

Métodos Numéricos para la Ciencia y la Ingeniería

Camila Castillo Pinto. RUT 18.889.762-2

03 de Noviembre, 2015.

1 Introducción pregunta 1.

Esta pregunta consistió en integrar la ecuación de Fisher-KPP en 1D (presentada a continuación), la cual modela el comportamiento de una especie animal:

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

donde la variable n describe la densidad de la especie en función del tiempo y de la posición. Los 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.
- $\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$: La tendencia de la especie a dispersarse para encontrar más recursos.

La solución de la ecuación es una combinación de difusión con un pulso viajero, por lo que se pedía que se resolviese discretizando mediante el método de Crank-Nicolson y el método de Euler explícito, para la parte de difusión y de reacción respectivamente.

Debía integrar x entre $x = 0$ y $x = 1$, el tiempo hasta $t = 4$, con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$, y además discretizando el espacio en aproximadamente 500 puntos, con las siguientes condiciones de borde:

$$\begin{aligned} n(t, 0) &= 1 \\ n(t, 1) &= 0 \\ n(0, x) &= e^{-x^2/0.1} \end{aligned}$$

1.1 Procedimiento

Para la resolución de este problema se utilizó como base el código implementado en clases con el profesor, cuya estructura consiste en:

- En primer lugar se implementó la parte principal del código que contiene el Setup: fijar las condiciones de borde, fijar valores para las variables, determinar el paso espacial y temporal, definir variable r , crear arreglos de ceros para luego guardar ahí la solución en cada iteración, y finalmente la iteración, actualizando los valores anteriores con los resultantes.
- Como se debía utilizar el método de Crank-Nicolson, la iteración para llegar a la solución consistió en calcular b , para luego calcular α y β , para finalmente calcular la solución n . El significado de b , α y β serán enunciados más adelante.
- Luego se procedió a definir las funciones que se utilizaron en la iteración y fuera de ella. Funciones tales como: *calcula_b*, la cual, como dice su nombre, se encarga de calcular b usando la fórmula discretizada; *inicializa_T*, la cual impone las condiciones iniciales del problema; *calcula_alpha_y_beta*, la cual calcula los valores de α y β usando los valores de b y de las condiciones iniciales; y *avanza_paso_temporal*, la cual calcula la solución para un paso más adelante, dt , usando los valores de α y β y las condiciones iniciales.

Discreticemos la ecuación a resolver: la discretización del lado izquierdo corresponde a:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{n_j^{n+1} - n_j^n}{\epsilon} \quad (2)$$

donde ϵ corresponde al paso temporal.

La discretización para la segunda derivada del lado derecho, usando el método de Crank-Nicolson es:

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \frac{n_{j+1}^{n+1} - 2n_j^{n+1} + n_{j-1}^{n+1}}{h^2} + \frac{1}{2} \frac{n_{j+1}^n - 2n_j^n + n_{j-1}^n}{h^2} \quad (3)$$

donde h corresponde al paso espacial.

La discretización para el segundo y tercer término del lado derecho, usando el método de Euler explícito es:

$$n - n^2 = n_j^n - n_j^n n_j^n \quad (4)$$

Si se reemplazan todos estos términos en la ecuación (1) y reordenamos dejando todos los términos que llevan superíndice $n + 1$ al lado izquierdo y los que llevan superíndice n al lado derecho, se obtiene:

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

donde $r = \gamma\epsilon/2h^2$.

Es importante notar que el lado derecho de la ecuación (5) es completamente conocido, ya que depende del paso n (paso anterior) y el lado izquierdo de la ecuación es nuestra incógnita para llegar a la solución (paso $n + 1$, paso siguiente).

Al lado derecho de la ecuación (5) se le llamó b , y tal como se mencionó anteriormente es conocido para cada iteración nueva que se quiera hacer. De este modo la función *calcula_b* es la encargada de entregar el valor de b .

Una vez calculados los b es posible calcular α y β , mediante la relaciones de recurrencia:

$$\alpha_k = -\frac{A_k^+}{A_k^o + A_k^- \alpha_{k-1}} \quad (6)$$

$$\beta_k = -\frac{b_k - A_k^- \beta_{k-1}}{A_k^o + A_k^- \alpha_{k-1}} \quad (7)$$

donde α_{k-1} y β_{k-1} son aquellos evaluados en el paso anterior y b_k son los b calculados anteriormente; A_k^+ , A_k^- y A_k^o corresponden a los coeficientes $-r$, $-r$ y $(1+2r)$ de la ecuación (5), respectivamente. Es importante mencionar que los valores de α_0 y β_0 quedan determinados por las condiciones iniciales y condiciones de borde. Este procedimiento es el que realiza la función *calcula_alpha_y_beta*.

Finalmente para calcular la solución de n es necesario usar α y β e iterar en reversa usando la fórmula (8):

$$n_j^{n+1} = \alpha_j n_{j+1}^{n+1} + \beta_j \quad (8)$$

Es importante mencionar que se utilizó un paso temporal $\epsilon = 0.01$, como el utilizado en el ejemplo de clases. El número de pasos temporales, entonces, se calculó mediante la fórmula: $N_{pasos_temporales} = 1 + (t_{final} - t_{inicial})/\epsilon$, donde se usó $t_{inicial} = 0$ y $t_{final} = 5$.

1.2 Resultados y Análisis

Se presenta la solución en un gráfico de Densidad de la especie n versus la posición x en el espacio (Ver Figura 1). Cada línea es la solución correspondiente para algún valor del tiempo.

De la figura 1 se observa que a medida que avanza el tiempo, la densidad de la especie estudiada se desplaza en el espacio, esta es la parte del pulso viajero. Además se observa que la curva para $t = 0$ es distinta a la curva en $t = 4$. Para $t = 0$ se nota que la densidad de la especie es mucho mayor para posiciones cercanas a cero, y decae rápidamente mientras se aleja del $x = 0$; mientras que para $t = 4$, la densidad se mantiene y comienza a decaer rápidamente recién cerca de $x = 1$.

2 Introducción pregunta 2

En esta pregunta se pedía resolver la ecuación de Newell-Whitehead-Segel (ver ecuación 9), la cual describe fenómenos de convección y combustión, entre otros.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu(n - n^3) \quad (9)$$

bajo las siguientes condiciones de borde:

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

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

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

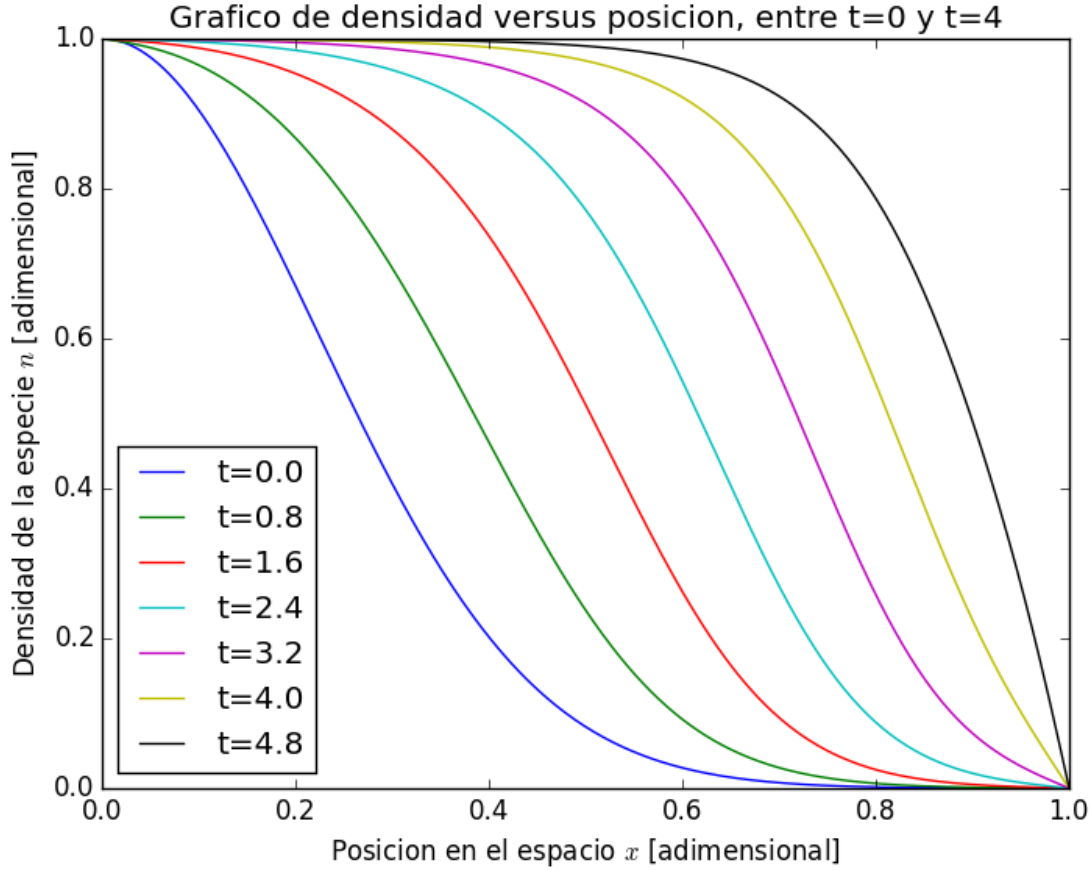


Figure 1: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$

2.1 Procedimiento

Se utilizó el mismo procedimiento que en la pregunta anterior, con las salvedades de: cambiar la función *inicializa_T*, para que usara las condiciones de borde mencionadas en la introducción de la pregunta 2; cambiar la función *calcula_b*, de manera que se resolviese la nueva ecuación presentada en (9).

Se setearon distintos valores para la semilla: 1, 5, 10, 83819 y 10000.

2.2 Resultados y Análisis

Se graficó la solución densidad de la especie n versus la posición x en el espacio (Ver Figuras 2, 3, 4, 5 y 6 adjuntadas al final del informe), para distintos valores de la semilla. Cada línea en el gráfico es la solución correspondiente para algún valor del tiempo.

Se observan diferentes formas de la solución debido a las condiciones iniciales aleatorias que se utilizaron.

De las figuras 2, 3 y 4 se observa cierta similitud, en el sentido que las tres figuras poseen dos amplitudes mayores que cero y dos amplitudes menores que cero. Además hay una de

las amplitudes que es más ancha que las demás.

Entre las figuras 5 y 6 también hay similitudes: poseen (predominantemente) 3 amplitudes, una mayor que cero y dos menores a cero.

Además se observa que para las figuras 2, 3, 4, 5 y 6, en el $t = 0$ presenta muchas oscilaciones bruscas y afiladas, y a medida que avanza en el tiempo se vuelven más suaves y curvas, y también se vuelven menos oscilaciones en comparación al número que se tenía en el tiempo cero.

También se observa que las amplitudes son cercanas a $+1$ y a -1 , los cuales son puntos estables del sistema.

3 Conclusiones

Para la pregunta 2, los puntos estables son $n = +1$ y $n = -1$ ya que anulan los términos de la reacción de la ecuación (9), sobreviviendo el término de difusión.

De los gráficos de la pregunta 2 se concluye que a medida que avanza el tiempo, las soluciones se acercan a los valores de los puntos de equilibrio estable ($+1$ y -1).

Del gráfico de la pregunta 1 se concluye que se observa lo esperado, es decir, la densidad de la especie tendería a crecer de no ser que se comienza a competir por los recursos, lo cual disminuye la densidad, y la especie se comienza a desplazar para buscar recursos.

Se recomienda hacer la iteración hasta un número más grande para el tiempo en la pregunta 2, ya que se podrá observar de forma más clara que la solución tiende a los puntos de equilibrio.

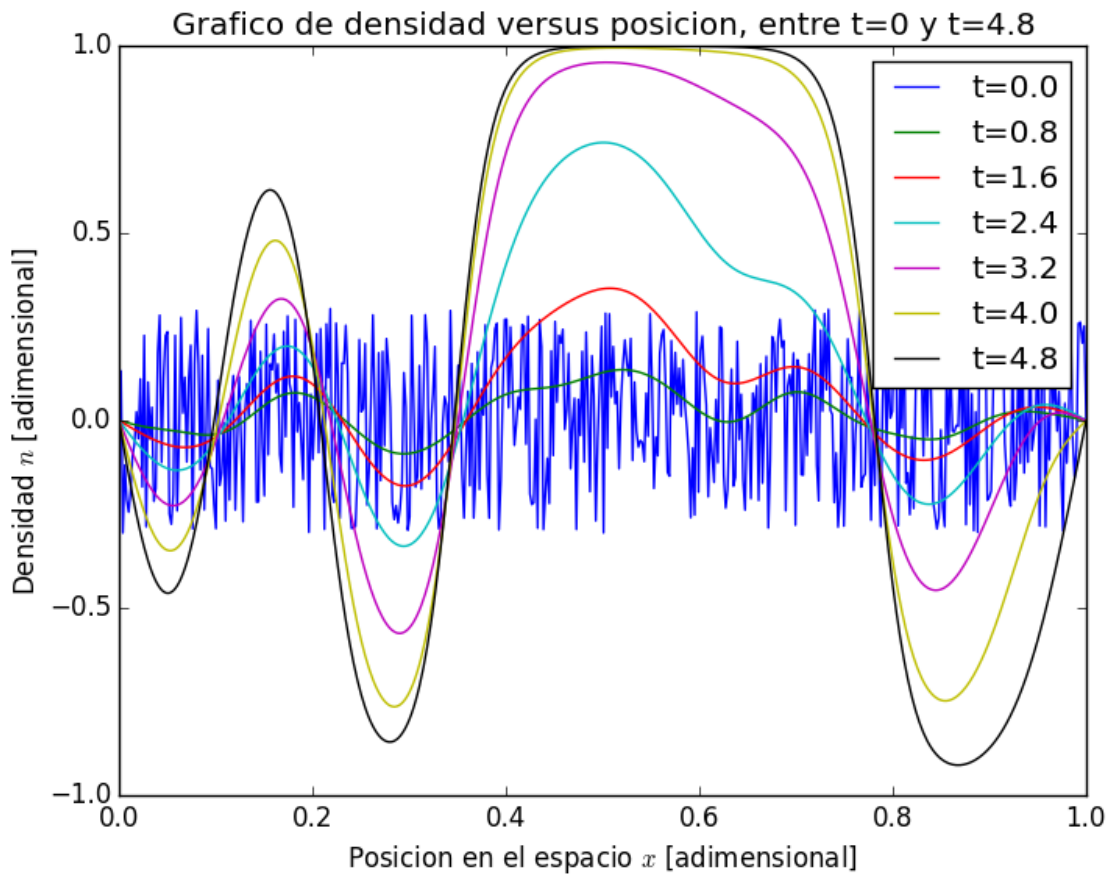


Figure 2: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$. Semilla = 1.

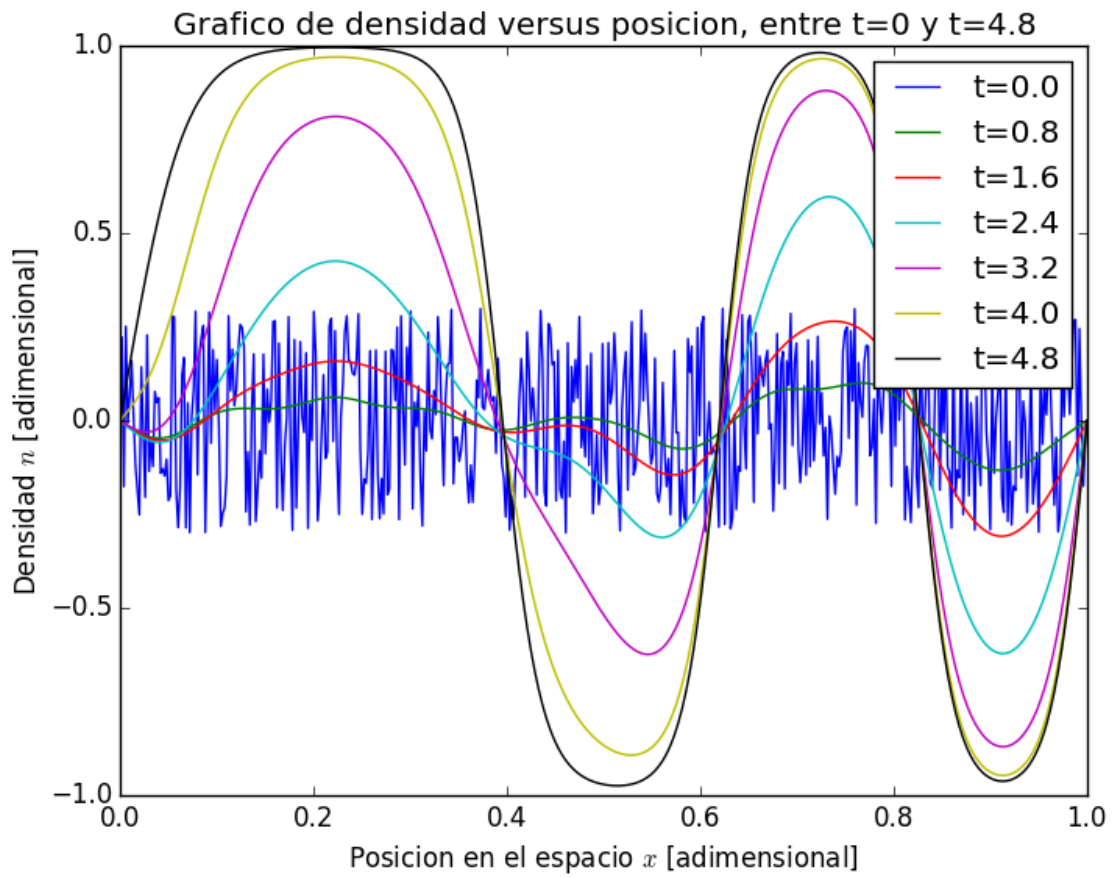


Figure 3: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$. Semilla = 5.

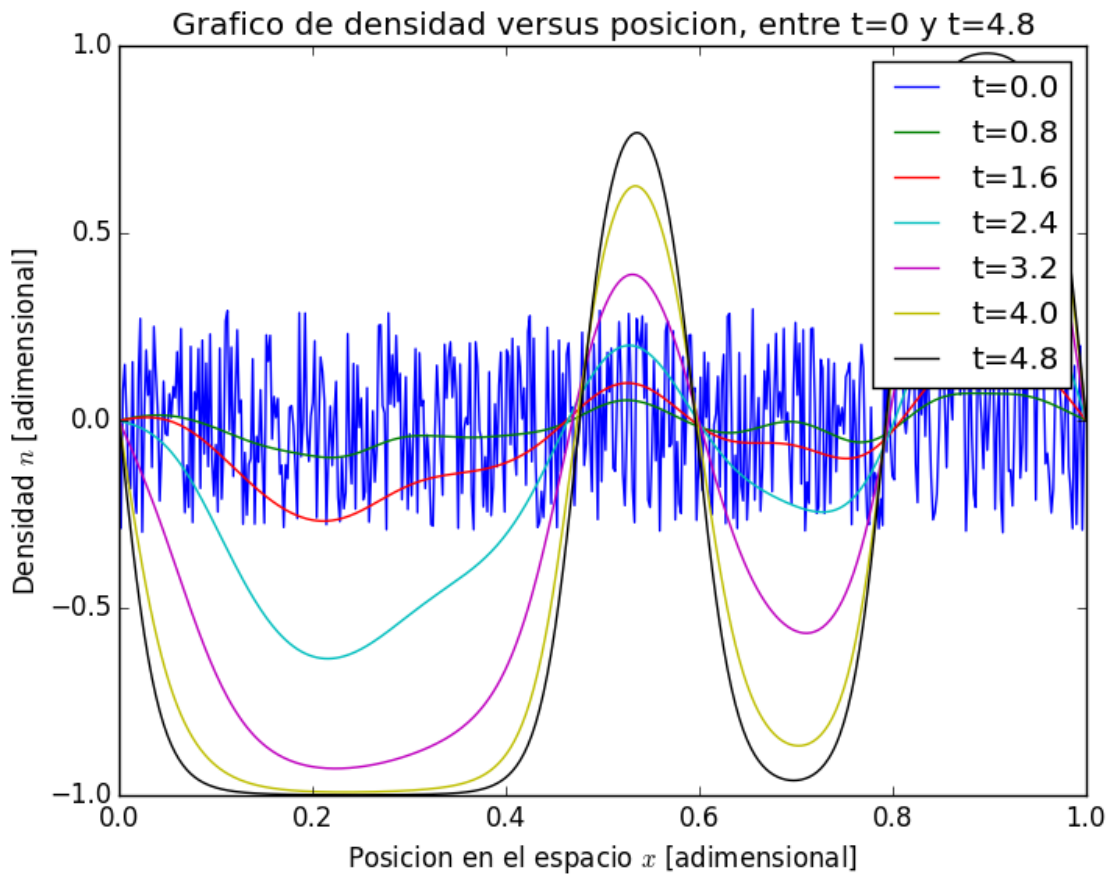


Figure 4: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$. Semilla = 10.

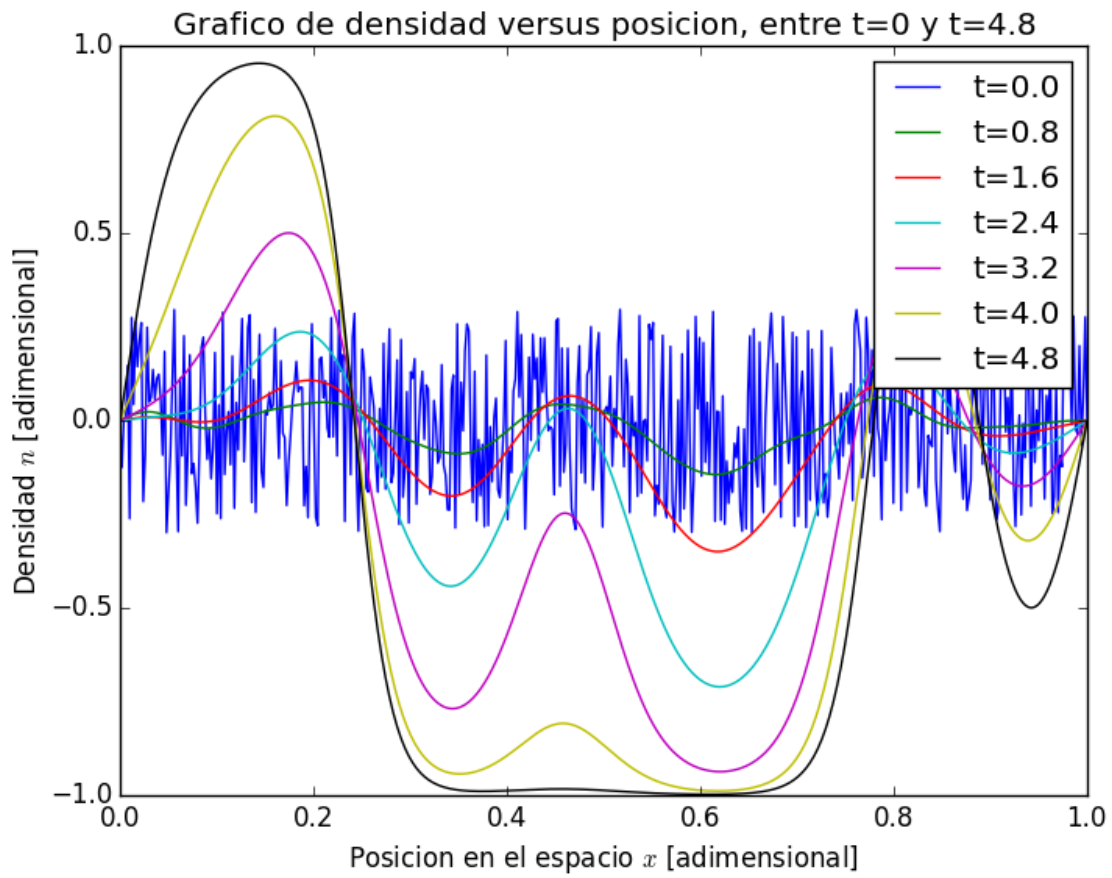


Figure 5: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$. Semilla = 83819.

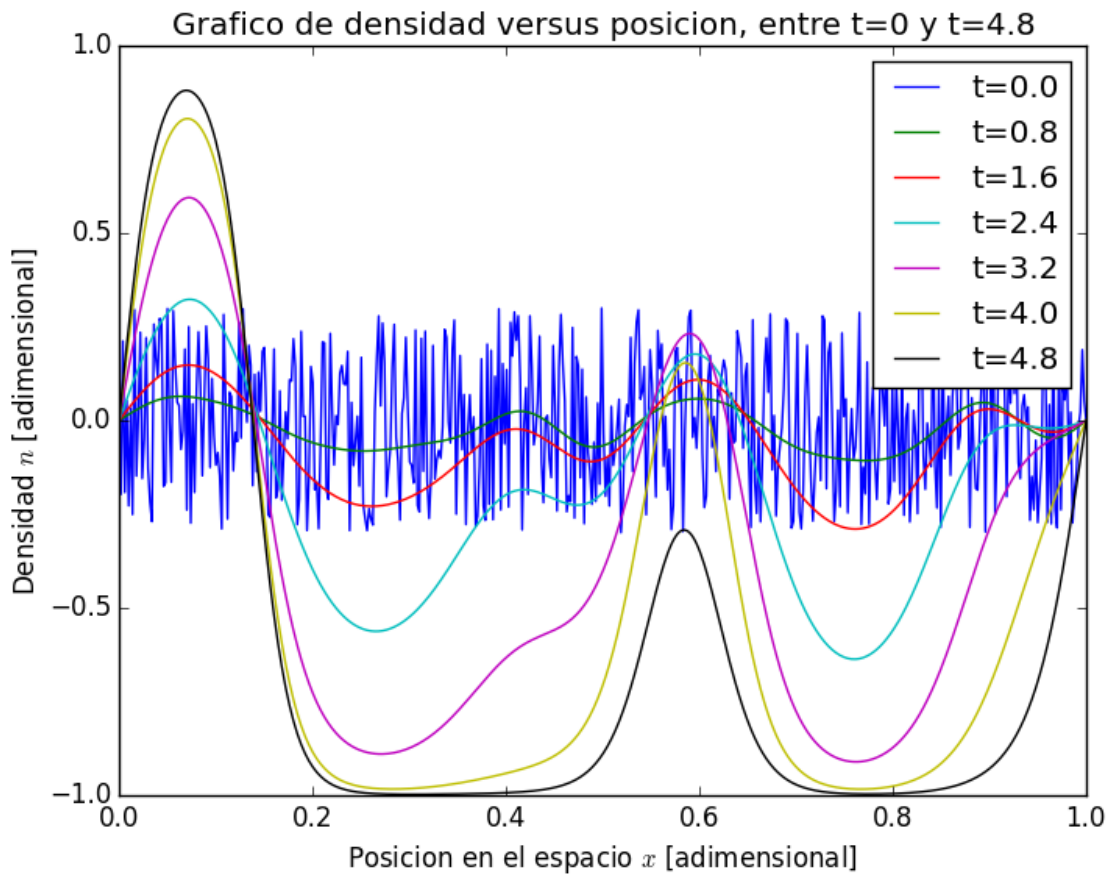


Figure 6: Gráfico de la solución n densidad de la especie versus la posición x en el espacio, para valores entre $t = 0$ y $t = 4.8$. Semilla = 10000.