

1] Vamos a estudiar el modelo de reacción-difusión (Skellam 1951') para la dinámica de una población biológica con tasa constante de crecimiento  $\alpha > 0$ , con una densidad de población inicial  $v_0(x)$  (en la clase de Schwartz) y realizando un movimiento difusivo con constante de difusión  $D > 0$ , es decir:

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, t) = D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x, t) + \alpha v(x, t), \quad v(x, 0) = v_0(x). \quad (1)$$

1.1) Verifica que las unidades de  $\alpha^{-1}$  y  $\sqrt{D/\alpha}$  son tiempo y espacio respectivamente, úsalos para realizar la siguiente adimensionalización en espacio y tiempo,

$$\tau := \alpha t, \quad y := \sqrt{\frac{\alpha}{D}} x, \quad u(y, \tau) := v(x, t)$$

y comprueba que el PVI resultante es:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau}(y, \tau) = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, \tau) + u(y, \tau), \quad u(y, 0) = u_0(y) := v_0\left(\sqrt{\frac{D}{\alpha}} y\right). \quad (2)$$

1.2) Verifica que, para todo  $\tau > 0$ , la función  $U(y, \tau) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \exp\left\{\tau - \frac{y^2}{4\tau}\right\}$  cumple la primera igualdad de (2) e indica quién es su límite cuando  $\tau$  tiende a cero.

1.3) Deduce una expresión para la solución de (2) y deshaz el cambio de variables para calcular la solución  $v$  de (1).

**Solución.** 1.1) Para obtener las dimensiones físicas, tomamos unidades en (1), obteniendo:

$$\left[\left[\frac{\partial v}{\partial t}\right]\right] = \left[\left[D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\right]\right] = [[\alpha v]] \Rightarrow \frac{[[v]]}{\text{tiempo}} = \frac{[[D]] [[v]]}{\text{espacio}^2} = [[\alpha]] [[v]].$$

Para las unidades de  $\alpha$ , comparamos el primer y el tercer elemento; y para las de  $D$  comparamos primero el segundo. Obtenemos:

$$[[\alpha]] = \frac{1}{\text{tiempo}}, \quad [[D]] = \frac{\text{espacio}^2}{\text{tiempo}}, \quad \Rightarrow \quad \sqrt{\frac{D}{\alpha}} = \sqrt{\frac{\text{espacio}^2 \text{ tiempo}}{\text{tiempo} \cdot 1}} = \text{espacio},$$

como queríamos. Hacemos el cambio sugerido y recalculamos los 3 términos de (1):

$$\frac{\partial v}{\partial t}(x, t) = \alpha \frac{\partial u}{\partial \tau}(y, \tau), \quad D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(x, t) = D \left(\sqrt{\frac{\alpha}{D}}\right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, \tau) = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(y, \tau), \quad \alpha v(x, t) = \alpha u(y, \tau).$$

Dividiendo por  $\alpha$  en los 3 términos, obtenemos directamente (2). El cambio en la condición inicial es simplemente una evaluación en  $\tau = 0$  o equivalentemente  $t = 0$ .

Para verificar 1.2) simplemente hemos de calcular derivadas (y reescribir  $U$ ):

$$\frac{\partial U}{\partial \tau}(y, \tau) = \frac{4\tau^2 - 2\tau + y^2}{4\tau^2} U(y, \tau), \quad \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}(y, \tau) = \frac{-2\tau + y^2}{4\tau^2} U(y, \tau), \quad U(y, \tau) = \frac{4\tau^2}{4\tau^2} U(y, \tau).$$

Evidentemente,  $U$  tiene problemas de continuidad en  $\tau = 0$ , ya que aparece en ambos denominadores. Pero si observamos que  $U = e^\tau \times$  (solución fundamental del calor), entonces su límite en cero queda claramente descrito por el de la solución fundamental del calor, ya que:  $e^0 \delta_0(y) = \delta_0(y)$ , es decir, la Delta de Dirac. Además sabemos que este límite ha de ser entendido operacionalmente (o en forma de convolución).

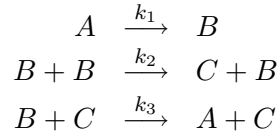
1.3) El apartado anterior indica precisamente que  $U$  es la solución fundamental de la ecuación que aparece en (2), por lo que la solución del PVI viene dada por

$$u(y, \tau) = U *_y u_0 = \frac{e^\tau}{\sqrt{4\pi\tau}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left\{-\frac{(y-z)^2}{4\tau}\right\} u_0(z) dz, \quad \text{si } \tau > 0, \quad u(y, 0) = u_0(y),$$

ya que cumple la EDO (porque  $U$  la verifica), y la continuidad en  $\tau = 0$  viene dada por el límite anterior (junto con los resultados de clase). Al deshacer el cambio, obtenemos el resultado pedido (nótese que el cambio de variables en la integral coincide con el de la adimensionalización, como era esperable):

$$\begin{aligned} v(x, t) &= u\left(\sqrt{\frac{\alpha}{D}} x, \alpha t\right) = \frac{e^{\alpha t}}{\sqrt{4\pi\alpha t}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left\{-\frac{(\sqrt{\frac{\alpha}{D}} x - z)^2}{4\alpha t}\right\} v_0\left(\sqrt{\frac{D}{\alpha}} z\right) dz = \left[ \begin{array}{l} \sqrt{\frac{D}{\alpha}} z = s, \\ dz = \sqrt{\frac{\alpha}{D}} ds \end{array} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{D}} \frac{e^{\alpha t}}{\sqrt{4\pi\alpha t}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left\{-\frac{(\sqrt{\frac{\alpha}{D}} x - \sqrt{\frac{\alpha}{D}} s)^2}{4\alpha t}\right\} v_0(s) ds = \frac{e^{\alpha t}}{\sqrt{4\pi D t}} \int_{\mathbb{R}} \exp\left\{-\frac{(x-s)^2}{4Dt}\right\} v_0(s) ds. \end{aligned}$$

2] El proceso químico de Robertson viene dado por las siguientes reacciones:



2.1) Llamando  $a(t)$ ,  $b(t)$  y  $c(t)$  a las concentraciones de  $A$ ,  $B$  y  $C$ , respectivamente, deduce las ecuaciones diferenciales asociadas al proceso y encuentra las dimensiones físicas de  $k_1$ ,  $k_2$  y  $k_3$ .

2.2) Analiza el crecimiento o decrecimiento de  $[A] + [B]$ ,  $[C]$  y  $[A] + [B] + [C]$ . Interpreta el resultado.

2.3) Describe todos los equilibrios (soluciones constantes) del proceso y, en el caso de que la solución con condiciones iniciales  $a(0) = a_0 > 0$ ,  $b(0) = b_0 \geq 0$  y  $c(0) = 0$  convergiera a uno de estos equilibrios, indica cuál sería en términos de  $a_0$  y  $b_0$ .

**Solución.** 2.1) Usando la Ley de Acción de Masas, deducimos:

$$a'(t) = -k_1 a + k_3 bc, \quad b'(t) = k_1 a - k_2 b^2 - k_3 bc, \quad c'(t) = k_2 b^2.$$

Para deducir las dimensiones, comparamos varios términos:

$$[[a']] = [[k_1]][[a]] \Rightarrow [[k_1]] = \frac{1}{\text{tiempo}}, \quad [[b']] = [[k_2]][[b]^2] = [[k_3]][[bc]] \Rightarrow [[k_2]] = [[k_3]] = \frac{1}{\text{tiempo} \times \text{mol}}.$$

2.2) Observamos, sumando las respectivas ecuaciones, que

$$\frac{d}{dt}(a + b) = -k_2 b^2 = -\frac{dc}{dt}, \quad \frac{d}{dt}(a + b + c) = 0,$$

es decir, la suma de las concentraciones de los compuestos  $A$  y  $B$  decrece continuamente y lo hace al mismo ritmo que aumenta el compuesto  $C$ , de manera que la concentración total de los 3 compuestos permanece constante en tiempo.

2.3) Para calcular los equilibrios, igualamos a cero las 3 ecuaciones (comenzando por la tercera):

$$k_2 b_e^2 = 0, \quad -k_1 a_e + k_3 b_e c_e = 0, \quad k_1 a_e - k_2 b_e^2 - k_3 b_e c_e = 0 \Rightarrow b_e = 0, \quad a_e = 0, \quad c_e \geq 0 \text{ libre.}$$

Como todos los equilibrios son de la forma  $(0, 0, c_e)$ , basta determinar  $c_e$  para encontrar el posible equilibrio. Usando el apartado anterior, sabemos que la suma  $a(t) + b(t) + c(t)$  permanece constante, por lo que el valor de esta suma en  $t = 0$  y el valor al que converge, el equilibrio, han de ser iguales, esto es  $a_0 + b_0 + 0 = 0 + 0 + c_e$ , por lo tanto, el equilibrio buscado viene dado por  $c_e = a_0 + b_0$ .

## CALIFICACIONES

Notas obtenidas por los alumnos en esta prueba (Tanto el ejercicio de Skellam como el de Robertson están puntuados sobre un máximo de 3 puntos, 1 punto por apartado).

DNI	Control 31 mayo			Nota máxima en examen día 19
	Skellam	Robertson	Nota (sobre 1,5)	
**.*..151			<b>0</b>	7
**.*..251	1,6	2,4	<b>1</b>	7
**.*..279			<b>0</b>	7
**.*..283	1,9	2,8	<b>1,18</b>	7
**.*..316	<b>1</b>	1,9	<b>0,73</b>	7
**.*..317	<b>1,1</b>	2,7	<b>0,95</b>	7
**.*..375	1,9	2,8	<b>1,18</b>	7
**.*..421	2,5	2	<b>1,13</b>	7
**.*..442	<b>1,2</b>	1,8	<b>0,75</b>	7
**.*..451	1,7	<b>1</b>	<b>0,68</b>	7
**.*..483			<b>0</b>	7
**.*..506			<b>0</b>	7
**.*..558	<b>1</b>	3	<b>1</b>	7
**.*..566	2,2	3	<b>1,3</b>	7
**.*..567	2,5	<b>1,4</b>	<b>0,98</b>	7
**.*..576	2,6	2,8	<b>1,35</b>	5,54
**.*..587	1,7	2,3	<b>1</b>	7
**.*..633	2,5	3	<b>1,38</b>	6,30
**.*..642	2,4	3	<b>1,35</b>	6,35
**.*..879	2,6	3	<b>1,4</b>	7
**.*..887	1,5	3	<b>1,13</b>	7
**.*..901	2,9	3	<b>1,48</b>	6,59
**.*..914	3	2,9	<b>1,48</b>	7
**.*..919	1,9	3	<b>1,23</b>	7
**.*..937			<b>0</b>	7
**.*..991	3	3	<b>1,5</b>	7

El examen puede ser revisado en tutorías (antes de la prueba final). Recordamos que las tutorías de la semana próxima serán jueves 15 y viernes 16 de 10:00h a 13:00h.

Recordamos también que los alumnos que no se presenten al examen del día 19 de junio de 2017, según la normativa vigente, tendrán una calificación por curso de “No presentado”.