

Tarea 06: Ecuaciones Reacción-Difusión

Eva DÍAZ

November 6, 2015

Curso:	Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería
Profesor:	Valentino González
Profesor Auxiliar:	Felipe Pesce

1 Introducción

La tarea consiste en resolver la dos ecuaciones de reacción-difusión: la ecuación de Fisher-KPP, que modela el comportamiento de una especie animal; y la ecuación de Newell-Whitehead-Segel, que describe fenómenos de convección y combustión.

La ecuación de Fisher-KPP tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu n - \mu n^2 \quad (1)$$

Donde n describe la densidad de la especie en el tiempo y el espacio. μn corresponde a la tendencia de la especie a crecer indefinidamente, $-\mu n^2$ representa la disminución en la densidad debido a la competencia entre individuos de la misma especie después de un tiempo; y $\gamma \nabla^2 n$ es la tendencia de la especie a dispersarse para encontrar más recursos.

Esta ecuación tiene dos puntos de equilibrio: $n = 0$ (inestable) y $n = 1$ (estable). Su solución tiene un comportamiento híbrido entre difusión y pulso viajero.

Por otra parte, la ecuación de Newell-Whitehead-Segel tiene la siguiente forma:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu(n - n^3) \quad (2)$$

Esta ecuación tiene tres puntos de equilibrio: $n = 0$ (inestable) y $n = \pm 1$ (estables ambos).

Mediante el método de Crank-Nicolson y de Euler explícito, y bajo ciertas condiciones iniciales se pretende resolver estas ecuaciones y analizar sus soluciones.

2 Desarrollo del Problema

2.1 Ecuación de Fisher-KPP

Para resolver esta ecuación se puede separar en la parte de difusión ($\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$) y en la de reacción ($\mu n(1 - n)$). Se discretiza la parte de difusión de la función $n(t, x)$ utilizando el método de Crank-Nicolson, obteniéndose lo siguiente:

$$\frac{n_j^{n+1} - n_j^n}{\epsilon} = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{n_{j+1}^{n+1} - 2n_j^{n+1} + n_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{n_{j+1}^n - 2n_j^n + n_{j-1}^n}{h^2} \right) + \mu n(1 - n) \quad (3)$$

La parte de reacción se discretiza utilizando el método de Euler explícito, obteniéndose lo siguiente:

$$\frac{n_j^{n+1} - n_j^n}{\epsilon} = \frac{\gamma}{2} \left(\frac{n_{j+1}^{n+1} - 2n_j^{n+1} + n_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{n_{j+1}^n - 2n_j^n + n_{j-1}^n}{h^2} \right) + \mu n_j^n (1 - n_j^n) \quad (4)$$

Se pueden separar los términos que dependen de $n + 1$ del resto, obteniéndose lo siguiente:

$$-rn_{j+1}^{n+1} + (1 + 2r)n_j^{n+1} - rn_{j-1}^{n+1} = rn_{j+1}^n + rn_{j-1}^n + (\epsilon\mu(1 - n_j^n) + 1 - 2r)n_j^n \quad (5)$$

En donde se ha definido r como:

$$r = \frac{\gamma\epsilon}{2h^2} \quad (6)$$

En esta última parte aparece un término que no corresponde al método de Crank-Nicolson que se denominará b_j . Si se agrega el cálculo de este término al método se puede determinar la solución a esta ecuación. Se itera sobre las filas de una matriz para cada intervalo de tiempo, y en cada iteración se definen parámetros α y β de tal forma que con ellos se obtiene el valor de n en el espacio.

2.1.1 Resultados

Bajo las condiciones iniciales $n(t, 0) = 1$, $n(t, 1) = 0$ y $n(0, x) = e^{-x^2/0.1}$, la Figura 1 muestra el resultado entre $t = 0$ y $t = 4$ para 50 pasos de tiempo. Para un número mayor de pasos se observa el mismo comportamiento, naturalmente, como se puede observar en la Figura 2, donde se presenta la solución entre $t = 0$ y $t = 1$ para 200 pasos de tiempo.

Se puede apreciar claramente como la solución converge hacia el valor 1, que se sabe que es la solución estable del problema. En el script se incluye una

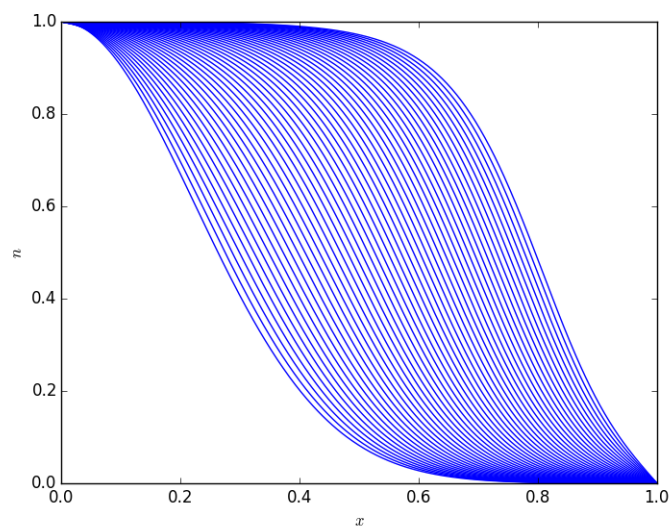


Figure 1: Densidad $n(t, x)$ entre $t = 0$ y $t = 1$ para 50 pasos.

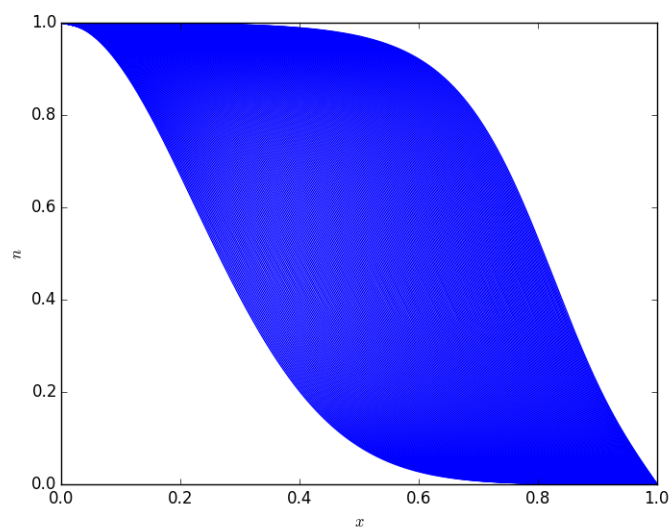


Figure 2: Densidad $n(t, x)$ entre $t = 0$ y $t = 4$ para 200 pasos.

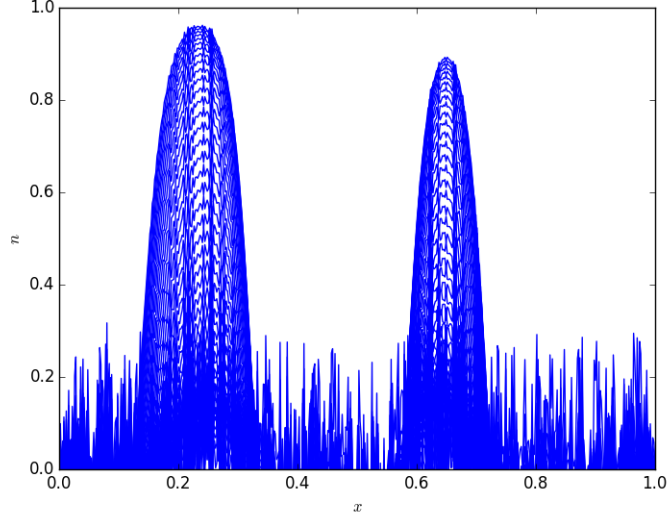


Figure 3: Densidad $n(t, x)$ entre $t = 0$ y $t = 1$ para 50 pasos y semilla de 345.

animación que grafica claramente esta convergencia y se da cuenta entonces de la parte difusiva de la ecuación en forma de pulso.

2.2 Ecuación de Newell-Whitehead-Segel

Para la resolución de esta ecuación se realizó el mismo procedimiento que para la ecuación anterior al discretizar y al plantear los parámetros.

2.2.1 Resultados

Para este problema las condiciones iniciales utilizadas son $n(t, 0) = 0$, $n(t, 1) = 0$ y $n(0, x) = \text{np.random.uniform(low=-0.3, high=0.3, size=Nx)}$. Notemos que ahora la condición inicial tiene un valor arbitrario que dependerá del valor de la semilla del random. Para 50 pasos de tiempo y un valor de semilla de 345 la solución obtenida se grafica en la Figura 3.

Un resultado similar se encuentra para los valores de semilla de 87 y 4679, los que se grafican en las Figuras 4 y 5, respectivamente.

A partir de estos resultados se puede observar un comportamiento que varía de acuerdo a la condición inicial aleatoria, sin embargo es posible apreciar que todas las soluciones convergen hacia los puntos $n = \pm 1$ dependiendo de la posición inicial de cada una, lo que era esperado debido a que estos puntos son

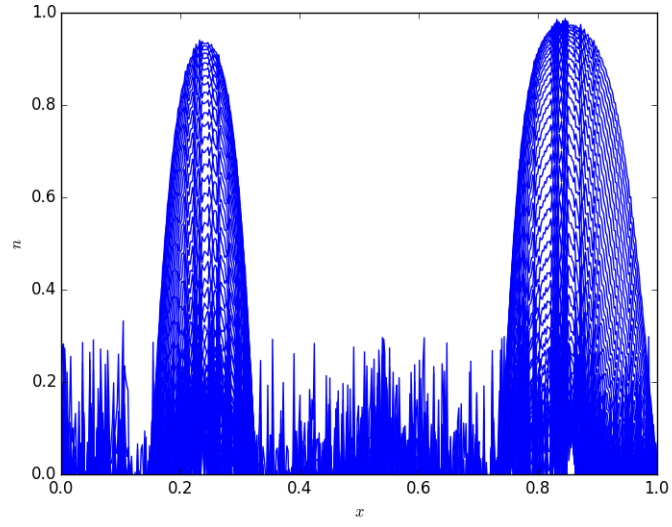


Figure 4: Densidad $n(t, x)$ entre $t = 0$ y $t = 1$ para 50 pasos y semilla de 87.

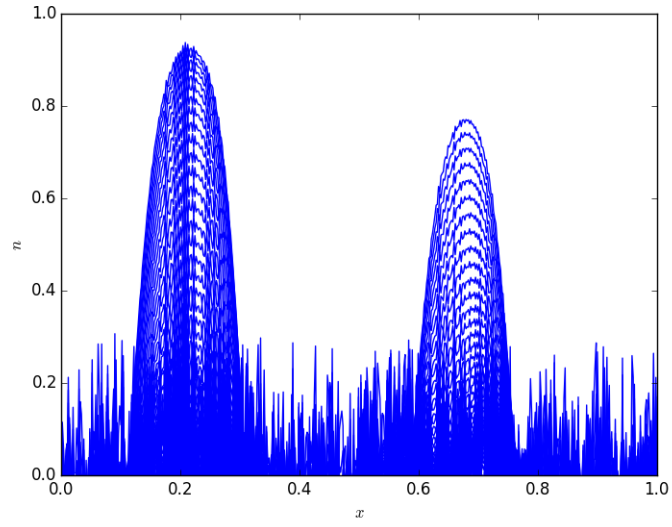


Figure 5: Densidad $n(t, x)$ entre $t = 0$ y $t = 1$ para 50 pasos y semilla de 4679.

los equilibrios estables de n . En el script se incluye una animación que permite apreciar con mayor claridad la convergencia de estas soluciones hacia los puntos estables.

3 Conclusiones

Se resolvió exitosamente ambas ecuaciones y se obtuvieron los resultados esperados teóricamente para cada uno de ellos, que es la convergencia de las soluciones hacia los puntos de equilibrio estable. A través de la iteración sobre el tiempo se pudo apreciar además los comportamientos difusivos de cada una.

En la segunda ecuación se pudo dar cuenta de la influencia de la condición inicial, que fue determinada de manera aleatoria. Se observa que las soluciones convergen hacia alguno de los dos puntos estables dependiendo de en qué punto partía cada una, lo cual también era un resultado esperado y acorde con lo teóricamente predicho.