

Informe de Métodos Numéricos

Tarea 6: EDP's Parabólicas o de Difusión

Leonardo Leiva

1. Resumen

2. Introducción: Marco Teórico

En este informe se presentará la resolución de una ecuación en derivadas parciales (EDP) del tipo parabólica o de difusión. Esta corresponde a un tipo de EDP que describe fluctuaciones de densidad de un material que se difunde^[2]. Los ejemplos clásicos de este tipo de ecuación son la ecuación del calor y la ecuación de Schrödinger. En este caso se estudiarán dos ecuaciones que tienen un comportamiento difusivo y otro de reacción: La ecuación de Fisher-KPP y la ecuación de Newell-Whitehead-Segel.

2.1. Sistemas de reacción-difusión

Ambas ecuaciones mencionadas se tratan de sistemas de reacción-difusión. Este tipo de sistemas describen como una o mas sustancias distribuidas en el espacio cambian bajo el efecto de dos procesos: reacciones locales (químicas cuando se trata de sustancias en las que las sustancias se transforman las unas en las otras), y difusión, que provoca que las sustancias se expandan en el espacio^[3].

Estos sistemas modelan diversos procesos tanto químicos como dinámicos (no químicos). En general, se representan bajo la ecuación (para el caso de 1 dimensión espacial):

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(B(t, x, F)\frac{\partial F}{\partial x}) = S(t, x, F) \quad (1)$$

Donde $F = F(x, t)$ es la concentración de la sustancia en el espacio y el tiempo.

Las soluciones de este tipo de ecuaciones tienen varios comportamientos posibles, entre los cuales están ondas viajeras, fenómenos de tipo onda, patrones auto-organizados como bandas, hexágonos o solitones disipativos.

2.2. Ecuación de Fisher-KPP

Este sistema será resuelto en la primera parte de la tarea. Corresponde a la modelación del comportamiento de de una especie animal.

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

Donde $n(x, t)$ es la densidad de población de la especie en el espacio y el tiempo. El primer término del lado derecho corresponde a la tendencia de la especie a encontrar más recursos, el segundo (lineal) es la tendencia a crecer indefinidamente, suponiendo que tienen los recursos para hacerlo, y el último representa la competencia por los recursos, que disminuirá la densidad de población.

Tiene dos puntos de equilibrio: $n = 0$ inestable; y $n = 1$ estable. La solución se comporta como una mezcla de difusión y un pulso viajero.

Para su resolución se usará una discretización para el método de Crank-Nicolson para la parte de difusión y de Euler explícito para la parte de reacción.

2.3. Ecuación de Newell-Whitehead-Segel

Esta ecuación será resuelta en la segunda parte de la tarea. Describe fenómenos de convección y combustión, entre otros.

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

En este caso, se tienen tres puntos de equilibrio: $n = 0$, inestable; $n = 1$ y $n = -1$, ambos estables.

2.4. Método de Crank-Nicolson

Este método se utiliza para resolver una ecuación del tipo

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (4)$$

con condiciones de borde rígidas: $n(t, 0) = n_{izq}$, $n(t, 1) = n_{der}$ y $n(0, x) = g(x)$ (con $g(0) = n_{izq}$ y $g(1) = n_{der}$).

Discretizando la ecuación se tiene:

$$\frac{T_k^{n+1} - T_k^n}{\epsilon} = \frac{1}{2} \left[\frac{T_{k+1}^{n+1} - 2T_k^{n+1} + T_{k-1}^{n+1}}{h^2} \right] + \left[\frac{T_{k+1}^n - 2T_k^n + T_{k-1}^n}{h^2} \right] \quad (5)$$

En esta ecuación se busca obtener los términos con $n + 1$, por lo que, reacomodando los términos se obtiene:

$$A_{k+1}^- \phi_{k-1} + A_k^0 \phi_k + A_{k-1}^+ \phi_{k+1} = b_k \quad (6)$$

Donde $\phi_k = T_k^{n+1}$, $A_k^- = -r$, $A_k^0 = 1 + 2r$, $A_k^+ = -r$ y

$$b_k = rT_{k-1}^n + (1 - 2r)T_k^n + rT_{k+1}^n \quad (7)$$

Lo cual corresponde a resolver un problema de la forma:

$$M\vec{\phi} = \vec{b} \quad (8)$$

Donde M es una matriz tridiagonal. Esta ecuación tiene por solución la relacione de recurrencia:

$$\phi_{k+1} = \alpha_k \phi_k + \beta_k \quad (9)$$

Reemplazando (9) en (6):

$$\phi_k = \alpha_{k-1}\phi_{k-1} + \beta_{k-1} \quad (10)$$

$$\alpha_{k-1} = \frac{-A_k^-}{A_k^+ \alpha_k + A_k^0} \quad (11)$$

$$\beta_{k-1} = \frac{b_k - A_k^+ \beta_k}{A_k^+ \alpha_k + A_k^0} \quad (12)$$

Notar que esta ecuación de recurrencia se cumple para los puntos intermedios, ya que los extremos están dados por las condiciones iniciales.

3. Metodología

3.1. Método: Ecuación de Fisher-KPP

Se resuelve el problema presentado en la sección 2.2, ecuación (2). Se usan las condiciones de borde

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

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

$n(0, x) = e^{-x^2/0.1}$ Para la discretización del espacio se usan 500 puntos. Para la discretización temporal se usan 3000 puntos, para lograr la estabilidad del sistema.

Los parámetros a usar son $\gamma = 0,001$ y $\mu = 1,5$.

Se utiliza un método muy similar al implementado en clases, calculando b , α y β para después hacer el avance temporal, solo que para el cálculo de b se agrega el término que representa la parte de reacción Newell-Whitehead-Segel de la ecuación. Se usa

$$\hat{b}_k = b_k + dt\mu(n_k - n_k^2) \quad (13)$$

Que representa la parte difusiva por Crank-Nicolson (b_k de la ecuación (7)) y el otro término que corresponde a la resolución con Euler explícito.

Se usó un $dt = dx = 0,002$ para asegurar estabilidad. El algoritmo usado para esta parte se encuentra en 'parte1.py'.

3.2. Método: Ecuación Newell-Whitehead-Segel

Se resuelve el problema presentado en la sección 2.3, ecuación (3). Se usan las condiciones de borde

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

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

$n(0, x) = \text{np.random.uniform(low}=-0.3, \text{ high}=0.3, \text{ size}=Nx)$ Para esta parte el código es similar a la parte anterior cambiando

$$\hat{b}_k = b_k + dt\mu(n_k - n_k^3) \quad (14)$$

Con las condiciones iniciales:

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

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

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

Para la tercera condición de borde se usan valores aleatorios, pero se sabe que en programación no existen como tal, por lo que se usa una semilla para fijar las condiciones iniciales ' $\text{np.random.seed}(\text{algún int}_i)$ '. Se debe tener precaución de poner la semilla al inicio del código para poder reproducir los resultados. Se cambia la semilla un par de veces para ver como cambian los resultados.

El algoritmo usado se encuentra en 'parte2.py'.

4. Análisis y Resultados

4.1. Parte 1: Fisher-KPP

En la figura 1 se observa estabilidad en $n = 1$, lo que se explica en las condiciones iniciales y la estabilidad de este punto, comparado con la inestabilidad de $n = 0$: Si la condición inicial fuera 0 para todo x , la solución se mantendría ahí, pero basta una pequeña variación, como la que da la condición inicial exponencial para que de a poco el sistema pierda el equilibrio cerca de la condición inicial de la derecha (en 0).

La solución se comporta como un pulso que se propaga desde izquierda a derecha, desde la condición inicial en 1 hasta la condición en 0. Dado que son condiciones fijas, nunca se logrará que n sea igual a 1 en todo el espacio, pero, para tiempos suficientemente grandes, se tendrá una vecindad suficientemente pequeña que no se encuentre en 1. Se estima que el costo computacional de esto es muy grande, porque para mantener el dt dentro de la condición de estabilidad se requeriría aumentar la cantidad de pasos. Basta proyectar el comportamiento que se observa con la predicción teórica tal y como se menciona anteriormente

4.2. Parte 2: Newell-Whitehead-Segel

Se observa en la figura 2 que con la semilla '123' se tienen equilibrios en 1 y -1 para tiempos más grandes, pero en el estado transiente se observan tendencias menos claras dependiendo de las condiciones iniciales aleatorias. La aleatoriedad determina el equilibrio a donde se dirige inicialmente, pero la vecindad de condiciones iniciales determinará la dirección final del punto de equilibrio. En la figura 4 se observa que para los puntos cercanos a la mitad en la condición inicial están más concentrados hacia arriba, lo cual desencadena en el equilibrio en 1. En la figura 3 se observa una tendencia inicial al medio a irse para el equilibrio en 1, pero la tendencia en la vecindad de irse a -1 anula el efecto y finalmente se estabiliza en -1.

Por otro lado, se observa que a partir de condiciones iniciales discontinuas, con suficiente tiempo, se obtiene un comportamiento cercano al continuo. No se puede decir que es continuo dado que la solución en sí se obtiene de una discretización.

Se destaca que los comportamientos entre cada semilla no siguen un patrón claro. Aparte de los resultados mostrados se probaron otras semillas, como dos valores cercanos entre ellos no se pueden sacar conclusiones claras sobre la dependencia entre ambos. Esto se debe

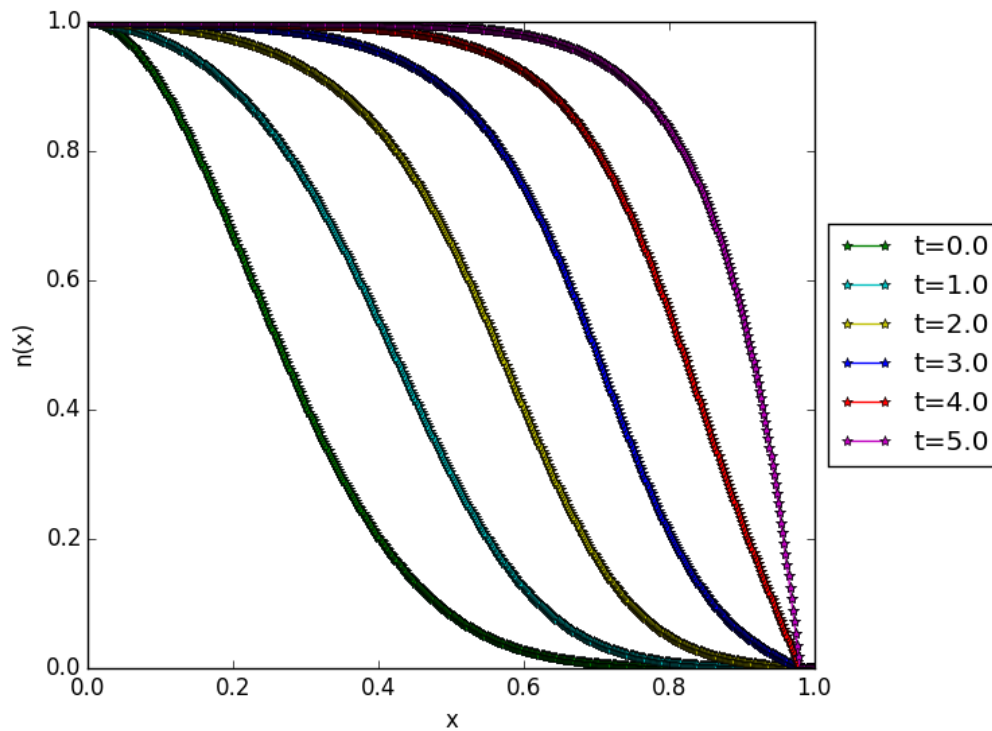


Figura 1: Se ilustra el comportamiento de la densidad de población en el espacio para el problema de la parte 1: Ecuación de Fisher-KPP

a que son condiciones aleatorias y no debería observarse dependencia por definición.

Sobre los puntos de equilibrio, analizando unicamente la contribución reactiva representada por el polinomio (tanto para la parte 1 como para la 2). Según esta idea, podemos observar que 0, 1 y -1 son soluciones del polinomio. Pero calculando las posiciones de equilibrio (con la primera derivada) se tiene que solo 1 y -1 cumplen la derivada igual a 0. De esta manera podemos concluir que estos últimos son equilibrios, mientras que 0 no lo es. Para la parte 1 se observa lo mismo, solo que, en ese caso -1 no cumple la condición para la derivada.

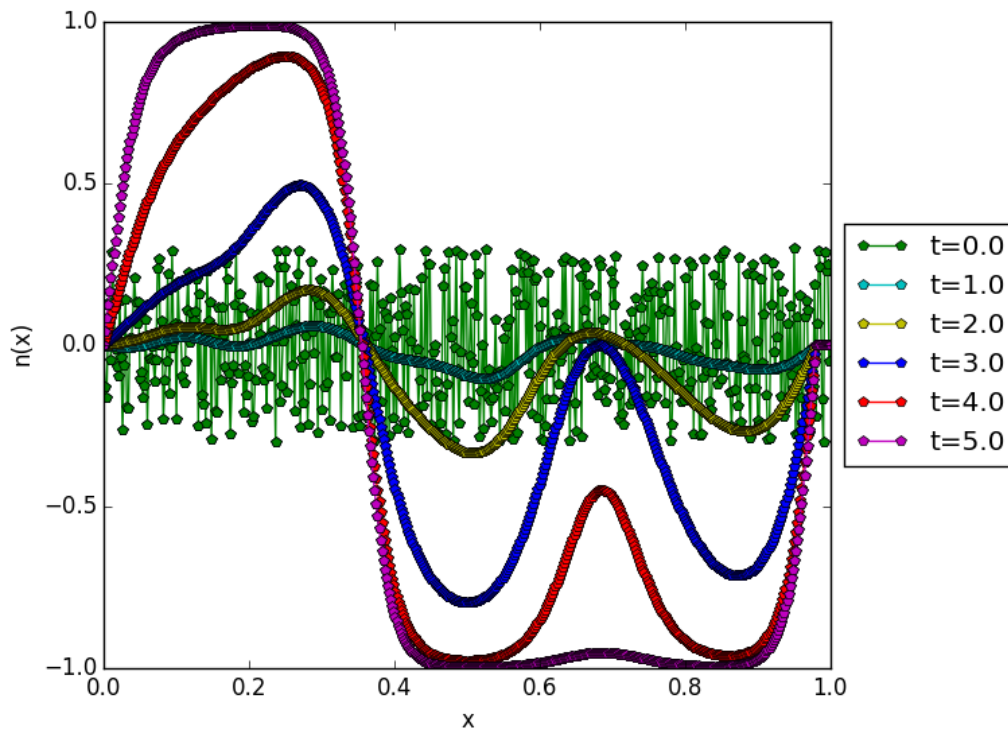


Figura 2: Comportamiento del sistema de la parte 2: Ecuación de Newell-Whitehead-Segel. Este caso muestra la semilla '123'.

5. Conclusión

En esta ocasión se implementó un sistema para solucionar una EDP parabólica. Se pueden observar claras diferencias en el método de implementación y en el tiempo de ejecución, considerando que para una EDP parabólica tardaba mucho tiempo en obtener la solución para un solo tiempo. Este caso es mucho más eficiente, a pesar de que solo estamos analizando una dimensión en el espacio.

Por otro lado, se puede concluir que el algoritmo es bueno en la resolución del problema dadas las referencias teóricas que se tienen: los puntos de equilibrio obtenidos, el comportamiento similar a un pulso en el primer caso, etc.

Podemos verificar y concluir por observación empírica que un sistema de obtención de números aleatorios no es tan aleatorio como se quiere, pero es lo que se espera. Por ello, hay que considerar varios casos antes de sacar conclusiones: por ejemplo, mirando solo la primera semilla usada, podría concluirse que siempre se tiene que para $x < 4$ el equilibrio es 1, mientras que para los otros casos, el equilibrio es -1, pero eso no es así, ya que al fijar la semilla, los resultados quedan determinados (según como se haya implementado el algoritmo 'random' usado). Luego, al comprobar otras semillas se observa que no depende en nada del

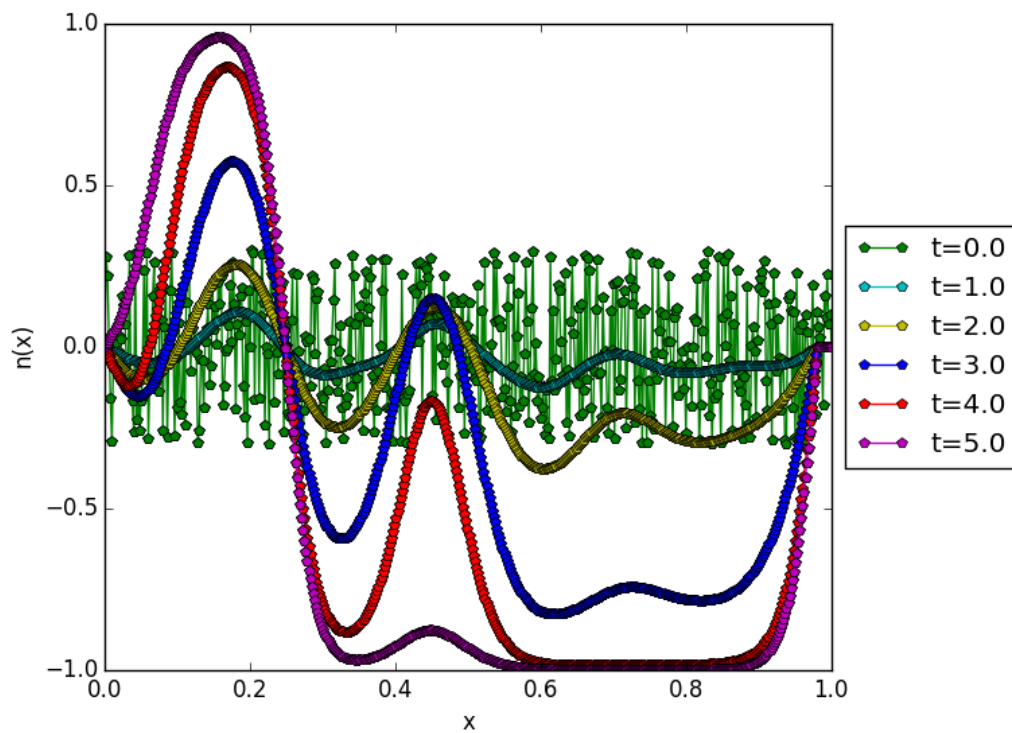


Figura 3: Comportamiento del sistema de la parte 2: Ecuación de Newell-Whitehead-Segel. Este caso muestra la semilla '8'.

valor de x , si no que depende de la condición inicial.

Referencias

- [1] Métodos Computacionales en Física - Patricio Cordero. Versión 14 de julio 2009.
- [2] Densidad del aire https://es.wikipedia.org/wiki/Ecuación_de_difusión
- [3] Densidad del aire https://es.wikipedia.org/wiki/Sistema_de_reacción-difusión

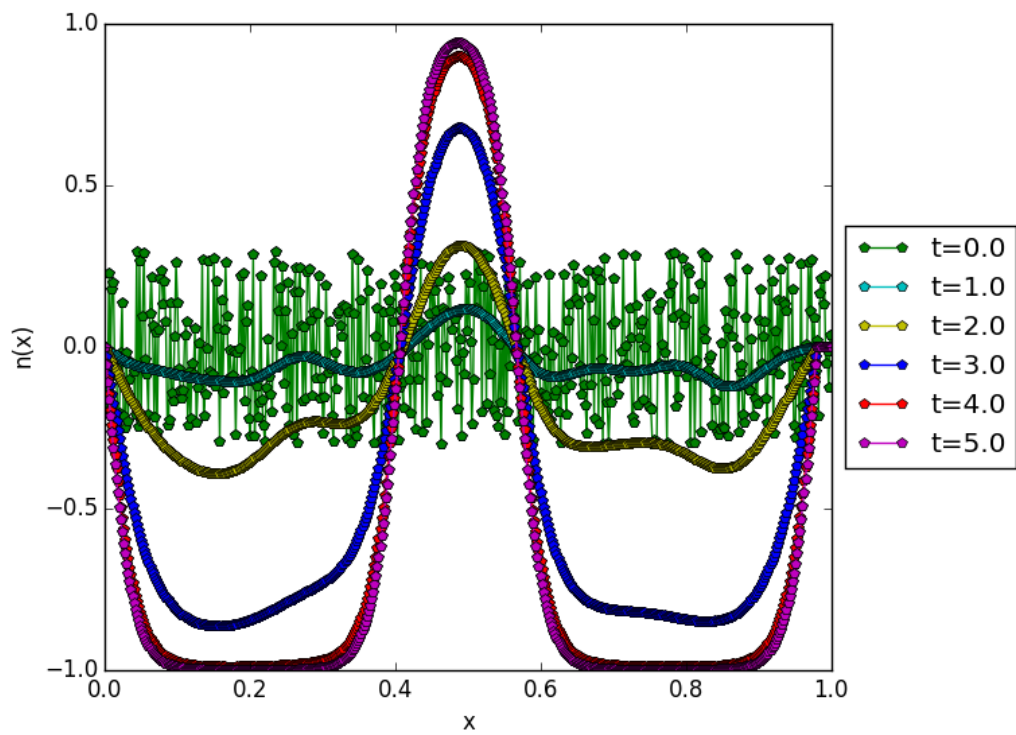


Figura 4: Comportamiento del sistema de la parte 2: Ecuación de Newell-Whitehead-Segel. Este caso muestra la semilla '888888888'.