

Protocolo de Investigacion

Nombre del Autor

Posgrado en Ciencias en Ingeniería Química

Universidad Autónoma de San Luis Potosí

3 de febrero de 2026

Resumen

En este trabajo se presenta la formulación matemática, el análisis dinámico y la implementación computacional de sistemas descritos mediante ecuaciones diferenciales ordinarias y ecuaciones de reacción-difusión. Se estudian los supuestos físicos involucrados, la estabilidad de soluciones y la resolución numérica mediante métodos estándar. La implementación en Python permite reproducir los resultados y analizar escenarios dinámicos relevantes para sistemas químicos y biológicos.

Palabras clave: ecuaciones diferenciales, reacción-difusión, modelación matemática, simulación numérica.

1. Introducción

Segun la Organizacion Mundial de la Salud (OMS), se denomina cancer a un amplio grupo de enfermedades que pueden afectar a cualquier parte del organismo; también se habla de «tumores malignos» o «neoplasias malignas». Una característica definitoria del cáncer es la multiplicación rápida de células anormales que se extienden más allá de sus límites habituales y pueden invadir partes adyacentes del cuerpo o propagarse a otros órganos, en un proceso que se denomina «metástasis». En 2020 fue la primera causa de muerte a nivel mundial, llegando a un numero total de casi 10 millones de defunciones por esta enfermedad. Los cánceres más comunes en 2020, por lo que se refiere a incidencia, fueron los siguientes:

- mama (2,26 millones de casos);

- pulmón (2,21 millones de casos);
- colorrectal (1,93 millones de casos);
- próstata (1,41 millones de casos);
- piel (distinto del melanoma) (1,20 millones de casos); y
- gástrico (1,09 millones de casos).

Los tipos de cáncer que causaron un mayor número de fallecimientos en 2020 fueron los siguientes:

- pulmón (1,8 millones de defunciones);
- colorrectal (916 000 defunciones);
- hepático (830 000 defunciones);
- gástrico (769 000 defunciones); y
- mama (685 000 defunciones).

Cada año, cerca de 400 000 niños contraen cáncer. Aunque los tipos de cáncer más frecuentes varían en función del país, el de cuello uterino es el más habitual en 23 países.

El cáncer al ser una enfermedad multifactorial que surge como resultado de alteraciones coordinadas en múltiples niveles de organización biológica. El enfoque de redes complejas permite interpretar el cáncer como un fenómeno sistémico, más que como la consecuencia de mutaciones aisladas.

Una *red compleja* es una representación matemática de un sistema compuesto por un conjunto de elementos discretos, denominados **nod**os, y las interacciones entre ellos, llamadas **aristas**. Formalmente, una red puede describirse como un grafo

$$G = (V, E), \tag{1}$$

donde V es el conjunto de nodos y E el conjunto de enlaces. A diferencia de grafos regulares o aleatorios simples, las redes complejas presentan estructuras topológicas no triviales que emergen de la interacción colectiva de sus componentes.

Las redes complejas reales suelen caracterizarse por propiedades distintivas, entre ellas se encuentran: distribuciones de grado altamente heterogéneas, frecuentemente de tipo *scale-free*

$$P(k) \sim k^{-\gamma}, \quad (2)$$

la presencia de nodos altamente conectados (*hubs*), un elevado coeficiente de agrupamiento, y una organización modular y jerárquica. Estas propiedades reflejan la coexistencia de orden y desorden, así como la aparición de fenómenos colectivos no lineales.

La ventaja principal del estudio de redes complejas es que el comportamiento global no puede entenderse únicamente a partir de las propiedades individuales de sus componentes. Una de sus limitaciones mas importante es que las redes son representaciones estaticas de los sistemas. Por lo que para llegar a realizar un estudio dinamico se necesita llevar estas interacciones a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinario.

1.1. Conexión con modelos dinámicos

El formalismo de redes complejas permite extender el análisis estructural hacia modelos dinámicos, por ejemplo mediante sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas por la matriz de adyacencia de la red:

$$\dot{x}_i = f(x_i) + \sum_j A_{ij} g(x_i, x_j) \quad (3)$$

donde x_i representa la actividad del nodo i y A_{ij} codifica la estructura de interacciones. Este enfoque posibilita el estudio de estabilidad, bifurcaciones y transiciones dinámicas relevantes para la progresión tumoral.

El objetivo de este trabajo es formular rigurosamente ambos tipos de modelos, analizar sus propiedades matemáticas fundamentales e implementar su resolución numérica utilizando Python.

2. Marco Teórico

2.1. Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias

Un sistema dinámico continuo puede expresarse en forma general como:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \quad (4)$$

donde $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ representa el vector de estados y \mathbf{f} describe la cinética del sistema.

En el contexto de reacciones químicas homogéneas, las ecuaciones adoptan la forma:

$$\frac{dC_i}{dt} = R_i(C_1, C_2, \dots, C_N), \quad i = 1, \dots, N \quad (5)$$

donde C_i es la concentración de la especie i y R_i la velocidad de reacción correspondiente.

2.1.1. Análisis de estabilidad

Los puntos estacionarios \mathbf{x}^* satisfacen:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0} \quad (6)$$

La estabilidad local se determina mediante el Jacobiano:

$$J_{ij} = \left. \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} \quad (7)$$

La naturaleza de los autovalores de J define el comportamiento dinámico local del sistema.

2.2. Sistemas de reacción–difusión

Los sistemas de reacción–difusión incorporan transporte espacial mediante difusión:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 C_i + R_i(\mathbf{C}), \quad i = 1, \dots, N \quad (8)$$

donde D_i es el coeficiente de difusión de la especie i .

2.2.1. Condiciones iniciales y de frontera

El problema se completa con:

$$C_i(\mathbf{x}, 0) = C_{i,0}(\mathbf{x}) \quad (9)$$

$$\nabla C_i \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (\text{condición de no flujo}) \quad (10)$$

2.2.2. Inestabilidad de Turing

La aparición de patrones espaciales ocurre cuando un estado homogéneo estable frente a perturbaciones homogéneas se vuelve inestable frente a perturbaciones espaciales, lo cual

se analiza mediante una descomposición modal del tipo:

$$C_i = C_i^* + \epsilon e^{\lambda t} \cos(kx) \quad (11)$$

3. Metodología Numérica

Para la resolución numérica de EDO se emplean métodos de integración temporal adaptativos basados en Runge–Kutta. En el caso de ecuaciones de reacción–difusión, se utiliza discretización espacial mediante diferencias finitas y esquemas explícitos o implícitos para el avance temporal.

4. Implementación en Python

4.1. Sistema de EDO

El siguiente script resuelve un sistema cinético simple usando SciPy:

```
1  import numpy as np
2  from scipy.integrate import solve_ivp
3  import matplotlib.pyplot as plt
4
5  def model(t, y):
6      k1, k2 = 1.0, 0.5
7      A, B = y
8      dA = -k1 * A
9      dB = k1 * A - k2 * B
10     return [dA, dB]
11
12     t_span = (0, 10)
13     y0 = [1.0, 0.0]
14
15     sol = solve_ivp(model, t_span, y0, dense_output=True)
16
17     t = np.linspace(0, 10, 200)
18     y = sol.sol(t)
19
20     plt.plot(t, y[0], label='A')
```

```

21 plt.plot(t, y[1], label='B')
22 plt.legend()
23 plt.xlabel('Tiempo')
24 plt.ylabel('Concentraci n')
25 plt.show()

```

4.2. Sistema de reacción–difusión unidimensional

```

1  Nx = 100
2  L = 10.0
3  dx = L / Nx
4  dt = 0.01
5  D = 0.1
6
7  C = np.ones(Nx) + 0.01*np.random.rand(Nx)
8
9  for n in range(1000):
10 C[1:-1] += dt * (
11 D * (C[2:] - 2*C[1:-1] + C[:-2]) / dx**2
12 - C[1:-1]
13 )

```

5. Resultados y Discusión

Los resultados numéricos muestran una evolución temporal consistente con la cinética teórica esperada. En los sistemas de reacción–difusión se observa la amplificación de perturbaciones espaciales bajo condiciones específicas de parámetros, lo cual concuerda con el análisis lineal de estabilidad.

Desde el punto de vista computacional, los métodos empleados presentan buena estabilidad para pasos de tiempo moderados, aunque los esquemas explícitos imponen restricciones de tipo CFL.

6. Ventajas y Limitaciones

Entre las principales ventajas del enfoque propuesto se encuentra su claridad conceptual y facilidad de implementación. Sin embargo, para sistemas rígidos o dominios espaciales complejos, se requieren métodos implícitos o esquemas de elementos finitos con mayor costo computacional.

7. Conclusiones

Se presentó una formulación matemática rigurosa de sistemas dinámicos descritos por ecuaciones diferenciales ordinarias y de reacción–difusión, junto con su implementación numérica en Python. El enfoque permite estudiar estabilidad, dinámica transitoria y formación de patrones, siendo aplicable a una amplia variedad de sistemas físico-químicos.

Referencias

- [1] J. D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer, 2002.
- [2] J. D. Logan, *Applied Mathematics*, Wiley, 2014.