

# Métodos matemáticos para la ciencia e Ingeniería: Resolución de EDPs tipo Reacción-Difusión

Fernanda PÉREZ (*rut: 18.769.232-6*)

3 de Noviembre, 2015

## 1 Ecuación de Fisher-KPP

### 1.1 Introducción

Se busca resolver e interpretar los resultados de la siguiente EDP:

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

Corresponde a una ecuación a derivadas parciales tipo reacción-difusión llamada Ecuación de Fisher-KPP. Ésta busca modelar el comportamiento de una especie animal.

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:

- $\mu n$  : Tendencia de la especie a crecer indefinidamente (suponiendo que los recursos sean infinitos).
- $-\mu n^2$  : Después de un tiempo, el aumento en densidad creará competencia por los recursos, lo que tenderá a disminuir la densidad.
- $\gamma \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$  : Tendencia de la especie a dispersarse para encontrar más recursos.

La ecuación tiene dos puntos de equilibrio  $n = 0$  y  $n = 1$ , pero sólo el segundo es estable. Las soluciones tienen un comportamiento que es una mezcla de difusión y un pulso viajero. Se busca resolver discretizando la parte de difusión mediante el método de Crank-Nicolson, y el método de Euler explícito para la parte de reacción, utilizando las siguientes constantes y condiciones:

- |                    |                            |
|--------------------|----------------------------|
| • $x \in [0, 1]$   | • $n(t, 0) = 1$            |
| • $\gamma = 0.001$ | • $n(t, 1) = 0$            |
| • $\mu = 1.5$      | • $n(0, x) = e^{-x^2/0.1}$ |

Se busca discretizar el espacio en aproximadamente 500 puntos, eligiendo un paso temporal de modo que la solución sea estable e integrar hasta al menos  $t = 4$ .

El problema utiliza unidades arbitrarias.

## 1.2 Procedimiento

La ecuación se puede ordenar de la siguiente forma:

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

Reconociendo en el lado derecho al primer término como el de difusión (lineal) y al segundo como el de reacción (no lineal). Se define la parte de reacción como  $R$ .

### 1.2.1 Reacción

Utilizando el método de Euler explícito:

$$R_j^n = \mu \cdot n_j^n (1 - n_j^n) \quad (2)$$

### 1.2.2 Difusión

Utilizando el método de Crank Nicolson tenemos que:

$$-rn_{j+1}^{n+1} + (1 + 2r)n_j^{n+1} - rn_{j-1}^{n+1} = rn_{j+1}^n + (1 - 2r)n_j^n + rn_{j-1}^n + dtR_j^n \quad (3)$$

Donde  $r = \gamma \frac{dt}{2 \cdot dx^2}$ . Es posible escribir lo anterior matricialmente como  $A\vec{n}^{n+1} = \vec{b}^n$ . Donde A tiene la forma tridiagonal mostrada en la ecuación 3.

Se utiliza la librería *scipy.sparse* para resolver este sistema. Ésta trabaja con matrices *poco densas*, es decir, matrices en que la mayoría de sus elementos resultan ser cero. Se forman las matrices del problema a partir de otras que cumplen con lo anterior.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -r & (1 + 2r) & -r & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & -r & (1 + 2r) & -r \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

Es posible obtener esta forma para A de la siguiente manera:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2r \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Por otro lado,  $\vec{b}$  resulta ser:

$$\vec{b} = M \cdot \vec{n}^n + \vec{R}^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ r & (1 - 2r) & r & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & r & (1 - 2r) & r \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \vec{n}^n + \vec{R}^n \quad (6)$$

Es posible obtener la matriz  $M$  de la Ecuación 5 de la siguiente manera:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2r \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \vdots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Una vez calculado el vector  $\vec{b}$  de la manera mostrada anteriormente, se setean sus valores extremos con los valores otorgados según las condiciones de borde. Notar que los extremos superior izquierdo e inferior derecho de  $A$  se dejaron con valor 1, para que las condiciones se cumplan. Se parte calculando  $\vec{b}$  con las condiciones iniciales del problema.

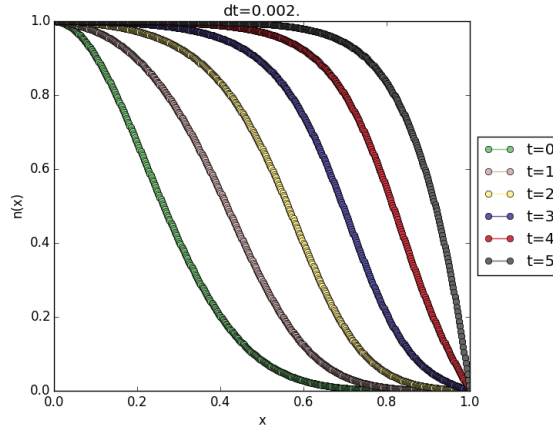
Finalmente, habiendo calculado  $A$  y  $\vec{b}^n$ , se resuelve el sistema, obteniendo  $\vec{n}^{n+1}$ .

Se utiliza  $dx = 0.002$  (dado del hecho de querer dar 500 pasos entre 0 y 1). Realizando un cambio de variables para  $x$  y  $t$ , de manera de obtener la Ecuación 8, es posible calcular  $dt$  máximo para el cual el método de Euler explícito es estable. Se escoge  $dt = 0.002$  que asegura estabilidad. Se grafica para un rango de  $t$  desde 0 hasta 5 (unidades arbitrarias).

$$\frac{\partial n}{\partial t'} = \frac{\partial^2 n}{\partial x'^2} + n(1 - n) \quad (8)$$

### 1.3 Resultados

Resolviendo el problema de la manera planteada en la sección Procedimiento, se obtiene la Figura 1 donde se decide graficar sólo para seis tiempos con el fin de obtener una mejor percepción de la evolución de la curva en el tiempo.



**Figura 1:** Gráfico  $n(x)$  vs  $x$ , donde  $n(x)$  corresponde a la densidad de la especie en función de la posición. Se muestra el estado de la curva en seis tiempos distintos equiespaciados en una unidad de tiempo.

## 1.4 Conclusiones

Se obtiene exitosamente la solución al problema.

Se aprecia en la Figura 1 un desplazamiento lateral de la curva en el tiempo, tal como lo hace un pulso viajero. En este movimiento, la curva se va acercando a una solución estable ( $n=1$ ). La especie invade el espacio, en busca de la supervivencia.

## 2 Ecuación de Newell-Whitehead-Segel

### 2.1 Introducción

Se busca resolver e interpretar los resultados de la siguiente EDP:

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

Corresponde a una ecuación a derivadas parciales tipo reacción-difusión llamada Ecuación de Newell-Whitehead-Segel. Ésta describe fenómenos de convección y combustión entre otros.

Esta vez la ecuación tiene 3 puntos de equilibrio:  $n = 0$  (inestable) y  $n = \pm 1$  (estables). Se pide explicar en argumentos simples por qué son estables.

Se utilizan las mismas constantes que en la pregunta anterior, pero con las siguientes condiciones de borde:

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

El problema utiliza unidades arbitrarias.

### 2.2 Procedimiento

Se escogen las semillas *18769* y *1876* para `np.random.uniform()`.

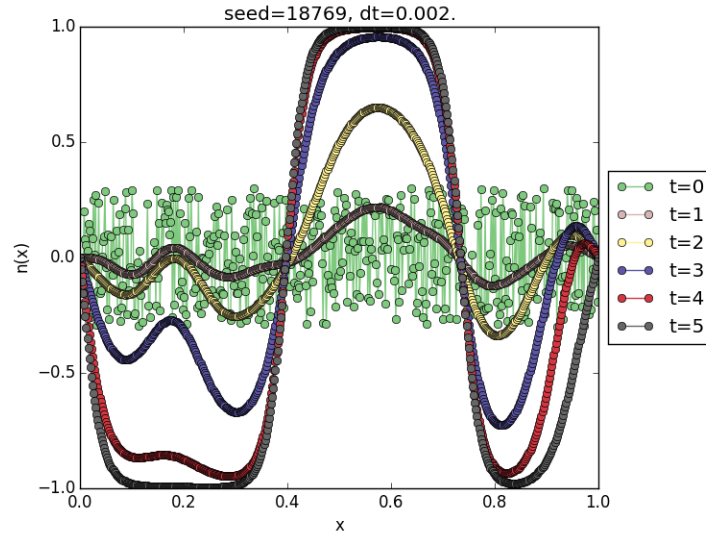
Se realiza un procedimiento análogo al visto en el problema anterior, cambiando las condiciones iniciales y de borde, y con las componentes de  $\vec{R}$  modificadas:

$$R_j^n = \mu \cdot n_j^n (1 - (n_j^n)^2)$$

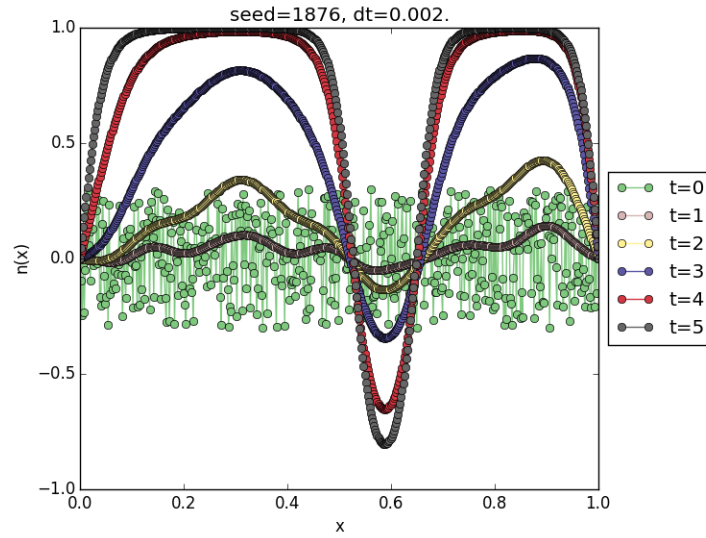
Se escoge  $dt = 0.01$  y se grafica para un rango de  $t$  desde 0 hasta 5 (unidades arbitrarias).

### 2.3 Resultados

Resolviendo el problema de la manera planteada anteriormente, se obtiene la Figura 2 y la Figura 3, donde se decide graficar sólo para seis tiempos, con el fin de obtener una mejor percepción de la evolución de la curva en el tiempo.



**Figura 2:** Gráfico  $n(x)$  vs  $x$ . Se muestra el estado de la curva en seis tiempos distintos equiespaciados en una unidad de tiempo. Se utiliza como semilla (seed) 18769, y  $dt = 0.01$ .



**Figura 3:** Gráfico  $n(x)$  vs  $x$ . Se muestra el estado de la curva en seis tiempos distintos equiespaciados en una unidad de tiempo. Se utiliza como semilla (seed) 1876, y  $dt = 0.01$ .

## 2.4 Conclusiones

Se obtiene exitosamente la solución al problema.

Tanto en la Figura 2 como en la Figura 3 se observa cómo la situación *random* de un inicio (condiciones iniciales) se ordena en una curva continua que con el tiempo va buscando llegar a los puntos de equilibrios estables ( $n = 1$ ,  $n = -1$ ). Podemos ver que los dos puntos anteriores son efectivamente puntos de equilibrio, ya que en ellos se anula la parte de reacción obteniéndose un comportamiento puramente difusivo, y estables ya que es posible apreciar en las figuras Figura 2 y Figura 3 que actúan como atractores.

Observando las dos figuras anteriormente mencionadas, es posible apreciar una fuerte dependencia de la solución con respecto a las condiciones iniciales.

Las gráficas obtenidas obedecen a lo esperado teóricamente.