

Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas

FI3104-01 Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

## Tarea N°6: Ecuaciones parabólicas de reacción-difusión: Fisher-KPP y Newell-Whitehead-Segel

Bruno Scheihing, RUT: 18.954.350-6

3 de Noviembre de 2015

### Resumen

En la presente tarea se buscó resolver numéricamente dos ecuaciones en derivadas parciales parabólicas de reacción-difusión, en particular las ecuaciones de Fisher-KPP y Newell-Whitehead-Segel, con parámetros  $\mu = 1,5$  y  $\gamma = 0,001$ . Para ello se discretiza la parte difusiva de las ecuaciones según el método de Crank-Nicolson, y la reactiva de forma explícita. El resultado obtenido para la ecuación de Fisher-KPP muestra un “frente de onda” avanzando desde el lado con condición de borde  $n = 1$  hacia el lado con condición de borde nula. Por otra parte, la ecuación de Newell-Whitehead-Segel mostró ser altamente sensible a las condiciones iniciales, en particular a su signo, pues apenas la solución logra tener un signo uniforme, empieza a acelerar hacia  $\pm 1$  con su signo correspondiente. Ambos fenómenos ocurren porque la solución se desplaza desde un equilibrio inestable hacia uno estable.

## 1. Introducción

Dentro de las ecuaciones en derivadas parciales, las ecuaciones parabólicas son un tipo de ecuaciones diferenciales de la forma:

$$Au_{xx} + 2Bu_{xy} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + F = 0$$

que satisfacen la condición  $B^2 - AC = 0$ .  $A, B, C, D, E, F$  pueden ser funciones de  $x, y, u$ , y los subíndices denotan derivadas parciales con respecto a la variable escrita.

En particular, las ecuaciones de reacción-difusión son de la forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\nabla^2 u + R(u)$$

donde  $D$  es un coeficiente de difusión y  $R(u)$  es la parte reactiva de la ecuación.

En la presente tarea se estudiarán dos de estas ecuaciones. La primera es la ecuación de Fisher-KPP unidimensional (en adelante FKPP):

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

Esta ecuación busca modelar el comportamiento de una especie animal, con  $n(x, t)$  la densidad de la especie en cada posición y tiempo. El término  $\nabla^2 n$  representa la tendencia de la especie a dispersarse,  $\mu n$  la tendencia a crecer indefinidamente y  $-\mu n^2$  busca representar la competencia por los recursos. Se resolverá la ecuación a partir de  $t = 0$  entre  $x = 0$  y  $x = 1$  para las siguientes condiciones de borde e iniciales:

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

para parámetros  $\mu = 1,5$  y  $\gamma = 0,001$ . Esta ecuación tiene un punto de equilibrio estable en  $n = 1$  y otro inestable en  $n = 0$ , por lo que se espera (dada la condición inicial, que es mayor a cero salvo en  $x = 1$ ) que la solución vaya convergiendo hacia 1 para la mayoría de los valores de  $x$ .

La segunda ecuación a resolver es la de Newell-Whitehead-Segel (en adelante NWS):

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

Esta ecuación describe algunos fenómenos de combustión y convección. Las condiciones de borde e iniciales a usar son:

$$n(t, 0) = 0 \quad ; \quad n(t, 1) = 0$$

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

Donde  $Nx$  es el largo del arreglo sobre  $x$  a usar. La idea de dar una condición inicial aleatoria (entre  $-0,3$  y  $0,3$  para todos los  $x$  disponibles) es para explorar cómo se estabiliza la solución. Para poder reproducir los resultados, se usará `np.random.seed(<algún int>)`, con el fin de controlar qué números “aleatorios” son generados. Se usará  $\mu = 1,5$  y  $\gamma = 0,001$ .

La ecuación de Newell-Whitehead-Segel, tal como está planteada antes, tiene puntos de equilibrio estable en  $n = \pm 1$ , y uno inestable en  $n = 0$ .  $n = \pm 1$  son estables porque al variar ligeramente  $n$  desde uno de esos puntos (despreciando el término  $\nabla^2 n$ ), disminuirlo hace que el lado derecho de la ecuación pase de ser nulo a positivo, y así  $n$  aumentaría de vuelta en el siguiente paso. Por otra parte, aumentar  $n$  provoca que el lado derecho pase de ser nulo a negativo, por lo que en el paso siguiente disminuiría de vuelta hacia el valor inicial de  $n$ .

## 2. Procedimiento

El procedimiento para ambas ecuaciones es análogo, puesto que sólo difieren en un término del lado derecho.

En primer lugar, se procede a re-escalar la ecuaciones, en el sentido de hacer un cambio de variables para eliminar las constantes que aparecen. A partir de la transformación:

$$t' = \mu t \quad ; \quad x' = x \sqrt{\frac{\mu}{\gamma}}$$

se logra que las ecuaciones se escriban como:

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t'} &= \frac{\partial^2 n}{\partial x'^2} + n - n^2 & (FKPP) \\ \frac{\partial n}{\partial t'} &= \frac{\partial^2 n}{\partial x'^2} + n - n^3 & (NWS)\end{aligned}$$

Se discretiza el espacio en 501 puntos, con un paso  $h = 0,002$  para la variable  $x$ . En términos de  $x'$ , este paso es de  $0,002\sqrt{\frac{1,5}{0,001}} \approx 0,07746$ . Se integrarán las ecuaciones por un tiempo  $t = 7$  ( $t' = 10,5$ ), con un paso temporal  $\varepsilon = h^2/4 = 0,0015$  en términos de  $t'$ . Este paso debería garantizar la estabilidad de la solución.

Las ecuaciones serán resueltas en términos de las variables  $x'$  y  $t'$ , transformando a  $x$  y  $t$  al momento de presentar los resultados (de hecho, como las estructuras de datos manejadas para  $n(x, t)$  son arreglos, bastará escalar los ejes de los gráficos de forma adecuada, pues los valores de la función  $n(x, t)$  final serán los mismos).

Sean  $j, N$  los índices asociados al reticulado espacial y temporal, respectivamente. Usando la discretización de Crank-Nicolson para la parte difusiva de las ecuaciones, se tiene la siguiente expresión:

$$\left[ \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \right]_j^N = \frac{1}{2} \frac{n_{j+1}^{N+1} - 2n_j^{N+1} + n_{j-1}^{N+1}}{h^2} + \frac{1}{2} \frac{n_{j+1}^N - 2n_j^N + n_{j-1}^N}{h^2}$$

Los demás términos:

$$\left[ \frac{\partial n}{\partial t} \right]_j^N = \frac{n_j^{N+1} - n_j^N}{\varepsilon} ; \quad [n]_j^N = n_j^N$$

Sea  $r = \varepsilon/(2h^2)$ . Reemplazando estos términos en las ecuaciones, se puede despejar que:

$$-rn_{j+1}^{N+1} + (1 + 2r)n_j^{N+1} - rn_{j-1}^{N+1} = rn_{j+1}^N + (1 - 2r)n_j^N + rn_{j-1}^N + \varepsilon R(n_j^N)$$

donde  $R(n_j^N)$  es el término de reacción para cada ecuación.

Este sistema de ecuaciones (pues hay una ecuación para cada  $j$  que no está en el borde) es de la forma:

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

Suponiendo una solución de la forma  $\phi_k = \alpha_k \phi_{k+1} + \beta_k$ , es posible probar que se tiene la siguiente recurrencia para  $\alpha_k$  y  $\beta_k$ :

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

No es difícil convencerse de que, dado el problema,  $\alpha_0 = 0$  (pues  $\phi_0$  es condición de borde y por lo tanto no depende de su sucesor en la sucesión  $\phi_k$ ). Desde aquí también se ve que  $\beta_0 = \phi_0$ . Con esto se itera sobre  $k$  y se calculan todos los  $\alpha_k, \beta_k$ . Esto permite, a partir de  $\phi_{500}$  (pues ese es el otro borde), determinar todos los  $\phi_k$  usando que  $\phi_k = \alpha_k \phi_{k+1} + \beta_k$ .

Con todo lo anterior se calcula  $n_j^{N+1}$ , para todos los valores de  $j$ , a partir de  $n_j^N$ . Se hace esta iteración la cantidad de veces que sea necesaria hasta llegar al tiempo deseado. Esto serían 4667 iteraciones, dados el intervalo y discretización temporal elegidos.

En ambos casos se impondrá primero la condición inicial y luego la condición de borde. Como resultado de la integración, se presentarán gráficos mostrando varias funciones  $n(x, t_0)$  (para diferentes  $t_0$ ) en la misma figura, indicando en qué dirección avanzó el tiempo.

En el caso de la ecuación FKPP, se tiene que  $R(n_j^N) = n_j^N - (n_j^N)^2$ , y para la ecuación NWS se tiene que  $R(n_j^N) = n_j^N - (n_j^N)^3$ . Para la ecuación NWS se irá variando la semilla del generador de números aleatorios para estudiar el comportamiento de la solución. Se presentarán gráficos para los enteros semilla 167, 347.

### 3. Resultados

#### 3.1. Ecuación de Fisher-KPP

Los resultados de la integración de la ecuación FKPP se muestran en la Figura 1. Las líneas azules y verdes están equiespaciadas en el tiempo (entre líneas consecutivas), y el cambio de color desde azul a verde indica el avance en el tiempo.

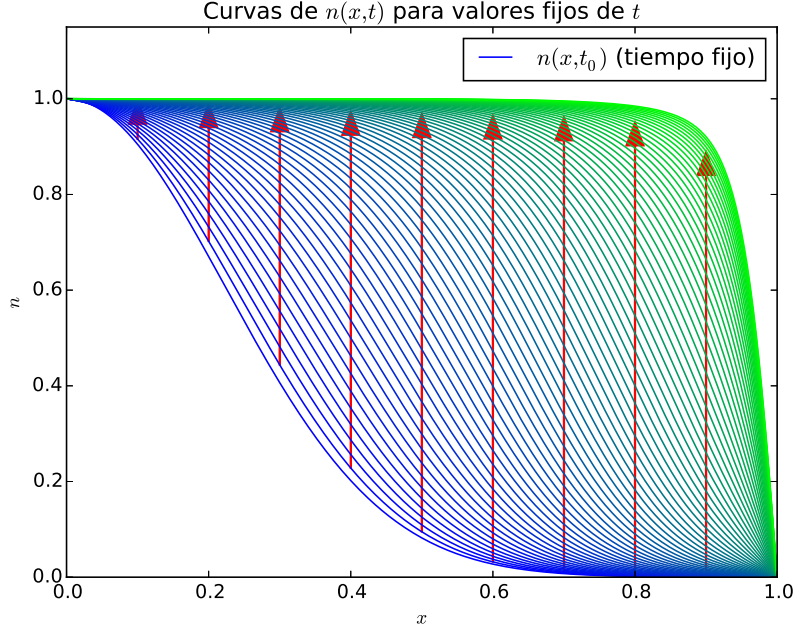


Figura 1: Solución a ecuación de Fisher-KPP, para  $\mu = 1,5$ ,  $\gamma = 0,001$ . Las flechas rojas indican en qué dirección avanza el tiempo sobre el gráfico. El cambio de azul a verde en el color de las líneas también indica el avance temporal.

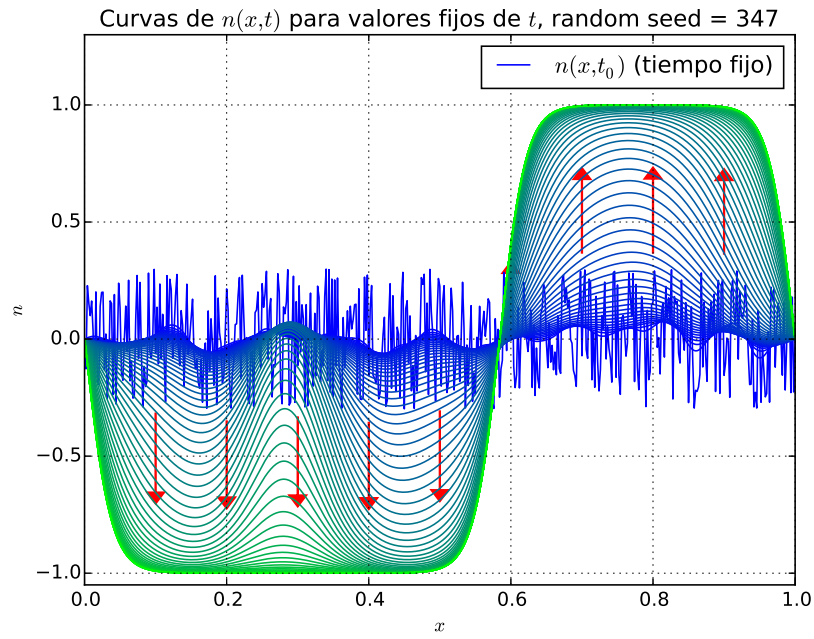
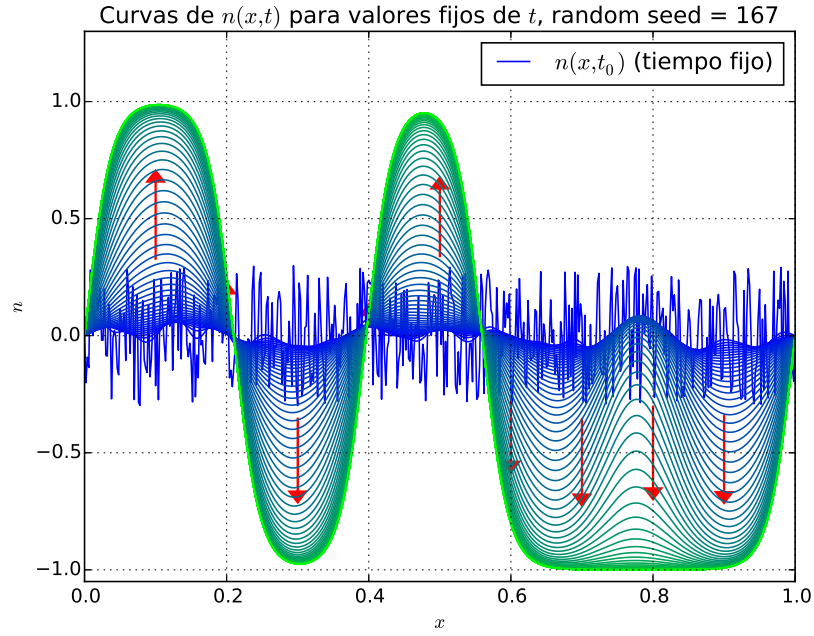


Figura 2: Soluciones para diferentes condiciones iniciales a ecuación de Newell-Whitehead-Segel, para  $\mu = 1,5$ ,  $\gamma = 0,001$ . Las flechas rojas indican en qué dirección avanza el tiempo sobre el gráfico. El cambio de azul a verde en el color de las líneas también indica el avance temporal.

Debido a la alta densidad de líneas verdes hacia  $(x, n) = (1, 1)$ , se deduce que la solución ha llegado a un estado relativamente estable.

Se observa que la función se fue “desplazando hacia la derecha” al avanzar en el tiempo, separándose de  $n = 0$  y tendiendo hacia  $n = 1$ , mostrando alguna semejanza con el comportamiento de un pulso viajero.

Se observa también que se cumplen las condiciones de borde en todo momento, lo que permite verificar (en alguna medida) el buen funcionamiento del código implementado.

### 3.2. Ecuación de Newell-Whitehead-Segel

Los resultados de la integración de la ecuación NWS se muestran en la Figura 2. Las líneas azules y verdes están equiespaciadas en el tiempo (entre líneas consecutivas), y el cambio de color desde azul a verde indica el avance en el tiempo.

En primer momento, se observa que la solución elige ir hacia  $n = 1$  o bien a  $n = -1$  en casi todos los puntos. Esto confirma que  $n = 0$  es un punto inestable, y que  $n = \pm 1$  es estable.

Observando la Figura 2 en detalle, se aprecia una fase de “estabilización” (líneas azules) de  $n(x, t)$ , donde la curva pasa desde las condiciones iniciales aleatorias hacia una curva más suave. Vemos que, por tramos, si esta curva queda en promedio por sobre  $n = 0$ , entonces la solución después tiende hacia  $n = 1$ . Por otra parte, si en promedio  $n(x, t)$  se encuentra por debajo de  $n = 0$ , entonces la solución se estabiliza hacia  $n = -1$ . Esto se observa viendo la posición relativa promedio de las condiciones iniciales respecto de la recta  $n = 0$ .

Además, se observa que la rapidez aparente de convergencia (entendida como la “densidad” de líneas) hacia  $n = \pm 1$  está determinada por qué tan lejos de cero (y en qué dirección) se encontraba el promedio local de las condiciones iniciales, sobre cada intervalo de  $x$ . Dentro de las figuras disponibles, el ejemplo más claro es el intervalo en torno a  $x = 0,75$  del segundo gráfico (random seed = 347), donde en el instante inicial el promedio de  $n$  se encontraba decididamente sobre cero, por lo que se produjo una menor resistencia para la convergencia hacia 1.

Por otra parte, vemos que los intervalos en donde se produjo el cambio más repentino para  $n(x, t)$  (en términos de cuánto cambió la función en un punto entre dos curvas consecutivas) fue donde la solución convergió por sus intervalos vecinos al punto estable ( $n = \pm 1$ ), y luego estos “empujan” al tramo intermedio hacia el punto estable. Para que esta situación aparezca, debe ocurrir que hayan tres intervalos (en la proporcionalidad de tamaño adecuada) donde el promedio de  $n$  en la condición inicial vaya alternando el signo, así creando una “resistencia” (para el intervalo intermedio) a ir hacia el lado preferido por sus vecinos.

## 4. Conclusiones

Las ecuaciones de Fisher-KPP y Newell-Whitehead-Segel fueron resueltas exitosamente, donde se aprecia visualmente la convergencia de la función  $n(x, t)$  (con el crecimiento del tiempo) hacia una solución estable o cuasi-estable.

En lo que respecta a la solución de la ecuación FKPP, se apreció que la condición inicial se fue “desplazando” hacia la derecha (mostrando un comportamiento de onda viajera), aumentando los valores de  $n$  para cada  $x$  a medida que avanza el tiempo, haciendo que la solución pase desde su equilibrio inestable  $n = 0$  hacia su equilibrio estable  $n = 1$ . También se puede interpretar como que la condición de borde  $n(0, t) = 1$  “difunde población” (en la idea de que es el modelo de la densidad de la especie) hacia el resto del espacio, actuando como una fuente (de población).

Por otra parte, la solución a la ecuación NWS presentó un comportamiento más variado en relación a su forma. Esta mostró ser altamente sensible a las condiciones iniciales, puesto que una leve perturbación a 0 (producto de la aleatoriedad de las condiciones iniciales) en los promedios sobre los diferentes intervalos “implusa” a la función  $n(x, t)$  hacia  $n = \pm 1$ . El signo elegido en esta última expresión es determinado por el signo promedio dentro del intervalo a estudiar. Se requeriría de un estudio más extenso para determinar (numéricamente) el ancho mínimo necesario de un intervalo con promedio mayor/menor que cero para que  $n(x, t)$  pueda converger a  $\pm 1$  en ese intervalo.

Ambos comportamientos encontrados son esperables, ya que muestran la tendencia de los sistemas a ir hacia sus puntos de equilibrio estable. La forma en que se alcanza el estado estable puede descomponerse en dos comportamientos: la parte reactiva “impulsa” al sistema hacia las zonas de equilibrio estable, mientras que la parte difusiva comunica estos cambios hacia las regiones adyacentes, favoreciendo que  $n(x, t)$  elija un signo (NWS) de forma uniforme a través de los intervalos de  $x$ , o sencillamente a haciendo el sistema más homogéneo (FKPP) (que después de todo, es el comportamiento esperable en una ecuación de difusión).