



industriales  
etsii

Escuela Técnica  
Superior  
de Ingeniería  
Industrial

# UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial

## SIMULACIÓN NUMÉRICA Y ESTUDIO DEL PROBLEMA LOTKA-VOLTERRA MEDIANTE EL PROGRAMA CODENET\_15

TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN INGENIERÍA EN TECNOLOGÍAS INDUSTRIALES



Universidad  
Politécnica  
de Cartagena

**Autor:** Adrián González Ortega  
**Director:** Juan Francisco Sánchez Pérez  
**Codirector:** Francisco Alhama López

Cartagena, Octubre de 2105

## **AGRADECIMIENTOS**

Este trabajo fin de carrera es el resultado de muchos años de sacrificio y dedicación. Al comienzo de esta aventura no podía imaginar la satisfacción que tendría acabar la carrera y ver todo lo aprendido, ya que me han hecho crecer tanto en lo personal como en lo profesional, pero todo esto no hubiera merecido la pena sin esas personas que en estos años me han soportado, hemos reído y hemos llorado juntos. Gracias Fito, Alex, Rocío, Ana y Desirée, gracias de corazón por estos años.

También me gustaría agradecer a los directores del proyecto D. Juan Francisco Sánchez Pérez y D. Francisco Alhama López por todos sus esfuerzos y dedicación para que este trabajo saliera adelante, gracias a su predisposición para trabajar cualquier día de la semana y permitir terminar este trabajo de forma satisfactoria.

Y en último lugar me gustaría agradecerse a mis padres, ya que sin su esfuerzo nada de esto sería posible, habéis sido un ejemplo para mí y habéis sido el motivo para tirar siempre para adelante, también gracias a mis abuelos y tíos por el apoyo en estos duros años, que con su granito de arena me han permitido cumplir este sueño, y por último mis hermanos, con los que he peleado y disfrutado todos estos años pero que son unas de las personas más importantes para mí.



A mis padres



# Índice

Capítulo 0. Antecedentes .....	5
0.1 Antecedentes .....	5
Capítulo 1. Introducción y objetivos .....	7
1.1 Introducción .....	7
1.2 Objetivos .....	9
Capítulo 2. Fundamentos teóricos .....	11
2.1 Introducción .....	11
2.2 Reacción de Belousov-Zhabotinsky .....	11
2.3 Modelos para Reacciones Químicas Oscilantes .....	16
2.4 Oregonator para Reacciones Químicas Oscilantes .....	17
2.5 Modelo de Brusselator para Reacciones Químicas Oscilantes .....	20
2.6 Modelo de Lotka-Volterra para Reacciones Químicas Oscilantes .....	21
2.7 Método de simulación por redes .....	27
1. Introducción .....	27
2. El modelo en red .....	27
3. Componentes del modelo en red.....	28
3.1. Monopuertas pasivas .....	28
3.2. Monopuertas activas.....	29
4. El MESIR como método numérico.....	30
5. Simulación mediante el programa PSPICE .....	31
Capítulo 3: El programa CODENET_15 .....	34
3.1 Introducción .....	34
3.2. Interface de introducción de datos .....	35
3.2.1 Pantalla inicial .....	35
3.2.2 Pantalla de generación de una ecuación diferencial ordinaria .....	37
3.2.3 Pantalla de generación de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y acopladas.....	41
3.3. Creación del modelo .....	45
3.4. Simulación y resultados.....	46
Capítulo 4. Análisis de resultados .....	50
4.1 Introducción .....	50
4.2 Cálculo de los puntos estables y adimensionalización de las ecuaciones .....	50
4.3 Representación gráfica.....	51
Composición característica la mitad ( $x_0$ ), tiempo característico el doble ( $t_0$ ).....	54

Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) igual ..... 56

Composición característica ( $x_0$ ) igual, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad ..... 58

Composición característica ( $x_0$ ) mitad, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad ..... 60

Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad ..... 62

Composición característica ( $x_0$ ) cuatro veces menor, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces mayor ..... 64

Composición característica ( $x_0$ ) cuatro veces mayor, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces menor ..... 66

Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) doble..... 68

Composición característica ( $x_0$ ) mitad, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces menor ..... 70

Capítulo 5. Conclusiones ..... 73

Capítulo 6. Bibliografía ..... 75

# Capítulo 0: Antecedentes

# Capítulo 0. Antecedentes

---

## 0.1 Antecedentes

Los químicos modernos son conscientes de que ciertas reacciones químicas pueden oscilar en el tiempo o en el espacio. Aproximadamente, antes de 1920, la mayoría de los químicos creían que las oscilaciones en sistemas homogéneos cerrados eran imposibles. La evidencia científica más antigua de que tales reacciones pueden oscilar fue recibida con cierto escepticismo.

De estas reacciones oscilantes, la más famosa es la reacción Belousov-Zhabotinsky (BZ). Ésta es también la primera reacción química que se encuentra que exhibe oscilaciones espaciales y temporales.

Los modelos teóricos oscilantes han sido estudiados por químicos, físicos y matemáticos. La más simple puede ser el Modelo de Lotka-Volterra. Otros modelos son el Brusselator y el Oregonator. Este último fue diseñado para simular la famosa reacción BZ.

# Capítulo 1: Introducción y objetivos

# Capítulo 1. Introducción y objetivos

---

## 1.1 Introducción

La llamada reacción de Belousov-Zhabotinsky fue inicialmente descubierta por Boris Belousov en algún momento entre 1951 y 1958 (la fecha exacta varía dependiendo de las fuentes). Un hecho singular que caracteriza la reacción de BZ y que la hace extremadamente relevante es el hecho de que la concentración de algunas especies que participan en la misma sufren una serie de oscilaciones durante un periodo de tiempo relativamente prolongado. Ha de destacarse que durante dichas oscilaciones el sistema no pasa por el punto de equilibrio, lo que implicaría una violación de la segunda ley de la termodinámica. Como consecuencia en la reacción de BZ se observan macroscópicamente oscilaciones y patrones espaciales, que son estructuras típicas de sistemas fuera del equilibrio.

Esta reacción no sólo posee gran importancia desde el punto de vista físico, químico (su estudio dio lugar a conceptos nuevos como el de oscilador químico no lineal) y matemático (las ecuaciones que la modelan poseen interés en sí mismas) sino que además es extremadamente sugerente desde un punto de vista biológico. Al ser un ejemplo clásico de termodinámica fuera del equilibrio no fue inicialmente bien acogida por la comunidad científica de la época, al considerarse que precisamente violaba las leyes de la termodinámica.

La reacción de BZ surgió como consecuencia del trabajo de su descubridor al intentar encontrar un análogo inorgánico del ciclo de Krebs. Concretamente en la receta original se hacía reaccionar una disolución de bromato y ácido cítrico en ácido sulfúrico con iones de cerio ( $Ce^{+4}$ ). Lo que Belousov pretendía ver era la conversión del color amarillo del  $Ce^{+4}$  en el incoloro  $Ce^{+3}$ . Su sorpresa fue observar que tras volver incolora la disolución volvía al color amarillo, y de nuevo incolora de forma repetida. Es más, observó que cuando la solución no era agitada se formaban en ella ondas de color amarillo que se propagaban por el medio.

Intentó publicar su descubrimiento en varias revistas de la Europa del Este, pero le fue rechazada su publicación al ser considerado “imposible” su existencia, su única publicación sobre la reacción aparece en el libro de resúmenes sin referenciar de una conferencia sobre biología y radiación. Frustrado por este hecho, Belousov decidió abandonar la ciencia para siempre a pesar de los esfuerzos del bioquímico E. E. Schnoll para convencerle de que prosiguiese su trabajo, pero Belousov se limitó a transmitirle a Schnoll su receta.

Fue así como bajo la dirección de Schnoll el joven estudiante de doctorado A. M. Zhabotinsky continuó el trabajo en esta reacción, motivo por el cual la reacción recibe el nombre de Belousov y Zhabotinsky. En su trabajo Zhabotinsky hizo los primeros estudios en los que se describe el mecanismo de la reacción al tiempo que estudió la distribución espacial de los patrones que en ella aparecen. Aún así, el trabajo de Zhabotinsky no se dio a conocer en el resto del mundo hasta una conferencia en Praga en 1968. En 1980 Belousov (fallecido en 1970), A. M. Zhabotinsky, V. I. Krinsky y G. R. Ivanitsky recibieron el premio Lenin (máxima distinción científica en la antigua Unión Soviética) por su trabajo con la reacción.

Ya en sus trabajos originales Belousov había usado la ferroína (un indicador redox que es de color rojo en forma reducida y azul en su forma oxidada) en algunos experimentos para aumentar el contraste de los cambios de color durante las oscilaciones. Zaikin y Zhabotinsky descubrieron que la ferroína por sí sola podía catalizar la reacción de BZ sin la necesidad del cerio. De esta forma quedó fijada definitivamente la receta clásica.

## 1.2 Objetivos

El objetivo global de este trabajo es el estudio del comportamiento del modelo de un Lotka-Volterra. Este objetivo global deberá ser el resultado de la consecución de los siguientes objetivos específicos:

- Revisión bibliográfica del problema de Lotka-Volterra.
- Estudio del método de simulación por redes.
- Elaboración del modelo e implementación en CODENET.
- Simulación del modelo. Representación gráfica de resultados.
- Estudio del problema de Lotka-Volterra.
- Establecimiento de conclusiones y elaboración de la Memoria del trabajo realizado

# Capitulo 2: Fundamentos teóricos

# Capítulo 2. Fundamentos teóricos

---

## 2.1 Introducción

Este capítulo se desarrollará de la siguiente manera: en un primer lugar hablaremos de la reacción oscilante más estudiada, la reacción de Belousov-Zhabotinsky. A continuación, se describirá la importancia de desarrollar modelos que describan las reacciones químicas oscilantes, y seguido de esto, tres de los modelos más importantes: el Oregonator, que describe la reacción de Belousov-Zhabotinsky; el Brusselator, creado en la Universidad de Bruselas; y en último lugar el modelo objeto de estudio de este trabajo, el Lotka-Volterra.

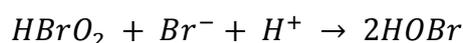
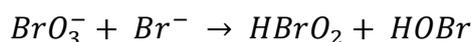
## 2.2 Reacción de Belousov-Zhabotinsky

El mecanismo de la reacción BZ es muy complejo, se puede simplificar separándolo en tres etapas.

### Primera etapa

La primera etapa se caracteriza por la reducción del  $BrO_3^-$  a  $Br^2$  que reacciona con el ácido malónico actuando como agente bromante.

Esta primera etapa sucede en varios pasos.

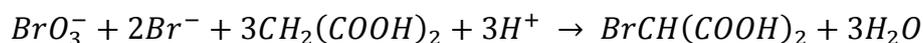


El bromo creado reacciona con el ácido malónico.



Como se observa en las reacciones el par redox  $Ce^{3+}/Ce^{4+}$  ni interviene en esta primera etapa, se necesita un exceso de bromuro.

La reacción global vista como la suma de las cuatro reacciones citadas antes es la siguiente:

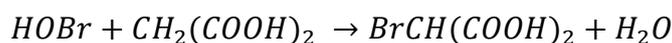
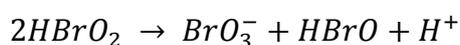
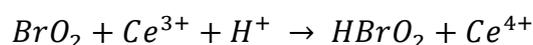
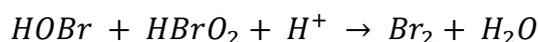


### Segunda etapa

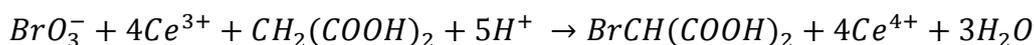
En una segunda etapa  $HBrO_2$  actúa como agente reductor del ion  $BrO^{-3}$ , el  $HBrO$  sustituye al  $Br_2$  ya que broma el ácido malónico. A medida que el bromuro se reduce por debajo de un valor crítico, esta segunda etapa se realiza más rápidamente.

El par redox interviene en la reacción  $Ce^{3+}$  se reduce a  $Ce^{4+}$ , en presencia del indicador se observa el viraje de la ferroína de rojo a azul.

La segunda parte del mecanismo consta de las reacciones:



La reacción global es la siguiente:



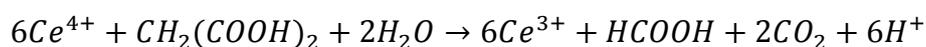
### Tercera etapa

Y una última etapa del proceso que consiste en la reducción del  $Ce^{4+}$  por acción del ácido bromomalónico dando  $Ce^{3+}$ .

Esto ocurre cuando la concentración del  $Ce^{4+}$  es elevada, en este paso se produce un aumento de la concentración de bromuro lo que favorece la primera etapa. Esta etapa explica la existencia de un largo periodo de inducción. La concentración de ácido bromomalónico debe aumentar de forma que se dé la reacción [10] produciendo un exceso de bromuro.

Durante el largo periodo de inducción hasta la aparición de las primeras oscilaciones la concentración de bromuro es muy baja. En presencia del indicador ferroína el color de la disolución vira de azul a rojo.

La tercera parte del mecanismo consta de dos reacciones:



A continuación, se presentan las fotos en las que se muestra el proceso oscilatorio:



[9] Figura 1: Transición de un color a otro. Durante ese corto intervalo, las concentraciones de Ce (III) y Ce (IV) son semejantes



[9] Figura 2



[9] Figura 3: En la mezcla reactiva predomina el Ce (III), lo cual hace que la concentración de  $((Ph)_2)Fe^{2+}$  sea elevada también y se observe un color rojo



[9] Figura 4



[9] Figura 5: En la mezcla reactiva predomina el Ce (IV), lo cual hace que la concentración de  $(Ph)_2Fe^{3+}$  sea elevada también y se observe un color azul pálido



[9] Figura 6



[9] Figura 7

## 2.3 Modelos para Reacciones Químicas Oscilantes

¿Por qué construir modelos teóricos para las reacciones químicas oscilantes?

Un modelo para una reacción química consta de las siguientes partes:

- Un mecanismo: esto es un conjunto de reacciones químicas elementares que describen como los reactivos forman productos intermedios, éstos se combinan con otros productos intermedios y otros reactivos, y en último lugar se producen los productos.
- Un conjunto de ecuaciones de velocidad: son ecuaciones diferenciales correspondientes al mecanismo de reacción y dan la velocidad de cambio de todos los reactivos, productos intermedios y productos finales.
- Un conjunto de ecuaciones de velocidad integrados: muestran las concentraciones en función del tiempo para reactivos, productos intermedios y productos. Son obtenidos por integración de las ecuaciones diferenciales de velocidad.

El criterio para que un modelo teórico sea aceptable es que éste describa las observaciones experimentales de medida variando las concentraciones en el tiempo.

Algunos modelos que describen reacciones químicas oscilantes son el Oregonator, el Brusselator, y el que va a ser objeto de estudio, el Lotka-Volterra.

## 2.4 Oregonator para Reacciones Químicas Oscilantes

Las reacciones oscilantes se describen a través de mecanismos muy complejos, para que estas sean posibles, es necesario que la reacción se encuentre lejos del equilibrio. De esa forma en ningún momento la concentración de las especies que intervengan será constante, logrando así que sean oscilantes con el tiempo. También es necesaria la existencia de una o más etapas catalíticas, uno de los productos es el reactivo de esa misma reacción.

Generalmente cualquier reacción química tiende a su posición de equilibrio más o menos rápida dependiendo del tipo de cinética que describa la reacción. La reacción no puede ir más allá del punto de equilibrio ya que incumpliría el segundo principio de la Termodinámica.

Es por ello que para que sea posible las reacciones oscilatorias debemos tener un proceso donde todas las etapas sean irreversibles unidireccionales y se dé en sistemas abiertos de flujo continuo (autocatálisis). El mecanismo exacto no se llegó a conocer hasta que en 1972 Noyes, Field y Körös explicaron el origen de las oscilaciones de las concentraciones  $Ce^{3+}$ ,  $Ce^{4+}$  y del ion  $Br^-$  mediante un mecanismo de reacción muy complejo conocido con el nombre de FKN.

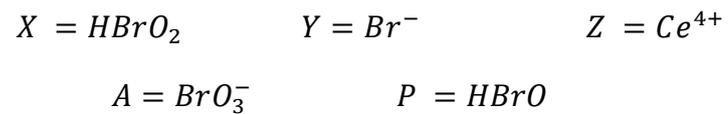
Se trata de un mecanismo genérico donde A y B son reactivos, X, Y e Z son especies intermedias de la reacción, y P son los productos.

Paso	Reacción	Velocidad de los pasos
1	$A + Y \rightarrow X$	$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A][Y]$ $\frac{d[Y]}{dt} = -k_1[A][Y]$ $\frac{d[X]}{dt} = k_1[A][Y]$
2	$X + Y \rightarrow P$	$\frac{d[X]}{dt} = -k_2[X][Y]$ $\frac{d[Y]}{dt} = -k_2[X][Y]$ $\frac{d[P]}{dt} = k_2[X][Y]$
3	$B + X \rightarrow 2X + Z$	$\frac{d[B]}{dt} = -k_3[B][X]$ $\frac{d[X]}{dt} = k_3[B][X]$ $\frac{d[Z]}{dt} = k_3[B][X]$
4	$2X \rightarrow Q$	$\frac{d[X]}{dt} = -k_4[X]^2$ $\frac{d[Q]}{dt} = k_4[X]^2$
5	$Z \rightarrow Y$	$\frac{d[Z]}{dt} = -k_5[Z]$ $\frac{d[Y]}{dt} = k_5[Z]$

Tabla 1: Reacciones en el modelo de Oregonator

El Oregonator describe un mecanismo que consta de 18 etapas elementales y 21 especies químicas distintas, y nos permite explicar los aspectos más destacados del mecanismo BZ.

Las especies del Oregonator se corresponden con las especies en la reacción de BZ siguientes.



## 2.5 Modelo de Brusselator para Reacciones Químicas Oscilantes

El mecanismo de reacción a estudiar, comúnmente llamado Brusselator, es un ejemplo de una reacción química oscilante autocatalítica. Una reacción autocatalítica es una en la que actúa una especie para incrementar la velocidad de la reacción producida. En muchos sistemas dinámicos complejos autocatalíticos son vistos, incluyendo múltiples estados estables y orbitas periódicas.

La dinámica y la química de las reacciones oscilantes han sido solamente objeto de estudio desde los últimos 50 años, empezando con el trabajo de Belousov.

El modelo de Brusselator fue propuesto por Prigogine y sus colaboradores de la universidad de Bruselas. Las reacciones del mecanismo y sus correspondientes velocidades son:

Pasos	Reacción molecular	Velocidades de los pasos
1	$A \rightarrow X$	$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]$ $\frac{d[X]}{dt} = k_1[A]$
2	$2X + Y \rightarrow 3X$	$\frac{d[X]}{dt} = k_2[X]^2[Y]$ $\frac{d[Y]}{dt} = k_2[X]^2[Y]$
3	$B + X \rightarrow Y + D$	$\frac{d[B]}{dt} = -k_3[B][X]$ $\frac{d[X]}{dt} = -k_3[B][X]$ $\frac{d[Y]}{dt} = k_3[B][X]$ $\frac{d[C]}{dt} = k_3[B][X]$
4	$X \rightarrow E$	$\frac{d[X]}{dt} = -k_4[X]$ $\frac{d[D]}{dt} = k_4[X]$

Tabla 2: Reacciones en el modelo de Brusselator

## 2.6 Modelo de Lotka-Volterra para Reacciones Químicas Oscilantes

El sistema de ecuaciones diferenciales Lotka-Volterra tiene un interés especial en el campo del Pensamiento Sistémico debido a que reúne dos características clave: aún tratándose de un modelo no lineal es sencilla de modelar con medios informáticos y hace tangible los conceptos a veces abstractos de interdependencia y acoplamiento, esenciales desde la perspectiva sistémica pues estas son “características isomorfas” a todos los sistemas.

El modelo Lotka-Volterra en su forma más simple trata de dos tipos de especies diferentes pero unidas por un fuerte vínculo enmarcado en el más puro darwinismo: una especie presa y otra especie predatora comparten un mismo ecosistema. Las premisas de partida son igualmente simples: la especie presa se desenvuelve en un medio sin escasez de alimentos y que la especie presa no tiene otro predator adicional al declarado en el modelo. Por otro lado, la especie predatora únicamente consume la especie presa declarada en el modelo y ninguna otra, incluida la propia especie predatora. Esto último bien es cierto que atenta contra la teoría de la evolución, puesto que la especie predatora debería estar capacitada para buscar otra especie para cazar cuando desaparece la población de la especie presa, como tampoco es posible la migración para presas o predadores y aunque es posible la existencia de otras especies, no afectan con la interacción a estudiar. Esto significa que el modelo parte de la hipótesis de trabajo de ser un sistema cerrado.

El modelo Lotka-Volterra muestra claramente la interdependencia entre las especies del sistema presa-predador y refleja lo que podemos intuir en el comportamiento cualitativo del modelo sin llegar a visualizarlo numéricamente o gráficamente, esto es, si hay muchos predadores y cazan todas las presas, podemos intuir lo que les pasará a la especie predatora al cabo de pocos periodos (curva logística exponencialmente negativa), mientras que si no hay predadores podemos intuir lo que les pasará a la especie presa al cabo de pocos periodos (curva logística exponencialmente positiva). Lo que ya resulta algo más complejo es que nuestra intuición nos anticipe lo que sucederá en un estadio de cuasi-equilibrio. Es lo que vamos a visualizar ahora, las oscilaciones del sistema y la emergencia de un cierto patrón oscilatorio común en muchos sistemas.

Vamos pues a interpretar el modelo de Lotka-Volterra.

$$\frac{dx}{dt} = x(\alpha - \beta y)$$

$$\frac{dy}{dt} = -y(\gamma - \delta x)$$

Donde,

- $x$  es el número de presas;
- $y$  es el número de predadores;
- $dx/dt$  y  $dy/dt$  representa el crecimiento de las dos poblaciones en el tiempo;
- $t$  representa el tiempo, y  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  y  $\delta$  son parámetros que representan las tasas de crecimiento/decrecimiento y de interacción entre las dos especies, es decir,  $\alpha$  representa la tasa de crecimiento de las presas,  $\beta$  representa la tasa de eliminación de las presas por parte de los predadores,  $\gamma$  representa la tasa de eliminación natural de los predadores y  $\delta$  representa la tasa de crecimiento de los predadores como resultado del consumo de presas.

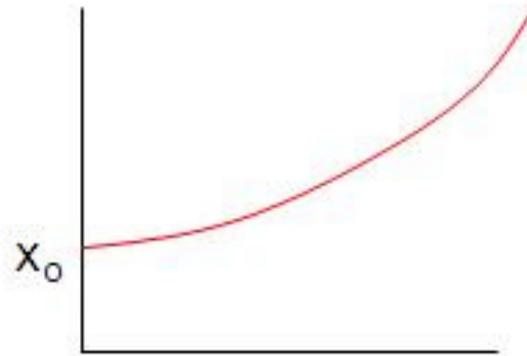
Como se puede observar intuitivamente, la velocidad con que varía la población de presas ( $x$ ) es proporcional a la población existente en el momento ( $t$ ) y proporcional al número de interacciones con los predadores ( $y$ ), es decir, proporcional tanto a la población de presas ( $x$ ) como de predadores ( $y$ ) en el momento ( $t$ ). Combinando ambos efectos la velocidad de variación de la población de presas será:

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x - \beta xy$$

Y la velocidad con que varía la población de predadores ( $y$ ) es proporcional a la población existente en el momento ( $t$ ) y proporcional al número de encuentros presa ( $x$ ) predador ( $y$ ), es decir, proporcional tanto a la población de presas ( $x$ ) como de predadores ( $y$ ) en el momento ( $t$ ). Combinando ambos efectos la velocidad de variación de la población de predadores será:

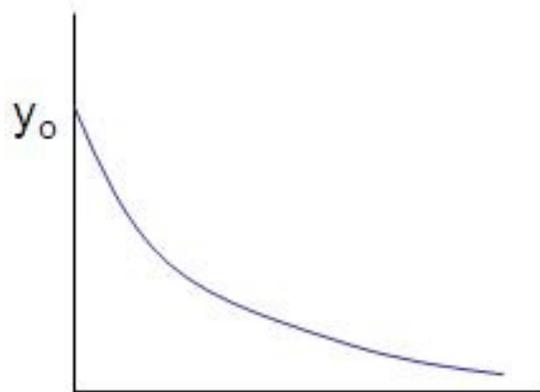
$$\frac{dy}{dt} = \delta xy - \gamma y$$

Por otro lado, como he anticipado antes, existen dos interpretaciones intuitivas fácilmente deducibles en el modelo, donde en ausencia de predadores ( $y$ ), la población de presas ( $x$ ) crece en forma exponencial positiva hasta saturar la capacidad de carga del ecosistema.



[10] Figura 8: Crecimiento exponencial de presas en ausencia de depredadores

Y, obviamente su contrario, esto es, en ausencia de presas ( $x$ ), los depredadores ( $y$ ) se extinguen en forma exponencial negativa hasta su extinción.

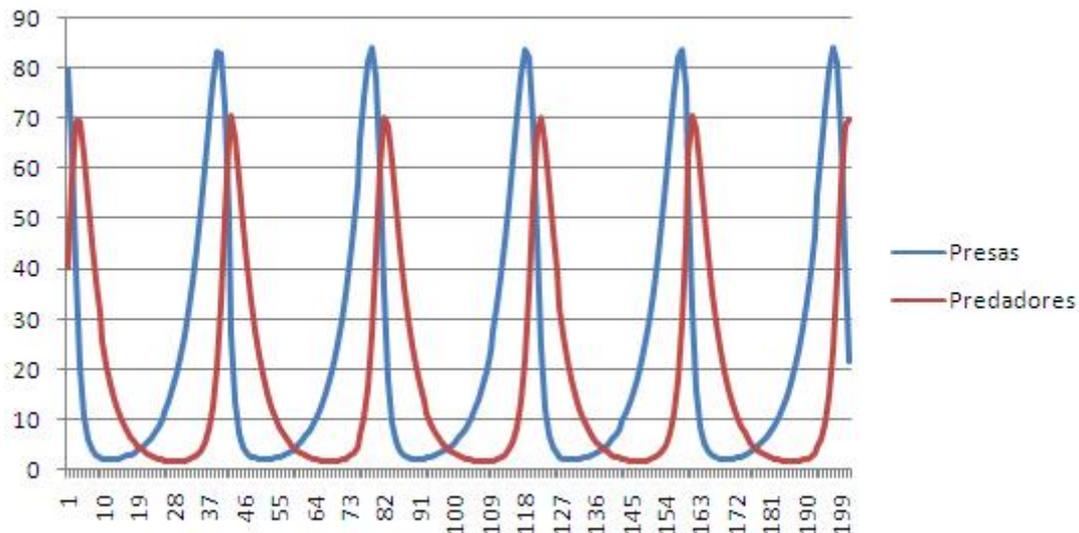


[10] Figura 9: Decrecimiento exponencial de depredadores en ausencia de presas

Pero, lo importante ocurre con el comportamiento anti-intuitivo del modelo Lotka-Volterra se encuentra cuando los parámetros de interacción  $\beta$  y  $\delta$  son distintos a cero, es entonces cuando nos encontramos con un sistema de dos ecuaciones acopladas, donde existe retroalimentación porque la variación de uno de los componentes del sistema afecta al segundo componente que a su vez afectará al primero. Es en este punto donde se encuentra lo más destacable del modelo, pues nos descubre sutilmente la emergencia de una propiedad sistémica de importancia para ambas especies: su interdependencia. Pues de algún modo, las presas “dependen” de los depredadores para evitar la maldición Malthusiana que supondría una superpoblación que superase la capacidad de carga del ecosistema, a la vez que los depredadores “dependen” de las presas para sobrevivir, reproducirse y evitar su desaparición. Aquí

es donde comienza lo interesante desde el punto de vista cualitativo y donde Volterra descubrió algunas propiedades dignas de mencionar.

La primera propiedad se denomina con el tiempo *Ley de la periodicidad de Volterra* que viene a decir que el cambio de los tamaños poblacionales de ambas especies (presa y depredadora) son periódicas, en efecto:



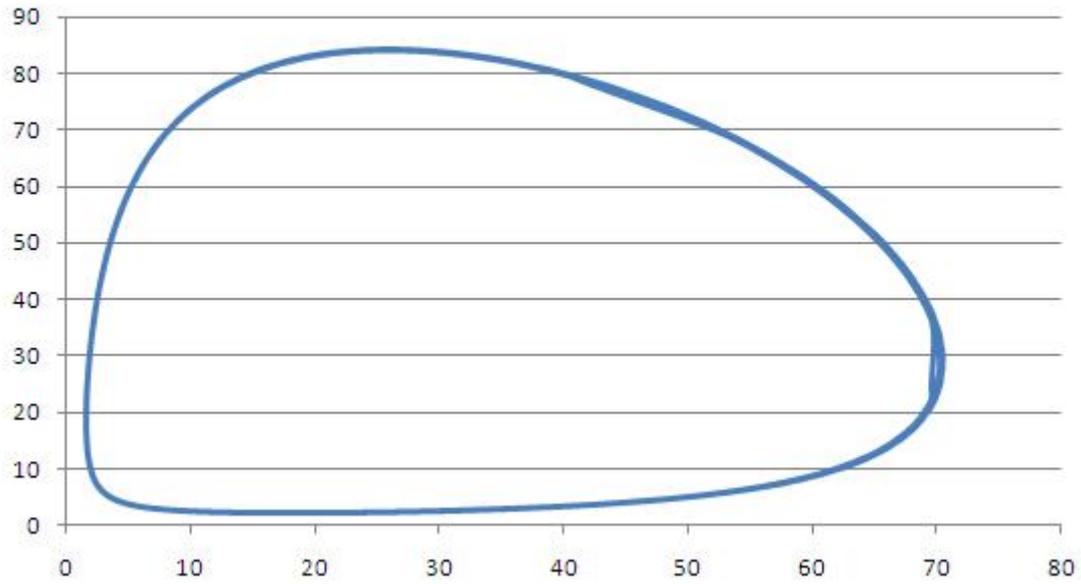
[10] Figura 10: Ley de la periodicidad de Volterra

Otra propiedad interesante y anti-intuitiva es la *Ley de la Conservación de los promedios*. Según ésta ley los promedios de los tamaños poblacionales de la especie presa (x) y de la depredadora (y) son independientes de su tamaño inicial y, calculados en un periodo son  $\alpha/\beta$  y  $\Upsilon/\delta$ .

Y, tal vez la propiedad más anti-intuitiva es la *Ley de la perturbación de los promedios*, más conocida como el "*Principio de Volterra*", que viene a decir que si las poblaciones de ambas especies son destruidas a una razón proporcional a su tamaño poblacional, el promedio de las presas aumenta, mientras que el de los depredadores disminuye.

Por último pero no menos importante es contemplar la *Ley de la periodicidad de Volterra* con el prisma del concepto del *atractor de ciclo límite*. Esto se consigue al graficar las soluciones  $x(t)$  e  $y(t)$  en forma paramétrica en el espacio de fases (x, y), obtenemos la superposición de dos funciones oscilatorias que podemos graficar mediante un típico diagrama de dispersión. En efecto, si observamos el ciclo poblacional de las presas en función del ciclo poblacional de los depredadores comprobaremos un patrón gráfico típico en el comportamiento de muchos sistemas.

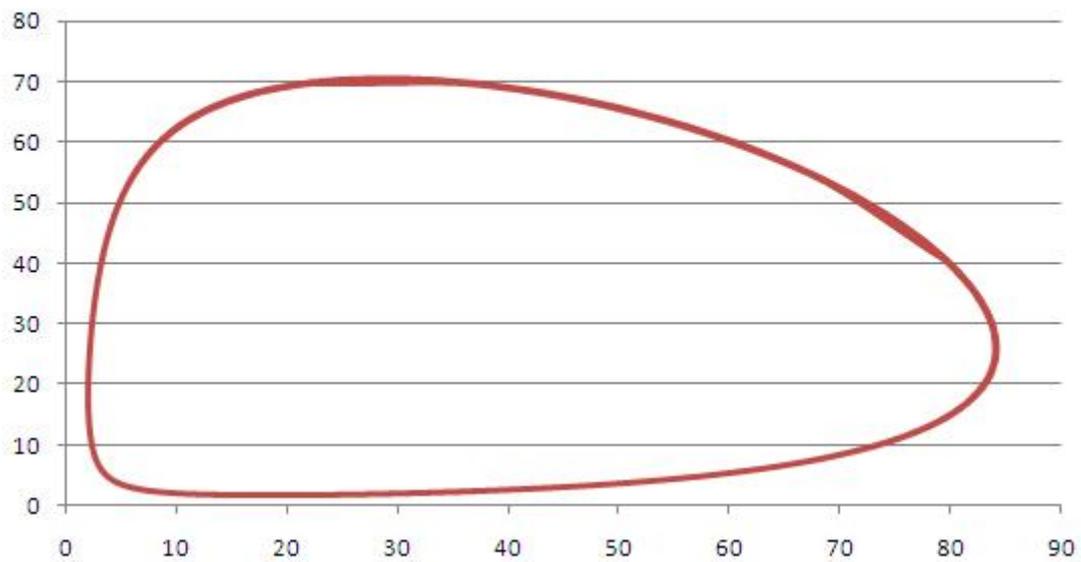
### Ciclo de Presas en función de Predadores



[10] Figura 11: Ciclo de presas en función de predadores

Igualmente, observamos el mismo fenómeno en el ciclo poblacional de los predadores en función del ciclo poblacional de las presas.

### Ciclo de Predadores en función de Presas



[10] Figura 12: Ciclo de predadores en función de presas

Volviendo a las reacciones químicas oscilantes, el modelo de Lotka-Volterra fue el primero en describir que las reacciones químicas podían oscilar.

Las ecuaciones que lo describen son las siguientes:

Pasos	Reacción molecular	Velocidad de la reacción
1	$A + X \rightarrow 2X$	$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A][X]$ $\frac{d[X]}{dt} = k_1[A][X]$
2	$X + Y \rightarrow 2Y$	$\frac{d[X]}{dt} = -k_2[X][Y]$ $\frac{d[Y]}{dt} = k_2[X][Y]$
3	$Y \rightarrow B$	$\frac{d[Y]}{dt} = -k_3[Y]$ $\frac{d[B]}{dt} = k_3[Y]$

**Tabla 3: Reacciones en el modelo de Lotka-Volterra**

Las leyes eficaces de velocidad para el reactivo A, el producto B, y los intermedios X e Y se encuentran sumando las contribuciones de cada paso:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A][X]$$

$$\frac{d[X]}{dt} = k_1[A][X] - k_2[X][Y]$$

$$\frac{d[Y]}{dt} = k_2[X][Y] - k_3[Y]$$

$$\frac{d[B]}{dt} = k_3[Y]$$

El paso 1 se llama autocatalítico porque X acelera su propia producción. Del mismo modo, el paso 2 también es autocatalítico. Problema: Dado el mecanismo que se requiere para resolver [A], [X], [Y] y [B] en función del tiempo. Lotka obtiene concentraciones oscilantes para ambos productos intermedios [X] e [Y]. Como la concentración de reactante [A] es constante (como, por ejemplo, A se sustituye de forma continua desde una fuente externa, ya que se consume en la reacción). El mecanismo de Lotka puede ser re-interpretado como un modelo para hacer oscilar las

poblaciones de depredadores y presas como lo hizo Volterra. En esto, [A] representa el ecosistema en el que se aprovechan [X] e [Y] depredador-presa. El paso 1 representa la procreación, la población de presas duplica en  $k_1$  la tasa [A] (crecimiento exponencial típica). Entonces [Y] es la población de depredadores que consumen la presa con el fin de sostener (y ampliar) su población. El paso 2 representa esta inclinación de los depredadores para reproducir en proporción a la disponibilidad de presas. Y, finalmente (paso 3), los depredadores mueren a una cierta tasa natural (también exponencial) de modo que se eliminan del ecosistema.

## 2.7 Método de simulación por redes

### 1. Introducción

El método de simulación por redes (MESIR) es una herramienta que permite estudiar cualquier proceso que pueda definirse mediante un modelo matemático. El procedimiento consta de dos fases: en primer lugar la elaboración de un modelo en red o circuito eléctrico equivalente del proceso y posteriormente, la simulación del proceso obteniendo la solución del modelo en red mediante el programa adecuado de resolución de circuitos eléctricos.

El MESIR ha sido aplicado con éxito en los campos de transporte a través de membranas, transferencia en masa en soluciones electrolíticas y no electrolíticas, transporte de calor en fluidos, vibraciones mecánicas, elasticidad, problemas inversos, etc.

### 2. El modelo en red

Un modelo en red se considera equivalente a un determinado proceso cuando las ecuaciones del modelo matemático discretizado y las ecuaciones del modelo en red para un elemento del volumen correspondientes a variables análogas coinciden.

La técnica consiste en reticular el espacio en elementos de volumen o celdas elementales. Al aplicar a estas celdas de tamaño finito las ecuaciones diferenciales, se obtienen un conjunto de ecuaciones diferenciales en diferencias finitas. Una vez que se ha establecido la correspondencia entre variables dependientes del problema y variables eléctricas, los resultados de la simulación pueden interpretarse en términos del proceso que se modela. La asociación de celdas según la geometría del problema configura el modelo en red correspondiente a todo medio finito. El modelo será más preciso cuanto mayor sea el número de celdas.

### 3. Componentes del modelo en red

A la red se le asocia un conjunto de flujos que obedecen a una ley de balance local y un conjunto de fuerzas que satisfacen la condición de unicidad. Las leyes de Kirchhoff establecen relaciones entre flujos y fuerzas por separado, pero no expresan ningún tipo de relación de flujos y fuerzas entre sí. Las relaciones entre el par conjugado flujo-fuerza se conocen como ecuaciones constitutivas y definen los elementos del circuito que expresan características de cada proceso. Las relaciones constitutivas se pueden establecer entre las variables de un par flujo-fuerza, se denominan monpuertas.

#### 3.1. Monopuertas pasivas

Los elementos pasivos no generan potencia (o bien disipan en una transformada energética o bien la almacenan y/o la entregan a la red), constituyen las monopuertas pasivas. En función de la relación existente entre las variables que obedecen a la ley de corrientes de Kirchhoff LCK y a la ley de voltajes de Kirchhoff LVK, existen las siguientes monopuertas pasivas:

- Monopuertas resistiva: es un elemento de circuito asociado a una relación entre las derivadas temporales de las variables flujo y fuerza de una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la resistencia R.

$$\frac{dX(t)}{dt} = \frac{RdJ(t)}{dt}$$

Una monopuerta resistiva es lineal si también lo es la relación entre las variables X (t) y J (t), en este caso R es una constante. Su acción es instantánea y carecen de memoria. Las monopuertas resistivas no lineales se definen a través de las funciones:

$$J(t) = Fr^{-1}(X)$$

$$X(t) = Fr(J)$$

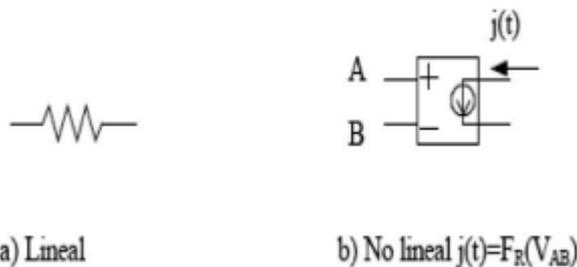


Figura 13: Representación simbólica de monopuertas resistivas

- Monopuerta capacitiva: es un elemento de circuito asociado a una relación entre la variable flujo y la derivada temporal de la variable fuerza en una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la capacidad C.

$$J(t) = C \frac{dX(t)}{dt}$$

En las monopuertas capacitivas se produce algún tipo de almacenamiento sin pérdidas. Su estado tiene en cuenta todas las operaciones hechas con anterioridad, de manera que tiene memoria.



Figura 14: Representación simbólica de una monopuerta capacitiva

- Monopuerta inductiva: es un elemento de circuito asociado a una relación entre la variable fuerza y la derivada temporal de la variable flujo de una misma rama mediante una función independiente del tiempo que es la inductancia L.

$$X(t) = L \frac{dJ(t)}{dt}$$

Al igual que en la monopuerta capacitiva, se produce un almacenamiento de energía sin pérdidas y su estado tiene memoria.



Figura 15: Representación simbólica de una monopuerta inductiva o inercial

### 3.2. Monopuertas activas

Las fuentes de tensión y corriente son elementos activos que generan potencia según una determinada ley, son las monopuertas activas. En ellas se produce una aportación o extracción de energía del sistema. Hay tres tipos de monopuertas activas:

- Fuentes constantes: se definen con las expresiones  $F_J(J) = 0$  y  $F_X(X) = 0$  en fuentes de flujo y fuerza respectivamente. Tienen asignado un sentido que indica por donde fluye la energía. Corresponden a pilas o generadores de corriente constante.

- Fuentes dependientes del tiempo: la relación constitutiva entre las variables tiene la forma  $X = X(t)$  y  $J = J(t)$  según se trate de fuentes de fuerza o flujo. También tiene asignado un sentido que indica la dirección en que fluye la energía.
- Fuentes controladas: son monopuertas especiales asociadas a relaciones constitutivas entre variables (conjugadas o no) expresadas mediante cualquier función que no contiene explícitamente el tiempo. Se trata de elementos de entradas múltiples con una única salida que corresponde a un flujo o una fuerza que depende de otros flujos o fuerzas de distintas ramas y nudos, del mismo o diferente circuito. Estas fuentes permiten especificar acoplos energéticos de distinto tipo.

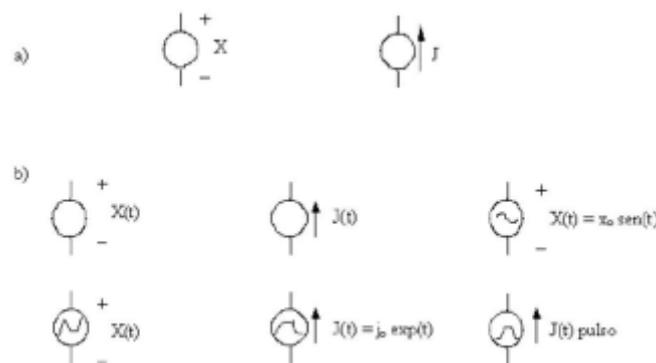


Figura 16: a) Representación simbólica de fuentes constantes y b) Representación simbólica de fuentes dependientes del tiempo

#### 4. El MESIR como método numérico

En el MESIR, el punto de partida es un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales (EDP) espacio-temporales. La única transformación que se hace en las ecuaciones es la discretización de la variable espacial que permite establecer la red eléctrica equivalente.

El modelo en red es la forma que se le da al modelo matemático para poder introducirlo en el software de resolución de circuitos PSPICE, que resuelve las ecuaciones de la red y proporciona la solución numérica del modelo matemático.

La elaboración del modelo en red implica la reticulación espacial, pero no temporal. Se parte de un sistema de EDP cuya reticulación espacial las convierte en ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo, que son las correspondientes al

circuito de una celda elemental. La diferencia esencial es que en los métodos numéricos ordinarios se realiza una reticulación simultánea de las dos variables independientes espacio y tiempo, mientras que en el MESIR la reticulación espacial que da como resultado el modelo en red y en segundo lugar, una reticulación temporal que realiza el software PSPICE durante el proceso de simulación.

## 5. Simulación mediante el programa PSPICE

Una vez se ha traducido el modelo a un lenguaje que PSPICE puede interpretar, el programa simula el proceso y arroja los resultados. La simulación está estructurada en cinco subprogramas principales (entrada, organización, análisis, salida y utilidades) que interaccionan entre ellos a través de una estructura de datos. El subprograma de entrada lee el archivo, construye una estructura de datos y chequea el circuito. El de organización construye las estructuras adicionales de datos que serán requeridas en el programa de análisis. El subprograma de salida genera y organiza en la memoria central los resultados solicitados por el usuario en forma tabulada o gráfica.

El subprograma análisis es la parte más importante del programa de simulación. Ejecuta los análisis del circuito requerido según las indicaciones del archivo de entrada. La información resultante se almacena en la memoria central para su posterior procesamiento en los archivos de salida.

En el proceso de simulación se obtiene la solución numérica de la representación matemática del modelo en red, esta representación contiene: las ecuaciones matemáticas de los diferentes tipos de monpuertas, solución de ecuaciones lineales, solución de ecuaciones no lineales e interpretación numérica.

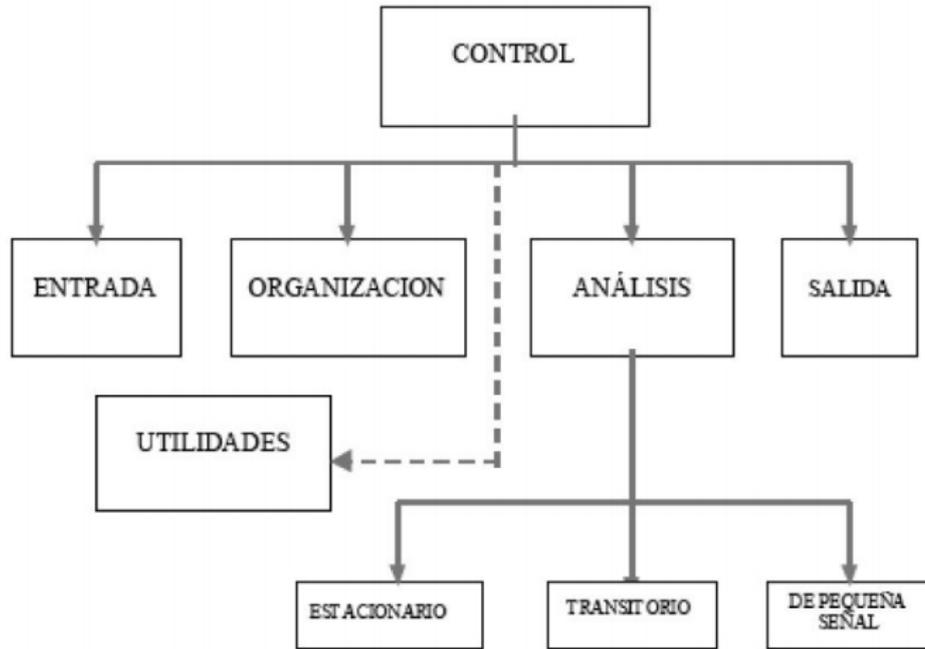


Figura 17: Diagrama de bloques del programa de simulación de circuitos Spice

El uso cada vez más extendido de SPICE demuestra su capacidad para el tratamiento de una extensa variedad de problemas en simulación de circuitos, resolviendo respuesta en corriente continua, respuesta transitoria en el tiempo y análisis de Fourier en el dominio de la frecuencia y análisis de pequeña señal en corriente alterna y distorsión.

# Capítulo 3: El programa CODENET\_15

# Capítulo 3: El programa CODENET\_15

---

## 3.1 Introducción

Este software facilita tanto la tarea de introducción de datos y creación de modelos como la de procesamiento de los archivos generados por los programas Ngspice y, sobretodo, Matlab, que es una herramienta potente en el post-procesado de datos y representación gráfica. El nombre CODENET es un acrónimo de “Coupled Ordinary Differential Equations by Network Method”.

La elaboración de los archivos de texto de los modelos siguen reglas muy intuitivas; está organizado en los mismos bloques, con independencia del problema, y permite acceder fácilmente a las soluciones a través de una numeración estándar de componentes y nudos del modelo.

A continuación se explicaran las diferentes ventanas de acceso al usuario (entrada de datos, opciones de simulación, acceso a la representación de las soluciones...) y se presentan aplicaciones a ejemplos ilustrativos.

El funcionamiento básico de CODENET\_15 se muestra en el diagrama de la figura 18.

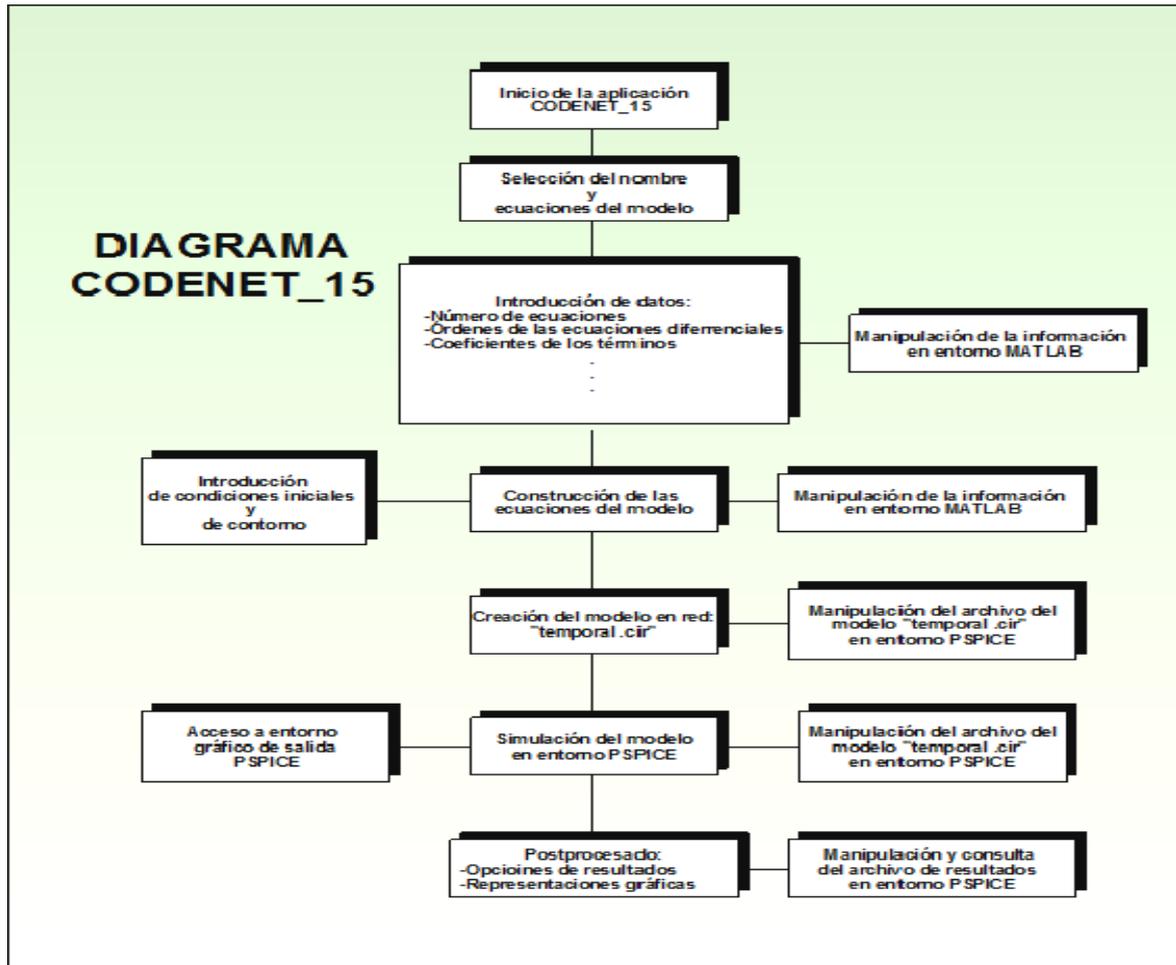


Figura 18: Diagrama de flujo del funcionamiento del programa CODENET\_15.

## 3.2. Interface de introducción de datos

### 3.2.1 Pantalla inicial

El programa CODENET\_15 está caracterizado por ser una aplicación de fácil manejo, teniendo nociones básicas de ecuaciones diferenciales ordinarias y sistemas de estas. Así, una vez que abrimos el ejecutable, la primera pantalla, figura 19, nos permite introducir el nombre que le vamos a asignar al modelo y si deseamos que esté compuesto por una sola ecuación o por un sistema de ecuaciones diferenciales.

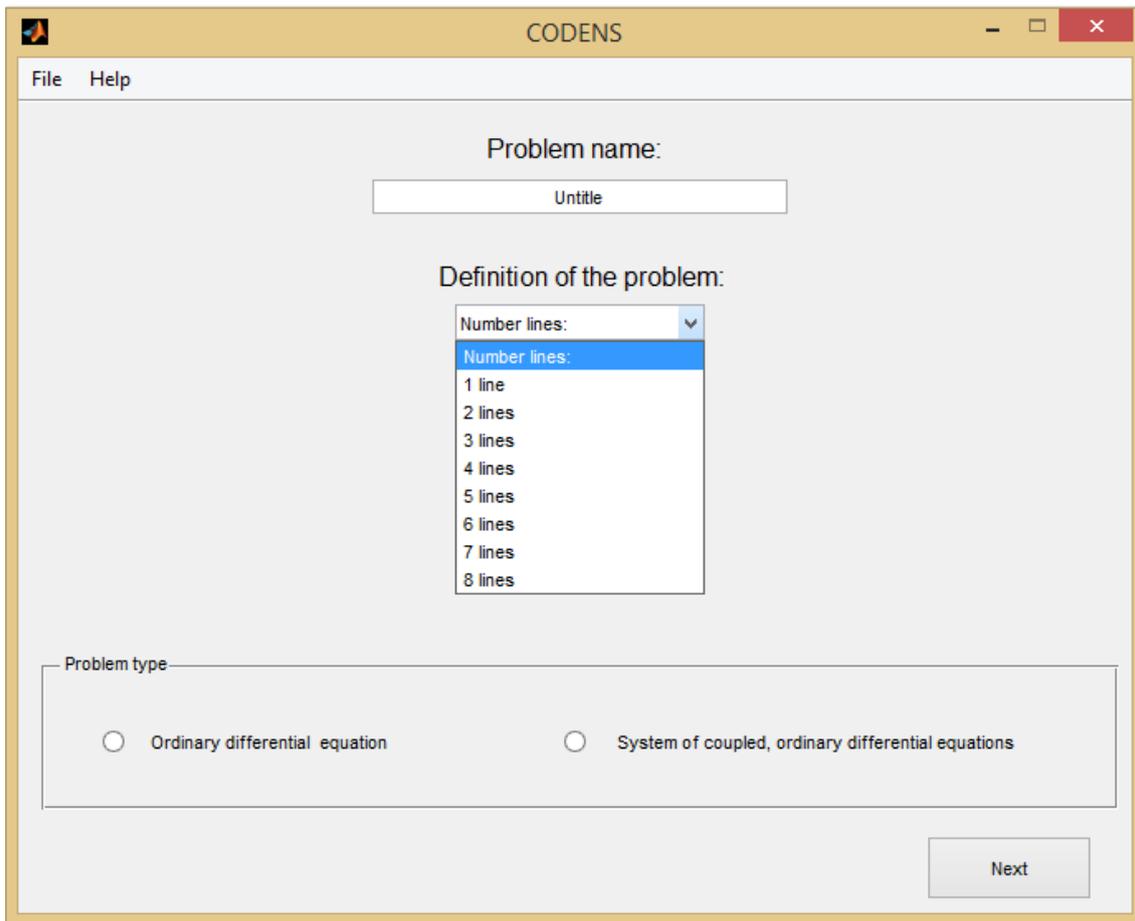


Figura 19: Pantalla de inicio del programa CODENET\_15

En esta primera pantalla, podemos definir para el problema el número de líneas..., para más tarde poder pasar a la descripción de cada una de las ecuaciones en la siguiente pantalla mediante el botón “Next”.

Además, en la pantalla inicial, tenemos una barra de herramientas, figura 20 donde al pulsar “File” se presenta un desplegable con las opciones clásicas siguientes:

- i) Generar el modelo de un nuevo problema, ‘New’,
- ii) Cerrar la aplicación, “Close”

También, tenemos un menú de ayuda, “Help”.

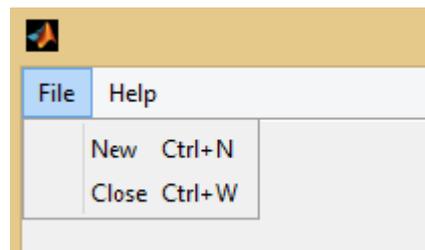


Figura 20: Barra de herramientas de la pantalla inicial

### 3.2.2 Pantalla de generación de una ecuación diferencial ordinaria

Si elegimos, para el modelo, la generación de una ecuación diferencial ordinaria, “Ordinary Differential Equation”, la siguiente pantalla de introducción de datos es la mostrada en la figura 21. En esta, podemos elegir que la ecuación sea hasta del cuarto orden de magnitud, teniendo así cubierta la práctica totalidad de los problemas mecánicos a los que nos podamos enfrentar.

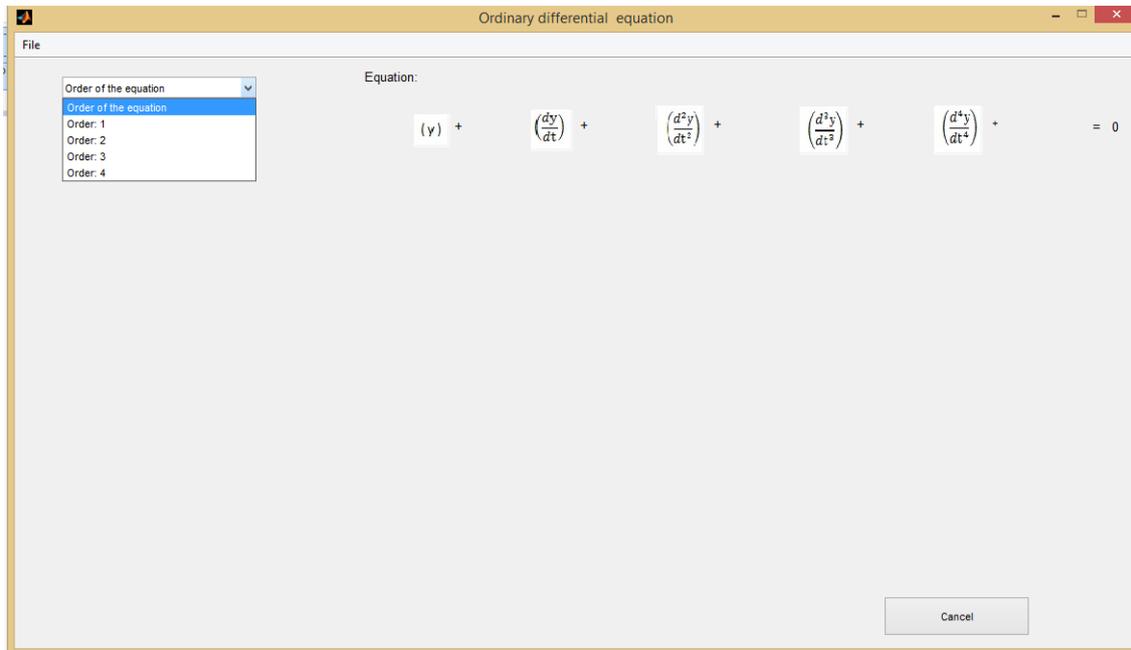


Figura 21: Pantalla para la generación de una ecuación diferencial ordinaria

Más tarde, el programa nos pide la introducción de los valores de los coeficientes de cada término y el exponente al que estará elevado cada derivada, con excepción de uno, que será el de la derivada mayor, que puede ser simplificado, como puede verse en la figura 22. También se ha de introducir el término independiente y el tiempo máximo que queremos elegir para nuestra simulación. Se ha incluido una casilla que, para facilitar la introducción de datos, se puede marcar y se despliega la nomenclatura que se ha de utilizar para algunas funciones u operaciones matemáticas. En esta pantalla disponemos de una barra de herramientas, figura 23, donde tenemos un menú desplegable en el botón “File” con las siguientes opciones:

- i) Generar el modelo de un nuevo problema, “New”,
- ii) Cargar un modelo ya guardado, “Open”,
- iii) Grabar el modelo que se está generando, “Save” (está opción aparecerá una vez hayamos rellenado datos),
- iv) Cerrar el modelo actual y pasar a la pantalla inicial, “Close”.

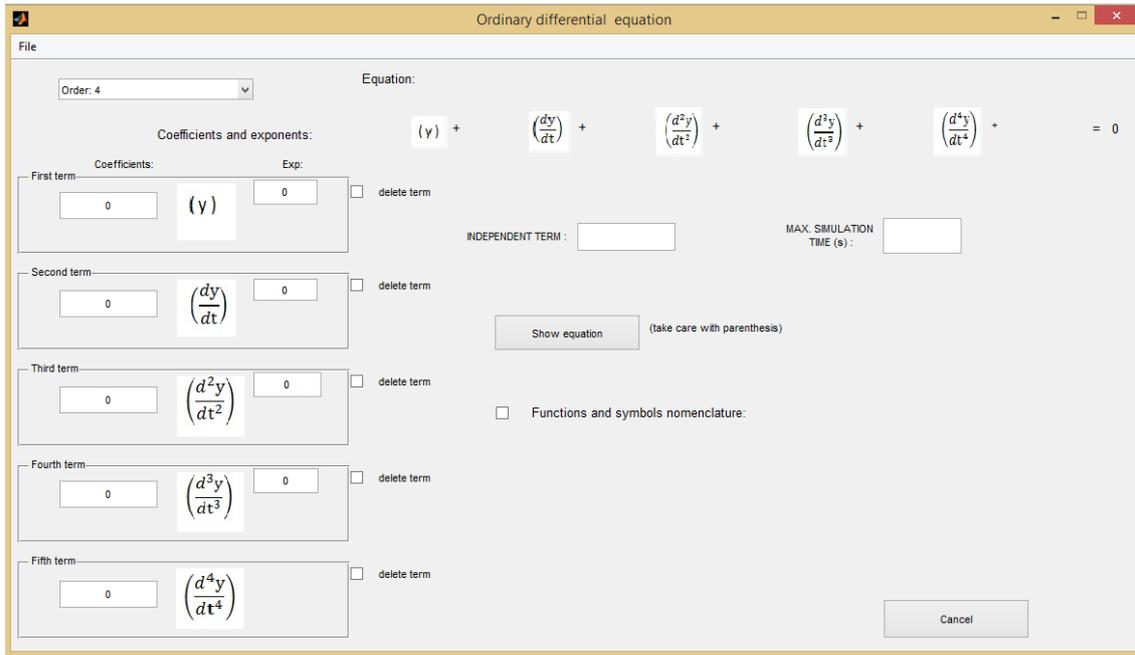


Figura 22: Introducción de datos para una ecuación diferencial ordinaria

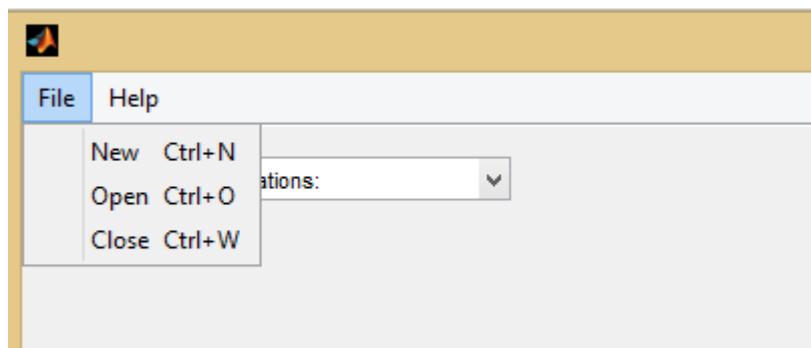
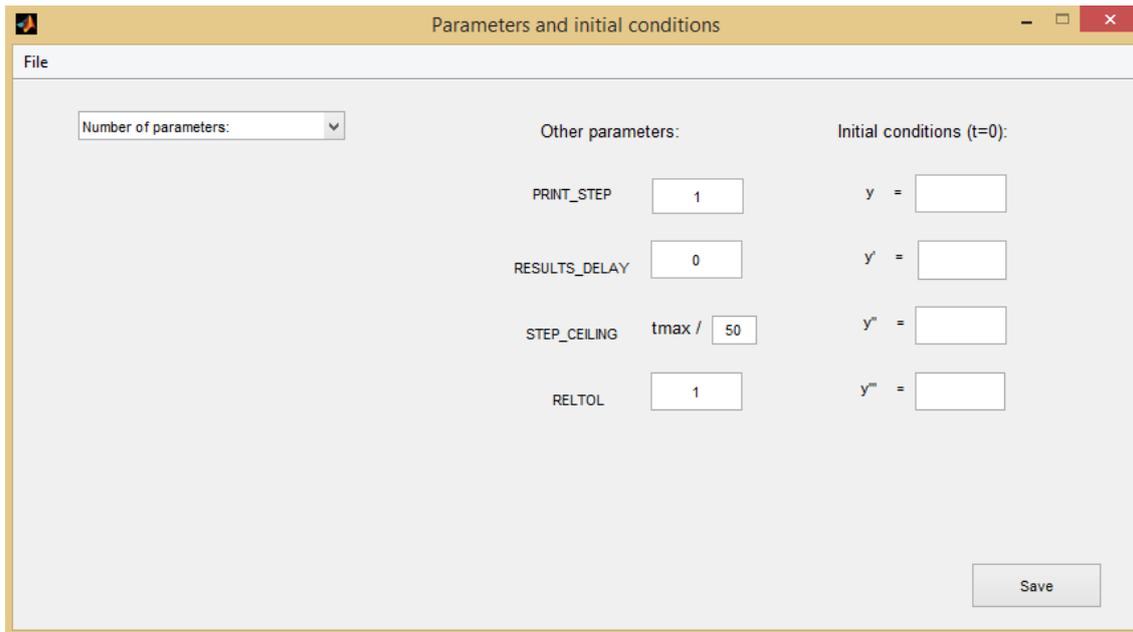


Figura 23: Barra de herramientas de la pantalla de generación de ecuaciones

Una vez que hayamos rellenado todo esta información debemos pulsar el botón “SHOW EQUATION” y, entonces, aparece en la pantalla la ecuación generada de nuestro modelo. En ese momento, se muestra otro botón que debemos pulsar para la agregar las condiciones iniciales y los parámetros que puedan tener nuestras ecuaciones, figura 24.



**Figura 24: Introducción de condiciones iniciales y de contorno**

Aquí tenemos otra barra de herramientas con un desplegable en el botón “File” con las opciones:

- i) Borrar los datos introducidos, “Clear”,
- ii) Cerrar esta ventana, “Close”.

En esta pantalla de introducción de datos se podrá dar valor de hasta diez parámetros que puedan existir en la ecuación, también de las condiciones iniciales para la incógnita y sus derivadas y el valor de otros parámetros especiales como:

- i) “PRINT STEP”,
- ii) “RESULTS DELAY”,
- iii) “STEP CEILING”
- iv) “RELTOL”, (relative tolerance), referida a parámetros internos del programa SPICE, establece un compromiso entre la precisión de los resultados y el tiempo de computación.

Una vez introducidos estos datos se procede a grabarlos pulsando “SAVE”, para que el programa CODENET\_15 los compute dentro del modelo que se está generando, desapareciendo, entonces, esta pantalla y volviendo a la de generación de la ecuación del modelo, figura 22. Allí, ya sólo quedará pulsar el botón “CREATE TEXT FILE”, para que el programa genere un archivo de texto “.txt”, figura 25, que será el “.cir” y éste podrá ser post-procesado por las herramientas gráficas de MATLAB o PSPICE, apareciendo en pantalla mediante el editor de texto “bloc de notas” de cualquier

computador con Windows, con la típica barra de herramientas de este editor de texto, figura 26, y que nos facilitará el tratamiento, edición y guardado de este archivo donde se precise.

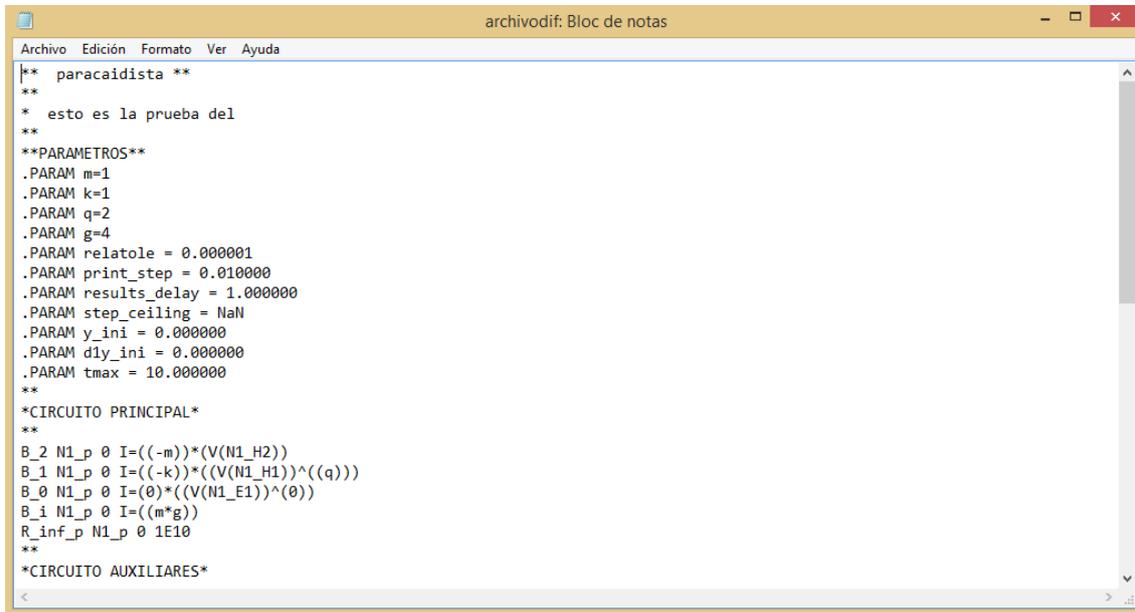


Figura 25: Archivo “.cir” de un modelo de prueba: Skydiverequation

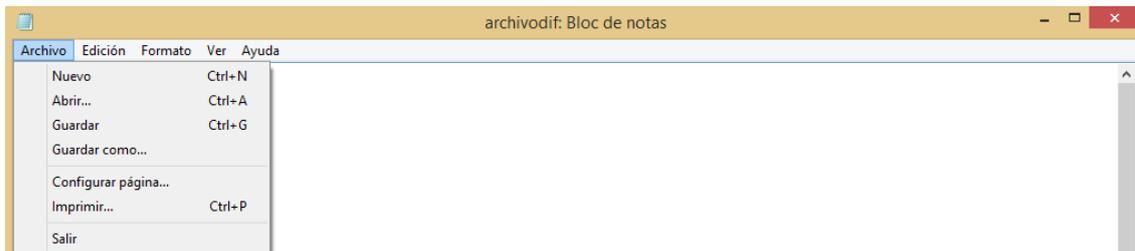


Figura 26: Barra de herramientas del editor de texto bloc de notas

Tras guardar el archivo de texto del modelo volveremos a la pantalla de generación de la ecuación, donde hay otro botón con la leyenda “SIMULATION”, para la simulación gráfica del modelo hasta ahora construido. Al pulsar este se abrirá otra ventana, figura 27, con las opciones que pueden interesar para la representación gráfica, que nos permite representar la variable dependiente frente a la independiente, cualquiera de sus derivadas o incluso todas las gráficas a la vez.

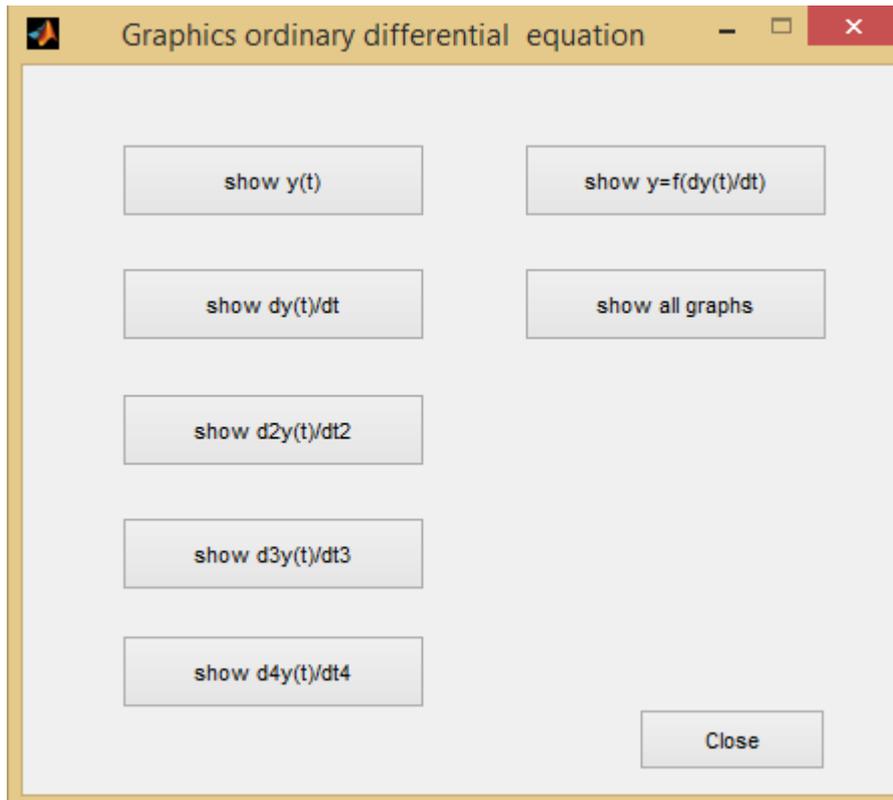
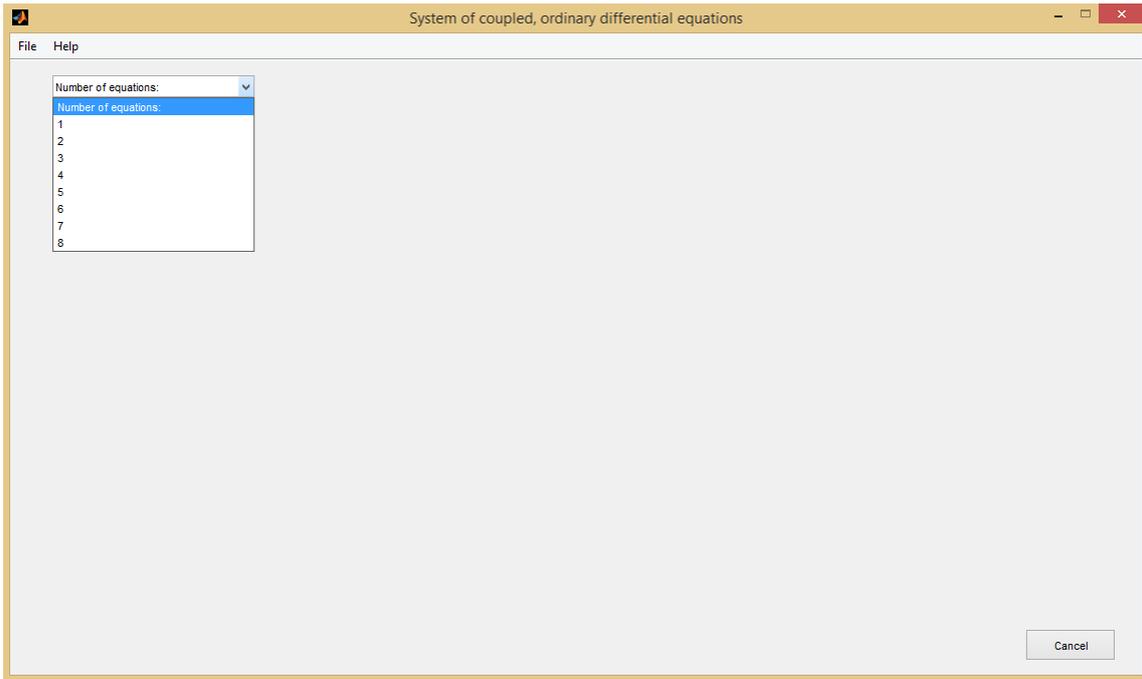


Figura 27: Ventana de opciones para la simulación

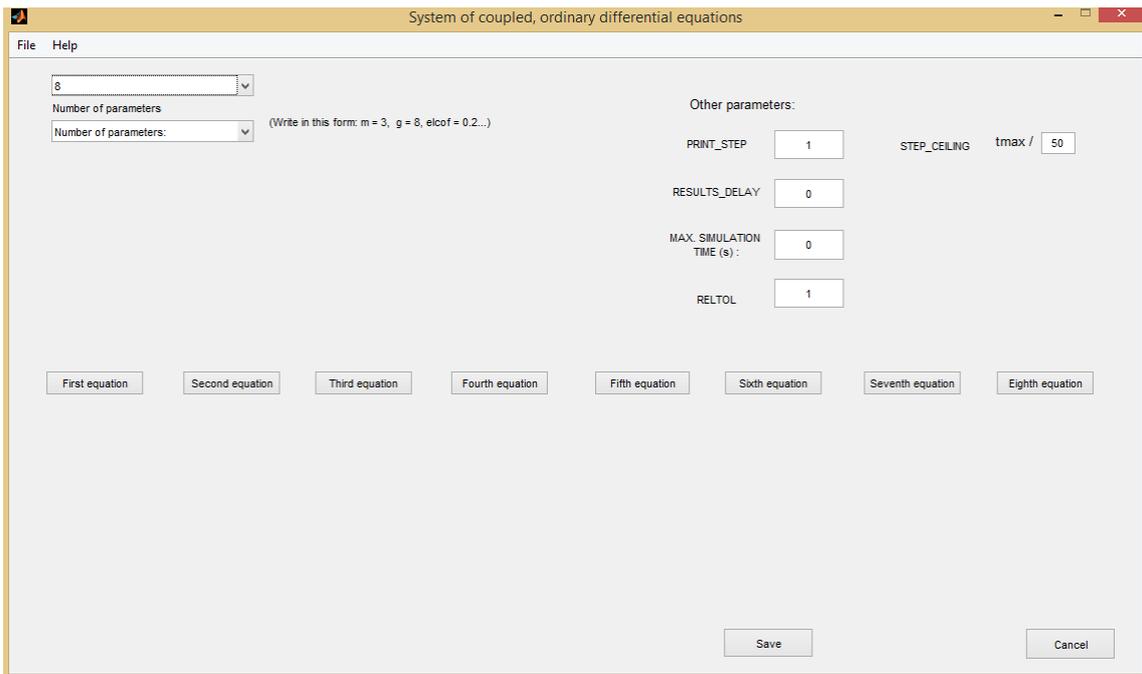
### 3.2.3 Pantalla de generación de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y acopladas

Si esta vez elegimos en la pantalla inicial del programa CODENET\_15 para el modelo que queremos estudiar, un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y acopladas, “system of coupled, ordinary differential equations”, la pantalla que muestra el programa se muestra en la figura 28, donde tenemos un desplegable que nos ofrece opciones acerca del número de ecuaciones que contiene el modelo. También, como sucedía al tratar en el punto anterior de una sola ecuación diferencial, tenemos una barra de herramientas con las opciones “File” y “Help”, como se muestra en la figura 23. El número de ecuaciones que se pueden elegir para el modelo es ocho, quedando así cubierta la práctica totalidad de los problemas mecánicos que podamos someter a estudio.

En la siguiente figura se muestra la opción del mayor número de ecuaciones permitidas por la aplicación para un sistema de ecuaciones diferenciales, figura 29, y a través de esta pantalla, se puede ir eligiendo una a una la ecuación que se quiere construir, haciendo click en cada una, para posteriormente pasar a otra pantalla de captura de datos muy similar a la que ya se ha visto en la generación de una ecuación diferencial del apartado anterior.

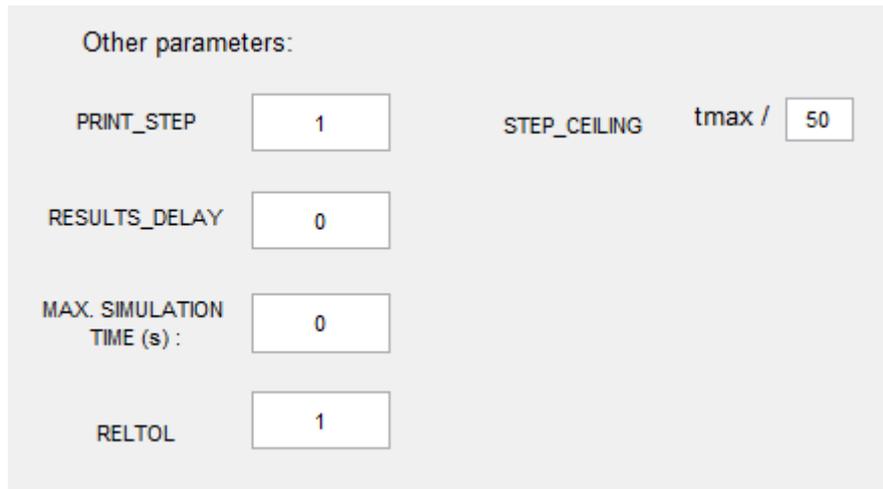


**Figura 28: Pantalla para la generación de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y acopladas**



**Figura 29: Número máximo de ecuaciones permitidas para un sistema en CODENET\_15**

Se hace notar que, cuando se trate de un sistema de ecuaciones diferenciales, los parámetros especiales que aparecen en la figura 30, aparecen en la pantalla original del sistema, y no en la de introducción de datos de cada una de las ecuaciones, como, también, ocurría cuando se trataba de una sola ecuación.



Other parameters:

PRINT\_STEP       STEP\_CEILING tmax /

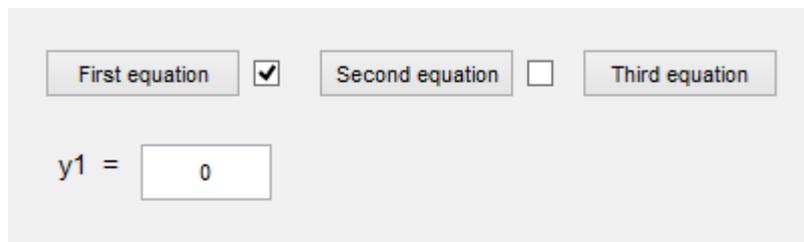
RESULTS\_DELAY

MAX. SIMULATION TIME (s) :

RELTOL

Figura 30: Detalle de los parámetros especiales en un sistema de ecuaciones

Una vez que vayamos introduciendo los datos de cada una de las ecuaciones del sistema, las iremos grabando pulsando “SAVE” e iremos volviendo, cada vez, a la pantalla de la figura 29 correspondiente a la del sistema de ecuaciones, para proceder con la siguiente ecuación hasta completar todas las que conformen nuestro modelo. Aparecerá al lado de cada ecuación generada una casilla, como se muestra en la figura 31, que podrá ser marcada y desmarcada para incluir las condiciones iniciales de todas las ecuaciones.



First equation       Second equation       Third equation

y1 =

Figura 31: Detalle de las condiciones iniciales

Una vez la información referente a todas las ecuaciones del modelo y sus condiciones de contorno este rellena, junto con los parámetros que puedan contener, se pulsará sobre el botón “SAVE” de la pantalla original del sistema y se generará un archivo de texto, “.txt”, similar al de la figura 32, que podrá ser guardado con facilidad, pues es abierto con el editor de textos, bloc de notas, como ocurría en el apartado anterior cuando se habló la generación de un modelo con una sola ecuación.

```

archivoacopladadif: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
** Untitle **
**
**
**PARAMETROS**
.PARAM tmax = 11.000000
.PARAM relatore = 11
.PARAM print_step = 2.000000
.PARAM results_delay = 11.000000
.PARAM step_ceiling = 0.220000
.PARAM y1_ini = 1
.PARAM y2_ini = 2
.PARAM d1y2_ini = 2
**
*CIRCUITO PRINCIPAL 1ª ECUACION*
**
B_1_y1 N1_p_y1 0 I=2*(V(N1_H1_y1))
B_0_y1 N1_p_y1 0 I=1*((V(N1_E1_y1))^3)
B_i_y1 N1_p_y1 0 I=2
R_inf_p_y1 N1_p_y1 0 1E10
**
*CIRCUITO AUXILIARES 1ª ECUACION*
**
B_1_y1V N1_E1_y1 0 V=V(N1_p_y1)
C_E1_y1 N1_E1_y1 N1_aux_E1_y1 1 IC=1
V_NULA_E1_y1 0 N1_aux_E1_y1 DC 0
R_inf_a_E1_y1 N1_E1_y1 0 1E10
    
```

Figura 32: Ejemplo de archivo de texto, “.txt”, generado para un sistema de ecuaciones

Después de cerrar o guardar dicho archivo de texto se puede visualizar en la pantalla la aparición de un nuevo botón en el margen inferior derecho con la leyenda “SIMULATION”. Una vez pulsado emerge la ventana de opciones para la representación gráfica del modelo, como muestra el ejemplo de la figura 33.

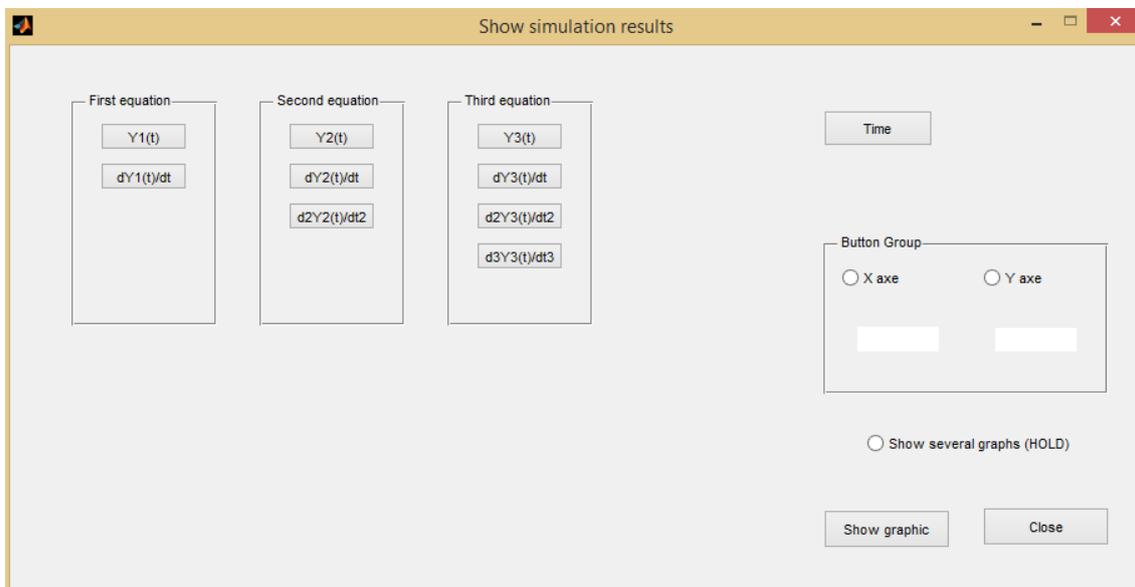


Figura 33: Opciones de simulación

En ésta se puede elegir que variable o cualquiera de sus derivadas queremos representar y en que eje, figura 34, pudiéndose colocar en cualquier eje a la variable independiente, el tiempo. Incluso hay una opción que permite hacer varias representaciones a la vez seleccionando “SHOW SEVERAL GRAPHS (HOLD)”. Por último pulsando sobre “SHOW GRAPHIC” se mostrarán las gráficas que interesen del modelo creado.

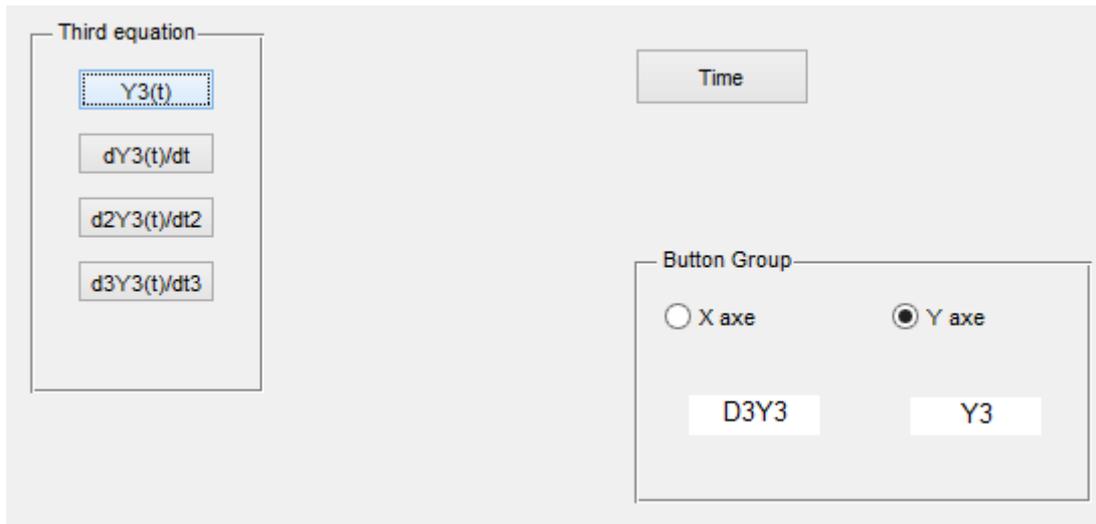


Figura 34: Detalle de la selección de ejes para las variables

### 3.3. Creación del modelo

Una vez implementada la ecuación en el software, el botón “Create a text file”, figura 35, permite crear un archivo .cir que se ejecutará en la consola de NgSpice.

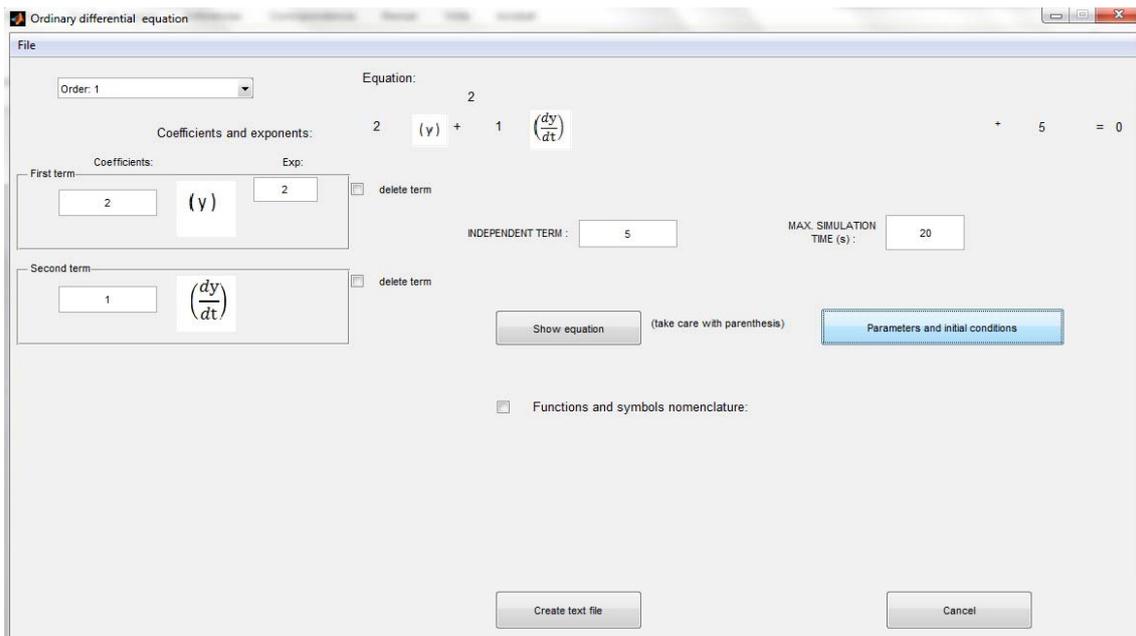


Figura 35: Ecuación implementada en CODENET\_15

Como se ha indicado en el apartado 3.2, el archivo que se genera está programado en código Spice. Para la presentación del archivo, el software utiliza los recursos propios de Windows, mostrando el circuito que representa la ecuación implementada con el bloc de notas, evitando que el usuario tenga que instalar otro software para su visionado, Figura 36.

```

archivodif.txt: Bloc de notas
Archivo Edición Formato Ver Ayuda
** Ecuación **
**
**
**PARAMETROS**
.PARAM 5
.PARAM tmax = 20.000000
.PARAM relatole = 1.000000
.PARAM print_step = 1.000000
.PARAM results_delay = 0.000000
.PARAM step_ceiling = 0.400000
.PARAM y_ini = 1.000000
**
*CIRCUITO PRINCIPAL*
**
B_1 N1_p 0 I=(1)*(V(N1_H1))
B_0 N1_p 0 I=(2)*((V(N1_E1))^(2))
B_i N1_p 0 I=(5)
R_inf_p N1_p 0 1E10
**
*CIRCUITO AUXILIARES*
**
B_1V N1_E1 0 v=V(N1_p)
C_E1 N1_E1 N1_aux_E1 1 IC=1.000000
V_NULA_E1 0 N1_aux_E1 DC 0
R_inf_a_E1 N1_E1 0 1E10
**
H_1 0 N1_H1 V_NULA_E1 1
R_aux_H1 N1_H1 0 1
**
V_time N1_t 0 DC PWL(0s,0s,20.000000s,20.000000s)
R_time N1_t 0 1
**
.TRAN 1.000000s 20.000000s 0.000000s 0.400000s UIC
.OPTIONS NOPAGE RELTOL=1.000000
.OPTIONS NUMDGT=5
*Listado de variables a imprimir en el archivo OUT

.control
run
display
wrdata tmp\res1 V(N1_p)
wrdata tmp\res2 V(N1_H1)
.endc
    
```

Figura 36: Ecuación implementada en formato de circuito

### 3.4. Simulación y resultados

Una vez se ha creado el circuito, el software presenta el botón “Simulation” que permite la simulación de la ecuación implementada en CODENTE\_15.

Tras su ejecución, el software presenta una nueva ventana que da acceso a la representación de las variables de la ecuación, Figura 37.

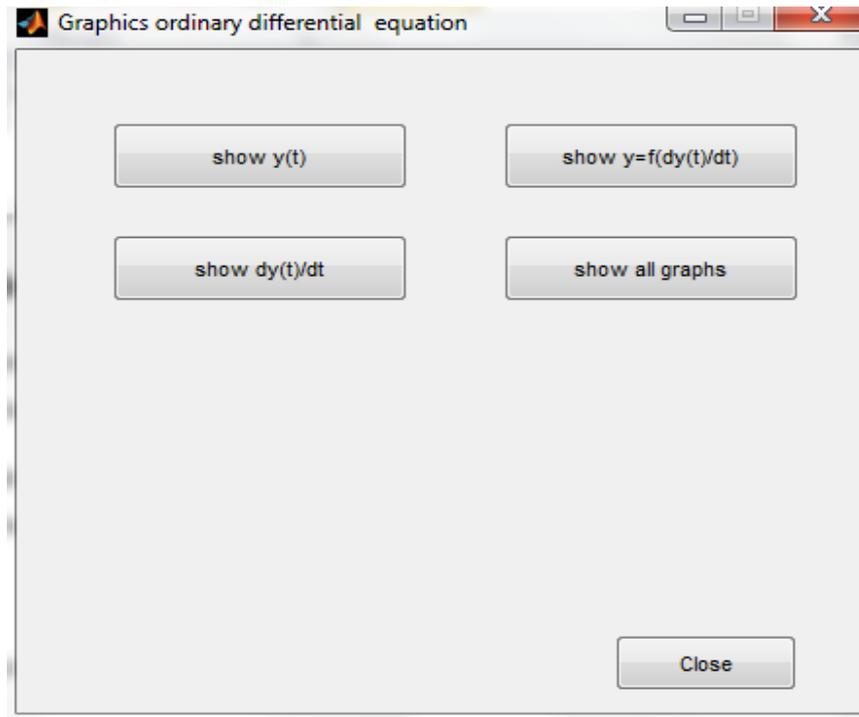


Figura 37: Ventana de representación de resultados

Para el ejemplo implementado, cada uno de los botones permite la representación de temporal de la variable seleccionada, Figura 38.

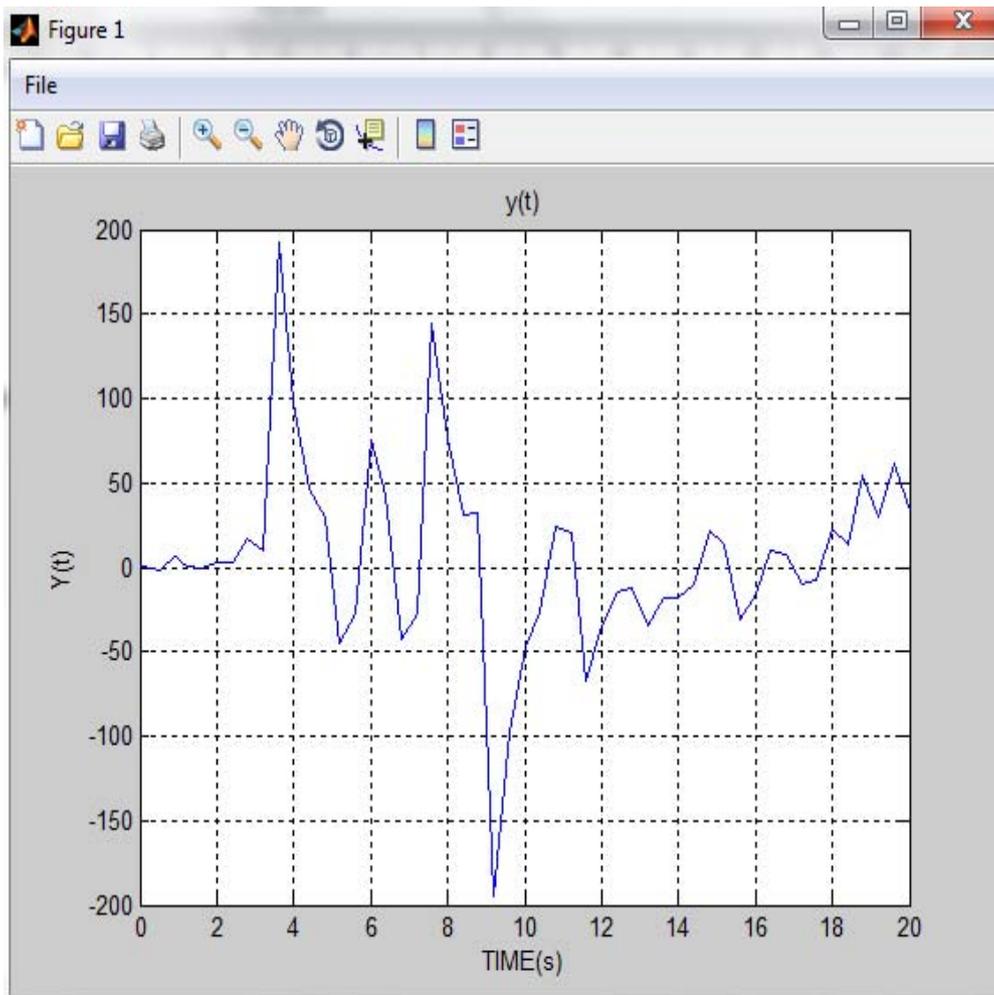


Figura 38: Representación gráfica de una variable

# Capítulo 4: Análisis de resultados

# Capítulo 4. Análisis de resultados

---

## 4.1 Introducción

En este capítulo abordaremos el análisis del modelo de Lotka-Volterra para reacciones químicas, demostrando su funcionamiento, y variaremos los parámetros para ver su comportamiento. Además haremos una representación gráfica de la variación de los parámetros.

## 4.2 Cálculo de los puntos estables y adimensionalización de las ecuaciones

Para el cálculo de los puntos estables del sistema, hacemos las derivadas de los productos [X] e [Y] cero.

$$\frac{dX}{dt} = 0 \rightarrow k_1AX - k_2XY = 0 \rightarrow k_1A = k_2Y \rightarrow Y_{est} = \frac{Ak_1}{k_2}$$

$$\frac{dY}{dt} = 0 \rightarrow k_2XY - k_3Y = 0 \rightarrow k_2X = k_3Y \rightarrow X_{est} = \frac{k_3}{k_2}$$

Resumiendo los puntos estables son:

$$Y_{est} = \frac{Ak_1}{k_2}$$

$$X_{est} = \frac{k_3}{k_2}$$

Y mediante análisis dimensional obtenemos los siguientes parámetros característicos:

$$t_o = \frac{1}{k_1A} \cdot \varphi \left( \frac{-k_1A}{k_3}, \frac{-k_2y_o}{k_1A} \right)$$

$$x_o = \frac{-k_3}{k_2} \cdot \varphi \left( \frac{-k_1A}{k_3}, \frac{-k_2y_o}{k_1A} \right)$$

Que son los valores que nos encargaremos de buscar en el siguiente apartado.

### 4.3 Representación gráfica

En primer lugar demostraremos que el sistema muere para los puntos estables, en este caso todos los valores serán igual a 1, y nuestros puntos iniciales serán los mismos que los puntos estables, para ello cogeremos los puntos iniciales  $x_0 = y_0 = x_{est} = y_{est} = k1 = k2 = k3 = A = 1$ .

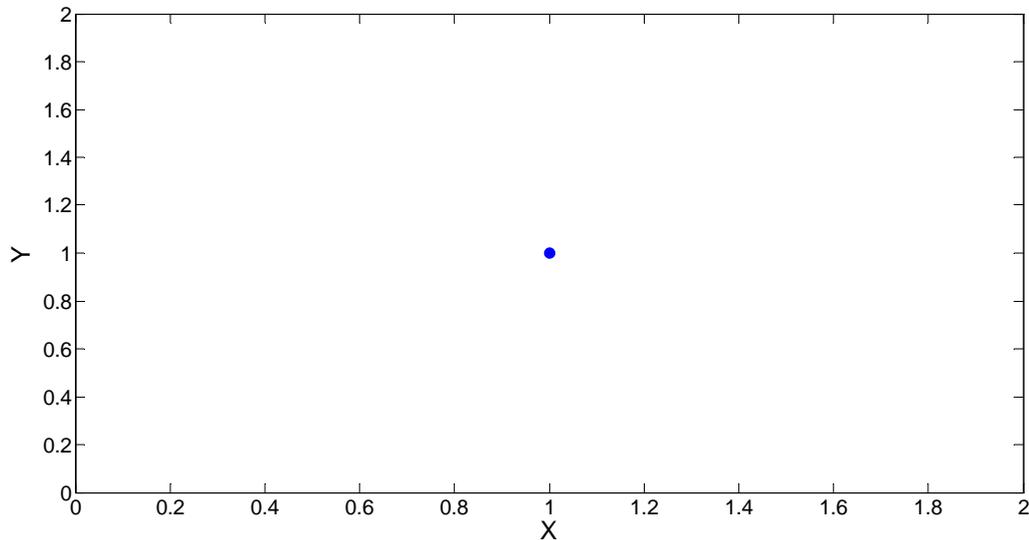


Figura 39: Representación del estado muerto

Podemos apreciar que cuando los puntos iniciales son iguales a los estables el sistema muere.

Ahora vamos a mostrar que nuestro trabajo se encuentra en el cuadrante 2, para ello, a la hora de representar el diagrama de fases utilizaremos el tiempo característico del caso base, es decir,  $t_0 = 1.596$ . Podemos verlo en la figura 40:

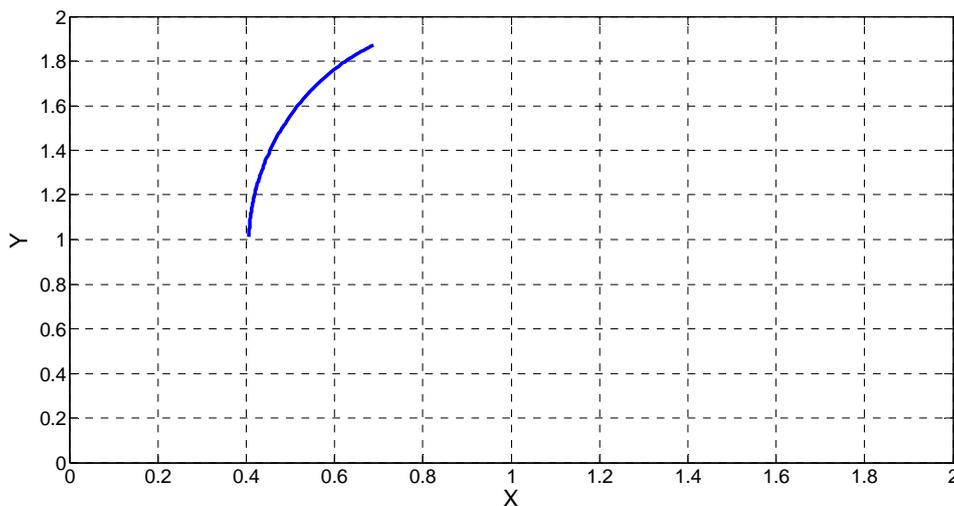


Figura 40: Representación del segundo cuadrante donde se va a realizar nuestro estudio

Posteriormente vamos a poner una tabla resumen de los casos a estudiar, en los que buscaremos que la composición característica o el tiempo característico varíen, y para ello jugaremos con el resto de los parámetros.

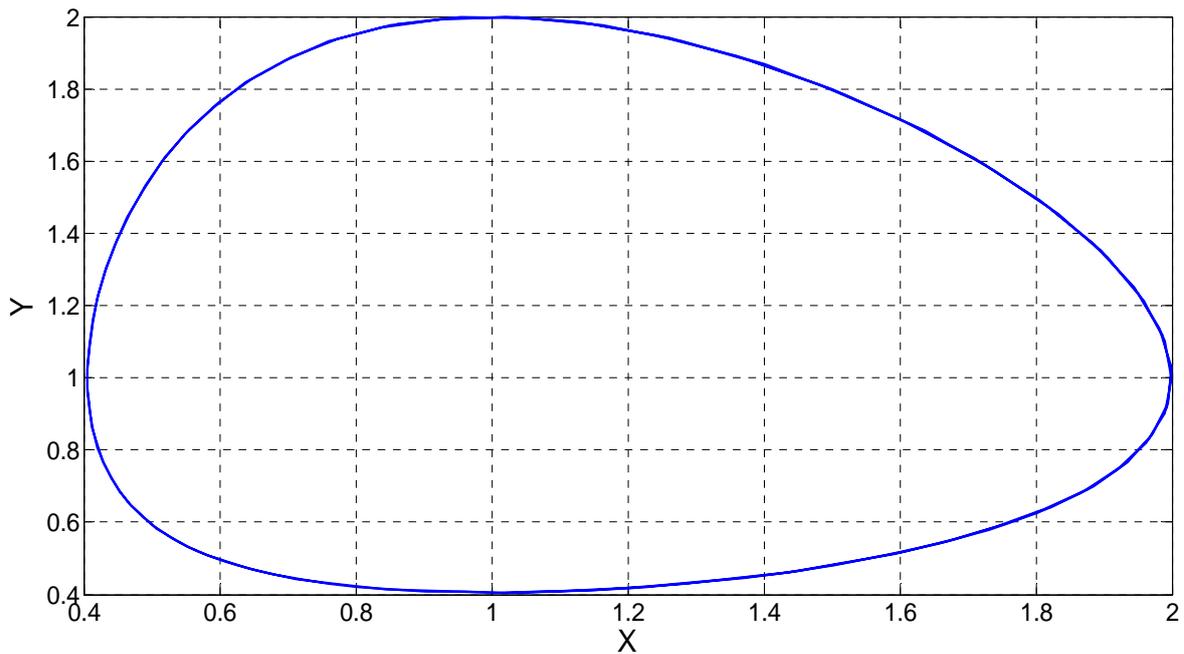
Caso	x <sub>est</sub>	y <sub>est</sub>	A	k1	k2	k3	x <sub>i</sub>	y <sub>o</sub>	y <sub>i</sub>	x <sub>o</sub>	t <sub>o</sub>
1	1	1	1	1	1	1	1	1	2	0.6	1.596
2	0.5	0.5	1	0.5	1	0.5	0.5	0.5	1	0.3	3.196
3	2	2	1	1	0.5	1	2	2	4	1.2	1.596
4	1	1	1	2	2	2	1	1	2	0.6	0.796
5	0.5	0.5	1	2	4	2	0.5	0.5	1	0.3	0.796
6	2	2	1	2	1	2	2	2	4	1.2	0.796
7	0.25	0.25	1	0.25	1	0.25	0.25	0.25	0.5	0.15	6.496
8	4	4	1	4	1	4	4	4	9	2.4	0.441
9	2	2	1	0.5	0.25	2	2	2	4	1.2	3.196
10	0.5	0.5	1	4	8	0.5	0.5	0.5	1	0.3	0.441

**Tabla 4: Casos a estudiar**

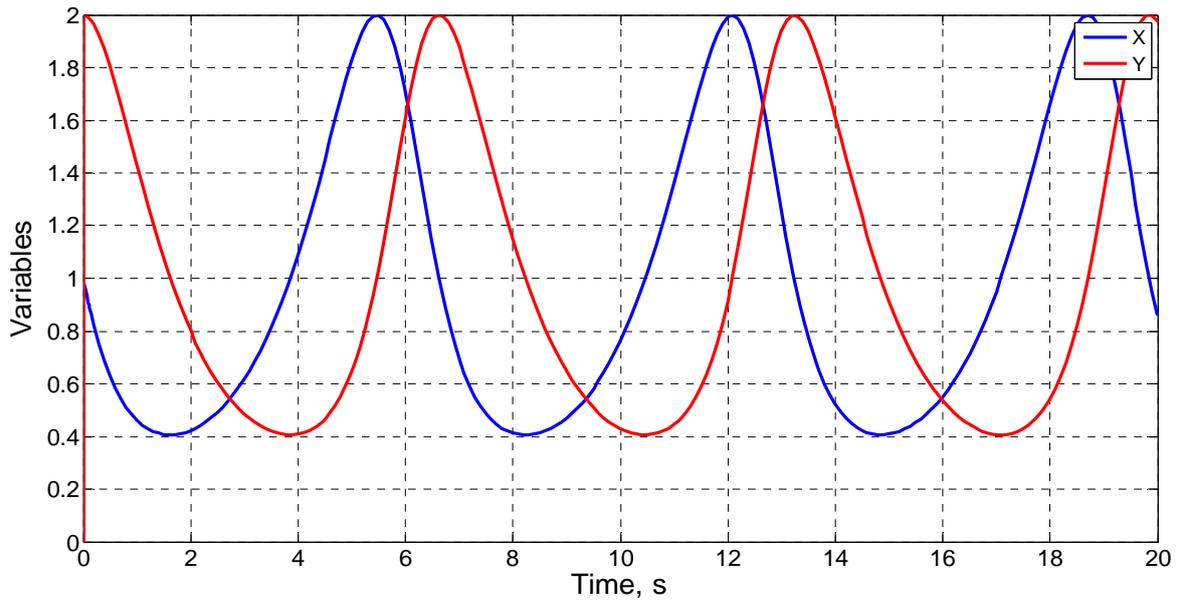
El caso 1 es el de partida, y en los demás iremos buscando la variación de los parámetros característicos. En este caso tenemos:

$$x_o = 0.6, y_o = 1, x_{est} = 1, y_{est} = 1, k1 = 1, k2 = 1, k3 = 1, A = 1.$$

A continuación realizaremos la representación de variables y el diagrama de fases para el caso base.



**Figura 41: Diagrama de fases Caso 1**



**Figura 42: Representación de variables**

Además en la figura 42 podemos apreciar los cuatro tiempos característicos. El primero (línea azul) va desde el inicio hasta el mínimo, el segundo se encuentra desde dicho mínimo hasta volver al punto estable, el tercero desde el punto estable hasta el máximo, y por último, el cuarto que se encuentra desde dicho máximo hasta el punto estable otra vez.

Y a continuación se representarán los demás casos, para ello al principio de cada uno colocaremos los parámetros que vamos a cambiar, y analizaremos que vamos a obtener a través del diagrama de fases y la representación de variables

### Composición característica la mitad ( $x_0$ ), tiempo característico el doble ( $t_0$ )

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 0.5, y_i = 1, x_{est} = 0.5, y_{est} = 0.5, k_1 = 0.5, k_2 = 1, k_3 = 0.5, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se reduce a la mitad, y el tiempo característico se hace el doble respecto al caso base como se observa en la figura 44.

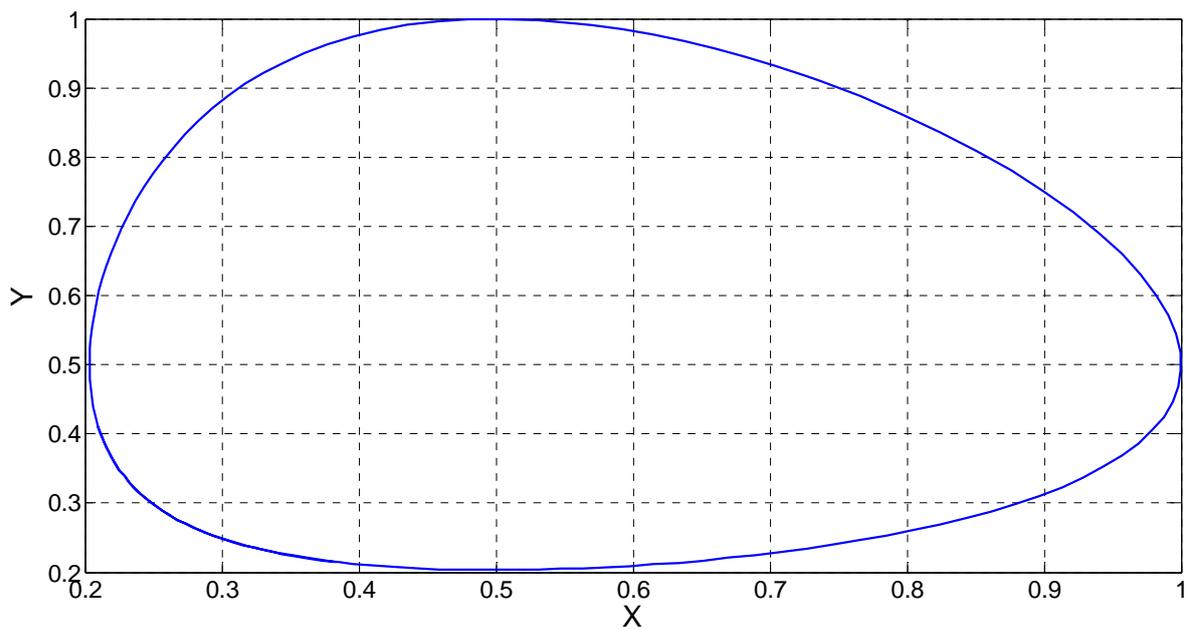


Figura 43: Diagrama de fases. Caso 2

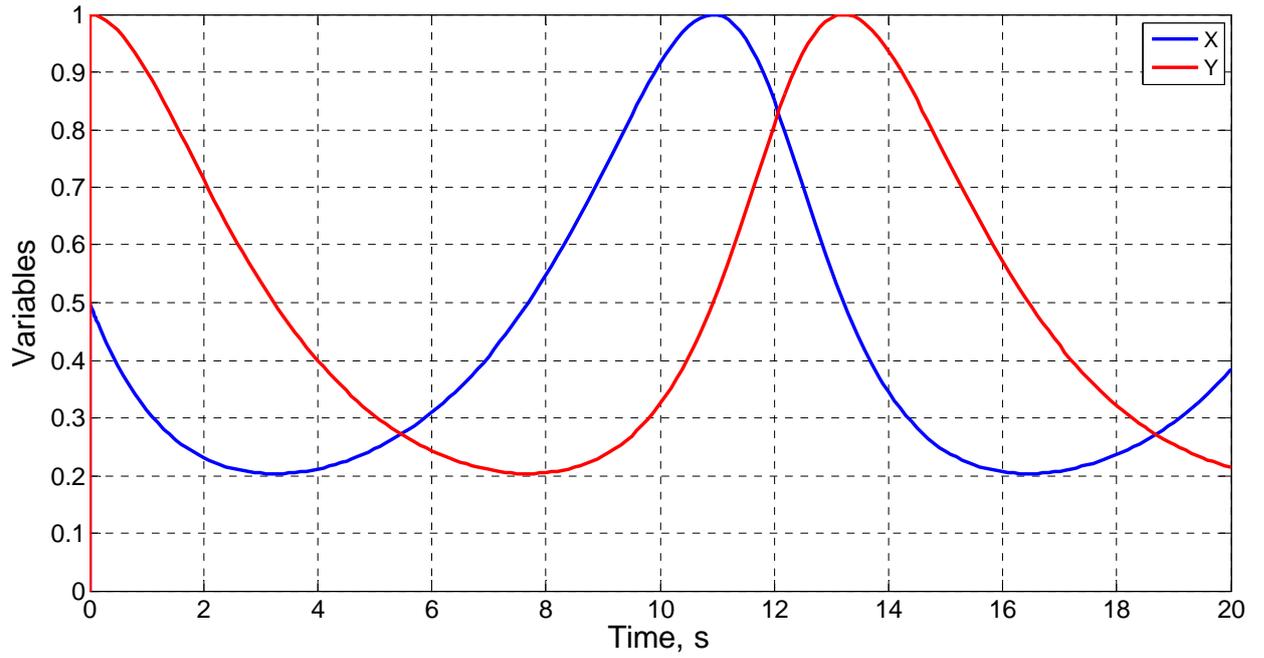


Figura 44: Representación de variables. Caso 2

### Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) igual

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 2, y_i = 4, x_{est} = 2, y_{est} = 2, k_1 = 1, k_2 = 0.5, k_3 = 1, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se hace el doble, y el tiempo característico se queda igual respecto al caso base como se observa en la figura 46.

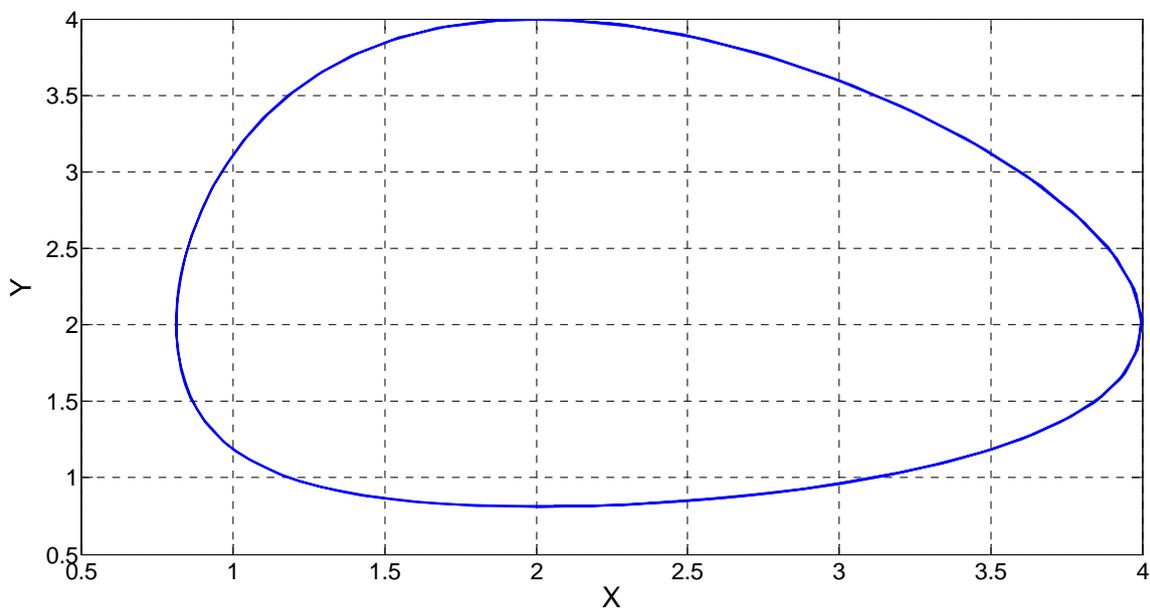


Figura 45: Diagrama de fases. Caso 3

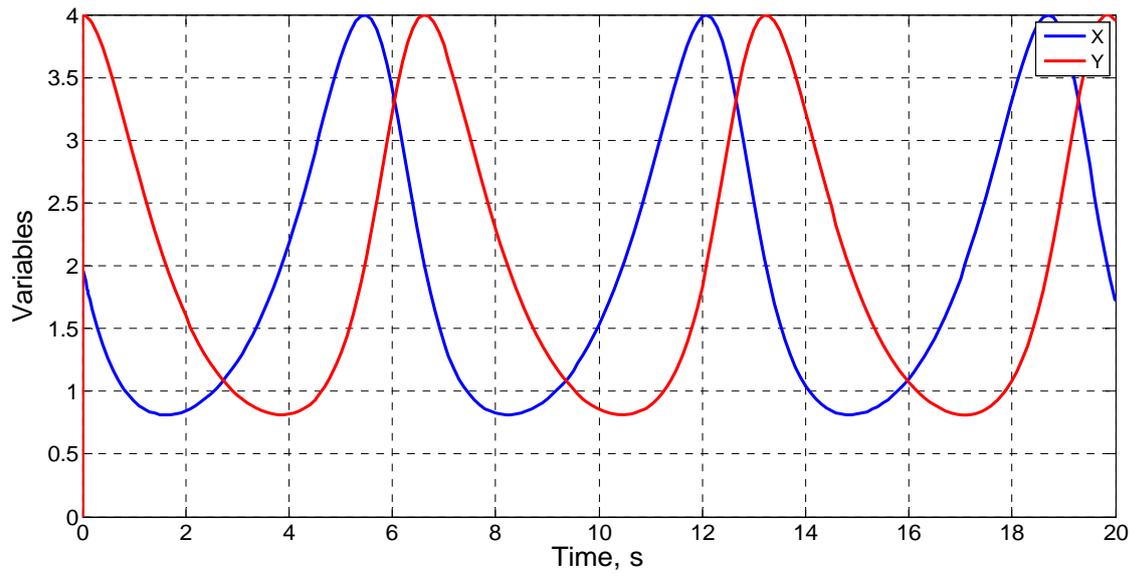


Figura 46: Representación de variables. Caso 3

### Composición característica ( $x_0$ ) igual, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 1, y_i = 2, x_{est} = 1, y_{est} = 1, k1 = 2, k2 = 2, k3 = 2, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se queda igual, y el tiempo característico se reduce a la mitad respecto al caso base como se observa en la figura 48.

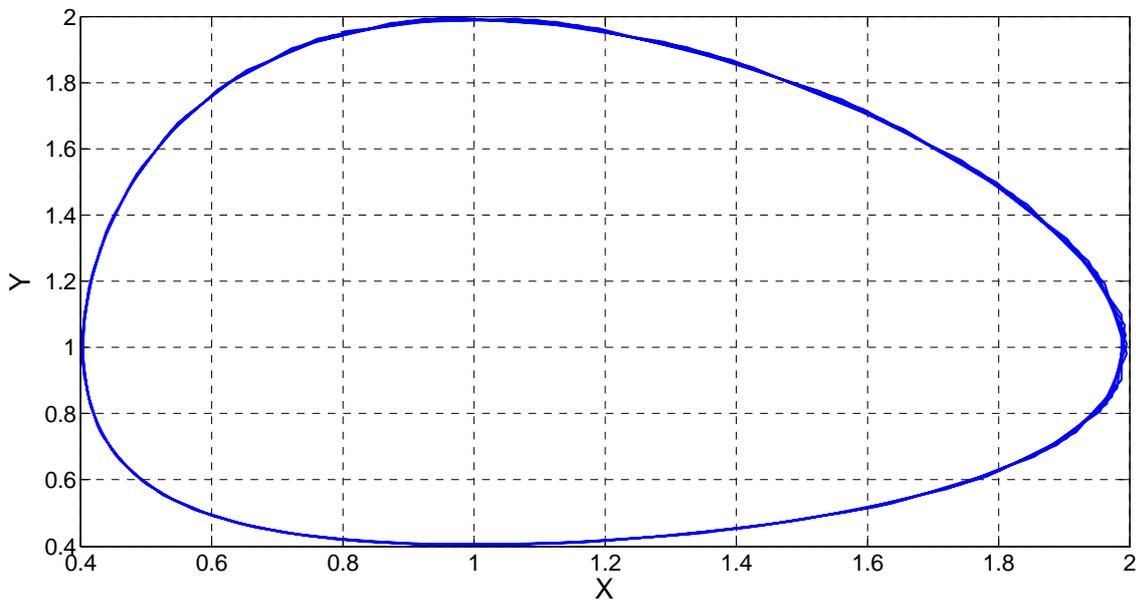


Figura 47: Diagrama de fases. Caso 4

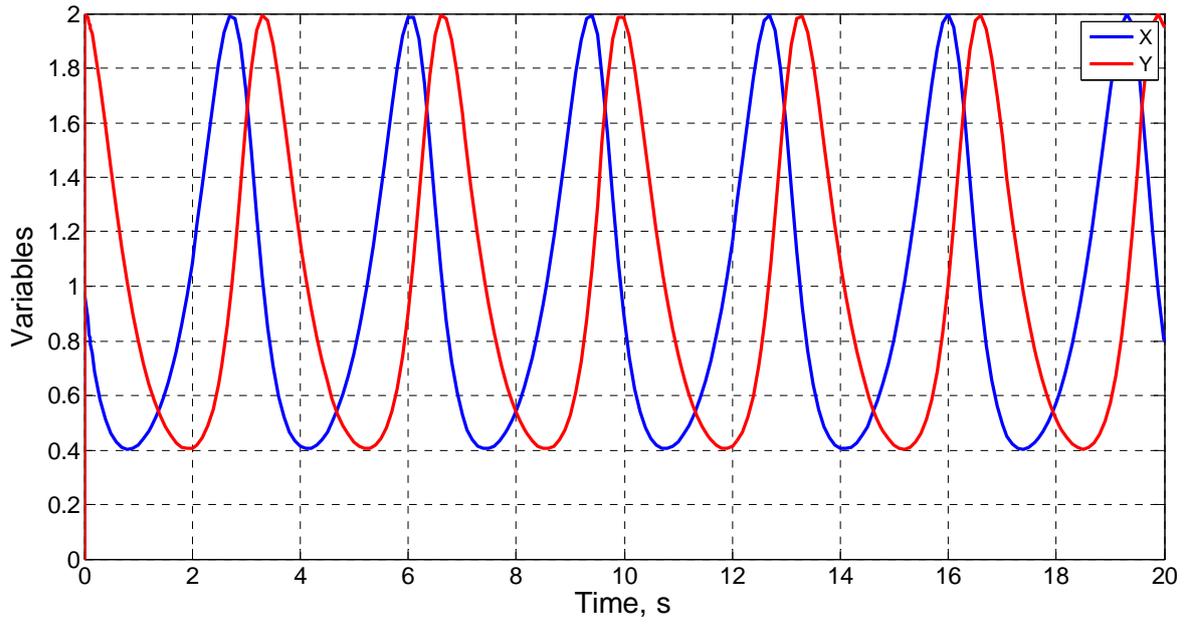


Figura 48: Representación de variables. Caso 4

### Composición característica ( $x_0$ ) mitad, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 0.5, y_i = 1, x_{est} = 0.5, y_{est} = 0.5, k_1 = 2, k_2 = 4, k_3 = 2, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se reduce a la mitad, y el tiempo característico se reduce también a la mitad respecto al caso base como se observa en la figura 50.

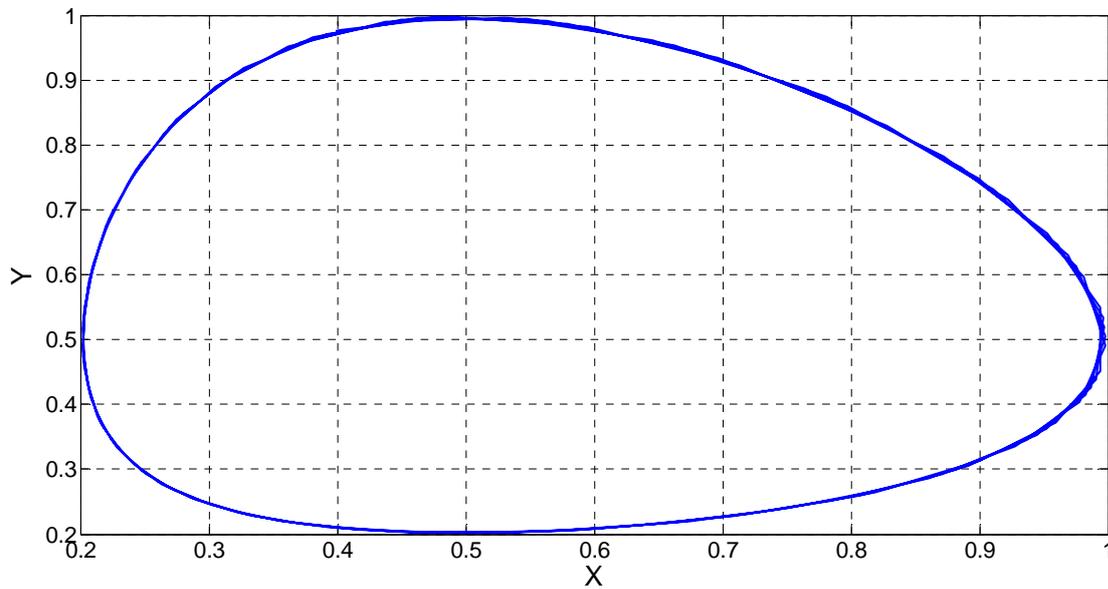


Figura 49: Diagrama de fases. Caso 5

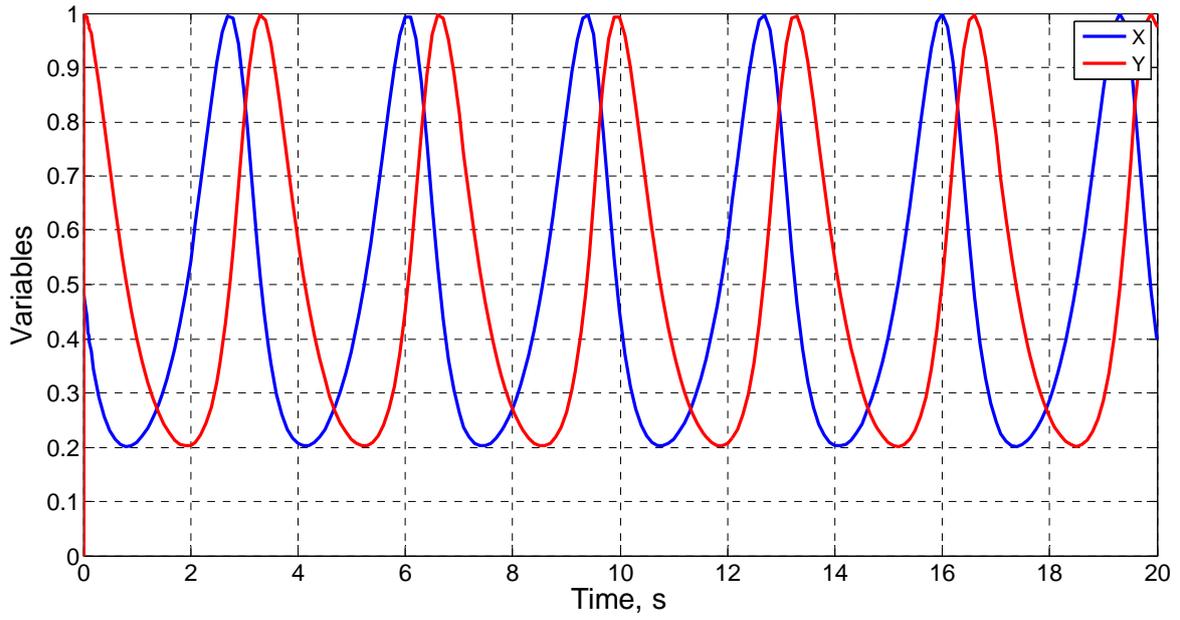


Figura 50: Representación de variables. Caso 5

### Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) mitad

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 2, y_i = 4, x_{est} = 2, y_{est} = 2, k1 = 2, k2 = 1, k3 = 2, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se hace el doble, y el tiempo característico se reduce a la mitad respecto al caso base como se observa en la figura 52.

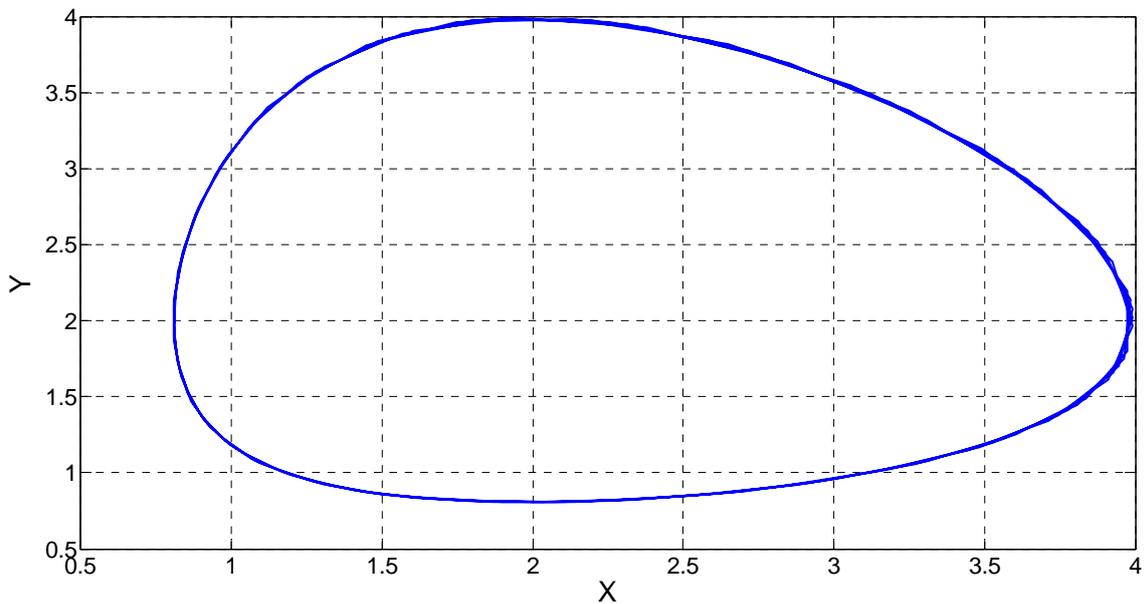


Figura 51: Diagrama de fases. Caso 6

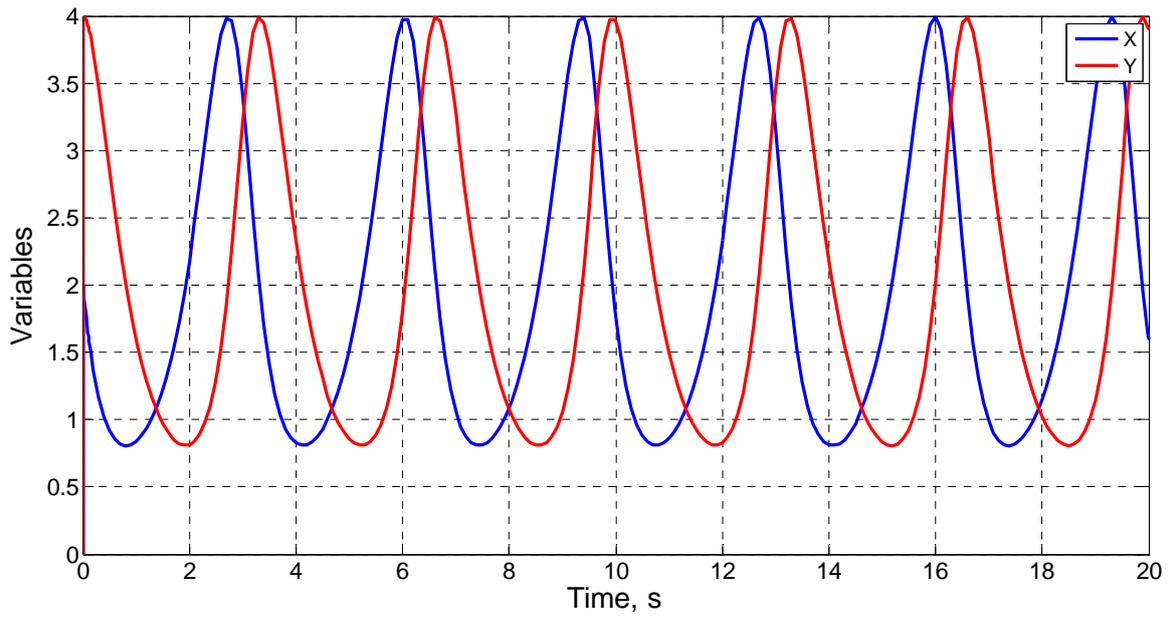


Figura 52: Representación de variables. Caso 6

### Composición característica ( $x_0$ ) cuatro veces menor, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces mayor

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 0.25, y_i = 0.5, x_{est} = 0.25, y_{est} = 0.25, k1 = 0.25, k2 = 1, k3 = 0.25, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se hace cuatro veces menor, y el tiempo característico se hace cuatro veces mayor respecto al caso base como se observa en la figura 54.

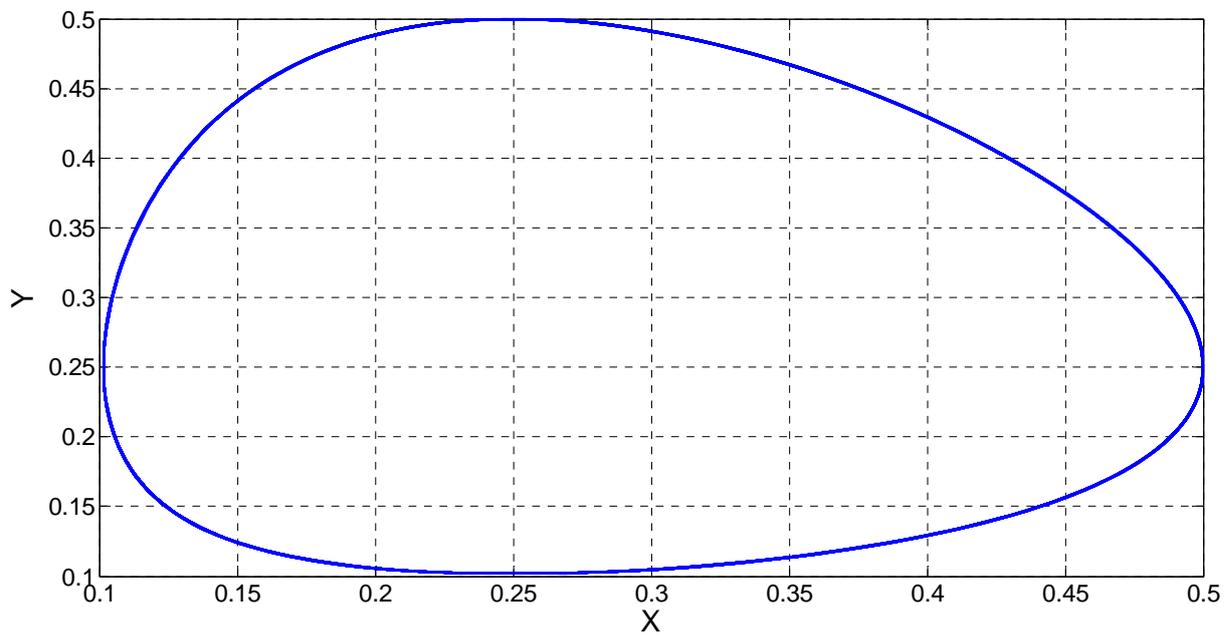


Figura 53: Diagrama de fases. Caso 7

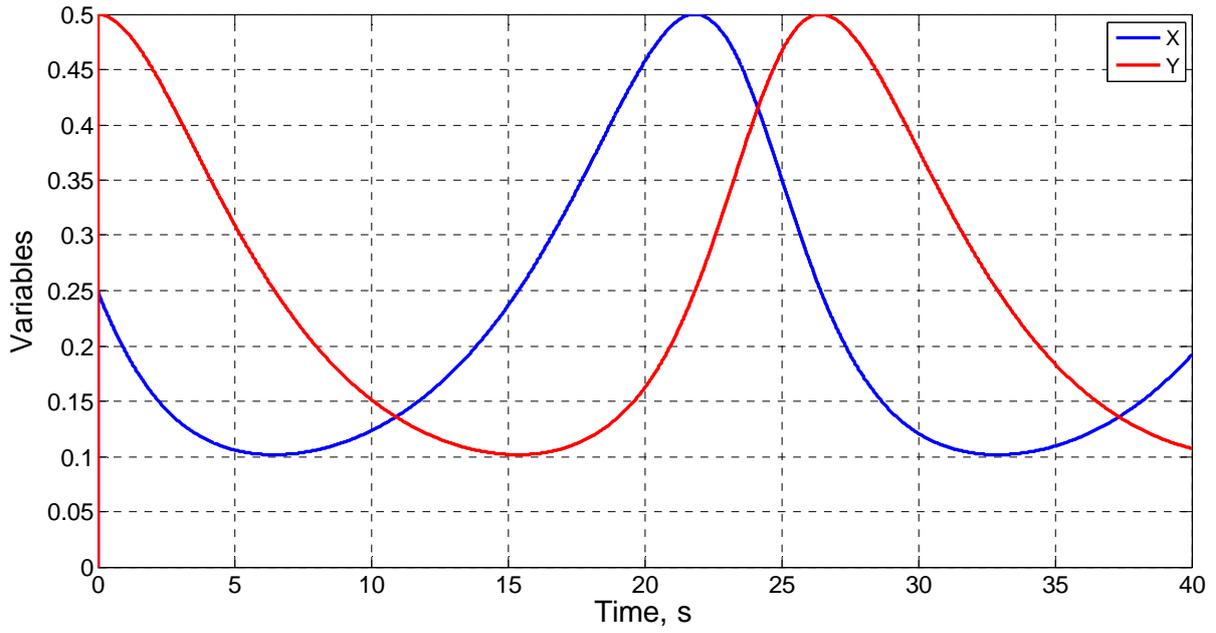


Figura 54: Representación de variables. Caso 7

### Composición característica ( $x_0$ ) cuatro veces mayor, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces menor

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 4, y_i = 8, x_{est} = 4, y_{est} = 4, k_1 = 4, k_2 = 1, k_3 = 4, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se hace cuatro veces mayor, y el tiempo característico se hace cuatro veces menor respecto al caso base como se observa en la figura 56.

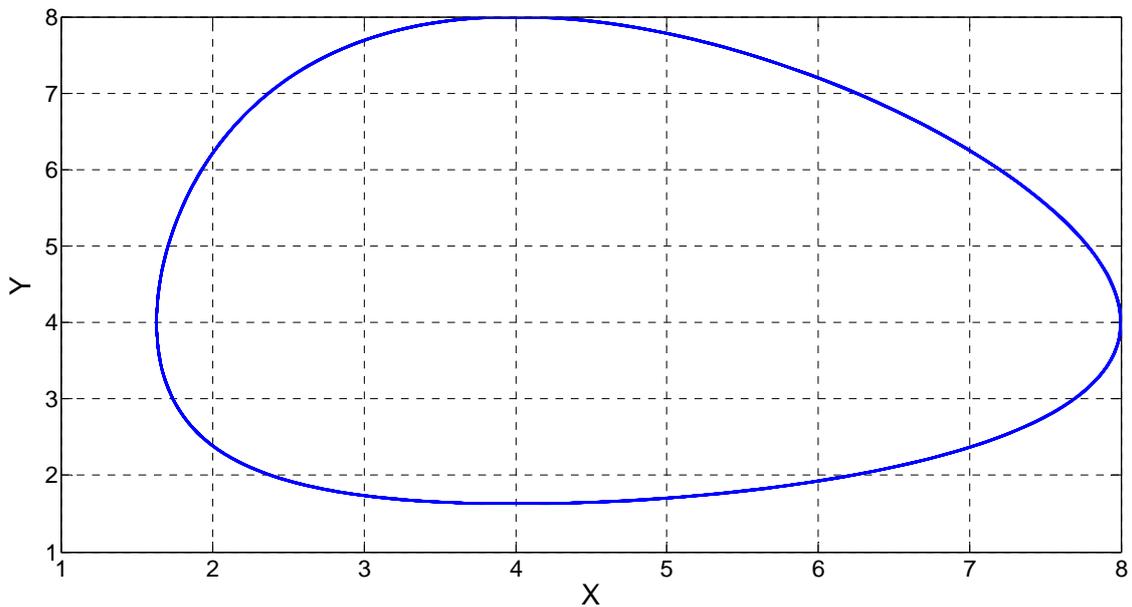


Figura 55: Diagrama de fases. Caso 8

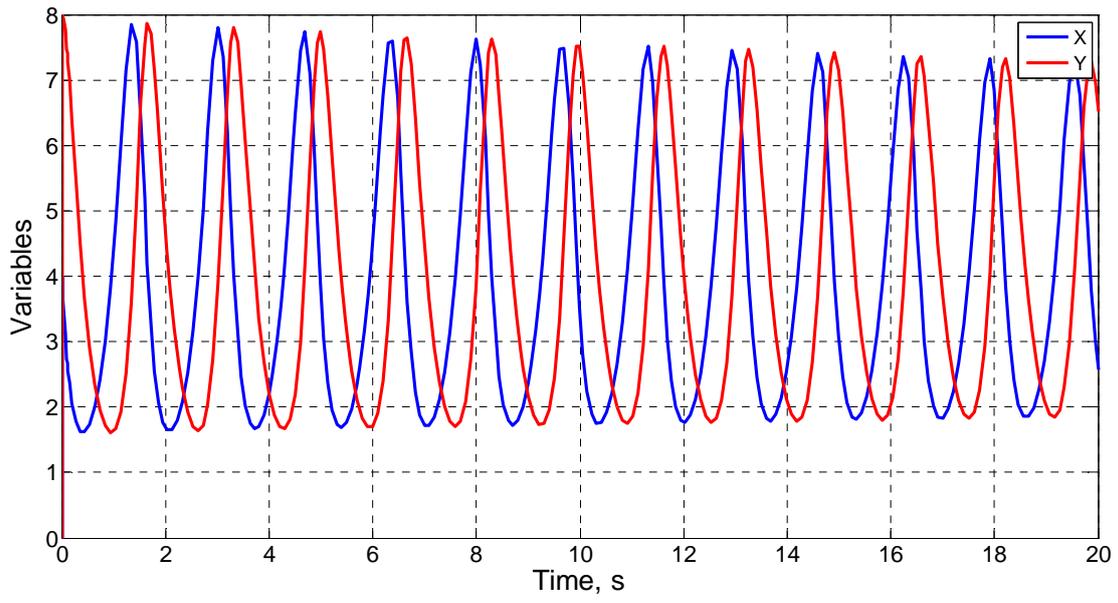


Figura 56: Representación de variables. Caso 8

### Composición característica ( $x_0$ ) doble, tiempo característico ( $t_0$ ) doble

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 2, y_i = 4, x_{est} = 2, y_{est} = 2, k_1 = 0.5, k_2 = 0.25, k_3 = 0.5, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se hace el doble, y el tiempo característico se hace el doble también respecto al caso base como se observa en la figura 58.

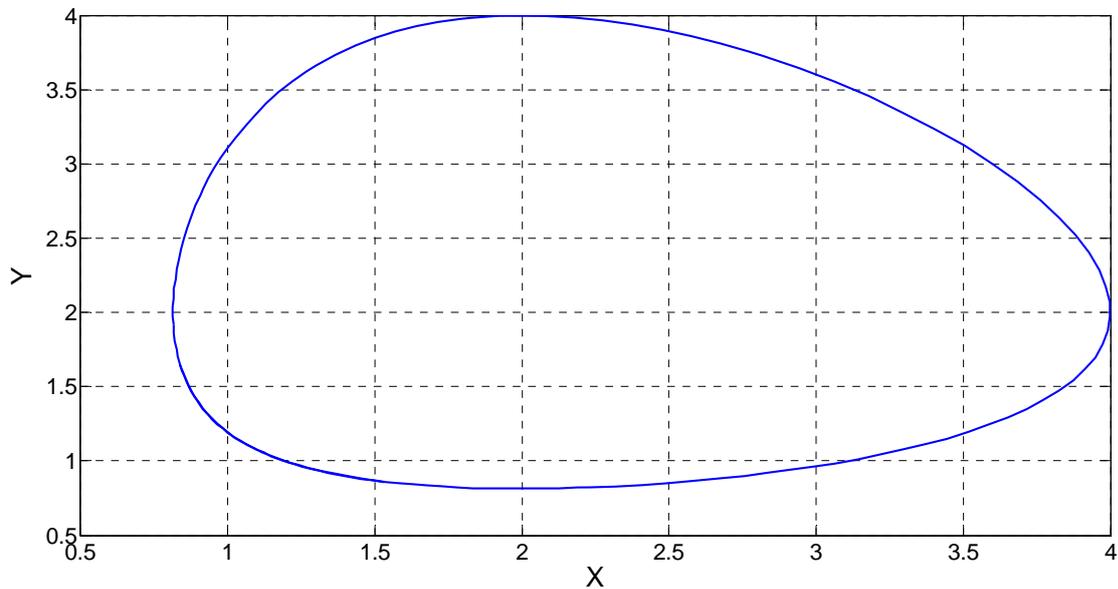


Figura 57: Diagrama de fases. Caso 9

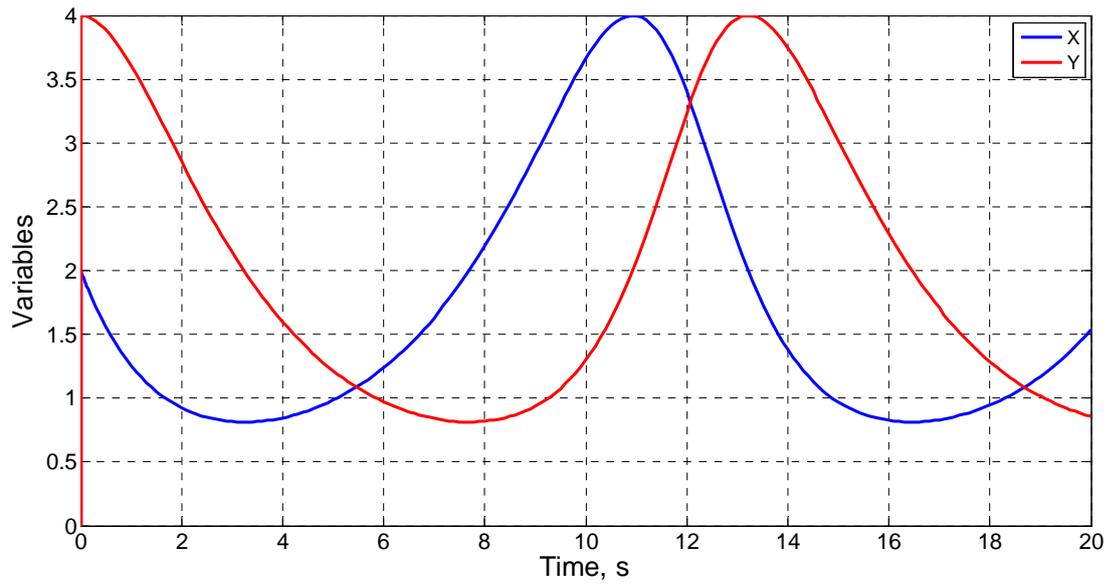


Figura 58: Representación de variables. Caso 9

### Composición característica ( $x_0$ ) mitad, tiempo característico ( $t_0$ ) cuatro veces menor

Los parámetros que obtenemos son:

$$x_i = 0.5, y_i = 1, x_{est} = 0.5, y_{est} = 0.5, k_1 = 4, k_2 = 8, k_3 = 4, A = 1.$$

Con estos parámetros podemos apreciar que la composición característica se reduce a la mitad, y el tiempo característico se hace cuatro veces menor respecto al caso base como se observa en la figura 60.

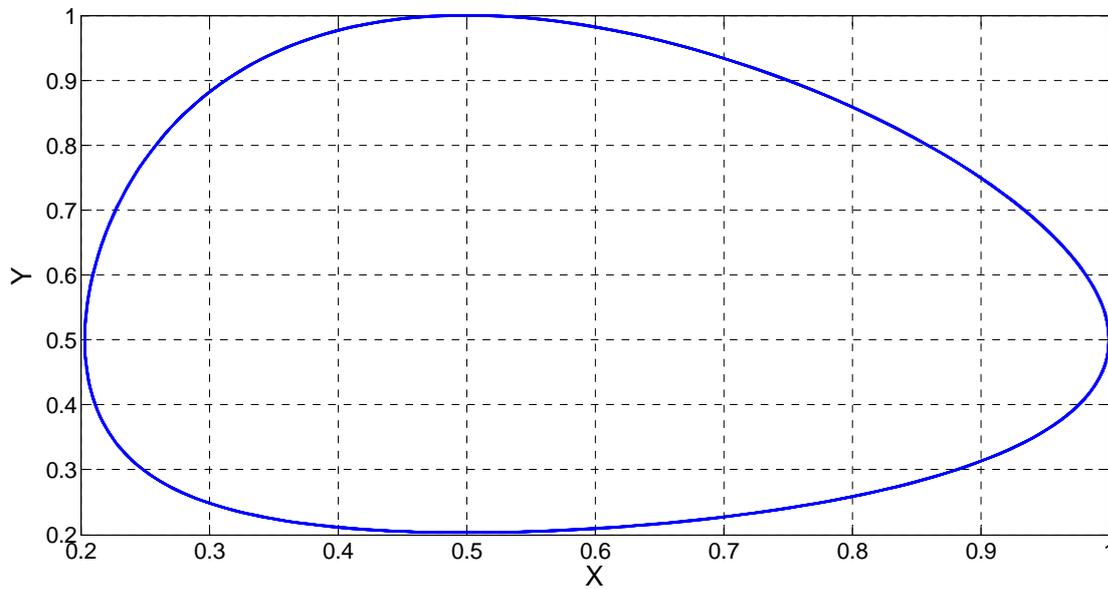


Figura 59: Diagrama de fases. Caso 10

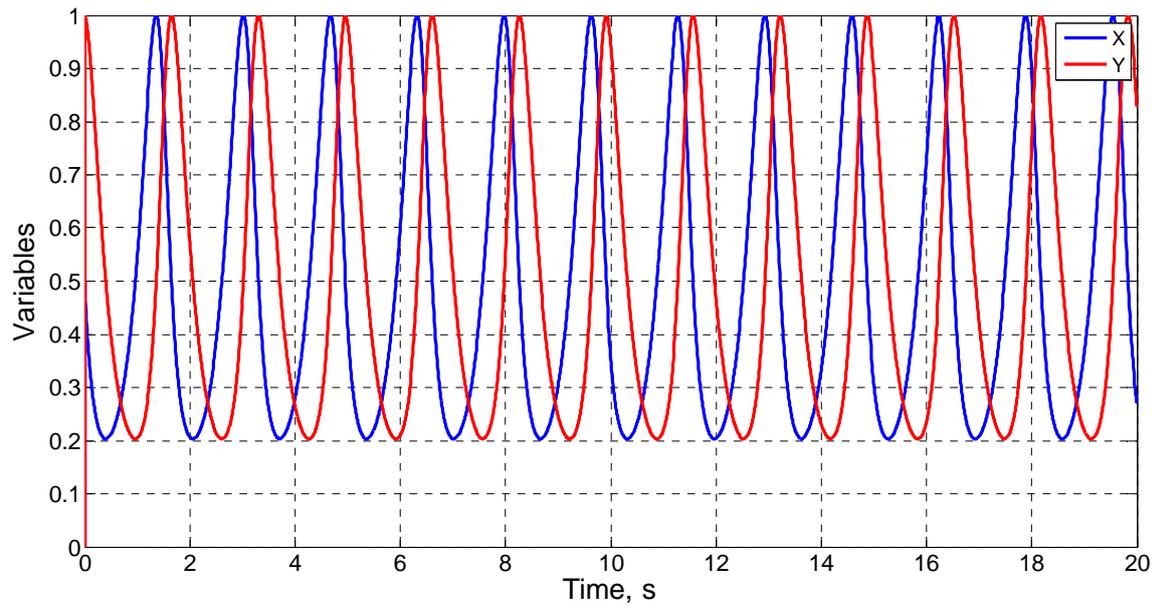


Figura 60: Representación de variables. Caso 10

# Capítulo 5: Conclusiones

## Capítulo 5. Conclusiones

---

- **Valoración sobre el software utilizado.** Se ha realizado un estudio detallado sobre la utilización de una parte del programa, el de resolución de ecuaciones acopladas, que trabajando con ella se han podido estudiar y analizar perfectamente todos los casos que aparecen en nuestro trabajo, por lo que es un software muy preciso y de gran utilidad para el estudio de este tipo de casos, arrojando rápidamente resultados y conclusiones de la que de otra forma sería mucho más difícil obtener.
- Una de las partes más importantes es la **puesta en práctica por parte del alumno** para trabajar con un software de análisis de ecuaciones diferenciales, pudiendo el mismo, ser capaz de obtener conclusiones dando a entender por tanto que el trabajo ha sido cumplido con gran éxito, ya que se ha analizado un modelo matemático real y el alumno ha adquirido los conocimientos y ha sido capaz de aplicarlo para un caso práctico.
- Mediante análisis dimensional hemos obtenido la solución de este sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, pudiendo demostrar su veracidad al variar las constantes y poder predecir su resultado.
- Se comprueba la utilidad de esta metodología para la resolución de problemas físico-químicos.

# Capítulo 6. Bibliografía

## Capítulo 6. Bibliografía

---

- [1] Ira N. Levine, Físicoquímica, Mc Grau Hill, Quinta edición 2004.
- [2] Ángel González Ureña, Cinética Química, Editorial Síntesis, 2001.
- [3] P.W. Atkins, Physical Chemistry, Oxford University Press, Thirt edition 1986.
- [4] Joan Beltrán Rusca y Javier Nuñez Delgado, Química Física, Ariel ciencia, 2002.
- [5] Daniel.C.Harris, Anàlisi química quantitativa, Editorial Reverté, S.A, 2006.
- [6] José Monzó Marco (2008). Lotka-Volterra: Interdependencia Sistémica. Consultada el 28 de septiembre de 2015, en <http://jmonzo.blogspot.com.es/2008/09/lotka-volterra-interdependencia.html>.
- [7] Ron Poshusta. Oscillating Chemical Reactions. Consultada el 24 de septiembre de 2015, en <http://www.idea.wsu.edu/OscilChem/>
- [8] F. Guillermo Mosqueira P. S. y Adrián Fuentes Vetán. (2005). Una reacción oscilante par alumnos del nivel medio superior. QUIMIBACHILLERES
- [9] Obtenidas de F. Guillermo Mosqueira P. S. y Adrián Fuentes Vetán. (2005). Una reacción oscilante par alumnos del nivel medio superior. QUIMIBACHILLERES.
- [10] Obtenidas de José Monzó Marco (2008). Lotka-Volterra: Interdependencia Sistémica. Consultada el 28 de septiembre de 2015, en <http://jmonzo.blogspot.com.es/2008/09/lotka-volterra-interdependencia.html>.
- [11] Nagel L.W. (1975). SPICE2: A computer program to simulate semiconductor circuits. Memo. Nº. UCB/ERL M520. Electronic Research Laboratory, Univ. de California, Berkeley, CA94720.
- [12] PSPICE, versión 6.0 (1994): Microsim Corporation, 20 Fairbanks, Irvine, California 92718.

[13] Schaeffer D.G and Cain J.W (2012) ODE: A bridge between undergrad and graduate math.

[14] Sánchez, J. F. (2012). Solución numérica de problemas de oxidación mediante el método de simulación por redes, PhD Thesis, Technical University of Cartagena, Spain.