

# RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE UNA ECUACIÓN DE REACCIÓN-DIFUSIÓN (NUMERICAL SOLUTION OF A REACTION-DIFFUSION EQUATION)

**Moyano E. A., Scarpettini A. F.**

Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica.  
Av. Gral. Paz 1499, (1650) San Martín, Prov. Buenos Aires, Argentina.

Contacto: emoyano@cnea.gov.ar

## RESUMEN

El presente trabajo tiene por objeto continuar con las observaciones y experiencias numéricas sobre un modelo de reacción-difusión, que es una forma simplificada de la ecuación del flujo neutrónico.

El modelo es parabólico, no lineal, con condiciones de borde Dirichlet. El objetivo es aproximar soluciones no triviales, asintóticamente estables para  $t \rightarrow \infty$ , es decir soluciones que tienden a las del problema elíptico, en el sentido de Lyapunov [1, 2, 3, 4].

Pertenece a las llamadas ecuaciones de reacción-difusión de tipo semilineal, es decir, ecuaciones lineales en el operador calor y que además tienen una función de reacción no lineal, en este caso  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , siendo  $u$  concentración,  $a$  y  $b$  parámetros [4]. El estudio de la incidencia de estos parámetros interesa a la física del flujo neutrónico. De modo que se buscan soluciones no triviales, positivas y acotadas.

El algoritmo empleado se fundamenta en el concepto de sucesiones monótonas y ordenadas [5], y en el teorema de existencia de Amann y Sattinger [1].

## ABSTRACT

The purpose of the present job is to continue the observations and the numerical experiences on a reaction-diffusion model, that is a simplified form of the neutronic flux equation.

The model is parabolic, nonlinear, with Dirichlet boundary conditions. The purpose is to approximate non trivial solutions, assyntotically stables for  $t \rightarrow \infty$ , that is solutions that tend to the elliptic problem, in the Lyapunov sense [1, 2, 3, 4].

It belongs to the so-called reaction-diffusion equations of semilinear kind, that is, linear equations in the heat operator and they have a nonlinear reaction function, in this case  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , being  $u$  concentration,  $a$  and  $b$  parameters [4]. The study of the incidence of these parameters take an interest to the neutronic flux physics. So that we search non trivial, positive and bounded solutions.

The used algorithm is based on the concept of monotone and ordered sequences [5], and on the existence theorem of Amann and Sattinger [1].

## INTRODUCCIÓN

Si se toma en consideración el efecto de retroalimentación de la temperatura en el análisis de la dinámica de reactores nucleares, el flujo neutrónico  $u$  y la temperatura  $v$  en el reactor están gobernados por las ecuaciones acopladas:

$$\begin{aligned} u_t - D \nabla^2 u &= \Sigma_a u f_0(u, v) \\ \rho c_p v_t &= v_0 \Sigma_f u \end{aligned} \quad (1)$$

donde  $D$  es el coeficiente difusivo,  $\rho$  es la densidad,  $c_p$  es el calor específico,  $\Sigma_a$  y  $\Sigma_f$  son la sección eficaz total y de fisión, respectivamente, y  $v_0$  es el número de neutrones producido por fisión. La función  $f_0$  representa el efecto de retroalimentación en el sistema del reactor, y se la llama factor de multiplicación. Hay dos tipos de retroalimentación, llamadas retroalimentación puntual y retroalimentación adiabática. En el primer caso  $f_0 \equiv f_0(u)$  es independiente de la temperatura  $v$  y es dado usualmente en la forma  $f_0 = a_1 - b_1 u$ . Las constantes  $a_1$ ,  $b_1$  son ambas positivas cuando la retroalimentación es negativa. Sustituyendo  $f_0 = a_1 - b_1 u$  en (1) nos lleva a

$$u_t - D \nabla^2 u = f(t, x, u) \quad (2)$$

con

$$f(t, x, u) = f(u) = u(a - bu) \quad (3)$$

donde  $a = a_1 \Sigma_a$ ,  $b = b_1 \Sigma_a$ . En el caso que haya una temperatura de retroalimentación positiva, la función  $f_0$  toma la forma  $\sigma u^\gamma$ , donde  $\sigma$ ,  $\gamma$  son constantes positivas. Esto nos lleva a la función de reacción

$$f(u) = \sigma u^p \quad (p \geq 1) \quad (4)$$

En el caso adiabático la función  $f_0 \equiv f_0(v)$  es independiente del flujo neutrónico  $u$  y se toma como  $f_0(v) = a_2 - b_2(v - v_a)$ , donde  $v_a$  es la temperatura promedio del núcleo del reactor. Reemplazando  $v$  por  $v - v_a$  y sustituyéndolo en (1), la ecuación resultante es

$$\begin{aligned} u_t - D \nabla^2 u &= c_1 u - c_2 uv \\ v_t &= c_3 u \end{aligned} \quad (5)$$

donde  $c_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , son constantes positivas. Integrando la ecuación para  $v$  desde 0 hasta  $t$  y sustituyendo  $v$  en la ecuación por  $u$ , nos lleva a una ecuación integrodiferencial en la forma de (2), donde

$$f(t, u) = au - bu \int_0^t u(s, x) ds \quad (6)$$

y  $a$ ,  $b$  son constantes positivas. Por otra parte, derivando la segunda ecuación en (5) respecto de  $t$  y sustituyendo en la primer ecuación, un cálculo formal nos da

$$v_{tt} = c_3 (D \nabla^2 u + c_1 u - c_2 uv) = \frac{\partial}{\partial t} (D \nabla^2 v + c_1 v - c_2 v^2 / 2)$$

Resulta por integración sobre  $(0, t)$  que

$$v_t - D \nabla^2 v = c_1 v - \frac{c_2}{2} v^2 + q(x)$$

donde  $q(x) = v_t(0, x) = c_3 u(0, x)$ . Esta ecuación es de la forma de (2) con  $u = v$  y

$$f(u) = u(a - bu) + q(x) \quad (7)$$

La función precedente difiere de (3) sólo en un término fuente  $q$ , que no es función de la incógnita  $u$ . En ambas (3) y (7) la constante  $a$  es positiva. De aquí en más, consideraremos, para facilitar la ilustración,  $q(x) = 0$ . De modo que matemáticamente se estudia el modelo representado por:

$$u_t - D u_{xx} = u(a - bu) \quad (x \in [0, L], 0 < t \leq T) \quad (8)$$

$$C.B. \quad u(x=0) = u(x=L) = 0 \quad (0 < t \leq T)$$

$$C.I. \quad u(x, 0) = u_0(x)$$

Si se anula  $u_t$  queda el problema elíptico:

$$D u_{xx} + u(a - bu) = 0 \quad (x \in [0, L]) \quad (9)$$

$$C.B. \quad u(x=0) = u(x=L) = 0$$

Con  $D = 1$  y multiplicando (9) por  $u_x$  es:

$$F(u, u_x) = \frac{1}{2} u_x^2 + \frac{a}{2} u^2 - \frac{b}{3} u^3 = cte. \quad (10)$$

Graficando esta función en el plano  $(u, u_x)$  (o plano de fases, ver fig.1), se aprecian las soluciones de (9).  $R_1 = (0, 0)$  y  $R_2 = (a/b, 0)$  se denominan puntos de descanso. Se muestran curvas distintas de la solución trivial, que verifican (9).

Sean  $(0, r)$  las coordenadas de cualquier punto sobre el eje  $u_x$ , resulta:

$$0 < r < \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{a^3}}{b} \quad (11)$$

Con  $r$  demasiado grande, la trayectoria no corta el eje  $u$  y aparecen soluciones no acotadas.

Así, cualquier trayectoria verifica  $F(u, u_x) = cte$ . En particular si  $ABC$  es una trayectoria no trivial, con  $A = (0, r)$ ,  $x = 0$  en  $A$  y  $x = L$  en  $C$ , es:

$$\frac{1}{2}u_x^2 + \frac{a}{2}u^2 - \frac{b}{3}u^3 = \frac{r^2}{2} \quad (12)$$

$$\Rightarrow dx = \frac{du}{\sqrt{\frac{2}{3}bu^3 - au^2 + r^2}} \quad (13)$$

Si  $x_B$  y  $u_B$  son los valores de  $x$  y  $u$  en el punto  $B$ , por simetría (respecto de  $u_x$ ) es  $L = 2x_B$ . De modo que en  $x_B = L/2$  se tiene una solución no constante del problema elíptico. Integrando (13) resulta:

$$x_B = \int_0^{u_B} \frac{du}{\sqrt{\frac{2}{3}bu^3 - au^2 + r^2}} \quad (14)$$

o bien:

$$\Rightarrow L = 2 \int_0^{u_B} \frac{du}{\sqrt{a(u_B^2 - u^2) - \frac{2}{3}b(u_B^3 - u^3)}} \quad (15)$$

Aproximando numéricamente (por Simpson) esta integral elíptica, para  $u_B \rightarrow 0$ , resulta en el límite un valor especial de longitud del dominio, que se indica con  $L^*$  y se denomina punto de bifurcación: es el punto a partir del cual aparecen las soluciones no triviales.

Las experiencias numéricas realizadas en el caso  $a = b = 1$ , muestran que  $L^* = \pi$ , y en general se observa la dependencia de  $L^*$  con el parámetro  $a$  de esta función de reacción.

Es así que empleando el algoritmo mencionado en [10], se ha resuelto el problema diferencial enunciado y se han graficado los resultados en el plano  $(L, \|u\|_\infty)$ , que es el plano de bifurcación.  $\|u\|_\infty$  es la norma infinita de la solución  $u$ , que se define:

$$\|u\|_\infty = \max\{|u| : x \in [0, L]\} \quad (16)$$

Se muestran las curvas de bifurcación (fig.3a, b, c y d), el punto  $L^*$ , donde comienzan a aparecer las soluciones no triviales, y la relación entre la idea de bifurcación y los parámetros  $a$  y  $b$ . Las experiencias numéricas muestran que  $\|u\|_\infty \rightarrow a/b$ . Estas mismas

experiencias hacen percibir la relación entre la idea de bifurcación (aparición de soluciones no triviales) y los valores de los parámetros  $a$  y  $b$ .

En cuanto a la estabilidad de las soluciones del problema enunciado, se consideran las ideas de Lyapunov y se distinguen dos tipos de estabilidad en las soluciones de equilibrio (soluciones independientes del tiempo): una estabilidad de carácter local, y otra llamada estabilidad asintótica. Así se dice que una solución de equilibrio  $u_e(x)$  es estable (localmente estable), si basta tomar una solución del sistema parabólico  $u_0(x)$  suficientemente cercana a la solución de equilibrio ( $|u_0(x) - u_e(x)| < \delta$ ) para que resulte  $|u(x,t) - u_e(x)| < \varepsilon$  a  $t > 0$ . La solución del problema parabólico se mantiene en un entorno de la solución de equilibrio [6].

En este trabajo el interés radica, especialmente, en aproximar numéricamente soluciones no triviales positivas, acotadas, independientes del tiempo y asintóticamente estables (es decir, soluciones estables en las que además  $\lim_{t \rightarrow \infty} |u(x,t) - u_e(x)| = 0$ ), llamadas atractores. Así se intenta aproximar soluciones de equilibrio del problema parabólico (8) que coincidan con la solución del problema elíptico (9), cuando  $t \rightarrow \infty$ .

Como  $u''(x) \leq 0$ , y  $u(0) = u(L) = 0$ ,  $u(x)$  es una función cóncava hacia abajo y  $u(x) \geq 0$  en el dominio  $[0;L]$ .

El método de las sucesiones monótonas [4, 5, 7, 8] usado para aproximar numéricamente el atractor, tiene su fundamento en un teorema de existencia de solución, demostrado por H. Amann (1971) y Sattinger (1972), que afirma que si un problema de borde como el expuesto, tiene una solución inferior  $\underline{u}(x)$  ( $\underline{u}(x)$  es tal que  $-L(\underline{u}(x)) \leq f(\underline{u})$ ,  $\underline{u} \leq 0$ ,  $L$  operador diferencial) y una superior  $\bar{u}(x)$  ( $\bar{u}(x)$  es tal que  $-L(\bar{u}(x)) \geq f(\bar{u})$ ,  $\bar{u} \geq 0$ ) y se cumple que  $\underline{u}(x) \leq \bar{u}(x)$  en el dominio  $D$ , entonces el problema de borde tiene una solución  $u(x)$  tal que  $\underline{u}(x) \leq u(x) \leq \bar{u}(x)$  en  $D$ .

De modo que se dice que  $\bar{u}$  es solución superior del problema elíptico si  $-\bar{u}'' \geq f(\bar{u})$  o  $\Delta \bar{u} + f(\bar{u}) \leq 0$  y  $\underline{u}$  es solución inferior si  $-\underline{u}'' \leq f(\underline{u})$  o  $\Delta \underline{u} + f(\underline{u}) \geq 0$ .

Para el operador calor se verifica:  $-\Delta \phi = \lambda \phi$ , con  $\phi(0) = \phi(L) = 0$ ,

$$\phi_n(x) = \text{sen} \frac{n\pi x}{L}, \text{ con } \lambda_n = \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2, n = 1, 2, 3, \dots \quad (17)$$

siendo  $\phi_n(x)$  las autofunciones y  $\lambda_n$  los autovalores correspondientes. Para  $n = 1$  es

$$\phi_1(x) = \text{sen} \frac{\pi x}{L}, \text{ con } \lambda_1 = \left( \frac{\pi}{L} \right)^2 \quad (18)$$

siendo  $\phi_1(x)$  la autofunción principal y  $\lambda_1$  el autovalor correspondiente.

Si por ejemplo se introduce la función  $h(x) = k\phi_1(x)$ , con  $k > 0$ , en la ecuación elíptica resulta:

$$\Delta h + f(h) = k \Delta \phi_1 + h(a - b h) = -k \lambda_1 \phi_1 + k \phi_1 (a - b k \phi_1) = k \phi_1 (-\lambda_1 + a - b k \phi_1)$$

En caso de ser  $\lambda_1 < a$  basta tomar  $k$  suficientemente pequeño para que resulte

$$\Delta h + f(h) \geq 0$$

es decir  $h(x)$  sería una solución inferior del problema diferencial ( $\underline{u}(x) = h(x)$ ).

En caso de ser  $a = b = 1$  y  $L = \pi$ , resulta  $\Delta h(x) + f(h(x)) \leq 0$ , es decir  $h(x)$  sería una solución superior ( $\bar{u}(x) = h(x)$ ). De modo que la construcción de las primeras funciones mayorante y minorante depende de los parámetros de la función de reacción.

Así, existen maneras de construir soluciones superiores  $g(x)$  e inferiores  $h(x)$  para esta función de reacción, que encierran la solución  $u(x)$  y tales que  $h(x) \leq u(x) \leq g(x)$ . Este es el punto de partida del proceso iterativo de Picard [4]. La metodología de cálculo ha sido explicada en [10]. Allí se mencionan dos condiciones sobre la función de reacción, que son fundamentales para mostrar la monotonicidad de las sucesiones que se generan en el tiempo y para demostrar la convergencia y la unicidad de la solución:

$$f(u_1) - f(u_2) \geq -k_1(u_1 - u_2), \quad u_1 \geq u_2, \quad k_1 \geq 0 \quad (19)$$

$$f(u_1) - f(u_2) \leq -k_2(u_1 - u_2), \quad u_1 \geq u_2, \quad k_2 \geq 0 \quad (20)$$

La primera (19) permite mostrar que la sucesión superior  $\{\bar{u}^{(k)}\}$  y la inferior  $\{\underline{u}^{(k)}\}$ , que parten de una solución superior  $g(x)$  y una inferior  $h(x)$  respectivamente, mantienen el carácter de monótonas.

De modo que  $\{\bar{u}^{(k)}\}$  converge monótonamente por valores superiores a una solución  $\bar{u}$  y  $\{\underline{u}^{(k)}\}$  converge monótonamente por debajo a una solución  $\underline{u}$ , y si se cumple la segunda condición (20) resulta  $\bar{u} = \underline{u}$  la única solución del problema en el intervalo de funciones  $[g, h]$ .

Uno de los casos considerados en el presente trabajo es la función de reacción con parámetros  $a = 30$ ,  $b = 1$ . Las normas infinitas de las soluciones a lo largo del tiempo están graficadas en la fig.4a y b. Estas normas convergen a la norma infinita de la solución del problema, que puede apreciarse comparando la fig.2 con la fig.4a.

Como se afirma en [10], si la función de reacción es Lipschitziana, es decir verifica:

$$|f(u_1) - f(u_2)| \leq K|u_1 - u_2|$$

siendo  $K$  la constante de Lipschitz, entonces se verifican obviamente las dos condiciones (19) y (20). Basta ver que siendo  $f(u) = u(a - bu)$  es:

$$\begin{aligned} |f(u_1) - f(u_2)| &= |u_1(a - bu_1) - u_2(a - bu_2)| = \\ &= |a(u_1 - u_2) - b(u_1^2 - u_2^2)| = \\ &= |u_1 - u_2| |a - b(u_1 + u_2)| \end{aligned}$$

Dado que se consideran funciones positivas y acotadas, existe  $u_1^* = \max\{u_1\}$  y  $u_2^* = \max\{u_2\}$ , y se puede considerar la condición de Lipschitz en forma local. Para que sea  $|u_1 - u_2| |a - b(u_1 + u_2)| \leq K|u_1 - u_2|$  basta elegir  $K \geq |a - b(u_1^* + u_2^*)|$ . O bien se pueden elegir en forma individual:

$$\begin{aligned} k_1 &= \max\{-f_u(u), h(x) \leq u \leq g(x)\} \\ k_2 &= \max\{f_u(u), h(x) \leq u \leq g(x)\} \end{aligned}$$

## CONCLUSIONES

Dado un modelo de reacción-difusión, con una función de reacción  $f(u, a, b) = u(a - bu)$ , siendo la variable  $u$  la concentración en la ecuación del flujo neutrónico,  $a$  y  $b$  dos parámetros que involucran otros de importancia física, se ha procedido a aproximar las soluciones mediante discretización en diferencias finitas implícita, en un proceso iterativo de tipo Picard.

Se han obtenido soluciones asintóticamente estables, es decir que verifican  $|u(x, t) - u_e(x)| \rightarrow 0$  si  $t \rightarrow \infty$  (se ha llamado  $u_e(x)$  a la solución del problema elíptico). Se han realizado también experiencias numéricas a fin de verificar la relación existente entre los parámetros  $a$  y  $b$  y la variación de la  $\|u\|_\infty$  de las soluciones no triviales [9].

Se han graficado curvas de bifurcación que muestran la aparición de soluciones no triviales, en función de la longitud del dominio  $[0, L]$  del modelo estudiado, notándose que la curva que contiene los valores de  $\|u\|_\infty$  se hace asintótica a la recta  $a/b$ , y que el valor de  $L^*$  disminuye a medida que aumenta el valor del parámetro  $a$ .

Se muestran también las soluciones del problema estacionario y la coincidencia de ellas con las soluciones del problema evolucionario, cuando  $t \rightarrow \infty$ , es decir aparecen los llamados atractores para distintos valores de  $a$  y  $b$ .

## REFERENCIAS

- [1] **Smoller, J.**, *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations*, Springer-Verlag, 1994.
- [2] **Fitzgibbon, W. E. y Walker, H. F.**, *Nonlinear Diffusion*, Pitman, 1977.
- [3] **Fife, P. C.**, *Mathematical Aspects of Reacting and Diffusing Systems*, Springer-Verlag, 1979.
- [4] **Pao, C. V.**, *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*, Plenum Press, New York, 1992.
- [5] **Walter, W.**, *Differential and Integral Inequalities*, Springer-Verlag, 1970.
- [6] **Logan, J. D.**, *Nonlinear Partial Differential Equations*, J. Wiley, 1994.
- [7] **Gorenflo, R.**, *Difference Schemes of Monotonic Type for Weakly Coupled Systems of Parabolic Equations with Mixed Lateral Boundary Conditions*, Computing 8, 343-362 (1971).
- [8] **Collatz, L.**, *Functional Analysis and Numerical Mathematics*, Academic Press, 1966.
- [9] **Huy, C. U., McKenna, P. J. y Walter, W.**, *Finite Difference Approximations to the Dirichlet Problem for Elliptic Systems*, Num. Math. 49, 227-237 (1986).
- [10] **Moyano, E. A. y Scarpettini, A. F.**, *Difusión no lineal: Método de las sucesiones monótonas para resolver un modelo de reacción-difusión de interés en la física nuclear*, XXVI Reunión Anual de la AATN, 1999.



## GRÁFICOS

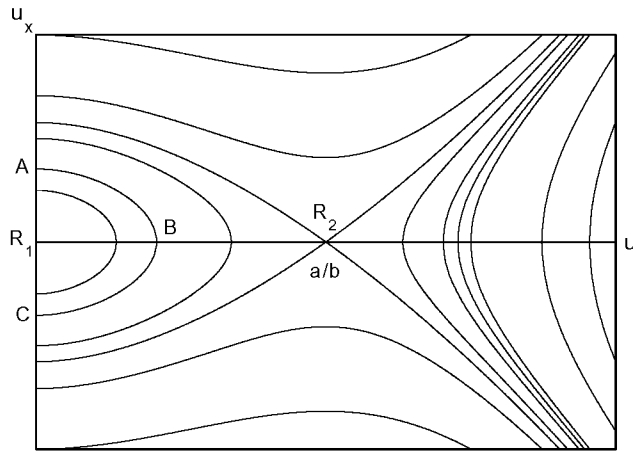


Figura 1. Diagrama de fases.

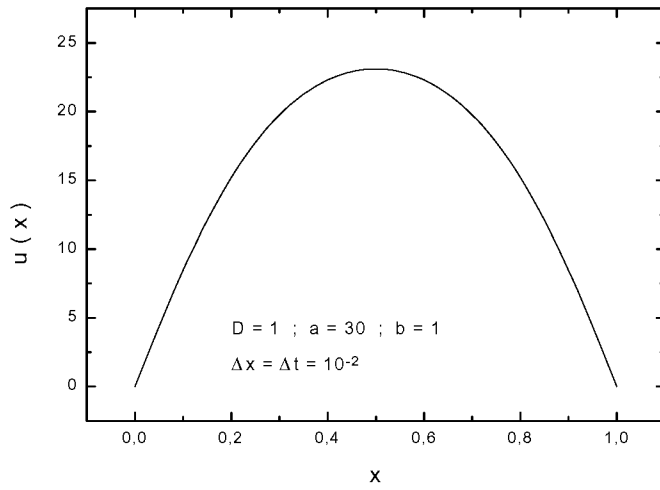


Figura 2. Solución estacionaria típica no trivial.

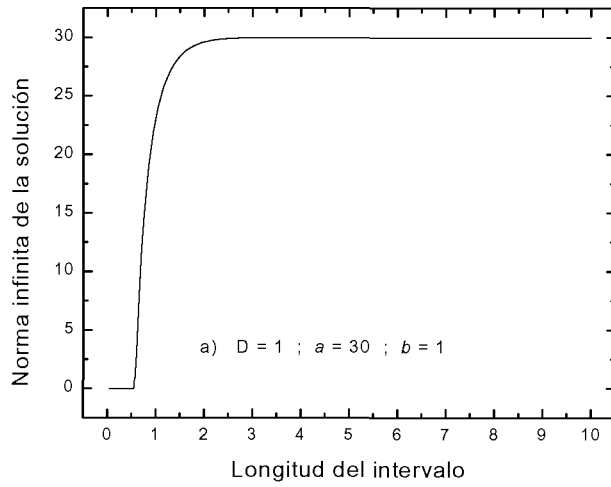


Figura 3a. Plano de bifurcación:  $a = 30, b = 1$ .

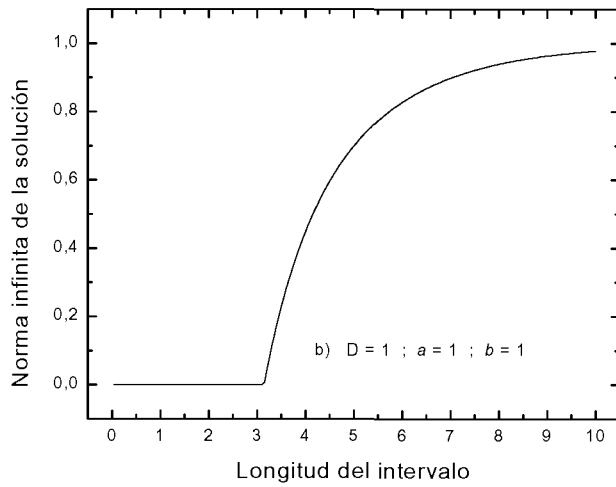


Figura 3b. Plano de bifurcación:  $a = 1, b = 1$ .

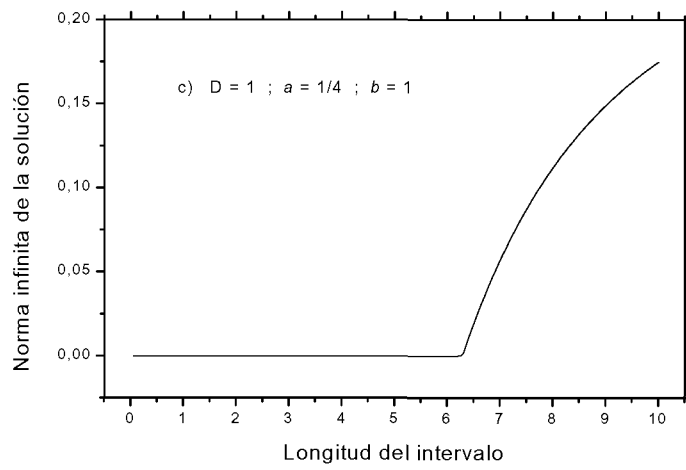


Figura 3c. Plano de bifurcación:  $a = 1/4$ ,  $b = 1$ .

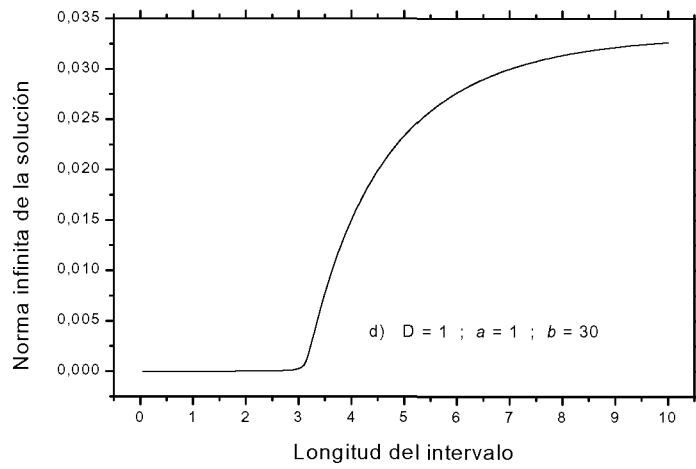


Figura 3d. Plano de bifurcación:  $a = 1$ ,  $b = 30$ .

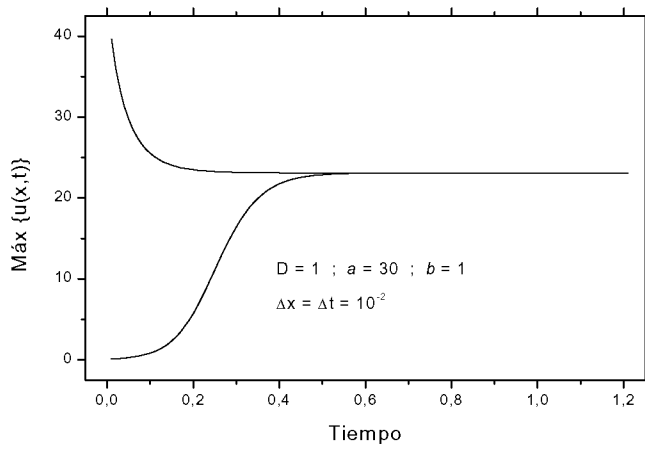


Figura 4a. Evolución de la norma infinita de las soluciones superiores e inferiores.

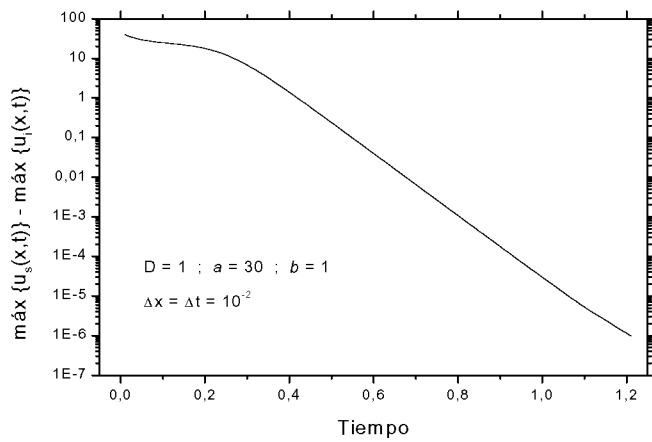


Figura 4b. Convergencia a la única solución del problema.