

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 interpretação 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

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

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

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

- (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 ,

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

com $0 \leq x \leq 1$, $A = 1$, $B = 3$, $\alpha = 1/50$, 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.