UNIVERSIDAD DE CHILE, FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS Y MATEMATICAS
Metodos Numericos para la Ciencia y Ingenieria

# Tarea 6: Ecuación de Crank-Nicolson en Difusión

Maria Jose Hernández Pozo

November 4, 2015

## 1 Introducción

Las ecuaciones de difusión se utilizan en variados modelos físicos, químicos e incluso de comportamiento biólogico, en particular trabajaremos con las ecuaciones de Fisher-KPP y Newell-Whitehead-Segel. La primera modela la densidad de una población animal en función del tiempo y la posición.

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

Donde $n = n(x,t)$ corresponde a la densidad de la especie, $\mu n$ : la tendencia de la especie a crecer indefinidamente (suponiendo que los recursos sean infinitos). $-\mu n^2$ : Despues de un tiempo, el aumento en densidad creará competencia por los recursos, lo que tenderá a disminuir la densidad. Por último la gradiente representa la tendencia de la especie a dispersarse para encontrar más recursos. Para x entre 0 y 1 con $\gamma = 0.001$ y $\mu = 1.5$ se pide resolver estas ecuaciones con las siguientes condiciones de borde:

$$n(t,0) = 1$$
$$n(t,1) = 0$$
$$n(0,x) = e^{-x^2/0.1}$$

Por otra pate tenemos la segunda ecuación de reacción-difusión que describe fenómenos de convección y combustión entre otros:

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

Que ha de ser integrada con las siguientes condiciones de borde:

$$n(t, 0) = 0$$
$$n(t, 1) = 0$$
$$n(0, x) = \texttt{np.random.uniform(low=-0.3, high=0.3, size=Nx)}$$

Siendo np.random.uniform una función que nos da un valores aleatorios en -3 y 3, nos dará Nx valores, en este caso será el número de pasos en el espacio que hayamos definido. En este trabajo se usaron 3 semillas las cuales estan adjuntas en archivos de texto. Se mantienen las constantes.

# 2 Procedimiento

Para integrar la solución de las ecuaciones planteadas es esencial hacer notar que aquellas estan compuestas por gradientes y polinomios, es decir, en el caso de la ecuación de Fisher el término correspondiente a la dispersión de la especie hacia lugares más espaciosos y en la ecuación de Newell, el movimiento difusivo de partículas, estan representados por gradientes y su solución en este trabajo es abordada con el método de Cranck-Nicolson, en cambio, los polinomios que los acompañan, por medio del método de euler explícito

Lo primero para ambas ecuaciones es adimensionalizarlas para simplificar su integración, esto se hace mediante un cambio de variable: $t_c = \mu t$ y $x_c = x\sqrt{\mu/\gamma}$. De esta forma las ecuaciones quedan:

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

Como se explicó anteriormente, dado que parte de solución depende de 2 variables y la otra no, se calculan ambas con distintos métodos y se suman en el avance temporal que es el común de ambos.
Ahora se procederá a explicar el método de Cranck Nicolson el cuál se usa a menudo en problemas difusivos. Tanto en la ecuación de Fisher como en la de Newell se tiene que:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$

Cuya discretización es:

$$\frac{n_i^{n+1} - n_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2(\Delta x)^2}\left((n_{i+1}^{n+1} - 2n_i^{n+1} + n_{i-1}^{n+1}) + (n_{i+1}^n - 2n_i^n + n_{i-1}^n)\right)$$

Los índices arriba corresponden al tiempo y sub índices a la posición. Si tomamos $r = \frac{a\Delta t}{2(\Delta x)^2}$, entonces:

$$-ru_{i+1}^{n+1} + (1+2r)u_i^{n+1} - ru_{i-1}^{n+1} = ru_{i+1}^n + (1-2r)u_i^n + ru_{i-1}^n$$

que es un sistema con matriz tridiagonal, A, osea: $A_k^-$, $A_k^0$, $A_k^+$, sus elementos. Podemos escribir entonces:

$$A_k^-\phi_{k-1} + A_k^0\phi_k + A_k^+\phi_{k+1} = b_k$$

Si se supone una solución de la forma: $\phi_k = \alpha_k\phi_{k+1} + \beta_k$ entonces podemos depejar los coeficientes alpha y beta:

$$\alpha_k = \frac{-A_k^+}{A_k^0 + A_k^-\alpha_{k-1}}; \beta_k = \frac{b_k - \beta_{k-1}A_k^-}{A_k^0 + A_k^-\alpha_{k-1}}$$

En cuanto a la discretización del espacio son 500 puntos y un delta tiempo de 0.1 con un numero de pasos temporales igual a 400.
Por último en cuanto a los polinomios, mediante el método de euler para Fisher KKP:

$$n_{n+1} = n_n + \Delta t(n_n + n_n^2)$$

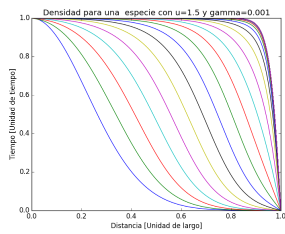
Y para Newell:

$$n_{n+1} = n_n + \Delta t(n_n + n_n^3)$$

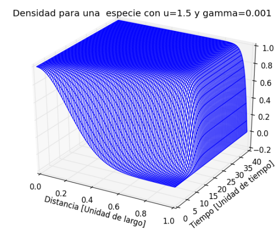
Hemos de notar que esta solución se integra en el cálculo de $b_k$ dado que depende del paso temporal.
Respecto a las soluciones estables e inestables para cada problema, en comportamiento biológico es fácil ver que 1 es la solución estable y dado que esa es la condición inicial, en el tiempo debiese tender a 1.
En cambio para la difusión de temperatura, existen dos soluciones estables: 1 y -1, es decir al estar cerca de estos valores al pasar el tiempo van tender a la solución de estos números. Dado que en el problema 2, existen condiciones iniciales aleatorias se esperaria que aquellas que esten cercanas a estas soluciones estables se dirijan hacia ellas y viceversa para las cercanas a 0. Los resultados serán mostrados en 2D y 3D.

# 3 Resultados

A continuación se muestran los resultados obtenidos para la ecuación de Fisher KPP:



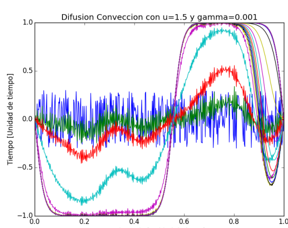

(a) Gráfico 2D



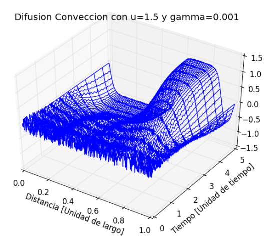

(b) Gráfico 3D

Figure 1: Densidad poblacional de una especie en un espacio entre [0,1] a través del tiempo con un $\mu = 1.5$ y $\gamma = 0.001$

Lo siguiente corresponde a los resultados obtenidos para la ecuación de Newell-Whitehead-Segel para valores de solución random iniciales, se hicieron 3 semillas distintas, es decir soluciones iniciales distintas, con valores aleatorios:

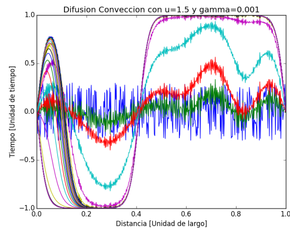



(a) Gráfico 2D

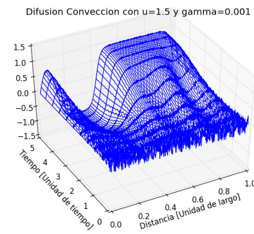



(b) Gráfico 3D

Figure 2: Comportamiento convectivo y otros para la primera semilla con un $\mu = 1.5$ y $\gamma = 0.001$. El gráfico 3D contiene hasta el tiempo 5 y y el 2D hasta 40.

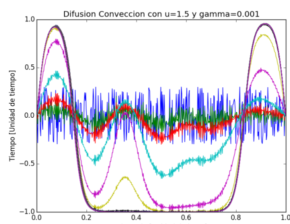



(a) Gráfico 2D

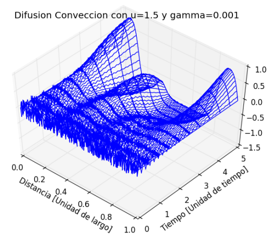



(b) Gráfico 3D

Figure 3: Comportamiento convectivo y otros para la segunda semilla con un $\mu = 1.5$ y $\gamma = 0.001$. El gráfico 3D contiene hasta el tiempo 5 y y el 2D hasta 40.




(a) Gráfico 2D




(b) Gráfico 3D

Figure 4: Comportamiento convectivo y otros para la tercera semilla con un $\mu = 1.5$ y $\gamma = 0.001$. El gráfico 3D contiene hasta el tiempo 5 y y el 2D hasta 40.

# 4 Conclusiones

Las ecuaciones fueron resueltas satisfactoriamente y los gráficos muestran claramente como tienden las soluciones a valores particulares a traves del tiempo, es decir a soluciones estables. Para la ecuación de Fisher-KPP la densidad inicial fue tendiendo a 1, la solución estable tal como se esperaba, es decir, con estas condiciones iniciales la densidad de especies tiende aumentar y llenar la línea x. La ecuación Newell-Whitehead-Segel tiene en cambio un comportamiento muy distinto, dado que las condiciones iniciales fueron totalmente aleatorias, se ubiese esperado encontrar una solución más difusa, es decir que no tendiese a una solución continua y con caracter sinusoidal (no necesariamente períodico) como el encontrado. Si no más bien algo similar a la condición inicial pero con valores -1 o 1. Con los conocimientos actuales no se puede dar una explicación a este suceso, se dejará como interrogante y futura investigación el resultado.