Dinâmica do Brusselator

Brusselator dinamic

Isabella Veronica Koslinski Freitas
ivkfreitas@gmail.com
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Ponta Grossa, Paraná, Brasil

Thiago Gilberto do Prado
thiagogilbertodoprado@gmail.com
Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Ponta Grossa, Paraná, Brasil

RESUMO

Este presente artigo tem como objetivo estudar o comportamento de uma reação oscilatória chamada Brusselator. Tendo em mente que há uma dinâmica não linear, o estudo da mesma é a base deste estudo, e para maiores detalhes na resolução é aplicada uma força externa à reação química. Diferenciando-se das demais reações, a do tipo oscilatória adquiri uma atuação não periódica podendo torna-la quase-periódica e até caótica. Com isso em mente e trabalhando em cima de equações diferenciais, é iniciado com a projeção de um mapa de fase juntamente com mapa de Poincaré, variando alguns parâmetros é feito o diagrama de bifurcação e posteriormente o expoente de Lyapunov, respectivamente.

PALAVRAS-CHAVE: Reação oscilatória. Dinâmica não linear. Caos.

Recebido: 19 ago. 2019.
Aprovado: 01 out. 2019.

ABSTRACT

This paper aims to study the behavior of an oscillatory reaction called Brusselator. Bearing in mind that there is a nonlinear dynamics, the study of it is the basis of this study, and for further details on the resolution, an external force is applied to the chemical reaction. Unlike the other reactions, the oscillatory type acquired a non-periodic action and can make it quasi-periodic and even chaotic. With this in mind and working on differential equations, it starts with the projection of a phase map along with Poincaré map, varying some parameters and the bifurcation diagram and then the Lyapunov exponent, respectively.

KEYWORDS: Oscillatory reaction. Non-linear Dinamics. Chaos.

INTRODUÇÃO

Ao longo das décadas, a dinâmica não-linear pareceu ser uma ferramenta poderosa para o entendimento da complexidade permanente na natureza, no qual se desenvolveu na ciência física e biológica como um estudo da reação oscilante. Conforme Kostet et. al:

> ”Conhecendo as condições iniciais, conhecer o comportamento do sistema e essa sensibilidade dá instabilidade característica; Estruturas em sistemas químicos surge de um princípio de auto-organização que pode ser no espaço e/ou no tempo.“ (KOSTET, ET. AL, 2018)

O não-equilíbrio que a dinâmica não-linear tem pode ser empregado para reações químicas, resultando em um comportamento oscilatório, visualmente a ates com o tempo e os reagentes. O grupo de Prigogine em Brussels desenvolveu um modelo simples, apelidado de Brusselator, ilustrando e estudando modelos de reação química envolvendo etapas trimoleculares, no qual pode adquir um comportamento periódico, quase-periódico ou caótico.

Segundo Gallas (2015), sendo um fato bem estabelecido que ocorre em praticamente todos os campos da ciência a existência de caos determinístico gerados por osciladores de todos os tipos, como nos fenômenos transitórios, descoberto por Ueda em 1961, ou os fluxos determinísticos não periódicos, descobertos por Lorenz em 1963, foram explicitamente reportados para fluxos, isto é, do conhecimento sobre o comportamento caótico decorre de investigações feitas mapeamentos não-lineares em tempo discreto, para sistemas de equações diferenciais. Este fato é uma consequência simples do comparativamente computacional e recursos gráficos disponíveis nos primeiros dias. Além disso, é muito mais simples e mais fácil para iterar um mapa discreto do que para integrar fluxos.

Com o domínio desta reação química pode ser possível entender outro tipo de reações que se aproxima do caos, e a dinâmica sobre isso. Existem muitas reações que não são periódicas por um período, como a reação de Beluosov-Zhabotinsky (BZ). SANAYEI (2010, p. 2488) afirma que “[...] a variação imprevisível na concentração de componentes que entrar em uma reação oscilatória corresponde ao caos químico, sendo macro-escalas do efeito de não-equilíbrio”. Sendo Brusselator um modelo simples, ao estudá-lo suas implicações poderão ser feitos em modelos de ordem superior. O objetivo do trabalho é o estudo de sua dinâmica, usando o espaço de fase e mapa de Poincaré para um primeiro contato com a não periodicidade, seguido do diagrama de bifurcação para melhor visualização da dinâmica e ainda haverá comprovação ou não do caos pelo expoente de Lyapunov.

METODOLOGIA

Para KUMAR, KHAN e YILDIRIM:

> “Neste sistema, os termos de reação surgem da modelagem matemática de sistemas químicos. Sendo uma reação autocatalítica, a espécie reagente interage com outras espécies aumentar sua taxa

> de produção, representando uma dinâmica caótica em uma estrutura do sistema aberto com sensibilidade às condições iniciais. A inclusão de uma reação de dissociação de espécies autocatalíticas, para um modelo como A → X + Y, seguida por uma reação de recombinação, X + Y → B, resulta em uma sensibilidade incomum condições de exposição. "(KUMAR, KHAN, YILDIRIM, 2012 p. 835-840).

Para garantir a interação das espécies, a reação química caótica precisa ser um boa reação e uma (ou mais) reação de dissociação seguida de uma reação de recombinação. O modelo trimolecular é usado devido à sua simplicidade teórica, com quatro etapas irreversíveis por:

$$A \xrightarrow{k1} X \tag{1}$$

$$B + X \xrightarrow{k2} Y + D \tag{2}$$

$$2X + Y \xrightarrow{k3} 3X \tag{3}$$

$$X \xrightarrow{k4} E \tag{4}$$

Presume-se que os produtos A e B sejam produtos constantes, D e E, e X e Y são componentes que variam no espaço e no tempo. Compatível com a lei de ação de massa resultar em um modelo com equações cinéticas na forma adimensional é possível remover todas as constantes cinéticas. O período T de todas as forças periódicas externas consideradas em nosso estudo é fixado 2π/ω, ω onde é a frequência angular das forças. Em aplicações práticas de engenharia, o processo de reação é frequentemente afetado por vários fatores periódicos externos. No estudo teórico, poderia ser aproximada como perturbação periódica externa. Pode-se supor que a perturbação externa afeta diretamente a concentração de inibidor na reação, sendo preciso uma lei de velocidade, tanto para o componente X e para o Y. Como F (t), F (t) = Fsin (ωt), uma força periódica que varia com tempo. Com as condições iniciais nulas e variando a, b e F é usado o software MATLAB para a simulação, utilizando as seguintes equações:

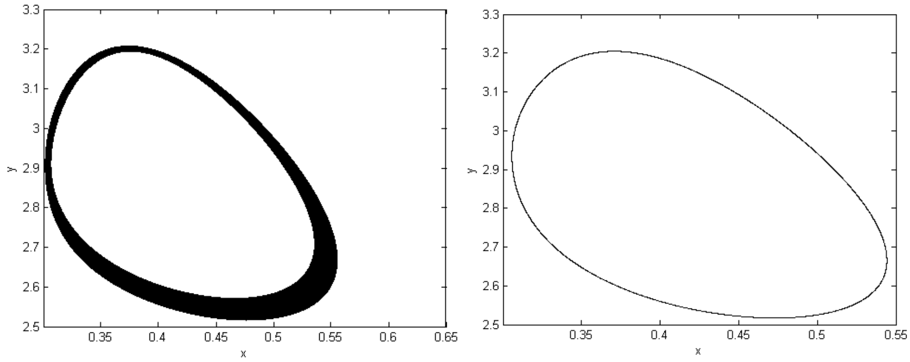
$$\frac{dX}{dt} = a - (b-1)X + X^2Y + F(t) \tag{5}$$

$$\frac{dY}{dt} = bX - X^2Y \tag{6}$$

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Simulando as equações (5) e (6) em conjunto e adicionando que todas as propriedades são adimensionais, resultará na dinâmica da reação, saberemos em que momentos a reação tenderá ao estado instável ou estável. O mapa de fase e o espaço de Poincaré são usados para compactar as informações e visualizar o comportamento do sistema, notando atratores e repulsores como podemos ver na Figura 1.

Figura 1 – Espaço de fase (esquerda) e mapa de Poincaré (direita) ambas as figuras adotam a= 0,4, b = 1,2, ω = 0,81 e F = 0,00128.



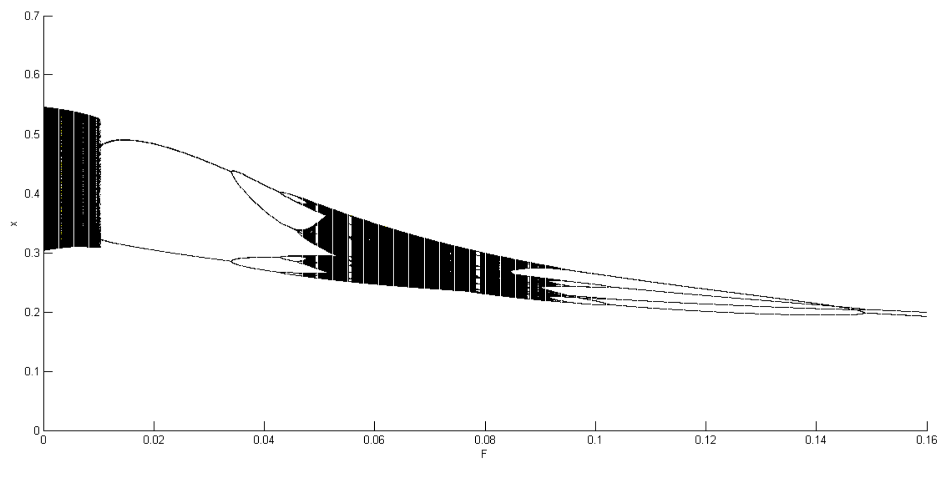
Fonte: Autoria própria (2019).

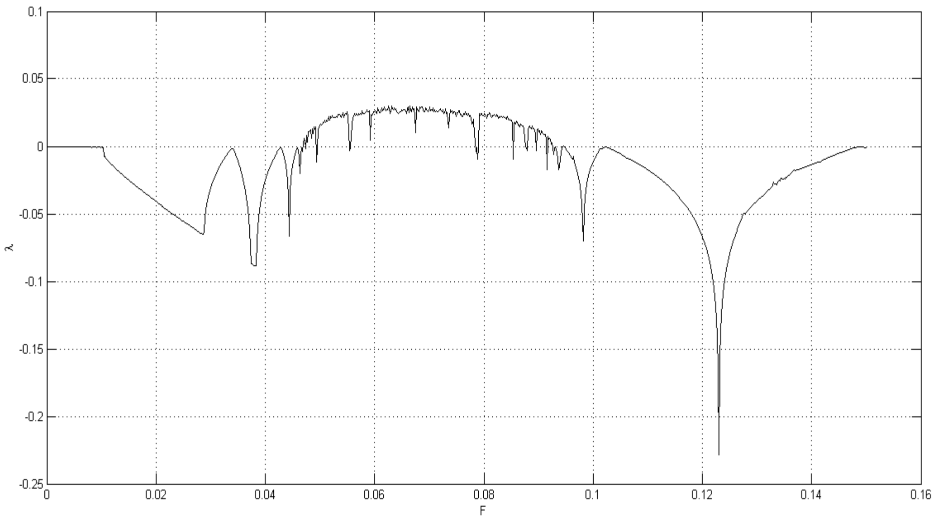
Para cada condição inicial diferente, a dinâmica do sistema seguirá uma trajetória, mas na Figura 1 o sistema passa em diferentes condições iniciais formando essa espessura no espaço de fase. Como podemos ver no espaço de fase o gráfico é não-período ou com um movimento aleatório, adicionando com alguns pontos do mapa de Poincaré, o que sugere que pode existir qualquer ponto caótico em que região.

A teoria da bifurcação é o estudo matemático das mudanças na estrutura do comportamento dinâmico assintótico da sistemas de engenharia. Conforme EPSTEIN e SHOWALTER:

> “Diagramas de bifurcação para reações oscilatórias tipicamente exibem comportamento em estado estacionário dando lugar a oscilações seguidas por um retorno ao comportamento em estado estacionário. Na região oscilatória, uma sequência complexa de oscilações cada vez mais complexas pode ocorrer, culminando no aparecimento de comportamento caótico. “(EPSTEIN, SHOWALTER, 1996, p. 13132-13147).

Figura 2 – Diagrama de bifurcação(cima) e expoente de Lyapunov(baixo) para F, adotado a=0.4, b=1.2, ω=0.81.





Fonte: Autoria própria (2019).

A primeira figura no ponto F = 0,03808, na Figura acima, podemos observar quatro janelas periódicas como em F = 0,04512 onde tem sete deste. Nas partes de figura onde tem um preenchimento preto não sabemos se esta parte é caótica ou não, o mesmo acontece nos pontos das bifurcações, como em F = 0,1026. Então, para verificar o caos, o expoente de Lyapunov foi usado, 0.04605≤F≤0.09309 são regiões onde há possível comportamento instável no sistema para a variação de F.

O caos é caracterizado pela dependência sensível as condições iniciais, de modo que mínimas perturbações possam levar a mudanças na dinâmica global. Para comprovar esse comportamento neste modelo o expoente de Lyapunov é usado, no gráfico quando são números negativos significa que o modelo é periódico, mas quando os números estão entre 0 e 1, afirmamos que há caos naquele momento.

O primeiro que variamos F e depois será variado o a e o b. Tirando o diagrama de bifurcação e expoente de Lyapunov para cada parâmetro, cabendo também, a análise do caos entre eles.

CONCLUSÕES

Esse estudo possibilitou maiores informações a respeito da dinâmica não linear e como o mesma é caracterizado, não somente sendo aplicada em reações oscilatórias mas em qualquer área, sendo útil para a demonstração real do comportamento do sistema.

Com os gráficos simulados há a comprovação de caoticidade no modelo, sendo mais visível quando há variação no parâmetro F. Mas não há o descarte de a e b, sendo estes também importantes para a dinâmica. Comprovando que essa não periodicidade é sensível as condições iniciais e ao tempo simulado, muitas vezes a simulação começa caótica e termina periódica, como também existe o contrário.

AGRADECIMENTOS

Ao apoio da Fundação Araucária para esta pesquisa, como também agradeço ao meu orientador Dr. Thiago Gilberto do Prado.

REFERÊNCIAS

EPSTEIN, I., SHOWALTER, K.: **Nonlinear chemical dynamics: Oscillations, patterns, and chaos**. The Journal of Physical Chemistry 100, 13132-13147 (1996).

GALLAS, J.A.C.: **Periodic oscillations of the forced Brusselator**. Modern Physics Letters B 29, p. 1530018 (2015).

KOSTET, B., TLIDI, M., TABBERT, F., FROHOFF-HÜLSMANN, T., GUREVICH, S.V., AVERLANT,E., ROJAS, R., SONNINO, G., PANAJOTOV, K.: **Stationary localized structures and the effect of the delayed feedback in the Brusselator model**. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 376(2135), p. 20170385 (2018).

KUMAR, S., KHAN, Y., YILDIRIM, A.: **A mathematical modeling arising in the chemical systems and its approximate numerical solution**. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering 7(6), 835-840 (2012).

SANAYEI, A.: **Controlling chaotic forced brusselator chemical reaction**. Proceedings of the World Congress on Engineering 2010 Vol III, 3, vol. 3, p. 2488. International Association of Engineers, Newswood Limited, (2010).