

Efecto de forzamientos periódicos sobre sistemas de reacción-difusión, análise de bifurcacións

Autor: Juan Ozaita Corral Titor: Alberto Pérez Muñuzuri

11 de julio de 2017



Resumo.- Neste traballo faremos unha análise do sistema do modelo de reacción-difusión Lengyel-Epstein, estudando as bifurcacións e o comportamento dinámico . Posteriormente engadiremos un forzamento temporal e estudaremos a variación da topoloxía do sistema así como a existencia de caos. O noso obxectivo será buscar ventanas de periodicidade coas súas correspondentes transicións, intentando atopar algún patrón de similitude.

Resumen.- En este trabajo haremos un análisis del sistema del modelo de reacción-difusión Lengyel-Epstein, estudiando las bifurcaciones y el comportamiento dinámico . Posteriormente añadiremos un forzamiento temporal y estudiaremos como varía la topología del sistema así como la existencia de caos. Nuestro objetivo será buscar ventanas de periodicidad con sus correspondientes transiciones, intentando encontrar algún patrón de similitud.

Abstract.- In this research paper we'll do an analysis of the Lengyel-Epstein reaction-diffusion model, we'll study the bifurcations and the dynamical behaviour. Later, we'll add an external force to study the variations in the topology as well as the existence of chaos. Our goal is to search periodicity windows with their transitions, trying to find any similarity pattern.

Índice

1. Introducción teórica	3
1.1. Osciladores químicos e un pouco de historia	3
1.2. Ferramentas da dinámica en dous dimensións	4
1.3. Dinámica en tres dimensións : Lyapunov e entropía	6
2. Características do sistema CDIMA	8
3. Estudo de bifurcacións	11
4. Forzamento temporal e caos	16
4.1. Análise de transicións sobre diagramas de máximos	21
5. Conclusións	24

1. Introdución teórica

1.1. Osciladores químicos e un pouco de historia

Ó longo deste traballo estudaremos o modelo de Lengyel-Epstein, empregado para a reprodución de patróns en sistemas activador-inhibidor no contexto dunha reacción química.

Para colocar un contexto histórico, debemos falar de reaccións BZ e osciladores químicos. Belusov e Zhabotinsky foron dous científicos soviéticos (químico e físico, respectivamente) que, cunha marxe de dez anos de diferenza, observaron nos anos 1950-60 as primeiras reaccións químicas con determinados marcadores (como a concentración das especies) oscilantes. Tratábase da simulación en laboratorio de ciclos biolóxicos, como o ciclo de Krebs de respiración celular, o que os levou a visualizar reaccións químicas que variaban en color en periodos de un minuto.

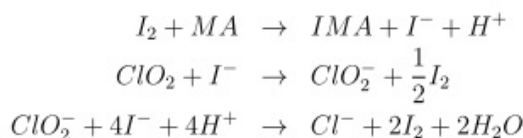
Lamentablemente, en aqueles anos, o modelo de maior importancia de descrición de comportamento biolóxico era o modelo ecolóxico de Lotka-Volterra, que exhibían formación de patróns oscilatorios baixo condicións demasiado xerais. Así, comezaron a aparecer modelizacións tales como o Brusselator, proposto por Prigogine e Lefever (da escola de Bruselas), caracterizado polas ecuacións:

$$\frac{dX}{dt} = a + X^2Y - (b+1)X \quad (1)$$

$$\frac{dY}{dt} = bX - X^2Y \quad (2)$$

Tivo importancia dado que exhibía autoorganización por parte das variables en xogo, orixinando pulsos automantenidos. A partir do desenvolvemento do Brusselator, comezaron a aparecer modelizacións cada vez máis completas da dinámica oscilatoria. O modelo que aquí estudamos ten a particularidade de que ademais da dinámica temporal, predecía a formación de patróns espaciotemporais para a reacción CDIMA, a que nos referiremos a continuación.

O modelo de Lengyel-Epstein *et al.* (1991) describe a reacción (Chlorine-Dioxide-Iodine-Malonic Acid). Nesta reacción o iodo presenta un comportamento autocatalítico, activando o sistema mentres o ión clorato actúa como inhibidor. Mientras producimos iones iodo mediante a iodación de acido malónico , retirámoslos mediante a súa interacción con dióxido de cloro. As reaccións descritas son as seguintes :



O que estudaremos aquí será a tradución da cinemática química destas reaccións (as ecuacións de concentración) no ámbito temporal, que é propiamente o modelo de Lengyel-Epstein. Para iso a partir das reaccións anteriores empregamos a lei de acción de masas (que traduce a estequiometría en constantes de reacción e concentracións) para despois reducir variables tomando únicamente as que teñen un comportamento a escala temporal similar. Finalmente adimensionalizamos as variables constantes para obter as condicións axeitadas para a

simulación numérica. O resultado é :

$$\dot{u} = a - c * u - \frac{4 * u * v}{1 + u^2} \quad (3)$$

$$\dot{v} = \sigma \left(c * u - \frac{4 * u * v}{1 + u^2} \right) \quad (4)$$

1.2. Ferramentas da dinámica en dous dimensións

O principal método de análise de sistemas de ecuacións en dúas dimensións é a linealización, sen embargo existen excepcións nas que a análise lineal é moi fráxil (os resultados poderían cambiar baixo pequenas perturbacións). Un exemplo é o caso do centro, pois como vemos na gráfica anterior , dependen d condición $\tau = 0$,algo moi sensible . Neste caso é preciso acudir a outro tipo de probas, como poden ser o uso de magnitudes conservadas, teoría de índices... En concreto, as traxectorias pechadas teñen importancia pois se trata de solucións periódicas. En sistemas de dous dimensións, as traxectorias pechadas poden existir ou ben como traxectorias illadas (que reciben o nome de ciclos límite) ou ben como colectividade na solución dalgúns problemas de aproximación lineal :

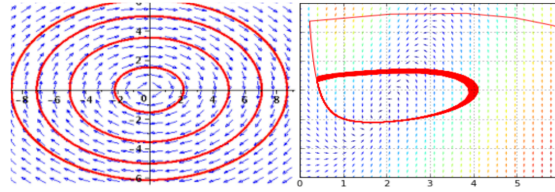


Figura 1: Exemplo de centro fronte a un ciclo límite

Como podemos ver, dado que os ciclos límite están illados, podemos clasificalos en función das direccións do fluxo interno e externo en : Estables (ambos fluxos tenden ó ciclo límite), inestables (ambos alóñxanse deste) ou semiestables (cando un deles se aproxima e o outro se afasta). Teñen moita importancia a nivel de modelizado, pois as súas oscilacións automanteñense, como sucede en moitos fenómenos naturais (latido dun corazón, ritmos de homeostase ...). Así, como podemos apreciar, a dinámica no plano pode optar a múltiples categorías, que podemos analizar a través de procesos de linealización ou mediante outras análises cualitativos. Estas variacións na topoloxía do sistema coñecense como bifurcacións e estudanse sobre un diagrama de bifurcacións.

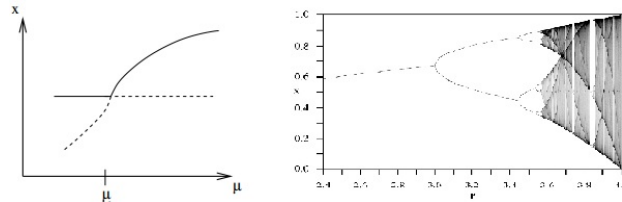


Figura 2: Exemplo de bifurcacións; as traxectorias representan os puntos fixos e a discontinuidade marca a estabilidade

Máis adiante veremos que no noso caso só temos un punto fixo, (é un sistema excitable) polo que no noso diagrama estudaremos a estabilidade deste.

Os dous grandes subgrupos de bifurcacións en dous dimensións son :

- Nas primeiras , a variación de parámetros (sempre reais) leva a espaciar máis ou menos os puntos fixos e a súa traslación ó longo da recta real. Isto tradúcese en que os puntos fixos que temos no sistema poden variar en estabilidade (nodo estable, nodo inestable, punto de silla) e en localización no plano (aproximandóos ou alonxandóos) e mesmo crealos ou facelos destruír) as posicións no plano teñen que ser reais e os parámetros do sistema poden xogar con eso).
- Se temos dous valores complexos por autovalores, as variacións as súas variacións poden facelos atravesar a recta $Re \lambda = 0$ cambiando a súa estabilidade (espirais estables a inestables e viceversa) e, como veremos, xerando ciclos límite . Este tipo de bifurcacións coñécense como bifurcacións de Hopf e son as que estudaremos, dado o noso sistema.

Pero non toda a xeometría do sistema se calcula a través dos nosos puntos fixos, debemos ter en conta o comportamento das nosas ecuacións diferenciais en todo momento. Un exemplo : Un sistema pode ter unha determinada cunca de estabilidade (de onde o fluxo non pode escapar) que non vai cambiar pese a variación de estabilidade do punto fixo. Se este tamén é estable, o problema está arranzado, mais se o noso punto fixo é inestable, xéranse estruturas como ciclos límite, que compensan ámbalas circunstancias. Falamos de ecuacións diferenciais estilo :

$$\dot{r} = \alpha r - \beta r^n \quad (5)$$

Este tipo de bifurcación coñécese como supercrítica.



Figura 3: Bifurcación subcrítica

Se incluímos novos termos da forma :

$$\dot{r} = \alpha r + \beta r^n - \gamma r^m \quad m > n \quad (6)$$

En ámbolos casos o primeiro parámetro controla a linealidade (o máis importante nas proximidades do punto fixo) e os outros termos controlan a cunca de estabilidade pois predominan a longas distancias.

Neste caso, como vemos na imaxe, xéranse novos ciclos de estabilidade/ inestabilidade, que coalescen nun valor crítico, deixando un ciclo límite inestable. Este

movemento autónomo por debaixo do punto de bifurcación é o que se coñece como histérese. Neste caso é moi útil representar o estudo da ecuación dinámica radial pois estes pares de ciclos corresponden a un caso concreto de bifurcación nunha dimensión. O caso descrito coñécese como bifurcación subcrítica.

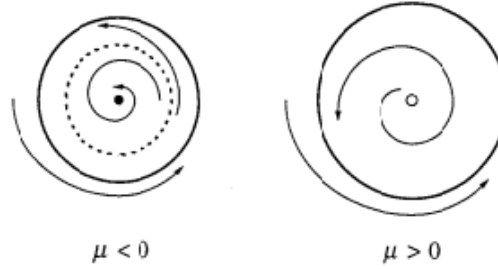


Figura 4: Bifurcación supercrítica

Estes dous tipos de bifurcacións están ligadas a aparición e desaparición de ciclos límite de distintos tipos (estables, inestables e semiestables). Sen embargo , en dous dimensións tamén existen outros tipos de bifurcacións como as que comentabamos antes relacionadas coa histérese ou outras relacionadas con aspectos angulares, como as bifurcacións de período infinito.

1.3. Dinámica en tres dimensións : Lyapunov e entropía

Ademais do estudo de bifurcacións, introduciremos un forzamento sinusoidal ó noso sistema e estudarémolo en función dos seus parámetros. O noso obxectivo é buscar comportamento caótico, pois introducimos unha ecuación máis saíndonos dos terreos de Poincaré-Bendixon.

A definición do caos está ligado á sensibilidade con respecto as condicións iniciais. Isto é, se definimos x_0 como punto inicial e a súa vecindade como $x_0 + \delta_0$, pasado un intervalo temporal , a vecindade evoluciona como $|\delta_n| = |\delta_0|e^{\lambda\Delta t}$ onde λ é o expoñente de Lyapunov. O cálculo propio do expoñente de lyapunov faise no límite infinito :

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta t} \frac{|\delta_n|}{|\delta_0|} \quad (7)$$

Existe un expoñente de lyapunov asociado a cada autovalor do sistema lineal, pero o determinante é o maior deles, pois determinará se o movemento é caótico ou non.

Neste traballo empregaremos o algoritmo de *Rosenstein et al.* , que extrae o maior expoñente de Lyapunov a partir dunha serie temporal.

Este método separa a serie en varias subseries, basándose nun punto inicial como referencia e buscando os puntos máis próximos a éste como inicio das subseries (para o cal ten en conta a frecuencia principal do sistema, que realiza cunha transformada de Fourier da serie inicial, co obxectivo de evitar subseries demasiado cortas. Así, dunha serie temporal moi longa, obtemos varias subseries con condicións iniciais moi próximas. A partir de ahí, analizando a distancia

relativa na traxectoria, pódese extraer o coeficiente de Lyapunov mediante un axuste logarítmico.

Ademáis empregaremos a entropía da mostra como medida de regularidade e complexidade das series temporais.

Esta ferramenta matemática toma a nosa serie de datos e a partir do número de datos (N), o número de elementos de cada subserie (m) e a diferenza tolerada (r). Explicaremos estes conceptos a través do procedemento. Tomando a nosa serie de datos:

$$\vec{u} = u(1), u(2) \dots u(N)$$

E forma unha secuencia de vectores tal que :

$$\vec{x}(1), \vec{x}(2) \dots \vec{x}(N - m + 1) \text{ onde } \vec{x}_i = [u(i), u(2) \dots u(i + m - 1)]$$

Para cada vector de referencia i calculamos :

$$C_i^m(r) = \frac{\vec{x}(j) \text{ tal que } dist[\vec{x}_i, \vec{x}_j] < r}{N - m + 1}$$

Onde a distancia é a máxima entre os valores de u comparados entre os vectores a comparar. Esta cantidade representa a proporción de vectores que se separan nun valor de tolerancia do noso vector de referencia.

A través da teoría ergódica de *Eckmann et Ruelle* (ver referencia na bibliografía) podemos relacionar esta expresión coa entropía de Kolmogorov-Sinai, un invariante topolóxico de cada sistema dinámico. Esta entropía é unha xeralización da entropía da información de Shannon. Sobre un sistema dinámico que ten definido un espazo de fases (Q) dividido nunha suma de particións (Q_m) (no noso caso as subseries) cunha medida de probabilidade μ podemos definir a entropía do sistema como :

$$h(Q) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{m} \sum_m \mu(Q_m) \log(\mu(Q_m))$$

Así, tomamos $C_i^m(r)$ como medida de probabilidade fraccionada definindo:

$$\Phi_r^m = \frac{1}{N - m + 1} \sum_i C_i^m(r) \log(C_i^m(r))$$

Ademáis, a partir da diferente configuración en función dos datos iniciais tomados para m, *Eckmann et Ruelle* definiron a entropía de Kolmogorov dun sistema dinámico como :

$$SampEn(m, r) = \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{r \rightarrow 0} (\Phi_r^m - \Phi_r^{m+1})$$

E esta é a cantidade que estudaremos, pois representa as variacións na predictibilidade da topoloxía do espazo de fase (no caso do noso sistema periódico, as variacións serían, a aparición de sistemas multiórbitas fronte a sistemas caóticos, por exemplo).

Dende un punto de vista cualitativo, a entropía marca a regularidade da serie. Se pensamos no ciclo mitocondrial de Krebs, a entropía fálanos da regularidade nas concentracións de activador e inhibidor . Unha alta irregularidade

nas concentracións , levaría a variacións máis elevadas, isto é máis actividade celular e, incluso podería darse o caso da perda de regularidade na serie. Polo contrario, unha serie regular para activador-inhibidor levaría a manter esta estrutura cíclica, coa actividade acotada por un máximo.

2. Características do sistema CDIMA

Neste apartado estudaremos as condicións xerais do noso sistema de ecuacións diferenciais para poder catagorizalo. Lembremos que o noso modelo de Lengyel-Epstein sen forzamento é :

$$\dot{u} = a - c * u - \frac{4 * u * v}{1 + u^2} \quad (8)$$

$$\dot{v} = \sigma \left(c * u - \frac{u * v}{1 + u^2} \right) \quad (9)$$

Onde os tres parámetros estudados (a , c e σ son maiores que 0).

Comprobemos que as traxectorias descritas no plano (u,v) están acotadas no cuadrante positivo, sempre e cando as condicións iniciais comecen ali. Para iso estudamos o comportamento nas fronteiras do cuadrante:

$$(u = 0) \quad \dot{u} = a \quad \dot{v} = 0 \quad (10)$$

$$(v = 0) \quad \dot{u} = a - c * u \quad \dot{v} = \sigma * c * u \quad (11)$$

$$(u = \infty) \quad \dot{u} \simeq -c * u \quad \dot{v} = \sigma * c * u \quad (12)$$

$$(v = \infty) \quad \dot{u} \simeq -\frac{4 * u * v}{1 + u^2} \quad \dot{v} \simeq -\frac{\sigma * u * v}{1 + u^2} \quad (13)$$

$$(14)$$

Sobre os eixes coordenados as velocidades propias de cada variable (isto é u para \dot{u} e v para \dot{v} son positivas (sempre que $u < (a/c)$), polo que se alonxa deles mentres que para o límite no infinito son negativas, polo que o noso sistema está acotado a esta rexión. Esta condición é importante pois como xa vimos, un espacio acotado pode xerar ciclos límite e outras estruturas que detallaremos.

Outra estratexia moi empregada no análise cualitativo dos sistemas dinámicos é traducir as ecuacións cartesianas a un plano polar. Se facemos isto co noso sistema obtemos :

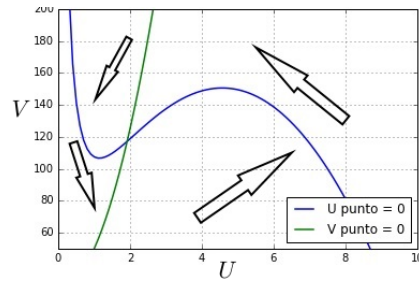


Figura 5: Nullclines do noso sistema e a dirección do fluxo en torno a elas

$$\dot{r} = \cos(\theta) \left(a + rc(\sigma \sin(\theta) - \cos(\theta)) - \frac{1}{1/r^2 + \cos^2(\theta)} (\sin(\theta)(4 * \cos(\theta) + \sigma \sin(\theta))) \right) \quad (15)$$

$$\dot{\theta} = 0,5 * \sin(2\theta) \left(c \left(\frac{\sigma}{\tan(\theta)} + 1 \right) - \frac{r}{1 + r^2 \cos^2(\theta)} (\sigma \cos(\theta) - 4 \sin(\theta)) - \frac{a}{r \cos(\theta)} \right) \quad (16)$$

Empregámolas para estudar a topoloxía do sistema. Se graficamos a ecuación radial facendo un barrido angular cos parámetros $a = 240, \sigma = 15, c = 25$ (os cales xustificaremos máis adiante) e poderemos apreciar a existencia de ciclos a través das dúas raíces da ecuación \dot{r} :

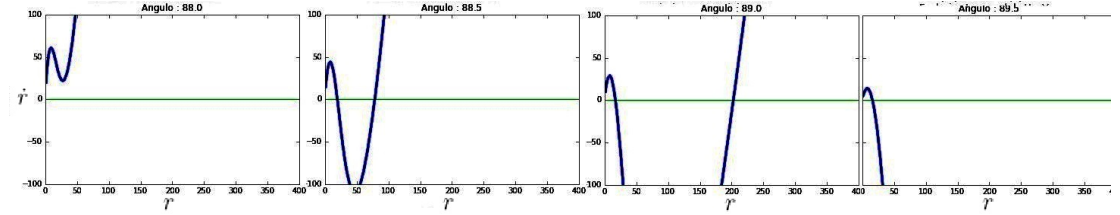


Figura 6: Ecuacion radial para $\theta=88,88.5,89$ e 89.5

Con respecto a ecuación angular, o único punto fixo para a ecuación ($\dot{\theta} = f(\theta)$) existe (no ámbito angular $(0 - \pi/2)$) existe para radios pequenos. Dada a existencia dunha soa raíz, non existe evidencia para estudar bifurcacións de tipo angular.

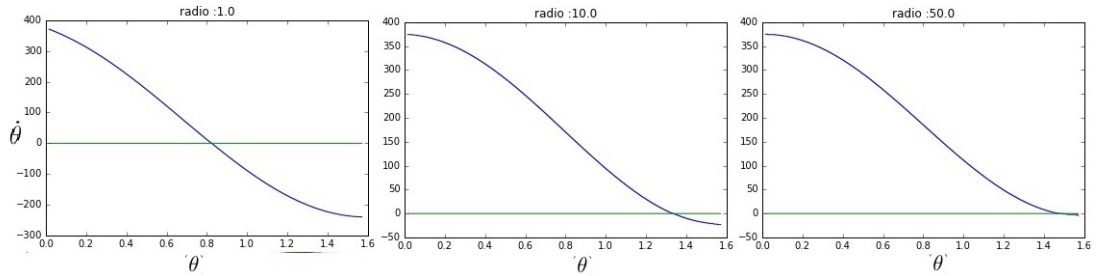


Figura 7: Ecuacion angular para $r=1,10$ e 50

Un último aspeto cualitativo podemos obtelo se tratamos de extraer o noso termo non lineal mediante a suma das ecuacións :

$$\frac{\dot{u} - a + cu}{4} = \frac{\dot{v}}{\sigma} - cu \quad (17)$$

$$\frac{4\dot{v}}{\sigma} - \dot{u} = 5cu - a \quad (18)$$

A continuación produciremos o estudo dinámico, primeiramente estudando os puntos fixos do noso sistema, para o cal resolvemos as ecuacións $\dot{u} = 0$ e $\dot{v} = 0$ simultaneamente. Deducindo directamente da ecuación anterior :

$$5cu - a = 0 \quad \implies \quad u^* = \frac{a}{5c} \quad (19)$$

Poderíamos estudar esta mesma circunstancia mediante a resolución das de cade ecuación dinámicas. A solución de cada ecuación dinámica por separado,

chámase nullcline. O noso sistema ten, por tanto, dous nullclines ($\dot{u} = 0$ e $\dot{v} = 0$):

$$\dot{u} = 0 = a - cu - \frac{4uv}{1+u^2} \quad \rightarrow \quad v(u) = \frac{(a-cu)(1+u^2)}{4u} \quad (20)$$

$$\dot{v} = 0 = \sigma \left(cu - \frac{uv}{1+u^2} \right) \quad \rightarrow \quad v(u) = c(1+u^2) \quad (21)$$

E, a partir, desta última nullcline, podemos deducir a coordenada de v correspondente o noso u fixo :

$$v^* = c(1+(u^*)^2) = \frac{25c^2 + a^2}{25c} \quad (22)$$

E este o noso único punto fixo do sistema.

Os sistemas dinámicos poden clasificarse en función dos puntos fixos e a xeometría das nullclines. Isto permítenos diferenciar varios sistemas , o cal se traduce nunha diferenciación entre as respostas que obtemos. Existen tres comportamentos característicos que podemos obter:

- **Réxime excitable**, que consta tan só de un punto fixo, ó que tenden todas as traxectorias pasado un tempo. Ten a particularidade de que baixo unha perturbación suficientemente grande , o sistema fai unha excursión polo espacio de fases, isto é, produce un pulso que desaparece tras un breve tempo.
- **Réxime bistable**, que consta de tres puntos fixos, distribuídos como dos puntos de estabilidade e unha inestabilidade central; que impulsa a traxectoria cara un ou outro punto fixo en función das condicións iniciais. Isto tradúcese na resposta en transición tipo escalón dun punto fixo ó outro.
- **Réxime oscilatorio**, que consta dun único punto fixo inestable, onde calquera perturbación transmítese como un recorrido a través das nullclines de maneira constante, orixinando unha onda viaxeira.

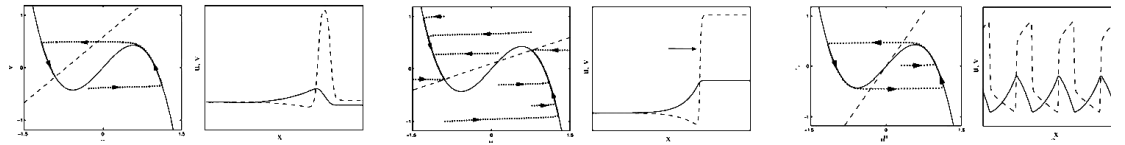


Figura 8: Réxime excitable, bistable e oscilatoria respectivamente

Se recuperamos a circunstancia do u^* para a ecuación 18 :

$$\frac{4\dot{v}}{\sigma} - \dot{u} = 5c(u - u^*) \quad (23)$$

O cal nos permite extraer algunha pequena conclusión :

- Nos puntos nos que u sexa máxima, a velocidade de v punto depende do signo de $(u - u^*)$. Isto, sumado a condición de contención no primeiro cuadrante (que lembremos que require $u < a/c$, isto é, $5u^*$) permítenos afirmar que como mínimo terá traxectorias periódicas , o cal podemos afirmar co teorema de Poincaré-

Bendixon , pois habitamos un sistema de dúas dimensións.

A continuación realizaremos o análise da xacobiana para determinar as condicións que determinan a estrutura topolóxica do noso sistema e, a continuación, comprobáremolo, cos diagramas de bifurcacións feitos a través de simulacións.

A partir desta xacobiana calculamos traza e determinante, cos que determinaremos autovalores e a partir deles, as condicións analíticas de Hopf, isto é, o momento no que os autovalores cruzan o eixe imaxinario.

$$\tau = \left(\frac{1}{25v^*} \right) (-125c^2 + 3a^2 - 5\sigma a) \quad (24)$$

$$\Delta = \left(\frac{1}{v^*} \right) (\sigma ca) \quad (25)$$

A condición de Hopf obtense mediante $\tau=0$, que nos da entre outras estas relacións :

$$\sigma = \frac{3a}{5} - \frac{25c^2}{a} \quad c = \sqrt{\frac{a(3a - 5\sigma)}{125}} \quad a = \frac{5}{6} \left(\sigma + \sqrt{\sigma^2 + 60c^2} \right) \quad (26)$$

Que utilizaremos para situar os parámetros máis adiante, co obxectivo de realizar os cortes no diagrama de bifurcacións.

A condición de estabilidade vén dada por $\tau^2 - 4\Delta = 0$. Sen embargo, non resolveremos esta condición pois dificulta moito o cálculo. No canto de métodos analíticos, utilizaremos o módulo de álgebra lineal de Scipy para o cálculo directo de autovalores, e a partir deste faremos mapas de resultados. Para o tanteo de valores empregamos as expresións anteriores.

3. Estudo de bifurcacións

O noso seguinte obxectivo é realizar a partir destes valores un diagrama de bifurcacións para observar como a variación dos parámetros varía o resultado dos autovalores derivados da linealización; buscando as variacións cualitativas máis importantes. O noso sistema ten tres parámetros, sen embargo, dada a dificultade da realización dun mapa en tres dimensións, mostraremos os diversos cortes (planos) de maior importancia cualitativa (isto é, de maior variación de estrutura topolóxica). A continuación presentamos a lenda e as gráficas:

Colores

A → Amarelo	N→ Negro	Na→ Laranxa	R→ Vermello	V→ Violeta
-------------	----------	-------------	-------------	------------

Estruturas no espacio de fase

N.E. → Nodo estable	E.E.→ Espiral estable	N.I.→ Nodo inestable	E.I:→ Espiral inestable
---------------------	-----------------------	----------------------	-------------------------

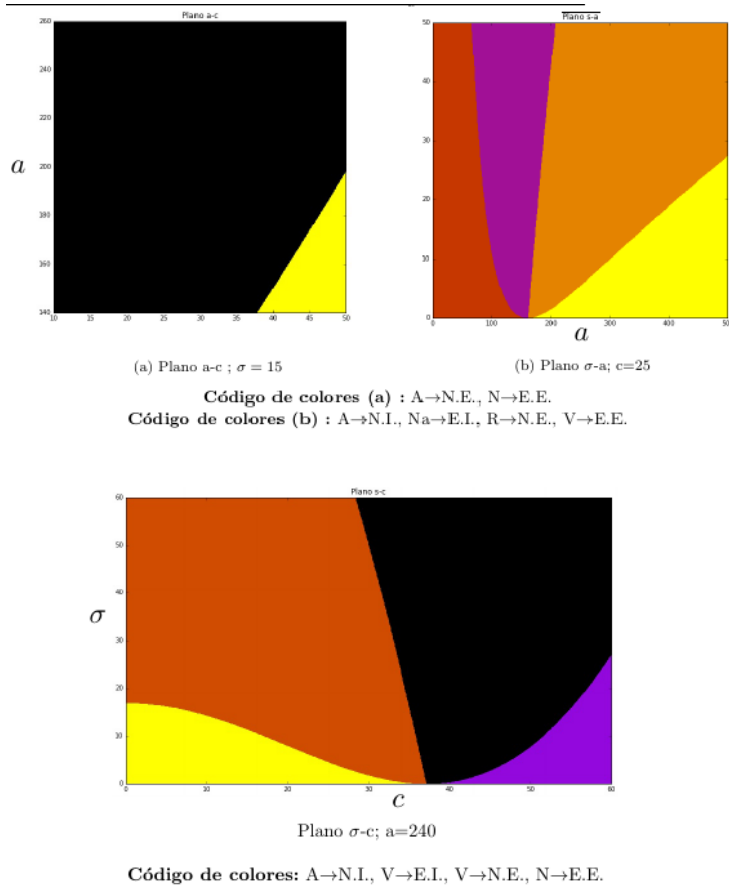


Figura 9: Planos coordinados de bifurcación dos parámetros do sistema

Temos que ter en consideración que aquí só estamos estudando únicamente os cortes coordinados do espazo de tres dimensións (σ, a, c) . Aquí estudaremos eses exemplos pois son máis simples, sen embargo pertencen a un espazo de bifurcacións en tres dimensións, como se observa na imaxe. O espazo representado coa malla é a solución de $a(\sigma, c)$ coa condición $\tau=0$ (en particular, a terceira ecuación de (26)). Asimesmo, as liñas discontinuas representan as zonas de interés que detallaremos máis abaixo. Ademais, dado que non varía ningún parámetro das ecuacións varía de signo (obsérvase mellor na ecuación radial), deberíamos esperar que todas as bifurcacións que se produzan ó longo desta malla sexan do mesmo tipo.

En ámbolos dous casos podemos observar que a principal transición que se produce é a transición de nodo inestable

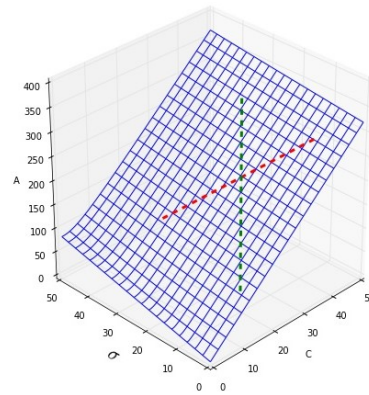


Figura 10: Superficie $\tau=0$ dentro do espazo σ, a, c

a nodo estable (a través de espirais).
 Para poder comprobar a estrutura destas bifurcacións fixamos as zonas de interés.
 Primeiramente fixamos un parámetro, neste caso; $a=240$, e, tomando os planos coordinados de bifurcación, escollemos o resto de parámetros de cara a poder observar totalmente as transicións nos dous planos coordinados seguintes; o que nos leva a escoller $\sigma = 15$ e $c = 25$:

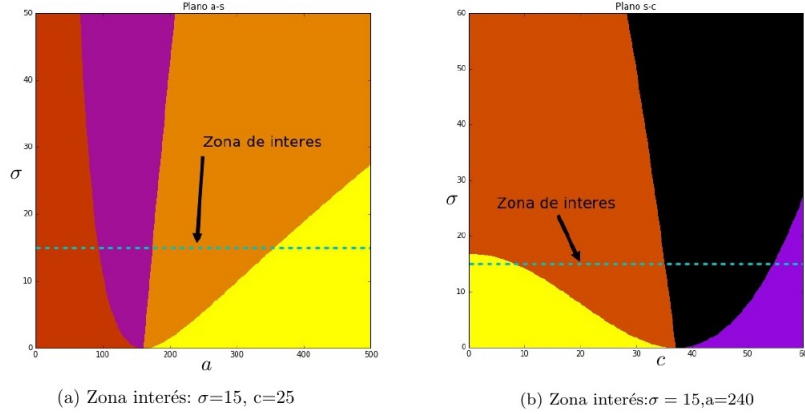
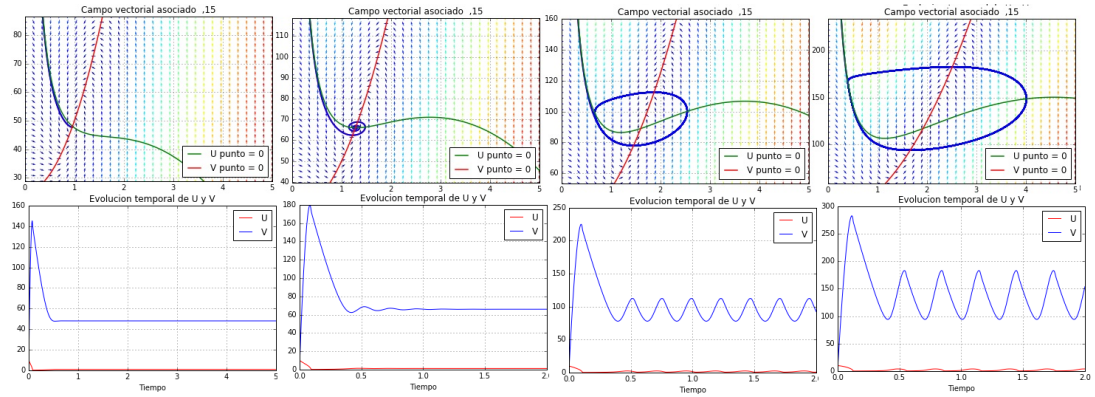


Figura 11: Zonas de interés sobre o plano de bifurcacións anterior

A continuación estudaremos como son as bifurcacións representadas nestas zonas de interés :

· **Zona de interés (a)**, $\sigma=15$; $c=25$: Comenzaremos estudiando a variación do parámetro a . Comenzamos amosando unhas imaxes do espacio de fases,comportamento temporal e transformada de Fourier respectivamente, para estudar a súa evolución:



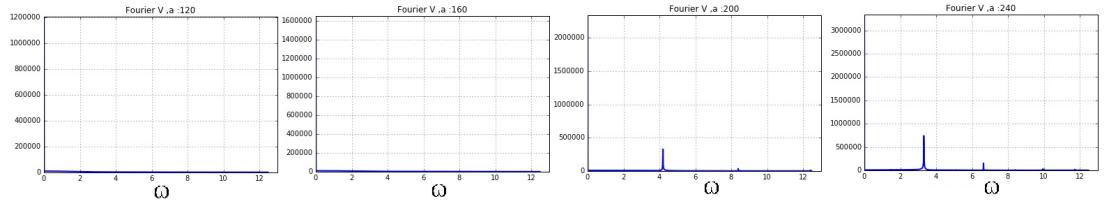


Figura 12: Campo vectorial, evolución temporal e transf. de Fourier para os valores de a : 120,160,200,240

Utilizar a ecuación (26) permítenos resolver un $a_{crit} \simeq 174$, como podemos observar na seguinte gráfica, que amosa os valores máximos e mínimos das traectorias, así como as frecuencias de ciclo que se obtíñen da linealización ,isto é, $im(\lambda)$:

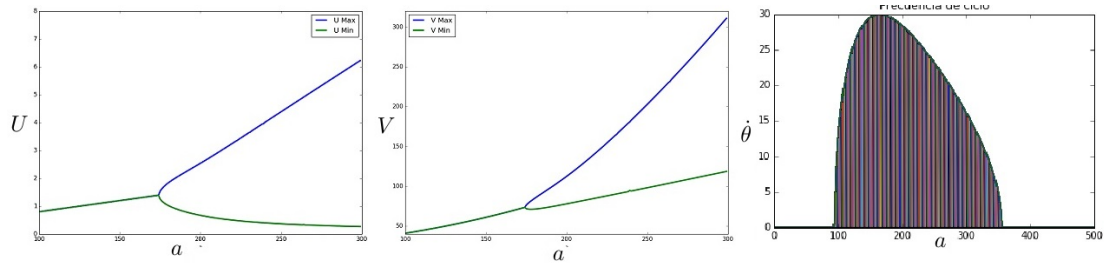
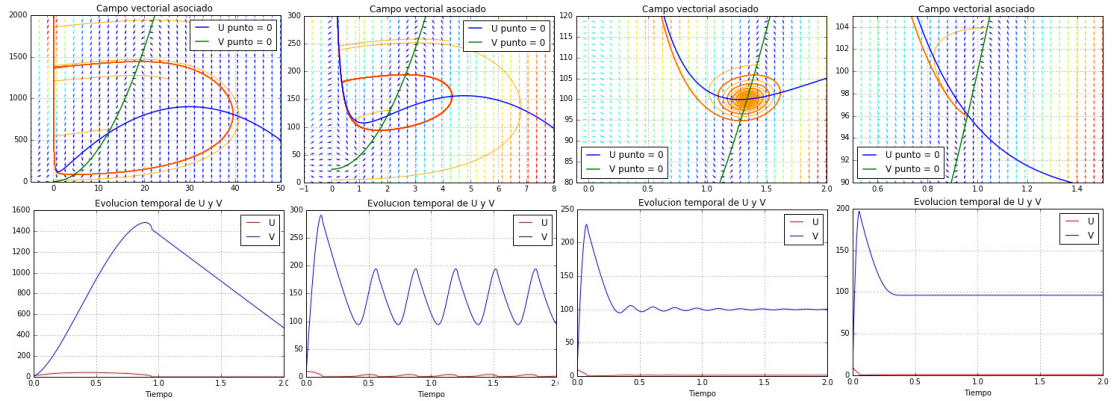


Figura 13: Valores máximos e mínimos de u e v , xunto coa frecuencia de ciclos en variación de a

A raíz destas imaxes podemos concluír que, nesta zona de interés :

- Prodúcese unha transición de un punto estable atractor a un ciclo límite de amplitude cada vez maior. Falamos polo tanto dunha **bifurcación de Hopf supercrítica**. O ciclo prodúcese a partir dun valor crítico de a , que calculamos. Por último presentamos a análise de Fourier :

· **Zona de interés (b)**, $a=240$; $\sigma = 15$: Neste caso estudamos a variación do parámetro c , polo que a continuación expomos unha serie de imaxes do espazo de fase dentro do intervalo estudado $c \in (0, 60)$:



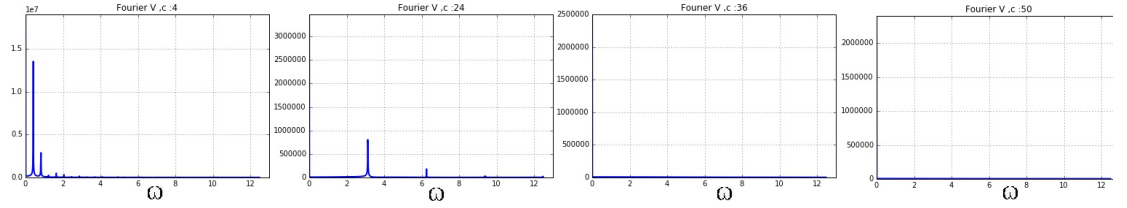


Figura 14: Campo vectorial, evolución temporal e transf. de Fourier para os valores de c : 4,24,36,50

Os resultados son correctos acordo ó valor esperado, pois se tomamos as expresións :

$$\tau = \frac{c}{25c^2 + 57600} (154800 - 125c^2) \quad (27)$$

Onde se resolvemos obtemos un valor $c_{crit} \simeq 35,19$, valor coherente cos resultados amosados. Para caracterizar estes ciclos ensinamos a variación de amplitude e frecuencia dos ciclos :

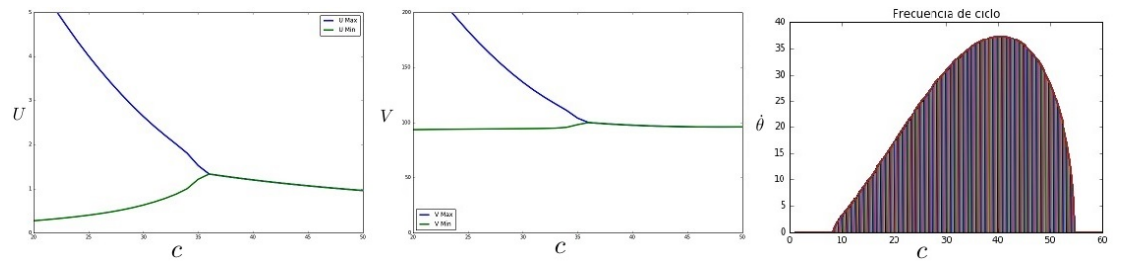


Figura 15: máximos e mínimos de u e v, xunto coa frecuencia de ciclos na variación en c

Podemos comprobar a raíz das imaxes anteriores que :

- Prodúcese unha transición de un ciclo límite (demiestable, como analizamos no preámbulo) que chegado a un c_{crit} pasa atenuarse para terminar convertíndose nun nodo estable. Falamos , por tanto dunha **bifurcación de Hopf supercrítica**.
- Vemos que os ciclos esvaécense a través da Figura 6, cando coinciden ámbolos valores máximo e mínimo. As frecuencias desvánecense ó chegar a c_{crit} , sen embargo, tamén existe un comportamento periódico para c baixo; corroborando a existencia do ciclo límite. Vémolo a través da análise de Fourier das series temporais :A frecuencia central segue existindo para baixo c, e desprázase a medida que aumentamos c, ademais de diminuír a súa amplitude .

En conclusión podemos observar que no noso espacio de parámetros prodúcese unha bifurcación supercrítica ó longo do tecido en 3 dimensións que citamos máis arriba, sen ningunha evidencia de bifurcación de outro tipo.

4. Forzamento temporal e caos

O modelo de Lengyel-Epstein representa o estudo de sistemas naturais auto-catalíticos. Todos os sistemas biolóxicos están sometidos a ciclos externos , tales como luz, calor, concentracións externas.... En definitiva, son forzamentos periódicos de magnitudes independentes, e aquí trataremos de estudar o seu efecto. Para isto introduciremos no sistema dinámico un novo parámetro (ϕ) e estudaremos como afecta a configuración do noso espacio de fase. O novo termo aparece como :

$$\dot{u} = a - c * u - \frac{4 * u * v}{1 + u^2} - \phi(t) \quad (28)$$

$$\dot{v} = \sigma \left(c * u - \frac{u * v}{1 + u^2} + \phi(t) \right) \quad (29)$$

$$\dot{\phi} = -\phi_M \sin(\omega t) \quad (30)$$

Dada a aparición de dous novos parámetros (amplitude e frecuencia da onda) , fixaremos unha segunda zona de interés nunha zona de existencia de ciclo límite para estudar como varia as traxectorias a inclusión destes dous parámetros. A partir dos datos recollidos na sección anterior tomamos como referencia:

$$\boxed{a=240, c=25, \sigma=15}$$

Comezamos analizando as propiedades do sistema nese punto. Observamos un ciclo límite con áuovalores imaxinarios e positivos. O comportamento no tempo de cada variable é o seguinte: Onde a amplitude cáculamola a partir dos valores

U	Frecuencia interna	Amplitude
U	24.547	1.8066
V	24.547	44.460

máximos e mínimos da secuencia periódica e a frecuencia a partir da principal (a de maior relevancia) da serie de Fourier. Introducir a terceira ecuación é complexo e aquí estudaremos unha zona de interés, mediante varios métodos :

- Expoñentes de Lyapunov, unha medida da diverxencia das condicións iniciais.
- Entropía da mostra, que analiza a impredictibilidade do sistema para mostrase largas.
- Estudo dos máximos da mostra; pois, como apreciaremos máis adiante, a nosa mostra mantén unha estrutura de ciclos pero xera novos sistemas multiórbita e aperiódicos, polo que estudar os máximos da serie temporal aporta unha importante información.

Presentamos a continuación as distribucións dos máximos na coordenada v, para variacións de amplitude de 5 nun rango de frecuencias de (0-20) e amplitudes de (0-35) . Únicamente presentamos a coordenada v , pois u ten unha estrutura topolóxica de máximos moi similar. A súa dereita aparecen, respectivamente,

os expoñentes de Lyapunov e a entropía para os mesmos valores de amplitude e frecuencia externa:

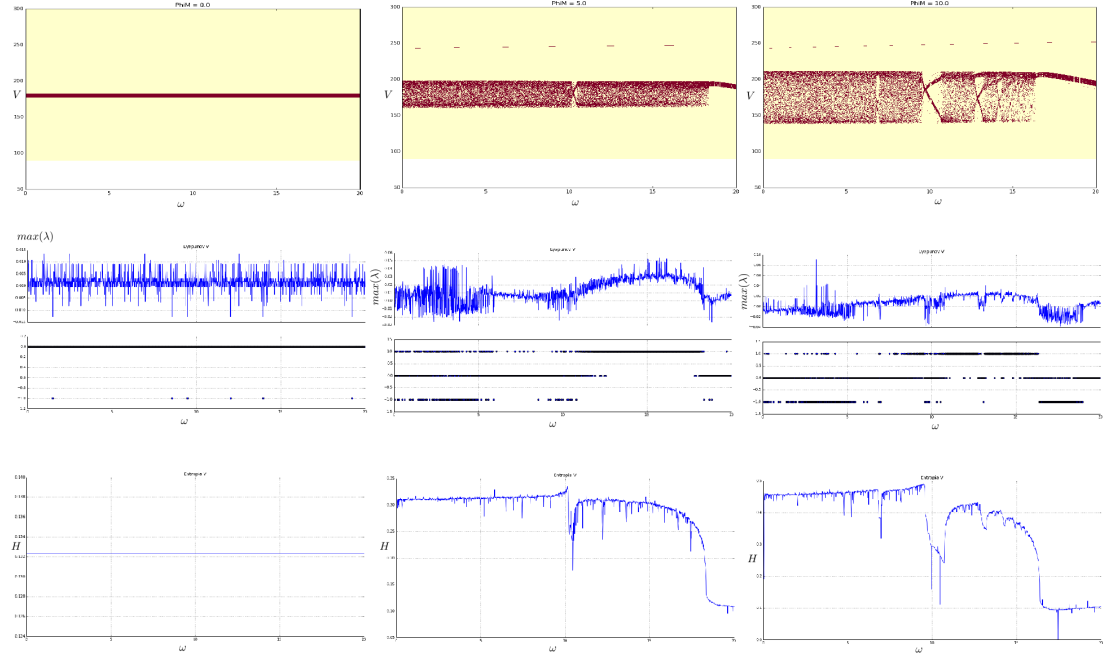


Figura 16: Diagrama de máximos, Lyapunov e entropía para $\phi_M=0,5$ e 10

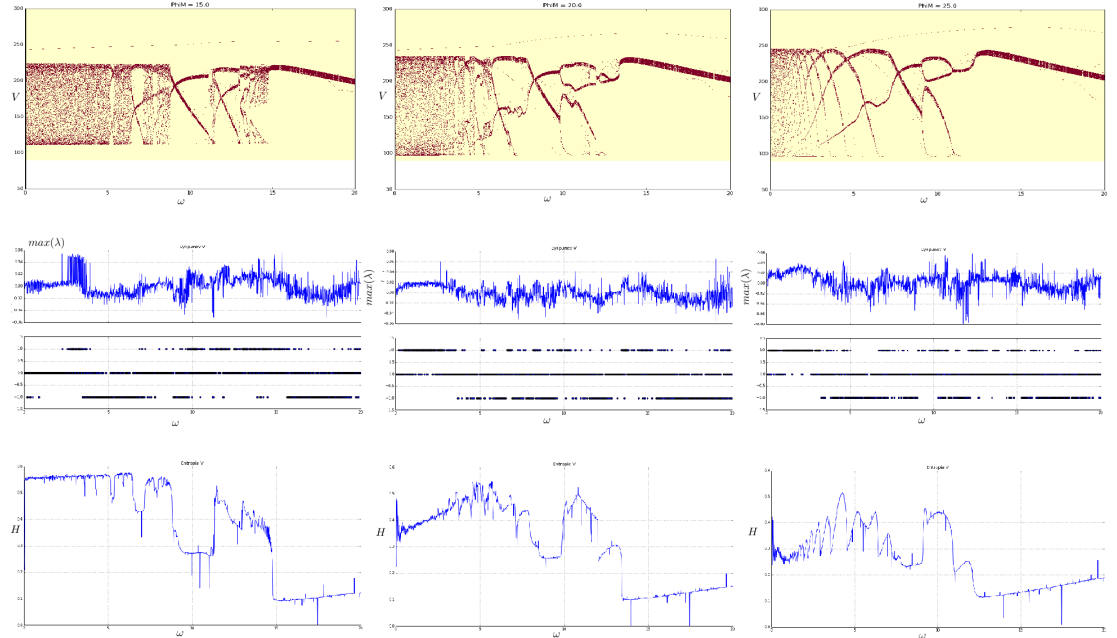


Figura 17: Diagrama de máximos, Lyapunov e entropía para $\phi_M=15,20$ e 25

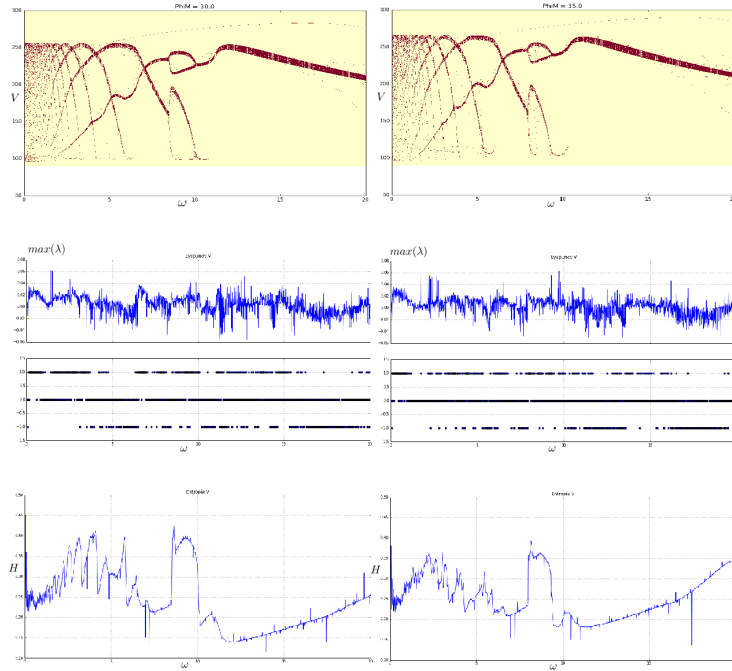


Figura 18: Diagrama de máximos, Lyapunov e entropía para $\phi_M=30$ e 35

Todos os resultados presentados recorren o ámbito de frecuencias (0-20) en 2001 pasos, isto é, toman un dato cada centésima de unidade. Faise necesario dicir que, dada a integración numérica levada a cabo ó longo deste traballo, existen detalles que non son moi exactos. Para comezar a gráfica que indica a posición dos máximos en ausencia de frecuencia debería ser unha liña e, sin embargo, ten unha anchura determinada debido o erro cometido na integración. Isto sucede tamén co cálculo do expoñente de Lyapunov polo que debaixo de cada imaxe introducimos un pequeno gráfico a tres niveis.

Tomando como referencia a primeira gráfica, na que non temos amplitude analizamos o resultado como unha distribución de ruído que asumimos como gaussiana. Calculando a media e a desviación típica desta establecemos unha cota $\bar{x} \pm 3,5\sigma$, o que significa unha probabilidade de erro de 1 en 2149. Dado que estudamos o noso sistema en 2001 pasos, é aceptable. Todos os valores que estén por encima desta cota establecida serán tomados como positivos e aparecerán no nivel superior. No nivel inferior estarán aqueles valores que estén por debaixo da cota mínima. Así os tres niveis representan: expoñente de Lyapunov positivo, cantidade non analizábel e expoñente de Lyapunov negativo, respectivamente. Con respecto a análise das gráficas, a introducción da coordenada ϕ orixina novas traxectorias.

De feito, obsérvase que segundo crece a amplitude, aparecen dúas ventanas principais: unha grande de traxectoria única conforme nos aproximamos a frecuencia interna (a do sistema sen a terceira ecuación) e outra máis pequena de dobre periodo preto da metade da frecuencia interna. Segundo aumenta a amplitude aparecen máis ventanas de maior periodicidade entre as dous ventanas anteriores. Existe un punto de inflexión, que é a ventana de dous órbitas no entorno de $\omega \simeq 10$. Antes e despois desta, as ventanas de periodicidade ábrense cada vez

con maior número de órbitas a esquerda e dereita e , podemos observar como as ventanas de periodicidade crecen a ambos lados, e, no caso das frecuencias máis altas, converxen a unha traxectoria única a través de ventanas de periodicidade cada vez maiores e case consecutivas. Ademais as ventanas aumentan a súa anchura coa amplitude , polo que a partir de $\phi_M = 15$ podemos observar como colapsan para aparecer estruturas máis complexas.

Como podemos observar cando non temos amplitude de forzamento o expoñente de Lyapunov (que aparece no medio) é puro ruído. Segundo imos aumentando a amplitude , aparece unha zona claramente caótica entre a ventana de dobre periodo e a de un periodo (vese de maneira clara con $\phi_M = 5$) na que interfieren como discontinuidades as ventanas de periodicidade. Cando a amplitude aumenta aínda máis, esta zona vese invadida por ruído de maneira progresiva ata quedar ata non poder distinguir un patrón continuo a partir de $\phi_M \simeq 30$. Este método analítico pódese comparar coa entropía da mostra, representada a dereita. Un descenso da entropía corresponde a unha maior predictibilidade , periodicidade e polo tanto, descenso no número de órbitas e viceversa se sube a entropía. Podemos comprobar esta relación nas gráficas da seguinte páxina.

Como se pode ver os vales de entropía concordan bastante ben coas ventanas de periodicidade que se van abrindo . A entropía descende de maneira constante ata chegar a etapa de traxectoria única e, igual que con Lyapunov, segundo aumentamos a intensidade do forzamento as cuncas distorsiónanse ata chegar a ser imperceptibles.

Nos sistemas caóticos multiórbita adoitan buscarse as bifurcacións de traxectorias que imprementan o número de órbitas a razóns xeométricas determinadas , como as cascadas de bifurcacións de dobre periodo. Neste sistema, as transicións entre as ventanas de periodicidade única ou múltiple e as zonas de única traxectoria moi uniforme son intermitentes e corresponden con ventanas de cada vez maior periodicidade. Para observar este fenómeno escollemos unha amplitude baixa onde podamos observar estas zonas. En concreto , tomamos $\phi_M = 15$. Presentaremos agora algunhas estas transicións de rexión de frecuencias estudadas (7.5-15), unha amplificación do anterior :

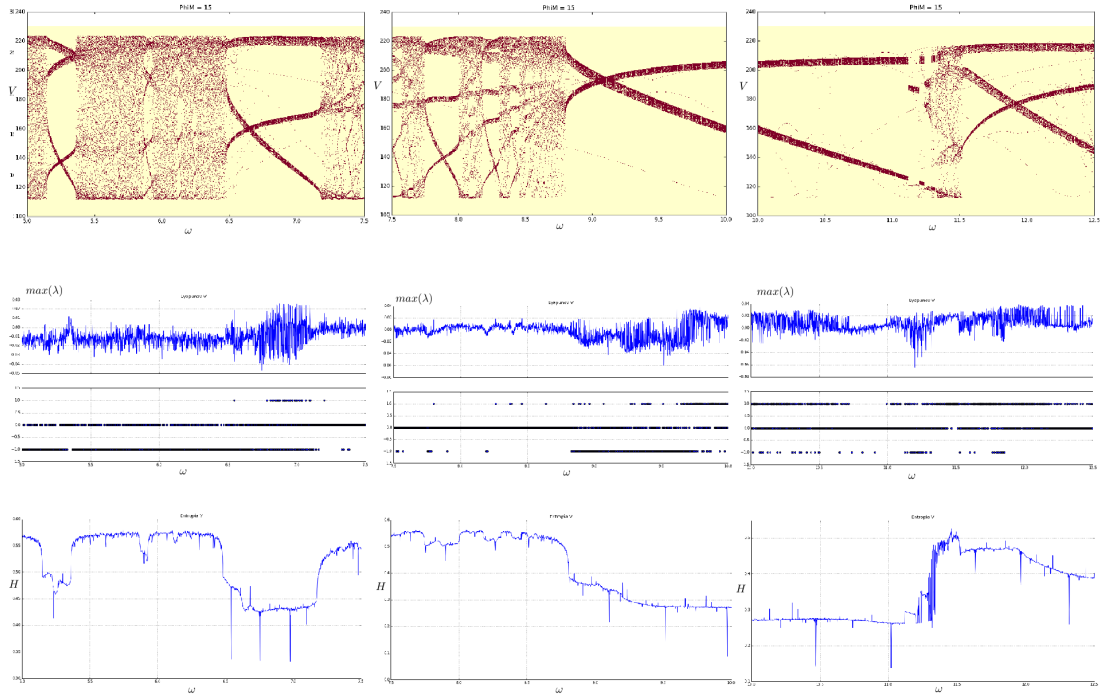


Figura 19: Diagrama de máximos, Lyapunov e entropía para $\phi_M=15$ e $\omega=(5,7.5)$, $(7.5,10)$ e $(10,12.5)$

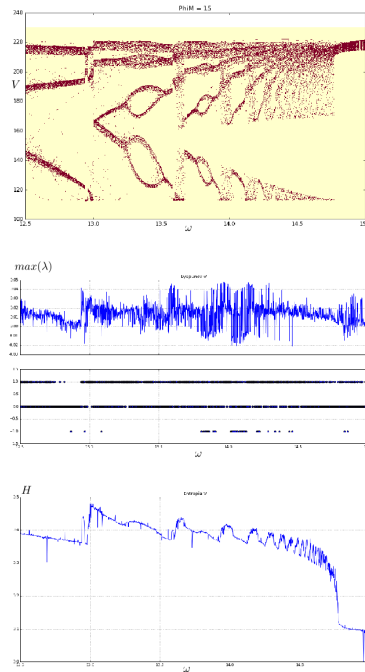


Figura 20: Diagrama de máximos, Lyapunov e entropía para $\phi_M=15$ e $\omega=(12.5,15)$

Podemos ver que, aínda que o expoñente de Lyapunov non é moi preciso para detectar as ventanas de periodicidade, a entropía está directamente relacionada con elas. Non só marca a diferenza entre as rexións caóticas e as ventanas de periodicidade senón que, dada a súa relación co número de órbitas, permítenos ver o tipo de transicións. E neste caso concreto podemos apreciar unha transición dende unha ventana de periodicidade dobre cara unha única a través do solapamento das diferentes ventanas de periodicidade. Este proceso tamén sucede para frecuencias baixas (entre as ventanas de periodo 2 e periodo 3 e , de maneira menos clara, entre a de periodo tres e periodo catro). O noso sistema parece ter unha estrutura recursiva no sentido de que as zonas con traxectoria única ($\omega=0$ e $\omega=$ frecuencia interna do sistema, $\simeq 20$) actúan como fronteira. A amplitude xera ventanas de periodicidade (a primeira que xorde é a de dobre periodo con $\omega \simeq 10$) que actúan como nova fronteira, xerando novas ventanas de periodicidade. Así , conforme aumentamos a amplitude vemos que entre zonas de traxectoria única aparece unha ventana de dobre periodicidade e, entre ésta e a traxectoria única máis cercana aparecen ventanas de periodo 3 e superiores. Este procedemento recursivo culmina cando $\omega \simeq 15$ cando nos aproximamos á traxectoria única, ou cando nos aproximamos a ventana de dobre periodo, pois se van acumulando ventanas de cada vez maior periodo.

4.1. Análise de transicións sobre diagramas de máximos

Diagramas de máximos como os expostos máis arriba pódennos facer pensar que poida que exista algunha relación entre parámetros tales como a anchura das ventanas de periodicidade (tal e como ocorre no caso do mapa logístico coas constantes de Feigenbaum). Éstas son aquelas que relacionan a anchura dunha ventana de periodicidade coa seguinte :

$$\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu_{n-2} - \mu_{n-1}}{\mu_{n-1} - \mu_n} \quad (31)$$

Trasladando ese concepto ó noso sistema, tratamos de buscar unha relación entre as anchuras das ventanas de periodicidade consecutivas. Para iso, empregamos un método de simulacións en cada vez máis pequenos rangos de frecuencia, e mediante contaxe de píxeles, tomamos o valor das anchuras sucesivas, sempre tendo en conta o error en píxeles. A difícil tarefa de medir a difusa ventana fai que as medidas máis baixas teñan un error relativo do 5 por cento, como se observa nas gráficas.

Sen embargo este cálculo faise complexo na transición mostrada anteriormente, dado que algunhas ventanas de periodicidade colapsan con outras, impedindo aínda máis, boas medidas. É por iso que tomamos como lugar de análise $\phi_M = 10$ pois nela, como podemos observar na imaxe, as ventanas de periodicidade da parte final da transición están espaciadas por zonas de caos :

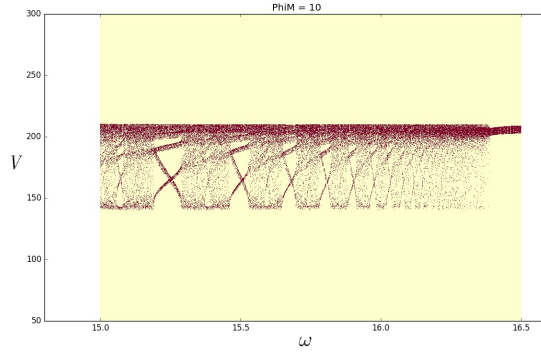


Figura 21: Parte final da transición cara a primeira órbita, con $\omega \in (15,16.5)$

Trátase dunha estrutura recursiva, pois como vemos máis abaixo, a topoloxía segue sendo a mesma a pesares de variar a anchura do rango de frecuencias nun factor 10:

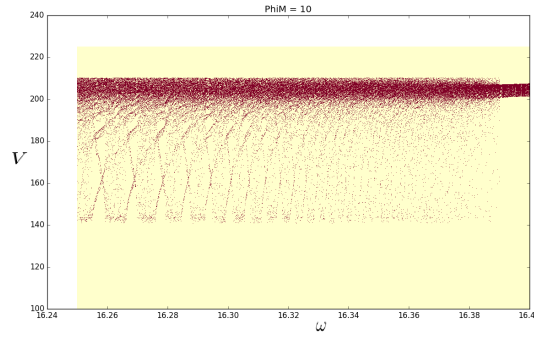


Figura 22: Parte final da transición cara a primeira órbita, con $\omega \in (16.25,16.4)$

A continuación presentamos os resultados da relación entre ventanas de periodicidade consecutivas. Cabe señalar que a relación nas ventanas de periodicidade comeza coa ventana de periodo 2 que se pode ver para $\phi_M = 10$ na figura 19 situada en torno a $\omega = 10$. Esa é a primeira ventana que se toma para o estudo ($n=1$); cubrindo o rango ata 16,25; como se apreciará na gráfica. Dado que aparecen ventanas secundarias de periodicidade máis elevada, o noso criterio é tomar a ventana que non deixa á dereita en frecuencias ningunha maior que ela.

Outro apunte interesante é que, mentres se pode distinguir (resolución en v utilizada en tódalas gráficas: 0,05), cada transición incorpora unha órbita máis que a anterior (Isto é, aparecen ventanas de periodicidade 2,3,4,5,6...). A continuación presentamos os nosos resultados: no eixo Y aparece a relación entre a ventana e a seguinte (α_n) mentres que no X aparece o n :

$$\alpha_n = \frac{\text{anchura ventana periodo } n + 1}{\text{anchura ventana periodo } n + 2}$$

Así obtemos a seguinte gráfica:

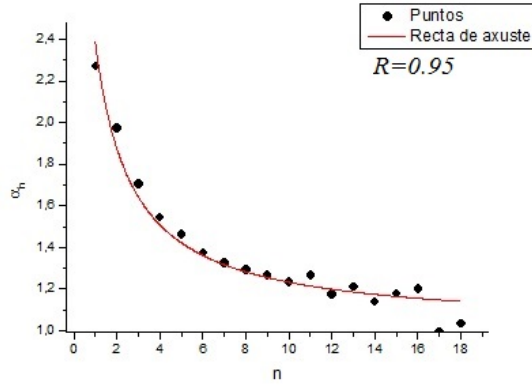


Figura 23: n vs α_n e o correspondente axuste

Os puntos converxen, como se pode ver na gráfica e , mediante un axuste racional á fórmula :

$$f(x) = c + \frac{b}{x + a}$$

Aplicamos este axuste para o cálculo de c , pois non é máis que o valor que toma α cando n tende ó infinito. Este valor para c é : 1.018 ± 0.025 , o que nos indica que o correspondente á primeira constante de Feigenbaum(α_∞) atoparase entre eses límites. E ata aquí a análise desta transición.

A continuación trataremos de relacionar a primeira variable estudada, a posición dos máximos da serie temporal das variables, máis directamente co espacio de fases do noso sistema.

Para facelo, lembremos que nos atopamos nun sistema multiórbita pero de comportamento acotado no espacio de fase, e polo tanto asociamos os nosos máximos da serie periódica con posibles órbitas do sistema. Para facer isto, estudamos a distribución de entropía para cada frecuencia e amplitude, pois como vimos anteriormente están directamente relacionados co número de órbitas do sistema . A partir de aquí, o que fixemos foi plotear estes resultados nun mapa de frecuencia (eixo vertical nun rango (0-20)) vs amplitude (eixo horizontal nun rango (0-50)) obtendo os resultados seguintes :

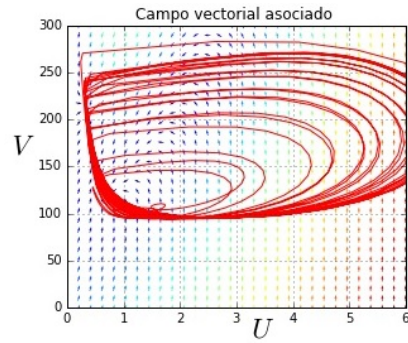


Figura 24: Exemplo de traxectoria caótica no noso sistema

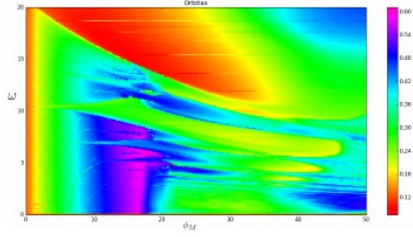


Figura 26: Plano de entropía

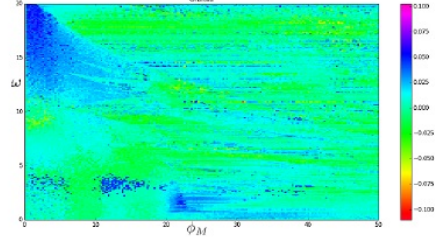


Figura 27: Plano de expoñente máximos de Lyapunov

Este mapa non recolle as pequenas variacións que si podemos observar nas gráficas dos máximos, pero nos permite observar as variacións na homoxeneidade segundo aumenta a amplitude, o que quere dicir que aparecen ventanas de periodicidade (a primeira aparece en torno a 10). De maneira similar, os datos recopilados dos expoñentes de Lyapunov foron recollidos nun mapa de frecuencia-amplitude.

Como vemos, non hai ningunha tendencia xeralizada, mais sí que podemos ver as cuestións que xa observáramos en primeira dimensión; en particular esa zona caótica en frecuencias próximas a 20 e amplitudes baixas.

Para repasar o comportamento a un rango máis elevado de frecuencias, presentamos estes mapas ampliados de expoñente máximo de Lyapunov e entropía. Neles podemos ver como é moi importante no sistema a frecuencia interna do sistema aparte da do forzamento, pois en torno a ela (e os seus múltiplos) acumúlanse as rexións caóticas e nela están as zonas de mínima entropía (isto é, as zonas de única traxectoria).

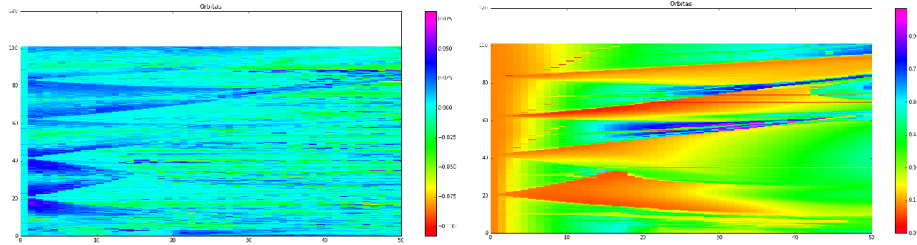


Figura 25: Diagrama de entropía e Lyapunov no rango de frecuencias (0-100) e amplitude (0-50)

Podemos concluír por tanto, que a relación entre a frecuencia interna do sistema e a frecuencia do forzamento externo é condicionante para a traxectoria única e mínimos de expoñente de Lyapunov.

5. Conclusións

Con respecto ó propio sistema, fixemos unha análise dos seus puntos fixos admitindo que a través da única superficie que caracteriza $traza = 0$ (cos tres parámetros positivos) orixina unha bifurcación de Hopf supercrítica. Ademais podemos afirmar o sistema de Lengyel-Epstein baixo un forzamento

sinusoidal presenta rexións caóticas. Este sistema ten dúas frecuencias características: a interna, correspondente a frecuencia sen forzamento e a do forzamento externo. Preto da coincidencia entre ambas (ou cos múltiplos destas) se producen transicións que, polo feito de presentar mínimos no expoñente máximo de Lyapunov e na entropía (o que se traduce en traxectorias únicas), demostran a existencia dunha resonancia no sistema entre ambas dúas frecuencias.

Por outra banda, os diagramas de máximos amosan a existencia dun caos intermitente, con ventanas de periodicidade. Estas presentan unha estrutura recursiva de complicado análise, mais para unha transición concreta, a que tende á traxectoria única con $\phi_M=10$ e $\omega=20$ presenta unha constante converxente no tamaño relativo entre ventanas de periodicidade consecutivas.

Referencias

- [1] STEVEN H. STROGATZ, (1994), *Non Linear Dynamics and Chaos*, Reading, Massachussets, Perseus Books Publishing
- [2] SUSANNA C. MANRUBIA e RICARD SOLÉ, (1993), *Orden y Caos en Sistemas Complejos*, Barcelona, Universidad Politécnica de Catalunya
- [3] CHEN, S.-G. AND HAO, B.-L. AND WANG, G.-R., (1984), *Intermittent chaos in the forced Brusselator*, Acta Physica Sinica, Harvard University
- [4] DANIEL CUIÑAS VÁZQUEZ, (2011), *Formation of Spatiotemporal Structures in Reaction-Difussion Systems*, Universidade de Santiago de Compostela
- [5] A.P. MUÑUZURI, M. DOLNIK, A.M. ZHABOTINSKY e I.R. EPSTEIN (2011), *Control of the chlorine dioxide-iodine-malonic acid oscillating reaction by illumination*, Journal of the American Chemical Society 121
- [6] A.K. HORVÁTH, A.P. MUÑUZURI, M. DOLNIK, A.M. ZHABOTINSKY e I.R. EPSTEIN (1999), *Control of the Turing structures by periodic illumination*, Physical Review Letters 83