

0036210
24



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

EVOLUCION DE PERFILES DE DENSIDAD EN
PROCESOS DE REACCION - DIFUSION

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS
(FISICA)

P R E S E N T A :

RICARDO ONDARZA ROVIRA

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

México, D. F.

1990



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

CAPITULO I

INTRODUCCION	1
--------------------	---

CAPITULO II

EVOLUCION DINAMICA DE PERFILES DE DENSIDAD EN PROCESOS DE REACCION-DIFUSION CON UN TERMINO DE CREACION	6
--	---

2.1 Ecuación de Reacción-Difusión. Consideraciones Preliminares	7
2.2 Soluciones Locales Explosivas	10
2.3 Soluciones Analíticas	11
2.4 Geometría Cilíndrica y Esférica	24

CAPITULO III

SOLUCIONES DE ONDA VIAJERA PARA ECUACIONES DE REACCION-DIFUSION CON TERMINOS DE CREA- CION Y ANIQUILACION	26
---	----

3.1 Soluciones de Tipo Onda Viajera	27
3.2 Naturaleza de las Soluciones a Partir de los Puntos Críticos en el Espacio Fase	35
3.3 Estabilidad de las Soluciones	43
3.4 Obtención de Soluciones a Partir de un	

Análisis Perturbativo	45
-----------------------------	----

CAPITULO IV

INTEGRACION NUMERICA DE LA ECUACION DE REACCION-DIFUSION	53
--	----

4.1 Discretización de la Ecuación de Reacción-Difusión	54
4.2 Estabilidad de las Soluciones	60

CAPITULO V

EVOLUCION DE PERFILES PARA CONDICIONES INICIALES ARBITRARIAS	64
--	----

5.1 Soluciones Locales Explosivas	65
5.2 Evolución de Perfiles con Presencia Simultánea de Procesos de Creación y Aniquilación	69
5.2.1 Caso $p > k$, $\delta = 1$	69
5.2.2 Caso $p < k$, $\delta = 1$	69
5.3 Perfiles de Concentración con Estado Estacionario Asintótico	74
5.4 Interacción de Perfiles	76
5.5 Estudio de Amplitudes y Anchos de los Perfiles	79
5.6 Soluciones de Tipo Onda Viajera	86

CAPITULO VI

APLICACIONES EN EL ESTUDIO DE PLASMAS CONFINADOS	91
--	----

6.1 Un Modelo para el Perfil de Temperatura	92
---	----

CONCLUSIONES	100
APENDICE	105
REFERENCIAS	112

Gráficas y Figuras

Gráfica $\psi(\tau)$ vs. τ	19
Gráfica $\psi(t)$ vs. t	20
Figura 2.1 Caso $b \neq 0, k = 1$. Condición Inicial de Equilibrio	22
Figura 2.2 Caso $b \neq 0, k = 1$. Condición Inicial por Arriba del Estado de Equilibrio	22
Figura 2.3 Caso $b \neq 0, k = 1$. Condición Inicial por Abajo del Estado de Equilibrio	23
Figura 3.1 Estabilidad de las Soluciones	44
Figura 3.2 Solución de Onda Viajera ($p = 2, \delta = 1, k = 4, c_4$)	51
Figura 3.3 Ecuación Diferencial para la Onda Viajera	51
Figura 3.4 Solución de Onda Viajera ($p = 2, \delta = 1, k = 4, c_5$)	52
Figura 3.5 Ecuación Diferencial para la Onda Viajera	52
Figura 5.1 Solución Local Explosiva ($p = 2, \delta = 1, \lambda = 0$)	67
Figura 5.2 Solución Local Explosiva ($p = 3, \delta = 2, \lambda = 0$)	67

Figura 5.3 Perfil Inicial Angosto	68
Figura 5.4 Perfil Inicial Perturbado	68
Figura 5.5 Perfil Inicial por Arriba de $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$ ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)	71
Figura 5.6 Perfil Inicial por Arriba de $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$ ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)($n(\pm L) = 0$)	71
Figura 5.7 Perfil Inicial por Debajo de $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$ ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)	72
Figura 5.8 Perfil Inicial por Debajo de $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$ ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)($n(\pm L) = 0$)	72
Figura 5.9 Gráficas de Amplitud	73
Figura 5.10 Estado Estacionario Asintótico ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)	75
Figura 5.11 Estado Estacionario Asintótico ($p = 1, k = 2, \delta = 1, \lambda \neq 0$)	75
Figura 5.12 Interacción de Perfiles Angostos	77
Figura 5.13 Interacción de Perfiles ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda \neq 0$)	78
Figura 5.14 Onda Viajera ($p = 1, k = 2, \delta = 1, \lambda = 1$)	87
Figura 5.15 Onda Viajera ($p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda = 1$)	88
Figura 5.16 Onda Viajera ($p = 1, k = 3, \delta = 2, \lambda = 1$)	89
Figura 5.17 Onda Viajera ($p = 3, k = 7, \delta = 2, \lambda = 1$)	90
Figura 6.1 Perfil de Temperatura ($p = 1, k = \frac{1}{2}, \delta = -\frac{1}{2}, \lambda = 1$)	98
Figura 6.2 Perfil de Temperatura ($p = \frac{1}{4}, k = \frac{1}{2}, \delta = -\frac{1}{2}, \lambda = 1$)	99

CAPITULO I

INTRODUCCION

Los fenómenos de reacción-difusión se presentan en numerosos problemas de la física, cinética química y modelos poblacionales. Involucran procesos de transporte, mediante coeficientes de difusión que no necesariamente son constantes, de creación y de aniquilación, de tal modo que las ecuaciones diferenciales parciales que modelan dichos fenómenos son no lineales en general. En el caso de la física de plasmas, que es el campo que motivó este estudio, es de interés conocer la evolución de perfiles de densidad de los iones y electrones en plasmas de laboratorio y astrofísica, donde la ionización juega el papel de la creación, y la recombinación el de la aniquilación. Además, en el estudio de perfiles de temperatura en aparatos de confinamiento magnético, aparecen ecuaciones parabólicas de este tipo, en las que los términos de creación y aniquilación representan efectos de fuentes de calentamiento y radiación, respectivamente.

El propósito de este trabajo es estudiar las propiedades cualitativas de soluciones a un grupo de ecuaciones de reacción-difusión, mas que el de resolver un problema específico. La idea esencial es poder identificar los elementos de un modelo que lleven a describir fenómenos que se observan experimentalmente. En particular, en el

caso de plasmas confinados por campos magnéticos, es importante determinar los efectos de transporte que se observan, así como su influencia en el comportamiento global del plasma. Así por ejemplo, es de interés conocer los mecanismos que permiten que un plasma se relaje a un estado estable, independientemente de las condiciones iniciales de la descarga, o los que llevan a cambios substanciales en el tiempo de confinamiento, como los llamados modos H.

Si bien no se pretende resolver aquí dichos problemas, se espera poder establecer paradigmas que ayuden a resolverlos.

La manera natural para estudiar el problema de condiciones iniciales para ecuaciones de reacción-difusión, es integrarlas numéricamente, lo cual se puede conseguir mediante el método de Crank-Nicolson, que proporciona condiciones de estabilidad apropiadas para ecuaciones parabólicas.

Sin embargo, para algunas ecuaciones existen soluciones particulares estables, con la propiedad de que si se parte de condiciones iniciales arbitrarias, éstas se relajan a dichas soluciones.

En este trabajo se estudian ecuaciones de reacción-difusión para una especie, en una dimensión espacial, en las que el coeficiente de difusión, el término de creación y el de aniquilación son monomios :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + n^p - \lambda |n|^k . \quad (1.1)$$

En la ecuación (1.1); $n = n(x, t)$ representa, por ejemplo, la densidad de la especie, mientras δ, p, k y λ son constantes.

En el Capítulo II, se revisa el caso $\lambda = 0$, anteriormente estudiado por Wilhelmsson et al., para el cual existen soluciones particulares explosivas, con la propiedad de estabilidad antes mencionada. Allí se presentan algunas situaciones en las que el perfil sólo puede avanzar

una distancia finita, efecto referido como localización del perfil. Se encuentra que la distancia que el perfil avanza lateralmente antes de obtener una configuración de tipo explosiva depende fuertemente de las condiciones iniciales impuestas.

Por otra parte, en el Capítulo III, mediante reducción a cuadraturas, se encuentran soluciones de onda viajera para un conjunto más general de ecuaciones, con $\lambda \neq 0$. En este último caso se estudia la forma del frente de onda en base a las propiedades de la solución en el espacio fase.

Los resultados analíticos presentan marcado interés por el hecho de poder así encontrar soluciones generales a las ecuaciones de reacción-difusión.

Cabe aquí señalar que por medio de reducción a cuadraturas es posible encontrar siempre las velocidades de propagación de los frentes de onda, aún para aquellos casos en el que el problema tratado no pueda ser expresado en forma cerrada.

En el Capítulo IV se desarrolla un código numérico con objeto de estudiar problemas de condiciones iniciales arbitrarias. La simulación numérica presenta un alternativa importante de comparación respecto a los resultados analíticos obtenidos, siendo útil también para aquellos casos en que no se tengan soluciones exactas a un problema determinado.

Númericamente se encuentra, en el Capítulo V, que condiciones iniciales arbitrarias se relajan a las soluciones particulares antes mencionadas. En este capítulo se encuentra además que bajo ciertas condiciones sujetas al término de creación es posible encontrar estados estacionarios de naturaleza asintótica.

Se estudia el balance que se presenta para diferentes valores de los parámetros δ , p y k , efectuándose un análisis de la evolución tanto de las amplitudes como los anchos de los perfiles.

Por último, se obtienen numéricamente los frentes de propagación para aquellos casos en que se dispone de resultados analíticos, siendo esto una parte fundamental en lo que concierne a la comparación entre estos resultados y la simulación numérica.

Finalmente, en el Capítulo VI, se estudian implicaciones de los resultados obtenidos en un modelo simple para perfiles de temperatura en aparatos de confinamiento magnético de plasmas.

Dados hasta aquí los lineamientos de este trabajo, se expondrá en lo que sigue una reseña de aquellos debidos a diferentes autores, así como las áreas en las que juegan su importancia.

Ecuaciones de la forma

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x} \right),$$

se encuentran en una gran variedad de procesos físicos, tales como en regiones saturadas en medios porosos ($\delta = 1$), (Polubarinova-Kochina, 1962); en percolación de un gas en medios porosos ($\delta \geq 1$), (Muskat, 1937); en el esparcimiento de películas delgadas de un líquido bajo la acción de la gravedad ($\delta = 3$), (Cohen et al., 1978); en dinámica de vórtices, (Neu, 1983), etc.

Diversos autores han trabajado en torno a problemas modelados por la ecuación anterior. Entre ellos pueden citarse, por ejemplo a :

Oleinik, Kalashnikov y Yui-Lin por sus contribuciones en la existencia y unicidad de soluciones, así como a Aronson, Kamin, Knerr y Kath, por la existencia de soluciones que bajo condiciones especiales tienen interfaces que permanecen inmóviles durante un tiempo finito, soluciones conocidas como "de tiempo de espera".

La inclusión de términos de reacción en la ecuación anterior ha permitido modelar diversas clases de procesos, como los de crecimiento poblacional (Fisher, 1937); en propagación de impulsos eléctricos en redes neuronales (Hodgkin et al., 1952; Scott, 1977; Pauwelussen, 1981), así como los de transiciones de fase (Metiu et al., 1976; Haken, 1977; Parlinski et al., 1981).

Deben citarse a Otwinowski, Paul y Laidlaw por haber encontrado soluciones de onda viajera por reducción a cuadraturas a ecuaciones con difusión lineal y términos de reacción polinomiales, concretamente de quinto orden. También a Weinberger (1975), a Kaliappan (1984) y a Rosenau y Oron (1986), entre muchos autores, por sus valiosas contribuciones alrededor de este tema.

CAPITULO II

EVOLUCION DINAMICA DE PERFILES DE

DENSIDAD EN PROCESOS DE

REACCION-DIFUSION

CON

UN TERMINO DE CREACION

El estudio de los procesos de reacción-difusión ha tomado gran importancia en Física, así como en otras ramas de la ciencia, para la descripción dinámica de sistemas. La formulación teórica de modelos que permitan la interpretación de dichos procesos ofrece un amplio campo de investigación para aquellos sistemas que presentan transiciones de estado, y en los que fenómenos de naturaleza no lineal se encuentran presentes.

Es propósito de este capítulo el hacer una presentación y revisión de técnicas analíticas que han sido desarrolladas recientemente por Wilhelmsson (1988 a-d), para encontrar soluciones particulares en el caso en el que se tiene un término monomial de creación, así como casos que se pueden reducir a éste.

2.1 Ecuación de Reacción-Difusión. Consideraciones Preliminares.

La difusión es un proceso físico por medio del cual se lleva a cabo un transporte de alguna variable física en un determinado sistema. Dicho proceso es el resultado de efectos disipativos. Este fenómeno de transporte se presenta en ejemplos como el de la difusión molecular, cuyo fundamento matemático fue establecido primeramente por Fick en 1855, en base al problema análogo de la conducción del calor, estudiado previamente por Fourier en 1822 (Crank, 1975).

La base de la teoría de difusión en medios isotrópicos se encuentra en la hipótesis de que la razón de transferencia de una sustancia a través de una sección de unidad de área es proporcional al gradiente de concentración medido perpendicularmente a dicha sección :

$$F = -D \frac{\partial n}{\partial x},$$

donde F es la razón de transferencia por unidad de área, n es la densidad, x es la coordenada espacial medida perpendicularmente a la sección y D es el coeficiente de difusión. En algunas situaciones el coeficiente de difusión puede tomarse como una constante, mientras que en otras este coeficiente puede depender de la concentración.

Los medios anisotrópicos presentan diferentes propiedades de difusión de un lugar a otro, y en donde las moléculas exhiben direcciones preferenciales de orientación. Para tales medios no resulta siempre válido la hipótesis establecida para la razón de transferencia como en el caso de medios que sean isotrópicos. Debido a esto, su tratamiento debe ser un tanto distinto.

Es a partir de la hipótesis anterior que la ecuación de reacción-difusión puede ser formulada.

La ecuación diferencial de reacción-difusión que se considerará en este capítulo presenta la forma siguiente :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(D_{s_1} \frac{\partial n}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(D_{s_2} \frac{\partial n}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(D_{s_3} \frac{\partial n}{\partial x_3} \right) - bn + cn^p, \quad (2.1)$$

donde b y c son coeficientes positivos constantes y n es la concentración. El término negativo representa un proceso de aniquilación, y el positivo uno de creación. Tratándose de un plasma, los procesos de creación involucran aquellos en los que se presenta ionización en el sistema y los de aniquilación están referidos a la recombinación que pueda ocurrir en el sistema estudiado. La constante p expresa el grado de la no linealidad del término de reacción. Las cantidades D_i , $i = x_1, x_2, x_3$ son los coeficientes de difusión en coordenadas cartesianas y t es el tiempo. Una representación física que ofrece la ecuación anterior se podría encontrar por ejemplo en la evolución de la densidad electrónica de un plasma.

En primera instancia se supondrá que los coeficientes de difusión presentan la forma :

$$D_i = a_i n^\delta, \quad i = x_1, x_2, x_3, \quad a_i s = \text{const.}; \quad \delta \geq 0,$$

y de manera análoga puede efectuarse el análisis cuando el coeficiente de difusión presente una forma polinomial, es decir, en el caso en que el coeficiente de difusión consista en una combinación lineal de diferentes órdenes en δ .

En los plasmas de fusión los procesos de difusión, ionización y recombinación juegan un papel muy importante. Debido a la naturaleza no lineal de los procesos de recombinación, los efectos combinados de la difusión (que se estudiarán aquí en su caso no lineal) y la

recombinación, son difíciles de estudiar en forma analítica. Es debido a lo anterior que el estudio de estos procesos se ha desarrollado en mayor parte mediante el uso de técnicas numéricas.

En lo siguiente se expondrá una técnica de análisis no lineal, desarrollada recientemente para la obtención de soluciones particulares para algunas ecuaciones de reacción-difusión.

Considérese primeramente el caso en el que $b = 0$ en la ecuación (2.1). Efectuando la renormalización espacial y temporal en la forma:

$$\left(\frac{c}{a_i}\right)^{\frac{1}{2}} x_i \rightarrow x_i, \\ ct \rightarrow t,$$

se tiene que la ecuación (2.1) puede escribirse como :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x_3} \right) + n^p,$$

que en una dimensión toma la forma :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{\gamma} n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + n^p, \quad (2.2)$$

donde γ está relacionada con la geometría del problema. Para coordenadas cartesianas $\gamma = 0$, suponiéndose simetría radial para los casos de geometría cilíndrica y esférica ($\gamma = 1, 2$; $x \rightarrow r$).

2.2 Soluciones Locales Explosivas.

En aquellos casos en que la ecuación de reacción-difusión presente un término de creación, el sistema físico considerado podrá exhibir una evolución en el tiempo hacia una solución explosiva (Wilhelmsson, 1977a,b, 1988c, 1989).

De aquí en adelante, se utilizará el término explosivo, de forma genérica, para caracterizar aquella solución o soluciones que crezcan ilimitadamente en un tiempo finito. Como se verá a continuación, el carácter local de las soluciones se encuentra ligado estrechamente con la propiedad mencionada, entendiéndose por local a los casos en que su solución se encuentre, espacialmente, comprendida en una región pequeña.

Estos casos tienen un marcado interés, ya que dichas soluciones corresponden a situaciones en las que el sistema físico dispone de alguna forma de energía libre, como sería el caso de un plasma caliente parcialmente ionizado, donde la ionización por electrones contribuye al aumento de la densidad electrónica. Algunas otras aplicaciones en física de plasmas pueden encontrarse en dispositivos de Z-Pinch y Plasma Focus.

La forma local de estas soluciones es debida al efecto de balance existente entre los términos de difusión y los de reacción. Como se verá a continuación, el valor de los parámetros involucrados en la ecuación de reacción-difusión, así como el de la simetría involucrada, son importantes en la evolución de los perfiles. Por ejemplo, en el caso unidimensional y para cierto grado de la no linealidad del término de reacción, así como para el coeficiente de difusión, se encuentra que ciertas distribuciones espaciales exhiben la preservación de su forma en el transcurso del tiempo. Como se mencionó anteriormente esta característica que presentan los perfiles de evolución se debe a la compensación que ocurre entre los términos de reacción y el de difusión.

2.3 Soluciones Analíticas.

En esta sección se considerará la obtención de una cierta clase de soluciones a la ecuación de reacción-difusión que presentan inestabilidades explosivas, con la preservación de la forma del perfil.

La obtención de soluciones a la ecuación (2.2) puede efectuarse introduciendo la transformación siguiente (Wilhelmsson, 1988a,b):

$$n = (t_0 - t)^\mu \phi(\xi), \quad (2.3)$$

$$\xi = x(t_0 - t)^{-\nu}, \quad (2.4)$$

donde t_0 es un instante arbitrario del tiempo. Esta transformación tiene su antecedente en aquella hecha por Boltzmann (1894) para la ecuación de difusión unidimensional cuando el coeficiente de difusión es función de la concentración.

Substituyendo la transformación anterior en la ecuación (2.2), y comparando las potencias de $(t_0 - t)$ se obtiene que los parámetros μ y ν están dados por:

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{1}{p-1}, \\ \nu &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{p-1} \right), \end{aligned}$$

así como la ecuación diferencial ordinaria en las nuevas variables:

$$\xi^{-\gamma} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^\gamma \phi^\delta \frac{d\phi}{d\xi} \right) = \left(\frac{1}{p-1} \right) \phi + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta}{p-1} \right) \xi \frac{d\phi}{d\xi} - \phi^p, \quad p \neq 1. \quad (2.5)$$

Cuando $p = \delta + 1$ el segundo miembro del lado derecho de la ecuación (2.5) se anula. De acuerdo a la transformación (2.4) se tiene que $\xi = x$ y $\nu = 0$.

En este caso, cuando $\gamma = 0$, se tiene que la ecuación diferencial ordinaria (2.5) se reduce a la expresión siguiente :

$$\frac{d}{dx} \left(\phi^{\delta} \frac{d\phi}{dx} \right) = \left(\frac{1}{p-1} \right) \phi - \phi^p.$$

Multiplicando ambos miembros de la ecuación anterior por $\phi^{\delta} \frac{d\phi}{dx}$ e integrando se obtiene la ecuación diferencial :

$$\left(\frac{p^2 - 1}{2} \right) \phi^{2(p-1)} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 = \phi^{p+1} - \left(\frac{p^2 - 1}{2p} \right) \phi^{2p}.$$

Esta ecuación puede integrarse, quedando en la forma :

$$x = \pm \sqrt{\frac{p^2 - 1}{2}} \int_{\phi_0}^{\phi} \sqrt{\frac{\phi^{p-3}}{1 - \left(\frac{p^2 - 1}{2p} \right) \phi^{p-1}}} d\phi,$$

donde

$$\phi_0 = \left(\frac{2p}{p^2 - 1} \right)^{(p-1)^{-1}}$$

De aquí se tiene que la solución se encuentra dada por :

$$\phi = \phi_0 \cos^{2(p-1)^{-1}} \left(\frac{(p-1)x}{2\sqrt{p}} \right), \quad p \neq 1.$$

Para el caso $p = 2, \gamma = 0, (\delta = 1, \nu = 0, \mu = -1)$ se tiene que :

$$\phi(x) = \frac{2}{3} \left[1 + \cos \left(\frac{x}{\sqrt{2}} \right) \right].$$

y

$$n(\xi, t) = (t_0 - t)^\mu \phi(\xi) = (t_0 - t)^{-1} \phi \left(\sqrt{\frac{c}{a}} x \right),$$

donde la concentración en $x = 0$, $t = 0$ es:

$$n(0, 0) = t_0^{-1} \phi(0) = \frac{4}{3} t_0^{-1} \equiv n_0,$$

$$t_0 = \frac{4}{3} \frac{1}{n_0}.$$

De la transformación (2.3)-(2.4) se obtiene la expresión para la concentración:

$$n(x, t) = \frac{n_0}{1 - \frac{1}{3} n_0 c t} \cos^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{c}{2a}} x \right) \quad (p = 2, \delta = 1).$$

Para el caso $p = 3$ ($\delta = 2$, $\gamma = 0$, $\nu = 0$, $\mu = -1/2$) se tiene:

$$x = \pm 2 \int_0^\phi \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \frac{1}{3} \phi^3}},$$

de donde se obtiene la expresión para $\phi(x)$ siguiente:

$$\phi(x) = \frac{\sqrt{3}}{2} \cos \left(\frac{x}{\sqrt{3}} \right),$$

y la expresión para la concentración :

$$n(x, t) = \frac{n_0}{\sqrt{1 - \frac{1}{3}n_0^2 ct}} \cos\left(\sqrt{\frac{c}{3a}} x\right) \quad (p = 3, \delta = 2).$$

En el capítulo siguiente se considerará la presencia de un término de aniquilación en la ecuación de reacción-difusión y se expondrán los resultados analíticos obtenidos para estos casos por medio de una técnica diferente a la empleada hasta el momento. Por medio de un análisis similar al visto previamente es posible resolver aquellos problemas que presentan un término de aniquilación de la forma bn , como se explica a continuación.

Para resolver el caso cuando $b \neq 0$ se introduce la transformación que sigue (Wilhelmsson, 1987b, 1988b, 1989) :

$$N = ne^{bt},$$

$$\tau = \frac{1}{b(p-1)} [1 - e^{-b(p-1)t}]. \quad (2.6)$$

Aplicando esta transformación se encuentra que :

$$\frac{\partial N}{\partial \tau} e^{-bt} = e^{-b(\delta+1)t} \frac{\partial}{\partial x} \left(N^\delta \frac{\partial N}{\partial x} \right) + N^p e^{-bt}.$$

Para el caso particular en que se cumpla que $p = \delta + 1$ se tiene que la ecuación anterior se reduce a la forma :

$$\frac{\partial N}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial x} \left(N^\delta \frac{\partial N}{\partial x} \right) + N^p, \quad (2.7)$$

la cual resulta en la misma ecuación diferencial (2.2) considerada previamente, para el caso en que b es idénticamente cero.

La solución a esta ecuación está dada por :

$$\begin{aligned}
 N &= (\tau_0 - \tau)^{\mu} \phi(x) \\
 &= (\tau_0 - \tau)^{-(p-1)^{-1}} \left(\frac{2p}{p^2 - 1} \right)^{(p-1)^{-1}} \cos^{2(p-1)^{-1}} \left(\frac{(p-1)x}{2\sqrt{p}} \right), \quad p \neq 1.
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

De acuerdo con la ecuación (2.6) se tiene :

$$\begin{aligned}
 n &= (\tau_0 - \tau)^{\mu} e^{-\mu x} \phi(x), \\
 e^{-\mu x} &= [1 - b(p-1)\tau]^{(p-1)^{-1}}.
 \end{aligned}$$

Con objeto de comprender la naturaleza de estas soluciones, se tomará como ejemplo el caso $p = 2$, $b = 1$. Entonces n está dada por :

$$n = \left(\frac{1 - \tau}{\tau_0 - \tau} \right) \phi(x).$$

Obsérvese que puesto que $t = \ln \left(\frac{1}{1-\tau} \right)$, $t \rightarrow -\infty$ cuando $\tau \rightarrow -\infty$, y $t \rightarrow \infty$ cuando $\tau \rightarrow 1$, prohibiéndose que $\tau > 1$.

Cuando $\tau_0 = 1$, $n(x, t) = \phi(x)$, de modo que se tiene una solución de equilibrio. Así, es de interés estudiar el comportamiento de la función :

$$\psi(\tau) = \frac{1 - \tau}{\tau_0 - \tau},$$

cuando $\tau_0 < 1$, y cuando $\tau_0 > 1$.

a) Caso $\tau_0 < 1$.

Para aquellos casos en que se cumpla la condición $\tau < \tau_0 < 1$ el comportamiento de $\psi(\tau)$ estará dado por la curva *a* de la gráfica (2.1). Las condiciones $\tau_0 < \tau < 1$ y $\tau_0 < 1 < \tau$ corresponden a la curva *b* de la misma gráfica.

La región de la curva *b* en que $\tau_0 < \tau < 1$ correspondería a densidades negativas, por lo que no refleja situaciones que tengan significado físico. En conclusión, sólo la rama *a* es relevante.

En términos del tiempo *t*,

$$\psi(t) = \frac{e^{-t}}{\tau_0 - 1 + e^{-t}},$$

observándose, como se ilustra en la gráfica (2.3) que $\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(t) = 1$, cuando $\tau = 0 = t$, $\psi(0) = \frac{1}{\tau_0}$, creciendo ilimitadamente en un tiempo finito $t = \ln(1 - \tau_0)^{-1}$.

La región de la curva *b* de la gráfica (2.1) en donde la concentración es negativa corresponde a la rama de la gráfica (2.3) donde $\psi(t) < 0$.

b) Caso $\tau_0 > 1$.

Cuando $\tau_0 > 1$ el comportamiento de la función $\psi(\tau)$ estará dado por las curvas *c* y *d* de la gráfica (2.2). Para esta misma condición, la gráfica (2.4) muestra el comportamiento de $\psi(t)$.

De acuerdo a los argumentos anteriores la rama *d* no corresponde a situaciones físicas, así como la región de la rama *c* donde $\psi(\tau) < 0$. La región de interés se encuentra en esta curva cuando $-\infty \leq \tau \leq 1$, y $\psi(\tau)$ decrece conforme τ aumenta. En función de *t*, ψ decae exponencialmente a cero, como puede verse de la expresión anterior, para tiempos grandes ($t \rightarrow \infty$).

Así pues, esta ecuación presenta una solución de equilibrio inestable, existiendo un cambio radical en el comportamiento. Siendo éste dependiente del parámetro τ_0 , el cual determina la distribución de densidad $n_0(x)$ para el tiempo $t = 0$. Si $\tau_0 < 1$, $\psi(0) = \frac{1}{\tau_0} > 1$, y la solución explota en un tiempo finito. Si por el contrario $\tau_0 > 1$, $\psi(0) < 1$, y decae exponencialmente.

Dado que :

$$\psi(r(t)) = \left[\frac{1 - b(p-1)\tau}{\tau_0 - \tau} \right]^{\frac{1}{p-1}} = \left[\frac{b(p-1)e^{-b(p-1)t}}{b(p-1)\tau_0 + e^{-b(p-1)t} - 1} \right]^{\frac{1}{p-1}},$$

si se pide que ψ sea una constante $K\tau^{\frac{1}{p-1}} > 0$, será posible tener soluciones de equilibrio siempre que $b = \frac{K}{p-1}$, en cuyo caso $\tau_0 = \frac{1}{K}$. Dado que para tener significado físico $\psi(r(t))$ debe ser positivo y real, el argumento de la raíz en el paréntesis debe ser positivo, si $p \geq 2$.

En analogía con el ejemplo estudiado, aparecen dos casos: $\tau_0 < \frac{1}{K}$ y $\tau_0 > \frac{1}{K}$. En el primero, equivalente a $b(p-1)\tau_0 < 1$ se tiene un comportamiento que va como :

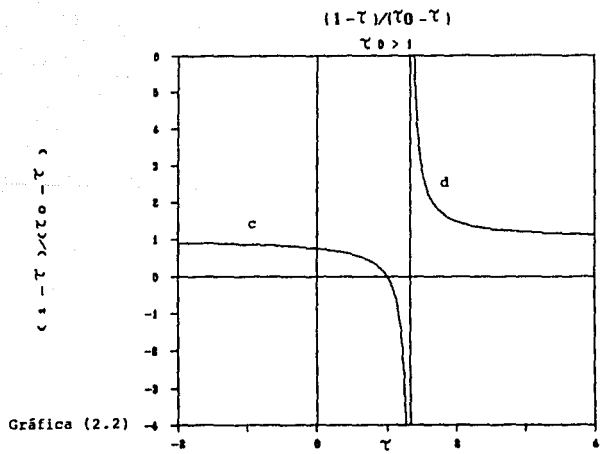
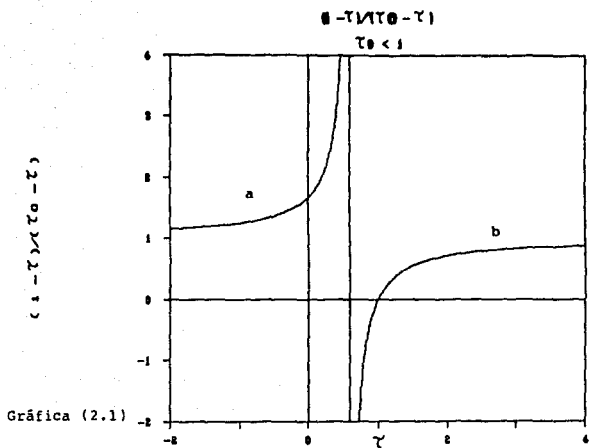
$$\psi(r) = \left(\frac{\frac{1}{K} - r}{\tau_0 - r} K \right)^{\frac{1}{p-1}}.$$

En el segundo, equivalente a $b(p-1)\tau_0 > 1$, se tiene un decaimiento del perfil que va como :

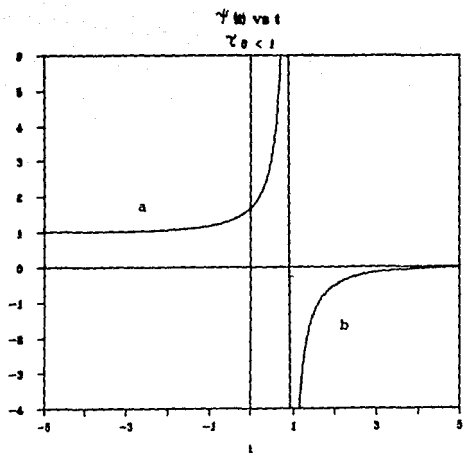
$$\psi(r) = \frac{e^{-\frac{Kr}{p-1}}}{\left(\tau_0 - \frac{1}{K}\right)^{\frac{1}{p-1}}}$$

para tiempos grandes.

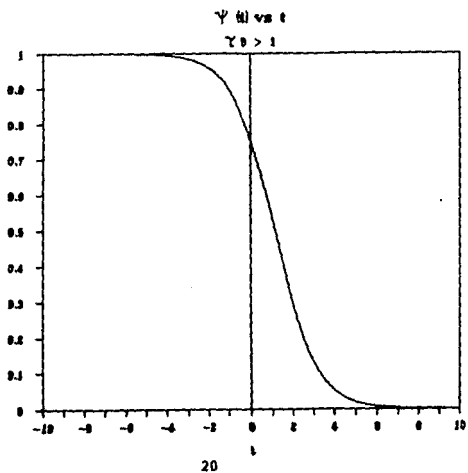
De la discusión anterior se puede ver también que la amplitud del perfil de equilibrio crece proporcionalmente con b y p , mientras la tasa del decaimiento está dada por b . Como es de esperar, si $b \rightarrow 0$, $K \rightarrow 0$ y la solución de equilibrio deja de existir, quedando sólo la solución explosiva estudiada anteriormente, dado que $r \rightarrow t$.



$\psi(\omega)$



$\psi(\omega)$



Las figuras siguientes ilustran diferentes casos en que la condición inicial del perfil se toma como la de equilibrio, por arriba de este perfil, así como por debajo de éste; para el caso en que $p = 2$, $\delta = 1$ y $b = 1$. Estas figuras fueron generadas a partir de un código de análisis numérico correspondiente a la discretización de la ecuación de reacción-difusión en diferencias finitas, el cual se discutirá más adelante.

La figura (2.1) representa el perfil de equilibrio para el caso $\tau_0 = 1$:

$$n(x, 0) = \frac{4}{3} \cos^2 \left(\frac{x}{2\sqrt{2}} \right) = \phi(x).$$

Aquí se aprecia que el perfil mantiene su forma inicial con el paso del tiempo.

En la figura (2.2) se estudia la evolución de un perfil que parte de una condición inicial por encima de la solución de equilibrio, y para la cual $\tau_0 = 0.66 < 1$

$$n(x, 0) = \frac{3}{2} \phi(x).$$

Por último, en la figura (2.3) se observa la evolución de un perfil cuya condición inicial está por debajo del perfil de equilibrio, correspondiente al caso $\tau_0 = 1.33 > 1$:

$$n(x, 0) = \frac{3}{4} \phi(x).$$

En base a los perfiles de evolución aquí mostrados puede observarse que el perfil de equilibrio es un perfil inestable, siendo τ_0 el parámetro que determina el comportamiento de la inestabilidad, tal como se describe en la ecuación (2.8).

Estado de Equilibrio

$Dt\alpha=1$ $P=2$ $K=1$ $Lam=1$ $Dt=0.005$

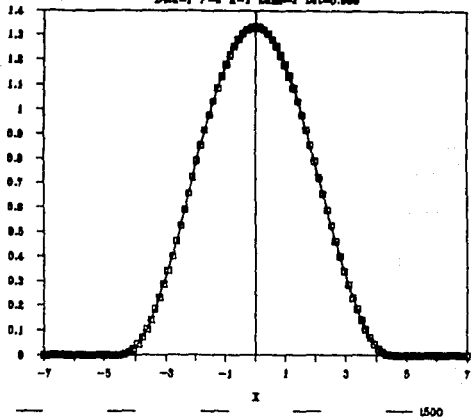


Figura (2.1)

□ 10

Condición Inicial Arriba del Equilibrio

$Dt\alpha=1$ $P=2$ $K=1$ $Lam=1$ $Dt=0.005$

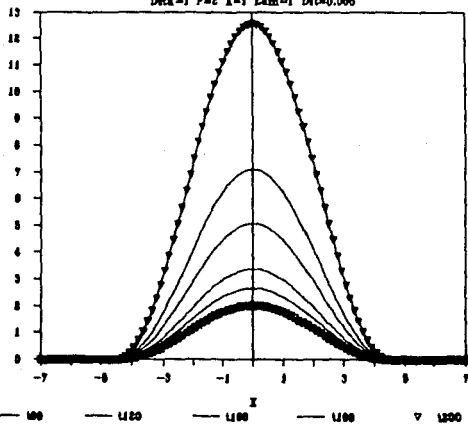


Figura (2.2)

□ 10

— 100

— 1120

— 1100

— 1100

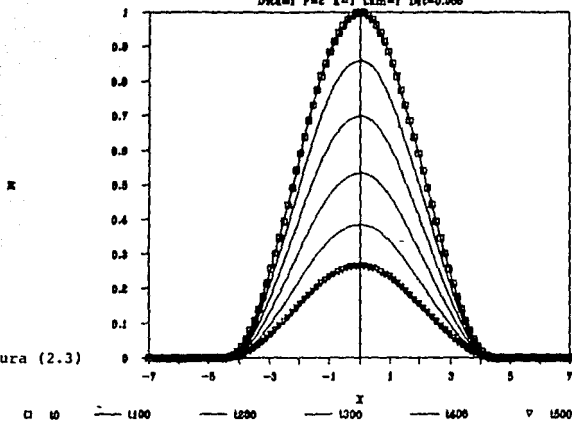
— 1100

— 1100

▽ 1100

Condición Inicial Abajo del Equilibrio

$Dh=1$ $P=2$ $K=1$ $Lam=1$ $Dt=0.205$



2.4 Geometría Cilíndrica y Esférica.

Para aquellos casos que presenten simetría radial en geometría cilíndrica o bien esférica ($\gamma = 1, 2$), se puede dar una solución aproximada de la ecuación (2.5) para $p = \delta + 1$, que se escribe en la forma (Wilhelmsen, 1988a,b, 1989) :

$$\phi = \phi_0 \cos^{\lambda} \left[\frac{x}{L} - \epsilon \left(\frac{x}{L} \right)^{\delta} \right], \quad (2.9)$$

donde

$$\phi_0 = \left(\frac{2p + \gamma(p-1)}{p^2 - 1} \right)^{(p-1)^{-1}},$$

$$L^2 = \frac{2}{(p-1)^2} [2p + \gamma(p-1)],$$

$$\lambda = 2(p-1)^{-1},$$

$$\epsilon = \frac{\gamma}{12} (3 + \gamma)^{-1}.$$

Para el caso cartesiano ($\gamma = 0$) la ecuación (2.9) se reduce a la ecuación (2.8). Para valores de $\gamma = 1, 2$ la ecuación (2.9) satisface la ecuación a un orden de x^2 para valores pequeños de x . La expresión (2.9) caracteriza un perfil espacial cuya forma se preserva en el transcurso del tiempo. La solución resulta ser local si la condición a la frontera es tal que $\phi(x)$ es igual a cero para valores del argumento mayores que un determinado valor. Por ejemplo, en el caso unidimensional con $p = 2, \delta = 1$, la solución para valores tales que $|x| < \pi\sqrt{2}$, evoluciona como $\frac{1}{2}(t_0 - t)^{-1} \cos^2 \left(\frac{x}{2\sqrt{2}} \right)$, mientras que es cero para valores en el rango $|x| > \pi\sqrt{2}$.

Para el caso $p \neq \delta + 1$ pueden encontrarse soluciones aproximadas a la ecuación (2.5) suponiendo la forma siguiente para la función ϕ :

$$\phi = \phi_0 G\left(\frac{\xi}{\Lambda}\right), \quad (2.10)$$

donde

$$G\left(\frac{\xi}{\Lambda}\right) = 1 - \left(\frac{\xi}{\Lambda}\right)^2 + \eta \left(\frac{\xi}{\Lambda}\right)^4, \quad \xi^2 < \Lambda^2,$$

en donde ξ se define por la ecuación (2.4). Esta expresión modela una forma de campana para los perfiles de concentración. Substituyendo la ecuación (2.10) en la (2.5), las constantes Λ , η y ϕ_0 pueden determinarse haciendo corresponder en el límite con aquellos para los cuales se cumple que $p = \delta + 1$.

De esta forma se obtiene :

$$\eta = \frac{p-1}{2} \left(\frac{2+\gamma}{3+\gamma} - \frac{p-2}{p-1} \right),$$

$$\Lambda^2 = 2 \left(\frac{p-1}{\delta} \right) [\Gamma - (1+\gamma)(p-1)] T,$$

con Γ y T dados por :

$$T = \left[\frac{1}{p-1} \frac{\Gamma - (1+\gamma)(p-1-\delta)}{\Gamma - (1+\gamma)(p-1)} \right]^{(p-1)^{-1}},$$

$$\Gamma = \delta(3+\gamma) + 3 - p.$$

CAPITULO III

SOLUCIONES DE TIPO ONDA VIAJERA PARA ECUACIONES DE REACCION-DIFUSION CON TERMINOS DE DE CREACION Y ANIQUILACION

En este capítulo se presentará la técnica por reducción a cuadraturas para la obtención de soluciones analíticas exactas a la ecuación de reacción-difusión. Se obtendrán soluciones de tipo onda viajera, donde el movimiento del frente de onda estará caracterizado por el grado de no linealidad de los términos de difusión, creación y de aniquilación.

Cabe destacar que, por medio de este método, en cualquier caso es posible obtener la velocidad de propagación de la onda aún cuando las expresiones obtenidas no puedan ser expresadas en forma cerrada. Esto representa una herramienta muy útil para conocer las velocidades del frente de onda en algún proceso bajo estudio.

Se estudiarán además las propiedades del frente de onda en base al comportamiento de las soluciones en el espacio fase. Este tipo de análisis permitirá conocer el rango de velocidades para las cuales existen soluciones viajeras, así como las cotas mínimas de velocidad que por debajo de ellas no es posible tener soluciones con frentes de propagación.

En capítulos posteriores se mostrará que partiendo de condiciones iniciales arbitrarias, los perfiles evolucionan a las soluciones particulares aquí encontradas.

3.1 Soluciones de Tipo Onda Viajera.

Considérese la siguiente ecuación diferencial parcial :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x} \right) + n^p - \lambda n^k \\ = n^{\delta} \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \delta n^{\delta-1} \left(\frac{\partial n}{\partial x} \right)^2 + n^p - \lambda n^k, \end{aligned} \quad (3.1)$$

que puede resolverse para ondas viajeras introduciendo la variable z dada por :

$$z = x - ct,$$

donde c representa la velocidad de propagación del frente de onda.

Denotando con primas las derivadas respecto a esta variable, la ecuación (3.1) toma la forma :

$$n^{\delta} n'' + \delta n^{\delta-1} n'^2 + cn' + n^p - \lambda n^k = 0. \quad (3.2)$$

Con el objeto de encontrar soluciones a este problema, se propone que la derivada de n respecto a la nueva variable sea de la forma

$$n' = \alpha n^{\gamma} + \beta n^p, \quad (3.3)$$

siendo los coeficientes α, β y el exponente γ , parámetros por determinar. Esta forma para n' quedará justificada cuando el análisis de las soluciones en el espacio fase sea realizado.

A partir de la ecuación (3.3) pueden obtenerse, en función de estos parámetros, las expresiones de los términos de la ecuación (3.2) que contienen derivadas de n .

Llevando a cabo lo anterior y reagrupando los términos con igual potencia en n se obtiene :

$$\begin{aligned} & \alpha^2 (\gamma + \delta) n^{2\gamma+\delta-1} + \alpha\beta (\gamma + p + 2\delta) n^{\gamma+p+\delta-1} + \\ & + \beta^2 (p + \delta) n^{p+\delta-1} + c\alpha n^\gamma + (c\beta + 1) n^p - \lambda n^k = 0 . \end{aligned} \quad (3.4)$$

La expresión anterior es la ecuación de partida que se utilizará con el propósito de obtener soluciones analíticas a la ecuación de reacción-difusión. Tomando diferentes elecciones en las condiciones de los exponentes de n , es posible obtener las expresiones de los parámetros α y β en términos de cantidades conocidas.

a) Escogiendo como condición para los exponentes de la ecuación (3.4) :

$$\begin{aligned} \text{i) } & 2\gamma + \delta - 1 = k \\ \text{ii) } & p = -\delta + 1 , \end{aligned} \quad (3.5)$$

se obtiene, después de agrupar los miembros con igual exponente en n :

$$\begin{aligned} k : & \quad \alpha^2 (\gamma + \delta) & = & \lambda \\ p : & \quad \beta^2 (p + \delta) + c\beta + 1 & = & 0 \\ \gamma : & \quad \alpha\beta (\gamma + p + 2\delta) + c\alpha & = & 0 . \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores se tiene que α y β estarán dadas por:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2\lambda}{k-p+2}},$$

$$\beta = -\sqrt{\frac{2}{k-p+2}},$$

y la expresión para la velocidad de propagación será :

$$c = \frac{k-p+4}{\sqrt{2(k-p+2)}}.$$

De la ecuación (3.3) se sigue que :

$$n' = \sqrt{\frac{2\lambda}{k-p+2}} n^p (n^{\dagger(k-p)} - \lambda^{-\dagger}). \quad (3.6)$$

De la ecuación anterior se tiene que :

$$dz = \sqrt{\frac{k-p+2}{2\lambda}} \frac{dn}{n^p (n^{\dagger(k-p)} - \lambda^{-\dagger})}$$

$$= \sqrt{\frac{2(k-p+2)}{\lambda(k-p)^2}} \frac{dv}{v^{\frac{k+p-1}{k-p}} (v - \lambda^{-\dagger})},$$

donde

$$v = n^{\dagger(k-p)}.$$

Por ejemplo, para el valor de $p = 1$ ($\frac{k+p-2}{k-p} = 1$), la integración de la ecuación (3.6) lleva a la expresión :

$$n = \frac{\lambda^{-x-1}}{(1 - Ae^{mx})^{x-1}}, \quad (3.7)$$

donde

$$m = \frac{k-1}{\sqrt{2(k+1)}},$$

$$c = \frac{k+3}{\sqrt{2(k+1)}},$$

siendo A una constante arbitraria. La ecuación (3.7) es la solución de la ecuación generalizada de Fisher ($k = 2$):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + n - \lambda n^k. \quad (3.8)$$

La solución (3.7) (para el caso $\lambda = 1$), fue obtenida primeramente por Kaliappan (1984) empleando un método perturbativo.

Para el caso en que $\frac{k+p-2}{k-p} = 0$ ($p = 2 - k$), se llega a la solución:

$$n = [Ae^{mx} + \lambda^{-x}]^{x-1},$$

donde

$$m = \frac{\sqrt{k}}{k-1}, \quad k \neq 1,$$

y

$$c = \frac{k+1}{\sqrt{k}} .$$

b) Escogiendo otra nueva condición sobre la ecuación (3.4) :

$$\begin{aligned} \text{i) } 2p + \delta - 1 &= k, \\ \text{ii) } \gamma &= 1 - \delta, \end{aligned} \tag{3.9}$$

se obtiene que :

$$\begin{aligned} k : \quad \beta^2 (p + \delta) &= \lambda \\ p : \quad \alpha \beta (p + \gamma + 2\delta) + c\beta + 1 &= 0 \\ \gamma : \quad \alpha^2 (\gamma + \delta) + c\alpha &= 0 . \end{aligned}$$

De donde se sigue que α, β y c están dadas por :

$$\alpha = -\frac{1}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} ,$$

$$\beta = \sqrt{\frac{\lambda}{p+\delta}} ,$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} .$$

Por lo que la expresión para n' queda en la forma :

$$n' = -\frac{1}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} n^{1-\delta} + \sqrt{\frac{\lambda}{p+\delta}} n^p . \quad (3.10)$$

De esta última expresión se sigue que :

$$dx = \frac{1}{p-k} \sqrt{\frac{p+\delta}{\lambda}} \frac{du}{v^{\frac{p-1}{p-k}} (1-\lambda^{-1}v)} ,$$

donde

$$v = n^{p-k} .$$

Para el caso $p = 1$ se obtiene la solución :

$$n = \left[\frac{Ae^{ms}}{1 + A\lambda^{-1}e^{ms}} \right]^{\frac{1}{1-k}} ,$$

donde

$$m = (1-k) \sqrt{\frac{\lambda}{k}} ,$$

y

$$c = \frac{1}{\sqrt{\lambda k}} .$$

Para el caso en que se cumpla que $2p = k + 1$ (que corresponde a $\delta = 0$), se obtiene la solución :

$$n = [\lambda (1 - Ae^{-mx})]^{1/(k-1)},$$

donde

$$m = \frac{1-p}{\sqrt{\lambda p}} ; p > 1,$$

y

$$c = \frac{1}{\sqrt{\lambda p}}.$$

Utilizando la expresión (3.10) es posible encontrar soluciones de tipo onda viajera a la ecuación de reacción-difusión cuyos exponentes δ , p y k cumplan con la condición (3.9) expuesta.

A continuación se presentan algunas soluciones analíticas obtenidas a partir de las ecuaciones (3.9) y (3.10) :

$$1) \delta = 1, p = 2, k = 4.$$

$$n = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left[\frac{1 - e^{mx}}{1 + e^{mx}} \right] = -\frac{1}{\sqrt{\lambda}} \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{3}}\right),$$

donde

$$m = \frac{2}{\sqrt{3}} \text{ y } c = \frac{1}{\sqrt{3\lambda}}.$$

$$2) \delta = 1, p = 1, k = 2.$$

$$n = \frac{1}{\lambda} \left(1 + \frac{\lambda}{A} e^{ms} \right) ; A = cte.$$

donde

$$m = \sqrt{\frac{\lambda}{2}} \text{ y } c = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} .$$

Esta solución fue descubierta por Newman y Sagan, y por Aronson y Weinberger (1980).

3) $\delta = 2, p = 1, k = 3.$

$$n = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} (1 + Ae^{ms}) ,$$

donde

$$m = 2\sqrt{\frac{\lambda}{3}} \text{ y } c = \frac{1}{\sqrt{3\lambda}} .$$

4) $\delta = 2, p = 3, k = 7.$

$$n = \lambda^{-1} \left[-\tanh\left(\frac{2s}{\sqrt{5}}\right) \right]^{\frac{1}{2}} ,$$

donde

$$c = \frac{1}{\sqrt{5\lambda}} .$$

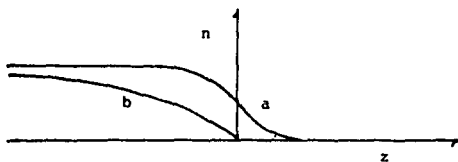
En el Capítulo V se presentará la evolución de los perfiles de concentración para distintos valores de los parámetros δ, p y k , a partir de la técnica de análisis numérico descrito en el capítulo siguiente.

Mediante el uso del método numérico desarrollado, podrán confirmarse tanto el movimiento de propagación de los frentes de onda, así como el de la formación de plataformas locales de estabilidad predichas por las soluciones analíticas exactas. En este punto radica la confiabilidad del método numérico en lo que se refiere a la evolución de los perfiles para aquellos casos en los que se desconosca alguna solución analítica.

3.2 Naturaleza de las Soluciones a Partir de los Puntos Críticos en el Espacio Fase.

Una alternativa para probar la existencia de soluciones de tipo onda viajera para la ecuación (3.1) se encuentra mediante el estudio del espacio fase para la ecuación de onda (3.2). Los frentes de onda que pueden encontrarse para las soluciones de la ecuación de reacción-difusión presentan dos formas distintas, una de ellas corresponde a (a) frentes del tipo de cambio de fase, frentes que se caracterizan por un decaimiento asintótico al infinito y (b) a frentes de tipo agudo, cuya pendiente es finita en el punto de contacto con el eje z (Aronson, 1980).

Estos tipos de frente de onda se muestran en el dibujo siguiente :



Haciendo uso de la transformación $n' = v$, la ecuación (3.2) puede descomponerse en el sistema :

$$\begin{aligned} n' &= v \\ v' &= -\delta n^{-1} v^2 - c n^{-k} v - n^{p-k} (1 - \lambda n^{k-p}) . \end{aligned} \quad (3.11)$$

Caso I. $\delta = 0$

De la ecuación (3.11) se obtiene para este caso el sistema de ecuaciones :

$$\begin{aligned} n' &= v \\ v' &= -c v - n^p (1 - \lambda n^{k-p}) . \end{aligned}$$

El sistema anterior es no singular y tiene como puntos críticos :

$$(n, v) = (0, 0), \left(\lambda^{-\frac{1}{k-p}}, 0 \right) .$$

Regresando a la expresión para n' de la ecuación (3.6), es decir :

$$n' = \sqrt{\frac{2\lambda}{k-p+2}} n^p (n^{\frac{1}{2}(k-p)} - \lambda^{-\frac{1}{2}}) ,$$

se tiene que :

$$\begin{aligned} n = 0 &\Rightarrow n' = v = 0 \\ v = n' = 0 &\Rightarrow n^{\frac{1}{2}(k-p)} = \lambda^{-\frac{1}{2}} \Rightarrow n = \lambda^{-\frac{1}{k-p}} , \end{aligned}$$

que son los dos puntos críticos del sistema.

De la ecuación (3.10) para n' :

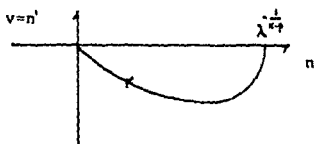
$$n' = -\frac{1}{\sqrt{\lambda p}} n (1 - \lambda n^{p-1}) ,$$

se obtiene :

$$n = 0 \Rightarrow n' = v = 0$$

$$v = n' = 0 \Rightarrow n^{p-1} = \lambda^{-1} \Rightarrow n = \lambda^{-\frac{1}{p-1}} = \lambda^{-\frac{1}{r}} ,$$

La conexión del punto silla $(\lambda^{-\frac{1}{r}}, 0)$ con el punto nodo $(0, 0)$ en el digrama de espacio fase corresponde a soluciones de onda viajera del tipo de cambio de fase.



De esta forma, se tiene que las soluciones de onda de la ecuación (3.1) para el caso en que $\delta = 0$ serán siempre ondas viajeras de cambio de fase.

Caso II. $\delta \geq 1$

Proponiendo el cambio de variable $v = n^\delta$ la ecuación (3.1) toma la forma :

$$\frac{\partial v}{\partial t} = v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{1}{\delta} \left(\frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 + \delta v^{\frac{1+\beta}{\beta}-1} (1 - \lambda v^{\frac{1+\beta}{\beta}}) ,$$

así como la ecuación de onda :

$$v v'' + \frac{1}{\delta} (v')^2 + c v' + \delta v^{\frac{1+\beta}{\beta}-1} (1 - \lambda v^{\frac{1+\beta}{\beta}}) = 0 .$$

Haciendo el cambio de variable $v' = w$ se obtiene el sistema :

$$v' = w$$

$$v w' = -\frac{w^2}{\delta} - c w - \delta v^{\frac{1+\beta}{\beta}-1} (1 - \lambda v^{\frac{1+\beta}{\beta}}) .$$

Para eliminar la singularidad del sistema en $v = 0$, Aronson propuso la introducción de una nueva variable r definida por :

$$\frac{dr}{dx} = \frac{1}{v} .$$

Denotando la derivada con respecto a esta variable como (\cdot) , el sistema anterior adquiere la forma :

$$\dot{v} = w v$$

$$\dot{w} = -\frac{w^2}{\delta} - c w - \delta v^{\frac{1+\beta}{\beta}-1} (1 - \lambda v^{\frac{1+\beta}{\beta}}) ,$$

teniendo este sistema los tres puntos críticos :

$$(v, w) = (0, 0), (0, -c\delta), (\lambda^{-\frac{k}{p+1}}, 0) .$$

La solución a este problema puede encontrarse, como se ha visto anteriormente, proponiendo la expresión :

$$w = v' = \alpha v^{\gamma} + \beta v^{\rho} ,$$

a partir de la cual se obtiene :

$$w = v' = \sqrt{\frac{2\lambda}{k-p+2}} \delta u^{\frac{(p+1)\delta-1}{\delta}} \left(u^{\frac{k-p}{p+1}} - \lambda^{-\frac{k}{p+1}} \right) ,$$

cuando $p = -\delta + 1$,

y

$$w = v' = -\frac{\delta}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} \left(1 - \lambda v^{\frac{p+1}{\delta}} \right) ,$$

para $k = 2p + \delta - 1$.

De esta última expresión se tiene que :

$$w = 0 \Rightarrow v = \lambda^{-\frac{\delta}{p+1}}$$

$$v = 0 \Rightarrow w = -\frac{\delta}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} = -c\delta ,$$

$$\text{con } c = \frac{1}{\sqrt{\lambda(p+\delta)}} .$$

La conexión de los puntos críticos anteriores (silla-silla) corresponde a soluciones de onda agudas.

Como ejemplo de lo anteriormente expuesto se analizará el tipo de soluciones que pueden obtenerse para la ecuación de reacción-difusión para una elección particular de los parámetros δ, p y k .

Tomando $\delta = 1, p = 2, k = 4$, se obtiene el sistema :

$$\dot{n} = v$$

$$\dot{v} = -n^{-1}v^2 - cn^{-1}v - n(1 - \lambda n^3) .$$

La singularidad en el origen puede removerse a partir del procedimiento de Aronson, obteniéndose :

$$\dot{n} = v n$$

$$\dot{v} = -v^2 - c v - n^2(1 - \lambda n^3) .$$

(3.12)

Los diagramas de espacio fase correspondientes al sistema anterior pueden encontrarse resolviendo para diferentes condiciones iniciales. Se ha tomado aquí $\lambda = 1$.

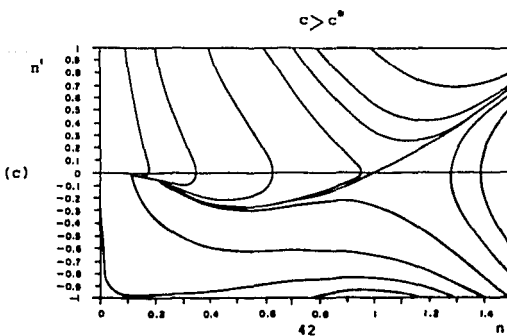
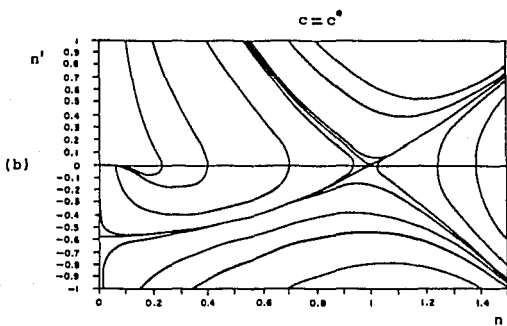
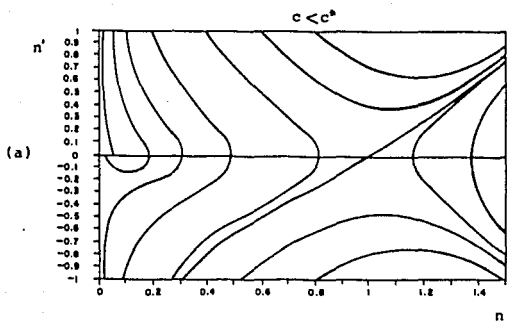
El diagrama (a) mostrado a continuación ilustra las curvas de nivel para el caso en que la velocidad de propagación c (aquí $c = 0.2$) en la ecuación (3.12) es menor que la velocidad analítica obtenida previamente ($c = c^* = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}$).

En este diagrama se observa que no existe conexión silla-silla, así como tampoco del tipo silla-nodo, por lo que en particular para esta elección de parámetros δ, p y k no existen soluciones de tipo onda viajera que tengan velocidades menores que c^* .

El diagrama (b) muestra el espacio fase para el caso en que la velocidad de propagación es igual a la velocidad analítica ($c = c^*$). Se aprecia en el diagrama la existencia de conexión silla-silla, por lo que la solución corresponde a una onda viajera aguda. La intersección de la curva de nivel, que pasa por el punto $(1, 0)$, con el eje de n' da la velocidad c^* del frente de onda de la solución.

En el diagrama (c) se encuentran las curvas de nivel para el caso de frentes de onda con velocidades mayores que c^* . Se aprecia en este caso que existe una conexión silla-nodo, teniéndose así, para este problema, la existencia de soluciones del tipo de cambio de fase.

Puede observarse en este diagrama que la convergencia de las curvas de nivel hacia el origen es muy lenta. De aquí, puede suponerse que un posible camino a seguir para obtener soluciones de onda con $c > c^*$ para este problema, sería el de proponer una función polinomial en n para n' , pero con un mayor número de términos que en el caso de $c = c^*$ y posiblemente con exponentes fraccionarios para n .



3.3 Estabilidad de las Soluciones.

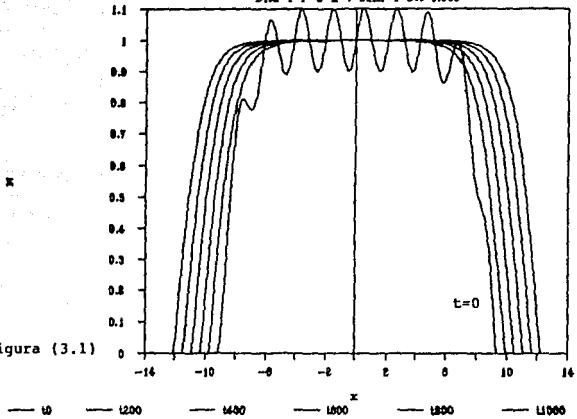
Con el objeto de estudiar la estabilidad de las soluciones previamente obtenidas, es posible introducir una perturbación en el perfil inicial y observar de este modo el grado de amortiguamiento de dicha perturbación.

Para realizar lo anterior, a la solución analítica (para el caso $\delta = 1, p = 2, k = 4$) se le introdujo una perturbación de tipo sinusoidal, como se muestra en la figura (3.1), observándose que la perturbación se amortigua completamente, además de que el perfil se ajusta en el tiempo a aquel conocido analíticamente y con la velocidad de frente de onda predicho.

A partir de este análisis se llega al hecho de que las soluciones encontradas para los diferentes valores de los parámetros de la ecuación de reacción-difusión son estables ante pequeñas perturbaciones, que se amortiguan en un tiempo finito, y se ajustan eventualmente a aquellas analíticas.

Perturbación

$Dt_0=1$ $P=2$ $K=4$ $Lam=1$ $Dt=0.006$



3.4 Obtención de Soluciones a partir de un Análisis Perturbativo.

A continuación se expondrá una técnica perturbativa con el propósito de poder encontrar soluciones a la ecuación diferencial parcial del ejemplo que se ha venido considerando. Los resultados de este análisis serán útiles para encontrar soluciones aproximadas para el caso en que $c > c^*$.

Como se mencionó en la sección anterior y a partir de los diagramas de espacio fase, puede asegurarse la existencia de soluciones de onda viajera cuyas velocidades de frente de onda sean mayores que c^* . En lo que sigue se aplicará un método perturbativo, semejante al empleado por Kaliappan (1984) para encontrar la solución (3.7). A pesar de que estas soluciones no resultan ser exactas para el problema considerado, ($\delta = 1, p = 2, k = 4$), es posible en un cierto grado de aproximación justificar la existencia de soluciones con $c > c^*$.

Kaliappan estudia la ecuación de reacción-difusión unidimensional:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + n - n^k,$$

que es una forma generalizada de la ecuación de Fisher ($k = 2$) y donde D es una constante positiva. El método perturbativo con el que trabaja hace posible la obtención de soluciones analíticas exactas a la ecuación anterior.

Las soluciones que se obtienen por este método a dicha ecuación, haciendo la transformación $n = n(x) = n(x - ct)$, son de la forma :

$$n = \left[1 - \frac{A}{\alpha} e^{ms} \right]^{-\alpha},$$

donde

$$\alpha = \frac{2}{k-1},$$

$$c = \frac{k+3}{\sqrt{2(k+1)}},$$

$$m = \frac{k-1}{\sqrt{2(k+1)}},$$

siendo A una constante arbitraria y c la velocidad de propagación de la onda. Por simplificación, se ha hecho la transformación $x \rightarrow D^{-1/2}x$.

Esta misma técnica se empleará en lo siguiente para encontrar soluciones aproximadas para la ecuación :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(n \frac{\partial n}{\partial x} \right) + n^2 - n^4. \quad (3.13)$$

A pesar de que la solución no es exacta para este caso, como se verá a continuación, este método perturbativo permite de alguna forma explicar el comportamiento cualitativo de las soluciones y tener así una base para entender la evolución de los perfiles de concentración. En el Capítulo V del presente trabajo se obtendrán los perfiles de concentración para ecuaciones similares a la anterior por medio del análisis numérico.

Las soluciones de tipo onda viajera se obtienen substituyendo la expresión :

$$n = n(z) = n(x - ct),$$

en la ecuación (3.13), obteniéndose la ecuación diferencial ordinaria:

$$n \frac{d^2 n}{dz^2} + \left(\frac{dn}{dz} \right)^2 + c \frac{dn}{dz} + n^2 - n^4 = 0, \quad (3.14)$$

donde c representa a la velocidad de la onda.

Se supone que la solución $n(z)$ de la ecuación anterior es de la forma :

$$n(z) = 1 + \epsilon f_1(z) + \epsilon^2 f_2(z) + \epsilon^3 f_3(z) + \dots \quad (3.15)$$

donde ϵ es un parámetro pequeño. Las funciones f_1, f_2 y f_3 se determinan substituyendo la expresión (3.15) en la (3.14) e igualando los términos con igual potencia en el parámetro ϵ , obteniéndose el sistema de ecuaciones :

$$\begin{aligned} f_1'' + c f_1' - 2f_1 &= 0 \\ f_2'' + c f_2' - 2f_2 &= -f_1 f_1'' - (f_1')^2 + 5f_1^2 \\ f_3'' + c f_3' - 2f_3 &= -f_2 f_1'' - f_1 f_2'' - 2f_1' f_2' + 10f_1 f_2 + 4f_1^3, \end{aligned}$$

y cuyas soluciones son :

$$\begin{aligned} f_1 &= A e^{mz}, \\ f_2 &= A^2 e^{2mz} \left[\frac{5 - 2m^2}{4m^2 + 2cm - 2} \right], \\ f_3 &= \frac{A^3 e^{3mz}}{9m^2 + 3cm - 2} \left[\frac{18m^4 - 49m^2 + 8cm + 42}{4m^2 + 2cm - 2} \right], \end{aligned}$$

siendo A una constante arbitraria y m dada por :

$$m = \frac{-c + \sqrt{c^2 + 8}}{2} . \quad (3.16)$$

De esta forma tenemos que $n(z)$ se expresa de la forma siguiente:

$$n(z) = 1 + \epsilon A e^{mz} + \epsilon^2 A^2 e^{2mz} \left[\frac{5 - 2m^2}{4m^2 + 2cm - 2} \right] + \\ + \epsilon^3 \frac{A^3 e^{3mz}}{9m^2 + 3cm - 2} \left[\frac{18m^4 - 49m^2 + 8cm + 42}{4m^2 + 2cm - 2} \right] .$$

Comparando los términos de esta última expresión con la serie binomial :

$$(1-x)^{-\alpha} = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2} x^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{6} x^3 + \dots ,$$

se tiene para el segundo y tercer miembros :

$$z = \frac{A e^{mz}}{\alpha} ,$$

y

$$\frac{\alpha + 1}{2\alpha} = \frac{5 - 2m^2}{4m^2 + 2cm - 2} . \quad (3.17)$$

Resolviendo la ecuación anterior para m se tiene :

$$m = (4\alpha - 1) \sqrt{\frac{2\alpha + 1}{24\alpha^3 + 14\alpha^2 - \alpha - 1}} . \quad (3.18)$$

A partir de las ecuaciones (3.16) y (3.18) se encuentra que la velocidad de propagación viene dada por :

$$c = (2\alpha + 3) \sqrt{\frac{2\alpha + 1}{24\alpha^3 + 14\alpha^2 - \alpha - 1}} \quad (3.19)$$

Finalmente, comparando el cuarto término de la serie binomial con el respectivo de la ecuación para $n(z)$ se obtiene :

$$\frac{(\alpha + 1)(\alpha + 2)}{3\alpha^2} = \frac{1}{9m^2 + 3cm - 2} \left[\frac{18m^4 - 49m^2 + 8cm + 42}{2m^2 + cm - 1} \right]$$

Substituyendo en esta última expresión los valores para c y m , y resolviendo para α se encuentra una ecuación de séptimo grado cuyas raíces reales son :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= -0.526 \\ \alpha_2 &= -0.393 \\ \alpha_3 &= -0.140 \\ \alpha_4 &= 0.284 \\ \alpha_5 &= 1.201 \end{aligned}$$

Las soluciones de onda viajera que se encuentra para este caso particular estudiado son de la forma :

$$n = \left[1 - \frac{A}{\alpha} e^{mz} \right]^{-\alpha} \quad (3.20)$$

donde α puede tomar alguno de los valores anteriores. El tercer valor para α no representa un caso físico, ya que tanto m como c serían imaginarios.

Únicamente de estos casos, aquellos dos para los cuales el valor de α sea positivo es posible encontrar soluciones acotadas si se toma $A < 0$ en la solución para n :

Para estas soluciones acotadas se tiene que:

$$\begin{aligned} m_4 &= 0.273 \\ c_4 &= 7.067 \\ m_5 &= 0.909 \\ c_5 &= 1.291 . \end{aligned}$$

Substituyendo la expresión para n dada por la ecuación (3.20) en la ecuación (3.14) se obtiene el siguiente residuo ($A < 0$) :

$$\begin{aligned} & -Am^2n^2e^{mz} \left[1 + \frac{A}{\alpha}e^{mz} \right]^{-2} (1 - Ae^{mz}) - Acmn e^{mz} \left[1 + \frac{A}{\alpha}e^{mz} \right]^{-1} + \\ & + A^2m^2n^2e^{2mz} \left[1 + \frac{A}{\alpha}e^{mz} \right]^{-2} + n^2 - n^4 = 0 . \end{aligned} \tag{3.21}$$

En las figuras (3.2) y (3.3) se muestran respectivamente la solución de tipo onda viajera para el caso c_4 , así como la ecuación (3.21) en función del argumento z , esto último para mostrar el grado de aproximación del método perturbativo. Las figuras (3.4) y (3.5) ilustran lo anterior para el caso de soluciones viajeras con velocidad c_5 .

La aplicación de este método perturbativo, para este caso, no da en sí soluciones analíticas exactas a la ecuación de reacción-difusión considerada. Resulta sin embargo, basándose en este grado de aproximación, que es factible el poder conocer las características de evolución de los perfiles de concentración.

SOLUCION DE ONDA VIAJERA

$m=1$ $\nu=0$ $\xi=1$

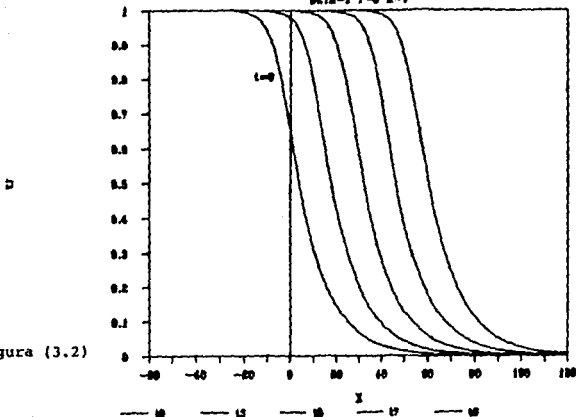


Figura (3.2)

RESIDUO (3.2) para $m=0.273$ y $c=7.067$

$m=1$ $\nu=0$ $\xi=1$

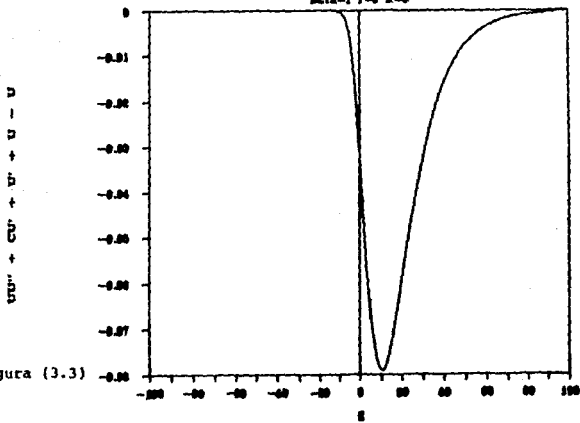


Figura (3.3)

SOLUCION DE ONDA VIAJERA

$\Delta T = 1 \quad P = 2 \quad K = 4$

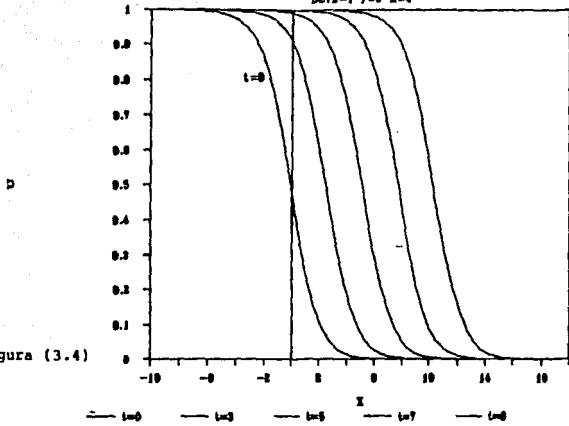


Figura (3.4)

RESIDUO (3.2) para $m=0.009$ y $c=1201$

$\Delta T = 1 \quad P = 2 \quad K = 4$

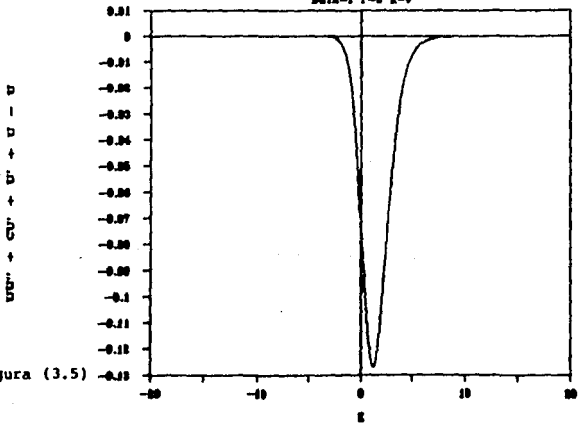


Figura (3.5)

CAPITULO IV

INTEGRACION NUMERICA DE LA ECUACION DE REACCION-DIFUSION

El estudio de la evolución dinámica de los perfiles de concentración se efectuará a través del análisis numérico de la ecuación de reacción-difusión. Este análisis servirá para estudiar aquellos casos en que se desconozcan soluciones analíticas o bien en los que se impongan condiciones iniciales arbitrarias al proceso estudiado.

En este capítulo se expone la integración numérica realizada a partir de la representación de esta ecuación en diferencias finitas, empleando el método de Crank-Nicolson. Con el propósito de obtener la confiabilidad de este método se efectúa en una sección su análisis de estabilidad, estimándose de esta forma las condiciones para las cuales el método no introduce errores significativos en el análisis.

4.1 Discretización de la Ecuación de Reacción-Difusión.

La ecuación de reacción-difusión unidimensional, que se considerará presenta la forma siguiente :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{\gamma} u^{\delta} \frac{\partial u}{\partial x} \right) + u^p - |\lambda| u^k, \quad (4.1)$$

en donde el parámetro γ está relacionado con la geometría ($\gamma = 0$, cartesiana y $\gamma = 1, 2$ cilíndrica y esférica respectivamente, ambos con simetría radial).

El segundo y tercer miembros del lado derecho de la ecuación anterior están relacionados respectivamente con procesos de creación y aniquilación. Los exponentes p y k dan el grado de la no linealidad de este tipo de procesos.

La integración numérica de esta ecuación se lleva a cabo a través de su representación discreta en diferencias finitas. La discretización de esta ecuación por medio de este método se expone en las siguientes líneas :

Expresando la ecuación (4.1) en la forma :

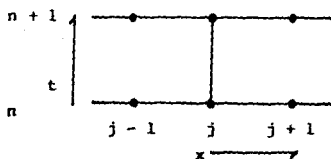
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{(\delta + 1)} \left[\frac{\gamma}{x} \frac{\partial}{\partial x} (u^{\delta+1}) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} (u^{\delta+1}) \right] + u^p - |\lambda| u^k,$$

la ecuación de diferencias que la aproxima es la siguiente :

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{1}{(\delta + 1)} \left\{ \frac{\gamma}{2x_j} \left[\frac{\Lambda(u^{\delta+1})_j^{n+1} + \Lambda(u^{\delta+1})_j^n}{2(\Delta x)} \right] + \right. \\ \left. + \left[\frac{\theta \Lambda^2(u^{\delta+1})_j^{n+1} + (1 - \theta) \Lambda^2(u^{\delta+1})_j^n}{(\Delta x)^2} \right] \right\} + \\ + (u^n)_j - |\lambda| (u^h)_j, \quad (4.2)$$

donde Δx y Δt son los incrementos espaciales y temporales respectivamente. El conjunto de puntos que forman la malla en el plano $x - t$ están dados por $x = j\Delta x$ y $t = n\Delta t$ donde $j = 1, 2, \dots, N$ y $n = 0, 1, 2, \dots$. La constante θ es un real tomado generalmente en el intervalo $0 \leq \theta \leq 1$. La aproximación a $u(j\Delta x, n\Delta t)$ se denota como $(u)_j^n$. El operador Λ se define más adelante.

El diagrama siguiente muestra el tipo de diferenciación que se aplica en el método de Crank-Nicolson. Los puntos mostrados son aquellos usados de la malla en el plano $x - t$, el eje temporal apunta hacia arriba de la página, mientras que los puntos espaciales corresponden al eje horizontal. La conexión de los tres puntos sobre el eje horizontal muestra a aquellos utilizados en la siguiente diferencia espacial consecutiva, mientras que los puntos unidos por la línea vertical a los usados en la diferencia temporal.



El miembro izquierdo de la ecuación (4.2) expresa la aproximación a la derivada temporal. El primer miembro del lado derecho de esta ecuación es la versión para la primera derivada espacial del método de discretización de Crank-Nicolson (1947). El operador Λ en este término queda dado por la expresión :

$$\Lambda(u^{\delta+1})_j^n = (u^{\delta+1})_{j+1}^n - (u^{\delta+1})_{j-1}^n . \quad (4.3)$$

El segundo miembro del lado derecho de la ecuación (4.2) expresa la aproximación por diferencias más general para la segunda derivada espacial. Esta ecuación incluye como casos especiales a las aproximaciones implícitas de Crank-Nicolson para $\theta = \frac{1}{2}$ y aquella de Laasonen (1949) para $\theta = 1$. Ambas aproximaciones resultan ser siempre estables. La expansión de Taylor en torno al punto $(x = j\Delta x, t = n\Delta t)$, muestra que el error que introduce la aproximación de Crank-Nicolson para esta derivada es del orden $e = O(\Delta t)^2 + O(\Delta x)^2$ y para el método de Laasonen de $e = O(\Delta t) + O(\Delta x)^2$. Al final del capítulo se discutirá la estabilidad de este esquema de diferencias para la ecuación de reacción-difusión.

El operador Λ^2 viene dado por la expresión siguiente :

$$\Lambda^2(u^{\delta+1})_j^n = (u^{\delta+1})_{j+1}^n - 2(u^{\delta+1})_j^n + (u^{\delta+1})_{j-1}^n . \quad (4.4)$$

La linealización del término $(u^{\delta+1})_j^{n+1}$ que aparece en el segundo y tercer miembros del lado derecho de la ecuación (4.2) puede efectuarse de diversas formas, una de éstas, sugerida por Beam y Warming (1976) es la siguiente (Richtmyer, 1967; Anderson, 1984; Crank 1975) :

$$(u^{\delta+1})_j^{n+1} \approx (u^{\delta+1})_j^n + (\delta + 1) (u^\delta)_j^n (u_j^{n+1} - u_j^n) . \quad (4.5)$$

Introduciendo la aproximación de Crank-Nicolson en la ecuación (4.2) y haciendo uso de las ecuaciones (4.3)-(4.5), la ecuación de diferencias para la ecuación de reacción-difusión dada por la expresión (4.1) resulta en la forma :

$$\begin{aligned}
 u_j^{n+1} - u_j^n = & \frac{\Delta t}{\delta + 1} \left\{ \frac{\gamma}{4(\Delta x)} \frac{1}{x_j} \left[2 \left((u^{\delta+1})_{j+1}^n - (u^{\delta+1})_{j-1}^n \right) + \right. \right. \\
 & + (\delta + 1) \left((u^\delta)_{j+1}^n (u_{j+1}^{n+1} - u_{j+1}^n) - (u^\delta)_{j-1}^n (u_{j-1}^{n+1} - u_{j-1}^n) \right) \left. \right] + \\
 & + \frac{1}{2(\Delta x)^2} \left[2 \left((u^{\delta+1})_{j+1}^n - 2(u^{\delta+1})_j^n + (u^{\delta+1})_{j-1}^n \right) + \right. \\
 & + (\delta + 1) \left((u^\delta)_{j+1}^n (u_{j+1}^{n+1} - u_{j+1}^n) - \right. \\
 & \left. \left. - 2(u^\delta)_j^n (u_j^{n+1} - u_j^n) + (u^\delta)_{j-1}^n (u_{j-1}^{n+1} - u_{j-1}^n) \right) \right] + \\
 & \left. + \Delta t \left[(u^p)_j^n - |\lambda| (u^k)_j^n \right] \right\} .
 \end{aligned}$$

Haciendo $w_j = u_j^{n+1} - u_j^n$ y reagrupando los términos con w_j para las diferentes j 's, se tiene que la aproximación en diferencias finitas queda en la forma siguiente :

$$A_j w_{j+1} + B_j w_j + C_j w_{j-1} = D_j , \quad (4.6)$$

donde los coeficientes A_j, B_j, C_j y D_j están dados por las expresiones:

$$A_j = -\alpha \left[1 + \frac{\gamma(\Delta x)}{2x_j} \right] (u^\delta)_{j+1}^n,$$

$$B_j = 1 + 2\alpha (u^\delta)_j^n,$$

$$C_j = -\alpha \left[1 - \frac{\gamma(\Delta x)}{2x_j} \right] (u^\delta)_{j-1}^n,$$

y

$$\begin{aligned} D_j = & \frac{\alpha\gamma(\Delta x)}{(\delta+1)x_j} \left[(u^{\delta+1})_{j+1}^n - (u^{\delta+1})_{j-1}^n \right] + \\ & + \frac{2\alpha}{(\delta+1)} \left[(u^{\delta+1})_{j+1}^n - 2(u^{\delta+1})_j^n + (u^{\delta+1})_{j-1}^n \right] + \\ & + \Delta t \left[(u^p)_j^n - |\lambda| (u^k)_j^n \right], \end{aligned}$$

donde

$$\alpha = \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2}.$$

El miembro derecho de la ecuación (4.6), junto con las condiciones a la frontera

$$w_1 = u_1^{n+1} - u_1^n,$$

$$w_N = u_N^{n+1} - u_N^n,$$

son cantidades conocidas que se utilizan en la solución de la ecuación.

El sistema de ecuaciones descrito por la expresión (4.6) es tal que todos los elementos de la matriz correspondiente al sistema son nulos excepto en tres de sus diagonales. Para la resolución de este sistema, el método que se describe en las siguientes líneas es eficiente y es además comúnmente usado; es en sí, una adaptación especial del método de eliminación gaussiana.

Para resolver el sistema descrito, se buscan dos cantidades E_j y F_j tales que se cumpla la relación (Potter, 1973; Forsythe, 1960) :

$$w_j = E_j w_{j+1} + F_j . \quad (4.7)$$

Si esto resulta válido para cualquier miembro de la familia de soluciones, de las condiciones a la frontera, se debe tener que :

$$E_1 = 0 , \quad F_1 = 0 . \quad (4.8)$$

Substituyendo $E_{j-1} w_j + F_{j-1}$ para w_{j-1} se tiene que :

$$w_j = - \frac{A_j}{B_j + C_j E_{j-1}} w_{j+1} + \frac{D_j - C_j F_{j-1}}{B_j + C_j E_{j-1}} .$$

De aquí se tiene que E_j y F_j están dados por :

$$E_j = - \frac{A_j}{B_j + C_j E_{j-1}} \quad j \geq 2 ,$$

$$F_j = \frac{D_j - C_j F_{j-1}}{B_j + C_j E_{j-1}} \quad j \geq 2 .$$

Utilizando estas dos últimas ecuaciones junto con la ecuación (4.8) se pueden calcular inductivamente los coeficientes E 's y F 's en orden creciente de la partición espacial j ($j = 1, 2, \dots, N$). Ahora bien, w_{j+1} está dado para $j = N$ por las condiciones a la frontera y se puede así calcular w_j de forma inductiva de la expresión (4.7) en orden decreciente de j ($j = N, N - 1, \dots, 1$). Esto completa el cálculo, restando el uso de la ecuación $u_j^{t+1} = u_j^t + w_j$ para la obtención, finalmente, de la solución en el paso temporal.

4.2 Estabilidad de las Soluciones.

Con el objeto de estimar la aproximación a la ecuación diferencial parcial por medio de la latiz discreta introducida, es conveniente analizar las derivadas de los términos involucrados. La importancia de lo anterior, radica en el hecho de que la derivada es una función que suministra información acerca de la variación local de una función en el espacio, siendo la derivada en diferencias el acoplamiento de puntos vecinos en la latiz. Para efectuar esta estimación es conveniente analizar lo concerniente a la estabilidad de las soluciones. Un método numérico resulta estable si un pequeño error introducido por la aproximación en cualquiera de sus pasos produce un error acumulativo menor. El estudio de la estabilidad de un determinado esquema consiste en la obtención del factor de amplificación para un modo de Fourier en la distribución espacial.

Se considerará primeramente el caso de una ecuación de reacción-difusión cuyo coeficiente de difusión no dependa de la concentración y posteriormente se generalizará al caso en que si lo sea.

Aplicando el modo de Fourier :

$$u = \hat{u}(t)e^{iks} ,$$

al primer miembro del esquema de diferencias, para el caso $\delta = 0$, se tiene que :

$$\hat{u}^{n+1} = \hat{u}^n + \beta [e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}] \hat{u}^{n+1} + \beta [e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}] \hat{u}^n ,$$

donde

$$\beta = \frac{\gamma \Delta t}{4x_j (\Delta x)} .$$

De esta última expresión se tiene :

$$\hat{u}^{n+1} = \left[\frac{1 + 2\beta i \operatorname{sen}(k\Delta x)}{1 - 2\beta i \operatorname{sen}(k\Delta x)} \right] \hat{u}^n \equiv g \hat{u}^n .$$

Así, el factor de amplificación $g(\Delta t, \Delta x, k)$ resulta ser complejo.

Tomando la magnitud del factor de amplificación en el plano complejo, se observa que este factor satisface la condición de estabilidad de von Neumann (Ritchmyer, 1967; Potter, 1973) :

$$|g| \leq 1 + O(\Delta t) .$$

El segundo miembro del algoritmo de diferencias puede analizarse de forma análoga. Aplicando la misma forma funcional del modo de Fourier a este término se obtiene la expresión :

$$\begin{aligned} \hat{u}^{n+1} = & \hat{u}^n + \theta \chi [e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}] \hat{u}^{n+1} + \\ & + (1 - \theta) \chi [e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x}] \hat{u}^n , \end{aligned}$$

donde

$$\chi = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}.$$

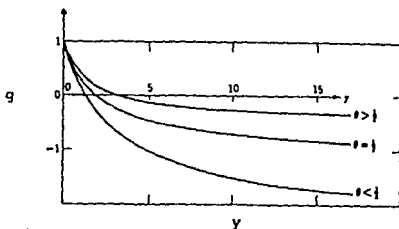
De esta expresión se obtiene :

$$\hat{u}^{n+1} \{1 - 2\theta\chi[\cos(k\Delta x) - 1]\} = \hat{u}^n \{1 + 2(1 - \theta)\chi[\cos(k\Delta x) - 1]\},$$

de donde se obtiene que el factor de amplificación queda dado por :

$$g = \frac{1 - 2\chi(1 - \theta)[1 - \cos(k\Delta x)]}{1 + 2\chi\theta[1 - \cos(k\Delta x)]}$$

La gráfica siguiente ilustra el comportamiento de g respecto al argumento $y = 2\chi[1 - \cos(k\Delta x)]$ para valores diferentes de θ . Conforme aumenta y , $g(\Delta t, \Delta x, k)$ decrece monótonamente de 1 al valor $-\frac{(1-\theta)}{\theta}$. Si se cumple la condición $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$ la asíntota no es menor que -1 , de ahí que este miembro de la ecuación de diferencias sea siempre estable. En el caso de tener que $0 \leq \theta < \frac{1}{2}$, y debe tomar por estabilidad el valor en el cual la curva intersecta $g = -1$.



donde

$$\chi = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}.$$

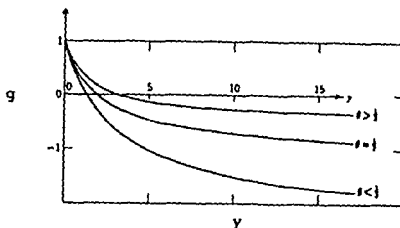
De esta expresión se obtiene :

$$\hat{u}^{n+1} \{1 - 2\theta\chi [\cos(k\Delta x) - 1]\} = \hat{u}^n \{1 + 2(1 - \theta)\chi [\cos(k\Delta x) - 1]\},$$

de donde se obtiene que el factor de amplificación queda dado por :

$$g = \frac{1 - 2\chi(1 - \theta)[1 - \cos(k\Delta x)]}{1 + 2\chi\theta[1 - \cos(k\Delta x)]}$$

La gráfica siguiente ilustra el comportamiento de g respecto al argumento $y = 2\chi[1 - \cos(k\Delta x)]$ para valores diferentes de θ . Conforme aumenta y , $g(\Delta t, \Delta x, k)$ decrece monótonamente de 1 al valor $-\frac{(1-\theta)}{\theta}$. Si se cumple la condición $\frac{1}{2} \leq \theta \leq 1$ la asíntota no es menor que -1 , de ahí que este miembro de la ecuación de diferencias sea siempre estable. En el caso de tener que $0 \leq \theta < \frac{1}{2}$, y debe tomar por estabilidad el valor en el cual la curva interseca $g = -1$.



Es así, que la condición de estabilidad será de la forma :

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2(1-2\theta)} \text{ si } 0 \leq \theta < \frac{1}{2} ,$$

$$\text{sin restricción si } \frac{1}{2} \leq \theta \leq 1 .$$

Con fundamento en lo anterior, se tiene que el método de Crank-Nicolson, utilizado en la discretización, es incondicionalmente estable.

El análisis para un coeficiente de difusión no lineal puede desarrollarse aplicando los resultados anteriores, haciendo para el primer término de diferencias la substitución $\beta \rightarrow u^b \beta$ y para el segundo término $\chi \rightarrow u^c \chi$.

En el Apéndice de este trabajo se presenta el código numérico desarrollado para el estudio de los perfiles.

CAPITULO V

EVOLUCION DE PERFILES PARA CONDICIONES INICIALES ARBITRARIAS

El propósito del presente capítulo es el de llevar a cabo el estudio de la ecuación de reacción-difusión para el caso general en que se encuentren presentes procesos simultáneos de difusión y reacción. El estudio de la evolución dinámica de los perfiles de concentración se hace a través del uso del código desarrollado en base al método descrito en el capítulo anterior, con lo que es posible estudiar la evolución de condiciones iniciales arbitrarias. Para diferentes órdenes arbitrarios en los términos no lineales de reacción y difusión se estudia el balance que se presenta entre ellos.

Se obtienen los comportamientos de los perfiles de concentración para aquellos casos en los que se presentan soluciones de carácter explosivo, corroborándose los resultados esperados a partir del análisis expuesto en el Capítulo II. De igual forma se analizan los procesos que involucran fenómenos de creación y aniquilación, obteniéndose para ellos soluciones de tipo onda viajera con las velocidades de propagación encontradas analíticamente.

Un resultado importante obtenido en este estudio es el hecho de que perfiles iniciales arbitrarios, en el transcurso de su evolución, se ajustan a las correspondientes soluciones analíticas, con las velocidades de propagación predichas analíticamente.

Pueden proponerse inclusive perfiles iniciales de tiempo de espera, observándose que sus frentes de onda eventualmente adquieren las velocidades de propagación encontradas de forma analítica.

Considérese nuevamente la ecuación de reacción-difusión :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left[x^{\gamma} n^{\delta} \frac{\partial n}{\partial x} \right] + n^p - \lambda |n^k| \quad (5.1)$$

En las secciones siguientes se estudiará el comportamiento de las soluciones de la ecuación anterior para diversos valores de los parámetros que involucran procesos de creación y aniquilación, así como de difusión. Se estudia además la evolución de los perfiles para las geometrías cilíndrica y esférica con simetría radial. El balance entre los procesos de reacción y de difusión se analiza para órdenes arbitrarios de sus términos.

Con el objeto de comprobar que el código desarrollado opere correctamente, se verifica que en aquellos casos en los que existen soluciones analíticas particulares, como las estudiadas en el Capítulo II, se reproduzcan los resultados esperados. El propósito de emplear métodos numéricos será el de estudiar la evolución de condiciones iniciales arbitrarias, tanto para los casos en los que existen soluciones particulares, como aquellos en los que no se conocen.

5.1 Soluciones Locales Explosivas.

En esta sección se presenta la reproducción numérica de la evolución explosiva descrita en la sección 2.3.

En la figura (5.1) se muestra la solución local explosiva correspondiente al caso $p = 2, \delta = 1, \lambda = 0$. La evolución del perfil de concentración es mostrado por las curvas en esta figura, en la que se observa el crecimiento no lineal y explosivo del perfil. Se encuentra además la preservación de la forma del perfil inicial. Tanto el comportamiento explosivo de la solución, como la forma de ésta, concuerdan

con los esperados para la solución analítica introducida previamente:

$$\phi(x) = \frac{2}{3} \left[1 + \cos\left(\frac{x}{\sqrt{3}}\right) \right].$$

La figura (5.2) muestra también la evolución de un perfil inicial hacia una solución local explosiva. Este comportamiento corresponde al caso $p = 3, \delta = 2, \lambda = 0$, con condición inicial $\phi(x) = \frac{\sqrt{3}}{2} \cos\left(\frac{x}{\sqrt{3}}\right)$.

Pueden ocurrir casos en que el perfil inicial difiera por no mucho de la solución particular o bien que éstos se encuentren perturbados. En las gráficas siguientes se muestran los comportamientos para dichos casos.

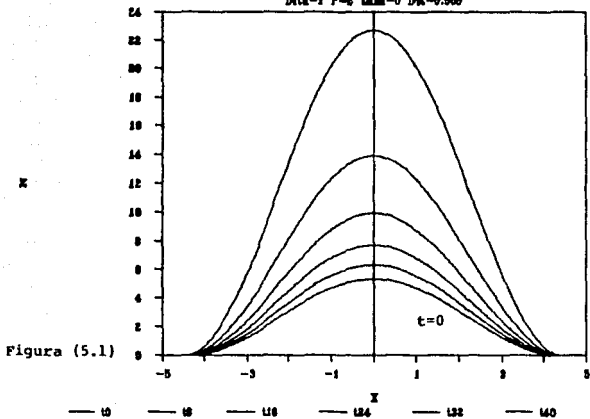
La figura (5.3) corresponde al caso de la evolución temporal de un perfil inicial angosto. En esta figura se observa que el perfil inicial decrece primeramente en amplitud hasta llegar a un mínimo, posteriormente aumenta en su amplitud aproximándose hacia una solución local explosiva. Este comportamiento es característico en ciertos casos en los que el grado de no linealidad del término de reacción sea mayor que el de difusión. Para este caso se tiene $p = 4, k = 2$ y $\delta = 1$.

Al valor para el cual el perfil presenta un mínimo en amplitud corresponde al momento en el que la relación entre la amplitud y anchura (el cual crece conforme el perfil aumenta) se ajustan a los de una solución local explosiva.

La figura (5.4) muestra la evolución de un perfil al que inicialmente se dió una pequeña perturbación. Dicha perturbación modifica inicialmente la forma de campana de las soluciones, pese a esto, el perfil tenderá siempre hacia una localidad explosiva.

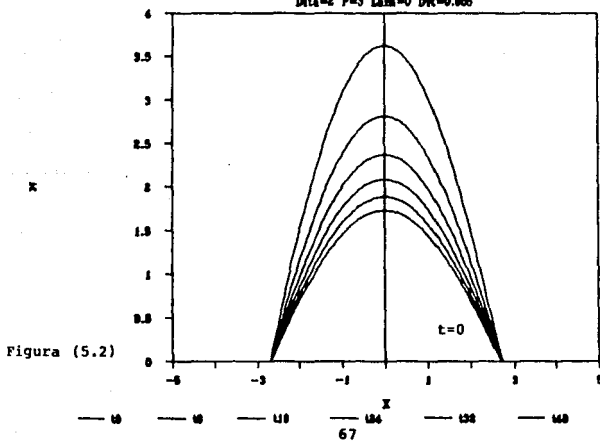
SOLUCION EXPLOSIVA

$Di=1$ $P=0$ $Lam=0$ $DR=0.005$



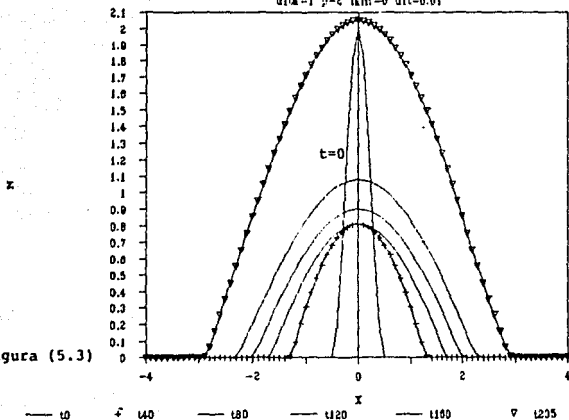
SOLUCION EXPLOSIVA

$Di=2$ $P=0$ $Lam=0$ $DR=0.005$



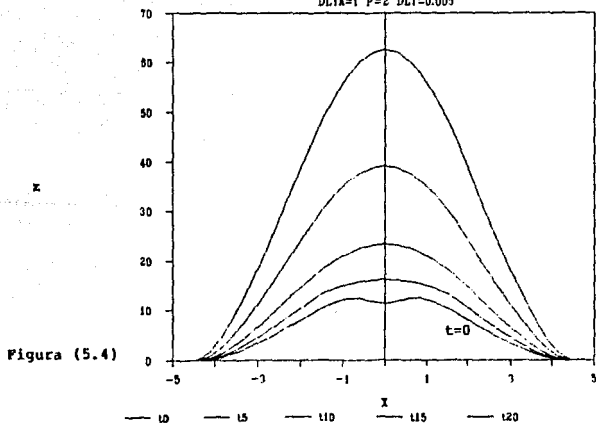
PERFIL ANGOSTO

$\Delta t = 1$ $p = 2$ $k_m = 0$ $\Delta t = 0.01$



PERTURBACION

$\Delta t = 1$ $P = 2$ $\Delta t = 0.005$



5.2 Evolución de Perfiles con Presencia Simultánea de Procesos de Creación y Aniquilación.

En esta sección se hace el análisis de la evolución de perfiles de concentración para aquellas situaciones que presentan tanto procesos de creación como de aniquilación. Los casos referidos son aquellos en los cuales el parámetro λ en la ecuación de reacción-difusión es diferente de cero.

5.2.1 Caso $p > k$, $\delta = 1$

En la sección 2.3 se estudió el caso en el que $p > k = 1$, encontrándose la existencia de soluciones de equilibrio inestable, tales que para condiciones iniciales mayores a ellas el perfil explota en un tiempo finito, mientras que para condiciones iniciales menores el perfil decae exponencialmente.

5.2.2 Caso $p < k$, $\delta = 1$

El comportamiento de las soluciones para los casos en que el término de creación sea menor que el de aniquilación presenta, para las formas de los perfiles, características diferentes. En la figura (5.5) se muestra la evolución temporal de un perfil obedeciendo la ecuación de reacción-difusión para el caso $\delta = 1, p = 2, k = 4, \lambda = 0.015$. Para este conjunto particular de parámetros se observa que la amplitud del perfil decrece siempre hasta un valor mínimo $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$. Cuando la amplitud inicial se encuentra por arriba de dicho valor, se forma una plataforma que se ensancha al transcurrir el tiempo. Se tiene así, en este caso, una vecindad en la cual el perfil adquiere una configuración estable. La plataforma de estabilidad se forma, como se mencionó en las líneas anteriores, en el valor para el cual la amplitud

toma el valor $\frac{1}{\lambda}$. Este valor se obtiene ya que en la región formada por la plataforma, tanto el lado izquierdo de la ecuación (5.1) como el primer miembro del lado derecho de dicha ecuación son nulos.

En la figura (5.6) se presenta un perfil cuya evolución es gobernada por los mismos valores de los parámetros anteriores, sin embargo, las condiciones a la frontera impuestas $n(\pm L) = 0$, son tales que no permiten al perfil tener desplazamientos laterales mas allá de estos valores. Es así, que para este caso se tiene un perfil que en el transcurso del tiempo llega a un estado de equilibrio.

La figura (5.7) exhibe el caso en el que la amplitud del perfil inicial de concentración se encuentra por debajo del valor $\frac{1}{\lambda}$, el perfil evoluciona en el tiempo aumentando su tamaño hasta dicho valor, al mismo tiempo que su soporte y ancho crecen.

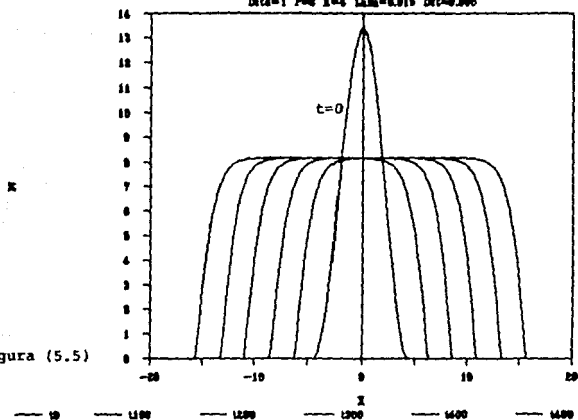
En forma similar a la figura (5.7), la figura (5.8) presenta un perfil en las que las condiciones a la frontera no le permiten avanzar lateralmente.

Las figuras (5.9a-c) muestran la evolución de la amplitud de los perfiles para el caso particular en el que $\rho = 2, \lambda = 1$. Se observa que conforme el exponente del término de aniquilación aumenta, para una condición inicial por debajo de la plataforma de estabilidad, el tiempo en que el perfil llega a esta plataforma es menor. En forma similar ocurre lo anterior para el caso en que la amplitud del perfil inicial se encuentre por arriba del valor $\frac{1}{\lambda}$.

Generalizando, se observa que es posible conseguir una plataforma de amplitud finita, si localmente $\frac{\partial n}{\partial x} = 0$, quedando la amplitud dada por $n = \lambda r^{-1}$.

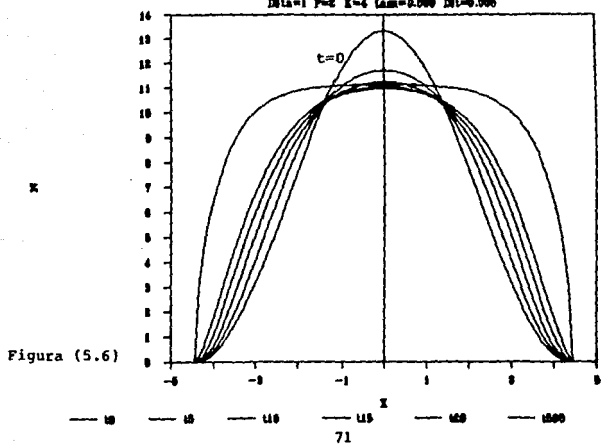
PLATAFORMA DE ESTABILIDAD

$Di=1$ $P=6$ $K=4$ $Lam=0.015$ $Di=0.005$



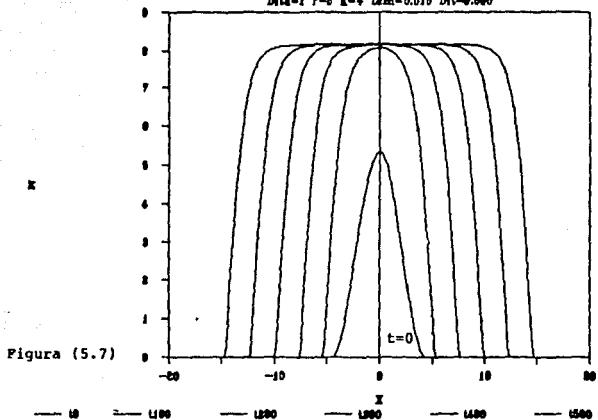
ESTADO ESTACIONARIO

$Di=1$ $P=6$ $K=4$ $Lam=0.005$ $Di=0.005$



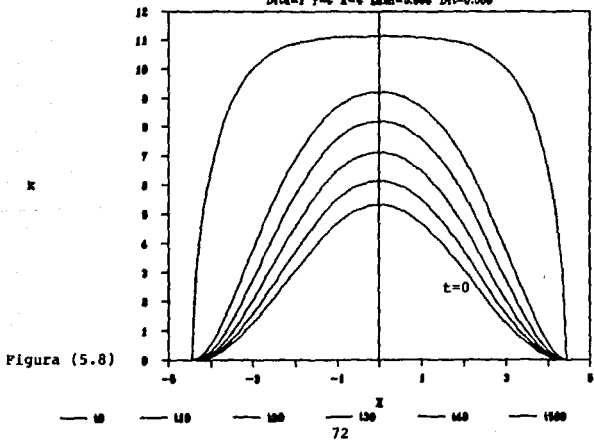
PLATAFORMA DE ESTABILIDAD

$D1a=1$ $P=8$ $K=4$ $Lam=0.015$ $D1t=0.005$



ESTADO ESTACIONARIO

$D1a=1$ $P=8$ $K=4$ $Lam=0.005$ $D1t=0.005$



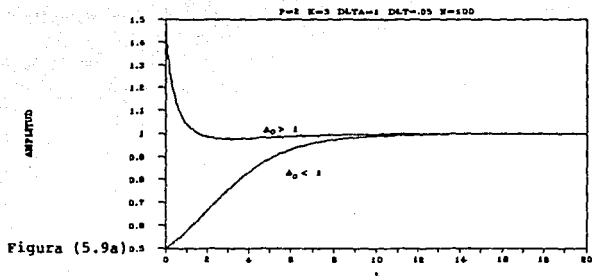


Figura (5.9a)

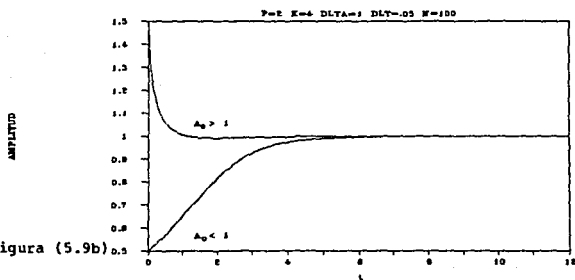


Figura (5.9b)

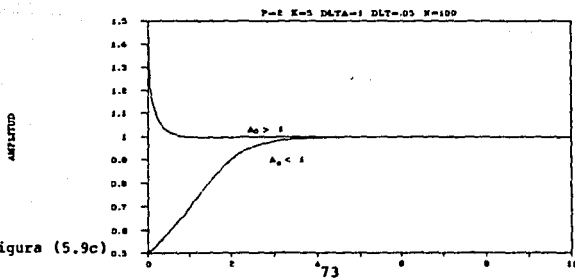


Figura (5.9c)

5.3 Perfiles de Concentración con Estado Estacionario Asintótico.

En esta sección se verá el caso en que bajo ciertas condiciones específicas es posible obtener un perfil de concentración que evolucione asintóticamente hacia un estado estacionario.

Este estado estacionario asintótico se logra multiplicando el término de creación por una función de soporte compacto. Dicha función, por definición debe ser diferente de cero en un cierto intervalo finito y anularse en el resto del espacio.

Para el caso $p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda = 1$, la figura (5.10) muestra el comportamiento de las soluciones para el término de creación multiplicado por el factor : ($L = 7$)

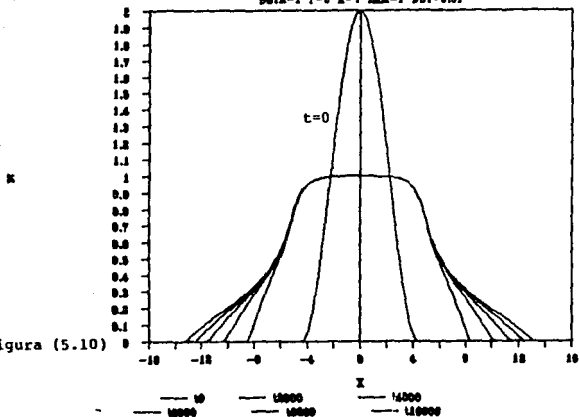
$$a(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } |x| < L \\ 0 & \text{si } |x| > L, \end{cases}$$

se observa que en el intervalo $[-L, L]$ se forma una plataforma cuya amplitud corresponde al valor $\frac{1}{\lambda}$. La plataforma crece, conforme evoluciona el perfil, hacia los extremos del soporte, aproximándose asintóticamente hacia un estado de equilibrio. Para estos valores de los parámetros, el estado estacionario asintótico viene dado en función de las coordenadas en la forma $\sqrt{\frac{x}{2}}$, que corresponde a la solución de la ecuación cuando $a(x) = 0$.

Utilizando la misma forma para $a(x)$ como en el caso anterior, la figura (5.11) muestra la evolución temporal del perfil gobernado por los parámetros $p = 1, k = 2, \delta = 1$. La plataforma constante se alcanza para el valor $\frac{1}{\lambda}$ de la amplitud, y el estado asintótico estacionario para los extremos del perfil corresponde a la función exponencial $e^{-\sqrt{\frac{x}{2}}}$.

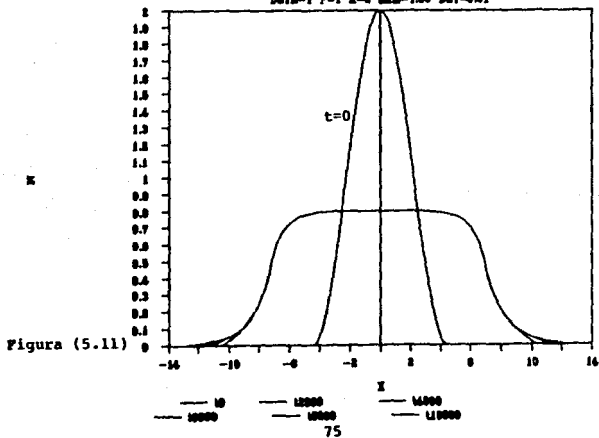
SOPORTE COMPACTO

DATA=1 P=0 K=4 LAM=1 DUT=0.01



SOPORTE COMPACTO

DATA=1 P=1 K=2 LAM=1.00 DUT=0.01



5.4 Interacción de Perfiles.

Resulta también de interés el estudio del comportamiento de la interacción de perfiles. La figura (5.12) muestra la interacción y evolución de dos perfiles angostos cuyos anchos iniciales son menores que los correspondientes a los casos de soluciones explosivas locales. Se observa que cada perfil evoluciona de forma independiente antes de ocurrir la interacción, disminuyendo sus amplitudes. Simultáneamente la distribución espacial de los perfiles se ensancha hacia sus extremos. Como producto de la interacción ambos perfiles generan un perfil que evoluciona asintóticamente hacia una localidad explosiva.

Otro tipo de interacción entre perfiles que no presenta este crecimiento no lineal hacia soluciones de tipo explosivo se muestra en la figura (5.13). El caso aquí expuesto corresponde a dos perfiles que se encuentran gobernados por los parámetros $p = 2, k = 4, \delta = 1, \lambda = 0.015$. El comportamiento individual de los perfiles es aquel expuesto en las secciones precedentes. Durante el proceso de interacción ambos perfiles se funden formando un perfil que eventualmente alcanza un estado asintótico estacionario. Dicho estado estacionario se encontrará por arriba o por debajo de las amplitudes iniciales dependiendo del valor de estos últimos respecto del parámetro λ .

INTERACCION DE PERFILES

Modelo de Interacción de Perfiles

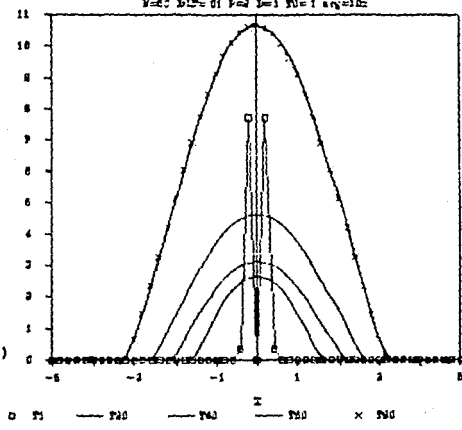
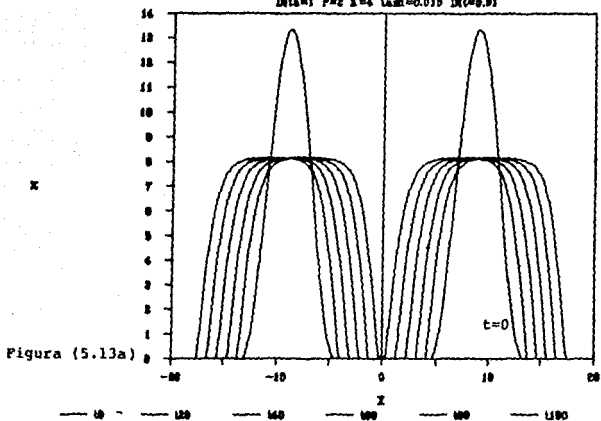


Figura (5.12)

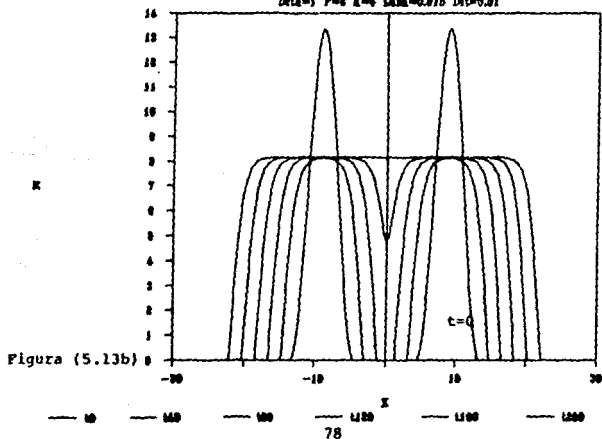
INTERACCION DE PERFILES

$Dt_0 = 1$ $P = 2$ $K = 4$ $\lambda_{max} = 0.015$ $Dt = 0.01$



INTERACCION DE PERFILES

$Dt_0 = 1$ $P = 6$ $K = 6$ $\lambda_{max} = 0.015$ $Dt = 0.01$



5.5 Estudio de las Amplitudes y Anchos de los Perfiles.

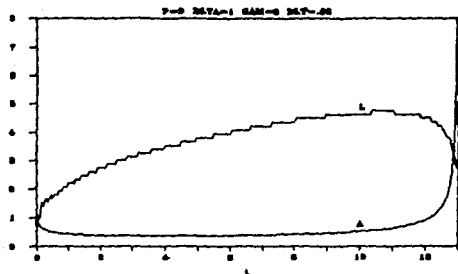
En esta sección se estudian las variaciones que presentan tanto las amplitudes (A) como los anchos de los perfiles de concentración (L), conforme estos evolucionan. En las gráficas siguientes se muestran las formas en que varían las amplitudes y los anchos de los perfiles para diferentes valores de los parámetros de la ecuación (5.1), en donde se ha escogido para este caso $\lambda = 0$. Para cada conjunto de estos valores se muestran tres ejemplos de condiciones iniciales diferentes. Se observa que la condición inicial es un factor importante para determinar la rapidez con la que los perfiles, eventualmente, han de aproximarse hacia una solución local explosiva. Conforme la amplitud inicial del perfil sea mayor, cuanto más rápidamente se acercará a este tipo de solución.

Como punto importante en la interpretación de estas gráficas, cabe señalar que en todos los casos existe un crecimiento ilimitado del perfil. El tiempo en el que ocurre esto depende, como ya se mencionó, de las condiciones iniciales fijadas.

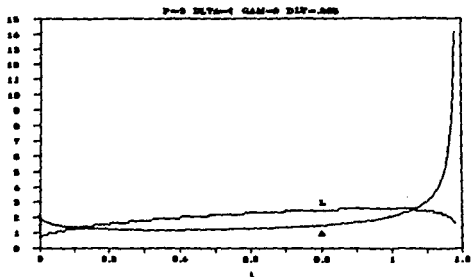
Un efecto encontrado en este estudio, radica en que para algunas estructuras, se presentará el estrangulamiento del perfil justo en el momento en que éste crece de manera ilimitada. El estudio de la región característica en donde se produce este efecto merecería estudiarse en forma más detallada.

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

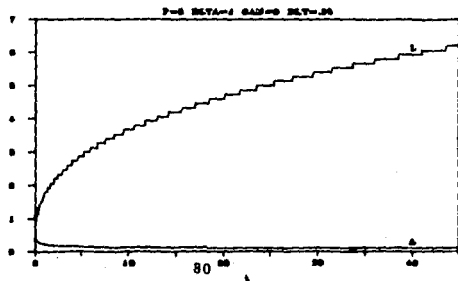
4-5



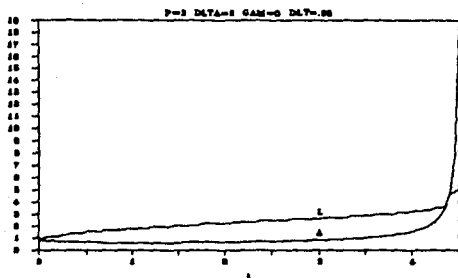
4-6



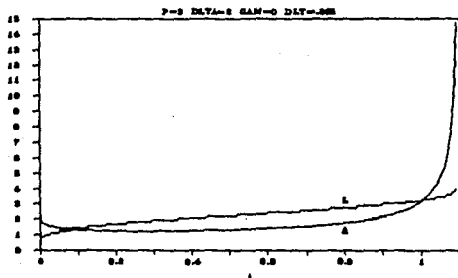
4-7



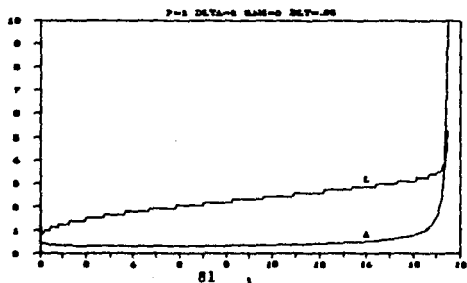
A-1



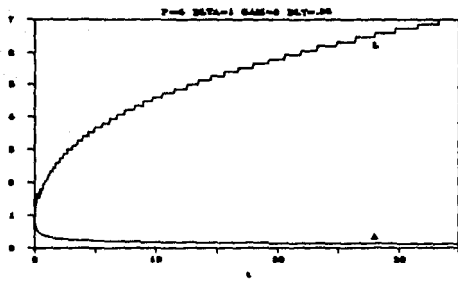
A-1



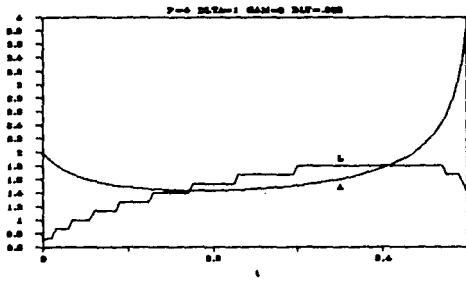
A-1



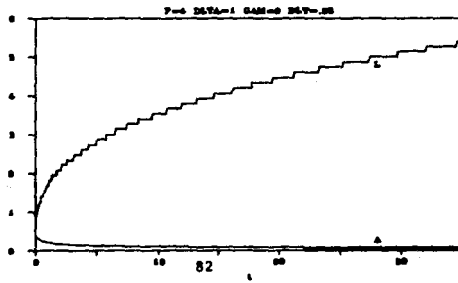
4
1
4



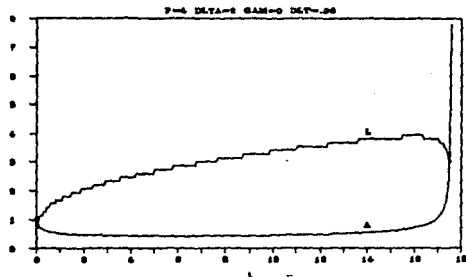
4
1
4



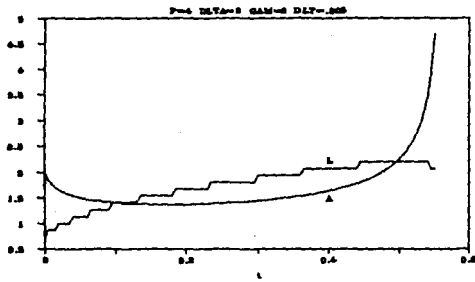
4
1
4



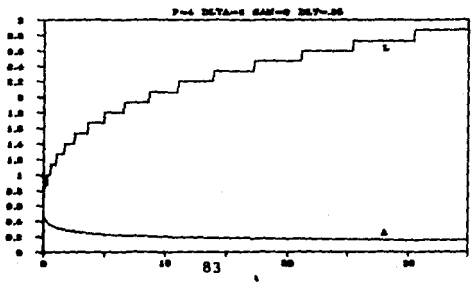
4-4



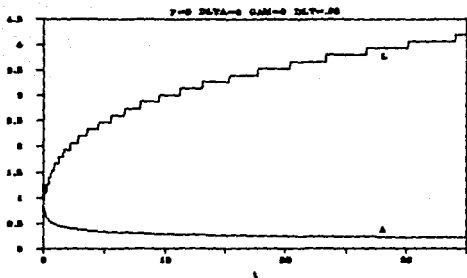
4-4



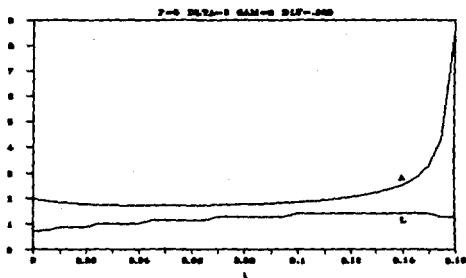
4-4



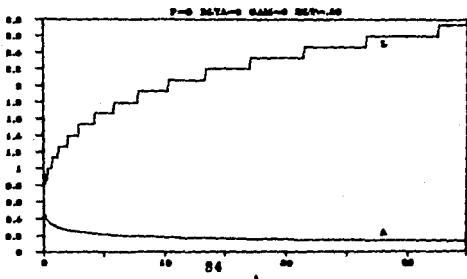
4
1
4



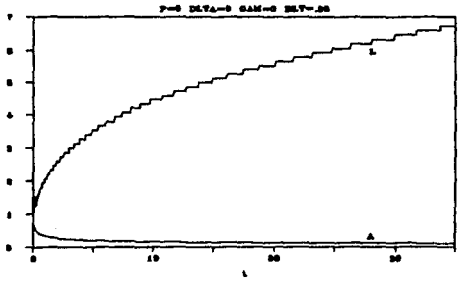
4
1
4



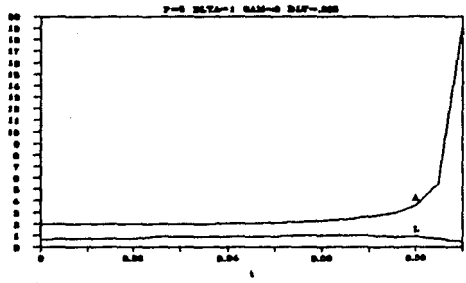
4
1
4



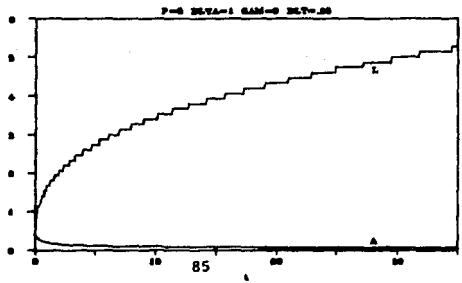
14



14



14

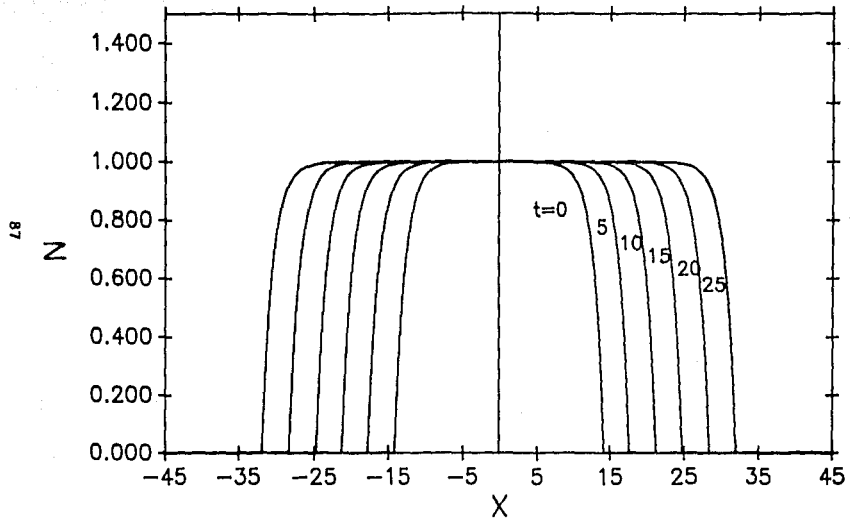


5.6 Soluciones de Tipo Onda Viajera.

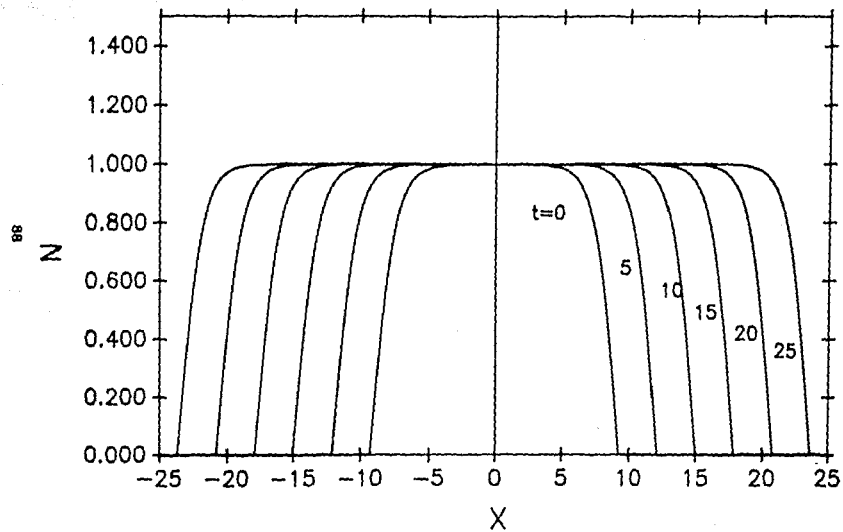
Para las soluciones analíticas de tipo onda viajera de la ecuación de reacción-difusión, vistas en el Capítulo III, las figuras (5.14)-(5.17), obtenidas a partir del código numérico, muestran el comportamiento de este tipo de soluciones. Las velocidades de propagación de los frentes de onda corresponden con aquellos predichos en ese capítulo.

Esta breve sección pretende sólo mostrar de manera gráfica, aquellas soluciones aportadas por el método de reducción a cuadraturas, visto a lo largo de este trabajo. Pueden ser utilizadas para comparar las velocidades de los frentes de propagación entre los distintos casos.

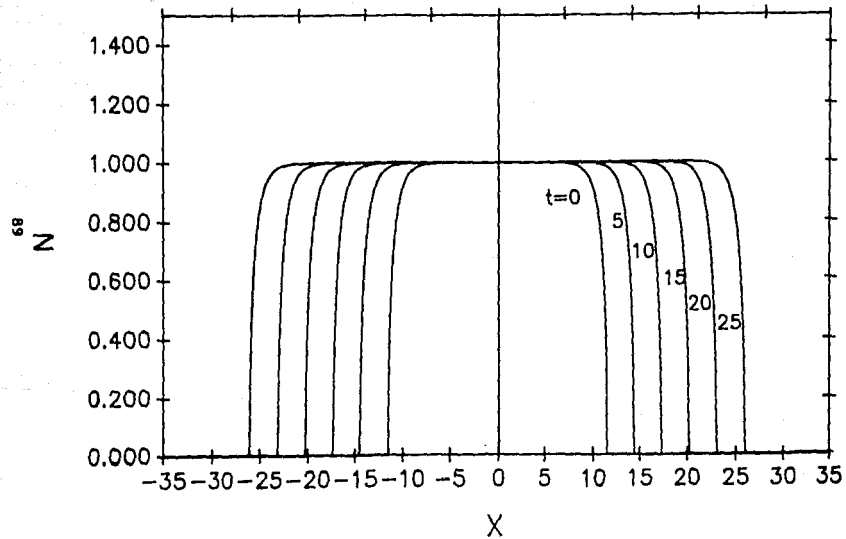
DELTA=1 P=1 K=2



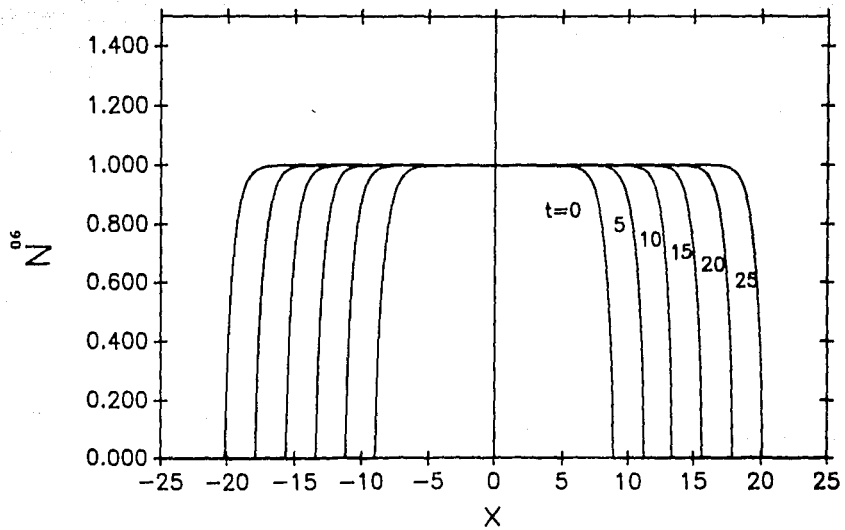
DELTA=1 P=2 K=4



DELTA=2 P=1 K=3



DELTA=2 P=3 K=7



CAPITULO VI

APLICACIONES EN EL ESTUDIO DE PLASMAS CONFINADOS

El propósito de este capítulo es el de formular un modelo primitivo en base al cual pueda obtenerse la descripción de perfiles de temperatura de plasmas confinados magnéticamente.

En este modelo, propuesto por Wilhelmsson (1989c, 1991), se plantea una ecuación para el perfil de temperatura, en la que se determina su evolución mediante un término de difusión , en el que el coeficiente de conductividad térmica depende de la temperatura. Posee además un término de aniquilación que representa pérdidas por radiación, u otros efectos, así como un término de creación, o calentamiento.

Aunque este no es un modelo formal, derivado de primeros principios, su propósito es señalar el tipo de comportamiento que se espera de los perfiles de temperatura, en base a propiedades globales de las ecuaciones que los pudieran determinar.

Cabe señalar que la dependencia de la temperatura en el coeficiente de conductividad térmica puede depender del estado de quie-

tud o turbulencia del plasma, e incluso podría variar con la posición y el tiempo en un aparato de fusión nuclear.

Por ello, el modelo aquí planteado debe considerarse como una aproximación burda al problema real.

Con el advenimiento de las máquinas de confinamiento, se ha abordado, a lo largo de los últimos años, el estudio de las condiciones bajo las cuales es posible aumentar los tiempos de mantenimiento del plasma.

La forma en que se comportan los sistemas físicos en dichos dispositivos magnéticos depende fuertemente de la geometría utilizada, del gas de llenado, así como de las fuentes de calentamiento usadas para mantener la temperatura.

Por tratarse de sistemas dinámicos, se encuentran además, pérdidas de energía producidas por radiación.

La radiación emitida es un factor importante, ya que representa un efecto a minimizar. Es en este punto, el que es importante plantear modelos que permitan obtener configuraciones estables de plasma, tomando en cuenta las características antes mencionadas.

Como ha sido establecido, los fenómenos de transporte en un plasma, pueden modelarse, en una primera aproximación, vía procesos de reacción-difusión.

La introspección del comportamiento de los perfiles de temperatura electrónica por medio de la variación de parámetros, permitiría de alguna manera conocer aquellas condiciones para las cuales es factible obtener estados estacionarios.

6.1 Un Modelo para el Perfil de Temperatura.

Los perfiles de temperatura y densidad obtenidos en dispositivos experimentales tienen típicamente distribuciones en forma de campana, reflejando el hecho de que en estos dispositivos experimentales la mayor concentración de partículas y en consecuencia de mayor temperatura se encuentra ubicada en la parte central de su cámara.

Suponiendo que la densidad del plasma no varía mucho tanto en el espacio como en el tiempo, lo cual ocurre aproximadamente para ciertos parámetros de operación (modos H), un modelo de la temperatura electrónica a partir de la ecuación de reacción-difusión puede expresarse de la forma siguiente :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - R(T) + S(T) , \quad (6.1)$$

donde $D(T)$ representa la difusión y los términos $R(T)$ y $S(T)$ están referidos a procesos de pérdida por radiación y calentamiento respectivamente.

Esta ecuación puede resolverse alternativamente utilizando las técnicas expuestas en el Capítulo II o III. En este capítulo se muestran ambas soluciones, y finalmente se muestran resultados de experimentos numéricos.

En el modelo propuesto por Wilhelmsson para el estudio de perfiles de temperatura se considera, para el caso de difusión perpendicular, a $D(T) \sim T^{-\frac{1}{2}}$, obtenido de transporte neoclásico, y para el término de radiación por bremsstrahlung a $R(T) \sim T^{\frac{1}{2}}$.

Despreciando los efectos producidos por el calentamiento ohmico (donde $T^{-\frac{1}{2}}$) y modulando el término de calentamiento a partir de $S(T) \sim g(t)T$, la expresión anterior puede resolverse con ayuda de las técnicas presentadas previamente.

Advirtiendo el hecho de que este modelo así definido, admite soluciones separables en espacio y tiempo, se introduce la transformación:

$$\hat{T} = T e^{-\int_0^t g(t') dt'}$$

y

$$r = \int_0^t e^{-\int_0^{t'} g(t'') dt''} dt'$$

Para el caso en que $g(t) = a = cte$, la transformación anterior se reduce a:

$$\hat{T} = T e^{-at}$$

$$r = \frac{2}{a} [1 - e^{-\frac{1}{2}at}]$$

La ecuación diferencial parcial (6.1) se transforma a partir de lo anterior, en la expresión:

$$\frac{\partial \hat{T}}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T^{\delta} \frac{\partial \hat{T}}{\partial x} \right) - T^k \quad (6.2)$$

donde $\delta = -\frac{1}{2}$ y $k = \frac{1}{2}$.

La ecuación anterior presenta la misma forma que la ecuación (2.2) vista anteriormente y cuya solución está dada por la ecuación (2.8), salvo que aquí $\delta < 0$, y el segundo término del miembro derecho describe una pérdida, en vez de una fuente.

La solución a la ecuación (6.2) puede obtenerse de aquella para la ecuación (2.2) normalizando las variables en la forma :

$$x \rightarrow iz ; t \rightarrow -\tau ,$$

obteniéndose la solución :

$$T = \frac{3}{2}(\tau_c - \tau)^2 \operatorname{sech}^4 \left(\frac{z}{2\sqrt{2}} \right) .$$

La solución anterior presenta la forma de campana que se obtiene experimentalmente para los perfiles de temperatura. La temperatura tenderá a cero en un tiempo finito $t = t_c$. El efecto de la presencia de una fuente de calentamiento será el de evitar que la temperatura disminuya rápidamente.

Tomando la transformación $z = x - ct$ y proponiendo para T' :

$$T' = \alpha T^\gamma + \beta T^p ,$$

la substitución de esta última expresión para T' permite establecer ciertas relaciones de los parámetros p, γ, δ y k , y de esta forma encontrar los valores para α y β , así como la velocidad de propagación de los frentes de onda de la solución.

Se obtiene para este caso la expresión para T' siguiente :

$$T' = \sqrt{2}T (1 - T^{\frac{1}{2}}) ,$$

expresión que puede ser integrada, con la solución dada por:

$$T = \left[\frac{A}{A + e^{m\tau}} \right]^2$$

donde A es una constante y :

$$m = \frac{1}{\sqrt{2}} ,$$

y

$$c = \sqrt{2} .$$

En la figura (6.1) se muestra el comportamiento de esta solución, observándose los efectos antes mencionados.

La figura (6.2) muestra la evolución temporal de esta solución cuando se consideran dos frentes de onda que viajan en direcciones opuestas. A diferencia de los resultados obtenidos en secciones previas, donde $k > p$, en este caso, en el que $k < p$, los frentes de onda se mueven "hacia adentro". Esto es compatible con los resultados de Wilhelmsson, ya que sus soluciones decrecientes quedarían por debajo de las de onda viajera.

Con el propósito de explorar el comportamiento de los perfiles, pueden hacerse elecciones particulares para los valores de los parámetros.

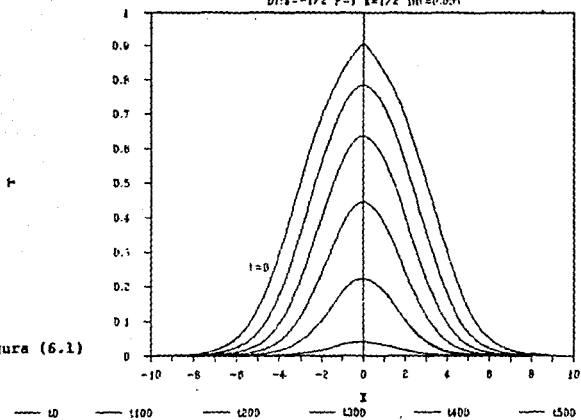
Las gráficas siguientes muestran el comportamiento para los valores $p = \frac{1}{4}$, $k = \frac{1}{2}$ y $\delta = -\frac{1}{2}$. Para este caso se ha encontrado la formación de un estado estacionario.

En la gráfica (6.3), se parte un estado inicial arbitrario cuya amplitud es mayor que la del estado final. En la gráfica (6.4) el estado inicial parte por debajo del estado final estacionario, aumentando su amplitud hasta alcanzar dicho estado.

Cabe señalar que la dependencia en este caso para el coeficiente de difusión es de T^{-1} , por lo que una temperatura nula queda prohibida. Sin embargo, es posible simular aquellos casos en donde la temperatura sea arbitrariamente pequeña alrededor de la cámara del contenedor de plasma.

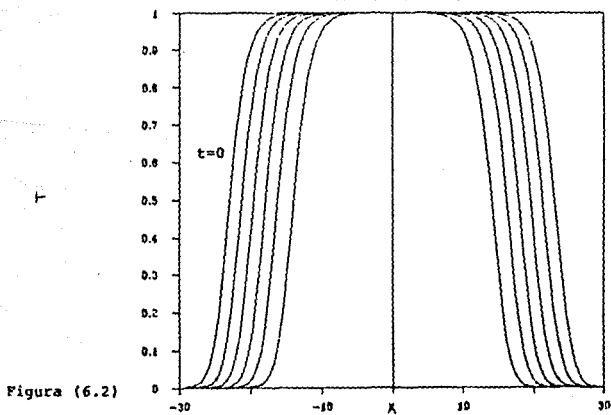
PERFIL DE TEMPERATURA

$Dl = -1/2$ $P = 1$ $K = 1/2$ $Dl = 0.005$



PERFIL DE TEMPERATURA

$Dl = -1/2$ $P = 1$ $K = 1/2$ $Dl = 0.005$



PERFIL DE TEMPERATURA

$$p=1/4 \quad k=1/2 \quad d(ta)=-1/2 \quad d(t)=0.005$$

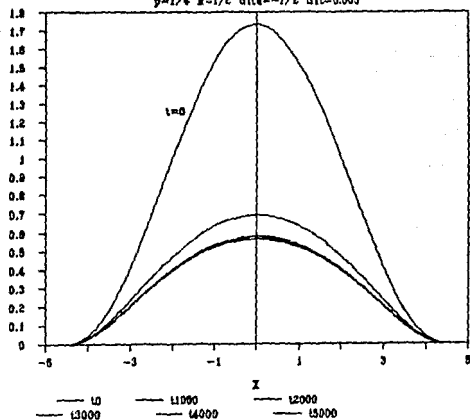


Figura (6.3)

PERFIL DE TEMPERATURA

$$p=1/4 \quad k=1/2 \quad d(ta)=-1/2 \quad d(t)=0.005$$

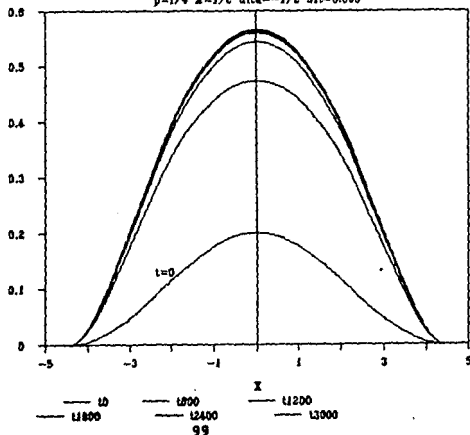


Figura (6.4)

CONCLUSIONES

A lo largo de este trabajo se han presentado algunas propiedades de carácter cualitativo y cuantitativo de la ecuación de difusión con términos de reacción. El conocimiento de estas propiedades hace posible tener un mejor entendimiento de los procesos que se presentan en las diferentes ramas de estudio. El planteamiento de ecuaciones de este tipo ofrece modelos mediante los cuales puede estudiarse la evolución temporal para una gran variedad de sistemas físicos. En particular, en física de plasmas resulta de gran interés el poder determinar los efectos de balance presentes entre la ionización y recombinación de las especies que constituyen un plasma, esto enfocado al estudio de confinamiento en dispositivos experimentales.

En lo que sigue, se discutirán las diversas formas de soluciones, obtenidas en este trabajo, de la ecuación de reacción-difusión, resumiendo las características importantes de cada una de ellas.

Primeramente, destacan aquellas soluciones en las cuales la configuración espacial de los perfiles se encuentra localizada en una región finita. El efecto de localización ocurre, por ejemplo, en los casos en que se encuentra presente únicamente la contribución de un término de creación, es decir en aquellos donde el parámetro λ es idénticamente nulo. Este efecto puede observarse igualmente cuando el exponente p , que expresa el grado de no linealidad del término de creación, es mayor que el parámetro δ , que da el grado de no linealidad del coeficiente de difusión.

Aquí, los efectos del término de creación dominan fuertemente sobre los de difusión, provocando que los perfiles se encuentren confinados a una pequeña región del espacio. Los perfiles bajo estas

condiciones, evolucionarán hacia soluciones de tipo explosivo, alcanzando amplitudes muy grandes en tiempos finitos. En cuanto a esto último, puede hacerse notar aquellos casos reales en los que pudiera haber un rompimiento del sistema físico o poblacional causado por el incremento desmedido en una o varias de las componentes de las especies que forman ese sistema.

Por medio de este método es factible también encontrar soluciones para ecuaciones de reacción-difusión que presenten un término de creación y uno de aniquilación lineal. Por medio de una transformación en las coordenadas espacial y temporal, es posible reducir esta ecuación a una en donde el término de aniquilación se encuentra ausente. De esta forma se tiene que las soluciones de estos casos serán similares a los tratados anteriormente.

Las condiciones iniciales que se imponen al perfil de partida son importantes, ya que, como se hizo notar, determinan el comportamiento evolutivo de los perfiles. En este punto, cabe recordar que la construcción de esta clase de soluciones hizo posible la existencia de configuraciones que corresponden a estados de equilibrio inestable, tales que por arriba de dichos estados se presentan comportamientos de tipo explosivo. Condiciones iniciales por debajo de estos estados implican que el perfil decrezca en amplitud en el transcurso de su evolución.

Las soluciones que exhiben estas propiedades tienen además la característica de preservar su forma en el tiempo. Esto último resulta independiente de la configuración que adquieren los perfiles, ya sea esta explosiva o no. Cuando se parte de una condición inicial por arriba del estado inestable y que difiere a su vez de aquellas condiciones para las cuales se construyeron soluciones de tipo explosivo, se encuentra que los perfiles adquieren dicha forma, ajustándose a la solución local conforme evolucionan. La calidad de atractor para estas soluciones no puede emplearse aquí estrictamente por tratarse de un efecto de atracción meramente cualitativa en lo que concierne

a la configuración adquirida por los perfiles.

Las condiciones iniciales, como se mencionó en las líneas previas, influyen marcadamente en el comportamiento que siguen los perfiles. Se encuentra en relación a esto, la existencia de perfiles que pueden avanzar lateralmente una cierta región hasta el momento en que adquieren una forma similar a las soluciones de tipo explosivo, ajustándose así a ellas. Existen además ejemplos en los que el perfil inicial es angosto. Aquí se observa que primeramente la amplitud del perfil disminuye conforme su ancho aumenta, hasta adquirir la condición de un estado que crece ilimitadamente, momento que constituye el inicio para la formación de estructuras locales.

En una sección del presente trabajo se muestra que este tipo de soluciones son estables ante perturbaciones de pequeña escala. Se ilustra lo anterior con una pequeña perturbación provocada al perfil de partida. Se observa que la perturbación se elimina en el tiempo, con la consiguiente recuperación de la forma del perfil.

Otra técnica de análisis no lineal llevada a cabo en este trabajo, para la obtención de soluciones analíticas exactas a la ecuación de reacción-difusión con términos de aniquilación, corresponde al de la reducción a cuadraturas para soluciones de onda viajera. Este método ha resultado ser una herramienta útil para encontrar soluciones con frentes de propagación. Mediante este análisis es posible transformar la ecuación diferencial parcial en una ordinaria, a partir de la cual pueden encontrarse relaciones que involucran las potencias de los términos de difusión, creación y aniquilación. A partir de estas relaciones se llega a expresiones que pueden ser integrables, para así obtener las soluciones al problema considerado. Es importante señalar que aún cuando la ecuación ordinaria obtenida no sea completamente integrable, siempre es posible encontrar analíticamente las velocidades con que se propagan los frentes de onda.

Por medio de la discretización de la ecuación de reacción-difusión en diferencias finitas (método de Crank-Nicolson), se hizo posible el estudio de problemas con presencia simultánea de procesos de creación y aniquilación. Los resultados más relevantes que arroja este estudio son los de la formación de plataformas locales de estabilidad. La amplitud a la cual se consigue localmente esta configuración, depende exclusivamente de los términos de creación y de aniquilación; y está dada en función de los parámetros p, k y λ . Cuando se parte de condiciones iniciales por debajo de la plataforma de estabilidad, el perfil crece hasta llegar a la amplitud correspondiente, a partir de la cual la plataforma aumenta en tamaño, al mismo tiempo que el perfil avanza lateralmente hacia sus extremos con una cierta velocidad. Similarmente, para condiciones iniciales por arriba de la plataforma, el perfil decrece hasta un valor, determinado por los términos de reacción.

Cuando la condición a la frontera es tal que fija los extremos del perfil de partida, se obtienen soluciones que en el tiempo adquieren configuraciones que no sólo son locales en la región de la plataforma, sino que la estabilidad abarca, en estos casos, a todo la región espacial en la que se encuentra comprendida el perfil final formado.

Haciendo uso de las soluciones exactas obtenidas por reducción a cuadraturas, fue posible comparar las velocidades de propagación observadas por medio del código numérico, y de esta forma tener un grado de confiabilidad en la simulación. Por otra parte, las alturas de los perfiles en las que se presenta la formación de los soportes compactos concuerdan, para los casos integrables, con las soluciones exactas.

Una alternativa para probar la existencia de soluciones de tipo onda viajera se encuentra en el estudio de los diagramas de espacio fase para la ecuación de reacción-difusión. Por medio de estos diagramas es posible encontrar las cotas de velocidad para las cuales

existen soluciones con frentes de propagación. La información que se extrae de este análisis permite saber, por medio del tipo de conexión que se trate (ya sea de tipo silla-silla o bien silla-nodo), la clase de soluciones que se esperan obtener para una determinada ecuación. La conexión silla-silla implica la existencia de soluciones agudas, y la de silla-nodo la de soluciones de cambio de fase. De esta forma, cuando se busca la existencia de soluciones viajeras con una velocidad específica, la conexión de los puntos característicos en el espacio fase, muestra el tipo de onda que debe encontrarse analíticamente. Cuando no se presenta la conexión de alguno de los dos tipos señalados, se concluye la inexistencia de una solución viajera con esa velocidad de propagación particular.

La formación de estados asintóticos de estabilidad pueden obtenerse proponiendo un coeficiente variable para el término de creación. El modo en que se forman estos estados depende de la elección de la función de soporte compacto, así como del valor del parámetro λ . Por ejemplo, la formación de estos estados, como se ilustra en este trabajo, depende inversamente de la posición para un caso y es de tipo exponencial para otro.

El estudio de las ecuaciones de reacción-difusión es de gran importancia en aquellas áreas de la ciencia en donde los procesos que se llevan a cabo pueden modelarse a partir de estas ecuaciones. Como ejemplos, pueden citarse aquellos problemas que aparecen en química, para el estudio de las reacciones químicas no lineales, en biología, en el estudio de dinámica poblacional, en física de plasmas, en propagación de señales eléctricas, redes neuronales, física de semiconductores, percolación de gases a través de medios porosos, esparcimiento de películas delgadas bajo gravedad y en demás fenómenos de transporte.

APENDICE

Line# Source Line Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler Version 5.0

```

59 C Salida en pantalla o archivo.
60 C-----
61 IF (FILE) THEN
62 IFILE=0
63 ELSE
64 IFILE=3
65 DPEL,UNIT=3,FILE=REDIF,OUT,STATUS=NEW
66 ENDIF
67 C-----
68
69 CALL TIMER(0)
70 H=1,ARBITRARY=N
71 WRITE (IFILE,3000)N,NFT,DELTA,P,LR,H,FO,RO
72
73 C-----
74 C Se fijan las condiciones iniciales llamando a la
75 C subrutina CONIN.
76 C-----
77 DO 1 J=1,N+1
78 A(J)=H+J
79 K(J)=F
80 CALL CONIN(F,ARQ,FO)
81 F(J)=FO
91 CONTINUE
82
83 C-----
84
85 ALFA=DELTA*(D+H)
86 EX=DELTA+1.
87 CD=1./EX
88
89 DO 2 J=2,N
90 A(J)=ALFA+F(J)+DLTA
91 B(J)=1.+2.*ALFA+F(J)+DLTA
92 C(J)=ALFA+F(J)+DLTA
93 D(J)=2.*ALFA+CD+F(J)+EX+2.*F(J)+EX+F(J)+EX
94 E(J)=D(J)+DELTA*(F(J)+F-LAM*F(J)+1)
95 F(J)=D(J)+DELTA*(F(J)+F-LAM*F(J)+1)
96 CONTINUE
97
98 E(1)=0.0
99 F(1)=0.0
100
101 DO 3 J=2,N
102 E(J)=-A(J)+B(J)+C(J)+E(J-1)
103 F(J)=(D(J)-C(J)+F(J-1))/(B(J)+C(J)+E(J-1))
104 CONTINUE
105
106 W(1)=0.0
107 W(N+1)=0.0
108
109 DO 4 J=N,2,-1
110 W(J)=E(J)+W(J+1)+F(J)
111 CONTINUE
112
113 DO 5 J=1,N+1
114 V(J)=F(J)+W(J)
115 CONTINUE
116

```

```

line# Source Line Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler version 5.1
117 DO 5 J=1,N+1
118 U(J)=F(J)
119 5 CONTINUE
120
121 -----
122 C Integración Numérica.
123 C -----
124 DO 10 J=1,N*7
125
126 DO 10 J=2,N
127 A(J)=ALFA*(U(J)+U(J-1))*DLTA
128 B(J)=1.-2.*ALFA*(U(J)+U(J-1))*DLTA
129 C(J)=ALFA*(U(J)-U(J-1))*DLTA
130 D(J)=2.*ALFA*(C(J)+U(J-1))*E+2.*U(J)*E*(U(J)-U(J-1))*C(J)
131 E(J)=D(J)*DELTA*(U(J)+U(J-1))*ALFA*(U(J)+U(J-1))
132 10 CONTINUE
133
134 DO 20 J=2,N
135 E(J)=A(J)-E(J)+C(J)+E(J-1)
136 F(J)=D(J)-C(J)+F(J-1)*(B(J)+C(J)+E(J-1))
137 20 CONTINUE
138
139 DO 30 J=N,2,-1
140 W(J)=E(J)*W(J+1)+F(J)
141 30 CONTINUE
142
143 DO 40 J=1,N+1
144 V(J)=W(J)*W(J)
145 40 CONTINUE
146
147 -----
148 C Tiempos transcurridos.
149 C -----
150 C
151 IF (.EQ. IVAL) THEN
152 DO 41 J=1,N+1
153 41 55 F(J)*W(J)
154 PRINT 5000,I
155 ENDF
156 IF (.EQ. IVAL) THEN
157 DO 42 J=1,N+1
158 42 55 F(J)*W(J)
159 PRINT 5000,I
160 ENDF
161 IF (.EQ. IVAL) THEN
162 DO 43 J=1,N+1
163 43 55 F(J)*W(J)
164 PRINT 5000,I
165 ENDF
166 IF (.EQ. IVAL) THEN
167 DO 44 J=1,N+1
168 44 55 F(J)*W(J)
169 PRINT 5000,I
170 STOP
171 IF (.EQ. IVAL) THEN
172 DO 45 J=1,N+1
173 45 55 F(J)*W(J)
174 PRINT 5000,I

```

Line# Source Line Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler Version 6.0

```

175      ENDIF
176      100 CONTINUE
177
178 C -----
179 C      Escritura de los resultados.
180 C -----
181      DO 50 J=1,N+1
182      WRITE (FILE,4000) (J, (U(J),ERR(J),ERR(J),CRAY(J),
183      CRAY(J),ERR(J))
184      CALL TIMER(1)
185
186      STOP
187      END

```

MAIN Local Symbols

Name	Class	Type	Size	Offset
CRAY	local	REAL*8	1608	0000
ERR	local	REAL*8	1608	064a
H	local	REAL*8	1608	0c92
CRAY	local	REAL*8	1608	123a
S	local	REAL*8	1608	1922
C	local	REAL*8	1608	1fba
L	local	REAL*8	1608	25b2
E	local	REAL*8	1608	2bfa
F	local	REAL*8	1608	3242
SD	local	REAL*8	8	386a
H	local	REAL*8	8	3872
X0	local	REAL*4	8	387a
I	local	INTEGER*4	4	38a2
X1	local	REAL*8	1608	38a6
J	local	INTEGER*4	4	38ee
L	local	REAL*4	4	38f2
N	local	INTEGER*4	4	38fb
FI	local	REAL*8	1608	38fa
F	local	REAL*8	8	4542
ALF	local	REAL*8	8	454a
U	local	REAL*8	1608	4552
V	local	REAL*8	1608	4b9a
W	local	REAL*8	1608	51e2
L	local	REAL*8	8	5824
LAM	local	REAL*4	4	5822
EX	local	REAL*8	8	5826
IVAL1	local	INTEGER*4	4	583e
IVAL2	local	INTEGER*4	4	5842
IVAL3	local	INTEGER*4	4	5846
IVAL4	local	INTEGER*4	4	584a
FILE	local	LOGICAL*4	4	584e
IVAL5	local	INTEGER*4	4	5852
DLTA	local	REAL*8	8	585e
IFILE	local	INTEGER*4	4	5856
DELT	local	REAL*8	8	5862
A0	local	REAL*8	8	5866
NPT	local	INTEGER*4	4	5872
DI	local	REAL*8 109	1608	587e
FO	local	REAL*8	8	588e

PAGE 5
10-10-80
14:56:25

Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler Version 5.00

main Local Symbols

Name	Class	Type	Size	Offset
ARRY.	local	REAL*8	1608	5ec8
BFRY.	local	REAL*8	1608	630e

Global Symbols

Name	Class	Type	Size	Offset
CONIN.	extern	***	***	***
TIMER.	extern	***	***	***
main.	FSUBRT	***	***	0000

Code size = 0cfd (3325)
Data size = 00e8 (212)
Bss size = 6b56 (27478)

No errors detected

Line# Source Line Microsoft FORTRAN Optimizing Compiler Version 5.00

```

1
2 C-----
3 SUBROUTINE CONIN(F, X, A0, F0)
4 C-----
5
6 C IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
7
8 PL=2.*SQRT(2)
9 ARG=X/PL
10
11 IF (ABS(X).GT.4.44288) THEN
12 F0=0.0
13 ELSE
14 F0=A0*COS(ARG)**2
15 ENDIF
16
17 RETURN
18 END

```

CONIN Local Symbols

Name	Class	Type	Size	Offset
F0	param			0006
A0	param			000a
X	param			000e
P	param			0012
ARG	local	REAL*8	8	0000
PL	local	REAL*8	8	0008

Global Symbols

Name	Class	Type	Size	Offset
CONIN	FSUBRT	***	***	0000

Code size = 0081 (129)
Data size = 000c (12)
Bss size = 0010 (16)

No errors detected

REFERENCIAS

- Anderson D. A. , Tannehill J. C. and Pletcher R. H. (1984) *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. New York-London: MacGraw Hill.
- Anderson D. , Jancel R. and Wilhelmsson H. (1984) *Similarity Solution of the Evolution Equation Describing the Combined Effects of Diffusion and Recombination in Plasmas*. Physical Review A **30** p.2113.
- Aronson D. G. (1970) *Regularity Properties of Flows Through Porous Media. A counter example*. SIAM J. Appl. Math. **19** p.299.
- Aronson D. G. and Weinberger H. F. (1975) *Proc. Tulane Program in Partial Differential Equations (Lecture Notes in Math.)*. New York: Springer Verlag.
- Aronson D. G. (1980) *Density Dependant Interaction-Diffusion Systems, in Dynamics and Modelling of Reactive Systems*, ed W. E. Stewart, W. Hamon Ray, C. C. Conley. New York: Academic Press. p.161.
- Cohen D. S. , Neu J. C. and Rosales R. R. (1978) *Rotating Spiral Wave solutions for Reaction-Diffusion Equations*. SIAM J. Appl. Math. **35** p.536.
- Crank J. and Nicolson P. (1947) "A Practical Method for Numerical Integration of Solutions of Partial Differential Equations of Heat-Conductive Type". Proc. Camb. Philos. Soc. **43** p.50.
- Crank J. (1975) *The Mathematics of Diffusion*. Second Edition Oxford/London: Oxford University Press.
- Fisher R. A. (1937) *Ann. Engenics* **7** p.355.
- Forsythe G. E. and Wasow W. R. (1960) *Finite Difference Methods for Partial Differential Equations*. New York/London: John Wiley & Sons.
- Haken H. (1980) *Dynamics of Synergetic Systems. Ed. by Haken*. New York: Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin.
- Hodgkin A. L. and Huxley A. F. (1952). *J. Physiol.* **117** p.500.
- Kaliappan P. (1984) *An Exact Solution for Travelings Waves for $u_t = Du_{xx} + u - u^4$* . Physica **11D** p.368.
- Kamin S. (1980) *Continuous Groups of Transformations of Differential Equations; Applications to Free Boundary Problems*, in: *Free Boundary Problems*, (E.

Magena, ed.) Rome.

- Kath W. L. (1984) *Waiting and Propagating Fronts in Nonlinear Diffusion.* *Physica* 12D p.375.
- Knerr B. F. (1977) *The Porous Medium Equation in one Dimension.* *Trans. Amer. Math. Soc.* 234 p.381.
- Metiu H. , Kitabara K. and Ross J. (1976) *Stochastic Theory of the Kinetics of Phase Transitions.* *J. Chem. Phys.* 64 p. 292.
- Muskat M. (1937) *The Flow of Homogeneous Fluids Through Porous Media.* New York: McGraw-Hill.
- Neu J. (1983) *The Dynamics of Stretched Vortices: Asymptotic Theory and Exact Solutions,* Conference on Fronts, Interfaces and Patterns, Los Alamos, N. M. May.
- Newman W. I. and Sagan C. (1980) *Galactic Civilizations: Population Dynamics and Interstellar Diffusion,* *Icarus.*
- Oleinik O. A. , Kalashnikov A. J. and Yui-Lin C. (1958) *The Cauchy Problem and Boundary Problems for Equations of the Type of Unsteady Filtration.* *Izv. Akad. Nauk SSR. Ser Mat* 22 p.667.
- Oron A. and Rosenau P. (1986) *Some Symmetries of the Nonlinear Heat and Wave Equations.* *Phys. Lett. A* 118 p.172.
- Otwinowski M. , Paul R. and Laidlaw W. G. (1988) *Exact Traveling Wave Solutions of a Class of Nonlinear Diffusion Equation by Reduction to a Quadrature.* *Physics Letters A* 128 p.483.
- Parlinski K. Zielinsky P. (1981) *On the Kinetics of the First Order Phase Transitions.* *Z. Phy.* B44 p.317.
- Pauwelussen J. P. (1981) *Nerve Impulse Propagation in a Boundary Nerve System: A Simple Model.* *Physica* D p.67.
- Polubarinova-Kochina P. Y. (1981) *Theory of Ground Water Movement.* Princeton Univ. Press.
- Potter D. (1973) *Computational Physics.* New York: John Wiley & Sons.
- Richtmyer R. D. and Morton K. W. (1967) *Differences Methods for Initial-Value Problems.* Second Edition New York/London: Interscience.
- Rosenau P. and Kamin S. (1983) *Thermal Waves in an Absorbing and Connecting Medium.* *Physica* 8D p.273.
- Scott A. C. (1975) *The Electrophysics of a Nerve System.* *Revs. of Modern*

Phys. 47 p.487.

- Scott A. C. (1977) *Neurophysics* New York: Wiley.
- Wilhelmsson H. (1987a) *Similarity Solution of two Couple Reaction-Difusion Rate Equations*. Physical Review A 35 p.1957.
- Wilhelmsson H. (1987b) *Explosive Instabilities of Reaction-Diffusion Equations*. Physical Review A 36 p.965.
- Wilhelmsson H. (1988a) *Nonlinear Evolution of Densities in the Presence of Simultaneous Diffusion and Reaction Processes*. Physica Scripta 38 p.216.
- Wilhelmsson H. (1988b) *Solution of Reaction-Diffusion Equations Describing Dynamic Evolution Toward Explosive Localized States*. Physical Review A 38 p.2667.
- Wilhelmsson H. (1988c) *Solutions of Reaction-Diffusion Equations Describing Explosive Evolution of Densities for Localized Structures*. J. Math. Phys. 29 p.1776.
- Wilhelmsson H. (1988d) *Simultaneous Diffusion and Reaction Processes in Plasma Dynamics*. Physical Review A 38 p.1482.
- Wilhelmsson H. (1989a) *Evolution and Interaction of Explosive Localized Structures*. Physica Scripta 39 p.606.
- Wilhelmsson H. and Le Roux M. (1989b) *External Boundary Effects on Simultaneous Diffusion and Reaction Processes*. Physica Scripta 40 p.674.
- Wilhelmsson H. (1989c) *Attractor Like Behaviour of a Temperature Profile for a Magnetic Confinement Fusion Plasma*.
- Wilhelmsson H. (1991) *Diffusion, Creation and Decay Processes in Plasma Dynamics*. Nuclear Physics. To be published.