

Treball final de grau
GRAU DE MATEMÀTIQUES
Facultat de Matemàtiques
Universitat de Barcelona

**Estudi de la dinàmica
de models de reacció-difusió**

Autora: Sara Matías Vejer

Director: Dr. Alex Haro
**Realitzat a: Departament de Matemàtica Aplicada
i Anàlisi, UB**
Barcelona, 30 de juny de 2015

Abstract

The Fisher-KPP equation is a model for invasion processes and the Brusselator is an autocatalytic model used in chemistry. Both of them belong to the reaction-diffusion models family. The purpose of this project is to study the behaviour and dynamics of their solutions. Having made a brief introduction into the weak solutions class to understand the existence and uniqueness of solutions, we focus on the phenomenon of traveling waves and its link with heteroclinic connections in a vector field. The Lyapunov theory provides us with the necessary tools to reach the existence of traveling waves in Fisher-KPP model. To complete the study we analyze the presence of a Hopf bifurcation in the Brusselator model.

Resum

L'equació de Fisher-KPP és un model per a processos d'invasió i el Brusselator és un model autocatalític molt usat en la branca de la química. Amdós pertanyen a la família de models de reacció-difusió. L'objectiu d'aquest treball és estudiar el comportament i la dinàmica de les seves solucions. Havent fet una breu introducció en la classe de les solucions febles per entendre l'existència i unicitat de solucions, ens centrem en el fenomen de les ones viatgeres i la seva relació amb les connexions heteroclíniques en un camp vectorial. La teoria de Lyapunov ens proporciona les eines necessàries per assolir l'existència d'ones viatgeres en el model de Fisher-KPP. Per completar l'estudi analitzem la presència d'una bifurcació de Hopf en el model Brusselator.

Agraïments

Agraeixo la dedicació i ajuda que m'ha proporcionat el meu tutor, Dr. Alex Haro, al llarg de l'elaboració d'aquest projecte.

També m'agradaria donar les gràcies a l'Andreu Alarcón i a l'Adrià Mádico pels seus consells.

Em resta agrair la paciència i el suport incondicional en tot moment per part de la meva família, padrins, pares i Aurora. I, finalment, dono les gràcies a l'Albert per fer sempre les coses tant fàcils.

Índex

Objectius i motivació	v
Introducció	vii
1 Models de reacció-difusió	1
1.1 Sistemes de reacció-difusió.	1
1.2 Derivació del model.	1
1.3 L'equació de Fisher-KPP.	5
1.4 El model Brusselator	6
2 Solucions febles. Existència i unicitat de solucions	9
2.1 Solucions febles.	9
2.1.1 Distribucions	9
2.1.2 Derivada d'una distribució.	10
2.1.3 Solucions febles en el sentit de les distribucions.	11
2.2 Teorema d'existència i unicitat de solucions.	12
2.2.1 Propietat d'invasió.	15
3 Ones viatgeres. Teoria de Lyapunov	17
3.1 Ones viatgeres i connexions heteroclíniques.	17
3.2 Funcions i estabilitat de Lyapunov	19
4 La bifurcació d'Andronov-Hopf	23
4.1 Bifurcacions	23
4.2 La bifurcació d'Andronov-Hopf.	23
4.2.1 Classificació de les bifurcacions de Hopf	25
5 Dinàmica del sistema Fisher-KPP	31
5.1 Preparació del sistema	31
5.2 Estudi qualitatiu en funció de c	31
5.2.1 Cas $c = 0$	31
5.2.2 Cas $0 < c < 2$	32
5.2.3 Cas $c \geq 2$	36

6	Dinàmica del sistema Brusselator	39
6.1	Equilibris en funció dels paràmetres	39
6.2	Anàlisi de la bifurcació.	41
6.3	Existència d'una òrbita periòdica al voltant del punt fix.	42
6.3.1	Construcció d'una regió positivament invariant	42
6.3.2	Aplicació del teorema de Poincaré-Béndixon	45
6.4	Simulació del comportament global del sistema.	46
7	Conclusions	49
	Bibliografia	53

Objectius i motivació

L'objectiu principal d'aquest treball és fer un estudi de diverses dinàmiques que es poden observar en diferents models de reacció-difusió aplicats als àmbits de la biologia i la química.

Personalment crec que una de les branques més atractives de les matemàtiques és aquella que ens dóna la possibilitat de tractar els fenòmens que ens envolten, veure com evolucionen i analitzar-los objectivament. Aquests estudis es fan a partir de models matemàtics que il·lustren, en forma d'equacions, paràmetres i variables, el comportament d'un entorn o d'un procés concret. La modelització és l'eina que ens permet dissenyar aquests models mitjançant els quals es fan prediccions, s'alteren processos per obtenir-ne un millor rendiment, es prenen decisions en el present en funció del que poden suposar en un futur, etc. En definitiva els models matemàtics poden arribar a suposar una evolució en el funcionament de la societat donat que ens permeten entendre millor i fer més fàcil allò que ens envolta.

D'altra banda, des de petita, sempre he tingut un gran interès per la naturalesa i les ciències de la vida. Així doncs, vaig decidir enfocar el meu treball final de grau cap al sector de les matemàtiques que més m'engresca aplicat a un àmbit que em motiva molt, el de la biologia.

En particular, la meua idea principal era fer un estudi d'algun model relacionat amb les ciències de la salut a partir de les eines adquirides en l'assignatura *Equacions Diferencials*. Aleshores vaig parlar amb el Dr. Alex Haro perquè em tutoritzés l'estudi.

Després d'una recerca d'informació i de diverses pluges d'idees, vaig decidir centrar-me en un tipus concret de model: el model de reacció-difusió. I, a continuació, en vaig triar dos més que són casos particulars d'aquest. Així doncs, em dispo a estudiar la dinàmica d'aquests sistemes i les eines matemàtiques necessàries per dur a terme aquesta tasca.

Introducció

Aquest treball constitueix un estudi del comportament de diferents sistemes de reacció-difusió utilitzant eines d'anàlisi matemàtica. Els models en que ens centrem són el model d'invasió de Fisher-KPP i el model autocatalític Brusselator.

Una equació de reacció-difusió és, en definitiva, una equació diferencial, per tant, per realitzar l'anàlisi del comportament dels sistemes citats, farem servir eines que es van veure en els cursos d'*Equacions Diferencials* i *Models Matemàtics i Sistemes Dinàmics*. A més, introduïrem nous conceptes i resultats més específics i complexes.

En alguns models de reacció-difusió s'observa la presència d'un tipus concret de solucions, les anomenades ones viatgeres. A partir de la teoria de Lyapunov demostrarem l'existència d'aquestes solucions en l'equació de Fisher-KPP i veurem algunes propietats d'aquest model.

Un comportament molt interessant i que cal tenir en compte en l'anàlisi de molts sistemes dinàmics és la presència de bifurcacions, alteracions en l'estabilitat del sistema degut a canvis en el valor dels paràmetres. En aquest cas s'estudiarà un tipus de bifurcació en particular: la bifurcació de Hopf.

El treball s'estructura en sis parts diferents. En la primera es fa la presentació general del model de reacció-difusió així com un seguiment del procés de derivació d'aquest i de dos casos particulars del mateix: l'equació de Fisher-KPP i el model Brusselator. A continuació, es fa referència a les solucions febles que ens serviran per enunciar el teorema d'existència i unicitat de solucions en models de reacció-difusió. Seguidament, en el capítol tercer, s'introdueixen els conceptes d'ona viatgera i connexió heteroclínica amb la relació entre ambdues. Per demostrar l'existència d'aquests fenòmens en un model de reacció-difusió fem servir eines que s'expliquen a partir de la teoria de Lyapunov. En el capítol quart es presenta un altre fenòmen que apareix en el comportament de molts sistemes dinàmics, la bifurcació de Hopf. Finalment, en els capítols cinquè i sisè, es fa un estudi de la dinàmica dels sistemes de Fisher-KPP i Brusselator.

Capítol 1

Models de reacció-difusió

1.1 Sistemes de reacció-difusió.

Els sistemes de reacció-difusió són models matemàtics que expliquen com la concentració d'una o més substàncies distribuïdes en l'espai varien sota la influència de dos processos:

1. Les reaccions químiques locals en les quals les substàncies es transformen.
2. La difusió que representa l'expansió d'una substància en l'espai.

Aquests sistemes modelen el moviment d'un conjunt d'individus en un medi. Es tracta d'individus de l'ordre de partícules bàsiques en la física, de bacteris, molècules o cèl·lules fins a animals, plantes, o esdeveniments com la propagació d'epidèmies o la difusió d'un rumor.

A nivell matemàtic, els sistemes de reacció-difusió prenen la forma d'una equació en derivades parcials parabòlica semi-lineal representada per l'expressió:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + f(u), \quad (1.1.1)$$

on $u = u(t, x)$ és una variable que descriu la concentració o densitat d'una substància o població en la posició $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ i el temps t , D és el coeficient de difusió i f és una funció real que fa referència a les reaccions locals.

A continuació anem a desenvolupar el procés mitjançant el qual es deriva aquesta equació de reacció-difusió. [1]

1.2 Derivació del model.

Sigui Ω l'entorn en que té lloc el moviment de la població (les partícules o els individus en qüestió), suposem que Ω és un entorn obert de \mathbb{R}^n , $n \geq 1$. Sigui $u(t, x)$ la funció de densitat de la població, on t és el temps i $x \in \Omega$ és la localització.

En aquest context, Ω és l'hàbitat de la població i $|\cdot|$ és la mesura de Lebesgue. Podem considerar u una funció contínua i diferenciable, ja que partim del supòsit que es tracta d'una població amb un gran nombre d'individus i, en poblacions de grans dimensions, té sentit suposar que es compleixen aquestes propietats.

Cal tenir en compte que, com més petita sigui l'escala de recol·lecció de les dades, més ben definida estarà la funció de densitat de la població.

Definició 1.2.1. *La població total en qualsevol subregió Θ de Ω en el temps t és*

$$\int_{\Theta} u(t, x) dx.$$

Ens proposem descriure com varia la funció $u(t, x)$ a mesura que el temps evoluciona i canvia la localització. Aquesta variació té lloc quan les partícules individuals es mouen, quan apareixen nous individus o quan se'n moren degut a raons físiques, químiques o biològiques.

Normalment les partícules es mouen seguint una mateixa tendència que es manifesta en àmbits molt diferents:

1. Les poblacions es mouen des d'àrees amb alta densitat de població a zones on aquesta densitat és menor.
2. La transferència de la calor es realitza de zones més calentes a zones més fredes.
3. La dissolució d'un producte químic a l'aigua té lloc des de zones amb més concentració a zones amb menys concentració de producte.

Així doncs, és un fenomen natural el fet que una substància es mogui d'una regió on la densitat poblacional és elevada a una regió on aquesta densitat sigui inferior. El moviment de $u(t, x)$ és el *flux* de la densitat de població i és un vector.

Per tant, el comportament de difusió de l'equació es deriva del principi "high to low" que significa que el flux sempre apunta en la direcció en que la densitat de població, $u(t, x)$, disminueix més ràpid, i.e., en la direcció del gradient negatiu de $u(t, x)$, $-\nabla_x u(t, x)$. Aquest fet es coneix com a *lleï de Fick*. Sigui $J(t, x)$ el flux de u , $D(x)$ el coeficient de difusió en x i ∇_x l'operador gradient ($\nabla_x u(x) = (\frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_n})$). Aleshores, la *lleï de Fick* es representa com $J(t, x) = -D(x)\nabla_x u(t, x)$.

D'altra banda, el comportament de reacció de l'equació té lloc quan el nombre de partícules en qualsevol punt del medi canvia com a conseqüència de factors com els naixements, les morts, la caça o reaccions químiques. Sigui $f(t, x, u)$ la *taxa de reacció* de la població, és a dir, la taxa de canvis deguts als factors esmentats que experimenta la població.

Sigui Θ una regió qualsevol de Ω , la població total de Θ és $\int_{\Theta} u(t, x) dx$ i la taxa de canvi del total de la població és $\frac{d}{dt} \int_{\Theta} u(t, x) dx$. Amb les consideracions fetes fins ara podem dir que el creixement net de la població en Θ és $\int_{\Theta} f(t, x, u) dx$, i el flux d'eliminació total és $\int_{\partial\Theta} J(t, x) \cdot \eta(x) dS$, on $\partial\Theta$ és la frontera de Θ i $\eta(x)$ és la direcció normal exterior a x .

Aleshores, podem expressar la variació total de la població de la forma següent

$$\frac{d}{dt} \int_{\Theta} u(t, x) dx = - \int_{\partial\Theta} J(t, x) \cdot \eta(x) dS + \int_{\Theta} f(t, x, u) dx. \quad (1.2.1)$$

Per fer el següent pas ens cal recordar el teorema de la divergència.

Teorema de la Divergència 1.2.2. *Sigui U un subconjunt obert de \mathbb{R}^n compacte i $S = \partial U$ la frontera de U . Aleshores, si F és un camp vectorial definit en un entorn de U es compleix*

$$\iiint_U (\nabla \cdot F) dU = \iint_S (F \cdot \eta) dS.$$

Pel *Teorema de la divergència* es té la igualtat

$$\int_{\partial\Theta} J(t, x) \cdot \eta(x) dS = \int_{\Theta} \operatorname{div}(J(t, x)) dx. \quad (1.2.2)$$

A continuació prenem l'expressió 1.2.1, substituïm el primer sumand de la dreta per l'expressió de $J(t, x)$ de la *lei de Fick* i li apliquem la igualtat 1.2.2. Després intercanviem l'ordre de diferenciació i integració, i obtenim:

$$\int_{\Theta} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) dx = \int_{\Theta} [\operatorname{div}(d(x) \nabla_x u(t, x)) + f(t, x, u)] dx.$$

I, com que l'elecció de Θ és arbitrària,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) = \operatorname{div}(d(x) \nabla_x u(t, x)) + f(t, x, u), \quad \forall(t, x). \quad (1.2.3)$$

Aquesta equació s'anomena *equació de reacció-difusió*, on $\operatorname{div}(d(x) \nabla_x u(t, x))$ és el terme de difusió que descriu el moviment dels individus, i $f(t, x, u)$, la taxa de reacció, és el terme de reacció. Sovint, en models de poblacions, aquest terme de reacció es troba multiplicat per una constant r , la taxa de creixement de l'espècie en qüestió.

Quan la regió de difusió és aproximadament homogènia, podem suposar $D(x) \equiv D$ constant i $f(t, x, u) \equiv f(u)$. Llavors es té

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \Delta u + r f(u), \quad (1.2.4)$$

on $\Delta u = \operatorname{div}(\nabla u)$. I aquesta és l'expressió d'un model de reacció-difusió qualsevol, com ens proposàvem trobar.

Observació 1.2.3. Quan no hi ha reacció, aleshores es té una equació de difusió $\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u$. En física matemàtica aquesta s'anomena *equació de la calor*, on u esdevé la funció temperatura.

Per poder estudiar les solucions de models d'aquest tipus és convenient reduir al màxim el nombre de paràmetres. Per fer-ho utilitzarem el procediment que es descriu a continuació.

En primer lloc es redefeixen les variables temps t i espai x :

$t := \alpha \cdot s$, on α és una constant i s és una variable.

$x := \beta \cdot y$, on β és una constant i y és una variable.

Seguidament s'expressen els termes del model segons la definició de t i x actual:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial s} \cdot \frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\partial u}{\partial s} \cdot \frac{1}{\alpha}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} \cdot \frac{1}{\beta} \implies \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \cdot \frac{1}{\beta^2}$$

Substituint aquests termes en el model obtenim l'expressió següent:

$$\frac{1}{\alpha} \cdot \frac{\partial u}{\partial s} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot \frac{1}{\beta^2} + r \cdot f(u)$$

Multipliquem per α a banda i banda de la igualtat:

$$\frac{\partial u}{\partial s} = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \cdot \frac{\alpha}{\beta^2} + \alpha r \cdot f(u)$$

Finalment, prenem $\alpha = \frac{1}{r}$ i $\beta = \sqrt{\alpha D} = \sqrt{\frac{D}{r}}$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u) \tag{1.2.5}$$

Aquesta és l'expressió de model de reacció-difusió que analitzarem.

Fins ara hem vist la forma general dels models de reacció-difusió i com es deriva aquesta expressió. En les dues seccions que trobem a continuació es presenten dos casos particulars de models de reacció-difusió: l'equació de Fisher-KPP i el sistema Brusselator. En ambdós casos s'explica la derivació del model fins a obtenir les equacions que estudiarem en els capítols següents.

1.3 L'equació de Fisher-KPP.

Trobem exemples de models de reacció-difusió en àmbits molt diferents de la biologia, la química, la geologia o l'ecologia. A continuació presentem una aplicació d'aquest model en un procés d'invasió biològica, és l'anomenat model de Fisher-KPP. El model rep aquest nom perquè fou proposat per Fisher l'any 1937 en el context de la dinàmica de les poblacions amb l'objectiu de descriure la propagació espacial dels individus amb gens mutats (mutació que suposava un avantatge per a la supervivència de l'espècie que la presentava). El terme KPP està format per les inicials de Kolmogorov, Petrovsky i Piscounov que van fer un estudi previ d'aquest model en dues dimensions i amb un terme de reacció general.

L'equació de Fisher-KPP, $\frac{\partial u}{\partial t} = D\Delta u + ru(1 - \frac{u}{K})$, és un cas particular d'equació de reacció-difusió en que $f(u) = ru(1 - \frac{u}{K})$, on u és la mida de la població, r representa la taxa de creixement i K és la capacitat de persistència de la població [2] [3]. Aquesta funció f és, doncs, una funció *logística*. El creixement logístic és molt semblant al creixement exponencial fins que arriba a un punt en que s'estabilitza. Segons aquest creixement poblacional, la taxa de reproducció és proporcional a la població existent i a la quantitat de recursos disponibles.

En l'equació, la taxa de creixement inicial és modelada pel primer terme ru , la taxa r representa l'augment proporcional de la població u en una unitat de temps. Més tard, quan la població creix, el segon terme, $-\frac{ru^2}{K}$ esdevé més gran que el primer a mesura que alguns membres de la població u competeixen entre ells per algun recurs crític (alimentació, espai vital...). Aquests efectes s'anomena *coll d'ampolla* i es modela pel valor del paràmetre K . La competència fa disminuir la taxa de creixement combinat fins que el valor de u deixa de créixer i s'assoleix la *maduresa de la població*.

L'equació de Fisher-KPP es pot simplificar dividint ambdós costats de la igualtat per K ,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \frac{u}{K} = D\Delta \frac{u}{K} + r \frac{u}{K} \left(1 - \frac{u}{K}\right),$$

i fent el canvi de variable $x = \frac{u}{K}$,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = D\Delta x + rx(1 - x). \quad (1.3.1)$$

Ara tenim una equació de reacció-difusió de la forma 1.2, de manera que, amb el procediment descrit en la secció anterior, podem considerar el model de Fisher-KPP com

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \Delta x + x(1 - x). \quad (1.3.2)$$

1.4 El model Brusselator

En la part que segueix passem a presentar un altre model de reacció-difusió: el model autocatalític Brusselator. Es tracta d'un model per a la reacció química Belousov-Zhabotinsky. [4] [5]

El *Brusselator* és un model teòric que descriu un tipus de reacció química oscil·lant i autocatalítica. En una reacció d'aquest tipus un dels productes actua com a catalitzador, és a dir, com a element que roman inalterat però provoca alteracions en la velocitat de la reacció química. L'objectiu d'aquest tipus de reaccions és augmentar la velocitat de la seva reacció de producció.

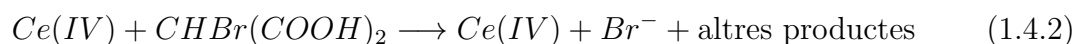
Es tracta d'un model que prediu matemàticament com els processos químics juguen un paper fonamental en la biologia. El metabolisme d'una cèl·lula viva, per exemple, és una activitat extraordinàriament complexa: milers de reaccions químiques es produeixen simultàniament transformant els nutrients, sintetitzant els seus constituents, i eliminant els excedents que no són utilitzats.

Més tècnicament, aquest model representa un cas particular de sistema de reacció-difusió caracteritzat per un mecanisme d'activació-inhibició capaç de donar lloc a comportaments complexos en forma d'oscil·lacions periòdiques (cicles límit) i ruptures de simetria a través de bifurcacions de Hopf.

Al llarg de l'estudi d'aquest model veurem com la variació de paràmetres dels termes de reacció i la relació entre els dos tipus d'elements (activador i inhibidor) representen mecanismes que causen la formació de patrons i fenòmens que provoquen canvis qualitius en l'estabilitat del sistema.

El model *Brusselator* fou proposat per Prigogine i Lefever el 1968. A mitjans del segle passat Belousov i Zhabotinsky van descobrir sistemes químics que presentaven oscil·lacions. En particular, van observar que el Ceri (III) ($Ce(III)$) i el Ceri (IV) ($Ce(IV)$) eren espècies oscil·lants: en una mescla de potassi bromat, sulfat de ceri (IV) i àcid cítric diluït en àcid sulfúric, la taxa de concentració iònica de $Ce(IV)$ i $Ce(III)$ oscil·lava. Es tracta d'una reacció que manté un prolongat estat de no equilibri que porta a oscil·lacions temporals macroscòpiques.

La reacció de Belousov-Zhabotinsky es descriu així:



L'equació 1.4.1 és autocatalitzada i fortament inhibida pels ions Br^- . Per tant, com que el $Ce(IV)$ es produeix en 1.4.1, la taxa de l'equació 1.4.2 augmenta de manera que dona lloc a una alta concentració de Br^- , el qual inhibeix i ralentitza

l'equació 1.4.1. Quan la concentració de $Ce(IV)$ disminueix, llavors també ho fa la de Br^- i el cicle torna a començar.

Derivació de les equacions cinètiques.

Les reaccions químiques es solen escriure com



on les espècies A i B reaccionen juntes per formar el producte, les espècies C i D .

Tot i que les concentracions de les espècies es solen representar entre claudàtors, en les equacions que trobem a partir d'ara els treurem per simplificar la notació.

Cal tenir en compte que s'assumeix que la majoria de sistemes químics segueixen la cinètica d'acció de masses, és a dir, la velocitat de la reacció és proporcional a la concentració dels reactius:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -k_1 AB$$

on el signe de A és negatiu perquè aquesta espècie es consumeix durant la reacció 1.6.3, k és la constant de reacció i els claudàtors indiquen la concentració de l'espècie que contenen. Així doncs, es tenen les equacions diferencials següents a partir la concentració de cada espècie:

$$-\frac{\partial B}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial D}{\partial t} = k_1 AB$$

Afegim una segona equació química:



A partir de les equacions 1.4.3 i 1.4.4, com que els coeficients estequiomètrics (coeficients que indiquen la quantitat de mols de cada espècie) són majors que 1, les equacions diferencials per a les espècies A i E són les següents:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial t} &= -k_1 AB - 2k_2 A^2 \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= 3k_2 A^2 \end{aligned}$$

Seguint aquests passos obtenim les equacions diferencials corresponents a les reaccions químiques següents, que descriuen el procés expressat en les equacions 1.4.1 i 1.4.2:



D'aquestes reaccions obtenim les equacions diferencials següents, cada grup d'equacions representa una reacció del sistema 1.4.5. Les funcions u i v representen les concentracions de les espècies U i V , respectivament, i depenen de la posició x i del temps t . I els termes k_i , $i = 1, \dots, 4$, són les constants de reacció:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial A}{\partial t} = -k_1 A \\ \frac{\partial u}{\partial t} = k_1 A \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v}{\partial t} = -k_3 u^2 v \\ \frac{\partial u}{\partial t} = k_3 u^2 v \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial B}{\partial t} = -k_2 B u \\ \frac{\partial u}{\partial t} = -k_2 B u \\ \frac{\partial v}{\partial t} = k_2 B u \\ \frac{\partial C}{\partial t} = k_2 B u \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = -k_4 u \\ \frac{\partial D}{\partial t} = k_4 u \end{array} \right\}$$

A partir d'aquestes equacions es determina el sistema de reacció-difusió. Per fer-ho suposem que les concentracions d'A i B són constants durant la reacció química:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k_1 A - k_2 B u + k_3 u^2 v - k_4 u + k_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.4.6)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = k_2 B u - k_3 u^2 v + k_1 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (1.4.7)$$

En particular tractarem el cas en que les constants de reacció són $k_1 = k_2 = k_3 = k_4 = 1$, de manera que el sistema a considerar és:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A - (1 + B)u - u^2 v + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.4.8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = B u - u^2 v + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (1.4.9)$$

Aquest sistema representa un model de reacció-difusió de dues equacions. En la primera el terme de reacció és $f_1(u, v) = A - (1 + B)u - u^2 v$ i en la segona és $f_2(u, v) = B u - u^2 v$. En ambdues equacions el terme de difusió és constant igual a $D = 1$.

En els capítols que trobem a continuació ens proposem adquirir les eines que ens permetin, al final, estudiar les solucions particulars d'aquests models que tenen un comportament *viatger* o que experimenten algun fenomen de *bifurcació*.

Capítol 2

Solucions febles. Existència i unicitat de solucions

Un cop hem vist com es deriven els models, ens interessa veure si tenen solucions. La qüestió és comprovar si un model està ben plantejat, és a dir, si, donada una condició inicial $u_0(x)$, llavors existeix una única solució del *Problema de Valors Inicials* o *Problema de Cauchy* amb $u(0, x) = u_0(x)$. Per fer-ho farem servir el *Teorema d'existència i unicitat de solucions*. Abans, però, cal que ens familiaritzem amb un tipus de funcions anomenades *solucions febles*.

2.1 Solucions febles.

En aquesta secció es presenta el concepte de *solució feble* [6] [7] que, a continuació, utilitzarem en el *Teorema d'existència i unicitat de solucions*.

Una *solució feble* d'una equació diferencial ordinària o parcial és una funció que compleix l'equació però per a la qual pot ser que no existeixin totes les derivades, es considera que satisfà l'equació en algun sentit definit amb precisió. Tot i que hi ha moltes definicions de solució dèbil per a diferents classes d'equacions, ens centrarem en la que es basa en les distribucions.

2.1.1 Distribucions

Les distribucions són objectes que generalitzen la noció clàssica de funcions en l'anàlisi matemàtic. Les distribucions ens permeten diferenciar funcions les derivades de les quals no existeixen en el sentit clàssic. En particular, qualsevol funció localment integrable té una derivada de la distribució. S'utilitzen molt en la teoria d'equacions diferencials perquè a vegades resulta més fàcil establir l'existència de solucions de distribucions que de solucions clàssiques.

Les distribucions es defineixen sobre un tipus de funcions de suport compacte, les *funcions test*, que es defineixen tot seguit.

Definició 2.1.1. S'anomena **funció test** una funció $\varphi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ tal que:

a) φ és infinitament derivable.

b) φ té suport compacte, i.e., és idènticament zero fora d'un compacte.

Denotarem $\mathcal{D}(\mathbb{R}^n)$ el conjunt de les funcions test.

Definició 2.1.2. Una **distribució** T és una aplicació lineal contínua $T : \mathcal{D}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathbb{R}$ i s'expressa $\langle T, \varphi \rangle$ el valor de T sobre la funció test φ .

Suposem que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ és una funció integrable localment. Aleshores, la distribució associada a f és T_f i es defineix el següent operador

$$\langle T_f, \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\varphi(x)dx, \quad \text{on } \varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^n).$$

Aquesta integral és un nombre real que depèn linealment i contínuament de φ . Per contra, els valors de la distribució T_f en funcions test de $\mathcal{D}(\mathbb{R})$ determinen els punts de gairebé tots els valors de f en \mathbb{R} .

2.1.2 Derivada d'una distribució.

La derivada d'una distribució ha de complir que si $f \in C^1$, llavors $\frac{\partial T_f}{\partial x_i} = T_{\frac{\partial f}{\partial x_i}}$. Sigui φ una funció test, desenvolupem la integral següent per parts:

$$\begin{aligned} \langle T_{\frac{\partial f}{\partial x_i}}, \varphi \rangle &= \int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)\varphi(x)dx_1 \dots dx_n = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{\partial f}{\partial x_i}(x)\varphi(x)dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{dx_i} dx_n \\ &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left([f(x)\varphi(x)]_{x_i=-\infty}^{x_i=+\infty} - \int_{\mathbb{R}} f(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x)dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{dx_i} dx_n \\ &= - \int_{\mathbb{R}^n} f(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}(x)dx_1 \dots dx_n = -\langle T_f, \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \rangle, \end{aligned}$$

on la penúltima igualtat es compleix degut a la propietat b) de la definició de funció test, i.e., $\varphi \equiv 0$, $\forall x \notin K$, amb K un compacte. Així doncs, en general podem calcular la derivada d'una distribució d'una funció f sobre φ fent servir la següent igualtat $\langle T_{\frac{\partial f}{\partial x_i}}, \varphi \rangle = -\langle T_f, \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \rangle$.

Espais L^p .

Definició 2.1.3. Sigui Ω un obert de \mathbb{R}^n dotat de la mesura de Lebesgue dx , es designa per $L^1(\Omega)$ l'espai de les funcions integrables sobre Ω amb valors de \mathbb{R} . S'escriu

$$\|f\|_{L^1} = \int_{\Omega} |f(x)|dx.$$

Definició 2.1.4. Siqui $p \in \mathbb{R}$, amb $1 \leq p < \infty$, es defineix l'espai L^p com

$$L^p(\Omega) := \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}; f \text{ mesurable i } |f|^p \in L^1(\Omega) \right\},$$

i es nota

$$\|f\|_{L^p} = \left[\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right]^{1/p}.$$

2.1.3 Solucions febles en el sentit de les distribucions.

Considerarem les solucions febles $u \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^+; L^2(\mathbb{R}^n))$ de les equacions parabòliques del tipus

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta u = f, & \text{en } \mathbb{R}^n, \\ u(t=0, x) = u^0(x). \end{cases} \quad (2.1.1)$$

D'acord amb la teoria general de les distribucions (Laurent Schwarz), aquestes solucions es poden definir a partir de la integració per parts d'una funció test.

Definició 2.1.5. *Sigui $f \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n)$, $u^0 \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^n)$. Una funció $u \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^n)$ és una **solució feble** (o **solució distribucional**) de 2.1.1 si es compleix*

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^n} u(t, x) \left[-\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Delta \Phi \right] dx dt = \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^n} f(t, x) \Phi(t, x) + \int_{\mathbb{R}^n} u^0(x) \Phi(0, x) dx, \quad (2.1.2)$$

per totes les funcions test $\Phi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times \mathbb{R}^n)$.

A continuació es justifica la definició de *solució feble* en el cas que els objectes involucrats siguin suficientment diferenciables. Així doncs, diferenciem, per parts, la següent integral:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^n} f(t, x) \Phi(t, x) dx dt &= \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial u}{\partial t}(t, x) - \Delta u(t, x) \right) \Phi(t, x) dx dt = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \underbrace{\int_0^\infty \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) \Phi(t, x) dt}_{a)} dx - \int_0^\infty \underbrace{\int_{\mathbb{R}^n} \Delta u(t, x) \Phi(t, x) dx}_{b)} dt = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left[-\Phi(0, x) u^0(x) - \int_0^\infty u(t, x) \frac{\partial \Phi}{\partial t}(t, x) dt \right] dx - \int_0^\infty \left[\int_{\mathbb{R}^n} u(t, x) \Delta \Phi(t, x) dx \right] dt = \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \left[-\Phi(0, x) u^0(x) - \int_0^\infty u(t, x) \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t}(t, x) + \Delta \Phi(t, x) \right) dt \right] dx \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

La integral a) es desenvolupa, per parts, a continuació:

$$\begin{aligned} \text{a) } \int_0^\infty \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) \Phi(t, x) dt &= [\Phi(t, x) u(t, x)]_0^\infty - \int_0^\infty u(t, x) \frac{\partial \Phi}{\partial t}(t, x) dt = \\ &= -\Phi(0, x) u^0(x) - \int_0^\infty u(t, x) \frac{\partial \Phi}{\partial t}(t, x) dt, \end{aligned}$$

on en l'última igualtat hem fet servir la propietat del suport compacte de les funcions test, i.e., $\Phi \equiv 0$ fora de compactes.

La integral $b)$ es realitza integrant, per parts, dues vegades:

$$\begin{aligned}
 b) \int_{\mathbb{R}^n} \Delta u(t, x) \Phi(t, x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}(t, x) \Phi(t, x) dx_i \right) dx_1 \dots dx_n = \\
 &= \sum_{i=1}^n \left[\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}(t, x) \Phi(t, x) dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{\hat{d}x_i} dx_n \right] = \\
 &= \sum_{i=1}^n \left[\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} u(t, x) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2}(t, x) dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{\hat{d}x_i} dx_n \right] = \\
 &= \int_{\mathbb{R}^n} u(t, x) \Delta \Phi(t, x) dx
 \end{aligned}$$

En l'última igualtat hem utilitzat la propietat de suport compacte de la funció test Φ , és a dir, $\Phi \equiv 0$ fora d'un suport compacte, per exemple si $x_i \rightarrow \pm\infty$. Així doncs, es fa servir la igualtat

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \Phi dx_i &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left(\int_{\mathbb{R}} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} \Phi dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{\hat{d}x_i} dx_n \\
 &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left(\left[\frac{\partial u}{\partial x_i}(x) \Phi(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial u}{\partial x_i}(x) \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}(x) dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{\hat{d}x_i} dx_n \\
 &= \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \left(0 - \left[\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}(x) u(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} u(x) \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2}(x) dx_i \right) dx_1 \overbrace{\dots}^{\hat{d}x_i} dx_n \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} u \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i^2} dx_i
 \end{aligned}$$

Finalment, reordenant els termes de la igualtat 2.1.3 obtenim la igualtat de la definició 2.1.2.

2.2 Teorema d'existència i unicitat de solucions.

Amb els conceptes presentats en la secció anterior, estem en condicions d'enunciar el teorema següent [8]:

Teorema d'existència i unicitat de solucions 2.2.1. *Suposem que la condició inicial satisfà*

$$u^0 \in L^1(\mathbb{R}^d), \quad 0 \leq u^0 \leq 1.$$

Aleshores, existeix una única solució $u \in \mathcal{C}([0, \infty); L^1(\mathbb{R}^d))$ i

$$0 < u(t, x) < 1, \quad \forall t > 0, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Per explicar aquest teorema farem servir els següents resultats:

Proposició 2.2.2. Principi de positivitat. *Suposem que $v^0 \geq 0$, $a(t, x) \geq -A$, $A > 0$ constant, llavors les solucions de*

$$\frac{\partial v}{\partial t} - D \Delta v = a(t, x)v \quad (2.2.1)$$

no són negatives.

Proposició 2.2.3. Principi de comparació.

Siguin $u_1^0, u_2^0 \in L^1(\mathbb{R}^d)$, $0 \leq u_1^0, u_2^0 \leq 1$. dues condicions inicials associades a dues funcions no-lineals, $f_1(\cdot)$ i $f_2(\cdot)$, respectivament. Aleshores,

$$\left. \begin{array}{l} u_1^0(\cdot) \leq u_2^0(\cdot) \\ f_1(\cdot) \leq f_2(\cdot) \end{array} \right\} \implies u_1(t, x) \leq u_2(t, x), \quad \forall t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Demostració. En aquesta demostració farem servir la notació $v_- = \begin{cases} -v, & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases}$

$$\text{A més, observem que } v_-^2 = \begin{cases} v^2, & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases} \quad \text{i } v_- \cdot v = \begin{cases} -v^2, & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases}.$$

Sigui $v := u_2 - u_1$, tal que $\frac{\partial}{\partial t} v - \Delta v = f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))$, hem de veure que $v \geq 0$.

En primer lloc prenem aquesta igualtat $\frac{\partial}{\partial t} v - \Delta v = f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))$, multipliquem a banda i banda pel terme v_- i integrem a banda i banda respecte x :

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial v}{\partial t} \cdot v_- dx = \int_{\mathbb{R}^n} \Delta v \cdot v_- dx + \int_{\mathbb{R}^n} [f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))] \cdot v_- dx \quad (2.2.2)$$

$$\text{Sabem que } \frac{\partial v}{\partial t} \cdot v_- = \begin{cases} -\frac{\partial v}{\partial t} \cdot v, & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases} = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (v^2), & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases} = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} (v^2)$$

Així doncs, el terme de l'esquerra de la igualtat 2.2 es pot expressar com

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{\partial v}{\partial t} \cdot v_- dx = -\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^n} (v^2) dx$$

D'altra banda, si desenvolupem el primer terme de la banda dreta de 2.2 obtenim el següent:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \Delta v \cdot v_- dx_i &= \left[\frac{\partial v}{\partial x_i \cdot v_-} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}} \frac{\partial v}{\partial x_i} \frac{\partial v_-}{\partial x_i} dx_i \\ &= \left[\frac{-\partial v_-}{\partial x_i \cdot v_-} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{\partial v_-}{\partial x_i} \right)^2 dx_i \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

En la segona igualtat hem tingut en compte que

$$\frac{\partial v_-}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial v}{\partial x_i} = \begin{cases} -\left(\frac{\partial v}{\partial t} \right)^2, & v \leq 0 \\ 0, & v > 0 \end{cases} = -\left(\frac{\partial v_-}{\partial t} \right)^2$$

Substituint aquests resultats en l'equació 2.2 obtenim la igualtat:

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^n} (v^2) dx = - \left[\frac{-\partial v_-}{\partial x_i v_-} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\mathbb{R}^n} \left(\frac{\partial v_-}{\partial x} \right)^2 dx - \int_{\mathbb{R}^n} [f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))] v_- dx$$

De manera que es compleixen les desigualtats següents:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^n} v_-^2 dx &\leq - \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla v_-|^2 dx - \int_{\mathbb{R}^n} [f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))] v_- dx \\ &\leq - \int_{\mathbb{R}^n} [f_2(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))] v_- dx \\ &\leq - \int_{\mathbb{R}^n} [f_1(u_2(t, x)) - f_1(u_1(t, x))] v_- dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}^n} f_1(u_2(t, x) - u_1(t, x)) v_- dx \\ &= - \int_{\mathbb{R}^n} f_1(v(t, x)) v_- dx \leq L_{f_1} \int_{\mathbb{R}^n} v_-^2 dx \end{aligned}$$

L'última igualtat es dona per la hipòtesi de les condicions inicials de ser Lipschitz.

Sigui $\gamma(t) = \int_{\mathbb{R}^n} v_-^2 dx$, aleshores $\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \gamma(t) \leq L_{f_1} \gamma(t)$. En particular, observem que $\gamma(t) \geq 0$.

Tot seguit integrem en l'interval $(0, t)$ a banda i banda de la desigualtat, resollem les integrals, i multipliquem per dos a ambdues bandes:

$$\begin{aligned} \int_0^t \frac{1}{2} \frac{d}{ds} \gamma(s) ds &\leq \int_0^t L_{f_1} \gamma(s) ds \\ \frac{1}{2} \gamma(t) - \frac{1}{2} \gamma(0) &\leq L_{f_1} \int_0^t \gamma(s) ds \\ \gamma(t) - \gamma(0) &\leq 2L_{f_1} \int_0^t \gamma(s) ds \\ \gamma(t) &\leq \gamma(0) + 2L_{f_1} \int_0^t \gamma(s) ds \end{aligned}$$

Prenent $C = \gamma(0)$ i $A = 2L_{f_1}$ es té:

$$\gamma(t) \leq C + A \int_0^t \gamma(s) ds$$

Recordem el següent lema:

Lema de Gronwall: *Sigui $u : I \rightarrow \mathbb{R}_+$ una funció contínua i no-negativa definida en I i $t_0 \in I$. Suposem que, $\forall t \in I$, u satisfà $u(t) \leq C + A \left| \int_{t_0}^t u(s) ds \right|$, on C , A són constants no-negatives. Aleshores, $\forall t \in I$, $u(t) \leq e^{A|t-t_0|} C$.*

Aplicant el Lema de Gronwall es té $\gamma(t) \leq e^{2L_{f_1} t} \cdot \gamma(0) \Rightarrow \gamma(t) \leq 0$, ja que $\gamma(0) = 0$.

Així doncs, d'una banda tenim $\gamma(t) \geq 0$ i, d'altra banda, $\gamma(t) \leq 0$. Per tant, $\gamma(t) \equiv 0 \Rightarrow v_-(t, x) = 0 \Rightarrow v(t, x) \geq 0$. Aquesta última implicació es dona per tal com s'ha definit el terme v_- . \square

2.2.1 Propietat d'invasió.

En particular, l'equació de Fisher-KPP descriu un procés d'invasió. Amb la propietat següent veurem que si, inicialment, la població creix, aquesta continuarà creixent per qualsevol temps.

Teorema 2.2.4. Propietat d'invasió. *Suposem que $0 \leq u^0 \leq 1$, $u^0 \in L^1(\mathbb{R}^n)$ és una solució de l'equació 1.2, i.e., $-D \Delta u^0 \leq f(u^0)$, aleshores*

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t, x) \geq 0, \quad \forall t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Capítol 3

Ones viatgeres. Teoria de Lyapunov

En aquest capítol veurem una sèrie de conceptes i eines que posarem en pràctica en el capítol quart per dur a terme un anàlisi qualitatiu de les solucions de l'equació de Fisher-KPP.

En primer lloc ens disposem a presentar un tipus concret de solucions anomenades *ones viatgeres* o *traveling waves* i els relacionarem amb el comportament viatger de les *connexions heteroclíniques* entre punts fixos. A continuació, veurem alguns conceptes i resultats relacionats amb l'estabilitat en el sentit de Lyapunov que ens serviran per completar l'estudi de la dinàmica del sistema.

3.1 Ones viatgeres i connexions heteroclíniques.

En els casos de models de reacció-difusió en que la funció taxa de reacció f no és lineal, les solucions explícites no es poden trobar. Les equacions de reacció-difusió es poden singularitzar en forma d'un tipus de solució coneguda com a *ona viatgera* i només es poden propagar sense distorsionar-se d'aquesta manera. Per tant, cal fer l'estudi de l'existència, comportament i estabilitat d'aquest tipus de solucions en aquesta equació. Abans però, en aquesta secció, introduïrem aquest concepte.

Definició 3.1.1. *Una solució **ona viatgera** és una solució de la forma $u(t, x) = U(x - ct)$, on $U(-\infty) = u_-$, $U(+\infty) = u_+$, i $c \in \mathbb{R}$ és una constant anomenada velocitat de desplaçament. Es caracteritzen per ser un tipus d'ona que es propaga en una única direcció i perquè el seu canvi de forma és negligible.*

Així doncs, les solucions que busquem són del tipus $u(t, x) = U(x - ct)$, on U és l'*ona viatgera* i c és la *constant de desplaçament*. D'aquesta manera podem expressar

els termes del model $\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u - f(u)$ així:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -cU'(x - ct), \quad \frac{\partial u}{\partial x} = U'(x - ct) \quad \text{i} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = U''(x - ct).$$

Per tant, es té l'equació $-cU'(x - ct) = U''(x - ct) + f(U(x - ct)), \forall t, x$ tal que prenent $\tau = x - ct$ i reordenant els termes podem expressar com:

$$U''(\tau) = -cU'(\tau) + f(U(\tau)) \quad (3.1.1)$$

Aleshores, fixant $V = U'$ s'obté el sistema d'equacions diferencials següent:

$$\begin{cases} \dot{U} = V \\ \dot{V} = -cV - f(U) \end{cases} \quad (3.1.2)$$

Per tant, prenent les solucions del model com a *ones viatgeres*, hem passat de tenir una única equació a tenir un sistema d'equacions diferencials. Així doncs, podem analitzar les solucions del model des de la vessant de la dinàmica d'aquest sistema. En aquest cas, el concepte que equivaldria al comportament d'*ona viatgera* és el de *connexió heteroclínica* entre punts fixos del sistema. Anem a definir aquest concepte.

Definició 3.1.2. *Sigui $\dot{x} = X(x)$ un sistema dinàmic continu i x_0, x_1 dos punts d'equilibri d'aquest sistema. Aleshores, una solució $\varphi(t)$ és una **òrbita heteroclínica***

*(o **connexió heteroclínica**) entre x_0 i x_1 si*
$$\begin{cases} \varphi(t) \longrightarrow x_0, & t \longrightarrow +\infty \\ \varphi(t) \longrightarrow x_1, & t \longrightarrow -\infty. \end{cases}$$

Això implica que l'òrbita està continguda en la varietat estable de x_1 i en la varietat inestable de x_0 .

A continuació s'introdueixen dos conceptes que ens serviran per tenir una altra visió d'aquesta definició. [10]

Definició 3.1.3. *Un punt $x \in \mathbb{R}^n$ pertany al **conjunt ω -límit** $\omega(x_0)$ de la corba solució $\varphi(t, x_0)$ si existeix una seqüència creixent i no acotada de nombres reals $\{t_n\}$ amb límit $\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(t_n, x_0) = x$.*

*Un punt $x \in \mathbb{R}^n$ pertany al **conjunt α -límit** $\alpha(x_0)$ si existeix una seqüència decreixent i no acotada de nombres reals $\{t_n\}$ amb límit $\lim_{n \rightarrow -\infty} \varphi(t_n, x_0) = x$.*

Observació 3.1.4. Si x_0 és un equilibri, llavors $\omega(x_0) = \alpha(x_0) = \{x_0\}$. A més, per qualsevol x_0 , el conjunt α -límit de l'equació $\dot{x} = f(x)$ és el conjunt ω -límit de $\dot{x} = -f(x)$.

Propietats 3.1.5. *Les propietats següents es compleixen per als conjunts α -límit i ω -límit.*

1. **Existència:** *El conjunt ω -límit d'una òrbita acotada és no buit.*

2. **Tancament:** Un conjunt ω -límit és tancat.
3. **Invariància:** Si $y \in \omega(x_0)$, llavors tota l'òrbita $F(t, y) \in \omega(x_0)$.
4. **Connectivitat:** El conjunt ω -límit d'una òrbita acotada està connectat.

Aquestes propietats es van demostrar al curs d'*Equacions Diferencials*.

Tornant, ara, a la idea d'ona viatgera, cal tenir en compte el cas particular de les ones viatgeres periòdiques o *wave trains*. A grans trets són funcions periòdiques que es mouen a velocitat constant, per tant, la velocitat de desplaçament c és constant. En conseqüència es tracta d'un tipus d'oscil·lació espai-temps que és una funció periòdica. Aquest tipus d'ones juguen un paper fonamental en equacions matemàtiques que modelen sistemes auto-oscil·lants, excitables i de reacció-difusió.

Aquest fet aplicat a la part de connexions heteroclíniques significaria que l'element x_0 és un punt fix però l'element x_1 és una òrbita periòdica, o a l'inrevés. Dit d'una altra manera, sigui $x \in \mathbb{R}^n$ un punt qualsevol d'aquest sistema, el conjunt α -límit $\alpha(x)$ és un punt fix i el conjunt ω -límit $\omega(x)$ és una òrbita periòdica.

En general el que ens proposem és trobar connexions heteroclíniques del sistema 3.1.2 per demostrar l'existència d'ones viatgeres en un model de reacció-difusió. Es tracta, doncs, de buscar punts fixos tals que el repulsor o la varietat inestable d'un punt de sella siguin el conjunt α -límit i l'atractor sigui el conjunt ω -límit de les trajectòries del sistema. Per provar l'existència d'atractors que compleixin aquest fet, a vegades, és molt útil fer servir les *funcions de Lyapunov*, de les quals parlem en la següent secció [9].

3.2 Funcions i estabilitat de Lyapunov

Definició 3.2.1. Siguí $\dot{x} = X(x)$ un camp vectorial definit en $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n$. Un punt d'equilibri \bar{x} és **estable** en el sentit de Lyapunov si, per qualsevol entorn N de \bar{x} , existeix un entorn N_1 de \bar{x} tal que $N_1 \subset N$, i tal que $\forall x_0 \in N_1$, la solució $\varphi(t, x_0) \in N$, $\forall t \geq 0$. Si un punt d'equilibri és estable i atractor - $\forall x_0 \in N_1$, $\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t, x_0) = \bar{x}$ - alhora, aleshores diem que és **assimptòticament estable**. Si un punt d'equilibri no és estable, aleshores és **inestable**. Finalment, si un punt d'equilibri és asimptòticament estable i, per a totes les condicions inicials, les solucions convergeixen a aquest punt, aleshores és **globalment asimptòticament estable**.

Definició 3.2.2. Siguí $\dot{x} = X(x)$ un camp vectorial i \bar{x} un equilibri d'aquest sistema. Una funció $E : \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, amb $\dot{E}(x) = DE(x) \cdot X(x)$, és una **funció de Lyapunov** per a \bar{x} si es satisfan les següents condicions:

1. $E(\bar{x}) = 0$, i $E(x) > 0$, $\forall x \in U$ tal que $x \neq \bar{x}$.
2. $\dot{E}(x) \leq 0$, $\forall x \in U$.

3. Si, a més, $\dot{E}(x) < 0, \forall x \in U$, llavors E s'anomena **funció de Lyapunov estricta**.

Teorema de Lyapunov 3.2.3. *Sigui \bar{x} un equilibri de $\dot{x} = X(x)$.*

- a) *Si existeix una funció de Lyapunov per a \bar{x} , llavors \bar{x} és estable.*
 b) *Si existeix una funció de Lyapunov estricta per a \bar{x} , llavors \bar{x} és asimptòticament estable.*

Demostració. a) Suposem que existeix una funció de Lyapunov per a \bar{x} , és a dir, es satisfan les condicions 1. i 2. de la definició.

Considerem la bola tancada de centre \bar{x} i radi δ , $\bar{B}_\delta(\bar{x}) = \{x \in \mathbb{R}^n; |x - \bar{x}| \leq \delta\}$, on δ és qualsevol tal que $\bar{B}_\delta(\bar{x}) \subset U$.

Sigui m el mínim valor de E sobre la frontera de $\bar{B}_\delta(\bar{x})$, i.e., $\exists x^* \in S_\delta(\bar{B}_\delta(\bar{x}))$ (representa la frontera de la bola i existeix per compacitat) tal que $m := E(x^*)$ i $E(x) \geq m, \forall x \in S_\delta(\bar{B}_\delta(\bar{x}))$.

Per 1. de 3.2 tenim que $m > 0$, ja que $E(x) > 0, \forall x \neq \bar{x}$, en particular per $x = x^*$.

Sigui $U_1 \equiv \{x \in B_\delta(\bar{x}) | E(x) < m\}$ i considerem una solució qualsevol $x(t)$. Si $x_0 \in U_1$, llavors, $\forall t \in [0, t_+]$, $E(x(t)) < m$, doncs $E(x(t))$ és decreixent. Per tant, $x(t) \in \bar{B}_\delta(\bar{x}) \subset U$ i $t_+ = +\infty$. Com que l'òrbita està acotada, llavors està definida $\forall t \geq 0$.

b) Suposem que existeix una funció de Lyapunov estricta per a \bar{x} , és a dir, es satisfan les condicions 1. i 3 de 3.2.

Per 3. tenim que $\dot{E}(x) < 0, x \in U - \bar{x}$, i.e., $E(x(t))$ és estrictament decreixent.

Com que $\bar{B}_\delta(\bar{x})$ és compacte, podem trobar una seqüència de temps $\{t_n\}$, amb $t_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$, tal que $x(t_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x_0$. Hem de veure que $x_0 = \bar{x}$.

Suposem que $x_0 \neq \bar{x}$, llavors $\exists \varepsilon$ suficientment petit tal que $x_0 \notin B_\varepsilon(\bar{x})$. Fem servir el mateix argument que en l'apartat anterior prenent, ara, l'obert $\tilde{U}_1 = \{x \in B_\varepsilon(\bar{x}); E(x) < m\}$. Així doncs, qualsevol trajectòria $x(t)$ que comenci a \tilde{U}_1 no pot sortir de $\bar{B}_\varepsilon(\bar{x})$, veure Figura 3.1.

D'aquest fet en resulta que la trajectòria $x(t)$ no pot entrar a \tilde{U}_1 . Llavors, en $U_1 - \tilde{U}_1$, \dot{E} està estrictament delimitada lluny de zero, i.e., es té l'estimació $\dot{E} \leq -K < 0$, per algun $K > 0$.

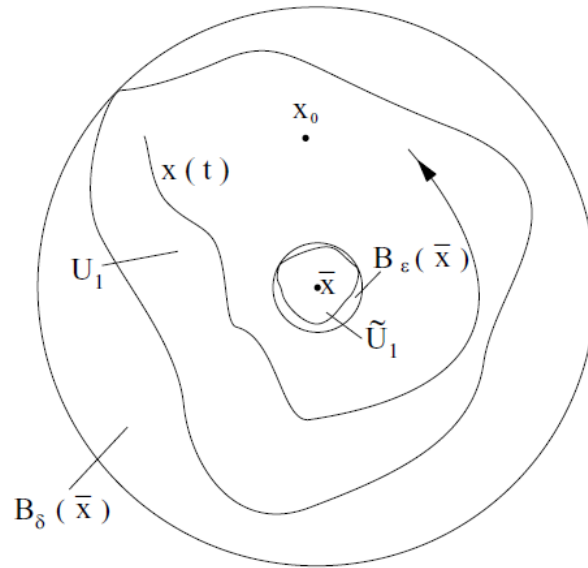


Figura 3.1: Trajectòries i entorns escollits en la Demostració del Teorema 3.2.3

Com que $x(t)$ no pot entrar a \tilde{U}_1 , podem fer aquesta estimació al llarg de la trajectòria $x(t)$ i obtenim

$$\int_0^{t_n} \bar{V}(x(s)) ds = V(x(t_n)) - V(x(0)) \leq -Kt_n, \quad (3.2.1)$$

i.e., $V(x(t_n)) \leq V(x(0)) - Kt_n$ i $V(x(t_n)) \leq V(x(0)) - Kt_n < 0$, si $n \rightarrow \infty$. I arribem a una contradicció amb el punt 1. de la definició i que sorgeix de suposar que $x_0 \neq \bar{x}$. Per tant, $x_0 = \bar{x}$. \square

Per a més detall sobre aquesta demostració, consulteu [11].

Un altre resultat molt útil per a l'anàlisi que farem en el següent apartat és el *Teorema de Barbashin - La Salle*. Abans d'estudiar-lo, però, cal definir alguns conceptes [10] [12].

Definició 3.2.4. *Sigui \bar{x} un equilibri asimptòticament estable de l'equació diferencial $\dot{x} = f(x)$. Llavors, la **conca d'atracció** de \bar{x} és el conjunt de condicions inicials x_0 tals que $\lim_{t \rightarrow \infty} \varphi(t, x_0) = \bar{x}$ i es denota per $B(\bar{x})$.*

Definició 3.2.5. *Un conjunt $U \subset \mathbb{R}^n$ s'anomena conjunt **positivament invariant** per a $\dot{x} = f(x)$ si, per a cada $x_0 \in U$, l'òrbita $\{F(t, x_0); t \geq 0\}$ està continguda en U .*

*Un conjunt positivament invariant que està acotat s'anomena **regió de captura**, cal que aquesta regió sigui n -dimensional.*

Proposició 3.2.6. *Sigui E una funció de Lyapunov sobre W , c un nombre real positiu i $W_c = \{x \in W; E(x) \leq c\}$. Aleshores:*

1. *Per a cada c , W_c és un conjunt positivament invariant.*
2. *Si, a més, $E(x) \rightarrow \infty$ quan $|x| \rightarrow \infty$, llavors W_c és una regió de captura.*

Ja estem en condicions d'enunciar i demostrar el següent teorema.

Teorema de Barbashin - La Salle 3.2.7. *Sigui $E : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funció de Lyapunov per a \bar{x} en l'entorn U i $Q = \{x \in U; \dot{E}(x) = 0\}$. Suposem que U és positivament invariant. Si l'únic conjunt positivament invariant contingut completament en Q és \bar{x} , llavors \bar{x} és assíptòticament estable. A més, U està contingut en la conca d'atracció de \bar{x} , i.e., $\forall x_0 \in U, \lim_{t \rightarrow \infty} F(t, x_0) = \bar{x}$.*

Lema 3.2.8. *Sigui $x_0 \in W_c$, $c > 0$, on $W_c = \{x \in \mathbb{R}^n; V(x) \leq c\}$ és un conjunt positivament invariant. Llavors, $\exists d, 0 \leq d \leq c$, tal que $V(x) = d, \forall x \in \omega(x_0)$.*

Com que V és constant en $\omega(x_0)$ i $\omega(x_0)$ és un conjunt invariant es té aquest corol·lari.

Corol·lari 3.2.9. $\dot{V} = 0, \forall x \in \omega(x_0)$.

Demostració. (Del Teorema 3.2.7)

Pel Lema 3.2.8 sabem que el valor de V és constant en els conjunts límit, en particular pels conjunts positivament invariants W_c , per qualsevol nombre positiu $c \in \mathbb{R}_+$. Com que V és constant en $\omega(x_0)$, el conjunt ω -límit $\omega(x_0)$ està contingut en Q . Aleshores, $\omega(x_0)$ també és positivament invariant. Per tant, $\omega(x_0) = \bar{x}$. Així doncs, el Lema 3.2.8 i el Corol·lari 3.2.9 són els passos de la demostració. \square

Capítol 4

La bifurcació d'Andronov-Hopf

Tal com hem fet en el model anterior, en aquest també ens proposem fer un estudi de la dinàmica global del sistema. Abans, però, ens cal parlar d'un fenòmen present en aquest model: les bifurcacions. En primer lloc descriurem aquest comportament i, a continuació, ens centrarem en un tipus de bifurcació en concret: la *bifurcació de Hopf*.

4.1 Bifurcacions

De tots els possibles moviments que experimenta un sistema dinàmic, els equilibris o punts fixos són els més simples. Si un punt fix és estable, el sistema romandrà a prop d'aquest estat tot i que hi hagin petites pertorbacions. Però els sistemes canvien degut a la variació del valor dels paràmetres. Per exemple, si variem el paràmetre a en l'equació $f_a(x) = ax(1 - x)$, de la família logística, els resultats en el comportament d'aquest sistema també canvien, el sistema passa de tenir una població fixa a oscil·lar entre poblacions altes i baixes. Aquest canvi s'anomena *bifurcació*. Es poden donar canvis més extrems en el comportament d'un sistema, per exemple l'aparició de periodicitats i, fins i tot, el caos.

A més de classificar els diferents tipus de moviment d'un sistema, també és útil categoritzar les formes en que el moviment pot canviar a mesura que el sistema es modifica. El conjunt de bifurcacions és universal, és a dir, és el mateix per a una gran varietat de sistemes. Per aquest motiu la teoria de les bifurcacions és un subcamp dels sistemes dinàmics àmpliament estudiat. En aquest cas ens centrarem en una bifurcació en particular: la *bifurcació de Hopf*, que s'explica en aquest capítol [13].

4.2 La bifurcació d'Andronov-Hopf.

Definició 4.2.1. *Suposem que \bar{x} és un equilibri en $a = \bar{a}$ per a la família de paràmetres $\dot{x} = f_a(x)$. Es diu que un **camí d'òrbites periòdiques es bifur-***

ca des de (\bar{a}, \bar{x}) si existeix un camí continu d'òrbites periòdiques que convergeix a l'equilibri quan $a = \bar{a}$.

El següent teorema fou provat per primera vegada per E. Hopf l'any 1942.

Teorema 4.2.2. La bifurcació d'Andronov-Hopf. Sigui $\dot{x} = f_a(x)$ una família de sistemes d'equacions diferencials en \mathbb{R}^n amb l'equilibri $x = 0$ per a tot a . Sigui $c(a) \pm ib(a)$ una parella complexa conjugada de valor propis de la matriu $Df_a(0)$ que creua l'eix imaginari a un nivell diferent de zero en $a = 0$, és a dir, $c(0) = 0, b = b(0) \neq 0$, i $c'(0) \neq 0$. A més, suposem que cap altre valor propi de $Df_a(0)$ és un enter múltiple de bi . Llavors, existeix un camí d'òrbites periòdiques de $\dot{x} = f_a(x)$ es bifurca des de $(a, x) = (0, 0)$ i l'equilibri canvia d'estabilitat. Els períodes d'aquestes òrbites s'apropen a $2\pi/b$ a mesures que les òrbites s'apropen al punt $(0, 0)$.

En la Figura 4.1 s'observa una òrbita periòdica que es bifurca des d'un punt d'equilibri en el pla.

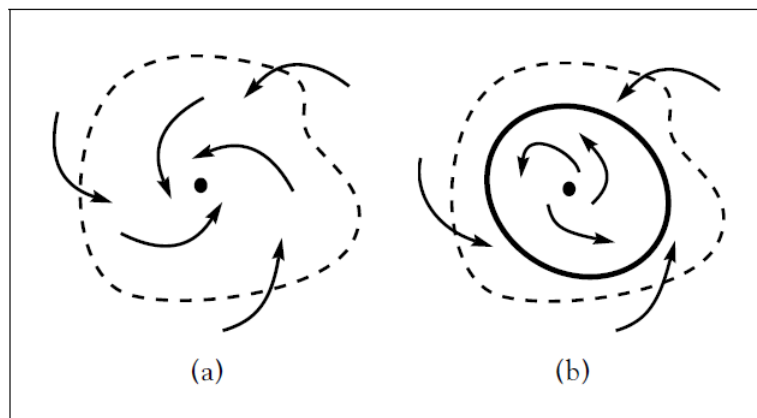


Figura 4.1: En el moment en que l'equilibri passa d'atractor (a) a repulsor (b), apareix una òrbita periòdica.

També podem visualitzar l'aparició d'una bifurcació de Hopf fent un anàlisi dels equilibris del sistema a partir dels valors propis. Per fer-ho utilitzarem el següent criteri.

Proposició 4.2.3. Criteri traça-determinant per a sistemes lineals de $2D$. Sigui $\dot{x} = Ax$ un sistema d'equacions amb A matriu real 2×2 , $T = \text{tr}A$, $D = \det A$ i $\Delta = T^2 - 4D$. Suposem que es tracta d'un sistema no degenerat, és a dir, $D \neq 0$. Aleshores el sistema $\dot{x} = Ax$ és:

- Punt de sella $\iff D < 0$.
- Centre $\iff T = 0$ i $\Delta < 0$.
- Focus atractor $\iff T < 0$ i $\Delta < 0$.

- *Focus repulsor* $\iff T > 0$ i $\Delta < 0$.
- *Node atractor* $\iff D > 0$, $\Delta \geq 0$ i $T < 0$.
- *Node repulsor* $\iff D > 0$, $\Delta \geq 0$ i $T > 0$.
- *Node estrellat* $\iff \Delta = 0$ i A no diagonal.

Demostració. Siguin λ_+ i λ_- les arrels del polinomi característic $P(\lambda) = \lambda^2 - T\lambda + D$. Aleshores,

$$\lambda_{\pm} = \frac{T \pm \sqrt{T^2 - 4D}}{2} = \frac{T \pm \sqrt{\Delta}}{2}, \quad T = \lambda_+ + \lambda_- \text{ i } D = \lambda_+ \lambda_-.$$

Suposem $D \neq 0$. Aleshores, distingim tres casos que a la vegada es subdivideixen:

1. Si $\Delta < 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} \in \mathbb{C}$ i $\operatorname{Re}(\lambda_{\pm}) = \frac{T}{2}$
 - a) $T < 0 \Rightarrow$ Focus atractor
 - b) $T = 0 \Rightarrow$ Centre
 - c) $T > 0 \Rightarrow$ Focus repulsor
2. Si $\Delta \geq 0 \Rightarrow \lambda_{\pm} \in \mathbb{R}$
 - a) $D < 0 \Rightarrow$ Signes de λ_+ i λ_- contraris \Rightarrow Punt de sella
 - b) $D > 0 \Rightarrow$ Mateix signes de λ_+ i $\lambda_- \Rightarrow$ Node
 - b.1) $T > 0 \Rightarrow$ Repulsor
 - b.2) $T < 0 \Rightarrow$ Atractor
3. Si $\Delta = 0 \Rightarrow$ Casos impropis o estrellats

□

El gràfic 4.2 mostra com es divideixen els diferents tipus d'equilibris. L'eix d'abscisses representa $T = \operatorname{tr}A$ i l'eix d'ordenades $D = \det A$. Anomenarem C la funció que descriu el discriminant $\Delta = \frac{T^2}{4}$. Així doncs, la bifurcació de Hopf té lloc en el moment en que T, D travessen la corba C .

4.2.1 Classificació de les bifurcacions de Hopf

Segons el comportament que experimenten les òrbites prop de l'equilibri en el punt de bifurcació, es diferencien dos tipus de bifurcació:

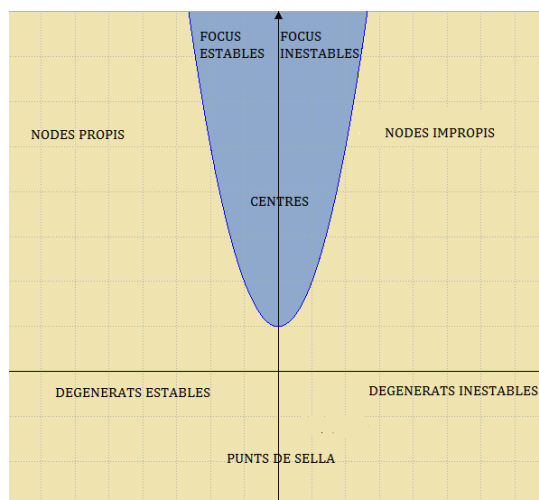


Figura 4.2: Criteri de la traça i el determinant.

- **Bifurcació supercrítica:** L'equilibri inicialment és estable. A mesura que el paràmetre canvia l'equilibri estable comença a desestabilitzar-se en forma d'oscil·lacions que van creixent. Per al valor del paràmetre en que succeeix aquest fet diem que hi ha una bifurcació de Hopf. A continuació el paràmetre continua variant i el punt fix, que abans era atractor, passa a ser repulsor i les òrbites del seu entorn són atretes per l'òrbita periòdica estable que s'ha format al seu voltant.

Per entendre millor aquest concepte veurem un exemple de sistema dinàmic, en coordenades polars, en el qual té lloc una bifurcació d'aquest tipus. En aquest cas el paràmetre que varia és ε :

$$\begin{cases} \dot{r} = r(\varepsilon - r^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases}$$

En aquest cas tenim un punt fix constant $r = 0$ i un punt fix $r = \sqrt{\varepsilon}$ que depèn del valor del paràmetre ε i podem distingir els casos següents, cadascun dels quals dona lloc a un retrat de fases diferent:

Observem que per $\varepsilon < 0$, $r = 0$ és l'únic punt fix i és atractor. Quan $\varepsilon = 0$, llavors $\dot{r} = -r^3$, de manera que l'origen continua sent un equilibri estable però les òrbites oscil·len més abans de ser atretes per ell. I, per $\varepsilon > 0$, tenim un segon equilibri en $r = \sqrt{\varepsilon}$ que resulta ser una òrbita periòdica estable. A la Figura 4.3 es representa en color vermell i atreu tant les òrbites del seu interior com les del seu exterior, de manera que l'origen passa a ser un punt fix repulsor.

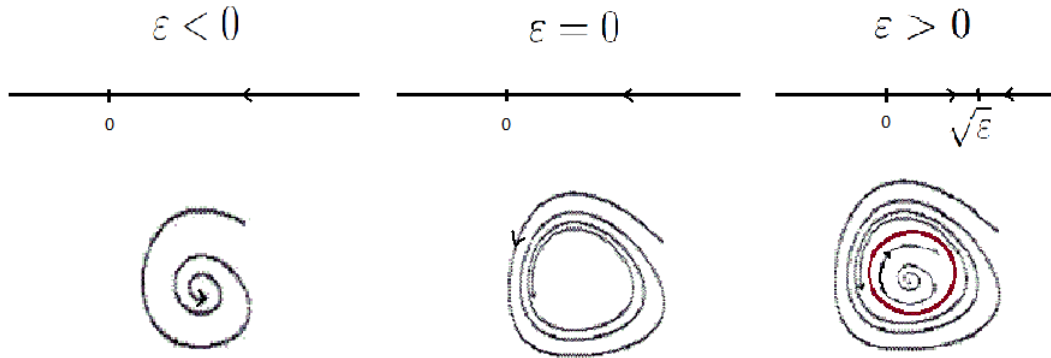


Figura 4.3: Retrats de fases del sistema per als diferents valors del paràmetre ε .

La Figura 4.4 també ens dona una caracterització d'aquest tipus de bifurcacions.

- **Bifurcació subcrítica:** Inicialment es té una òrbita periòdica inestable al voltant d'un punt fix atractiu. El paràmetre es va incrementant fins que arriba al valor en que té lloc la bifurcació de Hopf. Quan es passa aquest punt no existeixen equilibris estables, l'origen comença a repel·lir les òrbites del seu voltant poc a poc. A mesura que el paràmetre continua creixent, l'origen es converteix en un focus repulsor.

Per entendre millor aquest concepte veurem un exemple de sistema dinàmic, en coordenades polars, en el qual té lloc una bifurcació d'aquest tipus:

$$\begin{cases} \dot{r} = -r(\varepsilon - r^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases}$$

En aquest cas també tenim un punt fix constant $r = 0$ i un punt fix $r = \sqrt{\varepsilon}$ que depèn del valor del paràmetre ε i podem distingir els casos següents, cadascun dels quals dona lloc a un retrat de fases diferent:

$$\varepsilon < 0 \implies \text{Focus atractiu en } r = 0 \text{ i òrbita periòdica de radi } r = \sqrt{\varepsilon}.$$

$$\varepsilon = 0 \implies \text{Focus repulsor oscil·lant en } r = 0.$$

$$\varepsilon > 0 \implies \text{Focus repulsor en } r = 0.$$

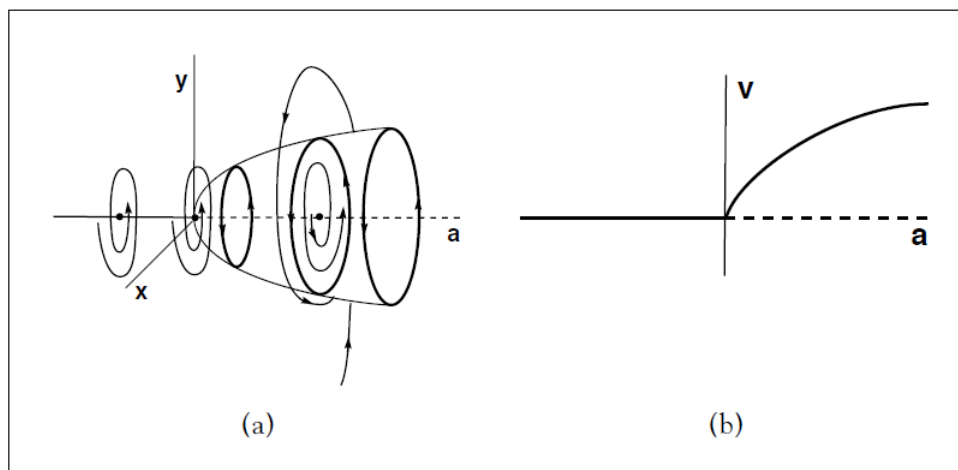


Figura 4.4: Bifurcació de Hopf supercrítica. (a) El camí d'equilibris $\{(a, 0, 0)\}$ canvia d'estabilitat quan $a = 0$. L'equilibri estable per $a < 0$ és reemplaçat per una òrbita periòdica estable quan $a > 0$. (b) Diagrama esquemàtic de la bifurcació de v en funció del paràmetre a .

A continuació veurem un altre comportament interessant que té lloc en les aquest tipus de bifurcacions:

- La **histèresi** és un efecte no lineal que a vegades apareix en presència d'una bifurcació subcrítica de Hopf. El paràmetre canvia, a continuació, torna al seu valor original, i, aleshores, el sistema experimenta un comportament completament diferent de l'original. Aquest canvi en el comportament del sistema, el qual depèn de la coexistència de dos atractors per al mateix valor del paràmetre, s'anomena histèresi.

Per entendre millor aquest concepte veurem un exemple de sistema dinàmic, en coordenades polars, en el qual té lloc una bifurcació d'aquest tipus:

$$\begin{cases} \dot{r} = -r(\varepsilon - r^2)(1 - r^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases}$$

En aquest cas, inicialment es té un punt fix atractor en $r = 0$, una òrbita periòdica repulsora en $r = \sqrt{\varepsilon}$ i una òrbita atractor en $r = 1$. De manera que en la regió limitada per l'òrbita periòdica petita, les òrbites són atretes pel focus atractor. Entre les dues òrbites periòdiques, les òrbites són atretes per la més gran. I fora d'aquesta el camp exterior apunta en direcció a l'òrbita periòdica gran. Hem fet una representació d'aquest comportament amb el software *GNUPLOT* i hem obtingut el gràfic següent, on s'indica l'òrbita repulsora en blau, l'atractora en vermell i la resta d'òrbites en negre:

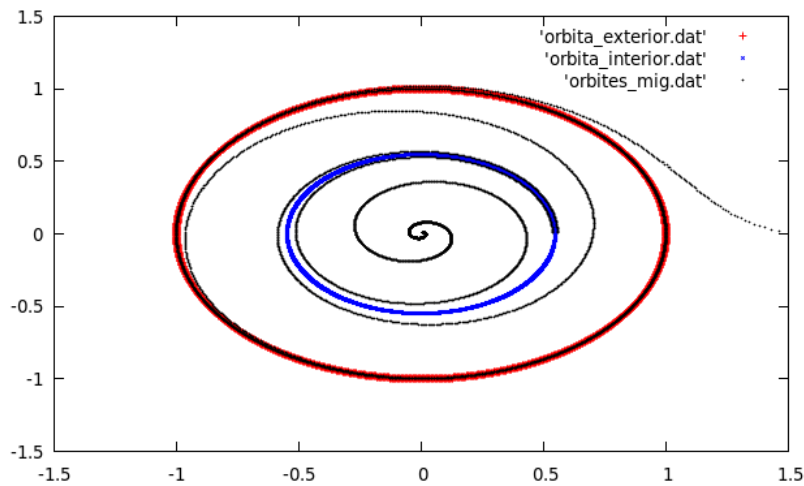


Figura 4.5: Retrat de fases previ a la histèresi.

Partint d'aquest estat inicial, a mesura que s'incrementa el valor del paràmetre ε , a l'interior de l'òrbita gran hi té lloc el mateix procés que s'observa en una bifurcació subcrítica. En el moment de la bifurcació, però, l'òrbita interior desapareix, l'origen passa a ser repulsor i repel·leix les òrbites que passen a ser atretes per l'òrbita periòdica exterior. Finalment, quan tornem a canviar el valor del paràmetre cap a $\varepsilon < 0$ (cap al valor inicial), l'equilibri del sistema ja no és el punt fix inicial sinó que és l'òrbita atractora.

En el cas de la histèresi és interessant tenir en compte que, una vegada ha tingut lloc la bifurcació, les òrbites que repel·la l'origen i són atretes per l'òrbita periòdica exterior representen connexions heteroclíniques entre l'origen i aquesta òrbita periòdica. Per tant, es podrien prendre com a ones viatgeres periòdiques. Tot i així, caldria fer un estudi més intensiu per afirmar que realment es presenta aquest fenomen.

La Figura 4.6 ens dóna una caracterització d'aquest tipus de bifurcacions amb histèresi:

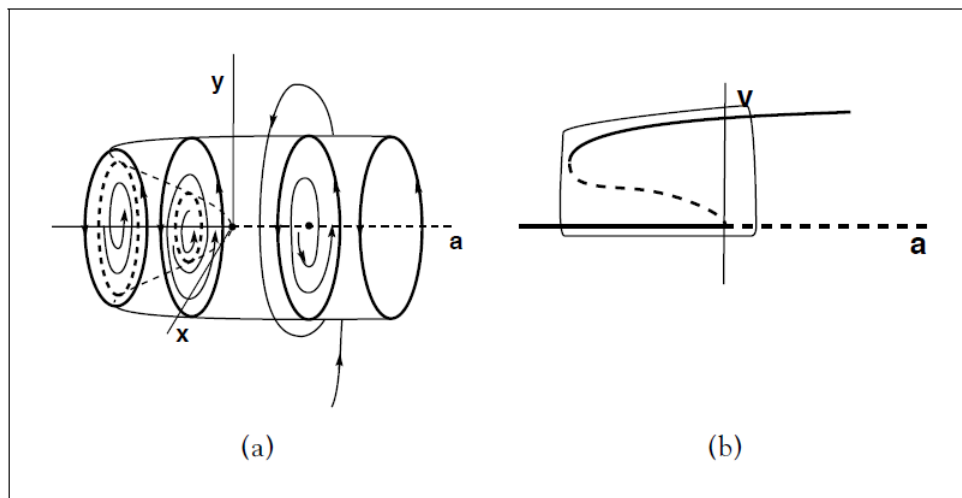


Figura 4.6: Bifurcació de Hopf subcrítica amb histèresi. (a) Hi ha una bifurcació en $a = 0$ des del camí $\gamma = 0$ d'equilibris. En aquest punt l'equilibri passa de ser estable a ser inestable, i es bifurca en un camí d'òrbites periòdiques inestables. Les òrbites periòdiques són inestables i s'extenen al llarg dels valors negatius del paràmetre, acabant en un punt de sella quan $a = -1$. Addicionalment, un camí d'òrbites periòdiques atractores surt del punt de sella. (b) Diagrama esquemàtic de la bifurcació de v en funció del paràmetre a . El rectangle mostra el camí histèrètic. Els segments verticals corresponen als salts.

Capítol 5

Dinàmica del sistema Fisher-KPP

Ens disposem a aplicar les eines adquirides en els capítols anteriors per estudiar les solucions del model de Fisher-KPP.

5.1 Preparació del sistema

Recordem que l'equació de Fisher-KPP és un model de reacció-difusió amb taxa de reacció $f(u) = u(1 - u)$. Per tant, l'equació que ens disposem a estudiar és

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + u(1 - u) \quad (5.1.1)$$

Tractarem les solucions d'aquest model com a ones viatgeres, per tant, seguint el procediment descrit en el capítol 3, analitzarem les solucions de l'equació de Fisher-KPP a partir de les solucions del sistema d'EDO's

$$X \begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = cy - x(1 - x) \end{cases} \quad (5.1.2)$$

Per comoditat de notació alhora de treballar en camps vectorials fem servir les variables x, y enlloc de u, v .

5.2 Estudi qualitatiu en funció de c

Cal estudiar aquest sistema en funció del paràmetre c , la velocitat de desplaçament de l'ona viatgera.

5.2.1 Cas $c = 0$

En primer lloc anem a estudiar el cas $c = 0$.

Suposant $dt \neq 0$, es té l'equació de les òrbites $\frac{dy}{dx} = \frac{-\mathcal{U}'(x)}{y}$, d'on obtenim l'EDO de variables separades $y dy = -\mathcal{U}'(x)dx$. En aquest cas el camp té una integral

primera. Integrant a les dues bandes obtenim la igualtat $\frac{1}{2}y^2 = \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} + C$, d'on es dedueix l'expressió de l'energia del sistema:

$$\underbrace{E(x, y)}_{\text{energia total}} = \underbrace{\frac{1}{2}y^2}_{\text{energia cinetica}} + \underbrace{-\frac{x^3}{3} + \frac{x^2}{2}}_{\mathcal{U}(x)} \quad (5.2.1)$$

Sent $\mathcal{U}(x)$ l'energia potencial del sistema, ja que sabem de física que l'energia total d'un sistema es divideix en energia cinètica i energia potencial.

A continuació veiem que l'energia del sistema es conserva ja que la seva derivada respecte el temps s'anul·la:

$$\frac{d}{dt}E(x(t), y(t)) = \frac{\partial E}{\partial x}(x(t), y(t))\dot{x}(t) + \frac{\partial E}{\partial y}(x(t), y(t))\dot{y}(t) = (-x^2 + x)y + y(x^2 - x) = 0 \quad (5.2.2)$$

Els punts fixos del sistema són $\bar{x}_1 = (0, 0)$, un centre (la part real dels valors propis que resulten del sistema $DX(0, 0)$ s'anul·la), i $\bar{x}_2 = (1, 0)$, un punt de sella amb varietat estable $E^s = (1, 1)$ i varietat inestable $E^u = (1, -1)$.

Calculem diferents nivells de l'energia potencial i en fem la projecció sobre el camp vectorial que dóna lloc a diferents corbes de nivell. En particular, el nivell d'energia que en que es troba la corba de nivell que passa pel punt fix \bar{x}_1 és el nivell $E_1 = E(\bar{x}_1) = 0$, i el nivell d'energia que dóna lloc a la corba que passa pel punt fix \bar{x}_2 és $E_2 = E(\bar{x}_2) = \frac{1}{6}$. Tant la varietat estable com la varietat inestable del punt de sella es troben sobre aquesta corba de nivell. Prenent diferents nivells d'energia i projectant-los sobre el pla x, y obtenim el retrat de fases del sistema. El càlcul de les isoclines verticals ($y = 0$) i horitzontals ($x = 0, x = 1$) ens proporciona la informació per determinar el sentit de gir de les òrbites.

Tal i com s'observa en la Figura 5.1 l'origen coincideix amb el centre (és un mínim del potencial) al voltant del qual trobem òrbites periòdiques amb nivells d'energia $0 < E(x, y) < \frac{1}{6}$. El nivell d'energia $E(x, y) = \frac{1}{6}$ dóna lloc a una corba que delimita la regió $A = \{(x, y); 0 < E(x, y) < \frac{1}{6}\}$ i passa pel punt de sella. Tenint en compte que el punt fix és un centre, qualsevol punt de A pertany a una òrbita periòdica al voltant d'aquest centre.

5.2.2 Cas $0 < c < 2$

En aquest cas la derivada de E és:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E(x(t), y(t)) &= \frac{\partial E}{\partial x}(x(t), y(t))\dot{x}(t) + \frac{\partial E}{\partial y}(x(t), y(t))\dot{y}(t) \\ &= (-x^2 + x)y + y(x^2 - x) = -cy^2 < 0, \end{aligned} \quad (5.2.3)$$

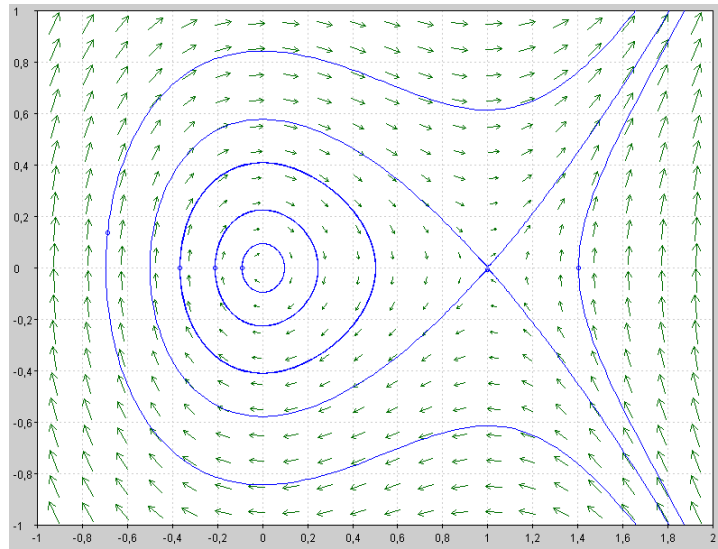


Figura 5.1: Retrat de fases per al cas $c=0$.

ja que $0 < c < 2$, i es compleix la igualtat per als punts $(x, 0)$. Per tant, l'energia total no es conserva sinó que decreix al llarg de les òrbites.

Els punts fixos no varien però en aquest cas $\bar{x}_1 = (0, 0)$ és focus atractori i $\bar{x}_2 = (1, 0)$ és un punt de sella.

En aquest cas el paràmetre c pren diferents valors dins de l'interval $(0, 2)$. Per fer-nos una idea del comportament de les òrbites dibuixarem el cas particular $c = 1$.

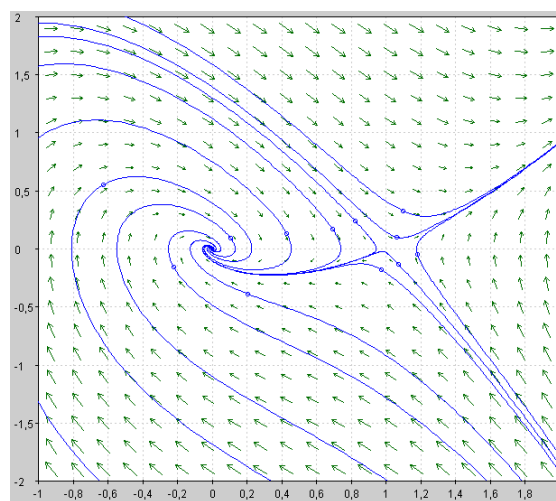


Figura 5.2: Retrat de fases per al cas $c=1$.

Com que no podem representar el retrat de fases corresponent a tots els casos de c en un sol gràfic, farem servir la teoria de Lyapunov per fer l'estudi de l'estabilitat de les solucions.

Prenem el conjunt $A = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2; 0 < E(x, y) < \frac{1}{6}\}$ com a entorn del punt \bar{x}_1 . Es compleix el següent:

1. $E(\bar{x}_1) = E(0, 0) = 0$, i $E(x, y) > 0$, $\forall (x, y) \in A$ tals que $(x, y) \neq \bar{x}_1$, ja que $E(x, y) \in \left(0, \frac{1}{6}\right) \quad \forall (x, y) \in A$.
2. $\dot{E}(x, y) = -cy^2 \leq 0$, $\forall (x, y) \in A$ tals que $(x, y) \neq \bar{x}_1$.

Com que E compleix les propietats d'una funció de Lyapunov per a \bar{x}_1 , pel *Teorema de Lyapunov* (Teorema 3.2.3) podem afirmar que el punt fix \bar{x}_1 és estable i també que $\exists (x, y) \in A$, $(x, y) \neq \bar{x}_1$, tals que $\dot{E}(x, y) = 0$, en particular es tracta del conjunt de punts $M = \{(x, y) \in A; x \neq 0 \text{ i } y = 0\}$. Com que la desigualtat 2. no és estricta, la funció E no és una funció de Lyapunov estricta i, per tant, no podem afirmar encara que aquest punt fix sigui asimptòticament estable.

Per veure si el punt fix \bar{x}_1 és asimptòticament estable farem servir el *Teorema de Barbashin-La Salle* (Teorema 3.2.7).

Sigui $E : A \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ la funció de Lyapunov per a \bar{x}_1 en l'entorn A i $Q = \{x \in A; \dot{E} = 0\}$, és a dir, $Q = M \cup \bar{x}_1$. En aquest cas A és *positivament invariant*. Com que l'únic conjunt *positivament invariant* de Q és \bar{x}_1 , llavors \bar{x}_1 és asimptòticament estable, es tracta d'un focus atractor la conca d'atracció del qual és A .

Finalment, anem a veure si existeix alguna connexió entre els punts fixos a partir d'un estudi de la varietat inestable del punt de sella i veient com varia per $0 < c < 2$.

Considerem el sistema X 5.1.2, en calculem la matriu jacobiana i l'avaluem en el punt fix $\bar{x}_2 = (1, 0)$:

$$DX(x, y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2x - 1 & -c \end{pmatrix} \implies DX(1, 0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -c \end{pmatrix}$$

A continuació, a partir del polinomi característic, en calculem els valors propis:

$$P_c(\lambda) = \det(DX(1, 0) - \lambda \text{Id}) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -c - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 + c\lambda - 1 \quad (5.2.4)$$

Igalant el polinomi a 0 i resolent l'equació de segon grau obtenim els valors propis següents:

$$\lambda_+ = \frac{-c + \sqrt{c^2 + 4}}{2} > 0 \quad \text{i} \quad \lambda_- = \frac{-c - \sqrt{c^2 + 4}}{2} < 0$$

Com que ens interessa veure el comportament de la varietat inestable del punt de sella, ens centrarem en calcular el vector propi del valor propi λ_+ únicament, que és el que dóna lloc a aquest subespai.

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \lambda_+ \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \implies \begin{cases} y = \lambda_+ x \\ x - cy = \lambda_+ y \end{cases} \implies y = \frac{1 - \lambda_+^2}{c} x \quad (5.2.5)$$

Així doncs, el subespai inestable del punt de sella \bar{x}_2 serà de la forma $E^u = (c, 1 - \lambda_+^2)$, pels diferents valors de c .

En la Figura 5.3 es pren el punt de sella com a l'origen de coordenades i es pot veure el subespai inestable, per $c = 0$, de color vermell. Quan la c pren valors entre 0 i 2, aquest vector es mou dins de la zona pintada, passant sempre pel punt de sella. Així doncs, per qualsevol valor $c \in (0, 2)$, aquest subespai inestable de \bar{x}_2 cau dins de A i, com que A és la conca d'atracció de \bar{x}_1 , la varietat inestable del punt de sella és atrreta pel focus atractor.

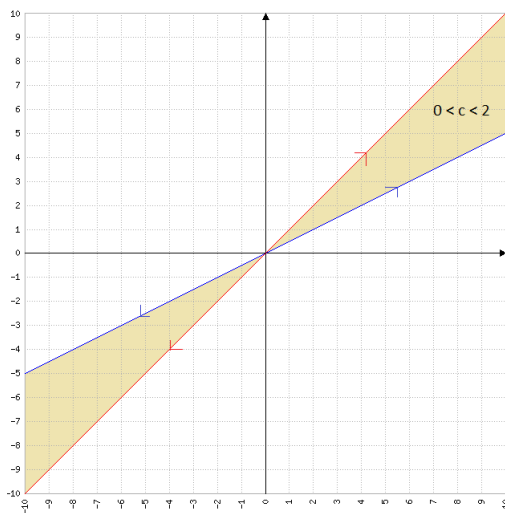


Figura 5.3: Regió dins de la qual es mou la varietat inestable del punt de sella per a diferents valors de c entre 0 i 2.

Com que l'òrbita que defineix el subespai E^u està continguda en la varietat estable de \bar{x}_1 i en la varietat inestable de \bar{x}_2 , aleshores aquesta òrbita constitueix una connexió heteroclínica entre el punt de sella \bar{x}_2 i el focus atractor \bar{x}_1 .

Sigui $(U(t), V(t))$ la connexió heteroclínica, llavors $u(t, x) = U(x - ct)$ és l'ona viatgera. Traslladant aquest resultat a les solucions del model original, podem afirmar que existeix una ona viatgera u tal que $u_- = 1$ i $u_+ = 0$, per $c \in (0, 2)$. Així doncs, l'ona viatgera experimentaria un comportament oscil·latori en el qual les oscil·lacions serien cada vegada més petites, correspondria a les òrbites del sistema que cada vegada s'acosten més a l'atractor.

Per al cas particular $c = 1$ hem reproduït el comportament de la connexió heteroclínica que uneix la varietat inestable del punt de sella de coordenada $x = 1$ amb el focus atractor de coordenada $x = 0$. En la figura és veu com el focus atrau ràpidament la varietat inestable del punt de sella perquè gairebé no oscil·la al seu voltant.

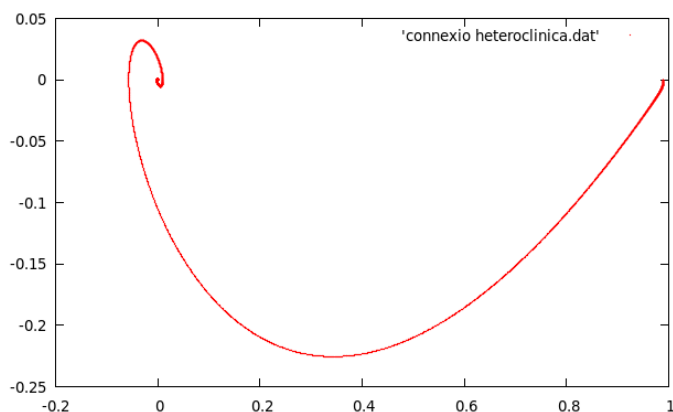


Figura 5.4: Connexió heteroclínica per al cas $c = 1$.

I, a continuació, s'observa la corresponent ona viatgera per al mateix cas $c = 1$. Es veu com parteix del nivell 1, oscil·la lleugerament - en el retrat de fases equival a les voltes que donen les òrbites al voltant del focus atractor abans de ser absorbides per ell - i, de seguida, assoleix el nivell 0 - correspon al moment en que la varietat inestable del punt de sella és totalment absorbida pel focus atractor.

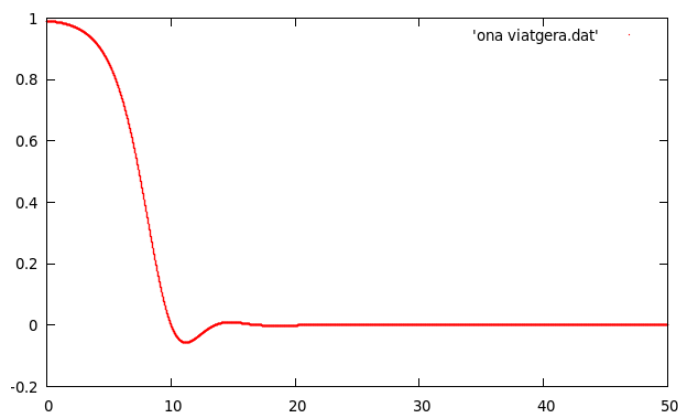


Figura 5.5: Ona viatgera per al cas $c = 1$.

5.2.3 Cas $c \geq 2$

Pel mateix raonament que en el cas anterior la derivada de l'energia és negativa, per tant, l'energia total no es conserva sinó que decreix al llarg de les òrbites.

Ara el punt fix $\bar{x}_1 = (0, 0)$ és un node atractor i el punt fix $\bar{x}_2 = (1, 0)$ és un punt de sella.

A partir de $c = 2$ i en endavant la regió A deixa de ser *positivament invariant* tot i que continua existint una *connexió heteroclínica* entre la varietat invariant del punt de sella i el node atractor. Ara les òrbites ja no oscil·len al voltant del punt fix fins a ser atretes per ell sinó que hi fan cap directament. Es pot observar en la figura següent per al cas particular $c = 3$.

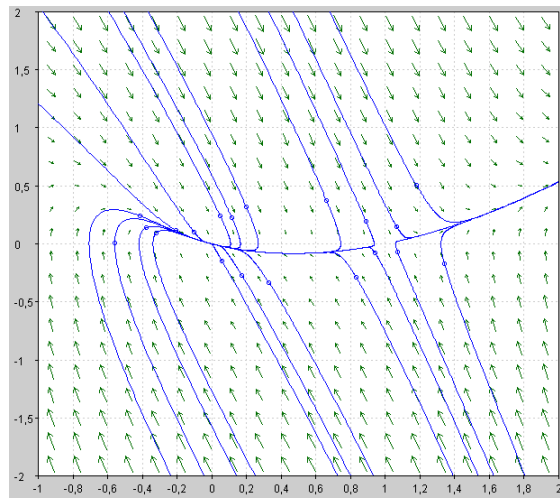


Figura 5.6: Retrat de fases per al cas $c=3$.

Per al cas particular $c = 3$ hem reproduït el comportament de la connexió heteroclínica que uneix la varietat inestable del punt de sella de coordenada $x = 1$ amb el node atractor de coordenada $x = 0$. En la figura és veu com el node atrau directament la varietat inestable del punt de sella.

I, a continuació, s'observa la corresponent ona viatgera per al mateix cas $c = 3$. Es veu com parteix del nivell 1 i, sense oscil·lar gens, assoleix el nivell 0 que correspon al moment en que la varietat inestable del punt de sella és totalment absorbida pel node atractor.

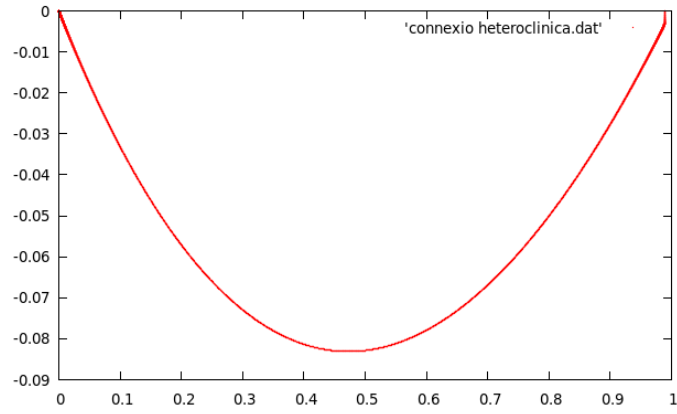


Figura 5.7: Connexió heteroclínica per al cas $c = 3$.

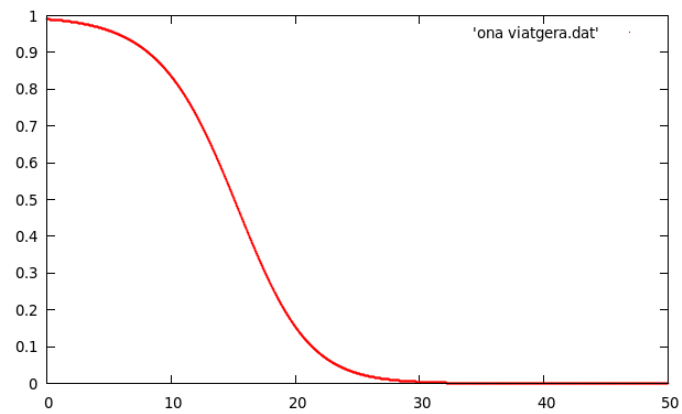


Figura 5.8: Ona viatgera per al cas $c = 3$.

Capítol 6

Dinàmica del sistema Brusselator

Ens disposem, ara, a fer un estudi de l'estabilitat del sistema Brusselator i de la dinàmica global del model [14]. Farem servir els resultats obtinguts en el capítol anterior.

6.1 Equilibris en funció dels paràmetres

En el primer capítol hem obtingut el sistema d'equacions de reacció-difusió del model Brusselator, que són de la forma $\frac{\partial u}{\partial t} = f(u) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$. A continuació farem un estudi de la dinàmica de la part de reacció del sistema, és a dir, sense considerar el terme de difusió $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$.

Per fer un estudi qualitatiu de les equacions 1.4.8 i 1.4.9 en funció dels paràmetres a i b , expressem el sistema de la forma següent:

$$X \begin{cases} \dot{x} = a - (b + 1)x + x^2y =: f(x, y) \\ \dot{y} = bx - x^2y =: g(x, y), \end{cases} \quad (6.1.1)$$

on $x, y \in \mathbb{R}$, $a, b \in \mathbb{R}$ i $a, b > 0$.

Per trobar els equilibris del sistema busquem els punts que satisfan $f(x, y) = g(x, y) = 0$. En aquest cas només existeix un punt fix $\bar{x} = (a, \frac{b}{a})$, que varia en funció dels paràmetres a i b . Per determinar de quin tipus és aquest punt farem un anàlisi dels valors propis de la matriu $DX(x, y)$ avaluada en el punt fix i donarem diferents valors als paràmetres:

$$DX(x, y) = \begin{pmatrix} -b - 1 + 2xy & x^2 \\ b - 2xy & -x^2 \end{pmatrix} \implies DX\left(a, \frac{b}{a}\right) = \begin{pmatrix} b - 1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{pmatrix}$$

Sabem que el polinomi característic d'aquesta matriu es pot expressar com

$$P(\lambda) = \lambda^2 - \text{tr}\left(DX\left(a, \frac{b}{a}\right)\right)\lambda + \det\left(DX\left(a, \frac{b}{a}\right)\right) = \lambda^2 - (b - 1 - a)\lambda + a^2. \quad (6.1.2)$$

Com que hem de fer un anàlisi tenint en compte tots els possibles valors dels paràmetres, enlloc de calcular explícitament els valors propis de $DX\left(a, \frac{b}{a}\right)$ a partir de les arrels del polinomi característic i distingir tots els possibles casos segons els valors d' a i b , farem servir un criteri que es basa en els valors de la traça i el determinant de la matriu $DX\left(a, \frac{b}{a}\right)$ i que hem vist en el capítol 4.

Per al model que ens ocupa tenim que $T = b - 1 - a^2$, $D = a^2$ i $\Delta = T^2 - 4D$. Per tant, com que $D = a^2 > 0 \forall a > 0, b > 0$, en cap cas el punt fix és un punt de sella. A continuació fixem el paràmetre a i anem a distingir tres casos diferents per al paràmetre b .

Cas $b > a^2 + 1$

Els valors de la traça i el discriminant són $T = b - 1 - a^2 > 0$ i $\Delta = (b + 1 - a^2)^2 - 4a^2 = a^4 + b^2 - 2a^2(1 - b) - 2b + 1$, respectivament, on el signe de Δ depèn dels valors dels paràmetres. Aleshores, per la Proposició 4.2.3, si $\Delta < 0$, aleshores el punt fix és un focus repulsor i, si $\Delta > 0$, llavors és un node repulsor. En qualsevol cas, si $b > a^2 + 1$, l'equilibri és inestable.

Cas $b < a^2 + 1$

Els valors de la traça i el discriminant són $T = b - 1 - a^2 < 0$ i Δ com abans, respectivament, on el signe de Δ depèn dels valors dels paràmetres. Aleshores, per la Proposició 4.2.3, si $\Delta < 0$, aleshores el punt fix és un focus atractor i, si $\Delta > 0$, llavors és un node atractor. En qualsevol cas, si $b > a^2 + 1$, l'equilibri és estable.

Cas $b = a^2 + 1$

El valor de la traça és $T = b - 1 - a^2 = 0$, per tant, l'equilibri és un centre. El període T d'una solució periòdica al voltant d'aquest centre ve donat per l'expressió $T = \frac{2\pi}{\omega}$, on ω és la freqüència aproximada. El valor d'aquesta freqüència es troba a partir del valor absolut de la part imaginària del valor propi λ_{\pm} per al cas $b = a^2 + 1$:

$$\lambda_{\pm} = \frac{b - 1 - a^2 \pm \sqrt{(b - 1 - a^2)^2 - 4a^2}}{2} \underset{b=a^2+1}{=} \underbrace{\sqrt{-a^2}}_{=} = \pm ia \implies \text{Im}(\lambda_{\pm}) = a$$

El període depèn del paràmetre a i és aproximadament $T = \frac{2\pi}{a}$.

Així doncs, amb a fixat, a mesura que el valor de b varia es donen comportaments diferents en l'entorn del punt fix. Hi ha un canvi en l'estabilitat del sistema quan s'incrementa la concentració de l'espècie B i es manté constant la concentració d' A .

L'estat del sistema en funció dels paràmetres a i b es pot veure en el gràfic següent:

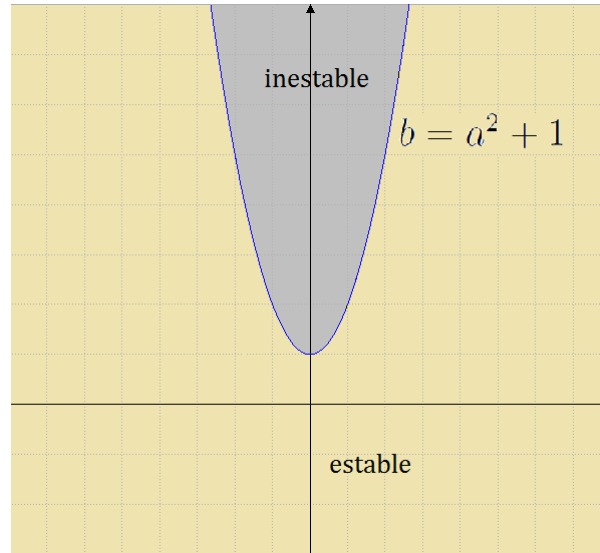


Figura 6.1: Estabilitat del sistema en funció dels paràmetres a i b .

6.2 Anàlisi de la bifurcació.

En l'apartat anterior acabem de veure que, quan els paràmetres varien, l'estabilitat dels punts fixos també ho fa. En aquest cas, fixada la concentració de l'espècie a es té que, a mesura que augmenta la concentració de l'espècie b , el punt fix passa de ser estable a ser inestable i hi ha un moment en que apareix una òrbita periòdica. Aquests fets ens porten a suposar que, per algun valor dels paràmetres, hi haurà una bifurcació de Hopf. Anem a veure-ho.

En primer lloc fixem el paràmetre a , a mesura que b varia, el punt fix \bar{x} canvia d'estabilitat, per $b < a^2 + 1$ és estable i per $b > a^2 + 1$ és inestable. Com que no hi ha cap altre equilibri en el sistema, és raonable suposar que hi haurà una bifurcació de Hopf quan $b = a^2 + 1$. Per corroborar aquesta dinàmica cal que es compleixin els supòsits del Teorema de Hopf (Teorema 4.2.2) per al cas $b = a^2 + 1$:

Observació 6.2.1. Siguin $\lambda_{\pm} = \frac{T \pm \sqrt{T^2 - 4D}}{2} = \frac{T \pm \sqrt{\Delta}}{2}$ els valors propis de la matriu $DX(a, \frac{b}{a})$.

1. La part real dels valors propis s'anul·la per a aquest valor del paràmetre b :

$$b = a^2 + 1 \implies T = b - 1 - a^2 = 0 \implies \operatorname{Re}(\lambda_{\pm}) = \frac{1}{2} = 0.$$

2. La part imaginària dels valors propis no s'anul·len per a aquest valor del paràmetre b :

$$b = a^2 + 1 \implies T = b - 1 - a^2 = 0 \implies \text{Im}(\lambda_{\pm}) = \frac{\sqrt{4D}}{2} = \sqrt{D} = \sqrt{a^2} = \pm a \neq 0.$$

3. La derivada de la part real dels valors propis respecte el paràmetre b no s'anul·la per a aquest valor de b :

$$\frac{\partial \text{Re}(\lambda_{\pm})}{\partial b} = \frac{1}{2} \frac{\partial T}{\partial b} = \frac{\partial(b - 1 - a^2)}{\partial b} = \frac{1}{2} \neq 0.$$

Efectivament es compleixen els supòsits, per tant, pel Teorema de Hopf, quan a és constant i $b = a^2 + 1$, existeix una bifurcació de Hopf en el punt fix $\bar{x} = (a, \frac{b}{a})$.

Així doncs, b és el paràmetre de bifurcació que, en moure's, fa que la recta $a = 1$ talli transversalment la corba $b = a^2 + 1$, tal i com s'observa en el dibuix.

6.3 Existència d'una òrbita periòdica al voltant del punt fix.

Fins ara hem vist que el sistema presenta una bifurcació de Hopf pel valor del paràmetre $b = a^2 + 1$ i, per tant, hi ha una òrbita periòdica. Fixat $a > 0$, volem veure si l'òrbita periòdica condiciona el comportament del sistema en funció del paràmetre b i si ens permetrà decidir de quin tipus de bifurcació de Hopf es tracta.

6.3.1 Construcció d'una regió positivament invariant

Per demostrar la presència d'una òrbita periòdica al voltant del punt fix cal construir una regió positivament invariant que envolti aquest punt i que presenti unes condicions concretes. Suposem que $b > a^2 + 1$, llavors l'equilibri és repulsor. En definir una zona de captura al seu voltant en la qual totes les òrbites apuntin cap a l'interior, veurem que entre el punt fix i les fronteres de la zona de captura existeix una òrbita periòdica. Per arribar a aquest resultat utilitzarem el teorema de Poincaré-Béndixon.

En primer lloc, calculem les isoclines del sistema:

- Isoclines verticals:

$$\dot{x} = a - (b + 1)x + x^2y = 0 \iff y = \frac{(b + 1)x - a}{x^2}$$

- Isoclines horitzontals:

$$\dot{y} = bx - x^2y = 0 \iff x = 0 \text{ i } y = \frac{b}{x}$$

Aquestes funcions divideixen el camp vectorial en regions amb diferents direccions i ens serviran per delimitar la regió atractora desitjada que anomenarem Ω . Procedim com segueix:

En primer lloc observem que, com que estem en el cas $b > a^2 + 1$, el punt fix $\bar{x} = (a, \frac{b}{a})$ és repulsor. Per tant, $\exists \delta > 0$ tal que tots els vectors de la frontera de $B_\delta(\bar{x})$ apunten cap a l'exterior de la bola, és a dir, \bar{x} repel·la les òrbites d'un entorn $B_\delta(\bar{x})$ com a mínim.

A continuació considerem les isoclines calculades en el supòsit de $b > a^2 + 1$ i les regions que limiten en el primer quadrant, que és on es troba l'equilibri \bar{x} . Tot seguit passem a definir les fronteres de Ω :

1. Frontera inferior: Podem prendre l'eix d'abscisses ($y = 0$) com a límit inferior, donat que és la recta que limita el primer quadrant.
2. Frontera esquerra: Busquem el punt en que la isoclina vertical talla el límit inferior, comprovem que aquest punt estigui dins del primer quadrant.

$$y = \frac{(b+1)x - a}{x^2} = 0 \iff (b+1)x - a = 0 \iff x = \frac{a}{b+1}$$

Com que $b > a^2 + 1 \implies b + 1 > a \implies \frac{a}{b+1} > a$. A més, numerador i denominador són majors que zero, de manera que $0 < \frac{a}{b+1} < a$. Efectivament, $x = \frac{a}{b+1}$ pertany al primer quadrant i es troba a l'esquerra de l'equilibri, per tant, prenem com a frontera esquerra el segment vertical que té l'extrem inferior en aquest punt $x = \frac{a}{b+1}$.

3. Frontera superior: Cal imposar que la recta que limiti Ω per la part superior passi pel punt d'intersecció entre el segment frontera esquerra i la isoclina horitzontal. Busquem aquest punt d'intersecció:

$$x = \frac{a}{b+1}, y = \frac{b}{x} \implies y = \frac{b(b+1)}{a}$$

. Com que $b > a^2 + 1 \implies b(b+1) > a \implies y > 1$, per tant, podem prendre la recta $y = \frac{b(b+1)}{a}$ com a límit superior perquè conté el punt fix.

4. Frontera dreta: Aquesta darrera frontera està formada per un segment vertical i per un altre segment que talla el primer i que intersecciona la frontera superior. Anem a determinar aquests segments. El segment vertical és $x_s = k$, $k > a$, tal que té un extrem en l'eix d'abscisses i l'altre sobre la isoclina vertical $y = \frac{(b+1)x-a}{x^2}$.

El segon segment té un extrem en el punt d'intersecció amb la frontera superior i l'altre en el punt d'intersecció amb el segment vertical dret que acabem de definir. Per determinar la inclinació d'aquest segment i establir el punt de tall amb la frontera superior, imposarem una condició més: Qualsevol vector sobre aquest segment ha d'apuntar en direcció a l'interior de Ω . Anem a definir aquest segment:

Sigui $n = (n_1, n_2)$ un vector normal al segment que volem trobar, cal que $n \cdot (\dot{x}, \dot{y}) < 0$, on \cdot és el producte escalar. Prenem, ara, el vector $n = (1, 1)$ i imposem la condició plantejada

$$(1, 1) \cdot (a - (b + 1)x + x^2y, bx - x^2y) = a - x < 0 \implies x > a$$

Així doncs, mentre $x > a$, el segment amb vector normal $(1, 1)$ compleix la condició. Per tant, aquest últim segment tallarà la frontera superior en qualsevol punt amb coordenada $x > a$ i tindrà pendent -1 .

Representarem aquesta regió positivament invariant per al cas particular $a = 1$, $b = 2.5$, és a dir, el punt fix és $\bar{x} = (1, 2.5)$.

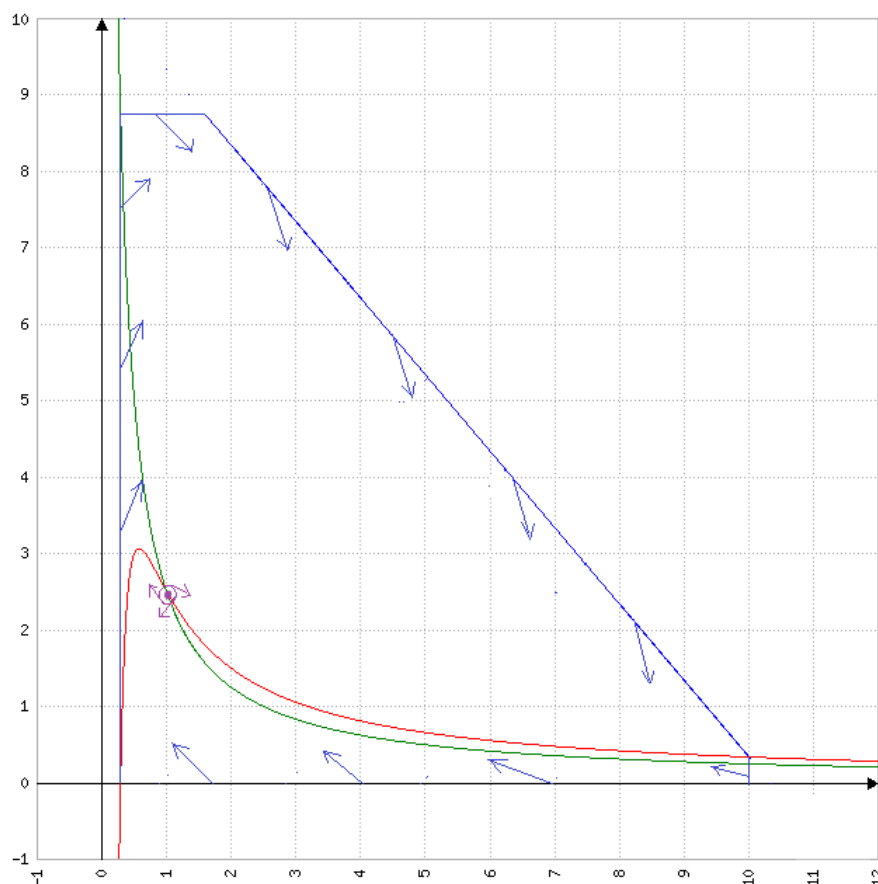


Figura 6.2: Regió positivament invariant per al cas $a = 1$, $b = 2.5$.

En la Figura 6.2 podem veure aquesta regió positivament invariant i les isoclines verticals (vermell) i horitzontals (verd) amb les respectives direccions del camp que determinen.

D'una banda es té que la direcció del camp que queda per sota de la isoclina vertical és negativa (apunta cap a l'esquerra) i la direcció del camp que queda per sobre és positiva (apunta cap a la dreta). D'altra banda, la direcció del camp que queda a la dreta de la isoclina horitzontal és negativa (apunta cap a baix) i la direcció del camp que queda a l'esquerra és positiva (apunta cap a baix). Amb aquestes consideracions podem representar les direccions globals del camp sobre cada frontera de la regió com s'indica a la figura en color blau. Efectivament, les direccions sobre les fronteres d'aquesta regió apunten cap a l'interior, en canvi, en un petit entorn del punt fix, tot apunta cap a l'exterior, donat que el punt fix en aquest cas és un repulsor. Així doncs, només podem explicar aquesta dinàmica amb la presència d'una òrbita periòdica estable envoltant el punt fix i a l'interior de la regió de captura.

6.3.2 Aplicació del teorema de Poincaré-Béndixon

Un cop construïda aquesta regió atrapant farem servir el següent teorema per demostrar l'existència d'una òrbita periòdica:

Teorema 6.3.1. Teorema de Poincaré-Béndixon. *Sigui $X : \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ un camp vectorial C^r ($r \geq 1$). Sigui $x \in \mathcal{U}$ tal que $t_+(x) = +\infty$. Suposem que $\exists K \subset \mathcal{U}$ compacte tal que $\gamma_+(x) = \{\varphi(t, x) | t \geq 0\}$. Sabem que $\omega(x)$ és compacte, connex i no buit. Si $w(x)$ no conté punts fixos llavors és una òrbita periòdica.*

Apliquem aquest teorema al cas que ens ocupa, sigui K la regió de captura que acabem de determinar. Sabem que $\omega(x)$ ha de ser compacte, connex i no buit. A més, $\omega(x)$ només pot tenir un nombre finit de punts fixos. Llavors s'ha de donar una de les opcions a), b) o c) del teorema:

El conjunt ω -límit no pot ser un punt fix perquè en aquest cas hauria de ser el punt \bar{x} que és repulsor i, per tant, no és un conjunt ω -límit. Tampoc pot ser una connexió finita de punts fixos perquè en la regió K només hi ha el punt fix \bar{x} . Per tant, el conjunt ω -límit ha de ser una òrbita periòdica estable que envolta el punt fix \bar{x} i està continguda dins del conjunt compacte K .

Així doncs, inicialment, fixat a i amb $b < a^2 + 1$, el punt fix és atractor. A mesura que augmenta el paràmetre b el punt fix atrau de manera més oscil·lant. Quan b assoleix el valor $a^2 + 1$ el punt fix esdevé un centre i apareix una òrbita periòdica al seu voltant, de manera que té lloc una bifurcació de Hopf local. Finalment, quan $b > a^2 + 1$, aquesta òrbita periòdica és estable i el punt fix passa a ser repulsor. Un cop demostrada aquesta dinàmica podem concloure que aquest sistema experimenta una bifurcació de Hopf supercrítica.

6.4 Simulació del comportament global del sistema.

Per tenir una visió de la dinàmica global del sistema representarem amb el software *pplane* el comportament del conjunt per a diferents valors dels paràmetres.

En primer lloc fixem el valor del paràmetre $a = 1$. A continuació manipulem el valor de b fent que variï entre 0.5 i 3 i analitzem els retrats de fases obtinguts en cada cas.

Cas $a = 1, b = 0.5$

El punt fix $(1, 0.5)$ és un focus atractor poc oscil·lant, és a dir, les òrbites convergeixen ràpidament a l'equilibri.

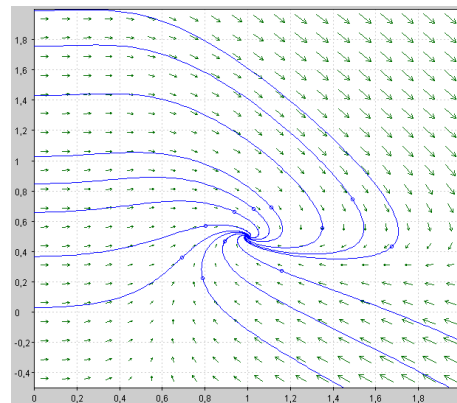


Figura 6.3: Cas $a = 1, b = 0.5$

Cas $a = 1, b = 1.5$

El punt fix $(1, 1.5)$ és un focus atractor més oscil·lant, és a dir, les òrbites convergeixen a l'equilibri però ho fan cada vegada més a poc a poc.

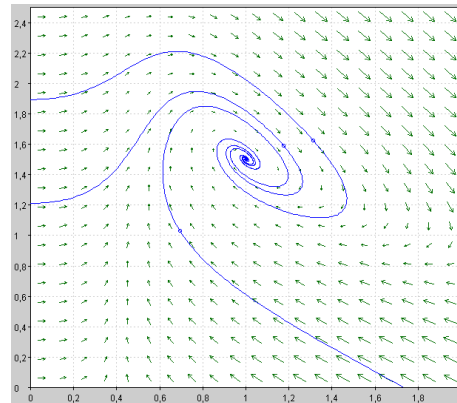
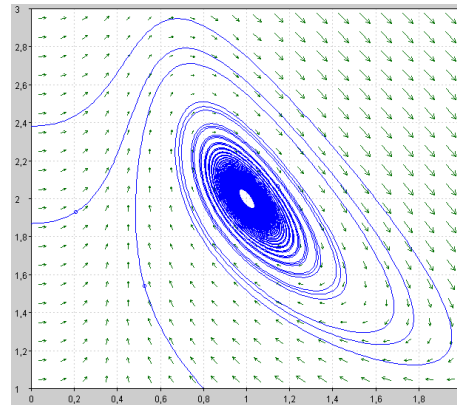


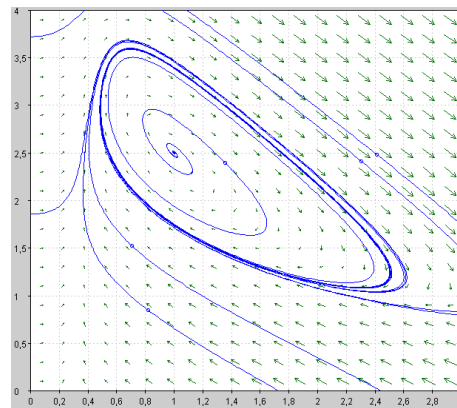
Figura 6.4: Cas $a = 1, b = 1.5$

Cas $a = 1, b = 2$

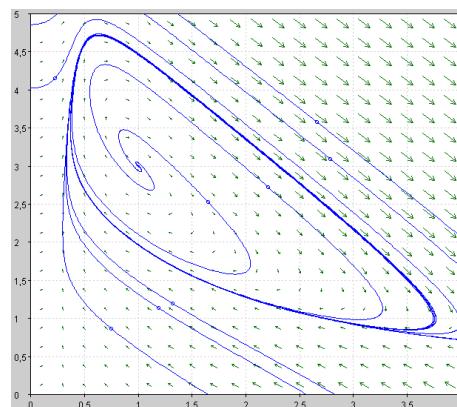
El punt fix $(1, 2)$ és un centre les òrbites del qual tenen un període $T = 2\pi$. Tal com es pot observar el punt fix queda envoltant per un conjunt d'òrbites que giren al seu voltant. El comportament global del sistema desenvolupa oscil·lant al voltant del centre.

Figura 6.5: Cas $a = 1, b = 2$ **Cas $a = 1, b = 2.5$**

El punt fix $(1, 2.5)$ passa a ser un focus repulsor que oscil·la lentament fins que és absorbit per l'òrbita periòdica, que es distingeix en el retrat de fases per ser una òrbita més gruixuda que les altres donat que totes les òrbites que estan a prop seu, tan dins com fora, són absorbides per ella.

Figura 6.6: Cas $a = 1, b = 2.5$ **Cas $a = 1, b = 3$**

El punt fix $(1, 3)$ continua sent un focus repulsor però ara més ràpidament cap a l'òrbita periòdica, que ha augmentat de dimensions. Les òrbites exteriors a l'òrbita periòdica també són atretes per ella.

Figura 6.7: Cas $a = 1, b = 3$

Capítol 7

Conclusions

En primer lloc he fet un seguiment del procés de construcció d'un model matemàtic de reacció-difusió, aprofundint en dos casos particulars. Tot i que existeix una gran quantitat d'informació en línia sobre els models de reacció-difusió, principalment m'he basat en el document [1] pel nivell i claredat del seu contingut.

L'equació de Fisher-KPP la vaig triar perquè és un model d'invasió que es podia aplicar en el cas particular del creixement d'un tumor dins d'un organisme i la meua intenció era investigar una mica més en aquesta direcció. Vaig acabar abandonant aquesta idea, d'una banda, per la seva dificultat i, d'altra banda, perquè vaig decidir centrar-me en les solucions d'aquesta equació, les ones viatgeres. Així doncs, he tingut l'oportunitat de conèixer aquest fenomen i d'estudiar la dinàmica del model de Fisher-KPP fent un canvi de variables i construint un sistema d'equacions on les solucions fossin ones viatgeres. Aquest procediment m'ha permès analitzar tal sistema en funció del paràmetre velocitat de desplaçament de l'ona, c . Hem vist que per al cas $c = 0$ es té un punt fix centre i un punt de sella. Per al cas $0 < c < 2$ es descriu una conca d'atracció al voltant del punt fix central que passa a ser un focus atractiu i, a mesura que c augmenta i passem a tenir el cas $c > 2$, la varietat inestable del punt de sella entra en aquesta regió positivament invariant i és atreta pel focus. D'aquesta manera he pogut observar i demostrar l'existència d'un comportament molt interessant que experimenten les òrbites d'aquest model: la connexió heteroclínica entre dos punts fixos que serveix per demostrar l'existència d'una ona viatgera com a solució del sistema. La majoria dels raonaments que m'han permès treure aquestes conclusions es basen en la teoria de Lyapunov, que no havia vist i a la qual he dedicat una secció del treball. Cal tenir en compte que el procediment de classificació de punts fixos em resultava familiar i no he aprofundit en la definició d'alguns conceptes perquè ja els havíem treballat en l'assignatura del grau *Equacions Diferencials*.

Amb l'estudi de l'existència i unicitat de solucions dels models de reacció-difusió també he tingut l'oportunitat de veure una pinzellada del que són les solucions febles i he treballat amb algunes demostracions que s'hi basen.

La tria del model Brusselator no va ser tan fàcil donat que també em cridava molt l'atenció el model de Selkov basat en el procés metabòlic de la glicòlisi. Com que la longitud del treball s'hagués allargat en excés amb l'estudi dels dos models em vaig acabar decantant pel Brusselator perquè en vaig trobar més informació. Així doncs, vaig decidir aprofundir bastant en la derivació del model perquè em va semblar interessant com, a partir de dues reaccions químiques, s'arriba a un sistema d'equacions diferencials. Donat que per fer un estudi del sistema complet havia de passar d'un sistema de dues equacions a un de quatre, em va semblar més adient analitzar només la part de reacció del model. A més, el meu objectiu no era resoldre un sistema d'equacions complex sinó observar certs comportaments en la dinàmica del model i prenent la part de reacció n'hi havia prou.

En aquest cas només hi ha un punt fix. L'anàlisi del sistema l'he fet en funció dels dos paràmetres que hi apareixen, a partir dels valors que prenen aquests paràmetres la dinàmica general del sistema varia. Quan $b < a^2 + 1$ l'equilibri és estable i quan $b > a^2 + 1$ passa a ser inestable, aleshores, quan $b = a^2 + 1$ té lloc una bifurcació de Hopf. Per corroborar-ho he aplicat la teoria de les bifurcacions de Hopf, a la qual he dedicat un capítol d'aquest treball. A més, per demostrar que, efectivament, quan el punt fix passa de ser estable a ser inestable apareix una òrbita periòdica al voltant d'aquest equilibri, he construït una regió positivament invariant entorn del punt fix utilitzant les propietats de les isoclines del camp. Finalment, es pot veure aquesta regió construïda per a un cas particular en que donem valors als paràmetres i la simulació de diferents retrats de fases que reproduïxen els comportaments descrits.

Tot i que no apareix en el projecte crec que, per complementar el contingut del treball i acabar-ho de lligar tot, també hagués estat interessant fer un estudi del model Brusselator prenent les solucions com a ones viatgeres tal com s'ha fet en l'equació de Fisher. I, d'altra banda, analitzar l'equació de Fisher-KPP sense el terme de difusió, tal com s'ha fet amb el model Brusselator.

A nivell personal estic satisfeta amb el resultat obtingut ja que he assolit els objectius fixats. D'una banda, he reproduït el desenvolupament de construcció de dos models de reacció-difusió aplicats a la química i la biologia, fet que despertava el meu interès. D'altra banda, he tingut l'oportunitat d'aprendre nous conceptes d'anàlisi matemàtica i d'ampliar els coneixements que he adquirit sobre equacions diferencials, models matemàtics i sistemes dinàmics durant el grau. Com a part pràctica he aplicat aquesta teoria als models escollits i he observat i demostrat els comportaments específics que es donaven. Pel que fa a la informació requerida per al desenvolupament del treball, la major part de documents que he consultat referents als models de Fisher-KPP i Brusselator els he trobat en línia. Tot i així, he consultat llibres i publicacions de renom per dur a terme els capítols més teòrics.

M'agradaria fer constar la dificultat que he tingut a l'hora d'encaminar el treball en la direcció que ha pres finalment. Aquest fet és degut a que, inicialment, tenia una idea de treball - un estudi matemàtic aplicat a la medicina del càncer - per a la qual em feien falta unes eines massa complexes tant a nivell matemàtic com biològic. Per aquest motiu el primer model que vaig tractar fou l'equació de Fisher-KPP, relacionada amb aquest context. Després em vaig adonar que gaudiria més del treball fent un estudi més assequible i en el qual pogués introduir eines que suposen la continuació d'algunes assignatures del grau.

Només em resta dir que al llarg de la realització d'aquest treball m'he hagut d'organitzar a nivell personal, he estat constant en la meva feina i he après molt, tal com m'havia plantejat. Penso que és un exercici de maduresa personal que, al mateix temps, implica un aprenentatge per part part de l'autor del projecte.

Bibliografia

- [1] J. Shi, *Partial Differential Equations and Mathematical Biology*, Math 490 Course, College of William and Mary, Williamsburg, USA (Spring 2004), Chap. 1, <http://www.resnet.wm.edu/~jxshix/math490/lecture-chap1.pdf>.
- [2] K. Embree, *Fisher-KPP equation*, 2011, <http://people.maths.ox.ac.uk/trefethen/pdectb/fisher2.pdf>.
- [3] B. Perthame, *Some mathematical models of tumor growth*, Université Pierre et Marie Curie, Paris (June 2014), Chap. 2, 23–32.
- [4] H. Kang, Y. Pesin, *Dynamics of a Discrete Brusselator Model: Escape to Infinity and Julia Set*, The Pennsylvania State University, 1–3, https://www.math.psu.edu/pesin/papers_www/brusselator.pdf.
- [5] S. Ault, E. Holmgren, *Dynamics of the Brusselator*, 1–3, http://www.academia.edu/171695/Dynamics_of_the_Bruscelator.
- [6] W. Rudin, *Functional Analysis*, University of Wisconsin (1991), Part II, Chap. 6.
- [7] B. Perthame, *Growth, reaction, movement and diffusion from biology*, Université Pierre et Marie Curie and Institut Universitaire de France, Paris (March 2010), Chap. 2, 19–20.
- [8] B. Perthame, *Growth, reaction, movement and diffusion from biology*, Université Pierre et Marie Curie and Institut Universitaire de France, Paris (March 2010), Chap. 3, 33–35.
- [9] K. T. Alligood, T. D. Sauer, J. A. Yorke, *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*, Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, New York (1996), Chap. 7, 290–309.
- [10] K. T. Alligood, T. D. Sauer, J. A. Yorke, *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*, Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, New York (1996), Chap. 8, 329–341.
- [11] S. Wiggins, *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, Springer-Verlag, New York (2003), Chap. 2, 20–24.

-
- [12] A. Haro, *Equacions Diferencials*, Curs del Grau de Matemàtiques, Universitat de Barcelona, Barcelona (2014).
- [13] K. T. Alligood, T. D. Sauer, J. A. Yorke, *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*, Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, New York (1996), Chap. 11, 483–491.
- [14] S. Ault, E. Holmgren, *Dynamics of the Brusselator*, 3–17, http://www.academia.edu/171695/Dynamics_of_the_Bruscelator.

