

Modelación computacional de soluciones de onda viajera en una ecuación poblacional no lineal

On the computational modeling of traveling-wave solutions of a nonlinear population equation

Jorge Eduardo Macías Díaz¹

Macías Díaz, J.E., Modelación computacional de soluciones de onda viajera en una ecuación poblacional no lineal. *Investigación y Ciencia de la Universidad Autónoma de Aguascalientes*. 57, 27-31, 2013.

RESUMEN

Partiendo de un paradigma cuantitativo de difusión y reacción no lineal, se propone un método en diferencias finitas para aproximar soluciones mediante una perspectiva no estándar. La expresión del término de reacción del modelo sigue un régimen de raíz cuadrada, y la existencia de soluciones de onda viajera para dicha ecuación es un hecho demostrado recientemente en la literatura. Este texto presenta una discretización de dicho modelo que conserva la mayoría de las propiedades matemáticas de tales frentes, a saber: la positividad, la acotación y la monotonía temporal y espacial de las soluciones. Se presentan algunas simulaciones numéricas que ilustran la bondad del método.

ABSTRACT

Departing from a diffusive partial differential equation with nonlinear reaction, we developed a non-standard, finite-difference scheme to approximate its solutions. The reaction term of the

Palabras clave: Ecuación diferencial parcial parabólica, modelo de reacción-difusión, régimen de raíz cuadrada, método de diferencias finitas, positividad y acotación, monotonía.

Keywords: parabolic partial differential equation, reaction-diffusion model, square-root law, finite-difference method, positivity and boundedness, monotonicity.

Recibido: 21 de Noviembre de 2012, aceptado: 25 de Febrero de 2013

¹ Departamento de Matemáticas y Física, Centro de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma de Aguascalientes, jemacias@correo.uaa.mx.

mathematical model follows a square-root regime, and the existence of traveling-wave solutions for this equation is a fact recently established in the specialized literature. In the present manuscript, we propose a discretization which preserves most of the mathematical features of such solutions, namely, the positivity, the elevation mark, and the temporal and the spatial monotony. We provide here some illustrative simulations that evidence the preservation of such properties.

INTRODUCCIÓN

El problema de aproximar soluciones de onda viajera de ecuaciones diferenciales parciales, es un tema interesante de investigación, el cual ha sido atacado tanto analítica (Wang *et al.*, 1990) como numéricamente (Tomasiello, 2010). Desde el punto de vista analítico, existe una cantidad considerable de técnicas que arrojan soluciones exactas o aproximadas para este tipo de modelos. Por mencionar algunas, podemos citar el método de factorizaciones, la técnica de la primera integral, la transformación de Cole-Hopf, y los métodos de seno-coseno y la tangente hiperbólica.

Sin embargo, es importante advertir que todas las mencionadas arriba presentan limitaciones severas frente a algunos modelos alineales. Por ejemplo, dichos métodos son inoperantes cuando los términos no lineales no son funciones polinomiales de la función solución. Una muestra de esto es el modelo investigado por Mickens (2012), el cual es una ecuación difusiva con régimen de raíz cuadrada que extiende a la

ecuación poblacional de Fisher (Fisher, 1937; Kolmogorov *et al.*, 1937).

Usando métodos de aproximación (balance dominante, para ser exactos), Mickens demostró la existencia de soluciones de onda viajera para la ecuación:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u),$$

donde $f(u) = \sqrt{u} - u^p$ y $p = 1$; sin embargo, el argumento que empleó para demostrar la existencia de dichas soluciones es válido para el caso general $p > \frac{1}{2}$. Dichas soluciones son no negativas y acotadas superiormente por 1, además de ser temporal y espacialmente monótonas. Asintóticamente, estas soluciones tienden espacialmente a 1 y 0 en $-\infty$ e ∞ respectivamente, semejando a las soluciones de onda viajera de la ecuación clásica de Fisher (Polyanin y Zaitsev, 2004).

Con esta información a la mano y la dificultad de determinar analíticamente las soluciones de onda viajera de nuestro modelo, se diseñará un método numérico no lineal en diferencias finitas para aproximar dichas soluciones. Como se verá ulteriormente, la discretización propuesta presenta la ventaja de conservar las propiedades de positividad y acotación de aproximaciones. El método preserva la monotonía de las soluciones, de donde se seguirá que la técnica también conserva condicionalmente la conservación de la monotonía temporal y espacial. Todas estas propiedades son características de las soluciones de interés, por lo que el método es una herramienta idónea en la investigación de las soluciones de onda viajera de la ecuación propuesta por Mickens.

MATERIALES Y MÉTODOS

La técnica empleada para aproximar las soluciones de la ecuación diferencial de interés, estará basada en la metodología de diferencias finitas. Para tal efecto, se fijará un intervalo espacial $[a, b]$, y un período finito de tiempo T .

Tómese una partición uniforme $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ del intervalo espacial, con norma $\Delta x = (b - a)/N$, y fíjese una partición uniforme $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_M = T$, con tamaño

de paso $\Delta t = T/M$. Sea u_n^m una aproximación al valor exacto de la solución en el punto $u = u(x_n, t_m)$.

El método iterativo para aproximar las soluciones del modelo bajo estudio está dado recursivamente por

$$\delta_t u_n^m = \delta_x^{(2)} u_n^m + f(u_n^{m+1}),$$

donde δ_t es la aproximación adelantada de orden 1 de la primera derivada parcial en el tiempo, y $\delta_x^{(2)}$ es la aproximación en diferencias centradas de orden 2, de la segunda derivada parcial en el espacio (Macías Díaz *et al.*, 2011; Macías Díaz, 2012). Es fácil ver que el método se puede expresar como $H_n^m(u_n^{m+1}) = 0$, donde $H_n^m(u) = \Delta t u^p + u - \Delta t \sqrt{u} - c_n^m$ y $c_n^m = R u_{n+1}^m + (1 - 2R)u_n^m + R u_{n-1}^m$. Además, se define $R = \Delta t / (\Delta x)^2$.

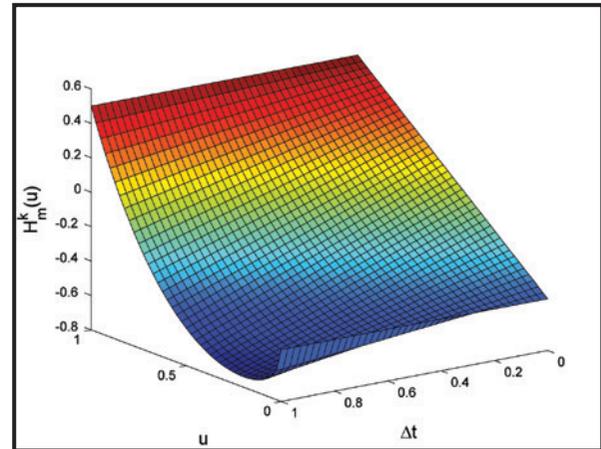


Figura 1. Gráfica de la función H_n^m versus u y Δt , fijando $C_n^m = \frac{1}{2}$ y $p = 3$. La gráfica ilustra la existencia, bajo cualquier instancia, de una única raíz en $[0, 1]$ para dichas funciones.

RESULTADOS

De este punto en adelante, supondremos que $R < \frac{1}{2}$. Se observa que cada función H_n^m es continua en $[0, 1]$, es diferenciable en $[0, 1]$, y satisface $H_n^m(0) = -c_n^m \leq 0 \leq 1 - c_n^m = H_n^m(1)$, siempre que la solución aproximada al tiempo t_m esté acotada entre 0 y 1. El Teorema del Valor Intermedio garantiza entonces que la solución a tiempo t_{m+1} también estará acotada entre 0 y 1, de donde se establece la positividad y la acotación del método.

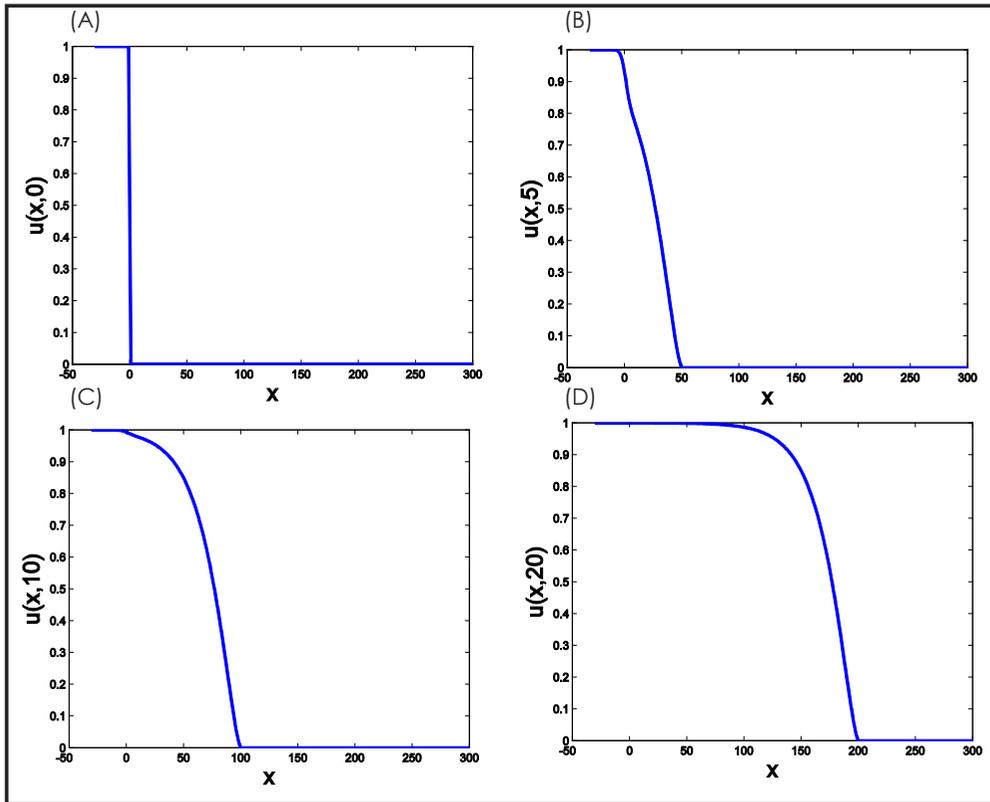


Figura 2. Soluciones numéricas obtenidas para $\Delta x = 1$, $\Delta t = 0.1$ y $p = 3$, en los instantes de tiempo (a) 0, (b) 5, (c) 10 y (d) 20. Los resultados ilustran la capacidad del método de conservar la monotonía espacial y temporal, así como la acotación de soluciones entre 0 y 1.

Por otra parte, no se pierda de vista que la derivada de $H_n^m(u)$ es cero en $u \in (0,1)$ sí y sólo si la identidad $2pt\Delta t v^{2p-1} + 2v - \Delta t = 0$ se satisface en dicho intervalo, siendo $v = \sqrt{u}$. Es fácil ver entonces que existe un único $u^* \in (0,1)$ para el cual la derivada de H_n^m se anula, y que dicho número representa un mínimo relativo de H_n^m . En consecuencia, si la aproximación inicial del método propuesto es acotada entre 0 y 1, entonces existe una única solución para nuestra técnica de diferencias finitas, la cual es acotada entre 0 y 1 en todas las iteraciones. Por comodidad, la figura 1 muestra la gráfica de las funciones H_n^m para $c_n^m = \frac{1}{2}$ y $p = 3$.

Para establecer la propiedad de conservación de monotonía, se supone que $u_{n+1}^m \leq v_{n+1}^m$, $u_n^m \leq v_n^m$ y $u_{n-1}^m \leq v_{n-1}^m$, y sea $d_n^m = Rv_{n+1}^m + (1-2R)v_n^m + Rv_{n-1}^m$. Se define la función:

$$J_n^m(u) = \Delta t u^p + u - \Delta t \sqrt{u - d_n^m}$$

en $[0,1]$. Entonces, v_n^m es la única solución de la ecuación $J_n^m(v) = 0$ en el intervalo $[0,1]$. Además, la desigualdad $J_n^m \leq H_n^m$ se satisface en $[0,1]$, de

donde se establece fácilmente que $u_n^{m+1} \leq v_n^{m+1}$, como se deseaba.

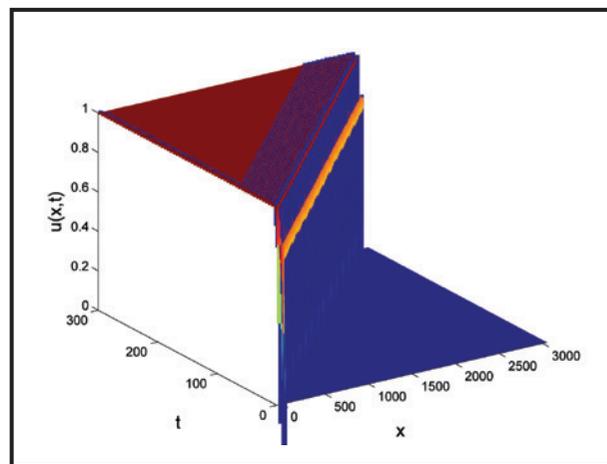


Figura 3. Gráfica de la solución numérica versus x y t , usando $\Delta x = 1$, $\Delta t = 0.1$ y $p = 3$. Los resultados ilustran la capacidad del método de conservar la monotonía espacial y temporal, así como la acotación de soluciones entre 0 y 1.

Como consecuencia de la conservación de la monotonía, el método también conserva la monotonía espacial de perfiles iniciales monótonos. Además, es fácil encontrar condiciones bajo las cuales se conserve la monotonía temporal de las aproximaciones. De tal manera, el método propuesto conserva muchas de las características esenciales de las soluciones de onda viajera del modelo bajo estudio y mejora, por mucho, algunos esfuerzos previos del autor en la dirección de discretizaciones lineales (Macías Díaz *et al.*, 2011; Macías Díaz, 2012), las cuales hacen uso de la teoría de M-matrices (Fujimoto y Ranade, 2004).

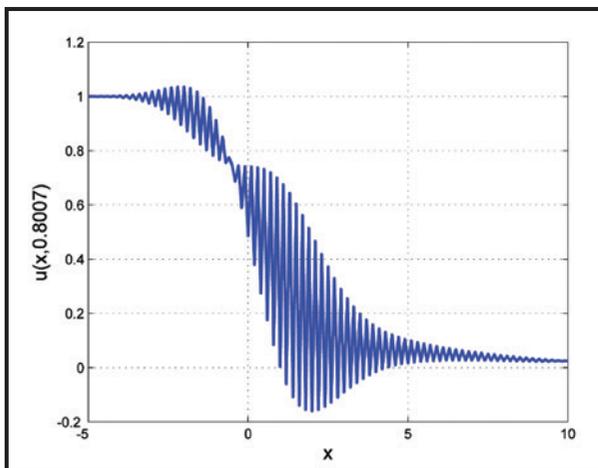


Figura 4. Solución numérica obtenida para $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0051$ y $p = 3$, al instante de tiempo 0.8007. La gráfica ilustra la necesidad de la condición $R < \frac{1}{2}$ para garantizar la acotación y la positividad de soluciones.

DISCUSIÓN

Es de notar que el método no es exacto en general, en el caso en el que $p = 1$; sin embargo, la técnica puede ser expresada de manera explícita usando el cambio de variable $v = \sqrt{u}$ y tomando la raíz positiva de la cuadrática resultante. En general, es necesario implementar el método de Newton-Raphson para aproximar la solución numéricamente. Las propiedades de convergencia y estabilidad del método no se presentan en este manuscrito, en vista del perfil divulgativo de la publicación.

Con el fin de ilustrar la validez de nuestros resultados, se proponen algunas simulaciones para un perfil inicial del tipo Heaviside con

centro en el origen. Se imponen condiciones homogéneas de Neumann en la frontera.

Se fija $\Delta x = 1$, $\Delta t = 0.1$ y $p = 3$. Las figuras 2 y 3 presentan las soluciones aproximadas por nuestro método en varios instantes de tiempo. Los resultados muestran la capacidad de nuestra técnica de conservar la acotación de las soluciones entre 0 y 1. Finalmente, se toma $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.0051$ y $p = 3$, de manera tal que $R > \frac{1}{2}$. La figura 4 muestra la solución aproximada del tiempo 0.8007. La gráfica sugiere que la condición $R < \frac{1}{2}$ no sólo es necesaria para garantizar la acotación de las soluciones numéricas entre 0 y 1, sino que también es necesaria para garantizar la estabilidad del método. Este es un problema abierto para un trabajo futuro.

CONCLUSIONES

En este trabajo se propuso un método de diferencias finitas para aproximar las soluciones de una ecuación diferencial difusiva con régimen de reacción de raíz cuadrada. El modelo matemático es una extensión de la famosa ecuación de Fisher de física nuclear y de dinámica poblacional, para el cual existen soluciones de onda viajera acotadas entre 0 y 1. Estas son espacial y temporalmente monótonas, y convergen asintóticamente a 0 y 1 en cualquier instante de tiempo. El método presentado en este trabajo, es capaz de conservar la positividad y la acotación de perfiles iniciales, así como la monotonía temporal y espacial de las aproximaciones.

Los resultados más relevantes de este texto proporcionan condiciones para la existencia y unicidad de aproximaciones acotadas entre 0 y 1. El método propuesto es una discretización en dos pasos, no estándar y no lineal, y su implementación computacional requiere del método de Newton-Raphson. Se proporcionaron simulaciones numéricas para ilustrar el hecho que la técnica conserva las propiedades mencionadas más arriba.

Es importante mencionar que aún quedan varios problemas de interés tras la publicación del presente trabajo. Los análisis de estabilidad y convergencia, así como la discusión a detalle de la propagación del error en casos específicos, son probablemente los problemas de carácter

teórico que más acaparan la atención. Desde un punto de vista pragmático, el empleo del método en la determinación de características inherentes a la solución de nuestro modelo, es un tema abierto de investigación. En particular,

la determinación de la dependencia de la velocidad de propagación de ondas con respecto al parámetro p , es uno de los temas de interés.

LITERATURA CITADA

- FISHER, R.A., The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Eugenics*, 7: 355-369, 1937.
- FUJIMOTO, T.; RANADE, R.R., Two characterizations of inverse-positive matrices: The Hawkins-Simon condition and the Le Chatelier-Braun principle. *Electronic Journal of Linear Algebra*, 11: 59-65, 2004.
- KOLMOGOROV, A.; PETROVSKY, I.; PISCOUNOV, N., Étude de l'équations de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application a un problème biologique. *Bulletin of the University of Moskou, International Series*, 1A: 1-25, 1937.
- MACÍAS DÍAZ, J.E., On a boundedness-preserving semi-linear discretization of a two-dimensional nonlinear diffusion-reaction model. *International Journal of Computer Mathematics*, 89: 1678-1688, 2012.
- MACÍAS DÍAZ, J.E.; PURI, A., On some explicit non-standard methods to approximate nonnegative solutions of a weakly hyperbolic equation with logistic nonlinearity. *International Journal of Computer Mathematics*, 88: 3308-3323, 2011.
- MACÍAS DÍAZ, J.E.; RUIZ RAMÍREZ, J.; VILLA, J., The numerical solution of a generalized Burgers-Huxley equation through a conditionally bounded and symmetry-preserving method. *Computer Mathematics with Applications*, 61: 3330-3342, 2011.
- MICKENS, R., Wave front behavior of traveling wave solutions for a PDE having square-root dynamics. *Mathematics and Computers in Simulation*, 82: 1271-1277, 2012.
- POLYANIN, A.D.; ZAITSEV, V.F., *Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations*. Estados Unidos de América: Chapman and Hall, 2004.
- TOMASIELLO, S., Numerical solutions of the Burgers-Huxley equation by the IDQ method. *International Journal of Computer Mathematics*, 87: 129-140, 2010.
- WANG, X.Y.; ZHU, Z.S.; LU, Y.K., Solitary wave solutions of the generalized Burgers-Huxley equation. *Journal of Physics A.*, 23: 57-79, 1990.