

SOLITONES EN SISTEMAS REACCION DIFUSION ?

G. Izús y R. Deza

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad Nacional de Mar del Plata, Funes 3350, 7600 Mar del Plata.*

C. Borzi

*División Estudios Especiales,
Centro Atómico Ezeiza, Comisión Nacional de energía Atómica,
Av. Libertador 8250, 1429 Buenos Aires.*

y H. Wio

*Centro Atómico Bariloche,
CC 439, 8400 San Carlos de Bariloche.*

Utilizando el método inverso recientemente propuesto por C. Borzi et al, es posible generar soluciones de tipo onda solitaria en sistemas reacción-difusión unidimensionales y de una componente. Mediante el estudio numérico de las colisiones entre dos de tales soluciones, investigamos ahora la posibilidad que éstas tengan carácter solitónico. El análisis está basado en un esquema de aproximación por diferencias finitas a las ecuaciones no lineales de evolución.

El método inverso y su implementación numérica son luego extendidos a sistemas de dos componentes.

INTRODUCCION

Los sistemas reacción-difusión (RD) son sistemas acoplados de EDP parabólicas no lineales. Por ejemplo para un sistema RD unidimensional (1D) de dos componentes (2C), tendremos:

$$u_t = D_1 u_{xx} + g_1(u, w) \quad w_t = D_2 w_{xx} + g_2(u, w) \quad (1)$$

donde toda la alinealidad está en g_1, g_2 .

Los sistemas RD modelan una variedad de interesantes fenómenos como dinámica de poblaciones, propagación de ondas en medios excitables, formación de estructura en sistemas biológicos, cinética química, etc¹.

Se ha encontrado que algunos sistemas RD poseen soluciones de tipo onda solitaria, es decir patrones estables que se propagan²; en el caso 1C-1D se ha propuesto recientemente un método inverso³, por medio del cual se pueden construir explícitamente sistemas RD que poseen ondas solitarias.

El método inverso funciona como sigue: dado un patrón de onda solitaria $u(x,t) = U(z)$ con $z = x-vt$ ($v = \text{cte}$), que evoluciona según

$$-vU_z = DU_{zz} + f(U) \quad (2)$$

y es tal que

$$U_z = h(U) \quad (3)$$

(de modo que el sistema es autónomo), obtenemos por sustitución el término no-lineal:

$$f(U) = -vh - Dh'h \quad (4)$$

y por ende la ecuación RD a ser obedecida por la onda solitaria propuesta, que será estable por construcción³.

Si las soluciones de onda solitaria elegidas pueden viajar en ambos sentidos, entonces es legítimo preguntarse si éstas tienen propiedades solitónicas, o sea si se comportan elásticamente ante colisiones. Aunque pueda sospecharse que no, debido a que los sistemas RD (obviamente disipativos) no admiten una formulación hamiltoniana (y por ende no podemos aplicar las herramientas desarrolladas para sistemas integrables, p.ej., pares de Lax, dispersión inversa, etc.), hay casos reportados⁴ de evidencia numérica en ese sentido. Nosotros investigamos numéricamente esa posibilidad. En la próxima sección lo hacemos para sistemas de 1C y en la siguiente extendemos el formalismo a los de 2C.

SISTEMAS DE UNA COMPONENTE

Ilustraremos primeramente nuestro análisis pro-

poniendo como patrón de onda solitaria un "escalón" como el de la distribución de Fermi:

$$U = \alpha / (1 + \lambda \exp \beta z) \quad (5)$$

1) Ecuación reacción - difusión.

Usando el método inverso para $D=1$ obtenemos:

$$f(U) = \beta(v-\beta)U + (\beta/\alpha)(3\beta-v)U^2 - 2(\beta/\alpha)^2 U^3 \quad (6)$$

Aquí podemos reemplazar $v \leftrightarrow -v$ siempre que al mismo tiempo hagamos la sustitución $\beta \leftrightarrow -\beta$: es por eso que elegimos este perfil.

2) Método numérico.

Para simular la evolución temporal usamos un esquema explícito de diferencias finitas. Tomamos $\alpha=1$, $D=1$, $\beta=v=10$, entonces la ecuación de RD se reduce a:

$$u_t = u_{xx} + 2\beta^2(u^2 - u^3) \quad (7)$$

Con la notación: $x = i.\Delta x$, $t = j.\Delta t$, $u(x,t) = \Phi_{ij}$, $r = \Delta t/(\Delta x)^2$ tenemos

$$\Phi_{i,j+1} = r(\Phi_{i-1,j} + \Phi_{i+1,j}) + (1-2r)\Phi_{ij} + 2\beta^2(\Phi_{ij}^2 - \Phi_{ij}^3)\Delta t \quad (8)$$

3) Estabilidad del método numérico⁵.

El estudio consiste en tres etapas:

a) Análisis para la ecuación de difusión $u_t = u_{xx}$: Si escribimos $[\Phi]_{j+1} = T[\Phi]_j$, la condición de estabilidad $RE(T) \leq 1$ (RE: radio espectral o máximo valor absoluto de un autovalor) vale siempre que $r \leq 1/2$. Para nuestros valores: $\Delta x = 0,01$, $\Delta t = 10^{-5}$, $r = 0,1$ está asegurada.

b) Tamaño de la corrección no lineal a (a):

El término NL es importante sólo en la región de transición (de ancho β^{-1}).

Si $0 \leq \Phi_{ij} \leq 1 \forall i,j$ (condición que fue monitoreada durante toda la evolución) entonces

$$(NL/lineal) \sim 5 \times 10^{-4} / 8 \times 10^{-1} = 6,25 \times 10^{-4} \ll 1$$

c) Análisis de estabilidad para el esquema numérico completo:

Dado que el término NL en (8) es siempre positivo, iterando: $T^n[\Phi]_{j,0} \leq [\Phi]_{j,n}$ vemos que la estabilidad numérica no está garantizada a priori para el esquema completo. Sin embargo, ésta queda

asegurada al dar una cota superior estable para $[\Phi]_{j,n}$, lo que es posible para nuestros parámetros.

En resumen, para los valores elegidos ($r=0,1$) el esquema numérico resulta estable, dado que está acotado por encima y por debajo por cotas que son estables ante iteraciones.

4) Resultados.

Primeramente hemos simulado la evolución temporal de una onda solitaria del tipo de la ecuación (5) con la condición inicial:

$$u(x,0) = \{1 + \exp[10(x-10)]\}^{-1} \quad (9)$$

y las condiciones de contorno $u(0,t)=1$, $u(20,t)=0$, logrando un frente de onda que se propaga con $v=10$, $\Delta v < 0,1$. Luego, hemos simulado un proceso de colisión entre dos ondas solitarias, usando la condición inicial:

$$u(x,0) = \{1 + \exp[10(x-10)]\}^{-1} + \{1 + \exp[-10(x-20)]\}^{-1} \quad (10)$$

y la condición de contorno $u(0,t) = u(30,t) = 1$. El proceso de colisión puede ser dividido en 3 etapas:

- 1) evolución "libre": el solapamiento entre ambos pulsos es despreciable, y cada uno se mueve como si el otro no existiera;
- 2) etapa de interacción: los dos pulsos interactúan fuertemente, distorsionando el perfil original;
- 3) caso estacionario: para $t > 0,6$ obtenemos la solución $u(x,t) = 1$, que es una solución analítica del problema estacionario.

A conclusiones similares conduce el análisis del perfil:

$$U = \alpha[(\pi/2) - \arctg(\beta z)] \quad (11)$$

al que corresponde

$$f(U) = -2(\alpha\beta)^2 \cdot \text{sen}^3(U/\alpha) + \alpha\beta v \cdot \text{sen}^2(U/\alpha) \quad (12)$$

que tiene también simetría $v, \beta \leftrightarrow -v, -\beta$. El análisis de estabilidad numérica es similar. También lucen cualitativamente similares los perfiles en la evolución, y en particular vale lo dicho para las etapas (1) - (3).

SISTEMAS DE DOS COMPONENTES:

Extendemos en esta sección el método inverso

delincado en Ref.[3] a sistemas de dos componentes. A partir del sistema (1) y suponiendo como antes $u(x,t)=U(z)$, $w(x,t)=W(z)$ con $z=x-vt$ y $U_z=h_1(U,W)$, $W_z=h_2(U,W)$, resulta:

$$\begin{pmatrix} g_1(U,W) \\ g_2(U,W) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} h_{1U} + v h_{1W} \\ h_{2U} h_{2W} + v \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Consideramos como ilustración el siguiente patrón de onda solitaria:

$$U = \alpha \cdot \text{sech}^2 \beta^2 z, \quad W = \alpha \cdot \text{th} \beta z \quad (14)$$

Los correspondientes términos no lineales en (13):

$$\begin{aligned} g_1(U,W) &= 2\beta v U W / \alpha - 4\beta^2 U W^2 / \alpha + 2\beta^2 U^2 / \alpha \\ g_2(U,W) &= -\beta v U + 2\beta^2 U W / \alpha \end{aligned} \quad (15)$$

Son invariantes bajo los cambios simultáneos: $v, \beta \leftrightarrow -v, -\beta$. Explotamos este hecho para obtener ondas que, obedeciendo la misma ecuación, viajen en direcciones opuestas (y puedan entonces chocar). El análisis de estabilidad no lineal para este caso es similar al anterior y lo omitimos.

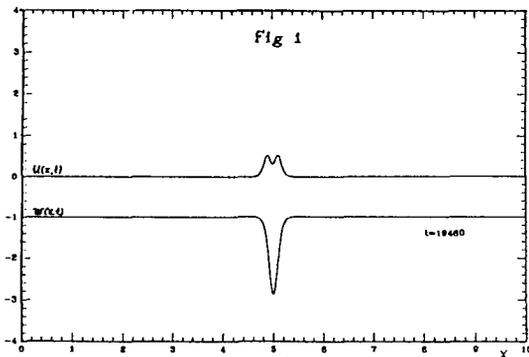


Figura 1: Detalle del proceso de colisión para el perfil (14). La unidad de tiempo en el cálculo es $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-5}$. La configuración de equilibrio es $U=0$, $W = -1$.

Los valores tomados en este caso para los parámetros son $\alpha = 1$, $\beta = v = 10$. Aunque los pulsos se aniquilaron finalmente entre sí, aparecieron algunos rasgos no triviales en el proceso de colisión que vale la pena estudiar más detenidamente. En efecto, en las etapas finales del proceso de colisión y luego que los dos pulsos correspondientes al campo U se hubieron fundido en uno solo, reaparecieron nuevamente dos pulsos que se man-

tuvieron durante algún tiempo a la misma distancia (fig.1) aunque decreciendo en amplitud hasta desvanecerse (luego de esto se fue desvaneciendo también el pulso del campo W). Nos mueve la esperanza de que imitando el procedimiento de Tuckwell³ sería posible encontrar ondas con carácter solitónico.

CONCLUSIONES

Hemos extendido el método inverso de la ref. [3] a sistemas de 2C: esto nos permite proponer perfiles de onda solitaria para ambas componentes que son, por construcción, solución estable de un sistema RD. Además del interés intrínseco de esta extensión (podemos ahora abordar problemas tipo excitador-inhibidor), nos mueve el propósito de contar con una mayor elasticidad al analizar el problema de la colisión: en efecto, en el caso 1C el conjunto de perfiles con simetría $v, \beta \leftrightarrow -v, -\beta$ era limitado, en cambio para sistemas 2C es mayor.

Hemos desarrollado un método numérico estable que permite estudiar la interacción de perfiles de onda solitaria de modo de determinar su comportamiento ante colisiones. Se busca ahora generalizar el método a sistemas más complejos que los RD, es decir, con términos NL de tipo derivativo

RECONOCIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado con apoyo parcial del CONICET.

REFERENCIAS

1. Meinhardt, *Models of biological pattern formation*. (Academic Press, 1982) M.Mimura y Yamaguti, *Adv.Biophys.* **15**, 19 (1982). A. Hodgkin y A.Huxley, *J.Physiol.* **117**, 500 (1952).
2. C.Borzi, H.Frisch, R.Gianotti y J.Percus, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **111 and 112**, 119(89); *J.Phys.A: Math.Gen.* **23**, 4823 (1990). C.Borzi y H.Wio, preprint IC/90/48.
3. H. Tuckwell, *SIAM J.Appl. Math.* **39**, 310 (1980); *Science* **205**, 493 (1979). H. Rotermund, S.Jakubith, A.von Oertzen y G.Ertl, *Phys.Rev.Lett.* **66**, 3083 (1991).
4. A.Scott, F.Chu, D.McLaughlin, *Proc. IEEE* **61**, 1443 (1973).
5. G.Smith, *Numerical solution of partial differential equations* (Clarendon Press, Oxford, 1978).