Pub. Mat UAB
Nº 19 Maig 1980
Actas II Congreso de Ecuaciones Diferenciales y
Aplicaciones -Valldoreix, Mayo 1979.

DOS EJEMPLOS DE SISTEMAS DE REACCION-DIFUSION : (i) ESTRUCTURAS LOCALIZADAS y (ii) MODELO DE HUTCHINSON (DE RETARDO TEMPORAL) CON DIFUSION

L.L. BONILLA y M.G. VELARDE

Departamento de Física de Fluidos
U.A.M., Cantoblanco (Madrid)

(i) Estructuras disipativas localizadas en un modelo de reacción-difusión

1. INTRODUCCION

En un artículo reciente (Bonilla y Velarde, 1979a) hemos estudiado las estructuras disipativas globales que se originaban en un proceso de reacción-difusión cuya modelización es la siguiente:

$$
\begin{aligned}
&A \rightarrow Y \\
&X + Y \rightarrow 2Y \qquad\qquad (1) \\
&X \xrightarrow{\text{(ley de saturación)}} P
\end{aligned}
$$

Suponiendo que el coeficiente de difusion de A es muchísimo mayor que los demás se puede ver que, con condiciones de contorno de Dirichlet en los extremos del reactor, el estado de equilibrio bifurca hacia soluciones estacionarias y periódicas que se extienden a todo el reactor. Aquí nos ocupamos del caso, algo más realista, en que el coeficiente de difusión de A, aún siendo mucho mayor que el de X y el de Y, no es infinitamente mayor que ellos. Entonces el sistema de ecuaciones correspondiente al esquema reaccional (1) es con $\theta = D_X/D_Y ; D = D_Y$

$$0 = -A + D_A \frac{\partial^2 A}{\partial r^2} \qquad (2.1)$$

$$\frac{\partial X}{\partial t} = XY - \frac{X}{1+qX} + \theta D \frac{\partial^2 X}{\partial r^2} \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = A - XY + D \frac{\partial^2 Y}{\partial r^2} \qquad (2.3)$$

con las siguientes condiciones de contorno (Dirichlet)

$$A(0) = A(1) = \bar{A} \qquad (3.1)$$

$$X(0,t) = X(1,t) = \bar{A}/(1-q\bar{A}) \qquad (3.2)$$

$$Y(0,t) = Y(1,t) = 1 - q\bar{A} \qquad (3.3)$$

que equivalen a resolver las ecuaciones (2.2), (2.3) con las condiciones de contorno (3.2), (3.3) substituyendo A en ellas por

$$A(r) = \bar{A} \; \frac{\cosh \frac{r - 1/2}{D_A^{1/2}}}{\cosh \left(2 D_A^{1/2}\right)^{-1}} \tag{4}$$

Nos limitaremos a enunciar los resultados más salientes remitiendo para los detalles a las referencias abajo indicadas.

2. RESULTADOS

El sistema de ecuaciones (3) tiene la siguiente solución estacionaria básica (solución trivial)

$$A_0(r) = A(r) \tag{5.1}$$

$$X_0(r) = A(r)/(1 - q\,A(r)) + \mathcal{O}(D) \tag{5.2}$$

$$Y_0(r) = 1 - q\,A(r) + \mathcal{O}(D) \tag{5.3}$$

Un estudio de la estabilidad lineal del estado (5) por el método WKB lineal frente a perturbaciones estacionarias correspondiente a bifurcación a estados estacionarios inhomogéneos arroja los siguientes resultados (Bonilla y Velarde 1979b):

1. Los puntos de retroceso que hay en la línea de estabilidad neutra correspondiente a bifurcación hacia estados estacionarios vienen dados por las raices del polinomio (6)

$$z(q) = q^4 + \frac{4\theta A - 2}{A} q^3 + \frac{1 - 10\theta A}{A^2} q^2 + \frac{10\,\theta}{A^2} q + \theta\,\frac{\theta A - 4}{A^3}$$

cuyos coeficientes son funciones de $A=A(r)$ (ec.(4)).

2. Sean $\bar{A}=$ max $A(r)$, $\underline{A}=$ min $A(r)$, A_*, A_+ $(A_+ < A_*)$ dos valores entre $\bar{A}$ y $\underline{A}$; sea q_c un valor de q sobre la línea de estabilidad neutra.

3. $z(q)$ tiene (siempre que $\theta A < 4$) una raiz real negativa y una o tres raices reales positivas. Considerando θ fijo, $z(q)$ tiene tres raices reales positivas en el intervalo

$$\underline{A} < A < A_* \tag{7}$$

y una sola junto con dos complejas conjugadas en

$$A_* < A < \bar{A} \tag{8}$$

Si notamos por q_1, q_2, q_3 a las raices de $z(q)$ elegidas de modo que

$$0 < q_1(A) \leq q_2(A) < q_3(A) \tag{9}$$

cuando A está en el intervalo (7), podemos ver que en el intervalo (8) la raiz positiva es $q_3(A)$. Las funciones $q_2(A)$, $q_3(A)$ son decrecientes con A en todo su intervalo de existencia, mientras que $q_1(A)$ es decreciente en

$$\underline{A} < A < A_+ \tag{10}$$

y creciente en

$$A_+ < A < A_* \tag{11}$$

4. Para que pertenezca a la línea de estabilidad neutra debe ser

$$q_c < q_3(\underline{A})$$

Entonces hay bifurcación a estructura disipativa localizada en un sola región del reactor (Fig. 1.a) si

$$q_2(\underline{A}) < q_c < q_3(\underline{A}) \tag{12}$$

$$q_3(\bar{A}) < q_c < q_1(A_+) \tag{13}$$

La estructura disipativa está localizada en tres regiones del reactor estando dos de ellas pegadas a sus extremos (Fig. 1.b) si

$$q_1(\underline{A}) < q_c < q_2(\underline{A}) \tag{14}$$

Y por último la estructura disipativa está localizada en tres regiones interiores del reactor (sin contacto con sus extremos) (Fig. 1.c) si

$$q_1(A_*) < q_c < q_1(\underline{A}) \tag{15}$$

o bien

$$q_1(A_+) < q_c < q_1(A_*) \tag{16}$$

El orden de las figuras 1.a-1.c refleja las situaciones que se obtienen cuando q_c va disminuyendo desde $q_3(A)$ hasta $q_1(A_+)$.

Para la obtención de estos datos resolvimos numéricamente la ecuación $z(q)= 0$ con los siguientes valores del orden de magnitud apropiado al modelo:

$$\begin{aligned} &\bar{A} = 1.000 \quad , \quad \underline{A} = 0.013 \\ &D_A = 1.0 \times 10^{-2} \quad , \quad D = 5.0 \times 10^{-4} \\ &\theta = 0.1, \ldots, 0.9 \end{aligned} \tag{17}$$

REFERENCIAS

1. L.L. Bonilla y M.G. Velarde, 1979a, Singular perturbations approach to the limit cycle and global patterns in a nonlinear diffusion-reaction problem with autocatalysis and saturation law, J. Math. Phys. (a aparecer)

2. L.L. Bonilla y M.G. Velarde, 1979b, Localized non-uniform patterns in a diffusion-reaction model with autocatalysis and the Langmuir-Hinshelwood saturation law, J. Math. Phys. (enviado)

(ii) Modelo de Hutchinson (de retardo temporal) con difusión

1. INTRODUCCION

Desde no hace mucho tiempo se han venido observando estructuras espaciotemporales en diversos sistemas ecológicos tales como poblaciones de plancton en los mares (Steven y Glombitza, 1972; Steele, 1974). Un modelo susceptible de reproducir cualitativamente una tal conducta es el siguiente (ecuación de Hutchinson con difusión):

$$\frac{\partial N(x,t)}{\partial t} = r\,N(x,t)\left[1 - \frac{N(x,t-T)}{K}\right] + D\,\frac{\partial^2 N(x,t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

Los resultados conocidos para la ecuación (1) sin difusión (D=0) pueden ser resumidos como sigue:

1. La ecuación (1) tiene únicamente dos estados de equilibrio N=0 (siempre inestable) y N=K (estable o

inestable, según que $r\,T$ sea menor o mayor que $\pi/2$).

2. Para $N > 0$ y $rT > \pi/2$ hay una corona (annulus) en el plano fase $\{N(t),\ N(t-1)\}$ formada por dos trayectorias cerradas (soluciones periódicas de la ecuación sin difusión) una interior a otra, que es global y asintóticamente estable y la región de atracción incluye todas las soluciones que no oscilen rápidamente (en el sentido que los armónicos superiores oscilan rápidamente) (Kaplan y Yorke, 1975).

3. Los resultados numéricos de G.S. Jones (1962) sugieren que las dos soluciones periódicas que constituyen la corona antedicha son la misma: una trayectoria periódica que bifurca del estado de equilibrio con período 4T y amplitud infinitesimal.

2. INFLUENCIA DE LA DIFUSION: RESULTADOS

Después de adimensionalizar la ecuación (1) y trasladar N a N-K, obtenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{N}(x,t)}{\partial x^2} - \frac{\partial \mathcal{N}(x,t)}{\partial t} - r\,\mathcal{N}(x,t-1) = \alpha\,\mathcal{N}(x,t)\,\mathcal{N}(x,t-1) \qquad (2)$$

Tras un análisis de estabilidad lineal y un estudio de perturbaciones singulares (método de las dos escalas, véase por ejemplo Bonilla y Velarde, 1979a) llegamos a los siguientes resultados referentes a la ecuación (2) (Bonilla y Velarde, 1979b).

I.1 Cuando el medio espacial es infinito, la solución trivial de (2) es estable o inestable (de modo oscilatorio) según sea $0 < r < r_0$, o bien $r_0 \leqslant r$ donde

$$r_0 = a_1 (a_1^2 + c^4)^{1/2} / c^2 \qquad \cot a_1 = -a_1/c^2 \tag{3}$$
$$\pi/2 < a_1 < \pi \qquad c > 0$$

I.2 Cuando la nolinealidad α es "finita", tenemos una bifurcación desde la solución trivial a la siguiente solución asintótica

$$\mathcal{N}(x,t) \approx \pm \left[\frac{r-r_0}{r_2}\right]^{1/2} \left[\frac{-wc}{\mu}(w^2+c^2-1)(w^2+c^2)^{1/2} K^2 r_2\right]^{1/2} \cos\left[1+\gamma(r-r_0)\right]\left[a_1 t + a_1 x/c\right] \tag{4}$$

dicha solución (4) es estable o inestable según sea $\mu < 0$ o bien $\mu > 0$. El coeficiente μ

$$\mu = (2w^2+c^2)\,\mathrm{Re}\,\Lambda + wc(w^2+c^2-1)\,\mathrm{Im}\,\Lambda$$

$$\Lambda = -2w^2c + i\,2w^2\left[(w^2+c^2)^{1/2} - w\right] \; +$$

$$+\frac{w^3}{(w^2+c^2)^{1/2}}\Big[5w^4c+20w^2c^3-4wc^4+c^5-(10w^3c+2c^4)(w^2+c^2)^{1/2} \tag{5}$$

$$+\,i\left(-3w^5-4w^3c^2+2w^2c^3+3wc^4-2c^5\right)+\left(3w^4-10w^2c^2+2wc^3-3c^4\right)(w^2+c^2)^{1/2}\Big]$$

$$\left[\left(4w^2+(w^2-c^2)(w^2+c^2)^{1/2}\omega+4w^2c^2\left(1+\omega(w^2+c^2)^{1/2}\right)^2\right]^{-1}$$

es negativo para $c \to 0$ y para $c \to \infty$; $wc = a_1$.

I.3 Cuando la nolinealidad α es "pequeña" la solución trivial bifurca a

$$\mathcal{N}^{\rho}(x,t) \approx \left[wc\,(w^2+c^2-1)(w^2+c^2)^{1/2}\,r_2/\mu\right]^{1/2}$$

$$\cos\left\{\left[1+\gamma(r-r_0)\right](a_1 t + a_1 x/c)\right\} \tag{6}$$

de modo supercrítico o subcrítico según sea $\mu<0$ o $\mu>0$.

II.1 Cuando el medio espacial tiene una longitud finita, L, e imponemos condiciones de Dirichlet en el contorno, la solución trivial de (2) es estable o inestable (de modo oscilatorio) según el punto $\frac{-\pi^2}{L^2}, -r$ esté por encima o por debajo de la línea (el parámetro β es la frecuencia de la solución periódica en $r=r_o$):

$$a=\beta\cot\beta \qquad \beta/\operatorname{sen}\beta=-b \qquad \frac{\pi}{2}<\beta<\pi \tag{7}$$

del plano a, b.

II.2 Cuando α es finita la solución trivial bifurca

a

$$\mathcal{N}(x,t) \approx \left[2\,\frac{r-r_0}{r_2}(\cos\beta - 1)\frac{r_2}{r_0^2}\,\frac{K^2}{Re\lambda}\right]^{1/2}\cos\beta t\left[1+(r-r_0)\theta\right]\operatorname{sen}\frac{\pi x}{L} \quad (8)$$

donde según sea negativo o positivo el parámetro $Re\,\lambda$ en este caso distinto de (5) - (8) es estable o inestable

II.3 Cuando $\alpha \ll 1$, la solución trivial bifurca à una onda estacionaria de amplitud finita

$$\mathcal{N}(x,t) \approx 2\left[\frac{2(\cos\beta - 1)r_2}{r_0^2\,Re\lambda}\right]^{1/2}\cos\beta t\left[1+(r-r_0)\theta\right]\operatorname{sen}\frac{\pi x}{L} \quad (9)$$

que es estable o inestable según sea $Re\lambda < 0$ o $Re\lambda > 0$.

III.1 Cuando el medio espacial tiene longitud finita e imponemos condiciones de flujo cero (Neumann) en el contorno, la solución trivial es estable o inestable según sea r menor o mayor que $\pi/2$.

III.2 Cuando α es finita la solución trivial bifurca a la solución periódica homogénea

$$\mathcal{N}(t) \approx \pm\left[12K^2\,\frac{r-r_0}{\pi}\right]^{1/2}\cos\left\{1+(r-r_0)\left[\frac{8}{\pi^2(\pi+2)} + \frac{\pi(\pi-2)}{12(\pi+2)K^2 r_2}\right]\right\}\frac{\pi t}{2}$$

que es asintóticamente estable. (10)

III.3 Cuando $\alpha \ll 1$, la solución trivial bifurca a la siguiente solución periódica homogénea asintóticamente estable

$$\mathcal{N}(t) \simeq \left[\frac{12 r_2}{\pi}\right]^{1/2} \cos\left\{1+(r-r_0)\left[\frac{8}{\pi^2(\pi+2)}+\frac{\pi(\pi-2)}{12(\pi+2)r_2}\right]\right\}\frac{\pi t}{2}$$

(11)

Los parámetros que rigen el comportamiento de este modelo juegan los siguientes papeles en relación con la solución trivial de (2):

El retardo $\underset{\sim}{T}$ y el ritmo de crecimiento $\underset{\sim}{r}$ son desestabilizantes, mientras la difusión es estabilizante tanto si el medio espacial es infinito como si está acotado. En el primer caso la velocidad de la onda viajera, $\underset{\sim}{c}$, es desestabilizante de la solución trivial y en el caso de medio finito y condiciones de Dirichlet, la longitud de la caja, L, actúa desestabilizando dicha solución trivial.

3. APENDICE: METODO DE LAS DOS ESCALAS

Ilustraremos la aplicación del método al caso de condiciones de contorno de flujo cero y nolinealidad finita.

Sabemos que cerca del punto de bifurcación hay una gran separación entre dos escalas de tiempo (este es un hecho general en problemas de bifurcación, comprobado incluso experimentalmente): el tiempo propio de la solución asintótica y el tiempo que tarda en decaer a la misma una cierta condición inicial (Fig. 2). En el caso que nos ocupa, la cercanía al punto de bifurcación $r=r_o$ la mide el parámetro (a determinar)

$$r(\epsilon) = r_o + \epsilon r_1 + \epsilon^2 r_2 + O(\epsilon^3)$$

y las dos escalas temporales son $\tilde{t}=t$ (escala de evolución rápida) y $\tau = \left[r(\epsilon) - r_o \right] t$ (escala de evolución lenta). Un desarrollo perturbativo como el siguiente

$$N(x,t,\tau;\epsilon) = \epsilon N_1(x,t,\tau) + \epsilon^2 N_2(x,t,\tau) + \epsilon^3 N_3(x,t,\tau) + O(\epsilon^4)$$

conduce a una jerarquía de ecuaciones diferenciales tales que, en el orden más bajo en ϵ, la solución será análoga a la solución del problema linealizado pero con las dos constantes de integración dependientes de τ y de la condición inicial. Así el limite $\tau \to \infty$ nos determina la solución asintótica y su estabilidad.

Hemos de señalar que en el caso que nos ocupa, la condición inicial no es puntual, sino del tipo

$$N(x,t) = \phi(x) \quad , -1 \leq t < 0$$

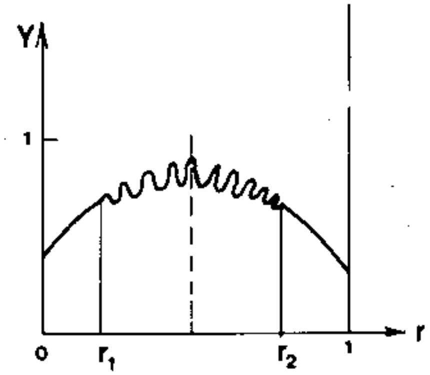
pero este hecho no aparece en la teoría puesto que, siguiendo un método análogo al de Bogoliubov-Mitropols ky (Murray, 1976) las funciones $a(\tau)$ se desarrollan así

$$a\left[t-(r-r_0)\right] \approx a(\tau)-(r-r_0)a'(\tau) = a(\tau) + \theta(\epsilon)$$

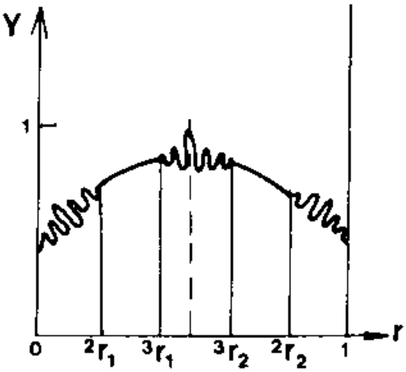
lo que equivale a suponer un tiempo τ suficientemente largo y que todas las condiciones iniciales decaen tras él al estado asintótico que corresponda (solución ondulatoria o solución trivial).

AGRADECIMIENTOS

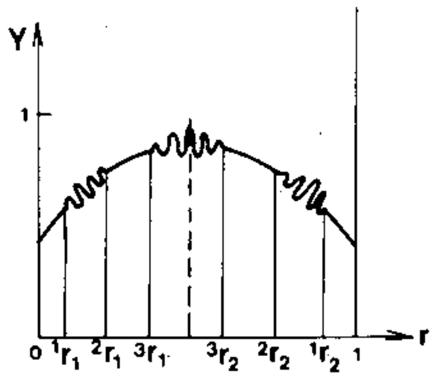
Este trabajo se ha beneficiado de la ayuda económica del Instituto de Estudios Nucleares (Madrid).



(a)



(b)



(c)

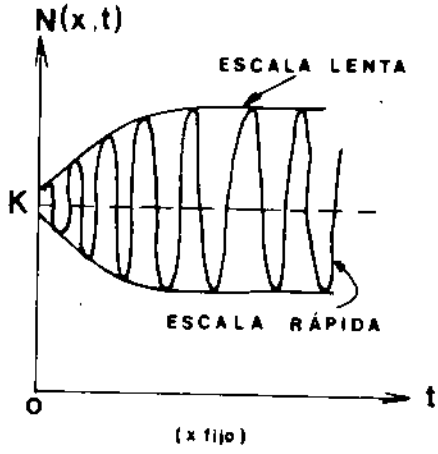


Fig 1

Fig 2

REFERENCIAS

1. L.L. Bonilla y M.G. Velarde, 1979a. Singular perturbations approach to the limit cycle and global patterns in a nonlinear diffusion-reaction problem with autocatalysis and saturation law. J. Math. Phys. (a aparecer).

2. L.L. Bonilla y M.G. Velarde 1979b. J. Math. Biol. (en preparación).

3. G.S. Jones, 1962. On the Nonlinear Differential-Difference Equation $f'(x) = -\alpha f(x-1)\{1+f(x)\}$. J. Math. Anal.Appl. 4, 440-469.

4. J.L. Kaplan y J.A. Yorke, 1975. On the stability of a periodic solution of a differential delay equation SIAM. J. Math. Anal. 6, 2, 269-282.

5. J.D. Murray. Spatial structures in Predator-Prey Communitites- a Nonlinear Time-Delay Diffusional Model. Math. Biosci. 30, 73-85.

6. J.H. Steele, 1974. Spatial heterogeneity and population stability. Nature, 248, 83.

7. D.M. Steven y R. Glombitza, 1972. Oscillatory variation of a Phytoplankton Population in a Tropical Ocean. Nature, 237, 105-107.