



PONTIFICIA **UNIVERSIDAD CATÓLICA** DEL PERÚ

Esta obra ha sido publicada bajo la licencia Creative Commons  
Reconocimiento-No comercial-Compartir bajo la misma licencia 2.5 Perú.

Para ver una copia de dicha licencia, visite  
<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.5/pe/>



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ

FACULTAD DE CIENCIAS E INGENIERÍA



## Caos en Frentes Químicos con Flujo de Poiseuille

Tesis presentada para optar el Título de Licenciado en Física que  
presenta el bachiller:

Carlos Alberto Argüelles Delgado

ASESOR: Desiderio Vasquez

Lima, Abril 2011

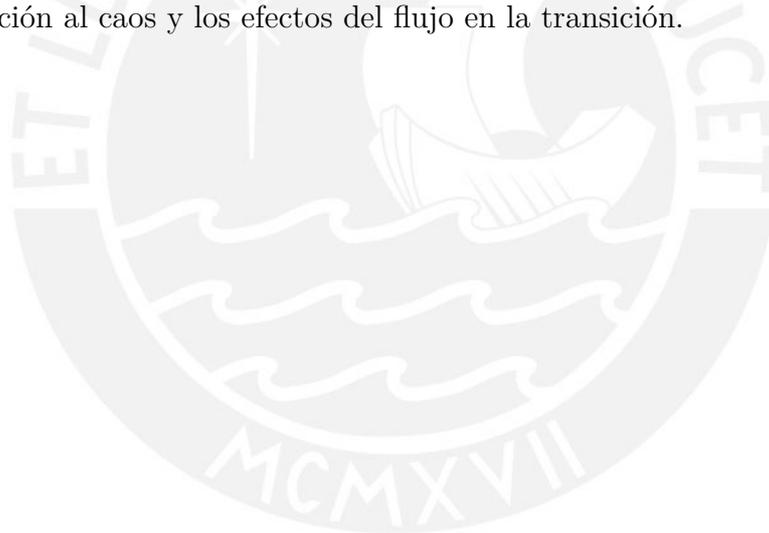
# Caos en Frentes Químicos con Flujo de Poiseuille

Carlos Alberto Argüelles Delgado

Propuesto para el Título de Licenciado en Física  
2011

## Resumen

Se estudian los frentes químicos debido a reacción-difusión descritos por la ecuación Kuramoto-Sivashinsky en un fluido de Poiseuille en un tubo. Se estudian las diferentes soluciones del frente variando el ancho del tubo y la velocidad media del flujo. Además se analizan las transiciones del frente plano a uno impar, y luego entre frentes pares e impares variando la velocidad media del flujo. Finalmente se analiza la transición al caos y los efectos del flujo en la transición.



## *Dedicado a*

Mis padres, Carlos y Sarisa, mis hermanos, Alonso y Sebastian, mis compañeros de universidad y todos los amigos que me apoyan día a día.



# Agradecimientos

Agradezco a mis profesores de física quienes, a lo largo de los años, me han proporcionado las herramientas para poder realizar este trabajo. En especial quisiera agradecer al profesor Francisco de Zela por sus comentarios y sus instructivas conversaciones. Adicionalmente, quisiera agradecer a Alberto Gago por las productivas discusiones.

No puedo dejar de agradecer a mi asesor, el profesor Desiderio Vasquez, quien me ha supervisado, tanto presencialmente como a la distancia, con comentarios y sugerencias precisas. Muchas gracias por dar rumbo y sentido a este trabajo.

De igual manera no puedo obviar el apoyo de mi familia, en especial, y mis padres, Carlos y Sarisa, a lo largo de este trabajo. También debo resaltar el apoyo de mis hermanos Alonso y Sebastián. Es claro que sin su apoyo y constante aliento este trabajo no habría podido llevarse a cabo.

Finalmente, agradezco a mis amigos y compañeros de la universidad, quienes siempre estaban dispuestos a discutir y criticar este trabajo con buen humor y camaradería. Aquí debo incluir a todos los amigos que han caminado a mi lado estos años. Gracias a todos.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>II</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>IV</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Introducción . . . . .	1
1.2. Trabajos previos . . . . .	3
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>5</b>
2.1. Preliminares . . . . .	5
2.1.1. Caracterización del caos mediante diagramas de bifurcación . . . . .	5
2.1.2. Flujo de Poiseuille . . . . .	6
2.2. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky . . . . .	6
2.3. Solución numérica de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky . . . . .	7
2.4. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky con el flujo de Poiseuille . . . . .	10
2.5. Análisis de estabilidad lineal de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky . . . . .	10
<b>3. Resultados y Simulaciones Numéricas</b>	<b>13</b>
3.1. Soluciones de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky . . . . .	13
3.2. Pérdida de estabilidad del frente plano . . . . .	13
3.2.1. Máximo de $\phi$ . . . . .	16
3.2.2. Estabilidad de la solución par . . . . .	19
3.3. Transiciones entre frente asimétrico y simétrico . . . . .	22
3.3.1. Transiciones en 3.141592... y 6.2 . . . . .	23
3.4. Transición entre una solución estacionaria a una periódica y al caos . . . . .	23
3.4.1. Frentes caóticos sin el flujo de Poiseuille . . . . .	26
3.4.2. Frentes caóticos con el flujo de Poiseuille . . . . .	26
<b>4. Conclusiones</b>	<b>30</b>
<b>A. Programa en FORTRAN</b>	<b>33</b>



# Índice de figuras

2.1. Análisis de estabilidad lineal del frente plano . . . . .	12
3.1. Frentes estacionarios descritos por la ecuación Kuramoto-Sivashinsky	14
3.2. Frentes para diferentes valores de $L$ con $\nu = 0$ . . . . .	15
3.3. Máximo relativo de $\phi$ versus $L$ para valores positivos de $\nu$ . . . . .	17
3.4. Máximo relativo de $\phi$ versus $L$ para valores negativos de $\nu$ . . . . .	18
3.5. $MaxRe\lambda$ para la solución par versus $L$ para valores positivos de $\nu$ . .	20
3.6. $MaxRe\lambda$ para la solución par versus $L$ para valores negativos de $\nu$ . .	21
3.7. Parámetro de asimetría versus $L$ para valores positivos de $\nu$ . . . . .	24
3.8. Parámetro de asimetría versus $L$ para valores negativos de $\nu$ . . . . .	25
3.9. Diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de $c_5$ respecto a $L$ .	27
3.10. Diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de $\phi$ respecto a $L$ .	27
3.11. Diagramas de bifurcación respecto a $L$ para distintos valores de $\nu$ . .	28
3.12. Diagramas de bifurcación respecto a $L$ para distintos valores de $\nu$ . .	29
3.13. Diagrama de bifurcación respecto a $\nu$ para $L = 18,2$ . . . . .	29

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Introducción

En las últimas décadas la dinámica no lineal se ha desarrollado con mucho entusiasmo en la física y en la química como un método para explicar la complejidad que se observa en la naturaleza. En particular los sistemas químicos han permitido un gran avance debido a que estos son fácilmente realizables experimentalmente, lo cual muchas veces no es posible en los sistemas biológicos o sociales. Se espera que los principios de la dinámica no lineal en los sistemas químicos den información sobre la dinámica de los sistemas vivos (biológicos) [4].

Los frentes de propagación están en toda la naturaleza. Podemos pensar, por ejemplo, en la expansión de una colonia de bacterias, la corrosión de un metal, enfermedades infecciosas o un "gen ventajoso" que se propagan en una población. Las ondas químicas son cambios en la concentración de un determinado químico que se propaga mediante reacciones autocatalíticas (reacciones en las cuales los reactivos son a la vez catalizadores de la reacción) con mecanismos de transporte de masa (e.g. difusión); es decir, son frentes de propagación de un sistema reacción-difusión [18, 13]. En 1906 Luther descubrió y analizó las primeras ondas químicas usando reacciones de permanganato-oxalato. Luther intentó usar estas ondas para explicar la propagación de impulsos nerviosos, calculando acertadamente la velocidad de propagación de la onda y confirmando que velocidades cercanas a las de sistemas nerviosos eran posibles [13]. No obstante, en la conferencia donde presentó estos resultados se encontraba el célebre físico-químico Nernst, a quien sorprendió los resultados de Luther, y asimismo le pareció que estas ondas no podían tener este tipo de comportamiento. Aproximadamente treinta años más tarde, el célebre estadístico y biólogo R.A. Fisher publicó un artículo titulado "The wave of advance of advantageous genes"[6, 4], en el cual estudiaba la propagación de un "gen ventajoso" por

medio de difusión en una población distribuida en una región unidimensional. Haciendo una analogía a la difusión física, llegó a la expresión ahora conocida como ecuación Fisher-Kolmogorov (deducida de manera independiente por Kolmogorov, Petrosky y Piscounoff) de la cual se deduce que la velocidad de propagación de la onda es tal como Luther había predicho [18]. No obstante, la ecuación Fisher-Kolmogorov equivalente para sistemas químicos solamente incluía tasas de reacción cuadráticas, y no se conocen soluciones analíticas. Existen sistemas químicos cuya adecuada descripción requieren velocidades de reacción cúbicas o de órdenes superiores [2]. Afortunadamente las ecuaciones de reacción-difusión para el caso en el cual las tasas de reacción son puramente cúbicas poseen una solución analítica. Así surge el interés por estudiar los sistemas de ecuaciones de reacción-difusión de órdenes mixtos cúbicos y cuadráticos [4, 10].

Los frentes de propagación anteriormente mencionados producen, bajo ciertas condiciones, patrones espacio-temporales. Estos patrones en reacciones químicas se remontan al descubrimiento de B.P Belousov a principio de 1950, quien notó que el color de una mezcla de bromato e iones de cerio con ácido cítrico en ácido sulfúrico oscilaba entre transparente y un color amarillo pálido [4]. Belousov caracterizó este fenómeno y lo presentó a las revistas de la época. Desafortunadamente, fue rechazado en base a que dicho fenómeno violaría la segunda ley de la termodinámica. El trabajo de Belousov fue obviado por la comunidad científica de la época. Posteriormente, un estudiante de postgrado A. Zhabotinsky modificó la reacción de Belousov logrando que la reacción oscilara entre tonos rojo y azules. Esta reacción ahora es conocida como la reacción Belousov-Zhabotinsky [4]. Luego, en las décadas de los 60s y 70s, conforme estas reacciones se hicieron más conocidas, se desarrollaron modelos teóricos de osciladores químicos tales como el Brusselador (un oscilador desarrollado en la Universidad Libre de Bruselas) y el Oregonador [4]. Por otro lado, en 1952 A. M. Turing publicó su famoso artículo "The basis of Chemical Morphogenesis"[21] en el cual propuso un mecanismo mediante el cual se pueden formar patrones espaciales usando como base sistemas químicos. El trabajo de Turing se basa en sistemas de reacción-difusión y tiene como objetivo explicar las formas características que se ven en la naturaleza. En particular, en su artículo trataba de explicar los patrones en los tentáculos de las hidras y hojas. Respecto a esto Murray [5] ha demostrado que estos principios pueden explicar la forma de las manchas en los leopardos, las rayas en las cebras, y en general la dependencia entre los patrones que pueden existir en un determinado pelaje con el tamaño y forma del animal.

El caos es una de las tres dinámicas fundamentales de la naturaleza : estacionaria, oscilatoria y caótica. El caos en los sistemas dinámicos se remonta a los trabajos

pioneros de Poincaré, Lorenz y Feigenbaum. Lorenz trabajaba haciendo predicciones meteorológicas asistido por computadoras. Debido a que en las computadoras de esa época tenía que reiniciar los cálculos cada cierto tiempo, Lorenz insertaba los valores finales de la última ejecución del programa como principio de la siguiente. Después de realizar esta acción repetidas veces se percató que la computadora daba valores diferentes cuando sucedía este proceso. Así se percató que el sistema que él había programado era sensible a perturbaciones. Actualmente se reconoce que sistemas caóticos presentan un comportamiento aperiódico y son muy sensibles a las condiciones iniciales. En particular el término *Caos Químico* se remonta al hallazgo de una secuencia de dobles de período en la reacción Belousov-Zhabotinsky por Roux y Swinney [4, 2].

En el presente trabajo nos aventuramos a estudiar un frente químico debido a un sistema de reacción-difusión de dos variables químicas, cuyo frente de propagación, en un sistema de referencia adecuado, se puede aproximar por la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky, y someteremos dicha reacción a un flujo estable. Caracterizaremos el comportamiento dinámico de la reacción en función del ancho del tubo en la cual esta se desarrolla, y la velocidad del fluido que nosotros imponemos. Asimismo veremos que este sistema presenta soluciones estacionarias, oscilatorias y caóticas. También se estudiarán las transiciones de simetría-asimetría que se han encontrado en el sistema.

## 1.2. Trabajos previos

Las ondas químicas, formadas por frentes de reacción que separan regiones de distinta concentración, aparecen en reacciones como la de Belousov-Zhabotinskii, la de Iodato y ácido arsenioso[16], y la de clorito-tetrionato (CT)[7]. Inicialmente se realizaron experimentos en frentes estables donde se observaron frentes de onda uniformes, con velocidad constante, sin ningún flujo presente. Cuando estas reacciones se propagan en un tubo vertical se observan inestabilidades debido al movimiento de fluido, que surgen al modificar el ancho del tubo. Sin embargo, Horvath et al. [8] encontraron inestabilidades que eran causadas no por movimiento de fluidos, sino por diferencia de los coeficientes de difusión de los distintos reactivos. Estas inestabilidades llevan a la formación de frentes caóticos. El propósito de esta investigación es analizar el movimiento de frentes caóticos bajo la influencia del movimiento de fluidos, en particular el flujo de Poiseuille. Trabajos previos con frentes químicos bajo el flujo de Poiseuille solo incluyeron frentes estables. El flujo de Poiseuille modificaba la forma y la velocidad de propagación del frente [3].

Horváth et al. [8] analizaron las inestabilidades que se pueden formar en frentes de reacción-difusión propagándose en un gel contenido en un reactor rectangular. Mostraron que en configuraciones de dos dimensiones con coeficientes de difusión diferentes (entre los reactivos) el frente puede ser inestable ante perturbaciones. La forma del frente no plano depende del ancho del tubo [8]. Así mismo demostraron que la perturbación del frente satisface una ecuación del tipo Kuramoto-Sivashinsky [19, 9]. El frente presenta bifurcaciones de Hopf, con ruptura de simetría y duplicando el periodo, las cuales eventualmente llevan al caos [8].

Se han realizado experimentos para estudiar inestabilidades en frentes con fluidos. Por ejemplo, Carey et al. [1] reportaron resultados experimentales en los cuales se tiene una reacción en un gel entre dos placas cuyo frente se propaga verticalmente hacia arriba y en el cual se generan inestabilidades cuya intensidad depende de la separación entre placas. Masere et al. [15] confirmaron que el frente se vuelve asimétrico debido a la formación de rollos de convección cuando asciende conforme predijo Vasquez [23], y que cuando desciende no se presentan inestabilidades dado que no hay convección. Además Wilder et al. [24] encontraron que las predicciones numéricas son consistentes con los experimentos en tubos.

Edwards [3] introdujo el flujo de Poiseuille en un frente químico estable propagándose en un tubo vertical y, mediante simulaciones numéricas, encontró el efecto sobre el frente cuando el flujo se mueve en dirección de la reacción, y en sentido contrario. Salin et al. [12] realizaron experimentos que confirmaron estos resultados teóricos. Vásquez encontró el cambio de velocidad en el frente debido a la gravedad para frentes estables propagándose en tubos verticales en un flujo de Poiseuille. Asimismo halló que, para pequeñas diferencias de densidad, el frente es asimétrico y predijo que el frente presentará una transición hacia un frente asimétrico conforme la distancia entre las paredes disminuye [22].

# Capítulo 2

## Marco Teórico

### 2.1. Preliminares

#### 2.1.1. Caracterización del caos mediante diagramas de bifurcación

Un sistema dinámico tiene dos elementos principales: una regla de evolución y un espacio de estados. La regla de evolución puede ser discreta, en cuyo caso se denomina mapeo, o continua en cuyo caso se denomina flujo. En ambos casos la regla de evolución puede depender de uno o más parámetros del sistema. En el caso discreto es, en general, de la forma

$$a_{n+1} = F(a_n; p_1, \dots, p_m)$$

donde  $a_n$  en general es un vector  $m$ -dimensional que indica el estado del sistema y  $F : \mathfrak{R}^m \rightarrow \mathfrak{R}^m$  es una función que depende de los parámetros (fijos)  $p_1, \dots, p_m$  que rige la evolución del sistema. En el caso continuo, la dinámica esta dada mediante una ecuación diferencial de la forma

$$\frac{da}{dt} = F(a; p_1, \dots, p_m)$$

Estamos interesados en el comportamiento del sistema a largo plazo, i.e.  $t \rightarrow \infty$ . Este comportamiento en general dependerá de las condiciones iniciales y de los parámetros de la dinámica. En el caso de un sistema discreto el comportamiento se indica en un diagrama de bifurcación, que es la gráfica de los puntos a los cuales converge el sistema en función del parámetro [14]. Si el sistema es estable para un rango del parámetro se observará que en ese rango la curva toma un valor fijo y único. El sistema también puede oscilar en una órbita estable; en este caso, el

sistema toma distintos valores que eventualmente se repiten cíclicamente y en el diagrama de bifurcación se ve que para el mismo valor del parámetro existen varios valores estables. Así el diagrama de bifurcación nos permite ver cómo un estado del sistema pierde o gana estabilidad conforme se varía el parámetro. En este caso el parámetro será el ancho del tubo.

Un diagrama de bifurcación para un sistema continuo no se puede realizar de la misma manera. No obstante se pueden tomar los máximos (o mínimos) relativos de la solución. A medida que la variable evoluciona en el tiempo, esta pasa por máximos y mínimos relativos. Usando estos valores podemos realizar un análisis similar al caso anterior. Este sistema tendrá las mismas propiedades dinámicas que el sistema original.

### 2.1.2. Flujo de Poiseuille

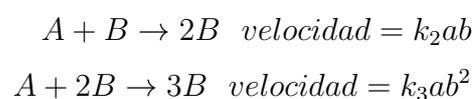
El flujo de Poiseuille es el flujo que describe la velocidad de un fluido incompresible a través de un tubo de sección circular constante. Fue derivado de forma independiente por Gotthilf Heinrich Ludwig Hagen y Jean Louis Marie Poiseuille en búsqueda de un modelo para el flujo de sangre a través de tubos delgados [20]. El perfil de velocidades del flujo de Poiseuille adimensional en dos dimensiones es [11]

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \frac{3}{2}(1 - x^2)\bar{\mathbf{v}}(y, z, t) \quad (2.1)$$

donde  $x \in [-1, 1]$  es la posición horizontal en el tubo (ancho),  $\mathbf{z}$  es paralelo al eje del tubo perpendicular a  $\mathbf{x}$ . El vector  $\mathbf{v}$  representa la velocidad del frente en una posición  $\mathbf{x}$  y tiempo  $t$  dados, mientras que  $\bar{\mathbf{v}}$  representa la velocidad promedio en la dirección vertical  $z$ .

## 2.2. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky

Consideremos un sistema de reacción-difusión de reactante A y autocatalizador B (reactante que también promueve su propia formación como producto) de tasas de reacción de ordenes mixtas (cúbicas y cuadráticas) definidas por las siguientes reacciones



donde A y B tienen coeficientes de difusión  $D_a$  y  $D_b$ ,  $a$  y  $b$  son las concentraciones

de A y B, y  $k_2$  y  $k_3$  son los coeficientes de las tasas de reacción. Hovárth [8] demostró que la interfaz de reacción entre A y B admite una solución de onda plana viajera estable. La solución será estable cuando los coeficientes de difusión sean iguales. Cuando no lo son, puede surgir una inestabilidad en la interfaz si la diferencia de coeficientes de difusividad excede un valor crítico. En un sistema de referencia (apropiadamente escalado según las difusividades y tasas de reacción) acoplado a la onda viajera inicialmente estable, la interfaz satisface la ecuación Kuramoto-Sivashinsky (ver [19, 9] para su deducción original en el caso de frentes de combustión por Kuramoto y Sivashinsky):

$$\dot{\phi} = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2$$

aquí el punto indica derivada respecto al tiempo y  $\phi(x, t)$  es la altura del frente medida respecto al frente plano en diferentes puntos  $x$  al ancho del tubo. Se observa que esta E.D.P. contiene un término no lineal, el responsable de la formación de inestabilidades y caos en el frente. La ecuación Kuramoto-Sivashinsky no tiene una solución analítica, salvo la trivial, por lo tanto es necesario resolverla usando métodos numéricos. En general la solución dependerá del ancho del tubo  $L$ , parámetro que cambiará cualitativamente la forma de las soluciones. Estas podrán ser pares, impares, estacionarias, oscilatorias o caóticas.

### 2.3. Solución numérica de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky

La ecuación Kuramoto-Sivashinsky es de la forma [19, 9]

$$\dot{\phi} = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 \quad (2.2)$$

donde el punto indica derivada respecto al tiempo y consideraremos que  $x$  esta en el rango  $[0, L]$ . Estamos interesados en hallar la solución de la ecuación (2.2) bajo las siguientes condiciones de frontera

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0 \quad (2.3)$$

Para ello consideremos una solución de la siguiente forma

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \cos(nqx) + d_n(t) \sin(nqx) \quad (2.4)$$

donde  $q = \frac{\pi}{L}$ . Es claro que para satisfacer la ecuación (2.3) debemos hacer en la ecuación (2.4)  $d_n = 0 \forall n$ . Por lo tanto la solución propuesta es de la forma

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \cos(nqx) \quad (2.5)$$

Las derivadas espaciales son

$$\phi' = - \sum_n c_n(t)(nq) \sin(nqx) \quad (2.6a)$$

$$\phi'' = - \sum_n c_n(t)(nq)^2 \cos(nqx) \quad (2.6b)$$

$$\phi^{(4)} = \sum_n c_n(t)(nq)^4 \cos(nqx) \quad (2.6c)$$

Introduciendo estas expresiones en la ecuación (2.2) y denotando por brevedad  $k_n = nq$  obtenemos

$$\sum_n \dot{c}_n(t) \cos(nqx) = \sum_n c_n k_n^2 \cos(nqx) - \sum_n c_n k_n^4 \cos(nqx) + \left( \sum_n c_n k_n \sin(nqx) \right)^2 \quad (2.7)$$

Reescribiendo el último término como el producto de dos sumatorias y usando identidades trigonométricas conocidas obtenemos

$$\begin{aligned} \left( \sum_r c_r k_r \sin(rqx) \right)^2 &= \sum_{r,s} c_r k_r c_s k_s \sin(rqx) \sin(sqx) \\ &= \sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} [\cos(qx(r-s)) - \cos(qx(r+s))] \end{aligned} \quad (2.8)$$

Notando que el coseno es una función par, y agrupando los términos que corresponden a  $\cos(nqx)$  obtenemos la siguiente relación entre los coeficientes

$$\dot{c}_n = c_n k_n^2 - c_n k_n^4 + \sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} (\delta_{|r-s|}^n - \delta_{r+s}^n) \quad (2.9)$$

donde  $\delta$  es el delta de Kronecker definido de la siguiente manera.

$$\delta_i^j = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

Separamos los términos dentro de la sumatoria

$$\dot{c}_n = (k_n^2 - k_n^4) c_n + \sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} \delta_{|r-s|}^n - \sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} \delta_{r+s}^n \quad (2.10)$$

Y desarrollamos la segunda sumatoria notando que los términos con  $s = n - r$  son los únicos que no son nulos (son iguales a 1)

$$\sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} \delta_{r+s}^n = \sum_r \frac{c_r k_r c_{n-r} k_{n-r}}{2} \quad (2.11)$$

En la primera sumatoria es conveniente distinguir tres casos:  $r > s, r < s$  y  $r = s$ . Introduciendo la siguiente notación para escribir los tres casos de forma separada

$$\delta_{|r-s|}^n = \delta_{r-s}^n \mathbf{1}_{r>s} + \delta_{s-r}^n \mathbf{1}_{r<s} + \delta_0^n \mathbf{1}_{r=s} \quad (2.12)$$

donde  $\mathbf{1}$  es una función indicadora que es 1 o 0 según sea el caso. Pero en la expansión de Fourier se ha considerado  $n \geq 1$ , por lo tanto el tercer término se anula. En la sumatoria el primer término conduce a sustituir  $r = n + s$ , mientras que el segundo conlleva a  $s = n + r$ . Luego obtenemos

$$\sum_{r,s} \frac{c_r k_r c_s k_s}{2} (\delta_{r-s}^n \mathbf{1}_{r>s} + \delta_{s-r}^n \mathbf{1}_{r<s}) = \sum_s \frac{c_{n+s} k_{n+s} c_s k_s}{2} + \sum_r \frac{c_{r+n} k_{r+n} c_r k_r}{2} \quad (2.13)$$

Como los índices son mudos esto se reduce en una sola sumatoria. Finalmente se obtiene

$$\dot{c}_n = (k_n^2 - k_n^4) c_n - \sum_r \frac{c_r k_r c_{n-r} k_{n-r}}{2} + \sum_r c_r k_r c_{n+r} k_{n+r} \quad (2.14)$$

Notemos que las ecuaciones (2.14) son un sistema de ecuaciones diferenciales entrelazadas. Para obtener una solución numérica aproximada de la ecuación (2.2) debemos truncar este sistema en un  $n_{m\acute{a}x}$ , y luego implementar el siguiente algoritmo de Euler [17]

$$c_{n,t+1} = c_{n,t} + \Delta t ((k_n^2 - k_n^4) c_{n,t} - \sum_r \frac{c_{r,t} k_r c_{n-r,t} k_{n-r}}{2} + \sum_r c_{r,t} k_r c_{n+r,t} k_{n+r}) \quad (2.15)$$

donde  $\Delta t$  es la discretización en el tiempo de la aproximación numérica que debe ser escogido convenientemente.

## 2.4. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky con el flujo de Poiseuille

La ecuación Kuramoto-Sivashinsky desarrollada en la sección anterior no incluye el efecto del flujo de Poiseuille [Ec. (2.1)]. La ecuación con el flujo sería de la siguiente forma

$$\dot{\phi} = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + \frac{3}{2}\left(1 - \left(\frac{x}{L}\right)^2\right)\bar{\nu} \quad (2.16)$$

donde  $\bar{\nu}$  es la velocidad media del flujo que, por simplicidad, denotaremos como  $\nu$  y  $x \in [0, L]$ . Podemos usar los resultados de la sección anterior, expandiendo el último término en series de Fourier. En este caso dicho término se reemplaza con

$$\nu(x) = \nu \sum_{n \text{ par}}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{6}{n^2} \cos(nqx) \quad (2.17)$$

donde  $q = \pi/L$ ,  $\nu$  es la velocidad media del flujo y  $x \in [0, L]$ . Con estos resultados podemos introducir el flujo de Poiseuille en la solución via expansión de cosenos dada en la ecuación (2.16). Valiéndonos la ecuación (2.14) y la ecuación (2.17) tenemos

$$\dot{c}_n = (k_n^2 - k_n^4)c_n - \sum_r \frac{c_r k_r c_{n-r} k_{n-r}}{2} + \sum_r c_r k_r c_{n+r} k_{n+r} + (-1)^{n+1} \frac{6}{n^2} \nu \Delta_{n,par} \quad (2.18)$$

donde  $\Delta_{n,par}$  es 1 si  $n$  es par y cero en caso contrario.

## 2.5. Análisis de estabilidad lineal de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky

El frente plano  $\phi(x, t) = 0$  es una solución de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky para  $\nu = 0$ . Se desea saber para qué valores de  $L$  está solución será estable ante pequeñas perturbaciones. Podemos escribir la solución perturbada como

$$\phi(x, t) = \phi_0(x, t) + \phi_{per}(x, t) \quad (2.19)$$

donde

$$\phi_0(x, t) = 0 \quad (2.20)$$

$$\phi_{per}(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) \cos(nqx) \quad (2.21)$$

con  $|\phi_{per}| \ll 1$  y  $q = \frac{\pi}{L}$ . Nótese que hemos tomado sólo la parte cosinusoidal de la serie de Fourier debido a las condiciones de borde [Ec. (2.3)]. Como estamos cerca de la solución podemos hacer un análisis de estabilidad lineal (i.e. despreciamos el término no lineal en (2.2)) y analizar término a término, obtenemos

$$\dot{A}_n = ((nq)^2 - (nq)^4)A_n. \quad (2.22)$$

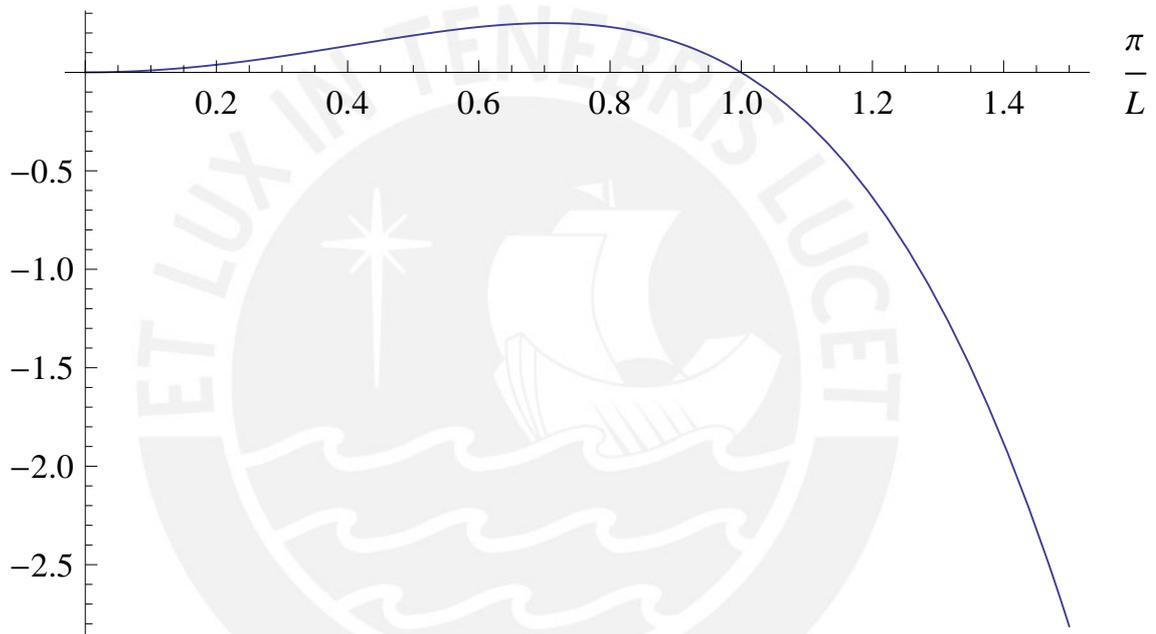
Observemos que si el coeficiente que acompaña a  $A_n$  es negativo, entonces  $A_n$  decae exponencialmente, i.e.  $\phi_{per} \rightarrow 0$ . Podemos escribir este coeficiente de la siguiente manera

$$[(nq)^2 - (nq)^4] = (nq^2) [1 - (nq)^2]$$

como  $n, q > 0$  se tiene que el punto crítico, i.e. punto a partir del cual el coeficiente pasa de ser positivo a negativo, para el término  $n$ -ésimo se da cuando

$$q = q_n = \frac{1}{n}$$

De aquí, es claro que si  $n < m$  se sigue que  $q_n > q_m$ . Esto significa que si  $q < q_n$  entonces todos los modos menores que  $n$  no decaerán. Para garantizar que el sistema sea estable todos los modos deben ser estables; para esto basta analizar el modo  $n = 1$ , pues si este es estable todos los demás serán estables. En particular para el primer modo,  $n = 1$ , podemos graficar este término, lo cual observamos en la figura (2.1). En esta figura observamos que existe una región donde dicho coeficiente es positivo. Este gráfico implica que para  $L > \pi$  la onda plana será inestable.



**Figura 2.1:** Gráfico de  $q^2 - q^4$  con  $q = \pi/L$ . En esta imagen se puede apreciar que existe una región entre 0 y 1 donde la función es positiva, y que la transición entre positiva y negativa se da en 1, i.e.  $L = \pi$ . Esto significa que el frente plano será inestable para  $L > \pi$

## Capítulo 3

# Resultados y Simulaciones Numéricas

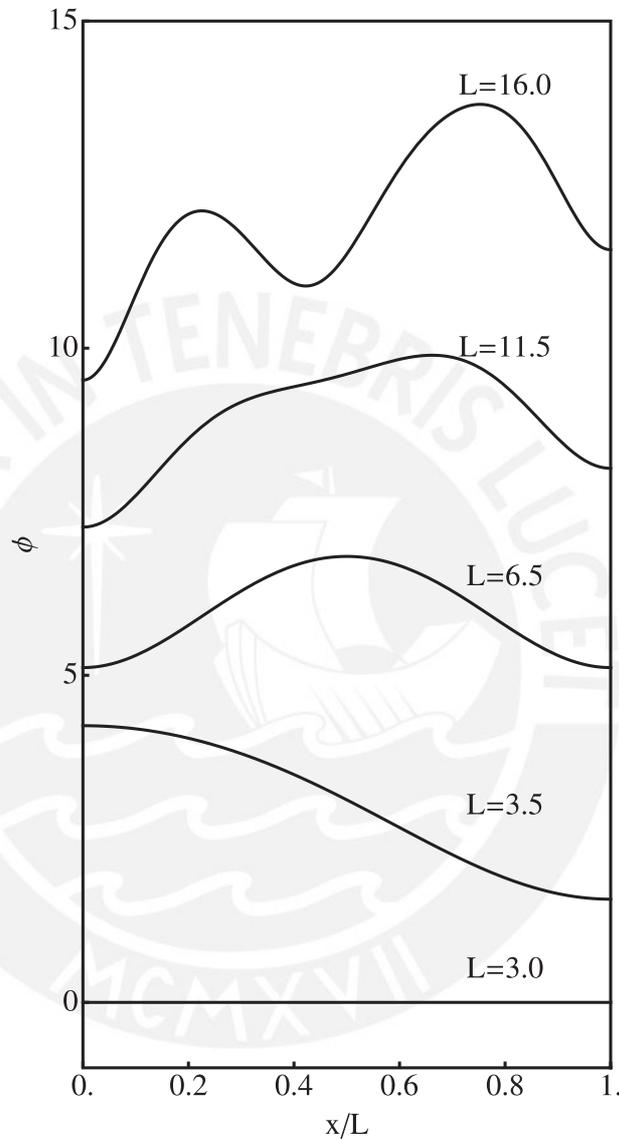
### 3.1. Soluciones de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky

Usando el método numérico explicado en el capítulo anterior hallamos soluciones de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky para distintos valores de  $L$  y  $\nu$ . Las soluciones pueden ser estacionarias u oscilatorias, pares o no-pares y, eventualmente, caóticas dependiendo de los valores de  $L$  y de  $\nu$ . En un primer caso, estudiamos las soluciones que existen para  $\nu = 0$  y observamos como afecta el cambio de  $L$  a estas soluciones. Inicialmente, para  $L < 16,5$ , tenemos soluciones estacionarias, estas están graficadas en la figura (3.1). Observamos que las soluciones estacionarias pueden ser pares o no-pares, y también pueden tener un mínimo o varios mínimos conforme variamos  $L$ . Estudiaremos en detalle estas transiciones de simetría en las secciones que siguen.

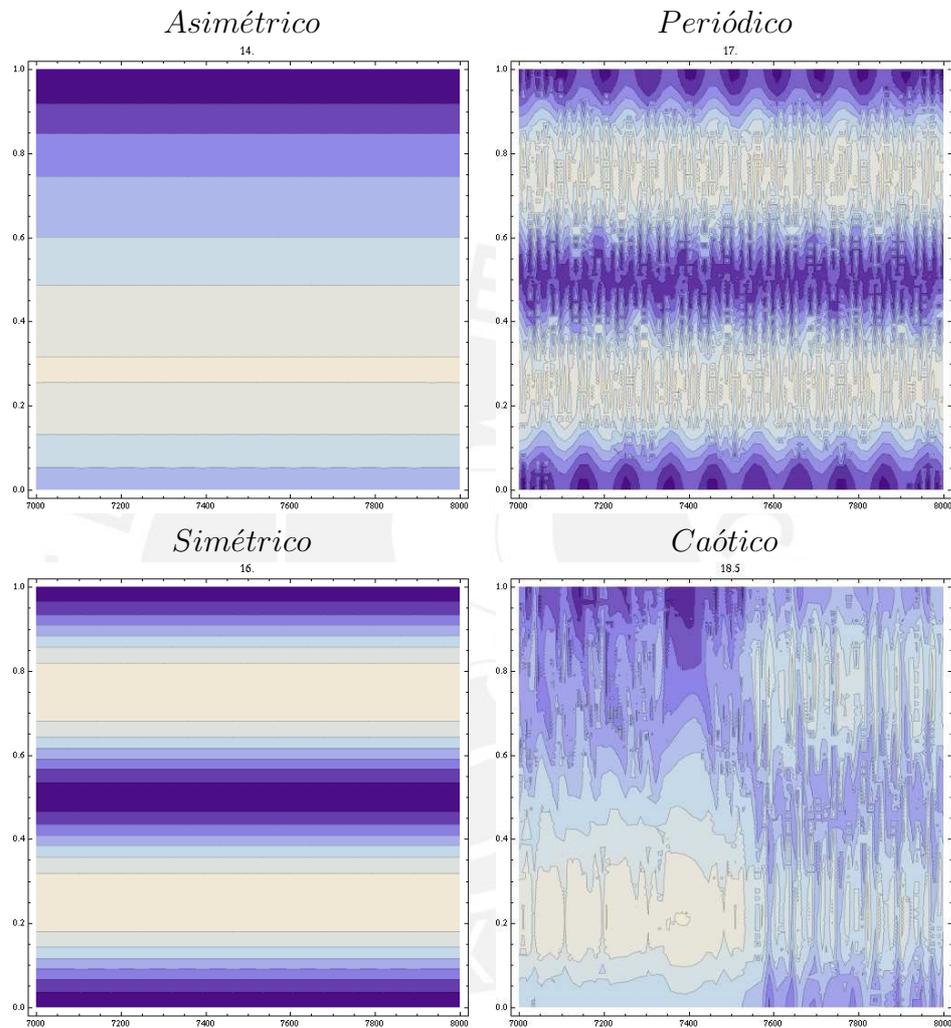
En la figura (3.2) se muestra la evolución del frente donde el eje horizontal es el tiempo y el eje vertical la posición en el tubo. Los colores más claros indican valores mayores de  $\phi$ . En estos gráficos podemos observar que existen comportamientos oscilatorios y caóticos. Cuando  $L > 16,5$  la solución presenta oscilaciones como las de la figura. Conforme aumenta  $L$  estas oscilaciones se vuelven más complejas hasta que eventualmente (para  $L$  alrededor de 18) el frente se vuelve caótico. La transición de un frente oscilatorio a uno caótico será estudiadas en secciones posteriores de este capítulo.

### 3.2. Pérdida de estabilidad del frente plano

Conforme se vio en el análisis de estabilidad del capítulo anterior, el frente plano ( $\phi(x, t) = 0$ ) se vuelve inestable para un ancho  $L > \pi$  y velocidad media del fluido



**Figura 3.1:** Gráfico de los frentes estacionarios representativos para distintos valores de  $L$ . Observamos que inicialmente para  $L = 3 < \pi$  tenemos un frente plano, luego al incrementar  $L$  obtenemos un frente asimétrico, seguido por uno simétrico, y después nuevamente por uno asimétrico, siendo finalmente reemplazado por un frente con dos máximos. Se observan múltiples transiciones de simetría conforme aumenta  $L$ .



**Figura 3.2:** La evolución del frente para diferentes valores de  $L$  con  $\nu = 0$ . En el eje horizontal el tiempo y en el eje vertical la posición en el tubo. Los colores más claros indican valores mayores de  $\phi$ . Se observa que la ecuación Kuramoto-Sivashinsky puede tener todos los tipos de comportamiento dinámico dependiendo del valor de  $L$ .

$\nu = 0$ . El objetivo de esta sección es analizar cómo es que el frente plano pierde estabilidad. Soluciones de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky indican que la solución que se obtiene cuando el frente plano ha perdido estabilidad es no-par. Dado que el frente plano es obviamente una función par, es conveniente estudiar también como es que la solución par pierde estabilidad. Para estudiar esta transición usaremos dos indicadores : el máximo relativo de  $\phi$  y la máxima parte real de los autovalores de la solución par.

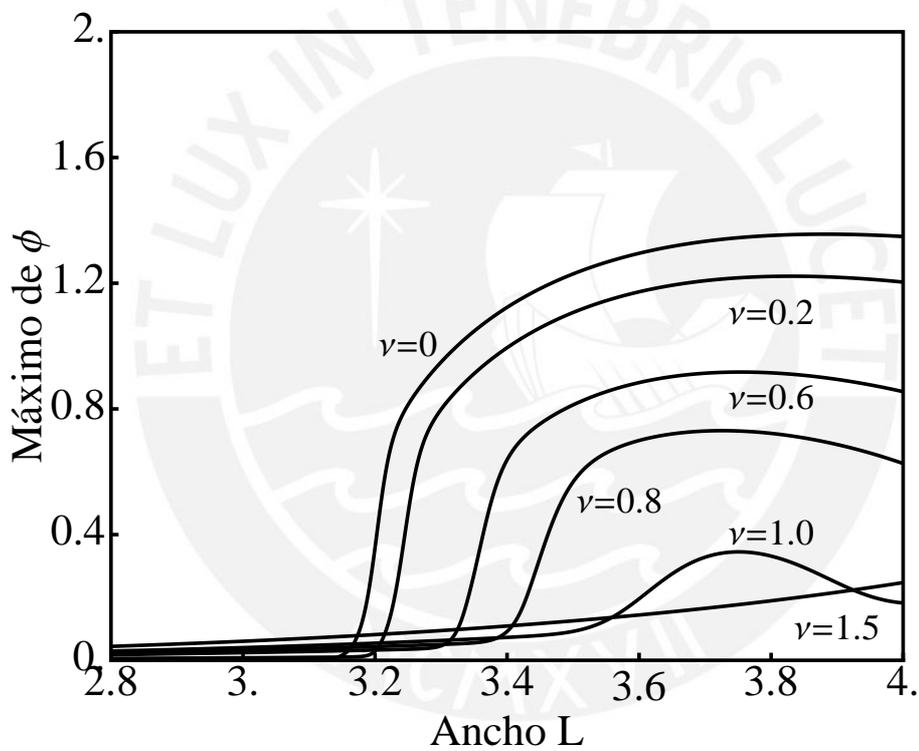
### 3.2.1. Máximo de $\phi$

Para realizar el análisis de los máximos relativos diseñamos un algoritmo en Mathematica que determina los máximos relativos de una función dada. Usando el programa en FORTRAN generamos una solución de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky para determinados valores de  $\nu$  y  $L$  fijos, manteniendo  $L < \pi$ . Usamos como condiciones iniciales pequeñas perturbaciones aleatorias cercanas a cero. Una vez que obtenemos esta solución con el programa incrementamos  $L$  en  $\Delta L$ , usando como condiciones iniciales los coeficientes de Fourier hallados anteriormente. Una vez que obtenemos todas las soluciones para el rango de  $L$  deseado, las introducimos al programa en el Mathematica.

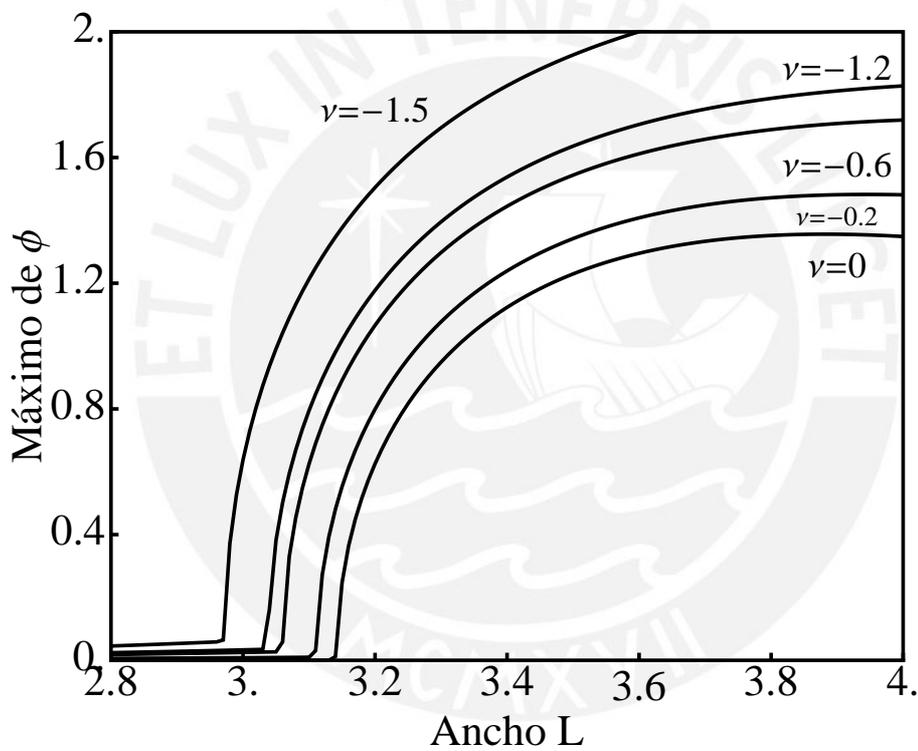
Los resultados de este procedimiento se encuentran en las figuras (3.3), para velocidades positivas del flujo de Poiseuille, y en (3.4) para velocidades negativas. En ambas figuras podemos observar que el gráfico correspondiente a  $\nu = 0$  empieza en 0 y que en  $L = \pi$  se aleja del eje. Esta es una señal de que el frente ha dejado de ser plano como esperábamos. En el caso de velocidades positivas podemos observar que, conforme aumentamos la velocidad, la curva base se eleva, pero, una vez que pasa la transición, se dobla cada vez más hasta que el máximo que marca la transición desaparece por completo. Identificamos este quiebre no como la transición de un frente plano a uno no plano, sino como la transición de un frente par a uno no-par. El frente inicial toma la simetría axial del flujo de Poiseuille. El hecho de que cuando aumenta  $\nu$  la curva inicial no empieza desde 0 es debido a que, para  $\nu > 0$ ,  $\phi = 0$  ya no es una solución de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky. La nueva solución podríamos hallarla haciendo  $\dot{\phi} = 0$ , i.e. resolviendo una ecuación de la forma

$$0 = -\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)^2 + \frac{3}{2}\left(1 - \left(\frac{x}{L}\right)^2\right)\nu \quad (3.1)$$

Claramente, la solución base inicial dependerá de  $\nu$ . Para velocidades positivas la solución base nueva pierde estabilidad cuando  $\nu$  es bajo, pero cuando  $\nu$  es alto no pierde estabilidad sino que se mantiene.



**Figura 3.3:** Máximo relativo de  $\phi$  respecto a  $L$  para valores positivos de  $\nu$ . Observamos que, conforme aumenta  $\nu$ , la concavidad disminuye. Y se observa que entre  $\nu = 1,0$  y  $\nu = 1,5$  la concavidad desaparece.



**Figura 3.4:** Máximo relativo de  $\phi$  respecto a  $L$  para valores negativos de  $\nu$ . Observamos que, conforme aumenta  $\nu$ , la concavidad aumenta. Y en este caso la concavidad no desaparece sino que más bien se incrementa.

En el caso de velocidades negativas podemos observar que sólo en el caso de  $\nu = 0$  las soluciones empiezan desde 0, y en los casos anteriores las soluciones empiezan desde valores mayores a 0. Esto es debido a la misma razón que para velocidades positivas. No obstante en este caso vemos que este frente siempre se vuelve inestable dando lugar a otro frente (uno asimétrico).

### 3.2.2. Estabilidad de la solución par

Para evaluar la estabilidad de una solución proseguimos de la siguiente manera. Notemos que tenemos en general un sistema de la forma

$$\dot{c}_i = F_i(c_1, \dots, c_n) \quad (3.2)$$

donde en nuestro caso  $i = 1, \dots, n = 15$ , y  $F_i$  esta dado por (2.14). Podemos determinar explícitamente el espectro de exponentes de Lyapunov de este sistema calculando los autovalores del Jacobiano asociado a  $F$ . Este jacobiano es de la forma

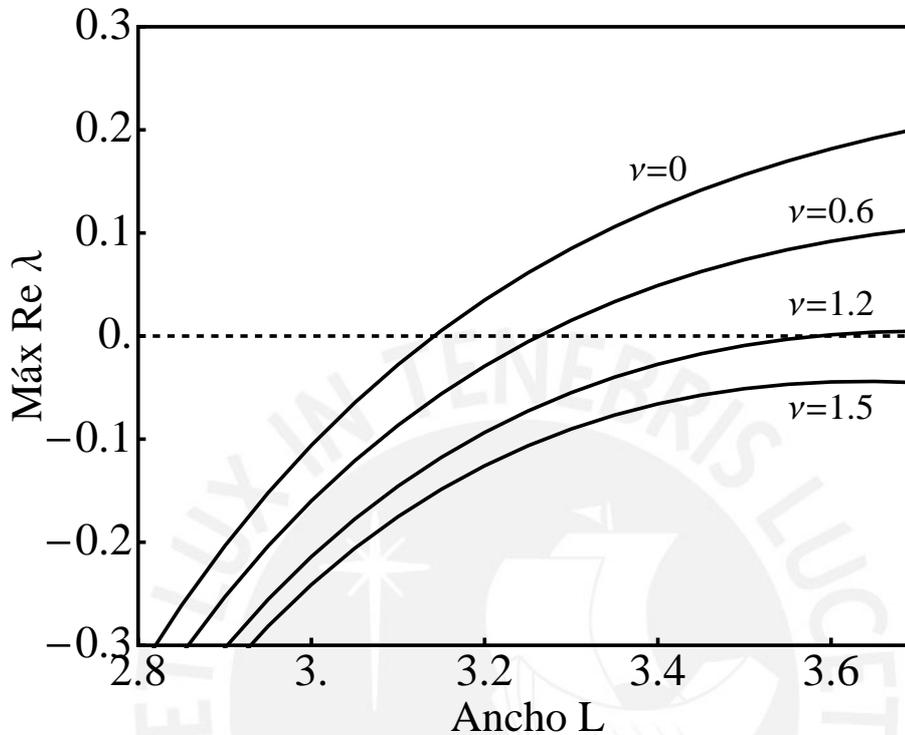
$$J_F(c_1, \dots, c_n) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial F_1}{\partial c_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_n}{\partial c_1} & \dots & \frac{\partial F_n}{\partial c_n} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

La solución será estable si  $Max\{Re(\lambda_i), i = 1, \dots, n\} < 0$ , i.e. si la parte real de todos los autovalores de la solución es negativa. Para demostrar esta afirmación recordemos que podemos los coeficientes forman un vector  $n$ -dimensional y  $J_F$  se pueden interpretar como un operador lineal sobre estos vectores. Dicho operador tiene autovectores (que en este caso corresponden a autofunciones debido a que los coeficientes estan asociados a funciones coseno) que denotaremos como  $(u_i)_{i=1,n}$  asociados a los autovalores anteriormente mencionados  $\lambda_i$ . Suponiendo condiciones iniciales arbitrarias y recordando que en la base de los autovectores la matriz  $J_F$  es diagonal y por lo tanto la solución de (3.2) es exponencial en cada término es decir que en la base de autovectores

$$\vec{c}(t) = \sum_{i=1}^n c_i(0) \exp(\lambda t) \vec{u}_i$$

Observemos que  $\lambda$  en general es un número complejo. Notemos que si alguno de las partes reales de los  $\lambda_i$  es positiva cuando  $t \rightarrow \infty$  la solución será divergente. Por ello para analizar la estabilidad de una solución basta considerar el máximo de las partes reales de los autovalores de  $J_F$  evaluada en la solución.

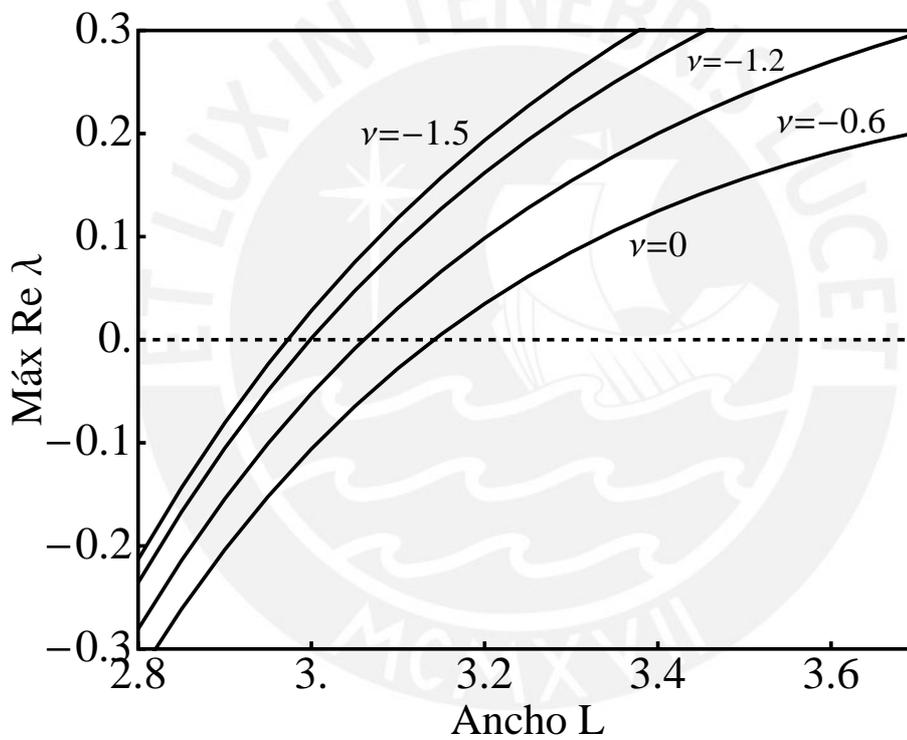
Por otro lado, se modificó el algoritmo de Euler en el programa en FORTRAN que genera las soluciones de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky para que genere so-



**Figura 3.5:** Máxima parte real del espectro de autovalores evaluado en la solución par versus a  $L$  para valores positivos de  $\nu$ . Observamos que conforme aumenta  $\nu$  la curva se dobla para abajo cruzando el cero. Esto significa que al aumentar  $\nu$  la solución par se vuelve estable en todo el rango, i.e. la transición entre par a impar desaparece.

luciones pares. Para lograr esto, en el paso en el algoritmo de Euler en el cual se actualizan los valores  $c_i$ , solo se actualizan los valores pares. Usando estos coeficientes se prosiguió a hallar los autovalores usando un algoritmo en Mathematica, los resultados para valores positivos del flujo de Poiseuille se encuentran en (3.5) y para los valores negativos (3.6).

Es claro que el resultado para  $\nu = 0$  es consistente con el análisis de estabilidad lineal que se realizó en el capítulo anterior, y los resultados del máximo relativo de la sección anterior, debido a que la solución par se vuelve inestable justamente en  $L = \pi$  para  $\nu = 0$ . En el caso de velocidades positivas observamos que las curvas se curvan hacia abajo y eventualmente la curva está siempre por debajo del eje. Esto significa que para velocidades positivas para una velocidad suficientemente grande ya no existe transición de un frente simétrico a uno asimétrico. Por otro lado, en el caso de velocidades negativas observamos que estas curvas siempre cruzan el eje,



**Figura 3.6:** Máxima parte real del espectro de autovalores evaluado en la solución par versus a  $L$  para valores negativos de  $\nu$ . Observamos  $\nu$  se vuelve más negativo la transición entre la solución impar a par se da antes y siempre se mantiene.

y que conforme la velocidad se vuelve más negativa el cruce se realiza antes. Este resultado también es consistente con el comportamiento observado en las figuras (3.3-3.4).

### 3.3. Transiciones entre frente asimétrico y simétrico

En la sección anterior se observó que la solución de la ecuación Kuramoto-Sivashinsky presenta una transición entre un frente par a uno no-par en  $L = \pi$  para  $\nu = 0$ . Resulta interesante estudiar en detalle esta transición, y otras transiciones de paridad que se dan conforme variamos  $L$  y como es que estas son afectas por el cambio de  $\nu$ .

Recordemos que toda función se puede descomponer en suma de una función par y una impar, por ejemplo

$$f(x) = \frac{f(x) + f(-x)}{2} + \frac{f(x) - f(-x)}{2}$$

donde la primera expresión del lado derecho es la parte par y la segunda es la impar. Entonces por la desigualdad triangular

$$\|\phi(t)\| \leq \|\phi_{par}(t)\| + \|\phi_{impar}(t)\|$$

Notemos que la igualdad solamente se da cuando la función es impar o par. Esto nos anima a definir el parámetro de asimetría como

$$A(t) = \frac{\|\phi_{par}\|(t)}{\|\phi\|(t)} \quad (3.4)$$

donde

$$\|\phi(t)\| = \int_0^L (\phi(x, t))^2 dx \quad (3.5)$$

la norma de la función  $\phi$  y definimos  $\phi_{par}$  como la parte par de la función, i.e. aquella formada solamente por los términos pares. Usando la condición de ortonormalidad de los cosenos

$$\int_{-1}^1 \cos(m\pi x) \cos(n\pi x) dx = \delta_n^m$$

y reemplazando el desarrollo de  $\phi$  en términos de cosenos de Fourier, i.e.

$$\phi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos(nqx)$$

es fácil probar que

$$\|\phi(t)\| = \frac{1}{2} \sum_i^n c_i^2(t) \quad (3.6)$$

con lo que

$$A(t) = \frac{\sum_i^n \text{par } c_i^2(t)}{\sum_i^n c_i^2(t)} \quad (3.7)$$

Además, denotamos  $A(\infty) = A$ . Notemos que  $A$  solamente está bien definido cuando la solución es estacionaria. Usaremos  $A$  como una medida de la asimetría de la solución.

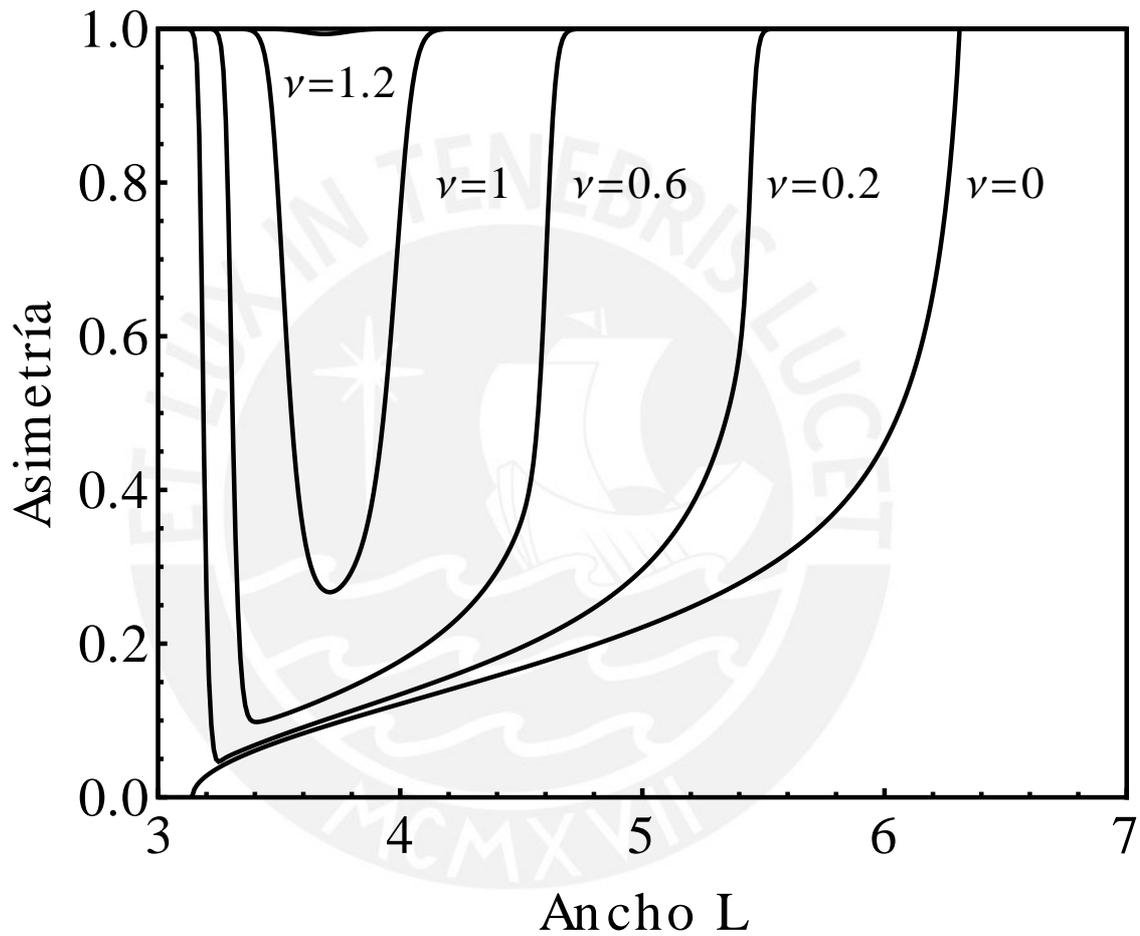
### 3.3.1. Transiciones en 3.141592... y 6.2

En la figura (3.7) se ha graficado  $A$  versus  $L$  para valores positivos de  $\nu$ , podemos observar que la curva correspondiente a  $\nu = 0$  recién empieza desde  $L = \pi$ . Esto es debido a que para valores de  $L$  menores que  $\pi$ , la solución  $\phi$  corresponde a la solución trivial. En este caso el valor de  $A$  no está bien definido por ser una división de la forma  $0/0$ . No obstante la curva de  $\nu = 0$  empieza indicando la existencia de una solución completamente impar que paulatinamente se va volviendo par hasta que es completamente par alrededor de seis. También observamos que conforme aumenta  $\nu$  la transición de impar a par, que inicialmente estaba alrededor de seis, se traslada hacia la izquierda y se hace menos prominente; eventualmente para un  $\nu$  suficientemente grande la transición desaparece por completo manifestándose solamente la solución par.

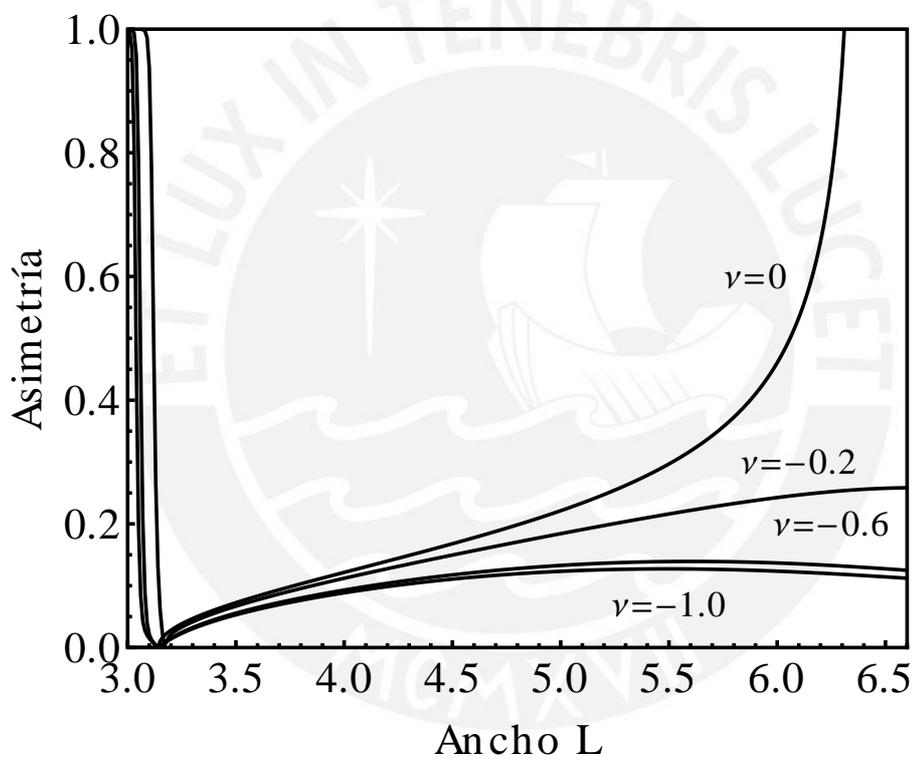
Por otro lado, en la figura (3.8) se ha graficado  $A$  versus  $L$  para valores negativos de  $\nu$ . En este caso observamos que la transición par-impar-par no desaparece sino que conforme aumenta  $\nu$  esta transición se ve reforzada, y que el punto de la transición impar-par se desplaza hacia la derecha.

## 3.4. Transición entre una solución estacionaria a una periódica y al caos

Usando el programa en FORTRAN realizamos diagramas de bifurcación para analizar el comportamiento a largo plazo de la solución y si existen patrones característicos del caos. Para realizar los diagramas de bifurcación usualmente usamos los mínimos relativos del frente ( $\phi$ ) o de la serie de tiempo de algún coeficiente.



**Figura 3.7:** Parámetro de asimetría versus L para valores positivos de  $\nu$ . Observamos que conforme aumenta  $\nu$  la transición par-impar-par disminuye hasta desaparecer y tener solamente una solución par.



**Figura 3.8:** Parámetro de asimetría versus L para valores negativos de  $\nu$ . Observamos que conforme  $\nu$  se vuelve más negativo la transición par-impar en  $\pi$  se acentúa mientras que la transición impar-par en  $6.75$  se corre a la derecha y acentúa.

El procedimiento es como sigue. Primero fijamos valores de  $L$  y  $\nu$ . Segundo usamos el programa en FORTRAN con condiciones iniciales aleatorias cercanas a la solución de frente plano para hallar los coeficientes de Fourier para cada instante. Se sabe que si alguno de los coeficientes manifiesta caos entonces la función total, que es combinación lineal de estos coeficientes, también manifestará caos. Luego podemos estudiar tanto los coeficientes como la función  $\phi$ . Para estudiar los coeficientes observamos la serie de tiempo de uno de dichos coeficientes y hallamos los mínimos relativos; en el diagrama de bifurcación graficamos dichos mínimos versus  $L$  para un  $\nu$  fijo. En el caso de estudiar la función  $\phi$  se usaron dos métodos. En uno de ellos se observó la serie de tiempo de  $\phi(L/5, t)$  y se analizaron los mínimos relativos de dicha serie. El otro método consistió en observar la serie de tiempo de los mínimos relativos de la función  $\phi$ , y luego observar los mínimos relativos de dicha serie de tiempo, i.e. los mínimos relativos de los mínimos relativos de  $\phi$  y luego graficar estos para cada valor de  $L$  y  $\nu$ . Los resultados de estos análisis se presentan en las siguientes secciones divididos para los casos en que  $\nu = 0$  y cuando  $\nu \neq 0$ .

### 3.4.1. Frentes caóticos sin el flujo de Poiseuille

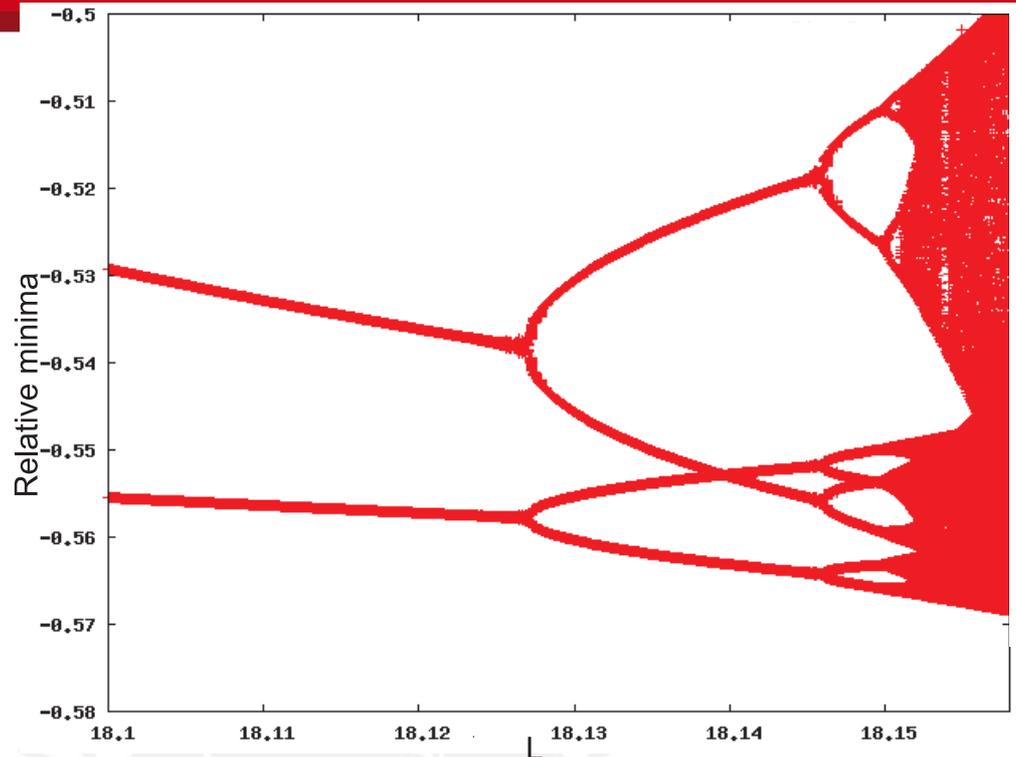
En la figura (3.9) se muestra el diagrama de bifurcación de los mínimos relativos del coeficiente número 5 respecto a  $L$  para  $\nu = 0$ . Observamos un comportamiento típico del caos, presentándose un diagrama de bifurcación con doblez de periodo y la aproximación a un régimen caótico. Se observa que este régimen empieza alrededor de 18.15 y ya está bien establecido en 18.20. También observamos que las líneas del diagrama se entrecruzan de alguna manera sugiriendo algún grado de degeneración.

Por otro lado, en la figura (3.10) se muestra el diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de la serie de tiempo de  $\phi(L/5)$ . En este caso como en la figura (3.9) se observa que hay un comportamiento típico de una transición al caos, nuevamente esta transición ocurre alrededor de 18.15. No obstante, en este caso a diferencia que en la figura (3.9) no existe degeneración en el diagrama.

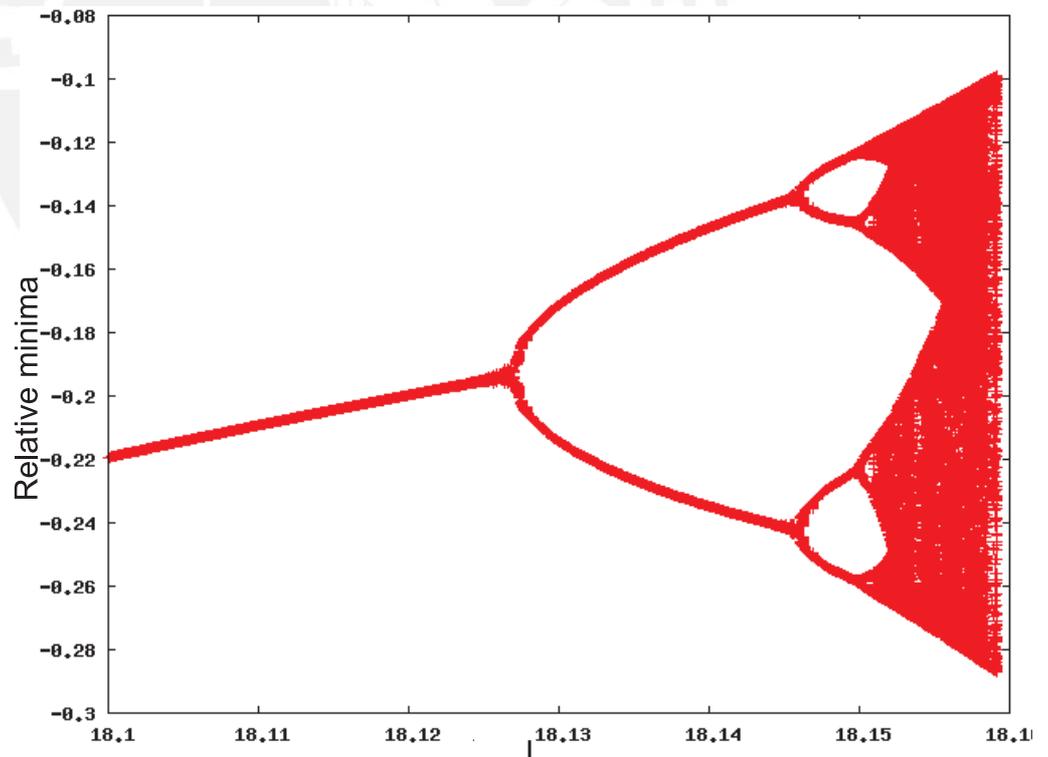
### 3.4.2. Frentes caóticos con el flujo de Poiseuille

Se ha estudiado el efecto del flujo de Poiseuille en frentes caóticos. Para lo cual se fijó el valor de  $L$  en 18.2, valor en el cual el frente es caótico sin flujo de Poiseuille ( $\nu = 0$ ). Para valores entre  $\nu = 0$  y  $\nu = 0,22$  la solución pasa de ser caótica, a ser oscilatoria. Al incrementarse el valor de  $\nu$  se observa que para  $\nu > 0,22$  la solución es estacionaria.

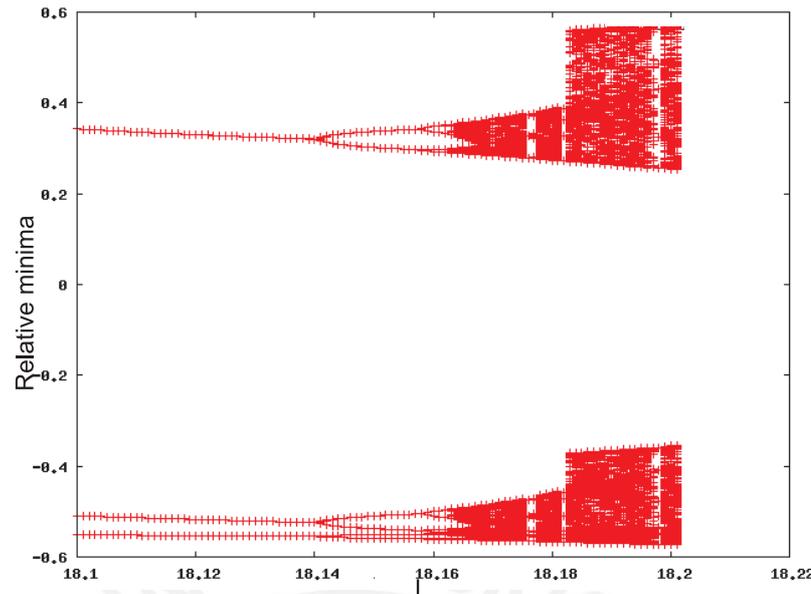
De los argumentos anteriores establecemos que el caos desaparece al incremen-



**Figura 3.9:** Diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de la serie de tiempo del coeficiente 5 respecto a  $L$ . Se observa un comportamiento típico de una transición de un comportamiento periódico (órbitas) a caos.



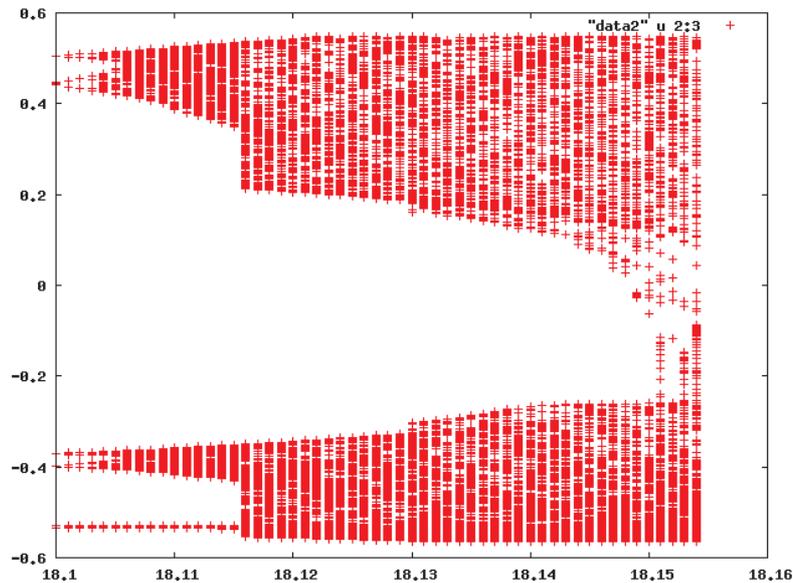
**Figura 3.10:** Diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de la serie de tiempo de los mínimos relativos de  $\phi$  respecto a  $L$ . Se observa un comportamiento típico de una transición de un comportamiento periódico (órbitas) a caos.



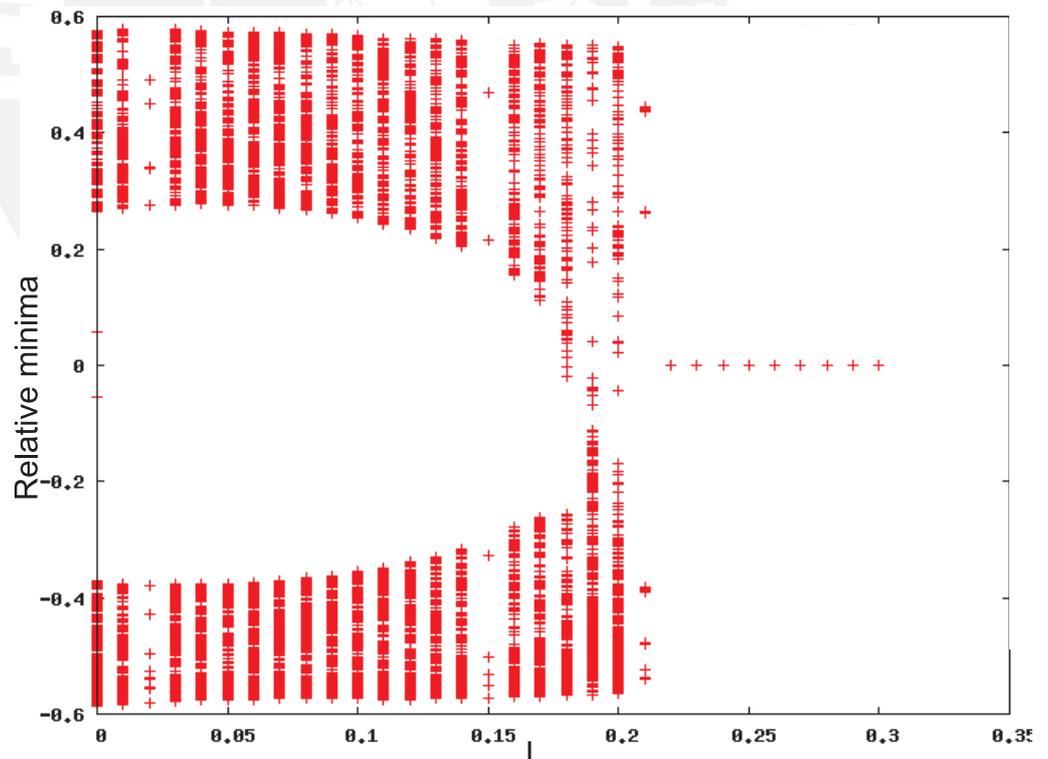
**Figura 3.11:** Diagramas de bifurcación respecto a  $L$  para distintos valores de  $\nu$ . Observamos que respecto a la figura (3.9) los diagramas de bifurcación se han corrido a la izquierda.

tarse  $\nu$ , ahora nos interesa investigar como se da esta transición. En las figuras (3.11) y (3.12) se ha graficado el diagrama de bifurcación de los mínimos relativos de la serie de tiempo del coeficiente 5 para los valores de  $\nu$  0.1 y 0.2. Podemos observar en esta figura, comparándola con la figura (3.9), los diagramas de bifurcación se han corrido hacia la izquierda. Se realizaron diagramas de bifurcación para valores mayores de  $\nu$ , pero en estos casos se encontraron que no existía bifurcación.

Para estudiar con más detalle como ocurre la transición entre el frente caótico y el frente estacionario realizamos un diagrama de bifurcación de los mínimos relativos del coeficiente 5 respecto a  $\nu$  para  $L = 18,2$ . En este caso sabemos que para  $\nu = 0$  el frente es caótico y estamos observando que sucede con el diagrama de bifurcación al aumentar  $\nu$  dejando  $L$  fijo. En la figura (3.13) se ha realizado este análisis, en ella podemos observar que el caos desaparece bruscamente al llegar al valor establecido de  $\nu$ . Eso sugiere que el caos da paso inmediatamente a una solución estacionaria. No obstante se requieren simulaciones de mayor resolución en  $\nu$  para garantizar eso, lo que se realizará en un trabajo futuro.



**Figura 3.12:** Diagramas de bifurcación respecto a  $L$  para distintos valores de  $\nu$ . Observamos que respecto a la figura (3.9) los diagramas de bifurcación se han corrido a la izquierda.



**Figura 3.13:** Diagrama de bifurcación respecto a  $\nu$  para  $L = 18,2$ . Observamos que existe un régimen caótico para  $\nu < 2$ , y que al pasar este valor se obtiene un régimen estacionario.

## Capítulo 4

### Conclusiones

En este trabajo se ha estudiado los frentes de reacción-difusión modelados por la ecuación Kuramoto-Sivashinsky sujetos al flujo de Poiseuille. Se han determinado que la dinámica de los frentes depende tanto del ancho del tubo como de la velocidad media del flujo de Poiseuille. Se han encontrado frentes que presentan una dinámica estacionaria, otros una periódica y finalmente se ha hallado que en algunas circunstancias esta puede ser caótica.

Se ha estudiado las transiciones entre las diferentes dinámicas que presenta el sistema. Primero se analizó la transición de un frente plano a un frente estacionario no plano. En esta transición se observó que el flujo de Poiseuille, en ambos casos, hace que el frente plano inicial adquiera una simetría par, i.e. ya no es plano. Comprobamos que cuando el flujo de Poiseuille tenía el mismo sentido que la propagación del frente la transición desaparecía para velocidades medias altas. Mientras que cuando el flujo de Poiseuille era opuesto al frente la transición ocurría antes y era reforzada. Además, se notó que cuando el frente era estacionario podía ser par o no-par dependiendo del valor de  $L$ . Se observaron transiciones de simetría para  $L = \pi, 6,2$  y  $11,2$  se estudiaron con detalle las dos primeras. En el primer caso el frente iba de un frente par a uno no-par, mientras que en el segundo iba de uno no-par a uno par. Para ambos casos se analizó el efecto del flujo de Poiseuille. En el primer caso cuando la velocidad media del flujo de Poiseuille incrementaba en el sentido de la propagación de la onda química se tenía que la transición ocurría para un valor de  $L$  mayor y eventualmente desaparecía, mientras que cuando la velocidad media del flujo de Poiseuille iba en contra del sentido de propagación la transición ocurría para valores de  $L$  menores y era reforzada.

También se estudio la transición de una dinámica oscilatoria a una caótica. Para esto se realizaron diagramas de bifurcación tanto de los mínimos relativos de la serie de tiempo de un coeficiente de la expansión de Fourier como de los mínimos

relativos de la serie de tiempo de los mínimos relativos del frente ( $\phi$ ). En ambos casos se observó que existía una transición del caos alrededor de 18, estando el caos plenamente establecido para 18,2 cuando la velocidad media del flujo de Poiseuille era cero. Al introducir el flujo de Poiseuille en esta transición se encontró que tanto para velocidades a favor o en contra de la onda el caos desaparecía.





# Apéndice A

## Programa en FORTRAN

El siguiente programa hecho para FORTRAN 90 calcula los coeficientes de la expansión de Fourier de la solución de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky con 15 términos. Para hacer esto se ha implementado el método de Euler usando la siguiente expresión

$$c_{n,t+1} = c_{n,t} + \Delta t((k_n^2 - k_n^4)c_{n,t} - \sum_r \frac{c_{r,t}k_r c_{n-r,t}k_{n-r}}{2} + \sum_r c_{r,t}k_r c_{n+r,t}k_{n+r}) \quad (\text{A.1})$$

donde  $n = 1, \dots, 15$ . El desarrollo de estas expresiones se ha incorporado explícitamente en el programa con el fin de hacerlo más veloz. Para generar estas expresiones sin lugar a errores se ha usado Mathematica, y luego transformado el output en tipo FORTRAN. Además, el número de iteraciones y el paso ha sido escogido de tal manera que en el rango estudiado de  $L$  se tengan las soluciones correctas.

---

```

PROGRAM KS
implicit real*8 (a-h,o-z)
C*****
C Definicion de variables
integer n
integer :: itt=1560000000
parameter (n=15)
real*8 q,k(n),xxx
real*8 p(n)
real*8 pp(n)

```

```

real*8 xk1(n),fp(n)
real*8 pi,dt
real*8 xL
real*8 poisvel
C Variables Auxiliares
real*8 fpp,pj,xk1j,ppp
C Contadores
integer i,j,u
C Funciones
real*8 x,phi
real*4 rand
C*****
C Dando valor a pi
pi=float(4)*atan(1.0d0)
C Escogiendo el paso del tiempo
dt=0.0000002d0
C Fijo L y el valor de la velocidad de Poiseuille
xl=3.10
poisvel=0.0d0
C*****
C Dando valores iniciales a p
call srand(8234234)
DO j=1,n
p(j)=rand()/100
ENDDO
C*****
C Definiendo Q
q=pi/xL
C Definiendo variables auxiliares
DO j=1,n
k(j)=float(j)*q
ENDDO
call srand(8997987)

DO i=1,itt
fp(1)=(q**2 - q**4)*p(1) + 2*q**2*p(1)*p(2) + 6*q*
1*2*p(2)*p(3) + 12*q**2*p(3)*p(4) + 20*q**2*p(4)*p(

```

$$15) + 30*q^{**2}*p(5)*p(6) + 42*q^{**2}*p(6)*p(7) + 56*q^{**2}*p(7)*p(8) + 72*q^{**2}*p(8)*p(9) + 90*q^{**2}*p(9)*p(110) + 110*q^{**2}*p(10)*p(11) + 132*q^{**2}*p(11)*p(12) + 156*q^{**2}*p(12)*p(13) + 182*q^{**2}*p(13)*p(14) + 210*q^{**2}*p(14)*p(15)$$

$$fp(2)=(-6*poisvel)/Pi^{**2} - (q^{**2}*p(1)**2)/2. + (4*q^{**2} - 16*q^{**4})*p(2) + 3*q^{**2}*p(1)*p(3) + 8*q^{**2}*p(1(2)*p(4) + 15*q^{**2}*p(3)*p(5) + 24*q^{**2}*p(4)*p(6) + 35*q^{**2}*p(5)*p(7) + 48*q^{**2}*p(6)*p(8) + 63*q^{**2}*p(1(7)*p(9) + 80*q^{**2}*p(8)*p(10) + 99*q^{**2}*p(9)*p(11) + 120*q^{**2}*p(10)*p(12) + 143*q^{**2}*p(11)*p(13) + 168*q^{**2}*p(12)*p(14) + 195*q^{**2}*p(13)*p(15)$$

$$fp(3)=-2*q^{**2}*p(1)*p(2) + (9*q^{**2} - 81*q^{**4})*p(3) + 4*q^{**2}*p(1)*p(4) + 10*q^{**2}*p(2)*p(5) + 18*q^{**2}*p(1(3)*p(6) + 28*q^{**2}*p(4)*p(7) + 40*q^{**2}*p(5)*p(8) + 54*q^{**2}*p(6)*p(9) + 70*q^{**2}*p(7)*p(10) + 88*q^{**2}*p(1(8)*p(11) + 108*q^{**2}*p(9)*p(12) + 130*q^{**2}*p(10)*p(13) + 154*q^{**2}*p(11)*p(14) + 180*q^{**2}*p(12)*p(15)$$

$$fp(4)=(-3*poisvel)/(2.*Pi^{**2}) - 2*q^{**2}*p(2)**2 - 3*q^{**2}*p(1)*p(3) + (16*q^{**2} - 256*q^{**4})*p(4) + 5*q^{**2}*p(1)*p(5) + 12*q^{**2}*p(2)*p(6) + 21*q^{**2}*p(3)*p(17) + 32*q^{**2}*p(4)*p(8) + 45*q^{**2}*p(5)*p(9) + 60*q^{**2}*p(1)*p(6)*p(10) + 77*q^{**2}*p(7)*p(11) + 96*q^{**2}*p(8)*p(12) + 117*q^{**2}*p(9)*p(13) + 140*q^{**2}*p(10)*p(14) + 165*q^{**2}*p(11)*p(15)$$

$$fp(5)=-6*q^{**2}*p(2)*p(3) - 4*q^{**2}*p(1)*p(4) + (25*q^{**2} - 625*q^{**4})*p(5) + 6*q^{**2}*p(1)*p(6) + 14*q^{**2}*p(1(2)*p(7) + 24*q^{**2}*p(3)*p(8) + 36*q^{**2}*p(4)*p(9) + 50*q^{**2}*p(5)*p(10) + 66*q^{**2}*p(6)*p(11) + 84*q^{**2}*p(12)*p(7)*p(12) + 104*q^{**2}*p(8)*p(13) + 126*q^{**2}*p(9)*p(14) + 150*q^{**2}*p(10)*p(15)$$

$$fp(6)=(-2*poisvel)/(3.*Pi^{**2}) - (9*q^{**2}*p(3)**2)/2 - 8*q^{**2}*p(2)*p(4) - 5*q^{**2}*p(1)*p(5) + (36*q^{**2} - 1296*q^{**4})*p(6) + 7*q^{**2}*p(1)*p(7) + 16*q^{**2}*p(12)*p(8) + 27*q^{**2}*p(3)*p(9) + 40*q^{**2}*p(4)*p(10) + 55*q^{**2}*p(5)*p(11) + 72*q^{**2}*p(6)*p(12) + 91*q^{**2}$$

$$1*p(7)*p(13) + 112*q**2*p(8)*p(14) + 135*q**2*p(9)*p(15)$$

$$fp(7)=-12*q**2*p(3)*p(4) - 10*q**2*p(2)*p(5) - 6*q**2*p(1)*p(6) + (49*q**2 - 2401*q**4)*p(7) + 8*q**2*p(1)*p(8) + 18*q**2*p(2)*p(9) + 30*q**2*p(3)*p(10) + 44*q**2*p(4)*p(11) + 60*q**2*p(5)*p(12) + 78*q**2*p(6)*p(13) + 98*q**2*p(7)*p(14) + 120*q**2*p(8)*p(15)$$

$$fp(8)=(-3*poisvel)/(8.*Pi**2) - 8*q**2*p(4)**2 - 15*q**2*p(3)*p(5) - 12*q**2*p(2)*p(6) - 7*q**2*p(1)*p(7) + (64*q**2 - 4096*q**4)*p(8) + 9*q**2*p(1)*p(9) + 20*q**2*p(2)*p(10) + 33*q**2*p(3)*p(11) + 48*q**2*p(4)*p(12) + 65*q**2*p(5)*p(13) + 84*q**2*p(6)*p(14) + 105*q**2*p(7)*p(15)$$

$$fp(9)=-20*q**2*p(4)*p(5) - 18*q**2*p(3)*p(6) - 14*q**2*p(2)*p(7) - 8*q**2*p(1)*p(8) + (81*q**2 - 6561*q**4)*p(9) + 10*q**2*p(1)*p(10) + 22*q**2*p(2)*p(11) + 36*q**2*p(3)*p(12) + 52*q**2*p(4)*p(13) + 70*q**2*p(5)*p(14) + 90*q**2*p(6)*p(15)$$

$$fp(10)=(-6*poisvel)/(25.*Pi**2) - (25*q**2*p(5)**2)/2. - 24*q**2*p(4)*p(6) - 21*q**2*p(3)*p(7) - 16*q**2*p(2)*p(8) - 9*q**2*p(1)*p(9) + (100*q**2 - 10000*q**4)*p(10) + 11*q**2*p(1)*p(11) + 24*q**2*p(2)*p(12) + 39*q**2*p(3)*p(13) + 56*q**2*p(4)*p(14) + 75*q**2*p(5)*p(15)$$

$$fp(11)=-30*q**2*p(5)*p(6) - 28*q**2*p(4)*p(7) - 24*q**2*p(3)*p(8) - 18*q**2*p(2)*p(9) - 10*q**2*p(1)*p(10) + (121*q**2 - 14641*q**4)*p(11) + 12*q**2*p(1)*p(12) + 26*q**2*p(2)*p(13) + 42*q**2*p(3)*p(14) + 60*q**2*p(4)*p(15)$$

$$fp(12)=-poisvel/(6.*Pi**2) - 18*q**2*p(6)**2 - 35*q**2*p(5)*p(7) - 32*q**2*p(4)*p(8) - 27*q**2*p(3)*p(9) - 20*q**2*p(2)*p(10) - 11*q**2*p(1)*p(11) + (1144*q**2 - 20736*q**4)*p(12) + 13*q**2*p(1)*p(13) + 28*q**2*p(2)*p(14) + 45*q**2*p(3)*p(15)$$

$$fp(13)=-42*q**2*p(6)*p(7) - 40*q**2*p(5)*p(8) - 36*q**2*p(4)*p(9) - 30*q**2*p(3)*p(10) - 22*q**2*p(2)*p(11) - 14*q**2*p(1)*p(12) + (168*q**2 - 2205*q**4)*p(13) + 18*q**2*p(1)*p(14) + 36*q**2*p(2)*p(15)$$

$$1)*p(11) - 12*q^{**2}*p(1)*p(12) + (169*q^{**2} - 28561*q$$

$$1^{**4})*p(13) + 14*q^{**2}*p(1)*p(14) + 30*q^{**2}*p(2)*p(1$$

$$15)$$

$$fp(14)=(-6*poisvel)/(49.*Pi^{**2}) - (49*q^{**2}*p(7)^{**2}$$

$$1)/2. - 48*q^{**2}*p(6)*p(8) - 45*q^{**2}*p(5)*p(9) - 40*$$

$$1q^{**2}*p(4)*p(10) - 33*q^{**2}*p(3)*p(11) - 24*q^{**2}*p(2$$

$$1)*p(12) - 13*q^{**2}*p(1)*p(13) + (196*q^{**2} - 38416*q$$

$$1^{**4})*p(14) + 15*q^{**2}*p(1)*p(15)$$

$$fp(15)=-56*q^{**2}*p(7)*p(8) - 54*q^{**2}*p(6)*p(9) - 50$$

$$1*q^{**2}*p(5)*p(10) - 44*q^{**2}*p(4)*p(11) - 36*q^{**2}*p($$

$$13)*p(12) - 26*q^{**2}*p(2)*p(13) - 14*q^{**2}*p(1)*p(14)$$

$$1 + (225*q^{**2} - 50625*q^{**4})*p(15)$$

C Calculo Incrementos

```
DO j=1,n
fpp=fp(j)
xk1(j)=dt*fpp
ENDDO
```

C Incremento los valores

```
DO j=1,n
pj=p(j)
xk1j=xk1(j)
pp(j)=pj+xk1j
ENDDO
```

C Puesta al dia

```
DO j=1,n,1
ppp=pp(j)
p(j)=ppp
ENDDO
ENDDO
write(*,*) xl
write(*,*) p
end program KS
```

real\*8 function phi(p,q,y,n)

C Reconstruye la función PHI a partir de su expansión de Fourier  
implicit real\*8 (a-h,o-z)

```
integer n
real*8 p(n)
real*8 y,q
integer i
phi=0.0d0
DO i=1,n,1
phi=phi+p(i)*cos(float(i)*q*y)
ENDDO
END
```



# Bibliografía

- [1] M. R. Carey, S. W. Morris, and P. Kolodner. *Phys. Rev. E*, 53, 1995.
- [2] M. Cross and P. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. *Review of Modern Physics*, 65:851–1112, 1993.
- [3] B. F. Edwards. *Phys. Rev.*, 89, 2002.
- [4] I. Epstein and K. Showalter. Nonlinear chemical dynamics : Oscillations, patterns and chaos. *J. Phys. Chem.*, 100:13132–13147, 1996.
- [5] K. K. D. K. P. Epstein I. and O. M. Las manchas del leopardo. *Scientific American*, 237:61–67, 1982.
- [6] R. A. Fisher. The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Eugenics*, 7:355–369, 1937.
- [7] D. Horváth, T. Bánsági, and Á. Tóth. Orientation-dependent density fingering in an acidity front. *J. Chem. Phys.*, 117:4399, 2002.
- [8] D. Horváth, V. Petrov, S. K. Scott, and K. Showalter. *J. Chem. Phys.*, 98, 1993.
- [9] Y. Kuramoto. *Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence*. Springer-Verlag, 1989.
- [10] K. Kustin, O. M., I. Epstein, and P. De Kepper. Oscillating chemical reactions. *Scientific American*, 237:96–107, 1982.
- [11] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics : Fluid Mechanics*. Pergamon, 1987.
- [12] M. Leconte, J. Martin, N. Rakotomalala, and D. Salin. *Phys. Rev. Lett.*, 90:128302–128306, 2003.

- [13] R. Luther. Propagation of chemical reactions in space. *Journal Of Chemical Education*, 64:740–742, 1987.
- [14] P. Manneville. *Dissipative Structures and Weak Turbulence*. Boston : Academic Press, 1990.
- [15] J. Masere, D. A. Vasquez, B. F. Edwards, and J. W. Wilder. *J. Phys. Chem.*, 98, 1994.
- [16] T. McManus, I. Epstein, K. Showalter, and J. Pojman. Convective effects on chemical waves. 2. simple convection in the iodate-arsenous acid system. *J. Phys. Chem.*, 95:1299–1306, 1991.
- [17] W. H. Press. *Numerical recipes in Fortran 90*. Cambridge : Academic Press, 1992.
- [18] K. Showalter and J. Tyson. Luther's 1906 discovery and analysis of chemical waves. *Journal Of Chemical Education*, 64:742–744, 1987.
- [19] G. Sivashinsky. *Acta Astronautica*, 1977.
- [20] S. P. Sutera and R. Skalak. The history of poiseuille's law. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 25:1–19, 1993.
- [21] A. Turing. The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 237:37–72, 1952.
- [22] D. A. Vasquez. *Phys. Rev. E*, 76, 2007.
- [23] D. A. Vasquez, J. W. Wilder, and B. F. Edwards. *Phys. Fluids A*, 4, 1992.
- [24] J. W. Wilder, D. A. Vasquez, and B. F. Edwards. *Phys. Rev. E*, 56, 1997.