

## DIFUSIÓN NO LINEAL: RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN.

**Edgardo A. Moyano, Alberto F. Scarpettini**

Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica.  
Av. Gral. Paz 1499, (1650) San Martín, Prov. Buenos Aires, Argentina.

Contacto: emoyano@cnea.gov.ar

### RESUMEN

Dado un modelo parabólico, no lineal, con condiciones de borde Dirichlet, se realizan experiencias numéricas a fin de aproximar soluciones no triviales, para  $t \rightarrow \infty$  asintóticamente estables, es decir soluciones que tienden a las del problema elíptico, en el sentido de Lyapunov [1, 2, 3].

El modelo pertenece a las llamadas ecuaciones de reacción-difusión de tipo semilineal, que son lineales en el operador calor y además tienen una función de reacción no lineal, en este caso  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , siendo  $u$  concentración,  $a$  y  $b$  parámetros [4].

El algoritmo empleado se fundamenta en el concepto de sucesiones monótonas y ordenadas [5], y en el teorema de existencia de Amann y Sattinger [1].

### ABSTRACT

With a nonlinear parabolic model, with Dirichlet boundary conditions, we make numeric experiences to approximate non trivial solutions, for  $t \rightarrow \infty$  assyntotically stables, that is solutions that tend to the elliptic problem, in the Lyapunov sense [1, 2, 3].

The model belongs to the so-called reaction-diffusion equations of semilinear kind, that are linear in the heat operator and have a nonlinear reaction function, in this case  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , being  $u$  concentration,  $a$  and  $b$  parameters [4].

The used algorithm is based on the concept of monotone and ordered sequences [5], and on the existence theorem of Amann and Sattinger [1].

### INTRODUCCIÓN

En el sistema del reactor nuclear con retroalimentación negativa de temperatura, se puede establecer un modelo simplificado del flujo neutrónico con una posible fuente interna [4], mediante:

$$u_t - D u_{xx} = f(x, u) \quad (x \in [0, L], 0 < t \leq T) \quad (1)$$

$$C.B. \quad u(x=0) = u(x=L) = 0 \quad (0 < t \leq T)$$

$$C.I. \quad u(x, 0) = u_0(x)$$

donde  $D$  es el coeficiente difusivo, con la función de reacción:

$$f(x, u) = u(a - bu) + q(x) \quad (2)$$

donde  $a, b$  son constantes positivas y  $q \geq 0$ . El mismo modelo describe la distribución de temperatura para el caso de una retroalimentación adiabática.

De aquí en más, consideraremos, para facilitar la ilustración,  $q(x) = 0$ . De modo que matemáticamente se estudia el modelo representado por:

$$u_t - D u_{xx} = u(a - bu) \quad (x \in [0, L], 0 < t \leq T) \quad (3)$$

$$C.B. \quad u(x=0) = u(x=L) = 0 \quad (0 < t \leq T)$$

$$C.I. \quad u(x, 0) = u_0(x)$$

Si se anula  $u_t$  queda el problema elíptico:

$$D u_{xx} + u(a - bu) = 0 \quad (x \in [0, L]) \quad (4)$$

$$C.B. \quad u(x=0) = u(x=L) = 0$$

Considerando  $D = 1$ , si se multiplica (4) por  $u_x$  y se integra, se llega a:

$$F(u, u_x) = \frac{1}{2} u_x^2 + \frac{a}{2} u^2 - \frac{b}{3} u^3 = \text{cte.} \quad (5)$$

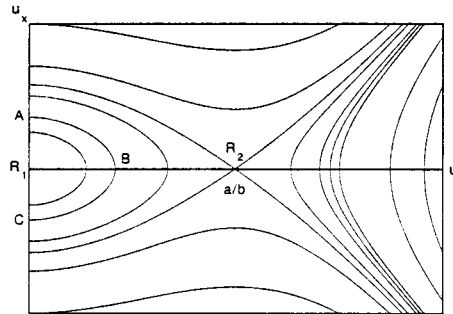


Figura 1. Diagrama de fases.

Con  $u_{i,j}^{(0)} = g_{i,j}$  y  $u_{i,j}^{(0)} = h_{i,j}$  como funciones de partida, se generan dos sucesiones  $\{\bar{u}_{i,j}^{(m)}\}$  y  $\{\underline{u}_{i,j}^{(m)}\}$  que se suelen llamar mayorantes y minorantes, con  $\eta_{i,j} \geq 0$ :

$$f_{i,j}(w) - f_{i,j}(v) \geq -P_{i,j}(w - v) \quad (11a)$$

$$f_{i,j}(w) - f_{i,j}(v) \leq \eta_{i,j}(w - v) \quad (11b)$$

Para  $h \leq v \leq w \leq g$  se demuestra que las soluciones discretas generadas tienen monotonicidad [5]. Se demuestra que con estas imposiciones para la función de reacción más débiles que la condición de Lipschitz, las sucesiones mayorante y minorante, convergen en forma monótona a la solución única del sistema parabólico discretizado.

Afortunadamente, la función de reacción de este problema es lipschitziana localmente, de modo que cumple

$$|f_{i,j}(w) - f_{i,j}(v)| \leq K_{i,j}|w - v| \quad (12)$$

así que basta elegir  $P_{i,j} = \eta_{i,j} = K_{i,j}$  para que se cumplan (11a) y (11b).

Se demuestra que si  $g_{i,j}$ ,  $h_{i,j}$  son un par de soluciones superior e inferior, tales que  $h_{i,j} \leq g_{i,j} \forall (i, j)$  de la grilla y  $f$  satisface (11a), entonces la sucesión maximal  $\{\bar{u}_{i,j}^{(m)}\}$  converge monótonamente, con valores mayores, a una solución discreta  $\bar{u} \equiv \bar{u}_{i,j}$ , y la sucesión minimal  $\{\underline{u}_{i,j}^{(m)}\}$  converge monótonamente, con valores menores, a una solución  $\underline{u} \equiv \underline{u}_{i,j}$  de (9) [4]. Además, se verifica que esas funciones discretas  $\underline{u}_{i,j}$  y  $\bar{u}_{i,j}$  satisfacen

$$h_{i,j} \leq \underline{u}^{(1)} \leq \underline{u}^{(2)} \leq \dots \leq \underline{u} \leq \bar{u} \leq \dots \leq \bar{u}^{(1)} \leq g_{i,j} \quad (13)$$

Para esta función de reacción se verifica además que  $f_{i,j}(0) \geq 0$ , y ello motiva la elección de funciones  $c_{i,j}^{(1)}$ ,  $c_{i,j}^{(2)}$  con  $c_{i,j}^{(2)} \geq 0$ , tales que

$$f_{i,j}(u) \leq c_{i,j}^{(1)}u + c_{i,j}^{(2)} \quad (14)$$

(cuando  $u \geq 0$  en la malla). Con la hipótesis (14) se calcula una solución superior y una inferior (discretas),  $S_{i,j}$  y  $s_{i,j}$ , resolviendo los sistemas implícitos:

$$\begin{aligned} \frac{S_{i,j+1} - S_{i,j}}{\Delta t} - D \left( \frac{S_{i-1,j+1} - 2S_{i,j+1} + S_{i+1,j+1}}{\Delta x^2} \right) &= c_{i,j+1}^{(1)}S_{i,j+1} + c_{i,j+1}^{(2)} \\ \frac{s_{i,j+1} - s_{i,j}}{\Delta t} - D \left( \frac{s_{i-1,j+1} - 2s_{i,j+1} + s_{i+1,j+1}}{\Delta x^2} \right) + P s_{i,j+1} &= f_{i,j+1}(0) \end{aligned} \quad (15)$$

con  $P = P_{i,j+1}$  como la función de (11a) y las condiciones de borde

$$S(x_0, t_{j+1}) = S(x_N, t_{j+1}) = s(x_0, t_{j+1}) = s(x_N, t_{j+1}) = 0; \quad S_{i,0} = s_{i,0} = (u_0)_i \quad (16)$$

El algoritmo comienza a iterar partiendo de  $\bar{u}_{i,0} = S_{i,j}$  y  $\underline{u}_{i,0} = s_{i,j}$ . Se demuestra que con esas funciones de partida, las sucesiones  $\{\bar{u}_{i,j}^{(m)}\}$  y  $\{\underline{u}_{i,j}^{(m)}\}$  convergen monótonamente, superior e inferiormente, a la única solución  $u_{i,j}^*$  del problema (9).

### CONCLUSIONES

Dado un modelo de reacción-difusión, con una función de reacción  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , siendo la variable  $u$  por ejemplo la concentración en la ecuación del flujo neutrónico,  $a$  y  $b$  parámetros, se han aproximado las soluciones mediante discretización en diferencias finitas de manera implícita, empleando en la resolución el algoritmo tridiagonal, en un proceso iterativo de tipo Picard.

Se han hecho experiencias numéricas con el objeto de verificar resultados teóricos sobre existencia de solución, estabilidad asintótica y aparición de puntos de bifurcación. Se ha observado cómo la solución del problema parabólico tiende a superponerse con la solución del problema elíptico, cuando el tiempo tiende a infinito (es decir cuando el problema se independiza del tiempo).

En la figura 2 se exhibe precisamente las soluciones del problema parabólico y del elíptico superpuestas, es decir una solución asintóticamente estable o atractor del problema elíptico, en el caso  $a = 30$ ,  $b = 1$  [7].

### REFERENCIAS

- [1] Smoller, J., *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, 1994.
- [2] Fitzgibbon, W. E. y Walker, H. F., *Nonlinear Diffusion*, Pitman, 1977.
- [3] Fife, P. C., *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*, Springer-Verlag, 1979.
- [4] Pao, C. V., *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*, Plenum Press, New York, 1992.
- [5] Walter, W., *Differential and Integral Inequalities*, Springer-Verlag, 1970.
- [6] Logan, J. D., *Nonlinear Partial Differential Equations*, J. Wiley, 1994.
- [7] Huy, C. U., McKenna, P. J. y Walter, W., *Finite Difference Approximations to the Dirichlet Problem for Elliptic Systems*, Num. Math. 49, 227-237 (1986).

Llamando  $(0, r)$  a las coordenadas de cualquier punto sobre el eje  $u_x$ , resulta el rango de variación útil:

$$0 < r < \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{a^3}}{b} \quad (6)$$

pues, como se advierte en los gráficos, si  $r$  es demasiado grande, la trayectoria no interceptará el eje  $u$  y las soluciones no estarán acotadas.

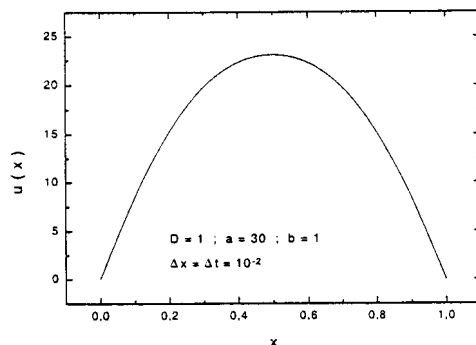


Figura 2. Solución estacionaria típica no trivial.

De modo que cualquier trayectoria está dada por  $F(u, u_x) = cte$ . En particular si  $ABC$  es una trayectoria no trivial, con  $A = (0, r)$ ,  $x = 0$  en  $A$  y  $x = L$  en  $C$ , es:

$$\frac{1}{2} u_x^2 + \frac{a}{2} u^2 - \frac{b}{3} u^3 = \frac{r^2}{2} \quad (7)$$

Sean  $x_B$  y  $u_B$  los valores de  $x$  y  $u$  en el punto  $B$ , por simetría (respecto de  $u_x$ ) es  $L = 2x_B$ . De modo que en  $x_B = L/2$  se tiene una solución no constante del problema elíptico. Integrando resulta:

$$L = 2 \int_0^{u_B} \frac{du}{\sqrt{a(u_B^2 - u^2) - \frac{2}{3}b(u_B^3 - u^3)}} \quad (8)$$

De aproximar numéricamente por Simpson esta integral elíptica, para  $u_B \rightarrow 0$ , resulta en el límite un valor especial de longitud del dominio, que se indica con  $L^*$  y se denomina punto de bifurcación: es el punto a partir del cual aparecen las soluciones no triviales.

Las experiencias numéricas en el caso  $a = b = 1$  muestran que  $L^* = \pi$ , y en general se observa la dependencia de  $L^*$  con el parámetro  $a$  de esta función.

El método de las sucesiones monótonas [4,5] que se usará luego para aproximar numéricamente el atractor, tiene su fundamento en un teorema de existencia de solución, demostrado por H. Amann (1971) y Sattinger (1972), que afirma que si un problema de borde como el expuesto, tiene una solución inferior  $\underline{u}(x)$  ( $\underline{u}(x)$  es tal que  $-L(\underline{u}(x)) \leq f(\underline{u})$ ,  $\underline{u} \leq 0$ ,  $L$  operador diferencial) y una superior  $\bar{u}(x)$  ( $\bar{u}(x)$  es tal que  $-L(\bar{u}(x)) \geq f(\bar{u})$ ,  $\bar{u} \geq 0$ ) y se cumple que  $\underline{u}(x) \leq \bar{u}(x)$  en el dominio  $D$ , entonces el problema de borde tiene una solución  $u(x)$  tal que  $\underline{u}(x) \leq u(x) \leq \bar{u}(x)$  en  $D$ . De modo que se dice que  $\bar{u}$  es solución superior del problema elíptico si  $-\bar{u}'' \geq f(\bar{u})$  o  $\Delta\bar{u} + f(\bar{u}) \leq 0$  y  $\underline{u}$  es solución inferior si  $-\underline{u}'' \leq f(\underline{u})$  o  $\Delta\underline{u} + f(\underline{u}) \geq 0$ .

Existen maneras de construir soluciones superiores  $g(x)$  e inferiores  $h(x)$  para esta función de reacción, que encierran la solución  $u(x)$ , tales que  $h(x) \leq u(x) \leq g(x)$ . Resultan el punto de partida del proceso iterativo de Picard, que a continuación se resume [4].

### METODOLOGÍA DE CÁLCULO

Se construyen sucesiones monótonas de soluciones numéricas superiores e inferiores ordenadas, mediante una iteración de tipo Picard, a partir de un sistema discreto lineal [4, 6]. Partiendo de un par de soluciones discretas, que llamaremos  $S_{i,j}$  y  $s_{i,j}$  (luego se dirá cómo se obtienen), se generan sucesiones monótonas que convergen superior e inferiormente, a la solución del problema discretizado.

Llamamos  $u_{i,j} = u(x_i, t_j)$ ,  $f_{i,j} = f(x_i, t_j, u(x_i, t_j))$ , y aproximamos la ecuación diferencial implícitamente:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} - D \left( \frac{u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}}{\Delta x^2} \right) = f(u_{i,j+1}) (u_0 = u_N = 0) \quad (9)$$

siendo  $i$  el índice espacial,  $j$  el índice temporal,  $\Delta x$  el paso espacial,  $\Delta t$  el paso temporal,  $x_i = i \Delta x$ ,  $t_j = j \Delta t$ . Del mismo modo se discretizan las condiciones de borde.

Se elige una función conveniente  $P(x,t)$ , siendo  $P_{i,j} = P(x_i, t_j) \geq 0$  y se suma  $P_{i,j} u_{i,j}$  a ambos miembros de (9). De modo que partiendo de una iteración inicial  $u_{i,j}^{(0)}$  se construye una sucesión  $\{u_{i,j}^{(m)}\}$  con el sistema

$$\begin{aligned} L[u_{i,j+1}^{(m)}] &\equiv \frac{u_{i,j+1}^{(m)} - u_{i,j}^{(m)}}{\Delta t} - D \left( \frac{u_{i-1,j+1}^{(m)} - 2u_{i,j+1}^{(m)} + u_{i+1,j+1}^{(m)}}{\Delta x^2} \right) + P_{i,j+1}^{(m)} u_{i,j+1}^{(m)} = P_{i,j+1}^{(m-1)} u_{i,j+1}^{(m-1)} + f(u_{i,j+1}^{(m-1)}) \\ u_{0,j+1}^{(m)} &= u_{N,j+1}^{(m)} = 0 \\ u_{i,0} &= (u_0)_i \end{aligned} \quad (10)$$

donde  $m = 1, 2, \dots$  indica paso de iteración. Así como ocurre en la matemática continua, la iteración inicial puede ser elegida como una solución superior o como una inferior.