Apellidos	Firma

Nombre	D.N.I o pasaporte	3ºA	3ºB	4º

EJERCICIO 1. Se considera la siguiente variante de la ecuación del calor:

$$A\frac{\partial v}{\partial t} = B\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - C(v - D)\,, \quad A, B, C, D \in \mathbb{R}\,. \tag{1}$$

(a) Sean $\widetilde{x} = \frac{x}{\lambda}$, $\widetilde{t} = \frac{t}{\tau}$ y $\widetilde{v}(\widetilde{x}, \widetilde{t}) = \frac{v(x,t)}{D} - 1$, donde $v(x, t)$ resuelve la ecuación (1). Determina las expresiones que deben adoptar τ y λ, en términos de las constantes originales, para que $\widetilde{v}(\widetilde{x}, \widetilde{t})$ satisfaga la ecuación

$$\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial \widetilde{t}} + \widetilde{v} = \frac{\partial^2 \widetilde{v}}{\partial \widetilde{x}^2}\,. \tag{2}$$

(b) Resuelve la ecuación (2) sujeta a la condición inicial $\widetilde{v}(\widetilde{x}, 0) = 1$. Por si te resultase útil, recuerda que la transformada de Fourier de la función $f(x) = e^{-\alpha^2 x^2}$ es $\hat{f}(y) = \frac{\sqrt{\pi}}{|\alpha|}e^{-\frac{\pi^2 y^2}{\alpha^2}}$.

(c) Caso de existir, encuentra todas las ondas viajeras asociadas a la ecuación (2). ¿Hay alguna limitación con respecto a la velocidad de propagación de las mismas?

Solución: (a) Se tiene:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial \widetilde{t}} &= \frac{\tau}{D}\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\tau}{AD}\Big(B\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - C(v - D)\Big)\,,\\
\frac{\partial \widetilde{v}}{\partial \widetilde{x}} &= \frac{\lambda}{D}\frac{\partial v}{\partial x}\,, \quad \frac{\partial^2 \widetilde{v}}{\partial \widetilde{x}^2} = \frac{\lambda^2}{D}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\,.
\end{aligned}$$

Por consiguiente, para que se satisfaga la ecuación (2) debe cumplirse:

$$\frac{\tau}{AD}\Big(B\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - C(v - D)\Big) + \frac{v}{D} - 1 = \frac{\lambda^2}{D}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}\,,$$

de donde se desprende que ha de ser

$$\frac{\tau B}{AD} = \frac{\lambda^2}{D}\,, \quad \frac{1}{D} = \frac{\tau C}{AD}\,, \quad \frac{CD\tau}{AD} = 1\,,$$

o equivalentemente

$$\tau = \frac{A}{C}\,, \quad \lambda = \sqrt{\frac{B}{C}}\,.$$

(b) En primer lugar, aplicamos la transformada de Fourier a ambos miembros de la ecuación (2):

$$\frac{\partial \widehat{\widetilde{v}}}{\partial \widetilde{t}} + \widehat{\widetilde{v}} = -4\pi^2 y^2 \widehat{\widetilde{v}}\,,$$

luego

$$\frac{\frac{\partial \widehat{\widetilde{v}}}{\partial \widetilde{t}}}{\widehat{\widetilde{v}}} = -(1+4\pi^2 y^2)\,,$$

que tiene por solución $\widehat{\widetilde{v}}(\widetilde{y},\widetilde{t}) = \widehat{\widetilde{v}}(\widetilde{y},0)e^{-(1+4\pi^2y^2)\widetilde{t}}$. Tomando ahora la transformada de Fourier inversa:

$$\widetilde{v}(\widetilde{x},\widetilde{t}) = e^{-\widetilde{t}}\left(\widehat{\widetilde{v}}(\widetilde{y},0)\,\widehat{\frac{1}{2\sqrt{\pi\widetilde{t}}}e^{-\frac{\widetilde{x}^2}{4\widetilde{t}}}}\right)^{\check{}} = e^{-\widetilde{t}}\,\widetilde{v}(\widetilde{x},0) * \frac{1}{2\sqrt{\pi\widetilde{t}}}e^{-\frac{\widetilde{x}^2}{4\widetilde{t}}} = e^{-\widetilde{t}}\,\frac{1}{2\sqrt{\pi\widetilde{t}}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{4\widetilde{t}}}\,dy = e^{-\widetilde{t}}\,.$$

(c) Buscamos soluciones de la forma $\widetilde{v}(\widetilde{x},\widetilde{t}) = U(\widetilde{x}-c\widetilde{t})$, donde $c\in\mathbb{R}$ denota la velocidad de propagación de la solución. Se tiene:

$$\frac{\partial\widetilde{v}}{\partial\widetilde{t}} = -cU'(\widetilde{x}-c\widetilde{t})\,,\quad \frac{\partial^2\widetilde{v}}{\partial\widetilde{x}^2} = U''(\widetilde{x}-c\widetilde{t})\,,$$

luego existirán soluciones de este tipo si y solamente si se verifica

$$-cU' + U = U'' \Leftrightarrow U'' + cU' - U = 0\,.$$

La ecuación característica asociada tiene por raíces $\mu_\pm = \frac{-c\pm\sqrt{c^2+4}}{2}$, luego las soluciones buscadas son de la forma

$$U(z) = Ae^{\mu_+ z} + Be^{\mu_- z}\,,\quad \forall A,B,c\in\mathbb{R}\,.$$

■

EJERCICIO 2. Se considera la siguiente reacción enzimática de tipo cooperativo (es decir, que son varios los sustratos que han de unirse a la enzima para que la reacción tenga lugar):

$$E + S + \overset{n)}{\cdots} + S \underset{k_{-1}}{\overset{k_1}{\rightleftharpoons}} ES \overset{k_2}{\to} E + P\,,$$

donde k_1, k_{-1}, k_2 son constantes positivas que indican la velocidad a la que ocurre cada reacción. Denotamos $[E],[S],[ES],[P]$ las concentraciones de cada una de las sustancias químicas que intervienen en la misma. Asimismo, supodrnemos que se dispone de una mezcla homogénea, de forma que $[E],[S],[ES],[P]$ dependen exclusivamente del tiempo t.

(a) Emplea la ley de acción de masas para escribir las ecuaciones diferenciales del modelo.

(b) Estudia las dimensiones de k_1, k_{-1} y k_2.

(c) Reduce el sistema obtenido en el apartado (a) a tan solo dos ecuaciones, usando para ello leyes de conservación apropiadas.

(d) Denotamos $E_0 := [E](t=0)$ y $S_0 := [S](t=0)$. Se considera el tiempo adimensional $\tau = k_1E_0^n t$ y el cambio de variables

$$u(\tau) = \frac{[S]\left(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\right)}{S_0}\qquad v(\tau) = \frac{[ES]\left(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\right)}{E_0}\,.$$

Deduce el sistema de ecuaciones diferenciales satisfecho por u y v. ¿Admite solución? ¿Es única? Justifica la respuesta.

(e) Determina los estados de equilibrio (soluciones estacionarias) del sistema diferencial del apartado (d).

Solución: (a) A diferencia del modelo de Michaelis-Menten analizado en clase, el que aquí se propone requiere de n sustratos para que se active la reacción química. En tal caso, las ecuaciones diferenciales que describen el proceso son las siguientes:

$$\begin{aligned}
\frac{d[ES]}{dt} &= k_1[E][S]^n - (k_{-1}+k_2)[ES]\\
\frac{d[E]}{dt} &= -k_1[E][S]^n + (k_{-1}+k_2)[ES]\\
\frac{d[S]}{dt} &= n\big(-k_1[E][S]^n + k_{-1}[ES]\big)\\
\frac{d[P]}{dt} &= k_2[ES]
\end{aligned}$$

(b) Como las dimensiones de $\frac{d[P]}{dt}$ son $\frac{\text{densidad}}{\text{tiempo}}$, de la última ecuación se desprende que $[[k_2]] = \frac{1}{\text{tiempo}}$, luego ha de ser también $[[k_{-1}]] = \frac{1}{\text{tiempo}}$ en virtud de las ecuaciones anteriores. Finalmente, de cualquiera de las dos primeras ecuaciones se desprende que $[[k_1]] = \frac{\text{densidad}}{\text{tiempo}} \cdot \frac{1}{\text{densidad}^{n+1}} = \frac{1}{\text{tiempo}\cdot\text{densidad}^n}$.

(c) La última ecuación puede resolverse explícitamente sin más que integrar entre 0 y t:

$$[P](t) = k_2 \int_0^t [ES](s)\, ds\,,$$

teniendo en cuenta que $[ES](0) = 0$. Por otra parte, sumando las dos primeras se deduce que $\frac{d}{dt}([ES]+[E]) = 0$, luego $[ES](t)+[E](t) = [ES](0)+[E](0) = E_0$. En conclusión, bastaría con conocer $[ES](t)$ para resolver $[P](t)$ y $[E](t)$, luego el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales puede reducirse a solamente dos:

$$\begin{aligned}
\frac{d[ES]}{dt} &= k_1[E][S]^n - (k_{-1}+k_2)[ES] = k_1(E_0-[ES])[S]^n - (k_{-1}+k_2)[ES]\\
\frac{d[S]}{dt} &= n\big(-k_1[E][S]^n + k_{-1}[ES]\big) = n\big(-k_1(E_0-[ES])[S]^n + k_{-1}[ES]\big)
\end{aligned}$$

(d) Se tiene:

$$\begin{aligned}
u'(\tau) &= \frac{1}{S_0k_1E_0^n}\frac{d[S]}{dt}\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big) = \frac{n}{S_0k_1E_0^n}\left(-k_1[E]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)[S]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)^n + k_{-1}[ES]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)\right)\\
&= \frac{n}{S_0k_1E_0^n}\left(-k_1(E_0-[ES])\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)[S]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)^n + k_{-1}[ES]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)\right)\\
&= -\frac{nS_0^{n-1}}{E_0^{n-1}}u(\tau)^n + \frac{nS_0^{n-1}}{E_0^{n-1}}v(\tau)u(\tau)^n + \frac{nk_{-1}}{S_0k_1E_0^{n-1}}v(\tau)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v'(\tau) &= \frac{1}{k_1E_0^{n+1}}\frac{d[ES]}{dt}\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big) = \frac{1}{k_1E_0^{n+1}}\left(k_1[E]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)[S]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)^n - (k_{-1}+k_2)[ES]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)\right)\\
&= \frac{1}{k_1E_0^{n+1}}\left(k_1(E_0-[ES])\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)[S]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)^n - (k_{-1}+k_2)[ES]\Big(\frac{\tau}{k_1E_0^n}\Big)\right)\\
&= \frac{S_0^n}{E_0^n}u(\tau)^n - \frac{S_0^n}{E_0^n}v(\tau)u(\tau)^n - \frac{k_{-1}+k_2}{k_1E_0^n}v(\tau)
\end{aligned}$$

Los segundos miembros son de clase C^∞ en u, v; en particular, localmente Lipschitz. En consecuencia, el teorema de Cauchy-Picard-Lindelöff asegura la existencia de una única solución maximal del problema de valores iniciales.

(e) Se trata de resolver el sistema $u' = 0$, $v' = 0$. De la primera de estas ecuaciones se desprende que

$$vu^n = \frac{E_0^{n-1}}{nS_0^{n-1}}\Big(\frac{nS_0^{n-1}}{E_0^{n-1}}u^n - \frac{nk_{-1}}{S_0k_1E_0^{n-1}}v\Big) = u^n - \frac{k_{-1}}{k_1S_0^n}v\,.$$

Sustituyendo esta expresión en la segunda ecuación obtenemos:

$$0 = \frac{S_0^n}{E_0^n} u^n - \frac{S_0^n}{E_0^n} \Big(u^n - \frac{k_{-1}}{k_1 S_0^n} v \Big) - \frac{k_{-1} + k_2}{k_1 E_0^n} v = -\frac{k_2}{k_1 E_0^n} v \,.$$

Por consiguiente, el único estado de equilibrio es $v \equiv 0$, $u \equiv 0$.

■