

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DEL PERÚ  
ESCUELA DE POSGRADO



PONTIFICIA  
**UNIVERSIDAD  
CATÓLICA**  
DEL PERÚ

# INESTABILIDADES DE UN FRENTE DE PROPAGACIÓN EN DOS DIMENSIONES EN UNA REACCIÓN-DIFUSIÓN CÚBICA

Tesis para optar el grado de Magíster en Física

## **Autor**

Lic. Edwin Agapito Llamoca Requena

## **Asesor**

Phd. Desiderio Vasquez Rodriguez

## **Jurado**

Mg. Jorge Luis Martín Quiroz Gonzalez

Dr. Pablo Martín Vilela Proaño

Lima - Perú  
2016





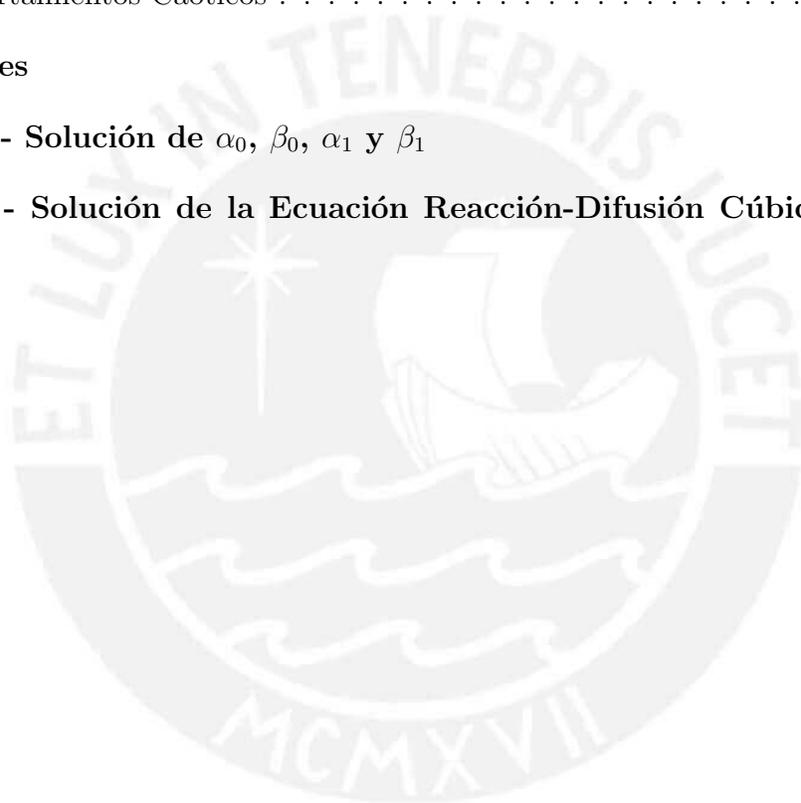
*a Gina, Fiorella y Erika*



# Indice General

Indice General	iii
Agradecimientos	v
Resumen	vii
Introducción	1
<b>1 Aspectos Teóricos</b>	<b>3</b>
1.1 Ecuaciones Parabólicas en dos Dimensiones . . . . .	3
1.1.1 Método Explícito . . . . .	4
1.1.2 Método Implícito de Dirección Alternante - IDA . . . . .	5
1.1.3 Método Localmente Unidimensionales . . . . .	6
1.2 Reacción-Difusión . . . . .	7
1.2.1 Reacción-Difusión Cúbica . . . . .	8
1.3 Caos . . . . .	10
1.3.1 Antecedentes Históricos . . . . .	11
1.3.2 ¿Qué es el Caos? . . . . .	12
1.3.3 Sensibilidad de las Condiciones Iniciales . . . . .	12
1.3.4 Intermittencia . . . . .	13
<b>2 Resultados</b>	<b>15</b>
2.1 Reacción-Difusión Cúbica en 2D . . . . .	15
2.2 Perturbando la Solución Plana . . . . .	17
2.3 Solución por el Método Explícito . . . . .	21
2.4 $\alpha_{max}$ en Función del Tiempo . . . . .	25
2.5 $\sigma$ Relación de Dispersión . . . . .	28
2.6 Aproximación de $\delta_c$ Crítico . . . . .	30
2.7 Velocidad de Advección . . . . .	31
2.8 Soluciones de Frente Plano Estables en 2D . . . . .	35

2.9	Inestabilidad de Frentes Planos . . . . .	38
2.10	Desviación de los Frentes . . . . .	42
2.11	Velocidad de Propagación de los Frentes . . . . .	49
2.12	Reacción-Difusión Cúbica con el Flujo de Poiseuille . . . . .	52
2.13	Sensibilidad en las Condiciones Iniciales . . . . .	55
2.14	Intermitencia . . . . .	56
2.15	Intermitencia Caótica . . . . .	59
2.16	Comportamientos Caóticos . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>exp_ab.f90 - Solución de <math>\alpha_0</math>, <math>\beta_0</math>, <math>\alpha_1</math> y <math>\beta_1</math></b>	<b>71</b>
<b>B</b>	<b>exp_ad.f90 - Solución de la Ecuación Reacción-Difusión Cúbica en 2D</b>	<b>77</b>
	<b>Bibliografía</b>	<b>87</b>



# Agradecimientos

Mi vocación por la física nace cuando estaba en segundo año de Ingeniería Civil en la Universidad Nacional de San Agustín y gracias a mi profesor de Matemáticas Ing. Calixto Yanqui que con su carisma en la enseñanza de las Matemáticas y la Física me orientó hacia un mundo fascinante de la Física. Me cambié a la carrera de Física y desde ese momento mis ideas fluyeron con mucha naturalidad. Al mismo tiempo también nace otra hermosa vocación, la ciencia de la computación.

Estas dos tendencias de conocimiento se apoderaron de mi vida profesional que lo llevo en paralelo hasta hoy. Agradezco también a dos científicos que marcaron mi vida profesional: Dr. Carmelo Barbagallo Físico Nuclear Italiano y al Dr. Meint Van Albada Físico Teórico Holandés que me ayudo a fusionar la Física con la computación.

En todos esos años estaré bien agradecido a mis padres Agapito y más en especial mi madre Yolanda que en todo momento me dió todo el apoyo y la libertad de elegir mi rumbo profesional hasta la decisión de realizar estudios de maestría.

Erika terminaba el tercer año de Ingeniería Civil y es donde decidí hacer la maestría en Física en la PUCP y con el apoyo que lo tendré hasta el final de mi tiempo es a mi esposa Gina y mis hijas Fiorella y Erika que en cada instante de mi ausencia me dieron el apoyo que sin ello no hubiera acabado la maestría.

Haciendo mis estudios de maestría recibí la confianza incondicional de PhD Desiderio Vasquez participando en su grupo de investigación de Física no Lineal y siendo a su vez mi asesor de mi tesis de Maestría el cual hizo mis sugerencias y comentarios muy precisos de mi trabajo de investigación. Estoy muy agradecido prof. Desiderio.

Agradezco a la Dra. Maria Elena Lopez, Dr. Eduardo Massoni, Dr. Alberto Gago, Dr. Pablo Vilela, Dr. Joel Jones y la Mg. Patrizia Pereyra que me dieron la confianza de ser parte del buen grupo de Física en la PUCP. A mis compañeros de estudio Felix, Francis y Jhoni que me dieron su amistad a pesar de la gran diferencia de edad que tengo con ellos. Finalmente a mis compañeros de trabajo en la PUCP que compartimos buenos momentos de conocimientos y amistad.

No olvidaré los hermosos momentos de mis estudios de la maestría en la biblioteca central de la PUCP el cual fué mi segundo hogar.



# Resumen

Se estudian los frentes de propagación en una región de dos dimensiones con forma de un tubo rectangular finito en sistemas isotérmicos autocatalíticos. Enfocamos el caso donde dos especies intervienen en una reacción y estas especies tienen coeficientes de difusión que pueden diferenciarse significativamente en magnitud. En las configuraciones de dos dimensiones, con diferentes coeficientes de difusión, los frentes de propagación pueden convertirse en inestables. La inestabilidad ocurre cuando la razón de los coeficientes de difusión excede de un valor crítico. La forma espacio-temporal de los frentes no planos en tales sistemas dependen del dominio rectangular perpendicular al frente, generándose para tiempos largos, intermitencias bien definidas separadas en cada intervalo de tiempo. A medida que se incrementa el ancho del dominio rectangular, aparece el caos. También estudiamos las formas de propagación de los frentes cuando el ancho del dominio es más grande que el largo del tubo, notándose simetría de acuerdo a las condiciones iniciales hasta un cierto tiempo y luego se rompe la simetría para tiempos posteriores. Por último al sistema reacción-difusión cúbica le incluimos un flujo advectivo de Poiseuille que dan como resultado dominio de frentes simétricos y asimétricos variando la velocidad promedio del flujo desde valores negativos a valores positivos.

# Introducción

El modelado y análisis de la dinámica de mezclas químicas por medio de ecuaciones diferenciales es una de las principales preocupaciones de los teóricos de la ingeniería química. Estas ecuaciones toman a menudo la forma de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales de forma parabólica no lineal, o ecuaciones de reacción-difusión; cuando hay difusión de sustancias químicas involucradas. Una buena descripción de modelamiento y análisis, puede obtenerse en las obras de R. Aris [1] *The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysis*, que así mismo fué uno de los principales contribuyentes a la teoría. El entusiasmo por los modelos desarrollados ha sido compartida por parte de la comunidad matemática, y estos modelos han de ser siempre una motivación con algunos resultados matemáticos hermosos [2].

Hay analogías entre las reacciones químicas y ciertos sistemas biológicos. Una analogía es la de un solo organismo vivo que es una estructura dinámica construida de moléculas e iones, donde muchos de ellos reaccionan y difunden. Otra analogía es por ejemplo, el potencial eléctrico de una membrana que puede difundirse como una sustancia química, y por supuesto puede interactuar con otras especies (iones), que son transportados a través de la membrana. Estos hechos dieron lugar a Hodgkin y Huxley de medir el modelo de la propagación de las señales nerviosas. En el nivel de las poblaciones, las personas interactúan y se mueven, por lo que no es de extrañar que aquí, de nuevo, los modelos más simples de interacción-migración en el espacio-tiempo tienen el mismo aspecto general que la de los sistemas de reacción-difusión [2].

Sin embargo, será evidente que los ejemplos dados, las observaciones formuladas, y temas elegidos, están inclinados hacia posibles aplicaciones biológicas. Esto refleja el interés general que se ha desarrollado en el uso de las ecuaciones de reacción-difusión para hacerse una idea de la dinámica y la estructura de comunicación biológica en los organismos. Un buen ejemplo de este interés se ve en la monografía de Nicolis y Prigogine

[3], que proporciona una buena visión general del estudio de la autoorganización de los fenómenos en muchas ciencias, como la biología. Es claro que las ecuaciones de reacción-difusión son muy relevantes aquí. Los fenómenos de autoorganización fueron aumentando (Prigogine y Nicolis [4]; G1ansdorff y Prigogine [5]) a la idea de *Estructura disipativa*, que en el contexto de reacción-difusión puede ser modelado por soluciones estables de las ecuaciones, que no son constantes en el espacio-tiempo.

En nuestro estudio aquí veremos el sistema reacción-difusión cúbica aplicado a una reacción química que implica un fenómeno de intermitencia que relaciona a un comportamiento complejo para tiempos muy largos. En el primer capítulo trataremos aspectos teóricos del sistema reacción-difusión así como el desarrollo de la técnica numérica de diferencias finitas para solucionar una ecuación diferencial parcial parabólica en dos dimensiones. En el segundo capítulo daremos solución al sistema reacción-difusión cúbica en dos dimensiones. Y finalmente haremos las conclusiones del resultado de las simulaciones efectuadas que corresponden a un sistema de reacción-difusión cúbica.



# 1

## Aspectos Teóricos

Aquí primero identificamos una ecuación diferencial parcial del tipo parabólico lineal en dos dimensiones y aplicaremos tres métodos numéricos para resolver la ecuación. Luego definiremos el sistema reacción-difusión, y después el sistema reacción-difusión cúbica en el que se refiere a una reacción química del tipo  $A + 2B \rightarrow 3B$ . Como veremos en el siguiente capítulo este sistema de reacción-difusión cúbica llegan a tener comportamientos caóticos, es entonces que damos una noción de caos y el fenómeno de intermitencia. Además consideramos la propagación del frente de reacción en un flujo externo, que es el caso del flujo de Poiseuille.

### 1.1 Ecuaciones Parabólicas en dos Dimensiones

Las ecuaciones diferenciales parciales parabólicas se obtienen en muchas aplicaciones de las ciencias naturales como transferencia de calor en estado transitorio en una barra delgada, distribución de temperatura sobre la superficie de una placa calentada, difusión de gases, genética poblacional, dispersión de mamíferos, dinámica de mezclas químicas, etc. Estas ecuaciones se resuelven ya sea por soluciones analíticas o aplicando técnicas numéricas. En muchos casos la solución analítica no está al alcance, por lo que dichas soluciones se orientan en soluciones aproximadas. Es decir, aplicando métodos numéricos podremos visualizar o tener una solución aproximada de dichas ecuaciones. Una de las técnicas numéricas más utilizadas son el método de diferencias finitas. En este trabajo hemos utilizado las diferentes técnicas de diferencias finitas para aproximar las derivadas espaciales, mientras que la evolución temporal del sistema se puede realizar por métodos implícitos o explícitos que describiremos a continuación. La elección de las técnicas numéricas mucho depende del problema a tratar como también del recurso computacional.

Entonces veremos tres técnicas numéricas mayor utilizadas en resolver ecuaciones

diferenciales parciales parabólicas en dos dimensiones.

### 1.1.1 Método Explícito

El método explícito aplicado en una dimensión, podemos extender a espacios de mayor dimensión, especialmente cuando la región es rectangular. Sea por ejemplo la ecuación de conducción del calor en dos dimensiones

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (1.1)$$

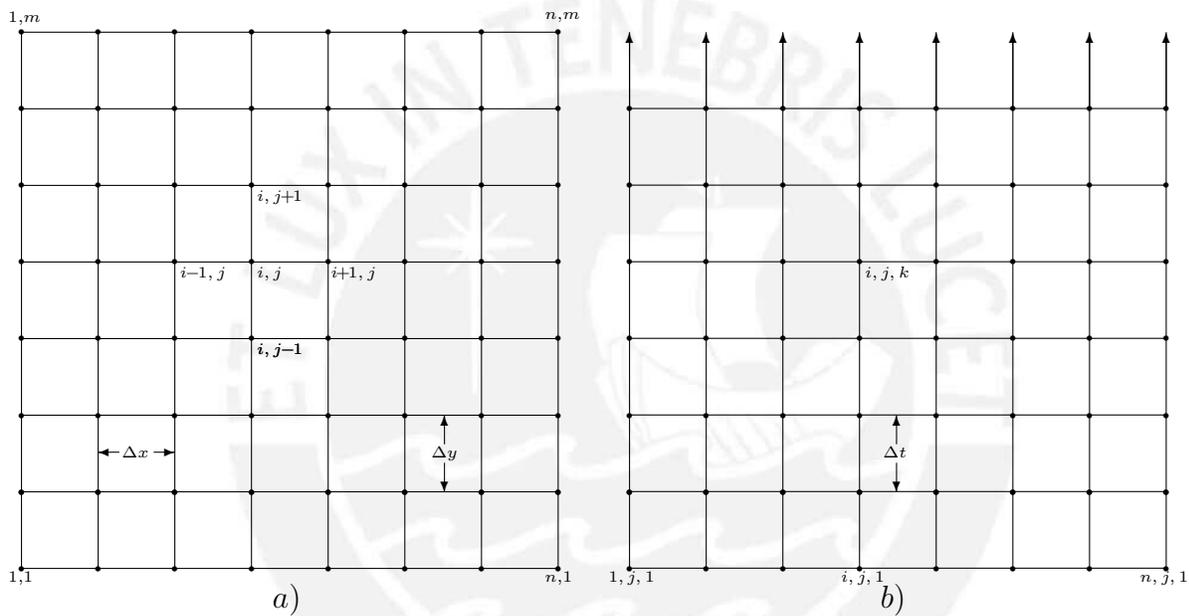


Figure 1.1: Malla usada usada para la solución por diferencias finitas de la ecuación diferencial parcial parabólica. a) Malla espacial con dos variables independientes  $x, y$ . b) Malla tridimensional visto de perfil con evolución temporal en el eje vertical.

Es posible obtener una solución aproximada por el método explícito sustituyendo en la ecuación (1.1) la aproximación de la primera y segunda derivada por diferencias finitas por la derecha para el tiempo y diferencia finita central para el espacio. Las características de la malla se observan en la figura (1.1) donde el punto de la malla  $(i, j)$  corresponde a  $u_{i,j}$ . Es decir

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta t} = k \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + k \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \quad (1.2)$$

Donde  $\Delta x$  es el tamaño de paso en la dirección  $x$ ,  $\Delta y$  en la dirección  $y$  y  $\Delta t$  tamaño de paso para el tiempo  $t$ .

$$\text{haciendo } k_a = \frac{k\Delta t}{\Delta x^2} \quad \text{y} \quad k_b = \frac{k\Delta t}{\Delta y^2}$$

Despejando  $u_{i,j}^{k+1}$  tenemos

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k + k_a(u_{i+1,j}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i-1,j}^k) + k_b(u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k) \quad (1.3)$$

o

$$u_{i,j}^{k+1} = k_a(u_{i+1,j}^k + u_{i-1,j}^k) + k_b(u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k) + (1 - 2k_a - 2k_b)u_{i,j}^k \quad (1.4)$$

Como en el caso unidimensional, este método está limitado por un estricto criterio de estabilidad. Cuando el esquema de computación es estable, los errores en cualquier etapa de cálculo no se amplifican, sino que se atenúan conforme avanza el cálculo. En el caso bidimensional, el criterio es [6, 7]

$$\Delta t \leq \frac{1}{8} \frac{\Delta x^2 + \Delta y^2}{k} \quad (1.5)$$

La dificultad con el empleo del esquema explícito es que las restricciones sobre  $\Delta t$  requieren de muchas filas de cálculos. Entonces buscamos un método en el cual  $\Delta t$  puede ser hecho más grande sin pérdida de estabilidad.

Como en el caso de sistemas unidimensionales, las técnicas implícitas ofrecen alternativas que garantizan estabilidad. Sin embargo, la aplicación directa de los métodos implícitos, como la técnica de Crank-Nicholson [6, 7, 8, 9, 10], lleva a la solución de  $(m \times n)$  ecuaciones simultáneas. Además, cuando aplicamos para dos dimensiones espaciales, estas ecuaciones pierden la valiosa propiedad de ser tridiagonales. De esta manera, el almacenamiento de la matriz y el tiempo de cálculo llegan a ser extremadamente grandes.

### 1.1.2 Método Implícito de Dirección Alternante - IDA

El esquema implícito de dirección alternante o esquema IDA, proporciona un medio para resolver ecuaciones diferenciales parciales parabólicas en dos dimensiones espaciales usando matrices tridiagonales. Este método fueron propuestos por Paceman y Rachford que básicamente consiste en utilizar un método de paso fraccionario en el que el problema algebraico se reduce a dos matrices tridiagonales [9, 11]. El método consiste en avanzar la solución en un primer semipaso de tiempo  $\Delta t/2$ , aproximando la derivada segunda en la dirección del eje  $x$  (por ejemplo) por un esquema implícito y la derivada segunda en la dirección del eje  $y$  por un esquema explícito. Es decir

$$\frac{u_{i,j}^{k+1/2} - u_{i,j}^k}{\Delta t/2} = k \frac{u_{i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + k \frac{u_{i,j+1}^k - 2u_{i,j}^k + u_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} \quad (1.6)$$

donde

$$-k_a u_{i+1,j}^{k+1/2} + 2(1 + k_a) u_{i,j}^{k+1/2} - k_a u_{i-1,j}^{k+1/2} = 2(1 - k_b) u_{i,j}^k + k_b (u_{i,j+1}^k + u_{i,j-1}^k) \quad (1.7)$$

De este modo en el primer semipaso de tiempo resolvemos el sistema algebraico (1.7) tridiagonal en la dirección del eje  $x$ . En el segundo semipaso utilizamos como valor inicial el obtenido en el paso previo, se avanza la solución aproximando la derivada segunda en la dirección  $y$  por un esquema implícito y la derivada segunda en la dirección del eje  $x$  por un esquema explícito.

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1/2}}{\Delta t/2} = k \frac{u_{i+1/2,j}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + k \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta y^2} \quad (1.8)$$

donde

$$-k_b u_{i,j+1}^{k+1} + 2(1 + k_b) u_{i,j}^{k+1} - k_b u_{i,j-1}^{k+1} = 2(1 - k_a) u_{i,j}^{k+1/2} + k_a (u_{i+1,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}) \quad (1.9)$$

En este segundo paso, resolvemos el sistema algebraico tridiagonal (1.9) en la dirección del eje  $y$ . El método resulta incondicionalmente estable si se tiene la precaución de alternar las direcciones en las que la aproximación se realiza en forma implícita. De acuerdo a lo anterior, el método IDA de Paceman-Rachford para la ecuación (1.1) consiste en utilizar en forma alternativa en pasos sucesivos de tiempo cada uno de tamaño  $\Delta t/2$ .

### 1.1.3 Método Localmente Unidimensionales

La escuela de matemática aplicada soviética desarrolló por la misma época métodos análogos al método IDA y que son conocidos como métodos splitting o métodos localmente unidimensionales. Estos fueron desarrollados por Godunov, Dyakonov, Janenko y Marchuk [9, 11]. La idea básica del método es el siguiente: dada la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} = k \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (1.10)$$

se puede escribir como un par de ecuaciones

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1.11)$$

y

$$\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial t} = k \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (1.12)$$

Para avanzar la solución de  $t_k$  a  $t_{k+1}$  se supone que (1.11) es válida de  $t_k$  a  $t_{k+1/2}$  y que (1.12) lo es de  $t_{k+1/2}$  a  $t_{k+1}$ .

Por lo tanto, las ecuaciones (1.11) y (1.12) pueden resolverse por cualquiera de los métodos existentes para una dimensión, sean estos explícitos o implícitos. Pero siempre tomando en cuenta que el resultado de la ecuación (1.11) es la condición inicial para la solución de la ecuación (1.12).

## 1.2 Reacción-Difusión

Todos los modelamientos que lleguen a las ecuaciones de reacción-difusión implican la combinación de dos procesos diferentes: Difusión que se relaciona con movimientos locales y reacción con respecto a crecimientos, interacciones, cambios de estado. La difusión es un fenómeno por medio del cual un grupo de partículas se mueven como grupo de acuerdo a la trayectoria irregular de cada una de las partículas. Así los movimientos particulares irregulares dan como resultado un movimiento regular como grupo, a este fenómeno se le conoce como proceso de difusión cuya ecuación diferencial parcial parabólica en un contorno  $\Omega$  es [12, 13]

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \nabla^2 u(x, t) = D \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x_j^2} \quad (1.13)$$

Con la condición inicial  $u(0, t) = u_0(t)$  y las condiciones de frontera que pueden ser

$$u|_{\Omega} (x, t) = 0 \quad (\text{Problema de Dirichlet}),$$

o

$$\frac{\partial u}{\partial n} |_{\Omega} (x, t) = 0 \quad (\text{Problema de Neumann}).$$

Donde  $D$  es el coeficiente de difusión y  $u(x, t)$  puede ser temperatura, conductividad, densidades poblacionales o cualquier otro fenómeno con carácter difusivo.

Cuando las partículas pueden cambiar su estado, como por ejemplo debido a interacciones de manera espontánea. Aquí se habla de reacciones químicas o procesos biológicos. A estas formas de reacción se puede indicar mediante una función

$$f(x, t, u(x, t)) \quad (1.14)$$

Si sumamos los dos procesos anteriores (1.13) y (1.14) obtenemos

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(x, t) + f(x, t, u(x, t)) \quad (1.15)$$

Con la condición inicial  $u(0, t) = u_0(t)$  y las condiciones de frontera

$$u|_{\Omega} (x, t) = 0 \quad (\text{Problema de Dirichlet}),$$

o

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Omega} (x, t) = 0 \quad (\text{Problema de Neumann}).$$

A la ecuación (1.15) se le denomina una ecuación de reacción-difusión.

Sistemas de reacción-difusión pueden dar lugar a interesantes fenómenos como comportamientos asintóticos, múltiples estados estacionarios, estructuras espaciales, pulso o frentes móviles y oscilaciones. El estudio de estos fenómenos necesita de una variedad de métodos provenientes de muchas áreas de la matemáticas como, por ejemplo, análisis numérico, bifurcación, teoría de la estabilidad, teoría de semigrupos, perturbaciones singulares, espacios de fase, métodos topológicos y muchos otros [13].

Como bien indicamos en los párrafos anteriores, el sistema de reacción-difusión tiene una gran amplitud de aplicaciones, así como también existe una variedad de métodos matemáticos para abordar dicho sistema. Este trabajo abordará un sistema de reacción-difusión cúbica en una reacción química donde se utilizará técnicas numéricas para estudiar su comportamiento. Es de esperar que la propagación de los frentes serán simples hasta complejos, es decir, sus comportamientos serán estables, inestables y caóticos.

### 1.2.1 Reacción-Difusión Cúbica

Los sistemas de reacción-difusión cúbica son modelos matemáticos que describen como una o más sustancias distribuidas en el espacio cambian bajo la influencia de dos procesos: Reacciones químicas en las que las sustancias se transforman las unas en las otras, y difusión, que provoca que las sustancias se expandan en el espacio.

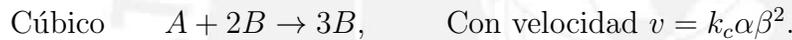
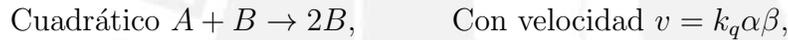
Los sistemas fuera de equilibrio se describen matemáticamente con ecuaciones diferenciales parciales no lineales, que evolucionan en el tiempo con las variables dinámicas. Para los sistemas químicos supondremos que el único acople espacial se debe a la difusión lineal, de manera que se rigen por ecuaciones de tipo reacción-difusión. Sea entonces,  $\mathbf{C}$  un vector que incluyen todas las concentraciones de cada especie, es decir, la ecuación de reacción-difusión es

$$\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial t} = D \nabla^2 \mathbf{C} + \mathbf{f}(x, t, \mathbf{C}, \lambda)$$

Donde las componentes del vector  $\mathbf{f}$  son funciones no lineales de las concentraciones  $\mathbf{C}$ , que incluyen la cinética de reacción;  $D$  que normalmente es la matriz diagonal en el que contienen los coeficientes de difusión y  $\lambda$  es un conjunto de parámetros [12].

Este tipo de sistemas presenta en general un comportamiento muy complejo que normalmente no puede tratarse analíticamente. Sin embargo, es posible obtener información sobre sus soluciones aproximadas o asintóticas cuando una solución conocida del sistema sufre una inestabilidad al variar uno de los parámetros. En estas condiciones se puede conocer el comportamiento cerca del umbral mediante técnicas perturbativas.

En esta tesis nos enfocamos en un sistema de reacción-difusión cúbica [14, 15, 18] de dos especies cuyos coeficientes de difusión son  $D_A$  y  $D_B$  que están involucradas mediante una reacción química del tipo



Aquí,  $A$  es el reactante y  $B$  es el autocatalizador,  $\alpha$  y  $\beta$  representan las concentraciones de sus especies con su ley de velocidades. El sistema reacción-difusión cúbica [17] para las especies  $\alpha$  y  $\beta$  son

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = D_A \nabla^2 \alpha - \alpha \beta^2, \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = D_B \nabla^2 \beta + \alpha \beta^2. \quad (1.17)$$

Cuando los coeficientes de difusión son iguales ( $D_A = D_B = 1$ ) las ecuaciones de reacción-difusión (1.16) y (1.17) se condiciona una relación adicional con las concentraciones de  $\alpha$  y  $\beta$  debido a que se manifiesta la conservación de masa total en cada punto del espacio, es decir,  $\alpha + \beta = 1$ , dado que para el tiempo inicial esta relación debe cumplirse en cada punto del espacio. Reescribimos las ecuaciones de reacción-difusión convirtiéndose en una sola ecuación, es decir

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \nabla^2 \alpha - \alpha(1 - \alpha)^2. \quad (1.18)$$

Resulta que esta ecuación es imposible de resolver analíticamente, sin embargo, podemos simplificar aún más considerando el sistema reacción-difusión en una dimensión. Tenemos entonces que

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} - \alpha(1 - \alpha)^2. \quad (1.19)$$

El análisis en 1D se procede asumiendo que la forma de la frente de onda emerge y se propaga a velocidad constante  $c$  [14]. La ecuación (1.19) podemos transformar en una ecuación diferencial ordinaria usando nuevas coordenadas de la forma  $\xi = x - ct$ . La ecuación de onda se convierte en

$$\frac{d^2 \alpha}{dz^2} + c \frac{d\alpha}{dz} - \alpha(1 - \alpha)^2 = 0, \quad (1.20)$$

con las condiciones a la frontera  $\alpha = 0$  para  $z \rightarrow -\infty$  y  $\alpha = 1$  para  $z \rightarrow +\infty$ .

La ecuación (1.20) tiene solución analítica [14, 15, 18]

$$\alpha = \frac{1}{1 + e^{-cz}}, \quad (1.21)$$

con la velocidad de la onda  $c = 1/\sqrt{2}$  [14, 15, 18].

Esta velocidad del frente de onda es muy importante porque trasciende dicha velocidad cuando tratemos el sistema reacción-difusión en 2D en el siguiente capítulo porque para procesos estables sus frentes tienden a  $c = 1/\sqrt{2}$ .

### 1.3 Caos

El resultado del caos ha recibido considerable atención en las últimas décadas. Durante los 1980s recibe un protagonismo generalizado, incluso algunos científicos lo han colocado a dos grandes revoluciones de la física teórica del siglo XX - Relatividad y Mecánica Cuántica [19]. Mientras esas teorías desafiaron el sistema dinámico Newtoniano, caos ha cuestionado creencias tradicionales dentro del marco de referencia Newtoniano.

El crecimiento del estudio del caos, la fascinante combinación de orden y desorden provocada por la inestabilidad; está vinculado con el rápido desarrollo de potentes computadoras. Dentro de los últimos cincuenta años, exitosas innovaciones en computación gráfica, es uno de los factores en el cual han habilitado a científicos y matemáticos para hacer progresos en sistemas no lineales donde aparece el caos.

A través de simulaciones reales por computadora y las técnicas del video, los científicos pueden ver ahora la evolución de sistemas dinámicos y los efectos caóticos complejos de la ecuaciones diferenciales fundamentales. El caos ha ganado bastante atención en muchas ramas de la ciencia. Estas incluyen campos tradicionales como la biología, física, química, matemáticas, astronomía, economía y geografía [19].

### 1.3.1 Antecedentes Históricos

Una importante excepción a la regla general de la linealidad fue el sistema de ecuaciones diferenciales derivados por el movimiento de los fluidos. El matemático suizo Leonard Euler publicó un artículo en 1755 con el título *Principios Generales del Movimiento de los Fluidos*, en el cual dió un conjunto de ecuaciones diferenciales para describir el movimiento de fluidos no viscosos [19]. Estos fueron posteriormente mejorados por el ingeniero Francés Claude Navier, cuando en 1821 publicó un artículo dando las ecuaciones y tomando en cuenta la viscosidad. Independientemente, en 1845 el físico matemático Británico George Gabriel Stokes derivó de alguna manera una hipótesis diferente a las mismas ecuaciones en un artículo titulado *Sobre las Teorías de la Fricción Interna del Movimiento de los Fluidos*. Estas son las famosas ecuaciones de Navier-Stokes [19], que son un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales los cuales son completamente generales en su aplicabilidad del movimiento de los fluidos y son de mayor importancia en problemas prácticos.

En los 1920s un meteorólogo inglés, Lewis Fry Richardson hizo un intento en calcular la solución de las ecuaciones especificando las condiciones iniciales y de la frontera usando métodos numéricos. El visualizó una orquesta de equipos humanos llevando a cabo un vasto número de cálculos bajo la batuta de los matemáticos. Su real necesidad fueron las potentes computadoras, aunque con el advenimiento del caos puso en señal de alerta a los modeladores que conociendo las condiciones iniciales y de la frontera de las ecuaciones diferenciales produce automáticamente un resultado real [19].

Durante los 1920s con la aparición de mecanismos eléctricos tales como amplificadores y osciladores, ilustraron mejor la necesidad de análisis no lineales. Después de la Segunda Guerra Mundial, John Von Neumann notó que la existencia de métodos matemáticos analíticos, son inadecuados para problemas no lineales y fue rápidamente visto el potencial ofrecido por las computadoras de alta velocidad. Para Von Neumann, los dispositivos heurísticos podría ser usado para discernir pistas en la búsqueda de construir propiedades basadas en la teoría de la no linealidad [19, 20].

La solución de problemas no lineales es notoriamente difícil. En dinámica de los fluidos, por ejemplo, el flujo estable de un fluido es bastante conocido. Pero el movimiento turbulento, tales como el movimiento rápido de agua, es un problema extremadamente complejo. Un problema abierto en la dinámica de los fluidos es la investigación de la relación entre turbulencia y caos.

### 1.3.2 ¿Qué es el Caos?

Inicialmente podemos caracterizar el caos como un comportamiento aparentemente aleatorio que proviene de reglas deterministas. Caos puede ser observado en muchos sistemas mecánicos básicos. Uno de estos es la variante de un péndulo simple, el cual el punto de giro se mueve de arriba hacia abajo. Para muchas frecuencias del punto de giro el péndulo se balancea de atrás y adelante con normalidad, pero a medida que el punto de giro se desacelera hacia abajo un punto es alcanzado donde el movimiento del péndulo se convierte en errático e impredecible [20]. En este punto el comportamiento regular periódico del péndulo da formas de movimiento caótico.

Tal vez el más conocido caso es la ecuación de diferencias de primer orden

$$x_{n+1} = \lambda x_n(1 - x_n), \quad (1.22)$$

usada en el crecimiento de poblaciones [20, 21]. Aquí  $x_n$  es un número entre 0 y 1 que representa a la fracción de individuos en un territorio, respecto de un número supuesto máximo posible, en el tiempo  $n$  y es medido sobre una escala entre 0 y 1. La presencia del término  $x_n^2$  hace la ecuación no lineal. Supongamos un valor inicial  $x_0$  elegido. Para valores del parámetro  $\lambda$  entre 0 y 3, el resultado del comportamiento de  $x_n$  tiende a un valor fijo estable cuando  $n$  tiende a infinito. Pero si  $\lambda$  es 3, se inicia la inestabilidad. El primer signo de esto es el comportamiento limitado de  $x_n$  oscilando entre dos valores. Para mayores incrementos de  $\lambda$ , el periodo 2 da paso a periodo 4, 8, 16 y así sucesivamente. Este es llamado el fenómeno de período doble. Finalmente, si  $\lambda$  se acerca a 3.57 es el inicio del caos.

### 1.3.3 Sensibilidad de las Condiciones Iniciales

Una característica esencial del caos en sistemas dinámicos no lineales es la extrema sensibilidad en las condiciones iniciales. Esto significa que dos conjuntos de condiciones iniciales en dicho sistema en el cual están muy cercanos, pueden dar lugar a diferentes estados para tiempos largos. Ya que en la naturaleza las condiciones iniciales no pueden ser conocidas exactamente, pero solo con precisión limitada; se deduce que la predicción del comportamiento a tiempo largo deben fallar para sistemas no lineales en estados caóticos. La sensibilidad de las condiciones iniciales en sistemas no lineales, es popularmente conocido como el *efecto mariposa*, porque un simple aleteo de las alas de las mariposas podrán teóricamente alterar las condiciones iniciales del sistema meteorológico y esto podría aumentar drásticamente diferentes patrones meteorológicos para un tiempo posterior. Frase acuñada por Edward Norton Lorenz [20] que proviene del proverbio chino *el aleteo de las alas de una mariposa se puede sentir al otro lado del mundo*. Henri Poincaré, eminente científico Francés, estaba enterado de este fenómeno cuando escribió en 1903 sobre el estudio del sistema

planetario, *Puede suceder que pequeñas diferencias en las condiciones iniciales produce grandes fenómenos lineales. Un pequeño error al comienzo producirá un enorme error después. La predicción se hace imposible* [19].

### 1.3.4 Intermitencia

Para detectar el comportamiento caótico se aplican varios métodos, pero el más usual es el de utilizar el modelo llamado análisis de series temporales, como el diagrama de bifurcaciones, que hace aparecer una secuencia de desdoblamiento del periodo. Si embargo, habrá que tomar en cuenta que incluso en la ausencia de desdoblamiento de periodo no se puede descartar el caos, porque éste puede aparecer bruscamente debido a fenómenos de intermitencia, como las salvas de estática que nos interrumpen a veces mientras escuchamos algún programa en la radio o la televisión, motivada por el taladro eléctrico del vecino o por una tormenta que se acerca. Esto también puede ocurrir con una red de procesadores paralelos, ya que pueden producir resultados diferentes y aleatorios a partir del mismo cálculo, no por el diseño de la red sino porque la intermitencia que es inherente a la complejidad de las redes que contienen rizados de realimentación no lineal. Algunos científicos creen que estos estallidos de intermitencia revelan que las vastas redes de computación siempre están sujetas a espasmos de caos [22].

Vale la pena describir brevemente otra ruta al caos para comparar la cascada de duplicación de periodos y el nacimiento de un atractor caótico en una explosión homoclínica. Y al igual que ocurre con la ruta de duplicación de periodo, hay de nuevo características universales de esta ruta que son independientes de los detalles finos de la dinámica [23].

Hay toda una variedad de fenómenos empíricos en los que hay periodos de comportamiento casi regular interrumpido a intervalos, aparentemente aleatorios, por brotes de un comportamiento mucho menos regular. Un ejemplo espectacular es la reacción química de Belousov-Zhabotinsky [24, 25, 26]. Investigadores han observado en fluidos convectivos como en una celda de Rayleigh-Bénard, una transición intermitente a la turbulencia. Este tipo de transición a la turbulencia también está presente en los sistemas dinámicos disipativos como el modelo de Lorenz [27, 28]. Trabajos de los efectos del ruido como los espectros de potencia en frecuencias bajas de órbitas caóticas se presentan transiciones intermitentes [29].



## 2

# Resultados

Para resolver las ecuaciones de reacción-difusión cúbica en 2D usaremos los métodos numéricos presentados anteriormente, buscaremos soluciones de frentes planos que se propagan en una dirección y obtendremos las condiciones de inestabilidad de dichos frentes. Debido a la inestabilidad de los frentes planos, aparecerán nuevos estados de propagación que ya no serán planos. Variando la relación de coeficientes de difusión  $\delta = D_A/D_B$  y el ancho  $l_y$  del tubo obtendremos dichas inestabilidades. A este conjunto de variables  $\delta$  y  $l_y$  estableceremos un patrón de búsqueda de inestabilidades.

Los resultados en este trabajo de investigación han requerido un uso extensivo de recursos computacionales. Entonces, usando el servidor ubicado en el departamento de Física así como el sistema de super cómputo Legión ambas de la Pontificia Universidad Católica del Perú; hemos llegado a resultados satisfactorios en un tiempo relativamente corto.

## 2.1 Reacción-Difusión Cúbica en 2D

Primero planteamos las ecuaciones de reacción-difusión para la reacción  $A+2B \rightarrow 3B$  en dos dimensiones para un tubo rectangular finito.

Sea  $\alpha = \alpha(x, y, t)$  y  $\beta = \beta(x, y, t)$ , concentraciones de especies  $A$  y  $B$  con coeficientes de difusión  $D_A$  y  $D_B$  respectivamente. Además también sean las funciones no lineales  $f(\alpha, \beta) = -\alpha\beta^2$  y  $g(\alpha, \beta) = +\alpha\beta^2$  que corresponden a las reacciones. Entonces las ecuaciones del sistema reacción-difusión cúbica son [18]

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = f(\alpha, \beta) + D_A \left( \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial y^2} \right), \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = g(\alpha, \beta) + D_B \left( \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2} \right), \quad (2.2)$$

donde tenemos cuatro condiciones en la frontera, es decir, dos condiciones de Dirichlet en los extremos del tubo y dos condiciones de Neumann en los costados del tubo. Por tanto,

las condiciones iniciales son

$$\begin{aligned} \alpha(x, y, 0) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x/2 \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y, \\ \alpha(x, y, 0) = 1 & \quad \text{para} \quad l_x/2 \leq x \leq l_x \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y, \\ \beta(x, y, 0) = 1 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x/2 \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y, \\ \beta(x, y, 0) = 0 & \quad \text{para} \quad l_x/2 \leq x \leq l_x \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y, \end{aligned}$$

y las condiciones en la frontera son

Condiciones de Dirichlet

$$\begin{aligned} \alpha(0, y, t) = 0 \quad \text{y} \quad \alpha(l_x, y, t) = 1 & \quad \text{para} \quad 0 \leq y \leq l_y, \\ \beta(0, y, t) = 1 \quad \text{y} \quad \beta(l_x, y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq y \leq l_y, \end{aligned}$$

Condiciones de Neumann

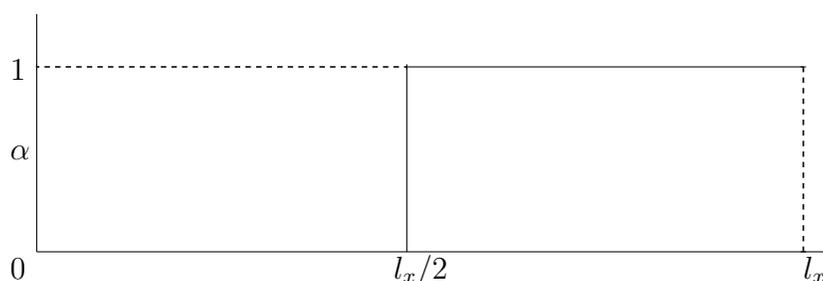
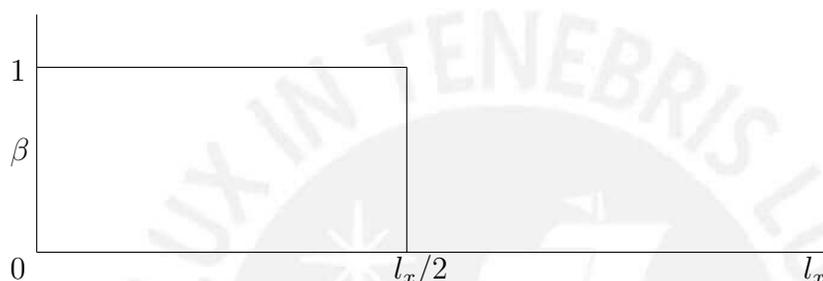
$$\begin{aligned} \alpha_y(x, 0, t) = 0 \quad \text{y} \quad \alpha_y(x, l_y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x, \\ \beta_y(x, 0, t) = 0 \quad \text{y} \quad \beta_y(x, l_y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x. \end{aligned}$$

En la figuras (2.1) y (2.2) visualizamos la forma de las condiciones iniciales vistas de perfil.

Los frentes planos se refieren a que los frentes de onda se manifiestan como superficies planas perpendiculares en la dirección de movimiento, es decir, a lo largo del tubo expandiéndose a lo largo del tiempo y alejándose de la fuente. Estos frentes planos son los frentes en una dimensión. Solo dependen de  $x$  y no dependen de  $y$ , por lo que obedecen a las ecuaciones en una dimensión. Los frentes no planos tiene la misma característica que los frentes planos con la diferencia que los frentes no planos son superficies curvas pero paralelas entre ellas.

Fácilmente podemos resolver con técnicas numéricas apropiadas estas dos ecuaciones diferenciales parciales acopladas y obtener por tanto la propagación de los frentes de  $\alpha$  y  $\beta$ . Pero vienen varias preguntas. ¿Cuál es la solución de los frentes planos? ¿Cuáles son las condiciones de inestabilidad de los frentes? ¿Para qué valores de  $\delta$  y  $l_y$  los frentes planos son inestables? ¿Cuál es el valor crítico  $\delta_c$  para transiciones entre distintos tipos de frentes planos? ¿Cuando la propagación de los frentes se vuelven caóticos?

Para responder a estas preguntas, lo primero que debemos hacer es buscar la inestabilidad de los frentes planos usando las variables  $\delta = D_A/D_B$  y el ancho  $l_y$  del tubo.

Figure 2.1: Condición inicial  $\alpha$  vista de perfil.Figure 2.2: Condición inicial  $\beta$  vista de perfil.

## 2.2 Perturbando la Solución Plana

Para poder explorar el comportamiento de  $\alpha(x, y, t)$  y  $\beta(x, y, t)$ , podemos expandir dichas funciones mediante una doble serie de Fourier. Es decir

$$\alpha(x, y, t) = \alpha_0(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} [\alpha_n(x, t) \cos \frac{n\pi y}{l_y} + \alpha'_n(x, t) \sin \frac{n\pi y}{l_y}], \quad (2.3)$$

$$\beta(x, y, t) = \beta_0(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} [\beta_n(x, t) \cos \frac{n\pi y}{l_y} + \beta'_n(x, t) \sin \frac{n\pi y}{l_y}]. \quad (2.4)$$

Si aplicamos las condiciones de Neumann a las ecuaciones (2.3) y (2.4) y para que cumpla dichas condiciones necesariamente debe cumplirse que  $\alpha'_n(x, t) = 0$  y  $\beta'_n(x, t) = 0$ . Entonces, las nuevas series de fourier son

$$\alpha(x, y, t) = \alpha_0(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n(x, t) \cos \frac{n\pi y}{l_y}, \quad (2.5)$$

$$\beta(x, y, t) = \beta_0(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(x, t) \cos \frac{n\pi y}{l_y}. \quad (2.6)$$

Aquí,  $\alpha_0(x, t)$  y  $\beta_0(x, t)$ , son las concentraciones del sistema reacción-difusión en una dimensión que mas adelante verificaremos que corresponden a las soluciones del frente plano en dos dimensiones. Significa entonces, que a estas soluciones le aplicamos un efecto perturbativo que corresponde a las sumatorias en las ecuaciones (2.5) y (2.6). Iniciaremos con el estudio de perturbaciones que corresponda al primer término en la expansión de Fourier. Es decir

$$\alpha(x, y, t) = \alpha_0(x, t) + \alpha_1(x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y}, \quad (2.7)$$

$$\beta(x, y, t) = \beta_0(x, t) + \beta_1(x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y}. \quad (2.8)$$

posteriormente veremos que este estudio se puede generalizar a cada uno de los otros términos de la serie.

Sea entonces  $\bar{\alpha}(x, y, t)$  y  $\bar{\beta}(x, y, t)$  las variables perturbativas. Es decir

$$\bar{\alpha}(x, y, t) = \alpha_1(x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y}, \quad (2.9)$$

$$\bar{\beta}(x, y, t) = \beta_1(x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y}. \quad (2.10)$$

Reemplazemos (2.7) y (2.8) en (2.1) y (2.2) respectivamente tenemos

$$\frac{\partial \alpha_0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \cos \frac{\pi y}{l_y} = D_A \frac{\partial^2 \alpha_0}{\partial x^2} + D_A \left[ \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2} - \frac{\pi^2}{l_y^2} \alpha_1 \right] \cos \frac{\pi y}{l_y} + f(\alpha, \beta) \quad (2.11)$$

y

$$\frac{\partial \beta_0}{\partial t} + \frac{\partial \beta_1}{\partial t} \cos \frac{\pi y}{l_y} = D_B \frac{\partial^2 \beta_0}{\partial x^2} + D_B \left[ \frac{\partial^2 \beta_1}{\partial x^2} - \frac{\pi^2}{l_y^2} \beta_1 \right] \cos \frac{\pi y}{l_y} + g(\alpha, \beta) \quad (2.12)$$

Ahora expandamos por serie de Taylor las funciones  $f(\alpha, \beta)$  y  $g(\alpha, \beta)$  e incluyamos los efectos perturbativos solo hasta primer orden de la derivada

$$f(\alpha, \beta) = f(\alpha_0 + \bar{\alpha}, \beta_0 + \bar{\beta}) = f(\alpha_0, \beta_0) + \frac{\partial f}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} \bar{\alpha} + \frac{\partial f}{\partial \beta} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} \bar{\beta},$$

y

$$g(\alpha, \beta) = g(\alpha_0 + \bar{\alpha}, \beta_0 + \bar{\beta}) = g(\alpha_0, \beta_0) + \frac{\partial g}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} \bar{\alpha} + \frac{\partial g}{\partial \beta} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} \bar{\beta},$$

pero como  $f(\alpha, \beta) = -\alpha\beta^2$  y  $g(\alpha, \beta) = +\alpha\beta^2$  entonces

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} &= -\beta_0^2 \\ \frac{\partial f}{\partial \beta} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} &= -2\alpha_0\beta_0 \\ \frac{\partial g}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} &= +\beta_0^2 \\ \frac{\partial g}{\partial \beta} \Big|_{\alpha_0, \beta_0} &= +2\alpha_0\beta_0\end{aligned}$$

por lo tanto

$$f(\alpha, \beta) = f(\alpha_0 + \bar{\alpha}, \beta_0 + \bar{\beta}) = -\alpha_0\beta_0^2 - \beta_0^2\alpha_1 \cos \frac{\pi y}{l_y} - 2\alpha_0\beta_0\beta_1 \cos \frac{\pi y}{l_y}, \quad (2.13)$$

$$g(\alpha, \beta) = g(\alpha_0 + \bar{\alpha}, \beta_0 + \bar{\beta}) = +\alpha_0\beta_0^2 + \beta_0^2\alpha_1 \cos \frac{\pi y}{l_y} + 2\alpha_0\beta_0\beta_1 \cos \frac{\pi y}{l_y}, \quad (2.14)$$

reemplazemos (2.13) en (2.11) y (2.14) en (2.12) y agrupando términos de forma que

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_0}{\partial t} + \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} \cos \frac{\pi y}{l_y} &= -\alpha_0\beta_0^2 + D_A \frac{\partial^2 \alpha_0}{\partial x^2} + \\ &+ \left[ D_A \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2} - \frac{\pi^2}{l_y^2} \alpha_1 - \beta_0^2 \alpha_1 - 2\alpha_0\beta_0\beta_1 \right] \cos \frac{\pi y}{l_y},\end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \beta_0}{\partial t} + \frac{\partial \beta_1}{\partial t} \cos \frac{\pi y}{l_y} &= +\alpha_0\beta_0^2 + D_B \frac{\partial^2 \beta_0}{\partial x^2} + \\ &+ \left[ D_B \frac{\partial^2 \beta_1}{\partial x^2} - \frac{\pi^2}{l_y^2} \beta_1 + \beta_0^2 \alpha_1 + 2\alpha_0\beta_0\beta_1 \right] \cos \frac{\pi y}{l_y}.\end{aligned} \quad (2.16)$$

Haciendo las identidades correspondientes en las ecuaciones (2.15) y (2.16), se deducen un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales parciales en una dimensión.

$$\frac{\partial \alpha_0}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 \alpha_0}{\partial x^2} - \alpha_0\beta_0^2, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial \beta_0}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 \beta_0}{\partial x^2} + \alpha_0\beta_0^2, \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 \alpha_1}{\partial x^2} - D_A \frac{\pi^2}{l_y^2} \alpha_1 - \beta_0^2 \alpha_1 - 2\alpha_0\beta_0\beta_1, \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial \beta_1}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 \beta_1}{\partial x^2} - D_B \frac{\pi^2}{l_y^2} \beta_1 + \beta_0^2 \alpha_1 + 2\alpha_0 \beta_0 \beta_1. \quad (2.20)$$

Las ecuaciones (2.17) y (2.18) son las ecuaciones del sistema reacción-difusión cúbica en una dimensión, mientras que las ecuaciones (2.19) y (2.20) son las perturbaciones aplicadas al sistema de reacción-difusión en dos dimensiones. En estas dos últimas ecuaciones está incluido el ancho  $l_y$  del tubo como una constante en el que será relevante para determinar estabildades o inestabildades en el sistema.

Determinemos ahora las nuevas condiciones iniciales y de frontera para el nuevo sistema de ecuaciones

Condiciones de Dirichlet

para  $\alpha(0, y, t) = 0$  es

$$\alpha(0, y, t) = \alpha_0(0, t) + \alpha_1(0, t) \cos \frac{\pi y}{l_y} = 0 \Rightarrow \alpha_0(0, t) = \alpha_1(0, t) = 0,$$

para  $\alpha(l_x, y, t) = 1$  es

$$\alpha(l_x, y, t) = \alpha_0(l_x, t) + \alpha_1(l_x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y} = 1 \Rightarrow \alpha_0(l_x, t) = 1 \text{ y } \alpha_1(l_x, t) = 0,$$

para  $\beta(0, y, t) = 1$  es

$$\beta(0, y, t) = \beta_0(0, t) + \beta_1(0, t) \cos \frac{\pi y}{l_y} = 1 \Rightarrow \beta_0(0, t) = 1 \text{ y } \beta_1(0, t) = 0,$$

para  $\beta(l_x, y, t) = 0$  es

$$\beta(l_x, y, t) = \beta_0(l_x, t) + \beta_1(l_x, t) \cos \frac{\pi y}{l_y} = 0 \Rightarrow \beta_0(l_x, t) = \beta_1(l_x, t) = 0.$$

Condiciones iniciales

$$\begin{aligned} \alpha_0(x, 0) &= 0 & \text{para } 0 \leq x \leq l_x/2 \\ \alpha_0(x, 0) &= 1 & \text{para } l_x/2 \leq x \leq l_x \\ \beta_0(x, 0) &= 1 & \text{para } 0 \leq x \leq l_x/2 \\ \beta_0(x, 0) &= 0 & \text{para } l_x/2 \leq x \leq l_x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \alpha_1(x, 0) &= +0.001 & \text{para } x = l_x/2 \\ \beta_1(x, 0) &= -0.001 & \text{para } x = l_x/2 \\ \alpha_1(x, 0) + \beta_1(x, 0) &= 0 & \text{para } x = l_x/2 \end{aligned}$$

Las condiciones iniciales para  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  son el efecto perturbativo que se da a la solución del sistema de reacción-difusión cúbica en una dimensión. Las soluciones de los frentes en una dimensión corresponden a las soluciones del frente plano en dos dimensiones. Por lo tanto, tenemos un sistema de reacción-difusión de cuatro variables  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$ ,  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  en una dimensión, en vez de un sistema en dos dimensiones. Resolveremos numéricamente el sistema de ecuaciones (2.17), (2.18), (2.19) y (2.20) aplicando método de diferencias finitas de modo explícito.

## 2.3 Solución por el Método Explícito

Como explicamos en el capítulo anterior, utilizamos este método por la facilidad de implementar el código y la rapidez relativa cuando ejecutamos la simulación. Entonces, resolvemos el sistema de ecuaciones (2.17),(2.18),(2.19) y (2.20) aplicando dicho método. Haciendo diferencia finita central en el espacio y diferencia finita por la derecha para el tiempo, tenemos

$$\frac{\alpha_{0,i}^{j+1} - \alpha_{0,i}^j}{\Delta t} = D_A \frac{\alpha_{0,i+1}^j - 2\alpha_{0,i}^j + \alpha_{0,i-1}^j}{\Delta x^2} - \alpha_{0,i}^j (\beta_{0,i}^j)^2 \quad (2.21)$$

$$\frac{\beta_{0,i}^{j+1} - \beta_{0,i}^j}{\Delta t} = D_B \frac{\beta_{0,i+1}^j - 2\beta_{0,i}^j + \beta_{0,i-1}^j}{\Delta x^2} + \alpha_{0,i}^j (\beta_{0,i}^j)^2 \quad (2.22)$$

$$\frac{\alpha_{1,i}^{j+1} - \alpha_{1,i}^j}{\Delta t} = D_A \frac{\alpha_{1,i+1}^j - 2\alpha_{1,i}^j + \alpha_{1,i-1}^j}{\Delta x^2} - D_A \frac{\pi^2}{l_y^2} \alpha_{1,i}^j - (\beta_{0,i}^j)^2 \alpha_{1,i}^j - 2\alpha_{0,i}^j \beta_{0,i}^j \beta_{1,i}^j \quad (2.23)$$

$$\frac{\beta_{1,i}^{j+1} - \beta_{1,i}^j}{\Delta t} = D_B \frac{\beta_{1,i+1}^j - 2\beta_{1,i}^j + \beta_{1,i-1}^j}{\Delta x^2} - D_B \frac{\pi^2}{l_y^2} \beta_{1,i}^j + (\beta_{0,i}^j)^2 \alpha_{1,i}^j + 2\alpha_{0,i}^j \beta_{0,i}^j \beta_{1,i}^j \quad (2.24)$$

$$\text{Haciendo} \quad k_\alpha = \frac{D_A \Delta t}{\Delta x^2} \quad \text{y} \quad k_\beta = \frac{D_B \Delta t}{\Delta x^2}$$

Despejemos de las ecuaciones (2.21),(2.22),(2.23) y (2.24) las variables  $\alpha_{0,i}^{j+1}$ ,  $\beta_{0,i}^{j+1}$ ,  $\alpha_{1,i}^{j+1}$  y  $\beta_{1,i}^{j+1}$  respectivamente y acomodando variables tenemos

$$\alpha_{0,i}^{j+1} = (1 - 2k_\alpha) \alpha_{0,i}^j + k_\alpha (\alpha_{0,i+1}^j + \alpha_{0,i-1}^j) - \alpha_{0,i}^j (\beta_{0,i}^j)^2 \Delta t \quad (2.25)$$

$$\beta_{0,i}^{j+1} = (1 - 2k_\beta) \beta_{0,i}^j + k_\beta (\beta_{0,i+1}^j + \beta_{0,i-1}^j) + \alpha_{0,i}^j (\beta_{0,i}^j)^2 \Delta t \quad (2.26)$$

$$\alpha_{1,i}^{j+1} = (1 - 2k_\alpha) \alpha_{1,i}^j + k_\alpha (\alpha_{1,i+1}^j + \alpha_{1,i-1}^j) - \left[ D_A \frac{\pi^2}{l_y^2} \alpha_{1,i}^j + (\beta_{0,i}^j)^2 \alpha_{1,i}^j + 2\alpha_{0,i}^j \beta_{0,i}^j \beta_{1,i}^j \right] \Delta t \quad (2.27)$$

$$\beta_{1,i}^{j+1} = (1 - 2k_\beta)\beta_{1,i}^j + k_\beta(\beta_{1,i+1}^j + \beta_{1,i-1}^j) - \left[ D_B \frac{\pi^2}{l_y^2} \beta_{1,i}^j - (\beta_{0,i}^j)^2 \alpha_{1,i}^j - 2\alpha_{0,i}^j \beta_{0,i}^j \beta_{1,i}^j \right] \Delta t \quad (2.28)$$

Implementamos un código en FORTRAN90, para dar la solución a este sistema de cuatro ecuaciones. El código figura en el apéndice y toma el nombre de `exp_ab.f90`. Para encontrar la inestabilidad, consideramos fijo la longitud del tubo  $l_x = 1500$  y variamos el ancho  $l_y$  del tubo en un rango de 7 a 16. El tiempo de simulación es de  $t = 1500$  con pasos de tiempo de  $\Delta t = 0.01$ ,  $\delta = 5$  y  $\Delta x = 0.5$ . Tomando en cuenta las mismas condiciones iniciales y de frontera indicadas en la sección anterior, debemos esperar que para  $l_y$  en el rango indicado; tanto  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  en el tiempo el sistema tenga comportamiento estable o inestable. Es decir, si las perturbaciones  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  decrecen con el tiempo, el sistema es estable. En caso contrario, estas crecerán monótonamente indicando la inestabilidad del frente. Cerca de la inestabilidad los cálculos numéricos toman bastante tiempo de cómputo, por lo que demora encontrar la transición con precisión adecuada.

Estudiamos el comportamiento de las perturbaciones  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  para dos valores distintos de  $l_y$ : 5 y 12, obteniendo evoluciones temporales muy distintas en cada caso. En las figuras (2.3) y (2.4) vemos que  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  decrecen y tienden a cero en el tiempo a medida que avanzan en el tubo, por lo tanto podemos decir que para ese ancho  $l_y = 7$  y  $\delta = 5$  es estable. La forma muy peculiar de la evolución de  $\beta_1$  se debe al carácter no lineal de  $\beta_0$  que es  $\beta_0^2$ . También influye la relación  $\delta = D_A/D_B$  debido a que son difusiones diferentes. En este caso  $D_A = 1$  y  $D_B = 0.2$ . Ahora si vemos las figuras (2.5) y (2.6),  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  se incrementan en el tiempo a medida que avanza en el tubo, lo que quiere decir que para  $l_y = 12$  y  $\delta = 5$  es inestable. También observamos en estas gráficas los comportamientos de las perturbaciones de  $\alpha_1$  y  $\beta_1$  para los mismos tiempos lo cual indica que el frente plano perderá estabilidad para  $l_y$  entre 7 y 12. Pudimos haber elegido otras longitudes para explicar los comportamientos de estas perturbaciones, porque tienen el mismo comportamiento evolutivo.

Si repetimos el mismo procedimiento para otros valores de  $\delta$ , tendremos otros valores de  $l_y$  donde encontramos la transición a la inestabilidad. Ahora analizemos la forma de crecimiento o decrecimiento de  $\alpha_1$  y  $\beta_1$ , tomando solo sus valores máximos. Pudimos haber tomado otros valores pero sería difícil identificarlos. Además dichos valores también es solución del sistema reacción-difusión con perturbación.

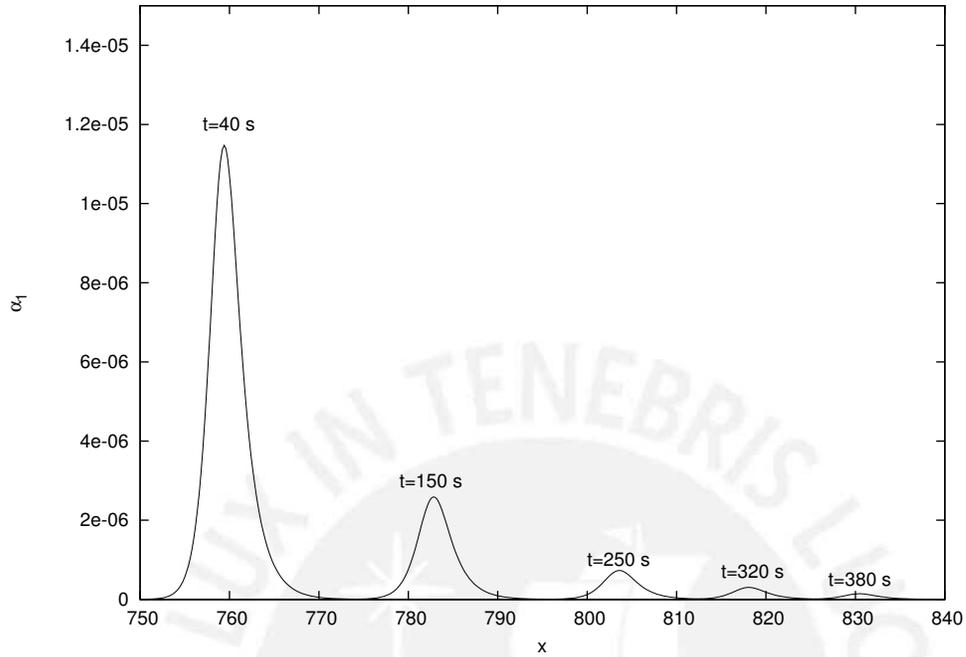


Figure 2.3:  $\alpha_1$  decrece para  $l_x = 1500$ ,  $l_y = 7$  y  $\delta = 5$

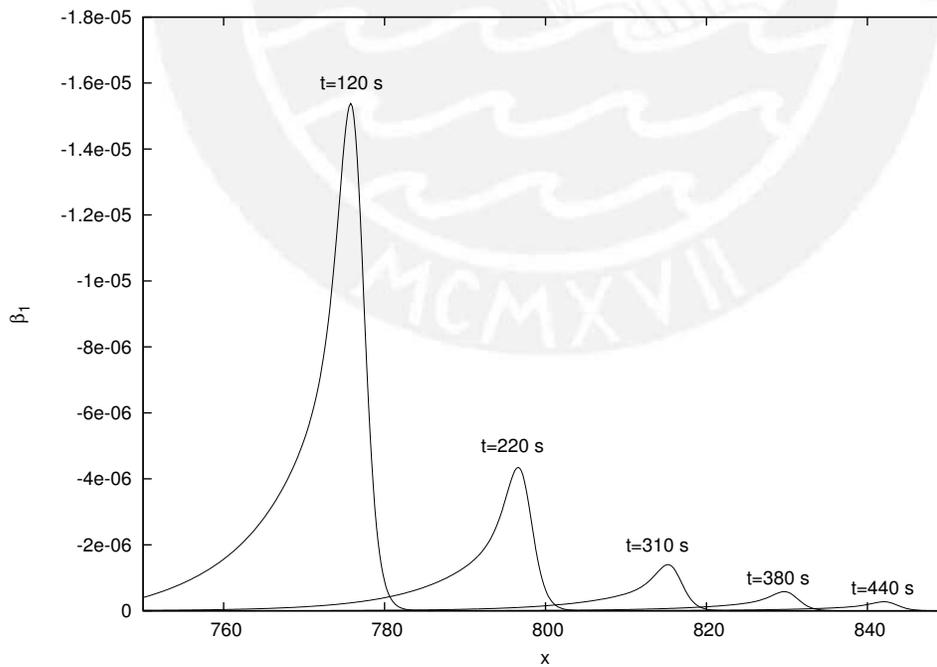


Figure 2.4:  $\beta_1$  decrece para  $l_x = 1500$ ,  $l_y = 7$  y  $\delta = 5$

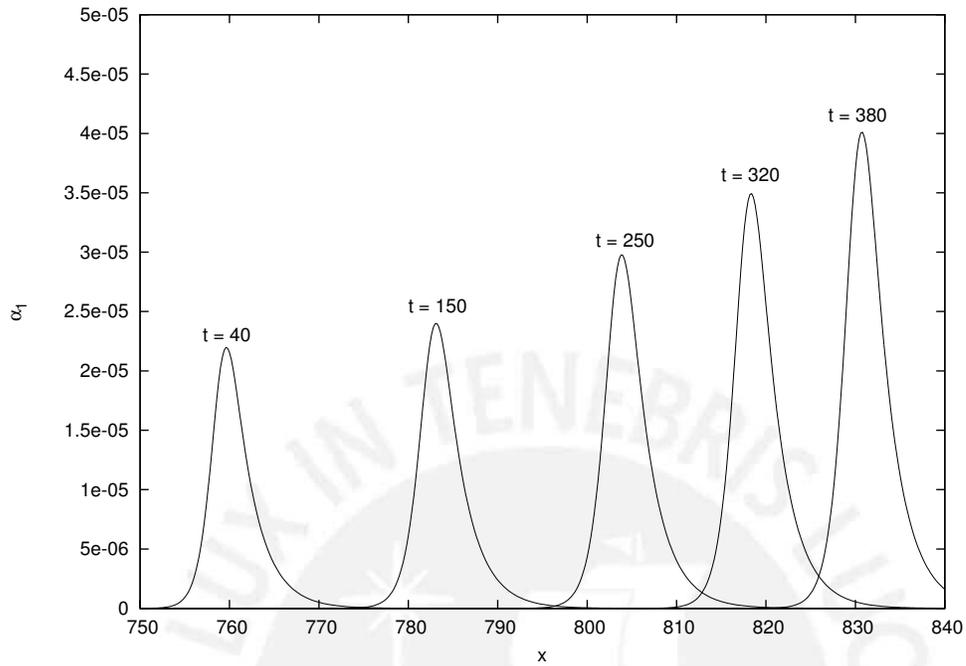


Figure 2.5:  $\alpha_1$  aumenta para  $l_x = 1500, l_y = 12$  y  $\delta = 5$

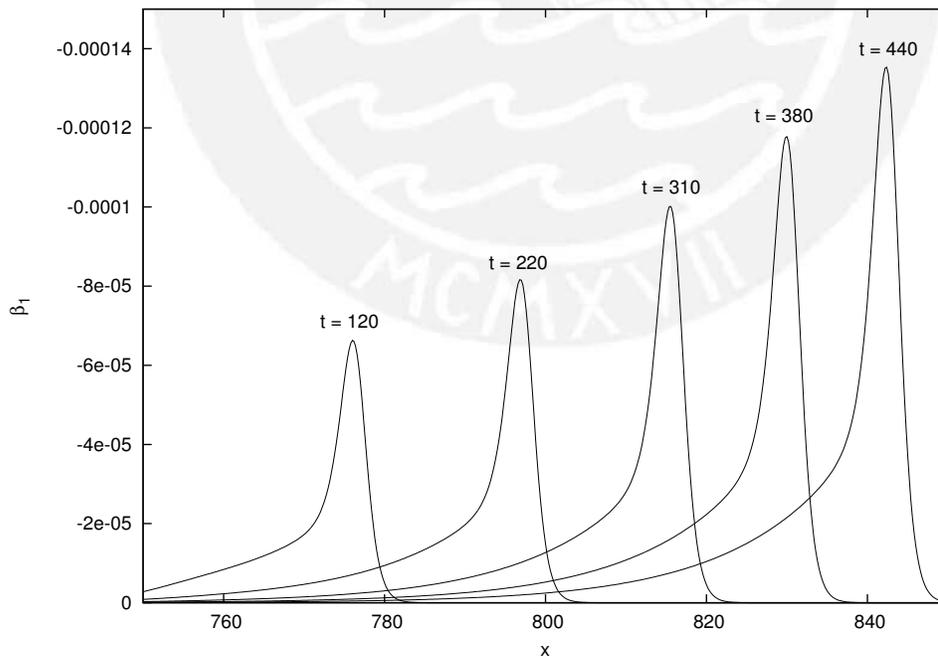


Figure 2.6:  $\beta_1$  aumenta para  $l_x = 1500, l_y = 12$  y  $\delta = 5$

## 2.4 $\alpha_{max}$ en Función del Tiempo

Como mencionamos en la sección anterior, podemos elegir solo los picos máximos tanto para  $\alpha_1$  como  $\beta_1$  para caracterizar el comportamiento de las perturbaciones. Estos valores los denotaremos por  $\alpha_{max}$  y  $\beta_{max}$  respectivamente. El análisis que haremos solo será para  $\alpha_{max}$  debido a que el comportamiento de  $\beta_{max}$  tendrá las mismas características pero en el lado negativo. Entonces, eso significa por ejemplo que para  $l_y = 7$  por cada tiempo habrá un  $\alpha_{max}$  tal como observamos en la figura (2.3) y tenderá a cero. Pero si elegimos  $l_y = 12$ , ocurrirá lo contrario que  $\alpha_{max}$  crecerá. ver figura (2.5).

En el mismo código `exp_ab.f90` implementamos la búsqueda de máximos por cada paso del tiempo y generamos una tabla de pares ordenados  $(t, \alpha_{max})$ . Esta simulación lo efectuamos para  $l_x = 1500$  con pasos de  $\Delta x = 0.2$ ,  $t = 1000$  de tiempo con incremento de  $\Delta t = 0.01$  y  $\delta = 5$ .

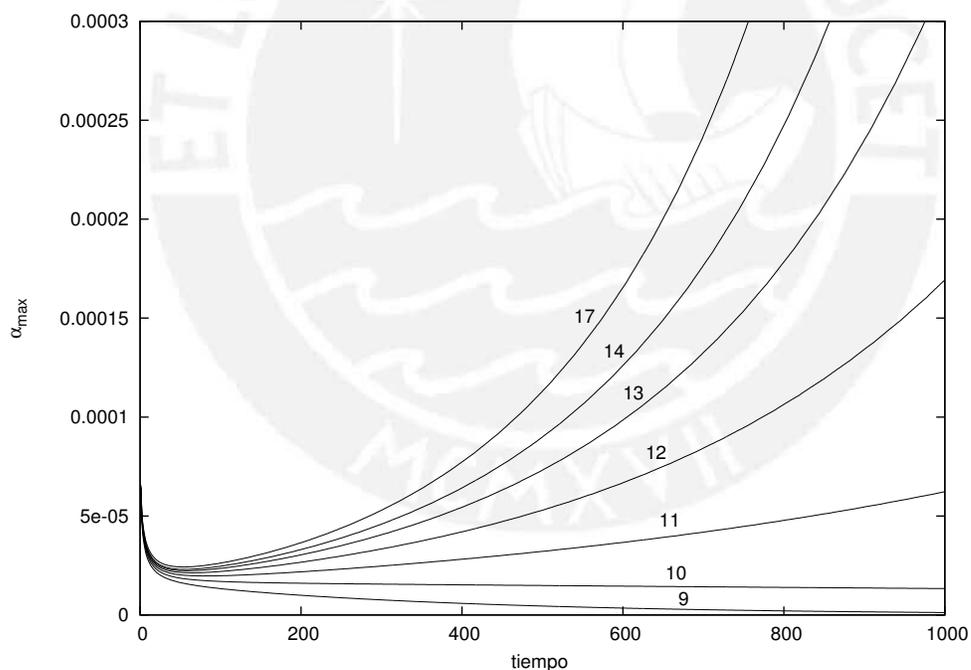


Figure 2.7: para  $l_x = 1500$ ,  $\delta = 5$  y  $t = 1000$

En la figura (2.7) vemos el paso de los frentes de estables a inestables, es decir, variando desde  $l_y = 9$  hasta  $l_y = 17$  para  $\delta = 5$ . Analizando con más detalle tenemos que para  $l_y = 9$ ,  $\alpha_{max}$  tiende a cero en el tiempo. A medida que aumenta  $l_y$  observamos que  $\alpha_{max}$  tiende a ser constante en el tiempo que para este caso no es

$l_y = 10$  pero si podemos decir que es una aproximación. Dado que estamos trabajando con procesos numéricos no podemos determinar con exactitud  $l_y$  donde  $\alpha_{max}$  cambie su comportamiento de creciente a decreciente. Si seguimos aumentando  $l_y$  ahora observamos claramente que  $\alpha_{max}$  crece en el tiempo, lo que verificamos que el frente es inestable. En la misma figura (2.7) vemos las inestabilidades para mayores que  $l_y = 10$ . Esta simulación la podemos repetir para  $l_x = 1500$  y otro  $\delta$ . Entonces, encontraremos otro ancho  $l_y$  del tubo en el que los frentes pasan de estables a inestables. En el código `exp_ab.f90` podemos cambiar el valor de  $\delta$  y buscaremos otro ancho  $l_y$  aproximadamente donde habrá dicha transición.

De acuerdo con el artículo de J.H. Merkin [17] el comportamiento evolutivo del frente ya sea estable o inestable es de modo exponencial para tiempos grandes, es decir  $e^{\sigma t}$ , donde  $\sigma$  es una constante que debemos encontrar. Por lo tanto, en la figura (2.8) cambiamos  $\alpha_{max}$  por  $\log \alpha_{max}$  en función del tiempo  $t$  y observamos que para tiempos largos tiene comportamiento lineal. Entonces, si aplicamos mínimos cuadrados, la ecuación que debemos ajustar es

$$\log \alpha_{max} = \nu + \sigma t \quad (2.29)$$

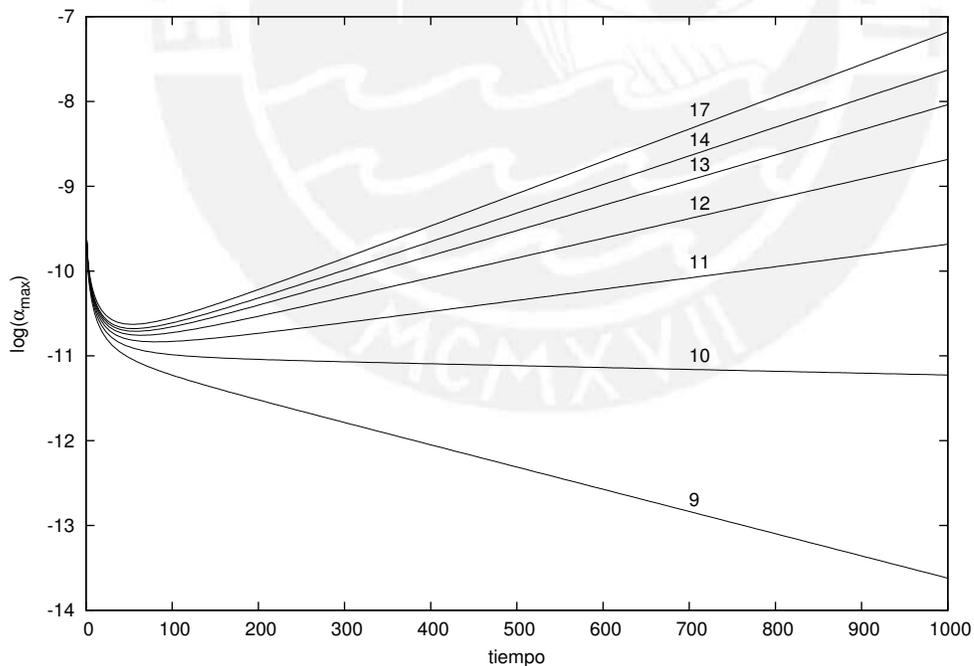


Figure 2.8: para  $l_x = 1500$ ,  $\delta = 5$  y  $t = 1000$

De la ecuación (2.29) nos interesa la pendiente  $\sigma$

$$\sigma = \frac{n \sum t_i \log \alpha_{max_i} - \sum t_i \sum \log \alpha_{max_i}}{n \sum t_i^2 - (\sum t_i)^2} \quad (2.30)$$

Para justificar la linealidad calculamos el coeficiente de correlación  $r$  de la forma

$$r = \frac{n \sum t_i \log \alpha_{max_i} - \sum t_i \sum \log \alpha_{max_i}}{\sqrt{n \sum t_i^2 - (\sum t_i)^2} \sqrt{n \sum (\log \alpha_{max_i})^2 - (\sum \log \alpha_{max_i})^2}} \quad (2.31)$$

$l_y$	pendiente $\sigma$	Coef. Correlación $r$
07.0	-1.2606495177984475E-002	-0.99990452142013575
08.0	-6.4118404912114286E-003	-0.99965452405666977
09.0	-2.6157658914421514E-003	-0.99803759268330638
10.0	-2.2383826813105105E-004	-0.81612869990186176
11.0	1.3193910070417355E-003	0.99333246578897205
12.0	2.3268032491307153E-003	0.99793691146845098
13.0	2.9740464265072962E-003	0.99880687597669593
14.0	3.3765642351274733E-003	0.99907284386141582
15.0	3.6187888125221858E-003	0.99922365912691713
16.0	3.7493050047413541E-003	0.99932672542673007
17.0	3.8068316976039526E-003	0.99936484572087581

Tabla 2.1: El coeficiente de correlación se aproxima a  $r = \pm 1$

Para encontrar la pendiente  $\sigma$  hemos elegido los datos de  $\alpha_{max_i}$  en un intervalo de pasos de tiempo largo entre [99001, 100000]. Es decir, con  $n = 1000$  datos efectuamos el ajuste lineal. En la tabla (2.1) mostramos los resultados de  $\sigma$  con su respectivo coeficiente de correlación  $r$  en el que tiende a  $\pm 1$ . Por lo tanto, decimos que existe un buen ajuste a la función lineal. Luego  $\alpha_{max}$  escribimos como

$$\alpha_{max} = Ce^{\sigma t} \quad (2.32)$$

Entonces, como observamos en las figuras (2.7) ó (2.8), para cada  $l_y$  tenemos un valor de  $\sigma$  correspondiente y esta variable se relaciona  $\alpha_{max}$  de la forma (2.32).

## 2.5 $\sigma$ Relación de Dispersión

En esta sección analizamos con más detalle el comportamiento de  $\sigma$  en función del ancho  $l_y$  del tubo para diferentes valores de  $\delta$ . En la figura (2.8) vemos que para  $\delta = 5$ , al variar  $l_y$ ,  $\sigma$  toma pendientes diferentes que pueden ser negativas o positivas. Si  $\sigma$  es negativo el sistema es estable y si es positivo, es inestable. Ahora bien si se elige otro  $\delta = 8$  por ejemplo, se intuye que será el mismo comportamiento como el de  $\delta = 5$ , pero con la diferencia que en la transición a la inestabilidad será para otro  $l_y$ .

Entonces si elegimos  $\delta = 5$  por ejemplo, podemos construir una curva en función de  $l_y$ , donde podemos variar desde valores muy pequeños hasta valores muy grandes con tamaños de paso menores que 1 de tal manera que veamos dicha curva como algo continuo. Pero además de la ecuación (2.9) donde incluimos el primer término de Fourier, podemos definir el número de onda  $k$  en términos del ancho del tubo  $l_y$  como

$$k = \frac{\pi}{l_y} \quad (2.33)$$

La ventaja de esta definición es que el análisis en términos de  $k$  sería también válido para los otros términos de Fourier, donde el valor de  $k$  incluiría el orden  $n$  de la expansión. Dado que el sistema para las perturbaciones es lineal, un análisis general correspondería a la suma de los análisis en cada término de expansión de Fourier.

En el mismo código `exp_ab.f90` implementamos la generación de una tabla con el par ordenado  $(k, \sigma)$  desde  $\delta = 1$  hasta  $\delta = 7.5$  variando de 0.5 en 0.5. Por cada  $\delta$ , variamos el ancho  $l_y$  del tubo desde  $l_y = 5$  hasta  $l_y = 1000$  con pasos de décimas. El recurso computacional es muy alto por que sólo ejecutar para un  $\delta$  y el rango  $l_y$  elegido, tomó un tiempo de dos días en el servidor de Física. Dividiendo el mismo código para la ejecución en paralelo acabó aproximadamente en una semana.

El resultado de la simulación que vemos en la figura (2.9), finalmente podemos interpretar como un patrón de búsqueda de inestabilidades. Identificamos con mucha facilidad para que  $\delta$  y ancho  $l_y$  del tubo, el sistema es inestable. Simplemente viendo en que valor de  $k$  la ordenada es  $\sigma > 0$ . En la figura (2.9) observamos que  $\delta$  aumenta y el máximo de  $\sigma$  también aumenta, pero no sucede cuando  $\delta > 7.5$ . Ahora sucede de modo inverso,  $\delta$  crece y el máximo de  $\sigma$  decrece. Esto indica que si  $\delta \rightarrow \infty$ , el máximo de  $\sigma \rightarrow 0$ . En la figura (2.10) vemos este efecto. Algo muy interesante también observamos en la figura (2.9), en el que hay valores de  $\sigma$  que nunca será positivo para todo  $k$ . Esto explicamos con más detalle en la siguiente sección.

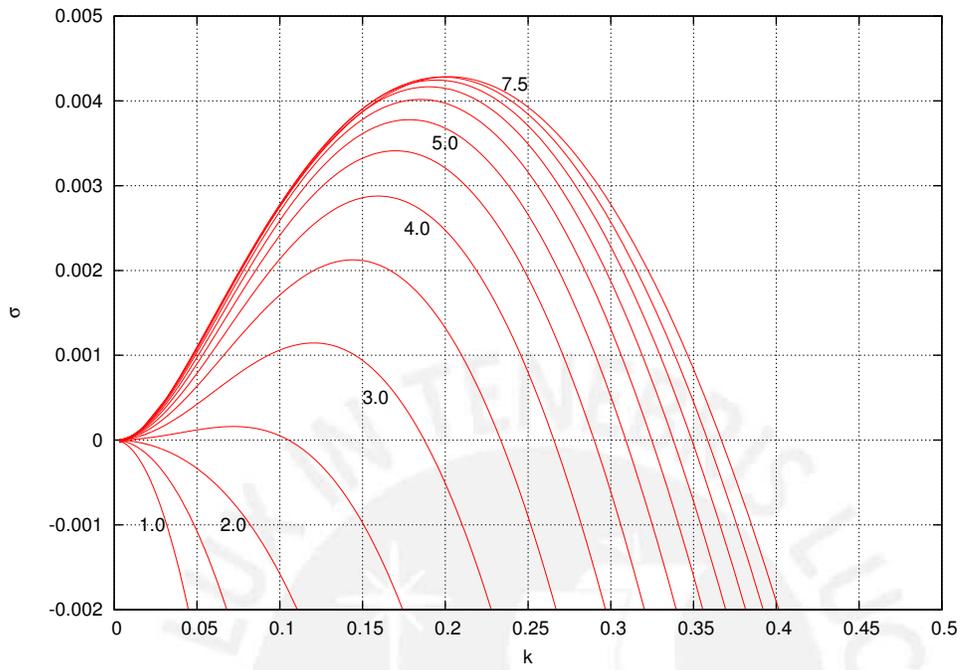


Figure 2.9: para  $l_x = 1500$ ,  $\sigma$  en función del vector de onda  $k$

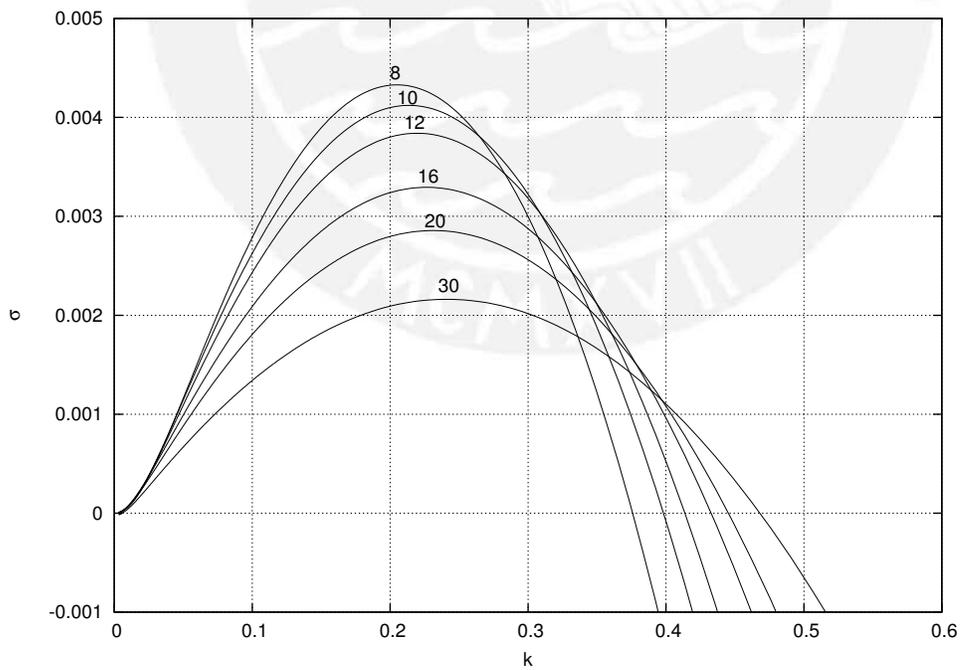


Figure 2.10: Para  $\delta > 7.5$  el máximo de  $\sigma$  decrece

## 2.6 Aproximación de $\delta_c$ Crítico

Analizando las curvas que se ubican por debajo de  $\sigma = 0$ , vemos que hay valores de  $\delta$  en el que  $\sigma$  siempre es negativo. Es decir, el sistema siempre será estable para todo  $l_y$ . Por lo tanto, existirá un  $\delta_c$  crítico en el que existe una transición del sistema de reacción-difusión cúbica de estable a inestable.

Notemos en la figura (2.9),  $\delta_c$  esta entre  $\delta = 2$  y  $\delta = 2.5$ . Con dicho gráfico nos aseguramos cual es el  $\delta_c$ . Entonces, amplifiquemos la figura (2.9) generando la figura (2.11) donde notamos con más claridad ese  $\delta_c$  que se aproxima a 2.30 que esta en plena concordancia con los artículos publicados. En el artículo publicado por Anatoly Malevanets et al. [18], se detallan los diferentes resultados sobre el cálculo de  $\delta_c$  aplicando diferentes teorías matemáticas así como técnicas numéricas. Siendo el valor de  $\delta_c \approx 2.3$  el valor más exacto resuelto por el mismo A. Malevanets.

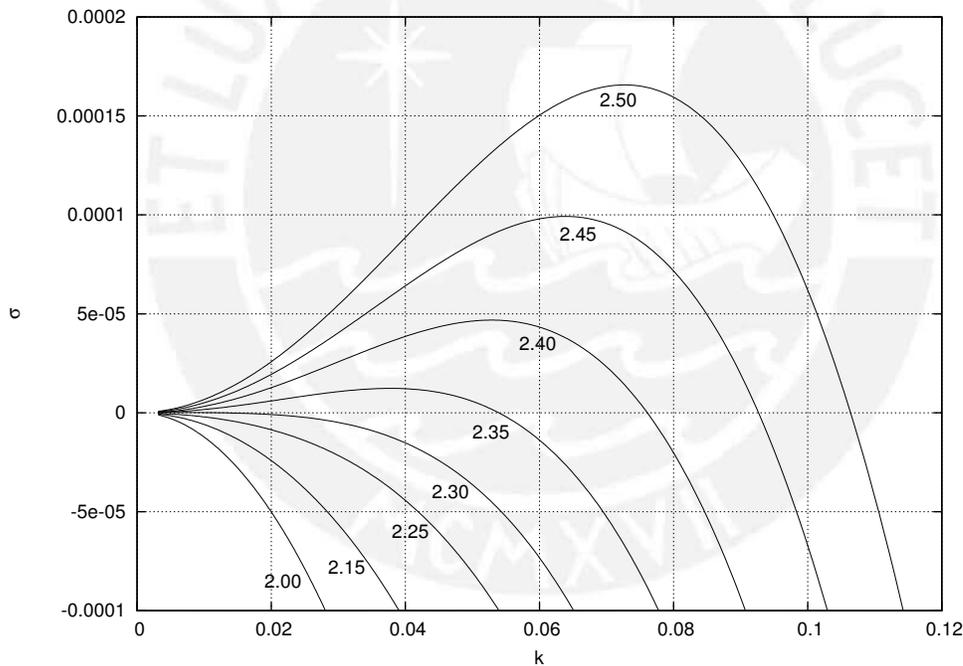


Figure 2.11: Gráfico amplificado de la figura (2.9) donde observamos que  $\delta_c \approx 2.3$

El resultado de  $\delta_c$  en este trabajo es original al introducirse una nueva técnica para calcular  $\sigma$ . En un trabajo previo D. Horvath et.al. [14, 16] estimó  $\delta_c \approx 2.9$  simulando directamente de las ecuaciones de reacción-difusión y utilizando una isoconcentración de  $\beta = 0.95$ . J.H. Merkin [17] genera dos ecuaciones diferenciales ordinarias introduciendo nuevas coordenadas  $\xi = x - ct$  a partir de las ecuaciones de reacción-difusión

y luego aplicó métodos perturbativos generando las figuras (2.9) y (2.10) y determinó que  $\delta_c$  se encuentra en el rango de  $\delta = 2.0$  y  $\delta = 2.5$  utilizando el software LAPACK. A. Malevanets et.al. [18] redujo las ecuaciones de reacción difusión a las ecuaciones de Kuramoto-Sivashinsky para determinar  $\delta_c \approx 2.3$ .

## 2.7 Velocidad de Advección

En la sección anterior encontramos un patrón de búsqueda de inestabilidades para diferentes valores  $\delta$  con sus respectivas longitudes  $l_y$  para determinar si el frente es estable o inestable. Entonces, ahora si podemos dar solución al sistema reacción-difusión cúbica en dos dimensiones dadas por las ecuaciones (2.1) y (2.2). Pero ahora tenemos que enfrentar el recurso computacional que ocasiona resolver dicho sistema. Por ejemplo uno de los mayores problemas de tiempo computacional que tenemos para resolver estos sistemas es la elección del largo del tubo  $l_x$ . Mientras mas largo el tubo, el recurso computacional crece tremendamente para un tamaño de paso  $\Delta x = 0.25$ . Y si queremos encontrar en el sistema comportamientos estables, inestables y caóticos; tendremos que usar el largo del tubo bien grande, con lo que el proceso computacional duraría varios días para tan solo evaluar un solo ancho  $l_y$ . Esto principalmente se debe a que el frente de onda viaja con una velocidad  $v$  en dirección a lo largo del tubo y si elegimos  $l_x$  no muy grande, rápidamente dicho frente chocará con el extremo del tubo con lo que su comportamiento evolutivo se bloquea. Ese es esencialmente el problema.

Entonces para salvar este gran problema utilizamos un sistema de referencia que se mueve a velocidad constante en la dirección del frente. En este sistema el frente resultante tendrá una velocidad menor y demorará más en llegar a la frontera. Este cambio a un sistema móvil da lugar a un término de advección en el sistema reacción-difusión cúbica. Si incluimos el término advectivo, este servirá para que el frente de onda avance lentamente y evitando que llegue al otro extremo del tubo. Entonces, las ecuaciones (2.1) y (2.2) toman ahora la forma

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\alpha\beta^2 + D_A\left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial y^2}\right) + v_a \frac{\partial \alpha}{\partial x}, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = +\alpha\beta^2 + D_B\left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2}\right) + v_a \frac{\partial \beta}{\partial x}, \quad (2.35)$$

donde  $v_a$  es la velocidad de advección que vamos a mantener constante para evaluar el comportamiento del sistema.

Las condiciones iniciales y de frontera son las mismas, es decir

Condiciones iniciales

$$\begin{aligned} \alpha(x, y, 0) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x/2 \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y \\ \alpha(x, y, 0) = 1 & \quad \text{para} \quad l_x/2 \leq x \leq l_x \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y \\ \beta(x, y, 0) = 1 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x/2 \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y \\ \beta(x, y, 0) = 0 & \quad \text{para} \quad l_x/2 \leq x \leq l_x \quad \text{y} \quad 0 \leq y \leq l_y \end{aligned}$$

y las condiciones en la frontera son :

Condiciones de Dirichlet

$$\begin{aligned} \alpha(0, y, t) = 0 \quad \text{y} \quad \alpha(l_x, y, t) = 1 & \quad \text{para} \quad 0 \leq y \leq l_y \\ \beta(0, y, t) = 1 \quad \text{y} \quad \beta(l_x, y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq y \leq l_y \end{aligned}$$

Condiciones de Neumann

$$\begin{aligned} \alpha_y(x, 0, t) = 0 \quad \text{y} \quad \alpha_y(x, l_y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x \\ \beta_y(x, 0, t) = 0 \quad \text{y} \quad \beta_y(x, l_y, t) = 0 & \quad \text{para} \quad 0 \leq x \leq l_x \end{aligned}$$

En las figuras (2.12) y (2.13) observamos mejor las condiciones iniciales de  $\alpha$  y  $\beta$  respectivamente. Vemos en dichas figuras el límite entre  $\alpha = 0$  y  $\alpha = 1$  como también entre  $\beta = 1$  y  $\beta = 0$ ; una forma discontinua a lo largo del ancho del tubo ubicada en  $l_x/3$ . Tomamos este criterio de ubicación de la discontinuidad para que la propagación de los frentes se demore en llegar al otro extremo. No hay diferencia alguna si fuera en  $l_x/2$  siempre y cuando no esté cerca en los extremos del tubo. En la figura (2.14) vemos claramente una parte saliente de longitud  $l_x/24$ . Esta elección fue hecha de esta manera para se vea en forma paulatina como las condiciones iniciales no influyen para tiempos relativamente largos, hacia comportamientos estables o inestables. Un análisis más detallado sobre las condiciones iniciales en el sistema de reacción-difusión es efectuado por Vicent Mendez [30].

Entonces, con las ecuaciones (2.34) y (2.35), podemos resolver con un tiempo mucho menor la evolución de los frentes debido a que podemos usar un dominio mas pequeño. El recurso computacional bajará sustancialmente donde las simulaciones ya no durarán días sino unas cuantas horas. Además casi todas las simulaciones se efectuaron en el servidor de Física y en el sistema de Super Cómputo Legión de la PUCP. Sin estos recursos no hubieramos podido presentar este trabajo de investigación.

Nuevamente usamos diferencias finitas y el método explícito para resolver las ecuaciones de reacción-difusión cúbica con estas nuevas condiciones iniciales. Para el espacio apliquemos diferencia finita central, y para el tiempo diferencia finita por la derecha. Reemplazando en las ecuaciones (2.34) y (2.35) tenemos

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_{i,j}^{k+1} - \alpha_{i,j}^k}{\Delta t} = D_A \frac{\alpha_{i+1,j}^k - 2\alpha_{i,j}^k + \alpha_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + D_A \frac{\alpha_{i,j+1}^k - 2\alpha_{i,j}^k + \alpha_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} + \\ + v_a \frac{\alpha_{i+1,j}^k - \alpha_{i-1,j}^k}{2\Delta x} - \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \end{aligned} \quad (2.36)$$

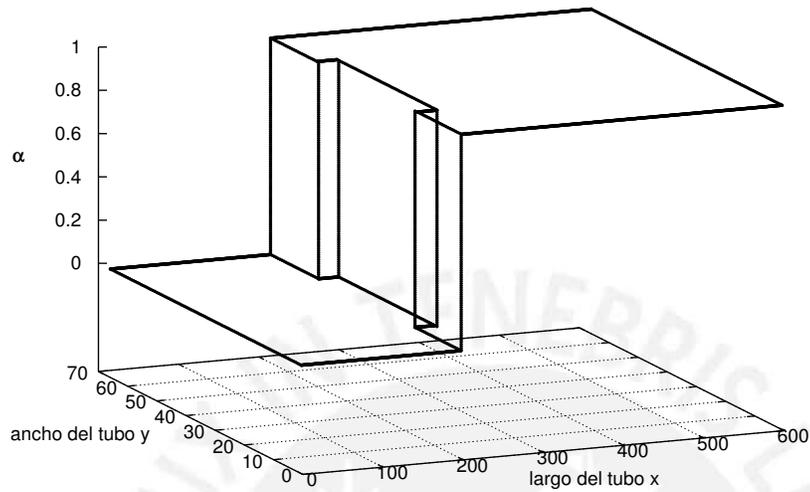


Figure 2.12: Condición inicial para  $\alpha$  con  $l_x = 600$  y  $l_y = 70$

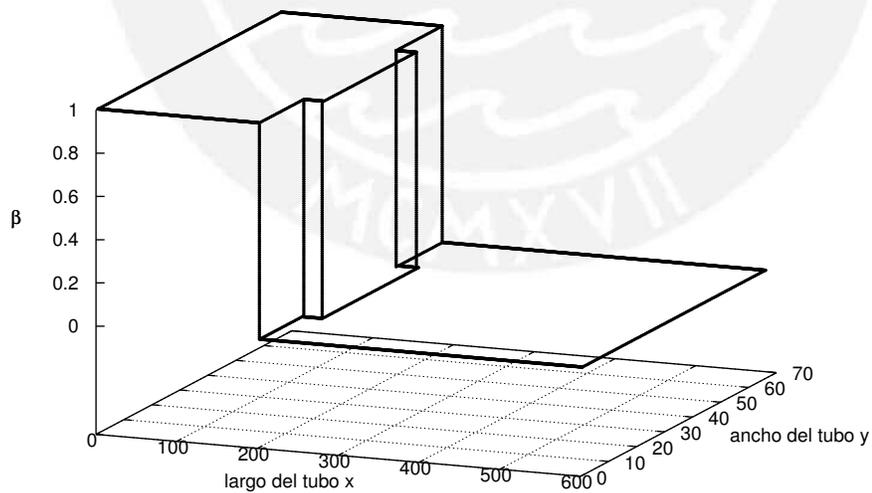
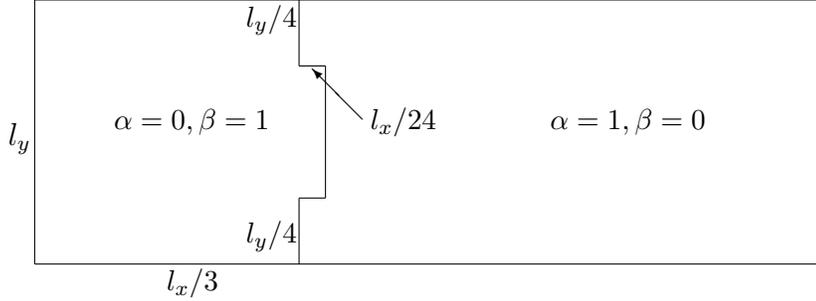


Figure 2.13: Condición inicial para  $\beta$  con  $l_x = 600$  y  $l_y = 70$

Figure 2.14: Condiciones iniciales vistos en el plano  $xy$ 

$$\begin{aligned} \frac{\beta_{i,j}^{k+1} - \beta_{i,j}^k}{\Delta t} = D_B \frac{\beta_{i+1,j}^k - 2\beta_{i,j}^k + \beta_{i-1,j}^k}{\Delta x^2} + D_B \frac{\beta_{i,j+1}^k - 2\beta_{i,j}^k + \beta_{i,j-1}^k}{\Delta y^2} + \\ + v_a \frac{\beta_{i+1,j}^k - \beta_{i-1,j}^k}{2\Delta x} + \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \end{aligned} \quad (2.37)$$

Haciendo  $k_{\alpha x} = \frac{D_A \Delta t}{\Delta x^2}$ ,  $k_{\alpha y} = \frac{D_A \Delta t}{\Delta y^2}$ ,  $k_{\beta x} = \frac{D_B \Delta t}{\Delta x^2}$ ,  $k_{\beta y} = \frac{D_B \Delta t}{\Delta y^2}$  y  $k_{ad} = \frac{v_a \Delta t}{2\Delta x}$

Despejemos de las ecuaciones (2.36) y (2.37) las variables  $\alpha_{i,j}^{k+1}$  y  $\beta_{i,j}^{k+1}$  respectivamente y acomodando variables tenemos

$$\begin{aligned} \alpha_{i,j}^{k+1} = \alpha_{i,j}^k + k_{\alpha x} (\alpha_{i+1,j}^k - 2\alpha_{i,j}^k + \alpha_{i-1,j}^k) + k_{\alpha y} (\alpha_{i,j+1}^k - 2\alpha_{i,j}^k + \alpha_{i,j-1}^k) + \\ + k_{ad} (\alpha_{i+1,j}^k - \alpha_{i-1,j}^k) - \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \Delta t \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\begin{aligned} \beta_{i,j}^{k+1} = \beta_{i,j}^k + k_{\beta x} (\beta_{i+1,j}^k - 2\beta_{i,j}^k + \beta_{i-1,j}^k) + k_{\beta y} (\beta_{i,j+1}^k - 2\beta_{i,j}^k + \beta_{i,j-1}^k) + \\ + k_{ad} (\beta_{i+1,j}^k - \beta_{i-1,j}^k) + \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \Delta t \end{aligned} \quad (2.39)$$

Compactando aún mas finalmente obtenemos

$$\begin{aligned} \alpha_{i,j}^{k+1} = (1 - 2k_{\alpha x} - 2k_{\alpha y}) \alpha_{i,j}^k + k_{\alpha x} (\alpha_{i+1,j}^k + \alpha_{i-1,j}^k) + k_{\alpha y} (\alpha_{i,j+1}^k + \alpha_{i,j-1}^k) + \\ + k_{ad} (\alpha_{i+1,j}^k - \alpha_{i-1,j}^k) - \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \Delta t \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$\begin{aligned} \beta_{i,j}^{k+1} = (1 - 2k_{\beta x} - 2k_{\beta y}) \beta_{i,j}^k + k_{\beta x} (\beta_{i+1,j}^k + \beta_{i-1,j}^k) + k_{\beta y} (\beta_{i,j+1}^k + \beta_{i,j-1}^k) + \\ + k_{ad} (\beta_{i+1,j}^k - \beta_{i-1,j}^k) + \alpha_{i,j}^k (\beta_{i,j}^k)^2 \Delta t \end{aligned} \quad (2.41)$$

Con estas dos últimas ecuaciones implementamos el código `exp_ad.f90` (ver apéndice) cuyas variables generales son

- Se divide  $l_x$  en  $n$  partes
- Se divide  $l_y$  en  $m$  partes
- Se genera una matriz  $u_{n,m}$  para  $\alpha$
- Se genera una matriz  $v_{n,m}$  para  $\beta$
- El tamaño de paso en la dirección  $x$  es  $\Delta x = l_x/(n - 1)$
- El tamaño de paso en la dirección  $y$  es  $\Delta y = l_y/(m - 1)$
- El tamaño de paso para el tiempo es  $\Delta t = 0.01$

Con estos datos generamos tablas que contienen  $(x, y, \alpha, \beta)$  para cada paso del tiempo  $t$ .

## 2.8 Soluciones de Frente Plano Estables en 2D

Hasta aquí hemos analizado y encontrado un patrón de búsqueda de inestabilidades de los frentes variando la relación  $\delta = D_A/D_B$ , ancho  $l_y$  del tubo y manteniendo el largo del tubo  $l_x$  finito y constante. Así como también hemos encontrado un  $\delta_c$  crítico en el que para  $\delta \leq \delta_c$  se manifiesta la estabilidad para todo valor de  $l_y$ . Por tanto, la figura (2.9) ayuda mucho para evaluar estabildades o inestabilidades de una solución en un sistema de reacción-difusión cúbica.

Analizemos ahora la evolución de frentes en dos dimensiones donde la forma de los frentes para tiempos largos son frentes planos. Los otros casos que se pudieran presentar bajo condiciones de estabilidad, se comportan de la misma forma de acuerdo a este análisis. En la tabla (2.2) observamos en diferentes tiempos los comportamiento de  $\alpha$  y  $\beta$ . Las condiciones iniciales son como vemos en las figuras (2.12) y (2.13). Los datos de la simulación son  $\delta = 5$ ,  $v_a = 0.21$ ,  $l_x = 600$ ,  $n = 1200$ ,  $l_y = 5$ ,  $m = 10$ ,  $\Delta x = l_x/(n - 1)$ ,  $\Delta y = l_y/(m - 1)$  y  $\Delta t = 0.05$ . En la parte (a) y (b) efectuamos 20 pasos del tiempo que corresponde a  $t = 1$  donde observamos la forma de los frentes como curvas irregulares (ver el plano  $xy$ ). Esto se debe a que aún esta influyendo las condiciones iniciales. En la parte (c) y (d) efectuamos 200 pasos del tiempo que corresponde a  $t = 10$  donde los frentes ya toman frentes planos pero que aún sigue influyendo las condiciones iniciales. Ahora si vemos las partes (e) y (f) que hemos simulado 2000 pasos del tiempo que corresponde a  $t = 100$ , observamos que los frentes tanto de  $\alpha$  como  $\beta$  son ondas planas y son paralelas unas a otras. Esto también significa que las velocidad del frente del sistema reacción-difusión es constante en todo el ancho del tubo. Si tomamos tiempos posteriores a este análisis, la propagación de los frentes siempre serán planos pero con velocidades diferentes por cada instante del tiempo. Si los tiempos son muy largos la velocidad de dichos frentes tienden a una constante. Si cambiamos las variables como  $\delta$  y  $l_y$  de tal manera que cumplan la condición de estabilidad de los frentes planos se tendrá que para tiempos largos las

velocidades tenderán a otra constante. Estas variaciones de las velocidades lo veremos en las siguientes secciones con mucho mas detalle. Si variamos  $l_x$ , la propagación de los frentes serán las mismas, solo que debemos de evaluar la velocidad de advección  $v_a$ , de tal manera que los frentes no lleguen al extremo del tubo.



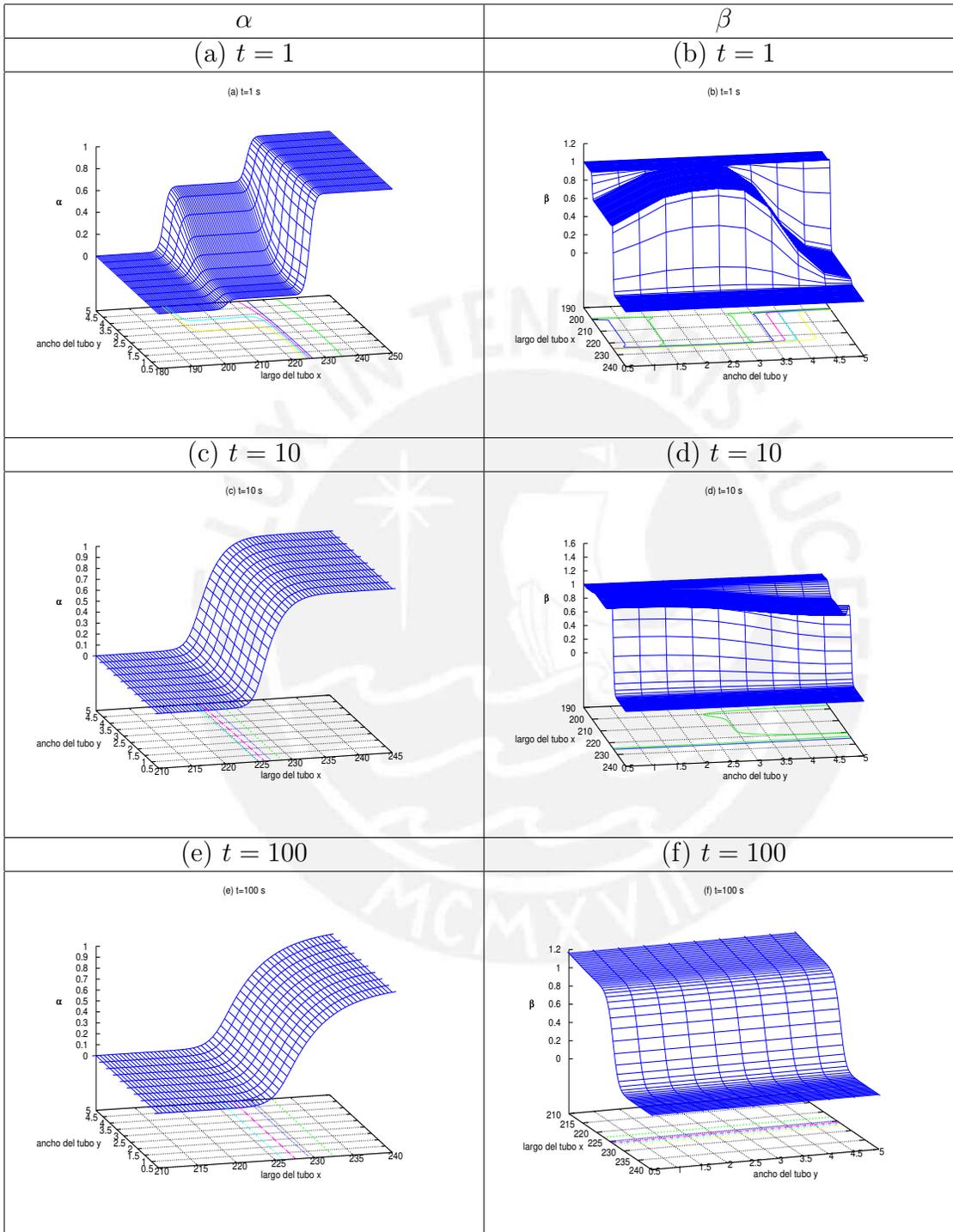


Tabla 2.2:  $\alpha$  y  $\beta$  en función del tiempo, en (e) y (f) los frentes son planos.

## 2.9 Inestabilidad de Frentes Planos

Lo que veremos en esta sección, es como los frentes planos se manifiestan como inestables, analizando un valor de  $\delta$  y una elección adecuada de ancho  $l_y$  del tubo. En la figura (2.9) buscamos un  $l_y$  de tal manera que  $\sigma > 0$ . En las tablas (2.3), (2.4) y (2.5) observamos que la propagación de los frentes no evolucionan hacia frentes planos, sino a frentes curvos, indicando que los frentes son inestables. Hemos elegido  $\delta = 5$  y utilizando la figura (2.9) para longitudes de  $l_y = 15$ ,  $l_y = 60$  y  $l_y = 120$  y viendo que el sistema son todos inestables debido a que  $\sigma > 0$ . Es decir que los frentes planos serán inestables. Pero a medida que los anchos crecen los frentes inestables aumentan la cantidad de crestas y valles.



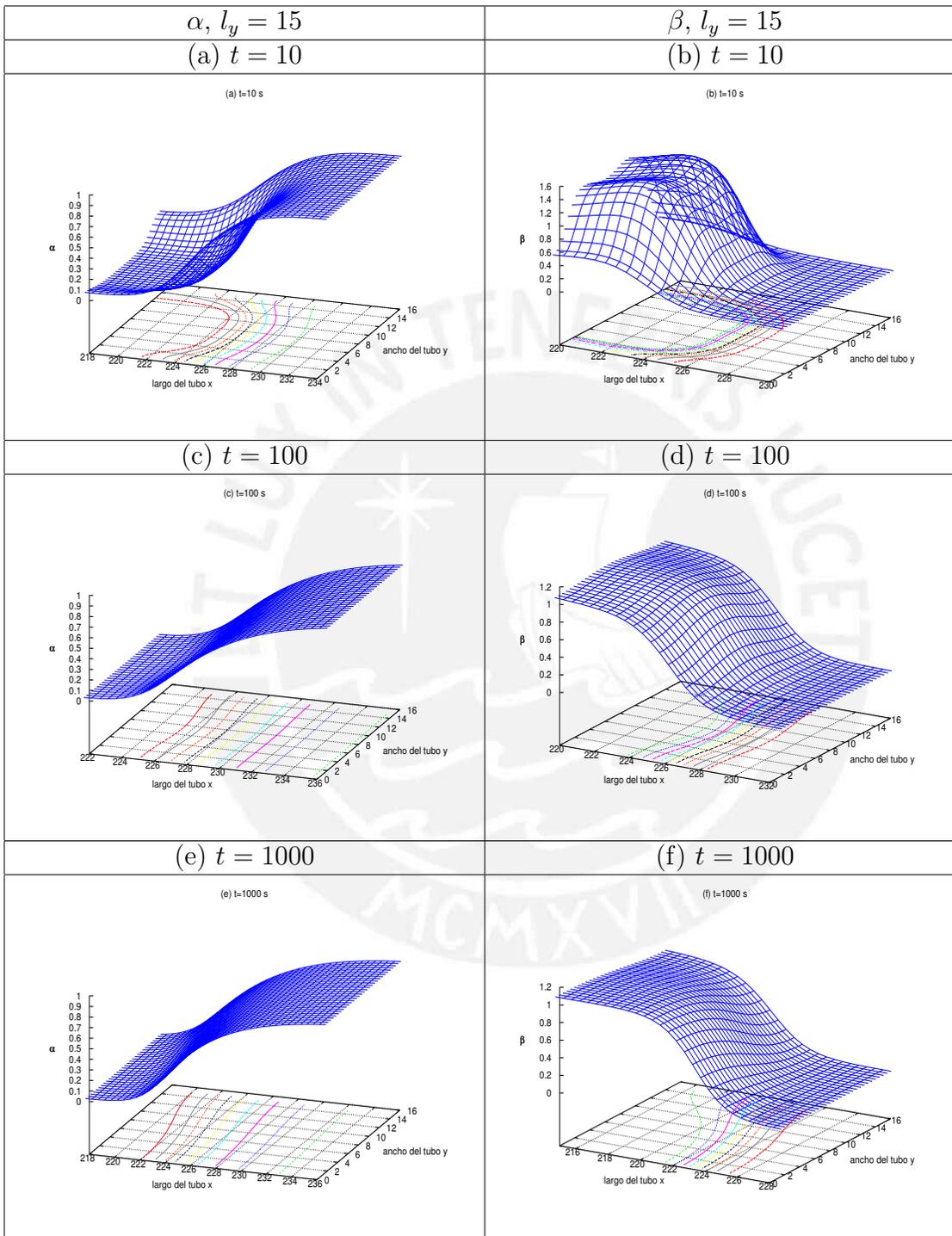


Tabla 2.3:  $\alpha$  y  $\beta$  en función del tiempo, en (e) y (f) los frentes son curvas y por tanto la velocidad de los frentes ya no son constantes.

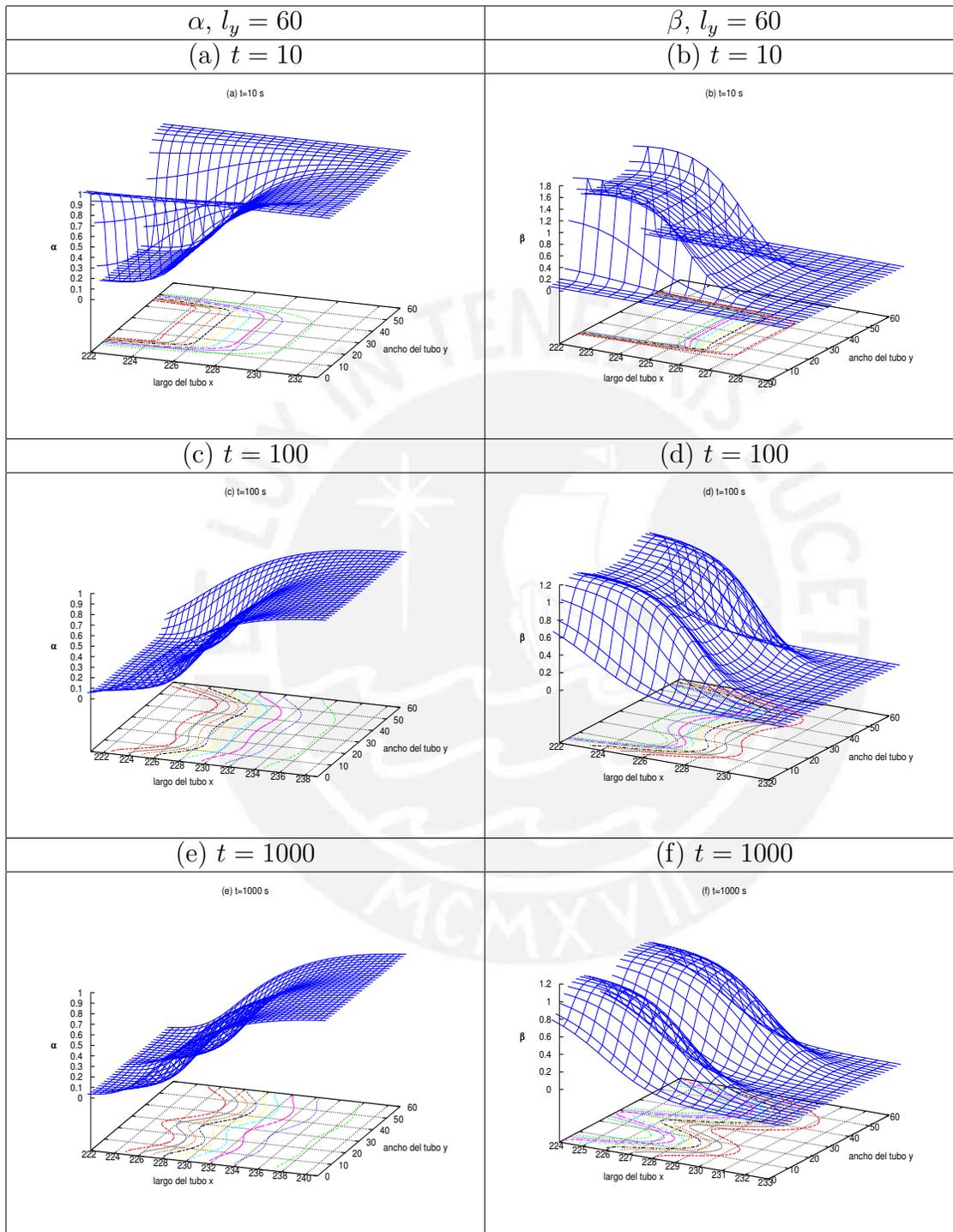


Tabla 2.4:  $\alpha$  y  $\beta$  en función del tiempo, en (e) y (f) los frentes son curvas y por tanto la velocidad de los frentes ya no son constantes.

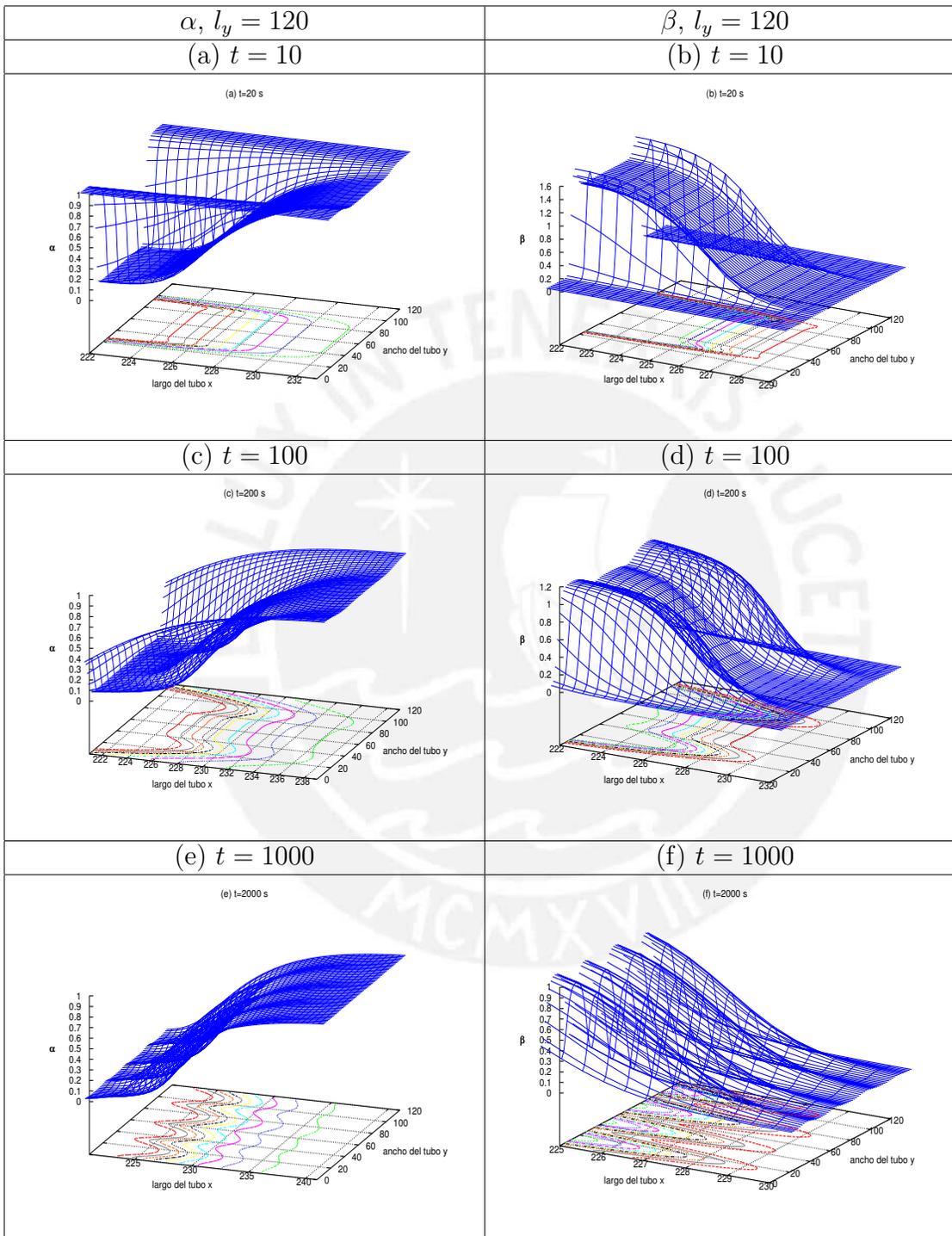


Tabla 2.5:  $\alpha$  y  $\beta$  en función del tiempo, en (e) y (f) los frentes son curvas y por tanto la velocidad de los frentes ya no son constantes.

## 2.10 Desviación de los Frentes

En las tres últimas tablas de las secciones anteriores vimos las superficies de  $\alpha$  y  $\beta$ , y para tiempos grandes dichas superficies tienen formas onduladas. En el plano  $xy$  también observamos curvas de nivel que corresponden a rectas paralelas y otras a curvas onduladas. Para analizar la evolución de  $\alpha$  y  $\beta$  solo tenemos que elegir y evaluar una curva de nivel, siendo para este trabajo  $\alpha = 0.5$  y  $\beta = 0.5$ . Entonces en el código `exp_ad.f90` (ver apéndice) implementamos una rutina para crear una tabla que contienen los pares ordenados  $(x, y)$  para un tiempo dado  $t$  correspondiente a la curva de nivel  $\alpha = 0.5$  y  $\beta = 0.5$ . Estas curvas de nivel nos permiten mostrar la evolución de las formas de los frentes para distintos valores de  $l_y$ .

Mostraremos algunos ejemplos de diferentes formas que tienen los frentes para los valores de  $\alpha = 0.5$ . Dado al acoplamiento de las ecuaciones en el sistema de reacción-difusión cúbica el comportamiento de  $\beta$  tiene la misma forma que del comportamiento de  $\alpha$ . En la figura (2.15) vemos que los frentes son planos y por lo tanto el sistema es estable. Si queremos verificar en la figura (2.9) para  $l_y = 7$ , vemos que el sistema es estable y los frentes por tanto deben ser planos. Si quisieramos analizar para otros valores de  $\alpha$ , el comportamiento será el mismo. En esta misma figura hemos graficado para tiempos largos, de tal manera que no afecte las condiciones iniciales.

En la figura (2.16) vemos ahora que los frentes ya no son planos y en consecuencia los frentes planos son ahora inestables. También podemos observar que en los costados del tubo las pendientes son cero que esta en completo acuerdo con las condiciones en la frontera. Otra característica de estos frentes es que son asimétricos, es decir, existe un máximo en un costado y un mínimo en el otro costado del tubo. Además, tal como dijimos en las secciones anteriores la ubicación de los frentes para tiempos largos están alejados de los extremos del tubo. Esto nos garantiza que el comportamiento de los frentes son los que necesitamos para evaluar las inestabilidades. Ahora si observamos la figura (2.17), los frentes siguen siendo curvas con características muy interesantes. Por ejemplo notemos que en  $l_y = 25$  observamos dos mínimos y un máximo, es decir, a diferencia de  $l_y = 15$  se aumentó un mínimo. También dada la forma de los frentes podemos decir que dichos frentes son simétricos e inestables. Podemos intuir que a medida que crece  $l_y$  aumentan la cantidad de máximos y mínimos. Y en la figura (2.18), como dijimos, a medida que crece  $l_y$  también aumentan el número de máximos y mínimos. En este caso hay dos máximos y tres mínimos. La pregunta que se nos viene con estas figuras, ¿en qué longitud  $l_y$  aumentan un máximo o un mínimo? Esto responderemos en las siguientes secciones pero por ahora asumimos que hay frentes planos, asimétricos y simétricos.

Bien, conocemos las diferentes formas de los frentes. Pero analizemos con más profundidad cada uno de los frentes. Lo que queremos saber es como varía cada

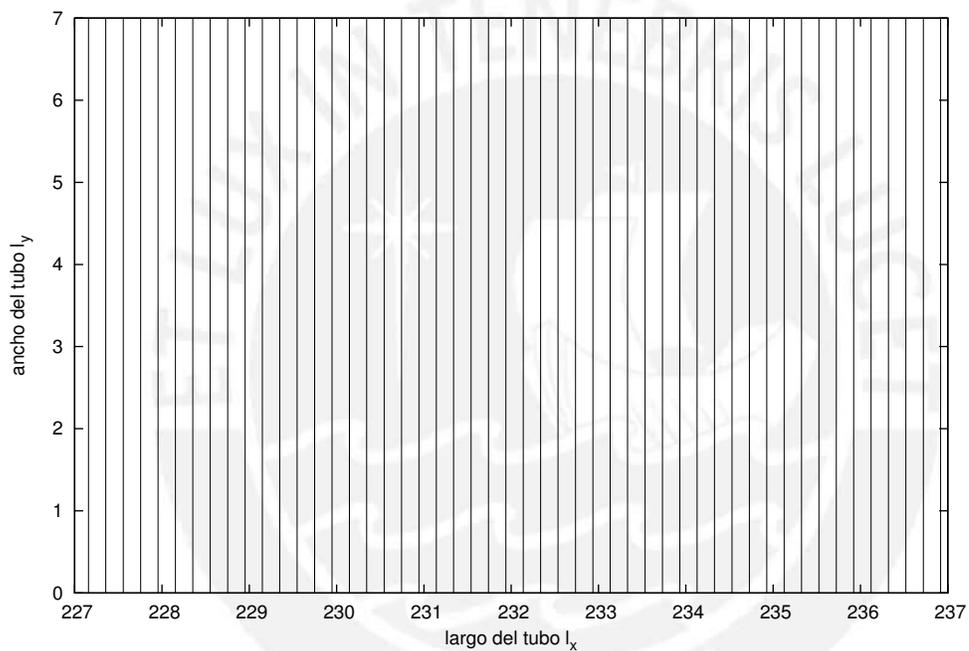


Figure 2.15: Frentes planos para  $\alpha = 0.5$ ,  $\delta = 5$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 7$ . Los tiempos estan entre  $t=5000$  y  $t=10000$

frente respecto del otro. Cuando los frentes planos son estables podemos directamente saber el comportamiento de los frentes porque siempre serán paralelos y las curvas de nivel serán equidistantes pues se grafican al mismo intervalo de tiempo, esto indica que la velocidad de propagación es constante. Esta forma de comportamiento solo es válido para tiempos largos. De igual manera cuando el frente plano es inestable, otras estructuras no planas aparecen. Aquí los nuevos frentes curvos se mantienen de forma equidistante uno del otro para cada intervalo de tiempo. Pero la estructura del frente variará en función de la longitud  $l_y$ .

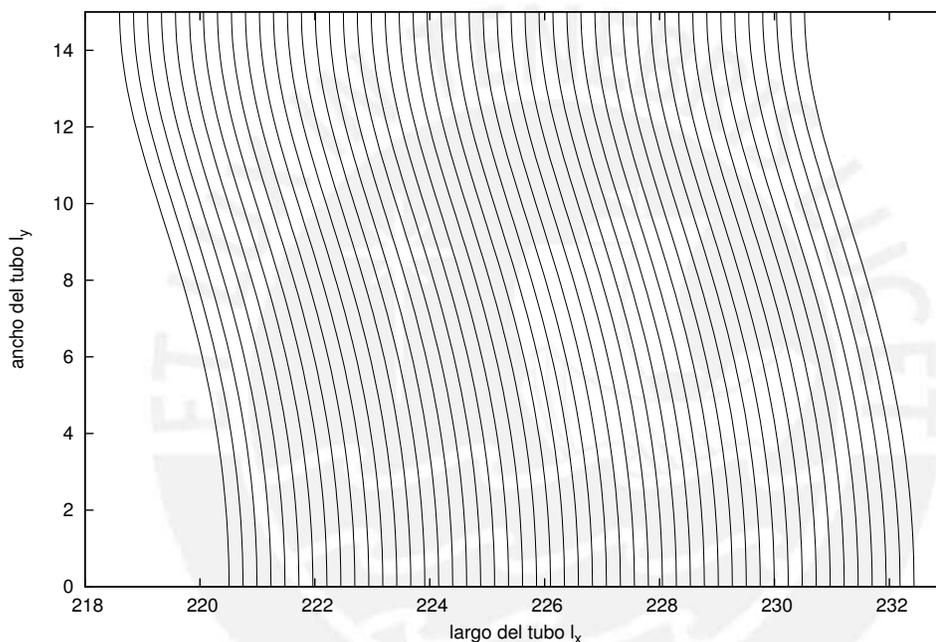


Figure 2.16: frentes no planos para  $\alpha = 0.5$ ,  $\delta = 5$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 15$ . Los tiempos estan entre  $t=5000$  y  $t=10000$ .

Si evaluamos las desviaciones de cada uno de los frentes planos o curvos para tiempos largos veremos que dichas desviaciones no cambian, es decir se van a mantener constantes. Esto significa, que el frente no cambia la forma que tiene. Para evaluar las desviaciones del frente plano, debemos de promediar todas las posiciones de cada punto del frente en todo el ancho  $l_y$  del tubo para un tiempo  $t$ . Luego evaluamos la desviación estandar y justo esta desviación nos indica cuanto el frente se desvía del frente plano. Ahora si evaluamos otro frente para  $t + \Delta t$  y encontramos su desviación estandar, y vemos que si la desviación es la misma, indica que el frente no ha cambiado de forma. Si evaluamos desde  $t = 0$  observamos que los frentes, la desviación con

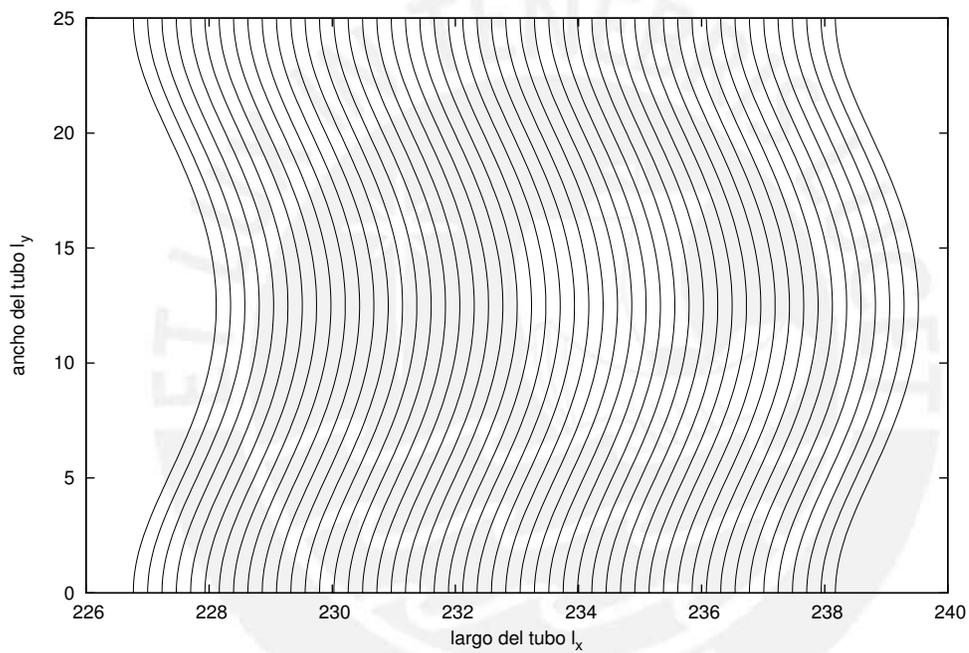


Figure 2.17: frentes no planos para  $\alpha = 0.5$ ,  $\delta = 5$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 25$ . Los tiempos estan entre  $t=5000$  y  $t=10000$ .

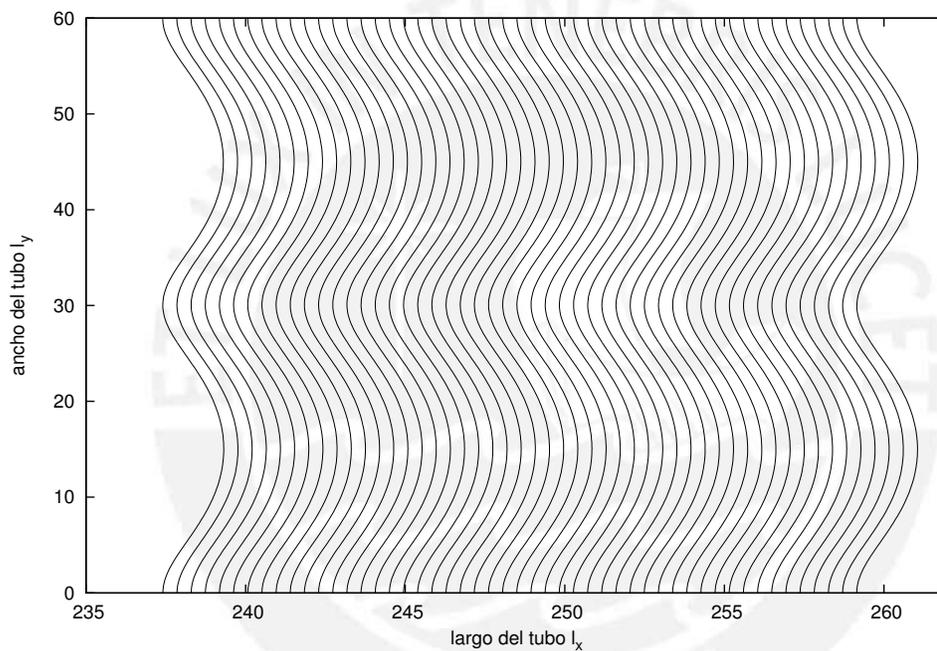


Figure 2.18: frentes no planos para  $\alpha = 0.5$ ,  $\delta = 5$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 60$ . Los tiempos estan entre  $t=5000$  y  $t=10000$

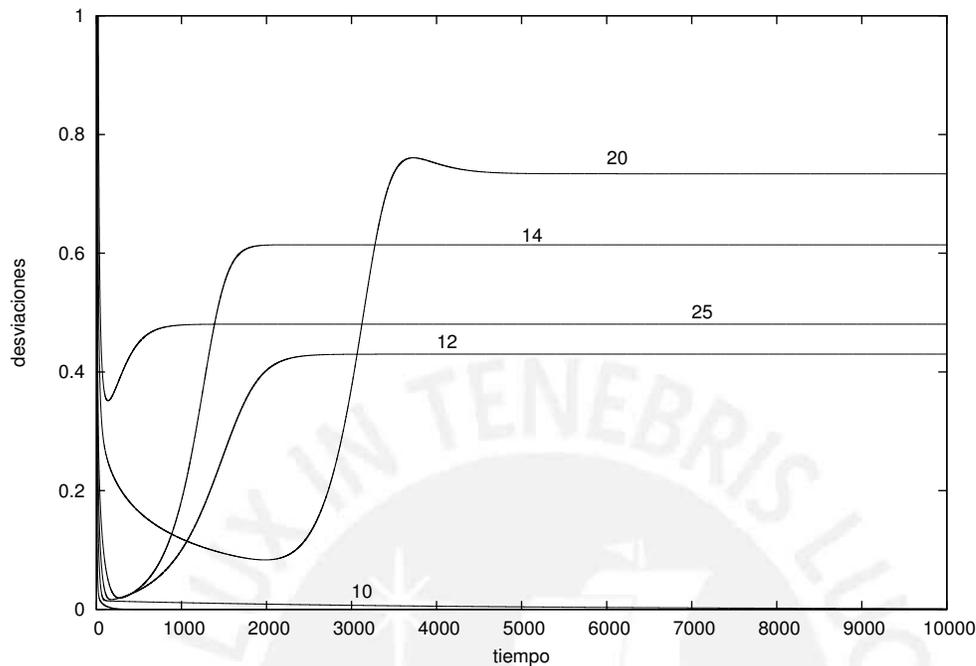


Figure 2.19: Desviación de los frentes para  $l_y = 10$ ,  $l_y = 12$ ,  $l_y = 14$ ,  $l_y = 20$  y  $l_y = 25$ . Observamos que para tiempos mayores a 5000 las desviaciones son constantes donde los frentes se mantienen constantes.

respecto al siguiente no será el mismo, pero a medida que avanza en el tiempo los frentes van a tener una misma forma uno del otro, y si el tiempo es largo serán los mismos. Es importante aclarar que solo estamos evaluando el sistema de frentes planos, asimétrico y simétricos. Para longitudes mayores los frentes no necesariamente mantendrán una forma constante. Estos podrán ser oscilatorios o caóticos, es decir la desviación de un frente con respecto del siguiente serán totalmente diferentes.

En la figura (2.19) observamos las desviaciones de los frentes en función del tiempo para  $l_y = 10$ ,  $l_y = 12$ ,  $l_y = 14$ ,  $l_y = 20$  y  $l_y = 25$ . En todas las gráficas para tiempos largos observamos rectas paralelas con respecto al eje del tiempo implicando que la forma de los frentes no varían en función del tiempo. En  $l_y = 10$  vemos que las desviaciones son prácticamente cero debido a que los frentes son planos y por tanto son estables. Si las desviaciones son constantes y mayores a cero los frentes no son planos. También notamos que para  $l_y = 20$  los frentes tienen más desviación que para  $l_y = 14$  y para  $l_y = 25$ . Eso nos hace intuir que las desviaciones fluctúan y que además que los frentes cambian de planos a asimétricos y luego a simétricos. En las transiciones notaremos una menor desviación del frente.

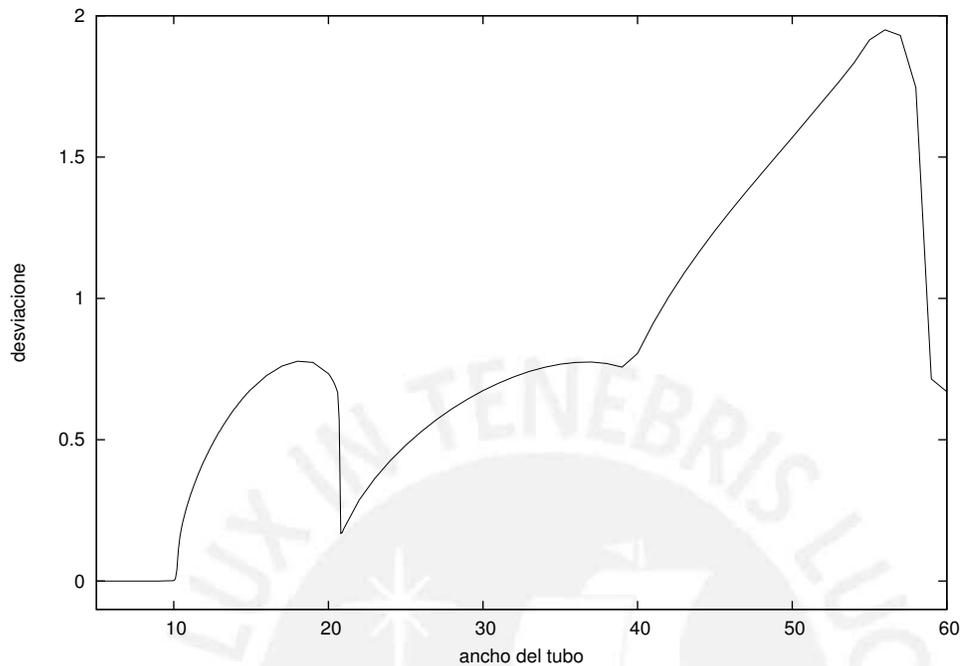


Figure 2.20: Desviación en función del ancho del tubo  $l_y$

Para una mejor comprensión de las desviaciones de los frentes en función del ancho  $l_y$  del tubo, evaluaremos por cada  $l_y$  la desviación de los frentes en un intervalo de tiempo entre  $t = 9000$  y  $t = 10000$ . En este intervalos nos estamos asegurando que los frentes se mantienen constantes. Es decir, para fabricar la figura (2.20) debemos de tomar en cuenta este detalle que nos asegura que los frentes se mantienen constantes. Basta que haya una diferencia de unas cuantas milésimas dicha figura no se espera.

Para un análisis más profundo explicaremos mediante la figura (2.20) el comportamiento de los frentes en función del ancho  $l_y$  del tubo. Observemos entre  $l_y = 5$  y  $l_y \approx 10$ , vemos que la desviación de los frentes en ese intervalo es prácticamente 0 donde los frentes son planos y estables. Luego vemos una subida repentina de las desviaciones que significa que es la transición entre frentes planos y asimétricos debido a que los frentes planos pierden estabilidad. Las soluciones estables son ahora frentes asimétricos. Pero desde  $l_y = 10$  hasta  $l_y \approx 21$  hay una curva en el que crecen las desviaciones hasta un valor máximo de desviación de frente asimétrico y luego decrece. Otra vez se presenta otra discontinuidad donde los frentes pasan de asimétricos a simétricos. Entonces en el intervalo de  $l_y \approx 21$  hasta  $l_y \approx 40$ , el comportamiento es totalmente simétrico donde hay también una máxima desviación simétrica. Finalmente desde  $l_y \approx 40$  hasta  $l_y \approx 60$  los frentes ya no son simétricos. En todos estos análisis es de esperar que las desviaciones tengan que incrementarse. Y más allá de

$l_y \approx 60$  es el inicio a un comportamiento aún mas interesante que los casos mencionados, es decir, comportamientos caóticos y es aquí donde en cada uno de los frentes, las desviaciones son totalmente diferentes uno del otro. En las siguientes secciones llegaremos a explicar estos comportamientos con más detalle.

## 2.11 Velocidad de Propagación de los Frentes

Hemos visto en la sección anterior las desviaciones que tienen los frentes en función del tiempo. Pero es necesario analizar la velocidad de los frentes en función el tiempo. Entonces, para determinar dichas velocidades debemos de calcular del siguiente modo

$$v_j = \frac{\alpha_{i',j}|_{(t+\Delta t)} - \alpha_{i,j}|_{(t)}}{\Delta t}. \quad (2.42)$$

Donde  $\Delta t = 0.01$  es el paso del tiempo en la simulación,  $\alpha_{i,j}$  es la ubicación de un elemento del frente  $j$  para  $\alpha = 0.5$  en el tiempo  $t$ ,  $\alpha_{i',j}$  es la ubicación de un elemento del frente  $j$  para  $\alpha = 0.5$  en el tiempo  $t + \Delta t$ . Si queremos evaluar la velocidad del frente  $v_f$ , tenemos que promediar todos los elementos del frente a lo largo del ancho  $l_y$  del tubo. Pero como hemos incluido la velocidad de advección  $v_a$ , entonces la velocidad del frente  $v$  es

$$v = v_f + v_a \quad (2.43)$$

La comprobación de la inclusión de la velocidad de advección en el sistema de reacción-difusión cúbica, fue la verificación de la velocidad de propagación de un frente plano cuando  $D_A = D_B = 1$ . En efecto para  $l_x = 600$ ,  $n = 2400$ ,  $l_y = 8$ ,  $m = 32$  y  $v_a = 0.7000$ , encontramos que  $v \approx 0.7064$ . Comparando con la velocidad de propagación teórica  $c = 1/\sqrt{2} \approx 0.7071$ , obtenemos un margen de error de 0.1%. En la sección (1.2) recordemos que para  $l_x \rightarrow +\infty$  la velocidad de propagación es  $c = 1/\sqrt{2}$ .

Entonces, en la figura (2.21) vemos que para  $l_y = 10$  el frente es plano y su velocidad es  $v = 0.2060$ , siendo esta la menor velocidad del sistema. Para frentes inestables sus velocidades fluctúan así como vemos para  $l_y = 12$ ,  $l_y = 14$ ,  $l_y = 20$ ,  $l_y = 25$  siendo sus velocidades respectivas  $v = 0.2116$ ,  $v = 0.2133$ ,  $v = 0.2108$ , y  $0.2124$ . También notamos que las velocidades son constantes para tiempos largos. En la figura (2.22) observamos mejor la evolución de la velocidad de los frentes en función del ancho  $l_y$  del tubo. Tal como vimos en la figura (2.20) la evolución de la velocidad de los frentes también se caracterizan según las formas de los frentes. Es decir, hasta  $l_y \approx 10$  los frentes son planos con  $v \approx 0.2060$ , luego entre  $l_y \approx 10$  hasta  $l_y \approx 21$  los frentes son asimétricos, entre  $l_y \approx 21$  y  $l_y \approx 40$ , los frentes son simétricos y a partir de  $l_y \approx 40$  hasta  $l_y \approx 58$ , los frentes ya no son simétricos. Mas allá de  $l_y \approx 58$  los frentes son caóticos.

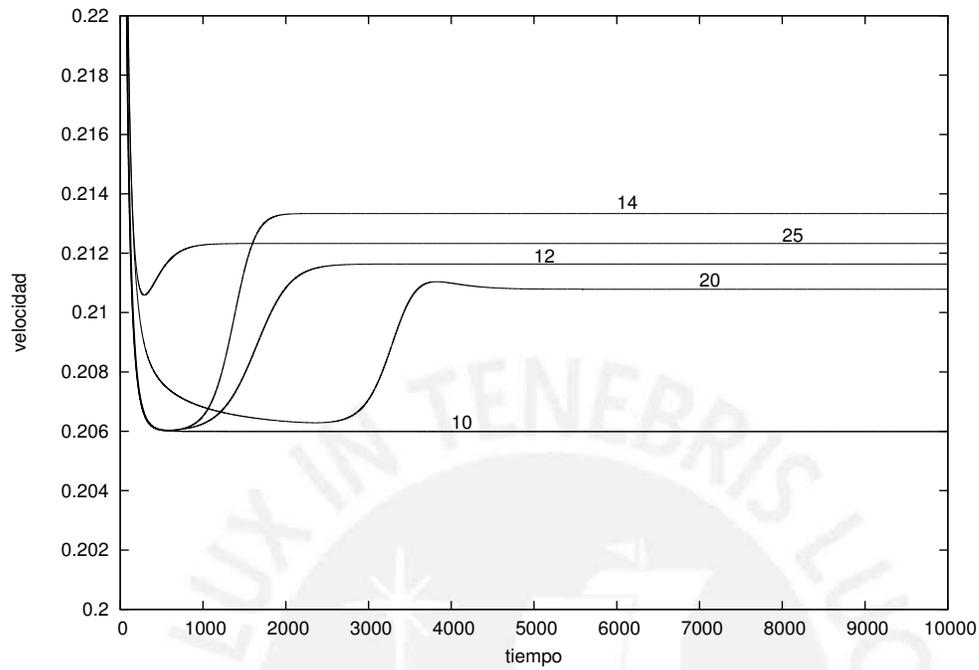


Figure 2.21: Velocidad promedio de los frentes para  $l_y = 10$ ,  $l_y = 12$ ,  $l_y = 14$ ,  $l_y = 20$  y  $l_y = 25$ . Notemos que para tiempos largos la velocidad de los frentes son constantes.

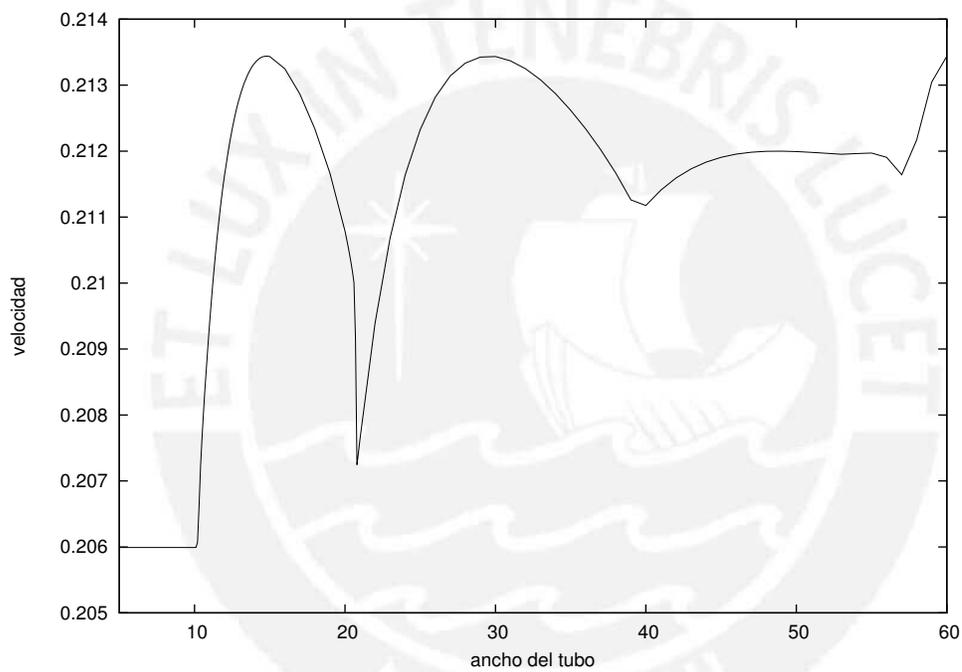


Figure 2.22: Velocidad promedio en función del ancho del tubo  $l_y$ . Evaluamos las velocidades en el intervalo de tiempo [9000,10000].

## 2.12 Reacción-Difusión Cúbica con el Flujo de Poiseuille

El flujo de Poiseuille entre placas paralelas altera la forma y velocidad de los frentes de una reacción química [31], tal como se ha observado en los experimentos con iodato-acido arsenioso [32, 33]. Por consiguiente, incluyamos un término de advección adicionando el flujo de Poiseuille al sistema de reacción-difusión cúbica de la forma

$$V_x(y, t) = \frac{6\bar{v}}{l_y^2}(l_y - y)y - \bar{v} \quad (2.44)$$

Donde  $\bar{v}$  es la velocidad promedio del flujo,  $l_y$  es el ancho del tubo,  $V_x(y, t)$  es el flujo de Poiseuille que varía a lo ancho del tubo medido desde un sistema de coordenadas que se mueve a la velocidad promedio del flujo de Poiseuille con respecto al marco de referencia del laboratorio. Por consiguiente, la velocidad promedio del flujo de Poiseuille en este sistema de coordenadas móvil es cero. Entonces, las ecuaciones (2.34) y (2.35) que son el sistema reacción-difusión cúbica con advección, incluimos el flujo de Poiseuille de esta manera

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = -\alpha\beta^2 + D_A\left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial y^2}\right) + v_a \frac{\partial \alpha}{\partial x} + V_x(y, t) \frac{\partial \alpha}{\partial x} \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = +\alpha\beta^2 + D_B\left(\frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \beta}{\partial y^2}\right) + v_a \frac{\partial \beta}{\partial x} + V_x(y, t) \frac{\partial \beta}{\partial x} \quad (2.46)$$

Las condiciones iniciales y de frontera son las mismas impuestas en las ecuaciones (2.34) y (2.35). Por lo tanto, la implementación del método numérico explícito será simplemente adicionar el término correspondiente al flujo de Poiseuille. Entonces, en el mismo código `exp_ad.f90` hemos adicionado el flujo de Poiseuille generando diferentes curvas de velocidades en función del tiempo.

Para explicar mejor la influencia del flujo de Poiseuille en el sistema reacción-difusión cúbica, debemos evaluar varias velocidades promedio  $\bar{v}$  desde valores positivos a valores negativos. En la figura (2.23) hemos evaluado para valores promedio positivos  $\bar{v} = 0.001, 0.002, 0.003, 0.005, 0.01, 0.03$  y  $0.05$ . En la misma figura observamos  $\bar{v} = 0$  que corresponde al sistema sin el flujo de Poiseuille que corresponde a la figura (2.22). Cuando  $\bar{v} = 0.001$  vemos la existencia de frentes planos hasta  $l_y \approx 10$  y luego evolucionan frentes asimétricos hasta  $l_y \approx 23$  y finalmente hay un dominio de frentes simétricos. Si  $\bar{v} = 0.002$  vemos que existen frentes planos hasta  $l_y < 10$ , después se generan frentes asimétricos hasta  $l_y \approx 24$ , luego hay un dominio simétrico de la forma que hay un máximo y dos mínimos hasta  $l_y \approx 37$  y finalmente

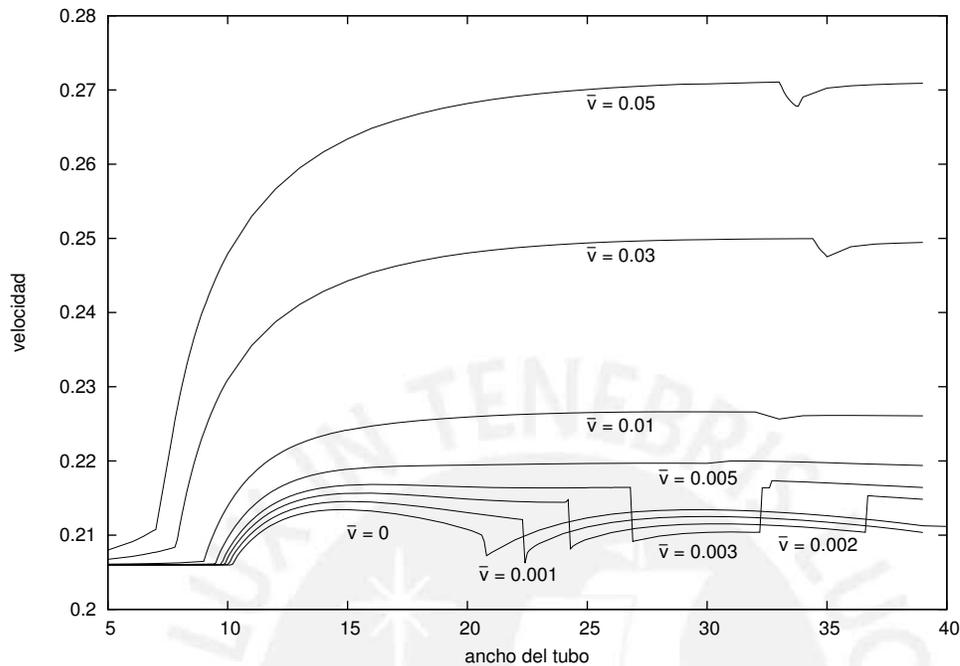


Figure 2.23: Velocidad promedio de los frentes en función del ancho  $l_y$  del tubo para varias velocidades promedio  $\bar{v}$  positivas correspondiente al flujo de Poiseuille.

sigue un dominio simétrico siendo la forma del frente con dos máximos y un mínimo. Si vemos cada vez hay mas dominio asimétrico a medida que se incrementa  $\bar{v}$ . Entonces, si observamos para  $\bar{v} = 0.05$  no hay frentes planos y luego los frentes son todos asimétricos. Podemos concluir por tanto que cuando incrementamos  $\bar{v}$  se anulan los frentes simétricos y los asimétricos entran a dominar en el sistema.

Ahora si evaluamos para velocidades promedios  $\bar{v}$  negativos, tal como observamos en la figura (2.24), siendo estas velocidades  $\bar{v} = -0.001, -0.002, -0.003, -0.005, -0.01, -0.03$  y  $-0.05$ . En la misma figura observamos  $\bar{v} = 0$  que corresponde al sistema sin el flujo de Poiseuille que es idéntica a la figura (2.22). Las siguientes dos curvas corresponden a  $\bar{v} = -0.001$  y  $\bar{v} = -0.002$  que nos indican que los frentes son asimétricos y que se hacen mas cortos, y luego para  $\bar{v} = -0.003$  una pequeño intervalo de  $l_y$  los frentes son asimétricos siendo posteriormente los frentes simétricos. Y para  $\bar{v} \leq -0.01$ , todos los frentes son simétricos. Por tanto, podemos concluir, a medida que disminuye la velocidad promedio  $\bar{v}$  se van disminuyendo los frentes asimétricos y aumentando los frentes simétricos y partir  $\bar{v} = -0.01$  todos los frentes son simétricos.

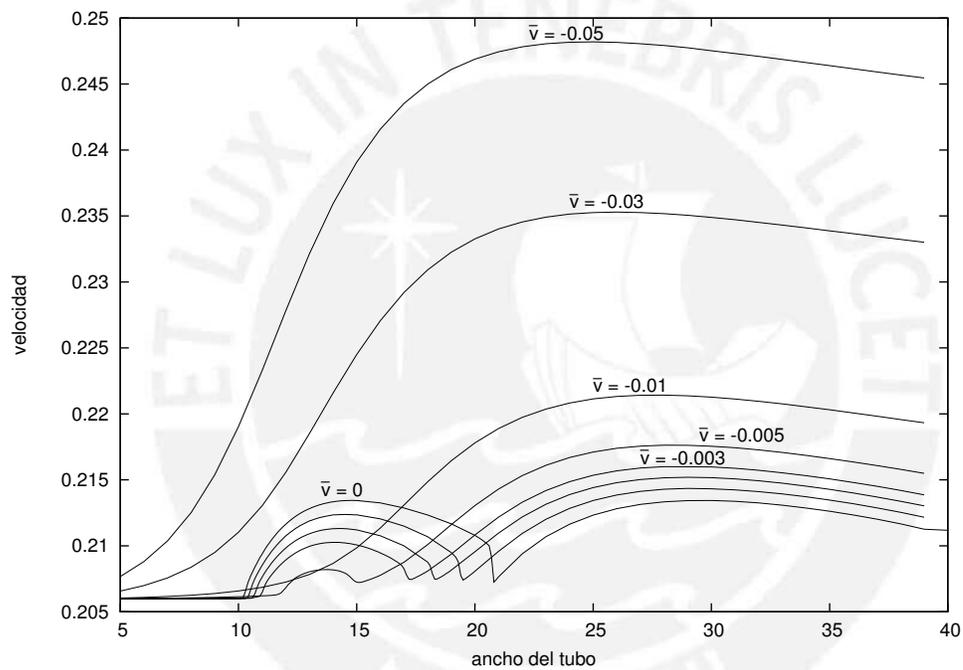


Figure 2.24: Velocidad promedio de los frentes en función del ancho  $l_y$  del tubo para varias velocidades promedio  $\bar{v}$  negativas correspondiente al flujo de Poiseuille.

## 2.13 Sensibilidad en las Condiciones Iniciales

Tal como se vió en la sección (2.1) hemos resuelto casi completamente las interrogantes planteadas. Es decir, encontramos patrones una vez que la solución del frente plano pierde estabilidad. Pero falta algo más trascendental, que es justo la interrogante que falta, ver si la propagación de los frentes inestables se convierten en caóticos. Para saber si el sistema reacción-difusión cúbica es caótico debemos verificar si es sensible a las condiciones iniciales.

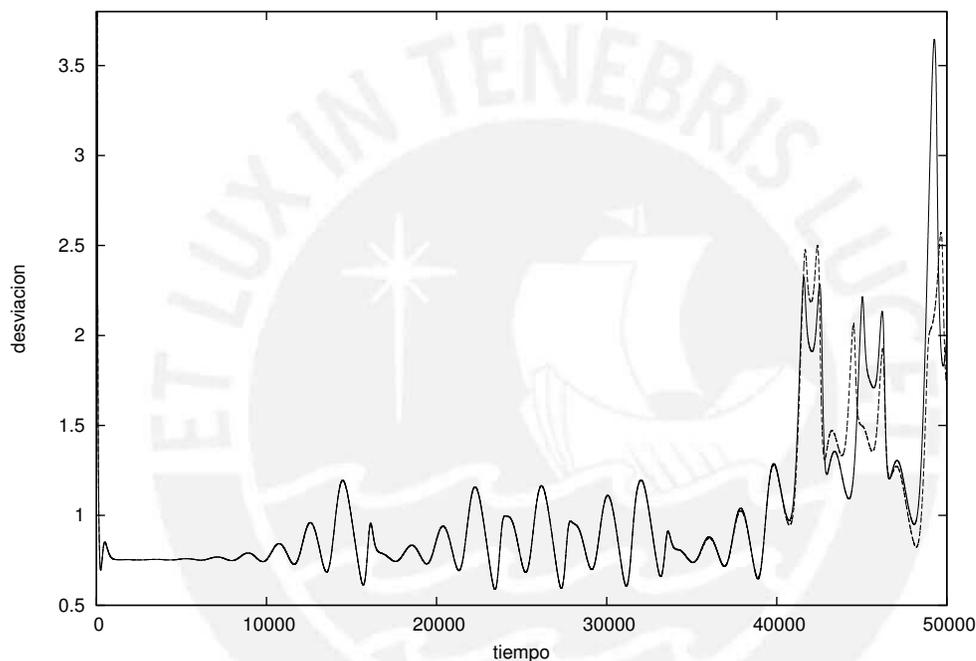


Figure 2.25: Representación en el dominio del tiempo de las desviaciones en función de  $t$ . La línea sólida es para la condición inicial  $50l_x/n = 25$  y para la línea punteada es  $49l_x/n = 24.5$ . Donde  $l_x = 600$ ,  $m = 1200$ ,  $\Delta t = 0.05$  y  $l_y = 70$ .

Como dijimos en la sección (1.3) de dos condiciones iniciales en el sistema reacción-difusión donde dichas condiciones están cercanamente juntas dan lugar a diferentes estados para tiempos largos. De la figura (2.25) vemos que las partes salientes en las condiciones iniciales tal como vimos en la sección 2.7 tienen una pequeña variación una respecto de la otra. Observamos claramente que hasta  $t \approx 40000$  las dos condiciones iniciales, sus desviaciones están juntas, pero después comienzan a separarse y toman desviaciones totalmente diferentes una de la otra. Característica propia de que la propagación de frentes en el sistema de reacción-difusión cúbica es caótico.

## 2.14 Intermitencia

Los análisis hechos en el sistema reacción-difusión cúbica con velocidad de advección, solo se hicieron cuando los frentes planos son estables, asimétricos y simétricos. Pero para anchos del tubo  $l_y > 60$  los comportamientos se manifiestan como caóticos. Para ver como se manifiestan los frentes caóticos, calculamos las desviaciones con  $\alpha = 0.5$  para ancho  $l_y = 62.802$  del tubo. En la figura (2.26) vemos que las desviaciones oscilan con amplitudes crecientes en función del tiempo. En el tiempo que mostramos las amplitudes crecen sin llegar a ser constantes, por lo que no podemos concluir si en este caso los frentes serán oscilatorios. Necesitamos aumentar  $l_y$  y ver que pasa con los frentes. En la figura también observamos que si aumentamos el tiempo seguirán creciendo las amplitudes hasta que se manifieste el fenómeno de intermitencia en el sistema. En nuestro trabajo tomaremos el tiempo  $t = 500000$  como límite y ver si al incrementar  $l_y$  se manifiestan comportamientos caóticos. La variación de  $l_y$  no la haremos grande sino pequeñas para hacer el seguimiento de la evolución de la desviación de los frentes en función del tiempo.

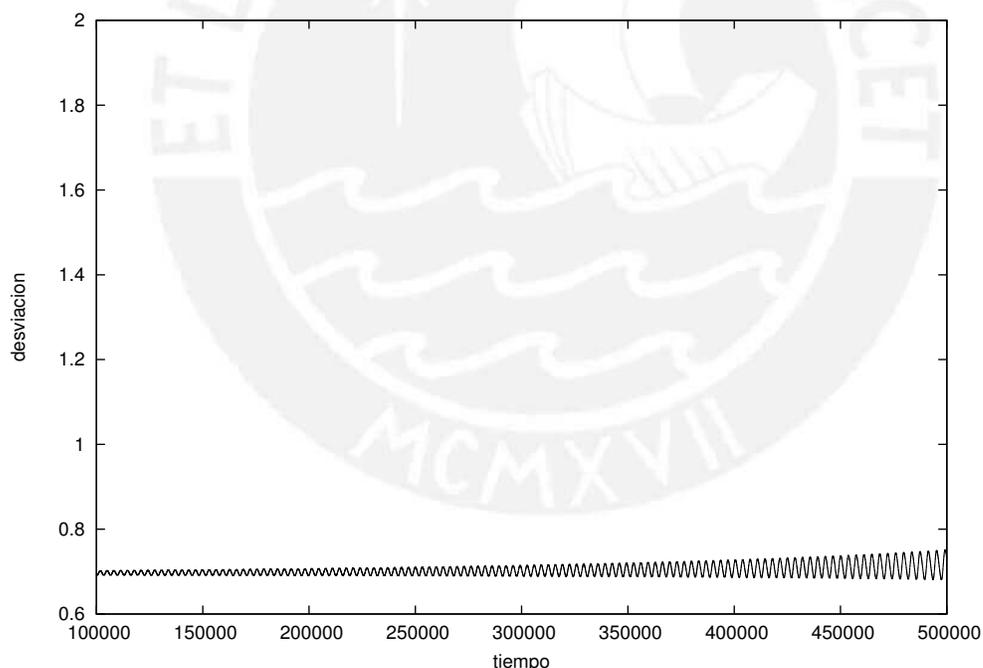


Figure 2.26: Representación de las desviaciones de los frentes en función de  $t$ . Las amplitudes crecen en función del tiempo. Para  $l_y = 62.802$

En efecto si vemos las figuras (2.27) y (2.28) vemos claramente que el sistema reacción-difusión cúbica se manifiesta el fenómeno de intermitencia. En la figura

(2.27) vemos que en  $t \approx 340000$  hay una explosión en la desviación del frente y luego se estabiliza y después de un intervalo de tiempo explota nuevamente y así sucesivamente. Cabe mencionar que las explosiones mostradas en (2.27) no ocurren a intervalos periódicos, como se puede observar en la figura. En este caso solo tenemos tres explosiones. Pero si aumentamos el ancho  $l_y = 62.892$  vemos en la figura (2.28) la primera explosión se dan en  $t \approx 230000$  siendo cada vez mas frecuente las explosiones. Notamos además que las explosiones no son idénticas, en la figura (2.28) notamos que la última oscilación es distinta antes de cada explosión. En nuestro caso tendremos siete explosiones. Esto nos sugiere que a medida que aumentamos  $l_y$  la cantidad de explosiones crece por cada intervalo de tiempo menor.

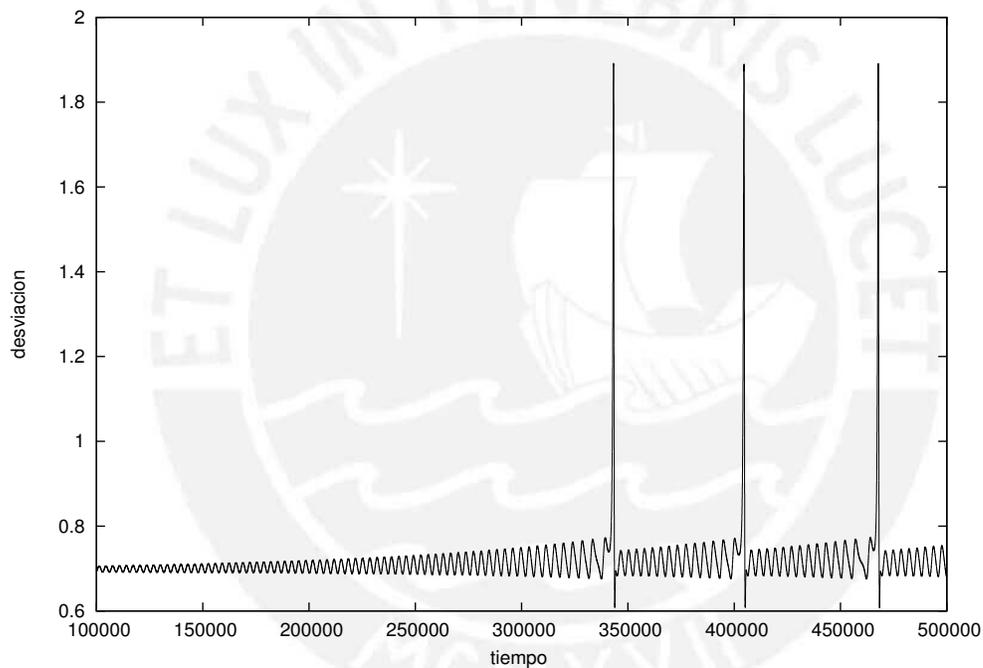


Figure 2.27: Desviaciones de los frentes en función de  $t$  para  $l_y = 62.842$ . En  $t \approx 340000$  observamos una explosión y otra explosión en  $t \approx 410000$  siendo este comportamiento una característica de la intermitencia.

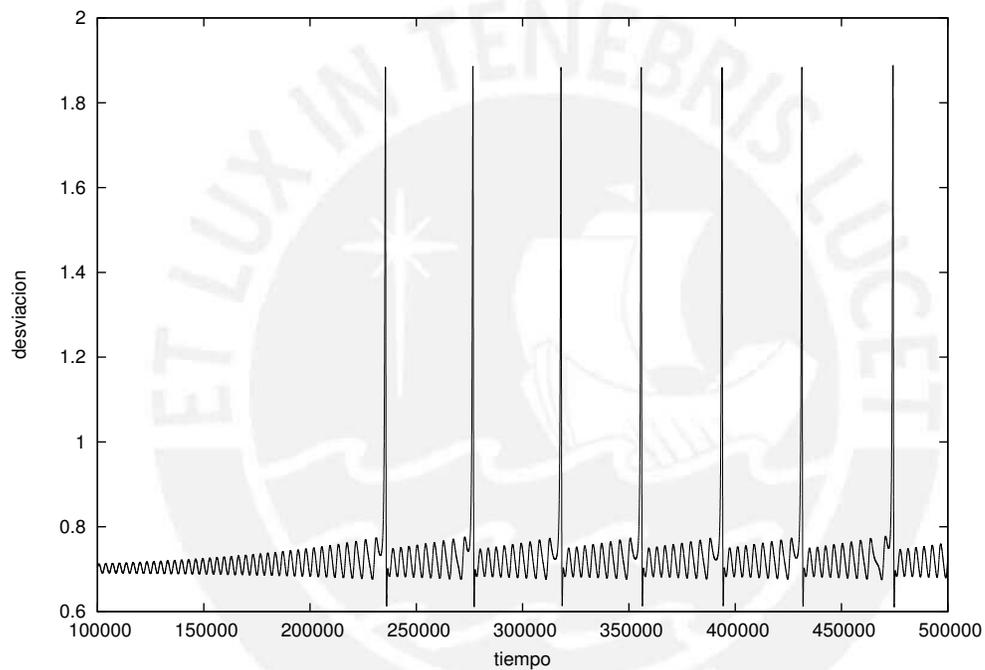


Figure 2.28: Para  $l_y = 62.892$  observamos la desviación de los frentes en función de  $t$ . En dichas desviaciones se observan explosiones frecuentes que para este caso son siete explosiones en cada intervalo de tiempo.

## 2.15 Intermitencia Caótica

Si seguimos aumentando  $l_y$  veremos explosiones casi continuas tal como se observa en la figura (2.29). Como bien observamos estas intermitencias ya no se repiten en cada intervalo de tiempo sino en forma aparentemente aleatoria. Podemos concluir por tanto, un fenómeno característico del caos.

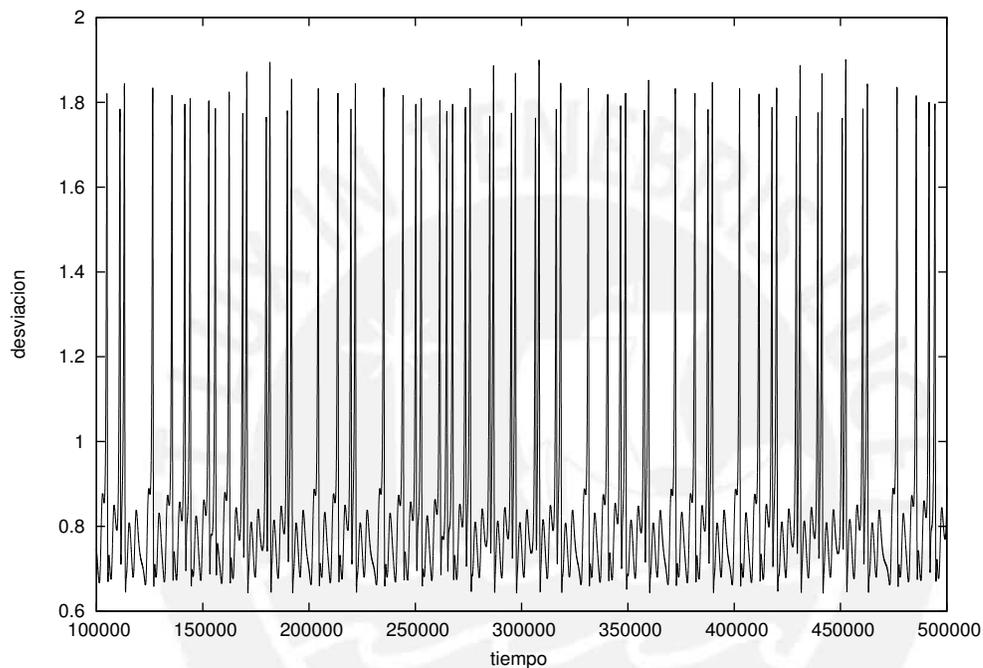


Figure 2.29: Para  $l_y = 63.910$  observamos la desviación de los frentes en función de  $t$ . En dichas desviaciones observamos explosiones continuas. Pero dichas explosiones se repiten en intervalos de tiempo aparentemente aleatorio indicando la presencia del caos.

## 2.16 Comportamientos Caóticos

Para comprender el efecto caótico de un sistema de reacción-difusión cúbica, pondremos tres ejemplos del efecto evolutivo de los frentes. Para un análisis más complejo del sistema tomamos tubos cuyo ancho  $l_y$  es el doble de  $l_x$  donde los frentes toman la dirección  $l_x$ . De acuerdo a nuestros resultados para distancias grandes de  $l_y$  se manifiestan inestables y tendrán comportamientos caóticos.

Primero analizemos para  $v_a = 0.14$ ,  $\delta = 8$ ,  $l_x = 600$ ,  $\Delta x = 0.5$ ,  $l_y = 1200$ ,  $\Delta y = 1$ ,

$t = 100000$ ,  $\Delta t = 0.01$  y  $\alpha = 0.5$ . Con el código `exp_ad.f90` hemos fabricado las figuras correspondientes a esta sección. En la figura (2.30) observamos el comportamiento de los frentes de onda que aproximadamente en  $x = 350$ , los frentes son simétricos en el eje horizontal del tubo. A partir de dicha distancia, se vuelve impredecible el comportamiento de dichos frentes. Pero también observamos antes que los frentes lleguen a  $x = 350$  un comportamiento muy complejo a medida que avanza en el tubo. De alguna manera hay una predicción simétrica, mas no del siguiente frente. Además resulta imposible predecir cuando se cumplirá un periodo para que nuevamente se repitan los frentes. En la figura (2.31) observamos las desviaciones que tienen los frentes uno del otro en función del tiempo. En dicha gráfica vemos que no hay una predicción de la desviación de un frente con respecto de la desviación del siguiente frente. Es pues por tanto un comportamiento caótico.

Una forma de visualizar mejor los frentes es analizando la evolución de los máximos o mínimos de los frentes en función del tiempo. En la figura (2.32) observamos con mas claridad la evolución del comportamiento de los frentes tomando en cuenta los mínimos. En dicha gráfica se evidencia la simetría que tienen los frentes hasta un tiempo aproximado de pasos del tiempo  $t = 40000$  y de ahí para adelante es totalmente asimétrico. Asimismo también en la figura (2.33) observamos los máximos con las mismas características que con los mínimos. Y en la figura (2.34) superponemos los resultados para máximos y mínimos donde notamos que el comportamiento es similar para ambos casos. Así también el análisis de las curvas de nivel para  $\beta = 0.5$ , vemos que tiene la misma forma de comportamiento como lo tiene  $\alpha = 0.5$ . Ver las figuras (2.35), (2.36), (2.37), (2.38) y (2.39)

El mismo análisis hacemos para  $\delta = 5$  y  $\delta = 20$  en el que visualizamos los comportamientos caóticos. Si se quiere trabajar con reacción-difusión cúbica, estos gráficos ayudarán tremendamente para posteriores investigaciones.

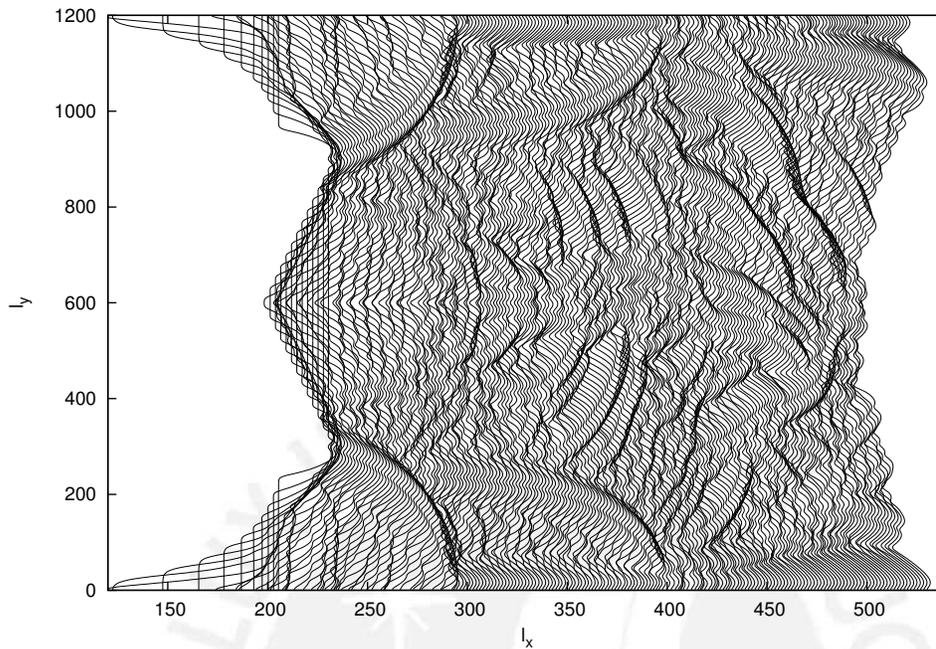


Figure 2.30: Frentes para  $\alpha = 0.5$  para  $\delta = 8$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 1200$ ,  $t = 100000$

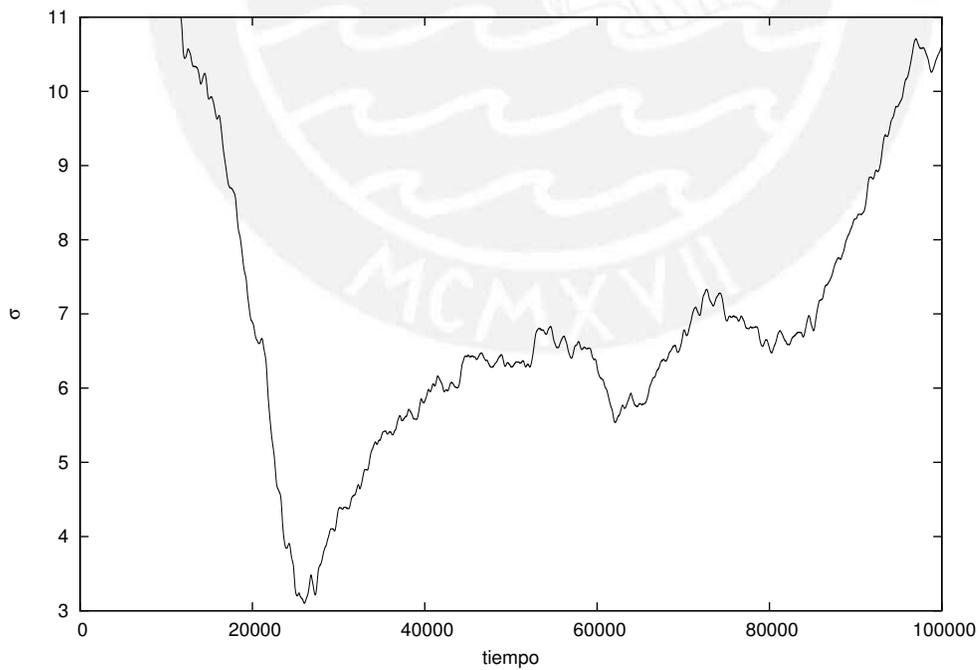


Figure 2.31: Desviaciones de  $\alpha = 0.5$  en función del tiempo  $t$

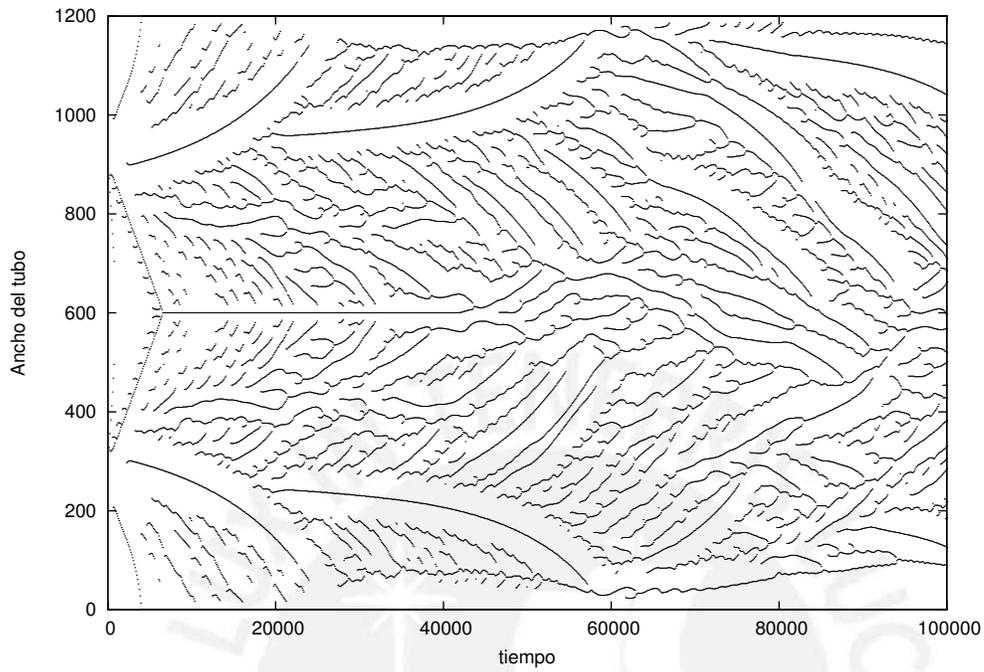


Figure 2.32: Valores mínimos para  $\alpha = 0.5$

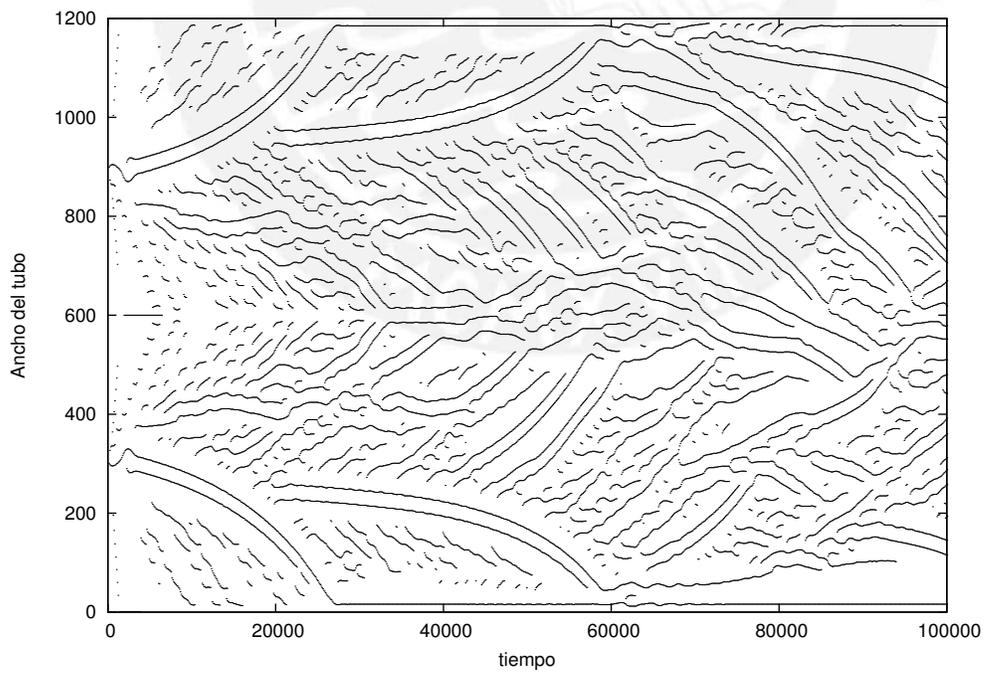


Figure 2.33: Valores máximos para  $\alpha = 0.5$

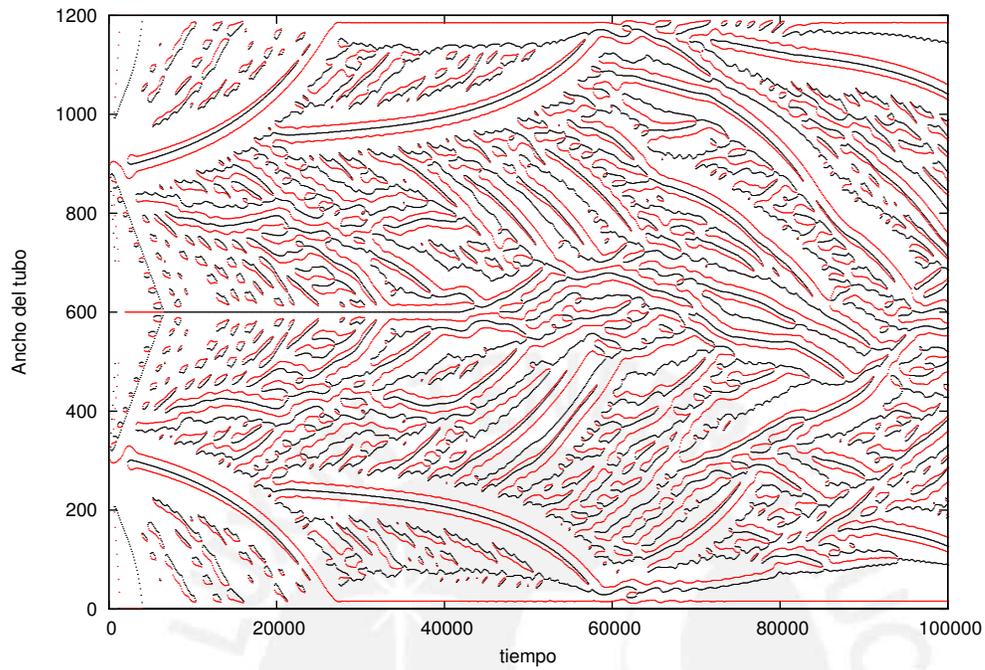


Figure 2.34: Valores máximos y mínimos para  $\alpha = 0.5$

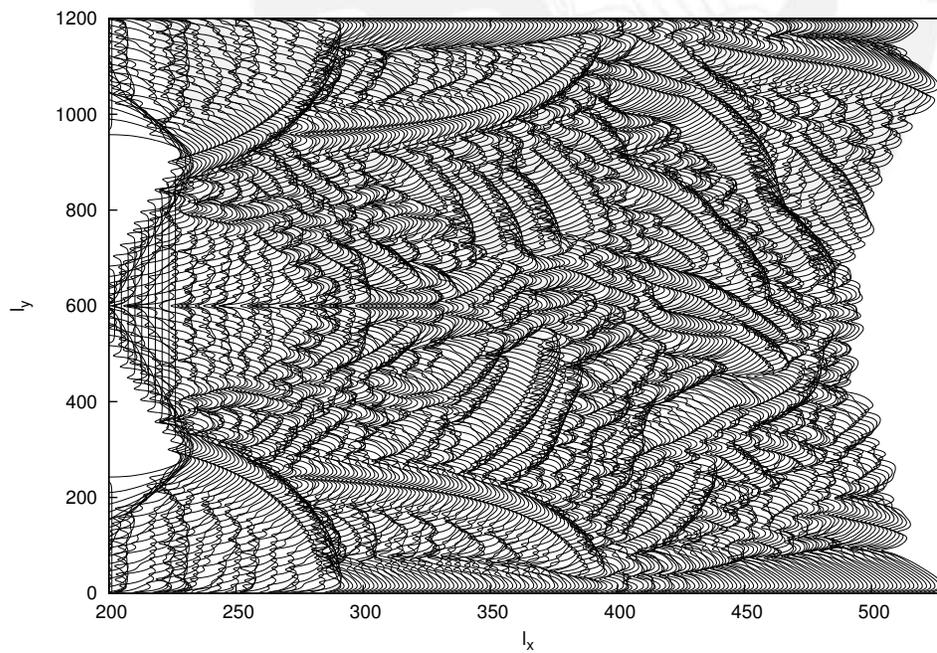


Figure 2.35: Frentes de  $\beta = 0.5$  para  $\delta = 8$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 1200$ ,  $t = 100000$

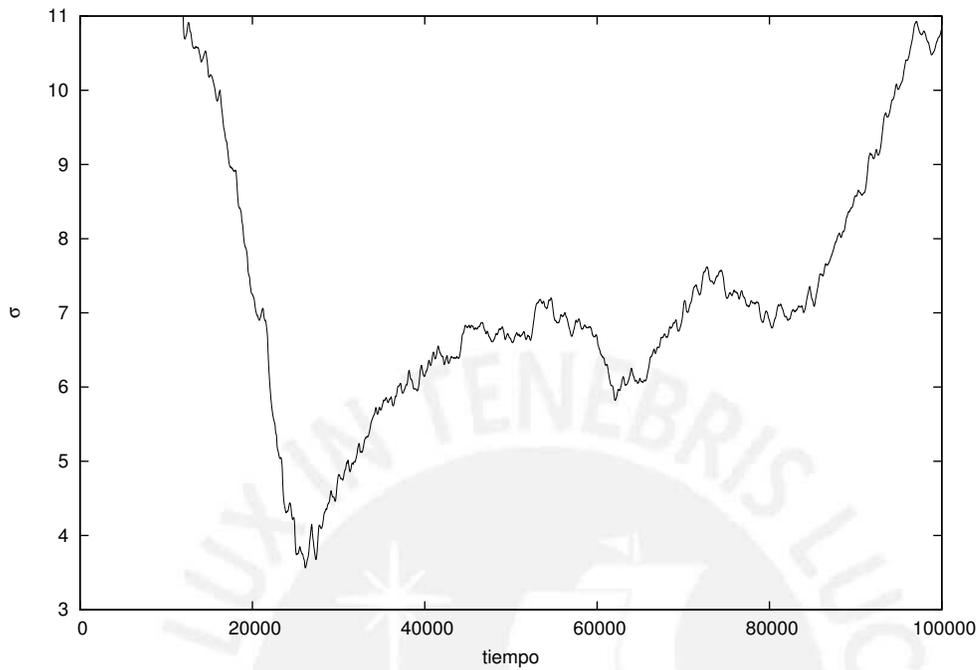


Figure 2.36: Desviaciones de  $\beta = 0.5$  en función del tiempo  $t$

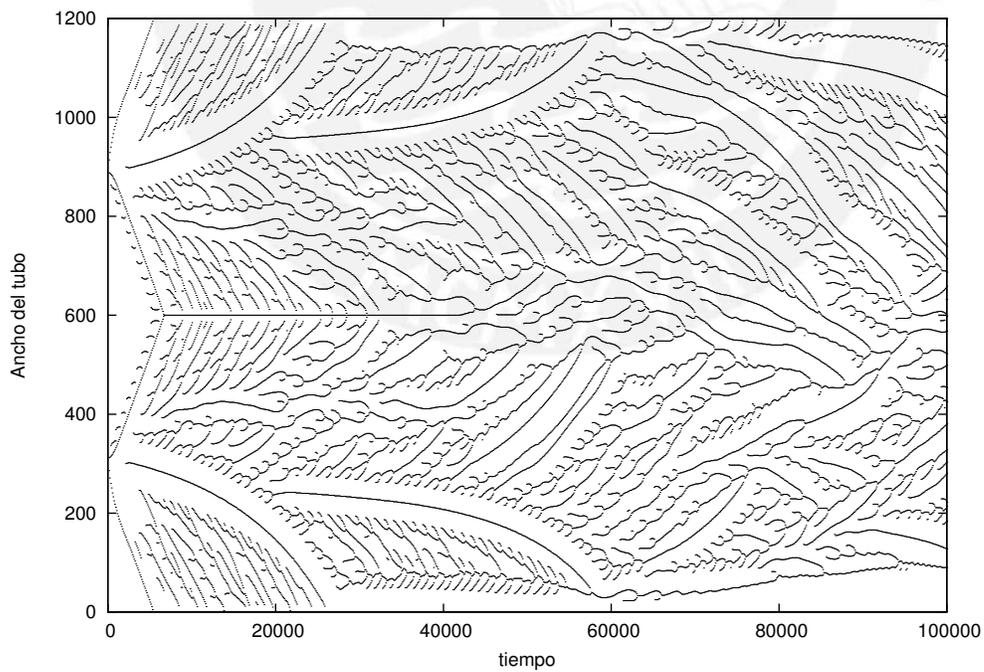


Figure 2.37: Valores mínimos para  $\beta = 0.5$

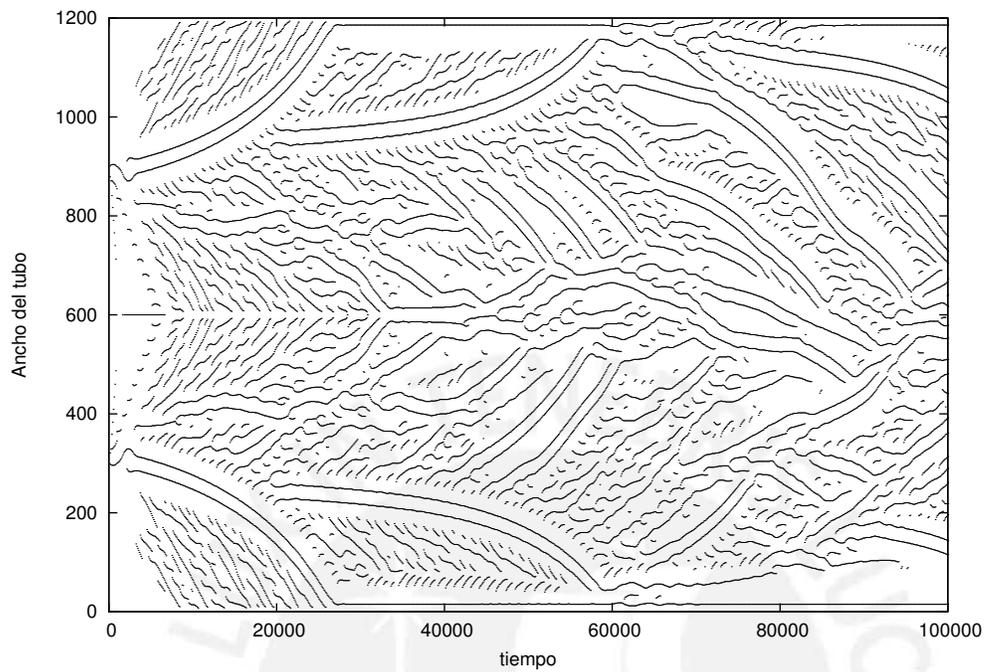


Figure 2.38: Valores máximos para  $\beta = 0.5$

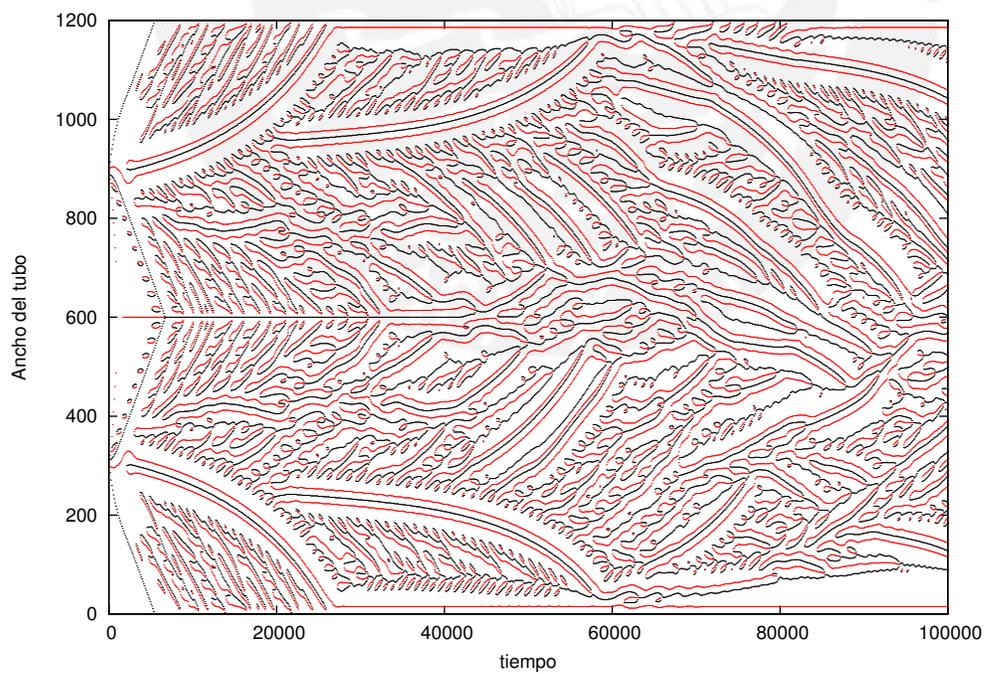


Figure 2.39: Valores máximos y mínimos para  $\beta = 0.5$

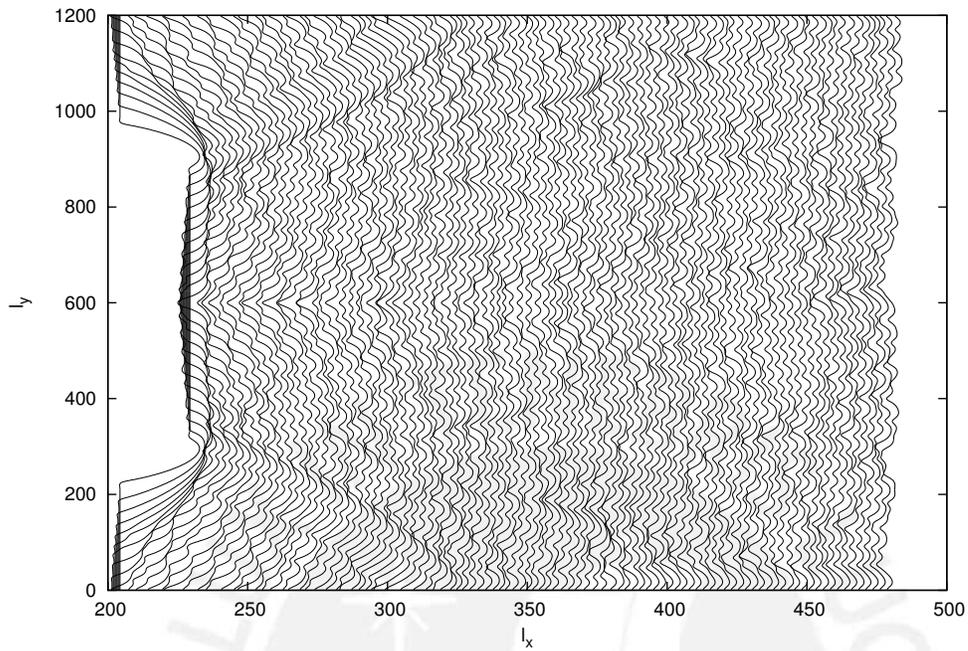


Figure 2.40: Frentes de  $\alpha = 0.5$  para  $\delta = 5$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 1200$ ,  $t = 100000$

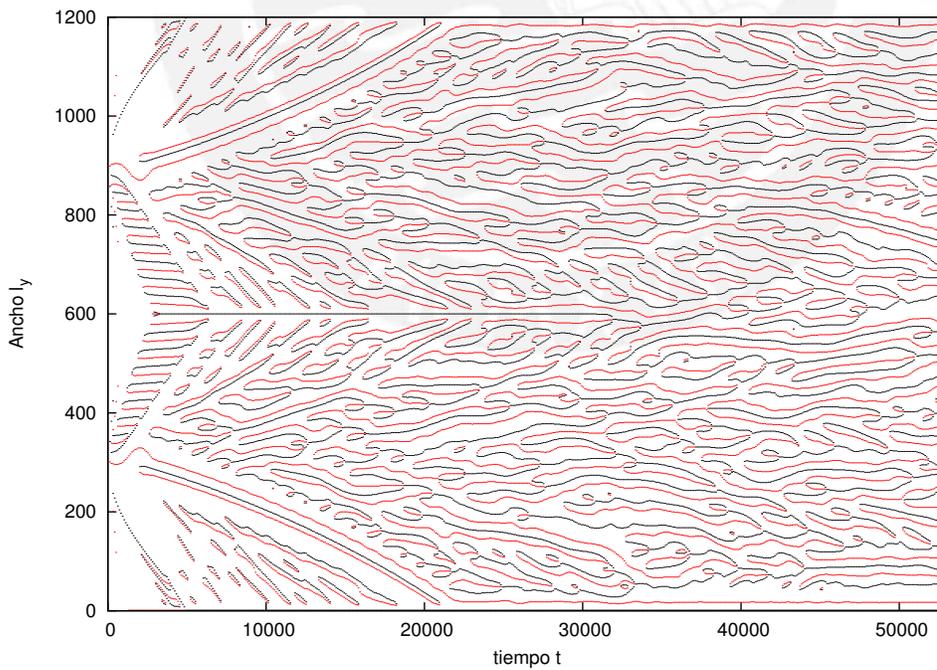


Figure 2.41: Valores máximos y mínimos para  $\alpha = 0.5$

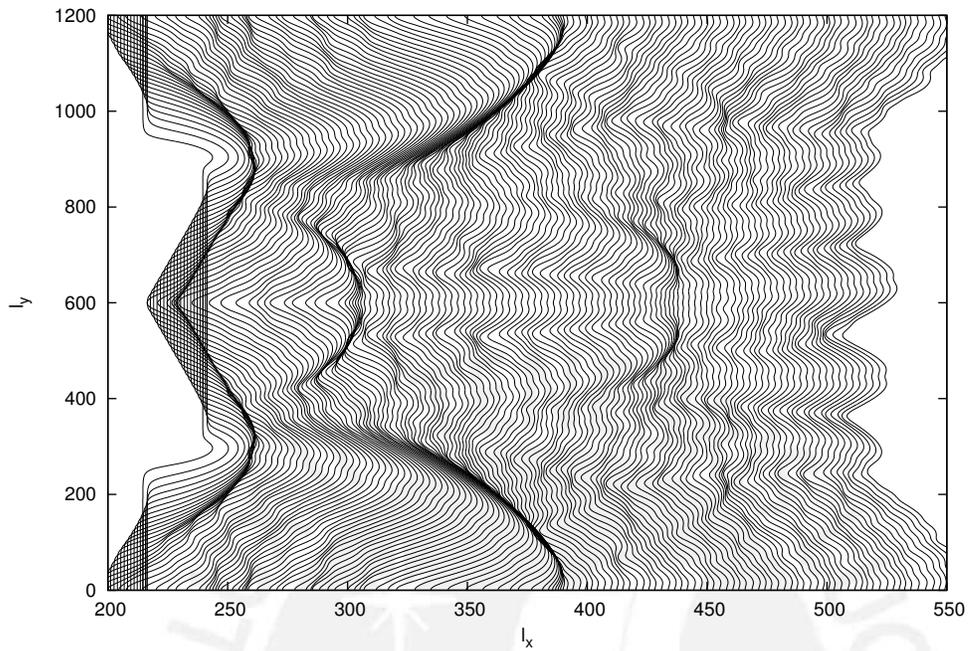


Figure 2.42: Frentes de  $\alpha = 0.5$  para  $\delta = 20$ ,  $l_x = 600$ ,  $l_y = 1200$ ,  $t = 100000$

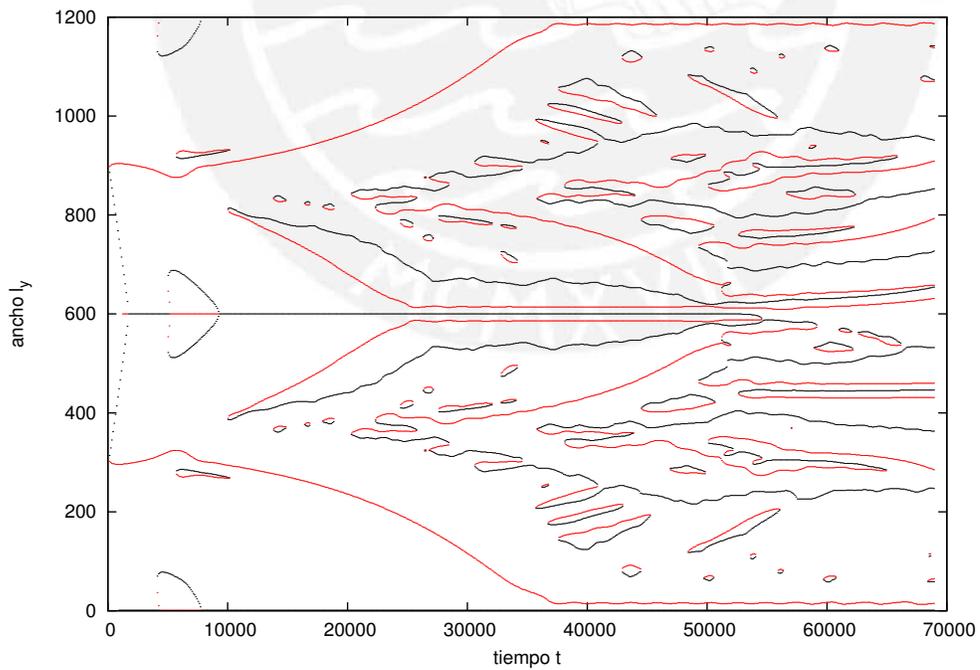


Figure 2.43: Valores máximos y mínimos para  $\alpha = 0.5$



# 3

## Conclusiones

1. En este trabajo hemos aplicado el método explícito para obtener las soluciones correspondientes a frentes de propagación en las ecuaciones de reacción-difusión cúbica. Esto se hizo con el fin de hacer un seguimiento de las soluciones numéricas desde las condiciones iniciales y de frontera impuestas hasta tiempos muy largos.
2. Con la aplicación del método explícito para dar solución a las ecuaciones de reacción-difusión cúbica, hemos verificado el patrón de búsqueda de inestabilidades tal como se encuentra en el artículo de J.H. Merkin [17].
3. Encontramos a través de nuestros cálculos de diferencias finitas el valor crítico  $\delta_c \approx 2.30$  aplicando una nueva técnica, y comprobamos que dicho resultado se ajusta al último resultado publicado por A. Malevanets [18].
4. Para mayor rapidez en el recurso computacional hemos adicionado un término advectivo que se ha encargado observar el frente desde un marco de referencia móvil, reduciendo la velocidad de propagación del frente comparado al sistema de laboratorio. La comprobación de la implementación de esta componente en el sistema, fue la verificación de la velocidad de propagación de un frente cuando  $D_A = D_B = 1$ , se aproxime a  $c = 1/\sqrt{2} \approx 0.7071$ . En efecto para  $l_x = 600$ ,  $n = 2400$ ,  $l_y = 8$ ,  $m = 32$ ,  $v_a = 0.7000$  y  $\Delta t = 0.01$ , encontramos que  $v \approx 0.7064$  con un error de 0.1%. Resultado que justifica las simulaciones efectuadas.
5. Hemos encontrado la velocidad de propagación de los frentes, así como las desviaciones respecto al frente plano en función en del ancho  $l_y$  del tubo, ver figura (2.20). Este gráfico nos muestra la evolución de los frentes a medida que incrementamos  $l_y$ . Es decir, los valores de  $l_y$  donde los frentes son planos, asimétricos y simétricos.

6. Podemos concluir que cuando incrementamos el valor promedio  $\bar{v}$  positivamente en el flujo de Poiseuille, los frentes simétricos van desapareciendo y los asimétricos entran a dominar en el sistema. De igual modo sucede si disminuimos  $\bar{v}$ , los frentes asimétricos van desapareciendo y los simétricos dominan en el sistema.
7. Las intermitencias se manifiestan para tiempos largos que tomamos como límite  $t = 500000$  a partir de  $l_y > 62.802$ . A medida que incrementamos  $l_y$  observamos que las intermitencias aumentan después de cada intervalo de tiempo, llegando a que las intermitencias sean continuas manifestándose finalmente comportamientos caóticos.



# Appendix A

## exp\_ab.f90 - Solución de $\alpha_0$ , $\beta_0$ , $\alpha_1$

y  $\beta_1$

```
! cuatro ecuaciones diferenciales de reaccion-difusion en una dimension
!
! Este codigo no lo voy a tocar dt=0.01, dx=0.4, delta=5, lx=10000, t=300000
!
program exp_ab
implicit none
integer::i,j,n,k,t,l,nu,nv,ierror,lyi,d
integer::flaga,flagb,flagc,flagd
real*8 ::dt,dx,lx,ly,la,lb,delta,Da,Db,pi,mxmu,mnmu,mxma,mnma,sh,sigma,alfa
real*8 ::regresion
real*8, dimension (5000) :: u0,u1,v0,v1,up,u0x,u1x,v0x,v1x
real*8, dimension (5000) :: a0,a1,b0,b1,ap,a0x,a1x,b0x,b1x
real*8, dimension (2000) :: ct,clny,at,alny
character(len=25)::archivo,strk,arca,arcb,arcc
pi=3.14159265358979
nu=1; nv=1
dt=0.01
print*,"Pasos del tiempo en miles"
t = 90000 ! este valor es normal
! para los resultados de los sigmas fue t = 61000
print*,"Ingrese lx "
```

```

    flaga = 0 ! si flaga = 1 ---> graba datos de alfas y betas al detalle
    flagb = 0 ! si flagb = 1 ---> graba datos de maximos y minimos asi como sus
logaritmos
    flagc = 1 ! si flagc = 1 ---> graba datos de aproximacion de Taylor y Fourier
    flagd = 0 ! si flagd = 1 ---> graba datos de aproximacion de Fourier
    lx=1000
    n =5000
    dx=lx/n
    Da=1.
    print *,n,dx
    do d=21,31
        delta=1+(d-1)*0.05_8; Db=Da/delta
        ! delta=1+(d-1)*0.5; Db=Da/delta
        print *,'Delta ',delta
        !
        ! Condiciones iniciales
        !
        la=Da*dt/dx**2
        lb=Db*dt/dx**2
        write(strk,'(i6)') int(lx)
        arca='exp'//adjustl(strk)
        arcb='/sigma'
        write(strk,'(f5.2)') delta
        arcc=adjustl(strk)
        archivo=trim(arca)//trim(arcb)//trim(arcc)
        print *,archivo
        open (unit=15,file=archivo,status="unknown",action="write")
        do l=200,1000,10
            ! do l=70,200
            do i=1,n
                if (i<=n/2) then
                    u0(i)=0.; u1(i)=0.; v0(i)=1.; v1(i)=0.
                else
                    u0(i)=1.; u1(i)=0.; v0(i)=0.; v1(i)=0.
                end if
            end do
            u1(n/2)=+0.001_8; v1(n/2)=-0.001_8
            if (flagc==1) then
                a0=u0; b0=v0; a1=u1; b1=v1
            endif
        end do
    end do

```

```

ly=1
if (flagb==1) then
!
! Crea un archivo con la estructura dl99.9lx99999.ly99.99
!
write(strk,'(i6)') int(lx); arca='exp'//adjustl(strk)
write(strk,'(f4.1)') delta; arcc='/dl'//adjustl(strk)
write(strk,'(f6.2)') ly ; arcb='ly'//adjustl(strk)
archivo=trim(arca)//trim(arcc)//trim(arcb)
open (unit=14,file=archivo,status="unknown",action="write")
endif
do k=1,t
u0x=u0; v0x=v0; u1x=u1; v1x=v1; u0x(1)=0; u0x(n)=1.
if (flagc==1) then
a0x=a0; b0x=b0; a1x=a1; b1x=b1; a0x(1)=0; a0x(n)=1.
endif
do i=2,n-1
u0x(i) = u0(i) + la*(u0(i+1)-2*u0(i)+u0(i-1)) - u0(i)*(v0(i))**2*dt
v0x(i) = v0(i) + lb*(v0(i+1)-2*v0(i)+v0(i-1)) + u0(i)*(v0(i))**2*dt
sh = v0(i)**2*u1(i) + 2*u0(i)*v0(i)*v1(i) + 3*u1(i)*v1(i)**2/4.
u1x(i) = u1(i) + la*(u1(i+1)-2*u1(i)+u1(i-1)) -
- Da*dt*(nu*pi/ly)**2*u1(i) - sh*dt
v1x(i) = v1(i) + lb*(v1(i+1)-2*v1(i)+v1(i-1)) -
- Db*dt*(nv*pi/ly)**2*v1(i) + sh*dt
if (flagc==1) then
a0x(i) = a0(i) + la*(a0(i+1)-2*a0(i)+a0(i-1)) - a0(i)*(b0(i))**2*dt
b0x(i) = b0(i) + lb*(b0(i+1)-2*b0(i)+b0(i-1)) + a0(i)*(b0(i))**2*dt
sh = b0(i)**2*a1(i) + 2*a0(i)*b0(i)*b1(i)
a1x(i) = a1(i) + la*(a1(i+1)-2*a1(i)+a1(i-1)) -
- Da*dt*(nu*pi/ly)**2*a1(i) - sh*dt
a1x(i) = a1(i) + la*(a1(i+1)-2*a1(i)+a1(i-1)) -
- Db*dt*(nv*pi/ly)**2*b1(i) + sh*dt
endif
enddo
u0=u0x; u1=u1x; v0=v0x; v1=v1x
if (flagc==1) then
a0=a0x; a1=a1x; b0=b0x; b1=b1x
endif
mxmu=-1.; mxma=-1.
mnmu=+1.; mnma=+1.

```

```

do i=1,n
  if (u1(i)>mxmu) then
    mxmu = u1(i)
  endif
  if (u1(i)<mnmu) then
    mnmu = u1(i)
  endif
  if (flagc==1) then
    if (a1(i)>mxma) then
      mxma = a1(i)
    endif
    if (a1(i)<mnma) then
      mnma = a1(i)
    endif
  endif
endif
enddo
if (mod(k,1000)==0) then
  print *,k
endif
if (mod(k,100)==0) then
  if (flagb==1) then
    if (flagc==1) then
      write(14,*)k,mnmu,mxmu,mxmu+mnmu,mxma+mnma,log(mxmu+mnmu),
        ,log(mxma+mnma)
    else
      write(14,*)k,mnmu,mxmu,mxmu+mnmu,log(mxmu+mnmu)
    endif
  endif
endif
if (k>t-2000 .and. k<t+1) then
  ct(k-t+2000)=k*dt; clny(k-t+2000)=log(mxmu+mnmu)
  if (flagc==1) then
    at(k-t+2000)=k*dt; alny(k-t+2000)=log(mxma+mnma)
  endif
endif
if (mod(k,1000)==0) then
  if (flaga==1) then
    write(strk,'(i6)') int(lx)
    arca='exp/'//adjustl(strk)
    write(strk,'(i6)') k
  endif
endif

```

```

        arcb='/ab'//adjustl(strk)
        archivo=trim(arca)//trim(arcb)
        open (unit=13,file=archivo,status="unknown",action="write")
        do i=n/2,n
            write(unit=13,fmt="(i5,4f20.16)",iostat=ierror)i,u0(i),
                ,v0(i),u1(i),v1(i)

        enddo
        write(unit=13,fmt="(i5,f12.8)",iostat=ierror)
        close(unit=13)
    endif
endif
enddo
close(14)
print *,ly
if (flagc==1) then
    write(15,*) ly,sigma(ct,cly),sigma(at,alny),regresion(ct,cly)
else
    write(15,*) ly,sigma(ct,cly)
endif
flush(15)
enddo
close(15)
enddo
end program exp_ab

function sigma(ct,cly)
    implicit none
    real*8, dimension (2000) :: ct,cly
    real*8 :: sigma,sumt,sumlny,sumtlny,sumtt
    integer :: i,nt

    nt=2000
    sumt=0; sumlny=0; sumtt=0; sumtlny=0
    do i=1,nt
        sumt = sumt + ct(i)
        sumlny = sumlny + cly(i)
        sumtlny = sumtlny + ct(i)*cly(i)
        sumtt = sumtt + ct(i)**2
    enddo
    sigma = (nt*sumtlny - sumt*sumlny)/(nt*sumtt-sumt**2)
end function

```

```

function regresion(ct,clny)
  implicit none
  real*8, dimension (2000) :: ct,clny
  real*8 :: regresion,sumt,sumlny,sumtlny,sumtt,sumlnlny
  integer :: i,nt
  nt=2000
  sumt=0; sumlny=0; sumtt=0; sumtlny=0; sumlnlny=0
  do i=1,nt
    sumt = sumt + ct(i)
    sumlny = sumlny + clny(i)
    sumtlny = sumtlny + ct(i)*clny(i)
    sumlnlny = sumlnlny + clny(i)**2
    sumtt = sumtt + ct(i)**2
  enddo
  regresion = (nt*sumtlny - sumt*sumlny)/
              / sqrt((nt*sumtt-sumt**2)*(nt*sumlnlny-sumlny**2))
end function

```



## Appendix B

# exp\_ad.f90 - Solución de la Ecuación Reacción-Difusión Cúbica en 2D

```
! Solucion de la ecuacion reaccion-difusion en 2-D.
! Metodo explicito, funciona muy bien
!
program exp_ad1
implicit none
integer :: i,j,k,n,m,t,ierror,d,li,dsp,ultime,flag,seed,values(8),lt,ka,nr,y
real*8 :: dt,dx,dy,lx,ly,delta,Da,Db,uno,ux,ix,vx,ixa,ixb,lagrange,vp,cf
real*8 :: k1a,k1b,k2a,k2b,kv,vad,advu,advv,ilx(5),ily(5)
real*8 :: avgalfa,avgbeta,avgvx,sigalfa,sigbeta,sigvx,sumalfa,sumbeta,sumvx
real*8 :: sum2alfa,sum2beta,sum2vx
real*8, dimension (2400,240) :: u,ua,v,va
real*8, dimension (240) :: xmin,xant
real*4::inicio,final
character(len=50)::archivo,strk,arca,arcb,arcc

call date_and_time(VALUE=values)
seed=values(5)*60*60+values(6)*60+values(7)+values(8)
call srand(seed)
```

```

print *,"Pasos del tiempo en miles"
t = 1000000
!
! largo del tubo
! todas las simulaciones hasta hoy 25-08 son para lx=1000 y n=1000
! ly=120 y m=120
! vad=0.2
lx = 600
n = 2400
dx = lx/(n-1)
!
! Ancho del tubo
ly = 63.000_8
m = 14
dy = ly/m
!
! delta del tiempo
dt = 0.01_8
!
! coeficiente de difusion
Da = 1
!
! termino que acompaa a la adveccion
vad = +0.2050_8; y = 6100
vp = +0.050_8
!
! Desplazamiento de la condicion inicial hacia la izquierda
dsp = 3

do lt=y,y,10
  ly=lt*0.001_8; m=lt/1000*4; dy=ly/(m-1)
  do d=9,9
    delta=1+(d-1)*0.5; Db=Da/delta
    print *,'Delta ',delta,vad
    print *,m,ly
    !
    ! condiciones iniciales para u=alpha
    do j=1,m
      do i=1,n
        if (i<=n/dsp) then

```

```

        u(i,j)=0.0_8
    else
        u(i,j)=1.0_8
    endif
end do
end do
uno = 0.0
xant=0
do j=m/4,3*m/4
    do k=0,50
        u(n/dsp+k,j)=uno
    enddo
end do
! condiciones iniciales para v=beta
v=1-u
!
! Actualizacion de datos cuando se bloquea el programa
!
ultime=0
call datos(u,v,ly,n,m,ultime)
write(strk,'(f7.3)') ly
arca = adjustl(strk)
archivo='600'//arca ; arcb = 'isoalfa' ; archivo=trim(archivo)//trim(arcb)
print *,archivo
open (unit=14,access='Append',file=archivo,status="unknown",action="write")
archivo='600'//arca ; arcb = 'isoamin' ; archivo=trim(archivo)//trim(arcb)
open (unit=17,access='Append',file=archivo,status="unknown",action="write")
archivo='600'//arca ; arcb = 'isoamax' ; archivo=trim(archivo)//trim(arcb)
open (unit=19,access='Append',file=archivo,status="unknown",action="write")
archivo='600'//arca ; arcb = 'isovari' ; archivo=trim(archivo)//trim(arcb)
open (unit=16,access='Append',file=archivo,status="unknown",action="write")
call cpu_time(inicio)

k1a=Da*dt/dx**2 ; k2a=Da*dt/dy**2 ; cf=dt/(2*dx)
k1b=Db*dt/dx**2 ; k2b=Db*dt/dy**2 ; ka=20
ua=u; va=v
ultime=0
do k=ultime+1,t
    do i=2,n-1
        do j=1,m

```

```

if (j==1 .or. j==m) then
  kv = (-vp+vad)*cf
else
  kv = (6*vp*(j-1)*dy*(ly-(j-1)*dy)/ly**2-vp+vad)*cf
endif
advu = kv*(u(i+1,j)-u(i-1,j)); advv = kv*(v(i+1,j)-v(i-1,j))
if (j==1) then
  ua(i,j) = (1-2*k1a-2*k2a)*u(i,j) + k1a*(u(i-1,j)+u(i+1,j))
           + 2*k2a*u(i,j+1) - dt*u(i,j)*v(i,j)**2 +advu
  va(i,j) = (1-2*k1b-2*k2b)*v(i,j) + k1b*(v(i-1,j)+v(i+1,j))
           + 2*k2b*v(i,j+1) + dt*u(i,j)*v(i,j)**2 +advv
endif
if (j>1 .and. j<m) then
  ua(i,j) = (1-2*k1a-2*k2a)*u(i,j) + k1a*(u(i-1,j)+u(i+1,j))
           + k2a*(u(i,j-1)+u(i,j+1)) - dt*u(i,j)*v(i,j)**2+advu
  va(i,j) = (1-2*k1b-2*k2b)*v(i,j) + k1b*(v(i-1,j)+v(i+1,j))
           + k2b*(v(i,j-1)+v(i,j+1)) + dt*u(i,j)*v(i,j)**2+advv
endif
if (j==m) then
  ua(i,j) = (1-2*k1a-2*k2a)*u(i,j) + k1a*(u(i-1,j)+u(i+1,j))
           + 2*k2a*u(i,j-1) - dt*u(i,j)*v(i,j)**2 +advu
  va(i,j) = (1-2*k1b-2*k2b)*v(i,j) + k1b*(v(i-1,j)+v(i+1,j))
           + 2*k2b*v(i,j-1) + dt*u(i,j)*v(i,j)**2 +advv
endif
enddo
enddo
u=ua; v=va
if ( mod(k,10000)==0 .or. mod(k,2000)==0 ) then
  ux=0.5
  do j=1,m
    do i=n/dsp,n
      if (u(i,j) > ux) then
        ix = i-1 + (ux-u(i-1,j))/(u(i,j)-u(i-1,j))
        xmin(j) = ix*dx
        if ( mod(k,10000)==0) then
          if (j==1) then
            write(14,*) k*dt,ix*dx,0.0
          else
            if (j==m) then
              write(14,*) k*dt,ix*dx,ly
            endif
          endif
        endif
      endif
    enddo
  enddo
endif

```

```

                else
                    write(14,*) k*dt,ix*dx,(j-1)*dy
                endif
            endif
        endif
    endif
    exit
endif
enddo
enddo
if ( mod(k,10000)==0) then
    write(14,*)
    write(14,*)
endif
endif
if ( mod(k,2000)==0 )then
!
! Minimos de alpha
!
    if (xmin(2)-xmin(1) > 0.) then
        write(17,*) k*dt,xmin(1),1*dy
    endif
    do j=2,m-1
        if (xmin(j)-xmin(j-1) < 0.) then
            if (xmin(j)-xmin(j+1) < 0.) then
                write(17,*) k*dt,xmin(j),(j-1)*dy
            endif
        endif
    enddo
    if (xmin(m)-xmin(m-1) < 0.) then
        write(17,*) k*dt,xmin(m),m*dy
    endif
!
! Maximos de alpha
!
    if (xmin(2)-xmin(1) < 0.) then
        write(19,*) k*dt,xmin(1),0*dy
    endif
    do j=2,m-1
        if (xmin(j)-xmin(j-1) > 0.) then
            if (xmin(j)-xmin(j+1) > 0.) then

```

```

        write(19,*) k*dt,xmin(j),(j-1)*dy
    endif
endif
enddo
if (xmin(m)-xmin(m-1) > 0.) then
    write(19,*) k*dt,xmin(m),m*dy
endif
endif
if (mod(k,ka-1)==0) then
    ux=0.5
    do j=1,m
        do i=n/dsp,n
            if (u(i,j) > ux) then
                ilx(1)=u(i-1,j); ilx(2)=u(i,j); ilx(3)=u(i+1,j)
                ilx(4)=u(i+2,j); ilx(5)=u(i+3,j)
                ily(1)=i-1 ; ily(2)=i ; ily(3)=i+1 ; ily(4)=i+2
                ily(5)=i+3 ; nr=4
                ix = lagrange(ilx,ily,nr,ux)
                xant(j) = ix*dx
                exit
            endif
        enddo
    enddo
endif
if ( mod(k,20)==0 ) then
    ka=ka+20
    ux=0.5
    avgalfa=0; avgbeta=0; sumalfa=0; sumbeta=0; sum2alfa=0
    sum2beta=0; sumvx=0; sum2vx=0
    do j=1,m
        do i=n/dsp,n
            if (u(i,j) > ux) then
                ilx(1)=u(i-1,j); ilx(2)=u(i,j); ilx(3)=u(i+1,j)
                ilx(4)=u(i+2,j); ilx(5)=u(i+3,j)
                ily(1)=i-1 ; ily(2)=i ; ily(3)=i+1 ; ily(4)=i+2
                ily(5)=i+3 ; nr=4
                ix = lagrange(ilx,ily,nr,ux)
                sumalfa = sumalfa + ix*dx
                sum2alfa = sum2alfa + (ix*dx)**2
                vx = (ix*dx - xant(j))/dt
            endif
        enddo
    enddo
endif

```

```

        sumvx = sumvx + vx
        sum2vx = sum2vx + vx**2
        exit
    endif
enddo
enddo
avgalfa = (sumalfa/m)
avgvx = (sumvx/m)
sigalfa = 0; sigvx = 0
if ( sum2alfa-sumalfa**2/m > 0 ) then
    sigalfa = sqrt((sum2alfa-sumalfa**2/m)/(m-1))
endif
if ( sum2vx-sumvx**2/m > 0 ) then
    sigvx = sqrt((sum2vx -sumvx **2/m)/(m-1))
endif
do j=1,m
    do i=n/dsp,n
        if (v(i,j) < ux) then
            ilx(1)=v(i-1,j); ilx(2)=v(i,j); ilx(3)=v(i+1,j)
            ilx(4)=v(i+2,j); ilx(5)=v(i+3,j)
            ily(1)=i-1 ; ily(2)=i ; ily(3)=i+1 ; ily(4)=i+2
            ily(5)=i+3 ; nr=4
            ix = lagrange(ilx,ily,nr,ux)
            sumbeta = sumbeta + ix*dx
            sum2beta = sum2beta + (ix*dx)**2
            exit
        endif
    enddo
enddo
avgbeta = (sumbeta/m)
sigbeta = 0
if ( sum2beta-sumbeta**2/m > 0 ) then
    sigbeta = sqrt((sum2beta-sumbeta**2/m)/(m-1))
endif
write(16,"(f8.1,6f21.12)") k*dt,avgalfa,sigalfa,
,avgbeta,sigbeta,avgvx,sigvx
if ( mod(k,1000)==0 ) then
    call cpu_time(final)
    print *,k,final-inicio, ix*dx
    call cpu_time(inicio)

```

```

        endif
    end if
    if ( mod(k,2000)==0 ) then
        flush(14); flush(16); flush(17); flush(19)
        write(strk,'(f7.3)') ly
        archivo='600/'//adjustl(strk)
        open (unit=13,file=archivo,status="unknown",action="write")
        write (13,*) k; close(13)
        archivo='600/backup'//adjustl(strk)
        open (unit=13,file=archivo,status="unknown",action="write")
        do i=1,n
            do j=1,m
                write(unit=13,fmt="(2i5,2f20.15)",iostat=ierror)i,j,u(i,j),v(i,j)
            end do
        end do
        close(unit=13)
    end if
enddo
archivo='600/'//adjustl(strk)
open (unit=13,file=archivo,status="old",iostat=ierror)
close(unit=13,status='Delete')
archivo='600/backup'//adjustl(strk)
open (unit=13,file=archivo,status="old",iostat=ierror)
close(unit=13,status='Delete')
enddo
enddo
end program exp_ad1

subroutine datos(u,v,ly,n,m,ultime)
    implicit none
    integer:: ierror,i,j,k,ultime,n,m,dsp
    real*8 :: ly,alfa,beta,tiempo,avgalfa,sigalfa,avgbeta,sigbeta,avgvx,sigvx
    real*8, dimension (600,60) :: u,v
    character(len=50)::archivo,arca,arcb,strk,archivold

    write(strk,'(f7.3)') ly
    arca = adjustl(strk)
    archivo='600/'//arca
    open (unit=14,file=archivo,status="old",action="read",iostat=ierror)
    if (ierror==0) then
        read (14,*) ultime; close(14)
    end if
end subroutine datos

```

```

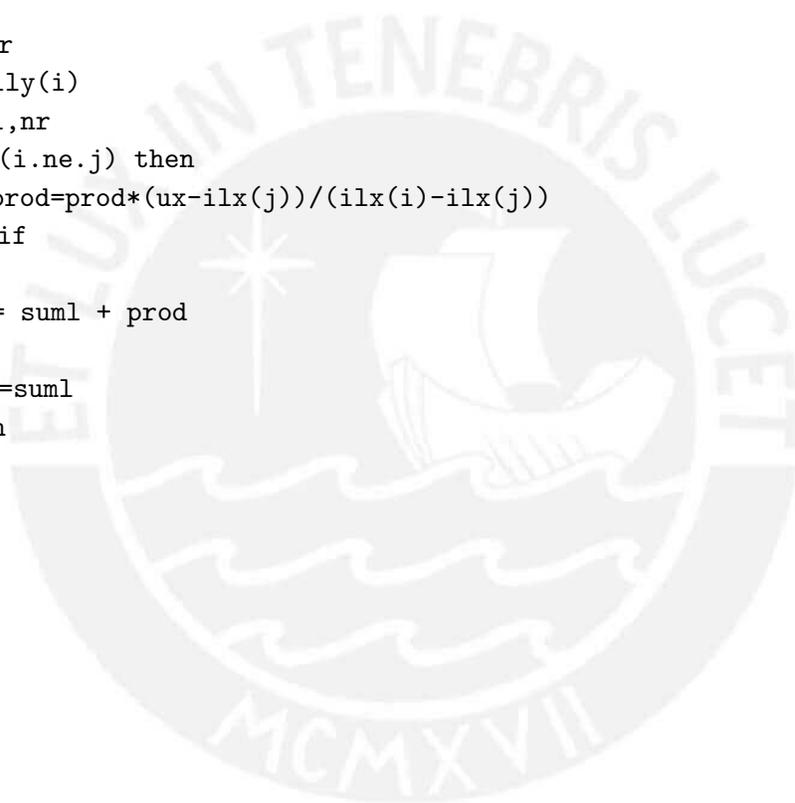
archivold='600/old'//arca ; arcb = 'isovari'
archivold=trim(archivold)//trim(arcb)
archivo = '600/' //arca ; arcb = 'isovari'
archivo =trim(archivo) //trim(arcb)
open (unit=14,file=archivold,status="old",action="read",iostat=ierror)
if (ierror==0) then
  close(14)
  open (unit=14,file=archivold,status="old",iostat=ierror)
  close(unit=14,status='Delete')
endif
call rename(archivo,archivold,ierror)
open (unit=14,file=archivold,status="old" ,action="read" ,iostat=ierror)
open (unit=16,file=archivo ,status="unknown",action="write",iostat=ierror)
k=0
do while (.true.)
  read(14,*,iostat=ierror) tiempo,avgalfa,sigalfa,avgbeta,sigbeta,avgvx,sigvx
  if (ierror==0) then
    k = k + 200
    write(16,"(f7.1,6f22.15)") tiempo,avgalfa,sigalfa,avgbeta,sigbeta,
      ,avgvx,sigvx
    if (k==ultime) then
      exit
    endif
  else
    exit
  endif
enddo
close(14); close(16)
open (unit=14,file=archivold,status="old",iostat=ierror)
close(unit=14,status='Delete')
archivo='600/backup'//adjust1(strk)
open (unit=13,file=archivo,status="old",action="read")
do while (.true.)
  read(13,*,iostat=ierror) i,j,alfa,beta
  if (ierror==0) then
    u(i,j)=alfa; v(i,j)=beta
  else
    exit
  endif
enddo

```

```
endif
end subroutine datos

function lagrange(ilx,ily,nr,ux)
  implicit none
  real*8, dimension (3) :: ilx,ily
  real*8 :: ux,suml,prod,lagrange
  integer :: i,j,nr

  suml=0
  do i=1,nr
    prod=ily(i)
    do j=1,nr
      if (i.ne.j) then
        prod=prod*(ux-ilx(j))/(ilx(i)-ilx(j))
      endif
    enddo
    suml = suml + prod
  enddo
  lagrange=suml
end function
```



# Bibliography

- [1] R. Aris, The Mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalysts I and II, Clarendon Press, Oxford 1975.
- [2] Paul C. Fife, Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems. Springer-Verlag 1979.
- [3] G. Nicolis and I. Prigogine, Self-organization in Nonequilibrium Systems, Wiley-Interscience, New York 1977.
- [4] I. Prigogine and G. Nicolis, On symmetry-breaking instabilities in dissipative systems, J. Chem. Phys. 47, 3542-3550, 1967.
- [5] P. Glansdorff and I. Prigogine, Thermodynamics of Structure, Stability and Fluctuations, Wiley-Interscience, New York, 1971.
- [6] Steven C. Chapra, Raymond P. Canale, Métodos Numéricos para Ingenieros, Cuarta Edición, Mc. Graw Hill 2003.
- [7] Curtis F. Gerald, Patrick O. Wheatley, Análisis Numérico con Aplicaciones, Sexta edición. Pearson Educación , México, 2000.
- [8] Richard L. Burden, J. Douglas Faires, Análisis numérico, Cengage Learning, Novena Edición, 2011.
- [9] G. Marshall, Solución numérica de ecuaciones diferenciales, Tomo 2, Editorial Reverté Argentina S.A., 1985.
- [10] Jhon H. Mathews, Kurtis D Fink, Métodos Numéricos con MatLab, Tercera Edición, Prentice Hall, 2000.
- [11] Joel H. Ferziger Peric Milovan, Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd Edition, Springer, 2002.

- [12] Begoña Peña Pellicer, Inestabilidades de Turing en Sistemas de Reacción-Difusión, Estadística descriptiva para bachillerato, Instituto de Matemáticas UNAM, 2004.
- [13] Eric Ávila Vales, Ecuaciones de Reacción-Difusión, Temas de Matemáticas para Bachillerato No. 5, Instituto de Matemáticas UNAM, 2004.
- [14] D. Horvath, V. Petrov, S.K. Scott, K. Showalter, Instabilities in propagating reaction-diffusion fronts, *J.Chem. Phys.* 98, 6332 (1993).
- [15] K. Showalter, Quadratic and Cubic Reaction-Diffusion Fronts, *Non. Science Today*, 4, 4 (1995).
- [16] Dezso Horvath and Kenneth Showalter, Instabilities in propagating reaction-diffusion fronts of the iodate-arsenous acid reaction, *J. Chem. Phys*, 102, 2471 (1995).
- [17] J.H.Merkin and I.Z. Kiss, Dispersion curves in the diffusional instability of autocatalytic reaction fronts, *Phys. Rev. E.* 72, 026219, (2005).
- [18] A. Malevanets, A Careta, R. Kapral, Biscala chaos in propagating fronts, *Phys. Rev. E.* 52, 4724 (1995).
- [19] A.J. Crilly, R.A. Earnshaw and H. Jones, *Fractals and Chaos*, Springer-Verlag, 1991.
- [20] James Gleick, *Caos, La creación de una ciencia*, Crítica Barcelona, 2012.
- [21] Marvin L. De Jong, *Introduction to Computational Physics*, Addison-Wesley Publishing Company, 1991.
- [22] José Jesús Borjón Nieto, *Caos, Orden y Desorden en el Sistema Monetario y Financiero Internacional*, Plaza y Valdés S.A., 2002.
- [23] Peter Smith, *Explaining Chaos*, Cambridge University Press, 1998.
- [24] D. Gurel and O. Gurel, *Oscillations in Chemical Reactions*, Springer Verlag, 1983.
- [25] Raymond Kapral and Kenneth Showalter, *Chemical Waves and Patterns*, Springer-Science+Business Media, B.V., 1995.
- [26] Irving R. Epstein, John A. Pojman, *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*, Oxford University Press, 1998.

- [27] Yves Pomeau and Paul Manneville, Intermittent Transition to Turbulence in Dissipative Dynamical System, *Commun. Math. Phys.* 74 ,189-197 (1980).
- [28] Steven H. Strogatz, *Nolinear Dynamics and Chaos*, Perseus Books Publishing, 1994.
- [29] Edward Ott, *Chaos in Dynamical Systems*, Cambridge University Press, 1994.
- [30] Vicent Méndez, Joaquim fort and Toni Pujol, Effect of Initial Conditions on the Speed of Reaction-Diffusion Fronts, *Phys. Rev. E* 67 016213 (2003).
- [31] Boyd F. Edwards, Poiseuille Advection of Chemical Reaction Fronts, *Phys. Rev. Lett.* 89, 104501 (2002).
- [32] M. Leconte, J. Martin, N. Rakotomalala, and D. Salin, Pattern of Reaction Diffusion Fronts in Laminar Flows, *Phys. Rev. Lett.* 90, 108302 (2003).
- [33] Robert S. Spangler and Boyd F. Edwards, Poiseuille Advection of Chemical Reaction Fronts: Eikonal Approximation, *J. Chem. Phys.* 118, 5911 (2003).

