



Fundación universitaria Konrad Lorenz

MATEMÁTICAS

ECUACIÓN DE DIFUSIÓN-REACCIÓN,
CASO DINÁMICO.

Autores:

Nataly Phawlllyn Neira Parra, Cod: 614212782

Juan Sebastián Vargas Arévalo Cod: 614221007

Docente :

Jaime David Mora Paz Ph.D

Métodos Numéricos para Ecuaciones Diferenciales

Mayo 2024

Resumen

1.

Introducción

En el mundo molecular, tanto en la química como en la física, existen diferentes interacciones de interés de la ciencia, saber como se comportan ciertos objetos en dichas interacciones, Veamos por ejemplo, la mezcla de una pequeña cantidad de una sustancia con otra, en esta interacción podemos reconocer dos procesos importantes: la difusión, que hace referencia al movimiento de las partículas en un fluido desde zonas de mayor a menor concentración. Y la reacción, que es el proceso de transformación de una sustancia en otra. (Riveros Castellanos y Pineda Jaramillo, 2020)

En particular, en Física el problema de la difusión de calor es bien estudiado, tanto así que el problema planteado en distintas dimensiones puede modelarse con una ecuación particular, **La ecuación del calor**

$$U_t - a\nabla^2 U = 0$$

donde U es la concentración o función temperatura y a es una constante.

Esta ecuación, no solo resuelve el problema del calor, si no también todo proceso de difusión.

Por otra parte, desde la química, tenemos **el proceso de reacción**, el cual se puede modelar con una ecuación diferencial ordinaria

$$U_t + cU = 0$$

donde U , al igual que en la ecuación de difusión, es la concentración o función temperatura Y c es una constante.

Veamos que si en un sistema encontramos ambos fenómenos, podemos sumar las ecuaciones de difusión y de reacción para modelar el nuevo sistema. así

$$(U_t - a_1\nabla^2 U) + (U_t + c_1 U) = 0$$

$$2U_t - a_1\nabla^2 U + c_1 U = 0$$

$$U_t - \frac{a_1}{2}\nabla^2 U + \frac{c_1}{2} U = 0$$

$$U_t - a\nabla^2 U + cU = 0$$

siendo esta ultima **la ecuación de difusión-reacción pura** o homogénea. esta ecuación también puede verse para el caso dinámico cuando no esta igualado a cero, sino a una función $f(U, r)$ con r el vector de posición que dependerá de la dimensión y coordenadas en las que este definido el sistema. así para el caso dinámico tenemos

$$U_t - a\nabla^2 U + cU = f$$

donde el operador Laplaciano dependerá de la geometría del sistema. Para este trabajo consideraremos un sistema de geometría polar, Anulando las variaciones en θ , así este operador toma la forma

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$

Así el problema puede escribirse como

$$U_t - aU_{rr} - \frac{2a}{r}U_r + cU = f(r, t) \quad (1)$$

Discretización del problema

Para discretizar la parte espacial de la ecuación , se usara diferencias finitas centradas (DFC) en la derivada de segundo orden y diferencias finitas progresivas (DFP) en la derivada de primer orden.

$$U'_{DFP} = \frac{U_{i+1} - U_i}{h}$$

$$U''_{DFC} = \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2}$$

Reemplazando esto en la parte espacial de la ecuación diferencial (1) tenemos :

$$\begin{aligned} & -\frac{2a}{r}U_r - aU_{rr} + cU = f(r, t) \\ & -\frac{2a}{r} \left(\frac{U_{i+1} - U_i}{h} \right) - a \left(\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} \right) + cU = f(r, t) \\ & -\frac{a}{h^2}U_{i-1} + \left(\frac{2a}{hr_i} + \frac{2a}{h^2} + c \right) U_i - \left(\frac{2a}{r_i h} + \frac{a}{h^2} \right) U_{i+1} = f(r, t) \end{aligned} \quad (2)$$

La ultima ecuación representa los nodos internos.

Condiciones de frontera

Para discretizar las condiciones de frontera en U_0 y U_M los nodos inicial y final respectivamente, tenemos los casos de:

Dirichlet $u(r) = d$

la ecuación de la condición por izquierda es

$$U_0 = d_{izq} + U_t(r_{izq})$$

La ecuación de la condición por derecha es

$$U_M = d_{der} + U_t(r_{der})$$

Neuman $a(r)u'(r) = g(r)$

Para calcular la ecuación de la condición por izquierda, discretizamos usando DFP , siendo $i = 0$

$$a \left(\frac{U_1 - U_0}{h} \right) = g(r_{izq})$$

$$\frac{a}{h} U_1 - \frac{a}{h} U_0 = g(r_{izq})$$

Para calcular la ecuación de la condición por derecha, discretizamos usando DFC , siendo $i = M$

$$a \left(\frac{U_{M+1} - U_{M-1}}{2h} \right) = g(r_{der})$$

$$U_{M+1} = U_{M-1} + \frac{2h}{a} g(r_{der})$$

Esta cantidad auxiliar la reemplazamos en la ecuación de nodos internos

$$-\frac{a}{h^2} U_{M-1} + \left(\frac{2a}{hr_{der}} + \frac{2a}{h^2} + c \right) U_M - \left(\frac{2a}{r_{der}h} + \frac{a}{h^2} \right) U_{M+1} = f(r_{der}, t)$$

$$-\frac{a}{h^2} U_{M-1} + \left(\frac{2a}{hr_{der}} + \frac{2a}{h^2} + c \right) U_M - \left(\frac{2a}{r_{der}h} + \frac{a}{h^2} \right) \left(U_{M-1} + \frac{2h}{a} g(r_{der}) \right) = f(r_{der}, t)$$

$$-\left(\frac{2a}{r_{der}h} + \frac{2a}{h^2} \right) U_{M-1} + \left(\frac{2a}{hr_{der}} + \frac{2a}{h^2} + c \right) U_M = f(r_{der}, t) + \left(\frac{2a}{r_{der}h} + \frac{a}{h^2} \right) \frac{2h}{a} g(r_{der})$$

$$-\left(\frac{2a}{r_{der}h} + \frac{2a}{h^2} \right) U_{M-1} + \left(\frac{2a}{hr_{der}} + \frac{2a}{h^2} + c \right) U_M = f(r_{der}, t) + \left(\frac{4}{r_{der}} + \frac{2}{h} \right) g(r_{der})$$

,

Sistema Final

el sistema final a solucionar, se compone de la parte espacial discretizada, $KU = F$ junto con la parte temporal.

$$U_t + KU = F$$

Este sistema es probado a través de dos funciones manufacturadas:

- $u(r, t) = -e^{-t} \cos(\pi r)$
- $u(r, t) = e^{(x-t)}$

en el intervalo de tiempo $[0, 1]$ y el intervalo del radio $[0, 2]$.

Se usa el método de diferencias finitas para solucionar la parte espacial y un método de integración en el tiempo (*punto medio y Euler backward*) para la parte temporal.

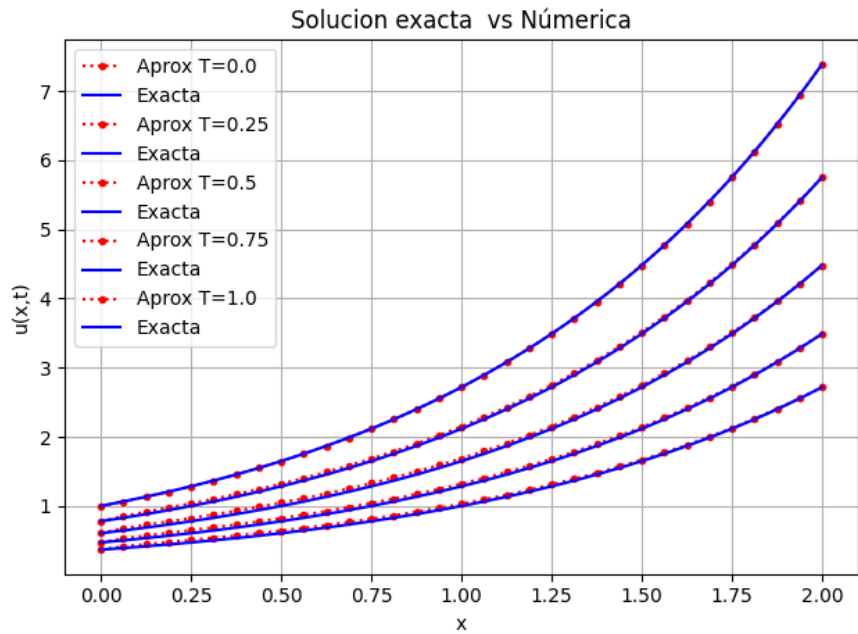
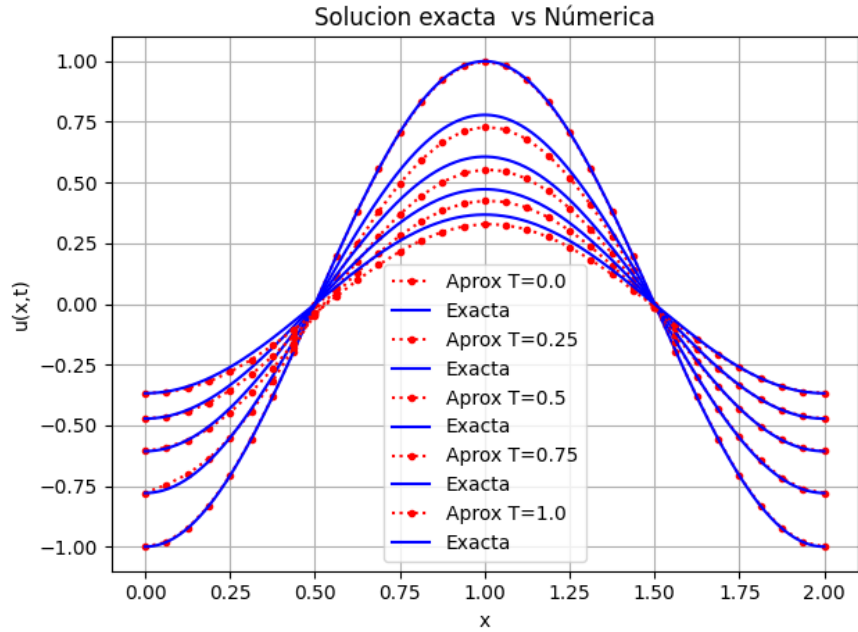


Figura 1: solución numérica del sistema para funciones Manufacturadas

Solución Numérica de distintos PVI

Para solucionar el sistema de EDO's que se plantea, se realiza la implementación en python de los métodos numéricos de Diferencias finitas para solucionar la parte espacial y el método de integración en el tiempo trapecio para solucionar la parte espacial. se implementan las condiciones de discretización expuestas anteriormente y se consideran tres problemas de valor inicial (Pérez, 2023)

Difusión de Calor en una Barra Circular (Anillo)

(*Dirichlet, Dirichlet*)

- **Condición Inicial:** $U(r, 0) = U_0(r)$, donde $U_0(r)$ es la distribución inicial de temperatura a lo largo del radio.
- **Condiciones de Frontera :** $U(0, t) = d_{izq}$ $U(R, t) = d_{der}$, donde R es el radio externo de la barra circular y d_{der}, d_{izq} es una temperatura constante en la frontera

Este PVI puede modelar la difusión de calor en una barra circular o anillo donde la temperatura inicial está dada por $U_0(r)$. La temperatura en el borde externo de la barra se mantiene constante en d_{der} .

Difusión de un Contaminante en un Lago Circular

(*Dirichlet-Neuman*)

- **Condición Inicial:** $U(r, 0) = 0$, representando que inicialmente no hay contaminante en el lago.
- **Condiciones de Frontera:** $U(0, t) = d_{izq}$ y $\frac{\partial U}{\partial r}(R, t) = 0$, donde R es el radio del lago.

Este PVI puede describir la difusión de un contaminante en un lago circular donde el contaminante comienza a difundirse desde una fuente central o interna. La condición de Neumann en la frontera externa ($\frac{\partial U}{\partial r}(R, t) = 0$) indica que no hay flujo de contaminante hacia fuera del borde del lago, lo cual es razonable si el lago es cerrado.

Reacción-Difusión en un Cuerpo Esférico de Material Reactivo

(*Neuman-Dirichlet*)

- **Condición Inicial:** $U(r, 0) = U_0(r)$, donde $U_0(r)$ es la distribución inicial de la concentración del reactivo.
- **Condiciones de Frontera:** $\frac{\partial U}{\partial r}(0, t) = 0$ y $U(R, t) = 0$, donde R es el radio del cuerpo esférico.

Este PVI puede representar un proceso de reacción-difusión en una partícula esférica de material reactivo. La condición de Neumann en la frontera interna ($\frac{\partial U}{\partial r}(0, t) = 0$) asegura simetría esférica (sin flujo radial en

el centro). La condición de Dirichlet en la superficie externa ($U(R, t) = 0$) puede representar que el reactivo se ha agotado o ha reaccionado completamente en la superficie.

Análisis de error

Para el calculo del error se considera se usa la formula

$$\mathcal{E}(h, \delta t) = \frac{\max_{0 \leq i \leq M; 0 \leq n \leq N} |U_i^n - u(x_i, t_n)|}{\max_{0 \leq i \leq M; 0 \leq n \leq N} |u(x_i, t_n)|}$$

Para realizar el análisis de error respectivo al método de solución numérica se analizan varios casos teniendo en cuenta: el tipo de combinación para las condiciones iniciales (*Dirichlet* ó *Neumann*), el método de integración en el tiempo Usado (*Punto Medio* ó *Backward Euler*) y la solución manufacturada puesta de ejemplo.

Se realiza el cálculo del error para cada combinación de el ancho del paso usado para la solución espacial (h), el ancho del paso para la solución numérica en la parte temporal (δt)

Caso I

En este caso se considera:

- Las condiciones iniciales tipo *Dirichlet* tanto por derecha como por izquierda.
- Solución manufacturada $u(r, t) = -e^{-t} \cos(\pi r)$.
- Método de integración en el tiempo *Backward Euler*

Se encuentra que para un h fijo el orden de convergencia del método no tienen dependencia de la elección δt , es decir, el error ha alcanzado un umbral mínimo debido a errores numéricos (como el error de redondeo) u otras limitaciones inherentes del método. Por otra parte, para cualquier δt el orden de convergencia del método es **lineal** con respecto al tamaño del paso h . (Fig.2).

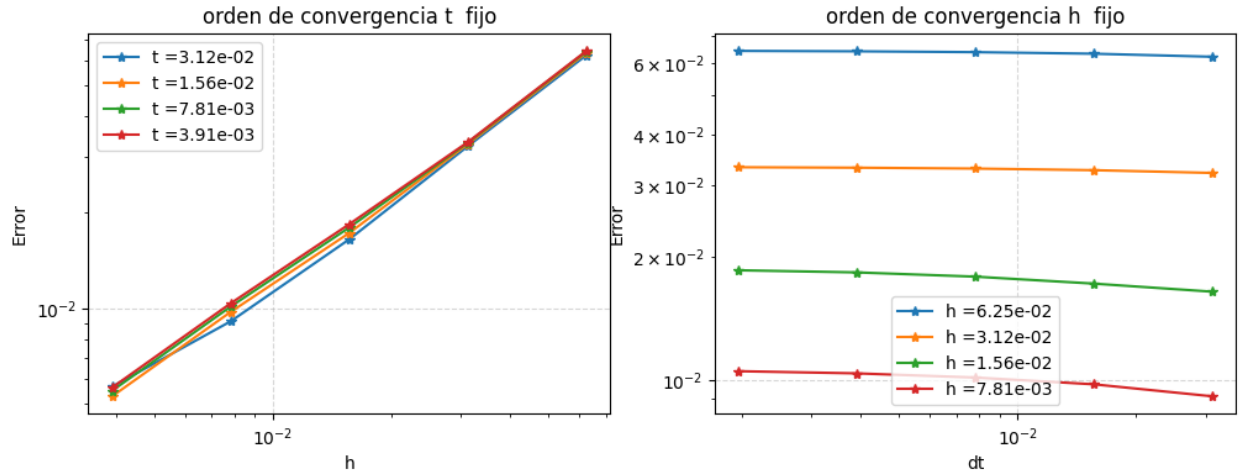


Figura 2: orden de convergencia Caso I

Caso II

En este caso se considera:

- Las condiciones iniciales tipo *Dirichlet* tanto por derecha como por izquierda.
- Solución manufacturada $u(r, t) = -e^{-t} \cos(\pi r)$.
- Método de integración en el tiempo *Punto Medio*

Al cambiar el método de integración en el tiempo, se encuentra que para un h fijo el orden de convergencia del método es lineal para δt no tan pequeños y a medida que el paso se hace mas pequeño el error se estabiliza, alcanzando su valor mínimo. Por otra parte, al igual que el caso anterior, el orden del convergencia del método es **lineal** con respecto al tamaño del paso h . (Fig.3)

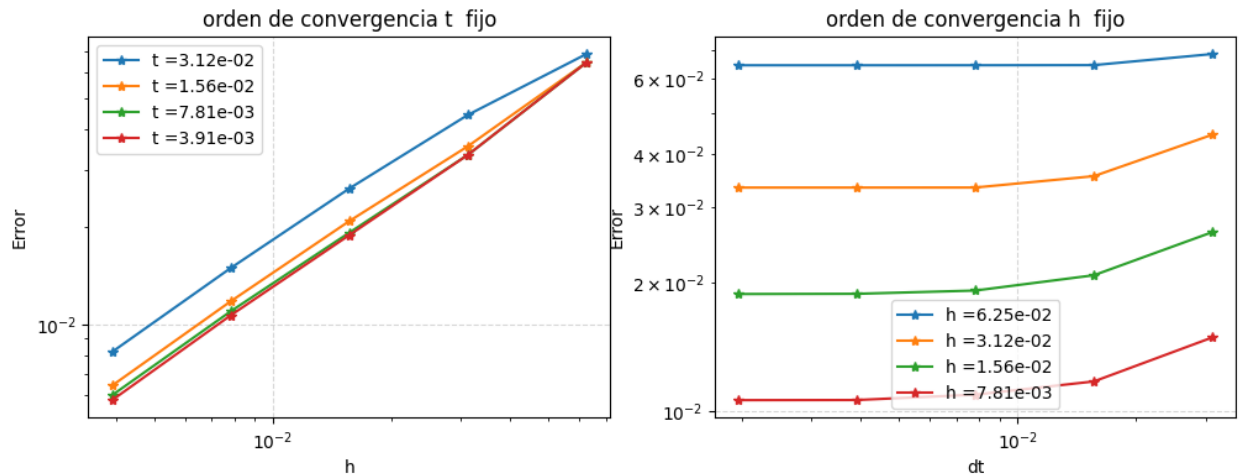


Figura 3: orden de convergencia Caso II

Veamos que al comparar el orden de convergencia de los métodos de integración usados se ve una pequeña mejoría en la aproximación a la solución usando el método de Punto Medio.(Fig.4)con respecto a la convergencia presentada en δt

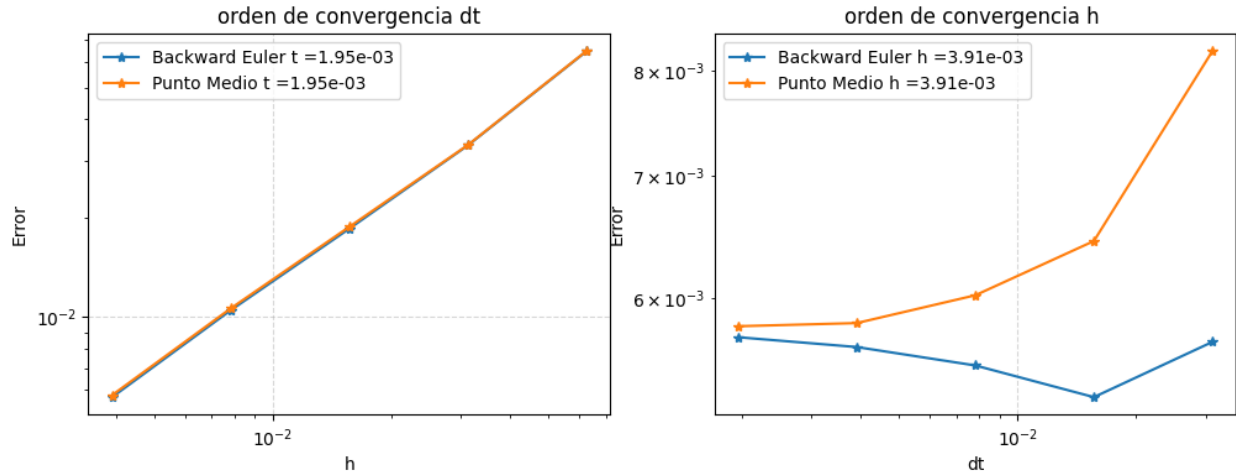


Figura 4: orden de convergencia, comparación entre métodos de integración

Caso III

En este caso se considera:

- Las condiciones iniciales tipo *Dirichlet* tanto por derecha como por izquierda.
- Solución manufacturada $u(r, t) = e^{(x-t)}$.
- Método de integración en el tiempo *Punto Medio*

Cuando se cambia la solución manufacturada, se encuentra que se presentan errores en ciertos pasos del cálculo de la aproximación cuando h disminuye. Sin embargo en el resto de los pasos, el comportamiento es similar a los casos anteriores, lineal para h e independiente para dt . (Fig.5)

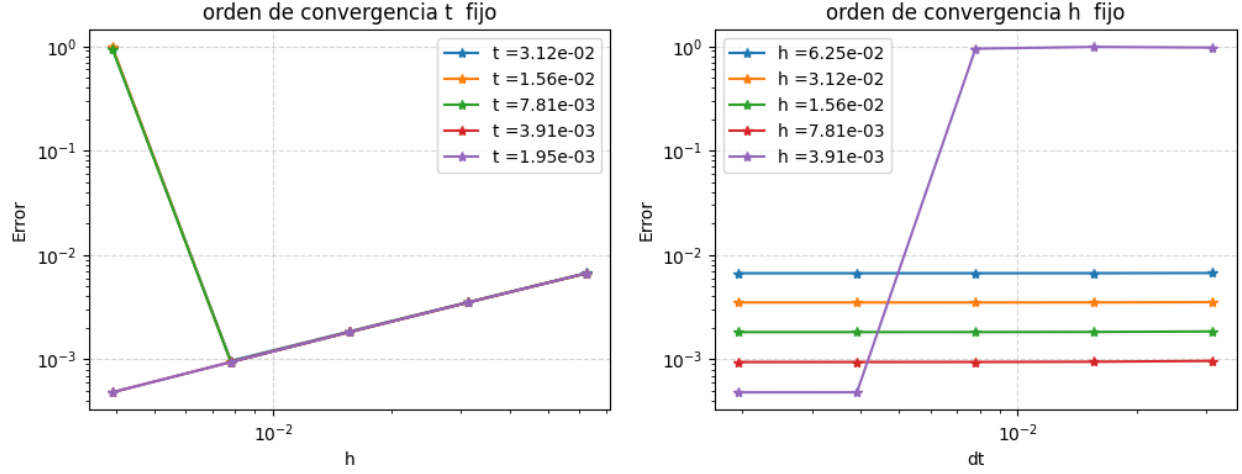


Figura 5: orden de convergencia Caso III

Por lo tanto, se confirma que la elección de la Solución no afecta el orden de convergencia, sin embargo, el método puede presentar problemas dependiendo de la solución manufacturada tomada, pues puede presentarse errores de redondeo, o inestabilidad en la solución por presencia de altas derivadas.

Caso IV

En este caso se considera:

- Las condiciones iniciales tipo *Dirichlet* por izquierda y *Neumann* por derecha.
- Solución manufacturada $u(r, t) = -e^{-t} \cos(\pi r)$.
- Método de integración en el tiempo *Punto Medio*

Cuando se cambia el tipo de condiciones iniciales por izquierda, se encuentra que los resultados son similares al Caso II, se presenta el mismo orden de convergencia tanto para h como para δt (Fig.6)

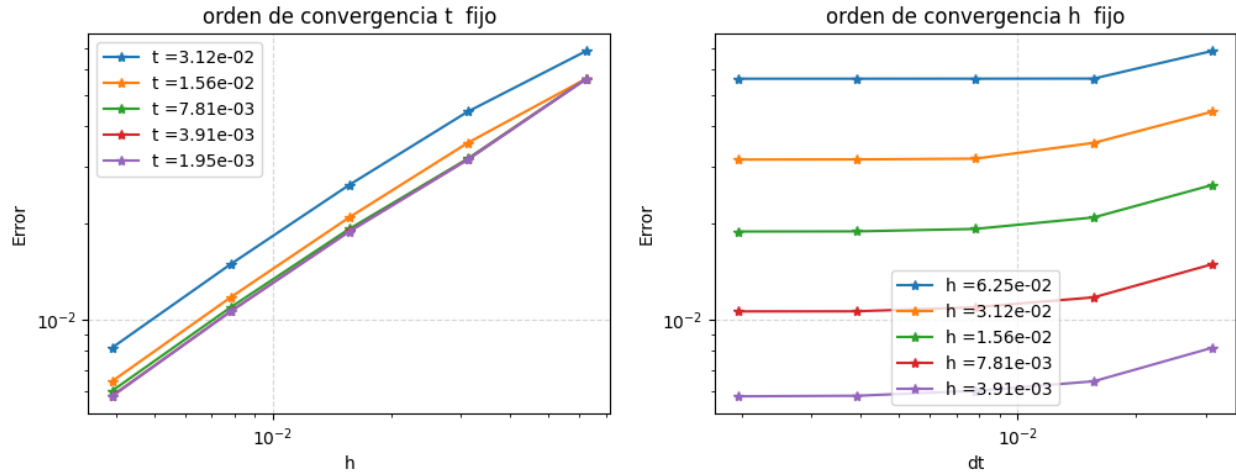


Figura 6: orden de convergencia Caso IV

Caso V

En este caso se considera:

- Las condiciones iniciales tipo *Neumann* por izquierda y *Dirichlet* por derecha.
- Solución manufacturada $u(r, t) = -e^{-t} \cos(\pi r)$.
- Método de integración en el tiempo *Punto Medio*

Cuando se cambia el tipo de condiciones iniciales por derecha, se encuentra que al igual que en caso anterior el error presenta el mismo comportamiento que el caso II (Fig.10)

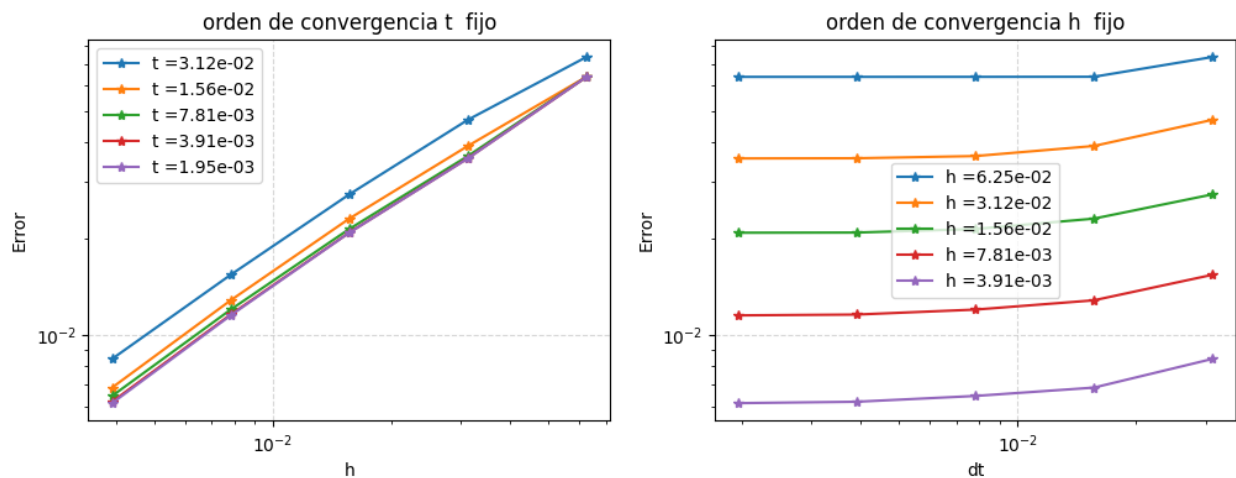


Figura 7: orden de convergencia Caso V

Por lo tanto, el uso de distintos tipos de condiciones iniciales no afecta el rendimiento o eficacia del

método numérico.

En general, se puede observar que el método tiene un orden de **convergencia lineal**, dependiente únicamente del tamaño del paso h .

0.1. corrección análisis de error

Se hace el análisis de error ahora con una función manufacturada que pueda ser separable, el orden de convergencia del paso temporal es de orden cuadrático

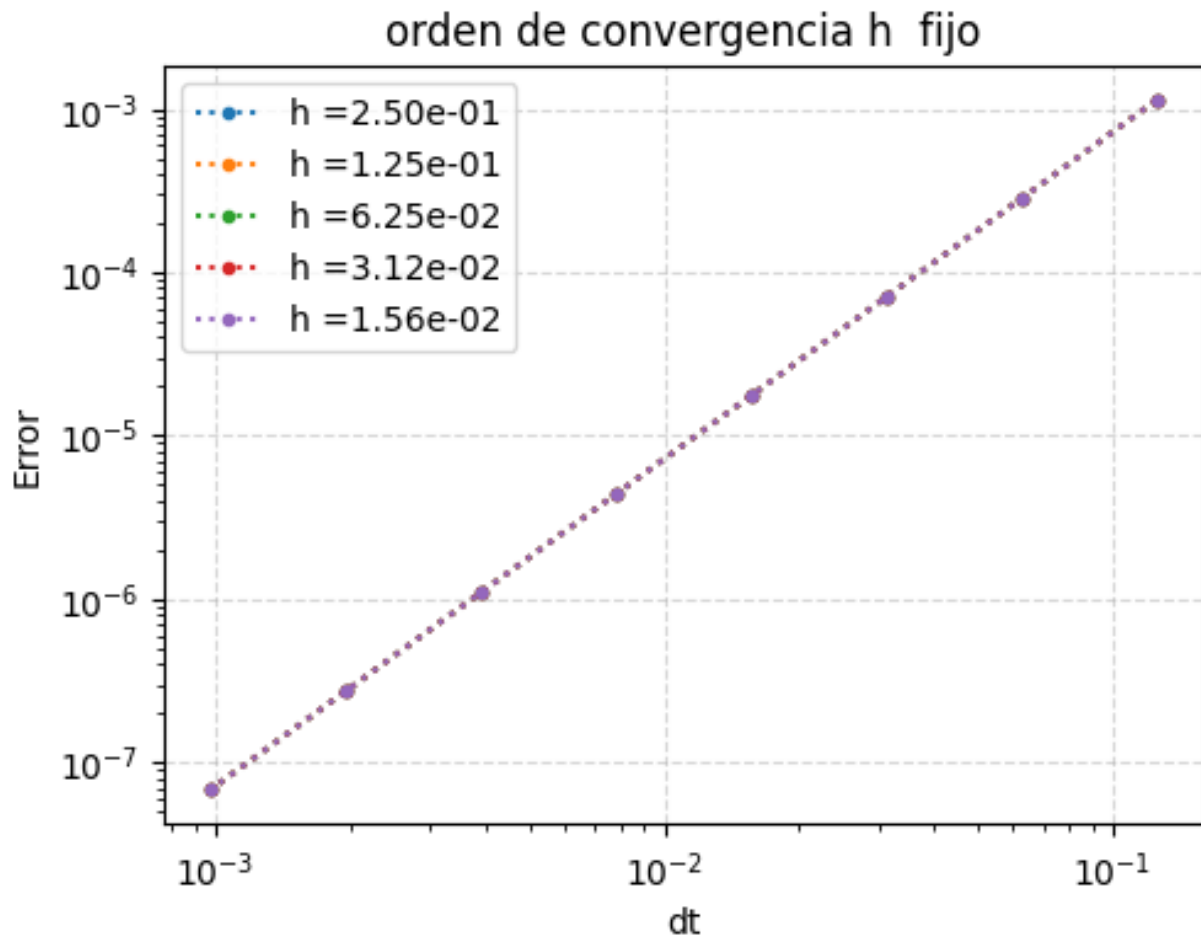


Figura 8: orden de convergencia temporal

se comparan los métodos de integración en el tiempo con orden de convergencia lineal y cuadrático correspondientemente.

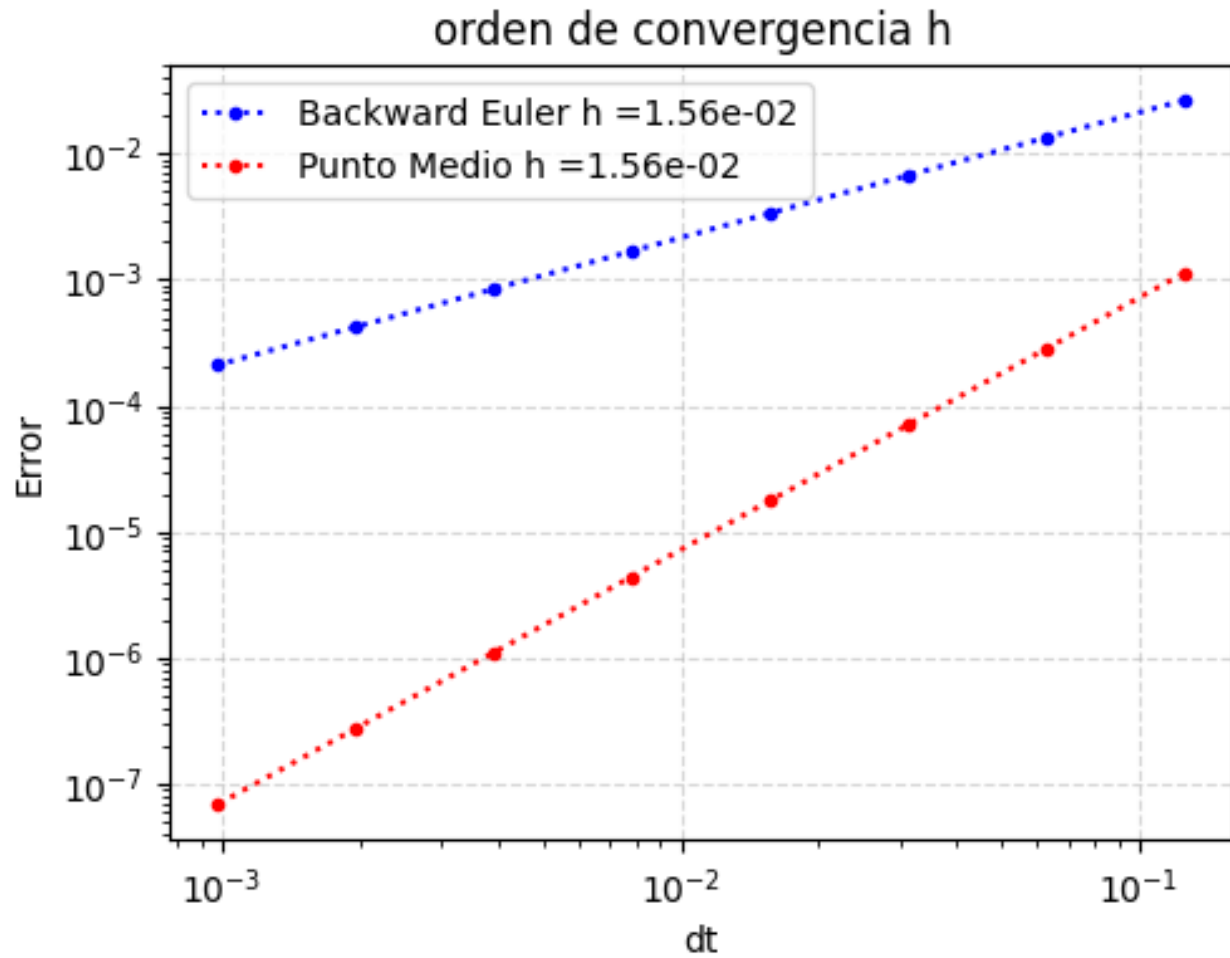


Figura 9: orden de convergencia temporal comparación de métodos

por ultimo se calcula la convergencia del error para la parte espacial que es lineal por el uso de diferencias progresivas .

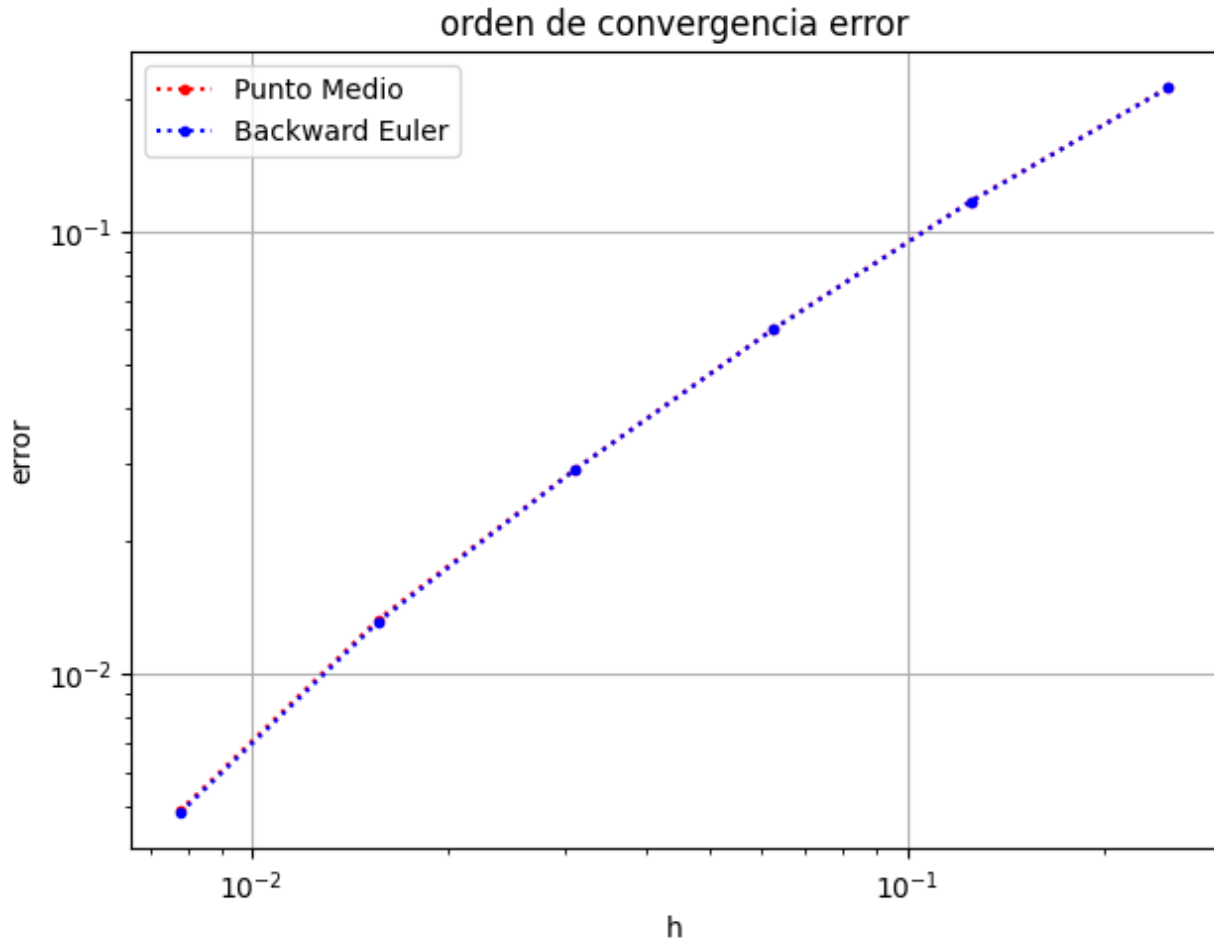


Figura 10: orden de convergencia espacial

Solución PVI específicos

Teniendo en cuenta los problemas de valor inicial presentados anteriormente, se solucionara cada problema haciendo uso del método numérico con las siguientes configuraciones:

1. Método de integración en el tiempo Backward Euler, con $h = 6.25 \times 10^{-2}$ y $\delta t = 3.12 \times 10^{-2}$.
2. Método de integración en el tiempo Punto Medio, con $h = 1.56 \times 10^{-2}$ y $\delta t = 1.95 \times 10^{-3}$.

Tenemos entonces:

■ Difusión de Calor en un Anillo (*Dirichlet-Dirichlet*)

- CI: $U(r, 0) = U_0(r) = 100e^{-(r/R)^2}$
- CF: $U(0, t) = d_{izq} = 100$
- CF: $U(R, t) = d_{der} = 35$

- Fuente: $f(r, t) = 0.1$

Se soluciona este PVI , numéricamente con los valores indicados de las condiciones de frontera e iniciales, y se gráfica la comparación de la solución usando la configuración **1 y 2** , en tres tiempos distintos $t = 0, t = 0,125, t = 1$. Fig(11)

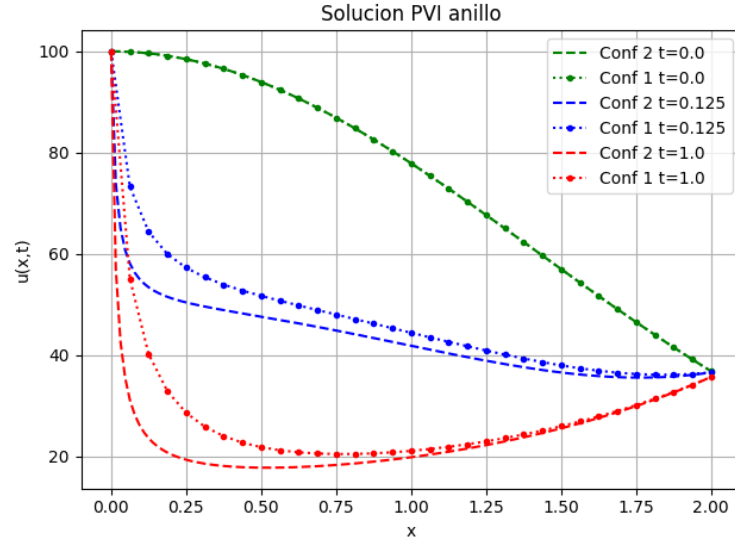


Figura 11: Comparación soluciones PVI anillo

Se puede observar que se inicia con el mismo estado, y al avanzar el tiempo aunque la forma de la solución se mantiene, hay una diferencia notable entre las dos configuraciones. Además, para ambas aproximaciones se respetan las condiciones de frontera donde el anillo tiene misma temperatura en su centro y su orilla

■ Difusión de un Contaminante en un Lago Circular (*Dirichlet-Neumann*)

- CI: $U(r, 0) = 0$
- CF: $U(0, t) = d_{izq} = 600$
- CF: $U_r(R, t) = 0$
- Fuente: $f(r, t) = 3\sin(\frac{4\pi}{10}t)$

Se soluciona este PVI , numéricamente con los valores indicados de las condiciones de frontera e iniciales, y se gráfica la comparación de la solución usando la configuración **1 y 2** , en tres tiempos distintos $t = 0, t = 0,125, t = 1$. Fig(12)

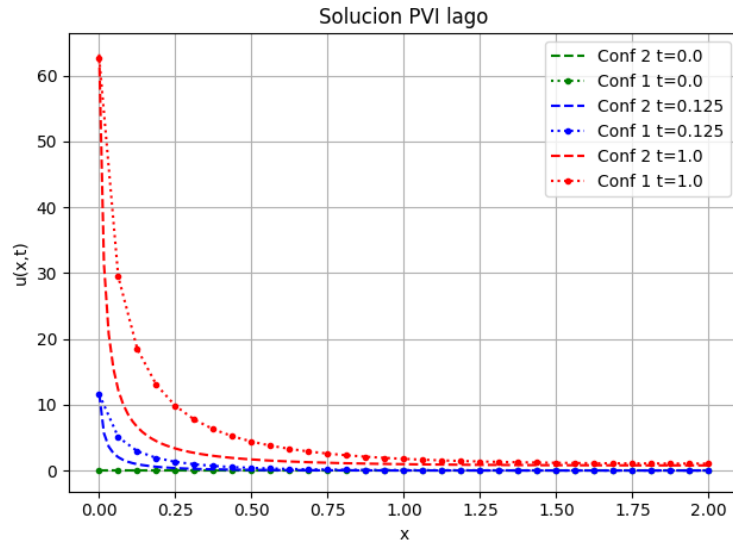


Figura 12: Comparación soluciones PVI Lago

Se puede observar que se inicia con el mismo estado, donde no hay contaminante en el lago, y al avanzar el tiempo la configuración 2 siempre muestra un estado de concentración mayor. También es importante resaltar que en ambas soluciones se respetan las condiciones de frontera, mostrando a la derecha una pendiente de cero.

■ Reacción-Difusión en un Cuerpo Esférico de Material Reactivo (*Neumann-Dirichlet*)

- CI: $U(r, 0) = U_0(r) = -40e^{-(r/R)^2}$
- CF: $U_r(0, t) = 0$
- CF: $U(R, t) = d_{der} = -40$
- Fuente: $f(r, t) = -0.2x$

Se soluciona este PVI, numéricamente con los valores indicados de las condiciones de frontera e iniciales, y se gráfica la comparación de la solución usando la configuración **1 y 2**, en tres tiempos distintos $t = 0, t = 0,125, t = 1$. Fig(13)

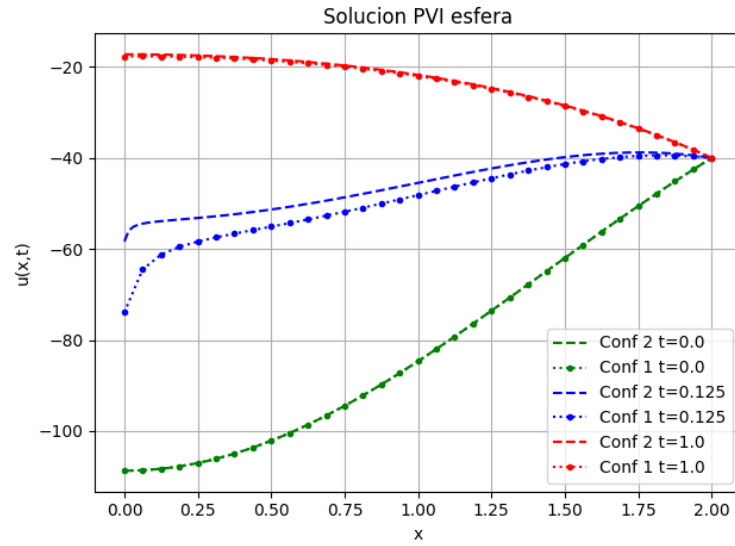


Figura 13: Comparación soluciones PVI cuerpo esférico

Se puede observar que se inicia con el mismo estado, donde hay una distribución inicial del reactivo, y al avanzar el tiempo se muestra una diferencia entre la solución de la configuración 1 con respecto a la 2. Sin embargo, en el tiempo final las soluciones mostradas son la misma. También es importante resaltar que en ambas soluciones se respetan las condiciones de frontera, mostrando a la derecha una concentración constante.

Animación de Resultados

Se elige la **configuración 1** del método dado que presenta mejores resultados y se anima en el tiempo las soluciones de los PVI del anillo y del a esfera presentados anteriormente. Dado que la EDP y el PVI representan situaciones con geometría circular, sin depender del o los ángulos implicados , se decide hacer una representación de la solución en coordenadas polares.

A continuación se muestra una imagen de cada animación.

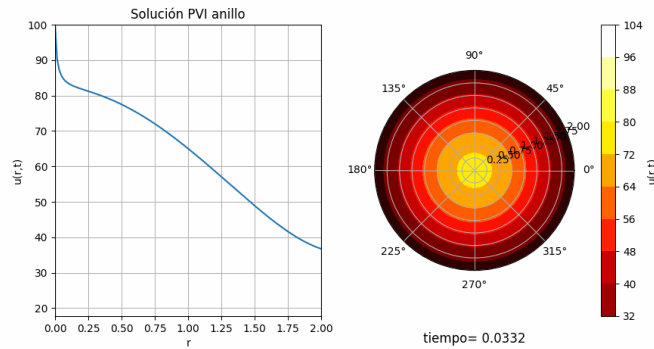


Figura 14: Soluciones PVI anillo

En esta solución podemos ver que la temperatura del disco o anillo , alcanza un estado de equilibrio cerca de los $t = 0.7$. y dado que la fuente es constante , se espera que se llegue al equilibrio.

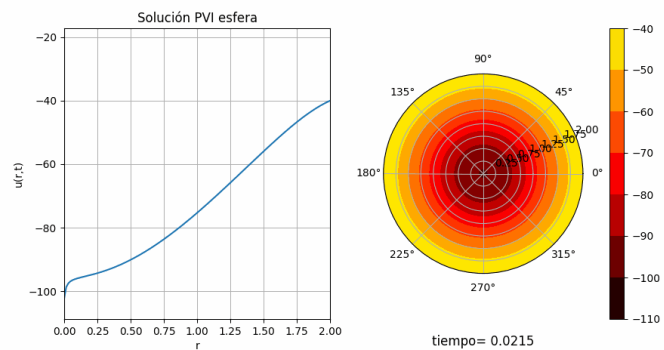


Figura 15: Soluciones PVI cuerpo esférico

Podemos ver que el proceso de reacción va en aumento, y es mayor la superficie, dado que la fuente depende del radio , la partícula llega a un estado de equilibrio cercano a $t = 0.5$, podemos ver la reacción en concéntrica.

Conclusiones

- El orden de convergencia del método numérico usado en este proyecto, donde se soluciona la parte espacial con diferencias finitas y la parte temporal con integración en el tiempo es de orden Lineal y depende únicamente del tamaño del paso espacial h .
- La EDP de difusión-reacción en el caso dinámico, para coordenadas polares o esféricas, presenta un problema de puntos singular al rededor de $r = 0$, por lo tanto, la discretización de las condiciones de frontera de izquierda, no puede hacerse usando la formula de nodos internos, lo cual le quita un poco de precisión a la solución o al cumplimiento de dicha condición.
- El método es sensible a problemas mal condicionados, dado que al hacer uso de Newton Raphson como herramienta en los métodos de integración en el tiempo, se puede presentar fallas en este punto.
- El método genera soluciones numéricas con errores relativos del orden de 10^{-2} y se considera aceptable
- La solución encontrada numéricamente de los PVI corresponde a lo esperado física o químicamente.

Anexos

- Para ver la implementación en python haga click aquí para ir al código abierto en Google Colab
- para ver las animaciones haga click aquí para ir al drive abierto donde se encuentran almacenados

Referencias

- Pérez, D. M. (2023). *Aplicaciones de la Ecuación de Reacción-Difusión* [Tesis de maestría, Universidad de Sevilla]. https://idus.us.es/bitstream/handle/11441/152559/TFG_Perez_Diego_Mario.pdf?sequence=1&isAllowed=y
- Riveros Castellanos, B. C., & Pineda Jaramillo, K. S. (2020). Ecuaciones de difusión-reacción. <https://repository.udistrital.edu.co/handle/11349/25045?show=full>