



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

Estudio y modelación de procesos de difusión en la formación de estructuras en ciencias de materiales.

Tesis presentada para obtener el título de:
Maestría en Ciencias Física Aplicada

Presenta:
Daniel Meza Rodríguez

Asesorado por:
Dr. M. Rodolfo Palomino Merino
Dr. José Fernando Rojas Rodríguez

Junio 2023

Título: Estudio y modelación de procesos de difusión en la formación de estructuras en ciencias de materiales

Estudiante: Daniel Meza Rodríguez.

Jurado

Dr. José Eduardo Espinosa Rosales (FCFM-BUAP)

Dr. José Juan Gervacio Arciniega (FCFM-BUAP)

Dr. Miller Toledo Solano (FCFM-BUAP)

Asesores

Dr. M. Rodolfo Palomino Merino

Dr. José Fernando Rojas Rodríguez

A mis padres y hermanos

Agradecimientos

Agradezco a mis padres y hermanos por el apoyo mostrado para mi desempeño en el posgrado, así como su soporte económico. Al Dr. Fernando por su apoyo incondicional para desarrollar mis habilidades para desarrollar temas de investigación. En general, a todas las personas que de muchas formas apoyaron mi trayectoria, muchas gracias a todos.

Índice general

Agradecimientos	II
Resumen	2
1. Introducción	3
1.1. Antecedentes	6
1.1.1. Quitina	6
1.1.2. Desacetilación	7
1.1.3. Ecuaciones químicas y velocidades de reacción	10
1.1.4. Velocidades de Reacción	11
1.1.5. Concentraciones	12
2. Sistemas dinámicos	14
2.1. Definición y concepto	14
2.2. Sistemas Dinámicos de una y muchas variables	15
2.3. Python y los sistemas dinámicos	17
2.4. El algoritmo de Euler	17
2.5. La difusión en los sistemas dinámicos y Python	20
2.6. Técnicas numéricas	24
2.7. Operador diferencial de Laplace (segunda derivada)	25
2.8. Sistemas de Reacción-Difusión	26
2.8.1. Sistemas de reacción difusión 2.0	31
3. Reacciones químicas, difusión, fuentes y sumideros	33
3.1. Reacciones químicas	33
3.2. Forma general de ecuaciones de Reacción - Difusión	34
4. Modelo de RD en la desacetilación de Quitina	37
4.1. Software - Análisis numérico	39

4.2. Análisis de parámetros y variables	39
5. Resultados	40
5.1. Resultados numéricos	40
5.2. Comparación con resultados experimentales	41
6. Conclusión-Discusión	54
Bibliografía	58

Resumen

En este trabajo se desarrolla un modelo dinámico espacialmente extendido para describir la cinética de una reacción química, específicamente la desacetilación de quitina, material que se encuentra en la cáscara de crustáceos, mediante una solución alcalina se obtiene quitosano. Se utiliza teoría de sistemas dinámicos para describir el comportamiento de la reacción. Así como métodos numéricos para esta simulación. Se implementa una herramienta numérica para describir la difusión presente en el sistema. El modelo se centra en modelar una superficie modelo rectangular para simular una superficie de cáscara de camarón en el proceso de desacetilación.

Palabras clave: Sistemas dinámicos, quitina, quitosano, desacetilación, simulación

Capítulo 1

Introducción

Se considera a la Quitina como la segunda molécula más abundante en la naturaleza, solo por debajo de la Celulosa; además de su abundancia, la producción de la misma es importante debido a la gran variedad de aplicaciones tecnológicas que se han generado [16]. Dentro del ámbito más científico, la Quitina es la responsable de la formación de estructuras en materiales biológicos como exoesqueletos de invertebrados marinos, caparazones de insectos e incluso crustáceos [26]. La formación de estructuras tipo cristalinas, o incluso de cristal fotónico, ha generado al menos dos líneas de investigación importantes: La primera es la formación de esas estructuras de la Quitina para ser reproducidas mediante las nuevas tecnologías de impresiones 3D para ser estudiadas como cristales fotónicos. La segunda es la creación de modelos que puedan generar estas estructuras de la misma forma que se ha modelado el crecimiento de hueso a partir de hidroxapatita [14]. En el contexto de esta segunda línea de investigación en donde se propone el siguiente proyecto de tesis de Maestría y como primera etapa es el estudio del proceso de desacetilación mediante modelos de reacción-difusión. Uno de los procesos importantes es la transformación de la quitina y la obtención de sus derivados a través del proceso de desacetilación que pueden ser modelados con sistemas de reacción difusión. Un estudio de desacetilación tiene mucha importancia en el modelo a desarrollar, ya que es uno de los mecanismos que tiende a explicar la formación de moléculas como el Quitosano que también de suma importancia en aplicaciones tecnológicas [9].

Es un hecho que los procesos de difusión son ubicuos. Los procesos de crecimiento y formación de los sistemas vivos no serían posibles sin la presencia del fenómeno de difusión: la formación de estructuras regulares o no, con diferentes funciones en sistemas vivos, provienen de diferentes procesos de reacción y difusión de la misma manera que las estructuras de materia inerte, como los cristales, sólidos amorfos,

polímeros, etc.

En los últimos años, bajo la óptica de los Sistemas Complejos, los modelos basados en los sistemas de reacción difusión han cobrado importancia en el estudio de modelos de todo tipo de sistemas cuya característica principal es estar fuera de equilibrio y que, por lo mismo, presentan la formación de estructuras espacio-temporales estables, oscilatorias o caóticas[6][4].

A la fecha existen algunos modelos relacionados con la ciencia de materiales para describir este tipo de fenómenos con diferentes formas de difusión y dinámica de mezclas [33].

La quitina es un polisacárido que se encuentra en la estructura de muchos organismos, tales como insectos, crustáceos, arácnidos, hongos y algas. Es considerado uno de los polímeros más abundantes de la naturaleza, después de la celulosa. La quitina tiene numerosas aplicaciones en campos como la industria alimentaria, agricultura, medicina y biotecnología, por lo que su obtención, modificación y caracterización ha sido objeto de numerosas investigaciones en las últimas décadas.

Se han encontrado diversas formas de obtener quitina, desde la extracción directa a partir de fuentes naturales hasta la producción a través de procesos de fermentación controlada. Además, su conversión a quitosano, un derivado de la quitina, permite obtener un material con mayor solubilidad, lo que amplía su campo de aplicación[17].

Entre algunas de las aplicaciones que se han desarrollado a partir de la obtención de quitina y quitosano, se pueden destacar los compuestos para la eliminación de toxinas, la producción de películas para empaques biodegradables, la elaboración de productos avanzados para la salud humana y animal, la síntesis de nanopartículas con fines terapéuticos, entre otros.

Se trata de hacer un estudio y revisión de modelos de reacción difusión para obtener las cualidades que permitan crear un modelo híbrido que describa este proceso en dos escalas, una molecular y otra macroscópica[15].

Para describir el proceso de desacetilación de la quitina para convertirla en quitosano mediante el uso de NaOH, se puede utilizar un modelo cinético. La cinética química estudia cómo las reacciones químicas avanzan a lo largo del tiempo, y se pueden modelar mediante ecuaciones diferenciales.

En este caso, la reacción química puede representarse de la siguiente manera:



donde QC representa la quitina, NaOH es el hidróxido de sodio, Quitosano es el producto deseado, CH₃COONa es el acetato de sodio y H₂O es agua.

La ecuación cinética para esta reacción puede expresarse como:

$$\frac{d[\text{QC}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (1.2)$$

$$\frac{d[\text{NaOH}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (1.3)$$

$$\frac{d[\text{Quitosano}]}{dt} = k_2[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (1.4)$$

$$\frac{d[\text{CH}_3\text{COONa}]}{dt} = k_2[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (1.5)$$

donde k_1 y k_2 son las constantes de velocidad de las dos etapas de la reacción. La concentración de la quitina en función del tiempo puede expresarse como:

$$[\text{QC}](t) = [\text{QC}]_0 e^{-k_1[\text{NaOH}]_0 t} \quad (1.6)$$

donde $[\text{QC}]_0$ y $[\text{NaOH}]_0$ son las concentraciones iniciales de la quitina y NaOH, respectivamente.

La concentración de quitosano y acetato de sodio en función del tiempo puede expresarse como:

$$[\text{Quitosano}](t) = \frac{k_2}{k_1} ([\text{QC}]_0 - [\text{QC}](t)) [\text{NaOH}](t) \quad (1.7)$$

$$[\text{NaAcO}](t) = \frac{k_2}{k_1} ([\text{QC}]_0 - [\text{QC}](t)) [\text{NaOH}](t) \quad (1.8)$$

donde $[\text{QC}](t)$ es la concentración de quitina en función del tiempo.

La temperatura y la concentración de NaOH pueden influir en las constantes de velocidad de reacción.

Para obtener los valores de las concentraciones y velocidades de reacción en función del tiempo se deben resolver numéricamente las ecuaciones diferenciales utilizando un software especializado en modelado cinético.

Es importante tener en cuenta que este modelo es una simplificación y no considera factores como la difusión de NaOH en la matriz de quitina o la formación de productos secundarios.

1.1. Antecedentes

1.1.1. Quitina

La quitina es un polisacárido estructural natural que se encuentra en la naturaleza en la pared celular de los hongos, exoesqueletos de crustáceos y algunos otros animales marinos (como calamares y algunos gusanos). Tiene una estructura química similar a la celulosa, pero a diferencia de ésta, contiene grupos acetamida en lugar de grupos hidroxilo.

El peso molecular de la quitina varía dependiendo de su grado de polimerización. La quitina es un polisacárido lineal que consiste en unidades repetitivas de N-acetilglucosamina unidas por enlaces (1→4). El peso molecular de la quitina es típicamente de 100.000 a 1.000.000 g/mol, y algunos estudios han reportado pesos moleculares de hasta 40.000.000 g/mol. Sin embargo, es importante tener en cuenta que el peso molecular puede variar según la fuente y el método de aislamiento utilizado.

La quitina ha atraído la atención de la comunidad científica debido a sus propiedades únicas, entre las cuales se incluyen:

- Biodegradable: Es un material biodegradable, lo que lo hace una alternativa ecológica a los materiales sintéticos no biodegradables.

- Química versátil: Puede ser modificada químicamente para obtener diferentes propiedades, como capacidad de absorción, capacidad de retener agua y compatibilidad con diferentes entornos biológicos.

- Baja toxicidad: Es un material no tóxico para los seres humanos y animales.

Las posibles aplicaciones de la quitina son diversas, entre las que destacan:

- Aplicaciones médicas: La quitina se ha utilizado en dispositivos médicos como vendas, apósitos y suturas, así como en terapias regenerativas, como el tratamiento de heridas y quemaduras.

- Aplicaciones agrícolas: La quitina y sus derivados se han utilizado para la bioestimulación y control de plagas en la agricultura.

- Aplicaciones industriales: Se utiliza en la producción de películas y recubri-

mientos para alimentos, productos electrónicos, textiles y productos de limpieza, entre otros.

- Aplicaciones ambientales: La quitina y sus derivados se están investigando como una alternativa biodegradable a los plásticos y en la eliminación de contaminantes en el agua y suelos.

En resumen, la quitina es un material natural con propiedades únicas y diversas aplicaciones potenciales en áreas diversas[3][11].

1.1.2. Desacetilación

La desacetilación de la quitina es un proceso mediante el cual se remueven los grupos acetilo (-COCH₃) de la quitina para producir quitosano[37].

Dado que la hidrólisis alcalina de la quitina produce quitosano, el cálculo del grado de desacetilación puede realizarse utilizando la siguiente fórmula:

$$\text{Grado de desacetilación} = \left[\frac{\text{cantidad de quitosano generado}}{\text{cantidad de quitina hidrolizada}} \right] \times 100$$

Para realizar el cálculo, es necesario conocer la masa molar de la glucosamina y de la acetilglucosamina, así como el número de moles de NaOH utilizado en la hidrólisis.

$$\begin{aligned} \text{Masa molar de glucosamina} &= 179,17 \text{ g/mol} \\ \text{Masa molar de acetilglucosamina} &= 221,21 \text{ g/mol} \\ \text{Número de moles de NaOH utilizado} &= (400 \text{ ml} \times 10 \text{ mol/L}) / 1000 = 4 \text{ moles} \end{aligned}$$

Primero, se debe convertir la masa de quitina a moles:

$$\text{Moles de quitina} = 500 \text{ g} / (203,23 \text{ g/mol}) = 2,46 \text{ moles}$$

Durante la hidrólisis alcalina, cada grupo acetilo de la quitina se convierte en un grupo hidroxilo. Por lo tanto, la cantidad de quitosano generado equivale a la cantidad de grupos hidroxilo formados durante la hidrólisis. Cada grupo hidroxilo proviene de un grupo acetilo, por lo que la cantidad de grupos hidroxilo formados es igual al número de grupos acetilo en la quitina[23].

La quitina es un polímero de acetilglucosamina y puede considerarse como una

cadena larga de unidades de glucosamina con un grupo acetilo unido al carbono 2 de cada unidad. La fórmula estructural de la acetilglucosamina es $C_8H_{15}NO_6$, lo que indica que hay un grupo acetilo y un grupo amino en cada unidad.

Por lo tanto, el número de grupos acetilo en la quitina es igual al número total de unidades de acetilglucosamina en la cadena. La quitina tiene una masa molar de 203,23 g/mol y cada unidad de acetilglucosamina pesa 221,21 g/mol. Por lo tanto, el número de unidades de acetilglucosamina en la quitina es[30]:

$$\text{Número de unidades de acetilglucosamina} = 500 \text{ g} / (221,21 \text{ g/mol}) = 2,26 \text{ moles}$$

Este número indica que hay 2,26 moles de unidades de acetilglucosamina en la muestra de 500 g de quitina. Cada mol de acetilglucosamina tiene un grupo acetilo, por lo que el número total de grupos acetilo en la muestra es:

$$\text{Número de grupos acetilo} = 2,26 \text{ moles} \times 1 \text{ grupo acetilo/mol} = 2,26 \text{ grupos acetilo}$$

La hidrólisis alcalina de cada grupo acetilo genera un grupo hidroxilo y una sal de acetato correspondiente. Para determinar la cantidad de quitosano generado, es necesario considerar que cada grupo hidroxilo corresponde a un grupo acetilglucosamina que ha perdido un grupo acetilo. Por lo tanto, la cantidad de quitosano generado en la hidrólisis es igual al número total de grupos acetilo menos el número total de sales de acetato formadas.

La hidrólisis alcalina de un grupo acetilo utiliza un mol de NaOH. Dado que se utilizaron 4 moles de NaOH en la hidrólisis, se forman 4 moles de sal de acetato correspondientes. Cada mol de sal de acetato proviene de una unidad de acetilglucosamina en la quitina, por lo que la cantidad de unidades de acetilglucosamina que han perdido un grupo acetilo es igual a 2,26 moles - 4 moles = -1,74 moles.

Esta cantidad negativa indica que no hay suficientes grupos acetilo en la muestra para reaccionar con todo el NaOH utilizado. A partir de esta información, se puede concluir que el grado de desacetilación de la muestra es menor al 100 %. Para calcular el grado de desacetilación, se necesita determinar cuál es la cantidad de grupos acetilo que no reaccionan con el NaOH[21].

Dados los resultados anteriores, se puede afirmar que la cantidad de grupos acetilo que reacciona con el NaOH es igual a la cantidad de sales de acetato formadas, es decir, 4 moles. Por lo tanto, la cantidad de grupos acetilo que no reacciona con el NaOH es igual a la diferencia entre el número inicial de grupos acetilo y la cantidad

de grupos acetilo que reacciona con el NaOH:

Número de grupos acetilo no reactivos = 2,26 grupos acetilo - 4 moles = -1,74 grupos acetilo

Nuevamente, esta cantidad negativa indica que no hay suficientes grupos acetilo en la muestra para reaccionar con todo el NaOH utilizado. Sin embargo, podemos calcular el grado de desacetilación suponiendo que el número de grupos acetilo no reactivos es cero. En este caso, la cantidad.

El grado de desacetilación (GDA) se define como la proporción de unidades de glucosamina que están desacetiladas en una muestra de quitina. Generalmente, se expresa en porcentaje y se calcula utilizando la siguiente fórmula[19]:

$$\text{GDA (\%)} = [(\text{Peso de quitina original} - \text{Peso de quitina desacetilada}) / \text{Peso de quitina original}] \times 100$$

Para modelar la desacetilación de la quitina y calcular las concentraciones de quitosano en una solución, se debe conocer el GDA y la concentración inicial de quitina (en mol/L o g/L). Supongamos que se tiene una solución de quitina con una concentración inicial de 1 g/L y un GDA del 75 %. Entonces, para calcular la concentración de quitosano después de la desacetilación, se puede utilizar la siguiente ecuación[28]:

$$\text{Concentración de quitosano (g/L)} = \text{Concentración inicial de quitina (g/L)} \times (1 - \text{GDA}/100)$$

Con los valores dados, se tendría:

$$\text{Concentración de quitosano (g/L)} = 1 \text{ g/L} \times (1 - 75/100) = 0.25 \text{ g/L}$$

Por lo tanto, la concentración de quitosano después de la desacetilación de la quitina sería de 0.25 g/L. Es importante tener en cuenta que el proceso de desacetilación no es completo y siempre habrá una parte de la quitina que no se convierta en quitosano. Además, la eficiencia de la desacetilación puede variar dependiendo de las condiciones de reacción (por ejemplo, temperatura, concentración de hidróxido de sodio).

La desacetilación alcalina de la quitina es un proceso químico que se utiliza para producir quitosano a partir de la quitina. Este proceso implica la solubilización de la quitina en una solución de hidróxido de sodio (NaOH) a altas temperaturas[12].

El proceso de desacetilación alcalina implica los siguientes pasos:

1. Preparación de la quitina: La quitina se extrae de fuentes naturales, como los caparazones de camarones y cangrejos. La quitina se somete a un proceso de desmineralización y desgrasado para eliminar las impurezas. Entonces, se seca y muele para obtener un polvo fino.

2. Solubilización de la quitina en NaOH: La quitina se mezcla con una solución de hidróxido de sodio (NaOH) y se calienta a altas temperaturas (alrededor de 120-130°C). El NaOH disuelve la quitina y produce una solución viscosa.

3. Desacetilación de la quitina: El NaOH reacciona con los grupos acetilo de la quitina y los convierte en grupos amino, produciendo quitosano. La reacción se lleva a cabo durante varias horas, y la solución se agita periódicamente para garantizar que todos los grupos acetilo se desacetilen de manera uniforme.

4. Neutralización de la solución: Una vez que se completa la desacetilación, se añade ácido acético (o algún otro ácido débil) para neutralizar la solución y detener la reacción. Esto produce un precipitado de quitosano.

5. Lavado y secado del quitosano: El quitosano se lava con agua para eliminar los residuos de ácido y NaOH, luego se seca y muele para obtener un polvo fino.

En general, la desacetilación alcalina es un proceso efectivo y económico para producir quitosano a gran escala. El quitosano resultante tiene muchas aplicaciones, como en la industria alimentaria y farmacéutica, la agricultura y la biotecnología

1.1.3. Ecuaciones químicas y velocidades de reacción

Para calcular las velocidades de reacción, necesitamos conocer los valores de las constantes de velocidad k_1 y k_2 . Estos valores pueden ser determinados experimentalmente en un laboratorio.

Una manera común de medir la constante de velocidad k_1 de la hidrólisis de la quitina es a través de la liberación de azúcares reductores como la glucosa. La hidrólisis de la quitina resulta en la producción de N-acetil-D-glucosamina, que puede ser convertido en glucosa por la acción de la enzima quitinasa. Midiendo la liberación de azúcares reductores a lo largo del tiempo, se puede obtener una curva de la velocidad de hidrólisis.

Por otro lado, se puede determinar la constante de velocidad k_2 mediante la cuan-

tificación de los grupos acetilos liberados durante la desacetilación de la quitina. La cantidad de grupos acetilos eliminados a lo largo del tiempo puede ser medida mediante distintas técnicas, como cromatografía o espectroscopía.

Una vez que se han obtenido los valores de k_1 y k_2 , se pueden calcular las velocidades de reacción utilizando la ecuación:

$$\text{Velocidad de reacción} = k * [\text{Reactante}]$$

Donde k es la constante de velocidad y $[\text{Reactante}]$ es la concentración del reactante. En el caso de la hidrólisis de la quitina, el reactante es la quitina, entonces la velocidad de reacción sería:

$$\text{Velocidad de hidrólisis} = k_1 * [Q]$$

Mientras que en la desacetilación de la quitina, el reactante es la quitina desacetilada, y la velocidad de reacción sería:

$$\text{Velocidad de desacetilación} = k_2 * [QA]$$

1.1.4. Velocidades de Reacción

Para calcular la velocidad de reacción de la desacetilación alcalina de 200 g de quitina con 160 g de NaOH, necesitamos conocer algunos datos experimentales de la reacción, como la cantidad de NaOH consumido, el tiempo de reacción y la concentración de la solución.

Suponiendo que tenemos una solución de NaOH al 1M (es decir, 40 g de NaOH disueltos en 1 litro de agua), y que la reacción se realiza a una temperatura de 60°C durante 2 horas, podemos estimar la velocidad de reacción de la siguiente manera:

1. Calculemos la cantidad de NaOH requerido para reaccionar con el 100 % de la quitina, teniendo en cuenta que cada unidad de masa molar de quitina $(C_8H_{13}NO_5)_n$, reemplaza dos unidades de hidróxido del NaOH.

$$\text{Masa molar de quitina} = 161.28 \text{ g/mol de monómero}$$

$$\text{Cantidad de moles de quitina} = 200 \text{ g} / 161.28 \text{ g/mol} = 1.24 \text{ moles de quitina}$$

En total se requieren:

2 moles de NaOH por cada mole de quitina.

Total de moles de NaOH= $1.24 \times 2 = 2.48$ moles de NaOH.

Masa de NaOH necesaria= masa molar NaOH x cantidad de moles de NaOH.

Masa de NaOH necesaria= $40 \text{ g/mol} \times 2.48 \text{ moles} = 99.2 \text{ g}$ de NaOH.

2. Si se emplea la cantidad de NaOH calculada en el primer paso, entonces la velocidad de reacción será:

Cantidad de NaOH consumida = 99.2 g

Tiempo de reacción = 2 horas = 7200 segundos

Dado que la concentración de NaOH es 1M, podemos calcular la velocidad de reacción como:

Velocidad= (Cantidad de NaOH consumido / Peso de quitina) / Tiempo

Velocidad= $(99.2 \text{ g} / 200 \text{ g}) / 7200 \text{ s}$

Velocidad= 0.00069 g/s

Por lo tanto, la velocidad de reacción de la desacetilación alcalina de 200 g de quitina con 160 g de NaOH, asumiendo una solución de NaOH al 1M y una temperatura de 60°C durante 2 horas, es de 0.00069 g/s. Es importante tener en cuenta que el valor de la velocidad de la reacción puede variar en función de las condiciones específicas de la reacción.

1.1.5. Concentraciones

Podemos utilizar la fórmula de la concentración molar para calcular la cantidad de NaOH:

Concentración molar = mol / volumen (en litros)

Primero, convertimos 0.01 M en mol/L:

$$0.01 \text{ M} = 0.01 \text{ moles} / 1 \text{ litro}$$

Luego, para calcular la cantidad de NaOH en gramos, necesitamos usar la masa molar del NaOH, que es de 40 g/mol. La masa es igual al número de moles multiplicado por la masa molar.

Para una solución de 1 peso/volumen, tenemos 1 gramo de soluto en 100 mL de solución. Por lo tanto, para una solución de 1 a 4 peso/volumen (1 g de soluto por cada 4 mL de solución), podemos asumir que tenemos 1 gramo de soluto en $4 \times 100 \text{ mL} = 400 \text{ mL}$ de solución.

Cantidad de NaOH = Concentración molar x volumen x masa molar

$$\text{Cantidad de NaOH} = 0.01 \text{ moles} / 1 \text{ litro} \times 0.4 \text{ litros} \times 40 \text{ g/mol}$$

$$\text{Cantidad de NaOH} = 0.16 \text{ gramos de NaOH}$$

Capítulo 2

Sistemas dinámicos

2.1. Definición y concepto

Los sistemas dinámicos son una rama de las matemáticas que se ocupa del estudio de sistemas que evolucionan en el tiempo. Un sistema dinámico puede ser descrito por un conjunto de ecuaciones o reglas que especifican cómo las variables del sistema cambian con el tiempo. Estos sistemas pueden ser modelados en una amplia gama de disciplinas, incluyendo la física, la biología, la química, la economía y la ingeniería, por nombrar algunas[8].

La teoría de los sistemas dinámicos es una herramienta importante para entender y predecir el comportamiento de sistemas complejos. Ha sido aplicada en una variedad de campos, desde la dinámica del clima hasta el modelado de epidemias. Los sistemas dinámicos también son cruciales para el diseño y control de sistemas, como aviones, robots y sistemas de control de procesos industriales.

La literatura sobre sistemas dinámicos es amplia y variada, desde libros de texto hasta artículos de investigación especializados. Algunas referencias recomendadas para introducirse en el tema son:

- "Differential Equations, Dynamical Systems, and an Introduction to Chaos" por Hirsch, Smale, y Devaney. Este libro es una introducción amplia y accesible al tema, con un enfoque en la teoría y aplicaciones de sistemas dinámicos[2].

- "Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering" por Strogatz. Este libro es un texto de nivel universitario que proporciona una introducción detallada a los sistemas dinámicos no lineales con aplicaciones en física, biología, química y tecnología[32].

- "Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos" por Wiggins. Este libro es una introducción detallada a los sistemas dinámicos y su análisis numérico, con un enfoque en las aplicaciones en la ciencia e ingeniería [1].

En resumen, los sistemas dinámicos son fundamentales en el estudio y comprensión de sistemas complejos y dinámicos en diversas disciplinas, desde la biología hasta la ingeniería. Hay una amplia gama de literatura dedicada a esta disciplina que puede ser utilizada para entender y aplicar estos conceptos.

2.2. Sistemas Dinámicos de una y muchas variables

En este caso se trata de la formulación genérica que nos permita describir la dinámica de sistemas cuyas variables asumen valores continuos en general, pero también, se considera al tiempo como un continuo. De esta manera, en general, se trata de buscar las herramientas y estrategias que nos permitirán visualizar las soluciones de los modelos planteados para diferentes sistemas en los que

- i) no se considera la estructura atómica o molecular de las sustancias;
- ii) el estado de agregación de cada sustancia solamente depende de su respectiva densidad de masa o su concentración y, en el caso general o extendido espacialmente
- iii) de sus propiedades de difusión relativas.

En el caso más general trataremos con sistemas abiertos y fuera de equilibrio, así que las ecuaciones diferenciales serán no-lineales.

Los sistemas dinámicos son sistemas que evolucionan en el tiempo y su comportamiento no puede ser completamente entendido mediante el examen aislado de sus partes constituyentes. Estos sistemas se pueden clasificar en dos tipos: sistemas dinámicos de una variable y sistemas dinámicos de muchas variables. Ambos tipos son de gran importancia en la ingeniería, la física, la biología, la economía, entre otros campos.

Los sistemas dinámicos de una variable son aquellos cuyo comportamiento está determinado por una única variable que cambia en el tiempo. Por ejemplo, el movimiento de un péndulo simple puede modelarse como un sistema dinámico de una variable, donde la posición angular de la bola del péndulo es la variable única. Debido a que estos sistemas son relativamente simples y fáciles de analizar, se utilizan ampliamente en ciencias como la física y la ingeniería. Se han desarrollado herramientas matemáticas especializadas, como la teoría de ecuaciones diferenciales, para analizar estos sistemas.

Por otro lado, los sistemas dinámicos de muchas variables son aquellos cuyo comportamiento está determinado por múltiples variables que cambian en el tiempo y que interactúan entre sí. Ejemplos comunes incluyen sistemas biológicos, como la regulación de la glucosa en sangre o la dinámica poblacional de un ecosistema. Debido a que estos sistemas son mucho más complejos, su análisis y comprensión requieren herramientas matemáticas más avanzadas como la teoría de sistemas dinámicos y la teoría de control.

Ambos tipos de sistemas dinámicos tienen características diferentes. Los sistemas de una variable son más sencillos y fáciles de analizar, ya que su comportamiento está determinado por una sola variable. Sin embargo, los sistemas de muchas variables son más complejos, pero a su vez, más representativos de la realidad, ya que la mayoría de los sistemas en la vida real están compuestos por múltiples variables que interactúan. Una diferencia importante entre estos dos tipos de sistemas es que, en los sistemas de una variable, el cambio en la variable única se debe únicamente a la dinámica interna del sistema. Por otro lado, en los sistemas de muchas variables, las variables pueden interactuar entre sí de formas difíciles de prever. Por ejemplo, en la regulación de la glucosa en sangre, la producción de insulina está influenciada tanto por la concentración de glucosa en sangre como por las señales hormonales del cuerpo. Estas interacciones pueden llevar a comportamientos impredecibles que son difíciles de analizar y comprender.

Otra diferencia importante es que los sistemas de una variable tienen una única dimensión, mientras que los sistemas de muchas variables tienen múltiples dimensiones. Si consideramos un ecosistema, la abundancia de cada especie representaría una dimensión, por lo que los sistemas de muchas variables pueden ser difíciles de visualizar y entender.

Para el análisis de sistemas dinámicos de una variable se utilizan herramientas matemáticas como la teoría de ecuaciones diferenciales, mientras que para el análisis de sistemas dinámicos de muchas variables se utilizan herramientas como la teoría de sistemas dinámicos y la teoría de control.

En conclusión, los sistemas dinámicos de una y más variables son importantes porque se pueden utilizar para modelar y comprender muchos sistemas complejos en el mundo real. Aunque los sistemas de una variable son más simples, su análisis puede ser insuficiente en muchos casos de la vida real. Por lo tanto, los sistemas de muchas variables son de mayor interés y una herramienta poderosa para estudiar sistemas complejos. Como resultado, los matemáticos y científicos continúan investigando y desarrollando nuevas técnicas para analizar y comprender estos sistemas, y con frecuencia aplican estos conocimientos en el diseño y control de sistemas complejos.

Todos los sistemas en los que podemos pensar del universo conocido son sistemas

dinámicos: todos cambian interior y exteriormente y, a su vez, provocan cambios en otros sistemas con los que tienen alguna interacción

2.3. Python y los sistemas dinámicos

Python es un lenguaje de programación popular para la implementación y simulación de sistemas dinámicos. Muchas bibliotecas de Python están disponibles para el análisis de sistemas dinámicos[24][13][34].

Una biblioteca popular es ‘SciPy’, que es una biblioteca de propósito general para matemáticas y ciencia, que contiene módulos para la simulación de sistemas dinámicos. ‘NumPy’ es otra biblioteca muy útil para realizar operaciones matemáticas avanzadas. Una biblioteca específica para sistemas dinámicos se llama ‘pyDDE’, un paquete que permite solucionar ecuaciones diferenciales con retardo a través de Python[22][7].

Algunas referencias bibliográficas que pueden ser útiles para aprender a aplicar sistemas dinámicos en Python son:

- "Dynamical Systems with Applications using Python" de Stephen Lynch, es un libro muy recomendado. El libro tiene una fuerte orientación hacia aplicaciones e incluye muchos ejemplos de sistemas dinámicos que los estudiantes pueden usar para trabajar con problemas del mundo real[24].

- "Python for Scientists and Engineers" de Rakesh Nayak, es un libro que incluye algunos capítulos sobre sistemas dinámicos y su aplicación, pero también explora un rango más amplio de temas para científicos e ingenieros que buscan implementar Python en su trabajo[27].

En resumen, hay muchos recursos disponibles para los estudiantes que desean aprender cómo aplicar Python para sistemas dinámicos. Además de ‘SciPy’, ‘NumPy’ y ‘pyDDE’, hay otros paquetes Python que pueden ser útiles según el interés específico en el tema. Los libros recomendados anteriormente también proporcionan un buen punto de partida para aprender cómo aplicar sistemas dinámicos usando Python.

2.4. El algoritmo de Euler

El método de Euler es un método numérico utilizado para aproximar soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias, es decir, ecuaciones que relacionan una función

con sus derivadas. Este método utiliza aproximaciones lineales locales para predecir el valor de la función en un punto futuro a partir de su valor actual y su derivada actual. El método de Euler es relativamente simple y fácil de implementar en Python, y es un buen método para comenzar a aprender sobre métodos numéricos[27].

Primero, vamos a definir una función en Python que represente la ecuación diferencial que queremos resolver. Por ejemplo, si queremos aproximar soluciones de la ecuación diferencial $dy/dx = x * y$, podemos escribir la siguiente función:

```
python
def f(x, y):
    return x * y
```

A continuación, vamos a definir otra función que utilice el método de Euler para aproximar la solución de esta ecuación diferencial. Esta función tomará como argumentos la función $f(x, y)$, el valor inicial de y en x_0 , el valor de x en el que queremos aproximar la solución y el tamaño del paso h que queremos tomar:

```
python
def euler_method(f, x0, y0, xn, h):
    x = x0
    y = y0
    while x < xn:
        y += h * f(x, y)
        x += h
    return y
```

Esta función funciona de la siguiente manera: comienza en x_0 con el valor inicial de y_0 . Luego, utiliza el método de Euler para aproximar el valor de y en el siguiente punto $x + h$, y repite esto hasta que llega al punto x_n que es el punto en el que queremos aproximar la solución. El tamaño del paso h determina la precisión de la aproximación y debe ser lo suficientemente pequeño para garantizar una buena precisión, pero no demasiado pequeño para no hacer el cálculo computacionalmente ineficiente.

Finalmente, podemos usar estas dos funciones para aproximar soluciones de la ecuación diferencial. Por ejemplo, si queremos aproximar la solución de la ecuación diferencial $dy/dx = x * y$ en el intervalo $x [0, 1]$ con valor inicial $y(0) = 1$ y un tamaño de paso $h = 0,1$, podemos hacer lo siguiente:

```
python
```

```

x0 = 0
y0 = 1
xn = 1
h = 0.1
result = euler_method(f, x0, y0, xn, h)
print(result)

```

Este código imprimirá el valor aproximado de la solución en $x = 1$. En este caso, el resultado es aproximadamente 2,0, lo cual es cercano al valor real de la solución en $x = 1$.

El método de Euler es un método numérico simple y fácil de implementar en Python que se utiliza para aproximar soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias. Con este método y algo de comprensión de Python se pueden resolver ecuaciones diferenciales muy complejas de manera numérica.

En Python, también podemos usar el método de Euler para resolver sistemas dinámicos utilizando la biblioteca 'NumPy'. Primero, debemos definir una función Python que tome las variables del sistema y devuelva sus derivadas. Por ejemplo, consideremos el siguiente sistema dinámico:

$$\begin{aligned} dx/dt &= -y \\ dy/dt &= x \end{aligned}$$

Para resolver este sistema, podemos definir una función que tome las variables 'x' y 'y' y devuelva sus derivadas 'dx/dt' y 'dy/dt'. La función se vería así:

```

python
def f(t, y):
    return np.array([-y[1], y[0]])

```

Aquí, el argumento 't' es el tiempo y el argumento 'y' es un arreglo NumPy que contiene los valores actuales de las variables 'x' y 'y'.

Luego, para resolver el sistema dinámico utilizando el método de Euler, podemos usar la siguiente función:

```

python
def euler_method(f, t0, tf, y0, h):
    t = np.arange(t0, tf + h, h)
    n = len(t)
    y = np.zeros((n, len(y0)))

```

```

y[0] = y0
for i in range(n - 1):
    y[i + 1] = y[i] + h * f(t[i], y[i])
return y, t

```

Esta función toma como argumentos la función ‘f’ que calcula las derivadas, el tiempo inicial ‘t0’, el tiempo final ‘tf’, el vector inicial de variables ‘y0’ y el tamaño de paso ‘h’ para la solución numérica. La función devuelve dos valores: un arreglo NumPy que contiene los valores numéricos de las variables ‘x’ y ‘y’ en cada paso y un arreglo NumPy que contiene los tiempos correspondientes.

Por ejemplo, para resolver el sistema dinámico con valores iniciales ‘x0 = 1’ y ‘y0 = 0’ en el intervalo de tiempo ‘t = [0, 10]’ con un tamaño de paso de ‘h = 0.1’, podemos usar la siguiente línea de código:

```

python
import numpy as np

t0, tf = 0, 10
y0 = np.array([1, 0])
h = 0.1
y, t = euler_method(f, t0, tf, y0, h)

```

La solución numérica para ‘x’ y ‘y’ en cada paso se almacena en el arreglo ‘y’, y los tiempos correspondientes se almacenan en el arreglo ‘t’.

En resumen, el método de Euler es un método numérico efectivo y fácil de implementar en Python para resolver sistemas dinámicos, y la biblioteca ‘NumPy’ es una herramienta útil para realizar cálculos eficientes de soluciones numéricas de sistemas dinámicos

2.5. La difusión en los sistemas dinámicos y Python

La difusión es un proceso que describe cómo se mueven las partículas a través de un medio o sustancia. Es importante en una variedad de campos, desde la física y la química hasta la biología y la ingeniería.

En Python, podemos modelar la difusión utilizando ecuaciones diferenciales parciales (EDPs) y la biblioteca ‘SciPy’. La ecuación de difusión más simple se conoce como la ecuación de difusión unidimensional y se ve así:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

donde ‘u’ es la concentración de la sustancia que se está difundiendo, ‘t’ es el tiempo, ‘x’ es la posición en el medio, y ‘D’ es el coeficiente de difusión que describe qué tan rápido se difunde la sustancia. Para resolver esta ecuación en Python, podemos usar la siguiente función:

```
from scipy import integrate

def diffusion_eq(u, t, D, dx):
    dudt = D * (np.roll(u, -1) - 2 * u + np.roll(u, 1)) / dx**2
    dudt[0] = 0
    dudt[-1] = 0
    return dudt
```

Esta función toma como argumentos la concentración inicial ‘u’, el tiempo ‘t’, el coeficiente de difusión ‘D’ y el tamaño de paso ‘dx’. Utiliza el operador ‘np.roll’ para calcular la segunda derivada espacial $\partial^2 u / \partial x^2$, y luego devuelve la derivada temporal $\partial u / \partial t$ correspondiente.

A continuación, podemos utilizar la función ‘odeint’ de ‘SciPy’ para resolver la ecuación de difusión para varios tiempos utilizando los valores iniciales dados y los parámetros dados:

```
import numpy as np
from scipy.integrate import odeint

D = 1.0 # Coeficiente de difusión
L = 1.0 # Longitud del medio
dx = 0.1 # Tamaño de paso
x = np.arange(0, L+dx, dx) # Vector de posición
u0 = np.zeros_like(x) # Concentración inicial
u0[int(len(x)/2)] = 1.0 # Concentración inicial, pico en el centro

t = np.arange(0, 1.0, 0.01) # Vector de tiempo
u = odeint(diffusion_eq, u0, t, args=(D, dx)) # Resolver la ecuación de difusión
```

En este ejemplo, creamos un vector ‘x’ de posiciones a lo largo del medio, una concentración inicial ‘u0’ que tiene un pico en el centro, y un vector ‘t’ de tiempos en los que queremos calcular la concentración. Luego, usamos la función ‘odeint’ para calcular la solución de la ecuación de difusión para cada tiempo en ‘t’.

Después de resolver la ecuación de difusión, podemos visualizar la solución en 3D con la siguiente línea de código:

```
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
X, T = np.meshgrid(x, t)
ax.plot_surface(X, T, u, cmap="inferno")
plt.xlabel('Posición')
plt.ylabel('Tiempo')
plt.show()
```

Esta visualización muestra cómo la concentración se difunde a través del medio a lo largo del tiempo.

En resumen, la difusión es un proceso importante en muchos campos, y la biblioteca ‘SciPy’ proporciona herramientas poderosas para modelar y resolver ecuaciones de difusión en Python.

El operador laplaciano es un operador diferencial que se usa comúnmente para describir procesos físicos en campos como la física y la mecánica cuántica. En Python, el operador laplaciano se puede implementar utilizando la biblioteca ‘NumPy’.

Dado un campo escalar ‘f(x,y,z)’, el operador laplaciano se define como la suma de las segundas derivadas parciales de ‘f’ respecto a cada una de las coordenadas (‘x’, ‘y’ y ‘z’). En matemáticas, se escribe como:

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}$$

En ‘NumPy’, podemos utilizar la función ‘laplace’ (disponible en ‘scipy.ndimage’) para calcular el operador laplaciano de un campo escalar de forma discreta. La sintaxis de la función ‘laplace’ es la siguiente:

```
from scipy.ndimage import laplace
```

```
L = laplace(f, mode='wrap', cval=0.0)
```

Donde 'f' es un arreglo 'numpy' que representa el campo escalar. Los parámetros 'mode' y 'cval' definen cómo manejar la frontera del arreglo. El parámetro 'mode' especifica el método de extrapolación y puede ser uno de 'reflect' (reflejar la matriz a cada lado), 'constant' (añadir valores constantes a cada lado), 'nearest' (repetir los valores más cercanos a cada lado) o 'wrap' (hacer que los índices se envuelvan). El parámetro 'cval' es el valor de los bordes si el modo seleccionado es 'constant'.

Veamos un ejemplo de cómo calcular el operador laplaciano de un campo escalar en Python:

```
python
import numpy as np
from scipy.ndimage import laplace

# Crear un campo escalar f(x,y,z)
x, y, z = np.mgrid[-5:5:64j, -5:5:64j, -5:5:64j]
f = np.sin(2*np.pi*x/5) * np.cos(2*np.pi*y/5) * np.exp(-z**2/25)

# Calcular el operador laplaciano
L = laplace(f, mode='wrap', cval=0.0)

# Visualizar los resultados
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

fig = plt.figure()
ax = fig.add_subplot(121, projection='3d')
ax.scatter(x, y, z, c=f.ravel(), cmap='viridis')
ax.set_xlabel('X')
ax.set_ylabel('Y')
ax.set_zlabel('Z')
ax.set_title('Campo escalar original')

ax = fig.add_subplot(122, projection='3d')
ax.scatter(x, y, z, c=L.ravel(), cmap='viridis')
ax.set_xlabel('X')
```

```

ax.set_ylabel('Y')
ax.set_zlabel('Z')
ax.set_title('Operador laplaciano del campo escalar')
plt.show()

```

En este ejemplo, generamos un campo escalar tridimensional 'f' utilizando la función 'numpy.mgrid'. Luego, utilizamos 'scipy.ndimage.laplace' para calcular el operador laplaciano 'L' del campo escalar. Finalmente, visualizamos los resultados utilizando la biblioteca 'matplotlib'.

2.6. Técnicas numéricas

Un objeto común de uso en los diferentes lenguajes de programación son los *array* o *arreglos* que, conceptualmente son estructuras rectangulares que se forman de filas y columnas de «cavidades», sitios o «celdas» para cierto tipo de dato. Normalmente, estos objetos (array) son de dos dimensiones topológicas, es decir, equivalentes a objetos bidimensionales, y están conformados por cierto número de filas y cierto número de columnas como es el caso del array U representado en (??)¹, o bien nuestro nuevo array u

$$u = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline u_{0,0} & u_{0,1} & u_{0,2} & & & & & \\ \hline u_{1,0} & u_{1,1} & & & u_{i-1,j} & & & \\ \hline & & \dots & u_{i,j-1} & u_{i,j} & u_{i,j+1} & & \\ \hline & & & & u_{i+1,j} & & & \\ \hline & & & & & & & \\ \hline & & & & & & & \\ \hline \end{array}.$$

Obviamente un array 3D sería como un conjunto de arrays del tipo de u sobrepuestos en forma de capas, lo cual nos daría 3 índices para identificar cada celda: fila, columna y capa (para más de 3 dimensiones es difícil construir una imagen visual, pero la idea es la misma).

Una de las maneras más simples de modelar un sistema que tiene extensión espacial explícita consiste en superponer las celdas de un array de la dimensión requerida en el espacio que ocupa el sistema. De otra forma podría pensarse en hacer

¹En este caso el número de filas se asocia con el número de pasos o iteraciones que llevará a cabo el algoritmo o, equivalentemente, el número de nuevos estados generados a partir de un estado inicial. El número de columnas corresponde al número de variables del SD.

una cuadrícula en el espacio del sistema y asociar cada celda de ese espacio con la celda de un array y los valores de las concentraciones de sustancia se colocan en la celda correspondiente

$$u = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \\ \hline & & u_{i-1,j} & & \\ \hline u_{i,j-1} & u_{i,j} & u_{i,j+1} & & \\ \hline & u_{i+1,j} & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline \end{array}$$

y, en el caso de que haya más de una sustancia en ese espacio, se construye otro array de la misma manera, pero con los valores de la otra sustancia en cada celda.

2.7. Operador diferencial de Laplace (segunda derivada)

Emplearemos nuevamente la serie de Taylor para evaluar el operador laplaciano, $\nabla^2 u$ para lo cual supondremos que una cantidad escalar u está distribuida espacialmente y puede ser representada por medio de un *array* o arreglo tipo matriz, de manera que las posiciones de *fila-columna* dentro del arreglo corresponderán a posiciones $y - x$ en el espacio real. De este modo, un elemento del array, $u_{i,j}$ (fila i , columna j), corresponderá a un sitio (x, y) del espacio real² primero asociamos un array a una localidad espacial determinada

$$u = \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & \\ \hline & & u_{i-1,j} & & \\ \hline u_{i,j-1} & u_{i,j} & u_{i,j+1} & & \\ \hline & u_{i+1,j} & & & \\ \hline & & & & \\ \hline & & & & \\ \hline \end{array}$$

²Para una correspondencia directa bajo la convención común de los ejes cartesianos, las coordenadas x deberían corresponder a las columnas y las coordenadas y a las filas, es decir, invertidas en orden.

$$u(x+h, y) = u(x, y) + hu_x(x, y) + \frac{1}{2}h^2u_{xx}(x, y) + \frac{h^3}{3!}u_{xxx}(x, y) + \dots \quad (2.2)$$

$$u(x-h, y) = u(x, y) - hu_x(x, y) + \frac{1}{2}h^2u_{xx}(x, y) - \frac{h^3}{3!}u_{xxx}(x, y) + \dots$$

sumando ambas expresiones tenemos

$$u(x+h, y) + u(x-h, y) = 2u(x, y) + h^2u''(x, y) + \mathcal{O}(h)$$

dividiendo por h^2 y despejamos u'' (omitiendo el término de error), el término del laplaciano en x

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u(x+h, y) + u(x-h, y) - 2u(x, y)}{h^2} \quad (2.3)$$

y en forma discreta

$$\nabla^2 u_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 2u_{i,j}}{h^2} \quad (2.4)$$

Para resolver la ecuación de Difusión, podemos usar la fórmula de Euler en la parte temporal y esta expresión para evaluar el operador de Laplace localmente en cada paso:

$$u_{i,j}^{t+1} = u_{i,j}^t + dt \nabla^2 u_{i,j}^t \quad (2.5)$$

2.8. Sistemas de Reacción-Difusión

Este tipo de SD se puede pensar como una extensión, precisamente, de los Sistemas Dinámicos a los cuales se les «agregarían» términos relacionados con la dinámica espacial del sistema (como difusión o advección), pero también como la extensión de una ecuación de conservación como es la ecuación de difusión de Einstein

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{D} \nabla^2 u \quad (2.6)$$

que, evidentemente, es una descripción local de conservación de la sustancia: según la Ley empírica de Fick, cuando hay gradientes de sustancia se crea una densidad de corriente, en sentido opuesto al gradiente, que depende del medio

$$\vec{J} = -D \nabla u \quad (2.7)$$

de manera que la sustancia u se desplaza hacia sitios de menor concentración y por lo mismo tiende a hacerse uniforme en el espacio (cuando no hay gradientes de u las corrientes desaparecen): pensemos en un volumen finito V donde hay una concentración local de la sustancia $u = u(\vec{r}, t)$: al tiempo t habrá una cantidad de sustancia en el volumen V

$$U = \int_V u(\vec{r}, t) dv$$

y la únicas formas de que U cambie en el tiempo son las siguientes:

- I. parte de la sustancia cruza la frontera (a saber, una superficie cerrada que envuelve a V), es decir, tenemos un flujo neto de sustancia hacia dentro o hacia fuera de V . Esto depende de la contribución de las concentraciones relativas de sustancia (gradientes) entre el interior y el exterior de V , en resumen, se tiene un flujo no nulo de sustancia cruzando a través de la superficie S que envuelve al volumen V

$$\oint_S \vec{J}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{s} \neq 0,$$

donde \vec{J} es la densidad de corriente de la sustancia u y su velocidad determina la dirección de $\vec{J} \propto u\vec{v}$. La Ley de Fick (2.7) y la difusión se ilustran en la figura 2.1 para un volumen bidimensional.

- II. o bien, dentro del volumen V ocurre un evento de creación o destrucción (fuente o sumidero) de la sustancia u

$$\int_V f(u; \vec{r}) dv$$

La variación dinámica de la cantidad de sustancia U en el volumen V está dada por

$$\frac{d}{dt} U = \frac{d}{dt} \int_V u(\vec{r}, t) dv = - \oint_S \vec{J} \cdot d\vec{s} + \int_V f(u; \vec{r}) dv$$

donde, como vimos \vec{J} es la densidad de corriente local generada por las diferencias en las concentraciones de u (gradientes de u) $\vec{J} = -\mathcal{D}\nabla u$, así que

$$- \oint_S \vec{J} \cdot d\vec{s} = \mathcal{D} \oint_S \nabla u \cdot d\vec{s} = \mathcal{D} \int_V \nabla^2 u dv$$

de manera que

$$\frac{d}{dt} \int_V u(\vec{r}, t) dv = \mathcal{D} \int_V \nabla^2 u dv + \int_V f(u; \vec{r}) dv$$

y como se trata de un volumen arbitrario V , entonces

$$\frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{D}\nabla^2 u + f(u) \quad (2.8)$$

que es la ecuación típica de un Sistema de Reacción-Difusión que en el caso de dos variables tomaría la forma de un sistema de ecuaciones diferenciales parciales, no lineales, acopladas como

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \mathcal{D}\nabla^2 u + f(u, v) \\ \frac{\partial v}{\partial t} &= \mathcal{D}\nabla^2 v + g(u, v) \end{aligned} \quad (2.9)$$

donde puede observarse que hay un acoplamiento por la vía de las funciones que corresponden a la parte reactiva del sistema y otro por el hecho de que la difusión de ambas especies depende de las concentraciones de las mismas en sitios vecinos muy cercanos al punto de evaluación del sistema.

En la figura 2.1 se muestra la idea de la Ley de Fick y del proceso de difusión espontánea: las zonas más oscuras corresponden a una mayor densidad o concentración de sustancia, por lo que las flechas rojas apuntan de las zonas menos intensas en color (menos densas) hacia las zonas de color más intenso. Si el sistema se deja sin constricciones volver al equilibrio, los excesos de sustancia de las zonas más densas o pobladas se irán desplazando hacia las zonas de menor concentración, como indican las flechas gris-blanco.

Se ha sobrepuesto una cuadrícula para indicar cómo se hace la representación espacial de las sustancias, reactivos, especies, etc. en modelos de Reacción-Difusión. En la imagen la celda u_{ij} representa una celda cualquiera del arreglo, array o matriz y corresponde con una porción del espacio en la que hay cierta concentración de la variable $u(x, y)$. Esta celda tiene un valor nulo para u en esa posición, sin embargo hay celdas vecinas con cierta concentración de u que, por efecto del proceso de difusión, harán que ese valor de u_{ij} cambie eventualmente: con el transcurso del tiempo la sustancia de alta concentración de la zona central se irá desplazando, de acuerdo a la Ley de Fick, hacia las zonas de menor concentración hasta el punto en el que la distribución espacial se hará uniforme ($u_{ij} = u_{kl}$ para todos los i, j, k, l) y los gradientes de sustancia eventualmente desaparecerán. El proceso puede ser rápido o

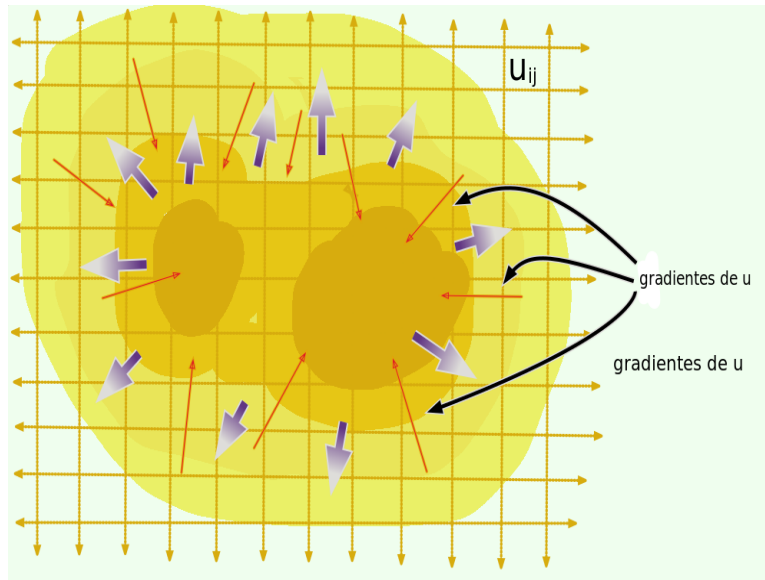


Figura 2.1: Concentraciones de sustancia (en tonos de naranja: más oscuro=mayor concentración). Las flechas rojas indican los gradientes o direcciones de máximo crecimiento de u , así que, al dejar «libre» al sistema aparecen corrientes de sustancia u en dirección opuesta los gradientes en cada punto del espacio apuntando hacia fuera de un elemento finito de volumen.

relativamente lento de acuerdo con el coeficiente de difusión \mathcal{D} que es propio de cada sustancia y medio en el caso de un sistema simple, de una sola variable, en un medio no reactivo. Si el medio fuese reactivo con la sustancia u entonces los procesos de creación o desaparición de sustancia u -o de alguna otra, producto de la reacción- afectarían al proceso de difusión simple, simétrica, isotrópica por el hecho mismo de que las reacciones dependen de las concentraciones locales de los reactivos y podrían llevar al sistema hacia la formación de estructuras no homogéneas que podrían ser estables, oscilatorias o caóticas.[35]

En el caso de dos o más variables tendremos arrays o arreglos «superpuestos» espacialmente, de manera que en la misma posición (i, j) habrá sustancia u y sustancia v , etc. en diferentes cantidades, densidades o concentraciones dadas por u_{ij}, v_{ij} , etc. de manera que la dinámica local descrita por cada una de las ecuaciones (2.9) ocurre en cada celda adicionada por los procesos de difusión que ocurren desde o hacia las celdas vecinas[31][25][29][20].

El coeficiente de difusión está relacionado con la rapidez de crecimiento de una mancha simétrica de partículas brownianas (modelo de Einstein) y no considera inhomogeneidades locales o posibles dependencias explícitas de \mathcal{D} con respecto a las coordenadas $\mathcal{D} = \mathcal{D}(x, y, \dots)$ o bien con respecto a la concentración de la sustancia misma o a las concentraciones locales $\mathcal{D} = \mathcal{D}(u, v, \dots)$ que, finalmente, modifican con su presencia el medio o entorno en el que se difunde cada una de las sustancias presentes.

Otra forma de interpretar o ver a los Sistemas de Reacción-Difusión (SRD) es considerando el caso de sistemas fuera de equilibrio que, al ser extendidos espacialmente de manera no uniforme, en general, se puede agregar un proceso de difusión que hará que el sistema «busque» ciertas condiciones óptimas. En el caso más simple se puede agregar un término de difusión para cada variable...[10][18][36]

$$\begin{aligned}\dot{u} &= f(u, v) + \mathcal{D}_u \nabla^2 u \\ \dot{v} &= g(u, v) + \mathcal{D}_v \nabla^2 v\end{aligned}\tag{2.10}$$

y se tiene un sistema de ecuaciones diferenciales parciales equivalente (o el mismo que) a (2.9) en donde u y v ahora son **arrays** (arreglos) cuyas entradas son los valores de estas variables en sitios distribuidos en el espacio (en una, dos o tres dimensiones), mientras que \mathcal{D}_u y \mathcal{D}_v son los coeficientes de difusión de la sustancias u e v respectivamente. De hecho, para cada una de las celdas de los arrays u y v debe cumplirse

$$\begin{aligned}\dot{x}_{ij} &= f(x_{ij}, y_{ij}) + \mathcal{D}_x \nabla^2 x_{ij} \\ \dot{y}_{ij} &= g(x_{ij}, y_{ij}) + \mathcal{D}_y \nabla^2 y_{ij}\end{aligned}\tag{2.11}$$

es decir que tenemos un sistema SRD (de Reacción-Difusión) en cada posición i, j conectado con las celdas vecinas $(i \pm 1, j)$ y $(i, j \pm 1)$ de acuerdo con (2.5) (ver figura 2.1) y, con las otras variables, a través de las funciones f y g .

Es evidente ahora que nuestras variables x e y dependen de las coordenadas y del tiempo. La solución numérica de la forma

$$U_{t+1} = U_t + dtF(U_t)\tag{2.12}$$

-pensando desde luego en la fórmula de Euler- se puede lograr redefiniendo la función vectorial F como $F(U) \equiv \begin{pmatrix} f(U) + \mathcal{D}_x \nabla^2 x \\ g(U) + \mathcal{D}_y \nabla^2 y \end{pmatrix}$.

Otra posibilidad más o menos obvia consiste en separar la parte *reactiva* de la *difusiva*, tomando por separado $F(U)$ tal y como se definió antes, en la ecuación (??) y, podríamos definir una nueva función vectorial $G(U) \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{D}_x \nabla^2 x \\ \mathcal{D}_y \nabla^2 y \end{pmatrix}$, que contiene la parte del operador espacial (*difusiva*) separada de la parte *reactiva*. De este modo la dinámica del sistema puede expresarse como

$$\dot{U} = F(U) + G(U) \quad (2.13)$$

y la solución sería, de acuerdo a la fórmula de Euler

$$U_{t+1} = U_t + dt[F(U_t) + G(U_t)]. \quad (2.14)$$

2.8.1. Sistemas de reacción difusión 2.0

Los sistemas reacción-difusión son un tipo de sistema dinámico que modela la interacción entre la reacción química y la difusión en sistemas físicos y biológicos. Estos sistemas se pueden describir matemáticamente mediante ecuaciones diferenciales parciales del tipo:

$$\partial u / \partial t = \nabla^2 u + f(u) \quad (2.15)$$

Donde u es un campo escalar que representa la concentración de una determinada sustancia, D es el coeficiente de difusión, ∇^2 es el operador laplaciano y $f(u)$ es una función no lineal que representa la cinética química de la reacción. La función $f(u)$ puede ser cualquier función no lineal, como la función de Michaelis-Menten o la función de Hill, dependiendo del tipo de reacción que se esté modelando, para el caso de reacciones químicas.

Los sistemas reacción-difusión son conocidos por presentar patrones espaciales complejos, como franjas, espirales y círculos, que surgen naturalmente de la interacción entre la reacción y la difusión. La formación de patrones espaciales se debe a la inestabilidad del sistema, lo que hace que pequeñas fluctuaciones en la concentración sean amplificadas y se propaguen a través del sistema.

La teoría de sistemas dinámicos se puede utilizar para analizar los sistemas reacción-difusión y comprender los patrones espaciales que se forman. En particular,

es posible estudiar la estabilidad de los patrones y cómo se forman a partir de condiciones iniciales aleatorias.

Una técnica común utilizada en la teoría de sistemas dinámicos para analizar los sistemas reacción-difusión es la simulación numérica. Con la ayuda de herramientas informáticas como Python, es posible resolver las ecuaciones diferenciales parciales que describen los sistemas reacción-difusión y visualizar los patrones espaciales que se forman. Además, es posible realizar estudios de sensibilidad para analizar cómo cambian los patrones en función de los parámetros del sistema.

En resumen, los sistemas reacción-difusión son una interesante aplicación de la teoría de sistemas dinámicos que nos permite modelar la interacción entre la reacción química y la difusión en sistemas físicos y biológicos, y comprender la formación de patrones espaciales complejos.

Capítulo 3

Reacciones químicas, difusión, fuentes y sumideros

3.1. Reacciones químicas

Las moléculas son entidades muy dinámicas, en constante movimiento y colisionando con otras moléculas vecinas. Este comportamiento "agresivo" es la base de las reacciones químicas, y si la energía suministrada es mayor a la de los enlaces que las mantienen unidas, pueden combinarse para generar nuevas moléculas. La cinética química vincula estas colisiones microscópicas a los cambios macroscópicos observables en las concentraciones de reactivos y productos.

Para ejemplificar esta idea, consideramos una reacción química en la que "x" moléculas de tipo A reaccionan con "y" moléculas de tipo B, nos da "z" moléculas de tipo C y "w" moléculas de tipo D, en notación química,



La razón de cambio de este proceso en un sistema cerrado y homogéneo está definido como el cambio en la concentración de una especie dada sobre un periodo de tiempo, dt.

$$R = -\frac{1}{x} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{y} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{z} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{w} \frac{d[D]}{dt} \quad (3.2)$$

Donde los corchetes denotan concentraciones, el signo menos corresponde al consumo de los sustratos, y la división por los coeficientes estequiométricos adecuados (x,y,z,w) para asegurar que R caracteriza toda la reacción y es la misma para toda la

reacción. Para relacionar la velocidad de reacción a valores absolutos de las concentraciones, observemos que R debe ser proporcional a la frecuencia de las colisiones intramoleculares necesarias para que la reacción ocurra.

Para una reacción bimolecular,



la llamada teoría de colisión muestra estrictamente que la frecuencia de colisión es proporcional al producto de las concentraciones $[A]$ y $[B]$. Consecuentemente, la velocidad de reacción se convierte en $R=k[A][B]$, donde la constante de proporcionalidad es conocida como la constante de la reacción (entre mayor valor tenga la constante k , la reacción es más rápida, entre menor valor tenga, es más lenta). Extrapolando este resultado a otro tipo de reacciones, tenemos que

$$R = k[A]^n[B]^m \quad (3.4)$$

En donde n y m son llamados órdenes de la reacción con respecto a las especies en particular. Estos órdenes dependen de la información atómica del mecanismo de la reacción, y son iguales a los coeficientes estequiométricos (x,y) para reacciones elementales, esto es, reacciones químicas de un solo paso, en el que " x " moléculas de A colisionan con " z " moléculas de B . En reacciones químicas complejas, estos valores pueden ser fraccionarios.

3.2. Forma general de ecuaciones de Reacción - Difusión

Los sistemas de reacción-difusión son modelos matemáticos que describen cómo una o más sustancias distribuidas en el espacio cambian bajo la influencia de dos procesos: reacciones químicas locales en las que las sustancias se transforman las unas en las otras, y difusión, que provoca que las sustancias se expandan en el espacio. El resultado de este proceso es una configuración estable en la que la composición química es no uniforme en un dominio espacial.

Los sistemas de reacción-difusión se aplican a la modelización de procesos tanto químicos como dinámicos de naturaleza no química. Encontramos ejemplos de tales aplicaciones en biología, geología, física y ecología. Matemáticamente, los sistemas de reacción-difusión tienen la forma de ecuaciones parabólicas en derivadas parciales y pueden representarse bajo la forma general:

$$\partial u / \partial t = \nabla^2 u + f(u) \quad (3.5)$$

donde cada componente del vector $u(x, t)$ representa la concentración de una sustancia, D es una matriz diagonal de coeficientes de difusión (unidimensional para nuestro estudio), ∇^2 denota el operador laplaciano y f da cuenta de las reacciones locales[5].

En este trabajo utilizamos el lenguaje Python versión 3.10 y su librería matplotlib para modelar y visualizar el operador Laplaciano aplicado a un campo escalar, véase figura 3.1.

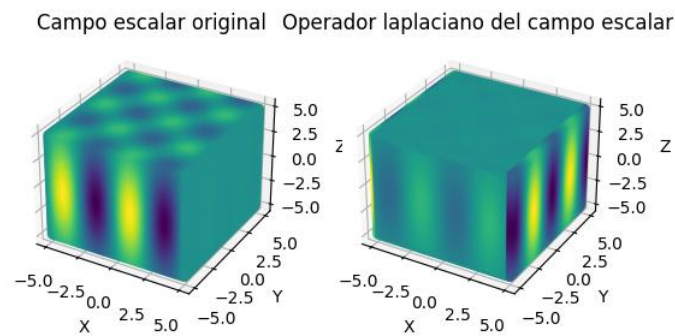


Figura 3.1: Difusión 1. Es el gráfico generado en el lenguaje Python para mostrar la aplicación del operador laplaciano a un campo escalar.

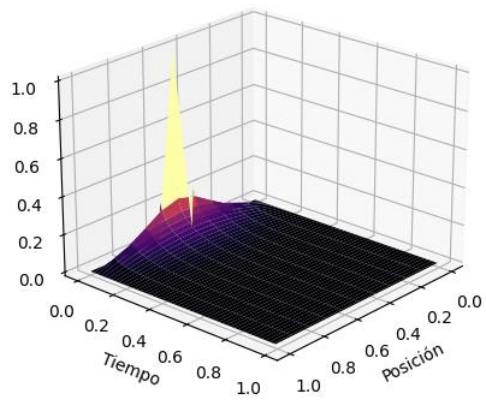


Figura 3.2: Difusión 2. En este gráfico se muestra la difusión en un campo en 3 dimensiones, se puede apreciar una fuente.

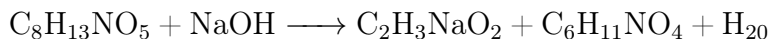
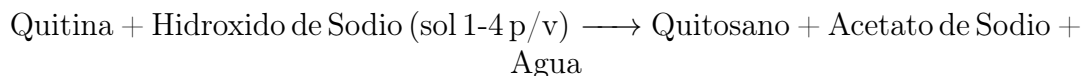
Capítulo 4

Modelo de RD en la desacetilación de Quitina

Se trata de un modelo para describir la dinámica de la transformación de quitina en quitosano, restringiendo el modelo a la reacción química de desacetilación alcalina. Se usa una base alcalina NaOH en solución para romper la cadena de la quitina, liberar los grupos acetilos en la solución y medir las concentraciones y difusión en la reacción, así como las concentraciones de acetato resultante.

Para esto, se utilizó un modelo de ecuaciones diferenciales de la literatura, al cual se le agregaron algunas consideraciones importantes para describir el fenómeno a estudiar.

En el modelo, se considera temperatura constante a 100 C, agitación constante y pH neutro. Además, en el modelo se considera una lámina (o cáscara) de tamaño 60x60, ya que es el tamaño de la malla para simular la superficie de la quitina que entra en contacto con la solución para producir quitosano.



En la literatura se modela esta reacción de manera simple y sin considerar muchas variables, ya que el mayor estudio a la reacción es de carácter experimental. El sistema de ecuaciones diferenciales que describe la cinética de esta reacción es:

$$\frac{d[\text{QC}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.1)$$

$$\frac{d[\text{NaOH}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.2)$$

$$\frac{d[\text{Quitosano}]}{dt} = k_2[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.3)$$

$$\frac{d[\text{CH}_3\text{COONa}]}{dt} = k_2[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.4)$$

Para nuestro modelo, proponemos ingresar los términos de difusión para las concentraciones disueltas, así como las velocidades de reacción dependientes de las concentraciones de los reactivos. El sistema de ecuaciones diferenciales para describir parte de la dinámica propuesta es:

$$\frac{d[\text{QC}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.5)$$

$$\frac{d[\text{NaOH}]}{dt} = -k_1[\text{QC}][\text{NaOH}] + D_2\nabla^2[\text{NaOH}] \quad (4.6)$$

$$\frac{d[\text{Quitosano}]}{dt} = k_2[\text{QC}][\text{NaOH}] \quad (4.7)$$

$$\frac{d[\text{CH}_3\text{COONa}]}{dt} = k_3[\text{Quitosano}] + D_3\nabla^2[\text{CH}_3\text{COONa}] \quad (4.8)$$

4.1. Software - Análisis numérico

4.2. Análisis de parámetros y variables

Se calcularon las variables de reacción para distintas concentraciones, pero se midió y reportó, solo la que tenía un comportamiento más interesante para nuestro caso de estudio, es decir, la que representaba el comportamiento de la reacción. Se creó una malla virtual de 60 por 60 casillas, representadas por arrays, que simulaban el espacio de la dinámica, así como una representación de la superficie de la quitina que entraría en contacto con la solución durante la reacción de tamaño 58 por 58.

Aplicamos la librería Array G, desarrollada en Python por el Dr. J. Fernando R, para visualizar los arrays de la simulación.

Capítulo 5

Resultados

5.1. Resultados numéricos

Se muestran las distintas etapas de la simulación de la reacción a etapa inicial, después de 1 hora y después de 160 minutos. Así como las concentraciones resultantes y los cambios de concentraciones a través del tiempo.

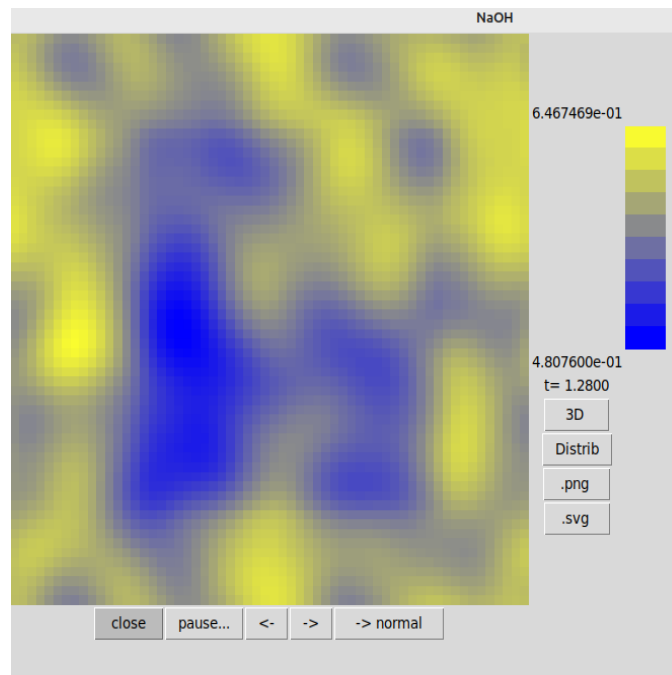


Figura 5.1: Concentracion inicial NaOH

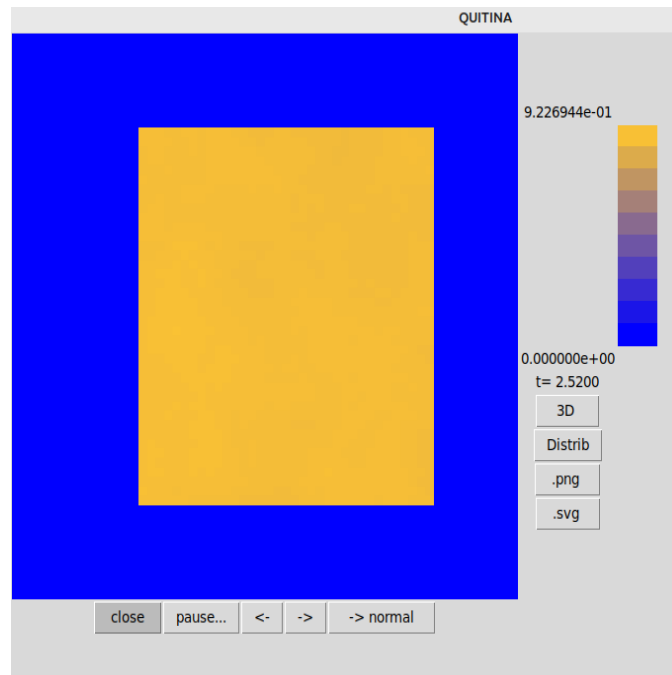


Figura 5.2: Quitina, simulada como una cáscara rectangular, en el tiempo 0.

Grado de desacetilación = (Quitosano generado)*100/Quitina inicial

En nuestro caso, generamos 710 g de quitosano con 1000 g de quitina, entonces logramos un grado de desacetilación del 71 %

5.2. Comparación con resultados experimentales

Los resultados experimentales nos ayudarían a optimizar el modelo, ya que algunos parámetros se consiguen solo experimentalmente, por ello es difícil reproducir con exactitud. En nuestro caso, variamos los parámetros hasta encontrar la dinámica decesada.

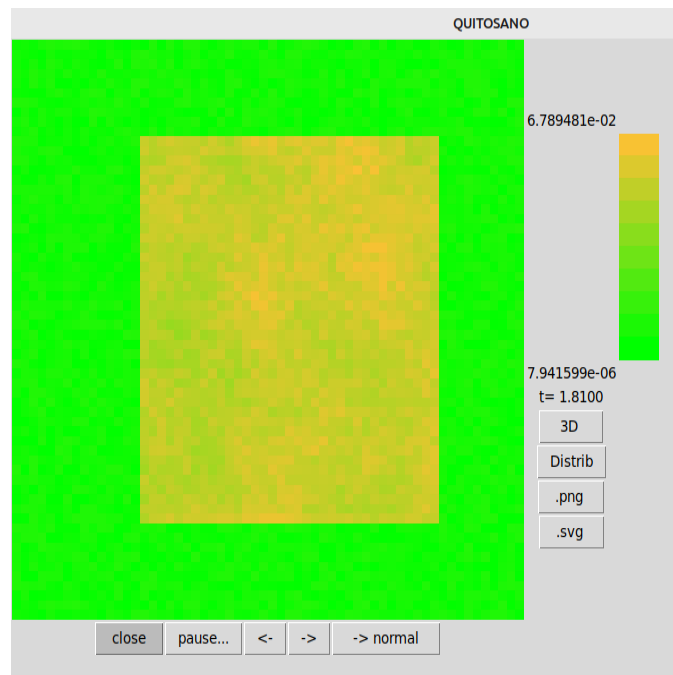


Figura 5.3: Generación de quitosano, concentración inicial.

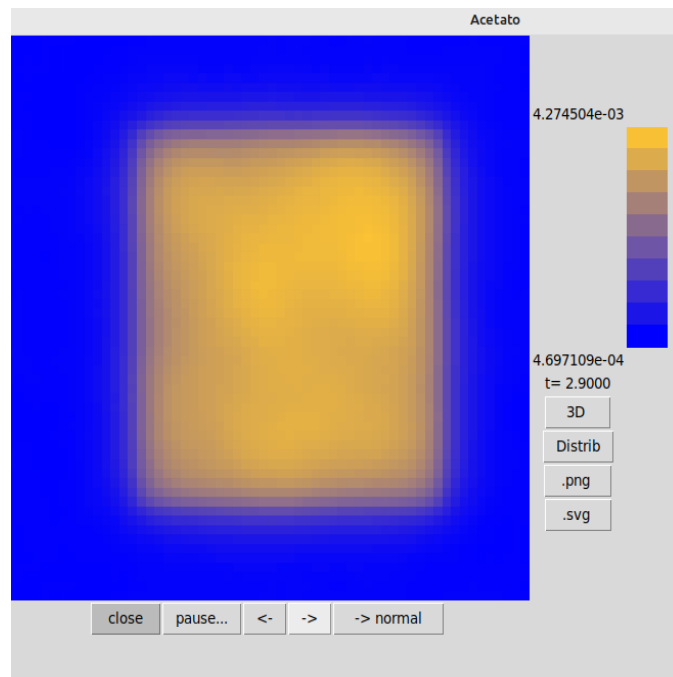


Figura 5.4: Acetato de sodio. Concentración inicial, los residuos de la reacción.

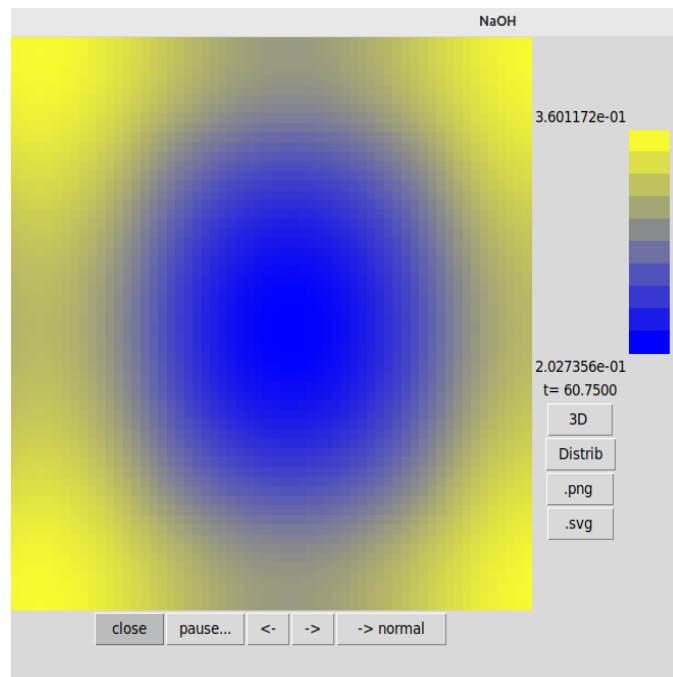


Figura 5.5: Concentración de NaOH pasados 60 minutos desde que inició la reacción.

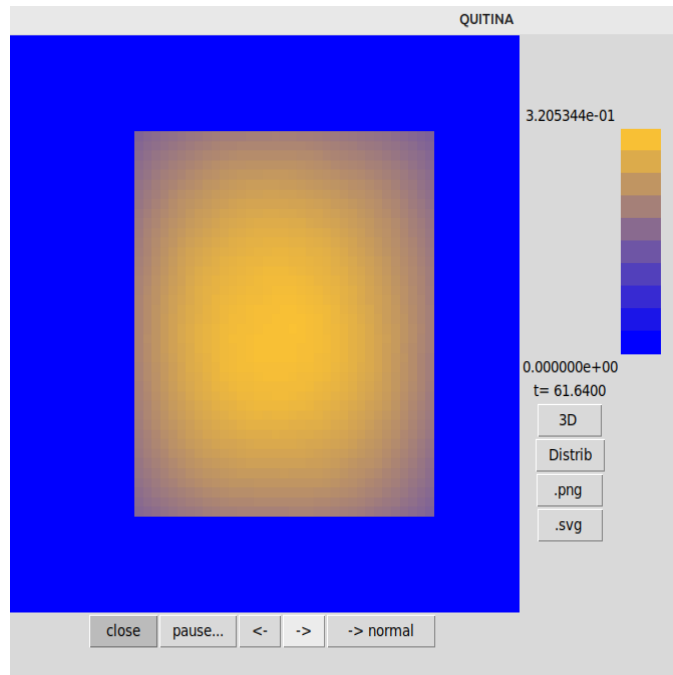


Figura 5.6: Quitina después de 60 minutos, empieza a mostrarse una degeneración del material.

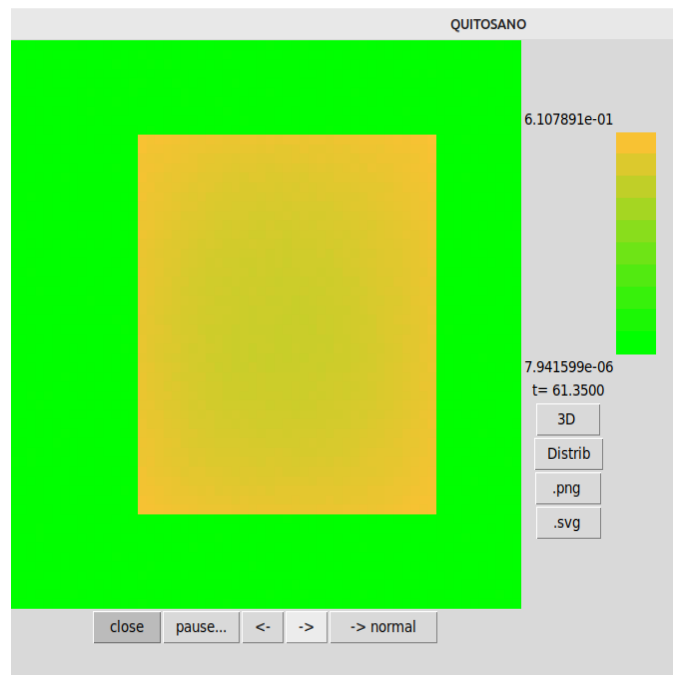


Figura 5.7: Quitosano producido después de 60 minutos.

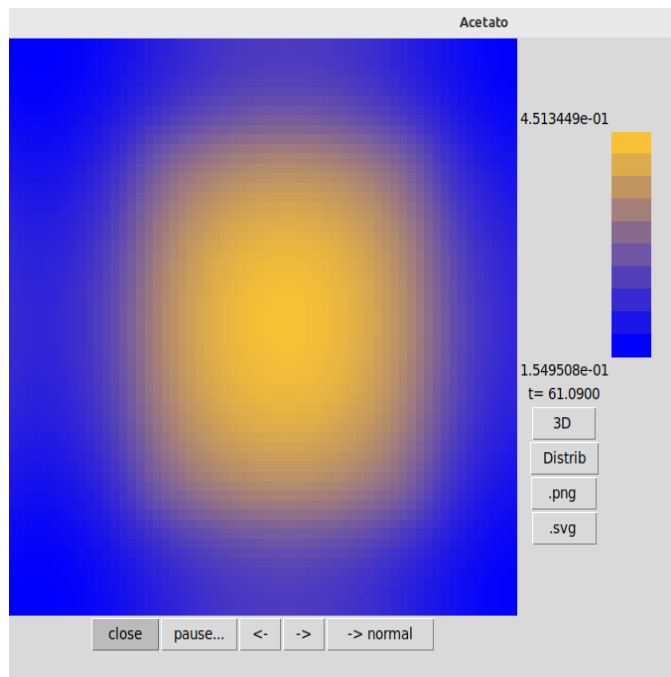


Figura 5.8: Concentración de acetato de sodio, residuo de la reacción.

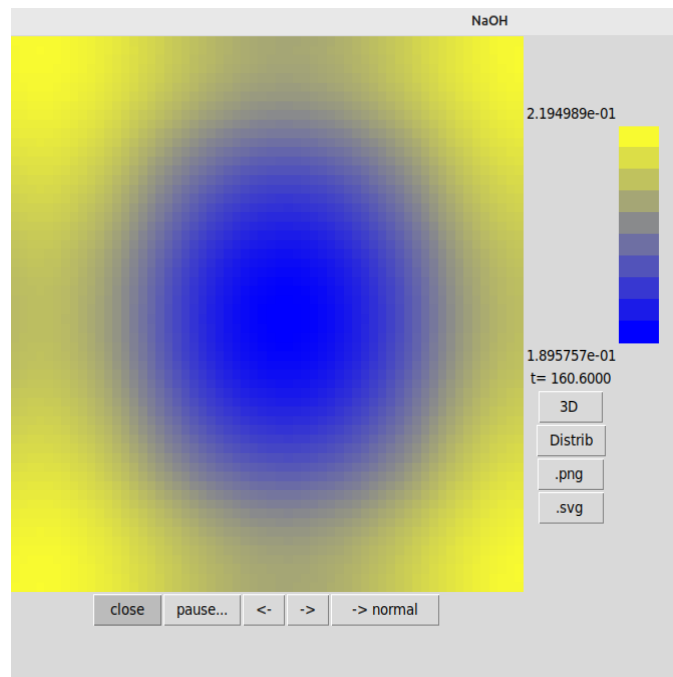


Figura 5.9: Concentración casi agotada de NaOH después de 160 minutos

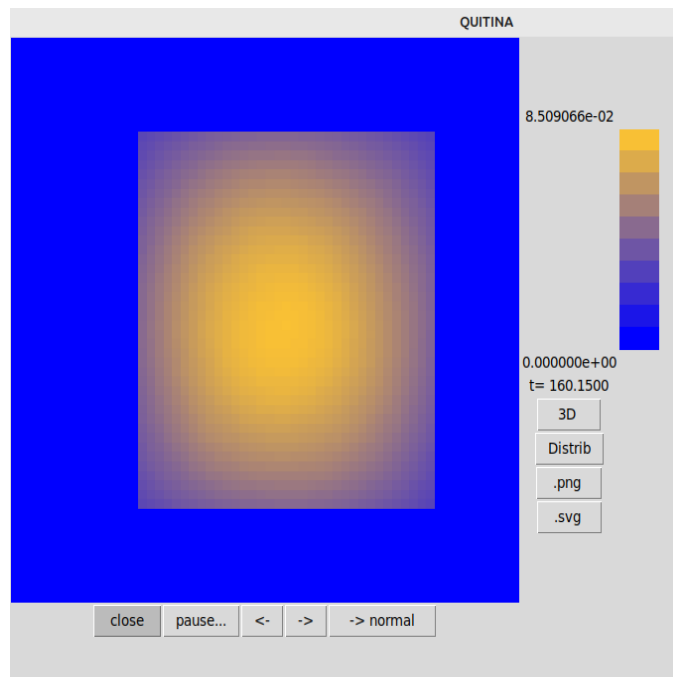


Figura 5.10: Quitina restante después de 160 minutos.

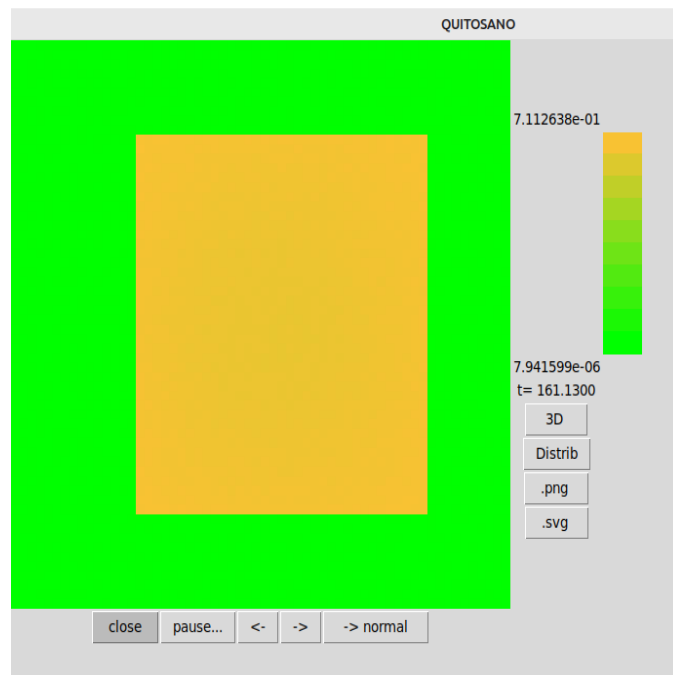


Figura 5.11: Quitosano al final de la reacción

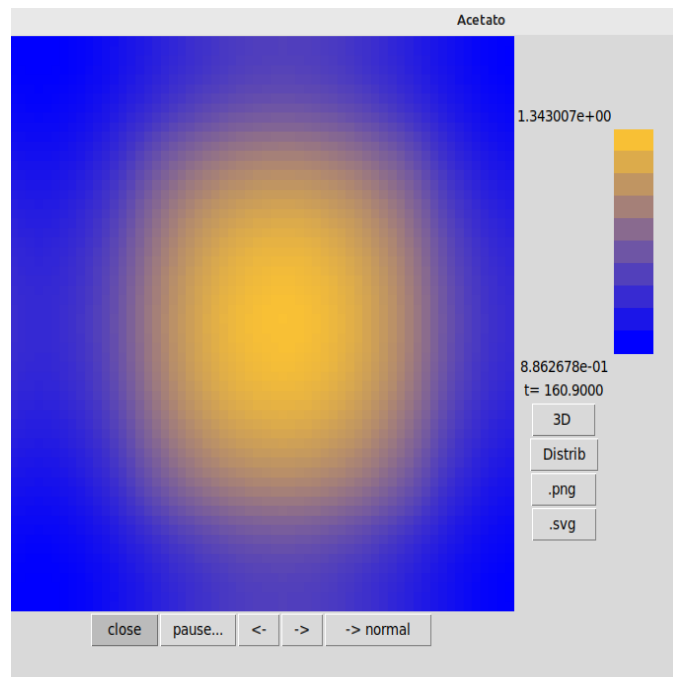
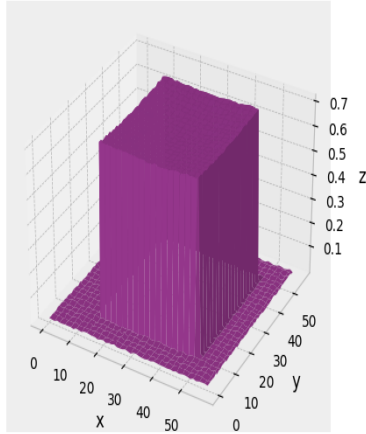
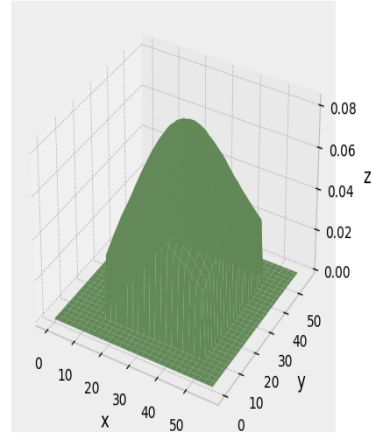


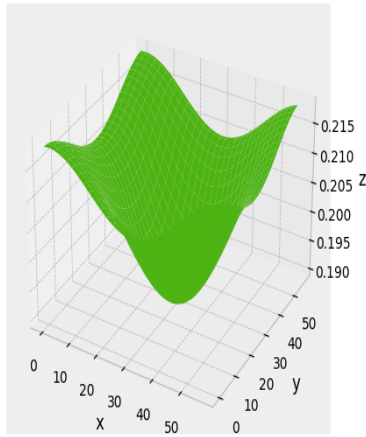
Figura 5.12: Acetato de sodio al final de la reacción.



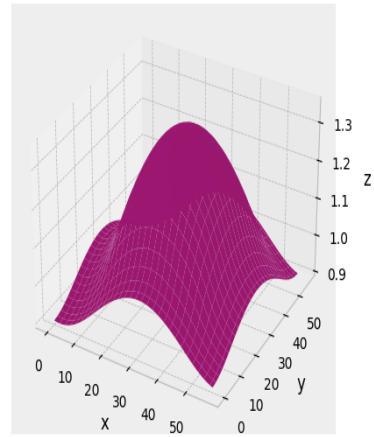
(a) Quitosano resultante.



(b) Quitina resultante.



(c) Hidroxido de Sodio resultante.



(d) Acetato resultante.

Figura 5.13: Valores finales de cada concentración (No es una representación del objeto, solo de sus valores totales de concentración).

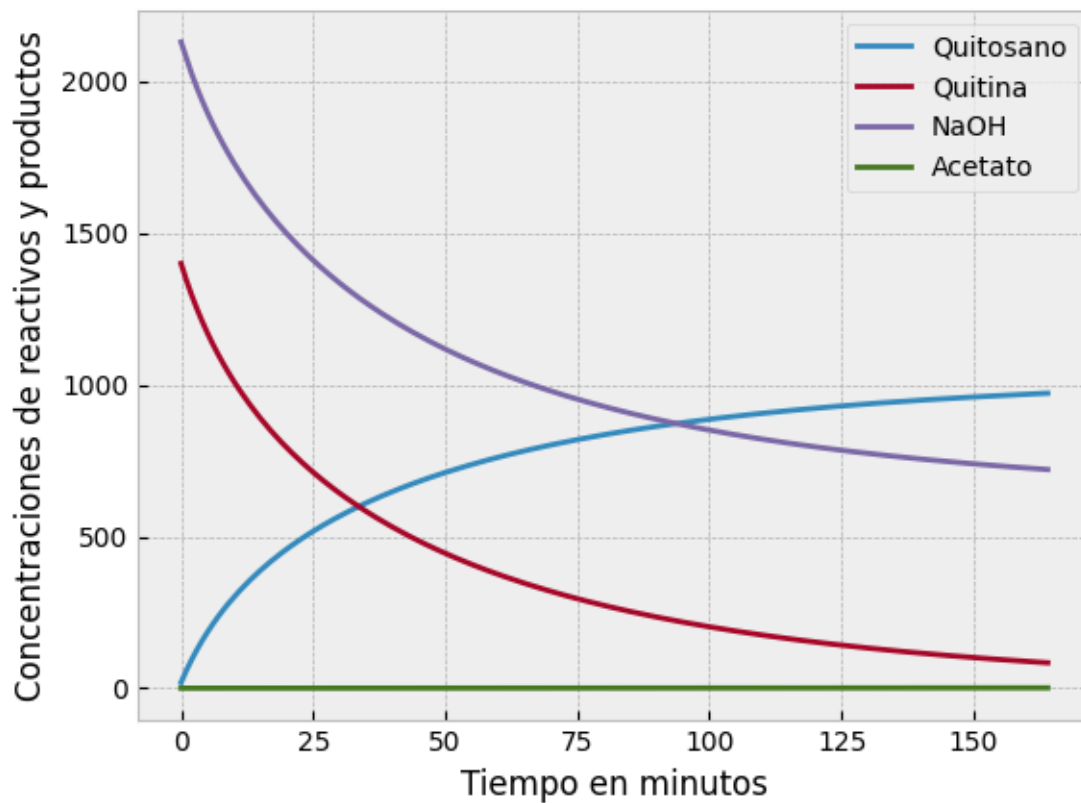


Figura 5.14: Concentraciones a través del tiempo donde podemos apreciar las variaciones de las concentraciones iniciales y la generación de quitosano(es la suma de las concentraciones distribuidas en la malla.).

Capítulo 6

Conclusión-Discusión

El modelo cumple su función, replica los resultados experimentales y la dinámica de la creación, pero requiere un mayor ajuste en sus parámetros y constantes para mayor efectividad y aumentar el tamaño de porcentaje de desacetilación. El grado de desactivación esperado era de 80-85 %, por ello se requiere una mayor resolución experimental.

Falto considerar el tamaño de la malla para poder calcular el área de superficie real que entro en contacto con la solución alcalina.

Se quiere una mejor geometría para ingresar información al modelo, ya que la superficie de contacto hace una gran diferencia para generar quitosano.

Bibliografía

- [1] *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*. Springer-Verlag, 2003.
- [2] *Differential Equations, Dynamical Systems, and an Introduction to Chaos*. Elsevier, 2013.
- [3] Entsar S. Abdou, Khaled S.A. Nagy, and Maher Z. Elsabee. Extraction and characterization of chitin and chitosan from local sources. *Bioresource Technology*, 99(5):1359–1367, March 2008.
- [4] and Jesús Andrés Arzola Flores. *Modified Oregonator: an Approach from the Complex Networks Theory*. PhD thesis.
- [5] Yhony Mamani Arce, José Yithak Aarón Chacaliaza Ricaldi, Alexander Jonathan Leandro Pelaez, Wilson Orlando Lanchipa Ramos, and Juan Adrian Ramos Guivar. Solución analítica y numérica de la ecuación de laplace utilizando python. *Revista de Investigación de Física*, 24(2):40–48, July 2021.
- [6] Jesús Arzola, J. F. Rojas-Rodríguez Santiago, A. E. Vidal-Robles, and Ana Maria Cervantes. Synchronization in chemical systems. 16:883, 05 2017.
- [7] Gerard A. Ateshian, Robert J. Nims, Steve Maas, and Jeffrey A. Weiss. Computational modeling of chemical reactions and interstitial growth and remodeling involving charged solutes and solid-bound molecules. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 13(5):1105–1120, February 2014.
- [8] V. Balakrishnan. *Mathematical Physics: Applications and Problems*. Springer International Publishing, 2020.
- [9] Bojana Bradić, David Bajec, Andrej Pohar, Uroš Novak, and Blaž Likozar. A reaction–diffusion kinetic model for the heterogeneous n-deacetylation step in

- chitin material conversion to chitosan in catalytic alkaline solutions. *Reaction Chemistry & Engineering*, 3(6):920–929, 2018.
- [10] Justin Carden, Casian Pantea, Gheorge Craciun, Raghu Machiraju, and Parag Mallick. *Mathematical methods for modeling chemical reaction networks*. August 2016.
- [11] Anabel Alas Casco and Dina Raquel Ventura Cruz. Estudio del grado de desacetilación del quitosano y su influencia en la remoción de plomo presente en aguas no potables. Master’s thesis, Universidad de El Salvador - Facultad de Química y Farmacia, 2007.
- [12] Nimeet Desai, Dhvani Rana, Sagar Salave, Raghav Gupta, Pranav Patel, Bharathi Karunakaran, Amit Sharma, Jyotsnendu Giri, Derajram Benival, and Nagavendra Kommineni. Chitosan: A potential biopolymer in drug delivery and biomedical applications. *Pharmaceutics*, 15(4):1313, April 2023.
- [13] I.R. Epstein and J.A. Pojman. *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics: Oscillations, Waves, Patterns, and Chaos*. Topics in Physical Chemistry. Oxford University Press, 1998.
- [14] I. Fernández-Cervantes, M. A. Morales, R. Agustín-Serrano, M. Cardenas-García, P. V. Pérez-Luna, B. L. Arroyo-Reyes, and A. Maldonado-García. Polylactic acid/sodium alginate/hydroxyapatite composite scaffolds with trabecular tissue morphology designed by a bone remodeling model using 3d printing. *Journal of Materials Science*, 54(13):9478–9496, March 2019.
- [15] J. A. Arzola Flores, E. García García, J. F. Rojas Rodríguez, R. Murueta Fortiz, G. Corona Morales, A. Hernández Santiago, E. Ayala Herrera, and E. Vidal Robles. Spatial and temporal dynamics of belousov-zhabotinsky reaction: A STEM approach. *Revista Mexicana de Física E*, 17(2 Jul-Dec):178–190, July 2020.
- [16] Food and agriculture organization of the united Nationsn. *The State of World Fisheries and Aquaculture 2014: Opportunities and challenges*. Food Agriculture Organization of the United Nations (FAO), Chicago, Illinois, United States of America, 2014.
- [17] B.A. Grzybowski. *Chemistry in Motion: Reaction-Diffusion Systems for Micro- and Nanotechnology*. Wiley, 2009.

- [18] Md Rifat Hasan, Ahad Amer Alsaiari, Burhan Zain Fakhurji, Mohammad Habibur Rahman Molla, Amer H. Asseri, Md Afsar Ahmed Sumon, Moon Nyeo Park, Foysal Ahammad, and Bonglee Kim. Application of mathematical modeling and computational tools in the modern drug design and development process. *Molecules*, 27(13):4169, June 2022.
- [19] Sougata Jana and Subrata Jana, editors. *Functional Chitosan*. Springer Singapore, 2019.
- [20] Zhiwei Ji, Ke Yan, Wenyang Li, Haigen Hu, and Xiaoliang Zhu. Mathematical and computational modeling in complex biological systems. *BioMed Research International*, 2017:1–16, 2017.
- [21] D. Knorr. Recovery and utilization of chitin and chitosan in food processing waste management. *Food Technology*, 45(1):114–122, 1991.
- [22] Volodymyr B. Kopei, Oleh R. Onysko, and Vitalii G. Panchuk. Component-oriented acausal modeling of the dynamical systems in python language on the example of the model of the sucker rod string. *PeerJ Computer Science*, 5:e2227, October 2019.
- [23] Majeti N.V Ravi Kumar. A review of chitin and chitosan applications. *Reactive and Functional Polymers*, 46(1):1–27, November 2000.
- [24] Stephen Lynch. *Dynamical Systems with Applications using Python*. Springer International Publishing, 2018.
- [25] Markus Meuwly. Machine learning for chemical reactions. *Chemical Reviews*, 121(16):10218–10239, June 2021.
- [26] M.A. Meyers and P.Y. Chen. *Biological Materials Science: Biological Materials, Bioinspired Materials, and Biomaterials*. Biological Materials Science: Biological Materials, Bioinspired Materials, and Biomaterials. Cambridge University Press, 2014.
- [27] Rakesh Nayak and Nishu Gupta. *Python for Engineers and Scientists*. CRC Press, October 2022.
- [28] Paulina Paul, Beata Kolesinska, and Witold Sujka. Chitosan and its derivatives - biomaterials with diverse biological activity for manifold applications. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, 19(9):737–750, May 2019.

- [29] Anders Rasmuson, B. A. B. Andersson, Louise Olsson, and Ronnie Andersson. Mathematical modeling in chemical engineering. 2014.
- [30] Marguerite Rinaudo. Chitin and chitosan: Properties and applications. *Progress in Polymer Science*, 31(7):603–632, July 2006.
- [31] L F Safiullina, I M Gubaydullin, R M Uzyanbaev, and A E Musina. Computational aspects of simplification of mathematical models of chemical reaction systems. *Journal of Physics: Conference Series*, 1368(4):042022, November 2019.
- [32] Steven H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos*. CRC Press, May 2018.
- [33] Weiqiang Tang, Hongping Yu, Teng Zhao, Leying Qing, Xiaofei Xu, and Shuangliang Zhao. A dynamic reaction density functional theory for interfacial reaction-diffusion coupling at nanoscale. *Chemical Engineering Science*, 236:116513, June 2021.
- [34] Yang Tang, Jürgen Kurths, Wei Lin, Edward Ott, and Ljupco Kocarev. Introduction to focus issue: When machine learning meets complex systems: Networks, chaos, and nonlinear dynamics. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 30(6):063151, June 2020.
- [35] J. Vigo-Aguiar and Higinio Ramos. Mathematical and computational tools in chemistry: CMMSE—2014. *Journal of Mathematical Chemistry*, 53(3):791–793, January 2015.
- [36] Ville-Valtteri Visuri. *Mathematical Modelling of Chemical Kinetics and Rate Phenomena in the AOD Process*. PhD thesis, 11 2017.
- [37] Islem Younes and Marguerite Rinaudo. Chitin and chitosan preparation from marine sources. structure, properties and applications. *Marine Drugs*, 13(3):1133–1174, March 2015.