Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra

Métodos Numéricos para Equações com Derivadas Parciais

Ano de 2004/2005 Ficha 4

Data de Entrega: 1 de Junho de 2005

1. Certas reacções químicas podem ser modeladas por equações diferenciais não lineares. Algumas dessas equações possuem soluções periódicas (como é o caso da reacção de Belousov-Zhabotinski) e têm importantes aplicações na interpreatção de fenómenos biológicos.

   O modelo de Lefever e Nicolis (1971), chamado Brusselator por ter sido proposto pelo grupo de Ilya Prigogine em Bruxelas, supõe a existência de seis substâncias A, B, D, E, X, Y que reagem entre si de acordo com as seguintes equações:

Reacção molecular	Taxa
$A \longrightarrow X$	k_1
$B + X \longrightarrow Y + D$	k_2
$2X + Y \longrightarrow 3X$	k_3
$X \longrightarrow E$	k_4

   Se denotarmos por $A(t)$, $B(t)$, ... as concentrações de A, B, ... como funções do tempo t, as reacções químicas anteriores podem ser descritas pelo sistema de equações diferenciais

$$\begin{aligned}
A' &= -k_1 A \\
B' &= -k_2 BX \\
D' &= k_2 BX \\
E' &= k_4 X \\
X' &= k_1 A - k_2 BX + k_3 X^2 Y - k_4 X \\
Y' &= k_2 BX - k_3 X^2 Y.
\end{aligned}$$

   As equações para D e E não irão ser consideradas visto não interferir com as restantes. Para além disso, vamos supor que as taxas de reacção são constantes e iguais a 1 e que A e B possuem concentrações constantes. As equações para produtos da reacção $u(t) := X(t)$ e $v(t) := Y(t)$ são dadas por

$$\begin{aligned}
u' &= A + u^2 v - (B+1)u \\
v' &= Bu - u^2 v.
\end{aligned}$$

   (a) Mostre que os sistema diferencial anterior possui um único ponto crítico $u = A$, $v = B/A$ e que a equação linearizada na vizinhança desse ponto é instável se e só se $B > A^2 + 1$.

   (b) Estude o comportamento dinâmico do sistema diferencial.

2. Considere agora o sistema Brusselator amortecido (isto é, com difusão), numa variável espacial x,

$$\begin{aligned}
u_t &= A + u^2 v - (B+1)u + \alpha u_{xx} \\
v_t &= Bu - u^2 v + \alpha v_{xx},
\end{aligned}$$

   com $0 \le x \le 1$, $A = 1$, $B = 3$, $\alpha = 1/50$, com as condições de fronteira $u(0,t) = u(1,t) = 1$, $v(0,t) = v(1,t) = 3$ e condições iniciais $u(x,0) = 1 + \sin(2\pi x)$, $v(x,0) = 3$. Estude o comportamento dinâmico do sistema usando o método das diferenças finitas numa malha uniforme.