

Soluciones límite de la ecuación FKPP y una analogía cuántica

Marco A. Reyes*, Gilberto Perea Olmos** y Sergio Márquez Gamiño**

RESUMEN

Primero, se presentan soluciones exactas para la ecuación FKPP para valores particulares de los parámetros de difusión y reacción. En segundo lugar, se propone una función de prueba que simule las características de la solución general de esta ecuación. Finalmente, se muestra que la obtención de una ecuación de Hamilton-Jacobi para el límite $\epsilon \rightarrow 0$ de la transformación hiperbólica usual, $x \rightarrow x/\epsilon$ y $t \rightarrow t/\epsilon$, está relacionado con el límite semiclassical de la mecánica cuántica.

ABSTRACT

First, exact solutions to the FKPP equation are found for particular values of the diffusion and reaction parameters. Secondly, a test function is proposed that simulates the characteristics of the general solution of the equation. Finally, it is shown that obtaining a Hamilton-Jacobi equation in the limit $\epsilon \rightarrow 0$ of the usual hyperbolic transformation, $x \rightarrow x/\epsilon$ and $t \rightarrow t/\epsilon$, is related to the semiclassical limit of quantum mechanics.

Recibido: 25 de mayo de 2010
Aceptado: 23 de mayo de 2011

INTRODUCCIÓN

La ecuación de Fisher-Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov (FKPP) para un campo escalar $\rho(x,t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + U\rho(1-\rho) \quad (1)$$

donde D es el coeficiente de difusión y U es el parámetro de la razón de crecimiento de densidad (Kolmogorov, 1937; Fisher, 1937; Kelbert, 1994), es utilizada para simular la aparición de ondas viajeras en sistemas de reacción-difusión, en problemas químicos y biológicos (Aronson, 1975; Britton, 1986; Kelbert, 1994; Dumortier, 2007), e incluso en problemas de física de altas energías (Soyes, 2005). El término importante en todos estos casos es la aparición de la componente $\rho(1-\rho)$ de la ecuación logística, o ecuación de Verhulst, $d\rho/dt = \rho(1-\rho)$, la ecuación típica de crecimiento poblacional. De hecho, en el trabajo original de Fisher se propone la simulación de la propagación de genes en una población (Fisher, 1930).

Dado que la ecuación FKPP es una ecuación diferencial parcial no lineal, es muy difícil encontrar una solución general exacta. Así, un procedimiento regular encontrado en la literatura para obtener una idea del comportamiento de las soluciones en términos de ondas viajeras consiste en llevar a cabo una transformación hiperbólica de las variables del problema, de la manera que se describe a continuación (Fedotov, 2000; Cuesta, 2007; Branco, 2007).

Palabras clave:

Ecuación FKPP; ecuación de difusión; ecuación logística; no-linealidad.

Keywords:

FKPP equation; diffusion equation; logistic equation; non-linearity.

Primero se realiza una transformación hiperbólica de las variables x y t , de manera que $x \rightarrow x/\epsilon$ y $t \rightarrow t/\epsilon$. Segundo, realicemos el cambio de $\rho(x,t)$ a $\rho^\epsilon\left(\frac{x}{\epsilon}, \frac{t}{\epsilon}\right)$.

*Departamento de Física, División de Ciencias e Ingenierías, Campus León, Universidad de Guanajuato. Loma del Bosque No. 103, Col. Lomas del Campestre, C.P. 37150, León, Gto., México.

**Departamento de Ciencias Aplicadas al Trabajo, División de Ciencias de la Salud, Campus León, Universidad de Guanajuato. Av. Eugenio Garza Sada No. 572, Col. Lomas del Campestre Sección 2, C.P. 37150, León, Gto., México.

Entonces,

$$\frac{\partial \rho^\varepsilon}{\partial t} = \varepsilon D \frac{\partial^2 \rho^\varepsilon}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} U \rho^\varepsilon (1 - \rho^\varepsilon).$$

En el límite $\varepsilon \rightarrow 0$ la razón de reacción es muy rápida y la difusión es muy lenta. Finalmente, al realizar la sustitución

$$\rho^\varepsilon(x, t) = \exp\left(-\frac{G(x, t)}{\varepsilon}\right), \quad (2)$$

la ecuación FKPP obtiene, en el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, la forma de una ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial G}{\partial t} + H\left(\frac{\partial G}{\partial x}\right) = 0, \quad (3)$$

en donde el Hamiltoniano está dado por

$$H(p) = Dp^2 + U. \quad (4)$$

Debido a la aparición de la ecuación de Hamilton-Jacobi, a la transformación hiperbólica descrita aquí también se le llama *Transformación Hamiltoniana*.

La ecuación (3) para el Hamiltoniano (4) es fácil de integrar, encontrándose que

$$G(x, t) = \frac{x^2}{4Dt} - Ut. \quad (5)$$

El frente de onda de la reacción se encuentra mediante la condición $x(t) = vt$, por lo que la velocidad de reacción queda dada como $v = \sqrt{4DU}$.

Otra manera de realizar la aparición de ondas viajeras en esta ecuación es substituyendo las variables x y t por la variable viajera $\xi = x - vt$, de manera que se obtiene la ecuación no lineal

$$D \frac{d^2 \rho}{d\xi^2} + v \frac{d\rho}{d\xi} + U\rho(1 - \rho) = 0, \quad (6)$$

la cual tiene solución analítica inmediata cuando se desprecia el término cuadrático en ρ .

Nuestro objetivo en este artículo será el encontrar soluciones exactas para la ecuación FKPP bajo condiciones muy particulares de los parámetros D y U (el caso $D = 0$, el caso $U = 0$), para poder analizar la tendencia que debiera tener la solución general del problema, con la intención de obtener una función que represente una buena aproximación a ésta (la tendencia general) Por otro lado, regresaremos a la aproximación Hamiltoniana descrita arriba para introducir una analogía mecánico cuántica del problema, por medio de la cual mostraremos que esta transformación conduce naturalmente a la ecuación de Hamilton-Jacobi.

SOLUCIONES EXACTAS PARA VALORES PARTICULARES DE LOS PARÁMETROS

Debido a la falta de una solución general para la ecuación FKPP, nuestro interés es encontrar soluciones para valores particulares de los parámetros D y U , que pueden servir para apreciar la aplicabilidad de la ecuación FKPP a sistemas naturales, lo que será más fácil de visualizar de manera gráfica. Comencemos entonces por mostrar las soluciones exactas para dos casos particulares de los parámetros, a decir, para $D = 0$ y $U = 0$.

El caso $D = 0$

En el caso de que el coeficiente de difusión se desvanezca, la ecuación (1) se transforma en la ecuación de Verhulst, o ecuación logística

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = U\rho(1 - \rho) \quad (7)$$

para el campo escalar $\rho(t)$, en donde U representa ahora la tasa de crecimiento poblacional. Esta ecuación tiene solución exacta, dada por

$$\rho_{D=0}(t) = \frac{1}{1 + \left(\frac{1}{\rho_0} - 1\right) e^{-Ut}}, \quad (8)$$

en donde ρ_0 es el valor inicial de $\rho(t)$. La forma de esta solución depende del valor inicial, como se muestra de manera general en la figura 1, donde se puede apreciar que todas las soluciones tienden asintóticamente al valor constante $\rho = 1$.

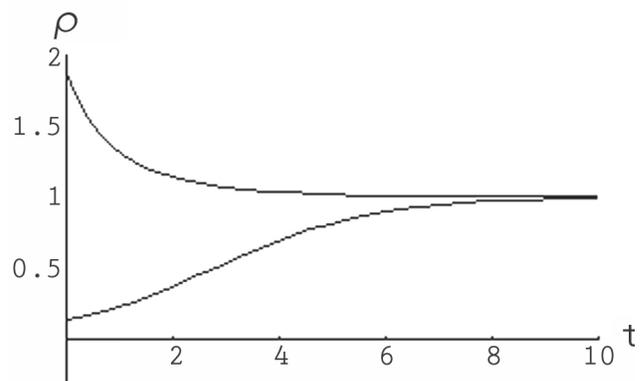


Figura 1. Solución general de la ecuación de Verhulst (7), para dos valores iniciales de ρ_0 por arriba y por debajo del valor asintótico $\rho = 1$, $\rho_0 = 0.133$ y $\rho_0 = 1.867$.

El caso $U = 0$

En el caso en que el parámetro de crecimiento U se desvanezca, la ecuación (1) se transforma en la ecuación de difusión

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, \tag{9}$$

la cual puede ser resuelta exactamente, pues permite separación de variables en $\rho(x,t) = T(t)R(x)$, quedando dos ecuaciones para $T(t)$ y para $R(x)$

$$\frac{dT}{dt} = -\lambda Dt, \text{ y } \frac{d^2R}{dx^2} = -\lambda R, \tag{10}$$

en donde λ es la constante de separación, obteniéndose la solución

$$\rho_{U=0} = \rho_0 e^{-\lambda Dt} \cos(x\sqrt{\lambda}). \tag{11}$$

El perfil de esta solución está representado en la figura 2: a lo largo del eje de coordenadas la solución tiene forma armónica, dando origen a oscilaciones espaciales que se van desvaneciendo conforme t aumenta.

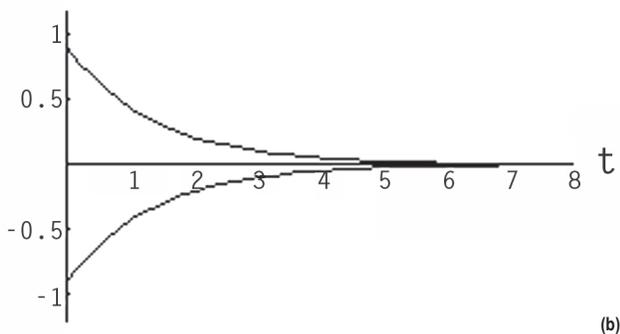
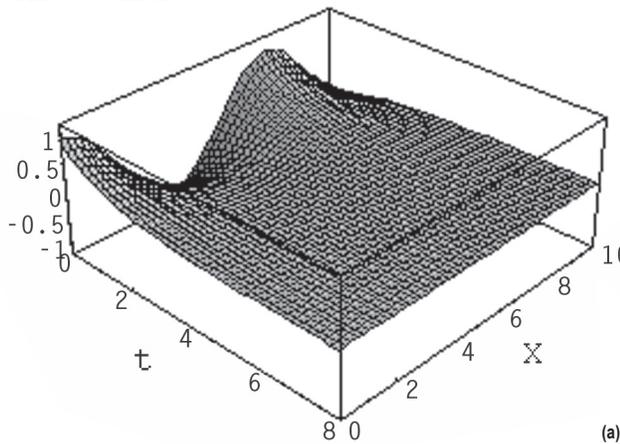


Figura 2. (a): solución general (11) de la ecuación de difusión (9) para $\rho_0=0.133$ y $\lambda=0.73$; ondas armónicas a lo largo del eje de coordenadas, amortiguadas por la exponencial temporal decreciente. **(b):** la proyección temporal para $x=0$.

La tendencia general

Aunque las ecuaciones (7) y (9) son conocidas, su valoración para la solución general de la ecuación FKPP no es muy citada, siendo que la solución general debería incluir las formas particulares. Es probable que el motivo de esto sea debido a la alta no linealidad de la ecuación de FKPP al incluir el término logístico, ya que, como sabemos, la ecuación logística puede incluso ser utilizada para introducir caos en un sistema mecánico (Bailey, 2007).

Por otro lado, podemos ver que el comportamiento de las soluciones en los dos casos particulares es bastante similar, al menos en su componente temporal, como puede verse en las figuras 1 y 2. Entonces, podemos suponer que la solución general deberá tener las siguientes características, que se deducen de los comportamientos particulares:

- i) La solución tiene un comportamiento exponencial decreciente en el tiempo.
- ii) La forma armónica espacial desvanece conforme el coeficiente de difusión D se anula, lo que podría indicar que la frecuencia del término armónico tenga la dependencia $\lambda = \lambda(D)$ en la ecuación (11), ocasionando que solo prevalezca el perfil logístico en ese límite.
- iii) El valor asintótico de la solución general cambia de $\rho_{lim}=0$ para $U=0$, a $\rho_{lim}=1$ para $D=0$, ocasionando que las curvas del campo escalar $\rho(x,t)$ se desplacen sobre su eje de valores.

Basados en estas características, podemos buscar al menos una función que pueda servir como función de prueba para los casos prácticos. El tipo de tendencias descritas las tiene la función

$$\tilde{\rho}(x,t) = \left\{ U^D + \frac{(\tilde{\rho}_0 - 1)e^{-(U+\lambda D)t}}{\tilde{\rho}_0 - (\tilde{\rho}_0 - 1)e^{-Ut}} \right\} \cos(Dx) \tag{12}$$

la cual no corresponde a una solución de la ecuación FKPP, pero sí incluye los dos casos límite, permitiendo tener una idea de la forma que debe tener aquella, como se puede apreciar en la figura 3, en donde por claridad solo se grafica la proyección temporal $\tilde{\rho}(t)$ de $\tilde{\rho}(x,t)$, que coincide con las soluciones encontradas en los límites $U=0$ y $D=0$, como puede verse en las figuras 1 y 2. Esta forma podría ser utilizada como función prueba para aplicaciones de la ecuación FKPP en problemas específicos.

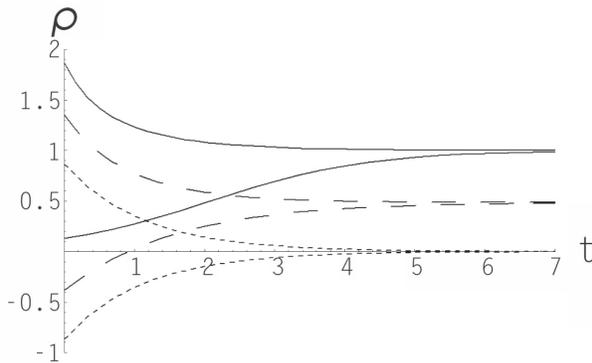


Figura 3. Gráfica de la proyección temporal de la función $\tilde{\rho}(x, t)$ (12): las curvas con línea continua corresponden a $U=0.9, D=0$, las de línea a rayas a $U=0.3, D=0.6$, y las de línea punteada a $U=0, D=0.9$. Las primeras y las últimas simulan las soluciones particulares (8) y (11), correspondientes a las figuras 1 y 2. En todos los casos se toman dos valores de $\tilde{\rho}_0$ para simular los límites de las oscilaciones espaciales.

UN ANÁLOGO MECÁNICO CUÁNTICO

Para culminar este trabajo, mostraremos aquí que la elección de la aproximación de la ecuación FKPP por medio de la transformación hiperbólica en este modelo es el análogo cuántico de la aproximación semiclásica WKB, la cual convierte la ecuación de Schrödinger en la ecuación de Hamilton-Jacobi (Sakurai, 1994).

Consideremos la transformación hiperbólica imaginaria dada por $x \rightarrow x/i\varepsilon$ y $t \rightarrow t/i\varepsilon$, la cual corresponde a un giro en el plano complejo espacio-temporal por 270° . Entonces, la ecuación FKPP (1) se transforma en la ecuación

$$i\varepsilon \frac{\partial \rho^\varepsilon}{\partial t} = -\varepsilon^2 D \frac{\partial^2 \rho^\varepsilon}{\partial x^2} + U \rho^\varepsilon (1 - \rho^\varepsilon) \quad (13)$$

la cual corresponde a una ecuación de Schrödinger no lineal donde ε es la constante de Planck, el coeficiente de difusión D corresponde al inverso de la masa de la partícula cuántica, y el parámetro de crecimiento U representa la contribución potencial no lineal de la ecuación. De esta manera, la aproximación hiperbólica desarrollada arriba, seguida por el límite semiclásico $\varepsilon \rightarrow 0$, conduce a la ecuación de Hamilton-Jacobi de manera natural. Es importante señalar aquí la semejanza que se obtiene entre este análogo y la ecuación de Gross-Pitaevskii (Gross, 1961; Pitaevskii, 1961), que permite soluciones solitónicas, además de la de partícula libre.

Finalmente, podemos ver que el despreciar términos cuadráticos en la ecuación (13), o equivalentemente en la ecuación (6), conduce a la ecuación de

una partícula cuántica en un potencial constante, es decir, la solución obtenida es la de una partícula cuántica libre.

CONCLUSIÓN

En este artículo analizamos las soluciones exactas a la ecuación FKPP bajo condiciones particulares de los parámetros de la misma. La forma de estas soluciones nos ha permitido predecir el comportamiento de la solución general, aunque no hemos podido determinar ésta de manera exacta. Sin embargo, la función $\tilde{\rho}(x, t)$ propuesta en este trabajo puede ser empleada para probar los aspectos prácticos del modelo. Por otro lado, aquí hemos mostrado que la contraparte imaginaria de la transformación hiperbólica sugerida en la literatura conduce a la aproximación semiclásica de una ecuación de Schrödinger no-lineal, lo que nos permite mostrar que la aparición de la ecuación de Hamilton-Jacobi obtenida mediante la transformación hiperbólica típica es una consecuencia natural de esta aproximación mecánica.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos el apoyo de DINPO-UGTO a través del proyecto 2010-100/10 para la realización de este proyecto.

REFERENCIAS

Aronson, D. y Weinberger, H. (1975) Nonlinear diffusion in population genetics, combustion and nerve propagation, *Lecture Notes in Math.* 446, Springer-Verlag, Berlin.

Bailey, D. H.; Borwein, J. M.; Calkin, N. J.; Girgensohn, R.; Luke, D. R.; and Moll, V. H. *Experimental Mathematics in Action.* Wellesley, MA: A K Peters, pp. 33-36.

Branco, J.R., Ferreira, J.A. y Oliveira, P. (2007) Numerical methods for the generalized FKPP equation, *Appl. Num. Math.* 57, pp. 89-102.

Britton, N. F. (1986) *Reaction-diffusion equations and their applications to biology*, Academic Press, New York.

Cuesta, E. (2007) Asymptotic behavior of the solutions of fractional integro-differential equations and sometimes discretizations, *DCDS supplement*, pp. 277-285.

Dumortier, F., et. al. (2007) The critical wave speed for the FKPP equation with cut-off, *Nonlinearity* 20, p. 855.

Fedotov, S. (2000) Front propagation into an unstable state of reaction-transport system, *Phys. Rev. Lett.* 86, pp. 926-929.

Fisher, R. A. (1930), *The genetical theory of natural selection*, Oxford University Press.

Fisher, R. A. (1937), *Ann. Eugenics* 7, p.355.

Gross, E. P. (1961), *Nuovo Cimento* 20, p. 454; *idem* (1963), *J. Math. Phys.* 4, p. 195.

Kelbert, M. Ya. y Suhov, Yu. M. (1994) The Markov branching random walk and systems of reaction-diffusion (KPP) equations, *IMA preprint series #1234*.

Kolmogorov, A., Petrovsky, I. y Piskunov, N. (1937), *Bull. Univ. Moscow, Ser. Intern.*, Sec. A 1, p.1.

Pitaevskii, L. P. (1961), *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 40, p. 646; *idem* (1961) *Sov. Phys. JETP* 13, p. 451.

Sakurai, J. J. (1994), *Modern Quantum Mechanics*, 5a Ed., Addison-Wesley Inc., pp.103-109.

Soyes, G. 2005 Fluctuation effects in high-energy evolution of QCD, *Phys. Rev. D* 72, 016007.