



Año I - Número 0

Diciembre 2015

ENOAN 2015

Se llevó a cabo con éxito la XXV ENOAN en la UAM Ixtapalapa del 6 al 11 de Septiembre, Ciudad. de México, D.F.

Continúa en la pág. 11

Ganadora del Premio Mixbaal 2015

MAYRA G. GARCÍA REYNA

Menciones honoríficas

Cesar Alberto Rosales Alcantar
Gerardo Tinoco Guerrero

Continúa en la pág. 14

Artículos

- La ENOAN a casi 24 años
H. Madrid
- Dinámica poblacional del SIDA en México de 1983 a 2012: un estudio retrospectivo y prospectivo
M. G. García Reyna
- Estudio de la propagación de ondas en el modelo de Gray-Scott
C. A. Rosales Alcantar
- Solución numérica de la ecuación de advección empleando mallas estructuradas sobre regiones planas irregulares utilizando un esquema de diferencias finitas
G. Tinoco Guerrero

I Encuentro Matemáticas Aplicadas

Se llevó a cabo el I Encuentro de Matemáticas Aplicadas en la Universidad Politécnica de San Luis Potosí, del 12 al 13 de Noviembre, S.L.P., México

Homenaje a Humberto Madrid

Se rindió un merecido reconocimiento al profesor Humberto Madrid de la Vega por su labor en las Matemáticas Aplicadas.

Continúa en la pág. 33



BOLETÍN

Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones

Consejo Editorial

Pablo Barrera Sánchez, UNAM

Pedro Flores Pérez, UNISON

Irma Delia García Calvillo, UAdeC

Humberto Madrid de la Vega, UAdeC

José Gerardo Tinoco Ruíz, UMSNH

Editores técnicos

Vanesa Ávalos Gaytan, UAdeC

Oliver Ávalos Rosales, UAdeC

Yajaira Cardona Valdés, UAdeC

Suscripciones al Boletín vía correo electrónico: smcca@smcca.org.mx

ISSN: en trámite

El Boletín publica dos fascículos al año.

Publicación de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones con apoyo del Centro de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas de la UAdeC.

Contenido

| | |
|--|----|
| Carta de Bienvenida..... | 4 |
| La ENOAN a casi 24 años..... | 5 |
| Reseña de la XXV ENOAN..... | 11 |
| Ganadores del Premio MIXBAAL..... | 14 |
| Dinámica Poblacional del SIDA en México de 1983 a 2012: un estudio retrospectivo y prospectivo..... | 15 |
| Estudio de las ondas viajeras en el modelo de Gray-Scott..... | 21 |
| Solución numérica de la ecuación de advección empleando mallas estructuradas sobre regiones planas irregulares utilizando un esquema de diferencias finitas..... | 29 |
| Homenaje al profesor Humberto Madrid..... | 33 |
| Próximos eventos..... | 34 |

Carta de Bienvenida

La Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones, A.C. (SMCCA) y el comité Editorial, les dan una cordial bienvenida a la primera edición del Boletín electrónico semestral de la SMCCA, el cual tiene como objetivo mantenerlos informados de las actividades realizadas por la SMCCA y sus asociados. En el Boletín se publicarán noticias, eventos, artículos de divulgación y de investigación de alto nivel en el área de Cómputo Científico y sus Aplicaciones, así como resúmenes de las mejores tesis de Licenciatura en Matemáticas Aplicadas.

En esta primera edición del boletín se presenta: la historia de la Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico (ENOAN) a sus XXV años de haber sido creada; una breve semblanza de la XXV edición de la ENOAN, llevada a cabo este año del 6 al 11 de septiembre en las instalaciones de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, en la Ciudad de México, D.F.; tres artículos de investigación presentados por los ganadores 2015 del Premio Mixbaal a la mejor tesis de Licenciatura en Matemáticas Aplicadas, y por último una semblanza del Homenaje realizado al Dr. Humberto Madrid de la Vega, Fundador de la ENOAN, durante el 1er. Encuentro de Matemáticas Aplicadas que se llevó a cabo en la Universidad Politécnica de San Luis Potosí, los días 12 y 13 de noviembre de este año.

La SMCCA agradecerá que ante el interés que surja en los lectores en los temas que se presenten en nuestra publicación, éstos se conviertan en usuarios asiduos, así como en miembros activos de nuestra Sociedad. La información del registro de membresías a la SMCCA la pueden consultar en el Módulo de Registro de nuestra página www.smcca.org.mx.

Rina Betzabeth Ojeda Castañeda

Presidenta

Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones

LA ENOAN

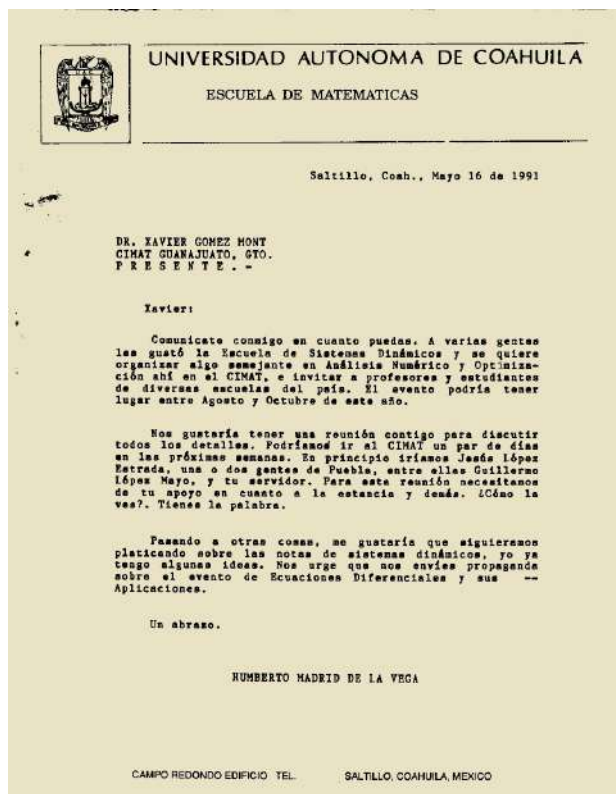
A CASI 24 AÑOS[©]



Por Humberto Madrid

© Reproducción del artículo publicado en la Carta Informativa de la Sociedad Matemática Mexicana, No. 68 Noviembre 2013

EN ABRIL DE 2014 SE CELEBRARÁ LA XXIV EDICIÓN DE LA ENOAN (ESCUELA NACIONAL DE OPTIMIZACIÓN Y ANÁLISIS NUMÉRICO) EN EL CIMAT, EN GUANAJUATO, GTO. SIRVAN ESTAS NOTAS COMO UNA SEMBLANZA DE LA HISTORIA DE ESTE IMPORTANTE EVENTO.



Los inicios

En el año de 1991, posiblemente en marzo o abril, nos encontrábamos en el CIMAT Jesús López Estrada de la Facultad de Ciencias de la UNAM y un servidor trabajando en un proyecto conjunto. Al mismo tiempo, en el mismo CIMAT, se celebraba una Escuela de Sistemas Dinámicos, organizada por Xavier Gómez Mont. A esta última asistía Guillermo López Mayo de la FCFM de la BUAP. Guillermo se mostraba entusiasmado con esa Escuela y nos propuso que organizáramos algo similar con temáticas de Optimización y Análisis Numérico, lo cual tenía sentido pues ya había gente trabajando en Optimización Numérica. En esa época había pocos eventos relacionados con estos temas y los que había eran especializados, la idea de una escuela nos pareció interesante. Por supuesto esta era una tarea complicada. Para empezar no sabíamos la respuesta que podría tener la convocatoria al evento.

CARTA DEL PROFESOR HUMBERTO MADRID AL DR.
XAVIER GOMEZ MONT

Necesitábamos recursos, un lugar para realizarla y convencer a otros colegas para que participaran como instructores, conferencistas o ponentes. De forma natural pensamos que la sede podría ser el propio CIMAT, así que hablamos con el entonces director José Ángel Canavati quien nos ofreció las instalaciones y el CIMATEL para el hospedaje. También platicamos con Xavier Gómez Mont quien nos animó y nos ofreció apoyo para becas. Debemos también recordar que en esa época no había Internet, ni correo electrónico, vaya, ni siquiera contábamos con fax.

En octubre, Del 7 al 11 de 1991 se realizó la primera edición de la Escuela de Análisis Numérico y Optimización, se ofrecieron 4 cursos (uno de ellos sobre MATLAB, el primero que se ofreció en el país), 3 conferencias y se presentaron 9 trabajos.

La asistencia fue de 52 personas provenientes de 17 instituciones (dos de ellas extranjeras). Los contingentes más numerosos fueron de Sonora, Puebla, Coahuila y la UNAM. El evento fue un éxito. Al final del evento se realizó una sesión de evaluación y se acordó tratar de seguir con la Escuela. La segunda edición se realizó, con éxito creciente, en junio de 1992 en el mismo CIMAT que generosamente nos dio el apoyo necesario, a ella concurren 81 personas de 13 instituciones. En 1993 la Escuela sale del CIMAT y la tercera Escuela se realizó en la Universidad Autónoma de Coahuila, ubicada en Saltillo, en noviembre de 1993, para este evento se contó con apoyo de la SEP y de la Sociedad Matemática Mexicana quien desde entonces ha mantenido el apoyo. La asistencia fue de 80 participantes de 16 instituciones nacionales y 2 extranjeras.



" Debemos también recordar que en esa época no había Internet, ni correo electrónico, vaya, ni siquiera contábamos con fax."

INSTALACIONES DEL CIMAT, GTO. CUNA DE LA ENOAN

En vista del éxito obtenido se realiza la cuarta edición en junio de 1994, en la BUAP en Puebla. Para esta ocasión el nombre del evento cambia a Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico (ENOAN).

Desde entonces se ha organizado la ENOAN para promover estas áreas a nivel nacional, ayudando a actualizar a los profesores e investigadores de universidades de provincia, así como estimular el interés de los estudiantes, intentando con esto lograr la vinculación de las Matemáticas Aplicadas con la ingeniería, la industria y el sector productivo. En cada ENOAN se ofrecen becas a estudiantes participantes y en ocasiones a profesores, lo cual ha contribuido a tener un público proveniente de diversas instituciones del país. En cada evento, a manera de clausura hay una sesión de evaluación que ha servido para ubicar fallas y corregirlas, también nos ha permitido detectar las inquietudes de los estudiantes. En esta sesión los estudiantes pueden sugerir temas para la siguiente edición. De esta manera se fueron incorporando temáticas afines como, aproximación, cómputo científico, biomatemáticas, estadística y otras más. Puesto que las aplicaciones de las matemáticas se manifiestan en forma de modelos y su implantación computacional, se abarca una gran variedad de áreas de matemáticas. El nombre de Escuela de Análisis Numérico y Optimización se ha conservado por razones históricas, pues fueron las primeras áreas que se abordaron.

"... en junio de 1994, en la BUAP, Puebla ... el nombre del evento cambia a Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico (ENOAN) "

Objetivos

Desde su inicio el objetivo principal del evento ha sido "organizar un encuentro de un carácter más general y abierto, [para] motivar y entusiasmar al mayor número posible de estudiantes, profesores e investigadores y profesionales de las áreas de ciencias e ingeniería del país, en el estudio, la enseñanza e investigación y las aplicaciones del Análisis Numérico y la Optimización" [1].

Más concretamente, se intenta

- Estimular en los estudiantes el estudio de las matemáticas aplicadas a nivel de licenciatura y posgrado.
- Estimular la investigación.
- Propiciar el intercambio académico entre instituciones de educación superior.
- Propiciar la vinculación interdisciplinaria.
- Propiciar la colaboración con los sectores productivos y de servicios.
- Propiciar y promover la presentación de trabajos de profesores e investigadores en las diferentes áreas de la modelación matemática y computacional.
- Promover la presentación de trabajos por parte de estudiantes
- Promover la formación de grupos interdisciplinarios para resolver problemas concretos en los sectores productivos y de servicio.
- Fortalecer los grupos de investigación existentes en las áreas citadas y promover la creación de nuevos grupos de investigación en provincia.
- Promover la vinculación de estudiantes de licenciatura y de posgrado con investigadores y profesores para la realización de trabajos de tesis.

Actividades

A fin de lograr sus objetivos anteriores, se realizan actividades académicas como cursos, conferencias presentación de trabajos presenciales y en cartel.

Con respecto a los cursos, estos usualmente se dividen como sigue

- Cursos básicos dirigidos a estudiantes de licenciatura.
- Cursos intermedios para estudiantes de licenciatura.
- Cursos avanzados para estudiantes de licenciatura de últimos semestres, de posgrado e investigadores.

En ocasiones se ofrecen cursos sobre temas relacionados con la computación científica el domingo anterior al evento.

Se ofrecen conferencias plenarias y conferencias por invitación, que por lo general pertenecen a alguna de las siguientes categorías

- Panorámicas.
- De divulgación y de difusión.
- Sobre aplicaciones a diversas disciplinas.
- Sobre aplicaciones en el sector productivo.

Para ello se invita regularmente a destacados especialistas tanto a nivel nacional como internacional para dictar conferencias. Asimismo se invita a profesionistas del sector productivo para comunicar sus experiencias sobre la aplicación de las matemáticas.

A partir de 2000 la conferencia inaugural lleva el nombre de Diego Briciot en honor al brillante matemático ya fallecido. Ésta es dictada por académicos que han contribuido al desarrollo de las matemáticas aplicadas del país.

Otra actividad importante es la presentación de trabajos por solicitud. Por lo general estos son resultados de investigaciones o tesis de licenciatura y posgrado. Se cuenta con dos modalidades, presencial o en cartel. De paso conviene mencionar que se premia al cartel mejor presentado.

En cada edición la institución sede define la temática principal del evento de acuerdo a sus intereses, esto permite la interacción con especialistas afines a los intereses de los académicos de la institución anfitriona. Estas pueden ser áreas generales como lo han sido, por ejemplo, Investigación de Operaciones, Ecuaciones Diferenciales Parciales, Modelación Matemática y Computacional. O bien sobre temas más específicos como El Agua o la temática de la próxima ENOAN que será Ciencias de la vida: Medicina, Biología y Ecología.

Desde hace varios años, el formato básico de la ENOAN se modificó para darle más relevancia a la temática principal, agrupando las conferencias y ponencias relacionadas con ella en un taller de modelación sobre el tema escogido.

Diego Briciot Hernández Castaños (1945-1993)

Distinguido científico mexicano, que nació en Culiacán, Sinaloa, el 13 de noviembre de 1945. Fue precursor en México de varias ramas de las matemáticas aplicadas y realizó su labor docente y de investigación tanto en México como en el extranjero. Estudió en la UNAM las carreras de matemáticas (1964—1968) y de ingeniería química (1962—1966). Obtuvo el grado de Doctor en Ciencias en la Universidad de Londres (1974).

[HTTP://WWW.UAQ.MX/INGENIERIA/PUBLICACIONES/EUREKA/N18/EN1802.HTML](http://www.uaq.mx/ingenieria/publicaciones/eureka/n18/en1802.html)

El premio Mixbaal

Desde 2002 se instituyó el Premio Mixbaal a la mejor tesis de licenciatura en matemáticas aplicadas dirigido a egresados de carreras de matemáticas y áreas afines. La cantidad y calidad de los trabajos recibidos han ido en constante acenso.

Actividades paralelas

En 2012 la Red de Modelos Matemáticos y Computacionales de CONACYT realizó en forma concurrente con la ENOAN un Taller de Ecuaciones Diferenciales Parciales. Así mismo en 2012 y 2013 se realizó el Taller de HP, auspiciado por HP Labs. A estos talleres pudieron asistir libremente los participantes de la ENOAN. En 2013 se ofrecieron, en forma paralela a la ENOAN, cursos especiales sobre temas específicos dirigidos a público de diversas instituciones académicas de la región.



PÓSTER DE LA XXIV ENOAN
TEMÁTICA: CIENCIAS DE LA VIDA



LA PALABRA MIXBAAL CORRESPONDE AL NÚMERO
CERO EN MAYA YUCATECO.

Financiamiento

La ENOAN no cuenta con recursos propios. Cada año se tienen que conseguir los recursos. El problema principal es conseguir el dinero para las becas de los estudiantes, estas consisten en el alojamiento y la dispensa del 50 % de la inscripción. En promedio se ofrecen 100 becas en cada año. Los recursos provienen de la institución sede, de la Sociedad Matemática Mexicana, de agencias locales como los consejos estatales de ciencia y tecnología, por mencionar algunos. En los últimos años también se han recibido aportaciones de Cuerpos Académicos que solicitan fondos para esta actividad a PROMEP de la SEP o como parte de proyectos de investigación. También se ha recibido apoyo importante de la Red de Modelos Matemáticos y Computacionales de CONACYT. Otro tipo muy importante de aportaciones son las que proporcionan las instituciones a la que están adscritos los instructores y conferencistas, pues por lo general cubren parte o la totalidad de los gastos de ellos. Recientemente se ha creado la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones A.C. (SMCCA) para poder gestionar directamente fondos para la ENOAN ante organismos como SEP y CONACYT.

Resultados

Como consecuencia de estos eventos se han establecido redes académicas formales e informales entre diferentes instituciones, muchos estudiantes han elaborado sus tesis con diversos investigadores y muchos otros se han animado a iniciar posgrados en matemáticas aplicadas o posgrados afines, lo cual contribuye al fortalecimiento de dichos posgrados.

Como se puede colegir de esta breve semblanza, en la organización de este evento concurren muchas voluntades de personas que en forma generosa y desinteresada apoyan esta actividad.

El éxito del proyecto es de todos y esto nos llena de satisfacción. Esperamos seguir realizando la ENOAN por muchos años. A final de cuentas esta actividad constituye una aportación al desarrollo de las matemáticas en nuestro país.

Referencias

- [1] J. Guerrero G. El Proyecto ENOAN. Escuela Nacional de Optimización y Análisis Numérico. Carta Informativa de la SMM. No. 15. Nov. 1997.
- [2] <http://www.enoan.org>



FOTOGRAFÍAS DEL ARCHIVO DE LA ENOAN

Reseña de la XXV ENOAN

► Por Rina Betzabeth Ojeda Castañeda y
María Luisa Sandoval Solís

DEL 6 AL 11 DE SEPTIEMBRE DE 2015 SE LLEVÓ A CABO CON GRAN ÉXITO LA XXV ESCUELA NACIONAL DE OPTIMIZACIÓN Y ANÁLISIS NUMÉRICO (ENOAN), EL VI TALLER DE MODELACIÓN MATEMÁTICA Y COMPUTACIONAL: “APLICACIONES A BIOSISTEMAS, INDUSTRIA Y SERVICIOS”, Y EL WORKSHOP: “APLICACIÓN DE OPTIMIZACIÓN MATEMÁTICA EN HEWLETT-PACKARD (HP)”, EN LAS INSTALACIONES DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA (UAM), UNIDAD IZTAPALAPA, DE LA CIUDAD DE MÉXICO, D.F. LA ORGANIZACIÓN DE ESTA XXV EDICIÓN DE LA ENOAN ESTUVO A CARGO DE UN COMITÉ LOCAL FORMADO POR PROFESORES-INVESTIGADORES Y ALUMNOS DE LAS UNIDADES AZCAPOTZALCO, CUAJIMALPA E IZTAPALAPA DE LA UAM, Y DEL COMITÉ NACIONAL CONFORMADO POR PROFESORES-INVESTIGADORES MIEMBROS EN ACTIVO DE LA SOCIEDAD MEXICANA DE COMPUTACIÓN CIENTÍFICA Y SUS APLICACIONES.

Durante esa semana, 300 asistentes en total, entre alumnos de licenciatura y posgrado, profesores, investigadores y profesionales interesados en la aplicación de las Matemáticas y el Cómputo Científico, se reunieron para participar en diversas actividades académicas: 18 cursos cortos, 5 conferencias plenarias, 9 conferencias invitadas de la ENOAN, 6 conferencias invitadas del Taller de Modelación, 133 ponencias presenciales y 41 carteles por solicitud de la ENOAN y del Taller de Modelación, así como 10 conferencias invitadas del Workshop de HP.

Los conferencistas (plenarios e invitados) y los instructores de los cursos que participaron en el evento, son profesores-investigadores de diferentes Instituciones de Educación Superior y Centros de Investigación tanto extranjeros como nacionales. Son profesionales ampliamente reconocidos en sus áreas de conocimiento, con gran experiencia en el ámbito de la docencia e investigación en temas de actualidad, relevantes y en el estado del arte sobre la aplicación de las matemáticas y del cómputo científico en la Ciencia e Ingenierías. Actualmente participan en proyectos establecidos para la solución de problemas ya sea de interés nacional y/o internacional.

Este perfil idóneo de los profesores-investigadores permitió a la ENOAN ofrecer a alumnos de licenciatura y posgrado de distintas instituciones educativas del país y del extranjero cursos especializados a diferentes niveles: básico, intermedio y avanzado, a los que generalmente ellos no pueden acceder con regularidad en sus instituciones. Cursos de computación como: introducción, programación y graficación en MATLAB, Python y lenguaje R, o bien cursos intermedios como: “introducción al método de elementos finitos” y “simulación de la dinámica de propagación de un rumor en redes complejas mediante herramientas de cómputo paralelo y distribuido”, o cursos especializados avanzados como: “introducción práctica de los algoritmos genéticos”, “introducción a los métodos espectrales para mecánica de fluidos” y “modelos de aguas someras: derivación y resolución numérica”, son un buen ejemplo de la totalidad de cursos que fueron presentados. Los interesados en conocer la gama de cursos impartidos, sus contenidos, bibliografía e información de los instructores, pueden consultar la página de la ENOAN en la liga www.enoan.org.

La participación de conferencistas plenarios e invitados internacionales y nacionales del evento, permitió a todos los asistentes tener la oportunidad de conocer el estado del arte de la Computación Científica y sus aplicaciones tanto en México, como en otros Países. Aquí se hace mención de los nombres de algunos de ellos, pero el lector puede consultar el programa completo de conferencias impartidas en www.enoan.org.

FOTOGRAFÍAS (DER.) DEL ARCHIVO DE LA XXV ENOAN
ALGUNOS DE LOS CONFERENCISTAS PLENARIOS E INVITADOS

Conferencistas Plenarios Doctores:

- PABLO BARRERA SÁNCHEZ, F.C.-UNAM;
- CIPRIANO A. SANTOS de Laboratorios HP;
- DAVID KINCAID, University of Texas, Austin, Tex. USA;
- QUINGLANXIA, University of California at Davis, USA;
- ARTURO ROJO DOMINGUEZ, UAM-Cuajimalpa.

Conferencistas Invitados Doctores:

- BENITO CHEN CHARPIENTER, University of Texas, Arlington, Tex. USA;
- CARLOS PARÉS MADROÑAL, Universidad de Malaga, España;
- LUIS GODDYN y •SIMON FRASER, University British Columbia, Canadá;
- JESÚS LÓPEZ ESTRADA y •FAUSTINO SÁNCHEZ GARDUÑO, F.C.-UNAM;
- GILBERTO CARRILLO VIVES, IMATE-Cuernavaca-UNAM;
- EDUARDO RAMOS MORA, IER-UNAM;
- PATRICIA SAAVEDRA BARRERA, UAM-Iztapalapa;
- FRANCISCO J. DOMÍNGUEZ MOTA y •JOSÉ GERARDO TINOCO RUÍZ, UMSNH;
- MARIANO RIVERA MERAZ, CIMAT;
- MARÍA TERESA LÓPEZ ARENAS, UAM-Cuajimalpa.

Conferencistas Invitados Workshop H.P. Doctores:

- FRANCISCO ANDRADE, CEO of GUAPO-HP;
- ISIDORO GITLER, ABACUS, Department of Mathematics, CINVESTAV-IPN;
- TERESA GONZÁLEZ, Scientist at HP-LABS.



Dentro de este marco de vinculación de academia-investigación-industria, los alumnos asistentes también tuvieron la oportunidad, un buen número de ellos (171 ponencias por solicitud), de exponer de manera presencial o a través de un formato de cartel, del desarrollo y los resultados de investigaciones que llevan a cabo en conjunto con sus profesores, bien como trabajos de tesis (licenciatura, maestría, doctorado) o en proyectos de investigación establecidos en sus Instituciones, recibiendo una retroalimentación de utilidad para mejorar su trabajo, tanto de parte de investigadores especializados en los temas presentados, como de sus compañeros de otras instituciones, interesados en estos temas.

Por último es de gran importancia señalar que el gran esfuerzo de trabajo realizado tanto por el Comité Local (Sede UAM) como el Comité Nacional (aglutinados dentro de la SMCCA) en la organización, y contando con el importante apoyo financiero de Instituciones, Dependencias y Centros de Investigación como: CONACYT, Unidades Azcapotzalco, Cuajimalpa e Iztapalapa y la Rectoría General de la UAM, Sociedad Matemática Mexicana, Facultad de Ciencias de la UNAM, y H.P., permitió obtener un conjunto de resultados a beneficio de una comunidad científica conformada por alumnos, profesores, investigadores y profesionales interesados en la Computación Científica y las Matemáticas Aplicadas, que incidieron en indicadores de impacto como los que se presentan en la siguiente tabla:



FOTOGRAFÍAS DEL ARCHIVO DE LA XXV ENOAN
INAUGURACIÓN

| | |
|--|-----|
| TOTAL DE ASISTENTES: | 300 |
| ALUMNOS BENEFICIADOS DEL EVENTO: | 220 |
| BECAS ESTUDIANTES DE INSTITUCIONES DE PROVINCIA: | 83 |
| BECAS ESTUDIANTES DE INSTITUCIONES DEL D.F. Y ALEDAÑAS: | 108 |
| PROGRAMAS EDUCATIVOS DE INSTITUCIONES PARTICIPANTES: | 25 |
| INVESTIGADORES, DOCENTES Y PROFESIONALES BENEFICIADOS DEL EVENTO: | 80 |
| CUERPOS ACADÉMICOS Y GRUPOS DE INVESTIGACIÓN DEL PAÍS Y DEL EXTRANJERO: | 20 |
| NÚMERO DE INSTITUCIONES PARTICIPANTES: | 56 |
| NACIONALES | 48 |
| EXTRANJERAS | 8 |

Ganadores del Premio **MIXBAAL**

Ganadores de la décimocuarta edición del premio Mixbaal a la Mejor Tesis de Licenciatura en Matemáticas Aplicadas.



Ganadora del premio Mixbaal

MAYRA GUADALUPE GARCÍA REYNA

Lic. en Matemáticas

Unidad Académica de Matemáticas de la Universidad Autónoma de Zacatecas

Trabajo: Dinámica Poblacional del SIDA en México de 1983 a 2012: un estudio retrospectivo y prospectivo.

Asesores: Leticia A. Ramírez Hernández y Juan Martínez Ortiz



Mención Honorífica



CESAR ALBERTO ROSALES ALCANTAR

Lic. en Matemáticas

Departamento de Matemáticas, División de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Sonora

Trabajo: Estudio de las ondas viajeras en el modelo de Gray-Scott

Asesor: Dr. Daniel Olmos Liceaga



Mención Honorífica



GERARDO TINOCO GUERRERO

Lic. en Matemáticas

Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Trabajo: Solución numérica de la ecuación de advección empleando mallas estructuradas sobre regiones planas irregulares utilizando un esquema de diferencias finitas.

Asesores: Francisco Domínguez Mota y Gerardo Tinoco Ruiz



Dinámica Poblacional del SIDA en México de 1983 a 2012: un estudio retrospectivo y prospectivo.

M. G. García Reyna, L. A. Ramírez Hernández* y J. Martínez Ortiz*

*Docente-Investigador en la Unidad Académica de Matemáticas de la Universidad Autónoma de Zacatecas.

Diciembre, 2015

Resumen

La epidemiología del SIDA es peculiar pues solo hay tres posibles estados: susceptible, infectado y muerto; a diferencia de otras infecciones donde se puede presentar también las fases de inmune, y hay una posible transición entre los estados infectado y susceptible. Ello junto con la esperanza de vida actual de una persona infectada en tratamiento, genera una dinámica acumulativa de casos. Esta peculiaridad sugiere ya un comportamiento sigmoideal no simétrico (Modelo de Gompertz). En este trabajo se establecen similitudes y diferencias significativas del comportamiento de la epidemia de SIDA en los últimos treinta años considerando diferentes escenarios: caso Nacional, Estatal (Zacatecas), diferenciado por sexo, por edad y por forma de contagio; haciendo comparativos de los parámetros de los ajustes tipo Gompertz, en cada contexto.

1 Introducción

Desde la antigüedad se han tratado de estudiar las epidemias. Se han ideado diferentes explicaciones para comprender las causas de difusión de una enfermedad y combatirla eficazmente. La aplicación de las matemáticas a este problema ha ayudado al entendimiento de este tipo de fenómenos, además de que permite realizar pronósticos, evaluación de políticas de control y monitoreo.

De los primeros modelos matemáticos de los que se tiene registro es la aportación del matemático y médico francés Daniel Bernoulli, quien en 1760 presentó un tratado sobre la epidemia de peste que azotaba Europa en aquella época [Esteva J. et al., 1991]. Con el paso del tiempo se generaron diferentes modelos para pronosticar la evolución de epidemias, uno de esos modelos es el de Gompertz.

En 1895 el matemático inglés Benjamín Gompertz propuso un modelo para describir procesos de crecimiento [Gompertz, 1825]; desde entonces la ecuación de Gompertz ha sido paradigmática

para la descripción de crecimiento tumoral y el empleo para terapias [Laird, 1964, Norton, 2005]. La versatilidad de la ecuación de Gompertz ha permitido ser empleada en la descripción de comportamiento de poblaciones de bacterias [Annadurai et al., 2000], y VIH [Hirimoto et al., 1997]. En general, los parámetros de dicha ecuación son ajustadas empíricamente de acuerdo a los datos de campo del proceso que se describe, sin embargo, aún sigue siendo una incógnita la naturaleza física de las mismas [Izquierdo, et al., 2013]. Algunos trabajos han propuesto un carácter dual, fractal y estocástico, de la ecuación de Gompertz [Waliszewski et al., 2003, Izquierdo et al., 2008].

La ecuación diferencial de Gompertz viene dada por la expresión

$$\frac{dN(t)}{dt} = \beta N(t) \ln \left(\frac{K}{N(t)} \right)$$

Donde $N(t)$ denota el tamaño de la población, β y K , los parámetros biológicos que corresponden, respectivamente, a la tasa intrínseca de crecimiento de modelo y la capacidad de carga. La

tasa de crecimiento del modelo está definida como:

$$\frac{dN(t)}{N(t)} = \beta \ln \left(\frac{K}{N(t)} \right)$$

Esto significa que la tasa de crecimiento es de orden logarítmico, a diferencia de otros modelos clásicos de crecimiento como los son el logístico o de Verhulst, de Bertalanffy y de Malthus. La capacidad de carga K denota el tamaño máximo que la población puede alcanzar.

Es posible hallar las soluciones de la ecuación de Gompertz pueden ser halladas de forma explícita y éstas tiene la forma $N(t) = Ke^{-\alpha e^{-\beta t}}$, donde el parámetro α es un número real. Este parámetro resulta de la integración de la ecuación. Obsérvese que si $N(0) = n_0$, entonces $\alpha = \ln \left(\frac{K}{n_0} \right)$.

El objetivo de este trabajo es establecer, a través del modelo de Gompertz, diferencias y similitudes en el comportamiento de la epidemia del SIDA de 1983 a 2012 para el caso nacional, para el Estado de Zacatecas, por sexo, edad y vía de contagio.

El Síndrome de Inmunodeficiencia Adquirida (SIDA) es la fase final de la enfermedad producida por el virus de Inmunodeficiencia Humana (VIH). Hacia 1981 en los Estados Unidos de América fueron dados a conocer los primeros diagnósticos de SIDA en el mundo, y desde entonces se ha convertido en una de las más peligrosas epidemias que se hayan conocido.

En México en primer diagnóstico notificado del virus tuvo lugar en 1983. El VIH provenía de Estados Unidos de América, consecuencia de la migración de mexicanos. En 1985, la enfermedad en nuestro país tuvo en un inicio un crecimiento exponencial, colocándonos en el lugar 13 de casos de infectados a nivel mundial y tercero en el continente americano, lo que alertó a los servicios de salud de nuestro país.

A la fecha la epidemia del VIH/SIDA ha cobrado la vida de unas 36 millones personas en el mundo, se calculó que en 2012 murieron 1.6 millones de personas debido a esta enfermedad (Córdova et al., 2009). Se sabe, de acuerdo a los

registros de casos de SIDA, que un 94.1 % de casos se originaron por vía sexual, 3.8 % por vía sanguínea (incluye transfusiones de sangre, usuarios de drogas intravenosas y exposición ocupacional), 2.1 % corresponde a vía perinatal.

Los antecedentes mencionados señalan que nos enfrentamos a un problema de gran envergadura y cualquier esfuerzo para entender la dinámica de la epidemia aunado a trabajos de carácter epidemiológicos que permiten tener control de la misma, redundará en tener eficientes políticas de salud, como tratamiento, monitoreo y control de los pacientes con VIH.

2 Descripción del Método

2.1. Obtención de datos

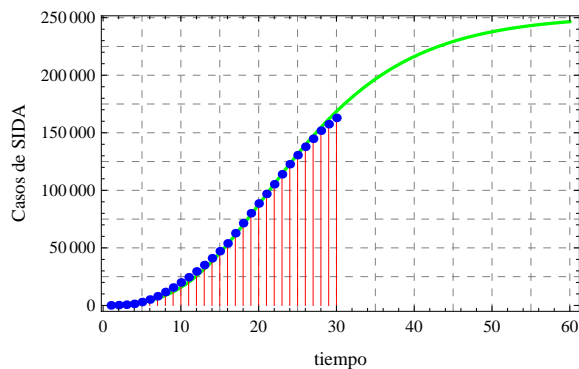
Se utilizaron los ajustes tipo Gompertz, para la epidemia de SIDA, construidos en diferentes escenarios: nivel nacional, por sexo, por forma de contagio y a nivel estatal. Las tablas de datos fueron recabadas del sitio web de CENSIDA y en los Servicios de Salud de Zacatecas.

El primer análisis que se realizó fue el caso nacional. Se consideraron los casos de SIDA diagnosticados por año, y se construyó la columna de acumulados. En la figura 1 se muestra la tabla, así como el ajuste de la Curva de Gompertz para los casos acumulados, tanto en forma gráfica como la expresión analítica. Se muestran además las medidas estadísticas que validan el modelo.

El segundo análisis que se realizó, fue estudiar el comportamiento de la epidemia en la población joven (15-24 años) a nivel nacional, que es donde se da mayor prevalencia. En la figura 2 se muestran los casos diagnosticados por año y el respectivo acumulado. Se hizo diferenciación por sexo.

Nuevamente, se hizo el ajuste de curvas tipo Gompertz con buenos resultados. En la figura 3 se muestran los gráficos de los datos (punteado) y la curva que mejor se ajustó; del lado izquierdo hombres y del derecho mujeres. Bajo cada curva se da la expresión del modelo y las medidas estadísticas de bondad de ajuste.

| Año | Casos diagnosticados por año | Casos diagnosticados acumulados |
|------|------------------------------|---------------------------------|
| 1983 | 67 | 67 |
| 1984 | 194 | 261 |
| 1985 | 366 | 627 |
| 1986 | 709 | 1336 |
| 1987 | 1596 | 2932 |
| 1988 | 2196 | 5128 |
| 1989 | 2848 | 7976 |
| 1990 | 3711 | 11687 |
| 1991 | 3882 | 15569 |
| 1992 | 4370 | 19939 |
| 1993 | 4522 | 24461 |
| 1994 | 5067 | 29528 |
| 1995 | 5571 | 35099 |
| 1996 | 5913 | 41012 |
| 1997 | 6123 | 47135 |
| 1998 | 6752 | 53897 |
| 1999 | 8870 | 62767 |
| 2000 | 8700 | 71467 |
| 2001 | 8608 | 80075 |
| 2002 | 8479 | 88554 |
| 2003 | 8347 | 96901 |
| 2004 | 8379 | 105280 |
| 2005 | 8667 | 113947 |
| 2006 | 8768 | 122715 |
| 2007 | 7860 | 130575 |
| 2008 | 7295 | 137575 |
| 2009 | 6924 | 144794 |
| 2010 | 7041 | 151835 |
| 2011 | 5627 | 157462 |
| 2012 | 5483 | 162945 |



$$N(t) = 252,020.7427e^{7.3010e^{-0.0966t}}$$

Error cuadrático 13.88
 Error cuadrático medio 0.49
 Correlación $r=0.996$

Figura 1: Casos de SIDA en México de 1983 a 2012, reportados y acumulado. En grafica se muestran los datos acumulados (punteado) y la curva de Gompertz ajustada. Debajo de ésta la ecuación de la curva, los errores cuadrático y cuadrático medio, y la correlación.

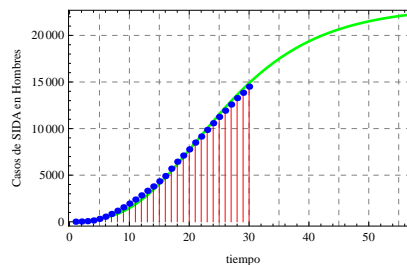
| HOMBRES 15-24 AÑOS | | | MUJERES 15-24 AÑOS | | |
|--------------------|------------------------------|--------------------------|--------------------|------------------------------|--------------------------|
| Año | Casos de SIDA diagnosticados | Casos de SIDA acumulados | Año | Casos de SIDA diagnosticados | Casos de SIDA acumulados |
| 1983 | 7 | 7 | 1983 | 0 | 0 |
| 1984 | 19 | 26 | 1984 | 2 | 2 |
| 1985 | 38 | 64 | 1985 | 3 | 5 |
| 1986 | 74 | 138 | 1986 | 12 | 17 |
| 1987 | 171 | 309 | 1987 | 40 | 57 |
| 1988 | 236 | 545 | 1988 | 38 | 95 |
| 1989 | 295 | 840 | 1989 | 59 | 154 |
| 1990 | 343 | 1183 | 1990 | 64 | 218 |
| 1991 | 369 | 1552 | 1991 | 75 | 293 |
| 1992 | 400 | 1952 | 1992 | 111 | 404 |
| 1993 | 434 | 2386 | 1993 | 90 | 494 |
| 1994 | 444 | 2830 | 1994 | 87 | 581 |
| 1995 | 493 | 3323 | 1995 | 124 | 705 |
| 1996 | 467 | 3790 | 1996 | 134 | 839 |
| 1997 | 552 | 4342 | 1997 | 149 | 988 |
| 1998 | 566 | 4908 | 1998 | 191 | 1179 |
| 1999 | 708 | 5696 | 1999 | 202 | 1381 |
| 2000 | 750 | 6446 | 2000 | 262 | 1643 |
| 2001 | 659 | 7105 | 2001 | 253 | 1896 |
| 2002 | 664 | 7769 | 2002 | 262 | 2158 |
| 2003 | 728 | 8497 | 2003 | 271 | 2429 |
| 2004 | 650 | 9147 | 2004 | 279 | 2708 |
| 2005 | 712 | 9859 | 2005 | 254 | 2962 |
| 2006 | 717 | 10576 | 2006 | 285 | 3247 |
| 2007 | 680 | 11256 | 2007 | 280 | 3527 |
| 2008 | 667 | 11923 | 2008 | 242 | 3769 |
| 2009 | 660 | 12583 | 2009 | 212 | 3981 |
| 2010 | 691 | 13274 | 2010 | 204 | 4185 |
| 2011 | 569 | 13843 | 2011 | 161 | 4346 |
| 2012 | 658 | 14501 | 2012 | 182 | 4528 |

(a) Hombres

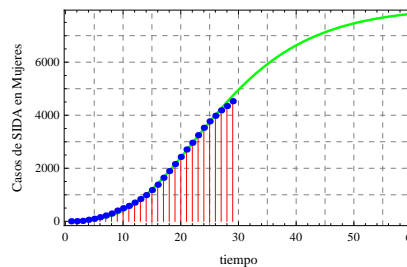
(b) Mujeres

Figura 2: Casos de SIDA en población de jóvenes (15-24 años) en México de 1983 a 2012, reportados y acumulado.

Un tercer análisis, aún en el contexto nacional, consistió en estudiar el comportamiento de la epidemia por forma de contagio. Se analizaron dos: vía sexual y vía perinatal. La transmisión por vía sanguínea presenta un patrón diferente al tener dos variantes: contagio por transfusión



(a) $N(t) = 23,066.1746e^{-6.8857e^{-0.0918t}}$
 Error cuadrático 20.53 %
 Error cuadrático medio 0.73 %
 Correlación $r=0.99462$



(b) $N(t) = 8,079.639e^{-7.4397e^{-0.09078t}}$
 Error cuadrático 13.24 %
 Error cuadrático medio 0.49 %
 Correlación $r=0.99606$

Figura 3: Las graficas muestran los datos acumulados (punteado) y la curva de Gompertz ajustada; 3(a):hombres, 3(b):mujeres.

y contagio por uso de drogas. En el primer caso, no hay reportes de contagio desde el 2005, por lo que no representa ya un problema de interés. En el segundo caso, existe ambigüedad en la clasificación de los casos reportados de contagio por esta vía, dado que usualmente se presentan situaciones de riesgo de contagio sexual, acompañando a éste tipo. En la figura 4 se muestran los datos considerados, el número de diagnósticos por año, y el acumulado.

| Vía Sexual | | | Vía Perinatal | | |
|------------|------------------------------|--------------------------|---------------|------------------------------|--------------------------|
| Año | Casos de SIDA diagnosticados | Casos de SIDA acumulados | Año | Casos de SIDA diagnosticados | Casos de SIDA acumulados |
| 1983 | 55 | 55 | 1983 | 0 | 0 |
| 1984 | 91 | 146 | 1984 | 0 | 0 |
| 1985 | 240 | 386 | 1985 | 0 | 0 |
| 1986 | 491 | 877 | 1986 | 6 | 6 |
| 1987 | 1094 | 1971 | 1987 | 23 | 29 |
| 1988 | 1439 | 3410 | 1988 | 41 | 70 |
| 1989 | 1787 | 5197 | 1989 | 39 | 109 |
| 1990 | 1704 | 6901 | 1990 | 39 | 148 |
| 1991 | 2044 | 8945 | 1991 | 50 | 198 |
| 1992 | 2515 | 11460 | 1992 | 47 | 245 |
| 1993 | 2578 | 14038 | 1993 | 64 | 309 |
| 1994 | 3022 | 17060 | 1994 | 71 | 380 |
| 1995 | 2960 | 20020 | 1995 | 56 | 436 |
| 1996 | 2916 | 22936 | 1996 | 75 | 511 |
| 1997 | 3397 | 26333 | 1997 | 89 | 600 |
| 1998 | 2751 | 29084 | 1998 | 69 | 669 |
| 1999 | 3261 | 32345 | 1999 | 92 | 761 |
| 2000 | 4026 | 36371 | 2000 | 105 | 866 |
| 2001 | 4951 | 41322 | 2001 | 127 | 993 |
| 2002 | 5239 | 46561 | 2002 | 154 | 1157 |
| 2003 | 5692 | 52253 | 2003 | 158 | 1325 |
| 2004 | 5882 | 58135 | 2004 | 147 | 1472 |
| 2005 | 6468 | 64603 | 2005 | 158 | 1630 |
| 2006 | 6521 | 71124 | 2006 | 152 | 1782 |
| 2007 | 6896 | 77820 | 2007 | 153 | 1934 |
| 2008 | 6288 | 84108 | 2008 | 110 | 2044 |
| 2009 | 6087 | 90195 | 2009 | 115 | 2159 |
| 2010 | 6280 | 96475 | 2010 | 103 | 2262 |
| 2011 | 5138 | 101613 | 2011 | 64 | 2326 |
| 2012 | 5227 | 106840 | 2012 | 67 | 2393 |

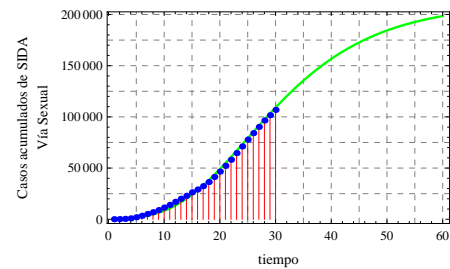
(a) Vía Sexual

(b) Vía Perinatal

Figura 4: Casos de SIDA, por vía de contagio, en México de 1983 a 2012, reportados y acumulado.

Al realizar el ajuste, nuevamente el comportamiento sigmoïdal se hace presente. En la figura 5 se presentan las gráficas de datos (punteado) y el ajuste de Gompertz (curva). Debajo de cada curva se da la expresión analítica de los modelos, así como las medidas estadísticas de bondad de ajuste.

Finalmente, se realizó el análisis para el caso específico del Estado de Zacatecas, la metodología fue la misma. Se analizaron los casos reportados desde la llegada del síndrome, 1986, y hasta el 2012. Nuevamente, al construir la tabla con los datos acumulados, se presenta un comportamiento tipo sigmoïdal, de Gompertz. En la figura 6 se presentan los datos usados (SSZ, 2013), la gráfica con los datos acumulados por año y la curva



(a) Vía Sexual

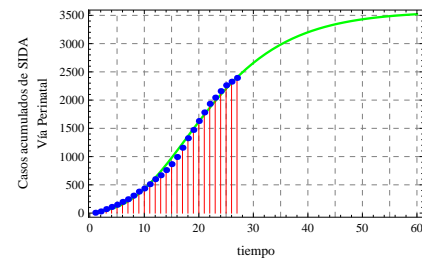
Vía Perinatal

$$N(t) = 210,857.1214e^{-7.1608e^{-0.0795t}}$$

Error cuadrático 18.2 %

Error cuadrático medio 0.65 %

Correlación $r=0.99365$



(b) $N(t) = 3,575.6279e^{-5.66817e^{-0.09385t}}$

Error cuadrático 13.02 %

Error cuadrático medio 0.52 %

Correlación $r=0.99592$

Figura 5: Casos de SIDA por vía de contagio, en México de 1983 a 2012, reportados y acumulado.

de Gompertz que mejor se ajustó, así como los indicadores estadísticos.

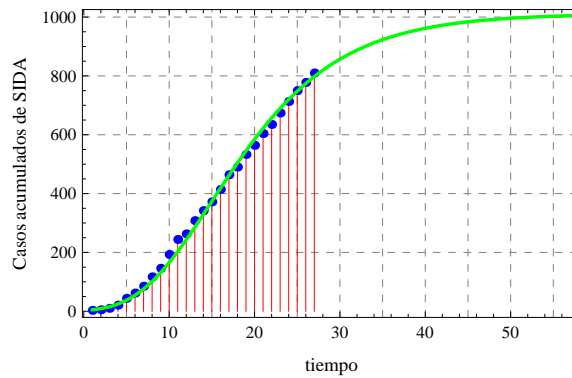
3 Análisis de resultados

Es posible hacer un análisis comparativo, por sectores, del comportamiento de la epidemia, únicamente considerando los valores que toman los parámetros α y β de los respectivos modelos de Gompertz ajustados. Si se analiza la ecuación diferencial de Gompertz, resulta sencillo determinar el punto en el que ocurre el cambio de concavidad, éste ocurre cuando la segunda derivada se anula, esto es:

$$K\alpha\beta^2e^{-\alpha e^{-\beta t}-\beta t}[\alpha e^{-\beta t} - 1] = 0$$

esto ocurre solamente cuando $\alpha = e^{\beta t}$. Esto es, el punto de inflexión depende tanto del valor de β , como del valor de α . De donde $\alpha > 0$ siempre; además, si α es grande, el punto de inflexión ocurre en tiempos cada vez posteriores. En lo que

| Zacatecas | | |
|-----------|------------------------------|--------------------------|
| Año | Casos de SIDA diagnosticados | Casos de SIDA acumulados |
| 1986 | 3 | 3 |
| 1987 | 2 | 5 |
| 1988 | 5 | 10 |
| 1989 | 11 | 21 |
| 1990 | 23 | 44 |
| 1991 | 18 | 62 |
| 1992 | 23 | 85 |
| 1993 | 32 | 117 |
| 1994 | 29 | 146 |
| 1995 | 47 | 193 |
| 1996 | 51 | 244 |
| 1997 | 19 | 263 |
| 1998 | 45 | 308 |
| 1999 | 34 | 342 |
| 2000 | 30 | 372 |
| 2001 | 42 | 414 |
| 2002 | 50 | 464 |
| 2003 | 26 | 490 |
| 2004 | 43 | 533 |
| 2005 | 31 | 564 |
| 2006 | 40 | 604 |
| 2007 | 31 | 635 |
| 2008 | 39 | 674 |
| 2009 | 39 | 713 |
| 2010 | 37 | 750 |
| 2011 | 28 | 778 |
| 2012 | 32 | 810 |



$$N(t) = 1,011.2008e^{-5.9921e^{-0.119624t}}$$

Error cuadrático 10.44
 Error cuadrático medio 0.41
 Correlación $r=0.9978$

Figura 6: Tabla de diagnósticos de SIDA por año en el estado de Zacatecas de 1986 al 2012. En la gráfica se muestran los datos acumulados (punteado), así como el ajuste de Gompertz (curva continua) y la ecuación e indicadores estadísticos de la bondad de ajuste.

se refiere al parámetro β , se observa que, dado que $t = \frac{\ln \alpha}{\beta}$, ocurren dos situaciones, entre más pequeño es el valor de β , entonces el punto de inflexión ocurre en tiempo posterior; sin embargo, hay una proporcionalidad directa entre el valor máximo esperado para la primer derivada de la curva de Gompertz (que en este caso coincide con los datos reportados por año, no acumulado).

4 Conclusiones

La epidemia a nivel Nacional, en jóvenes hombres o mujeres, tiene un valor de β similar (0.09662, 0.0918 y 0.09078, respectivamente), pero valores diferentes de α (7.3010, 6.8857 y 7.4397, respectivamente), siendo el menor el caso de hombres, lo que nos indica que el punto de inflexión, y por lo tanto la estabilización, se dará antes. Cuando se hace el comparativo, ahora tomando las vías de contagio, observamos que la vía sexual presenta un parámetro α significativamente mayor al de la transmisión por la vía perinatal (7.1608 y 5.6681, respectivamente). Esto se interpreta como una estabilización más lenta. Sin embargo es un valor similar a los obtenidos en el caso Nacional y al de mujeres jóvenes. Para el parámetro β , se

tiene disparidad de nuevo, la vía sexual toma un valor menor en una centésima (0.07953 y 0.09385). La interpretación de ésta es que se espera un valor máximo mayor, es decir, un pico más alto en el reporte anual de casos.

Al analizar el caso particular del Estado de Zacatecas, en comparación con el caso Nacional, se observa que se tiene un valor menor de α (5.9921 y 7.3010), comparable solo con el del caso perinatal Nacional. Esto nos indica una estabilización más temprana. Al analizar el caso del parámetro β , ocurre que éste es el mayor de todas las situaciones (0.1196), lo que cusa un retraso en la estabilización, pero que se ve compensado con un valor máximo esperado relativamente pequeño.

5 Comentarios finales

El análisis aquí presentado, habilita una nueva forma de hacer estimaciones comparativas en diferentes escenarios de la epidemia. Esta forma de hacer comparativos es una herramienta objetiva medible, y deja de lado la ambigüedad que pudiera presentarse en un comparativo basado solo en proporcionalidad de poblaciones.

Referencias

- [1] Annadurai G., Rajesh Babu, S., Srinivasamoorthy V. R., "Development of mathematical models (logistic, Gompertz and Richards models) describing the growth pattern of *Pseudomonas putida* (NICN 2174)", Bioprocess Engineering 23, pp. 607-612, (2000).
- [2] CENSIDA, "Vigilancia Epidemiológica de casos de VIH/SIDA en México Registro Nacional de casos de SIDA", CENSIDA 2013, consulta realizada el 01 de agosto de 2013. Dirección de internet <http://www.censida.salud.gob.mx/>.
- [3] Córdova Villalobos J. A., Ponce de León Rosales S., Valdespino, J. L. "25 años de SIDA en México. Logros, desaciertos y retos". México: Instituto Nacional de Salud Pública, (2009).
- [4] Esteva L., Hernández J., Gómez G., Zapata M., "Matemáticas y epidemiología", Ciencias, 24, pp. 57-62, (1991).
- [5] Faustino Sánchez J. L., "Matemáticas para las Ciencias Naturales", Sociedad Matemática Mexicana, México, (1998).
- [6] Gompertz, B., "On the nature of the function expressive of the law of human mortality, and on a new mode of determining the value of life contingencies", Philosophical Transactions of the Royal Society London 36, p. 513, (1825).
- [7] Hirimoto K., Hofuku I., Oshima K., "Population dynamics of HIV positive by application of a locally modified Gompertz curve: a case study for Japan", Nonlinear Analysis Theory, Methods & Applications, 30, 2, pp. 985-993, (1997).
- [8] Izquierdo-Kulich E., Regalado O. Nieto-Villar M. J. "Origen fractal de la Ecuación de Gompertz", Revista Cubana de Física., 30, pp. 26-27, (2013).
- [9] Izquierdo-Kulich E., Nieto-Villar J. M., E. Izquierdo and J. M. Nieto-Villar, "Morphogenesis of the Tumour Patterns" Mathematical Biosciences and Engineering 5, pp. 299-313, (2008).
- [10] Katsuhisa H. y Ichiro Hofuku, K. O., "Population Dynamics of HIV Positive by application of a locally modified Gompertz curve: a case study for Japan", Nonlinear Analysis Theory, Methods & Applications, Vol. 30, No. 2, pp 985-993, 1997.
- [11] Laird A. K. "Dynamics of tumour growth", British journal of cancer 18, pp. 490-502, (1964).
- [12] Norton L, "Conceptual and practical implications of breast tissue geometry: toward a more effective, less toxic therapy", Oncologist 10, pp.370-380, (2005).
- [13] P. Waliszewski P., Konerski J., "The Gompertzian curve reveals fractal properties of tumor growth", Chaos, Solitons and Fractals, 16, pp. 665-674, (2003).
- [14] Servicios de Salud del Estado de Zacatecas, Datos Históricos y Estadísticos del Programa Estatal de VIH/SIDA/ITS, (2013).

Estudio de las ondas viajeras en el modelo de Gray-Scott

C. A. Rosales Alcantar, D. Olmos Liceaga*

*Departamento de Matemáticas, Universidad de Sonora.

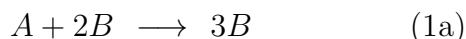
Diciembre, 2015

Resumen

El modelo químico Gray-Scott representa la dinámica de la reacción autocatalítica cúbica en su mínima expresión. Este modelo químico comenzó a ser estudiado por Peter Gray y Stephen Scott en los años 80, con el fin de analizar las características primordiales que propician las dinámicas complejas de esta reacción química. Por lo tanto, el presente trabajo se enfoca en presentar los distintos escenarios que presenta el modelo, contrastando el efecto que se tiene al tener hipótesis de dependencia o independencia química y de tener hipótesis de homogeneidad o heterogeneidad en el sistema. Como principal resultado, se mostrará numéricamente que el modelo presenta los fenómenos de reflexión de onda y de nacimiento de onda. Además, se dará una explicación del motivo por el cual se suscitan éstos fenómenos.

1 Introducción

El modelo de Gray-Scott [2], llamado así en honor a Peter Gray y Stephen Scott, representa el modelo matemático que describe la reacción química autocatalítica



cuando ésta ocurre en un reactor CSTR, el cual es un reactor de flujo constante con agitación constante. En la reacción autocatalítica, B es un catalizador, A es una especie química que reacciona con B , y C representa los productos inertes en los que se convierte B .

Este modelo químico, al igual que sus contemporáneos como el Oregonator ([1]) y el Brusselator ([10]), presenta el fenómeno de oscilaciones periódicas, pero tiene la peculiaridad de ser representado por menos reacciones químicas, lo cual es una gran ganancia.

Actualmente, este modelo matemático, tiene una gran cantidad de referencias y además, tiene la propiedad de que es el modelo químico **más sencillo** que posee una riqueza en términos matemáticos de escenarios, patrones y oscilaciones.

Algunos investigadores como Hale ([6], [7]), Peletier ([8]) y Petrov y Showalter ([9]) han trabajado en el modelo, modificando la hipótesis de homogeneidad por la hipótesis de heterogeneidad, logrando tener un modelo de Reacción-Difusión, la cual se suscita en reactores tipo CFUR (Continuous Fed Unstirred Reactor).

Los resultados obtenidos por ellos han sido muy importantes, pues han determinado la existencia de ondas viajeras en el sistema, que poseen características y propiedades interesantes. Han encontrado regiones donde se suscitan oscilaciones, tanto en el espacio como en el tiempo ([9]), pero también han encontrado ondas estacionarias y estudiado su estabilidad ([6], [7]).

Dado todo esto, en este trabajo mostraremos los resultados más importantes de Gray-Scott ([2], [3], [4]) y los resultados de Petrov et. al. ([9]), los cuales incluyen los fenómenos de **wave-reflection** y **wave-splitting**, como se puede apreciar en la figura 1.

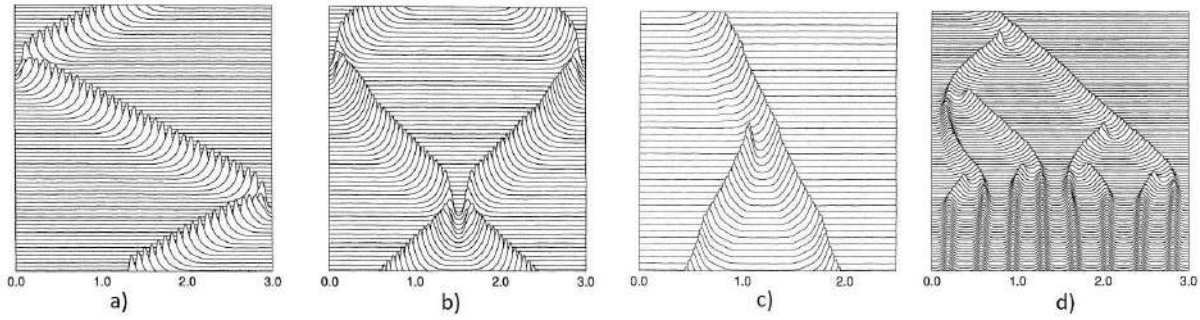
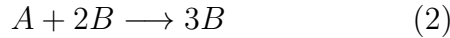


Figura 1: Figura tomada de [9]. (a) Onda viajera que presenta el fenómeno **wave-reflection**, respecto a los bordes. (b) Ondas viajeras que presentan el **wave-reflection** entre sí y con los bordes. (c) Onda viajera que presenta el **wave-splitting**. (d) Panorama general que presenta el **wave-splitting**, al saturar el medio.

2 Autocatálisis sin decaimiento

El inicio del trabajo consiste en analizar la reacción de autocatálisis cúbica



mediante la ley de acción de masas, donde A representa el reactante químico y B representa el autocatalizador de la reacción. Esta reacción se modela en un reactor tipo CSTR, el cual posee las condiciones de llenado continuo, volumen constante y agitación constante, es decir, trabajaremos con una mezcla idealmente homogénea.

El cambio del reactante A en función del tiempo se puede modelar matemáticamente, introduciendo las propiedades del reactor CSTR, de la siguiente manera:

$$\frac{da}{dt} = \frac{(a_0 - a)}{t_r} - ka(a_0 + b_0 - a)^2 \quad (3)$$

mientras que el cambio del compuesto autocatalítico B queda determinado por la siguiente relación

$$b = a_0 + b_0 - a \quad (4)$$

donde a y b representan las concentraciones de las especies químicas A y B , respectivamente. De la misma manera, k es la velocidad de la reacción química (2), t_r representa el tiempo de residencia de la concentración A en el reactor y a_0 representa el flujo de entrada de A .

Para efectos del trabajo, el análisis de soluciones se realizó utilizando la versión adimensionalizada de (3) siguiente

nalizada de (3) siguiente

$$\frac{d\gamma}{d\tau} = \frac{27}{4} (1 - \gamma) (\gamma + \beta_0)^2 - \frac{\gamma}{\tau_r} \quad (5)$$

donde

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{a_0 - a}{a_0}, \quad \tau = \frac{4}{27} ka_0^2 t, \\ \tau_r &= \frac{4}{27} ka_0^2 t_r, \quad \beta_0 = \frac{b_0}{a_0}. \end{aligned} \quad (6)$$

De la definición de γ , se observa que tiene sentido químico cuando $\gamma \in [-\frac{b_0}{a_0}, 1]$.

2.1. Análisis de ecuación (5) para distintos valores de β_0 e interpretación química

a) Cuando $\beta_0 = 0$, se observa que las raíces de (5) son $\gamma_1 = 0$ y $\gamma_{\pm} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{16}{27\tau_r}} \right)$. Se puede observar que cuando $\tau_r < \frac{16}{27}$, solo existe un equilibrio, el cual es estable. Por tanto, al tomar una condición inicial γ_0 en el intervalo $(0, 1]$, el flujo del sistema nos llevará a $\gamma_1 = 0$. Por tal motivo, para $\tau_r < \frac{16}{27}$, el sistema original llega al equilibrio $a = a_0$ y $b = 0$.

Por otro lado, si $\tau_r > \frac{16}{27}$, entonces existen 2 equilibrios, $\gamma_1 = 0$ y γ_+ , estables y un equilibrio inestable, γ_- . Por tanto, si tomamos una condición inicial en el intervalo $[0, \gamma_-)$, por el flujo del sistema, ésta terminará en el equilibrio estable $\gamma_1 = 0$. En tanto, si tomamos una condición inicial en el intervalo $(\gamma_-, 1]$, el

flujo del sistema la moverá hacia el equilibrio estable γ_+ .

b) Caso $0 < \beta_0 < 0.125$. Si tomamos τ_r que cumpla (1) del lema 1.4 de [11], entonces solo existe un equilibrio. Por tanto, al tomar cualquier condición inicial $\gamma_0 \in [-\beta_0, 1]$, el flujo del sistema llevará a la condición inicial al equilibrio determinado. En cambio, cuando elegimos τ_r que cumpla (2) del lema 1.4 de [11], suceden los fenómenos químicos conocidos como ignición y extinción. Estos fenómenos indican que, si perturbamos el parámetro que determina las estabildades (en este caso, τ_r), el sistema puede ir de un equilibrio estable a otro, en un instante de tiempo muy corto. Este fenómeno se observa en los puntos fijos donde sucede la bifurcación silla-nodo. Y para terminar, sea elegimos τ_r que cumpla (3) del lema 1.4 de [11], entonces hay 3 equilibrios. En este caso, el valor de la condición inicial γ_0 determinará hacia que equilibrio se dirigirá el flujo.

c) Caso $\beta_0 \geq 0.125$. Al tener sólo un equilibrio estable, entonces toda condición inicial γ_0 que tomemos en el intervalo $[-\beta_0, 1]$, va a tender al equilibrio. En términos de las variables originales a y b , quiere decir que sin importar la condición inicial que se tome, el flujo del sistema no permitirá que una de las especies químicas desaparezca.

3 Autocatálisis con decaimiento

Los casos estudiados en el capítulo 1 se realizaron bajo la premisa que el compuesto autocatalítico B no tiene un decaimiento. Ahora, en este capítulo, el estudio del modelo Gray-Scott se sigue en esa dirección. En concreto, se estudió el siguiente modelo químico

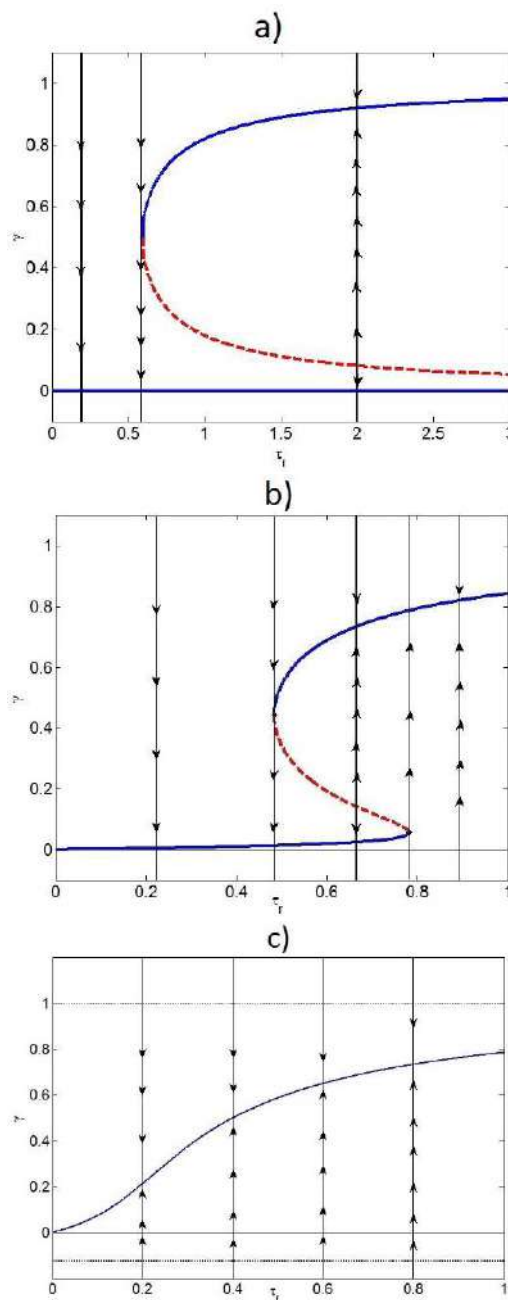
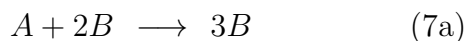


Figura 2: a) Retrato fase del sistema (5) cuando $\beta_0 = 0$. b) Retrato fase del sistema (5) para $0 < \beta_0 < 0.125$. c) Retrato fase del sistema (5) cuando $\beta_0 > 0.125$. En color azul se denotan los equilibrios estables y en color rojo, el equilibrio inestable. Las flechas indican la dirección del flujo en cada región.

donde las variables a y b , que representan a las concentraciones de A y B , respectivamente, son independientes, pues no cumplen una condición de balance de volumen. El estudio de este modelo químico se realizó en 2 etapas:

1. La primera de ellas consiste en analizar el modelo (7) cuando el catalizador B no presenta flujo de entrada; a este modelo le llamaremos **Modelo S**.
2. La segunda etapa consiste en estudiar el modelo (7) cuando el catalizador B presenta flujo de entrada; a este modelo le llamaremos **Modelo C**.

A continuación mencionaremos los resultados más importantes del **Modelo C**.

3.1. Estudio del Modelo C

El modelo C, considera la hipótesis de que el catalizador B tiene un flujo de entrada constante. Así, el modelo, vía ley de acción de masas, de (7) se observa como:

$$\frac{da}{dt} = \frac{a_0 - a}{t_r} - k_1 ab^2 \quad (8a)$$

$$\frac{db}{dt} = \frac{b_0 - b}{t_r} + k_1 ab^2 - k_2 b \quad (8b)$$

donde se tiene que k_1 representa la tasa de reacción de (7a), k_2 representa la tasa de reacción de (7b), a_0 representa el flujo de entrada del reactante A , b_0 representa el flujo de entrada del compuesto autocatalítico B y t_r representa el tiempo de residencia, que servirá como parámetro indicador del modelo. El término $\frac{b_0 - b}{t_r}$ de (8b) influye de manera muy notable en la dinámica del sistema. Se incrementan los distintos escenarios al modificar los parámetros del sistema, como por ejemplo, sistemas con 2 órbitas periódicas. (ver [5].)

Para facilitar el trabajo, se considero el siguiente modelo adimensionalizado de (8) por

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{d\tau} &= \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha\beta^2 \\ \frac{d\beta}{d\tau} &= \frac{\beta_0 - \beta}{\tau_r} + \alpha\beta^2 - \kappa_2\beta \end{aligned} \quad (9a)$$

donde

$$\alpha = \frac{a}{a_0}, \beta = \frac{b}{a_0}, \tau = k_1 a_0^2 t, \quad (10)$$

$$\tau_r = k_1 a_0^2 t_r, \kappa_2 = \frac{k_2}{k_1 a_0^2}, \beta_0 = \frac{b_0}{a_0}. \quad (11)$$

Los puntos fijos de (9) son difíciles de calcular. Sin embargo, se conocen las condiciones para que sucedan dos equilibrios. Se sabe que cuando

$$\alpha = \frac{3 \pm \sqrt{1 - 8\beta_0}}{4} \quad (12)$$

se tienen raíces dobles para los parámetros

$$\tau_r = \frac{S^\pm - 2\kappa_2 \pm \sqrt{S^\pm (S^\pm - 4\kappa_2)}}{2\kappa_2^2},$$

donde

$$S^\pm = \frac{1}{8} \left[1 + 20\beta_0 - 8\beta_0^2 \pm \sqrt{(1 - 8\beta_0)^3} \right].$$

Por tanto, en el plano $\tau_r - \alpha$, existen hasta 4 puntos donde surge la tangencialidad (o bien, bifurcaciones silla-nodo). Todo esto depende de los valores de β_0 y de κ_2 . El análisis gráfico, se puede observar en la figura (3).

3.1.1. Excitabilidad

Considerando los parámetros $\tau_r = 315$, $\kappa_2 = \frac{1}{40}$ y $\beta_0 = \frac{1}{15}$, vamos a exhibir que el modelo (9) es excitable, es decir, existe un valor umbral β_{um} para el cual se cumple que el tiempo que tardan en llegar las soluciones al equilibrio por debajo de ese umbral es mucho menor que cuando las soluciones están por encima de ese umbral.

Para estos valores en el espacio de parámetros, el sistema presenta 3 equilibrios:

- $I = (0.29660075538769, 0.086767989009102)$, el cual tiene comportamiento inestable.
- $S = (0.89977755808206, 0.018804406964091)$, el cual tiene comportamiento de punto silla.
- $E = (0.93695506371563, 0.014615398177042)$, el cual tiene comportamiento estable.

Ahora, analicemos que sucede cuando perturbamos ligeramente el equilibrio estable E para valores mayores de β . Como se observa en la figura 4 (a), la respuesta del sistema a la perturbación en $\beta_1 = 0.016$ es nula, por tanto, el sistema tiende rápidamente al equilibrio. Esto mismo sucede cuando el sistema se perturba a $\beta_2 = 0.017$, aunque

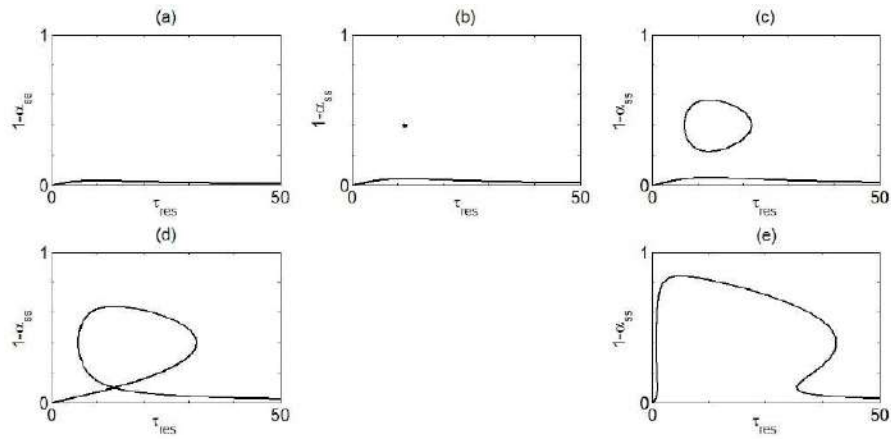


Figura 3: Los 5 escenarios posibles. (a) Para cada τ_r existe un equilibrio. (b) Para $\tau_r = \frac{1}{\kappa_2}$ existen 2 equilibrios, y para cualquier otro valor de τ_r , existe un equilibrio. (c) Existencia de una isola. (d) Intersección de la isola con el punto fijo que siempre existe. (e) Existencia de un hongo.

tarda ligeramente mas tiempo en llegar al equilibrio. El análisis interesante sucede cuando se vuelve a perturbar el equilibrio para $\beta_3 = 0.018$.

En este caso, la respuesta del sistema es mas drástica. En la figura 4 (a) se observa que la solución comienza a diverger, pero no es así. En la figura 4 (b) se puede observar la respuesta del sistema a esta perturbación. Esta respuesta comienza como una recta, en dirección noroeste, es decir, decayendo α y creciendo β . Luego, al alcanzar su máximo en β , comienza a decaer lentamente, obteniendo el mínimo de α . Después de esto, la trayectoria comienza a volver a crecer en α y decrecer en β paulatinamente, hasta llegar de nuevo al equilibrio E . De aquí concluimos que el umbral $\beta_{um} \in (0.017, 0.018)$.

4 Frentes de propagación en autocatálisis con decaimiento

Para terminar la tesis, el trabajo se enfocó en modelar con en reactores heterogéneos las reacciones (7). Se analizó el modelo de Gray-Scott con flujo de entrada (8) cuando éste presenta el fenómeno de excitabilidad para los valores $\tau_r = 315$, $\kappa_2 = \frac{1}{40}$ y $\beta_0 = \frac{1}{15}$.

Éste estudio se realizó mediante simulaciones numéricas bajo el esquema de diferencias finitas. Por simpleza, usaremos el modelo adimensional-

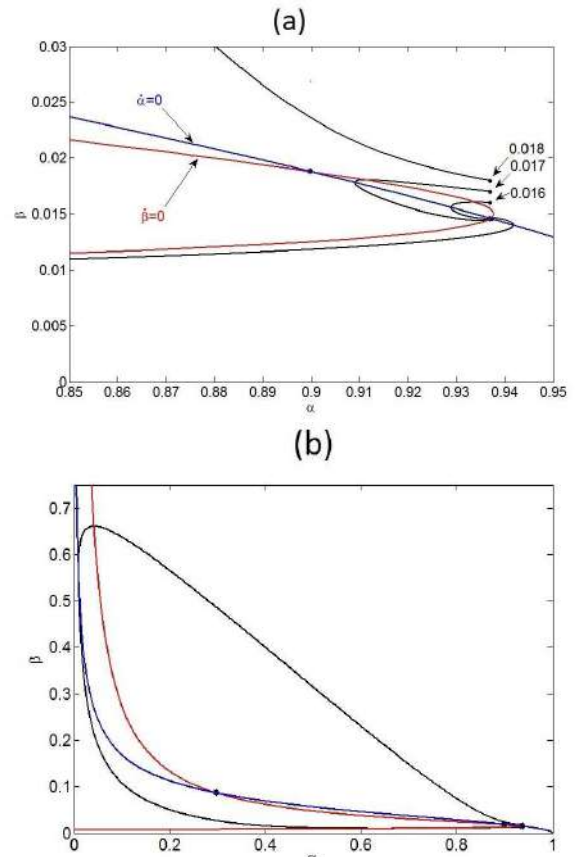


Figura 4: (a) Respuesta de sistema a las perturbaciones $\beta_1 = 0.016$, $\beta_2 = 0.017$ y $\beta_3 = 0.018$. En azul se observa la curva nula de α y en rojo se observa la curva nula de β . (b) Respuesta al sistema de Gray-Scott con flujo de entrada para la perturbación $\beta_3 = 0.018$.

zado (9) bajo hipótesis de difusión:

$$\alpha_\tau = \delta \nabla^2 \alpha + \frac{1 - \alpha}{\tau_r} - \alpha \beta^2, \quad (13a)$$

$$\beta_\tau = \nabla^2 \beta + \frac{\beta_0 - \beta}{\tau_r} + \alpha \beta^2 - \kappa_2 \beta, \quad (13b)$$

donde $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ representan las concentraciones de A y B , respectivamente, en el tiempo τ y la posición y . Así mismo, $\delta = \frac{D_A}{D_B}$ representa la razón entre los coeficientes de difusión D_A y D_B . Además, los parámetros κ_2 , τ_r y β_0 están definidas como en el capítulo 2.

Los casos donde pondremos énfasis para estudiar, serán cuando $\delta = 7$ y $\delta = 17$, es decir, casos donde $D_A \gg D_B$. Éstas soluciones ya han sido estudiados en [9]. Las simulaciones numéricas se realizarán utilizando el esquema de diferencias finitas explícitas. Se considerará el espacio $[0, 1000] \times [0, 10000]$ y los tamaños de paso serán $dy = 3.3$ y $d\tau = 0.01$. Además, tomaremos condiciones de frontera de Neumann de cero-flujo:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad y \quad \frac{\partial \beta}{\partial \mathbf{n}} = 0 \quad (14)$$

\mathbf{n} : es el vector normal a $\partial [0, 1000]$; y en cada caso de estudio, se plantea la condición inicial a usar.

4.1. Casos de estudio y resultados

1. Con $\delta = 7$ y la siguiente condición inicial:

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \\ b_0 & \text{si } y > 100 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$, se observó que la condición inicial α_0 y β_0 evoluciona a los pulsos mostrados en la figura 5. Estos pulsos tienen un gradiente alto en la parte frontal de la onda y en la parte trasera de ésta, tienen un gradiente bajo. Ésto se debe a la difusión que tiene el sistema (13) y además, brinda la pauta para que las ondas se desplacen en la dirección donde se encuentra el gradiente mayor. Otra propiedad que tienen los pulsos es que ellos

rebotan con los bordes $y = 0$ y $y = 1000$, alternando en cada rebote la ubicación del gradiente alto y del gradiente bajo en el pulso.

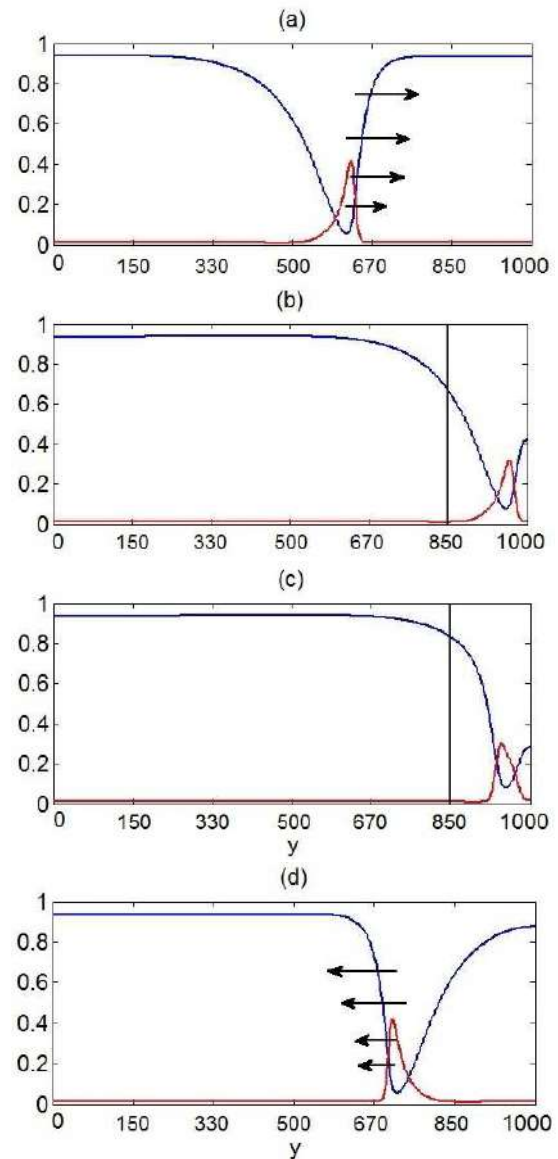


Figura 5: Por escribir

2. Con $\delta = 7$ y la siguiente condición inicial

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \text{ o } y \geq 900 \\ b_0 & \text{si } 100 < y < 900 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$, las simulaciones numéricas muestran que las perturbaciones realizadas generan 2 pulsos, los

cuales viajan en direcciones opuestas. Conforme τ crece, los frentes llegan a encontrarse en $y = 500$, donde notamos que las ondas no se condensan en una sola, sino que se repelen una a la otra, motivando que cambien de dirección. Éste hallazgo nos indica que la recta $y = 500$ es un eje de simetría, el cual a su vez funciona como borde de reflexión para cada una de las ondas viajeras, además de los bordes en $y = 0$ y $y = 1000$. La figura 6 (b) muestra las ondas viajeras avanzando en dirección opuesta a como aparecen en la figura 6 (a), después de haber chocado entre sí y rebotar.

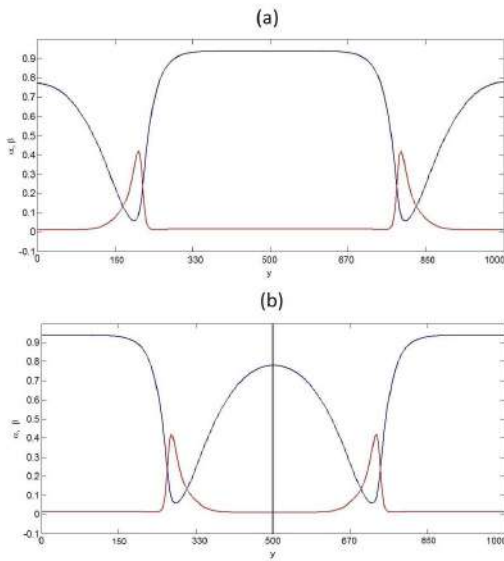


Figura 6: (a) En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 5$. (b) En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. En negro se muestra la recta $y = 500$. Ambos perfiles han sido tomados en un tiempo $\tau = 20$.

3. Con $\delta = 17$ y

$$\alpha(y, 0) = a_0 \quad \forall y \in [0, 1000]$$

$$\beta(y, 0) = \begin{cases} 0.1 & \text{si } y \leq 100 \\ b_0 & \text{si } y > 100 \end{cases}$$

donde $a_0 = 0.936955$ y $b_0 = 0.014615$, las simulaciones numéricas muestran que la parte trasera de los pulsos se excitan, de forma que surge el nacimiento de otro pulso.

El cambio en los perfiles se puede observar en la figura 8. Este proceso continua sucediendo hasta que se satura el sistema, tal como se puede apreciar en la figura 7.

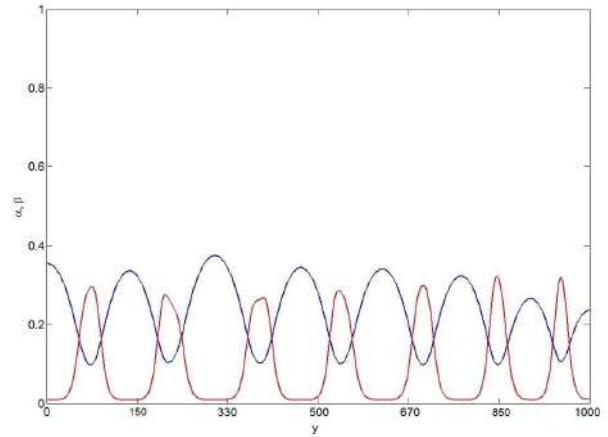


Figura 7: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. Estos perfiles muestran el fenómeno de saturación de ondas.

Como se puede observar en las gráficas 7 y 8 en comparación a los casos anteriores, es que ahora no sólo se tiene un efecto de reflexión con respecto a los bordes, sino además, sucede el fenómeno de **nacimiento de onda**. ¿A qué se debe esto? La alta difusividad que se tiene del reactante A respecto a la difusividad del compuesto catalítico B , en este caso, es la causante de este fenómeno.

Recordemos que en el caso cuando $\delta = 7$, cuando fijabamos un valor sobre el eje y y la onda pasaba a través de él, los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ parece que recorren la órbita de excitabilidad, terminando en el equilibrio estable. Ahora bien, el valor de δ en este caso de estudio es 17. Esto quiere decir que, conforme los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ se acercan al valor del equilibrio estable, la alta difusión provoca que los valores de $\alpha(y, \tau)$ y $\beta(y, \tau)$ salten por encima del umbral de excitabilidad. Así, el punto vuelve a recorrer la trayectoria de excitabilidad y, por ende, se crea otra onda en la parte trasera de la onda que ya teníamos.

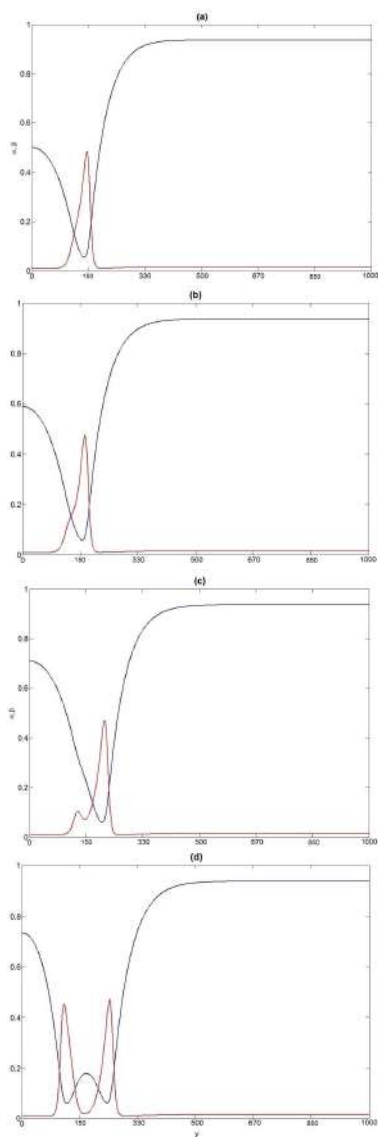


Figura 8: En azul, se muestra el perfil de $\alpha(y, \tau)$. En rojo, se muestra el perfil de $\beta(y, \tau)$. (a) Perfiles al tiempo $\tau = 5$ (b) Perfiles al tiempo $\tau = 7$ (c) Perfiles al tiempo $\tau = 10$ (d) Perfiles al tiempo $\tau = 15$.

Referencias

- [1] Richard J Field. Limit cycle oscillations in the reversible oregonator. *The Journal of Chemical Physics*, 63(6):2289–2296, 1975.
- [2] P. Gray and S.K. Scott. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: isolas and other forms of multistability. *Chemical Engineering Science*, 38(1):29–43, 1983.
- [3] P. Gray and S.K. Scott. Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: Oscillations and instabilities in the system $a + 2b \rightarrow 3b; b \rightarrow c$. *Chemical Engineering Science*, 39(6):1087–1097, 1984.
- [4] P. Gray and S.K. Scott. Sustained oscillations and other exotic patterns of behavior in isothermal reactions. *The Journal of Physical Chemistry*, 89(1):22–32, 1985.
- [5] Peter Gray and Stephen K Scott. *Hola Chemical oscillations and instabilities: nonlinear chemical kinetics*. Clarendon Press. Oxford University Press, 1990.
- [6] J.K. Hale, L.A. Peletier, and W.C. Troy. Stability and instability in the gray-scott model: the case of equal diffusivities. *Applied mathematics letters*, 12(4):59–65, 1999.
- [7] J.K. Hale, L.A. Peletier, and W.C. Troy. Exact homoclinic and heteroclinic solutions of the gray-scott model for autocatalysis. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 61(1):102–130, 2000.
- [8] L.A. Peletier. Pulses, kinks and fronts in the gray-scott model (nonlinear diffusive systems: Dynamics and asymptotics). 1178:16–28, 2000.
- [9] Valery Petrov, Stephen K. Scott, and Kenneth Showalter. Excitability, wave reflection, and wave splitting in a cubic autocatalysis reaction-diffusion system. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*, 347(1685):631–642, 1994.
- [10] Ilya Prigogine and René Lefever. Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. ii. *The Journal of Chemical Physics*, 48(4):1695–1700, 1968.
- [11] Cesar Alberto Rosales-Alcantar. *Tesis de Licenciatura: Estudio de las ondas viajeras en el modelo de Gray-Scott*. Universidad de Sonora, 2014.

Solución numérica de la ecuación de advección empleando mallas estructuradas sobre regiones planas irregulares utilizando un esquema de diferencias finitas

G. Tinoco Guerrero F. J. Domínguez Mota*
J. G. Tinoco Ruiz*

*Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, U.M.S.N.H

Diciembre, 2015

Resumen

Hoy en día nos encontramos con el problema de resolver las ecuaciones de cuerpos de agua poco profundas en regiones irregulares; estas ecuaciones son muy importantes para poder modelar el comportamiento de líquidos que tengan la característica de que su extensión es mucho mayor que su profundidad. Uno de los bloques importantes para lograr resolver estas ecuaciones, es la ecuación de advección. En este trabajo, se proponen algunos esquemas para aproximar la solución de la ecuación de advección en regiones irregulares en el plano, utilizando una variación del método de diferencias finitas en mallas convexas y estructuradas.

1 Introducción

Consideremos el problema de obtener una aproximación en diferencias finitas a la solución del problema de advección

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = 0 \quad [0, T] \times \Omega, \quad a, b \in \mathbb{R},$$

$$u(x, y, 0) = g(x, y),$$

$$u(x, y, t)|_{S_1} = h(x, y, t),$$

donde Ω es un dominio plano simplemente conexo y $\partial\Omega$ es un polígono de Jordan orientado de manera positiva, de tal manera que $\partial\Omega = S_1 \cup S_2$ donde S_1 y S_2 están conectados.

En especial, a nosotros nos interesa aproximar la solución en regiones Ω que cumplan con ser irregulares, no rectangulares y no simétricas, para las cuales es necesario generar mallas convexas minimizando un funcional adecuado. Los funcionales armónicos y de área [1, 2], implementados

en UNAMalla [3], pueden ser usados para generar mallas estructuradas de una gran variedad de dominios simplemente conexos en el plano.

2 Esquema de Lax-Wendroff propuesto

Para aproximar el operador lineal básico de segundo orden

$$L = Au_{xx} + Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F \quad (1)$$

en el punto p_0 utilizando aproximaciones a los valores de u en algunos puntos vecinos p_1, \dots, p_q de p_0 , utilizamos un esquema de diferencias finitas en p_0 , el cual se puede escribir como la combinación lineal

$$L_0 = \Gamma_0 u(p_0) + \Gamma_1 u(p_1) + \dots + \Gamma_q u(p_q). \quad (2)$$

Consideramos que este esquema es consistente si

$$[Lu]_{p_0} - L_0 \rightarrow 0$$

cuando $p_1, \dots, p_q \rightarrow p_0$ [4]. Utilizando los primeros seis términos de la expansión en series de Taylor hasta segundo orden, de la condición de consistencia se obtiene el sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & \Delta x_1 & \dots & \Delta x_q \\ 0 & \Delta y_1 & \dots & \Delta y_q \\ 0 & (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_q)^2 \\ 0 & \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_q \Delta y_q \\ 0 & (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_q)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_0 \\ \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F(p_0) \\ D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Debemos notar que el sistema definido en (3) tiene 6 ecuaciones y $q + 1$ incógnitas, por lo que, en la mayoría de los casos, resulta estar mal determinado, y una manera de resolverlo es utilizando mínimos cuadrados. Si consideramos únicamente las últimas 5 ecuaciones de (3), obtenemos el sistema de ecuaciones reducido

$$\begin{pmatrix} \Delta x_1 & \dots & \Delta x_q \\ \Delta y_1 & \dots & \Delta y_q \\ (\Delta x_1)^2 & \dots & (\Delta x_q)^2 \\ \Delta x_1 \Delta y_1 & \dots & \Delta x_q \Delta y_q \\ (\Delta y_1)^2 & \dots & (\Delta y_q)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(p_0) \\ E(p_0) \\ 2A(p_0) \\ B(p_0) \\ 2C(p_0) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

Este nuevo sistema puede resolverse utilizando la factorización de Cholesky de sus ecuaciones normales para conseguir los valores de $\Gamma_1, \dots, \Gamma_q$. Después, para calcular Γ_0 utilizamos la primera ecuación del sistema (3)

$$\Gamma_0 = -\Gamma_1 \dots - \Gamma_q + F(p_0). \quad (5)$$

De esta forma obtenemos el conjunto de coeficientes necesarios para definir el esquema (2) [5]. Para poder aplicar esta aproximación al esquema de Lax-Wendroff para la ecuación de advección

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad (6)$$

aplicamos la regla de la cadena a

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -a \frac{\partial u}{\partial x} - b \frac{\partial u}{\partial y}$$

para obtener

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ab \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2},$$

después, sustituimos las derivadas parciales en el desarrollo en serie de Taylor

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \frac{\partial u}{\partial t} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} (\Delta t)^2 + \dots$$

lo que arroja [6]

$$u(x, t + \Delta t) = u(x, t) + \left[-\Delta t \left(a \frac{\partial u}{\partial x} b \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left(a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ab \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \right] + \dots$$

Observemos que el esquema definido por las ecuaciones (4) y (5) se puede aplicar al operador

$$-\Delta t \left(a \frac{\partial u}{\partial x} + b \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left(a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ab \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right);$$

los coeficientes $\Gamma_0, \dots, \Gamma_q$ obtenidos definen el esquema modificado de Lax-Wendroff

$$u_0^{k+1} = u_0^k + \sum_{l=0}^q \Gamma_l (u_0, \dots, u_q) u_l^k, \quad (7)$$

donde k representa el nivel de tiempo.

El esquema (7) puede ser usado tanto en mallas estructuradas como en mallas no estructuradas. Como nosotros estamos interesados en mallas estructuradas, podemos aprovechar la estructura lógica dada por el par de índices en la malla $G = \{p_{i,j} | 1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n\}$ y utilizaremos un parche “upwind” que utiliza, para cada nodo de la malla, tres de sus vecinos, (fig 1) para obtener,

$$u_0^{k+1} = u_0^k + \Gamma_0 u_0^k + \Gamma_1 u_1^k + \Gamma_2 u_2^k + \Gamma_3 u_3^k, \quad (8)$$

donde $u_{i,j}^k$ es la aproximación a u en el punto i, j de la malla en el nivel de tiempo k , con $1 < i \leq m$, $1 < j \leq n$, $0 < k$.

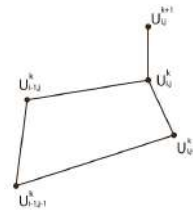


Figura 1: Parche “Upwind”.

Otra elección posible es elegir, para cada nodo de la malla, 5 de sus vecinos (fig. 2)

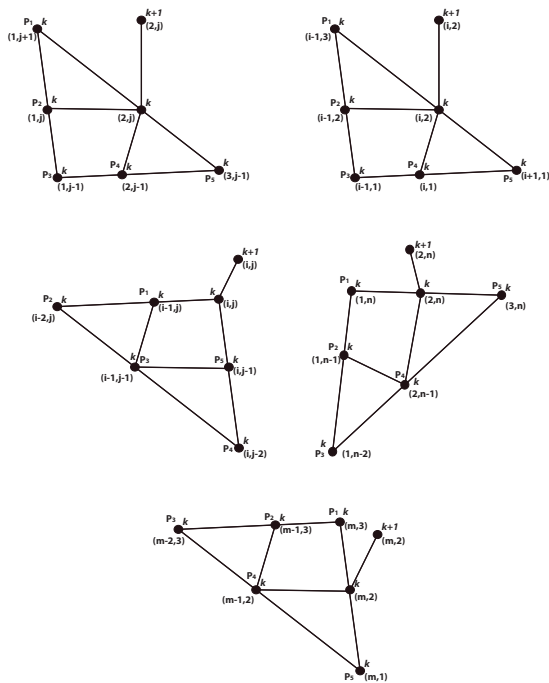


Figura 2: Diferentes stencils del esquema de seis puntos.

lo cual, para cada uno de los casos nos arroja

$$u_0^{k+1} = u_0^k + \Gamma_0 u_0^k + \Gamma_1 u_1^k + \dots + \Gamma_5 u_5^k$$

3 Pruebas Numéricas

Para las pruebas numéricas fueron seleccionadas dos regiones irregulares, se denotan como MIC y UCH. Todas ellas fueron escaladas y trasladadas al rectángulo $[0, 1] \times [0, 1]$. Para estas regiones se generaron mallas con 21 y 41 puntos por lado, utilizando el software UNAMALLA (fig. 3). Las siguientes funciones fueron seleccionadas para las pruebas como las condiciones inicial y de frontera en S_2

MIC: $u(x, y, t) = 0,2e^{((-x-0,4-0,3t)^2 - (y-0,25-0,3t)^2)/0,1}$,

UCH: $u(x, y, t) = 0,2e^{((-x-0,45-0,3t)^2 - (y-0,5-0,3t)^2)/0,1}$,

el intervalo de tiempo $[0, 1]$ se dividió uniformemente en 2023 subintervalos. Utilizando estos valores, ambos esquemas de Lax-Wendroff fueron aplicados en las mallas generadas.

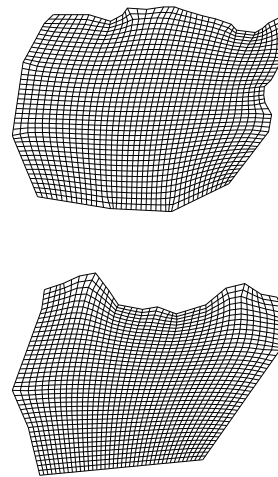


Figura 3: Mallas de 41×41 para las regiones MIC y UCH respectivamente.

En un tiempo dado k , los valores de las normas de los errores cuadráticos son calculados como la función de la malla

$$\|e^k\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j} (u_{i,j}^k - U_{i,j}^k)^2 \mathcal{A}_{i,j}}$$

donde $U_{i,j}^k$ y $u_{i,j}^k$ son el valor aproximado y el valor exacto, respectivamente, de la solución calculado en el elemento i, j , y $\mathcal{A}_{i,j}$ es el área del polígono definido por $\{P_{i+1,j}, P_{i,j+1}, P_{i-1,j}, P_{i,j-1}\}$. En las tablas (1) y (2) se muestran las comparaciones de los errores cuadráticos calculados para cada uno de los esquemas, calculados en diferentes niveles de tiempo .

| Tiempo | MIC6-41 | MIC4-41 | MIC6-81 | MIC4-81 |
|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 0.2 | 9.94689E-04 | 3.37870E-03 | 2.51720E-04 | 1.79819E-03 |
| 0.4 | 1.90578E-03 | 5.72534E-03 | 4.95780E-04 | 3.21863E-03 |
| 0.6 | 2.74889E-03 | 7.47673E-03 | 7.33288E-04 | 4.39042E-03 |
| 0.8 | 3.52592E-03 | 8.90078E-03 | 9.63062E-04 | 5.42054E-03 |
| 1 | 4.18341E-03 | 1.00509E-02 | 1.17664E-03 | 6.32403E-03 |
| 1.2 | 4.58228E-03 | 1.09010E-02 | 1.35114E-03 | 7.03036E-03 |
| 1.4 | 4.30207E-03 | 1.03554E-02 | 1.25441E-03 | 6.75443E-03 |
| 1.6 | 2.62256E-03 | 5.19720E-03 | 8.43889E-04 | 3.15201E-03 |
| 1.8 | 8.54396E-04 | 2.81098E-03 | 2.45275E-04 | 1.72499E-03 |
| 2 | 3.47884E-04 | 1.47913E-03 | 1.19442E-04 | 8.87659E-04 |

Tabla 1: Errores en mallas de MIC con esquema de 4 puntos y de 6 puntos.

| Tiempo | UCH6-41 | UCH4-41 | UCH6-81 | UCH4-81 |
|--------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 0.2 | 7.18202E-04 | 2.11223E-03 | 1.82321E-04 | 1.09235E-03 |
| 0.4 | 1.45774E-03 | 3.63714E-03 | 3.80097E-04 | 1.96817E-03 |
| 0.6 | 2.21738E-03 | 4.80409E-03 | 5.93608E-04 | 2.68195E-03 |
| 0.8 | 2.87029E-03 | 5.62231E-03 | 7.89542E-04 | 3.19847E-03 |
| 1 | 2.69085E-03 | 6.05978E-03 | 7.90683E-04 | 3.52662E-03 |
| 1.2 | 2.08307E-03 | 4.28012E-03 | 5.93355E-04 | 2.36662E-03 |
| 1.4 | 5.52660E-04 | 1.34209E-03 | 1.71576E-04 | 8.26164E-04 |
| 1.6 | 2.42048E-04 | 7.73178E-04 | 6.84829E-05 | 3.72653E-04 |
| 1.8 | 4.05732E-05 | 1.87926E-04 | 7.67959E-06 | 5.47649E-05 |
| 2 | 2.60173E-06 | 2.72907E-05 | 2.23069E-07 | 3.57997E-06 |

Tabla 2: Errores en mallas de UCH con esquema de 4 puntos y de 6 puntos.

4 Conclusiones

Como es descrito en [7] el esquema modificado de Lax-Wendroff definido en la ecuación (8) es una opción simple y económica de aproximar la solución de la ecuación de advección en algunas regiones planas irregulares utilizando mallas estructuradas. Sin embargo, la geometría de la región sigue representando un problema muy importante ya que no siempre se pueden cumplir las condiciones para lograr estabilidad en el método. Sin embargo, el esquema de seis puntos descrito logra superar algunos de estos inconvenientes, describiendo un esquema mucho más estable que obtiene resultados numéricos más precisos que el esquema de cuatro puntos.

Referencias

- [1] P. Barrera-Sánchez, L. Castellanos, F. J. Domínguez-Mota, G. F. González-Flores and A. Pérez-Domínguez, *Adaptive discrete harmonic grid generation*, *Math. Comput. Simulation*, 79 (2009), pp. 1792–1809.
- [2] P. Barrera-Sánchez, F. J. Domínguez-Mota, G. F. González-Flores and J. G. Tinoco-Ruiz, Generating quality structured convex grids on irregular regions, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 34 (2009), pp. 76–89.
- [3] UNAMALLA, *An Automatic Package for Numerical Grid Generation*, <http://www.matematicas.unam.mx/unamall>
- [4] M. Celia and W. Gray, *Numerical Methods for Differential Equations*, Prentice-Hall, 1992.
- [5] F. Domínguez-M., S. Mendoza and J. Tinoco, Finite Difference Schemes Satisfying an Optimality Condition, *MASCOT10 Proceedings*, (2011).
- [6] A. Iserles, *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, (2008).
- [7] F. Domínguez-M., J. Tinoco-R., G. Tinoco-G., P. Michel-F. and E. Ruiz-D., *A modified Lax-Wendroff scheme for irregular 2D space regions*, *MASCOT12 Proceedings*, (2012).

Homenaje al profesor Humberto Madrid

En el marco del IV Congreso Nacional de Innovación Tecnológica Educativa efectuado en la Universidad Politécnica de San Luis Potosí, se organizó el I Encuentro en Matemáticas Aplicadas los días 12 y 13 de noviembre, rindiendo un merecido homenaje al profesor Humberto Madrid de la Vega por su distinguida labor en las Matemáticas Aplicadas.

En el evento se reunieron amigos, colegas, compañeros de trabajo y ex-alumnos del profesor, los cuales presentaron trabajos en diversas áreas de la matemática aplicada como: análisis numérico, álgebra lineal numérica, optimización, aproximación, probabilidad y estadística y ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales.

Para más detalles sobre el evento visitar la página:

<http://mateaplicadas2015.blogspot.mx/>





1ER. ENCUENTRO DE MATEMÁTICAS APLICADAS

Reconocimiento al profesor
Humberto Madrid de la Vega
por su labor en las Matemáticas Aplicadas

Universidad Politécnica de San Luis Potosí, SLP, 12 y 13 de noviembre de 2015
<http://mateaplicadas2015.blogspot.mx/>



Próximos eventos

El V Encuentro Cuba- México de Métodos Numéricos y Optimización será realizado del 18 al 21 de enero de 2016, en la ciudad de La Habana, Cuba.

El objetivo principal del Encuentro es continuar desarrollando las relaciones de colaboración científica en las disciplinas de Métodos Numéricos y Optimización entre instituciones cubanas y mexicanas.

El Encuentro está dirigido a investigadores, profesores y estudiantes. Se realizarán dos tipos de actividades: cursos introductorios y presentación de ponencias. El Encuentro dará prioridad a las ponencias que presenten el estado del arte en algún tema de investigación de las siguientes temáticas:

- Álgebra Lineal Numérica
- Métodos de Interpolación y Aproximación
- Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales
- Optimización No-Lineal
- Software para Cómputo Científico

Para más detalles sobre el evento visitar la página:

<http://cubamex2016.blogspot.mx>

V Encuentro Cuba-México
Métodos Numéricos y Optimización
Del 18 al 21 de enero de 2016, La Habana, Cuba.

Álgebra Lineal Numérica
Métodos de Interpolación y Aproximación
Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales
Optimización no-lineal
Software para Cómputo Científico

<http://cubamex2016.blogspot.mx/>

Logos of participating institutions: ICTMAY, Universidad de la Habana, and others.

Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones

Consejo Directivo de la Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones
2013-2016

Dra. Rina Betzabeth Ojeda Castañeda.

Dr. Francisco Javier Domínguez Mota.

Dra. Irma Delia García Calvillo.

Dr. Justino Alávez Ramírez.

Dr. Pedro Flores Pérez.

Dr. Pablo Barrera Sánchez.

M.C. Francisco Cepeda Flores.

Presidenta

Vicepresidente

Secretaria

Tesorero

Vocal

Vocal

Secretario de Actas y Acuerdos

La Sociedad Mexicana de Computación Científica y sus Aplicaciones fue fundada el 16 de Mayo de 2013, para realizar actividades de investigación científica o tecnológica inscritas en el RENIECyT (Registro Nacional de Instituciones y Empresas Científicas y Tecnológicas), prestadas únicamente a los socios y asociados. Es una Asociación sin fines de lucro. Entre sus tareas fundamentales destacan: Conjuntar acciones e intereses comunes en los investigadores, profesores y estudiantes interesados en la Computación Científica y sus Aplicaciones, con el fin de fomentar la investigación de calidad, promover la actualización y el perfeccionamiento para el desarrollo científico, tecnológico y social; promover la creación, organización, acumulación y difusión de conocimientos referidos a la Computación Científica y sus Aplicaciones; promover la formación e interacción de redes y grupos de trabajo orientados hacia el desarrollo disciplinar, interdisciplinar y temático de la investigación; fomentar el desarrollo de la investigación sobre la Computación Científica y sus Aplicaciones en la República Mexicana; contribuir al mejoramiento de la enseñanza de la Computación Científica y sus Aplicaciones en la República Mexicana; promover y organizar toda clase de encuentros y eventos académicos orientados a la comunicación y discusión entre investigadores y profesores, así como también a la difusión del conocimiento hacia sectores interesados en la integración de la Computación Científica y sus Aplicaciones en los problemas de su sector.

Correo electrónico: smcca@smcca.org.mx

<http://www.smcca.org.mx>

