Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

Informe Tarea 6

Nelson Soto Medina

Pregunta 1:

En esta pregunta se introduce la ecuación de reacción-difusión de Fisher-KPP en su versión 1D, que modela el comportamiento de una especie animal:

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

En donde $n = n(t, x)$ es la densidad de la especie.

Se pide resolver la ecuación utilizando Crank-Nicolson para la difusión y Euler explícito para la reacción, con $x \epsilon [0,1]$, $\gamma = 0.001$, $\mu = 1.5$ y con las condiciones de borde:

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

E integrar hasta al menos $t = 4$.
Para eso primero discretizamos la ecuación, quedando el lado izquierdo:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{n_j^{n+1} - n_j^n}{\epsilon}$$

Que se podría decir que es simplemente la definición de derivada temporal, con ϵ el paso temporal.
En el lado derecho, con Crank-Nicolson tenemos:

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

Y con Euler explícito:

$$n - n^2 = n_j^n \left(1 - n_j^n\right)$$

Quedando finalmente, utilizando el cambio de variable $r = \epsilon\gamma/2h^2$:

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

Todo el lado derecho es conocido (los valores de n son los actuales) por lo tanto se puede calcular. A su valor le llamaremos B.
Al lado izquierdo se encuentran coeficientes acompañando a los n^{n+1}, A^+, A^0 y A^-, igual a -r, (1+2r), -r, respectivamente (denominados así por su relación con j). A^+ es igual a A^- por lo que los llamaremos a ambos tan solo como A.

Con estos términos podemos calcular:

$$\alpha_k = -\frac{A_k}{A_k^o + A_k\,\alpha_{k-1}}$$

$$\beta_k = -\frac{b_k - A_k\,\beta_{k-1}}{A_k^o + A_k\,\alpha_{k-1}}$$

Términos que dependen de sus valores anteriores.

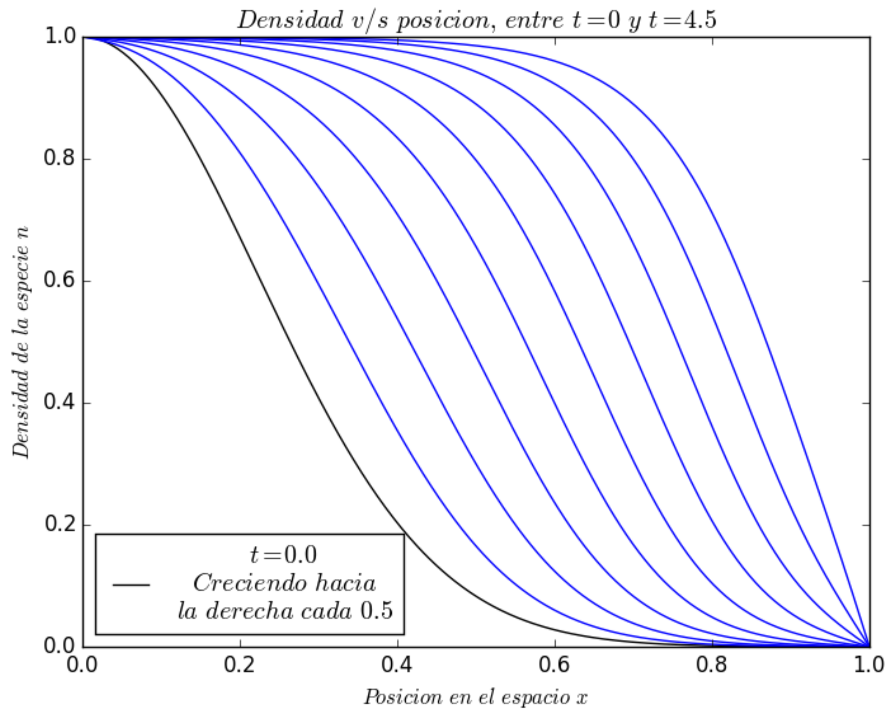
Finalmente la solución a la ecuación se obtiene iterando en reversa:

$$n_j^{n+1} = \alpha_j n_{j+1}^{n+1} + \beta_j$$

Donde usaremos las condiciones de borde para obtener el primer resultado.

En el programa se calcula cada solución de n con respecto al tiempo y se adhiere a una variable nTotal que contiene todas las soluciones dentro del rango.

Al graficar diez resultados, desde t=0 hasta t=4.5, a pasos de 0.5, se obtiene:



Para interpretar esto vayamos al primer caso de t=0. A medida que crece el espacio donde está la especie, se reduce la densidad de esta, la que alcanza su máximo en x=0 y llega a su mínimo cerca de x=1 (tal como las condiciones de borde). A medida que pasa el tiempo se ve que la densidad necesita de más espacio para disminuir y puede deberse al aumento de la población de la especie en ese tiempo. En el tiempo cercano a 5 la densidad se mantiene casi constante para luego bajar rápidamente cuando el espacio aumenta más allá de 0.6.

Entonces se puede concluir que al pasar el tiempo, la población aumenta, y como hay un límite de densidad (n=1) la especie tiende a repartirse en el espacio a medida que aumenta la población, aumentando por consecuencia la densidad en el territorio mas lejano (limitado también por x=1).

Pregunta 2:

Ahora se presenta un caso muy similar, pero con la ecuación reacción-difusión de Newell-Whitehead-Segel, que describe fenómenos de convección y combustión entre otros:

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

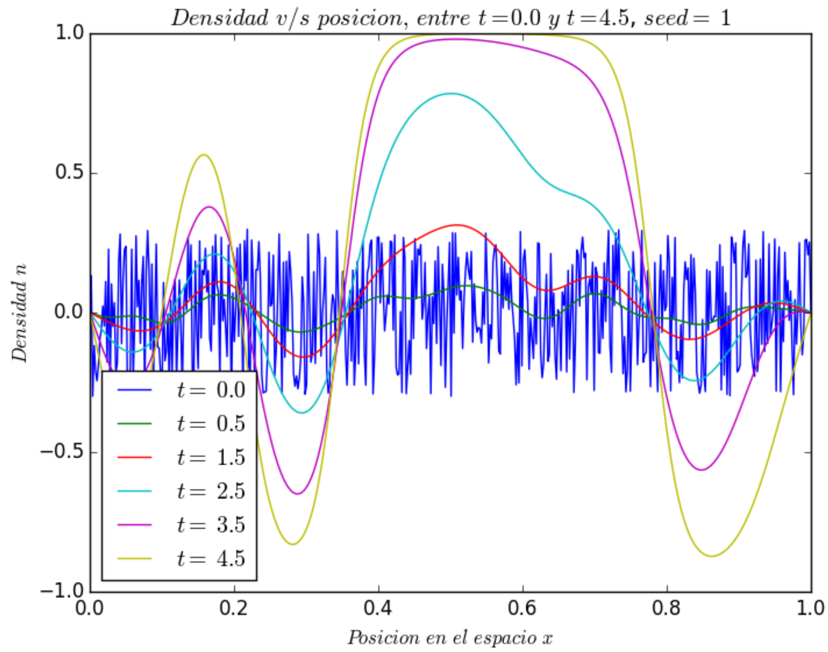
Se diferencia solo con el n^3.

Se utilizarán las mismas constantes, pero las condiciones de borde cambian a:

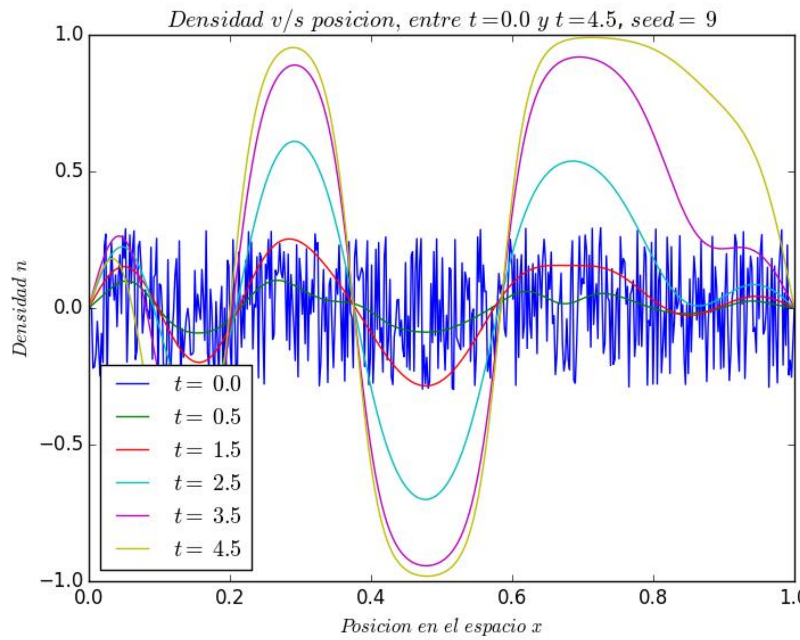
$$n(t,0) = 0$$
$$n(t,1) = 0$$
$$n(0,x) = \texttt{np.random.uniform(low=-0.3, high=0.3, size=Nx)}$$

Donde $n(0,x)$ es ahora un arreglo de números al azar entre -0.3 y 0.3, de tamaño Nx o el número de pasos. El arreglo depende de una semilla que hay que setear

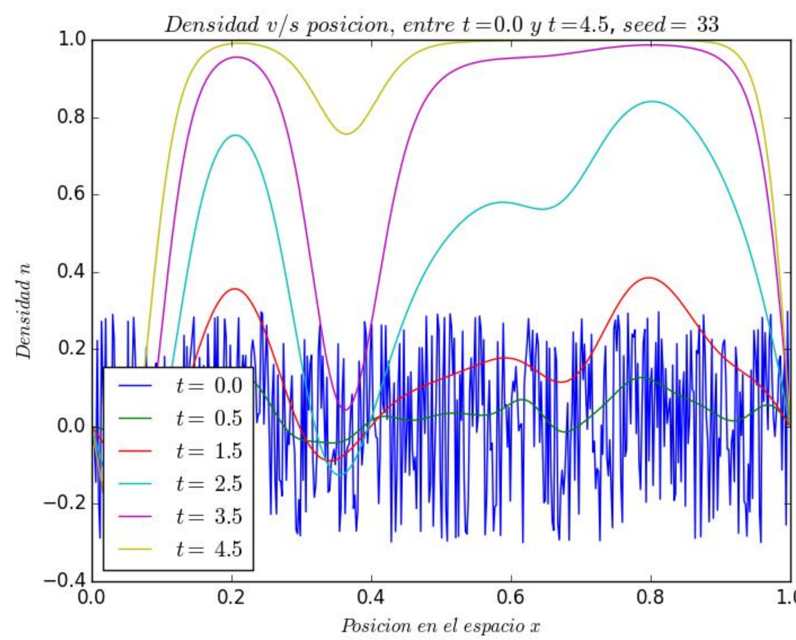
Aplicando estos pequeños cambios al programa se obtiene, para distintas semillas igual a 1, 9, 33 y 99 respectivamente:



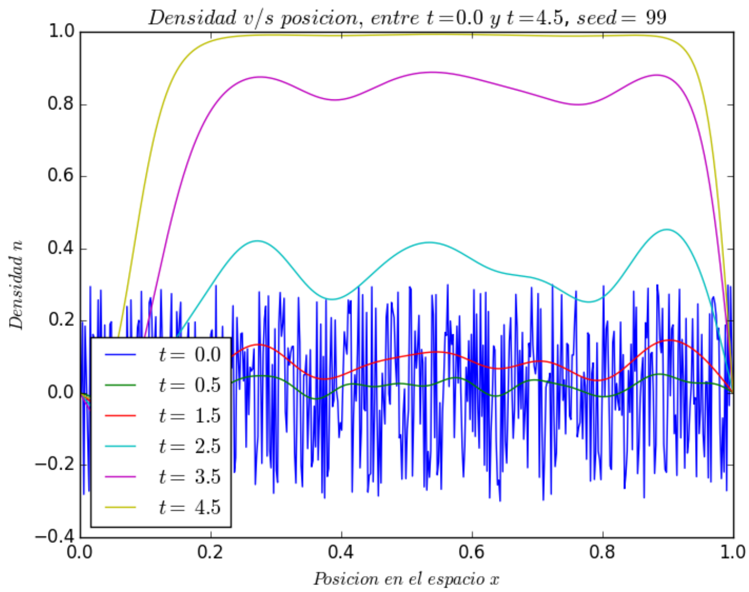
$Densidad\ v/s\ posicion,\ entre\ t = 0.0\ y\ t = 4.5,\ seed = 1$
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
$Densidad\ n$
$Posicion\ en\ el\ espacio\ x$
$t = 0.0$
$t = 0.5$
$t = 1.5$
$t = 2.5$
$t = 3.5$
$t = 4.5$



$Densidad\ v/s\ posicion,\ entre\ t=0.0\ y\ t=4.5,\ seed=\ 9$
Densidad n
Posicion en el espacio x
$t=\ 0.0$
$t=\ 0.5$
$t=\ 1.5$
$t=\ 2.5$
$t=\ 3.5$
$t=\ 4.5$
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0



$Densidad\ v/s\ posicion,\ entre\ t=0.0\ y\ t=4.5,\ seed=\ 33$
Densidad n
Posicion en el espacio x
$t=\ 0.0$
$t=\ 0.5$
$t=\ 1.5$
$t=\ 2.5$
$t=\ 3.5$
$t=\ 4.5$
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0



Se puede ver que con t=0 solo hay 'ruido' entre -0.3 y 0.3 producido por los números al azar entregados por la condición de borde. Luego de eso en t=0.5 se aprecia algo mucho más definido, pero que sigue la desviación general de los números al azar, es decir, que los el arreglo de números al azar le da su forma inicial para luego tomar forma y aumentar o disminuir (dependiendo si los números al azar se inclinan hacia lo positivo o lo negativo) hasta un máximo de 1 o -1.
En el gráfico con semilla = 9 se ve una distribución menos uniforme, y se debe a que las distribuciones locales de los números al azar son más fuertemente negativas en algunos lugares y positivas en otros, logrando esa expansión hacia ambos lados, a diferencia del gráfico con semilla = 99.
Se estima que con un tiempo bastante más largo la curva tienda a pegarse completamente a 1 o -1, dependiendo del promedio de los números al azar. Entonces la densidad tiene a esos valores a medida que pasa el tiempo.

Finalmente se concluye que la curva tiende a alejarse de 0 y terminar en -1 o 1, siendo 0 el punto inestable y por lo tanto -1 y 1 los estables. Además la posición en x sólo determina los valores iniciales al azar en la función.
Esto se podría interpretar como un fluido en reposo que bajo pequeñas perturbaciones se mueve por el espacio del tamaño de x.

Como tema aparte y para finalizar:
Además de los códigos para graficar, se agregó un tercer código para mostrar una animación que representa la evolución del sistema a lo largo del tiempo para ambas preguntas, el cual solo importa los datos necesarios de los otros.
Los 3 archivos python cumplieron con las reglas de PEP8 satisfactoriamente antes de agregar los comentarios.