

ILI-286: Computación Científica II  
Laboratorio #5  
*Sistemas de Reacción-Difusión*

Claudio Torres

Axel Símonsén

Martín Villanueva

29 de diciembre 2015

## 1 Reacción-Difusión y formación de patrones de Turing

Los sistemas de reacción-difusión son modelos matemáticos usualmente ocupados para describir fenómenos químicos/biológicos, en los cuales concentraciones de una o más sustancias distribuidas en el espacio, cambian a lo largo del tiempo debido a procesos de reacción (transformación de una sustancia en otra) y difusión (concentración de una sustancia se propaga en el espacio, a lo largo del tiempo). Un sistema de reacción-difusión corresponde a una PDE parabólica, que se expresa en forma general como

$$\partial_t \mathbf{u} = \mathbf{D} \Delta \mathbf{u} + \mathbf{R}(\mathbf{u}), \quad (1)$$

donde  $\mathbf{u}$  es un vector con las concentraciones de cada sustancia,  $\mathbf{D}$  es una matriz diagonal con los coeficientes de difusión, y  $\mathbf{R}$  es una función (usualmente no lineal) que compone la parte reactiva de la ecuación.

En un trabajo de Alan Turing titulado "*The Chemical Basis of Morphogenesis*", propone un modelo de formación de patrones de pigmentación en pelajes animales, basado en sistemas de reacción-difusión. En este existen dos sustancias (de concentraciones  $u$  y  $v$  respectivamente) la cuales interactúan según (2), donde la primera sustancia favorece la pigmentación de la piel mientras que la segunda la inhibe.

$$\begin{pmatrix} \partial_t u & \partial_t v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_u & 0 \\ 0 & D_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta v \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F(u, v) \\ G(u, v) \end{pmatrix} \quad (2)$$

La forma que tome la función de reacción depende de la aplicación particular. Para efectos de este laboratorio consideraremos el modelo propuesto por FitzHugh-Nagumo

$$\begin{aligned} \partial_t u &= D_u \Delta u + \lambda u - u^3 - \kappa - \sigma v \\ \tau \partial_t v &= D_v \Delta v + u - v, \end{aligned} \quad (3)$$

aquí  $D_u$ ,  $D_v$ ,  $\lambda$ ,  $\tau$ ,  $\sigma$  y  $\kappa$  son todas constantes que definen el comportamiento del sistema. Adicionalmente se trabajará con condiciones de borde periódicas.

## 2 Diferencias finitas en 2D

Se quiere resolver este problema por medio de diferencias finitas, pero hay que tomar en cuenta que ahora se trabaja en un espacio bidimensional, i.e, las funciones son  $u(x, y, t)$  y  $v(x, y, t)$ .

- Proponer un esquema de discretización "*forward*" para el cálculo de  $(u, v)$  en un tiempo siguiente. Indicar el error de aproximación.

- b) Desarrolle la función `solve_forward(u0, v0, Δx, Δy, Δt, Tf, Du, Dv, λ, τ, σ, κ)`, la cual recibe las condiciones iniciales  $u_0$  y  $v_0$  juntos con los parámetros de la PDE, y retorna un arreglo de dimensiones  $(N_t, N_x, N_y)$ , con la evolución de  $u(x, y, t)$  en el tiempo. Aquí  $(N_t, N_x, N_y)$  corresponden a la cantidad puntos de la malla en cada dimensión.
- c) Proponer un esquema de discretización "*backward*" para el cálculo de  $(u, v)$  en un tiempo siguiente. Indicar el error de aproximación.
- d) Desarrolle la función análoga `solve_backward(u0, v0, ...)`, la cual cumple la misma interfaz que la anterior. Como podrá notar de c) el sistema a resolver es no lineal, por ello en cada iteración deberá ocupar `scipy.optimize.fsolve`.
- e) (**Bonus: 10 puntos.**) Desarrollar la función `jacobian()` que compute analíticamente el Jacobiano del sistema no lineal anterior, tal como lo requiere el argumento opcional `fprime` de `scipy.optimize.fsolve`. Notar que cuando este no se entrega como argumento, debe ser estimado.

#### Observaciones:

1. Ambas implementaciones deben ser vectorizadas. Debe haber un sólo loop, para iterar en el tiempo.
2. Evite crear arreglos innecesarios.
3. No modificar las condiciones iniciales  $(u_0, v_0)$ .

### 3 Método de las Líneas

La idea de MOL (Method Of Lines) es reemplazar las derivadas espaciales en la PDE, por sus respectivas aproximaciones de diferencias finitas. De esta manera las variables independientes espaciales no aparecen explícitamente, quedando así como única variable independiente el tiempo. Sin embargo esto debe hacerse para cada punto de la malla, generando de este modo un sistema de ODEs (acoplado) que aproximan la solución original a la PDE. Más concretamente, consideremos la ecuación de calor en 2D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (4)$$

reemplazando la segunda derivada espacial por su aproximación de segundo orden centrada en el punto  $i$ -ésimo

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = D \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}, \quad (5)$$

se obtiene la ODE para dicho punto. Repitiendo esto para todos los puntos interiores de la malla, se obtiene el sistema dinámico prometido. Notar que el nombre MOL, viene del hecho de que cada ODE evoluciona a lo largo de la línea  $(x_i, y_j, t)$  para  $t \in [0, T_f]$ .

- a) Discretizar las derivadas espaciales en (3) y mostrar el sistema dinámico acoplado resultante.
- b) Desarrolle la función `solve_mol(u0, v0, Δx, Δy, Δt, Tf, Du, Dv, λ, τ, σ, κ, method)` que provea la misma interfaz que las anteriores. Esta debe hacer evolucionar simultáneamente/vectorizadamente todas las ODEs, y debe funcionar con los métodos RK2 y RK4.

### 4 Simulaciones

Para las simulaciones consideraremos un dominio  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  con  $N_x = N_y = 50$  (número de puntos de discretización en  $x$  y  $y$ ) y  $T_f = 10$ . Adicionalmente, tomar en cuenta lo siguiente:

- El método *forward* es estable para  $\Delta t \sim \Delta x^2$ . Ajuste  $\Delta t$  ocupando este criterio.
- El método *backward* puede considerarse incondicionalmente estable.

- Para los métodos basados en MOL, ajuste los time step  $\Delta t$  lo más grande posibles, sin caer en inestabilidad (realizar ajuste empírico).
  - Para  $(u_0, v_0)$  generar condiciones aleatorias uniformes en  $[0, 1]$ , dentro del domino  $\Omega$ . Estas mismas condiciones serán ocupadas por todos los métodos, por lo cual es muy importante que no se modifiquen.
  - Sólo se grafica  $u$ , pues corresponde a la concentración de la sustancia que favorece la pigmentación, es decir, la forma que toma  $u$  esta directamente relacionada con los patrones de pigmetación generados.
- a) Indique intuitivamente el significado o influencia de cada uno de los parámetros  $D_u$ ,  $D_v$ ,  $\lambda$ ,  $\tau$ ,  $\sigma$ ,  $\kappa$  en (3).
  - b) Ocupando como parámetros `params=` ( $D_u = 3e - 4$ ,  $D_v = 4e - 3$ ,  $\lambda = 1.0$ ,  $\tau = 0.2$ ,  $\sigma = 1.0$ ,  $\kappa = -0.004$ ), ejecute sus cuatro implementaciones anteriores. Animar los resultados con función que se provee.
  - c) Escoja la implementación que considere tuvo mejor desempeño, y realice 3 simulaciones variando los parámetros `params`. Animar los resultados, y explicar si estos tienen coherencia respecto a las variaciones de los parámetros realizadas.

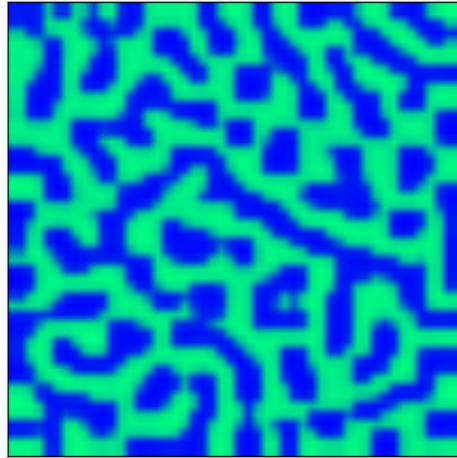


Figure 1: Formación de patrones esperado

## Instrucciones:

- (a) La estructura del laboratorio es la siguiente:
  - (a) Título, nombre(s) de estudiante(s), email(s) y rol(s).
  - (b) Introducción.
  - (c) Desarrollo y análisis de resultados.
  - (d) Conclusiones.
  - (e) Referencias.
- (b) El laboratorio debe ser realizado en IPython notebook (con Python2 o Python3).
- (c) Se evaluará la correcta utilización de librerías NumPy y SciPy, así como la correcta implementación de algoritmos vectorizados cuando se indique.
- (d) El archivo de entrega debe denominarse Lab5-apellido1-apellido2.tar.gz, y debe contener un directorio con todos los archivos necesarios para ejecutar el notebook, junto con un archivo README indicando explícitamente la versión utilizada de Python.
- (e) El descuento por día de atraso será de 30 puntos, con un máximo de 1 día de atraso. No se recibirán entregas después de este día.
- (f) El trabajo es personal o en grupos de a 2, no se permite compartir código, aunque sí se sugiere discutir aspectos generales con sus compañeros. Copias exactas serán sancionadas con nota 0.
- (g) El no seguir estas instrucciones, implica descuentos en su nota obtenida.