

Métodos numéricos para la ciencia y la ingeniería

Tarea 6

Jean Paul Martel

03 de noviembre 2015

1 Ecuación de Fisher-KPP

1.1 Introducción

Las ecuaciones de reacción-difusión representan modelos que combinan estos dos procesos. En el caso de una dimensión, son de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u)$$

En el lado derecho de la ecuación, la segunda derivada parcial respecto a x representa el término difusivo, mientras $f(u)$ el de reacción.

El ejemplo que se trata aquí es la ecuación de Fisher-KPP (Kolmogorov-Petrovsky-Piscounov) que busca modelar el comportamiento animal. Esta es:

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

La variable $n = n(t, x)$ describe la densidad de la especie como función del tiempo y la posición. Los 3 términos del lado derecho corresponden a:

μn : la tendencia de la especie a crecer indefinidamente (suponiendo que los recursos sean infinitos).

μn^2 : Después de un tiempo, el aumento en densidad creará competencia por los recursos, lo que tenderá a disminuir la densidad.

∇n : La tendencia de la especie a dispersarse para encontrar más recursos. La ecuación tiene dos puntos de equilibrio $n=0$ y $n=1$, donde el primero es inestable y el segundo estable.

Se quiere resolver numéricamente la ecuación para x entre 0 y 1 con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$ usando las siguientes condiciones de borde:

$$n(t, 0) = 1$$

$$n(t, 1) = 0$$

$$n(0, x) = e^{-x^2/0.1}$$

2 Procedimiento

Se usarán dos métodos simultáneamente para resolver la EDP, el método Crank–Nicolson para la parte de la difusión, y Euler explícito para la parte de reacción. Considerando solamente el término difusivo (segunda derivada parcial respecto a x), puede discretizarse usando Crank-Nicolson se muestra a continuación (usando la letra u en vez de n para evitar confusión con los índices):

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{\gamma}{2(\Delta x)^2} ((u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) + (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n))$$

Ahora considerando sólo el término reactivo se utiliza Euler explícito:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = f(u) = \mu u - \mu u^2$$

Con lo que la discretización completa del problema puede obtenerse como la suma de ambas expresiones:

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = \frac{\gamma}{2(\Delta x)^2} ((u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}) + (u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)) + f(u)$$

Se realiza el cambio de variable: $r = \frac{\gamma \Delta t}{2(\Delta x)^2}$ Reemplazando y reordenando:

$$-ru_{i+1}^{n+1} + (1 + 2r)u_{i-1}^{n+1} + (1 - 2r)u_i^n + ru_{i-1}^n + \Delta t f(u)$$

En este caso $f(u) = \mu u - \mu u^2$

La ecuación anterior también puede verse de la forma:

$$A_i^- u_{i-1} + A_i^0 u_i + A_i^+ u_{i+1} = b_i$$

En b_i está incluido el término constante $f(u)$. Esta ecuación lineal tiene solución de la forma:

$$u_{i+1} = \alpha_i u_i + \beta_i$$

Donde α y β cumplen las fórmulas de recurrencias siguientes ¹:

$$\alpha_{i-1} = \frac{-A_i^-}{A_i^+ \alpha + A_i^0}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{b_i - A_i^+ \beta_i}{A_i^+ \alpha + A_i^0}$$

Estas ecuaciones se usarán para el cálculo numérico. Se discretizará el espacio con 501 puntos, que corresponde a un $h = \delta x = \frac{1}{500} = 0.002$. Además

¹Mayor detalle de estos cálculos se encuentran en el apunte de Métodos Computacionales en Física del profesor Patricio Cordero

se avanza en tiempo usando $dt = \Delta t = 0.15$ hasta completar 15 unidades de tiempo.

En el programa, se crea una matriz de ceros "*n_solucion*" con tantas columnas como pasos espaciales existen y tantas filas como pasos temporales. El arreglo "*n*" lleva los valores de la densidad en todos los puntos para un tiempo dado. Se inicializa este arreglo para incluir las condiciones iniciales y de borde. Además, en cada avance temporal (usando la discretización explicada antes) se obtienen los valores de la densidad en el arreglo "*n_ext*" que utiliza en cada paso los datos del arreglo "*n*" correspondientes a un tiempo anterior. Este código puede encontrarse en "*Parte1_Fisher_KPP.py*"

Se grafican las curvas *nvsx* para distintos tiempos.

3 Resultados

Los gráficos obtenidos son los siguientes:

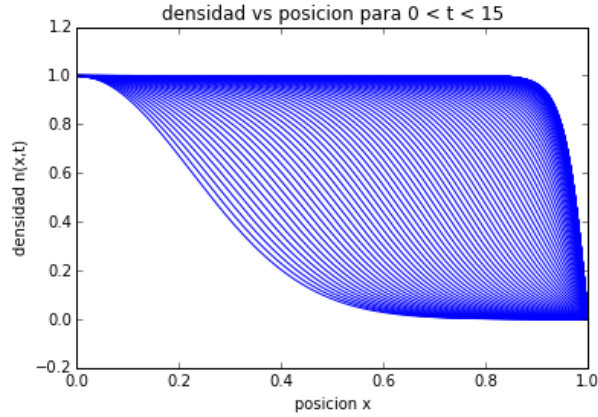


Figure 1: Gráfico densidad vs posición. Figura muestra soluciones de la ecuación de Fisher-KPP en un plano. Curvas más a la derecha representan tiempos posteriores. Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$

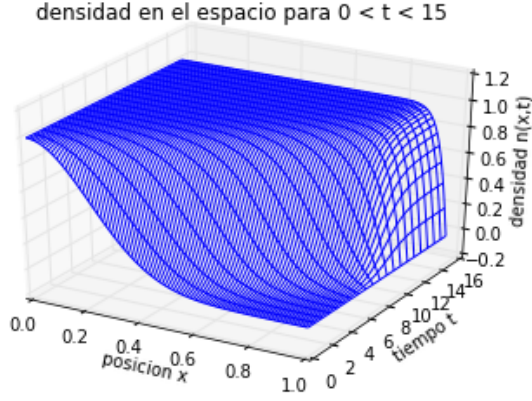


Figure 2: Gráfico 3D densidad vs posición vs tiempo. Muestra soluciones de la ecuación de Fisher-KPP para distintos tiempos. Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$

3.1 Conclusiones

La ecuación de Fisher-KPP modela la distribución de una población en el espacio y dependiente del tiempo. Si se analiza el término reactivo de la ecuación, es decir, $f(n) = \mu n - \mu n^2$, este representa la tasa de crecimiento de la población para una posición dada. En un principio, para pequeños valores de n , el crecimiento es aproximadamente proporcional a n , pero luego el término $-\mu n^2$ provoca que la tasa crecimiento disminuya hasta detenerse y llegar al equilibrio estable en $n = 1$ cuando los términos μn y μn^2 se anulan entre si. El término difusivo $\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$, modela la distribución de la población en el espacio (en una dirección).

La combinación de estos efectos genera finalmente una onda de densidad que se propaga en el espacio y se aprecia claramente la tendencia de la solución a converger a $n(x, t) = 1$. Se observa también que $n(x, t) = 0$ es equilibrio inestable. Se puede entender como que un grupo de la población que se mantiene y crece en un lugar mientras existan suficientes recursos. Una nueva fracción de población llega al lugar aumentando la población, pero también la competencia. Miembros de la especie migran para buscar más recursos. Las condiciones de borde, conservan la misma densidad en todo tiempo en una posición $x = 0$ y la suprimen en $x = 1$. Esto mantiene la forma de la función.

4 Ecuación de Newell-Whitehead-Segel

4.1 Introducción

Al igual que la ecuación de Fisher-KPP, Newell-Whitehead-Sege es otra ecuación de de reacción-difusión que describe fenómenos de convección y combustión entre otros. Corresponde a:

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

Se busca integrar para encontrar las soluciones de esta ecuación, con las mismas constantes: $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$

Se utilizan ahora las siguientes condiciones de borde e inicial:

$$n(t, 0) = 0$$

$$n(t, 1) = 0$$

$$n(0, x) = \text{np.random.uniform(low=-0.3, high=0.3, size=Nx)}$$

La condición inicial corresponde a valores obtenidos al azar. Se quiere resolver para dos condiciones iniciales distintas.

5 Procedimiento

Al igual que antes se resuelve la parte difusiva con Crank-Nicolson y la reactiva con Euler explícito.

La discretización de esta ecuación, es análoga que para la de Fisher-KPP, con la salvedad de usar $f(u) = \mu(n - n^3)$

El programa básicamente se implementa igual que antes, pero cambiando debidamente las condiciones iniciales. A recordar, se discretiza con $h=0.002$, $dt=0.1$, para 501 puntos y tiempo total de 15 unidades de tiempo. Se obtiene el gráfico con la solución de n vs x para diferentes tiempos.

Este código puede encontrarse en "*Parte2_Newell_Whitehead_Segel.py*"

6 Resultados

Los gráficos obtenidos son los siguientes:

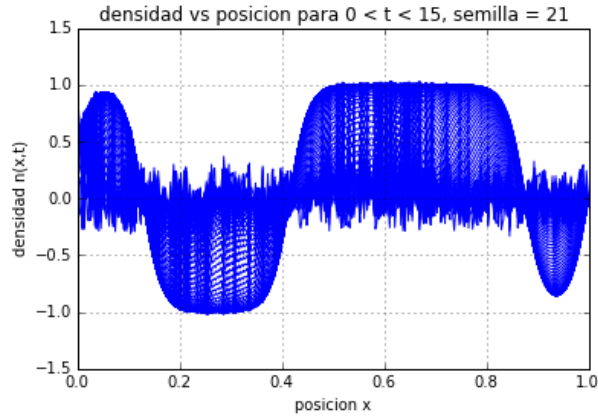


Figure 3: Gráfico densidad vs posición. Figura muestra soluciones de la ecuación de Newell-Whitehead-Segel para distintos tiempos. Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$.

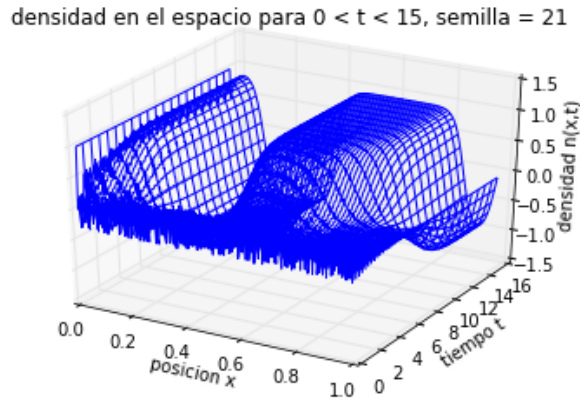


Figure 4: Gráfico 3D densidad vs posición. Figura muestra soluciones de la ecuación de Newell-Whitehead-Segel . Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$.

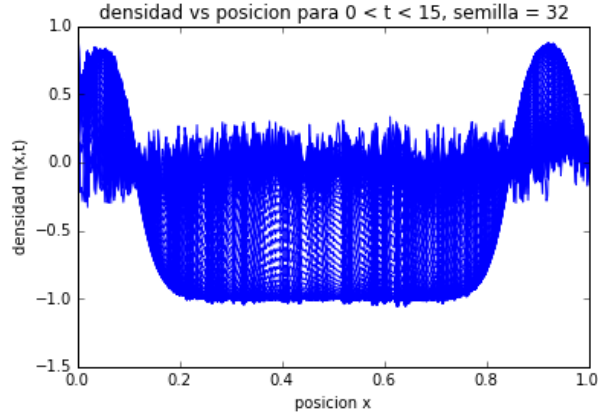


Figure 5: Gráfico densidad vs posición. Figura muestra soluciones de la ecuación de Newell-Whitehead-Segel para distintos tiempos. Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$.

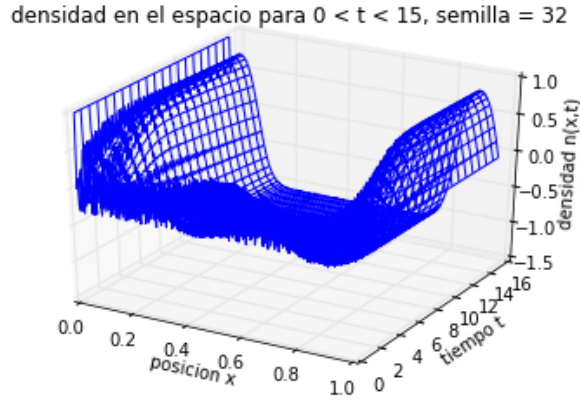


Figure 6: Gráfico 3D densidad vs posición. Figura muestra soluciones de la ecuación de Newell-Whitehead-Segel . Con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$. Discretización $h=0.002$, $dt=0.15$, $T_{total}=15$.

6.1 Conclusiones

La solución de la ecuación Newell-Whitehead-Segel depende fuertemente de las condiciones iniciales. Las condiciones iniciales fueron generadas al azar. . Existe clara diferencia entre en ambos casos estudiados

Para la semilla 32, en los extremos se acercan a densidades de $n(x,t) = 1$, mientras en la zona central alcanzas valores cercanos a $n(x,t) = -1$. Con la

semilla 21 estos valores se alcanzan alternadamente distinguiendo 2 zonas con valores positivo para $n(x, t)$ y dos con valores negativos.

Además, para una misma condición inicial, la evolución de los puntos difieren bastante con la de sus vecinos.

De cualquier forma, se aprecia que en ambos casos de condiciones iniciales se alcanzan los puntos de equilibrio esperados si se espera el tiempo suficiente. Estos puntos recordemos son 1 y -1. Como en la ecuación de Fisher-KPP, se producen debido a que el término reactivo se anula.

Entonces, a pesar de que los sistemas descritos por esta ecuación sean muy sensibles a las condiciones iniciales, llegan inevitablemente a puntos de equilibrios predecibles.