

Reducción de un modelo de dispersión poblacional utilizando el método POD

Jijón S.* Merino P.†

* *Estudiante del Máster de Matemáticas y Aplicaciones en la Universidad Paris 6*

† *Departamento de Matemáticas*

sofia.jijon@etu.upmc.fr, pedro.merino@epn.edu.ec

Resumen

Consideramos el modelo de crecimiento poblacional descrito por la ecuación de Fisher, que consiste en una ecuación parabólica de reacción-difusión en dos dimensiones.

En este artículo, proponemos la aplicación del método POD (Proper Orthogonal Decomposition) con el propósito de establecer un modelo numérico *reducido* para la ecuación de Fisher, utilizando los esquemas de Euler Implícito y Crank-Nicholson. Los esquemas reducidos resultantes utilizan un número mucho menor de variables, comparado con sus contrapartes aproximadas con funciones base del método de elementos finitos. Presentamos diversos experimentos numéricos para comprobar la eficiencia de la reducción.

Palabras claves: Reducción de modelos, Proper Orthogonal Decomposition (POD), Modelos de Reacción-Difusión, Ecuación de Fisher, Dinámicas de Población.

Abstract

We consider a population growth model given by Fisher's equation, which consists in a reaction-diffusion parabolic equation in two dimensions.

In order to solve this model numerically we propose the application of the POD (Proper Orthogonal Decomposition) model reduction technique to Fisher's equation using Implicit Euler and Crank-Nicholson schemes. The resulting numerical reduced models have considerably less number of variables compared with their finite element approximation counterparts. Examples are presented throughout this document to illustrate the efficiency of the reduction.

Keywords: Model Reduction, Proper Orthogonal Decomposition, Fisher Equation, Population Dynamics.

1 Introducción

La aproximación a través de la técnica de semidiscretización de modelos descritos por ecuaciones diferenciales de tipo parabólico implica la discretización de las variables espaciales (por ejemplo, mediante elementos finitos), lo cual da como resultado un problema de valor inicial que puede ser resuelto por los métodos numéricos conocidos para ecuaciones diferenciales ordinarias. La resolución numérica involucra problemas a gran escala y, consecuentemente, implica un elevado costo computacional, sobre todo si se requiere obtener soluciones de alta precisión numérica en discretizaciones muy finas del dominio.

Distintas técnicas de reducción de modelos han sido desarrolladas con el objetivo de aproximar modelos matemáticos complejos mediante modelos alternativos, que sean tratables numéricamente y con menor esfuerzo; cf. [2]. Uno de los métodos más populares por su simplicidad y eficiencia para obtener modelos reducidos, es el método conocido como *Proper Orthogonal Decomposition* (POD). Un excelente tratado al respecto de la teoría y

aplicación del método POD se puede encontrar en [8]. Este método ha sido utilizado exitosamente en la reducción de modelos provenientes de áreas diversas, como, por ejemplo, en dinámica de fluidos, transferencia de calor, entre otros; cf. [5]. La idea básica que subyace en el método POD es la construcción de una base ortonormal *conveniente*, la cual se encuentra en el mismo espacio donde yace la solución del modelo. Esta conveniencia radica en que, mediante un análisis de componentes principales sobre las observaciones del modelo, se puede construir una nueva base de funciones que contienen información relevante de las características del sistema dinámico. La nueva base de funciones tiene un número significativamente menor de elementos, y por sus características; es posible reconstruir una aproximación de la solución del modelo con una reducción considerable de recursos computacionales. En particular, la reducción de un modelo descrito por una ecuación diferencial resulta muy útil en la resolución numérica eficiente de problemas de control óptimo gobernados por dicha ecuación; cf. [8, 9, 12].

En este artículo estudiamos la reducción del mode-

lo de dinámica poblacional dado por la ecuación de Fisher (6), la cual describe el crecimiento de una población, determinado por un término autorregulatorio de tipo logístico, y su difusión sobre un territorio bidimensional; cf. [3]. Estas condiciones, si bien son ideales, pueden describir situaciones que se podrían dar, por ejemplo, en un laboratorio donde se realiza cultivos de organismos en cajas Petri.

Nuestro objetivo es la reducción de los modelos numéricos que se obtienen tras la aplicación del método de Newton para resolver la ecuación de Fisher y la resolución de los problemas lineales de valor inicial asociados a los métodos de Euler implícito y Crank-Nicholson. Dicha reducción se basa en la aplicación del método POD en la construcción de una base ortonormal, que es construida haciendo un análisis de componentes principales. Para éste análisis se usa los datos las instancias de la solución de la ecuación. La nueva base se incorpora en la aplicación del método de Galerkin para obtener los esquemas numéricos reducidos y, consecuentemente, los algoritmos de reducción. Al final presentamos un ejemplo numérico sobre el cual se realizan diferentes experimentos y verificamos numéricamente la eficiencia del modelo reducido.

2 Método POD

El método POD permite hacer una *reducción* de modelos descritos por ecuaciones diferenciales, reemplazando la base de funciones utilizada por el método de los Elementos Finitos (MEF), por una base ortonormal que contiene información inherente al modelo y que resulta de minimizar un error asociado de aproximación en el sentido de los mínimos cuadrados. Es decir, la base es construida de forma que sus elementos contienen la máxima información posible para representar a la solución de la ecuación; cf. [5]. Esto permite que la resolución numérica del problema tenga un costo computacional mucho menor en comparación a la resolución dada por el método de los elementos finitos, ya que generalmente son pocos los elementos de la base POD necesarios para la resolución del modelo.

Para construir dicha base, la cual caracteriza al modelo reducido, primero es necesario obtener información del fenómeno, la cual es tomada de la solución aproximada del problema evolutivo en ciertos instantes de tiempo del intervalo $[0, T]$. A estas observaciones las llamaremos *snapshots*; cf. [8]. El método de los snapshots resulta ser una técnica natural para obtener información de un sistema dinámico, aunque existen otras posibilidades para recolectar información del modelo; cf. [9].

2.1 Descripción del método

En lo que sigue, consideramos el espacio de Hilbert $L^2(\Omega)$ dotado del producto escalar usual $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$ y de su norma inducida $\|\cdot\|_{L^2(\Omega)}$. Además, notamos por V al

espacio $H^1(\Omega)$ y por $W(0, T)$ al espacio de las funciones $y \in L^2(0, T; V)$ tales que su derivada con respecto a la variable t , notada por $\partial_t y$, es elemento de $L^2(0, T; V^*)$, siendo V^* el espacio dual de V .

Definición 1 Sea $y = y(x, t)$ una función en $W(0, T)$, y sea $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_m = T$ una partición uniforme del intervalo $[0, T]$. Para cada t_j , $y_j = y(x, t_j)$ es un snapshot o imagen de y al tiempo t_j , para $j = 0, 1, \dots, m$.

Notamos por $\mathcal{I} = \{y_j\}_{j=0}^m \subset L^2(\Omega)$ al conjunto de *snapshots* del sistema considerado, con al menos uno de ellos distinto de cero. Estos snapshots corresponden a instancias de la solución que se obtienen de la solución aproximada del problema.

Sea $\mathcal{V}_m \subset L^2(\Omega)$ el espacio generado por los snapshots y sea $\{\psi_k\}_{k=1}^d$ una base ortonormal de \mathcal{V}_m donde $d = \dim(\mathcal{V}_m)$. Entonces, cada elemento del conjunto de snapshots puede ser escrito utilizando la fórmula usual de proyección como sigue:

$$y_j = \sum_{k=1}^d (y_j, \psi_k)_{L^2(\Omega)} \psi_k, \quad \forall j \in 0, 1, \dots, m. \quad (1)$$

El método POD consiste en escoger una base ortonormal de \mathcal{V}_m tal que para todo $\ell \in \{1, 2, \dots, d\}$, el error cuadrático promedio entre las funciones y_j y la ℓ -ésima suma parcial de (1) sea mínimo; es decir, los elementos de la base buscada se caracterizan como las soluciones del siguiente problema de optimización:

$$\begin{cases} \min_{\{\psi_k\}_{k=1}^{\ell}} \sum_{j=0}^m \left\| y_j - \sum_{k=1}^{\ell} (y_j, \psi_k)_{L^2(\Omega)} \psi_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \text{sujeto a:} \\ (\psi_k, \psi_p)_{L^2(\Omega)} = \delta_{kp}, \quad k, p = 1, \dots, \ell, \end{cases} \quad (2)$$

con

$$\delta_{kp} = \begin{cases} 1, & \text{si } k = p, \\ 0, & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

Al conjunto $\{\psi_k\}_{k=1}^{\ell}$ que verifica (2) se le llama *base POD de rango ℓ* .

Supongamos que $\Delta t = T/m$ es el parámetro del tamaño de la discretización del intervalo $[0, T]$, con lo que los instantes de tiempo quedan dados por $t_j = j\Delta t$, con $j = 0, 1, \dots, m$. Los *snapshots* y_j se toman como sigue:

$$y_j = \begin{cases} y(\cdot, t_j), & j = 0, 1, \dots, m, \\ \bar{\partial}y_{j-m}, & j = m+1, \dots, 2m, \end{cases}$$

donde

$$\bar{\partial}y_j = \frac{1}{\Delta t} [y_j - y_{j-1}].$$

Por construcción, todos los snapshots pertenecen a V . Hay que notar que también son consideradas las aproximaciones de las derivadas con respecto a t . Aunque en este trabajo tomamos todas aproximaciones de la solución en cada instante de tiempo, es también posible tomar un subconjunto de ellas de acuerdo con algún un criterio de relevancia numérica o adaptividad.

La base POD se construye correlacionando la información contenida en los snapshots. La matriz de correlación se define como sigue.

Definición 2 La Matriz de Correlación C está dada por:

$$C_{ji} = (y_i, y_j)_{L^2(\Omega)}, \quad j, i = 0, 1, \dots, m. \quad (3)$$

Por su definición, la matriz C es simétrica semidefinida positiva.

A partir de los snapshots construiremos un subespacio de $L^2(\Omega)$ que contenga un porcentaje considerable de información sobre el problema que se quiere resolver. Gracias a las propiedades de C , es posible construir una base ortonormal que contenga a los valores y vectores propios de la matriz. En efecto, tenemos la siguiente proposición; cf. [8].

Proposición 1 Sean $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d > 0$ los primeros d valores propios más grandes de la matriz de correlación C y $v_1, \dots, v_d \in \mathbb{R}^n$ los vectores propios asociados. Entonces, el conjunto $\{\psi_k\}_{k=1}^d$ dado por:

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \sum_{j=0}^m v_k(j+1) y_j(x, \cdot), \quad (4)$$

donde $k = 1, \dots, d \leq m$ y donde $v_k(j)$ es la j -ésima componente del vector propio v_k , es una base POD; i.e. $\{\psi_k\}_{k=1}^d$ es solución de (2).

Detalles sobre la demostración de este resultado se pueden encontrar en [6, 8, 5, 12].

Una de las características más importantes de esta base es que sus elementos están definidos sobre todo el dominio y no están definidos localmente, como es el caso de las funciones base del método de los elementos finitos, las cuales son funciones a soporte compacto. Además, la nueva base es originada por los snapshots y por los vectores y valores propios de la matriz de correlación, por lo cual la base POD contiene información relevante para el fenómeno.

El conjunto $\{\psi_k\}_{k=1}^d$ es una base ortonormal cuyos elementos pertenecen al espacio $H^1(\Omega)$, de manera que podemos utilizar esta base en la aproximación de Galerkin de la ecuación diferencial que describe el la propagación de la población en cuestión.

Gracias a la Proposición 1, los valores propios de la matriz de correlación gozan de la propiedad de ser decrecientes. Numéricamente, se observa que su decaimiento es muy rápido, por tanto el número de elementos requerido de la base POD para aproximar la solución del problema es significativamente menor. Este es el principio de la reducción del tamaño del modelo mediante la técnica POD.

Por otro lado, es de interés conocer las estimaciones de los errores de aproximación del método POD. Sin embargo, éste sigue siendo un tema en estudio actualmente, como se pueden ver en las referencias recomendadas en

[9]. En la siguiente proposición (ver [8]) se muestra que el error de aproximación utilizando la base POD está determinada por la magnitud de los valores propios de la matriz de correlación.

Proposición 2 Para todo $\ell \leq d$ tenemos la siguiente fórmula de estimación del error de aproximación:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=0}^m \left\| y(t_j) - \sum_{k=1}^{\ell} (y(t_j), \psi_k)_{L^2(\Omega)} \psi_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \\ & \sum_{j=1}^m \left\| \bar{\partial} y(t_j) - \sum_{k=1}^{\ell} (\bar{\partial} y(t_j), \psi_k)_{L^2(\Omega)} \psi_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ & = \sum_{k=\ell+1}^d \lambda_k. \end{aligned} \quad (5)$$

3 Modelo de Fisher para la Dinámica Poblacional en el Espacio

El modelo de Fisher se establece al considerar la dinámica poblacional de una población de cierta especie no diferenciada (sin tomar en cuenta ningún tipo de categorización como por ejemplo: la edad de los individuos, el sexo, o interacciones intraespecíficas) que crece sobre cierto espacio plano en el transcurso de un intervalo de tiempo; cf. [3, 1].

Llamamos *estado* de la población a la densidad poblacional en cierto tiempo t y sobre cierto punto x del espacio, el cual está dado por una función $y = y(x, t)$.

Suponemos que r es la tasa de natalidad de la población y que κ es la cantidad máxima de habitantes naturalmente sostenibles por el hábitat (*capacidad de carga*), de manera que el término $-r/\kappa$ representa una tasa de mortalidad producida por la sobrepoblación. En el modelo que estudiamos aquí, no se toma en cuenta el término correspondiente a la mortalidad natural de la población como tal, pues vamos a considerar un término general que puede referirse tanto a la mortalidad natural como a un posible control, que puede ser a su vez la aniquilación o recolección de los individuos en cierta madurez.

El modelo que describe este fenómeno está dado por la ecuación de Fisher, la cual se discute en la siguiente sección.

3.1 Modelo de Fisher

El modelo de Fisher considera el crecimiento poblacional de tipo logístico, combinado con el fenómeno difusión espacial. Se considera también un término adicional que controla el crecimiento de la población que puede ser interpretado como una tasa de mortalidad natural de los individuos, o provocada por una acción externa. El hábitat sobre el cual se dispersa la población se asume como un dominio bidimensional que se encuentra aislado; cf. [1].

Específicamente, el modelo de Fisher consiste en el siguiente problema parabólico:

$$\begin{cases} \partial_t y(x, t) - \gamma \Delta y(x, t) + u(x, t)y \\ \quad = ry(x, t) \left(1 - \frac{y(x, t)}{\kappa} \right), & (x, t) \in Q_T, \\ \partial_\nu y(x, t) = 0, & (x, t) \in \Sigma_T, \\ y(x, 0) = y_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (6)$$

Donde:

- $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ es un dominio acotado que representa el hábitat; $x \in \Omega$ corresponde a la variable espacial.
- $\partial\Omega$ es la frontera de Ω .
- $Q_T = \Omega \times (0, T)$ y $\Sigma_T = \partial\Omega \times (0, T)$.
- $\partial_\nu y$ es la derivada con respecto a la normal exterior ν en la frontera de Ω . Las condiciones de frontera de tipo Neumann homogéneas representan a un hábitat aislado, i.e. no existe inmigración ni emigración de población a través de su frontera.
- y_0 es el estado inicial del sistema y corresponde a la densidad poblacional inicial.
- r es la tasa natural de crecimiento de la especie.
- κ es la capacidad máxima de sostenibilidad de individuos en el espacio considerado o *capacidad de carga* del ambiente.
- γ es una constante que representa la velocidad con la cual se dispersa la población.

Para hacer el análisis de dicha ecuación, consideramos la siguiente hipótesis.

Hipótesis 1 Se asume que:

- La frontera de Ω es Lipschitz.
- La condición inicial y_0 es elemento de $L^\infty(\Omega)$ y verifica $y_0(x) \geq 0$ c.t.p. $x \in \Omega$, $y_0 \not\equiv 0$.
- La función u es elemento de $C(Q_T)$ y verifica $u(x, t) \geq 0$, $\forall (x, t) \in \Omega \times (0, T)$.
- γ, κ y r son constantes positivas.

La formulación variacional de (6) corresponde al siguiente problema: buscamos $y \in W(0, T)$ tal que satisfice:

$$\langle \partial_t y, \phi \rangle_{V^*, V} + \gamma(\nabla y, \nabla \phi) + (uy, \phi) - r(y, \phi) + \frac{r}{\kappa} (y^2, \phi) = 0, \quad (7)$$

para todo $\phi \in V$, c.t.p. $t \in (0, T)$. Aquí, $\langle \cdot, \cdot \rangle_{V^*, V}$ representa al producto en dualidad entre V^* y V .

En [6, 3] se pueden encontrar detalles sobre las estimaciones a-priori de la solución del problema (6) que dan lugar al siguiente Lema.

Lema 1 Supongamos que existe una solución $y \in C^{2,1}(Q_T)$ del problema (6). Entonces existe una constante $M = \|y_0\|_\infty e^{rT}$ tal que

$$0 \leq y(x, t) \leq M. \quad (8)$$

La existencia de soluciones de (6) está basada en la aplicación del teorema del punto fijo a una formulación adecuada de la ecuación. Siguiendo la teoría propuesta en [4], se puede adaptar la demostración de la existencia de soluciones débiles de problemas de valor inicial parabólicos no lineales con condiciones de Dirichlet que se propone en el Teorema 9.2.2, pág. 500, [4]. En nuestro caso se considera condiciones de frontera de Neumann homogéneas y un término no lineal localmente Lipschitz.

Establecemos el siguiente teorema, cuya demostración detallada se puede encontrar en [6].

Teorema 1 Bajo la Hipótesis 1, y suponiendo la estimación (8), entonces existe una única solución débil del problema (6) en $W(0, T)$, que satisface (7).

Se puede consultar [11] sobre algunos resultados de regularidad para ecuaciones lineales parabólicas.

4 Reducción del Modelo de Fisher aplicando el Método POD

Como se explicó anteriormente, la reducción del modelo se realizará en función de los esquemas numéricos semidiscretizados de Euler Implícito y Crank-Nicholson. A continuación presentamos dichos esquemas numéricos para la ecuación de Fisher. Éstos se formulan a partir de la aplicación del método de Newton para obtener un esquema linealizado del problema, el cual da lugar a una formulación variacional linealizada de (6). Aplicamos el método de los Elementos Finitos (MEF) utilizando la aproximación de Galerkin, considerando la base de los elementos finitos lineales a trozos. Se aproxima la solución $y(x, t)$ como sigue:

$$y(x, t) \approx \sum_{j=1}^n w_j(t) \phi_j(x), \quad \text{con } n \in \mathbb{N}, \quad (9)$$

donde ϕ_j es la función base correspondiente del método de los elementos finitos. Reemplazando (9) en (7) obtenemos el siguiente problema de valor inicial en términos de un sistema de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) lineales:

$$\begin{aligned} M w'_{k+1}(t) + \gamma K w_{k+1}(t) + \\ M_u(t) w_{k+1}(t) - r M w_{k+1}(t) \\ + \frac{2r}{\kappa} M_{y_k}(t) w_{k+1}(t) = \frac{r}{\kappa} M \tilde{w}_k(t), \end{aligned} \quad (10)$$

con el índice correspondiente a las iteraciones del método de Newton $k = 1, 2, \dots$; donde:

- M es la *Matriz de Masa* con coordenadas

$$M(j, p) = (\phi_j, \phi_p)_{L^2(\Omega)};$$

- K es la *Matriz de Rigidez* con coordenadas

$$K(j, p) = (\nabla \phi_j, \nabla \phi_p)_{L^2(\Omega)};$$

- $M_u = M_u(t)$ es la matriz con coordenadas

$$M_u(j, p) = (u(\cdot, t)\phi_j, \phi_p)_{L^2(\Omega)};$$

- $M_{y_k} = M_{y_k}(t)$ es la matriz con coordenadas

$$M_{y_k}(j, p) = (y_k(\cdot, t)\phi_j, \phi_p)_{L^2(\Omega)};$$

- $\tilde{w}_k = \tilde{w}_k(t)$ es el vector con coordenadas

$$\tilde{w}_k(j) = (w_k(j))^2;$$

para $j, p = 1, \dots, n$.

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de valor inicial dado por (10) se resuelve utilizando algún método de integración numérica para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias. En particular, aplicaremos el método de Euler Implícito (EI) y el método de Crank-Nicholson (CN). Estos esquemas se consideran utilizando una partición regular con tamaño de paso Δt . La deducción de los siguientes esquemas se encuentra en [6].

Proposición 3 (Newton + EI) Si al sistema (10) se le aplica el método de Euler Implícito, se obtiene un sistema lineal de la forma:

$$A_k w_{k+1}(t_{i+1}) = b_k, \quad (11)$$

donde:

$$A_k = M + \Delta t \left(\gamma K + M_u(t_{i+1}) - rM + \frac{2r}{\kappa} M_{y_k}(t_{i+1}) \right),$$

$$b_k = M w_{k+1}(t_i) + \Delta t \frac{r}{\kappa} M \tilde{w}_k(t_{i+1}),$$

para $k = 1, 2, \dots$

Proposición 4 (Newton + CN) Al aplicar al sistema (10) el método de Crank-Nicholson, se obtiene un sistema lineal de la forma:

$$A_k w_{k+1}(t_{i+1}) = b_k, \quad (12)$$

donde:

$$A_k = M + \frac{\Delta t}{2} \left(\gamma K + M_u(t_{i+1}) - rM + \frac{2r}{\kappa} M_{y_k}(t_{i+1}) \right),$$

$$b_k = \left[M - \frac{\Delta t}{2} \left(\gamma K + M_u(t_i) - rM + \frac{2r}{\kappa} M_{y_k}(t_i) \right) \right] w_{k+1}(t_i) + \frac{r\Delta t}{2\kappa} M (\tilde{w}_k(t_{i+1}) + \tilde{w}_k(t_i)),$$

para $k = 1, 2, \dots$

Observación 1. En [10] se puede encontrar un estudio más amplio sobre ciertos problemas de estabilidad que presenta el método de CN cuando se trabaja con condiciones iniciales irregulares; por ejemplo funciones en L^∞ ; estos problemas se pueden subsanar utilizando la siguiente estrategia dada en la misma referencia: comenzamos la resolución del problema lineal derivado del esquema de EI en las primeras dos iteraciones del método de Newton, a partir de la tercera iteración utilizamos el método de CN; cf [10]. A este método lo llamaremos el método de Crank-Nicholson Estabilizado (CNe). Esta estrategia evita las oscilaciones que ocurren en el método CN cuando se considera una condición inicial irregular, por ejemplo una función constante a trozos; las cuales son importantes para la consideración de datos reales.

4.1 Aplicación del método POD

Sea $W \in \mathbb{R}^{n \times m+1}$ una solución discreta aproximada, resultado de utilizar uno de los métodos mencionados en la Proposición 3 y la Proposición 4, donde n representa el número de nodos de la discretización espacial y m el número de nodos de la discretización temporal; de manera que la i -ésima columna de W representa a la aproximación de la solución en el tiempo t_i y se nota $W(:, i)$.

A partir de la matriz W , construimos la matriz de snapshots Y_{snap} tomando como snapshots las aproximaciones de la solución en cada uno de los instantes t_i ; es decir, tomamos todas las columnas $W(:, i)$, $i = 1, \dots, m$ y construimos a partir de ellas los elementos $\bar{\partial}W$ siguiendo el esquema de [8]. La matriz Y_{snap} se define como sigue:

Definición 3 Sea Δt el tamaño de paso de la discretización temporal. Entonces, las columnas de la Matriz de Snapshots corresponden a:

$$Y_{snap}(:, j) = \begin{cases} W(:, j), & j = 0, 1, \dots, m, \\ \bar{\partial}W(:, j - m), & j = m + 1, \dots, 2m, \end{cases}$$

donde:

$$\bar{\partial}W(:, j) = \frac{1}{\Delta t} [W(:, j) - W(:, j - 1)].$$

Luego, aproximamos la matriz de correlación como

$$C \approx Y_{snap}^T M Y_{snap}.$$

Gracias a que la matriz C es semi definida positiva. Los valores propios de la matriz C son reales no negativos y pueden ordenarse. Su magnitud representan la cantidad de información del problema contenida en cada función propia correspondiente. Debido a esta observación, tomamos los primeros d valores y vectores propios, notados por v_k y λ_k , respectivamente, con $k = 1, \dots, d$.

Construimos la base ortonormal establecida en la Proposición 1, aproximada de la siguiente forma: generamos la matriz Ψ , cuya k -ésima columna está dada por el vector $Psi(:, k)$, correspondiente a la aproximación de la función test ψ_k definido como sigue, cf. (4)

$$\Psi(:, k) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} Y_{snap} v_k, \quad k = 1, \dots, d, \quad (13)$$

Utilizando la base POD, establecemos el esquema reducido análogo a (10):

$$\begin{aligned} M^\psi w'_{k+1}(t) + \gamma K^\psi w_{k+1}(t) + \\ M_u^\psi(t) w_{k+1}(t) - r M^\psi w_{k+1}(t) \\ + \frac{2r}{\kappa} M_{y_k}^\psi(t) w_{k+1}(t) = \frac{r}{\kappa} M^\psi \tilde{w}_k(t), \end{aligned} \quad (14)$$

con $t \in [0, T]$, para $k = 1, 2, \dots$

Dado que los elementos de la base POD son ortonormales, la Matriz de Masa en la base POD está dada por la matriz identidad de tamaño d : $M^\psi = I \in \mathbb{R}^{d \times d}$, mientras que la matriz de rigidez se aproxima de la siguiente manera (ver [8]):

$$K^\psi \approx \Psi^T K \Psi.$$

Por otro lado, para calcular las coordenadas de las matrices M_u^ψ y $M_{y_k}^\psi$ y del vector \tilde{w}_k , es necesario aproximar los valores de las integrales

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} u(x, t) \psi_j(x) \psi_p(x) dx, \\ \int_{\Omega} y_k(x, t) \psi_j(x) \psi_p(x) dx, \\ \int_{\Omega} y_k^2(x, t) \psi_j(x) dx, \end{aligned}$$

respectivamente, para $j, p = 1, \dots, d$ y $k = 1, 2, \dots$. En este trabajo se realiza dicha aproximación utilizando la *Fórmula Prismoidal*; cf. [7].

Llamamos $W^\Psi \in \mathbb{R}^{d \times m+1}$ a la aproximación de la solución del sistema reducido (14). Establecemos el siguiente algoritmo para la resolución de los modelos numéricos reducidos para la ecuación de Fisher.

Require: N_n (pasos de Newton), m (instantes de tiempo), valor inicial y_0 , función u .

Ensure: Solución aproximada de (6) notada por W_{new}^Ψ .

```

1: Inicializar  $W_{old}^\Psi$ 
2: while ( $k < N_n$  y criterio de parada) do
3:   for  $i = 0, 1$  do
4:     Calcular  $W_{new}^\Psi(:, t_i)$  resolviendo (11) para el esquema reducido (14)
5:   end for  $i$ 
6:   for  $i = 2 : m$  do
7:     Calcular  $W_{new}^\Psi(:, t_i)$  resolviendo (12) para el esquema reducido (14)
8:   end for  $i$ 
9:   Asignar  $W_{old}^\Psi = W_{new}^\Psi$ .
10: end while  $k$ 
11: return  $W_{new}^\Psi$ 

```

Algoritmo 1. Esquema reducido de Crank Nicholson

5 Experimentos Numéricos

En esta sección presentamos un ejemplo que simula el comportamiento de una población no diferenciada bajo condiciones muy simplificadas y que se dispersa sobre el territorio ecuatoriano. Sean $x = (x_1, x_2) \in \Omega$, $t \in [0, 2]$. La población inicial $y_0 = y(x, 0)$ viene dada por la siguiente función, que representa tres focos de condensación poblacional:

$$y(x_1, x_2, 0) = \begin{cases} x_1 + x_2 & \text{si } \|(x_1, x_2) - (0.3, 0.8)\|_{\mathbb{R}^2} \leq 0.1, \\ & \text{o } \|(x_1, x_2) - (0.4, 0.3)\|_{\mathbb{R}^2} \leq 0.1, \\ 0 & \text{caso contrario.} \end{cases}$$

La Figura 1 corresponde al gráfico de y_0 . Sin ánimo de incurrir en una rigurosidad geográfica, dividimos el mapa ecuatoriano en tres regiones que representan a: la Costa (si $0 \leq x_1 < 0.3$), la Sierra (si $0.3 \leq x_1 < 0.7$) y la Amazonía (si $0.7 \leq x_1 \leq 1$). Consideramos una población que crece en función de la humedad presente en el ambiente, la cual a su vez depende del tiempo. En este caso, interpretamos a la función $u(x, t)$ como una tasa de mortalidad asociada a la humedad del ambiente. Dicha función se construye tomando valores constantes 1, 2 y 3 según la región: a menor humedad, mayor capacidad de suprimir individuos; por ejemplo, el valor más alto se encuentra en la Sierra, ya que es el lugar en el que el crecimiento poblacional se podría controlar mejor.

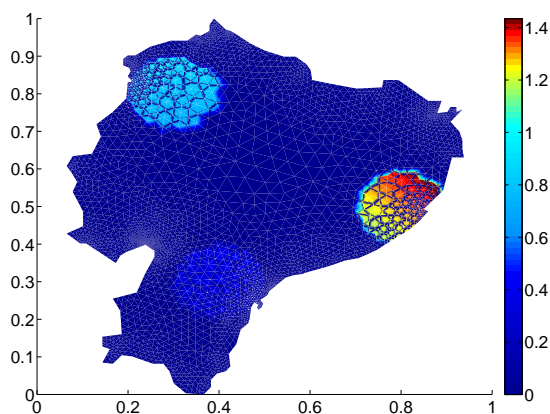
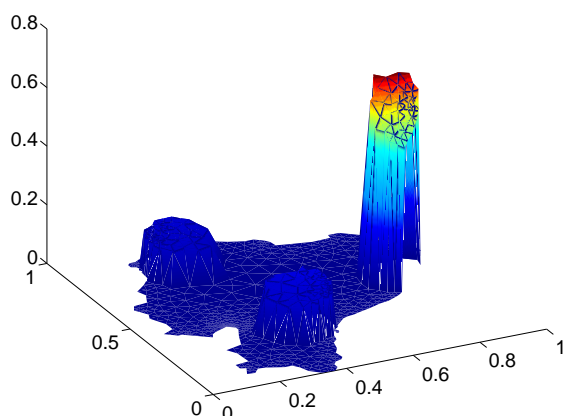


Figura 1. Simulación, estado inicial y . Gráficos de la función $y_0 = y(x, 0)$.

Con propósitos académicos ilustrativos se considera la humedad con tres funciones que nos permiten diferenciar las regiones, asumiendo que la humedad crece linealmente (en la Sierra), cuadráticamente (en la Amazonía) y cúbicamente (en la Costa), a lo largo del año, asumiendo que el Ecuador tiene 2 estaciones: *verano* e *invierno*.

La Figura 2 corresponde a los gráficos del porcentaje de humedad dependiente del tiempo. Aunque estas suposiciones no son del todo realistas, queremos experimentar sobre el modelo con situaciones que podrían presentarse en la práctica. La Figura 3 representa la función u en el tiempo $t = 0$.

Los parámetros del modelo de Fisher que tomamos para la experimentación son los siguientes:

$$\gamma = 0.5 \quad r = 1 \quad \kappa = 10 \quad T = 2.$$

Aplicando el Algoritmo 1, conseguimos los siguientes resultados: la Figura 4 muestra los errores de aproximación obtenidos al aplicar el método POD sobre el mallado, fijando $d = 10$ y $N_t = 400$.

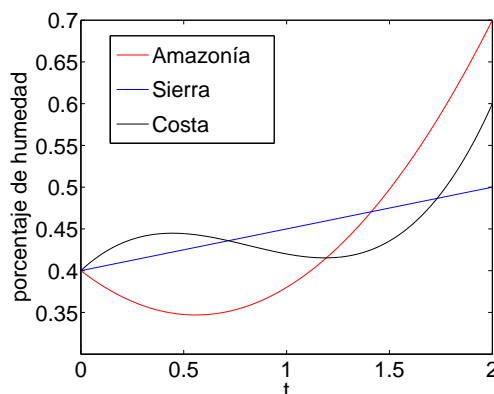


Figura 2. Función $u(\cdot, t)$, que representa la humedad presente en las tres regiones del dominio. La función u varía con respecto al tiempo pero es constante a trozos en el espacio (ver Figura 3).

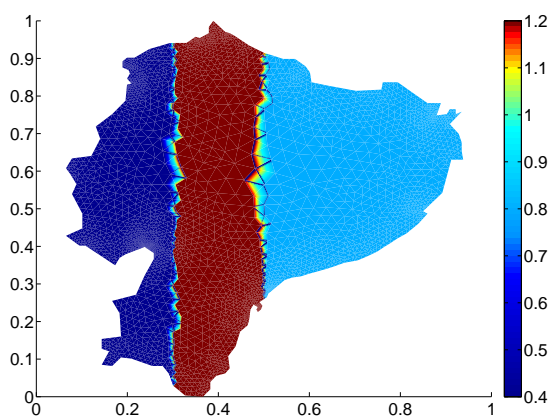
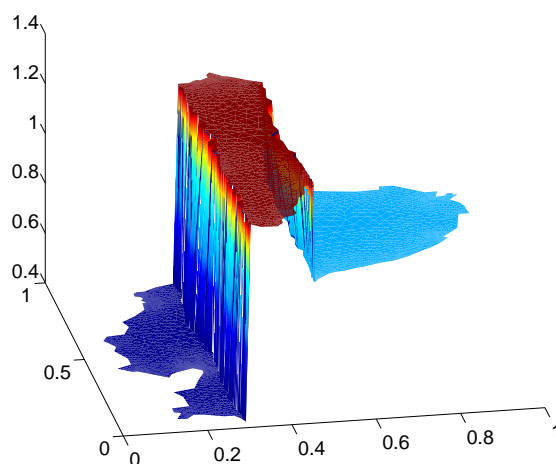


Figura 3. Gráfico de la función u evaluada en $t = 0$.

La Figura 5 muestra las aproximaciones de la solución en los tiempos $t = 0.05, 1, 2$, respectivamente.

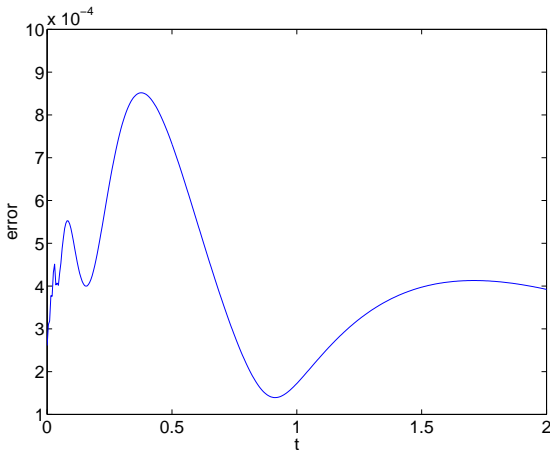


Figura 4. Errores de aproximación del método POD + CNe, con $d = 10$, $h \approx 0.096$ y $m = 400$.

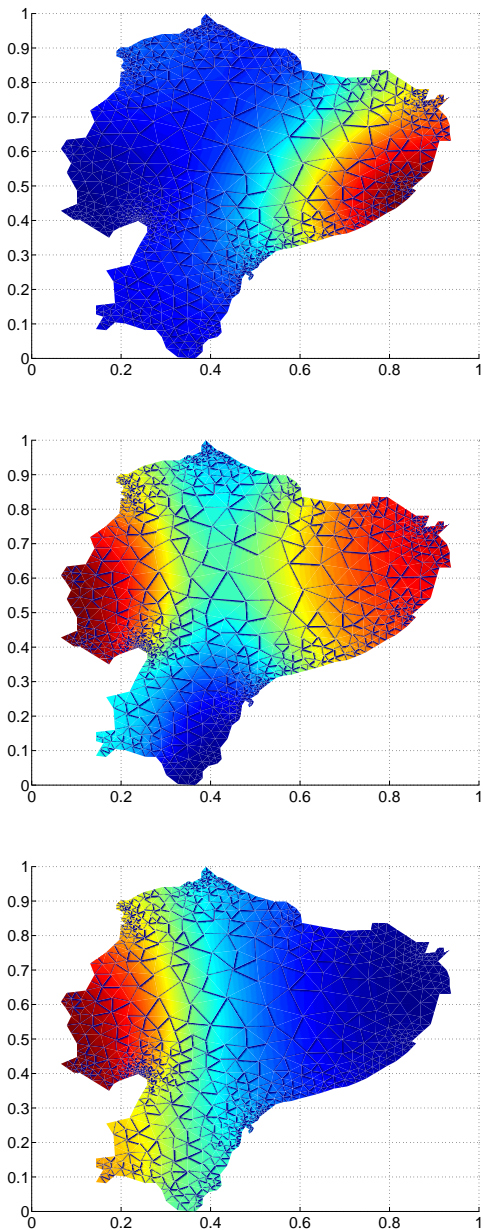


Figura 5. Aproximaciones de la solución en los tiempos $t = 0.05$, $t = 1$ y $t = 2$.

Ya que estamos estudiando un método de reducción de modelo, es de interés observar el comportamiento del método al usar un número mucho mayor de puntos en el dominio y comparar el tiempo de resolución y la memoria de almacenamiento utilizada.

Para ello, refinamos la malla del dominio que representa al mapa del Ecuador hasta obtener 198641 nodos que dieron lugar a 393728 triángulos, con $h \approx 0.006$; y se tomó 1000 subintervalos del intervalo temporal. Para realizar estos experimentos numéricos, los ejemplos fueron resueltos en un servidor HP con 2 procesadores XEON X5670, con sistema Linux Centos de 64bit con 96GB de memoria RAM.

Realizamos el mismo procedimiento: resolvemos el esquema original utilizando el método de CN estabilizado para obtener la información que nos permite construir la base POD y resolvemos el esquema reducido. El notorio decrecimiento de los valores propios obtenidos de la matriz de correlación se pueden observar en la Figura 6.

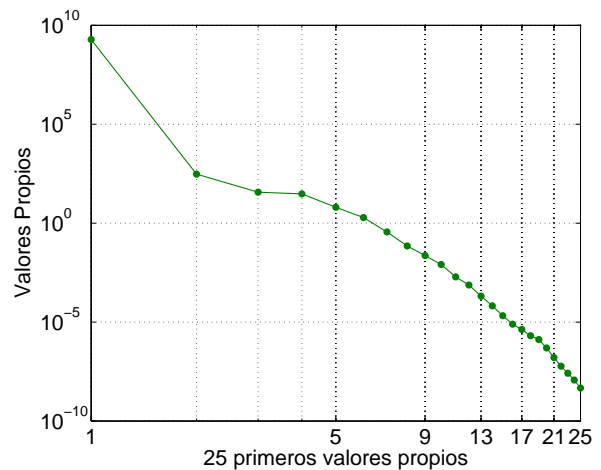


Figura 6. Gráfico de los valores propios de la matriz de correlación C , en escala logarítmica.

Por otro lado, las Figuras 7, 8, 9 y 10 representan los primeros cuatro elementos de la base POD que se construyó a partir de los valores y vectores propios, como en (13).

Al resolver el sistema reducido, se obtuvo una solución aproximada de tamaño 13×2001 , la cual ocupa aproximadamente 208 KB y que fue resuelta en aproximadamente 15 minutos; mientras que la solución aproximada obtenida utilizando elementos finitos es de tamaño 198641×2001 , lo cual ocupa aproximadamente 3.1 GB, y fue resuelta en aproximadamente 10 horas, tomando un tiempo aproximado de una hora para cada iteración del método de Newton. Con este experimento se confirma la reducción del costo computacional al aplicar el método POD.

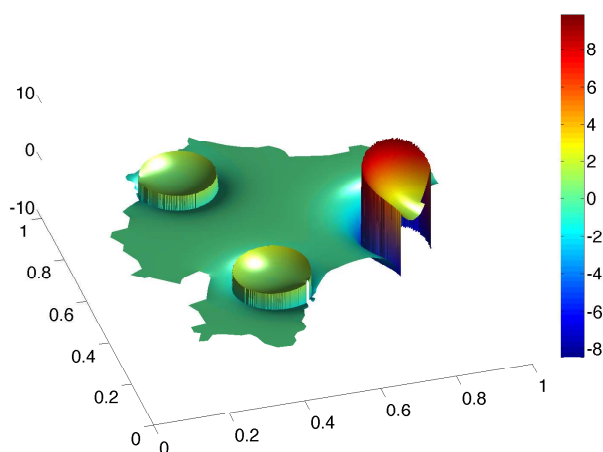


Figura 7. Primer elemento de la base POD, asociado al valor propio $\lambda_1 \approx 1.90205249981 \times 10^9$.

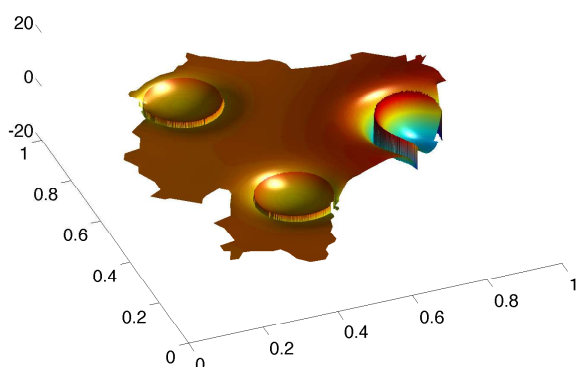


Figura 8. Segundo elemento de la base POD, asociado al valor propio $\lambda_2 \approx 3.00170 \times 10^2$.

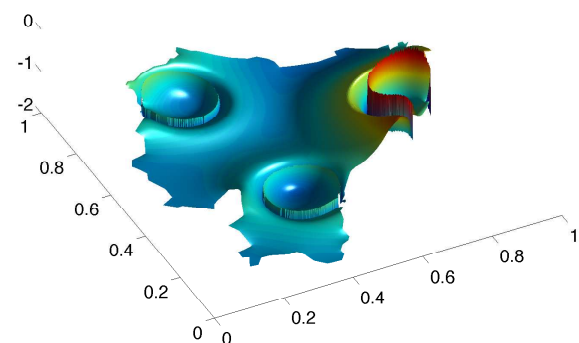


Figura 9. Tercer elemento de la base POD, asociado al valor propio $\lambda_3 \approx 36.80345$.

Este método permite resolver el problema utilizando un número significativamente menor de variables. Además, hemos conducido experimentos perturbando los datos para aplicar el método POD y verificar resul-

tados satisfactorios bajo dichas perturbaciones. Esto permite resolver problemas similares, sin tener que resolver el problema original en la base de elementos finitos.

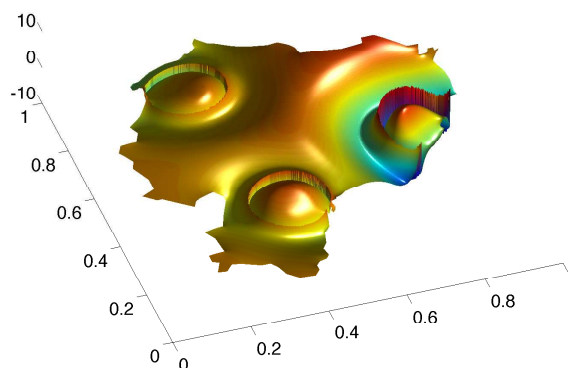


Figura 10. Cuarto elemento de la base POD, asociado al valor propio $\lambda_4 \approx 30.28986$.

Consideramos una función $u(x, t) + \varepsilon$ que corresponde a una versión perturbada de la función $u(x, t)$. Tomamos $0 \leq \varepsilon \leq 1$, y resolvemos el esquema reducido (14), con la base POD obtenida al resolver el problema con $u = u(x, t)$.

La Figura 11 muestra los errores de aproximación entre el sistema *perturbado* resuelto por el método POD y el sistema *perturbado* resuelto por el MEF, tomando $\varepsilon = 0.001$ y $\varepsilon = 0.1$. Mientras que en la Figura 12 se pueden observar los errores de aproximación al considerar el problema perturbado tomando $\varepsilon = 0.7$. A pesar de perturbar la función u con un mayor valor, el error de aproximación sigue siendo pequeño.

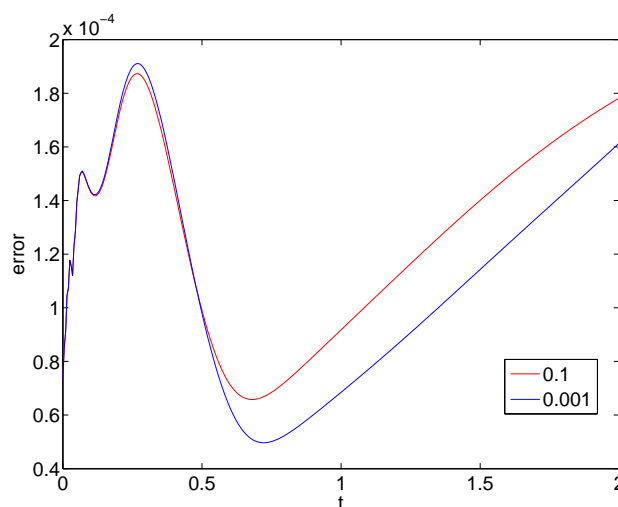


Figura 11. Gráfico de los errores de aproximación obtenidos al aplicar el método POD+CN al problema perturbado, tomando $\varepsilon = 0.1$ y $\varepsilon = 0.001$.

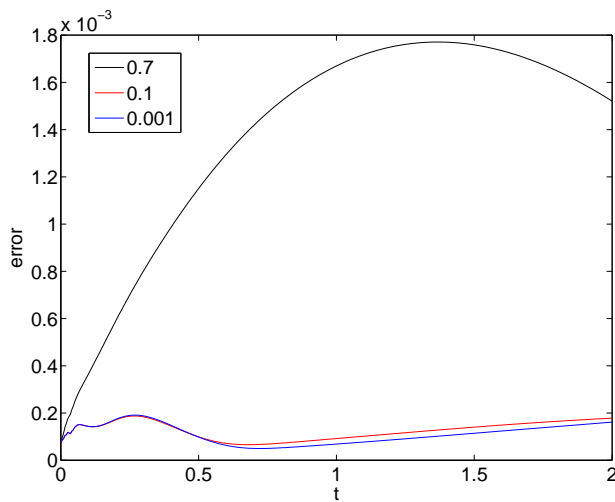


Figura 12. Gráfico de los errores de aproximación obtenidos al aplicar el método POD+CN al problema perturbado, tomando $\varepsilon = 0.7$.

Referencias

- [1] S. Anița, V. Arnăutu, and V. Capasso. *An Introduction to Optimal Control Problems in Life Sciences and Economics*. Springer, 2010.
- [2] A. Antoulas. *Approximation of Large-scale Dynamical Systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), USA, Filadelfia, 2005.
- [3] C. Cosner. *Reaction-Diffusion Equations and Ecological Modeling*. Springer, USA, 2008.
- [4] L. Evans. *Partial Differential Equations*. AMS, USA, 1998.
- [5] P. Holmes, J. Lumley, and G. Berkooz. *Turbulences, Coherent Structures, Dynamical Systems and Symmetry*. Cambridge University Press, Inglaterra, Cambridge, 1996.
- [6] S. Jijón. Reducción del Modelo de Fisher Utilizando el Método POD. Tesis previa a la obtención del título de Matemático, Escuela Politécnica Nacional, 2012.
- [7] E. Kammann, F. Tröltzsch, and S. Volwein. A Method of A-Posteriori Error Estimation with Application to Proper Orthogonal Decomposition. Aún no publicado, 2012.
- [8] K. Kunisch and S. Volkwein. Galerkin Proper Orthogonal Decomposition Methods for Parabolic Problems. *Numerische Mathematik*, pages 117–148, 2001.
- [9] R. Pinnau. Model Reduction via Proper Orthogonal Decomposition. *Fachbereich Mathematik*, 2008.
- [10] R. Rannacher. Finite Element Solution of Diffusion Problems with Irregular Data. *Numerische Mathematik*, 1984.
- [11] F. Tröltzsch. *Optimal Control of Partial Differential Equations*. AMS, USA, 2010.
- [12] S. Volkein. Model Reduction Using Proper Orthogonal Decomposition. Script, 2011.