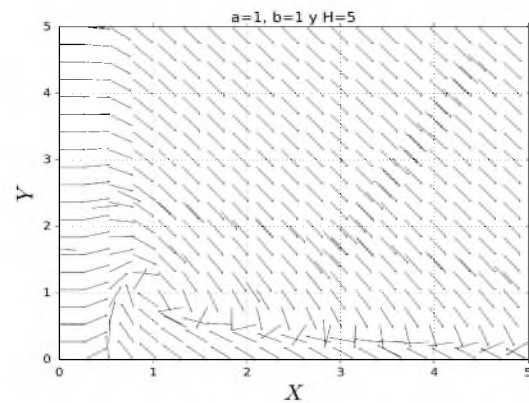
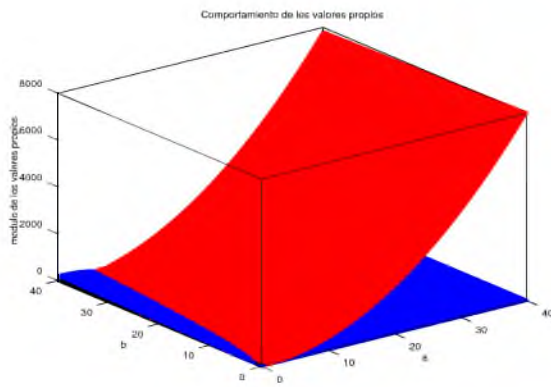
(a) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de la matriz A y el plano de color negro es el plano unitario



(b) En la región de color azul el punto fijo es inestable. En la región negra el punto fijo es estable. En la región de color rojo el punto fijo es inestable del tipo silla.

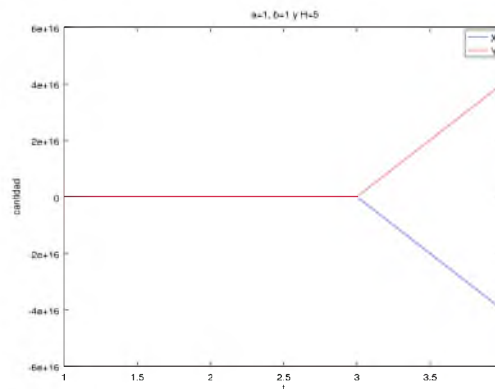
Figura 3.10: Valores propios y regiones de estabilidad e inestabilidad para el punto fijo del modelo discreto del Bruselador, con $H = 0.01$.

Como mencionamos, un valor de H diferente puede dar lugar a comportamientos diferentes. La figura (3.11) muestra el comportamiento del sistema cuando $H = 5$. Como deseamos tener un comportamiento parecido al modelo continuo optamos por tomar $H = 0.01$.



(a) Las superficies de color rojo y azul representan los valores propios de la matriz A y el plano de color negro es el plano unitario. Para cualquier valor de a y b el módulo de los valores propios se sitúan arriba del plano unitario, por lo tanto el punto fijo es inestable.

(b) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 1$ y $H = 5$.



(c) Variación de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 1$ y $H = 5$.

Figura 3.11: Estabilidad del sistema dinámico (3.5) al variar los parámetros a y b , con $H = 5$, observe que el punto fijo es inestable.

Las figuras (3.12, 3.13, 3.14, 3.15) se realizaron con Python y Octave, tomamos los mismos valores de parámetros que en el sistema continuo (3.2) y algunos valores en las diferentes regiones de estabilidad.

3.4. Análisis con sistemas dinámicos discretos con retardo.

El modelo del Bruselador con retardo lo planteamos de la siguiente manera. Tomemos el sistema dinámico continuo discreto

$$\begin{aligned}x_{t+1} &= (a - bx_t - x_t + x_t^2 y_t)H + x_t \\y_{t+1} &= (bx_t - x_t^2 y_t)H + y_t\end{aligned}$$

donde $a, b, H > 0$, escogemos este sistema debido a que el modelo de la sección 3.2 no muestra un comportamiento similar al modelo continuo, en particular la estabilidad de punto de equilibrio es distinta, mientras que el modelo de la sección 3.3 si muestra un comportamiento muy parecido, en particular tienen regiones de estabilidad similares.

Vamos a poner un retardo en el sistema, sea $w_t = y_{t-1}$ en consecuencia tenemos el sistema

$$\begin{aligned}x_{t+1} &= (a - bx_t - x_t + x_t^2 w_t)H + x_t \\y_{t+1} &= (bx_t - x_t^2 w_t)H + w_t \\w_{t+1} &= y_t.\end{aligned}\tag{3.6}$$

Un punto fijo para este sistema es un punto (x_t, y_t, w_t) tal que

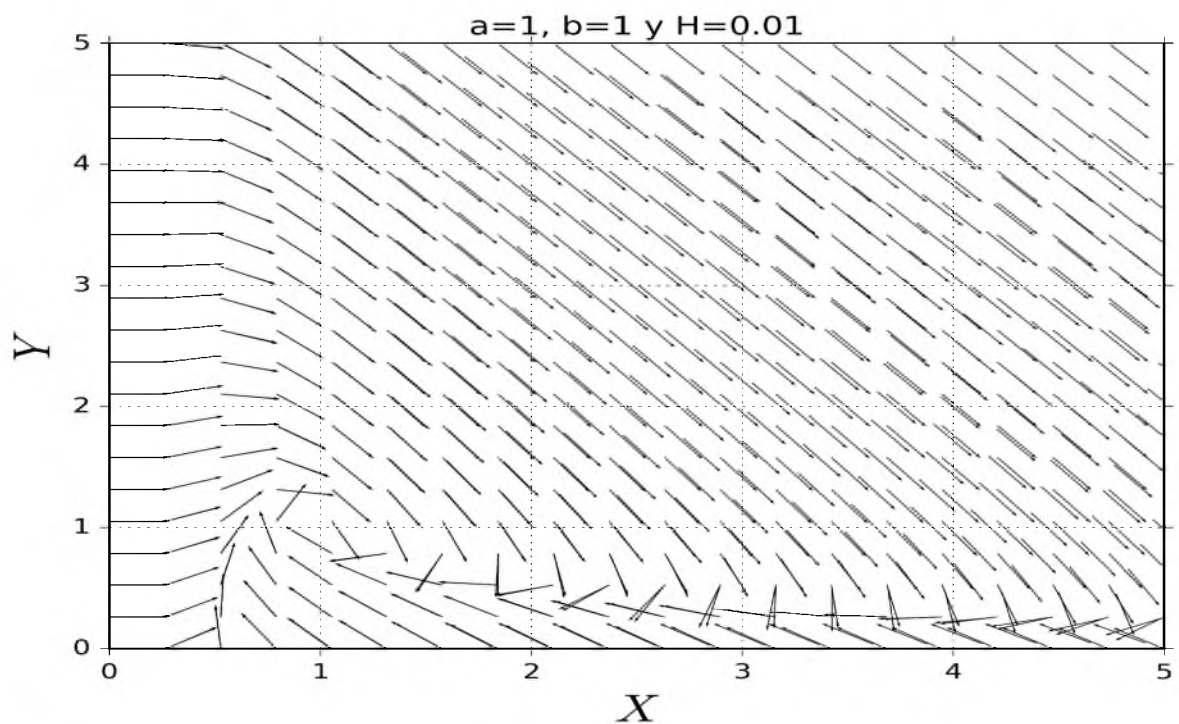
$$\begin{aligned}(a - bx_t - x_t + x_t^2 w_t)H + x_t &= x_t \quad (1) \\(bx_t - x_t^2 w_t)H + w_t &= y_t \quad (2) \\y_t &= w_t. \quad (3)\end{aligned}$$

El punto fijo de este sistema lo calculamos sumando las ecuaciones (1) y (2), obtenemos x_t y después lo sustituimos en y_t , de esta manera el punto fijo del sistema (3.6) es $x^* = (a, \frac{b}{a}, \frac{b}{a})$.

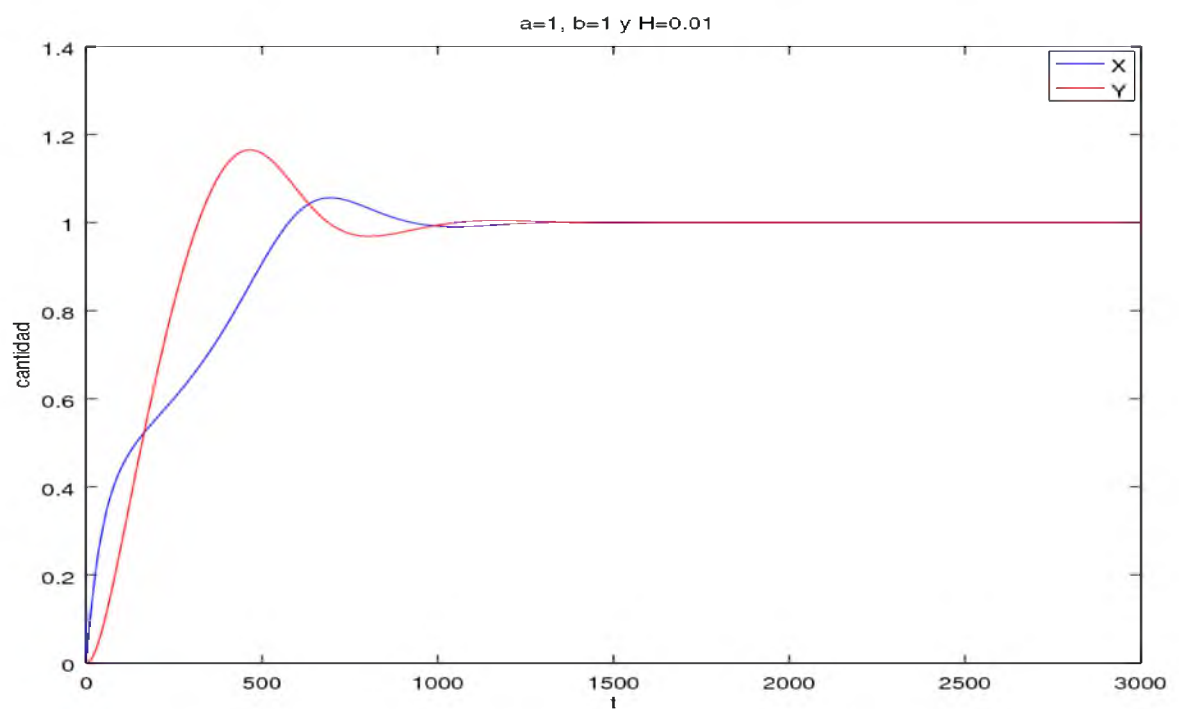
La matriz jacobiana evaluada en el punto fijo x^* es:

$$A = \begin{bmatrix} (b-1)H + 1 & 0 & a^2 H \\ -bH & 0 & -a^2 H + 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

donde el polinomio característico es $p(\lambda) = -\lambda^3 + \lambda^2(H(b-1) + 1) + \lambda(1 - a^2 H) + H(a^2(1 - H) + 1 - b) - 1$ y los valores propios son las raíces de dicho polinomio.

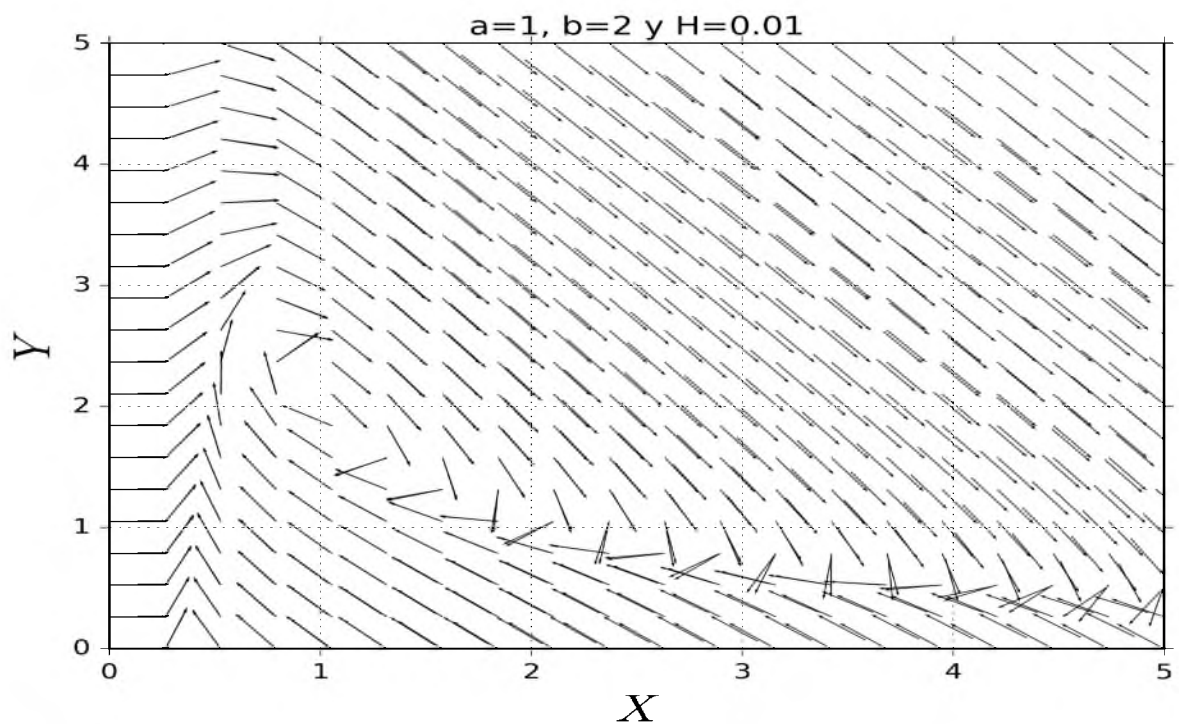


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 1$.

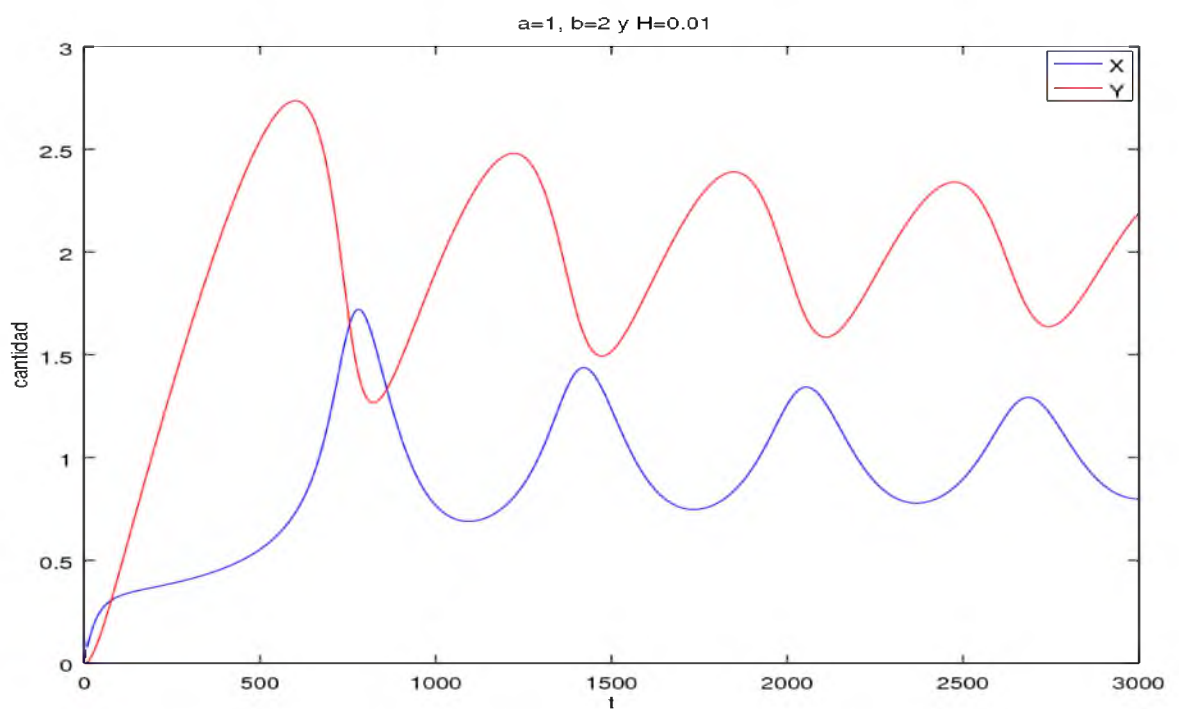


(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 1$.

Figura 3.12: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto en la región donde el punto fijo es estable, parte negra figura 3.10.

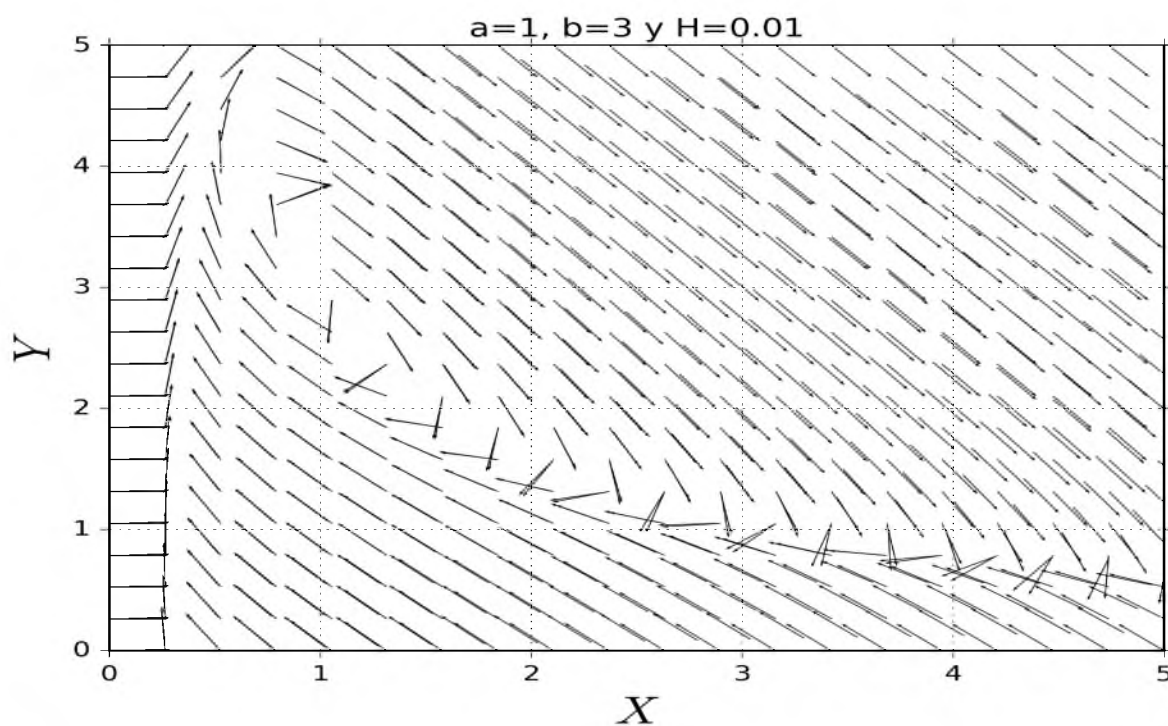


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 2$.

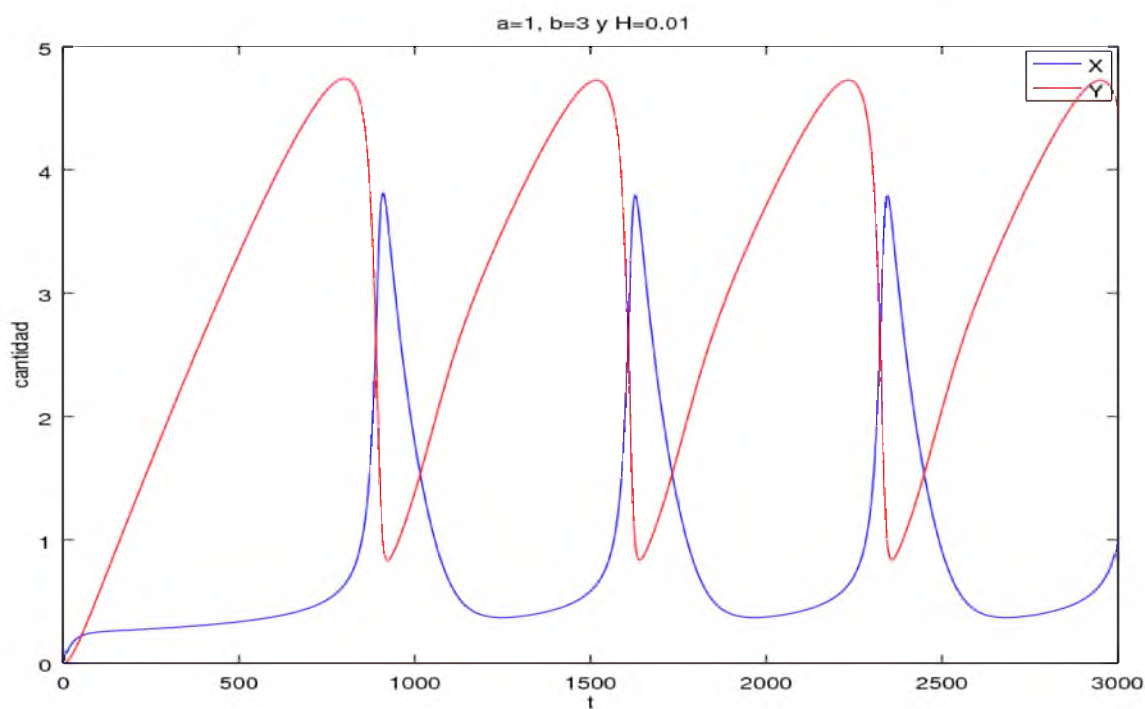


(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 2$.

Figura 3.13: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto en la región donde el punto fijo es inestable, parte azul figura 3.10.

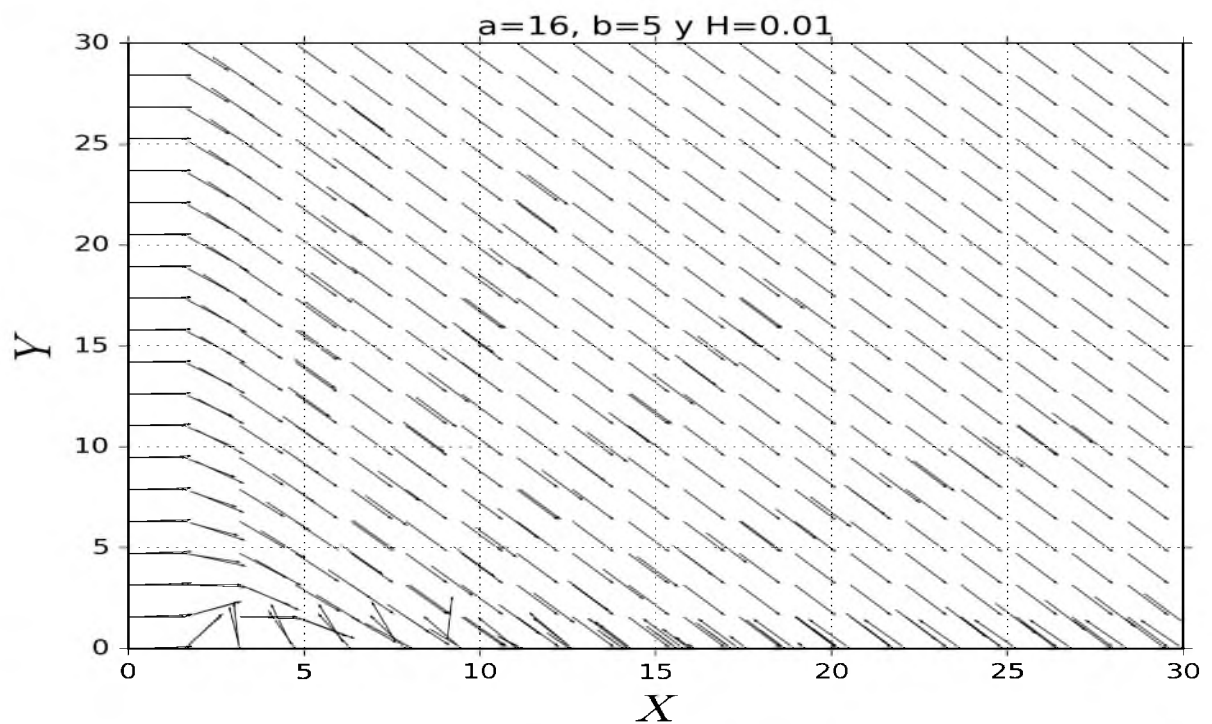


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 3$.

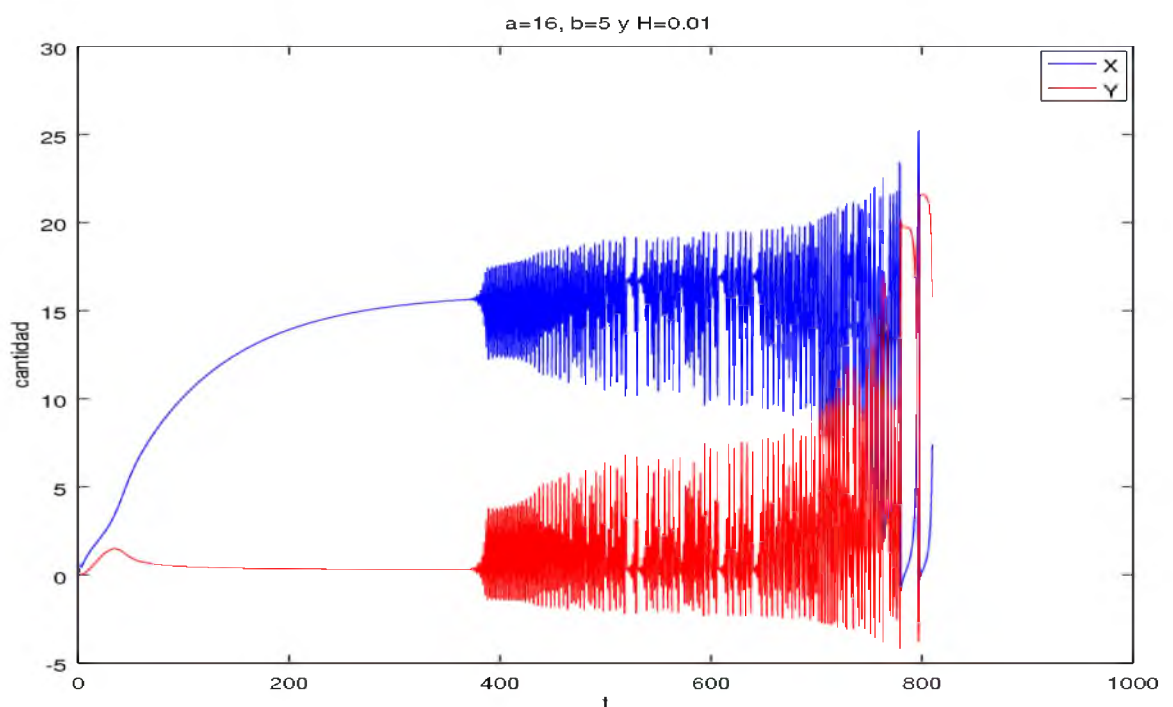


(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$ y $b = 3$.

Figura 3.14: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto en la región donde el punto fijo es inestable, parte azul figura 3.10.



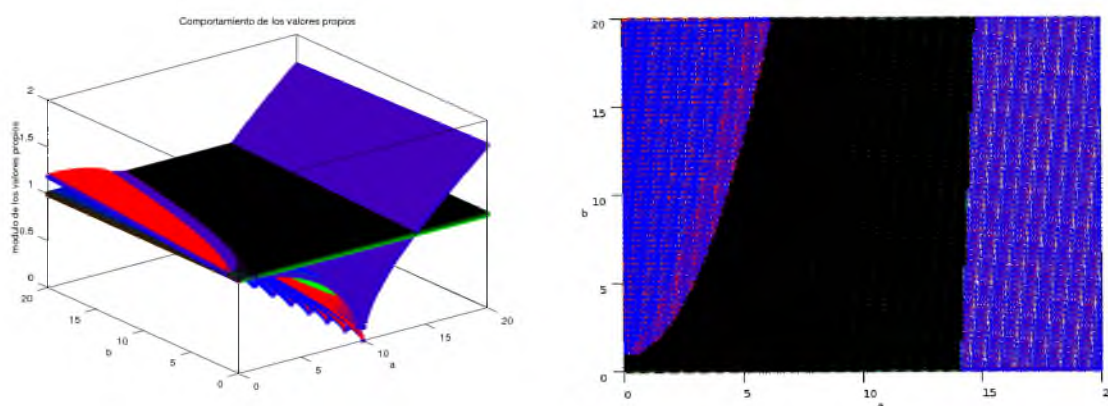
(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 16$ y $b = 5$.



(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 16$ y $b = 5$.

Figura 3.15: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto en la región donde el punto fijo es inestable del tipo punto silla, parte roja figura 3.10.

Para nuestro análisis tomamos el valor de $H = 0.01$ como en el modelo planteado en la sección anterior. Debido a que no podemos decir explícitamente el comportamiento de los valores propios, recurrimos a técnicas numéricas. En la figura (3.16) podemos visualizar las regiones de estabilidad del punto fijo y el comportamiento de sus valores propios al variar los parámetros a y b .



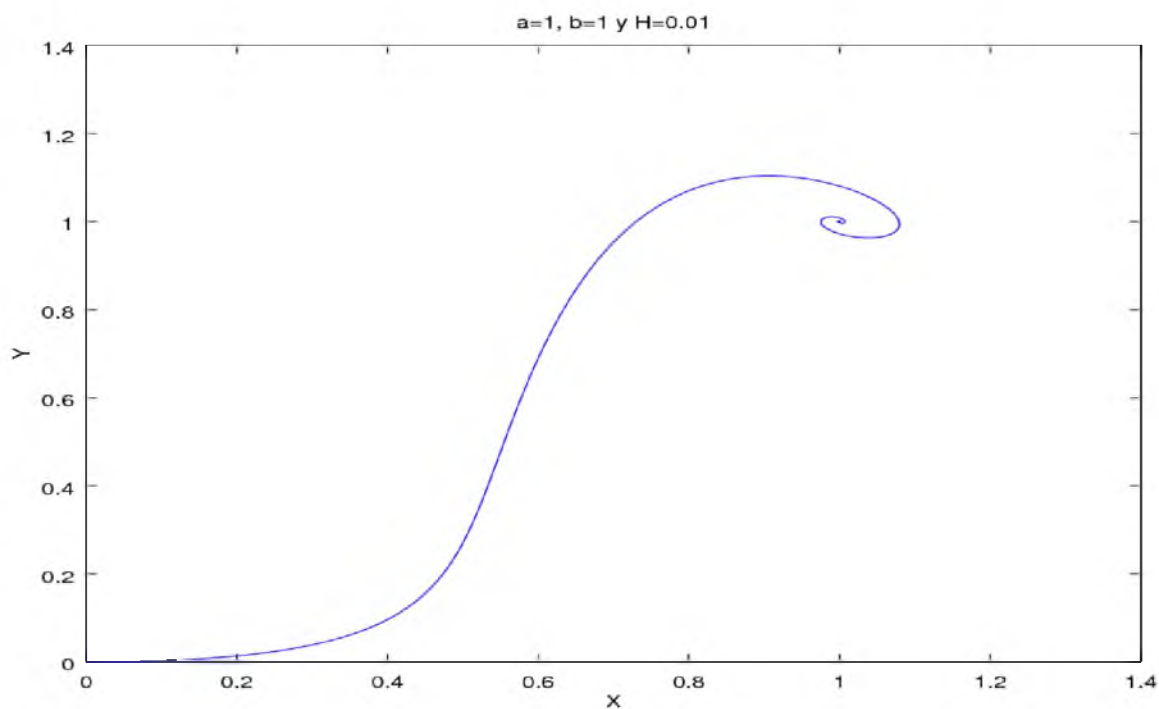
(a) Las superficies de colores azul, rojo, verde representan los valores propios del punto fijo x^* y el plano de color negro es el plano unitario.

(b) En la región negra el punto fijo es estable. En las dos regiones de color azul el punto fijo es inestable del tipo punto silla.

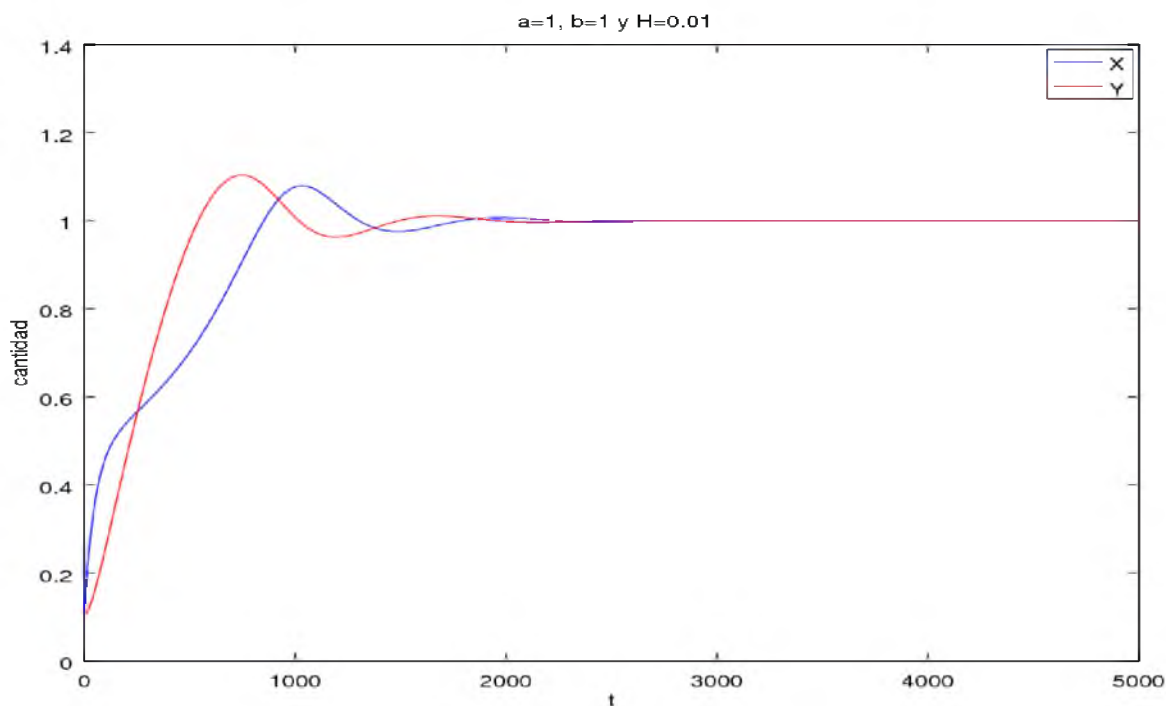
Figura 3.16: Valores propios y regiones de estabilidad e inestabilidad para el punto fijo del modelo discreto con retardo del Bruselador con $H = 0.01$.

En las figuras (3.17,3.18, 3.19) podemos visualizar el espacio fase para los productos intermedios y la variación de las concentraciones de los productos intermedios X e Y para algunos valores de parámetros específicos tomados en las diferentes regiones de estabilidad.

Obsérvese que si escogemos un valor de H diferente el sistema tiene un comportamiento distinto a cuando se escoge $H = 0.01$, véase la figura (3.20).

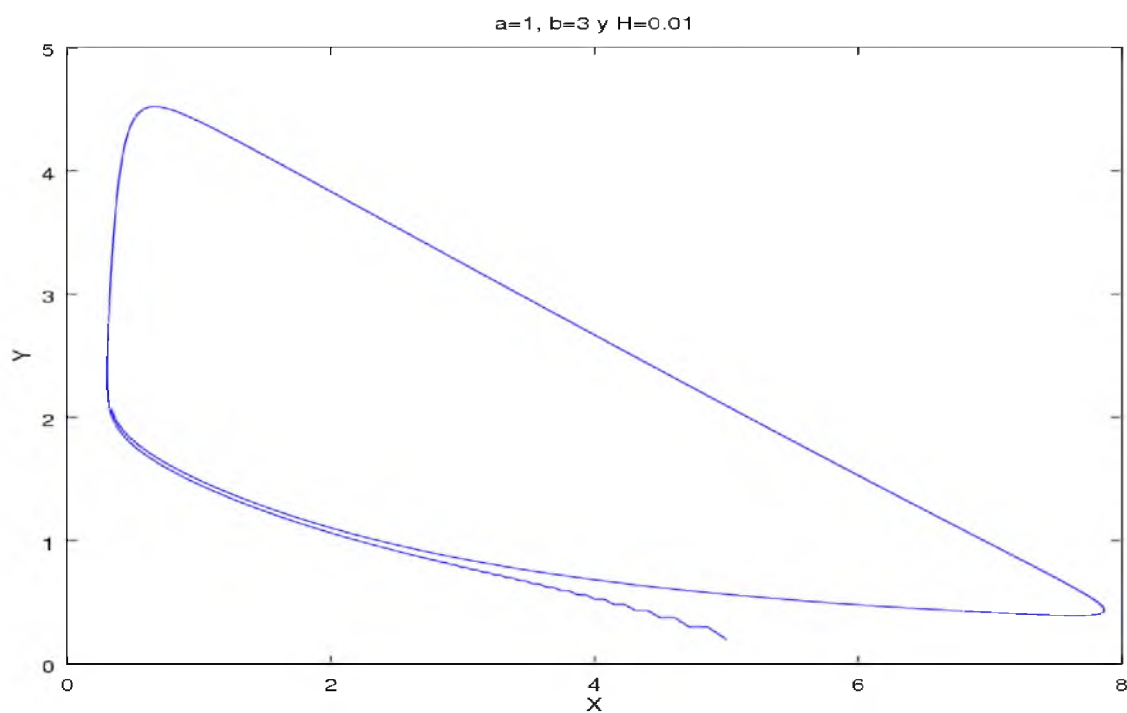


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 1$.

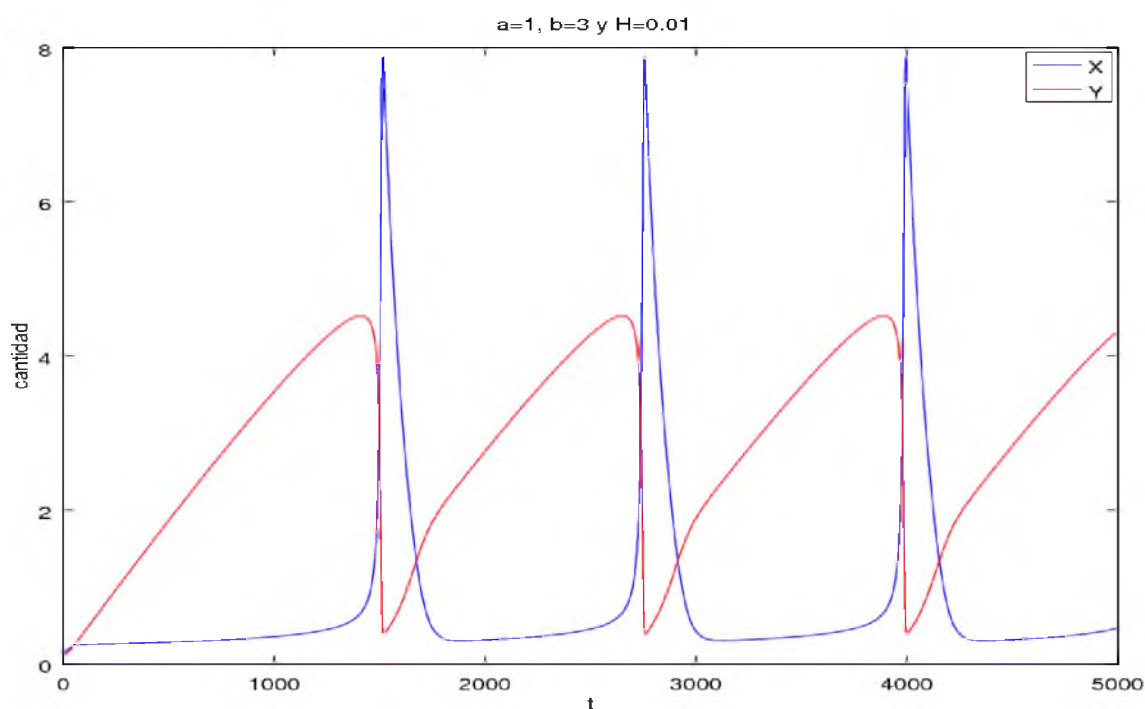


(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 1$.

Figura 3.17: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto con retardo en la región donde el punto fijo es estable, parte negra figura 3.16.

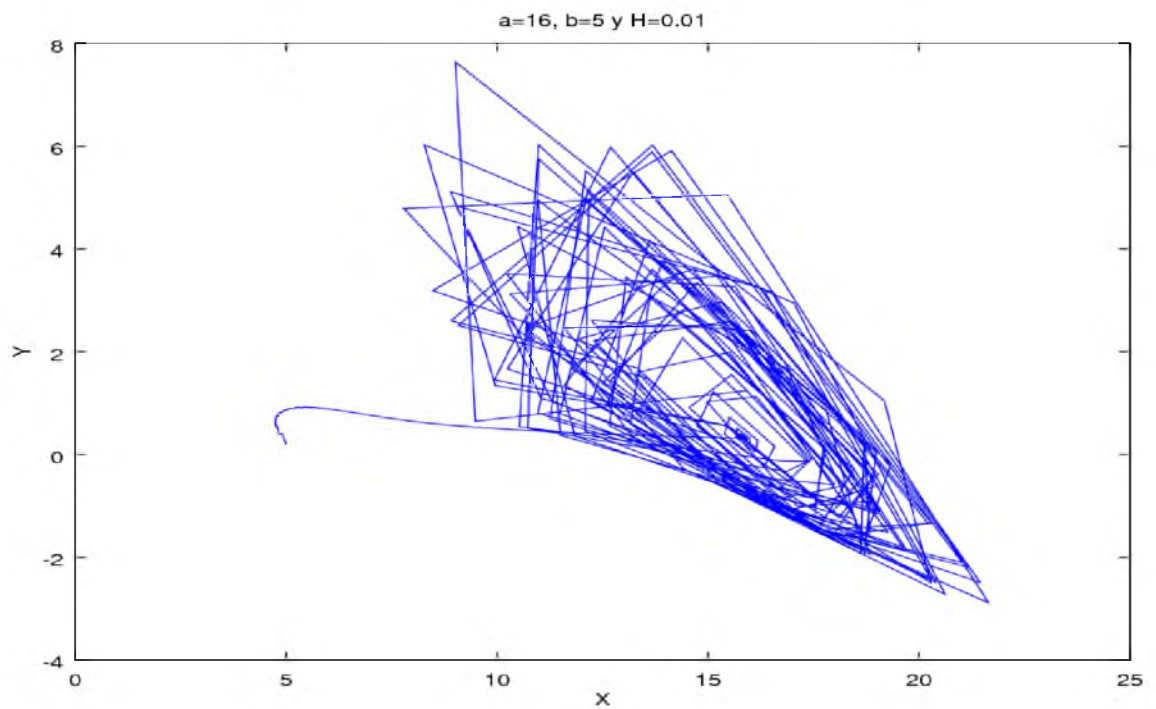


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 3$.

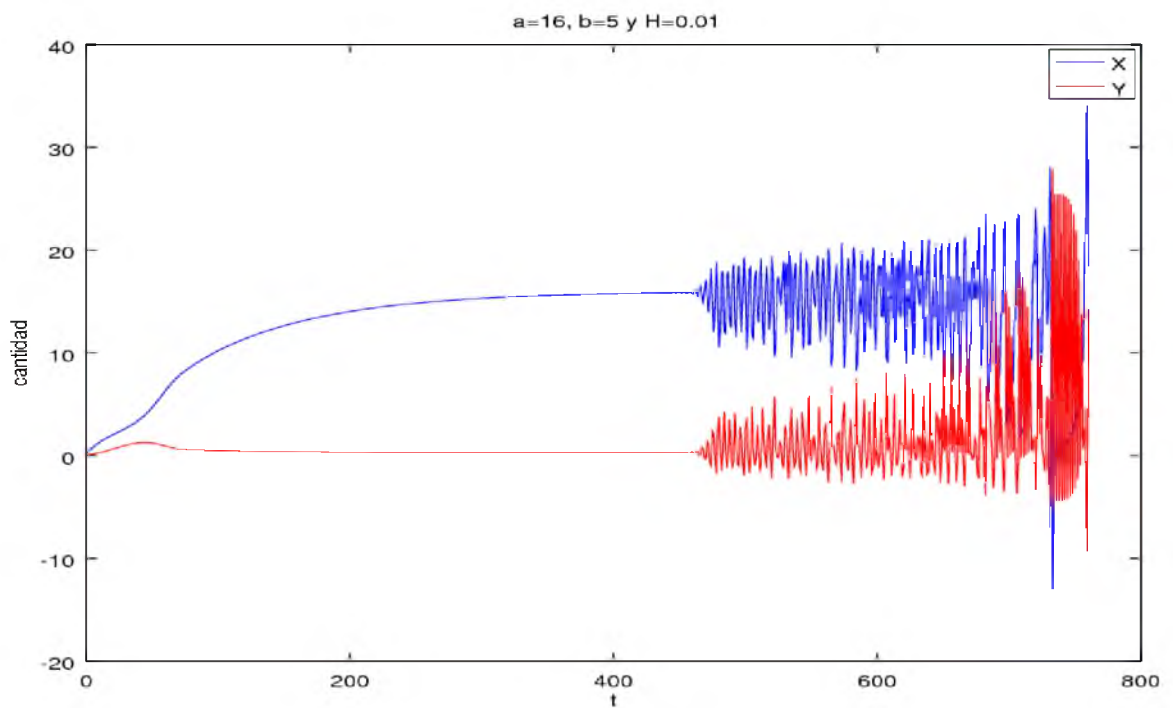


(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 1$, $b = 3$.

Figura 3.18: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto con retardo en la región donde el punto fijo es inestable del tipo punto silla, parte azul figura 3.16.

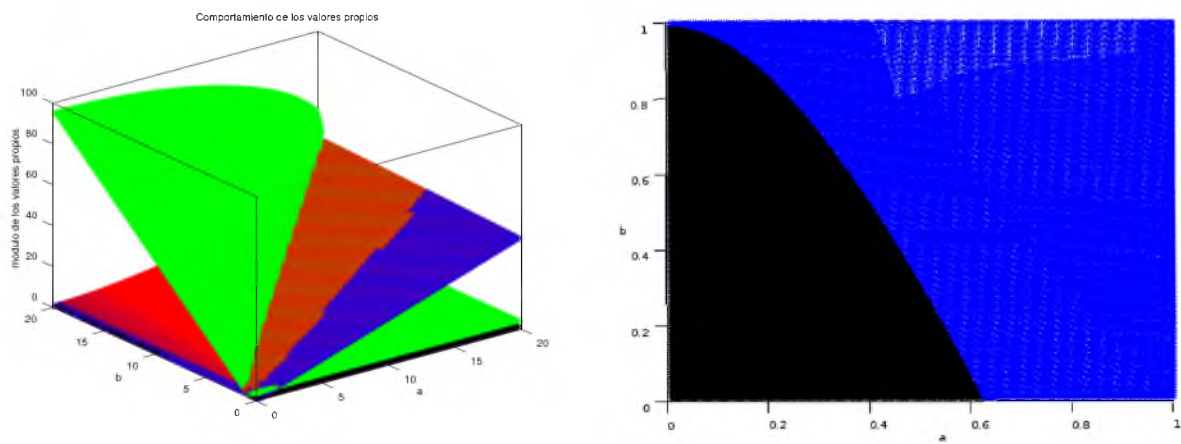


(a) Espacio fase para los productos intermedios X e Y cuando $a = 16$, $b = 5$.



(b) Variación de la concentración de los productos intermedios X e Y cuando $a = 16$, $b = 5$.

Figura 3.19: Ejemplo de la dinámica del sistema en el modelo discreto con retardo en la región donde el punto fijo es inestable del tipo punto silla, parte azul figura 3.16.



(a) Las superficies de colores azul, rojo, verde representan los valores propios del punto fijo x^* y el plano de color negro es el plano unitario.

(b) En la región negra el punto fijo es inestable del tipo silla y en la region de color azul el punto fijo es inestable.

Figura 3.20: Valores propios y regiones de estabilidad e inestabilidad para el punto fijo del modelo discreto con retardo del Bruselador cuando $H = 5$.

Capítulo 4

Discusión y conclusiones

El objetivo de este capítulo es analizar los diferentes modelos planteados en el capítulo anterior y discutir las implicaciones dinámicas de cada uno considerando una serie de ecuaciones representadas en el Bruselador.

El primer modelo tratado es el modelo del Bruselador planteado como un sistema dinámico continuo, es decir, planteado como un sistema de ecuaciones diferenciales, en este observamos que para los parámetros a y b estrictamente positivos, la dinámica depende de la relación entre dos cantidades: b y $a^2 + 1$, si $b > a^2 + 1$, los valores propios λ_1 y λ_2 son complejos conjugados con parte real mayor que cero, en consecuencia el estado estacionario es inestable, por otro lado si $b < a^2 + 1$, los valores propios λ_1 y λ_2 son complejos conjugados con parte real menor que cero, en efecto el estado estacionario es estable, y si $b = a^2 + 1$ los valores propios λ_1 y λ_2 son puramente complejos, de esta manera el estado estacionario es un centro, más aún, para $b = a^2 + 1$ ocurre una bifurcación de Andronov-Hopf supercrítica y para $b > a^2 + 1$ ocurre un ciclo límite estable.

El segundo modelo es el Bruselador planteado como un sistema dinámico discreto, es decir, planteado como un sistema de ecuaciones en diferencias, en este modelo no ocupamos ningún método de discretización, solo asumimos que $t \in \mathbb{Z}$, en este modelo observamos que bajo cualquier cambio de parámetros $a > 0$ y $b > 0$ el punto fijo es de la forma $x^* = (p_i, y)$ donde p_i es una raíz del polinomio $p(x) = -2x^3 + ax^2 - (b + 2)x + a$ y $y = a - 2p_i$ para $i = 1, 2, 3$, además dependiendo del valor del discriminante de este polinomio se tiene un número de raíces reales, las cuales tienen diferente tipo de estabilidad véase la tabla (4.1).

El tercer modelo es el Bruselador discreto, planteado con un sistema de ecuaciones en diferencias usando la técnica de discretización:

$$\dot{x}(t) \approx \frac{x(k+1) - x(k)}{H}$$

donde H es una constante positiva que indica la proporcionalidad entre la diferencia del estado en los tiempos k y $k + 1$ y la razón de cambio. En este modelo podemos observar

que la estabilidad del sistema depende de los valores propios de la matriz jacobiana

$$A = \begin{bmatrix} (b-1)H + 1 & a^2 H \\ -bH & -a^2 H + 1 \end{bmatrix},$$

podemos notar que el comportamiento es similar al del Bruselador continuo cuando $H = 0.01$, en general las regiones de estabilidad cambian dependiendo del valor de H , en este caso escogimos $H = 0.01$ ya que obtenemos una región donde el punto fijo es inestable, otra región donde el punto fijo es estable, y otra donde el punto fijo es inestable del tipo punto silla, en este caso no podemos dar explícitamente la relación entre los valores de los parámetros a y b en la que ocurre este comportamiento, sin embargo si podemos observar las regiones de estabilidad e inestabilidad mediante técnicas numéricas. Graficando en los mismos valores de parámetros que en el caso continuo podemos observar el mismo comportamiento, se produce una órbita periódica y se presentan oscilaciones. La diferencia notable entre este modelo y el continuo es la amplitud y la frecuencia de las oscilaciones, esto puede notarse en las figuras (3.12, 3.13 y 3.14), donde X y Y varían entre 0 y 5 pero en el modelo continuo una oscilación completa puede observarse en un rango de tiempo de 10 unidades, en cambio en el modelo discreto completar la oscilación toma alrededor de 1000 unidades.

Por su parte el modelo con retardo, presenta también una región en donde el punto fijo es inestable del tipo punto silla y otra donde es estable. De la misma manera que en el modelo anterior las regiones de estabilidad varían dependiendo del valor de H escogido, en este caso tomamos $H = 0.01$. Como en los casos anteriores graficando en los mismos valores de parámetros se presentan órbitas periódicas. Una diferencia es que la región de estabilidad no es igual a la del sistema discreto y a la del sistema continuo, se logra la estabilidad en una región de parámetros mas amplia. Y una oscilación completa puede observarse en un rango de tiempo de 1500 unidades. La siguiente tabla muestra con más detalle la comparación entre los diferentes modelos analizados.

Tabla 4.1 : Comparación entre las propuestas de modelos matemáticos del Bruselador.

Ecuaciones	Ecuaciones ocupadas	Teoría	Punto de equilibrio	Análisis y software	Regiones de estabilidad	Existencia de órbitas periódicas
$\dot{x} = a - bx - x + x^2y$ $\dot{y} = bx - x^2y$	Ecuaciones diferenciales	Sistemas dinámicos continuos	$x^* = (a, \frac{b}{a})$	Numérico con Octave	Inestable y estable. Existen muchos trabajos realizados con este modelo.	Ciclo límite estable
$x_{t+1} = a - bx_t - x_t + x_t^2y_t$ $y_{t+1} = bx_t - x_t^2y_t$	Ecuaciones en diferencias	Sistemas dinámicos discretos	$x^* = (p_i, y_i)$ donde p_i es una raíz de $p(x) = -2x^3 + ax^2 - (b+2)x + a$ y $y = a - 2p_i$ para $i = 1, 2, 3$.	Numérico con Octave	Si $D > 0$ existe una raíz real: x^* es inestable del tipo punto silla si D está en la región A. x^* es inestable si D está en B. Si $D = 0$, existen 3 raíces reales, 2 son iguales. $x_1^* = x_2^*$ es inestable. x_3^* es inestable del tipo punto silla. Si $D < 0$, hay 3 raíces reales distintas: x_1^* es inestable. x_2^* es inestable del tipo punto silla. x_3^* es inestable del tipo punto silla.	No hay órbitas periódicas
$x_{t+1} = (a - bx_t - x_t + x_t^2y_t)H + x_t$ $y_{t+1} = (bx_t - x_t^2y_t)H + y_t$	Ecuaciones en diferencias	Sistemas dinámicos discretos	$x^* = (a, \frac{b}{a})$	Numérico con Octave y Python	Las regiones de estabilidad varían dependiendo del valor de H escogido. Para $H = 0.01$ se presentan regiones inestables, estables e inestables del tipo punto silla.	Órbitas periódicas
$x_{t+1} = (a - bx_t - x_t + x_t^2w_t)H + x_t$ $y_{t+1} = (bx_t - x_t^2w_t)H + w_t$ $w_{t+1} = y_t$	Ecuaciones en diferencias	Sistemas dinámicos discretos	$x^* = (a, \frac{b}{a}, \frac{b}{a})$	Numérico con Octave	Las regiones de estabilidad cambian dependiendo del valor de H escogido. Para $H = 0.01$ se presentan regiones inestables del tipo silla y estables.	Órbitas periódicas

En nuestro análisis hemos visto que cada modelo estudiado tiene similitud en la localización de las regiones de estabilidad, y la presencia de oscilaciones. El modelo continuo es muy conocido y ha sido muy estudiado, en esta tesis hicimos dos propuestas de modelos discretos y una propuesta de modelo discreto con un retardo, donde para realizar el análisis se ocuparon técnicas numéricas.

La importancia de realizar modelos matemáticos que describen fenómenos químicos radica en que estos permiten validar comportamientos observados experimentalmente y puede dar información sobre las reacciones previo a realizar el análisis experimental, además nos permite observar el comportamiento de productos intermedios antes de obtener el producto final.

En algunas otras áreas también aparecen oscilaciones, como se describirá a continuación.

Un ejemplo particular es el ciclo de glaciación el cual se ha estudiado desde hace mucho tiempo, existen muchas teorías y modelos que intentan comprender, explicar y predecir como ocurre una glaciación y porque se repite cada cierto tiempo, un artículo que revisa algunos de estos modelos planteados con sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, es decir analizadas con teoría de sistemas dinámicos continuos, es *Oscillators and relaxation phenomena in Pleistocene climate theory* escrito por Michel Crucifix [6].

Un ejemplo específico de un fenómeno oscilatorio que se puede modelar con ecuaciones en diferencias, es decir con sistemas dinámicos discretos, son las redes regulatorias, en estas las oscilaciones están relacionadas con la homeostasis que son aquellos procesos en el cuerpo humano que permiten mantener la estabilidad como la respiración, digestión, etc. [5].

Ejemplos de fenómenos oscilatorios modelados por sistemas dinámicos discretos con retardo son modelos de crecimiento poblacional veáse [16,24].

Queda como trabajo a futuro profundizar en el análisis de los modelos propuestos de sistemas dinámicos discretos.

Apéndice A

Método de Runge Kutta de orden 4

Los métodos de Runge-Kutta son métodos iterativos que utilizan promedios de la función de pendiente $f(t, y)$ en dos o más puntos en el intervalo $[t_{n-1}, t_n]$ para calcular y_n para aproximar las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias, en particular del problema de valor inicial.

Consideremos un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$\dot{x} = f(t, x, y)$$

$$\dot{y} = g(t, x, y)$$

con condiciones iniciales $x(t_0) = x_0$ y $y(t_0) = y_0$. De esta manera el algoritmo Runge-Kutta de orden 4 para el sistema de ecuaciones con la condición inicial anterior está dada por

$$\begin{aligned}t_n &= t_{n-1} + h \\x_n &= x_{n-1} + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\y_n &= y_{n-1} + \frac{h}{6}(p_1 + 2p_2 + 2p_3 + p_4)\end{aligned}$$

donde h es el tamaño de paso fijo y

$$\begin{aligned}k_1 &= f(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}) \\k_2 &= f\left(t_{n-1} + \frac{h}{2}, x_{n-1} + \frac{h}{2}k_1, y_{n-1} + \frac{h}{2}p_1\right) \\k_3 &= f\left(t_{n-1} + \frac{h}{2}, x_{n-1} + \frac{h}{2}k_2, y_{n-1} + \frac{h}{2}p_2\right) \\k_4 &= f(t_{n-1} + h, x_{n-1} + hk_3, y_{n-1} + hp_3) \\p_1 &= g(t_{n-1}, x_{n-1}, y_{n-1}) \\p_2 &= g\left(t_{n-1} + \frac{h}{2}, x_{n-1} + \frac{h}{2}k_1, y_{n-1} + \frac{h}{2}p_1\right) \\p_3 &= g\left(t_{n-1} + \frac{h}{2}, x_{n-1} + \frac{h}{2}k_2, y_{n-1} + \frac{h}{2}p_2\right) \\p_4 &= g(t_{n-1} + h, x_{n-1} + hk_3, y_{n-1} + hp_3)\end{aligned}$$

Obsérvese que en este método se utiliza un promedio ponderado de pendientes en el punto medio $t_{n-1} + \frac{h}{2}$ y en los puntos extremo t_{n-1} y t_n , para más información veáse [3].

Apéndice B

Segunda ley de la termodinámica.

La termodinámica es el estudio científico de la interrelación entre el calor y otras formas de energía. En la termodinámica se analizan los cambios en el estado de un sistema, estos estados son propiedades macroscópicas como la concentración, energía, temperatura, presión y volumen.

En la Química uno de los objetivos principales al estudiar la termodinámica, es poder predecir si ocurrirá alguna reacción cuando se mezclen los reactivos en condiciones especiales (cierta temperatura, presión y concentración).

Una reacción que si ocurre en determinadas condiciones se llama espontánea y si no ocurre en esas condiciones se dice que no es espontánea. Ejemplos de comparación entre estas reacciones son:

La expansión de un gas en un recipiente vacío es un proceso espontáneo, mientras que el proceso inverso, la contracción de la moléculas de un gas dentro de un recipiente no es espontáneo. Una cascada de agua cae de manera espontánea pero nunca sube espontáneamente.

La entropía (S) de un sistema se define como una medida de aleatoriedad o una medida del desorden de un sistema, es decir describe el grado en que los átomos, las moléculas o los iones se distribuyen en forma desordenada en una determinada región del espacio. A medida que aumenta el desorden de un sistema, mayor será su entropía. Para un sistema químico, el cambio de entropía está dada como $\frac{dS}{dt} = S_f - S_i$ donde S_f y S_i son las entropías del sistema en los estados inicial y final, respectivamente.

La **segunda ley de la termodinámica** nos dice que la entropía del universo aumenta en un proceso espontáneo y se mantiene constante en un proceso que se encuentra en equilibrio. Debido a que el universo está constituido por el sistema y su entorno, el cambio de entropía del universo ($\frac{dS(\text{universo})}{dt}$) en cualquier proceso es igual a la suma de los cambios de entropía del sistema ($\frac{dS(\text{sistema})}{dt}$) y de sus alrededores ($\frac{dS(\text{alrededores})}{dt}$).

De esta manera, podemos reescribir la segunda ley de la termodinámica de la siguiente

manera:

Para un proceso espontáneo:

$$\frac{dS(\text{universo})}{dt} = \frac{dS(\text{sistema})}{dt} + \frac{dS(\text{alrededores})}{dt} > 0.$$

Para un proceso en equilibrio:

$$\frac{dS(\text{universo})}{dt} = \frac{dS(\text{sistema})}{dt} + \frac{dS(\text{alrededores})}{dt} = 0.$$

Para más detalle veáse [4].

Bibliografía

- [1] AGREDA, J. A., AND BARRAGÁN, D. A. Reacciones químicas oscilantes: su historia. *Revista Colombiana de Química* 27, 2 (1998), 61–70.
- [2] BARTOSIEWICZ*, Z., AND PAWŁUSZEWICZ, E. Euler's discretization, dynamic equivalence and linearization of control systems. *International Journal of Control* 78, 10 (2005), 773–781.
- [3] BORRELLI, R. L. C., BORRELLI, C. S. R. L., AND COLEMAN, C. S. *Ecuaciones diferenciales: una perspectiva de modelación*. Oxford University Press, 2002.
- [4] CHANG, R. Química general. *Fondo Educativo Interamericano* (2000).
- [5] COUTINHO, R., FERNANDEZ, B., LIMA, R., AND MEYRONEING, A. Discrete time piecewise affine models of genetic regulatory networks. *Journal of mathematical biology* 52, 4 (2006), 524–570.
- [6] CRUCIFIX, M. Oscillators and relaxation phenomena in pleistocene climate theory. *Phil. Trans. R. Soc. A* 370, 1962 (2012), 1140–1165.
- [7] DURÁN, A. L. Patrones de turing en sistemas biológicos. *UAM* (2012).
- [8] EPSTEIN, I. R., AND POJMAN, J. A. *An introduction to nonlinear chemical dynamics: oscillations, waves, patterns, and chaos*. Oxford University Press, 1998.
- [9] GRAY, P., AND SCOTT, S. K. *Chemical oscillations and instabilities: non-linear chemical kinetics*. Clarendon Press. Oxford University Press, 1990.
- [10] HADDAD, W. M., AND CHELLABOINA, V. *Nonlinear dynamical systems and control: a Lyapunov-based approach*. Princeton University Press, 2008.
- [11] HILGER, S. Analysis on measure chains—a unified approach to continuous and discrete calculus. *Results in Mathematics* 18, 1-2 (1990), 18–56.
- [12] HIRSCH, M. W., SMALE, S., AND DEVANEY, R. L. *Differential Equations, Dynamical Systems, and an Introduction to Chaos*, vol. 60. Academic Press, 2004.

- [13] JOHN W. EATON, DAVID BATEMAN, S. H., AND WEHBRING, R. *GNU Octave version 4.0.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations*. 2015.
- [14] KHALIL, H. K. *Nonlinear Systems*. Macmillan Publishing Company, 1992.
- [15] KUZNETSOV, Y. A. *Elements of applied bifurcation theory*, vol. 112. Springer Science & Business Media, 2013.
- [16] LADAS, G. Recent developments in the oscillation of delay difference equations. *Differential Equations: Stability and Control* (1990), 321–332.
- [17] LYNCH, S. *Dynamical systems with applications using MATLAB*. Springer, 2004.
- [18] MURRAY, R. K., GRANNER, D. K., MAYES, P., AND RODWELL, V. W. *Harper bioquímica ilustrada*. El manual moderno, 2004.
- [19] PERKO, L. *Differential Equations and Dynamical Systems*, vol. 7. Springer Science & Business Media, 2012.
- [20] ROBERT, L. D. *An introduction to chaotic dynamical systems*, 1989.
- [21] SARMAH, H. K., DAS, M. C., BAISHYA, T. K., SARMAH, H. K., DAS, M. C., AND BAISHYA, T. K. Hopf bifurcation in a chemical model. *International Journal for Innovative Research in Science and Technology* 1, 9 (2015), 23–33.
- [22] UPADHYAY, S. K. *Chemical kinetics and reaction dynamics*.
- [23] WIGGINS, S. *Introduction to applied nonlinear dynamical systems and chaos*, vol. 2. Springer Science & Business Media, 2003.
- [24] YU, J., ZHANG, B., AND WANG, Z. Oscillation of delay difference equations. *Applicable Analysis* 53, 1-2 (1994), 117–124.