OSCILACIONES CAOTICAS SOFTWARE LIBRE

Ricardo E. Adra[1] , Graciela C. Pedrosa[2]
Grupo de Investigación PROIMES
Facultad Regional Tucumán, Universidad Tecnológica Nacional, Argentina
radra@arnet.com.ar, **gpedrosa@herrera.unt.edu.ar**

Área temática: Aplicación de la Matemática
Palabras Claves : oscilaciones caóticas, oscilaciones extrañas ,software libre, GNU,.

RESUMEN

En esta oportunidad se experimentaron en el campo de las ecuaciones diferenciales, también se estudio, reactores caóticos con gráficos extraños y se agregaron los gráficos para su análisis.

El software con licencia libre, permite disponer de varias herramientas a la vez, complementarias o capaces de interactuar entre sí. El profesor cuenta con ventajas adicionales a la hora de la planificación y el desarrollo de la asignatura, derivadas de tener la garantía de que un programa con software libre podrá ser instalado y usado por los alumnos en su propio domicilio, y de que esta herramienta podrá ser instalada y usada en tantos puestos como sea necesario. El software libre ofrece la interesante posibilidad de que los alumnos puedan acceder al código fuente, a la forma en que está programada la herramienta que están utilizando en clase.

1. INTRODUCCION

Se experimentaron con un modelo de reactores químicos y se plantearon las ecuaciones diferenciales . Se trabajó con las ecuaciones de tasa de cambio y los datos iniciales en un programa de solución numérica y se observarán los resultados. Se procedió a trazar las curvas componente x e y. Se ilustran las oscilaciones inusuales o inesperadas en las concentraciones en los intermediarios. Estas oscilaciones se generan internamente y no se deben a oscilaciones en los factores externos, como temperatura o presión.

Para tal fin se empleó programas de solución numérica con objeto de observar cómo cambian las soluciones cuando se modifican los datos iniciales y los coeficientes de las ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO).

2. FUNDAMENTACION

Se muestra que al elegir de manera apropiada los intervalos para las variables pueden crearse gráficas curiosas e inusuales. Este aspecto de la representación de gráficas científicas y matemáticas es de suma importancia, ya que sobre todo se precisa que las gráficas den información del comportamiento de las soluciones. Se empleará QTOCTAVE , software libre sobre plataforma también libre Linux.

Los sistemas de ecuaciones diferenciales independiente del modelo en cuestión, no tiene mayor relevancia, ya que planteado el problema se resuelve como cualquier otro sistema dinámico de ecuaciones diferenciales.

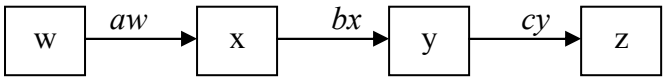
3. DESARROLLO

El estudio de oscilaciones extrañas en un reactor químico empieza con una concentración inicial positiva para un producto y las concentraciones iniciales cero para ciertas especies, se tiene un problema de valor inicial no lineal.

Se supone que el tiempo y las concentraciones han sido modificadas a cantidades adimensionales y que los valores de inicio y las tasas constantes conocidas.

Supóngase que un reactivo se transforma en una reacción química en especies intermedias y éstas en un producto final. Es posible adaptar el concepto de modelo comportamental y la ley de equilibrio para modelar este proceso. Las letras mayúsculas sirven para indicar las distintas

especies y las minúsculas para las concentraciones correspondientes. En la reacción representada a continuación, el compuesto W se convierte en el intermediario X, *W* -> X, con una tasa de *aw.* Conforme avanza la reacción, X se convierte en Y, X -> *Y,* con una tasa *bx,* y *Y* se convierte en el producto final *Z, Y* —> Z, con una tasa *cy.* Por tanto, utilicemos un modelo comportamental para describir estas reacciones y escribamos la tasa de cada reacción sobre las flechas.



En virtud de que la tasa de transformación de cada compuesto en otro es proporcional a su concentración, las reacciones son de primer orden, de modo que se obtiene un conjunto de cuatro ecuaciones lineales de tasa de cambio en las concentraciones:

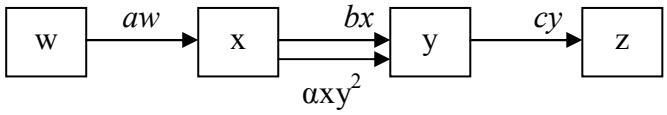
$$w' = -aw, \quad x' = aw - bx, \quad y' = bx - cy, \quad z' = cy \quad (1)$$

Obsérvese que el sistema lineal (1) es una cascada lineal que puede resolverse de arriba abajo. En particular, es posible empezar con una concentración w_0 de cada reactivo y obtener $w(t) = w_0 e^{-at.}$ Al sustituir *w* por esta expresión en la ecuación lineal de tasa de cambio para x y hacer que x(0) = 0, por ejemplo, podría resolverse la segunda EDO de (1) para x(t), y así sucesivamente, paso por paso. En el margen se muestran las curvas características para x(t) y y(t): estas concentraciones intermedias alcanzan valores máximos y luego disminuyen de forma exponencial.
Desde hace muchos años han llamado mucho la atención una clase particular de reacciones no lineales denominadas reacciones *autocatalíticas.* En una reacción de este tipo, una especie química promueve su propia producción. En seguida se ofrece un ejemplo: dos unidades de *Y* reaccionan con una unidad de X para producir tres unidades de *Y.* una ganancia neta de una unidad de *Y.*

En una reacción autocatalítica la tasa de transformación de una especie química en otra no sigue una ley de tasa de cambio de primer orden. A fin de modelar las reacciones que no pudieran ser de primer orden es necesario introducir un principio de modelación más general denominado ley química de acción de masas.

> Ley química de acción de masas. Si *n* moléculas de reactivo $X_{1,...,}$Xn,, reaccionan para producir m moléculas de producto *P1,...,Pm* en una etapa de una reacción, entonces la tasa de disminución de la concentración de cada reactivo y la tasa de aumento de la concentración de cada producto es proporcional al producto de las concentraciones de los n reactivos Esta es la *ley química de acción de masas***.**

Apliquemos este nuevo principio a la reacción modelada por el sistema (1), pero con el paso de reacción
X ->*Y* aumentado por un paso autocatalítico *X* + 2 *Y* ->3 *Y.*
Por la ley de química de acción de masas la tasa de disminución de X en el paso autocatalítico es αxy^2 (α es una tasa constante positiva**),** en tanto que la tasa de aumento de *Y* es $3\alpha xy^2 - 2\alpha xy^2 = \alpha xy^2$. Estas tasas se muestran en el modelo comportamental aumentado



Si empezamos con una concentración inicial positiva de W y las concentraciones iniciales cero para las cuatro especies, se tiene el problema de valor inicial no lineal:

$$
\begin{aligned}
w' &= -aw, & w(0) &= w_0 \\
x' &= aw - bx - \alpha xy^2 & x(0) &= 0 \\
y' &= bx - cy + \alpha xy^2 & y(0) &= 0 \\
z' &= cy & z(0) &= 0
\end{aligned}
\qquad (2)
$$

$$x' = e^{-0.002t-0.08x-xy^2}, x(0) = 0$$

$$y' = 0.08x - y + xy^2, y(0) = 0$$

Requiere de la función anterior, que para programar en OCTAVE , se la denominó fborre.m

```
function f=fborre(t,x)
f=[exp(-0.002*x(3))-0.08*x(1)-x(1)*x(2)^2;0.08*x(1)-x(2)+ x(1)*x(2)^2;x(2)];
```

Para invocar esta función debemos tener los siguientes parámetros en el programa:

```
tspan=0 :0.1:1000;
x0=[0 0 0];
[t,x]=eulerbis7('fborre',tspan,x0);
plot3(x(:,1),x(:,2),x(:,3))
% Luego plot(t,x(:,1)) y plot(t,x(:,2))
```

Se desarrollo un programa especial para sistemas de ecuaciones basado en Euler y se lo denominó eulerbis7

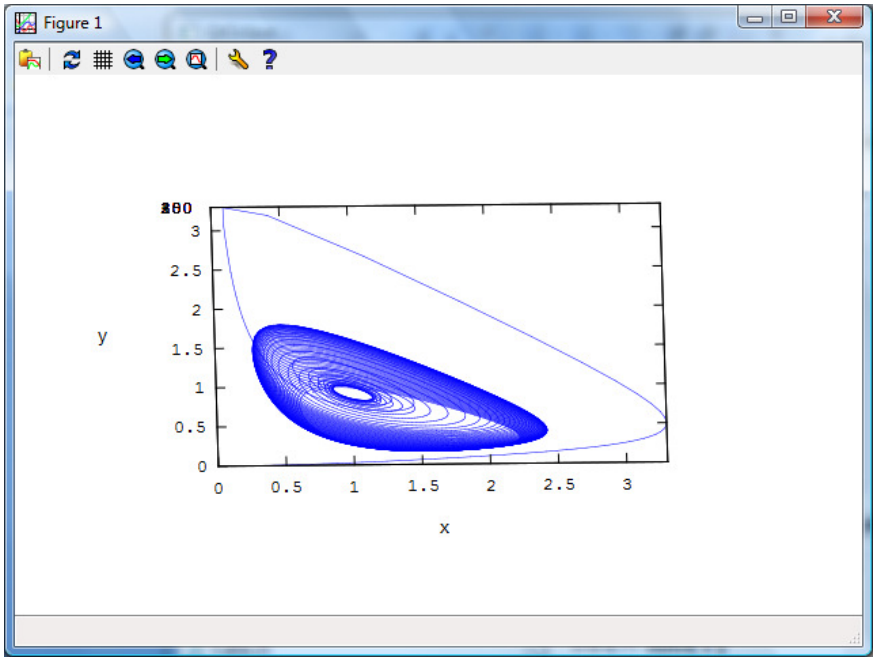


Figura 1

En la figura 1 se observa la órbita de la interacción autocatalítica entre los intermediarios [PVI(4)]. En la línea de comando se escribe ahora : >> plot(t,x(:,1))

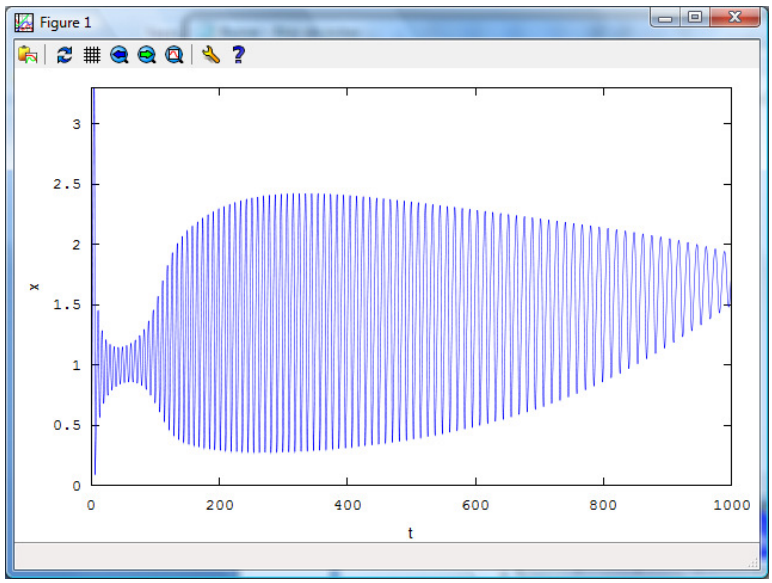


Figura 2

En la línea de comando se escribe ahora : >> plot(t,x(:,2))

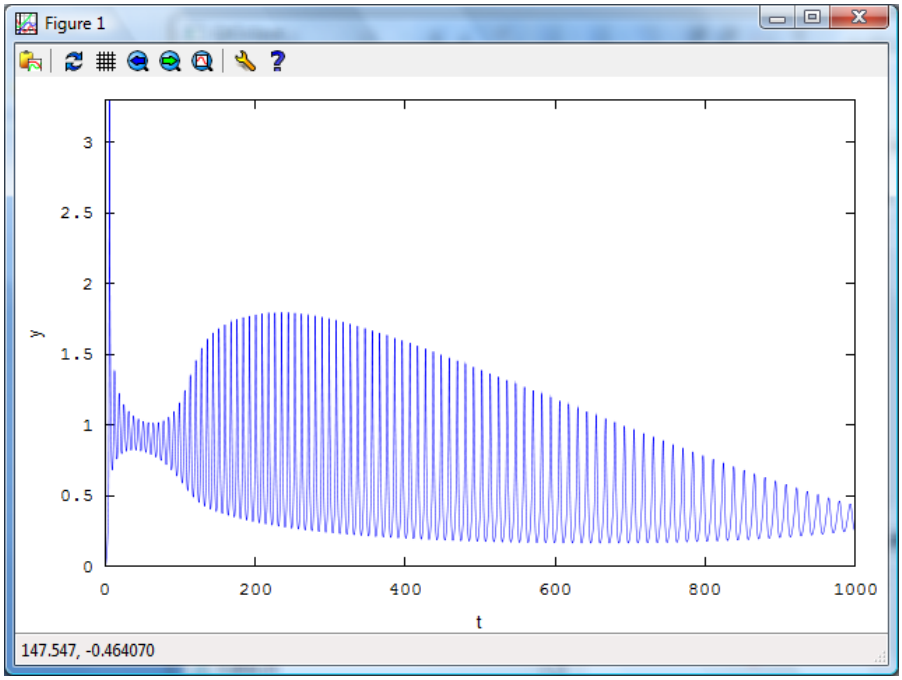


Figura 3

En la figura 3 se puede observar que las las oscilaciones autocatalíticas de las concentraciones se activan y luego se desactivan [PVI (4)].

Supóngase que el tiempo y las concentraciones han sido modificadas a cantidades adimensionales y que los valores de ω_0 y de las tasas constantes y α están dadas por

$$\omega_0=500,\ a=0.002,\ b=0.08,\ c=1,\ \alpha=1 \qquad (3)$$

Introduzcamos ahora estas ecuaciones de tasa de cambio y los datos iniciales en un programa de solución numérica y veamos qué resulta. Trazaremos las curvas componente x e y. En la figura 2 y 3 se ilustran las oscilaciones inusuales o inesperadas en las concentraciones en los intermediarios. Estas oscilaciones se generan internamente y no se deben a oscilaciones en los factores externos, como temperatura o presión. Obsérvese que tras algunas variaciones iniciales las concentraciones se comportan casi de manera normal hasta alrededor de t = 170 cuando empiezan las oscilaciones violentas en las concentraciones. Las oscilaciones se

detienen cerca de t = 600 y las concentraciones de los intermediarios declinan en forma gradual.
En el siguiente ejemplo se tratará parte del modelo autocatalítico como un sistema aislado de dos EDO.
Ejemplo. Autocatalizador bidimensional
Se sabe por (3) y el primer PVI en (2) que $w(t) = w_0 e^{-0.002t} = 500e^{-0.002t}$, por lo que la segunda y tercera ecuaciones de tasa de cambio en el PVI (2) se convierten en

$$\begin{aligned} x' &= 0.002w - 0.08x - xy^2 = e^{-0.002t} - 0.08x - xy^2, x(0) = 0 \\ y' &= 0.08x - y + xy^2, y(0) = 0 \end{aligned} \qquad (4)$$

Es posible tratar el PVI (4) numéricamente, y eso es justo lo que haremos. En la figura 1 se ilustran las curvas componentes y en la 2 la órbita correspondiente en el plano xy. Nótese la apariencia de la órbita cuando sale de la maraña de las oscilaciones y empieza a volver a x = 0, y = 0 a medida que la reacción se aproxima a su fin. Por último, en la figura 4 se muestra la curva tiempo-estado para 7<= t <= 700. La figura de la copa del principio del capítulo es parte de esta figura limitada al intervalo de tiempo 7 <= t <= 377.

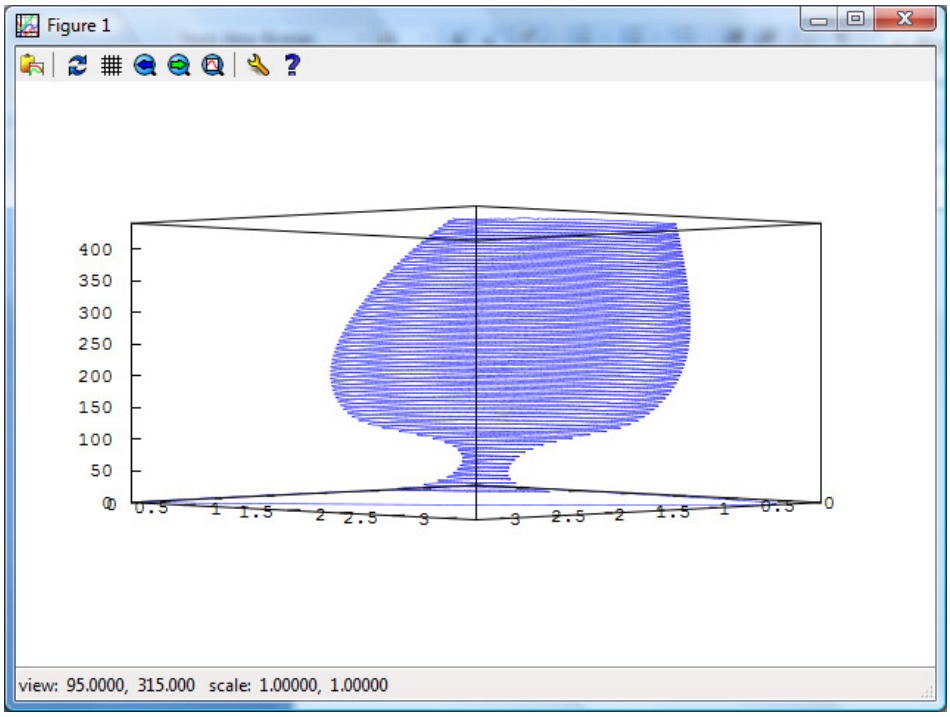


Figura 4 Curva tiempo-estado para el PVI (4)

Las investigaciones contemporáneas sugiere que las oscilaciones misteriosas y los cambios de comportamiento de los sistemas físicos pueden explicarse con frecuencia en términos de una bifurcación. Al parecer, las oscilaciones de las concentraciones en un reactor químico, los ciclos de vida de una célula y los ciclos límites de Van de Pol en un circuito eléctrico se disparan cuando cambia un parámetro de un sistema y ocurre una bifurcación de Hopt o de algún otro tipo.
Verificar las condiciones de una bifurcación no siempre es sencillo. Una vez que se ha identificado un posible parámetro de bifurcación en el sistema, es posible usar gráficas de computadoras para desplegar pruebas visuales de que ha ocurrido una bifurcación.

En la figura 4 se muestra que al elegir de manera apropiada los intervalos para las variables pueden crearse gráficas curiosas e inusuales que, por decirlo así, cuentan una historia. Este aspecto de la representación de gráficas científicas y matemáticas es de suma importancia, ya que sobre todo se precisa que las gráficas den información del comportamiento de las soluciones. Si la representación gráfica es mala, entonces no surgirá la información.

4. CONCLUSIONES

Se muestra que al elegir de manera apropiada los intervalos para las variables pueden crearse gráficas curiosas e inusuales. Este aspecto de la representación de gráficas científicas y matemáticas es de suma importancia, ya que sobre todo se precisa que las gráficas den información del comportamiento de las soluciones. Se empleó QTOCTAVE , software libre sobre plataforma también libre Linux.

5. **RREFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS**

Robert Borrelli, Courtney Coleman, "Ecuaciones Diferenciales" Oxford University Press, 2002

Ricardo Adra, "Transformada de Fourier en Máxima" , Laboratorio Proimes, FRT-UTN. Tucumán, Octubre 2007.

Ricardo Adra, Graciela Pedrosa , "Transferencia de calor en Octave", Laboratorio Proimes, FRT-UTN. San Miguel de Tucumán, Junio 2006.

Adra, R. E., "Estudio de Superficie Software Libre", , Laboratorio Proimes.2008

Adra, R. E., Pedrosa G. "Oscilaciones Caóticas en reactor químico, Software Libre" , Mecom2010.

M. Golubitsky,M.Dellnitz, "Algebra Lineal y Ecuaciones diferenciales", Thomson Learning, 2001.

Dennis G. Zill, "Ecuaciones Diferenciales con aplicaciones de Modelado", Thomson Learning, 2002.

Henry Edwards,David Penney, "Ecuaciones Diferenciales", Prentice Hall, 2001.