

Aplicación del caos polinomial a ecuaciones diferenciales parciales aleatorias

Application of polynomial chaos to random partial differential equations

Cayama, Jorge y González-Parra, Gilberto*

Grupo de Matemática Multidisciplinar, Facultad de Ingeniería, ULA,
Mérida 5101, Venezuela

*gcarlos@ula.ve

Resumen

En este artículo aplicamos el caos polinomial a algunas ecuaciones diferenciales parciales aleatorias que surgen en modelos matemáticos que provienen de muchas ramas de las ciencias e ingeniería. La aleatoriedad puede venir dada por errores en medidas o incertidumbre intrínseca o ambas. El caos polinomial está basado en el caos de Askey los cuales forman una base completa en el espacio de Hilbert de las funciones cuadráticamente integrables $L_2(\mathcal{C})$. En este artículo se aplicó el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales aleatorias correspondientes a dos modelos diferentes de transmisión de calor y una referente a la dinámica del gas. Los resultados numéricos muestran los intervalos de confianza y valores esperados para las soluciones. Estos resultados muestran la efectividad y confiabilidad del método utilizando sólo pocas dimensiones del caos. La consistencia del método se verifica al comparar los resultados con la solución analítica de la ecuación diferencial determinística asociada al modelo.

Palabras clave: Ecuaciones diferenciales parciales aleatorias, caos polinomial, incertidumbre, caos de askey.

Abstract

This paper is concerned with the application of polynomial chaos to some random partial differential equations that represent mathematical models from different branches of science and engineering. The randomness involved in these differential equations may come in many cases due to data uncertainty that cannot be known, or due to errors in measurements and intrinsic variability or both. In order to model these uncertainties some probability distributions functions are assumed for the parameters of the partial differential equations. Polynomial chaos is based on the Askey chaos which forms a complete basis on the Hilbert Space of square integrable $L_2(\mathcal{C})$ -functions. Here we apply polynomial chaos to some random partial differential equations modeling heat and gas dynamics. To verify the consistence of the method, results are compared against numerical solutions of the associated deterministic mathematical model.

Key words: Random partial differential equations, polynomial chaos, uncertainty, askey chaos.

1 Introducción

En la mayoría de las aplicaciones de la ingeniería se intenta resolver los problemas físicos convirtiéndolos en modelos matemáticos determinísticos. Esto se puede considerar como una aproximación un poco tosca de la realidad, debido a que muchos de los parámetros físicos entre los datos de entrada que describen el problema se fijan a lo largo del proceso o conversión, es decir, al considerar coeficientes determinísticos se pasan por alto aspectos como los errores

en los datos observados o medidos, las propiedades del material, la variabilidad de las condiciones y también la incertidumbre o falta de conocimiento. En la realidad, estos parámetros muestran cierta aleatoriedad lo cual en definitiva influye sobre el comportamiento de la solución. Esta aleatoriedad no se toma en cuenta en el modelo determinístico. Con el propósito de incluir esta propiedad de incertidumbre en el modelo matemático, se han desarrollado algunos métodos probabilísticos. Junto a las aproximaciones estadísticas, las cuales utilizan una enorme muestra de números

(pseudo-) aleatorios y por tanto se convierten en procesos costosos, se ha hecho una fuerte investigación sobre las aproximaciones no estadísticas (determinísticas). Recientemente, se ha estado desarrollando un nuevo método de aproximación no estadístico, llamado caos polinomial (Ghanem y Spanos, 1991). Esta aproximación, basada en el concepto de Wiener del caos homogéneo (Wiener, 2003), ha probado ser muy eficiente en las aplicaciones de ingeniería (Ghanem y Spanos, 1991; Stanescu y Chen-Charpentier, 2009). Aquí, el término caos, propuesto por Wiener, se refiere a la aleatoriedad (como por ejemplo, la que se observa en la teoría estadística de un gas) y no se debe confundir con el concepto de teoría del caos relacionado a los sistemas dinámicos no lineales, en el cual el término caos fue usado por Yorke (Li y Yorke, 1975) sólo 37 años después. La base teórica de la aproximación por caos polinomial está basada en las conclusiones de Cameron y Martin (Cameron-Martin, 1947), en la que una expansión del caos polinomial converge en algún funcional $L_2(\mathcal{C})$ en el sentido $L_2(\mathcal{C})$, donde \mathcal{C} es el espacio de funciones reales las cuales son continuas en el intervalo $[0, 1]$ y se anulan en 0. En el contexto de los procesos estocásticos, esto implica que cada proceso estocástico con momento de segundo orden finito se puede representar por una expansión del caos polinomial (infinita). La forma original del caos polinomial es una expansión espectral basada en los polinomios de Hermite ortogonales en términos de variables aleatorias gaussianas y utilizando coeficientes determinísticos. Sin embargo, al utilizar esta forma original, la convergencia óptima se consigue sólo cuando se trabaja con procesos estocásticos gaussianos. Esto se puede ver en trabajos previos, como en (Cayama, González-Parra y Chen-Charpentier, 2011; González-Parra y Cayama, 2012), en los cuales se aplicó el caos polinomial a ecuaciones diferenciales ordinarias. Para obtener una convergencia óptima para procesos estocásticos más generales, Xiu y Karniadakis extendieron esta aproximación en un esquema más amplio llamado el caos polinomial generalizado (Xiu y Karniadakis, 2002). En este esquema se utiliza la conexión cerrada entre las funciones de probabilidad de ciertas variables aleatorias y la función de peso en la relación de ortogonalidad de ciertos polinomios ortogonales para representar los procesos no gaussianos (Chen-Charpentier, Cortés, Romero y Roselló 2013). Con más exactitud, se ha logrado que las expansiones espectrales basadas en los polinomios ortogonales del esquema Askey (Koekoek y Swarttouw, 1998) en términos de la variable aleatoria correspondiente, escogida de acuerdo a la función de peso de los polinomios, puedan ser empleadas eficientemente para representar un amplio rango de distribuciones “estándar”. Esto implica que la convergencia óptima se pueda lograr para procesos caracterizados por la distribución uniforme, Gamma y Beta, como ejemplos (Mood y col., 1950)). Las ecuaciones diferenciales con coeficientes aleatorios se utilizan como modelos en muchas aplicaciones. En muchos casos éstas describen de mejor manera el comportamiento real en comparación con

las ecuaciones con coeficientes determinísticos (Arenas, González-Parra y Jódar, 2010). El propósito principal de este artículo es estudiar la aproximación por medio del método de la expansión en caos polinomial para resolver modelos provenientes de la ciencia e ingeniería representados por ecuaciones diferenciales parciales las cuales están sometidas a incertidumbres en sus parámetros (Cayama, González-Parra y Chen-Charpentier, 2011). Se pretende obtener resultados numéricos mostrando los intervalos de confianza y valores esperados para las soluciones de las ecuaciones diferenciales. Además de comprobar la efectividad y confiabilidad del método utilizando sólo pocas dimensiones del caos.

2 Caos polinomial

En esta sección se introduce el polinomio del caos generalizado a lo largo de la expansión de Karhunen-Loeve (KL), otra técnica clásica para representar procesos aleatorios. La expansión KL se puede utilizar en algunos casos para representar eficientemente a los campos estocásticos, es decir, datos estocásticos.

El polinomio original del caos, también llamado como caos homogéneo, fue propuesto primordialmente en (Wiener, 1938), allí se emplearon los polinomios de Hermite en términos de variables gaussianas aleatorias. De acuerdo al teorema de Cameron-Martin propuesto en (Cameron-Martin, 1947), se puede aproximar a algún funcional en $L_2(\mathcal{C})$ y converge en $L_2(\mathcal{C})$, donde \mathcal{C} es el espacio de funciones reales las cuales son continuas en el intervalo $[0, 1]$ y se anulan en 0. Por lo tanto, el caos polinomial proporciona una manera de expandir procesos aleatorios de segundo orden en términos de los polinomios de Hermite. Los procesos aleatorios de segundo orden son procesos con varianza finita y se aplican a la mayoría de procesos físicos. Así, un proceso aleatorio general de segundo orden $\chi(\theta)$, visto como una función de θ , es decir, un evento aleatorio, se puede expresar en la forma

$$\begin{aligned} \chi(\theta) = & \chi_0 \Gamma_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} \chi_{i_1} \Gamma_{i_1}(\xi_{i_1}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \chi_{i_1} \chi_{i_2} \Gamma_2(\xi_{i_1}(\theta), \xi_{i_2}(\theta)) + \\ & \sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} \chi_{i_1} \chi_{i_2} \chi_{i_3} \Gamma_3(\xi_{i_1}(\theta), \xi_{i_2}(\theta), \xi_{i_3}(\theta)) + \dots, \end{aligned} \quad (1)$$

donde $\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ denota los polinomios de Hermite de orden n en término de las variables aleatorias gaussianas independientes multidimensionales $\xi = (\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ con media cero y varianza unitaria. La ecuación anterior es la versión original del polinomio del caos de Wiener, en la

cual las integrales continuas se reemplazan por sumatorias. La expresión general del polinomio de Hermite es dada por:

$$\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n}) = e^{1/2\xi^T\xi} (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi_{i_1} \dots \partial \xi_{i_n}} e^{-1/2\xi^T\xi} \quad (2)$$

El número total de términos N_t en una expansión de orden total p que involucra n variables aleatorias viene dado por

$$N_t = 1 + P = 1 + \sum_{s=1}^p \frac{1}{s!} \prod_{r=0}^{s-1} (n+r) = \frac{(n+p)!}{n!p!}. \quad (3)$$

Por conveniencia en la notación, la ecuación (1) se puede escribir de nuevo como $\chi(\theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \chi_j \Phi_j(\xi)$,

donde existe una correspondencia uno a uno entre las funciones $\Gamma_n(\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$ y $\Phi_j(\xi)$, también entre los coeficientes χ_j y $\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n}$. La sumatoria de la ecuación (1) se lleva a cabo de acuerdo al orden del polinomio de Hermite, mientras que en la ecuación (4) se hace un recuento iniciando con los polinomios de orden bajo. Para mayor claridad, se muestra la expansión en dos dimensiones según (1)

$$\chi(\theta) = \chi_0 \Gamma_0 + \chi_1 \Gamma_1(\xi_1) + \chi_2 \Gamma_1(\xi_2) + \chi_{11} \Gamma_2(\xi_1, \xi_1) + \chi_{12} \Gamma_2(\xi_2, \xi_1) + \chi_{22} \Gamma_2(\xi_2, \xi_2) + \dots \quad (5)$$

y según la forma simplificada (4)

$$\begin{aligned} \chi(\theta) &= \chi_0 \Phi_0(\xi) + \chi_1 \Phi_1(\xi) + \chi_2 \Phi_2(\xi) + \chi_3 \Phi_3(\xi) + \dots \\ &= \chi_0 + \chi_1 \xi_1 + \chi_2 \xi_2 + \chi_3 (\xi_1^2 - 1) + \chi_4 (\xi_1 \xi_2) + \chi_5 (\xi_2^2 - 1) + \dots \end{aligned} \quad (6)$$

Por ejemplo, los primeros seis polinomios de Hermite en una dimensión son:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\xi) &= 1, \\ \Phi_1(\xi) &= \xi, \\ \Phi_2(\xi) &= \xi^2 - 1, \\ \Phi_3(\xi) &= \xi^3 - 3\xi, \\ \Phi_4(\xi) &= \xi^4 - 6\xi^2 + 3, \\ \Phi_5(\xi) &= \xi^5 - 10\xi^3 + 15\xi, \end{aligned}$$

y para una expansión de segundo orden, los primeros seis polinomios de Hermite en dos dimensiones son:

$$\begin{aligned} \Phi_0(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = 1, \\ \Phi_1(\xi) &= \phi_1(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = \xi_1, \\ \Phi_2(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_1(\xi_2) = \xi_2, \\ \Phi_3(\xi) &= \phi_2(\xi_1) \phi_0(\xi_2) = \xi_1^2 - 1, \\ \Phi_4(\xi) &= \phi_1(\xi_1) \phi_1(\xi_2) = \xi_1 \xi_2, \\ \Phi_5(\xi) &= \phi_0(\xi_1) \phi_2(\xi_2) = \xi_2^2 - 1. \end{aligned}$$

El polinomio del caos forma una base ortogonal completa en el espacio de las variables aleatorias gaussianas $L_2(\mathcal{C})$, es decir,

$$\langle \Phi_i, \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i^2 \rangle \delta_{ij}, \quad (7)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es la media del conjunto, este es el producto interno en el espacio de Hilbert de las variables aleatorias gaussianas

$$\langle f(\xi), g(\xi) \rangle = \int f(\xi) g(\xi) W(\xi) d\xi \quad (8)$$

La función de peso es

$$W(\xi) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n}} e^{-1/2\xi^T\xi}, \quad (9)$$

donde n es la dimensión de ξ . Lo que distingue la expansión de Wiener-Hermite de otro posible conjunto de expansiones es que estos polinomios son ortogonales con respecto a la función de peso $W(\xi)$ la cual tiene la forma de distribución de probabilidad gaussiana independiente multidimensional con varianza unitaria. Se utilizará el término caos de Hermite de ahora en adelante para denotar los polinomios del caos de Wiener.

Para trabajar con más variables aleatorias, se introduce la expansión del caos polinomial generalizado, el caos de Askey, como una generalización de la expansión original del caos de Wiener-Hermite. La base de la expansión del caos de Askey se forma con el conjunto de polinomios ortogonales del esquema Askey. Así como en (5), se representa el proceso aleatorio de segundo orden $\chi(\theta)$ como

$$\begin{aligned} \chi(\theta) &= c_0 I_0 + \sum_{i_1=1}^{\infty} c_{i_1} I_1(\zeta_{i_1}(\theta)) + \\ &\sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} c_{i_1} c_{i_2} I_2(\zeta_{i_1}(\theta), \zeta_{i_2}(\theta)) + \\ &\sum_{i_1=1}^{\infty} \sum_{i_2=1}^{i_1} \sum_{i_3=1}^{i_2} c_{i_1} c_{i_2} c_{i_3} I_3(\zeta_{i_1}(\theta), \zeta_{i_2}(\theta), \zeta_{i_3}(\theta)) + \dots \end{aligned} \quad (10)$$

donde $I_n(\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$ denota los caos de Askey de orden n en términos de las variables aleatorias multidimensionales $\zeta = (\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$. En la expansión del caos de Askey, los polinomios I_n no están restringidos a los polinomios de Hermite pero en cambio pueden ser cualquier miembro del esquema de Askey. Nuevamente, por conveniencia en la notación, se escribe (10) como:

$$\chi(\theta) = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{c}_j \Psi_j(\zeta), \quad (11)$$

donde existe una correspondencia uno a uno entre las funciones $I_n(\zeta_{i_1}, \dots, \zeta_{i_n})$ y $\Psi_j(\zeta)$, y entre sus coeficientes \hat{c}_j y c_{i_1}, \dots, c_{i_n} . Como los polinomios del esquema Askey forman una base completa en el espacio de Hilbert dotado de sus soportes correspondientes, se puede esperar que cada caos de Askey converge a algún funcional $L_2(\mathcal{C})$ en $L_2(\mathcal{C})$ en un espacio funcional de Hilbert correspondiente como un resultado generalizado del teorema de Cameron-Martin (Cameron-Martin, 1947; Ogura, 1972). La relación de ortogonalidad de los polinomios del caos del caos de Askey toma la forma

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \langle \Psi_i^2 \rangle \delta_{ij}, \quad (12)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota la media del conjunto que es el producto interno en el espacio de Hilbert de las variables ζ

$$\langle f(\zeta), g(\zeta) \rangle = \int f(\zeta) g(\zeta) W(\zeta) d\zeta \quad (13)$$

ó

$$\langle f(\zeta), g(\zeta) \rangle = \sum_{\zeta} f(\zeta) g(\zeta) W(\zeta) \quad (14)$$

en el caso discreto. Acá $W(\zeta)$ es la función de peso correspondiente a la base de los polinomios del caos de Askey Ψ_i (Xiu y Karniadakis, 2003). Algunos tipos de polinomios ortogonales del esquema Askey tienen funciones de peso de la misma forma que la función de probabilidad de ciertos tipos de distribuciones aleatorias. En la práctica se escoge el tipo de variable independiente ζ en los polinomios $\Psi_j(\zeta)$ de acuerdo a los tipos de distribución aleatoria.

3 El polinomio del caos aplicado a ecuaciones diferenciales parciales

3.1 Aplicación a una ecuación diferencial parcial sencilla

Si se tiene la siguiente ecuación diferencial parcial (parabólica y homogénea):

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a(\omega) u(x, t), \quad u(x, 0) = 1, \quad (15)$$

y si se considera al coeficiente $a = a(\omega)$ como aleatorio, entonces la ecuación (15) se puede ver como una ecuación diferencial estocástica

$$\frac{\partial u(x, t; \omega)}{\partial t} = a(\omega) u(x, t; \omega), \quad (16)$$

sujeta a la condición inicial $u(x, 0) = 1$. Es decir, los valores del coeficiente aleatorio a se suponen que dependen de los resultados ω de un experimento, $a = a(\omega)$, donde ω toma los valores del conjunto de todos los resultados Ω . Esta última se supone que está debidamente equipada con una σ -álgebra \mathcal{F} y una medida de probabilidad P tal que la tripleta (Ω, \mathcal{F}, P) forma un espacio de probabilidad (Ross, 2002).

Así, la solución $u(x, t; \omega)$ se convierte en un proceso estocástico. Ahora se aplica el método del polinomio del caos, se obtiene una metodología general para la solución numérica de la ecuación (26) y la estimación de los diversos momentos de la solución (Ghanem y Spanos, 1991; Walters y Huyse, 2002; Xiu y Karniadakis, 2002). En este contexto, una cantidad aleatoria $\chi(\omega)$ se proyecta en el espacio del polinomio del caos dado por (1). El polinomio del caos se puede organizar en una secuencia $\Phi_i(\xi(\omega))$, detallada en (4), de tal manera que la expansión de las variables aleatorias y del proceso estocástico que aparecen en (16) se expresan como:

$$a(\omega) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \Phi_j(\xi(\omega)),$$

$$u(t, x; \omega) = \sum_{i=0}^{\infty} u_i(t, x) \Phi_i(\xi(\omega)), \quad (17)$$

donde los Φ_i 's son funciones de base polinomiales escogidas apropiadamente (ver sección 2) del vector aleatorio ξ . El número de variables en ξ representa la dimensión del caos. Se ha considerado la expansión en términos del polinomio de Hermite. Este polinomio es el más conveniente para ser aplicado cuando la variable aleatoria sigue una función de distribución de probabilidad normal. Una proyección de Galerkin utilizando la propiedad (7), junto con el truncamiento de la serie infinita a $P + 1$, dará lugar a un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que rigen la evolución en el tiempo del coeficiente del caos solución u_i de la ecuación diferencial parcial (15). El parámetro aleatorio a se expande como un funcional de una sola variable independiente en ξ debido a que su espacio aleatorio es unidimensional. Por otra parte, para todas las cantidades al azar, el primer coeficiente en la expansión representa la media,

por lo que $\bar{u}(t, x) = u_0(t, x)$. Ahora, la expansión de (16) a través del polinomio del caos se expresa como

$$\sum_{i=0}^P \frac{\partial u_i}{\partial t} \Phi_i = \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P u_i a_j \Phi_i \Phi_j, \tag{18}$$

en la cual se ha hecho un adecuado ordenamiento en las funciones de base Φ_i 's y en su dependencia de las variables aleatorias ξ que resulta de dicho orden, el cual no se indica explícitamente. Al exigir que el residual sea ortogonal al subespacio generado por las funciones de base, se obtiene una proyección de Galerkin en los respectivos espacios de Hilbert de las variables aleatorias. En particular, al tomar el producto interno de la ecuación anterior con la función de base Φ_L y utilizando la ortogonalidad de los Φ_i 's resulta:

$$\langle \Phi_L, \Phi_L \rangle \frac{\partial u_L}{\partial t} = \sum_{i=0}^P \sum_{j=0}^P u_i a_j \langle \Phi_i \Phi_j, \Phi_L \rangle. \tag{19}$$

La ecuación (19) es un sistema lineal de ecuaciones diferenciales parciales acopladas, en las $P + 1$ incógnitas u_0, \dots, u_P . El sistema se puede resolver utilizando, por ejemplo, un método de diferencias finitas explícitas en el tiempo y centrada en x . Por lo general, en los modelos y procesos reales, los dos momentos de interés son la media y la varianza. El valor de la varianza se puede calcular a partir de los coeficientes de la expansión. Para u , por ejemplo, la varianza es $\mathcal{V}[u(t, x)] = \sum_{i=0}^P u_i^2(t, x) * \mathcal{V}[\Phi_i]$.

3.2 Aplicación a una ecuación diferencial de calor homogénea

Consideremos la siguiente ecuación diferencial de calor

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}, \tag{20}$$

sujeta a la condición inicial $u(x, 0) = \text{sen}(\pi x)$. Si se asume al coeficiente $a = a(\omega)$ como aleatorio, la ecuación (20) se puede expresar como sigue:

$$\frac{\partial u(x, t; \omega)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x, t; \omega)}{\partial x^2} \tag{21}$$

Nuevamente, en este caso, los valores del coeficiente aleatorio a dependen de los resultados ω de un experimento, $a = a(\omega)$, donde ω toma los valores del conjunto de todos los resultados Ω correspondiente a la tripleta $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ definida anteriormente. Por lo tanto, la solución $u(x, t; \omega)$

se convierte en un proceso estocástico. Similarmente, una cantidad aleatoria $\chi(\omega)$ se proyecta en el espacio del polinomio del caos dado por (11), por lo que la expansión de la variable aleatoria y del proceso estocástico que aparecen en (21) se expresan como en (17). Como en el estudio anterior, se ha considerado la expansión en términos del polinomio de Hermite, pues se consideró una función de distribución de probabilidad normal para el parámetro $a(\omega)$. Una proyección de Galerkin utilizando la ortogonalidad de las funciones de base $\langle \Phi_i, \Phi_j \rangle = \delta_{ij} \langle \Phi_i, \Phi_j \rangle$, además del truncamiento de la serie del caos polinomial a un número finito de términos $P + 1$, da lugar a un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que gobiernan la evolución en el tiempo del coeficiente del caos solución u_i de la ecuación (20). Además, $\bar{u}(t, x) = u_0(t, x)$. Ahora, la expansión de (21) a través del polinomio del caos es

$$\sum_{i=0}^P \frac{\partial u_i}{\partial t} \Phi_i = \sum_{i,j=0}^P a_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \Phi_i \Phi_j \tag{22}$$

Tomando el producto interno entre las funciones de base Φ_L y utilizando la ortogonalidad de los Φ_i 's resulta:

$$\frac{\partial u_L}{\partial t} = \frac{1}{\langle \Phi_L, \Phi_L \rangle} \sum_{i,j=0}^P a_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \langle \Phi_i \Phi_j, \Phi_L \rangle, \tag{23}$$

donde $L = 0, 1, \dots, P$

3.3 Aplicación a una ecuación diferencial de calor no homogénea

Un modelo de ecuación diferencial de calor relacionada a la transmisión de calor en una dimensión en una varilla es

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + b(\omega), \tag{24}$$

sujeta a la condición inicial $u(x, 0) = \text{sen}(\pi x) + x(1 - x)$, y la condición de contorno $u(0, t) = u(1, t) = 0$. Al suponer que los coeficientes $a = a(\omega)$ y $b = b(\omega)$ son aleatorios, la ecuación (24) toma la forma:

$$\frac{\partial u(x, t; \omega)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x, t; \omega)}{\partial x^2} + b(\omega), \tag{25}$$

entonces la solución $u(x, t; \omega)$ se convierte en un proceso estocástico. Análogamente, una cantidad aleatoria $\chi(\omega)$ se proyecta en el espacio del polinomio del caos dado por (11), en consecuencia, la expansión de la variable aleatoria y del proceso estocástico que aparecen en (25) se expresan como:

$$\begin{aligned}
 a(\omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_j \Phi_j(\xi(\omega)), \\
 b(\omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} b_j \Phi_j(\xi(\omega)), \\
 u(t, x; \omega) &= \sum_{i=0}^{\infty} u_i(t, x) \Phi_i(\xi(\omega)),
 \end{aligned} \tag{26}$$

donde los Φ_i 's son funciones de base polinómicas debidamente escogidas del vector aleatorio ξ . El número de variable ξ representa la dimensión del caos. Se ha considerado la expansión en términos del polinomio de Hermite. Éste será aplicado a la función de distribución de probabilidad normal, correspondiente a ambas variables aleatorias. Al realizar una proyección de Galerkin utilizando la ortogonalidad de las funciones de base $\langle \Phi_i, \Phi_j \rangle = \delta_{ij} \langle \Phi_i, \Phi_j \rangle$, y considerando el truncamiento de la serie del caos polinomial como en el estudio anterior, se obtiene un sistema de ecuaciones en derivadas parciales que gobiernan la evolución en el tiempo del coeficiente del caos solución u_i de la ecuación (24). Así, la expansión de (25) a través del caos polinomial es

$$\sum_{i=0}^P \frac{\partial u_i}{\partial t} \Phi_i = \sum_{i,j=0}^P a_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \Phi_i \Phi_j + \sum_{j=0}^P b_j \Phi_j, \tag{27}$$

en el cual se ha hecho un adecuado ordenamiento en las funciones de base Φ_i 's y en su dependencia de las variables aleatorias ξ que resulta de dicho orden, el cual no se indica explícitamente. Tomando el producto interno entre las funciones de base Φ_L y utilizando la ortogonalidad de los Φ_i 's, se tiene:

$$\langle \Phi_L, \Phi_L \rangle \frac{\partial u_L}{\partial t} = \sum_{i,j=0}^P a_j \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} \langle \Phi_i \Phi_j, \Phi_L \rangle + \langle \Phi_L, \Phi_L \rangle b_j, \tag{28}$$

donde $L = 0, 1, \dots, P$

3.4 Solución de la ecuación diferencial aleatoria para la dinámica del gas

Considere la siguiente ecuación dinámica del gas no lineal, homogénea:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial u}{\partial t} + a(\omega)(u^2)_x - u(1-u) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0, \\
 u(x, 0) &= e^{-x},
 \end{aligned} \tag{29}$$

la cual se puede ver como una ecuación diferencial estocás-

tica si se considera el siguiente coeficiente aleatorio: $\alpha = a(\omega)$. Por lo tanto, la solución $u(x, t)$ de la ecuación (29) se convierte en un proceso estocástico $u(x, t; \omega)$. Se asume que los procesos estocásticos y las variables aleatorias de este problema se pueden parametrizar por una sola variable aleatoria ω . Esto implica que la ecuación dinámica del gas (29) se resume en encontrar a $u(x, t; \omega)$ tal que satisfaga:

$$\begin{aligned}
 u_t(x, t; \omega) &= \\
 u(x, t; \omega) (1 - u(x, t; \omega)) - a(\omega)(u^2(x, t; \omega))_x,
 \end{aligned} \tag{30}$$

en $D = t \times S$ y la condición inicial $u(x, 0) = e^{-x}$. El dominio D consiste en el producto del dominio temporal $T = [0, t_{final}]$ y el dominio S , siendo el soporte de la variable ω . Ahora, para encontrar una solución numérica a través de la expansión del caos polinomial, siguiendo en enfoque de Wiener-Hermite, se toma en cuenta nuevamente que dicha expansión se puede organizar en una secuencia $\Phi_i(\xi)$, de tal manera que la expansión de los procesos aleatorios que aparecen en la ecuación (29) toma la forma:

$$\begin{aligned}
 a(\omega) &= \sum_{j=0}^{\infty} a_j \Phi_j(\xi(\omega)), \\
 u(t, x; \omega) &= \sum_{i=0}^{\infty} u_i(t, x) \Phi_i(\xi(\omega)),
 \end{aligned} \tag{31}$$

donde los Φ_i 's son funciones de base polinomiales escogidas apropiadamente (ver sección 2) del vector aleatorio ξ . Al asumir las expansiones (31) en la ecuación (30) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\partial u_i}{\partial t} \Phi_i &= \\
 \sum_{i=0}^{\infty} u_i \Phi_i - \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} u_i u_j \Phi_i \Phi_j - \\
 2 \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} u_i a_j \frac{\partial u_k}{\partial x} \Phi_i \Phi_j \Phi_k.
 \end{aligned} \tag{32}$$

Al realizar una proyección de Galerkin, utilizando la propiedad (7) junto con el truncamiento de la serie infinita a $p + 1$ términos, se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales que rigen la evolución del tiempo de los coeficientes del caos de la solución:

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_m, \Phi_m \rangle \frac{\partial u_m}{\partial t} &= \\
 \langle \Phi_m, \Phi_m \rangle u_m - \sum_{i,j=0}^P u_i u_j s_{ijk} - \sum_{i,j,k=0}^P u_i a_j \frac{\partial u_k}{\partial x} r_{ijkm}, & \quad (33)
 \end{aligned}$$

Donde $r_{ijkm} = \langle \Phi_i \Phi_j \Phi_k, \Phi_m \rangle$ $s_{ijm} = \langle \Phi_i \Phi_j, \Phi_m \rangle$

4 Simulaciones numéricas utilizando caos polinomial

En esta Sección se muestran los resultados numéricos al aplicar el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales mostradas en la sección 3.

4.1 Una ecuación diferencial parcial aleatoria

Aquí se resuelve la ecuación diferencial parcial aleatoria $\frac{\partial u(x,t;\omega)}{\partial t} = a(\omega)u(x,t;\omega)$.

(34)

La solución determinística (sin considerar a la variable α como aleatoria) para esta ecuación es $u(x,t) = u(x,0)e^t$. En la Figura 1 se puede observar la evolución de la media de la solución utilizando caos polinomial, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria (34), suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ para el parámetro α y un valor inicial $u(x,0) = 1.0$. Estas soluciones se calcularon utilizando el caos polinomial en conjunto con los polinomios de Hermite debido a su conveniencia para parámetros que siguen una distribución gaussiana. Es importante resaltar la precisión de la solución esperada al compararla con la solución determinística a pesar de solo estar usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones de caos polinomial. La solución del polinomio del caos se muestra para la media (línea de color azul) junto a dos curvas límites (líneas de color rojo) que representan el intervalo de confianza $[\bar{u}(x,t) - 2S(t), \bar{u}(x,t) + 2S(t)]$, en el punto $x = 0.5$, donde $S(t) = \sqrt{V[u(x,t)]}$ es la desviación estándar en la solución. Es importante resaltar que al introducir valores pequeños de aleatoriedad en el modelo permite una representación más fiel de la evolución en el tiempo de la solución, para un punto x dado entre 0 y 1. El sistema de ecuaciones diferenciales determinísticas que se genera fue resuelto con el método de Euler hacia adelante. Se utilizó un tamaño del paso del tiempo $\Delta t = 0.01$.

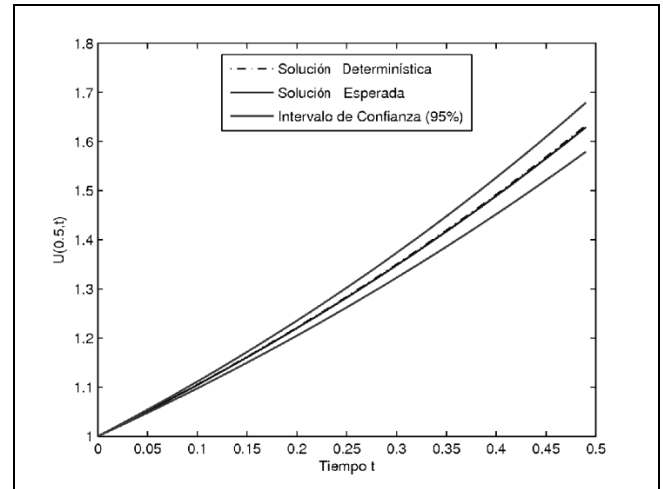


Fig. 1. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la solución $u(0.5,t)$ de la ecuación diferencial parcial (34) en comparación con su solución exacta suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ para el parámetro α .

4.2 Una ecuación diferencial parcial aleatoria de calor

Se desea resolver la ecuación diferencial de calor

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \quad (35)$$

Sujeta a la condición inicial $u(x,0) = \text{sen}(\pi x)$. Si se asume al coeficiente $a = a(\omega)$ como aleatorio, la ecuación (35) se puede expresar como:

$$\frac{\partial u(x,t;\omega)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x,t;\omega)}{\partial x^2} \quad (36)$$

sujeta a la condición inicial $u(x,0) = \text{sen}(\pi x)$. En la Figura 2, para el valor $x = 0.5$, se puede observar la evolución de la media de la solución utilizando caos polinomial, la solución del problema determinístico asociado (resuelto con el método de Euler hacia adelante) y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria (36) suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ para el parámetro α y una condición inicial $u(x,0) = \text{sen}(\pi x)$. Como se puede observar en la Figura 2, el caos polinomial genera soluciones con buena precisión usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones de caos polinomial. Se debe mencionar que estas soluciones se calcularon utilizando el caos polinomial con los polinomios de Hermite. Se utilizó el método de Euler tanto implícito y explícito con distintos tamaños de paso en el tiempo, por ejemplo $\Delta t = 0.0001$, para resolver las ecuaciones diferenciales luego de aplicar el caos polinomial pero no hubo diferencias significativas.

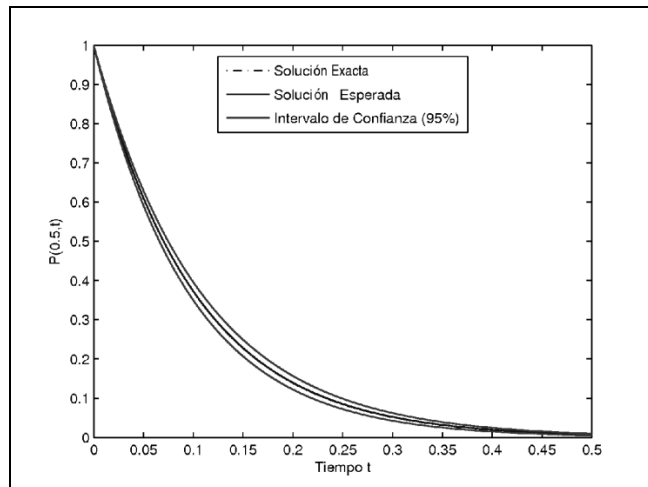


Fig. 2. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la solución $u(0.5, t)$ de la ecuación diferencial parcial (38), suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ para el parámetro a .

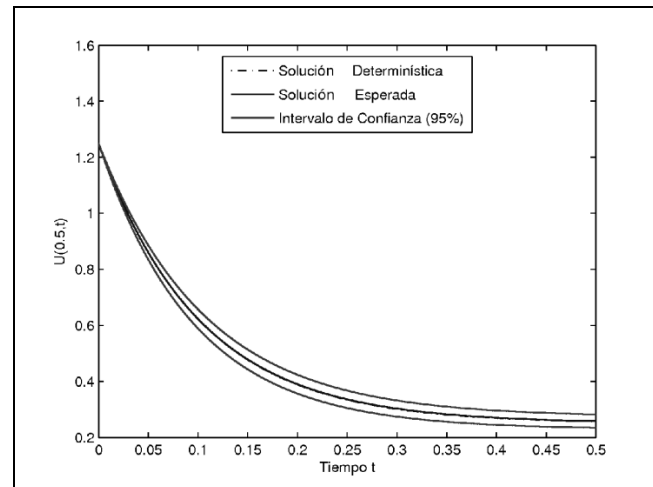


Fig. 3. Evolución de la media y del intervalo de confianza de la solución $u(0.5, t)$ de la ecuación diferencial parcial de calor no homogénea (38), suponiendo distribuciones gaussianas $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ y $\mathcal{N}(2.0, 2.0/16)$ para los parámetros a y b , respectivamente.

4.3 Una ecuación diferencial de calor no homogénea

En esta parte se desea resolver la ecuación diferencial de calor no homogénea

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} + b(\omega), \quad (37)$$

sujeta a la condición inicial $u(x, 0) = \sin(\pi x) + x(1 - x)$, y la condición de contorno $u(0, t) = u(1, t) = 0$. Si se considera a los coeficientes $a = a(\omega)$ y $b = b(\omega)$ como aleatorios, la ecuación (37) toma la forma:

$$\frac{\partial u(x,t; \omega)}{\partial t} = a(\omega) \frac{\partial^2 u(x,t; \omega)}{\partial x^2} + b(\omega), \quad (38)$$

entonces la solución $u(x, t; \omega)$ se convierte en un proceso estocástico.

Particularmente en este estudio, se asume que las variables aleatorias a y b tienen distribuciones gaussianas $\mathcal{N}(1.0, 1.0/16)$ y $\mathcal{N}(2.0, 2.0/16)$, respectivamente. El sistema de ecuaciones diferenciales determinísticas que se genera fue resuelto con el método de Euler hacia adelante. Se utilizó un tamaño del paso del tiempo $\Delta t = 0.0001$. En la Figura 4 se puede observar la evolución de la media de la solución $u(0.5, t)$ de la ecuación diferencial parcial, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria de calor (38). En la Figura 3 se observa que el caos polinomial genera de nuevo soluciones con buena precisión usando solo dos dimensiones de caos en las expansiones del caos polinomial.

4.4 Ecuación dinámica del gas

Se desea resolver la ecuación diferencial parcial aleatoria

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a(\omega)(u^2)_x - u(1 - u) &= 0, \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0, \\ u(x, 0) &= e^{-x}, \end{aligned} \quad (39)$$

cuando se asume al parámetro a como aleatorio, particularmente, en este estudio se asume que este parámetro sigue una distribución gaussiana $\mathcal{N}(2.0, 0.0125)$. La solución de la ecuación diferencial determinística asociada, sujeta a la condición inicial $u(x, 0) = e^{-x}$ y con $0 \leq x \leq 1, t > 0$, es

$$u(x, t) = e^{t-x}. \quad (40)$$

En la Figura 4, para el valor $x = 0.5$, se puede observar la evolución de la media, la solución del problema determinístico asociado y el intervalo de confianza para las soluciones de la ecuación diferencial aleatoria (39). Nuevamente, solo se utilizó dos dimensiones de caos en las expansiones del caos polinomial, empleando los polinomios de Hermite. Se trabajó con el método de Euler, tanto implícito y explícito, con distintos tamaños del paso en el tiempo ($\Delta t < 0.01$), para resolver las ecuaciones diferenciales luego de aplicar el caos polinomial, pero no hubo diferencias significativas.

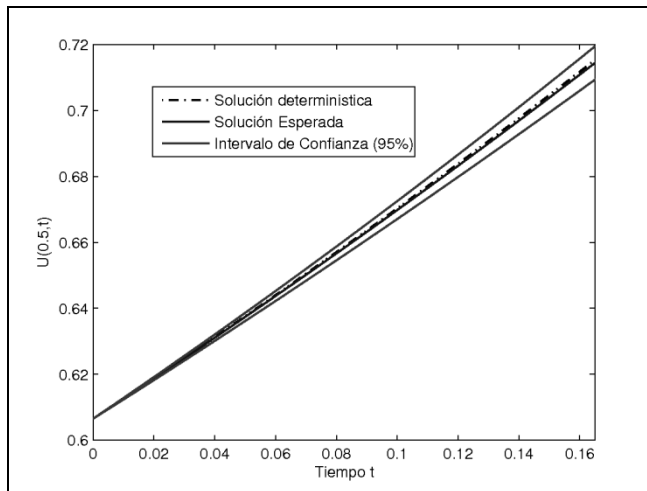


Fig. 4. Evolución de la media y el intervalo de confianza de la solución de $u(0.5, t)$ de la ecuación diferencial parcial (39), suponiendo una distribución gaussiana $\mathcal{N}(2.0, 0.0125)$ para el parámetro α

5 Conclusiones

En este artículo se aplicó el caos polinomial para resolver las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales aleatorias correspondientes a dos modelos diferentes de transmisión de calor y una referente a la dinámica del gas. Estas ecuaciones diferenciales aleatorias surgen en varios modelos matemáticos que provienen de muchas ramas de las ciencias e ingeniería. La base teórica de la aproximación por caos polinomial consiste en que una expansión del caos polinomial converge en algún funcional $L_2(C)$ en el sentido $L_2(C)$. En el contexto de los procesos estocásticos, esto implica que cada proceso estocástico con momento de segundo orden finito se puede representar por una expansión del caos polinomial (infinita). Para obtener los resultados numéricos se ha utilizado los polinomios de Hermite debido a su conveniencia cuando los parámetros aleatorios siguen una distribución gaussiana. Los resultados numéricos muestran los intervalos de confianza y valores esperados para las soluciones de las ecuaciones en derivadas parciales aleatorias. Los resultados encontrados aquí muestran la efectividad y confiabilidad del método utilizando sólo pocas dimensiones del caos. De esta forma se sugiere que para las ecuaciones diferenciales parciales aleatorias es recomendable utilizar el caos polinomial.

Futuras líneas de investigación consisten en considerar otro tipo de distribuciones distintas a las gaussianas para los distintos parámetros aleatorios. Para estos casos será conveniente explorar otro tipo de polinomios como el de Legendre, Laguerre o Charlier. Adicionalmente, se desea aplicar esta técnica a modelos con datos reales con cierto grado de incertidumbre en sus parámetros. Específicamente se aplicará el caos polinomial a modelos poblacionales, epidémicos, económicos y modelos de flujo en medios porosos.

Referencias

- Arenas A.J, González-Parra G y Jódar L, 2010, Randomness in a mathematical model for the transmission of respiratory syncytial virus (RSV), *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 80, No. 5, pp. 971-981.
- Askey R y Wilson J, 1985, Some basic hypergeometric polynomials that generalize Jacobi polynomials, *Memoirs of the American Mathematical Society*, AMS, Providence, RI, pp. 319.
- Beckmann P, 1973, *Orthogonal Polynomials for Engineers and Physicists*, Golem Press.
- Cameron R.H y Martin W.T, 1947, The orthogonal development of nonlinear functionals in series of Fourier-Hermite functionals, *Ann. Math.* Vol. 48, pp. 385.
- Cayama J, González-Parra G y Chen-Charpentier B, 2011, *Aplicación del Caos Polinomial a modelos matemáticos basados en ecuaciones diferenciales*, Tesis de Maestría, Programa de Matemática Aplicada a la Ingeniería, Universidad de Los Andes.
- Chen-Charpentier B, Cortés J.C, Romero J.V y Roselló M.D, 2013, Some recommendations for applying gPC (generalized polynomial chaos) to modeling: An analysis through the Airy random differential equation, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 219, No. 9, pp. 4208-4218.
- Chihara T.S, 1978, *An Introduction to Orthogonal Polynomials*, Gordon and Breach Science Publishers.
- Ghanem R, Spanos P.D, 1991, *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*, Dover Publications, Mineola, NJ.
- González-Parra G, Cayama J, 2012, Comparación de Caos Polinomial y Monte Carlo para ecuaciones ordinarias aleatorias, *Revista de Ciencia e Ingeniería – Universidad de Los Andes*, Vol. 33, No. 1, pp. 9-20.
- Koekoek R y Swarttouw R.F, 1998, The Askey-scheme of hypergeometric orthogonal polynomials and its q-analogue, *Technical Report 98-17*, Department of Technical Mathematics and Informatics, Delft University of Technology.
- Li T.Y y Yorke J.A, 1975, Period three implies chaos, *Amer. Math. Monthly*, Vol. 82, pp. 985-992.
- Mood A.M, Graybill F.A y Boes D.C, 1950, *Introduction to the theory of statistics*, 3rd Ed., McGraw-Hill.
- Murray J.D, 2002, *Mathematical Biology I*, Springer, Berlin.
- Ogura H, 1972, Orthogonal functionals of the Poisson process, *IEEE Trans. Info., Theory* 18, pp. 473-481.
- Ross S., 2002, *A First Course in Probability*, Prentice Hall, New Jersey.
- Schoutens W, 2000, *Stochastic Processes and Orthogonal Polynomials*, Springer, New York.
- Stanescu D, Chen-Charpentier B, 2009, Random coefficient differential equation models for Monod kinetics, *Discrete and continuous dynamical systems*, pp. 719-728.
- Szegő G, 1939, *Orthogonal Polynomials*, AMS, Providence, RI.
- Walters R.W., Huysse L., 2002, *Uncertainty quantification*

for fluid mechanics with applications, ICASE Report No. 2002-1, NASA Langley Research Center, Hampton Va.
Wiener N., 1938, The homogeneous chaos, Am. J. Math. Vol. 60, pp. 897–936.
Xiu D, Karniadakis G.E, 2002, The Wiener–Askey polynomial chaos for stochastic differential equations, SIAM J. Sci. Comput. Vol. 24, pp. 619–664.
Xiu D, Karniadakis G.E, 2003, Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos, Journal of Computational Physics, Vol. 187, pp. 137-167.

Recibido: 01 de octubre de 2012

Revisado: 12 de enero de 2013

Cayama, Jorge: Profesor. Licenciado en matemáticas de la Universidad Centroccidental “Lisandro Alvarado”. Barquisimeto, Venezuela. Magister en Matemática Aplicada a la Ingeniería en la ULA. Miembro del Grupo de Matemática Multidisciplinar (GMM) de la Universidad de Los Andes en Mérida, Venezuela.

González-Parra, Gilberto: Profesor. Universidad de Los Andes, Mérida Venezuela. Ingeniero de Sistemas. Magister en Matemática Aplicada a la Ingeniería en la ULA y Doctorado en Matemática Aplicada en la Universidad Politécnica de Valencia, España. Ha sido invitado a realizar actividades de investigación en distintas universidades en países como Australia, España, Turquía, Grecia, Estados Unidos y Colombia. Ha publicado artículos en diversas áreas de matemática aplicada, cofundador del Grupo de Matemática Multidisciplinar (GMM) de la Universidad de Los Andes en Mérida, Venezuela y revisor de reconocidas revistas internacionales.

