

Proyectos - Física Computacional II-2022
Prof. Karem Rodríguez

I. EL OSCILADOR DE DUFFING

Considere el siguiente oscilador no lineal:

$$\ddot{x} + \gamma \dot{x} + x + \alpha x^2 + \beta x^3 = 0. \quad (1)$$

Con $\alpha = 0$, la ecuación 1 describe un oscilador amortiguado cuya fuerza de restitución se fortalece con la amplitud cuando $\beta > 0$ y se debilita cuando $\beta < 0$, éstos casos son llamados el caso de *endurecimiento del resorte* o de *reblandecimiento del resorte*.

Cuando $\alpha \neq 0$, existe otra fuerza dependiente de la amplitud, la cual hala o empuja el oscilador de manera diferente dependiendo de la dirección del desplazamiento del mismo.

Grafique las cantidades físicas relevantes de este sistema para los siguientes casos:

1. $\gamma = 0, \alpha = 0, \beta > 0$.
2. $\gamma = 0, \alpha = 0, \beta < 0$.
3. $\gamma = 0, 0 < \alpha \ll \sqrt{|\beta|}, \beta < 0$.

Habiendo realizado las gráficas anteriores, explore que sucede en cada uno de los casos anteriores cuando $0 < \gamma \ll 1$, cada uno con 2 valores diferentes del parámetro γ . Su objetivo es obtener una descripción apropiada (así sea cualitativa) del sistema con el menor trabajo posible.

Para ir un paso más allá, explore el caso cuando el signo de x se invierte, esto es, de manera lineal en lugar de hacerlo con una fuerza restitutiva, ¿encuentra una inestabilidad? ¿cómo puede evidenciar que es una inestabilidad física y no numérica?.

Nota: las cantidades físicas relevantes a analizar para cada caso particular con parámetros específicos son, la posición y la velocidad en función del tiempo así como el diagrama de fases donde grafica la posición y la velocidad como las cuadraturas relevantes.

Escoja un caso particular y realice una animación adecuada que muestre todas las cantidades físicas relevantes.

Para leer más sobre este tipo de osciladores no lineales puede revisar las referencias aquí planteadas.

Solucione el conjunto de ecuaciones acopladas mediante el método de **Runge-Kutta** o similar.

Referencias

- [1] Georg Duffing (1861-1944), ingeniero alemán famoso por su oscilador, el cual con el signo invertido de x y un fuerza periódica externa adicional, es uno de los sistemas más simples conocidos que exhiben un comportamiento caótico.
- [2] Strogatz, S.H, *Nonlinear dynamics and chaos: With Application to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*. Perseus Books Publishing, Cambridge, (1994). Secciones 7.6 y 12.5
- [3] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M. *Mechanics*. Butterworth-Heinemann, (1976). Capítulo 29.
- [4] Glendinning, P. *Stability, Instability, and Chaos: An Introduction to the Theory of Nonlinear Differential Equations*. Cambridge University Press, Cambridge, (1994). Sección 7.2.

II. EL PÉNDULO NO LINEAL, AMORTIGUADO Y FORZADO.

Considere un péndulo con una masa m atada al extremo de una varilla rígida de longitud l atada un pivote sin fricción, lo cual le permite al péndulo moverse libremente bajo la gravedad en un plano vertical. Es de esperarse que el movimiento gradualmente llegue a su fin debido a una fuerza viscosa que genera un torque sobre el péndulo. Para mantener el movimiento es posible adicionar una fuerza externa periódica. De tal manera que la ecuación de movimiento del péndulo esta dada por,

$$ml \frac{d^2\theta}{dt^2} + b \frac{d\theta}{dt} + mg \sin(\theta) = A \cos(\omega t), \quad (2)$$

donde b es una constante positiva que parametriza la viscosidad del medio donde se encuentra inmerso el péndulo, A es la amplitud de oscilación y ω es la frecuencia angular. Esta ecuación de movimiento puede ser escrita en términos de dos ecuaciones diferenciales acopladas de primer orden,

$$\frac{d\theta}{d\bar{t}} = \bar{v}, \quad (3)$$

$$\frac{d\bar{v}}{d\bar{t}} = -\frac{\bar{v}}{Q} - \sin(\theta) + \bar{A} \cos \bar{\omega} \bar{t}, \quad (4)$$

$$\text{donde, } Q = \frac{mg}{\omega b}, \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}},$$

$$\text{y las cantidades adimensionales } \bar{t} = \omega_0 t, \quad \bar{\omega} = \frac{\omega}{\omega_0}, \quad \bar{A} = \frac{A}{mg}.$$

El factor Q representa el número de oscilaciones del sistema no forzado antes que su enegía sea reducida significativamente debido a la viscosidad. La amplitud \bar{A} es medida en unidades del máximo torque gravitacional posible. $\bar{\omega}$ es la frecuencia angular del torque externo medido en unidades de la frecuencia natural del péndulo. Solucione el conjunto de ecuaciones acopladas mediante el método de **Runge-Kutta**.

1. Grafique el ángulo θ en función del tiempo adimensional \bar{t} . Hágalo para diferentes valores de $\bar{\omega}$. Realice una gráfica bidimensional con para 4 valores de $\bar{\omega}$ diferentes. Y Realice una gráfica tridimensional variando $\bar{\omega}$ en pasos de $\Delta\bar{\omega}$ desde un valor inicial $\bar{\omega}_i$ hasta un valor final $\bar{\omega}_f$.
2. Grafique el diagrama de fase, esto es la velocidad adimensional en el eje vertical y el ángulo en el horizontal, para un valor de $\bar{\omega}$ en cada uno de los diferentes regímenes (ejemplo: periódico, quasiperiódico, no periódico) que haya encontrado en su exploración de valores.
3. Realice una animación del movimiento del péndulo para un conjunto fijo de parámetros en cada uno de los regímenes.

El fin de éste proyecto conlleva a resultados sorprendentes como el estudiar el péndulo fuera de la aproximación a oscilaciones pequeñas y con características más cercanas a la realidad como la atenuación y el forzamiento.

III. EL PÉNDULO INVERTIDO Y LA ECUACIÓN DE MATHIEU.

Considere un péndulo invertido cuyo pivote oscila a alta frecuencia en la dirección vertical. Este es un problema clásico de la teoría de control por su alta inestabilidad y no linealidad, convirtiéndose su estabilización en un reto [1, 2].

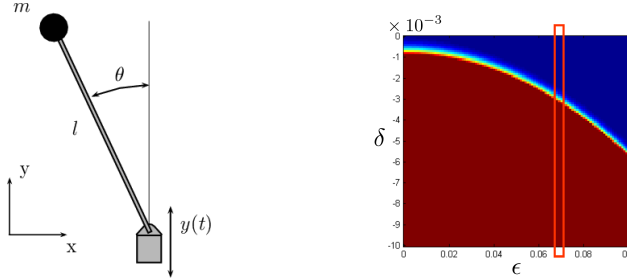


FIG. 1: Izquierda: esquema del péndulo invertido. Derecha: diagrama de estabilidad del péndulo.

La ecuación de movimiento de este sistema está dada por,

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} - \left[\underbrace{\frac{g}{l}}_{\text{Gravedad}} - \underbrace{\frac{\omega^2 A}{l} \cos(\omega t)}_{\text{Pivote}} \right] \sin \theta = 0, \quad (5)$$

La dinámica del péndulo es dominada por el pivote cuando éste oscila con una frecuencia mayor a la frecuencia natural del péndulo, $\sqrt{g/l} = \omega_0 < \omega$.

Si se introduce una reparametrización del tiempo en función de la frecuencia de oscilación del pivote de la forma, $t = \tau/\omega$, se consideran ángulos pequeños $\sin \theta \approx \theta$ y se utilizan las siguientes variables adimensionales,

$$\delta = -\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^2, \quad \epsilon = \frac{A}{l},$$

la ecuación de movimiento se escribe,

$$\frac{d^2\theta}{d\tau^2} + [\delta + \epsilon \cos(\tau)] \theta = 0, \quad (6)$$

la cual es conocida como la ecuación de Mathieu.

1. Solucione la ecuación (6) utilizando el método de **Runge-Kutta** o **Numerov**. Utilice valores de δ y ϵ basandose en el diagrama de estabilidad presentado, donde en la región azul el péndulo es estable en contraste con la roja donde es inestable.
2. Grafique θ en función del tiempo para 2 valores de ω en cada régimen y uno sobre la transición, puede tener una guía como el rectángulo rojo que se sugiere en el diagrama.
3. Grafique el diagrama de fase del sistema estable y uno para el inestable, esto es θ en el eje horizontal y $d\theta/dt$ en el vertical.
4. Realice una animación de su péndulo invertido con dos ventanas, en la izquierda la animación del diagrama de fase y en la derecha su animación del ángulo y la velocidad en función del tiempo.

Referencias

- [1] Butikov and Eugene, *On the dynamic stabilization of an inverted pendulum*, Am. J. Phys., Vol. 69, No. 7, (2001).
- [2] Smith, Blackburn, et. al. *Stability and Hopf bifurcations in an inverted pendulum*, Am J. Phys. 60, No. 10, (1992).

IV. PROPAGACIÓN DE ENFERMEDADES.

Para analizar la propagación de enfermedades considere tres grupos de individuos. $S(t)$ el cual es el número de individuos susceptibles a ser infectados, $I(t)$ el cual es el número de individuos infectados y $R(t)$ el cual es el número de individuos recuperados. Sea la población inicial de $N = 7,900,000$ individuos, considere las fracciones de susceptibles $s(t) = S(t)/N$, de infectados $i(t) = I(t)/N$ y de recuperados $r(t) = R(t)/N$. Debido a que no consideramos que individuos ingresen o dejen la población inicial, la única manera que la población susceptible varíe es porque se infecta. Por otro lado, consideramos que la población infectada tiene un número b de contactos que pueden propagar la enfermedad, aún cuando no todos son con población susceptible. También se considera que una fracción k de infectados puede recuperarse en una ventana temporal, esto es, si en promedio la duración de la infección son tres días entonces en promedio un tercio de la población infectada se recupera cada día. El modelo completo está dado por [1],

$$\begin{aligned}\frac{ds}{dt} &= -bs(t)i(t), \\ \frac{di}{dt} &= bs(t)i(t) - ki(t), \\ \frac{dr}{dt} &= ki(t).\end{aligned}\tag{7}$$

Las poblaciones iniciales están dadas por

$$\begin{aligned}S(0) &= 7,900,000, & s(0) &= 1 \\ I(0) &= 10, & i(0) &= 1.27 \times 10^{-6} \\ R(0) &= 0, & r(0) &= 0\end{aligned}$$

1. Solucione el sistema acoplado de ecuaciones mediante el método de **Runge-Kutta** o **Verlet-velocidad** para 4 parejas de parámetros (b, k) donde uno de ellos sea la pareja $(1/2, 1/3)$, variando $k \in [0.1, 0.6]$ y $b \in [0.5, 2]$
2. Grafique las fracciones $s(t)$, $i(t)$ y $r(t)$ como función del tiempo para las 4 parejas de parámetros.
3. Encuentre el pico de infección para cada conjunto tomado. Para casos de picos de infección pequeños, discuta las variaciones en las fracciones de la población infectada $i(t)$ y recuperada $r(t)$.
4. ¿Qué sucedería en el caso en que $i(0) = 0$?
5. Grafique para cada conjunto de parámetros el diagrama de fase, esto es, grafique la población en el eje horizontal y su variación en el tiempo en el eje vertical.
6. Realice la animación de su sistema con 4 paneles, el de la esquina superior izquierda contiene el diagrama de fase, y los otros tres paneles contienen la población en función del tiempo para cada una de las poblaciones involucradas.

Referencias

- [1] D. Smith and L. Moore, *The SIR Model for Spread of Disease - Relating Model Parameters to Data*, Loci/JOMA, Convergence (2004).

V. MODELO DE PREDADOR-PRESA DE ODELL

Considere el siguiente sistema no lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas:

$$\frac{dx}{dt} = x[x(1-x) - y], \quad (8)$$

$$\frac{dy}{dt} = y(x - a), \quad (9)$$

donde $x \geq 0$ es la población adimensional de presas, $y \geq 0$ es la población adimensional de depredadores y $a \geq 0$ es un parámetro de control [1]. Este modelo describe una especie vegetaria x , la cual es monógama con una tasa de nacimiento proporcional a su población al cuadrado, $\sim x^2$, la población está limitada por la disponibilidad de comida con una razón de muerte proporcional al cubo de su población, $\sim x^3$, y es devorada por su especie depredadora, y , a una tasa proporcional a la interacción entre las dos especies. Los depredadores son monógamos pero se procrean condicionalmente dependiendo de la disponibilidad de presas, a una razón proporcional a x , y tienen una tasa de muerte controlada por el parámetro a . Los tamaños de las poblaciones de x y y son normalizadas de manera apropiada (x a su valor correspondiente en ausencia de depredador).

1. Determine los puntos donde la primera derivada de las poblaciones se anula a lo cual se le conoce como isoclinas (nullcline) en el primer cuadrante, esto es, poblaciones siempre positivas.
2. Muestre que los puntos de equilibrio del sistema son $(0, 0)$, $(1, 0)$ y $(a, a - a^2)$, clasifíquelos, explique la diferencia entre ellos.
3. Realice el diagrama de fase para $a > 1$, y muestre que los depredadores van directo a la extinción en este caso, ¿cómo son las órbitas en este caso?
4. Muestre que ocurre una bifurcación de Hopf en el punto $a_c = 1/2$, ¿podría decir si es subcrítica o supercrítica dicha bifurcación?. Pruebe que no existen órbitas periódicas para $a \geq 1/2$, ¿existen órbitas periódicas para $a < a_c$? si es el caso muestre dos ejemplares.
5. Estime la frecuencia de las oscilaciones de ciclo límite (una trayectoria aislada y cerrada) para un valor de a cercano a la bifurcación.
6. Realice diagramas de fase topológicamente (morfológicamente) diferentes para $0 < a < 2$ en el primer cuadrante, mínimo 3.

Interprete sus soluciones en términos de la dinámica de las poblaciones, esto es, cada población de las especies en función del tiempo.

Escoja un caso particular y realice una animación adecuada que muestre todas las cantidades físicas relevantes. Solucione el sistema de ecuaciones mediante el método de **Runge-Kutta** u otro método del mismo orden o mayor.

Referencias

- [1] Odell, G.M., *Qualitative theory of systems of ordinary differential equations, including phase plane analysis and the use of the Hopf bifurcation theorem*, L. A. Segel (ed.), Mathematical Models in Molecular and Cellular Biology, Cambridge University Press, Cambridge, 1980.
- [2] R.-M. Georgescu, *Bifurcation in a model of the population dynamics*, Proceedings of the International Conference on Theory and Application of Mathematics and Informatics ICTAMI 2005 - Alba Iulia, Romania, No. 11, (2006).

VI. ECOLOGÍA MATEMÁTICA, ECUACIONES DE LOTKA-VOLTERRA.

Suponga un sistema biológico cerrado, esto es sin migraciones, donde hay dos tipos de animales: depredadores ($y(t)$) y presas ($x(t)$). Ellos forman una cadena alimenticia simple, donde el depredador caza las presas mientras que las presas se alimentan de vegetación. La población de este sistema se modela por dos ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas llamadas ecuaciones de *Lotka-Volterra*. Originalmente se puede considerar el sistema [1],

$$\frac{dx}{dt} = ax - \alpha xy \quad (10)$$

$$\frac{dy}{dt} = -cy + \gamma xy \quad (11)$$

donde a, c, α y γ son constantes positivas. Note que en ausencia de depredadores ($y = 0$), la población de las presas crece exponencialmente. Y en ausencia de presas ($x = 0$) la población de depredadores decae exponencialmente a cero por hambruna.

Sin embargo estos incrementos/decrementos exponenciales no son realistas, para reemplazar dicho crecimiento exponencial del primer término en la primera ecuación se adiciona un segundo término de crecimiento logístico de manera que el sistema se transforma,

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= (ax - rx^2) - \alpha xy \\ \frac{dy}{dt} &= -cy + \gamma xy. \end{aligned} \quad (12)$$

Ahora la población de las presas se estabilizará de acuerdo con las capacidades ambientales dadas por la ecuación logística [2].

1. Muestre que este sistema tiene tres puntos críticos: uno en el origen, uno en el primer cuadrante y uno en el eje positivo de las x .
2. Solucione el sistema de ecuaciones (12) y muestre el punto crítico como una espiral alrededor del punto de estabilidad en el primer cuadrante. *Recomendación:* utilice $a = 4, r = 2, \alpha = 1, c = 2$ y $\gamma = 2$.
3. Solucione el sistema de ecuaciones (12) y muestre el punto crítico como una línea nodal asintóticamente estable en el primer cuadrante. *Recomendación:* utilice $a = 6, r = 3, \alpha = 1, c = 2$ y $\gamma = 1$.

Si los depredadores tienen una fuente de comida alterna (por ejemplo los osos pueden subsistir alimentándose de plantas), entonces no necesariamente mueren de hambre en ausencia de presas, en este caso, la segunda ecuación cambia adicionando el término de crecimiento logístico.

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= (ax - rx^2) - \alpha xy \\ \frac{dy}{dt} &= (by - cy^2 + \gamma xy). \end{aligned} \quad (13)$$

4. Solucione el sistema (13) y muestre una solución asintóticamente estable del mismo.

Solucione el sistema de ecuaciones mediante el método de **Runge-Kutta** u otro método del mismo orden o mayor.

Referencias

- [1] Brauer, F. and Castillo-Chavez, C., *Mathematical Models in Population Biology and Epidemiology*, Springer-Verlag (2000).
- [2] Berryman, A. A., *The Origins and Evolution of Predator-Prey Theory*, Ecology. 73 (5), 1530–1535 (1992).

VII. ECOLOGÍA MATEMÁTICA, ECUACIONES DE LOTKA-VOLTERRA - BIFURCACIÓN

Suponga un sistema biológico cerrado, esto es sin migraciones, donde hay dos tipos de animales: depredadores ($y(t)$) y presas ($x(t)$). Ellos forman una cadena alimenticia simple, donde el depredador caza las presas mientras que las presas se alimentan de vegetación. La población de este sistema se modela por dos ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas llamadas ecuaciones de *Lotka-Volterra*. Originalmente se puede considerar el sistema como el conjunto de ecuaciones (12) del proyecto VI, aquí escribiremos dicho conjunto de manera diferente siguiendo la Ref.[1]

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= ax - f(x)y, \\ \frac{dy}{dt} &= -cm y + cxy,\end{aligned}\tag{14}$$

donde a es la tasa de crecimiento de las presas en ausencia de depredador. $f(x)$ es la respuesta funcional del depredador a la densidad de presas. c representa la eficiencia del depredador (eficiencia en la caza), y m es la tasa de mortalidad del depredador que depende de la eficiencia del depredador.

En los últimos años, se han incluido factores extra al modelo que lo vuelven cada vez más un reto para solucionar, en particular aquí se añade un análisis de bifurcación introduciendo el efecto Allee por medio de un polinomio no entero de la forma

$$a = (x^{q_1-1} - l)(1 - x), \quad f(x) = x, \quad c = y^{q_2-1},\tag{15}$$

donde l es el límite del efecto Allee, tómelo real y positivo. q_1 y q_2 son dos elementos no enteros, con lo cual las ecuaciones del sistema quedan de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= x(x^{q_1} - l)(1 - x) - xy, \\ \frac{dy}{dt} &= (x - m)y^{q_2}.\end{aligned}\tag{16}$$

El análisis dinámico del sistema indica que hay dos casos para ser considerados, el de efecto Allee fuerte y débil, aquí se concentrará en el efecto fuerte, donde $l \in [0, 1]$. De los múltiples puntos de singularidades de equilibrio, trabajará en los puntos de equilibrio cuando $m \in [0, l^{\frac{1}{q_1}}]$ tomando $q_1 = 0.5$ donde realizará los diagramas de fase de las siguientes situaciones:

1. Para $0.5 < q_2 \leq 1.9$, encuentre que el nodo estable se encuentra cuando las poblaciones satisfacen $x = y = 0$.
2. Para $0 < q_2 \leq 0.5$, encuentre que un punto de silla se encuentra cuando se satisface $|x| \rightarrow 0, y = 0$.
3. Para $0 < q_2 \leq 0.5$, encuentre que un punto de silla se encuentra cuando se satisface $x = l^{\frac{1}{q_1}}$ y $y = 0$.
4. Para $0.5 < q_2 \leq 1.1$, encuentre que un nodo inestable se encuentra cuando se satisface $x = l^{\frac{1}{q_1}}$ y $y = 0$.
5. Y encuentre que cuando las poblaciones satisfacen $x = 1$ y $y = 0$, el sistema presenta un punto de silla el cual corresponde justamente al efecto Allee fuerte en estudio.
6. Para cada uno de los casos anteriores presente el diagrama 2D de las poblaciones de depredadores y presas en función del tiempo.
7. Una vez haya realizado los diagramas de fase de los diferentes sistemas dinámicos propuestos en los ítems anteriores, escoja uno de los casos y realice la animación de éste. Debe hacer un video de dos ventanas donde en una se muestra el diagrama de fase, y en la otra las poblaciones del depredador y presa en función del tiempo.

Referencias

- [1] Saad, A. B., Boubaker, O., and Elhadj, Z., *PD Bifurcation and Chaos Behavior in a Predator-Prey Model With Allee Effect and Seasonal Perturbation*, Recent Advances in Chaotic Systems and Synchronization, 211–232 (2019).

VIII. MODELO PARA LA PROPAGACIÓN DEL SIDA

El modelo incorpora las siguientes hipótesis:

1. La propagación del SIDA ocurre de manera predominante por contacto sexual con individuos infectados.
2. En el presente no hay cura, pero el progreso de la enfermedad se puede disminuir mediante quimioterapia a personas infectadas.
3. En una población de $N(t)$ individuos, éstos se clasifican en tres grupos, donde $x(t)$ es el número de personas sanas (susceptibles de ser contagiadas), $y(t)$ es el número de personas infectadas del virus que no han sido tratadas con quimioterapia y $z(t)$ individuos infectados que reciben tratamiento. N_0 es el tamaño constante que tendría la población en ausencia de infección y μN_0 es la población sexualmente activa. β_1 y β_2 son respectivamente, las probabilidades de transmisión por contacto con un infectado tratado y no tratado. El parámetro c está asociado al número de compañeros sexuales. La terminación de la actividad sexual μ , γ mortalidad debida al SIDA y administración de quimioterapia τ . El parámetro d determina la mortalidad pero se asume que $d < \gamma$ como consecuencia de la quimioterapia.

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \mu(N_0 - x) - c\lambda x, \\ \frac{dy}{dt} &= c\lambda x - (\mu + \gamma + \tau)y, \\ \frac{dz}{dt} &= \tau y - (d + \mu)z,\end{aligned}\tag{17}$$

donde $N(t) = x(t) + y(t) + z(t)$ y $\lambda = \frac{\beta_1}{N}y + \frac{\beta_2}{N}z$.

1. Defina el grupo de parámetros con los que va a trabajar, asegúrese que su método le ayuda a converger a la solución deseada. ¿Cuántos regímenes puede distinguir en su barrido de parámetros?
2. Consigne en un archivo las poblaciones individuales x, y, z así como la población total N en función del tiempo para luego graficar las cuatro cantidades de manera bidimensional.
3. Con base en la exploración de parámetros realizada pinte las gráficas de las poblaciones en mínimo dos regímenes diferentes.
4. Realice la gráfica del diagrama de fases de las tres poblaciones, esto es: en el eje vertical el cambio de la población en el tiempo (velocidad) y en el eje horizontal la población, en el tiempo ambas cantidades, cada punto corresponde a la pareja para un punto fijo.
5. Realice una animación donde tiene 4 paneles, en la esquina superior izquierda están las poblaciones (2D), y en la superior derecha, así como en las inferiores izquierda y derecha los tres diagramas de fase para cada población.

Necesita solucionar las ecuaciones del modelo las cuales son un conjunto de tres ecuaciones diferenciales de primer orden acopladas usando el método de **Runge-Kutta**. El fin de éste proyecto conlleva a resultados sorprendentes como la generación de un modelo de administración de quimioterapia en una población infectada con SIDA.

IX. MOLÉCULAS DE $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ Y RUNGE-KUTTA.

Considere un gas de moléculas de $^{40}\text{K}^{87}\text{Rb}$ a ultra bajas temperaturas, las cuales colisionan siguiendo un momento orbital $L = 1$. De tal manera que a estas temperaturas y controlando su densidad inicial, las moléculas llegan al régimen degenerado en el que se puede estudiar la rata de reacción como función de la temperatura siendo éste un sistema cuántico estático en ausencia de campos eléctricos externos. Como resultado de las reacciones químicas la densidad n de las moléculas, confinadas en una trampa armónica, decrece de acuerdo con

$$\frac{dn}{dt} = -\beta n^2 - \alpha n, \quad (18)$$

donde β es el coeficiente que da cuenta de las pérdidas de dos cuerpos y α describe el decremento en la densidad debido al incremento en la temperatura, finalmente t es el tiempo. Considere la rata de pérdida como $\beta_0 = 9 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, la población inicial de las moléculas $N_0 = 11 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$. Evolucione el sistema alrededor de 40ms o 100 ms o hasta donde su integrador se lo permita.

1. Considere $\beta \equiv \beta_0$ constante (el valor dado) y grafique la densidad n como función del tiempo, en un gráfico 2D.
2. Considere β dependiente de la temperatura $\beta \equiv \beta(T)$ de manera lineal. Realice la evolución para mínimo 5 valores de T aumentando hasta un $\beta_{\max} = 50 \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Considere la temperatura adimensional. Realice una gráfica 3D donde muestre la superficie de sus resultados y una 2D donde muestre los valores de β usados en la 3D.
3. Considere β variable en el tiempo $\beta \equiv \beta(t)$ de manera cosenoidal donde a $t = 0$ el valor inicial de $\beta = \beta_0$ es su valor máximo y es el valor dado en el enunciado. El valor mínimo de β es 1/4 de su valor inicial. Grafique sus resultados en un gráfico 2D, muestre la gráfica de β en función del tiempo y n en función del tiempo (una al lado de la otra).
4. Considere β que oscila y decae en el tiempo. El valor inicial de β es su valor máximo y es el doble del valor dado en el enunciado. El valor mínimo de β es 1/4 de su valor inicial. Grafique sus resultados en un gráfico 2D, muestre la gráfica de β en función del tiempo y n en función del tiempo (una al lado de la otra).
5. Realice una animación de su sistema un caso particular de los previamente analizados donde muestre la perdida de la densidad de sus moléculas a medida que el tiempo transcurre.

El valor de α debe extraerlo de tal manera que la población en el ítem (a) al cabo de 40 ms sea $n(t = 40\text{ms}) \approx 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$

Referencias

- [1] J.P. Covey, S. A. Moses, J. Ye, D. S. Jin, Royal Society of Chemistry, "Cold Chemistry: Molecular Scattering and Reactivity Near Absolute Zero" (2017). (<https://arxiv.org/abs/1609.07671>).

X. MODELO DE CRECIMIENTO DE TUMOR, EC. DE GOMPERTZ.

Una de las observaciones más cercanas a la universalidad sobre tumores sólidos es que casi todos desaceleran, esto es, reducen su tasa de crecimiento específica $(dN/dt)/N$ a medida que aumentan su tamaño debido a su anfitrión. En consecuencia, su ecuación de crecimiento está dada de manera general por una ecuación diferencial ordinaria no lineal y de primer orden, la cual es de la forma [1],

$$\frac{dN}{dt} = f(N), \quad (19)$$

donde $f(N)$ es una función apropiada. Las observaciones son consistentes con que el tumor llega a un número limitado de células dado por la capacidad del anfitrión $K > 0$, si el tratamiento o la muerte no intervienen en el proceso. El modelo más usado generaliza la ecuación logística, la cual presenta un atractor global en $K > 0$ para la región donde $N > 0$, con lo cual se tiene:

$$f(N) = NF\left(\frac{N}{K}\right) = \left(\frac{\mu N}{\nu}\right) \left[1 - \left(\frac{N}{K}\right)^\nu\right], \quad \text{donde } \mu > 0. \quad (20)$$

con ν real. En particular, el valor $\nu = 0$ es entendido como un límite que al tomarlo, de la ecuación (19) se obtiene la ecuación de Gompertz [2],

$$F\left(\frac{N}{K}\right) = -\mu \ln\left(\frac{N}{K}\right). \quad (21)$$

1. Solucione la ecuación (19) usando la función (20), mediante el método de **Runge-Kutta**. Debe hacer una exploración del rango de parámetros manteniendo las condiciones que se le han dado para éstos.
2. Haga un barrido del parámetro ν llevándolo lentamente al límite en que $\nu \rightarrow 0$ sin llegar a serlo totalmente, manteniendo los otros parámetros quietos. ¿Hasta qué valor de ν puede tomar?.
3. Solucione la ecuación (19) usando la función (21), esto es la ecuación de Gompertz, y use también el mismo **Runge-Kutta** y conjunto parámetros anterior. ¿Obtiene que la solución en $\lim \nu \rightarrow 0$ de $f(N)$ de (20) tiende a $F(N/K)$ de (21)?.
4. Cambie el conjunto de parámetros y solucione nuevamente los incisos del 1. al 3.
5. Tomando un conjunto específico de parámetros realice la animación del número de células en función del tiempo usando (20) y (21), en un multiplot comparando la evolución de las poblaciones una al lado de la otra.
6. (Opcional) Realice la animación de cómo la solución usando (20) se acerca a la solución usando (21) en función del parámetro ν , y el resto de parámetros fijos.

Referencias

- [1] R.K. Sachs, L.R. Hlatky, P. Hahnfeldt, *Simple ODE models of tumor growth and anti-angiogenic or radiation treatment*, Mathematical and Computer Modelling, Volume 33, 1297-1305 (2001).
- [2] Brunton, G. F., and Wheldon, T. E., *The Gompertz equation and the construction of tumour growth curves*, Cell Proliferation, 13(4), 455–460,(1980).

XI. MODELO DE DOS COMPARTIMIENTOS DE ANGIOGÉNESIS E INHIBICIÓN ANGIOGÉNICA

Una de las observaciones más cercanas a la universalidad sobre tumores sólidos es que casi todos desaceleran, esto es, reducen su rata de crecimiento específica $(dN/dt)/N$ a medida que aumentan su tamaño debido a su anfitrión. En consecuencia, su ecuación de crecimiento está dada de manera general por una ecuación diferencial ordinaria no lineal y de primer orden, la cual es de la forma [1],

$$\frac{dN}{dt} = f(N), \quad (22)$$

donde $f(N)$ es una función apropiada. Las observaciones son consistentes con que el tumor llega a un número limitado de células dado por la capacidad del anfitrión $K(t)$, si el tratamiento o la muerte no intervienen en el proceso. Con $N(t)$ la población de las células cancerígenas. Se asume que el tumor es tan grande que la neovascularización domina la disponibilidad de oxígeno y nutrientes. Las ecuaciones dinámicas están dadas por,

$$\frac{dN}{dt} = NF\left(\frac{N}{K}\right), \quad (23)$$

Aquí $F(x)$ es una función suave, decreciente en el intervalo $(0, \infty)$ con $F(1) = 0$ como la función (21) del proyecto X. Mientras que la capacidad del anfitrión está dominada por,

$$\frac{dK}{dt} = -\alpha c(t)K + \omega N - \gamma N^{2/3}K, \quad \text{donde } 0 \leq \alpha, \omega, \gamma. \quad (24)$$

El término αcK está determinado por la intensidad del agente quimioterapéutico α (agente angiogénico administrado externamente), la concentración del agente en la ubicación del tumor $c(t)$ gobernado por los efectos del tratamiento y los medicamentos. El término ωN corresponde a una estimulación de corto alcance por el tumor, y el término $\gamma N^{2/3}K$ corresponde a una inhibición a largo alcance.

1. Solucione las ecuaciones acopladas (23) y (24) usando el método de **Runge-Kutta** y haga un sondeo por los diferentes parámetros.
2. Grafique la población de las células cancerígenas $N(t)$ y de las células anfitrionas $K(t)$ en función del tiempo para un conjunto fijo de parámetros.
3. Para el conjunto de parámetros del ítem anterior, grafique el diagrama de fase, esto es, la población cancerígena en el eje vertical y la población anfitriona en el eje horizontal.
4. Muestre que en ausencia de tratamiento externo, i.e., para $c(t) = 0$ las ecuaciones de movimiento muestran un atractor global específico en el cuadrante N, K positivos en el diagrama de fase, con $N_0 = K_0 = (\omega/\gamma)^{3/2}$.
5. Cuando un inhibidor como la angionstatina es administrada, el resultado es ralentizar o, incluso, revertir la neovascularización y por tanto el tumor desacelera o contrae. Muestre que esto es verdad variando γ como función que decae desde $\gamma(t=0) = \gamma_0$ y de manera exponencial en el tiempo hasta un valor mínimo pero diferente de cero $\gamma(t=t_f) = \gamma_{\min}$. Realice una animación mostrando la evolución de la población cancerígena como función del tiempo cuando se aplica el inhibidor.

Referencias

- [1] R.K. Sachs, L.R. Hlatky, P. Hahnfeldt, *Simple ODE models of tumor growth and anti-angiogenic or radiation treatment*, Mathematical and Computer Modelling, Volume 33, 1297-1305 (2001).
- [2] Brunton, G. F., and Wheldon, T. E., *The Gompertz equation and the construction of tumour growth curves*, Cell Proliferation, 13(4), 455-460, (1980).