

Tesis de Licenciatura

**Estudio dinámico de reacciones
químicas oscilatorias: control
usando fuerzas externas periódicas**

Malena Inés Español

5 de agosto de 2003

Director: Gabriel Acosta.

Departamento de Matemática
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

Agradecimientos

Parte de este trabajo ha sido realizado en el Centro de Biodinámica y el Departamento de Matemática de la Universidad de Boston (Center for Biodynamics and Department of Mathematics, Boston University). Agradezco a su codirectora Dra. Nancy Kopell y otros miembros por su ayuda y colaboración en la realización de este trabajo. En especial a Horacio Rotstein a quien estoy profundamente agradecida por su gran predisposición y por compartir tantas ideas que han hecho posible este trabajo.

Agradezco a Gabriel Acosta, mi director de tesis, por su constante apoyo y guía.

A Gabriela Jeronimo, que tuvo la infinita paciencia de leer la tesis y darme sugerencias.

A mis amigos, por su grata compañía.

A Agustín, mi esposo, por todo.

Resumen

El propósito de este trabajo consistió en estudiar ciertos modelos simplificados que representan reacciones químicas oscilatorias, que es un tema en estado de desarrollo. El estudio de modelos simplificados aparece debido a la gran cantidad de variables involucradas y a las dificultades de modelización que esto acarrea. Por su parte, el estudio teórico y numérico de dichos modelos suele brindar información relevante a la hora de realizar predicciones y/o correcciones sobre los mismos.

La reacción de Belousov-Zhabotinsky ha despertado gran interés convirtiéndose en el prototipo de reacción química oscilante. Con el propósito de explicar los fenómenos involucrados en dicha reacción se han utilizado diversas técnicas relacionadas con sistemas dinámicos involucrando ecuaciones ordinarias, como así también ecuaciones en derivadas parciales que contemplan mecanismos difusivos que explicarían ciertos fenómenos para los que todavía se desconoce su causa.

Nosotros estudiamos algunas de las técnicas referidas para ecuaciones ordinarias, y realizamos diversas simulaciones numéricas relacionadas con el modelo conocido como FitzHugh-Nagumo modificado (que adaptamos apropiadamente), introduciendo un término forzante sugerido por experimentos químicos realizados. En este sentido, nuestro interés radicó en reproducir y/o prever aspectos de la dinámica involucrados en la reacción.

Índice General

1	Introducción	1
2	Reacción Belousov-Zhabotinsky y sus modelos matemáticos	4
2.1	El Oregonator	4
2.2	El modelo FitzHugh-Nagumo modificado	6
3	Sistemas dinámicos: definiciones y conceptos básicos	6
3.1	Sistemas autónomos en el plano	6
3.2	Estudio geométrico	8
3.3	Linealización	10
3.4	Estructuras que aparecen en el plano: ciclos límites	12
3.5	Teorema de Lienard	15
4	Oscilaciones de relajación	19
4.1	Ecuación de Van der Pol	20
4.2	Problemas de perturbación singular	22
4.3	Ejemplos	25
5	El fenómeno Canard	28
6	Métodos numéricos	30
6.1	Región de estabilidad absoluta	31
6.2	Ecuaciones rígidas	32
6.3	El CVODE	32
7	Simulaciones	34
7.1	Oscilador autónomo	34
7.2	Oscilador no autónomo	40
8	Conclusiones	49

1 Introducción

El campo de la química no lineal ha crecido rápidamente en los últimos años [7], [8], [10], [14]. Si bien la mayoría de los sistemas de interés científico son no lineales, en muchas ocasiones los científicos han encontrado práctico trabajar bajo condiciones tales que los sistemas estudiados se comporten linealmente. El estudio de sistemas lineales es tratable matemáticamente, pero los fenómenos generados por éstos no presentan desde el punto de vista dinámico la riqueza que se asemeja a la que se puede encontrar en sistemas no lineales. En el caso particular de la química, la no linealidad aparece como consecuencia de la ley de acción de masas que se aplica para construir ecuaciones diferenciales que describen la evolución con respecto al tiempo de las concentraciones de los compuestos químicos involucrados en la reacción química bajo consideración.

Consideremos por ejemplo el caso de la siguiente reacción química esquemática [22]



La ley de acción de masas establece en este caso que en cada tiempo t la concentración de A decrece en forma proporcional a su magnitud y a la concentración de B presente en dicho instante. Matemáticamente esto se expresa como

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B], \quad (2)$$

donde $k > 0$ es la constante de reacción. Para cada instante t , llamemos $x(t) = [A]$ e $y(t) = [B]$. La ecuación (1) establece que por cada molécula de A que reacciona, se necesitan 2 moléculas de B para producir 3 moléculas de C. Es decir que, en cada instante t

$$x - x(0) = \frac{1}{2}[y - y(0)]. \quad (3)$$

Llamando $a = y(0) - 2x(0)$ se obtiene una ecuación no lineal que describe la evolución con el tiempo de la concentración de A:

$$\frac{dx}{dt} = -kxy = -kx(a + 2x). \quad (4)$$

Esta ecuación puede ser integrada, obteniéndose

$$x(t) = \frac{x(0)ae^{-akt}}{a + 2x(0)(1 - e^{-akt})}. \quad (5)$$

Si B está inicialmente en exceso, entonces $a > 0$ y $x(t)$ tiende a cero. Es decir A reacciona totalmente. En cambio, si A está en exceso inicialmente, $a < 0$ y $x(t)$ tiende a $x(0) - \frac{y(0)}{2}$, de acuerdo a la estequiometría de la reacción. En este caso B ha reaccionado totalmente

para maximizar la producción de C. Como vemos, hay dos estados de equilibrio posibles y, dependiendo de las condiciones iniciales, el sistema converge a uno u otro. En un sistema lineal es posible encontrar a lo sumo un solo punto de equilibrio. Entonces queda claro la importancia de un modelo con un término no lineal.

En términos generales, si un sistema está cercano al equilibrio, los efectos no lineales pueden despreciarse y la dinámica de la reacción química tiende a estabilizarse. En cambio, si el sistema está lejos del punto de equilibrio aparece una muy rica variedad de estructuras químicas. Entre ellas, oscilaciones químicas, es decir, la variación periódica o quasi-periódica de las concentraciones de una o más de las especies involucradas en una reacción. Las oscilaciones químicas pueden considerarse como el prototipo dinámico de la química no lineal [7], [8], [10], [14], [22] y constituyen el objeto de estudio en este trabajo.

Hasta principios de la década del '70 era comúnmente aceptado (más una creencia que una actitud científica) que las oscilaciones químicas eran desde un punto de vista teórico imposibles ya que violaban la Segunda Ley de la Termodinámica. Esto no obstante el hecho que algunos tipos de oscilaciones electroquímicas ya habían sido reportados durante el siglo XIX (ver [22]). La más conocida y estudiada de las reacciones químicas oscilatorias es la reacción de Belousov-Zhabotinsky (BZ) que involucra bromato, ácido cítrico e iones Cerio positivamente cargados que pueden aparecer con valencias distintas, Ce^{4+} y Ce^{3+} . En presencia de Ce^{4+} la solución presenta un color amarillento, mientras que en presencia de Ce^{3+} la solución es incolora. Belousov encontró que la solución, en lugar de perder el color amarillento (lo cual implica que la concentración de Ce^{4+} converge a un estado de equilibrio en el cual Ce^{4+} está ausente) recobraba éste, luego de un intervalo de tiempo (aproximadamente 1 minuto) en el cual la solución se presentaba como incolora. Dado el escepticismo reinante, el trabajo de Belousov solo pudo ser publicado en los proceedings de una conferencia que no requerían referato [2]. Años más tarde, Zhabotinsky prosiguió con la investigación de reacciones químicas oscilatorias estudiando variaciones de la reacción estudiada por Belousov, teniendo más éxito en la difusión de sus resultados. Descripciones del trabajo de Belousov y Zhabotinsky, así como de trabajos posteriores, pueden encontrarse en [7], [8], [10], [14], [22].

El mecanismo de la reacción de BZ fue dilucidado a principios de los '70 por Field, Körös y Noyes. Esto constituyó el inicio del trabajo teórico en torno de la reacción de BZ y otras reacciones químicas oscilatorias, permitiendo la construcción de modelos matemáticos que presentan oscilaciones químicas. Uno de tales modelos es el Oregonator que describimos en la Sección 2.

En la reacción de BZ se han encontrado otros comportamientos dinámicos. Entre ellos biestabilidad (coexistencia de dos estados de equilibrio), multiestabilidad (coexistencia de más de dos estados de equilibrio), biritmicidad (coexistencia de dos ciclos límites) y caos.

En el caso de la biestabilidad el sistema exhibe histéresis: cuando un parámetro de control se modifica lentamente, la composición del estado de equilibrio cambia en forma continua hasta que se transforma en inestable y se produce un salto hacia el otro estado de equilibrio con distinta composición. Cuando el parámetro en cuestión cambia en la dirección opuesta, la composición del estado de equilibrio varía nuevamente en forma continua hasta llegar a un segundo punto de transición en el cual el sistema salta hacia el primer estado de equilibrio [22]. En un sistema químico abierto, caos puede ser definido como la variación aperiódica de la composición química del reactor, determinada por la dinámica intrínseca del sistema y dependiente en forma sensible de las condiciones iniciales (la evolución de dos sistemas caóticos cuyas condiciones iniciales son infinitesimalmente diferentes evolucionan de manera tal que ambos divergen exponencialmente). Estos comportamientos dinámicos son homogéneos, es decir, todos los puntos de un reactor exhiben la misma dinámica.

Las reacciones químicas también exhiben estructuras espaciales más complejas en las cuales distintos puntos del reactor pueden comportarse en forma diferente. En particular, ondas viajeras que se propagan con velocidad constante, espirales, estructuras de Turing, etc. Este tipo de estructuras involucran difusión, es decir el acoplamiento local de los distintos puntos del reactor.

En los últimos años nuevas estructuras han sido descubiertas en la reacción BZ al someter al reactor químico a fuerzas externas. Estas fuerzas externas pueden ser función del promedio de la concentración de alguno de los reactantes, en cuyo caso se trata de acoplamiento global [20], [21], [25], [26], [28], o puede ser independiente de las concentraciones de los reactantes [27]. En este trabajo nos referiremos a este último caso como forzamiento. El tipo de estructuras encontradas han sido denominadas clusters. Un cluster es un conjunto de puntos del reactor que oscilan con la misma amplitud en forma sincronizada [20]. Dos clusters distintos pueden oscilar con amplitudes comparables y produciendo “picos” en distintos tiempos y en forma regular, es decir, la diferencia entre dos picos es constante y predecible. Nos referiremos a estos clusters como clusters de fase. Si las oscilaciones no son regulares nos referiremos a los clusters como clusters de fases no regulares. También puede ocurrir que dos clusters oscilen con amplitudes tales que su cociente es muy diferente a 1. En este caso se denominan clusters localizados. En el caso en el que además de la fase, la amplitud de los clusters es irregular, los llamaremos clusters irregulares.

Clusters localizados, de fases e irregulares han sido obtenidos experimentalmente en la reacción de BZ [25], [26]. Estos resultados han sido reproducidos en modelos matemáticos del tipo Oregonator con acoplamiento global [26], [28]. El mecanismo por el cual se producen clusters localizados ha sido explicado para modelos simplificados (modelo de FitzHugh-Nagumo modificado [20]) reminiscentes cualitativamente de modelos del tipo Oregonator con acoplamiento global [20], y para modelos de tipo Oregonator propiamente dicho con acoplamiento global [22]. En ambos casos se ha encontrado que este mecanismo se basa en el fenómeno Canard, una explosión de la amplitud del ciclo límite al variar continuamente un parámetro de control del sistema.

En este trabajo nos concentraremos en la reacción de BZ fotosensitiva, sometida a iluminación periódica [23]. Nuestro objetivo es comenzar a entender el mecanismo dinámico por el cual se generan los diferentes tipos de clusters encontrados experimentalmente.

En la Sección 2 explicamos el modelo del Oregonator y describimos el modelo de FHN modificado.

En la Sección 3 presentamos el marco teórico de sistemas dinámicos necesario para la comprensión del fenómeno que estamos estudiando.

En la Sección 4 explicamos algunas características de los osciladores de relajación que han permitido clarificar algunos aspectos relacionados con el tipo de oscilaciones que presenta la reacción de BZ.

Un tipo de fenómeno observado en la reacción de BZ es la explosión de la amplitud de las oscilaciones al cambiar alguna condición del sistema. Desde el punto de vista matemático, estas explosiones se presentan al cambiar algún parámetro del modelo [20], [21]. El fenómeno ha sido denominado Canard [6] y su descripción aparece en la Sección 5.

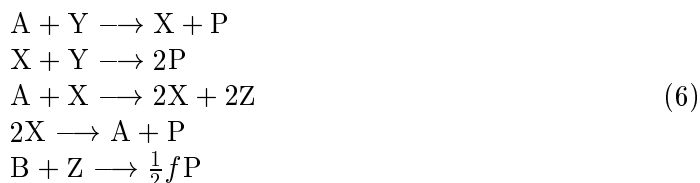
En la Sección 6 describimos los métodos numéricos utilizados en nuestras simulaciones, presentadas en la Sección 7.

2 Reacción Belousov-Zhabotinsky y sus modelos matemáticos

La reacción Belousov-Zhabotinsky (BZ) es el fenómeno prototípico de la dinámica química no lineal. Field, Körös y Noyes propusieron un mecanismo detallado para la reacción BZ que involucra muchos reactivos y reacciones que hacen que el modelo tenga un uso analítico limitado debido a su complejidad. Por esta razón se han desarrollado modelos simplificados que mantienen las principales características dinámicas del original. Uno de dichos modelos es conocido como el Oregonator.

2.1 El Oregonator

La secuencia de las reacciones básicas del modelo Oregonator puede ser escrita como:



donde $A = \text{BrO}_3^-$; $B =$ especie orgánica tal como el ácido malónico y el ácido bromo-malónico; $P = \text{HOBr}$; $X = \text{HBrO}_2$; $Y = \text{Br}^-$; $Z =$ forma oxidada del catalizador; y f es un factor estequiométrico que sirve como un parámetro ajustable. En lo que sigue,

suponemos que los reactantes A y B se mantienen a concentraciones fijas y concentramos nuestro análisis en X, Y y Z. Las correspondientes ecuaciones de cambio son:

$$\begin{aligned}\frac{d[X]}{dt} &= k_3[A][Y] - k_2[X][Y] + k_5[A][X] - 2k_4[X]^2 \\ \frac{d[Y]}{dt} &= -k_3[A][Y] - k_2[X][Y] + \frac{1}{2}fk_c[B][Z] \\ \frac{d[Z]}{dt} &= 2k_5[A][X] - k_c[B][Z]\end{aligned}\tag{7}$$

Donde k_i , $i = 2, \dots, 5$ y k_c representan las constantes de reacción respectivas. El análisis se simplifica bastante transformando estas ecuaciones a una forma adimensionalizada. Los factores apropiados para la conversión son:

$$x \equiv \frac{2k_4[X]}{k_5[A]} \quad y \equiv \frac{k_2[Y]}{k_5[A]} \quad z \equiv \frac{k_c k_4[B][Z]}{(k_5[A])^2} \quad t \equiv k_c[B]T.\tag{8}$$

Introduciendo algunos parámetros adimensionados, obtenemos una forma simple de la ecuación cinética:

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{qy - xy - x(1-x)}{\varepsilon} \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{-qy - xy + fz}{\varepsilon'} \\ \frac{dz}{dt} &= x - z,\end{aligned}\tag{9}$$

donde los valores típicos para $\varepsilon \approx 10^{-2}$, $\varepsilon' \approx 10^{-5}$ y $q \approx 10^{-4}$.

Como ε' es mucho más chico que ε , uno puede considerar que la concentración del ion bromato está en equilibrio y obtener $y = \frac{fz}{q+x}$. Sustituyendo este resultado en el sistema (9), nos quedamos con un sistema que nos da la tasa de cambio de la concentración del ácido brómico y de la forma oxidada del catalizador:

$$\begin{aligned}\varepsilon \frac{dx}{dt} &= x(1-x) + f \frac{q-x}{q+x} z \\ \frac{dz}{dt} &= x - z.\end{aligned}\tag{10}$$

Este último es el modelo reducido del Oregonator en su forma típica. En [27], se estudia la reacción BZ sometida a una fuente de iluminación periódica. Este proceso se modela utilizando las ecuaciones (9) y añadiendo un término de forzamiento externo en el miembro derecho. Esto implica la aparición de un forzamiento externo en el miembro derecho de la primera ecuación del modelo reducido (10). Observemos, para más adelante, que en particular el forzamiento aparece como parte de un término no lineal.

El sistema (10) fue tomado como referencia en [20] para introducir el modelo de FitzHugh-Nagumo modificado que presentaremos a continuación.

2.2 El modelo FitzHugh-Nagumo modificado

En forma general, el modelo FitzHugh-Nagumo modificado se escribe

$$\begin{aligned}\dot{v} &= f(v) - w \\ \dot{w} &= \epsilon[pv - o - w]\end{aligned}\tag{11}$$

con

$$f(v) = \begin{cases} f_{cub}(v_m) \frac{v^2}{v_m^2} + k, & v \leq v_m \\ f_{cub}(v) + k, & v > v_m, \end{cases}$$

donde

$$f_{cub}(v) = -hv^3 + av^2 - bv + c,$$

v_m es el mínimo de la función f_{cub} y p, o, k, h, a, b y c son constantes no negativas.

Este es el modelo que estudiaremos en este trabajo. Más adelante nos referiremos a aspectos cualitativos de su dinámica, y realizaremos simulaciones numéricas con forzamiento externo en el espíritu mencionado en la sección previa. Esto es, utilizando un forzamiento periódico en la primer ecuación de (11) que es la que contiene la parte no lineal del sistema. El modelo (11) tiene características similares a las del Oregonator, y además, como veremos, a una gran variedad de modelos pertenecientes a otras áreas científicas.

3 Sistemas dinámicos: definiciones y conceptos básicos

El estudio de los sistemas dinámicos es de interés en todas las ramas de las ciencias. Los sistemas dinámicos representan fenómenos y procesos que cambian con el tiempo y pueden ser modelados matemáticamente en términos de ecuaciones diferenciales y/o la iteración de mapeos. Las ecuaciones diferenciales describen la evolución de sistemas en tiempo continuo, a diferencia de la iteración de mapeos o ecuaciones en diferencias finitas que modelan sistemas que evolucionan en tiempo discreto. En las páginas que siguen nos vamos a dedicar a las ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE's), es decir, las que involucran derivadas con respecto a una sola variable independiente: en nuestro caso, t , el tiempo.

3.1 Sistemas autónomos en el plano

En esta sección estudiaremos sistemas dinámicos bidimensionales (es decir, en el plano) con el objeto de introducir los conceptos básicos que utilizaremos más adelante en nuestro estudio.

Consideremos un subconjunto abierto $\Delta \subset \mathbb{R}^2$. Recordemos que un campo vectorial de clase C^1 en Δ es una aplicación $\mathbf{F} : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^2$ de clase C^1 . También escribiremos

$\mathbf{F} = (f_1, f_2)$, con $f_i : \Delta \rightarrow \mathbb{R}$; $(x_1, x_2) \mapsto f_i(x_1, x_2)$ de clase C^1 para $i = 1, 2$. Vamos a estudiar sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma

$$\begin{cases} \dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2) \end{cases} \quad (12)$$

donde las $x_i : I \rightarrow \mathbb{R}$; $i = 1, 2$, son funciones C^1 .

Este tipo de sistemas se denominan autónomos del plano debido a que las f_i no dependen explícitamente de t , y sus soluciones pueden interpretarse como curvas en el plano. Las x_i representan cantidades (voltaje en un circuito eléctrico, concentraciones de reactivos, poblaciones de diferentes especies, etc.) mensurables o no, necesarias para la descripción del problema (físico, químico o biológico) considerado. Las funciones f_i reflejan el conocimiento que se tiene acerca de la relación entre las variables y su tasa de cambio. También escribiremos el sistema (12) de la manera equivalente

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X}) \quad (13)$$

y entenderemos por una solución de esta ecuación, una función $\varphi : I \rightarrow \Delta$, $\varphi(t) = (x_1(t), x_2(t))$ tal que

$$\frac{d\varphi}{dt}(t) = \mathbf{F}(\varphi(t)). \quad (14)$$

La $\varphi(t)$ se llama *trayectoria* del campo \mathbf{F} .

El sistema (13) puede aparecer provisto de condiciones iniciales $\varphi(0) = \mathbf{x}_0$ para cierto $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^2$. En base al teorema de unicidad de soluciones que enunciaremos en breve podemos utilizar la notación $\varphi_{\mathbf{x}_0}$ para definir dicha solución.

Una trayectoria $\varphi_{\mathbf{x}} : I \rightarrow \Delta$ de \mathbf{F} se llama *solución maximal* si para toda trayectoria $\psi_{\mathbf{x}} : J \rightarrow \Delta$ tal que $I \subseteq J$ y $\varphi_{\mathbf{x}} = \psi_{\mathbf{x}}$ en I entonces se tiene que $I = J$ y consecuentemente $\varphi_{\mathbf{x}} = \psi_{\mathbf{x}}$. En este caso I se llama el *intervalo maximal*, y se denota $I_{\mathbf{x}}$.

Una ecuación del tipo (13) es significativa matemáticamente y como representación de un problema físico, químico o biológico si sus soluciones están bien definidas y caracterizadas. Es importante entonces saber si tales soluciones existen, si son únicas (que no haya ambigüedades) y bajo qué condiciones esto ocurre, así como también cómo es la dependencia de ellas con respecto a los diferentes parámetros del modelo. Los siguientes teoremas brindan información en ese sentido.

Teorema 1 *Existencia y unicidad de soluciones maximales.*

- a) Para cada $\mathbf{x} \in \Delta$ existe un intervalo abierto $I_{\mathbf{x}}$ donde está definida una única solución maximal $\varphi_{\mathbf{x}}$ de $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X})$ tal que $\varphi_{\mathbf{x}}(0) = \mathbf{x}$.

- b) Sea $\mathbf{y} = \varphi_{\mathbf{x}}(t)$ y $t \in I_{\mathbf{x}}$, entonces $I_{\mathbf{y}} = I_{\mathbf{x}} - t = \{r - t : r \in I_{\mathbf{x}}\}$ y $\varphi_{\mathbf{y}}(s) = \varphi_{\mathbf{x}}(t + s)$ para todo $s \in I_{\mathbf{y}}$.
- c) El conjunto $\mathcal{D} = \{(t, \mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Delta, t \in I_{\mathbf{x}}\}$ es abierto en \mathbb{R}^3 y la aplicación $\varphi : \mathcal{D} \rightarrow \mathbb{R}^2$ dada por $\varphi(t, \mathbf{x}) = \varphi_{\mathbf{x}}(t)$ es de clase C^1 .

Observación 2 De hecho, para asegurar la existencia y unicidad de solución, basta con que \mathbf{F} sea Lipschitz, es decir, que verifique

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{X}) - \mathbf{F}(\mathbf{Y})\| \leq K \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|$$

para algún $K < \infty$. La constante K se denomina la constante de Lipschitz de \mathbf{F} . En este caso solo se obtiene continuidad respecto de los datos iniciales. Más específicamente puede verse que

$$\|\varphi_{\mathbf{x}}(t) - \varphi_{\mathbf{y}}(t)\| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| e^{Kt}$$

lo cual da una cota de “cuánto” pueden separarse las soluciones en un intervalo de tiempo $[0, t]$.

Observación 3 El Teorema 1 vale en dimensión n . En consecuencia, de existir parámetros en el sistema pueden incorporarse como variables en un sistema de mayor orden y obtener continuidad o derivabilidad respecto de dichos parámetros.

Teorema 4 Sea φ una solución maximal de $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{F}(\mathbf{X})$ en I . Entonces se cumple alguna de las siguientes condiciones:

- a) φ es biyectiva.
- b) $I = \mathbb{R}$ y φ es constante.
- c) $I = \mathbb{R}$ y φ es periódica, es decir, existe $\tau > 0$ tal que $\varphi(t + \tau) = \varphi(t)$ para todo $t \in \mathbb{R}$ y $\varphi(t_1) \neq \varphi(t_2)$ si $|t_1 - t_2| < \tau$.

3.2 Estudio geométrico

Un sistema dinámico puede pensarse como la descripción de los distintos estados de cierto proceso que evoluciona. La evolución de dicho proceso implica el paso de un estado a otro de manera unívoca. Si el sistema es autónomo del plano, es decir si se representa por medio de una ecuación del tipo (12), los estados quedan definidos (gracias al Teorema 1) por los valores que asumen las variables (x_1, x_2) . De manera general llamaremos espacio de fases, al espacio que describe los “estados” del proceso.

En la mayoría de los casos, encontrar soluciones analíticas de sistemas del tipo (12) es muy difícil, de manera que se hace necesario utilizar herramientas matemáticas que nos

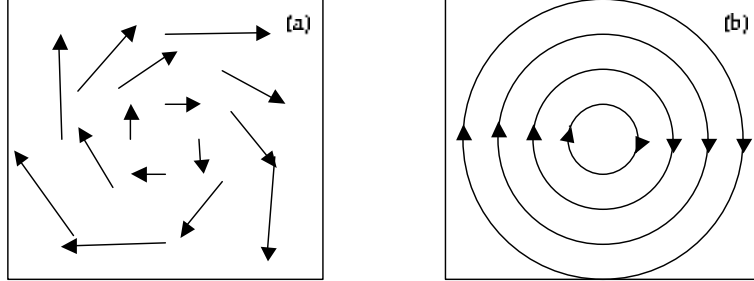


Figura 1: (a) Campo vectorial (b) es el diagrama de fases correspondiente a (a)

permitan entender aspectos cualitativos relevantes de las soluciones. Entre los métodos geométricos posibles está el estudio cualitativo del espacio de fases.

Para esto consideramos cada punto (x_1, x_2) como la posición de una partícula imaginaria moviéndose en el plano \mathbb{R}^2 y (\dot{x}_1, \dot{x}_2) como el vector velocidad de la partícula. Para cada punto del espacio de fases donde f_1 y f_2 están definidas, el lado derecho del sistema (12) nos dice cuál es la velocidad de la partícula en esa posición. Si consideramos todos los puntos con sus respectivas velocidades tenemos un campo vectorial \mathbf{F} . Si evaluamos \mathbf{F} en algunos puntos podemos intuir el movimiento de todas las partículas al mismo tiempo y pensarlo como un flujo de partículas. La Figura 1 da una idea de esto.

En términos más formales, podemos definir:

Definición 5 La aplicación $\varphi : \mathcal{D} \rightarrow \Delta$, definida en el Teorema 1, se llama el flujo generado por \mathbf{F} .

Definición 6 El conjunto $\gamma_{\mathbf{p}} = \{\varphi(t, \mathbf{p}), t \in I_{\mathbf{p}}\}$, es decir, la imagen de la trayectoria de \mathbf{F} en el punto \mathbf{p} , se llama la órbita de \mathbf{F} en el punto \mathbf{p} .

Definición 7 Un conjunto abierto Δ provisto de todas las trayectorias φ se dice diagrama de fases.

Los diagramas de fases se interpretan gráficamente descomponiendo el abierto Δ en una unión de órbitas. Para empezar a dibujar el diagrama es muy útil el estudio de las *curvas de nivel cero*, definidas como las curvas donde $\dot{x}_1 = 0$ o $\dot{x}_2 = 0$, es decir, donde $f_1(x_1, x_2) = 0$ o $f_2(x_1, x_2) = 0$. Estas curvas indican dónde el flujo es horizontal o vertical y además separan el espacio de fases en regiones de acuerdo a los signos de \dot{x}_1 y \dot{x}_2 . Un ejemplo de esto se puede observar en la Figura 2.

El siguiente paso es buscar los puntos donde la velocidad es nula, es decir, donde ambas curvas de nivel cero se intersectan. Esos puntos nos dan también cierta información útil para determinar el diagrama de fases de un sistema y la dirección del flujo.

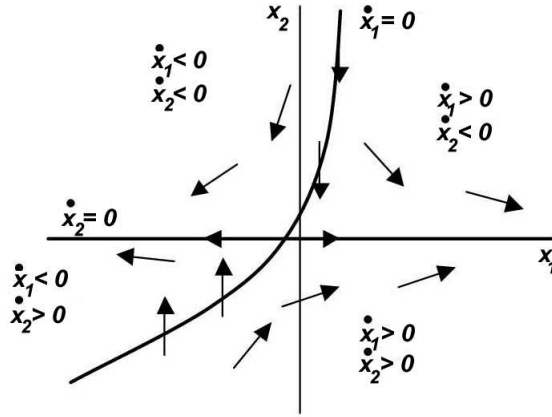


Figura 2: Curvas de nivel cero para un sistema del tipo (12)

Definición 8 Un punto $\mathbf{x}_e \in \Delta$ se dice punto de equilibrio si $\mathbf{F}(\mathbf{x}_e) = 0$, o de manera equivalente $f_i(\mathbf{x}_e) = 0$, $i = 1, 2$.

De acuerdo al comportamiento de las soluciones en un entorno apropiado del punto de equilibrio, estos últimos pueden ser clasificados en estables o inestables dependiendo de si las soluciones con valores iniciales en un entorno del punto de equilibrio permanecen en dicho entorno para siempre o no. Las definiciones precisas de estos conceptos son las siguientes:

Definición 9 Un punto de equilibrio \mathbf{x}_e del sistema (13) se dice estable si, para todo entorno U de \mathbf{x}_e existe un entorno U_1 de \mathbf{x}_e tal que toda solución de (13) con $\varphi(0) \in U_1$ está definida en U para todo $t \geq 0$. Si además $\lim_{t \rightarrow +\infty} \varphi(t) = \mathbf{x}_e$ entonces \mathbf{x}_e es asintóticamente estable. Un punto de equilibrio \mathbf{x}_e del sistema (13) se dice inestable si no es estable.

3.3 Linealización

Las definiciones que dimos en la Sección anterior caracterizan a un punto de equilibrio localmente. Para determinar la naturaleza de cada punto de equilibrio se puede aproximar el campo vectorial \mathbf{F} linealmente. La idea subyacente es que, como $\mathbf{F}(\mathbf{x}_e) = 0$, cerca del equilibrio $\mathbf{F}(\mathbf{X}) \sim D\mathbf{F}(\mathbf{x}_e)\mathbf{X}$.

La diferencial $D\mathbf{F}$ queda definida por la *matriz Jacobiana* de \mathbf{F} , que en el punto (x_1, x_2) está dada por

$$D\mathbf{F}(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}_{(x_1, x_2)}.$$

Definición 10 Si (\bar{x}_1, \bar{x}_2) es un punto de equilibrio del sistema (12), decimos que el sistema

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}_{(\bar{x}_1, \bar{x}_2)} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \quad (15)$$

es la linealización del sistema (12) en el punto de equilibrio (\bar{x}_1, \bar{x}_2) .

Es de esperar que la linealización de \mathbf{F} resulte válida como aproximación solo en los casos en que la parte lineal sea “significativa”, esto es, que en *algún sentido* no se anule, ya que en caso contrario los términos de mayor orden serían relevantes. Los puntos de equilibrio para los cuales la aproximación tiene validez son, como veremos en breve, los que se definen a continuación

Definición 11 Un punto de equilibrio \mathbf{x}_p de un campo vectorial \mathbf{F} de clase C^1 se dice hiperbólico si todos los autovalores de $D\mathbf{F}(\mathbf{x}_p)$ tienen parte real diferente de cero.

Para estudiar el impacto ocasionado en la dinámica al cambiar el campo original por su linealizado, se requiere de algún concepto que permita comparar los flujos resultantes. En términos generales dos sistemas dinámicos poseen el mismo comportamiento cualitativo si sus flujos son iguales salvo ciertas “deformaciones”. El concepto de conjugación topológica formaliza esta idea.

Definición 12 Sean $\varphi_1 : D_1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ y $\varphi_2 : D_2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ dos flujos generados por los campos $\mathbf{F}_1 : \Delta_1 \rightarrow \mathbb{R}^2$ y $\mathbf{F}_2 : \Delta_2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ respectivamente. Se dice que \mathbf{F}_1 es topológicamente conjugado a \mathbf{F}_2 cuando existe un homeomorfismo $h : \Delta_1 \rightarrow \Delta_2$ tal que $h(\varphi_1(t, \mathbf{x})) = \varphi_2(t, h(\mathbf{x}))$ para todo $(t, \mathbf{x}) \in D_1$.

Finalmente el Teorema de Hartman brinda condiciones suficientes bajo las cuales la linealización respeta la dinámica localmente.

Teorema 13 (Teorema de Hartman)

Sean $\mathbf{F} : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^2$ un campo vectorial de clase C^1 y \mathbf{x}_p un punto de equilibrio hiperbólico. Entonces, existen entornos V de \mathbf{x}_p en Δ y W de 0 en \mathbb{R}^2 tal que \mathbf{F} restringida a V es topológicamente conjugado a $D\mathbf{F}(\mathbf{x}_p)$ restringida a W .

En consecuencia, en puntos de equilibrio hiperbólicos, la dinámica local se reduce al estudio de sistemas lineales con coeficientes constantes. Estos pueden resolverse explícitamente, y

resulta sencillo describir el aspecto cualitativo de sus soluciones.

Un sistema dinámico lineal de dos dimensiones con coeficientes constantes es un sistema de la forma

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= ax_1 + bx_2 \\ \dot{x}_2 &= cx_1 + dx_2\end{aligned}\tag{16}$$

o, matricialmente, $\dot{\mathbf{X}} = A\mathbf{X}$, donde $\dot{\mathbf{X}} = (\dot{x}_1, \dot{x}_2)^T$ y $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$.

Buscando soluciones del sistema (16) de la forma

$$\mathbf{x}(t) = e^{\lambda t} \mathbf{v},$$

se llega a que el problema se reduce a encontrar autovalores de A [4], es decir, valores de λ tales que

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}.\tag{17}$$

La naturaleza del punto de equilibrio $(0, 0)$ queda caracterizada por los autovalores:

- Si los autovalores tienen parte real menor o igual que cero, es estable.
- Si los autovalores tienen parte real menor que cero, es asintóticamente estable.
- En cualquier otro caso, es inestable.

Dependiendo del tipo de autovalores obtenemos los diagramas cualitativos de la Figura 3.

3.4 Estructuras que aparecen en el plano: ciclos límites

Definición 14 Sea Δ un abierto de \mathbb{R}^2 y sea $\mathbf{F} : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^2$ un campo vectorial de clase C^1 . Una órbita periódica γ de \mathbf{F} se llama ciclo límite si existe un entorno V de γ tal que γ es la única órbita cerrada de \mathbf{F} que interseca V .

Existen los siguientes tipos de ciclos límites:

- a) Estable, cuando $\lim_{t \rightarrow \infty} \text{dist}(\varphi(t, \mathbf{q}), \gamma) = 0$ para todo $\mathbf{q} \in V$.
- b) Inestable, cuando $\lim_{t \rightarrow -\infty} \text{dist}(\varphi(t, \mathbf{q}), \gamma) = 0$ para todo $\mathbf{q} \in V$.
- c) Semiestable, cuando $\lim_{t \rightarrow \infty} \text{dist}(\varphi(t, \mathbf{q}), \gamma) = 0$ para todo $\mathbf{q} \in V \cap \text{Ext}(\gamma)$ y $\lim_{t \rightarrow -\infty} \text{dist}(\varphi(t, \mathbf{q}), \gamma) = 0$ para todo $\mathbf{q} \in V \cap \text{Int}(\gamma)$ o lo contrario.

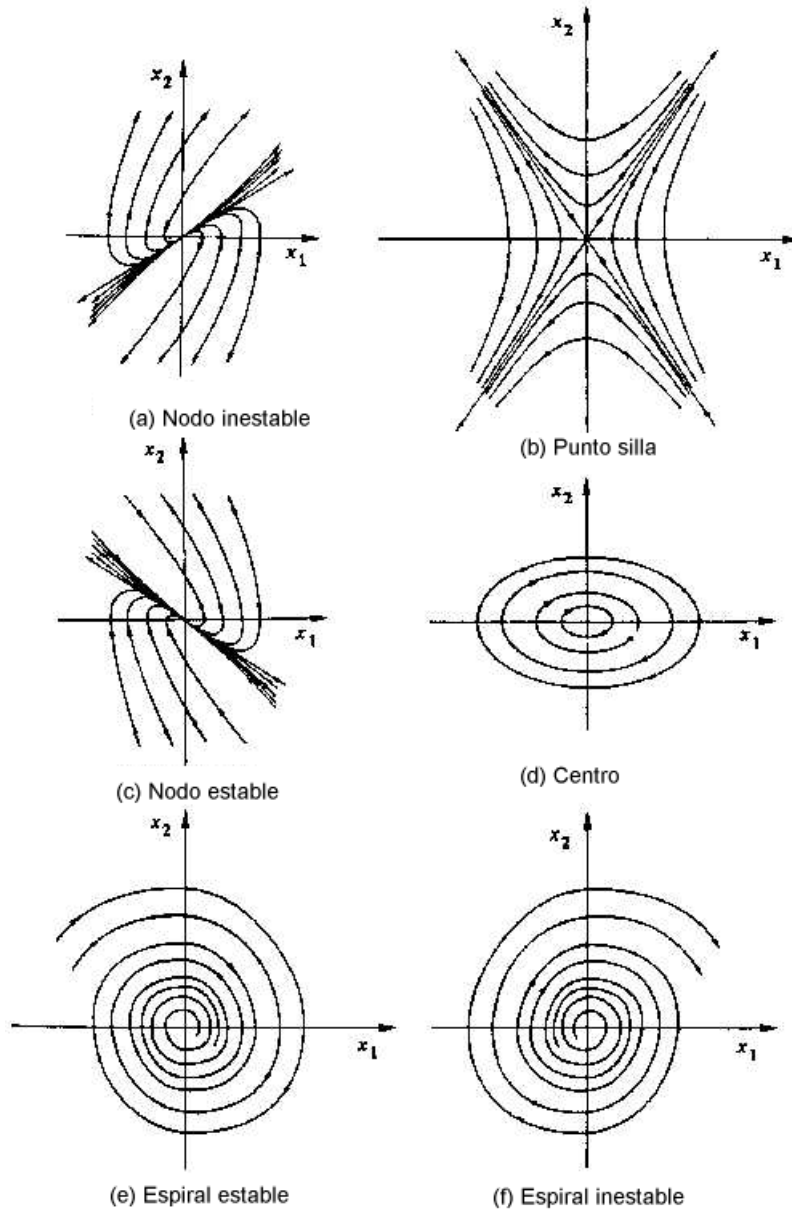


Figura 3: Diferentes características cualitativas que puede tener un punto de equilibrio de un sistema lineal en el plano



Figura 4: Ciclos límites

La Figura 4 muestra los diferentes casos.

Este fenómeno solo se puede dar en sistemas no lineales. Esto se debe a que un sistema lineal $\dot{\mathbf{X}} = A\mathbf{X}$ puede tener órbitas cerradas, pero éstas no pueden ser aisladas. Si $\mathbf{x}(t)$ es una solución periódica, entonces $c\mathbf{x}(t)$ también lo es para cualquier constante $c \neq 0$. Entonces $\mathbf{x}(t)$ está rodeada de una familia de órbitas cerradas.

Un resultado que permite demostrar en ocasiones la existencia de ciclos límites es el Teorema de Poincaré-Bendixson, que vamos a enunciar de manera conveniente para nuestros propósitos. Para enunciarlo necesitamos algunas definiciones previas.

Sea Δ un conjunto abierto de \mathbb{R}^2 y $\mathbf{F} : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^2$ un campo vectorial de clase C^1 . Sea $\varphi(t) = \varphi(t, \mathbf{p})$ una trayectoria de \mathbf{F} que pasa por el punto \mathbf{p} definida en su intervalo maximal $I_{\mathbf{p}} = (a_{\mathbf{p}}, b_{\mathbf{p}})$. Si $b_{\mathbf{p}} = \infty$ se define

$$\omega(\mathbf{p}) = \{q \in \Delta : \exists (t_n)_{n \in \mathbb{N}} \text{ tal que } t_n \rightarrow \infty \text{ y } \varphi(t_n) \rightarrow q \text{ cuando } n \rightarrow \infty\}.$$

El conjunto $\omega(\mathbf{p})$ se denomina ω -límite de \mathbf{p} .

Teorema 15 (*Poincaré-Bendixson*)

Sean Δ un conjunto abierto de \mathbb{R}^2 y \mathbf{F} un campo vectorial de clase C^1 en Δ . Sea γ^+ una semiórbita positiva de \mathbf{p} , es decir, $\gamma_{\mathbf{p}}^+ = \{\varphi(t, \mathbf{p}) : t \geq 0\}$. Sea $\varphi(t) = \varphi(t, \mathbf{p})$ una trayectoria de \mathbf{F} definida para todo $t \geq 0$ tal que γ^+ esté contenida en un compacto $K \subset \Delta$. Entonces, si $\omega(\mathbf{p})$ no contiene ningún punto de equilibrio, $\omega(\mathbf{p})$ es una órbita periódica.

La demostración de este teorema y otros resultados relacionados se encuentran en [23].

3.5 Teorema de Lienard

Cierto tipo de ecuaciones de Lienard se escriben como

$$\begin{cases} v' &= f(v) - w \\ w' &= v \end{cases} \quad (18)$$

donde

- $f \in C^1$, $f(-v) = -f(v)$
- $\exists! \beta > 0$ tal que $f(\beta) = 0$ y f es decreciente en (β, ∞)
- $\lim_{v \rightarrow \infty} f(v) = -\infty$.

Las ecuaciones que interesan en gran parte de este trabajo comparten características cualitativas con las ecuaciones (18). Por esta razón dedicamos algunas líneas al estudio de estas ecuaciones, que permiten un tratamiento sencillo debido en parte a la simetría de sus soluciones, y que de paso ilustran el tipo de comportamiento esperado en casos más complicados.

Teorema 16 (*Lienard*) *El sistema (18) admite una única solución periódica, estable y no constante.*

Dem. Observemos que el único punto de equilibrio del sistema es el $(0, 0)$ debido a que $f(0) = 0$. Además para toda solución $(v(t), w(t))$ se verifica que v crece si $w < f(v)$ y decrece en caso contrario. Del mismo modo w crece si $v > 0$ y viceversa. Además sobre el eje w el campo $(f(v) - w, v)$ es paralelo al eje v , y sobre la curva $f(v) = w$ resulta paralelo al eje w . Se sigue que una solución que parta del punto $A = (0, -w_0)$, con $w_0 > 0$ suficientemente grande describe una trayectoria ABECD del tipo que se visualiza en la Figura 5.

Como f es impar, es fácil ver que si (v, w) es solución, también debe serlo $(-v, -w)$. En consecuencia, la reflexión del arco ABECD respecto del $(0, 0)$ es una trayectoria del sistema. La idea es probar que existe un w_0 suficientemente grande, de modo tal que $w_0 > w_1$, donde $(0, w_1) = D$. Si esto fuera cierto resultaría que la curva de Jordan J formada por ABECD, su reflexión, y los segmentos que unen sus extremos contendría a la semiórbita positiva que pasa por A , ver Figura 6. Por ende $\omega(A) \subset K$ donde K es la región encerrada por J . El conjunto K es compacto, y verificando que el único punto de equilibrio $(0, 0)$ es una fuente (i.e. nodo inestable) resultaría que $\omega(A) \neq (0, 0)$, y por Poincaré-Bendixon $\omega(A)$ es una órbita periódica. Veamos primero entonces que $w_0 > w_1$ para w_0 suficientemente grande. Para este fin, observemos que si $w_0 \rightarrow \infty$ y w_1 permanece acotado entonces es fácil tomar $w_0 > w_1$, por ende podemos suponer que ambos $w_0, w_1 \rightarrow \infty$.

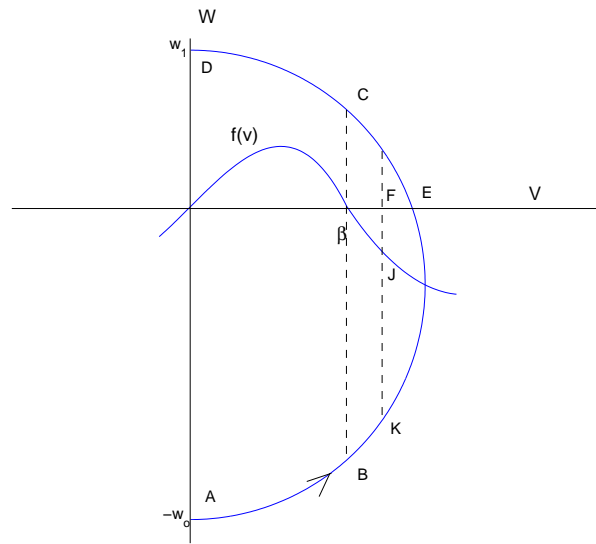


Figura 5:

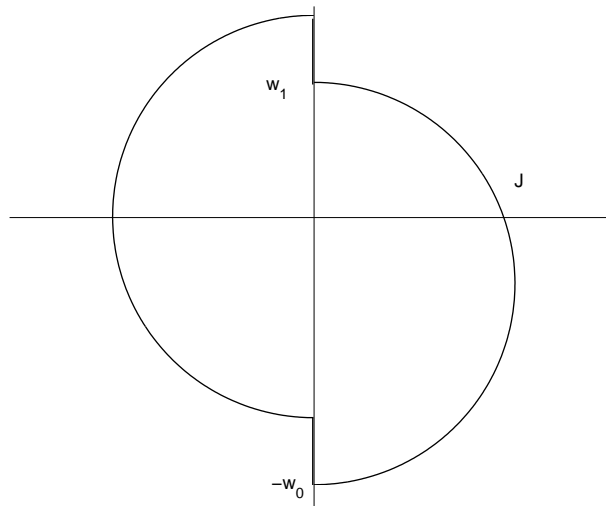


Figura 6:

Consideremos entonces la función

$$R(v, w) = \frac{1}{2}(v^2 + w^2)$$

de (18) obtenemos

$$\frac{dR(v(t), w(t))}{dt} = v(t)f(v(t))$$

y con la notación de la Figura 5, se tiene

$$\frac{1}{2}(w_1^2 - w_0^2) = R(D) - R(A) = \int_{ABECD} dR \quad (19)$$

pero

$$\Phi_{ABCDE}(w_0) = \int_{ABECD} dR = \int_{AB} dR + \int_{CD} dR + \int_{BEC} dR$$

donde usamos la notación $\Phi_{ABCDE}(w_0)$ para resaltar la dependencia respecto del dato w_0 . Ahora bien, decimos que $\int_{AB} dR$ y $\int_{CD} dR$ decrecen monótonamente a 0. En efecto, consideremos

$$\Phi_{AB}(w_0) = \int_{AB} dR = \int_{AB} \frac{dR}{dt} \frac{dt}{dv} dv = \int_{AB} \frac{vf(v)}{f(v) - w} dv$$

la integral es positiva pues lo es el integrando y también dv . Si tomamos ahora $w'_0 > w_0$, la trayectoria verifica la situación de la Figura 7, y es claro que $\Phi_{AB}(w_0) > \Phi_{AB}(w'_0)$ debido a la monotonía del integrando en la variable w .

Por último $\lim_{w_0 \rightarrow \infty} \Phi_{AB}(w_0) = 0$ pues w crece una cantidad fija en ese tramo de la curva, debido a que $0 \leq v \leq \beta$ y $w' = v$ por (18). De manera idéntica se trata el caso $\Phi_{CD}(w_0)$. La integral $\Phi_{ECD}(w_0)$, también es monótona, y verifica $\lim_{w_0 \rightarrow \infty} \Phi_{ECD}(w_0) = -\infty$, en efecto

$$\Phi_{CED}(w_0) = \int_{ECD} \frac{dR}{dt} \frac{dt}{dv} dv = \int_{CED} f(v) dv$$

la monotonía se verifica fácilmente de (ver Figura 7)

$$\Phi_{CED}(w_0) > \Phi_{C''D''}(w'_0) > \Phi_{C'D'}(w'_0)$$

la primer desigualdad vale, pues a derecha de β , f es decreciente y además $dv > 0$. La segunda sigue del hecho de que en la curva considerada $f < 0$. Por último, y volviendo a la Figura 5, consideremos el segmento **fi**jo a derecha de β que pasa por F y K . Obtenemos que

$$\Phi_{BEC}(w_0) < \Phi_{KE}(w_0) < - \int_{KD} \text{long}(FJ) dv = -\text{long}(FJ)\text{long}(FK)$$

donde la primer desigualdad se obtiene de $f < 0$, la segunda de la monotonía de f . Entonces

$$\lim_{w_0 \rightarrow \infty} \Phi_{BEC}(w_0) \rightarrow -\infty$$

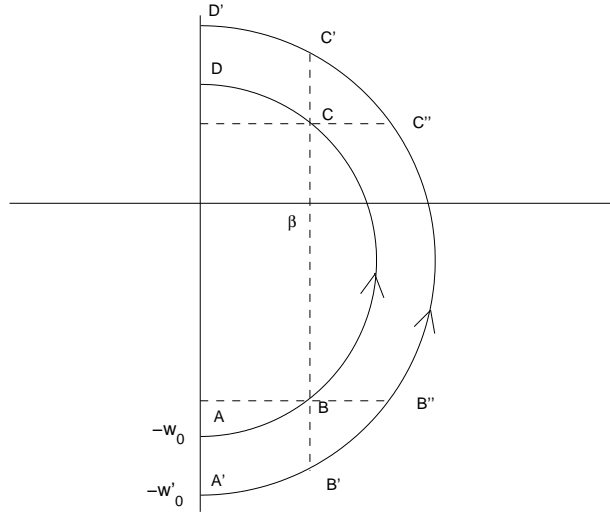


Figura 7:

ya que $\text{long}(FK) \rightarrow \infty$.

En consecuencia hemos probado que

$$\lim_{w_0 \rightarrow \infty} \Phi_{ABECD}(w_0) \rightarrow -\infty$$

monótonamente. De (19) se tiene que si w_0 es suficientemente grande $w_0 > w_1$, como queríamos ver.

Para probar que $(0,0)$ es una fuente, basta notar que por las hipótesis sobre f , $\frac{dR}{dt} = vf(v) > 0$ si $-\beta < v < \beta$, y por ende en un entorno del origen.

Por lo tanto queda probado que $\omega(A)$ es necesariamente una órbita periódica. Para ver la unicidad, notemos que por la simetría descrita al comienzo de la demostración, las órbitas periódicas deben ser simétricas respecto del $(0,0)$, pero eso implica que si la órbita pasa por $A = (-w_0, 0)$ y $D = (w_1, 0)$ entonces $w_0 = w_1$, y entonces necesariamente $R(D) - R(A) = 0$. Probemos entonces que existe un único w_0 cuya trayectoria verifica esta propiedad. Utilizando la notación de la Figura 8 llamemos $E = (v_0, 0)$ al punto de corte de la trayectoria con el eje v .

Si $v_0 < \beta$ se tiene que

$$R(D) - R(A) = \Phi_{ABDED}f(u)dv > 0$$

pues allí $f > 0$ y $dv > 0$. Pero si $v_0 > \beta$ obtenemos por el argumento previo

$$\lim_{w_0 \rightarrow \infty} \Phi_{ABECD}(w_0) \rightarrow -\infty$$

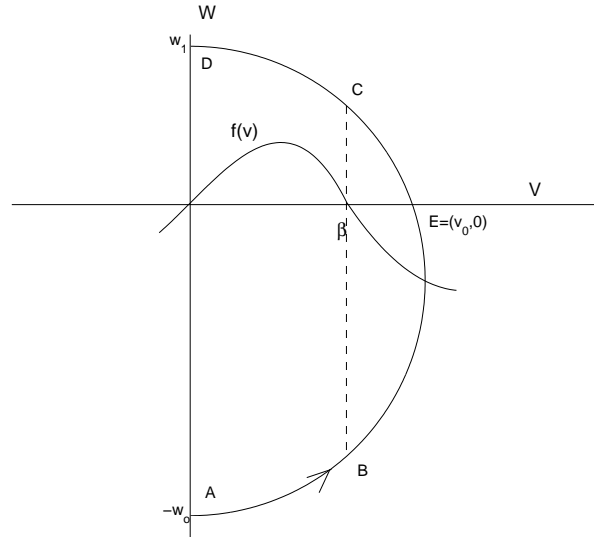


Figura 8:

monótonamente, por ende, existe un único w_0 tal que $R(D) - R(A) = 0$ y por lo tanto una única órbita periódica. De la unicidad se desprende inmediatamente la estabilidad. \square

Observación 17 *De la demostración del Teorema de Lienard, se observa que todas las órbitas del sistema (18) confluyen a la órbita periódica estable, que es el único ciclo límite del sistema. Los sistemas que estudiamos en este trabajo comparten esta característica.*

4 Oscilaciones de relajación

Las ecuaciones diferenciales ordinarias que poseen ciclos límites estables son importantes porque modelan sistemas que producen *oscilaciones autosostenidas*, es decir, que oscilan aun ante la ausencia de fuerzas externas periódicas. En este trabajo aparecen diversos modelos cuyas soluciones manifiestan este comportamiento. Un caso particular de oscilaciones autosostenidas son las oscilaciones de relajación. La dinámica de un oscilador de relajación puede entenderse fácilmente con ayuda del ejemplo clásico [9] que mostramos en la Figura 9: un sube y baja que tiene de un lado una masa y del otro, un tanque de agua que se va llenando hasta que alcanza un punto en el que el peso del agua desequilibra el sistema, elevando la masa en el lado izquierdo; esto vacía el tanque el cual vuelve a elevarse y el ciclo comienza de nuevo. La dinámica del sistema puede ser descrita por dos variables de estado: el volumen $V(t)$ del agua en el tanque y la posición angular $\Phi(t)$ del sube y baja. Lo importante es notar que cada ciclo tiene dos escalas de tiempo: el

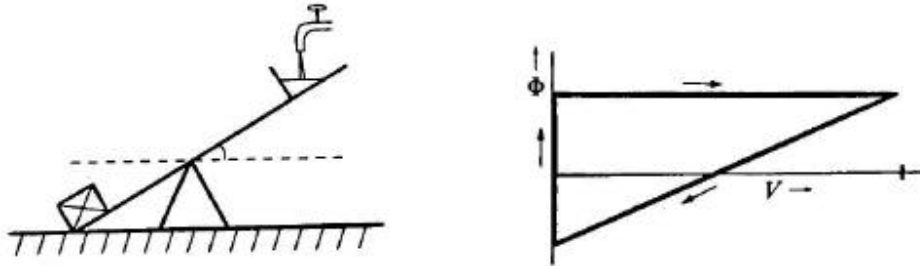


Figura 9: Sube y baja con reservorio y su trayectoria cerrada en el plano de fases

de llenado y el de vaciado, ya que el sube y baja solo cambia de posición una vez que el tanque llega a un punto determinado. Esto es lo que caracteriza a este tipo de osciladores.

4.1 Ecuación de Van der Pol

En 1920, Van der Pol experimentó con oscilaciones en un circuito eléctrico particular y concluyó que para toda condición inicial las trayectorias convergían a la misma órbita periódica de amplitud finita. Como este comportamiento es diferente del de soluciones de sistemas lineales, Van der Pol propuso la siguiente ecuación diferencial no lineal para modelarlo:

$$\ddot{x} + \nu(x^2 - 1)\dot{x} + x = 0, \quad (20)$$

donde ν es un parámetro positivo.

Esta ecuación se puede reescribir como un sistema de dos ecuaciones de primer orden. Si $x = x_1$ y $\dot{x} = x_2$, (20) queda escrita como

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -x_1 - \nu(x_1^2 - 1)x_2. \end{aligned} \quad (21)$$

Van der Pol estudió este sistema y descubrió que cuando ν es grande aparecen oscilaciones de relajación como resultado del mismo. Para entender heurísticamente la dinámica de la ecuación de Van der Pol podemos reescribir (20) mediante la transformación que hizo Lienard.

Sea $f(x) = -x + \frac{x^3}{3}$ y hagamos un cambio de coordenadas $(x, \dot{x}) \rightarrow (x, y)$, donde y se define como $\nu y = \dot{x} + \nu f(x)$. Esto transforma la ecuación (20) en

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \nu(y - f(x)) \\ \dot{y} &= -\frac{x}{\nu}. \end{aligned} \quad (22)$$

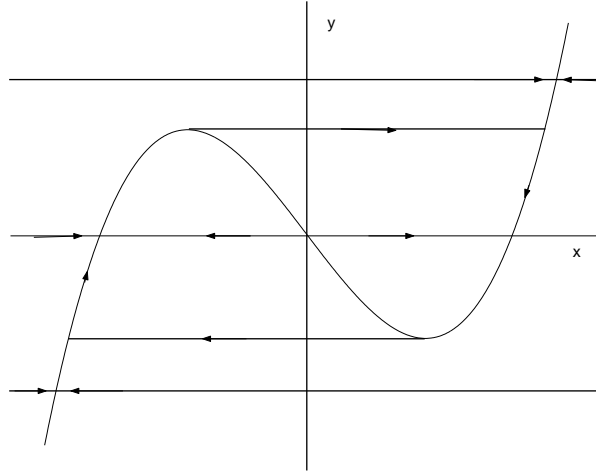


Figura 10: Diagrama de fases de la ecuación de Van der Pol

Este sistema tiene la forma (18), para la cual demostramos la existencia de ciclos límites. Lo que nos interesa ahora es otro aspecto de la dinámica relacionado con las oscilaciones de relajación. Vemos que las trayectorias satisfacen la ecuación

$$[y - f(x)] \frac{dy}{dx} = -\frac{1}{\nu^2} x.$$

Cuando ν es grande, el lado derecho es pequeño, sugiriendo que la ecuación podría ser aproximada por

$$[y - f(x)] \frac{dy}{dx} = 0. \quad (23)$$

Si analizamos esta última ecuación podríamos concluir que pasan dos cosas: $\frac{dy}{dx} = 0$, y entonces $y(x)$ es constante, o $y = f(x)$. En el primer caso la trayectoria es constante, en el segundo caso la trayectoria es idéntica a la función $f(x)$. En la Figura 10 podemos ver el diagrama de fases correspondiente a la aproximación del sistema (22). Ahí vemos que el gráfico de $y = f(x)$ tiene 3 ramas, es decir 3 partes donde la función f es monótona. Para cada valor de y , las ramas de la derecha e izquierda, donde la f es creciente, son estables y la rama del medio, donde f es decreciente, es inestable. Supongamos que la condición inicial del problema (22) está lejos de la función $y = f(x)$ ($y - f(x) \neq 0$) en el diagrama de fases. Entonces, $dy/dx = 0$ y la trayectoria es constante con dirección a algunas de las ramas de la izquierda o derecha. Cuando la trayectoria llega a un entorno suficientemente pequeño de $y = f(x)$ (rama derecha o izquierda), dado que son ramas estables, la trayectoria permanece en esa rama subiendo, en la rama izquierda, o bajando,

en la rama derecha. Cuando la trayectoria llega al máximo o mínimo locales de $f(x)$, se aleja en dirección a la otra rama estable. Este proceso se sigue repitiendo y así uno obtiene un ciclo límite de la forma que se puede ver en la Figura 10.

Para poder entender matemáticamente la relación entre las escalas de tiempo en problemas del tipo de Van der Pol, y formalizar un poco más el argumento previo, es necesario estudiar el sistema por medio de técnicas del tipo de perturbaciones singulares.

4.2 Problemas de perturbación singular

Durante muchos años se han estudiado modelos matemáticos en un intento de describir este tipo de fenómenos encontrados en diferentes campos de la ciencia.

El oscilador de Van der Pol forma parte de una clase general de problemas denominados de *perturbación singular* cuyo sistema de ecuaciones diferenciales tiene la forma

$$\begin{aligned}\dot{v} &= F(v, w) \\ \dot{w} &= \epsilon G(v, w),\end{aligned}\tag{24}$$

donde $\epsilon > 0$ es un parámetro muy pequeño ($\epsilon \ll 1$). Este sistema se conoce como *sistema rápido*.

Este tipo de problemas involucran dos escalas de tiempo. La variable v es conocida como la variable *rápida* y w como la variable *lenta* ya que generalmente v evoluciona a una tasa $O(1)$ dada por la función F y w evoluciona más lentamente a una tasa proporcional a ϵ . Es útil estudiar la reformulación del sistema (24) en términos de la variable reescalada $t = \epsilon\tau$

$$\begin{aligned}\epsilon\dot{v} &= F(v, w) \\ \dot{w} &= G(v, w).\end{aligned}\tag{25}$$

Este sistema se conoce como *sistema lento*.

Ambos sistemas son equivalentes cuando $\epsilon \neq 0$. Sin embargo, la denominación de perturbación singular se refiere a la discontinuidad en el comportamiento entre los sistemas cuando $\epsilon \rightarrow 0$. Para ver esa discontinuidad, analicemos cada uno.

Por simplicidad vamos a estudiar los sistemas en los cuales $F(v, w) = f(v) - w$, donde $f(v)$ es una función de forma cúbica que tiene un mínimo local en v_{min} y un máximo local en v_{max} con $v_{min} < v_{max}$, es decir que $f(v)$ es decreciente para $v < v_{min}$ y $v > v_{max}$ y $f(v)$ es creciente para $v_{min} < v < v_{max}$. Consideremos además, $G(v, w) = g(v) - w$.

I) Análisis del sistema rápido

Con estas suposiciones, el sistema (24) con condiciones iniciales $v(0) = v_0$, $w(0) = w_0$ queda escrito

$$\begin{aligned}\frac{dv}{dt} &= f(v) - w, & v(0) &= v_0 \\ \frac{dw}{dt} &= \epsilon[g(v) - w], & w(0) &= w_0.\end{aligned}\tag{26}$$

Si $\epsilon = 0$, tenemos que

$$\begin{aligned}\frac{dv}{dt} &= f(v) - w, & v(0) &= v_0 \\ \frac{dw}{dt} &= 0, & w(0) &= w_0.\end{aligned}\tag{27}$$

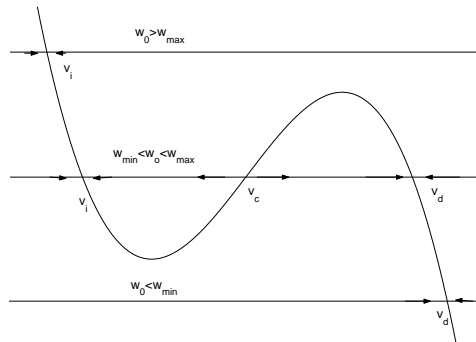
y entonces $w = w_0$ para distintos valores de w_0 . Sabiendo esto, la primera ecuación del sistema (27) queda

$$\frac{dv}{dt} = f(v) - w_0, \quad v(0) = v_0.\tag{28}$$

Para cada valor de w_0 tenemos una ODE que puede ser analizada. De acuerdo al valor de w_0 esta ecuación tiene

- 3 puntos de equilibrio, $v_i < v_c < v_d$, si $w_0 > w_{min}$ y $w_0 < w_{max}$
- 1 punto de equilibrio v_i , si $w_0 < w_{min}$, o v_d , si $w_0 > w_{max}$.
- 2 puntos de equilibrio, $v_i < v_d$, si $w_0 = w_{min}$ o $w_0 = w_{max}$.

donde $w_{min} = f(v_{min})$ y $w_{max} = f(v_{max})$.



Nótese que los valores de v_i , v_c y v_d dependen del valor de w_0 considerado. Puede verse claramente que v_i y v_d son puntos de equilibrio estables en tanto que v_c es un punto de equilibrio inestable. Es decir, para valores de v_0 distintos de v_i , v_c y v_d , las trayectorias correspondientes convergen a v_i o v_d de acuerdo a que $v_0 < v_c$ o $v_0 > v_c$ respectivamente.

II) Análisis del sistema lento

El sistema (25) bajo las condiciones sobre F y G queda

$$\begin{aligned}\epsilon \frac{dv}{d\tau} &= f(v) - w, & v(0) &= v_0 \\ \frac{dw}{d\tau} &= g(v) - w, & w(0) &= w_0.\end{aligned}\tag{29}$$

Si $\epsilon = 0$,

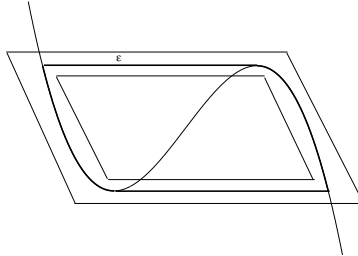
$$\begin{aligned}0 &= f(v) - w, & v(0) &= v_0 \\ \frac{dw}{d\tau} &= g(v) - w, & w(0) &= w_0.\end{aligned}\tag{30}$$

En este caso $w = f(v)$, dándonos una función cúbica de acuerdo a las suposiciones hechas arriba. Por lo dicho en **I**) esta cúbica tiene 2 ramas estables y una rama central inestable. Localmente, en un entorno de $w = f(v)$, f es una función inversible, es decir $v = f^{-1}(w)$. Podemos reemplazar en la segunda ecuación y obtenemos

$$\frac{dw}{d\tau} = g(f^{-1}(w)) - w, \quad w(0) = w_0.\tag{31}$$

Dado que, como mencionamos antes, la dinámica descrita en **I**) ocurre en una escala de tiempo rápida en tanto que la dinámica descrita aquí ocurre en una escala de tiempo lenta, podemos suponer sin pérdida de generalidad que w_0 se encuentra en una de las ramas estables de $w = f(v)$, con lo cual el problema (31) está bien definido. La trayectoria es unidimensional con la partícula moviéndose a lo largo de la rama correspondiente con una velocidad dada por $\frac{dw}{d\tau} = g(f^{-1}(w)) - w$.

Con la ayuda del análisis hecho en **I**) y **II**) podemos tener una visión clara de la dinámica de (26) en su aproximación de orden cero: si la condición inicial del sistema no se encuentra en $w = f(v)$ debemos utilizar la aproximación dada en **I**), la trayectoria rápidamente se dirige hacia una de las ramas estables de $f(v)$ manteniendo el valor de w constante. Una vez en una de estas ramas (o sea $w = f(v)$), la aproximación válida es la dada en **II**), y la trayectoria se mantiene sobre ella, en dirección a (v_{min}, w_{min}) o (v_{max}, w_{max}) dependiendo de qué rama se trate hasta alcanzar dichos extremos. Esto ocurre en una escala de tiempo lenta con respecto a la considerada en **I**). En ese momento, la aproximación **II**) pierde validez (f deja de ser inversible), y debe utilizarse nuevamente la aproximación dada por **I**). Este análisis puede hacerse una y otra vez y así obtener una aproximación de orden cero del ciclo límite (en negrita en la siguiente figura). Para $0 < \epsilon \ll 1$, los ciclos límite se encuentran dentro de un entorno de ancho ϵ del ciclo de orden cero [11].



4.3 Ejemplos

Los ejemplos 1 a 4 que describimos a continuación fueron estudiados durante los últimos 50 años para modelar problemas que surgen en distintas áreas de la ciencia (oscilaciones químicas oscilatorias, disparos de neurona, etc.). En esta sección los presentamos como ejemplos de problemas de perturbación singular y mostramos gráficos de las curvas de nivel correspondientes a cada uno. Mirando estos gráficos se puede observar también que todos ellos están relacionados dinámicamente al ejemplo 5, que es el de nuestro estudio.

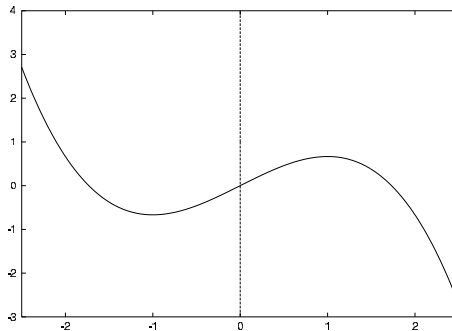
En lo que sigue, consideramos $\epsilon \ll 1$.

Ejemplo 1: La ecuación de Van der Pol

La ecuación de Van der Pol fue presentada en la Sección 4.1. como un sistema que modela un circuito eléctrico particular. Un modelo más general y que tiene el mismo comportamiento es el siguiente:

$$\begin{aligned} \dot{v} &= -\frac{1}{3}v^3 + v - w \\ \dot{w} &= \epsilon[v - \alpha]. \end{aligned} \tag{32}$$

Las curvas de nivel cero con parámetro $\alpha = 0$ son



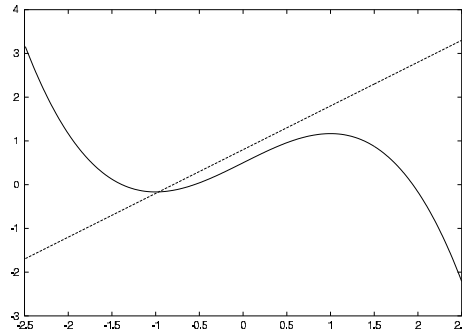
Ejemplo 2: La ecuación clásica de FitzHugh-Nagumo (FHN)

En 1962, Nagumo modeló una neurona por medio de un circuito eléctrico. En 1969, FitzHugh demostró que este modelo podía ser obtenido modificando el oscilador de Van der Pol. La ecuación propuesta fue

$$\begin{aligned}\dot{v} &= -hv^3 + av^2 - bv + c - w \\ \dot{w} &= \epsilon[\beta v - \eta - w],\end{aligned}\tag{33}$$

donde h, a, b, c, β y η son constantes no negativas [18].

Las curvas de nivel cero para esta ecuación con parámetros $h = 1/3$; $a = 0$; $b = -1$; $c = 0,5$; $\beta = 1$ y $\eta = -0,8$ son

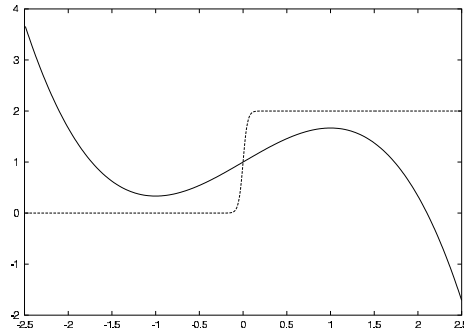


Ejemplo 3: La ecuación sigmosoidal FHN

Este modelo [18] es una modificación del anterior que fue estudiado con el mismo objetivo: modelizar la dinámica de una neurona. El sistema es el siguiente:

$$\begin{aligned}\dot{v} &= -hv^3 + av^2 - bv + c - w \\ \dot{w} &= \epsilon\left[\frac{1}{2}\left(\tanh\left(\frac{v-\beta}{\eta}\right) + 1\right) - w\right].\end{aligned}\tag{34}$$

Sus curvas de nivel cero con parámetros $h = 1/3$; $a = 0$; $b = -1$; $c = 0,5$; $\beta = 0$ y $\eta = 0,05$ son



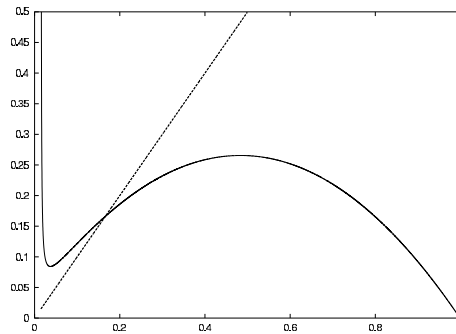
Ejemplo 4: El Oregonator

Este es modelo del Oregonator presentado en la Sección 2.1. Se cree que oscilaciones bioquímicas y biológicas, las cuales son mucho más complejas y no han sido explicadas todavía, coinciden en muchos casos cualitativamente con la reacción BZ.

$$\begin{aligned}\dot{v} &= -v^2 + v - qw \frac{(v-\alpha)}{v+\alpha} \\ \dot{w} &= \epsilon[pv - w]\end{aligned}\tag{35}$$

donde p , q y α son valores positivos.

Sus curvas de nivel cero con parámetros $\alpha = 0.015$, $q = 1$ y $p = 1$ son



Ejemplo 5: Modelo de FHN modificado

Este es el modelo presentado en la Sección 2.2.

$$\begin{aligned}\dot{v} &= f(v) - w \\ \dot{w} &= \epsilon[pv - o - w]\end{aligned}\tag{36}$$

con

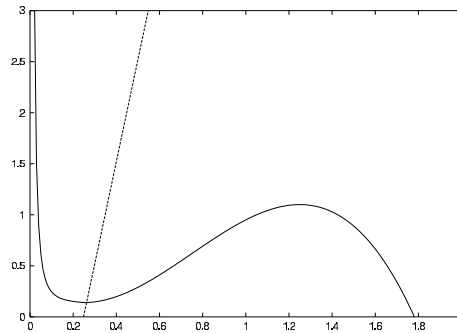
$$f(v) = \begin{cases} f_{cub}(v_m) \frac{v_m^2}{v^2} + k, & v \leq v_m \\ f_{cub}(v) + k, & v > v_m, \end{cases}$$

donde

$$f_{cub}(v) = -hv^3 + av^2 - bv + c,$$

v_m es el mínimo de la función f_{cub} y p, o, k, h, a, b y c son constantes no negativas.

Se puede ver que pertenece a la familia de problemas de perturbación singular y mirando sus curvas de nivel, notamos que tiene características similares a los ejemplos anteriores. La siguiente figura muestra las curvas de nivel cero del sistema con los siguientes valores de los parámetros: $\epsilon = 0,01$; $p = 10$; $o = 2,6$; $a = 4,32$; $h = 1,92$; $b = 1,8$; $c = 0,23$; $v_m = 0,25$ y $k = 0,12$.



5 El fenómeno Canard

En 1977, G. Reeb le sugirió a un grupo de estudiantes (Benoit, Callot, F. Diener y M. Diener [3]) analizar la ecuación de Van der Pol agregándole un parámetro λ

$$\ddot{x} + \nu(x^2 - 1)\dot{x} + x = \lambda \quad (37)$$

donde ν es una constante grande. Haciendo nuevamente el cambio de coordenadas $(x, \dot{x}) \rightarrow (v, w)$, donde w se define como $\nu w = \dot{x} + \nu f(x)$ y reescribiendo el sistema, nos encontramos con el primer ejemplo presentado en la Sección 4.3,

$$\begin{aligned} \dot{v} &= f(v) - w \\ \dot{w} &= \epsilon[v - \lambda], \end{aligned} \quad (38)$$

donde $f(v) = -\frac{1}{3}v^3 + v$. La dinámica de este sistema depende del valor de λ , es decir, de la posición relativa de las curvas de nivel cero entre sí. Su punto de equilibrio es $(\bar{v}, \bar{w}) = (\lambda, f(\lambda))$. Si v_{min} es el mínimo local de la función $f(v)$ y v_{max} es el máximo local, para $\lambda < v_{min}$ o $\lambda > v_{max}$, el punto de equilibrio es estable y para $v_{min} < \lambda < v_{max}$ es inestable. Para ver esto último calculemos los autovalores de la matriz Jacobiana de la linealización del sistema (38) en el punto de equilibrio $(\lambda, f(\lambda))$:

$$D\mathbf{F}(\lambda, f(\lambda)) = \begin{pmatrix} f'(\lambda) & -1 \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix}.$$

Los autovalores de $D\mathbf{F}(\lambda, f(\lambda))$ son

$$\frac{f'(\lambda) \pm \sqrt{f'(\lambda)^2 - 4\epsilon}}{2}.$$

Si $f'(\lambda) < 0$, el punto de equilibrio $(\lambda, f(\lambda))$ es estable y si no, inestable.

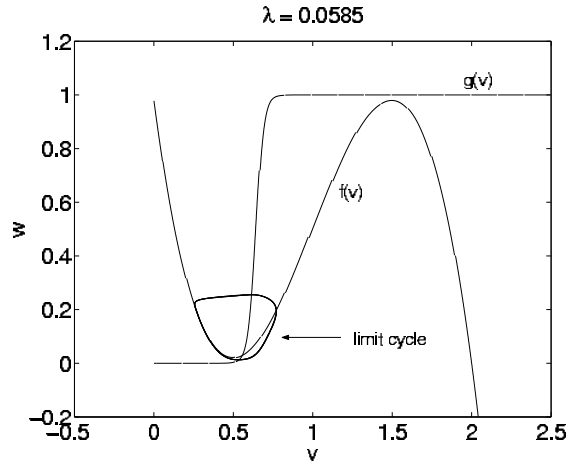
Para comprender la estructura global de sistemas de tipo (38) y más generales, consideremos un sistema de tipo (24) con un parámetro λ ,

$$\begin{aligned} \dot{v} &= F(v, w) \\ \dot{w} &= \epsilon G(v, w, \lambda). \end{aligned} \tag{39}$$

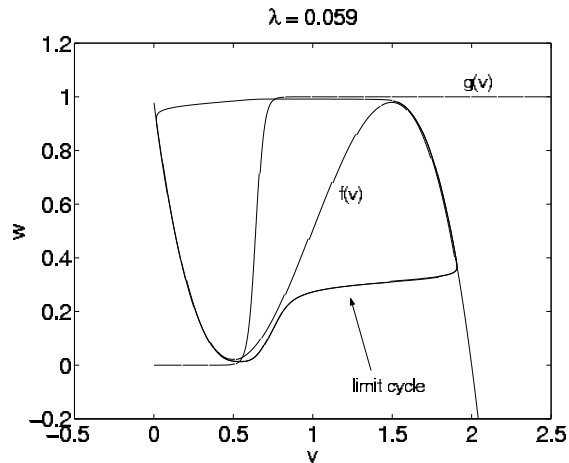
Supongamos que la matriz Jacobiana de la linealización de un sistema de tipo (39) tiene autovalores con parte imaginaria distinta de cero. Cuando el parámetro λ varía, la linealización del sistema cambia y en consecuencia también varían los autovalores de la matriz Jacobiana. Puede ocurrir que al incrementar el valor del parámetro λ , cuando éste pasa a través de un valor crítico λ_H , la parte real de los autovalores de la matriz Jacobiana pasan de ser negativas a positivas, es decir, el punto de equilibrio pasa de ser estable a inestable. Si se genera un ciclo límite estable que contiene al punto de equilibrio inestable del sistema (39), entonces decimos que se produjo una *bifurcación de Hopf supercrítica*. Esto ocurre por ejemplo en el sistema (38), cuando λ atraviesa el valor $\lambda_H = v_{min}$. Estudiando cómo se comporta el sistema (38) para valores del parámetro más allá de λ_H , en [3] hallaron que existe un valor crítico λ_c de λ tal que, para valores de λ en un entorno pequeño de λ_c , los ciclos límites se deforman de manera particular, como veremos más adelante en un ejemplo. Esto sucede no sólo para la ecuación de Van der Pol, sino también para problemas de perturbación singular como los presentados en (39) que verifican:

- la curva de nivel cero $F(v, w) = 0$ es una función de forma cúbica que tiene un mínimo local en (v_{min}, w_{min}) y un máximo local en (v_{max}, w_{max}) con $v_{min} < v_{max}$ y $w_{min} < w_{max}$;
- la función G es una función no decreciente de w y la curva de nivel cero $G(v, w, \lambda) = 0$ es una función creciente de v para todo valor de λ en un entorno dado de $\lambda = 0$ y
- G es también una función decreciente de λ para todo valor de v en un entorno de v_m .

Para mostrar el fenómeno encontrado, consideremos el modelo sigmoidal FHN presentado en el Ejemplo 3 de la Sección 4.3 y supongamos que para el valor λ_H del parámetro, tenemos una bifurcación de Hopf supercrítica. Para un valor del parámetro $\lambda > \lambda_H$, estamos en presencia de un ciclo límite estable como se ve en la figura



En un entorno exponencialmente pequeño del valor crítico λ_c con $\lambda_c > \lambda_H$, se produce una deformación repentina del ciclo límite, convirtiéndose en un oscilador de relajación, como se puede ver en la siguiente gráfica:



Este rápido cambio de un ciclo límite de amplitud pequeña a un ciclo límite de gran amplitud se conoce como el *fenómeno Canard*. Se pueden encontrar distintos análisis de este fenómeno en [1], [6] y [15]. También es posible calcular el valor λ_c [16].

6 Métodos numéricos

En esta sección discutimos algunos aspectos relacionados con los métodos numéricos utilizados en las simulaciones. Los conceptos básicos de esquema numérico, convergencia, etc., se dan por conocidos y nos referimos sólo a cuestiones generales de estabilidad debido a la rigidez de los sistemas considerados.

Los métodos numéricos utilizados en las simulaciones fueron las siguientes:

- Método de Runge-Kutta 4 programado por nosotros en lenguaje C
- Método adaptivo CVODE, provisto por un paquete en lenguaje C (es en realidad una versión en C que cubre las capacidades provistas por los paquetes para Fortran VODE, y VODEPK)
- Método adaptivo ODE15s utilizando Matlab.

Los dos últimos utilizan variantes de métodos multipaso BDF, con paso variable y resultan de gran utilidad en la integración de ecuaciones rígidas. Dedicamos más adelante algunas palabras más al CVODE.

6.1 Región de estabilidad absoluta

Consideremos el problema Test

$$x'(t) = \lambda x(t), \quad x(0) = 1 \quad (40)$$

con $\lambda \in \mathbb{C}$, $Re(\lambda) < 0$. Observemos que $\lim_{t \rightarrow \infty} |x(t)| = 0$.

Definición 18 *Un esquema numérico que aproxime (40) se dice absolutamente estable si*

$$|u_n| \rightarrow 0 \quad \text{cuando} \quad t_n \rightarrow \infty \quad (41)$$

donde u_n es la solución aproximada a tiempo t_n .

Definición 19 *La región de estabilidad absoluta de un esquema se define como*

$$EA = \{z = \lambda h \text{ tales que se verifica (41)}\}$$

donde h es el paso de tiempo utilizado en el esquema.

Observemos que para valores grandes de $|\lambda|$, es de interés trabajar con regiones grandes de EA , para que el esquema respete la dinámica trabajando con un paso razonable h .

Definición 20 *Un esquema se dice A estable si*

$$EA = \{z \text{ tales que } Re(z) < 0\}.$$

La situación ideal para un esquema resulta ser evidentemente la A estabilidad. Sin embargo esta situación se encuentra rara vez en la práctica. De hecho es bien conocido que:

Teorema 21 *(Barrera de Dahlquist)*

Ningun método explícito multipaso puede ser A estable. Mas aún, no existe método multipaso de orden mayor a 2 que sea A estable.

La Barrera de Dahlquist nos indica que, en términos generales, con métodos multipaso, debemos “sacrificar” orden de convergencia o región de estabilidad. Para métodos explícitos lo mismo puede decirse de Runge-Kutta. La alternativa de utilizar métodos implícitos de Runge-Kutta parece ser [19] que deja de ser conveniente si se pretende adaptar el paso en rangos muy grandes, debido a que las estimaciones a posteriori tienden a subestimar el error (i.e. estimarlo por debajo) con lo cual el estimador deja de ser confiable para pasos grandes h_n .

Estas cuestiones son de gran importancia cuando el esquema debe usarse para aproximar ecuaciones rígidas, las que definimos a continuación.

6.2 Ecuaciones rígidas

El fenómeno conocido como rigidez de sistemas de ecuaciones ordinarias aparece con frecuencia en el campo de las reacciones químicas, en la teoría de control, en la teoría de circuitos eléctricos, en la semidiscretización de ecuaciones en derivadas parciales utilizando el método de líneas, etc. Hablando en general, siempre que aparezcan cambios bruscos en la dinámica de las soluciones, aparece la rigidez.

Vamos a restringirnos una vez más a sistemas en el plano, aunque el concepto se aplica en general en dimensión n .

Consideremos el sistema

$$\mathbf{X}' = A\mathbf{X} + \mathbf{w}(t), \quad A \in \mathbb{R}^{2 \times 2} \text{ y } \mathbf{w}(t) \in \mathbb{R}^2. \quad (42)$$

Para simplificar supongamos que A posee 2 autovalores distintos λ_1, λ_2 , con autovectores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ respectivamente. La solución de (42) se escribe entonces

$$\mathbf{x}(t) = C_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{v}_1 + C_2 e^{\lambda_2 t} \mathbf{v}_2 + \mathbf{p}(t),$$

donde $\mathbf{p}(t)$ representa una solución particular de (42). Supongamos además que $Re(\lambda_i) < 0$, en ese caso $\mathbf{p}(t)$ puede interpretarse como una solución estacionaria (en el sentido de que en tiempos largos, el “transitorio” $C_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{v}_1 + C_2 e^{\lambda_2 t} \mathbf{v}_2$ desaparece y sólo resulta visible $\mathbf{p}(t)$).

En esta situación resulta que, si nuestra intención es aproximar $\mathbf{p}(t)$, el esquema debe poseer un paso h tal que $\max_{i=1,2} \{|\lambda_i|\} h \in EA$. En consecuencia, con regiones de estabilidad pequeñas, debemos avanzar lentamente para resolver el transitorio, cuando en realidad nuestra intención es aproximar la solución asintótica.

6.3 El CVODE

El algoritmo provisto por el paquete CVODE utiliza una conjunción de dos métodos multipaso implícitos conocidos como Adams-Moulton (AM) y Backward Differentiation Formula

(BDF). Como comentamos debajo, el propósito es que el método resultante trabaje con ecuaciones rígidas y no rígidas simultáneamente. Recordemos que los métodos de Adams para aproximar ecuaciones de la forma

$$x'(t) = f(x(t), t) \quad (43)$$

aparecen al escribir

$$x(t_{n+1}) - x(t_n) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x(t), t) dt$$

e integrar aproximadamente el miembro derecho, con una integración exacta de algún polinomio interpolador de $f(x(t), t)$. Si se utiliza el nodo superior x_{n+1} en la interpolación, el método implícito resultante se denomina de Adams-Moulton. Las regiones de estabilidad absoluta de algunos métodos de AM (de orden 3, 4 y 5) aparecen en la siguiente figura representados por los dominios interiores a las curvas. El método de orden 2, no visible en la figura, aparece al integrar el polinomio de grado 1 que interpola a f en t_{n+1} y t_n (regla del Trapecio) y resulta ser A estable.

Regiones AM

Por su parte los métodos BDF van en otro sentido, aproximando directamente $x'(t_{n+1})$ al derivar alguna interpolación de f . Regiones de estabilidad absoluta para algunos métodos BDF (de orden 3, 5 y 6) aparecen en la figura siguiente, representadas por las regiones exteriores a las curvas.

Regiones BDF

El CVODE combina ambos métodos explotando la “complementariedad” visualizada en las figuras previas, para lograr un método capaz de trabajar en problemas rígidos y no rígidos a la vez.

7 Simulaciones

Comenzamos describiendo la dinámica de un oscilador no sometido a forzamiento utilizando el modelo FHN modificado (Ejemplo 5 de la Sección 4.3.). Esta dinámica varía al variar algún parámetro en el sistema, es decir, varía al variar la forma o la posición relativa de las curvas de nivel cero entre sí. Llamemos v_b y w_b a las coordenadas del punto de intersección entre las curvas de nivel cero. En las Figuras 11, 12 y 13 podemos ver que variando el parámetro c u o de manera tal que v_b crece, el fenómeno Canard puede ser inducido.

7.1 Oscilador autónomo

1) Ciclo límite de amplitud pequeña

En las tres figuras que se encuentran a continuación podemos ver el plano de fases y la evolución de v y w con respecto al tiempo para el caso del ciclo límite de amplitud pequeña. Lo que le sigue es una lectura de las mismas para comprender la dinámica del sistema.

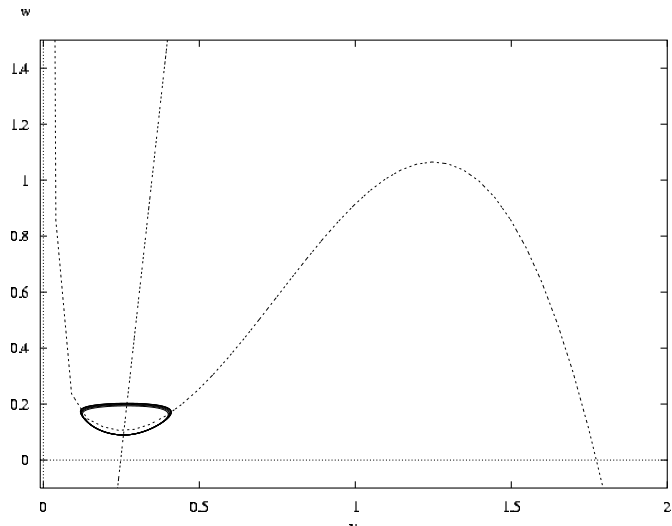


Figura 11-a: Plano de Fases

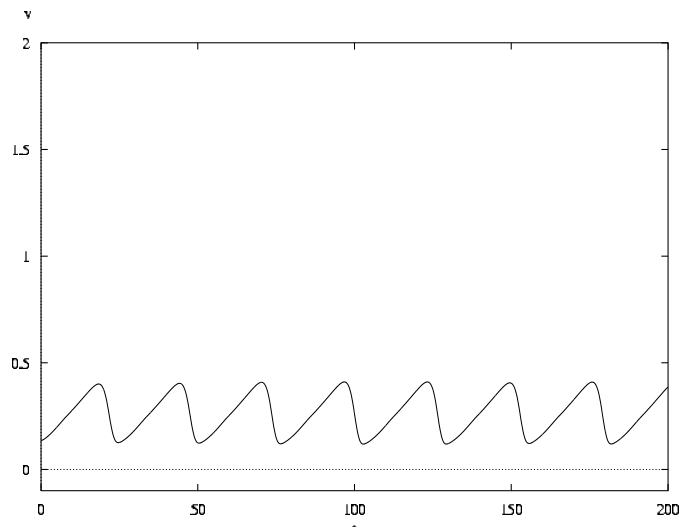


Figura 11-b: Gráfico de v en función de t

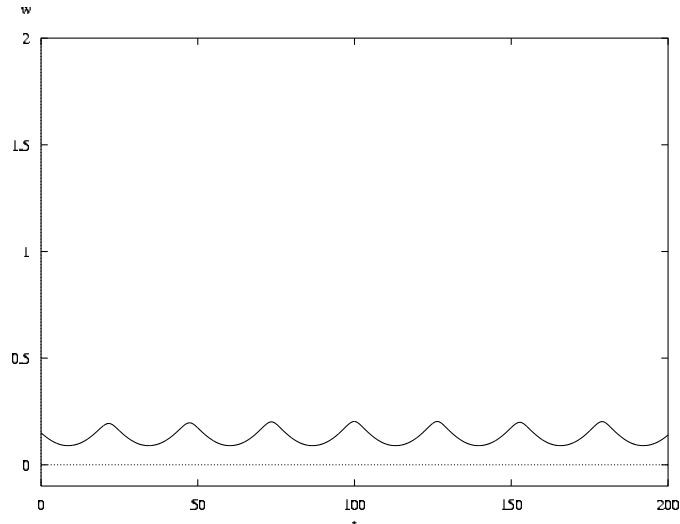


Figura 11-c: Gráfico de w en función de t

En la Figura 11-a se observa un ciclo límite pequeño que se traduce en las Figuras 11-b y 11-c como oscilaciones de amplitud pequeña. En el plano de fases vemos que la trayectoria una vez que pasa el valor mínimo de $f(v)$ sigue un poco por la rama inestable y retorna a la rama estable izquierda.

2) Ciclo límite deformado

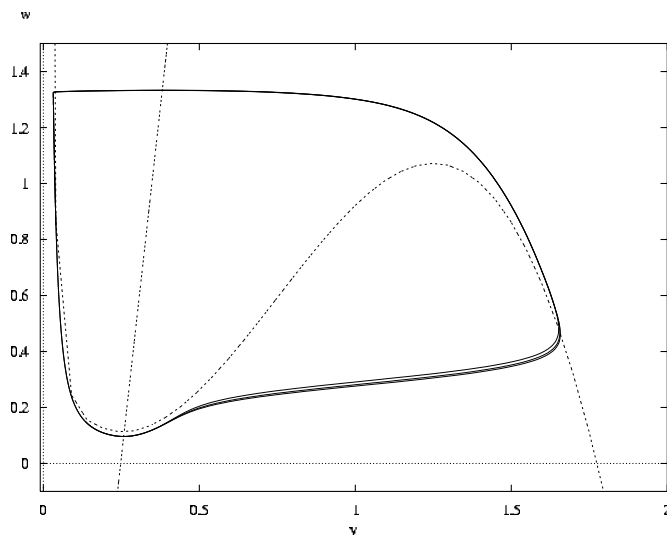


Figura 12-a: Plano de Fases

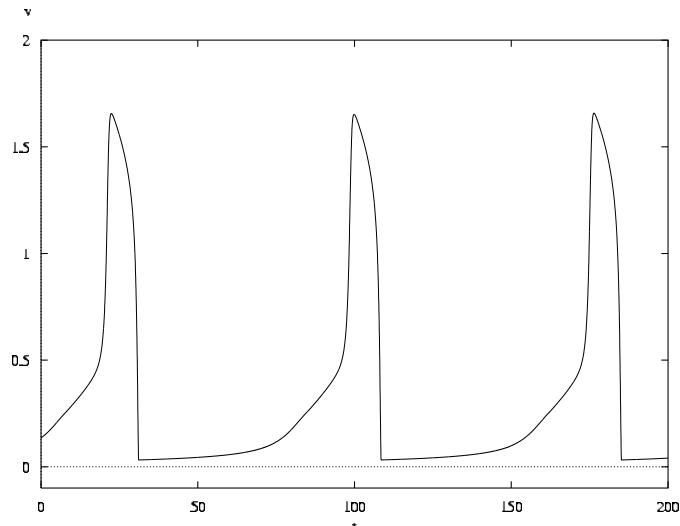


Figura 12-b: Gráfico de v en función de t

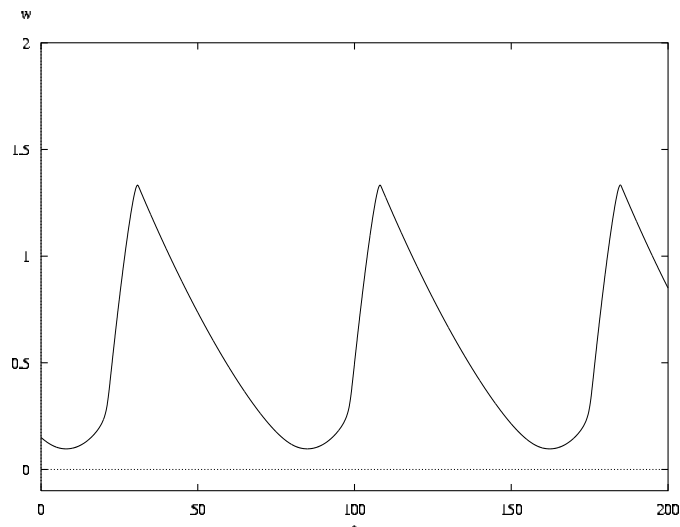


Figura 12-c: Gráfico de w en función de t

Consideremos el inicio del período de oscilación cuando v asume su valor mínimo en el ciclo límite. En la Figura 12-b, podemos observar que al principio v crece lentamente, luego crece muy rápidamente hasta obtener su valor máximo. A partir de ahí comienza a decrecer lentamente para luego decrecer rápidamente hasta obtener su valor mínimo y completar su período. Esto corresponde a la trayectoria en el plano de fases avanzando en un entorno de la rama estable izquierda de $f(v)$ hasta llegar al mínimo local de $f(v)$, luego permanece un tiempo en la rama inestable y después de un rato salta hacia la rama

estable derecha de $f(v)$, a partir de ahí sube lentamente por esta rama hasta llegar al máximo local de $f(v)$ para luego desplazarse nuevamente hacia la rama estable derecha de $f(v)$ y así completar su ciclo. Podemos observar de esta manera las dos escalas de tiempo: la escala de tiempo lenta, que corresponde al desplazamiento de la trayectoria en un entorno de las ramas derecha e izquierda de la curva de nivel cero correspondiente a la función cúbica, y la escala de tiempo rápida, que corresponde al desplazamiento de la trayectoria entre dos ramas.

La diferencia en los tiempos puede ser también observada en el gráfico de w respecto de t . El valor de w crece y decrece a un ritmo mucho más lento que el que permanece cerca de sus valores mínimo y máximo locales. Esto se traduce en que el crecimiento y decrecimiento del valor de w representan en el plano de fases, el recorrido de la trayectoria por las ramas de la función $f(v)$. Y los picos que se pueden observar en la Figura 12-b representan los saltos que se producen de una rama a la otra.

3) Ciclo límite de amplitud grande

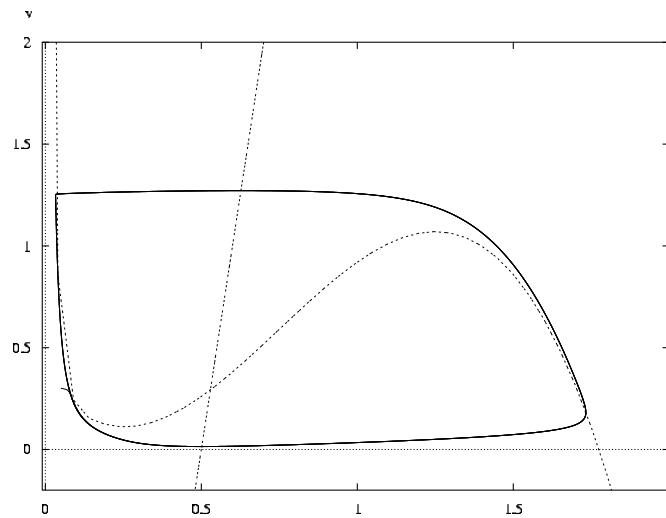


Figura 13-a: Plano de Fases

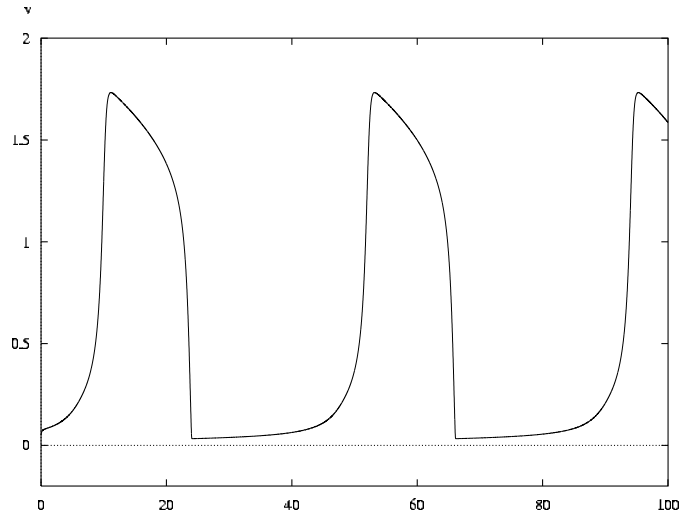


Figura 13-b: Gráfico de v en función de t

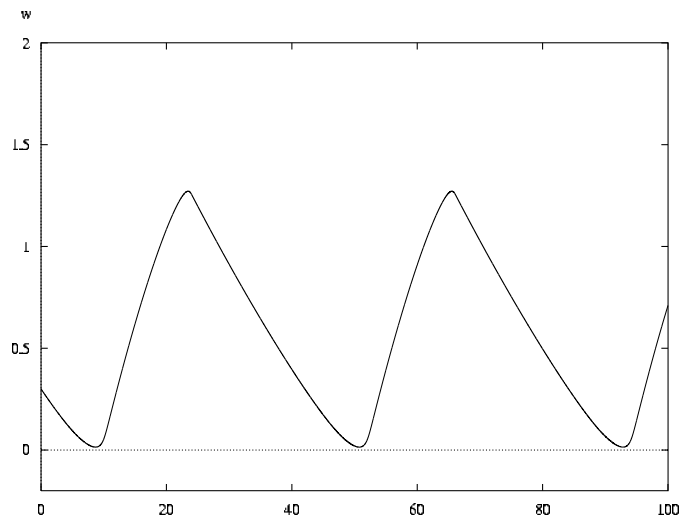


Figura 13-c: Gráfico de w en función de t

Se puede hacer una lectura similar a la del ciclo límite deformado. La diferencia con respecto a las Figuras número 12 es que en 13-a vemos que la trayectoria viene bajando por la rama estable de la izquierda y antes de llegar al mínimo de la función f se despega hacia la rama estable de la derecha sin tomar en ningún momento la rama inestable del centro. En consecuencia, cuando alcanza la rama estable de la derecha lo hace para un valor de w más chico al que tomaba en el ciclo límite deformado y entonces permanece más tiempo en la rama estable de la derecha lo que se traduce en las gráficas de v respecto

al tiempo (Figura 13-b) en un pico no tan pronunciado.

7.2 Oscilador no autónomo

Nuestro interés es ver cómo cambia el modelo ante fuerzas periódicas externas. Es decir, queremos estudiar el siguiente modelo

$$\begin{aligned}\dot{v} &= f(v) - w - \theta s(t) \\ \dot{w} &= \epsilon[pv - o - w]\end{aligned}\tag{44}$$

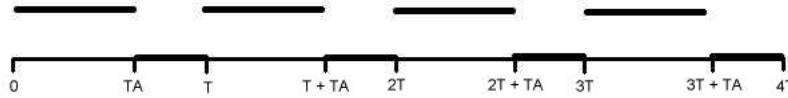
con

$$f = \begin{cases} f_{cub}(v_m) \frac{v_m^2}{v^2} + k, & v \leq v_m \\ f_{cub}(v) + k, & v > v_m \end{cases}$$

y

$$f_{cub}(v) = -hv^3 + av^2 - bv + c,$$

donde θ es una constante y $s(t)$ es una función periódica de período T , que vale 1 para un período de longitud TA y 0 para el período de longitud $T-TA$. La gráfica de $s(t)$ es



Esta función s ha sido motivada por resultados experimentales [23].

El modelo que proponemos es una modificación del modelo FHN (Ejemplo 2 de la Sección 4.3) con la característica de que la rama izquierda de $f(v)$ es asintótica al eje w , tal como ocurre en distintas versiones del Oregonator (ver curvas de nivel cero del Ejemplo 5 de la Sección 4.3). Esto permite, entre otras cosas, que los valores de v sean positivos, lo cual es necesario ya que se trata de concentraciones químicas. La constante k también fue elegida para que los valores de w sean positivos ya que es también una concentración química.

Las constantes de (44) utilizadas en el estudio fueron $\epsilon = 0,01$; $p = 10$; $o = 2,6$; $a = 4,32$; $h = 1,92$; $b = 1,8$; $c = 0,23$; $v_m = 0,25$ y $k = 0,12$ y las de la función $s(t)$ toman valores $T = 151$ y $\theta = 0.045$ y TA será dejado como un parámetro.

Las Figuras 14-a, 14-b y 14-c corresponden al modelo (44) cuando $TA = 40$. En la Figura 14-a se puede observar que la fuerza externa influye en la dinámica del sistema produciendo la convivencia de dos ciclos límites de amplitud grande.

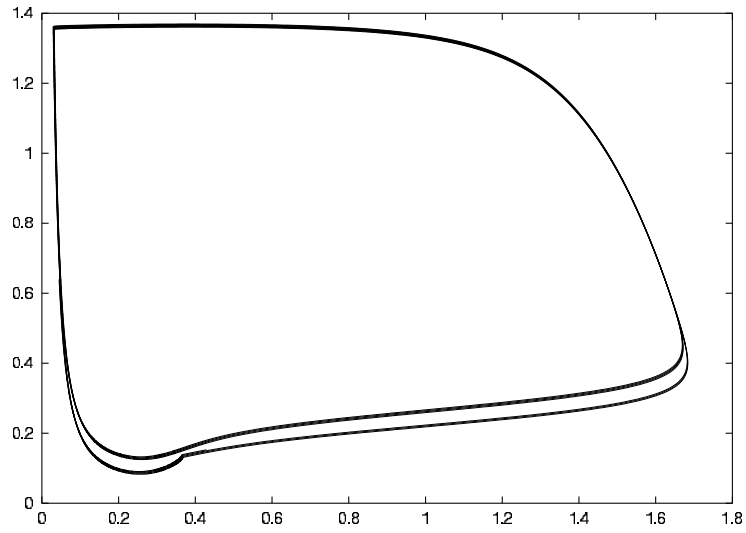


Figura 14-a: Plano de Fases

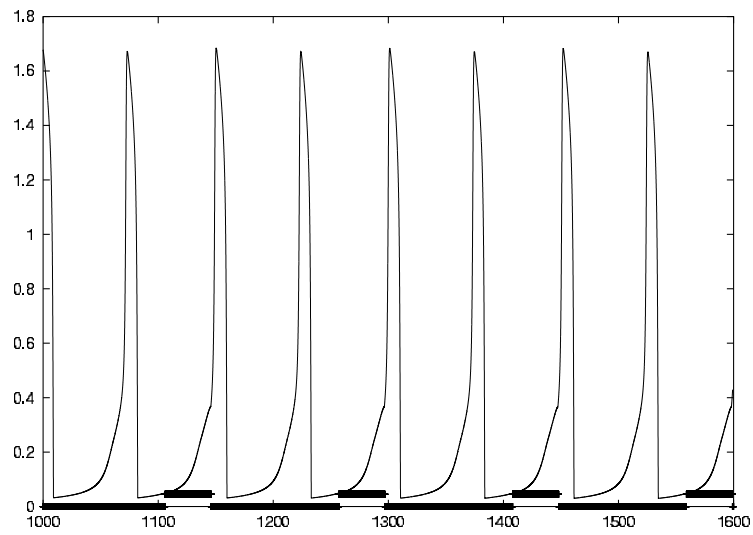


Figura 14-b: Gráfica de v en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA=40$

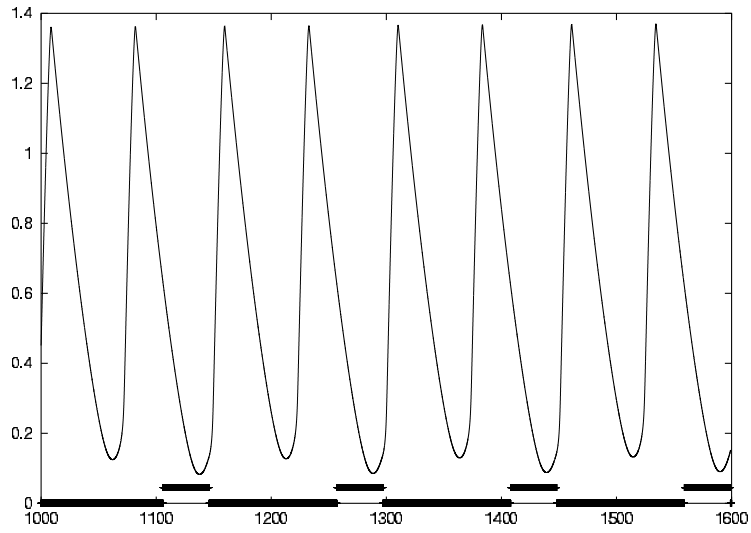


Figura 14-c: Gráfica de w en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA=40$

En las Figuras 14-b y 14-c se puede ver que estos dos tipos de ciclos límites se van intercalando.

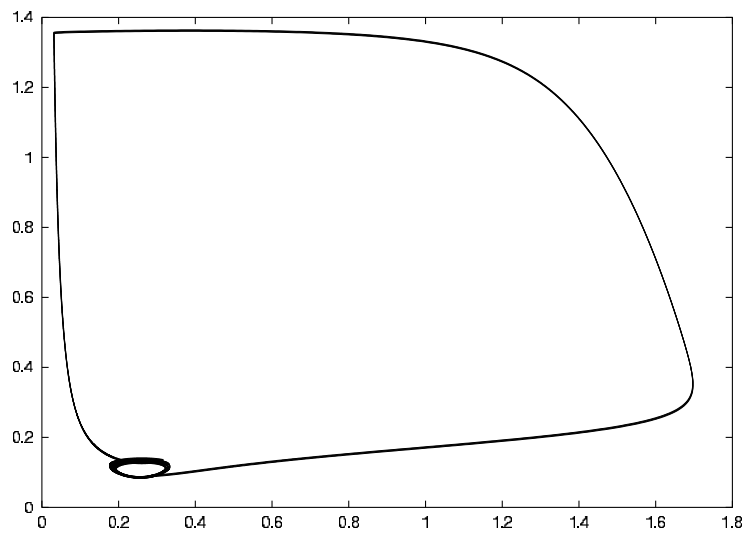


Figura 15-a: Plano de Fases

Las Figuras 15-a, 15-b, 15-c y 15-d corresponden al modelo (44) cuando $TA = 80$. En la Figura 15-a se puede observar que la fuerza externa produjo la aparición de un ciclo límite de amplitud pequeña que convive con el ciclo límite de amplitud grande.

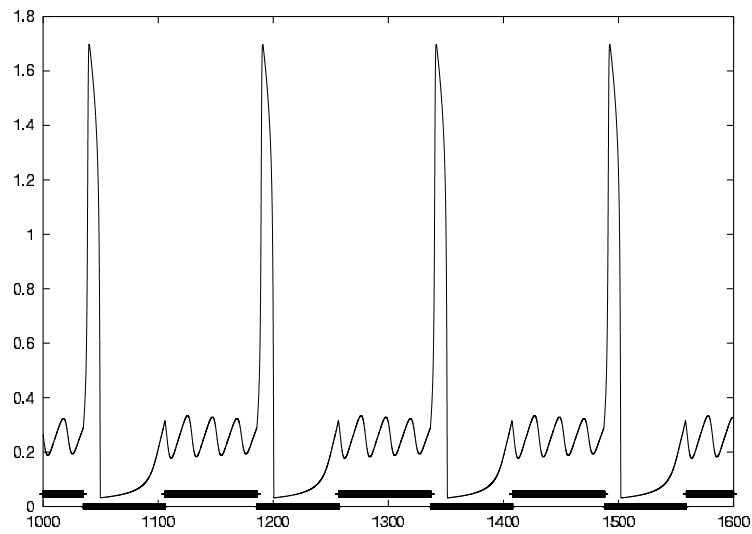


Figura 15-b: Gráfica de v en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA=80$

En la figura 15-b se puede leer mejor que se produce un patrón de cuatro oscilaciones pequeñas y una oscilacion de amplitud mayor.

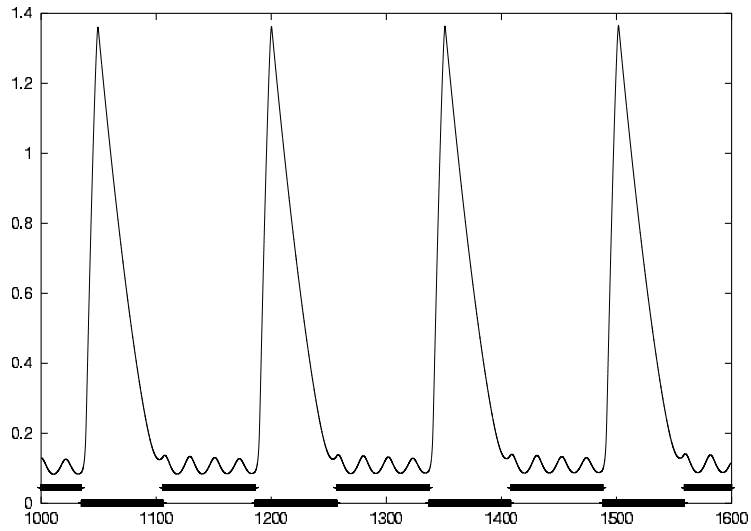


Figura 15-c: Gráfica de w en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA= 80$

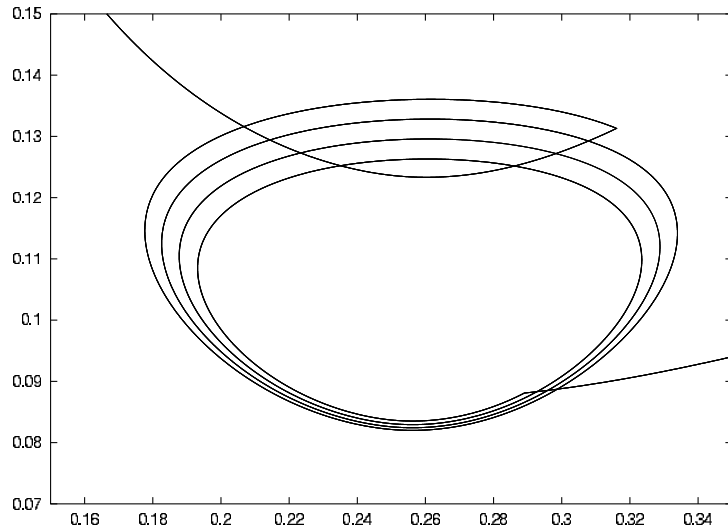


Figura 15-d: Zoom de 15-a

En la Figura 15-d podemos ver mejor cuál es la influencia de la función $\theta_s(t)$ en la dinámica del sistema. La función $\theta_s(t)$ modifica la posición relativa de las curvas de nivel cuando toma valor distinto de cero. A partir de ese momento la trayectoria pasa a estar en una posición donde se produce una espiral de amplitud pequeña. En el momento en que la

función $\theta_s(t)$ vuelve a valer cero la trayectoria se encuentra en una posición en que la trayectoria se escapa hacia la otra rama estable de la función f y se vuelve a producir una oscilación de amplitud grande.

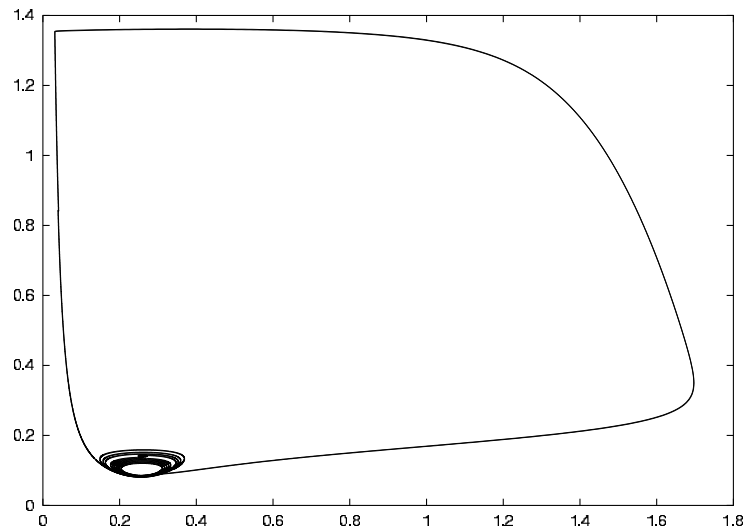


Figura 16-a: Plano de Fases

Las Figuras 16-a, 16-b, 16-c y 16-d corresponden al modelo (44) cuando $TA = 80$. En la Figura 16-a vemos que nuevamente conviven un ciclo límite de amplitud grande con espirales pequeñas. En las Figuras 16-b y 16-c tenemos una visión de cómo son las oscilaciones pequeñas correspondientes a las mismas.

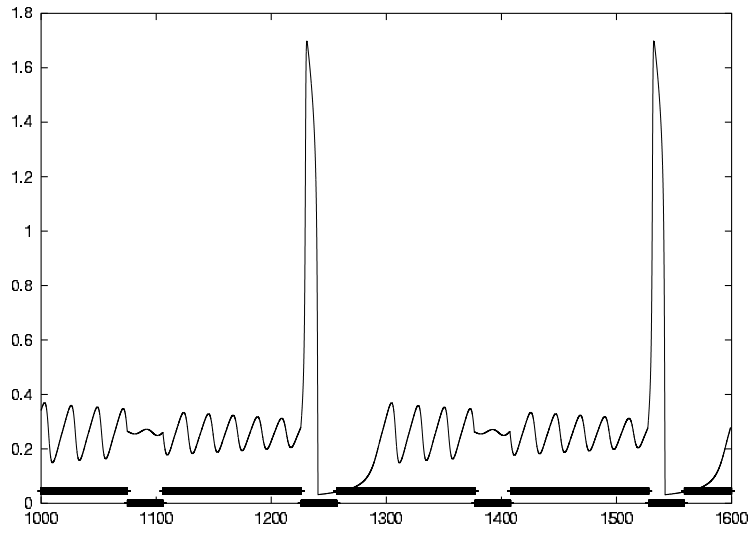


Figura 16-b: Gráfica de v en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA= 120$

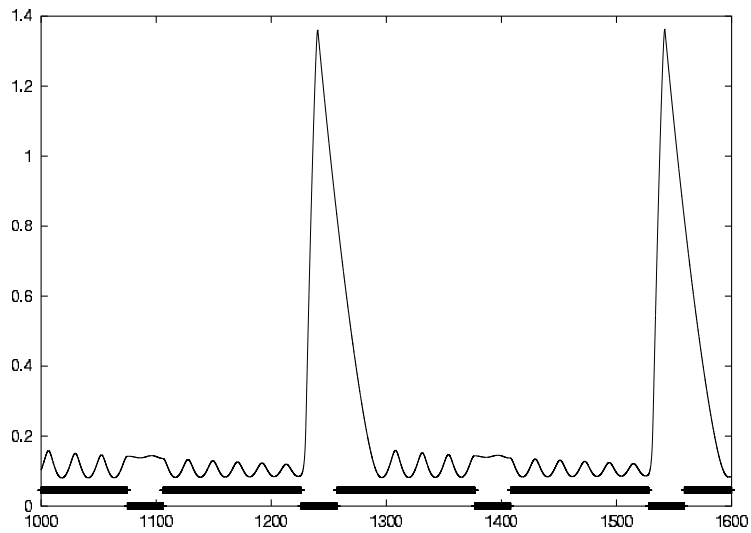


Figura 16-c: Gráfica de w en función de t y de la función $\theta_s(t)$ con $TA= 120$

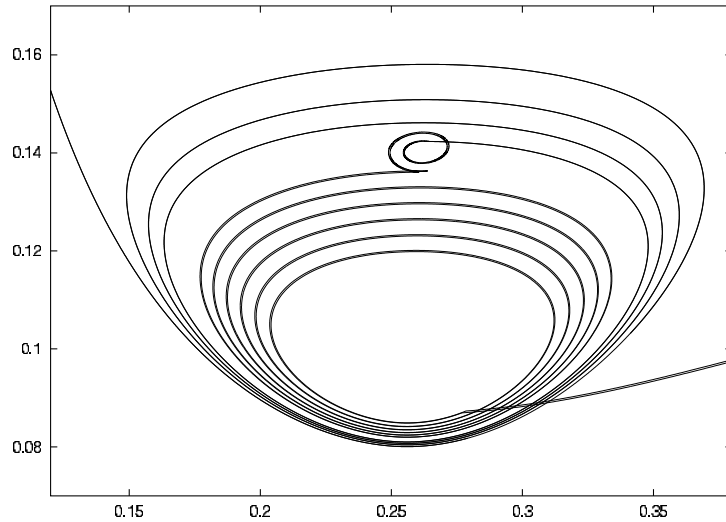


Figura 16-d

La Figura 16-d nos muestra nuevamente la influencia de la función $\theta_s(t)$. En este caso la trayectoria ya está influenciada por el valor de la función $\theta_s(t)$ distinto de cero (como se puede ver en la Figura 16-b o 16-c). Vemos que en el momento que la función $\theta_s(t)$ toma valor cero, la trayectoria se encuentra en una posición donde hay una espiral y se produce el “rulito” que vemos en la figura. Luego la función $\theta_s(t)$ vuelve a tomar un valor distinto de cero dándonos una espiral, y en el momento que la función $\theta_s(t)$ vuelve a valer cero, la trayectoria se escapa hacia la otra rama volviendo a producirse el ciclo límite de amplitud grande.

Luego de la realización de una cantidad razonable de simulaciones de las cuales resultan paradigmáticas las Figuras 14, 15 y 16, el estudio se trasladó a buscar para qué valores de TA y de θ se repetían los patrones observados en dichas figuras. Con este fin, definimos *pico* cuando la función v supera el valor 1,5. La Figura 17-a permite una búsqueda rápida de patrones. El eje horizontal es el tiempo y el eje vertical marca el valor de TA, es decir, el intervalo de tiempo durante el cual la función $\theta_s(t)$ vale θ . En cada gráfico se fija el valor de θ y lo que nos dice el gráfico es cuándo se produce un pico para cada período TA. Esto nos permite ver cómo influye TA en el tipo de patrones con un valor de θ dado.

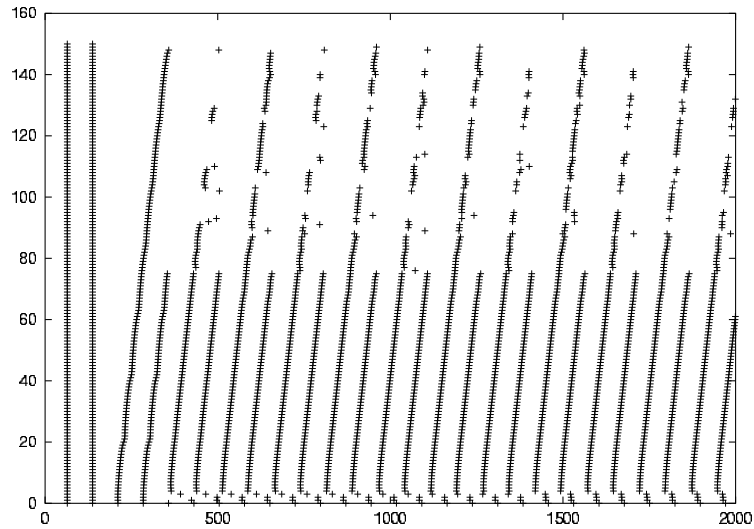
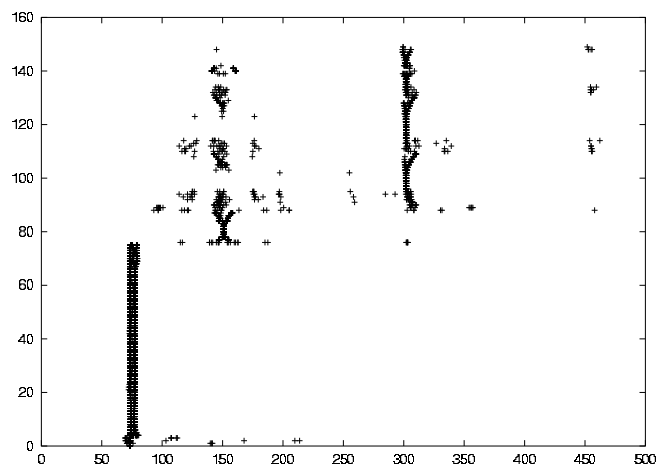


Figura 17-a: Gráfica de picos en función de t para valores de $\theta = 0.045$

Por ejemplo podemos ver que el patrón donde no se producen oscilaciones pequeñas como en la Figura 14-a aparece para valores de TA menores que 75. Patrones como la Figura 15-a aparecen para diferentes valores de TA , como por ejemplo para $75 < TA < 85$. Y el patrón de la Figura 16-a aparece para valores alrededor de $TA=100$ y $TA=120$.

La Figura siguiente, también de utilidad a la hora de identificar patrones, muestra la diferencia de tiempo entre dos picos consecutivos en función de t para el valor de $\theta = 0.045$.



8 Conclusiones

El propósito de este trabajo consistió en estudiar el modelo FHN modificado que representa reacciones químicas oscilatorias. A dicho modelo se le aplicó un término forzante sugerido por experimentos realizados. Concluimos que este término forzante modifica la dinámica del sistema. Dependiendo de las características de este término forzante vemos que es posible modificar la amplitud del oscilador. En el futuro con un mayor análisis de este forzante será posible un control en la amplitud del mismo, es decir que, si el oscilador autónomo es de amplitud grande se podrá inducir a uno de amplitud pequeña.

Referencias

- [1] S. M. Baer y T. Erneux: *Singular Hopf bifurcation to relaxation oscillations*. SIAM Journal on Applied Mathematics, **46**: 721-739, 1986.
- [2] B.P. Belousov: *Sbornik Referator Opo Radiatsioni Medizin*. Conference proceedings, p.145, 1958.
- [3] E. Benoit, J. L. Callot, F. Dienner y M. Dienner: *Chase au Canard*. IRMA, Strasbourg, 1980.
- [4] E. A. Coddington y N. Levinson: *Theory of Ordinary Differential Equations*. McGraw-Hill, 1955.
- [5] S. D. Cohen y A. C. Hindmarsh: *CVODE, A Stiff/Non Stiff ODE Solver in C*. Computers in Physics, Scientific Programming, 10(2), 138,1996.
- [6] W. Eckhaus: *Relaxation Oscillations including a standard chase on french ducks*. In Lecture Notes in Mathematics, Springer-Verlag, **985**: 449-497, 1983
- [7] I. R. Epstein y J. P. Pojman: *Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics. Oscillations, Waves, Patterns and Chaos*. Oxford University Press, 1998.
- [8] R. J. Field y M. Burger: *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*. Wiley, 1985.
- [9] J. Grasman: *Asymptotic Methods for relaxation oscillations and Applications*. Springer-Verlag, 1986.
- [10] P. Gray y S. K. Scott: *Chemical Oscillations and Instabilities: Nonlinear Chemical Kinetics*. Clarendon, Oxford, 1995.
- [11] J. Guckenheimer y P. Holmes: *Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields*. Springer-Verlag, 1997.
- [12] J. Hale y H. Kocak: *Dynamics and Bifurcations*. Springer-Verlag, 1991.
- [13] T. J. Kapper: *An Introduction to Geometric Methods and Dynamical Systems Theory for Singular Perturbation Problems*
- [14] R. Kapral y K. Showalter: *Chemical Waves and Patterns*. Kluwer, Dordrecht, 1995.
- [15] M. Krupa y P. Szmolyan: *Relaxation oscillation and canard explosion*. Journal of Differential Equations **174**, 312-368, 2001. Por aparecer en SIAM Journal on Applied Mathematics, 2003.

- [16] M. Krupa y P. Szmolyan: *Extending geometric singular perturbation theory to non-hyperbolic points - fold and canard points in two dimensions*. SIAM Journal on Mathematical Analysis, **33**: 286-314, 2001.
- [17] E. F. Mishchenko y N. K. Rozov: *Differential equations with small parameters and relaxation oscillations*. Plenum Press, 1980.
- [18] J. D. Murray: *Mathematical Biology*. Springer, Berlin, 1989.
- [19] A. Quarteroni, R. Sacco y F. Saleri *Numerical Mathematics*. Springer, 2000.
- [20] H. G. Rotstein, N. Kopell, A. M. Zhabotinsky y I.R. Epstein: *A canard mechanism for localization in systems of globally coupled oscillators*.
- [21] H. G. Rotstein, N. Kopell, A. M. Zhabotinsky y I.R. Epstein: *Canard phenomenon and localization of oscillations in the Belousov-Zhabotinsky reaction with global feedback*. Preprint.
- [22] F. Sagués e I. R. Epstein: *Nonlinear chemical dynamics*. Dalton Transactions, **7**: 1201-1217, 2003.
- [23] J. Sotomayor: *Licoes de equacoes diferenciais ordinarias*. Instituto de Matematica Pura e Aplicada, 1979.
- [24] S. H. Strogatz: *Nonlinear Dynamics and Chaos with Applications to Physics, Biology, Chemistry and Engineering*. Addison Wesley, Reading MA, 1994.
- [25] V. K . Vanag, L. Yang, M. Dolnik, A. M. Zhabotinsky e I. R. Epstein: *Oscillatory cluster patterns in a homogeneous chemical system with global feedback*. Nature, **406**: (6794) 389:391, 2000.
- [26] V. K. Vanag, A. M. Zhabotinsky e I. R. Epstein: *Pattern formation in the Belousov-Zhabotinsky reaction with photochemical global feedback*. The Journal of Physical Chemistry A, **104**: 11566-11577, 2000.
- [27] V. K. Vanag, A. M. Zhabotinsky e I. R. Epstein: *Oscillatory clusters in the periodically illuminated, spatially extended Belousov-Zhabotinsky reaction*. Physical Review Letters, **86**: 552-555, 2001.
- [28] L. Yang, M. Dolnik, A. M. Zhabotinsky e I. R. Epstein: *Oscillatory cluster in a model of the photosensitive Belousov-Zhabotinsky reaction system with global feedback*. Physical Review E, **62**: 6414-6420, 2000.