

## UN TEOREMA DE ACOTACIÓN CON APLICACIONES A LAS OSCILACIONES DE REACCIONES QUÍMICA AUTOCATALITICAS

Luis León<sup>1</sup> y Larry Mendoza<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Universidad Central de Venezuela, Facultad de Ingeniería, Departamento de Matemática Aplicada

<sup>2</sup> Universidad nacional Experimental Politécnica “Antonio José de Sucre” Vicerrectorado “Luis Caballero Mejías”, Departamento de Ciencias Básicas.

[\\*prodimat@gmail.com](mailto:*prodimat@gmail.com) / [ljmendoza@unexpo.edu.ve](mailto:ljmendoza@unexpo.edu.ve)

### RESUMEN

Sea  $[dx/dt=q(x) - u(x,y)]$ ,  $[dy/dt= \varepsilon (v(x,y)-v(y))]$  (1), donde  $q$  describe la entrada (input) y posiblemente la salida (output) de un agente,  $v$  la salida y posiblemente la entrada de un segundo agente.  $\varepsilon$  es el parámetro de escalamiento (scaling). Nos interesa la acotación de las soluciones, principalmente como requisito para aplicar el teorema de Poincaré – Bendixson para obtener soluciones periódicas. Los sistemas de la forma (1) en particular aparecen en reacciones químicas y se consideran como una generalización del modelo original de Lotka – Volterra. Nuestra principal aplicación se refiere a un conjunto de reacciones químicas autocatalíticas involucrando a dos reactantes internos  $X, Y$  cuyas concentraciones varían con el tiempo y dos extremos  $A, B$  de concentraciones constante.

*Palabras Clave: teorema de Poincaré – Bendixson, Reacciones químicas,*

### ABSTRACT

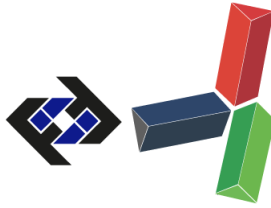
Be it  $[dx/dt=q(x) - u(x,y)]$ ,  $[dy/dt= \varepsilon (v(x,y)-v(y))]$ , where  $q$  describes the input and a possible agent's output,  $v$  is the output and a possible the input of a second agent,  $\varepsilon$  is the scaling parameter. It is our interest to narrow the solutions down, as a requisite to apply the Poincaré – Bendixson theorem in order to obtain periodic solutions. Systems expressed in the form (1) appear in chemical reactions and are considered as a generalization of the original Lotka - Volterra model. In this case of study, the principal application is referred to a set of autocatalytic chemical reactions where two internal reactants  $X, Y$  get involved, whose concentrations vary in time up to reach two values  $A, B$  of constant concentrations.

*Keywords: Poincaré – Bendixson theorem, Chemical reactions,*

### INTRODUCCIÓN

Sea

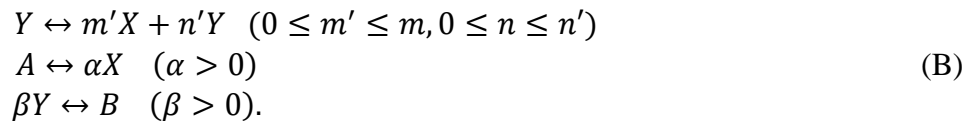
$$\begin{aligned} \dot{x} &= q(x) - u(x,y) \\ \dot{y} &= \varepsilon(v(x,y) - v(y)) \end{aligned} \tag{A}$$



donde  $q$  describe la entrada (input) y posiblemente la salida (output) de un agente,  $v$  la salida y posiblemente la entrada de un segundo agente.  $\varepsilon$  es el parámetro de escalamiento (scaling). Nos interesa la acotación de las soluciones, principalmente como requisito para aplicar el teorema de Poincaré – Bendixson para obtener soluciones periódicas.

Los sistemas de la forma (A) en particular aparecen en la descripción de reacciones químicas en la acción de masa cinética y se consideran como una generalización del modelo original de Lotka – Volterra. Nuestra principal aplicación está referida a un conjunto de reacciones químicas autocatalíticas involucrando a dos reactantes internos  $X, Y$  cuyas concentraciones varían con el tiempo y dos externos  $A, B$  de concentraciones constante.

Las ecuaciones estequiometrias son



### Formulación del Teorema.

**Teorema 1.** En el sistema de ecuaciones diferenciales (A).

$$\begin{aligned} \dot{x} &= q(x) - u(x, y) \\ \dot{y} &= \varepsilon(v(x, y) - v(y)) \end{aligned} \tag{A}$$

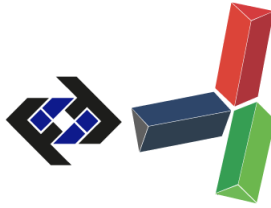
Sea  $\varepsilon$  una constante positiva y sean  $q, r, u, v$  funciones  $q, r : [0, +\infty] \longrightarrow \mathbb{R}$  satisfaciendo la condición de Lipschitz local. Aún más supongamos que exista una función continua no acotada, no decreciente  $f : [0, \infty] \longrightarrow [0, +\infty]$  y constantes no negativas  $a_1, a_2, c_1, c_2, c_3$  tal que las siguientes nuevas condiciones tomadas:

- (1) Sea  $S = \{(x, \bar{y}) : 0 \leq \bar{y} \leq f(x)\}$  es el conjunto por debajo de la gráfica de  $f$ . Entonces la función  $(x, y) \longrightarrow u(x, y)$  restringida a  $S$ , para cada  $y \geq 0$  es no decreciente con respecto a  $x$ .
- (2) La función  $(x, y) \longrightarrow v(x, y)$  restringida a  $S$ , para cada  $y \geq 0$  es no decreciente con respecto a  $x$ .
- (3) Para cada  $y \geq 0$ , la desigualdad  $u(0, y) \leq q(0)$  es tomada.
- (4)  $r(0) \leq v(0, 0)$ ,

Las condiciones (1) y (2) se admiten para definir:

$$\begin{aligned} w(y) &= \lim_{x \rightarrow \infty} u(x, y) \in \mathbb{R} \cup \{\infty\} \\ z(y) &= \lim_{x \rightarrow \infty} v(x, y) \in \mathbb{R} \cup \{\infty\} \end{aligned}$$

- (5) Si  $r(0) = z(0)$  entonces existe  $\eta > 0$  tal que,  $\forall x \geq a$ , y  $\forall y \in [0, \eta]$ ,  $q(x) < u(x, y)$ . Si  $r(0) \neq z(0)$  ponemos  $\eta = 0$ .



- (6)  $\forall y \in [0, C_1], z(y) > r(y)$ .  
 (7)  $\forall y \geq 0$  y  $\forall y \geq C_2, r(y) \geq q(x)$ . (Esto implica que  $q$  está acotado superiormente)  
 (8) Sea  $\tilde{q} = \sup\{q(x) \mid x \geq C_2\}$ . Entonces  $\forall y \geq C_1, w(y) > \tilde{q}$   
 (9)  $\forall x \geq 0$  y  $\forall y \geq C_3, v(x, y) \leq u(x, y)$

Entonces cualquier solución  $(x(y), y(t))$  del sistemas (A) está definida y acotada  $\forall t \geq 0$ .

**Observación 1.** Técnicamente las nueve condiciones se usan para encerrar a una solución dada comenzando en  $(x_0, y_0)$  en un conjunto compacto acotado por segmento de rectas.

Como de (1) – (9) no se imponen condiciones sobre la constante  $\varepsilon$ , el teorema es válido inclusive si  $q, r, u, v, f, a_1, a_2, c_1, c_2, c_3$  y  $\eta$  depende de  $\varepsilon$ .

### Aplicando el Teorema de Poincaré – Bendixson.

En el Contexto del teorema 1 nos gustaría aplicar el teorema de Poincaré – Bendixson para asegurar la existencia de soluciones periódicas disfrutando alguna suerte de estabilidad. La siguiente proposición describe tal situación.

**Proposición 1.** Sean  $q, r, u, v$  funciones continuamente diferenciables del sistema (A) y supongamos que ellas cumplen con todas las condiciones del Teorema 1. Aún más asumamos que:

- (i) Existe un único punto estacionario  $(x_s, y_s)$  con coordenadas positivas.  
 (ii) La linealización del campo vectorial tiene traza y determinante positivo en  $(x_s, y_s)$ .  
 (iii) Existe una invariante positivamente emanando de un eje de coordenadas y manteniéndose a una distancia positiva  $\geq \delta > 0$  de ambos ejes después de algún tiempo.

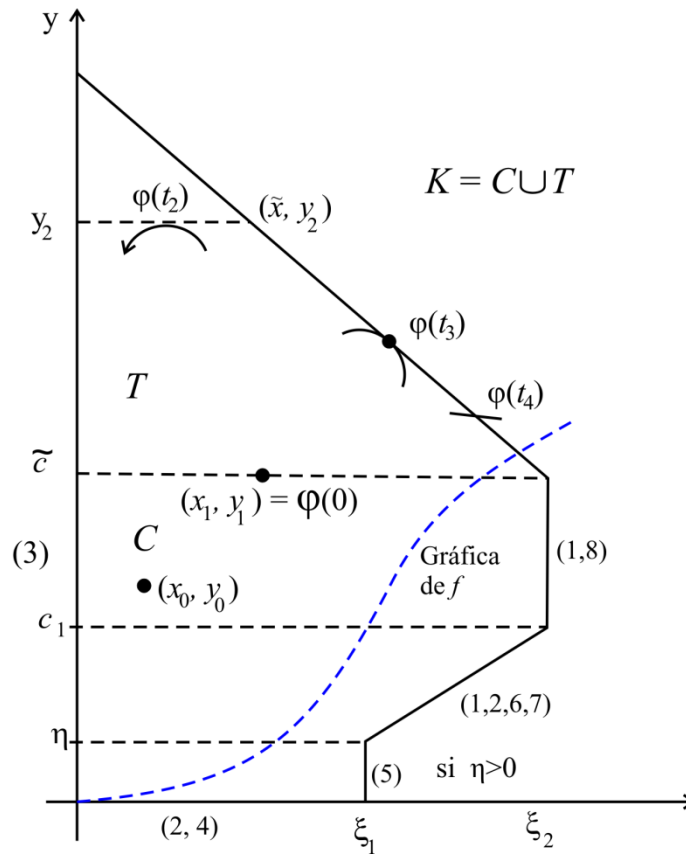
Entonces el sistema tiene una órbita cerrada orbitalmente estable. Si  $q, r, u, v$  son funciones reales analíticas, entonces existe una órbita cerrada orbitalmente y asintóticamente estable.

**Prueba del Teorema 1.** Para el campo vectorial del sistema (A), usaremos la notación  $(\dot{x}, \dot{y})$ . Dada una solución, la semi orbitata positiva permanece en un conjunto compacto  $K$  a ser construido. En la Figura 1, los números encerrados en los paréntesis contiguos a un segmento de recta acotada a  $K$  indican las condiciones a tomar en cuenta para que la solución no abandone a  $K$  vía estos segmentos de rectas. Sin embargo, observe que no se pretende que el conjunto  $K$  sea necesariamente invariante positivamente por la condición (3),

$$x(0, y) = q(0) - u(0, y) \geq 0 \quad \forall y \geq 0 \quad (C)$$

Por (2) y (3),

$$y(x, 0) = \varepsilon(v(x, 0) - r(0)) \geq \varepsilon(v(0,0) - r(0)) \geq 0 \quad \forall x \geq 0 \quad (D)$$



**Figura 1.**

(Note que  $[0, \infty) \times \{0\} \subset S$ ). Así que por el lema, toma las soluciones están definidas en los intervalos semi-abiertos maximales a la derecha y ninguna solución termina en un punto frontera del cuadrante positivo en el plano.

Sea  $(x_0, y_0)$  un punto inicial arbitrario. Primero asumiremos que  $(0) = z(0)$ . No es una restricción asumir que  $a_1 \geq x_0$ .

Por (5) para cualquier  $x \geq a_1$ , en el segundo de recta vertical con puntos extremos  $(x, 0)$  y  $(x, y)$ , la desigualdad  $\dot{x} < 0$  es tomada, y las órbitas que pasan a través de este segmento de recta desde la derecha a la izquierda.

Si  $r(0) \neq z(0)$  entonces (4) y (2) implican que  $r(0) < z(z)$  y  $\eta$  es cero. En cualquier caso por decrecimiento de  $\eta$  y crecimiento de  $a$ , si es necesario, podemos asumir que  $\eta \leq C_1$  y  $[a, \infty] \times [0, \eta]$  CS.

Por (6),  $z(y) > r(y) \quad \forall y \in [\eta, C_1]$ . (Este intervalo posiblemente es degenerado).

Por lo tanto, dando  $\tilde{y} \in [\eta, C_1]$ , existe  $x \geq 0$  tal que  $(x, y) \in S$  y  $v(x, y) > r(y) \quad \forall y$  en un entorno de  $\tilde{y}$ . La compacidad de  $[\eta, C_1]$  y la condición (2) hacen que  $b_1 \geq 0$  tal que  $v(b, y) > r(y)$  para cualquier  $y \in [\eta, C_1]$ . Sin pérdida de generalidad  $b_1 \geq \max\{x_0, a_1, a_2, \}$  y  $[b_1, \infty] \times [0, C_1]$  CS. El número  $p = \min\{v(b_1, y) - r(y) \mid \eta \leq y \leq C_1\}$  es positivo.

Sea  $q_{\text{sup}} = \sup\{q(x) \mid x \geq 0\}$  (finito por (7)). Entonces sobre el conjunto  $\{(x, y) \mid x \geq b_1 \text{ o } \eta \leq y \leq C_1\}$  CS el campo vectorial por (1) satisfice

$$x(x, y) = q(x) - u(x, y) \leq q_{\text{sup}} - u(b_1, y) \leq M, \quad (\text{E})$$

Para un número real positivo apropiado  $M$ , y

$$\dot{y}(x, y) = \varepsilon(v(x, y) \cdot r(y)) \geq \varepsilon p > 0 \quad (\text{F})$$

de aquí que  $\frac{\dot{x}}{\dot{y}} \leq \frac{M}{\varepsilon p}$ , y las órbitas pasan a través de cualquier segmento recta de pendiente  $\varepsilon p/(2M)$  en este conjunto desde abajo.

Sea  $\tilde{c} > \max\{y_0, c_1, c_2, c_3\}$ . Por compacidad de  $[c_1, \tilde{c}]$  y un argumento ya usado anteriormente (8) y (1) implican: existen  $b_2 \geq b_1$  tal que  $[b_2, \infty) \times [0, \tilde{c}]$  CS y  $u(b_2, y) > \tilde{q} \quad \forall y \in [c_1, \tilde{c}]$ . Por tanto si  $x \geq b_2$  &  $y \in [c_1, \tilde{c}]$  entonces

$$x(x, y) = q(x) - u(x, y) \leq \tilde{q} - u(b_2, y) < 0 \quad (\text{G})$$

y las órbitas pasan a través de segmento de rectas verticales con puntos extremos  $(x, C_1)$  y  $(x, \tilde{C})$  de derecha izquierda. Definamos a  $C$  como el conjunto compacto acotado por una curva poligonal cerrada uniendo a los vértices ordenados  $(0,0)$ ,  $(\xi_1, 0)$ ,  $(\xi_1, \eta)$ ,  $(\xi_2, c_1)$ ,  $(\xi_2, \tilde{c})$ ,  $(0, \tilde{c})$ ,  $(0,0)$ , donde  $\xi_1 \geq b_1$  y  $\xi_2 \geq b_2$  sujeto a la condición que la recta a través  $(\xi_1, \eta)$  y  $(\xi_2, c_1)$  tiene pendiente  $\varepsilon p/(2M)$ , excepto cuando  $\eta_1 = c_1$ ; en este caso escogemos  $\xi_1 = \xi_2$ . Entonces la semiórbita positiva de cualquier punto en  $c$  (por ejemplo  $(x_0, y_0)$ ) puede dejar a  $c$  solamente por la orilla superior horizontal.

Definamos a  $T$  como la superficie triangular compacta con vértice  $(0, \tilde{c})$ ,  $(\xi_2, \tilde{c})$  y un tercer vértice sobre el eje y tal que uno de los lados, denotado por  $E$ , tiene pendiente  $-2\varepsilon$ .

Sea  $K = C \cup T$ . Como veremos, una semiórbita positiva de un punto en  $C$  no puede dejar a  $K$ . Esto es debido a las limitaciones en las direcciones del campo vectorial en  $T$ , a saber:

Sea  $(x, y)$  con  $y \geq \tilde{c}$

**Caso 1:**  $u(x, y) > q(x)$ . Entonces  $x(x, y) < 0$ . Más aún

(a)  $\dot{y}(x, y) \leq 0$ , ó

(b)  $\dot{y}(x, y) > 0$ , en cuyo caso lo que sigue a continuación es tomado en  $(x, y)$ :

$$v > r \text{ (cuando } \dot{y} > 0 \text{) y } r \geq q \text{ (por (7))}$$

$$\Rightarrow 0 < v - r \leq u - q \text{ (ya que de (9))}$$

$$\Rightarrow 0 < y/(-\dot{x}) \leq \varepsilon$$

De aquí que  $0 > \frac{y}{\dot{x}} \geq -\varepsilon > -2\varepsilon$ .

**Caso 2:**  $u(x, y) = q(x)$ . Entonces en  $(x, y)$ ,  $x = 0 < \dot{y} = \varepsilon(v - y) \leq \varepsilon(u - q) = 0$  (por (7) y (9)). El campo vectorial es estacionario o apunta verticalmente hacia abajo en  $(x, y)$ .

**Caso 3:**  $u(x, y) < q(x)$ . Entonces en  $(x, y)$ ,  $x > 0 < \dot{y} = \varepsilon(x - r) \leq \varepsilon(u - q) < 0$  (por (7) y (9)).

Supongamos que una solución  $\varphi(t) = (x(t), y(t))$ , con punto inicial  $(x_1, y_1) \in C$  en  $t = 0$ , deje a  $K$ . El último punto en  $C$  (antes de dejar a  $K$ ) tiene a  $\tilde{c}$  como la coordenada de  $y$ ; así podemos asumir que  $(x_1, y_1)$  es este último punto  $y_1 = \tilde{c}$ .  $\varphi$  deje a  $K$  por vez primera en  $t = t_4$ . Entonces  $(x_4, y_4) = \varphi(t_4) \in E$ .

Como  $E$  tiene pendiente  $-2\varepsilon$ , los casos 1 y 2 son descartados en  $(x_4, y_4)$ . Por lo tanto, en  $(x_4, y_4)$ ,  $\dot{x} > 0$  &  $\dot{y} < 0$  de acuerdo con el caso 3 y  $y(t) > y_4$  para algún  $t < t_4$ .

Ahora tomemos a  $y|_{[0, t_4]}$ , allí alcanza su valor máximo  $y_2$  en  $t = t_2$  y sea  $(x_3, y_3) = \varphi(t_3)$  en el primer punto de  $E$  con  $t \leq t_3 \leq t_4$ . Entonces  $\dot{y}(t_2) = 0$  y  $\dot{x}(t_2) \neq 0$ , así que  $x(t_2) < 0$  (Caso 1), y  $y(t_2) < 0$  este en el intervalo de  $T$ . Por lo tanto,  $t_2 < t_3$ .

Colocar las conclusiones del trabajo en formato de párrafos. Evitar conclusiones largas y el uso de viñetas.

Aún más  $\varphi([t_2, t_3])$  y dos segmento de rectas uniendo el punto  $(\tilde{x}, y_2) \in E$  con  $\varphi(t_2)$  y  $\varphi(t_3)$ .  $J$  este contenido en  $T$  como  $\varphi([0, t_2]) \subset T$ , como el segmento de recta desde  $\varphi(t_2)$  hasta  $(\tilde{x}, y_2)$  no está completamente contenido en  $\varphi([0, t_2])$  tal que  $\varphi(t)$  está contenido en la región interior de  $J$ .

Por lo tanto, todo  $\varphi([0, t_2])$  este contenido en esa región, que es un subconjunto del interior de  $T \overset{\circ}{(T)}$ , lo que es una contradicción.

Esto demuestras que  $\varphi(t)$  permanece en  $K \forall t \geq 0$  para los que está definido. Como  $K$  es compacto,  $\varphi(t)$  está definido  $t \geq 0$ . Completando la prueba del teorema.

### Prueba de la Proposición 1.

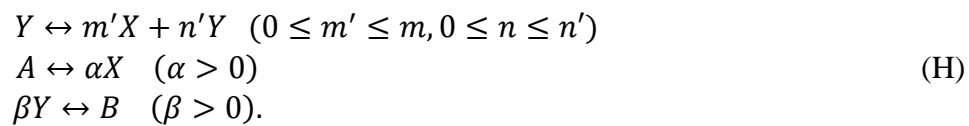
Ahora por el teorema 1 sabemos que las soluciones están definidas  $\forall t \geq 0$ . Por lo tanto cualquier órbita tiene un conjunto  $w$ -límite bien definido positivo. Una sola orbita comenzando en la curva invariante pero no sobre el eje, tiene un conjunto límite positivo que no encuentra los ejes (en vista de (iii)) y no contiene un punto estacionario (ya que de (i) y (ii)), y por el teorema de Poincaré – Bendixson ella tiende a un ciclo límite que esta lo más exterior debido al teorema de la curva de Jordan. Una órbita comenzando cerca de  $(x_s, y_s)$  tiende también a un ciclo límite (a lo más interior). Estos dos ciclos límites acotan una región anular que es invariante positivamente, se puede demostrar que este caso la región anular contiene una órbita cerrada orbitalmente estable la cual puede orbitalmente y asintóticamente estable si el campo vectorial es real y analítico.

Para la prueba de esto ver [1].

### Aplicaciones de los resultados a reacciones autocatalítica.

En lo que sigue asumiremos que todos los parámetros son positivos al menos que asuma lo contrario. Una solución  $(x(t), y(t))$  se dice acotada si ella está acotada  $\forall t \geq 0$ .

Asumamos un sistema químico con dos reactantes internos  $X, Y$  y dos reactantes externos  $A, B$  y las ecuaciones estequiométricas.



Los coeficientes estequiométricos  $m, n', \alpha, \beta$  son externos positivos,  $m', n$  son externos no-negativos.

Las ecuaciones diferenciales para la acción de masa tipo cinético consiste de

$$\begin{cases} \dot{x} = \alpha(k_2 - k_2'x^\alpha) - (m - m')(k_1x^m y^n - k_1'x^{m'} y^{n'}) \\ \dot{y} = (n' - n)(k_1x^m y^n - k_1'x^{m'} y^{n'}) - \beta(k_3y^\beta - k_3') \end{cases} \tag{I}$$

Donde  $x$  e  $y$  son concentraciones de  $X, Y$  respectivamente, y las constante  $k_i > 0$  y  $k_i' \geq 0$  describen la tasa hacia delante y hacia atrás, en el  $i$ -ésimo paso de la reacción de arriba, para = 1,2,3 .

Este modelo fue propuesto por Schnakenberg [2] en un estudio de reacciones catalíticas, candidatas para tener un comportamiento de ciclo límite entre los sistemas con dos reactantes internos.

**Proposición 2.** Asumamos  $k_1, k_2, k_3 > 0$  y  $k'_1, k'_2, k'_3 \geq 0$ . Asumamos que  $n = 0$  o  $n > 0$  y  $k'_3 > 0$ , ó  $n > 0$  y  $k'_3 = 0$  y  $k'_2 > 0$ . El sistema (5) satisface las hipótesis del teorema 1, por lo tanto todas las soluciones son acotadas para tiempos positivos.

**Prueba.** En la notación del sistema (A), ponemos

$$q(x) = \alpha(k_2 - k'_2 x^\alpha) \quad (J)$$

$$u(x, y) = v(x, y) = (m - m')(k_1 x^m y^n - k'_1 x^{m'} y^{m'}) \quad (K)$$

$$\varepsilon = \frac{n' - n}{m - m'}, \quad r(y) = \frac{m - m'}{n' - m} \beta (k_3 y^\beta - k'_3) \quad (L)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x, y) \geq 0 \Leftrightarrow m k_1 x^{m-m'} \geq m' k'_1 y^{n'-m} \quad (M)$$

Si  $m'^{k'_1} = 0$  entonces (1) y (2) son satisfechas con cualquier  $f$ . (3) y (4) son triviales. Para  $n = 0$ ,  $\infty = z(0) \neq r(0)$ . Ahora asumamos  $n > 0$ . Entonces  $z(0) = 0$ , así que  $z(0) \neq r(0)$  si  $k'_3 > 0$ . Si  $k'_3 = 0$  entonces  $z(0) \neq r(0)$  pero en este caso  $k'_2 > 0$  por hipótesis y existe un  $a_1$  tal que  $(x) < 0 \forall z \geq a_1$ . Puesto que  $n > 0$  implica que  $u(a_1, 0) = 0$ , la desigualdad  $u(a_1, y) > q(a_1)$  es toamda  $\forall y \in [0, \eta]$  si  $\eta > 0$  se escoge apropiadamente. Entonces  $x \geq a_1$  y  $0 \leq y \leq \eta \Rightarrow q(x) \leq q(a_1) < u(a_1, y) \leq u(x, y)$  y (5) se verifica en todos los casos. Como  $z(y) = w(y) = \infty$  para cualquier  $y > 0$ , (6) y (8) son ciertos con  $c_1$  y  $c_2$  arbitrarios. Como  $k_3 > 0$ , (7) retoma y (9) es trivial.

## REFERENCIAS

- [1] Erle, D. Stable closed orbits in plane autonomous dynamical systems, *J. Reine Agnew. Math.* 305 (1979), 136 – 139.
- [2] Schnakenberg, J. Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *Journal of theoretical biology*, 81(3). 1979, 389-400.