Relación de ejercicios 2

Modelos matemáticos II, (4^o Grado en Informática y Matemáticas). Curso 2016-17.

Leyes de acción de masas

AM.5. (Ver cinética de Michaelis-Menten, (1903)–Victor Henri–reacciones enzimáticas) Nos encontramos ante una enzima E y un sustrato S que se comportan como sigue. La enzima puede existir en tres formas: bien desligada, bien formando un complejo ES_1 cuando se liga a un único sustrato o bien formando otro complejo ES_2 cuando el complejo ES_1 se une a un sustrato más. La reacción enzimática es capaz de producir un cierto producto P a partir de ES_1, dando como resultado una enzima libre, pero también puede producir producto P a partir de ES_2, dando como resultado un complejo ES_1. Las reacciones descritas quedan como:

$$S + E \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} ES_1 \overset{k_2}{\rightarrow} P + E \qquad\qquad ES_1 + S \underset{k_{-3}}{\overset{k_3}{\rightleftharpoons}} ES_2 \overset{k_4}{\rightarrow} P + ES_1$$

Llamando como sigue: $s = [S]$, $e = [E]$, $c_1 = [ES_1]$, $c_2 = [ES_2]$ y $p = [P]$ a las respectivas concentraciones de cada uno (como variables dependientes del tiempo), determina el sistema de 5 EDO's que verifican estas concentraciones.

AM.6. Resuelve la ecuación para p y descríbela en función de las otras variables.

AM.7. Muestra que la concentración total de enzima (teniendo en cuenta las tres formas en que podemos encontrarla) se conserva en el tiempo.

AM.8. Usa los dos ejercicios anteriores para eliminar las variables p y e del sistema original y teniendo en cuentas las condiciones iniciales:

$$e(0) = e_0 > 0,\ s(0) = s_0 > 0,\ c_1(0) = c_2(0) = p(0) = 0,$$

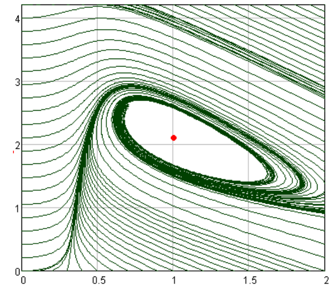
Describe el PVI resultante formado por sólo 3 ecuaciones para s, c_1 y c_2 agrupando en cada EDO los términos de ganancia y de pérdida.

AM.9. Verifica que la siguiente variable “temporal" $\tau := k_1 e_0\, t$ y las variables dependientes de “concentración":

$$u(\tau) := \frac{s(t)}{s_0}, \quad \mathrm{v}_1(\tau) := \frac{c_1(t)}{e_0}, \quad \mathrm{v}_2(\tau) := \frac{c_2(t)}{e_0},$$

no tienen dimensiones. Describe el PVI que verifican las nuevas incógnitas $u(\tau)$, $\mathrm{v}_1(\tau)$ y $\mathrm{v}_2(\tau)$ de modo que todas las nuevas constantes que aparezcan (combinaciones de las anteriores) no tengan dimensiones.

AM.10. El siguiente modelo compuesto por 4 leyes de acción de masas es teórico y fue propuesto por investigadores (Prigogine y Lefever '68) de Bruselas que le dieron el nombre de **bruselator** (*Brussels + oscillator*) ya que posee soluciones oscilantes en torno a un único estado estacionario, que pretendemos calcular en este ejercicio.



$$A \xrightarrow{k_1} X, \qquad B + X \xrightarrow{k_2} Y + D, \qquad X + X + Y \xrightarrow{k_3} X + X + X, \qquad X \xrightarrow{k_4} E.$$

Considera que las concentraciones de A, B, D y E (que puedes denotar respectivamente como a, b, d y e) son constantes no nulas y, llamando $x(t)$ e $y(t)$ a las concentraciones respectivas de X e Y, en el instante de tiempo t, determina las ecuaciones que verifican.

AM.11. Determina las unidades de k_4 y de $\Omega = \sqrt{k_4/k_3}$ y realiza la siguiente adimensionalización de la ecuación: $\tau := k_4\, t$ para el tiempo y $u(\tau) := \frac{x(t)}{\Omega}$ y $v(\tau) := \frac{y(t)}{\Omega}$ para las incógnitas, comprobando que el sistema resultante es:

$$\frac{du}{d\tau} = \gamma + u^2\, v - (\beta + 1)u, \qquad \frac{dv}{d\tau} = \beta u - u^2\, v.$$

Describe los parámetros γ y β en función de k_1, k_2, k_3, k_4, a y b y verifica que ambos son adimensionales

AM.12. Calcula el estado estacionario (es decir, la solución constante en tiempo) en función de γ y β y recupera después las dimensiones para describirlo en función de las constantes del problema.

Difusión: Ley de Fick y transformada de Fourier

DF.13. Si definimos $h_a(f)(x) := f(a\,x)$ para cada $a > 0$, prueba que $\mathcal{F}(h_a(f)) = \frac{1}{a} h_{1/a}\mathcal{F}(f)$, siendo $\mathcal{F}$ la transformada de Fourier definida en clase.

DF.14. Prueba que $\mathcal{F}(f * g) = \mathcal{F}(f)\mathcal{F}(g)$ y que $\mathcal{F}^{-1}(f\,g) = \mathcal{F}^{-1}(f) * \mathcal{F}^{-1}(g)$, donde $*$ representa la convolución entre funciones de la clase de Schwartz $\mathcal{S}$.

DF.15. Sea $u(x,t) := \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} e^{\frac{-(x-y)^2}{4t}} u_0(y)dy$ la solución de la ecuación del calor: $\partial_t u = \partial^2_{xx} u$ con condición inicial $u_0 \in \mathcal{S}$. Prueba que existe una constante que únicamente depende de u_0 tal que, para cada $t > 0$, se verifica: $\displaystyle\max_{x\in\mathbb{R}} |u(x,t)| \leq \frac{C}{\sqrt{t}}$.

DF.16. En las condiciones del ejercicio anterior, prueba que

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} u(x,t)^2 dx = -2\int_{-\infty}^{\infty} \Big(\frac{\partial u}{\partial x}(x,t)\Big)^2 dx.$$

Sugerencia: multiplica la ecuación por u en integra.

DF.17. En 1951 Skellam propuso el siguiente modelo

$$\frac{du}{dt} = \Delta_x u + k\,u, \tag{1}$$

donde $u : \mathbb{R}\times(0,\infty) \to \mathbb{R}_0^+$ es una distribución de una población que se repoduce continuamente con tasa de natalidad k y se dispersa en espacio de forma aleatoria (la constante de difusión ya ha sido normalizada a 1 mediante un cambio de variables). Comprueba que la función: $U(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi t}} \exp\left(k\,t - \frac{x^2}{4t}\right)$ es solución de (1).

DF.18. ¿Cuál sería el límite de $U(x,t)$ cuando t tiende a cero?

DF.19. Con la ayuda de la transformada de Fourier, y siguiendo el mismo proceso seguido en clase, deduce la expresión para la solución de (1) con condición inicial $p(x,0) = p_0(x)$.

DF.20. Analiza el comportamiento de dichas soluciones cuando $t \to \infty$.

Reacción difusión

RD.18. Dada la ecuación FKPP

$$\frac{du}{dt} - D\Delta_x u = \alpha\, u\Big(1 - \frac{u}{u_\infty}\Big)$$

verifica que las unidades de α^{-1} y $\sqrt{D/\alpha}$ son tiempo y espacio respectivamente y úsalos para realizar la siguiente adimensionalización de la ecuación:

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

y verifica que la ecuación resultante es precisamente la FKPP sin dimensiones estudiada en clase: $\partial_\tau v - \Delta_y v = v(1-v)$.

RD.19. Al estudiar en clase la ecuación FKPP sin dimensiones, y en particular la existencia de soluciones de tipo onda viajera decrecientes y con velocidad c, hemos deducido que existe una velocidad crítica $c = 2$ por debajo de la cual no existen tales soluciones. Deshaciendo la adimensionalización anterior, determina cuál es esa velocidad crítica, en términos de las constantes físicas de la ecuación.

RD.20. Dada la ecuación Biestable

$$\frac{du}{dt} - D\Delta_x u = \alpha\, u\Big(1 - \frac{u}{u_\infty}\Big)\Big(\frac{u}{u_{min}} - 1\Big)$$

realiza en este caso la siguiente adimensionalización de la ecuación:

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

y verifica que la ecuación resultante es precisamente la Biestable sin dimensiones estudiada en clase: $\partial_\tau v - \Delta_y v = v(1-v)(v-\beta)$ con $0 < \beta = \frac{u_{min}}{u_\infty} < 1$.

RD.21. Para la ecuación FKPP hemos deducido en clase que, si buscamos soluciones de tipo onda viajera decrecientes, éstas han de tener necesariamente velocidad positiva. Si estuviésemos interesados en soluciones de tipo onda viajera pero con un perfil de onda monóto crecientes que conecte el 0 (en $-\infty$) y el 1 (en ∞), ¿cuál debería ser el signo de la velocidad? Justifica analínicuamente tu respuesta.