

**Sociedad Chilena de
Mecánica Computacional**

Cuadernos de Mecánica Computacional

Vol. 20 n°1, 2023

“SOLUCIÓN ANALÍTICA DE LA ECUACIÓN CONVECCIÓN- DIFUSIÓN-REACCIÓN FRACCIONAL CON EL MÉTODO DE ANÁLISIS DE HOMOTOPÍA”

Jorge Otto P.⁺, Emilio Cariaga L.^{*}

^{*} Departamento de Ciencias Matemáticas y Físicas, Universidad Católica de Temuco
R. Ortega 02950 – Temuco – CHILE
e-mail : ecariaga@uct.cl

⁺ Facultad de Ingeniería - Universidad de Playa Ancha
L. Carvallo 270 – Valparaíso – CHILE
e-mail : jorge.otto@upla.cl

RESUMEN

En este trabajo se estudia la aplicación del método de análisis de homotopía (HAM) a la resolución analítica de una ecuación diferencial parcial del tipo difusión-convección-reacción con derivada temporal de orden fraccionario. Específicamente, se considera la derivada fraccional conforme, que a diferencia de las derivadas fraccionarias del tipo Riemann-Liouville o Caputo, hereda las propiedades usuales de la derivada entera. Luego, se implementan computacionalmente dos tipos de modelos fraccionarios con el fin de analizar el comportamiento de las soluciones analíticas HAM, y esto, para distintos órdenes fraccionarios. Finalmente, las soluciones HAM son validadas comparando contra otra solución analítica basada en la transformada de Laplace.

1. INTRODUCCIÓN

El “cálculo fraccional” permite dar sentido matemático a expresiones del tipo

$$\frac{d^{\frac{1}{3}}}{dx^{\frac{1}{3}}}f(x) \text{ o } \frac{\partial^{\frac{1}{2}}}{\partial t^{\frac{1}{2}}}f(x, t),$$

es decir, a derivadas de orden fraccional, las cuales son de interés físico y matemático, pues existen fenómenos que son mejor modelados con el cálculo fraccional que con el cálculo tradicional entero. Para la “derivada fraccional” se han propuesto varias definiciones matemáticamente válidas, tales como, Caputo, Riemann-Liouville y Conforme, de las cuales la “Derivada Fraccional Conforme” ha demostrado heredar de mejor manera las propiedades usuales de la derivada entera [1,2]. Por otro lado, una “ecuación diferencial fraccional” es aquella que contiene al menos una derivada fraccional.

Para resolver este tipo de ecuaciones se han propuesto una amplia gama de métodos numéricos y analíticos [2]. En este trabajo nos focalizamos en el método analítico HAM (acrónimo de: *homotopy analysis method*) que ha demostrado ser muy eficiente para resolver diversos tipos de ecuaciones diferenciales (ordinaria o parcial, derivada entera o fraccional, lineal o no lineal, etc...), especialmente aquellas que presentan fuertes no linealidades [3]. El método HAM propone una solución en serie infinita de funciones, en donde cada función individual se calcula resolviendo una relación iterativa entre dos elementos consecutivos de la serie, lo cual involucra sólo derivadas e integrales del cálculo elemental. Esta relación iterativa se define a partir de una homotopía (aplicación que deforma continuamente una aproximación inicial de la ecuación a resolver en su solución exacta) construida convenientemente.

El objetivo de este trabajo es evaluar la aplicabilidad del método HAM a una ecuación diferencial fraccional lineal del tipo convección-difusión-reacción, en donde, la única derivada fraccional presente es la derivada parcial respecto del tiempo [1,4].

La distribución del artículo es la siguiente. En la sección 2 se define la derivada fraccional conforme y se presentan los dos modelos que serán resueltos con el método HAM. En la sección 3 se aplica el método HAM a ambos modelos. Finalmente, la sección 4 expone los resultados obtenidos.

2. EDP CDR FRACCIONAL

Existen varias definiciones de derivada fraccional, tales como, Caputo, Riemann-Liouville, o Conforme. En este artículo se utiliza la derivada fraccional conforme cuya definición y principales propiedades se presentan a continuación.

Definición de Derivada Fraccional Conforme (cf. [1]):

A.- Sea $\alpha \in (0, 1]$. Sea una f función real valuada bien definida sobre el intervalo $[0, +\infty)$. La derivada fraccional conforme de la función f , de orden α , se define como

$$T_\alpha(f)(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(t + \epsilon t^{1-\alpha}) - f(t)}{\epsilon}$$

para todo $t > 0$. Si este límite existe la función se dice α -diferenciable. Por otro lado, si $\lim_{t \rightarrow 0^+} T_\alpha(f)(t)$ existe, entonces, $T_\alpha(f)(0) = \lim_{t \rightarrow 0^+} T_\alpha(f)(t)$. Una notación alternativa para $T_\alpha(f)(t)$ está dada por $f^{(\alpha)}(t)$.

B.- Sea $\alpha \in (n, n + 1]$, $n = 1, 2, 3, \dots$ Sea una f función bien definida y derivable n -veces sobre el intervalo $(0, +\infty)$. Sea $\alpha \in (n, n + 1]$. La derivada fraccional conforme de la función f , de orden α , se define como

$$T_\alpha(f)(t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f^{(\lfloor \alpha \rfloor - 1)}(t + \epsilon t^{(\lfloor \alpha \rfloor - \alpha)}) - f^{(\lfloor \alpha \rfloor - 1)}(t)}{\epsilon}$$

para todo $t > 0$, y $\lfloor \alpha \rfloor$ denota a la *función techo* (entero más pequeño, que es mayor o igual a α).

Observación: note que si $\alpha = 1$ entonces $T_1(f)(t) = \frac{df}{dt}$, es decir, se trata de la derivada ordinaria de orden 1 usual.

Teorema (cf. [1]): Sea $\alpha \in (0,1]$. Sean f y g funciones con derivada entera para todo $t > 0$. Entonces la DFC posee las siguientes propiedades:

$$1.- T_\alpha(a \cdot f + b \cdot g) = a \cdot T_\alpha(f) + b \cdot T_\alpha(g), \text{ con } a, b \in \mathbb{R}.$$

$$2.- T_\alpha(t^\beta) = \beta \cdot t^{\beta-\alpha}, \text{ con } \beta \in \mathbb{R}.$$

$$3.- T_\alpha(fg) = f \cdot T_\alpha(g) + g \cdot T_\alpha(f)$$

$$4.- T_\alpha\left(\frac{f}{g}\right) = \frac{f \cdot T_\alpha(g) - g \cdot T_\alpha(f)}{g^2}$$

$$5.- \text{Si } f(t) = Cte \text{ es una función constante, entonces } T_\alpha(Cte) = 0.$$

$$6.- \text{Si } f \text{ posee derivada de orden 1, entonces } T_\alpha(f)(t) = t^{1-\alpha} \cdot \frac{df}{dt}.$$

EDP Fraccionales Resueltas:

En este informe se consideran dos ecuaciones en derivadas parciales de tipo fraccional. Se trata del clásico modelo de difusión-convección, con y sin término reactivo, pero en ambos casos con derivada fraccional conforme respecto del tiempo. Ambos modelos se presentan a continuación como Caso 1 y Caso 2, y serán resueltos con el método HAM en la sección 4.

Caso 1: para $\alpha \in]0,1]$, determine $C(x, t)$ tal que,

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_a \frac{\partial C}{\partial x} - u_a C \right)$$

para $x \in [0, L]$ y $t \geq 0$, sujeta a la condición inicial $C(x, 0) = c_\alpha \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right)$, para $x \in]0, L]$, y a las condiciones de frontera $C(0, t) = C(L, t) = 0$, para $t > 0$. En este informe se consideran en particular, $u_a = u_0(1 + ax)$, y $D_a = D_0(1 + ax)$, para $x \in]0, L]$, con u_0, D_0, a , constantes auxiliares.

Caso 2: para $\alpha \in]0,1]$, determine $C(x, t)$ tal que,

$$\frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_a \frac{\partial C}{\partial x} - u_a C \right) - \lambda(t)C$$

para $x \geq 0$ y $t \geq 0$, sujeta a la condición inicial $C(x, 0) = c_\alpha x e^{\gamma x}$, para $x > 0$, y a las condiciones de frontera $C(0, t) = 0$, $\lim_{x \rightarrow +\infty} C(x, t) = 0$, para $t > 0$. En este informe se considerará en particular, $\lambda(t) = \lambda_0(1 - \mu t)$, para $t \geq 0$.

3. MÉTODO DE ANÁLISIS DE HOMOTOPÍA

El método HAM (cf. [3]) corresponde a un método analítico diseñado especialmente para resolver ecuaciones diferenciales no lineales, pero no exclusivamente. El método HAM expresa la solución exacta (en sentido clásico) $C = C(x, t)$ como una serie de funciones

$$C(x, t) = \sum_{m=0}^{+\infty} C_m(x, t)$$

en donde, $C_m, m = 1, 2, 3 \dots$ se calculan con la fórmula iterativa

$$M[C_m(x, t) - g(m) \cdot C_{m-1}(x, t)] = \frac{h_0}{(m-1)!} \cdot \frac{\partial^{m-1} N[\psi(x, t; q)]}{\partial q^{m-1}} \Big|_{q=0},$$

siendo $M[\cdot]$ un operador lineal invertible, que se selecciona dependiendo de la estructura de la ecuación original, $N[\cdot]$ un operador que define la ecuación original $N[C] = 0$ cuya solución analítica se quiere calcular, h_0 parámetro numérico que permite garantizar la convergencia numérica de la serie de funciones, y g es una función tipo indicatriz definida como $g(m) = 0$, si $m \leq 1$, y $g(m) = 1$, si $m \geq 2$. Procedimentalmente, la función C_m se despeja de la identidad anterior aplicando el operador inverso $M^{-1}[\cdot]$ a ambos lados, y además la función C_{m-1} se supone ya calculada desde la iteración anterior. La aproximación inicial C_0 se postula conocida al inicio del proceso. Finalmente, la función $\psi(x, t; q)$, en la identidad anterior, es solución de la “ecuación de deformación de orden cero” (nomenclatura asignada por el método HAM):

$$(1 - q) \cdot M[\psi(x, t; q) - C_0(x, t)] = h_0 \cdot q \cdot N[\psi(x, t; q)]$$

siendo $q \in [0, 1]$, parámetro de homotopía (o de *incrustación*), el cual describe la propiedad esencial del método HAM (y que explica el uso del término homotopía): si $q = 0$ la solución de la ecuación anterior es $\psi(x, t; 0) = C_0(x, t)$, y si $q = 1$, su solución está dada por $\psi(x, t; 1) = C(x, t)$, esto es, se obtiene la solución de la ecuación original $N[C] = 0$. En la práctica, dependiendo de la exactitud requerida se selecciona $p = 0, 1, 2, 3, \dots$, tal que

$$C(x, t) \approx C_0(x, t) + C_1(x, t) + C_2(x, t) + \dots + C_p(x, t).$$

Por esta razón, y en realidad, el método HAM permite calcular una solución que en rigor sólo es pseudoanalítica. Sin embargo, en la práctica ha demostrado ser bastante útil y eficiente para resolver ecuaciones diferenciales fuertemente no lineales en variados contextos de modelación matemática.

4. RESULTADOS

En esta sección se informa la aplicación del método HAM a las EDP con derivada fraccional conforme descritas en los casos 1 y 2 de la sección 2.

4.1. Solución Analítica HAM Modelo Caso 1. En este caso: $M = \frac{\partial}{\partial t}$, $C_0 = c_a \sin(\frac{\pi x}{L})$, y

$$N[C] = \frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} - D_0(1 + ax) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - (aD_0 - u_0(1 + ax)) \frac{\partial C}{\partial x} + au_0 C.$$

Con los anteriores, y con $M^{-1}[w] = \int_0^t w(x, u) du$, la relación iterativa está dada por

$$C_m(x, t) = g(m)C_{m-1} + h_0 M^{-1}[N[C_{m-1}]]; m = 1, 2, 3, \dots$$

Por otro lado, los valores numéricos de los parámetros son: $L = 1.5[km]$, $c_a = 1 \left[\frac{mg}{L} \right]$, $u_0 = 0.001 \left[\frac{km}{año} \right]$, $D_0 = 0.01 \left[\frac{km^2}{año} \right]$, y $a = 0.03 \left[\frac{1}{km} \right]$. Respecto del parámetro de convergencia h_0 se observa, a partir de la figura 1, que efectivamente existe un intervalo $] - 1.7; 1.2[$ aproximado de horizontalidad de la curva $C_{tt}(0,1)$:

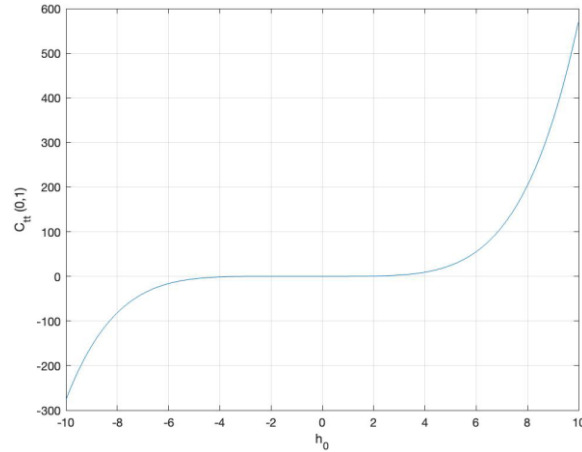


Figura 1. Curva de convergencia: $C_{tt}(0,1)$ vs. h_0 .

Sin embargo, es necesario evaluar en qué medida el intervalo de convergencia anterior se ve afectado si cambia el orden α de la derivada fraccional. Para responder esta pregunta se presenta la figura 2,

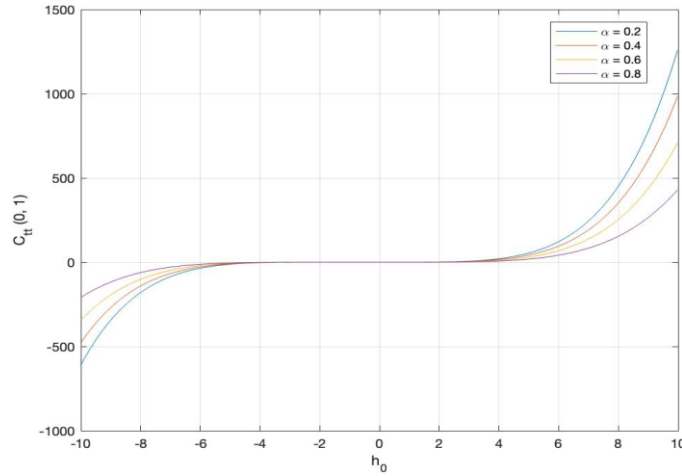


Figura 2. Curva de convergencia: $C_{tt}(0,1)$ vs. h_0 , con $\alpha = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$.

en donde, se observa con claridad la estabilidad del intervalo respecto del orden fraccional de la derivada temporal. Habiendo establecido la convergencia de la serie HAM se evalúa el impacto del orden fraccional de la derivada temporal sobre la solución analítica del caso 1. La figura 3 muestra los resultados obtenidos:

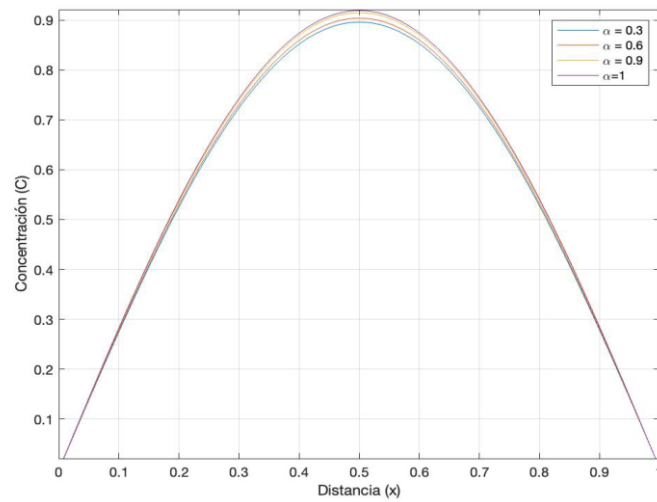


Figura 3. Curva solución: $C(x,1)$ vs. x , con $\alpha = 1.0, 0.9, 0.6, 0.3$.

Se finaliza el caso 1 con una evaluación del impacto del parámetro de difusión D_0 sobre la solución del modelo 1 con una derivada fraccional de orden $\alpha = 0.2$. La figura 4 presenta los resultados obtenidos:

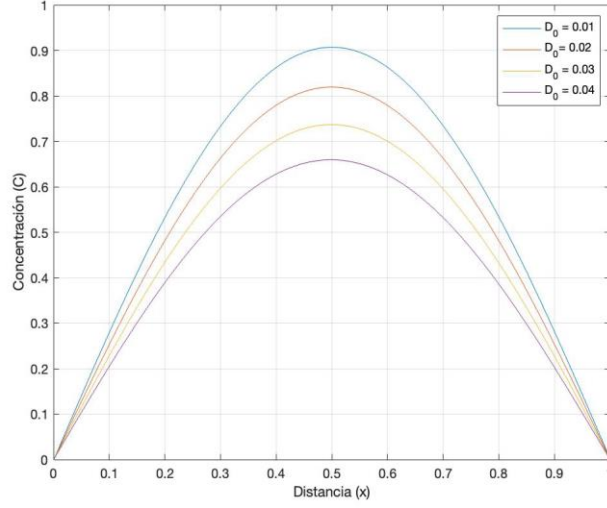


Figura 4. Curva solución: $C(x, 1)$ vs. x , con $D_0 = \frac{1}{100}, \frac{2}{100}, \frac{3}{100}, \frac{4}{100}$, y $\alpha = 0.2$.

Se constata la capacidad del método HAM de obtener soluciones analíticas de una EDP fraccional, no trivial, recurriendo a operaciones básicas del cálculo diferencial e integral.

4.2. Solución Analítica HAM Modelo Caso 2. En este caso: $M = \frac{\partial}{\partial t}$, $C_0 = c_\alpha x e^{\gamma x}$, y

$$N[C] = \frac{\partial^\alpha C}{\partial t^\alpha} - D_\alpha \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + u_\alpha \frac{\partial C}{\partial x} + \lambda_0(1 - \mu t)C.$$

Con los anteriores, y con $M^{-1}[w] = \int_0^t w(x, u) du$, la relación iterativa está dada por

$$C_m(x, t) = g(m)C_{m-1} + h_0 M^{-1}[N[C_{m-1}]]; m = 1, 2, 3, \dots$$

Por otro lado, los valores numéricos de los parámetros son: $c_\alpha = 2 \left[\frac{mg}{L} \right]$, $u_\alpha = 0.2 \left[\frac{cm}{hr} \right]$, $D_\alpha = 0.5 \left[\frac{cm^2}{año} \right]$, $\lambda_0 = 0.05 \left[\frac{1}{km} \right]$, $\gamma = 0.0025 \left[\frac{cm^2}{año} \right]$, $\mu = 0.01[-]$. Respecto del parámetro de convergencia h_0 se observa, a partir de la figura 1, que efectivamente existe un intervalo $] -0.9; 1.5[$ aproximado de horizontalidad de la curva $C_{tt}(0,1)$:

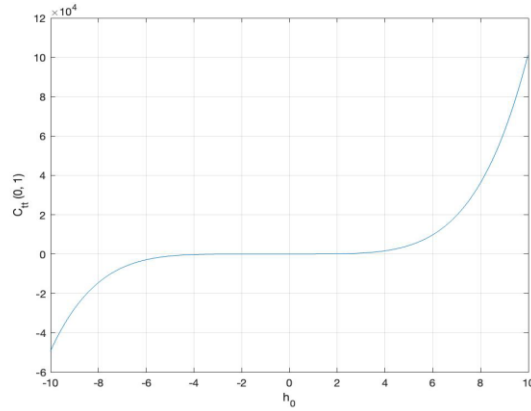


Figura 5. Curva de convergencia: $C_{tt}(0,1)$ vs. h_0 .

La figura 6 muestra la solución basada en el método HAM para distintos órdenes de la derivada fraccional. Específicamente, para $\alpha = 0.1, 0.4, 0.7, 1.0$:

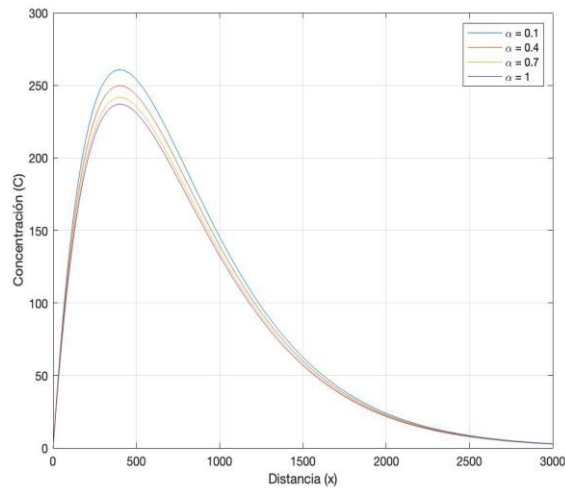


Figura 6. Concentración de contaminantes vs. distancia para $t = 20[hr]$.

4.3. Validación Método HAM [5]. Con el fin de verificar la idoneidad del método HAM como solución analítica, se compara con un método analítico tradicional como es la transformada de Laplace (cf. [5]). Como modelo de referencia se resuelve el modelo Caso 2 con ambos métodos analíticos. La figura 7 presenta los resultados obtenidos, y para distintos órdenes fraccionarios de derivación.

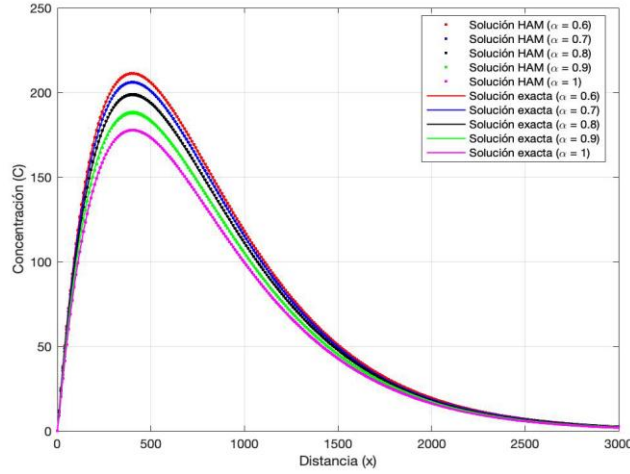


Figura 7. Comparación soluciones analíticas modelo caso 2: método HAM vs. transformada de Laplace. En $t = 10[hr]$ y para $\alpha = 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0$.

Dado que en estricto rigor, cada orden α fraccional de derivación define una nueva ecuación diferencial fraccional, el parámetro de convergencia h_0 del método HAM se debe calcular para cada α . En el caso de la figura 7 los valores de calculados fueron $h_0 = -0.7, -0.81, -0.95, -1.15, -1.3$, respectivamente. Por ejemplo, para $\alpha = 0.6$, se calculó $h_0 = -0.7$, y así sucesivamente. Se constata una alta correspondencia entre la curva HAM y la calculada vía transformada de Laplace. Sin embargo, con el fin de cuantificar con mayor exactitud la Figura 8 relaciona tres magnitudes: (a) la norma L_∞ de la diferencia (error) entre el polinomio HAM, y la transformada de Laplace, (b) el número de términos del polinomio HAM, y (c) el valor h_0 del parámetro de convergencia para cada punto.

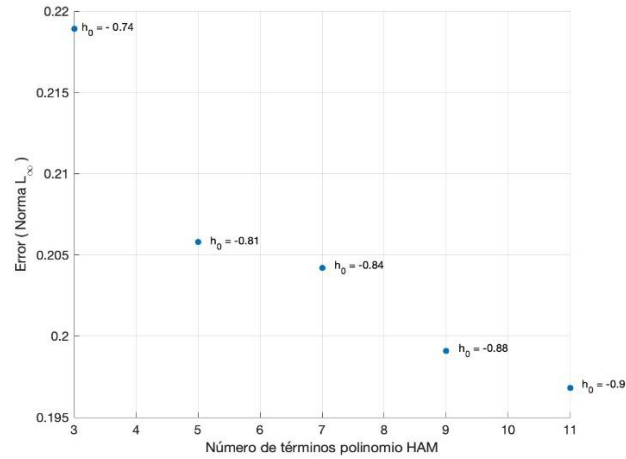


Figura 8. Error en norma vectorial L_∞ vs. número de términos polinomio HAM.

Se destaca la significativa sensibilidad de h_0 en relación al número de términos del polinomio HAM.

5. CONCLUSIONES

En este estudio se evaluó la aplicabilidad del método HAM a la resolución analítica de ecuaciones diferenciales fraccionales. Para tal efecto, se consideraron dos versiones lineales y unidimensionales de la ecuación diferencial parcial convección-difusión-reacción con derivada fraccional conforme. Para ambas ecuaciones sólo la derivada parcial temporal es fraccional. Además, el método HAM se validó con el método analítico usual basado en la transformada de Laplace. En todos los casos el método HAM resultó ser numéricamente convergente y capaz de resolver de manera exacta para distintos órdenes fraccionarios. Los experimentos computacionales permitieron constatar la capacidad del método HAM para resolver este tipo de ecuaciones recurriendo sólo a elementos básicos del cálculo diferencial e integral no fraccionales. Por otro lado, como principal debilidad se informa que sólo fue posible aplicar el método HAM para la derivada fraccional conforme, pues para Caputo o Riemann-Liouville se requirió un número excesivo de cálculos elementales que agotaron el recurso computacional utilizado. Justamente esta debilidad motiva una línea futura de desarrollo basada en la optimización computacional de los algoritmos utilizados.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Departamento de Ciencias Matemáticas y Físicas, y al Magíster en Matemáticas Aplicadas de la Universidad Católica de Temuco por las facilidades brindadas para la ejecución de este proyecto de graduación.

REFERENCIAS

- [1] M.Chaudhary, R.Kumar, M.Kumar, Fractional convection-dispersion equation with conformable derivative approach, Chaos, Solitons and Fractals, 141, pp.1-15, 2020.
- [2] A. Kilbas, H. Srivastava, J. Trujillo, “Theory and Applications of Fractional Differential Equations”, in: Math. Studies., North-Holland, New York, 2006.
- [3] S. J. Liao, “Advances in the homotopy analysis method”. Singapore: World Scientific; 2013.
- [4] J. Otto, “Solución analítica de la ecuación convección-difusión-reacción fraccional con el método de análisis de homotopía”, Tesis Magíster en Matemáticas Aplicadas, Facultad de Ingeniería, Universidad Católica de Temuco, 2023.
- [5] M.J. Simpson, A.J. Ellery, “Exact series solutions of reactive transport models with general initial conditions”, Journal of Hydrology, 513, pp.7-12, 2014.