



HAL
open science

Bifurcación de Hopf subcrítica para el modelo reversible no Lineal de Gray-Scott con difusión

Susely Figueroa Iglesias, Mariano Rodríguez

► **To cite this version:**

Susely Figueroa Iglesias, Mariano Rodríguez. Bifurcación de Hopf subcrítica para el modelo reversible no Lineal de Gray-Scott con difusión. *Ciencias Matemáticas*, 2015, 29, pp.53 - 59. hal-02273143

HAL Id: hal-02273143

<https://hal.science/hal-02273143>

Submitted on 19 Oct 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

TÍTULO:

Bifurcación de Hopf Subcrítica para el Modelo Reversible no Lineal de Gray-Scott con Difusión.

TITLE:

Subcritical Hopf Bifurcation for Reversible non Linear Gray-Scott Model with Diffusion.

Autor(es):

- Lic. Susely Figueroa Iglesias. *Facultad Matemática y Computación, UH.*
- Dr. Mariano Rodríguez Ricard. *Facultad Matemática y Computación, UH.*

Resumen:

La investigación de la ocurrencia de bifurcación de Hopf, se puede llevar a cabo en una infinidad de modelos, incluyendo sistemas dinámicos de tipo reacción-difusión. Un sistema importante de este tipo queda representado cuando el término de reacción está dado por un modelo reversible no lineal de Gray-Scott, que es el más simple consistente con principios químicos. Propuesto en 1983 por Gray y Scott, el modelo ha sido estudiado en gran medida como un simple modelo polinomial de acción de masa, que tiene una dinámica rica. El modelo reversible de Gray-Scott es una expansión del modelo original y está derivado del conjunto de dos reacciones químicas reversibles. El modelo original corresponde a dos reacciones irreversibles, donde el producto es inerte, y por tanto se modela con dos variables, pero si se supone que no lo sea entonces se tiene un modelo con tres dimensiones, desde el punto de vista de las variables. En este trabajo se realizó un análisis sobre la ocurrencia de bifurcación de Hopf subcrítica del sistema de reacción-difusión que representa el modelo reversible no lineal de Gray-Scott. Para este análisis se utilizó la teoría general de la bifurcación en cuestión y la correspondiente al Teorema de la Variedad Central.

Abstract:

To investigate Hopf Bifurcation, can be made in several models, including dynamics models of reaction-diffusion. An important system of this type can be represented when the term of reaction is a reversible nonlinear model of Gray-Scott, which is the simpler consistent with chemical principles. Proposed by Gray and Scott in 1983, the model have been studied in a great form like a simple polynomial of mass action model, which has a rich dynamic. The reversible model of Gray-Scott is an expansion of original model and it is derived from a set of two reversible chemical reactions with inert product, and it's represented with two variables, but if it suppose that the product isn't inert, then the model has three dimensions, from the point of view of variables. In this work the objective was to do an analysis about the subcritical Hopf bifurcation in the reaction-diffusion system which represent the nonlinear reversible model of Gray-Scott. For this it is used the Hopf bifurcation general theory and Center Manifold theorem.

1. Introducción

La teoría de los sistemas dinámicos no lineales juega un papel muy importante en casi todas las áreas de la ciencia y la ingeniería, ya que los modelos matemáticos de los fenómenos del mundo real son de hecho no lineales. La teoría de la dinámica es particularmente útil en el estudio de comportamientos complejos tales como la inestabilidad, la bifurcación y el caos, los cuales son encontrados en mecánica, aeronáutica, circuitos eléctricos, sistemas controlables, problemas poblacionales, economía, sistemas financieros, acciones de mercado, sistemas ecológicos, etc. En general, el análisis del comportamiento de las soluciones de sistemas no lineales puede ser dividido en dos categorías principales: análisis local y análisis global. Por ejemplo, comportamientos post-críticos tales como la bifurcación silla-nodo y la bifurcación de Hopf pueden ser estudiadas localmente en una vecindad del punto crítico, mientras que órbitas heteroclínicas y homoclínicas, y caos son esencialmente comportamientos globales y lógicamente tienen que ser estudiados globalmente. Las dos categorías mencionadas necesitan ser tratadas con diferentes teorías y metodologías [2].

Muchos sistemas dinámicos son modelados mediante ecuaciones de reacción- difusión, ya que estas son convencionalmente usadas en la física-química para describir la distribución de concentración y temperatura. En este caso, la transferencia de calor y masa es descrita por el término de difusión mientras que el término de reacción describe la razón de producción de masa y calor. Estos términos no lineales son usualmente considerados a partir de la Ley de Acción de Masa.

La selección de la forma de reacción puede variar [6].

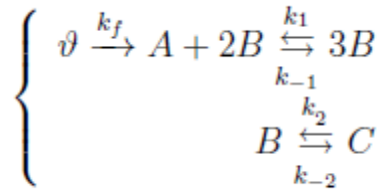
Ahora bien, una tarea importante en el estudio de los sistemas dinámicos no lineales de tipo reacción-difusión, cuyo término de reacción puede depender de uno o más parámetros, es investigar la ocurrencia de bifurcaciones. Una bifurcación es un cambio cualitativo en la dinámica del sistema, el cual puede ocurrir cuando los parámetros se hacen variar desde un cierto valor crítico. Ellos expresan la transición entre las diversas regiones de funcionamiento y es esencial su conocimiento para el análisis de la dinámica del sistema, donde diferentes comportamientos de un proceso dado necesitan ser predeterminados.

Un sistema importante de este tipo queda representado cuando el término de reacción está dado por un modelo reversible no lineal de Gray-Scott, que es el más simple consistente con principios químicos. Propuesto en 1983 por Gray y Scott, el modelo ha sido estudiado en gran medida como un simple modelo polinomial de acción de masa, que tiene una dinámica rica [16].

2. Modelo completo de Gray-Scott

El modelo de Gray-Scott, es el más simple consistente que es conocido para exhibir las oscilaciones temporales en un reactor continuo [20]. El modelo reversible de Gray-Scott es

una expansión del modelo original de Gray-Scott y está derivado del conjunto de dos reacciones químicas reversibles.¹



Aquí k_1, k_2 y k_f son razones constantes positivas, que representan las velocidades de la primera y segunda reacción directa y k_{-1}, k_{-2} se asumen positivas también y representan las razones de la primera y segunda reacción inversa. En este caso se discute la situación en la cual el reaccionante A está siendo añadido continuamente dentro de un reactor sin agitar. La razón ϑ en la cual se suministra A se asume positiva si la concentración a de A cae por debajo de un valor pre-asignado A_0 , y negativa si esta excede a A_0 . Específicamente se asume que:

$$\vartheta = k_f (A_0 - a).$$

A se añade al sistema y todas las especies son eliminadas del sistema por el flujo, esto es que están siendo extraídas del reactor por un agujero o tubo. Solo los términos que son añadidos dependen de factores externos, que pudiera ser por ejemplo la velocidad a la que un agente externo está suministrando la sustancia. Entonces el modelo de ecuaciones se convierte en [13]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dA}{dt} = -k_1 AB^2 + k_{-1} B^3 + k_f (A_0 - A), \\ \frac{dB}{dt} = k_1 AB^2 - k_{-1} B^3 - (k_f + k_2) B + k_{-2} C, \\ \frac{dC}{dt} = k_2 B - k_{-2} C - k_f C. \end{array} \right.$$

con condiciones iniciales:

$$A(0) = A_0, \quad B(0) = 0, \quad C(0) = 0.$$

Aquí $A(t), B(t)$ y $C(t)$ representan las concentraciones de las sustancias A, B y C respectivamente para $t \geq 0$. No obstante, en ausencia de agitación, las diferentes concentraciones dependen no solo del tiempo, sino también, debido a la difusión, de su ubicación en el reactor. Asumiendo una geometría unidimensional, con coordenada espacial x , el modelo de Gray-Scott entonces queda como un sistema de ecuaciones de reacción-difusión:

¹ se llama reacción reversible a la reacción química en la cual los productos de la reacción vuelven a combinarse para generar los reactivos.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dA}{dt} = D_A \frac{d^2 A}{dx^2} - k_1 AB^2 + k_{-1} B^3 + k_f (A_0 - A), \\ \frac{dB}{dt} = D_B \frac{d^2 B}{dx^2} + k_1 AB^2 - k_{-1} B^3 - (k_f + k_2) B + k_{-2} C, \\ \frac{dC}{dt} = D_C \frac{d^2 C}{dx^2} + k_2 B - k_{-2} C - k_f C. \end{array} \right.$$

Aquí D_A, D_B y D_C son los coeficientes de difusión de los químicos A, B y C y $x \in [0; L]$. Se consideran además condiciones de frontera y condiciones iniciales:

$$\left. \frac{dA}{dx} \right|_{0,L} = \left. \frac{dB}{dx} \right|_{0,L} = \left. \frac{dC}{dx} \right|_{0,L} = 0$$

$$A(0) = A_0, \quad B(0) = 0, \quad C(0) = 0.$$

2.1 Nildimensionalización del Sistema

Con el fin de trabajar el sistema en variables sin dimensiones se hacen las siguientes transformaciones:

$$a = \frac{A}{A_0}, \quad b = \frac{B}{A_0}, \quad c = \frac{C}{A_0}, \quad x = \frac{x'}{L}, \quad t = t' k_1 A_0^2,$$

$$D_i = \frac{D_i'}{k_1 A_0^2 L^2}, \quad (i = A, B, C), \quad \eta_1 = \frac{k_{-1}}{k_1}, \quad \eta_2 = \frac{k_{-2}}{k_2'}, \quad k_2' = k_2 A_0^2 k_1, \quad k_f = \alpha k_1 A_0^2;$$

donde la prima denota la variable original.

Sustituyendo entonces por los nuevos parámetros, (luego de considerar $A_0 = 1$), se obtiene el siguiente sistema en variables adimensionales:

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t a = D_A \partial_{xx} a - ab^2 + \eta_1 b^3 + \alpha(1 - a), \\ \partial_t b = D_B \partial_{xx} b + ab^2 - \eta_1 b^3 - k_2(b - \eta_2 c) - \alpha b, \\ \partial_t c = D_C \partial_{xx} c + k_2(b - \eta_2 c) - \alpha c. \end{array} \right. \quad (3.1)$$

con condiciones de frontera:

$$\left. \frac{\partial a}{\partial x} \right|_{0,L} = \left. \frac{\partial b}{\partial x} \right|_{0,L} = \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{0,L} = 0,$$

y condiciones iniciales:

$$a(0, x) = 1, \quad b(0, x) = 0, \quad c(0, x) = 0.$$

3. Análisis para la Bifurcación.

Aquí hay que asumir primero el problema (3.1) cuando las difusividades son iguales a cero, esto es el sistema cinético de ecuaciones:

$$\begin{cases} \partial_t a = -ab^2 + \eta_1 b^3 + \alpha(1 - a), \\ \partial_t b = ab^2 - \eta_1 b^3 - k_2(b - \eta_2 c) - \alpha b, \\ \partial_t c = k_2(b - \eta_2 c) - \alpha c. \end{cases} \quad (3.2)$$

Las soluciones que aquí se obtengan son también soluciones espacialmente homogéneas (es decir, independientes de la variable espacial) del sistema de reacción-difusión.

3.1 Puntos estacionarios

Resolviendo el sistema de ecuaciones que queda al hacer nula las derivadas con respecto al tiempo, se obtiene:

$$b \left[\left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} + \eta_1 \right) b^2 - b + \alpha \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} \right) \right] = 0.$$

De aquí siempre se tiene el punto estacionario trivial $P_0(a_0; b_0; c_0) = (1, 0, 0)$ y se puede establecer entonces una condición sobre el espacio de los parámetros:

$$R = 1 - 4\alpha \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} \right) \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} + \eta_1 \right) \geq 0,$$

para la cual se tienen diferentes posibilidades:

- **Caso 1.** $R < 0$, entonces solo queda el punto trivial, $P_0(a_0; b_0; c_0) = (1, 0, 0)$
- **Caso 2.** $R = 0$, entonces se tiene solo otro punto estacionario, correspondiente a:

$$b = b^* = \frac{1}{2 \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} + \eta_1 \right)},$$

que sería:

$$P^* = (a^*, b^*, c^*) = \left(1 - b^* \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} \right), b^*, \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} b^* \right),$$

- **Caso 3.** $R > 0$ entonces se tienen otros dos puntos estacionarios, a partir de las otras dos posibilidades para b ,

$$b = b_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{R}}{2 \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} + \eta_1 \right)},$$

los cuales serían:

$$P_{\pm} = (a_{\pm}, b_{\pm}, c_{\pm}) = \left(1 - b_{\pm} \left(1 + \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} \right), b_{\pm}, \frac{k_2}{\alpha + \eta_2 k_2} b_{\pm} \right).$$

3.2 Análisis de la estabilidad

Se procede ahora a analizar la estabilidad de los puntos estacionarios del sistema en cada caso posible, a partir del análisis de la matriz jacobiana (J), evaluada en cada punto y buscando posibles valores propios imaginarios puros.

- Caso 1.

Suponiendo entonces que solo se tiene el punto estacionario trivial P_0 , evaluando J en este se obtiene:

$$J_0 = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 \\ 0 & -k_2 - \alpha & k_2\eta_2 \\ 0 & k_2 & -k_2\eta_2 - \alpha \end{pmatrix},$$

cuya traza es $\tau_0 = -3\alpha - k_2(1 + \eta_2) < 0$, determinante $\delta_0 = \alpha^3 - \alpha^2 k_2(1 + \eta_2) < 0$, y valores propios $\lambda_{1,2} = -\alpha$ y $\lambda_3 = -\alpha - k_2(1 + \eta_2)$, que son todos reales y negativos ya que todos los parámetros del sistema se consideran estrictamente positivos. Debido a esto y al Teorema de Hartman entonces el punto de equilibrio trivial $(1; 0; 0)$ es un punto de equilibrio asintóticamente estable y no ocurre bifurcación de Hopf.

- Caso 2.

Para que se cumpla en la igualdad, $R = 0$ se necesitan buscar valores del parámetro α tal que, una vez fijados los parámetros $\eta_1 = \eta_2 = 10^{-2}$ y $k_2 = 0,059$, se anule el radical. La Figura 3.1 devuelve los posibles ceros: $\alpha_1 \in [0; 0,0001]$, $\alpha_2 \in [0,03; 0,04]$ y $\alpha_3 \in [0,09; 0,1]$.

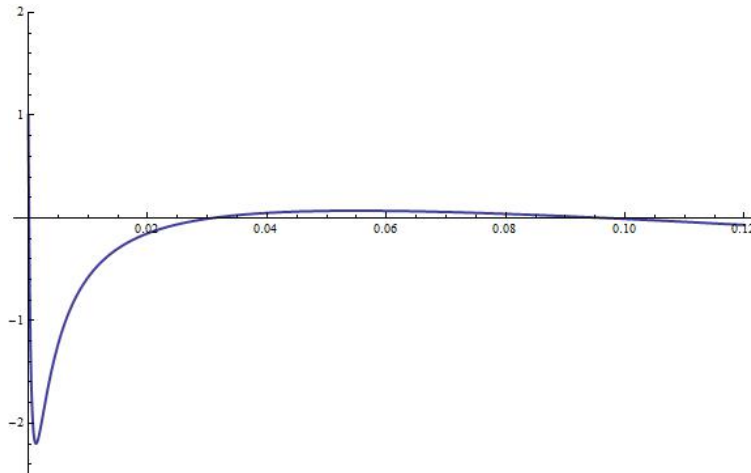


Figura 3.1: Gráfica de R como función de α

Se tienen entonces tres posibilidades para P^* y sea P_i^* el punto correspondiente a la evaluación para α_i , con $i = 1,2,3$.

Evaluando la matriz jacobiana en estos puntos se calculan los valores propios que se muestran en la Tabla 3.1:

Puntos	Valores Propios
P_1^*	$\lambda_1 = -0,0490714$ $\lambda_2 = -0,0001263$ $\lambda_3 = -0,0001158$
P_2^*	$\lambda_1 = -0,0308777$ $\lambda_2 = 0,0195688$ $\lambda_3 = -0,0034207$
P_3^*	$\lambda_1 = -0,0967559$ $\lambda_2 = -0,0383408$ $\lambda_3 = -0,0017883$

Tabla 3.1: Valores propios para el Caso 2.

Por lo tanto, análogo al Caso 1, se concluye que alrededor del punto P^* no ocurre bifurcación.

- **Caso 3.**

Para este caso se cumple la relación en el espacio de los parámetros de manera estricta, o sea $R > 0$ y por tanto se obtuvieron dos estados estacionarios además del trivial; se hace un análisis de cada uno por separado.

▪ *Punto P_-*

Sea entonces J_- la matriz jacobiana evaluada en el punto estacionario no trivial P_- , del cálculo de las raíces del polinomio característico se obtienen los valores propios:

$$\lambda_{2,3} = a_- b_- - \alpha - \frac{101}{200} k_2 - \frac{103}{200} b^2 \pm \frac{1}{200} [R_\lambda]^{\frac{1}{2}},$$

donde:

$$R_\lambda(b_-) = 10609b_-^4 - 41200a_-b_-^3 + (40000a_-^2 - 19606k_2)b_-^2 - 39600k_2a_-b_- + 10201k_2^2.$$

Tomándose un gráfico de R_λ como función de b_- , se obtiene la Figura 3.2:

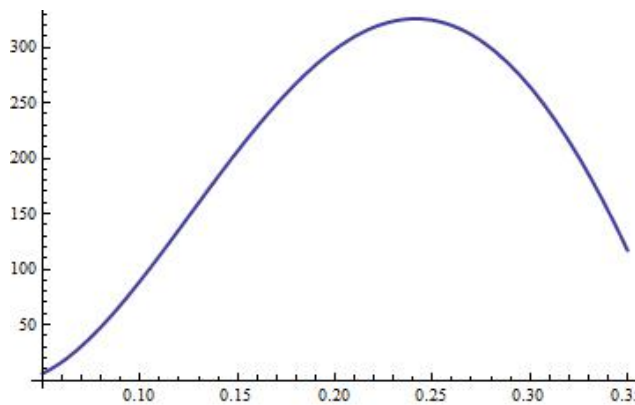


Tabla 3.2: Expresión bajo el radical de los valores propios $\lambda_{2,3}$ como función de b_- .

En el intervalo seleccionado se observa a partir de la gráfica que la función radicando es positiva, pero para corroborarlo se seleccionan valores aleatorios cercanos a este intervalo y se procede a evaluar R_λ obteniéndose la Tabla 3.2:

b_-	$R_\lambda(b_-)$	b_-	$R_\lambda(b_-)$
0	35,5097	0,20	298,264
0,01	16,1871	0,25	324,467
0,05	6,12228	0,30	264,562
0,1	89,3989	0,31	241,798
0,15	206,574	0,35	117,312

Tabla 3.2: Valores de $R_\lambda(b_-)$

Esto significa que los valores propios son reales y no complejos conjugados como se necesita para lograr un punto de Hopf.

▪ *Punto P_+*

Para este caso los valores propios obtenidos son los mismos, salvo la evaluación en b_+ . Nuevamente se toma un gráfico de R_λ ahora como función de b_+ y se obtiene la Figura 3.3.

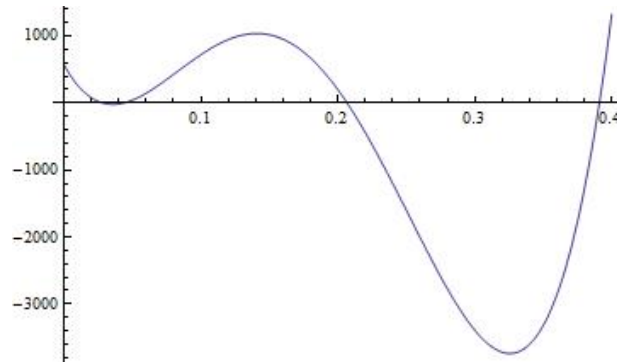


Figura 3.3: Expresión bajo el radical de los valores propios $\lambda_{2,3}$ como función de b_+ .

Igualmente a como se hizo para el caso de P_- se seleccionan valores aleatorios de α que cumplan la relación sobre el espacio de los parámetros y se procede a evaluar R_λ ahora para valores de α obteniéndose la Tabla 3.3:

α	$R_\lambda(\alpha)$	α	$R_\lambda(\alpha)$
0,03	$13,4687 - 43,6126i$	0,043	$-91; 8064$
0,034	$-2,74925$	0,05	$-131; 557$
0,035	$-22,7068$	0,07	$-183; 051$
0,036	$-34,9436$	0,09	$-104; 456$
0,04	$-70,5695$	0,1	$27; 4717 - 126; 496i$

Tabla 3.3: Valores del radicando en los valores propios como función de α .

Siendo así entonces para valores de los parámetros cercanos a los fijados siempre se tendrá que el radicando es negativo y por tanto los valores propios son complejos conjugados.

Por otra parte para poder garantizar la bifurcación, la parte real de los valores propios debe anularse en algún punto. Sea $\mu(\alpha) = \text{Re } \lambda_{2,3}$, tal que:

$$\mu(\alpha) = a_+ b_+ - \alpha - \frac{101}{200} k_2 - \frac{103}{200} b_+^2.$$

Si se grafica $\mu(\alpha)$ en el punto estacionario P_+ como una función del parámetro α para el valor de $k_2 = 0.059$ se obtiene, la Figura 3.4.

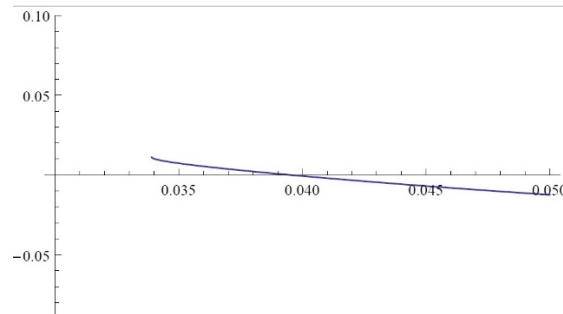


Figura 3.4: Parte Real de los valores propios como función de α .

Esta gráfica muestra la existencia un valor $\alpha_0 \in [0,035; 0,04]$ tal que μ se hace cero. Basándose en este gráfico se realizó la evaluación de esta función en los extremos del intervalo $[0,0395; 0,04]$ y se obtuvieron valores de diferente signo; para acotar un poco más el intervalo se utilizó el Método de Bisección y se obtuvieron los valores de la Tabla 3.4.

Intervalos	Evaluación extremo izquierdo	Evaluación extremo derecho
$[0,035; 0,04]$	0,00731429	-0,000682727
$[0,035; 0,039]$	0,00731429	0,000709885
$[0,039; 0,04]$	0,000709885	-0,000682727
$[0,039504; 0,039505]$	$7,09418 \times 10^{-7}$	$-6,8243 \times 10^{-7}$
$[0,0395045096; 0,0395045096]$	$1,25006 \times 10^{-10}$	$-1,41786 \times 10^{-11}$

Tabla 3.4: Valores y evaluaciones de μ en función de α .

Esto permite afirmar que el valor de α_0 pertenece a este último intervalo, ya que la función $\mu(\alpha)$ es continua en el intervalo cerrado y es aplicable entonces el Teorema de Bolzano para funciones reales continuas en un intervalo cerrado que toman valores de diferentes signos en los extremos del mismo.

Entonces mediante le Teorema para la bifurcación de Hopf que se encuentra en [11] se puede garantizar que para el sistema completo de Gray-Scott se tiene una Bifurcación de Hopf, y se establece como parámetro para la bifurcación $\alpha = \alpha_0 = 0,039504509689813$.

4. Teorema de la Variedad Central

En aras de caracterizar la misma y determinar la estabilidad de las trayectorias cerradas y la degeneración o no de la bifurcación se debe aplicar el Teorema de la Variedad Central al sistema en cuestión ya que en un punto de Hopf está bien definida una variedad central bidimensional e invariante [19].

4.1 Traslación de coordenadas y sistema en una base de funciones propias.

Considérese nuevamente el sistema de Gray-Scott sin dimensiones y sin difusión (3.2) con parámetro de bifurcación α para los valores fijados de los parámetros, $k_2 = 0,059$ y $\eta_1 = \eta_2 = 10^{-2}$, y sea el punto de equilibrio $P_+ = (a_+, b_+, c_+)$ con valores propios $\lambda_1 = -\alpha$ y $\lambda_{2,3}(P_+)$.

Se procede ahora a escribir el sistema (3.2) en la forma:

$$\dot{X} = J(\alpha)X + F(X, \alpha)$$

donde F es una función vectorial suave cuyas componentes $F_{1,2}$ tienen desarrollos de Taylor en X que comienzan al menos con términos cuadráticos, y J es la matriz jacobiana evaluada en el punto $P_+(\alpha)$.

Trasladando el punto de equilibrio hasta el origen mediante una traslación lineal de coordenadas, se tiene $X = (x_1, x_2, x_3)^T$, donde $x_1 = a - a_+$, $x_2 = b - b_+$, $x_3 = c - c_+$. Siendo así se tiene el nuevo sistema en la forma necesaria:

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \\ \dot{x}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b_+^2 - \alpha & 3\eta_1 b_+^2 - 2a_+ b_+ & 0 \\ b_+^2 & -3\eta_1 b_+^2 + 2a_+ b_+ - k_2 - \alpha & k_2 \eta_2 \\ 0 & k_2 & -k_2 \eta_2 - \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + F(X),$$

donde:

$$F(X) = \begin{pmatrix} -2x_1 x_2 b_+ - x_1 x_2^2 - a_+ x_2^2 + 3\eta_1 b_+ x_2^2 + \eta_1 x_2^3 \\ 2x_1 x_2 b_+ + x_1 x_2^2 + a_+ x_2^2 - 3\eta_1 b_+ x_2^2 - \eta_1 x_2^3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

4.2 Cálculo de la Variedad Central

Sea $n_0 = 2$ la cantidad de valores propios sobre el eje imaginario correspondientes al punto estacionario P_+ evaluado en el valor $\alpha = \alpha_0$ y $(n - n_0) = 3 - 2 = 1$ los que tienen parte real distinta de cero, de los cuales $n_- = 1$ tiene parte real negativa y $n_+ = 0$ positiva. Como $n_0 > 0$, entonces sea E_0 el subespacio lineal (hiperplano) correspondiente a la unión de los subespacios propios generados por los n_0 valores propios sobre el eje imaginario. Por tanto el vector X de dimensión $n_0 + n_- = n$ puede ser sustituido, mediante una transformación lineal de coordenadas, por $(X_1; X_2)$ de dimensiones n_0 y n_- respectivamente para poder escribir el sistema en una base de funciones propias. Con lo cual el sistema queda:

$$\begin{pmatrix} \dot{u}_1 \\ \dot{u}_2 \\ \dot{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \beta & 0 \\ -\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ v \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G_1(u_1, u_2, v) \\ G_2(u_1, u_2, v) \\ H(u_1, u_2, v) \end{pmatrix}$$

Donde $\beta = \text{Im } \lambda_{2,3}(P_+)$ y G_1, G_2 y H son funciones suaves del nuevo vector de coordenadas $Y = (u_1, u_2, v)$ cuyos desarrollos en serie de Taylor comienzan en términos de al menos orden dos.

Por el Teorema de Variedad Central se puede garantizar que existe una variedad $W_{loc}^c(0)$ invariante, de dimensión $n_0 = 2$ suave y localmente definida que es tangente a E_0 en $Y = Y_0 = 0$. La variedad central puede ser localmente representada como el gráfico de una función suave con la siguiente representación:

$$v = V(z, \bar{z}) = \frac{1}{2} \omega_{20} z^2 + \omega_{11} z \bar{z} + \frac{1}{2} \omega_{02} \bar{z}^2 + O(|z|^3).$$

Aquí la variable z representa la nueva coordenada del sistema, luego de escribir este en su forma compleja, siendo $z = u_1 + iu_2$. Los coeficientes ω_{ij} son desconocidos pero en \mathbb{C} . Siendo así se procede a escribir el sistema en su forma compleja obteniéndose:

$$\begin{aligned} \dot{z} = i\beta z + \frac{1}{2} G_{20} z^2 + G_{11} z \bar{z} + \frac{1}{2} G_{02} \bar{z}^2 \\ + \frac{1}{2} (G_{21} - 2\langle G_{10}, -\alpha_0^{-1} H_{11} \rangle + \langle G_{01}, (2i\beta + \alpha_0)^{-1} H_{20} \rangle) z^2 \bar{z}, \end{aligned}$$

donde los G_{ij} y los H_{ij} corresponden a las derivadas parciales de orden mayor o igual a dos. Se procede entonces a graficar la Variedad Central, luego de calcular cada uno de los ω_{ij} , a partir de los G_{ij} , obteniéndose las gráficas de la Figura 4.1, donde está representada la variedad obtenida, vista desde diferentes ángulos.

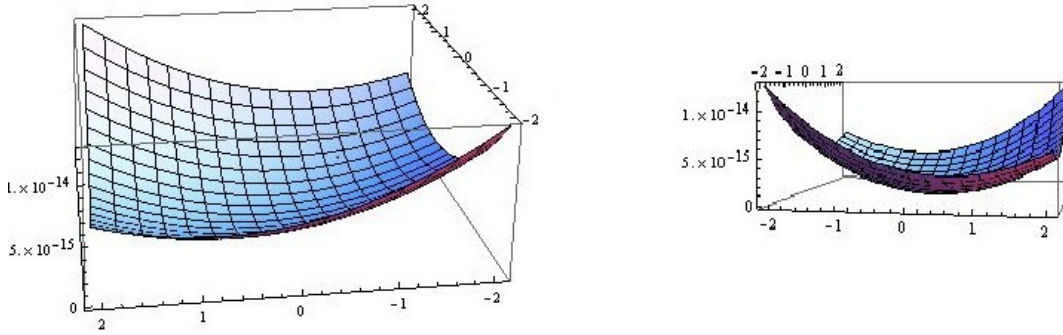


Figura 4.1: Variedad Central tangente para el sistema.

4.3 Cálculo del Primer Coeficiente de Lyapunov

Sea el vector $F(X)$ obtenido anteriormente, si se escribe en términos de funciones multilineales $M(\varepsilon, \delta)$ y $N(\varepsilon, \delta, \gamma)$, para tres vectores cualesquiera de \mathbb{R}^3 , $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3)$, $\delta = (\delta_1, \delta_2, \delta_3)$ y $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ tales que:

$$F(X) = \frac{1}{2} M(X, X) + \frac{1}{6} N(X, X, X) + O(\|X\|^4),$$

entonces se obtiene que:

$$M(\varepsilon, \delta) = \begin{pmatrix} -4b_+ \varepsilon_1 \delta_2 - 2a_+ \varepsilon_2 \delta_2 + 6\eta_1 b_+ \varepsilon_2 \delta_2 \\ 4b_+ \varepsilon_1 \delta_2 + 2a_+ \varepsilon_2 \delta_2 - 6\eta_1 b_+ \varepsilon_2 \delta_2 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$N(\varepsilon, \delta, \gamma) = \begin{pmatrix} -6\varepsilon_1\delta_2\gamma_2 + 6\eta_1\varepsilon_2\delta_2\gamma_2 \\ 6\varepsilon_1\delta_2\gamma_2 - 6\eta_1\varepsilon_2\delta_2\gamma_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

De ahí que el primer coeficiente de Lyapunov se pueda calcular según la siguiente fórmula invariante:

$$l_1(0) = \frac{1}{2\beta} \operatorname{Re}[\langle p, N(q, q, \bar{q}) \rangle - 2\langle p, M(q, -\alpha_0^{-1}M(q, \bar{q})) \rangle + \langle p, M(\bar{q}, (2i\beta + \alpha_0)^{-1}M(q, q)) \rangle].$$

Aquí q y p son los vectores propios de la matriz jacobiana y su traspuesta respectivamente y satisfacen:

$$\langle p, q \rangle = 1.$$

Finalmente al calcular los vectores propios y vincularlos según la fórmula para l_1 a partir de las funciones M y N especificadas anteriormente, se obtiene:

$$l_1(0) = \frac{1}{2\beta} \operatorname{Re}[(0,5581 - 1,3064i) - 2(13,5755 + 18,8909i) + (75,4621 + 1,70235i)] \\ \approx 584,883$$

Como se observa el Primer Coeficiente $l_1(0)$ de Lyapunov es positivo estrictamente y por tanto, aplicando el Teorema para la Bifurcación de Hopf que aparece en [11], se concluye el siguiente Teorema:

Teorema:

Para el sistema paramétrico de Gray-Scott (3.2) con parámetro variable α , y con valores fijos para el resto de los parámetros $\eta_1 = \eta_2 = 10^{-2}$ y $k_2 = 5,9 \times 10^{-2}$ ocurre una Bifurcación de Hopf para el valor crítico de $\alpha_0 = 0,039504509689813$, la cual es no degenerada y subcrítica.

5. Conclusiones y Recomendaciones

Es importante destacar que se ha obtenido una caracterización esencial del modelo tridimensional no lineal de Gray-Scott, que es un sistema de tres ecuaciones en derivadas parciales de tipo parabólico con condiciones de frontera con difusión y con parámetros dependientes de la variable espacial. Este problema ha sido reducido al análisis de una bifurcación de Hopf en un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

El problema inicial, que es una expansión del modelo original de Gray-Scott y está derivado del conjunto de dos reacciones químicas reversibles donde se supone que el producto no es inerte, primeramente se lleva a variables nildimensionales. Siguiendo entonces el objetivo principal de este trabajo se intenta demostrar el cumplimiento de las condiciones para el surgimiento de una bifurcación de Hopf para el nuevo sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias sin dimensiones.

Aunque primeramente se demuestra que el sistema presenta para el valor del parámetro α_0 una bifurcación de Hopf, la extensión a dimensión arbitraria del teorema que lo garantiza,

depende en gran medida del Teorema de la Variedad Central, que es un resultado sumamente fuerte en toda la teoría de las ecuaciones diferenciales. Se procede entonces analizar las condiciones para el cumplimiento de las hipótesis del mismo y se logra una primera aproximación de esta variedad hasta los términos cuadráticos, lo cual permite reducir el sistema a dimensión dos y calcular el Primer Coeficiente de Lyapunov, $l_1(0)$, que es el valor necesario para caracterizar la bifurcación obtenida. Se obtiene $l_1(0) > 0$ lo que demuestra finalmente que la bifurcación es no degenerada y subcrítica por lo cual se espera la presencia de un ciclo límite como órbita del sistema. Los resultados para el sistema con difusión son semejantes y aparece también para el sistema original una solución periódica que se bifurca para cierto valor del parámetro.

Como dificultades de este procedimiento hay que indicar que aunque las condiciones para la bifurcación son obtenidas analíticamente, estas son evaluadas de forma numérica para ciertos valores de los parámetros involucrados en el sistema. No obstante esto hace que surja la motivación que se propone como una recomendación a trabajo futuro, de tomar otros valores de estos coeficientes y tratar de obtener otro tipo de bifurcación para este mismo sistema. Además las técnicas que llevan a los resultados de este trabajo pueden ser muy útiles en el estudio posterior de otros modelos ya sea de dinámica química o de otras situaciones.

6. Bibliografía:

- [1] Aguirre, P., González-Olivares, E., Sáez, E., 2008, “*Two limit cycles in a Leslie-Gower predator-prey model with additive Allee effect*”, *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, DOI 10.1016/j.nonrwa.2008.01.022.
- [2] Carrillo, F.A., 2006, “*Control de Oscilaciones en Sistemas No Lineales alrededor de Puntos de Equilibrio No Hiperbólicos*”, Tesis de Maestría, Universidad de Sonora.
- [3] Demmel, J.W, 1997, “*Applied Numerical Linear Algebra*”, The Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia.
- [4] J.D. Drover, B. Ermentrout, 2003, “*Nonlinear coupling near a degenerate Hopf (Bautin) bifurcation*”, *SIAM J. Appl. Math.*, Vol.63, No.5,1627-1647.
- [5] Edelstein-Keshet L., 2005, “*Mathematical Models in Biology*”, SIAM's Classics in Applied Mathematics 46, Philadelphia.
- [6] Egaña, G., 2008 “*Existencia de Solución Periódica Promedio para el Sistema de Holling con Difusión*”, Tesis de Maestría, Universidad de La Habana.
- [7] Elsgoltz, L., 2004, “*Ecuaciones Diferenciales y Cálculo Variacional*”, Editorial Felix Varela, La Habana.
- [8] Farr, W.W., Golubitsky, M., 2012, “*Rotating Chemical Waves in the Gray-Scott Model*”, Society for Industrial and Applied Mathematics, Disponible en: <http://www.jstor.org/stable/2102247>.
- [9] Fernández, G., 2008, “*Estructuras espacio-temporales en sistemas de Reacción-Difusión-Advección*”, Tesis de Doctorado, Universidad de Santiago de Compostela.
- [10] Gross, T., Feudel, U., 2004, “*Analytical search for bifurcation surfaces in parameter space*”, *Physica D*, Vol.195, 292-302.
- [11] Kuznetsov, Y.A., 2004, “*Elements of Applied Bifurcation Theory*”, Applied Mathematical Sciences, vol.59, Second Edition, Springer-Verlag, New York.

- [12] Kuehn, C., 2012 “*From First Lyapunov Coefficients to Maximal Canards*”.
- [13] Mahara, H., Suematsu, et al., 2004, “*Three Variable reversible Gray-Scott Model*”, The Journal of Chemical Physics, 121(18), Disponible en: <http://hdl.handle.net/2115/5428>.
- [14] Marsden, J.E., McCracken, M., 1976, “*The Hopf Bifurcation and its Applications*”, Springer-Verlag, New York.
- [15] Murray, J.D., 1992, “*Mathematical Biology*”, Biomathematics Text, Springer-Verlag, Berlin.
- [16] Peletier, L.A., 2000, “*Pulses, kinks and fronts in the Gray-Scott Model*”, Mathematical Institute, Leiden University, Leiden, The Netherlands.
- [17] M.R. Ricard, S. Mischler, 2009, “*Turing instabilities at Hopf bifurcation*”, J. Nonlinear Sci., Vol.19, Issue 5, 467-496, DOI 10.1007/s00332-009-9041-6.
- [18] M.R. Ricard, 2011, “*On degenerate planar Hopf bifurcations*”, J. Phys. A: Math. Theor. 44. 065202 (15pp), DOI:10.1088/1751-8113/44/6/065202.
- [19] Sotomayor, J., Mello, L.F., Braga, D.C., 2007 , “*Lyapunov coefficients for degenerate Hopf bifurcations*”, arXiv: 0709.3949v1 [math.DS].
- [20] Vastano, J.A., et.al, 1987 “*Chemical Pattern Formation with equal Diffusion Coefficients*”, Physics Letters A, Vol 124 number 6,7.