

EVALUACIÓN DE DISCRETIZACIONES EN TIEMPO Y MÉTODOS LDG PARA PROBLEMAS DE DIFUSIÓN Y REACCIÓN NO LINEAL EN 2D

ASSESSMENT OF TIME DISCRETIZATIONS AND LDG METHODS FOR DIFFUSION AND NONLINEAR REACTION PROBLEMS IN 2D

P. Castillo^{1*}, I. Henríquez²

¹Departamento de Ciencias Matemáticas, Universidad de Puerto Rico, P.O. Box 9018, Mayagüez, Puerto Rico 00681.

²Escuela de Matemáticas y Ciencias de la Computación, Universidad Nacional Autónoma de Honduras, Tegucigalpa, D.C. Honduras.

Recibido 1 de Diciembre de 2016, Aceptado 8 de Marzo de 2017

Resumen

Se realiza un estudio numérico del desempeño de las técnicas de integración en tiempo: IMEX y descomposición de operadores, en combinación con la versión original de la discretización espacial discontinua “Local Discontinuous Galerkin” (LDG) y su versión de disipación mínima, MD-LDG. El estudio se enfoca en la precisión y la estabilidad numérica en sistemas de difusión y reacción no lineal que surgen en problemas de ingeniería química, en particular en el modelamiento de patrones de Turing. Los experimentos numéricos muestran que el método de elemento finito Galerkin discontinuo es una excelente alternativa para la simulación de esta clase de problemas.

Palabras clave: sistemas de difusión con reacción no lineal, Local Discontinuous Galerkin, elemento finito discontinuo, aproximaciones de alto orden, descomposición de operadores, IMEX.

Abstract

A numerical study of the performance of the time integration schemes: IMEX and Operator Splitting combined with the original version of the finite element discontinuous spatial discretization known as “Local Discontinuous Galerkin” (LDG) and its minimal dissipation version, MD-LDG is presented. The study focuses on precision and numerical stability for diffusion and nonlinear reaction systems which arise in chemical engineering problems, in particular in the modeling of Turing patterns. Numerical experiments show that discontinuous Galerkin finite element method is an excellent alternative for the simulation of this class of problems.

Keywords: diffusion with nonlinear reaction systems, Local Discontinuous Galerkin, Discontinuous Finite Element, high order approximations, Operator Splitting, IMEX.

1. Introducción

A partir del trabajo pionero, Turing (1952), sobre morfogénesis; en el cual se describe la evolución de un estado estacionario homogéneo hacia uno espacialmente heterogéneo (estructuras de Turing) mediante un simple modelo de reacción-difusión; la modelación teórica y el diseño experimental de sistemas químicos que presentan dichas estructuras

han sido testigos de un progreso considerable. Por ejemplo en biología, particularmente en biología del desarrollo, varios modelos de reacción-difusión han sido propuestos recientemente para predecir una amplia variedad de mecanismos morfológicos en la formación de tejidos y órganos. Ver Marcon y Sharpe (2012), para una extensa colección de modelos

* Paul Castillo. E-mail: paul.castillo@upr.edu
Tel. 1-787-832-4040, Fax 1-787-265-5454

aplicados a sistemas biológicos; y Mikhailov y Showalter (2006) para distintas aplicaciones químicas.

Estos modelos se formulan, por lo general, mediante un sistema no lineal de ecuaciones en derivadas parciales, cuya representación se resume en la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = (\mathcal{D}_p \otimes \Delta) \mathbf{c} + r_p(\mathbf{c}), \quad (1)$$

donde \mathbf{c} es un vector en \mathbb{R}^p que representa la concentración de p especies químicas; \mathcal{D}_p es una matriz de coeficientes de difusión, la cual por lo general se asume diagonal y constante (difusión lineal); y r_p es el operador no lineal de reacción que acopla el sistema con las p especies químicas. La naturaleza no lineal de la reacción química hace difícil (sino imposible) representar la solución mediante una fórmula analítica explícita. Por otro lado el diseño de experimentos que permita visualizar las estructuras de Turing, principalmente en 3D, es actualmente, un gran reto tecnológico. Esto ha ocasionado un enorme interés en la aplicación y el desarrollo de métodos computacionales para la simulación numérica de tales sistemas de ecuaciones en derivadas parciales.

Diversas técnicas han sido propuestas para la discretización espacial de problemas transitorios de difusión y reacción no lineal. Por ejemplo, el método tradicional de diferencias finitas de segundo orden, fue investigado en Ruuth (1995) para la formación de patrones; y recientemente, un nuevo método de alto orden fue propuesto en Sgura y col. (2012) para la simulación de patrones de Turing en electrodeposición química. Debido a su flexibilidad en el manejo de geometrías complejas, discretizaciones espaciales basadas en el método clásico de elemento finito, también han sido utilizadas en Madzvamuse (2006); Madzvamuse y Maini (2007) y sus referencias.

Una técnica de discretización espacial que ha ganado mucha popularidad en las últimas décadas, es la de elemento finito Galerkin discontinuo. Esta posee la particularidad de no imponer continuidad entre celdas adyacentes, por lo que el grado de aproximación puede ser variable y mallas arbitrarias pueden ser utilizadas, por ejemplo mallas con nodos colgantes. Esta propiedad es ideal para métodos *hp*-adaptativos. Por otro lado, la matriz de masa es diagonal por bloques, por lo tanto fácil de invertir; lo cual resulta muy conveniente cuando se utilizan métodos explícitos de integración en tiempo ya que no se requiere de la técnica de agrupamiento, conocida en inglés como “*mass lumping*”, utilizada frecuentemente en el método clásico de elemento

finito. Un ejemplo característico de esta clase de métodos es el de Volumen Finito, el cual puede ser considerado como un método Galerkin discontinuo de bajo orden. El uso de este método particular, en combinación con una técnica de descomposición de operadores, fue reportado por primera vez por Tyson y col. (2000) para la simulación de un modelo de movimiento de células; y recientemente, Epshteyn (2009) utilizó discretizaciones discontinuas de alto orden. Zhu y col. (2009) presentan un nuevo método discontinuo para problemas de biología del desarrollo.

El método *Local Discontinuous Galerkin* (LDG), originalmente propuesto por Cockburn y Shu (1998), para problemas transitorios no lineales de convección-difusión; es otro ejemplo de métodos Galerkin discontinuo. Si bien es cierto, el método ha sido analizado teóricamente para una extensa variedad de problemas, muy poco se sabe sobre su desempeño en problemas de difusión con reacción no lineal. El interés particular de este método es motivado por la comparación realizada por Castillo (2002) para un problema elíptico modelo, donde se mostró la superioridad en estabilidad y precisión de dicho método en comparación a otros métodos Galerkin discontinuo similares.

El propósito del presente trabajo es el de realizar un estudio de la precisión numérica del método LDG aplicado a sistemas no lineales de reacción-difusión Ec. (1). El operador de difusión es discretizado espacialmente usando a) la versión *original* del método LDG presentado en Castillo y col. (2001) y b) una versión más reciente, conocida como LDG de mínima disipación (MD-LDG), analizada en Cockburn y Dong (2007). Para la discretización temporal se consideran dos técnicas conceptualmente diferentes: método Implícito-Explícito (IMEX) y métodos de descomposición de operadores. Ambas permiten de forma natural, en combinación con discretizaciones espaciales discontinuas, desacoplar los términos de difusión y reacción; además al no imponer ningún tipo de continuidad, el término de reacción puede ser calculado como pequeños sistemas independientes de ecuaciones diferenciales ordinarias, uno por cada celda; lo cual es ideal para el cálculo en paralelo. Una comparación exhaustiva de todas las técnicas de integración en tiempo sería imposible de llevar a cabo, sin embargo los autores no conocen ningún trabajo donde se comparen ambas discretizaciones espaciales, en particular la de mínima disipación, así como las temporales.

Para realizar este estudio comparativo se diseñó

un marco computacional de alto orden para sistemas de difusión y reacción no lineal en dominios bidimensionales y número arbitrario de especies. Este marco implementa de manera unificada ambas versiones del método LDG en mallas conformes no estructuradas con celdas triangulares.

El artículo está organizado como sigue. En las secciones 2 y 3 se describen, brevemente, el método LDG aplicado a un problema escalar no lineal y las técnicas de integración en tiempo usadas en nuestro estudio. La sección 4 se concentra en experimentos numéricos y en la sección 1 se discuten los hallazgos.

2. Métodos LDG

Aplicando el esquema de líneas y utilizando la discretización espacial del método LDG, se obtiene un problema continuo en tiempo. Por simplicidad, se describe el proceso de semi-discretización para el siguiente problema escalar de reacción-difusión en 2D:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \sigma \Delta c - r(c) = 0, \quad \forall (x, t) \in \Omega \times (0, T], \quad (2)$$

$$c(0, x) = c_0(x), \quad \forall x \in \Omega, \quad (3)$$

$$\sigma \nabla c \cdot n = 0, \quad \forall (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T]. \quad (4)$$

Se asumirá que el coeficiente de difusión σ es constante en todo el dominio. Siguiendo el procedimiento estándar de introducir una variable auxiliar $\mathbf{q} = -\sigma \nabla c$, se obtiene el siguiente sistema

$$\sigma^{-1} \mathbf{q} + \nabla c = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \circ \mathbf{q} - r(c) = 0. \quad (6)$$

Se denota por $\mathbb{P}_p(T)$, el espacio de polinomios restringidos a la celda T ; de grado máximo $p \geq 1$, el cual puede variar en cada celda. Las funciones $c(\cdot, t)$ y $\mathbf{q}(\cdot, t)$ son aproximadas por $c_h(\cdot, t) \in \mathbb{P}_p(T)$ y $\mathbf{q}_h(\cdot, t) \in \mathbb{P}_p(T)^2$ respectivamente. Multiplicando por funciones de prueba $(\mathbf{v}(\cdot, t), w(\cdot, t)) \in \mathbb{P}_p(T)^2 \times \mathbb{P}_p(T)$ el problema de elemento finito en la celda T se escribe

$$\int_T \sigma^{-1} \mathbf{q}_h \cdot \mathbf{v} + \oint_{\partial T} \widehat{c}_h \mathbf{v} \cdot \vec{n}_T - \int_T c_h \nabla \circ \mathbf{v} = 0, \quad (7)$$

$$\int_T w \frac{\partial c_h}{\partial t} + \oint_{\partial T} w \widehat{\mathbf{q}}_h \cdot \vec{n}_T - \int_T \mathbf{q}_h \cdot \nabla w + \oint_{\partial T} w s(c_h) \cdot \vec{n}_T - \int_T w r(c_h) = 0, \quad (8)$$

donde los flujos numéricos \widehat{c}_h y $\widehat{\mathbf{q}}_h$ son aproximaciones respectivamente de c y \mathbf{q} en la frontera, ∂T , de la

celda T ; y $s(\cdot)$ es un término de estabilización, el cual se define en la Ec. (10) y básicamente garantiza la existencia y unicidad del problema discreto, Castillo y col. (2000). Sea e una arista compartida por las celdas T_1 y T_2 ; se denota por c_h^i y \mathbf{q}_h^i la aproximación de c y \mathbf{q} , respectivamente, sobre la celda T_i . En la arista e , los flujos numéricos son definidos como la combinación convexa de los valores de c_h y \mathbf{q}_h en las celdas T_1 and T_2 :

$$\widehat{c}_h = (1 - \beta_e) c_h^1 + \beta_e c_h^2 \quad \text{y} \quad \widehat{\mathbf{q}}_h = \beta_e \mathbf{q}_h^1 + (1 - \beta_e) \mathbf{q}_h^2, \quad (9)$$

donde β_e es un parámetro que depende de la arista. Sobre la frontera, simplemente se define $\widehat{c}_h = c_h$ y $\widehat{\mathbf{q}}_h \cdot \vec{n}_T = \mathbf{q}_h \cdot \vec{n}_T = 0$. En la celda T_1 , el término de estabilización se define

$$s(c_h) = \frac{\eta_e}{h_e} (c_h^1 - c_h^2) \vec{n}_T \quad (10)$$

donde η_e es el parámetro de estabilización, el cual es positivo y depende de cada arista. El análisis teórico de este parámetro se discutió a fondo en Castillo y col. (2000) y en Perugia y Schötzau (2002). Mientras que la influencia del parámetro β_e fue discutida en Cockburn y col. (2001) para mallas Cartesianas y en Castillo (2010a) para mallas no estructuradas. El análisis de error *a priori*, para las versiones h y hp del método LDG, aplicado a un problema transitorio lineal de convección difusión en una dimensión fue presentado en Castillo (2000) y en, Castillo y col. (2001) respectivamente. Cockburn y Dawson (2000) analizaron el caso multidimensional.

El problema discreto se reduce a un sistema no lineal de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya forma es la siguiente

$$D\mathbf{Q}_h + B_1 C_h = 0, \quad (11)$$

$$M \frac{dC_h}{dt} + B_2 \mathbf{Q}_h + S_\eta C_h - \mathcal{R}_h(C_h) = 0. \quad (12)$$

Usando la definición particular de los flujos numéricos, Ec. (9), mediante un simple cálculo se tiene $B_2 = -B_1^T$, véase Castillo y col. (2000) para una descripción detallada de la forma bilineal. Es importante resaltar que la matriz D es diagonal por bloques; por lo que, contrario a lo mencionado en Zhu y col. (2009), la variable auxiliar \mathbf{Q}_h no se requiere en la implementación. Finalmente, escribiendo $B_1 = B_\beta$ se obtiene un sistema reducido el cual involucra **solamente** la variable C_h :

$$M \frac{dC_h}{dt} - \Delta_h^{LDG} C_h - \mathcal{R}_h(C_h) = 0$$

donde $-\Delta_h^{LDG} = S_\eta + B_\beta^T D^{-1} B_\beta$. (13)

Recientemente, Castillo y Sequeira (2013), presentaron un procedimiento de ensamblado rápido y completamente local para $-\Delta_h^{LDG}$, el cual no requiere del almacenamiento de ninguna de las matrices globales B_β , D^{-1} y S_η . Este procedimiento también ha sido utilizado en Alvarado y Castillo (2016) para el operador *rot - rot*. Otros detalles sobre la implementación del método LDG han sido discutidas en Castillo (2010a), donde se realizó una descripción detallada de estructuras de datos eficientes para la implementación de un código *h*-adaptativo usando mallas no conformes con un número arbitrario, pero fijo, de nodos colgantes; y en Castillo (2010b), donde se propusieron algunas heurísticas para su reducción en el caso de difusión isotrópica.

2.1. LDG de disipación mínima

En problemas transitorios, el término de estabilización del LDG y métodos discontinuos similares, produce más disipación numérica de la necesaria, lo cual podría deteriorar la precisión del método. Para evitar este problema, o por lo menos minimizarlo, Cockburn y Dong (2007) analizaron una modificación de la versión original del LDG conocida como *Minimal Dissipation-LDG* (MD-LDG). Eligiendo β de forma apropiada, la estabilización se impone, únicamente, en un subconjunto de aristas de frontera. Curiosamente, para un problema con condiciones de frontera de flujo nulo, lo cual ocurre frecuentemente en los modelos que nos interesan, la estabilización puede ser **completamente** eliminada. En este caso particular, la discretización del operador Laplaciano se reduce a

$$-\Delta_h^{mdLDG} = B_\beta^T D^{-1} B_\beta. \quad (14)$$

Además, esta selección particular del parámetro β también puede reducir la conectividad de las celdas en el caso de difusión isotrópica; esto se analizó en Castillo (2010a).

3. Integración en tiempo

A continuación se describen brevemente las ideas generales de las dos técnicas de discretización en

tiempo que se consideran en este estudio: método de descomposición de operadores y métodos IMEX.

3.1. Métodos de descomposición de operador

La idea básica de los métodos de descomposición de operadores, o métodos fraccionarios, Marchuk (1968) y Strang (1968), consiste en dividir un paso en tiempo en una secuencia de varios sub-pasos cada uno relacionado, normalmente, a un proceso físico subyacente: advección, difusión, reacción, etc; y luego, aplicar la técnica numérica de integración en tiempo que sea la “*más conveniente*” para cada paso intermedio. Por ejemplo, Tyson y col. (2000) aplicaron esta técnica combinada con el método de Volumen Finito a un modelo de movimiento de células. Por lo general estos métodos tienen una precisión temporal de segundo orden. Recientemente, nuevos esquemas de alto orden fueron propuestos por Jia y Li (2011).

La motivación principal para el uso de este tipo de esquemas en tiempo en combinación con una discretización espacial discontinua, es que se puede desacoplar la difusión de la reacción. Puesto que los métodos Galerkin discontinuos no imponen continuidad entre celdas, la reacción se reduce a un conjunto de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de menor tamaño, uno por cada celda; por lo que no se tiene que resolver un sistema no lineal global, lo cual resultaría muy costoso.

Si se denota por $S_{\{\tau, t_*\}}^1(\cdot)$ un esquema discreto que avanza de t_* a $t_* + \tau$; un método de descomposición en tiempo con p pasos intermedios, se puede esquematizar de la siguiente manera

$$u^{n+1} = S_{\{\tau_p, t_p\}}^p \circ \dots \circ S_{\{\tau_1, t_1\}}^1(u^n). \quad (15)$$

En este estudio, se consideran los siguientes métodos de descomposición de operadores:

- a) OS-SS: descomposición simétrica de Strang (1968), la cual puede ser escrita como

$$u^{n+1} = S_{\{\tau/2, t_n\}}^1 \circ S_{\{\tau, t_n\}}^2 \circ S_{\{\tau/2, t_n\}}^1(u^n), \quad (16)$$

donde $S_{\{\tau, t_*\}}^1$ es el método del trapecio implícito y $S_{\{\tau, t_*\}}^2$ el de tipo explícito.

- b) OS-TR: descomposición trapezoidal propuesta por Hundsdorfer (1998),

$$u^{n+1} = S_{\{\tau/2, t_n\}}^3 \circ S_{\{\tau, t_n\}}^2 \circ S_{\{\tau/2, t_n\}}^1(u^n), \quad (17)$$

donde $S_{(\tau,t_n)}^1$ y $S_{(\tau,t_n)}^3$ son los pasos de Euler explícito e implícito, respectivamente; y $S_{(\tau,t_n)}^2$ es el método del trapecio implícito.

3.2. Métodos IMEX

A diferencia de la técnica de descomposición de operadores, los métodos implícito-explícito (IMEX) combinan, en un mismo paso de tiempo, una discretización implícita para la parte rígida y otra explícita para la no rígida. Ruuth (1995) analizó varios esquemas IMEX combinados con diferencias finitas y métodos pseudo-espectrales para la discretización espacial; y esquemas de paso múltiple del tipo “Backward Differentiation Formulas” (BDF), para la parte rígida; Ascher y col. (1997) desarrollaron métodos IMEX de tipo Runge-Kutta con mayor región de estabilidad que la de algunos métodos IMEX de paso múltiple.

La literatura sobre el análisis de los métodos IMEX combinado con discretizaciones espaciales discontinuas es bastante escasa. En Hundsdorfer y Jaffré (2003) un esquema Galerkin discontinuo usando polinomios de primer grado acoplado a un método BDF de segundo orden fue analizado para la ecuación de convección-reacción en una dimensión. En Kavnesky y col. (2007) se demostró, numéricamente, que los métodos Runge-Kutta IMEX combinados con discretizaciones Galerkin discontinuas son más eficientes que los métodos Runge-Kutta explícitos.

En nuestro estudio se consideran dos métodos IMEX de segundo orden:

- a) IMEX-RK2: presentado en Ascher y col. (1997) como el IMEX de punto medio (1, 2, 2).

- b) IMEX-BDF2: presentado en Ruuth (1995); Ascher y col. (1997) como 2-SBDF.

En ambos métodos el operador de difusión se considera de manera implícita y la reacción de manera explícita.

4. Experimentos numéricos

Se denota por LDG-0, el método LDG para el cual $\beta_e = 0,5$ en todas las aristas interiores. Esto produce la mayor conectividad, la cual incluye los vecinos inmediatos de una celda así como un segundo nivel de celdas formado por los vecinos inmediatos de las celdas del primer nivel. Además se considera el caso de un flujo direccional: sea e una arista compartida por las celdas T_1 y T_2 . Dado un vector dirección \vec{d} , se define $\beta_e = 0$ ($\bar{c}_h = c_h^1$) si $\vec{n}_T \cdot \vec{d} > 0$ y $\beta_e = 1$ ($\bar{c}_h = c_h^2$) en caso contrario. En particular se denotarán por LDG-1 y MDLDG-1, los métodos LDG y MD-LDG respectivamente, donde $\vec{d} = (-1, 1)^T$. Esta dirección produce conectividad mínima en las mallas utilizadas. Las mallas para el ejemplo de la sección 4.1 se construyeron por refinamiento global, partiendo de la malla inicial m_0^A de la Fig. 1, con dos triángulos. La malla m_i^A tiene 2×4^i celdas y el diámetro de cada celda es $h_{max}^i = \sqrt{2} \times 2^{-i}$. Los cálculos se realizaron con las mallas m_5^A hasta m_8^A . Las de la sección 4.2 se generaron a partir de las mallas, m_0^A , m_0^B y m_0^C , ilustradas en la Fig. 1, para los modelos de: a) Fisher, b) Schnakenberg y c) pigmentación, respectivamente. El diámetro de la malla m_i^B es $h_{max}^i = 0,5 \times 2^{-i}$; y el de la malla m_i^C es $h_{max}^i = 40,0 \times 2^{-i}$.

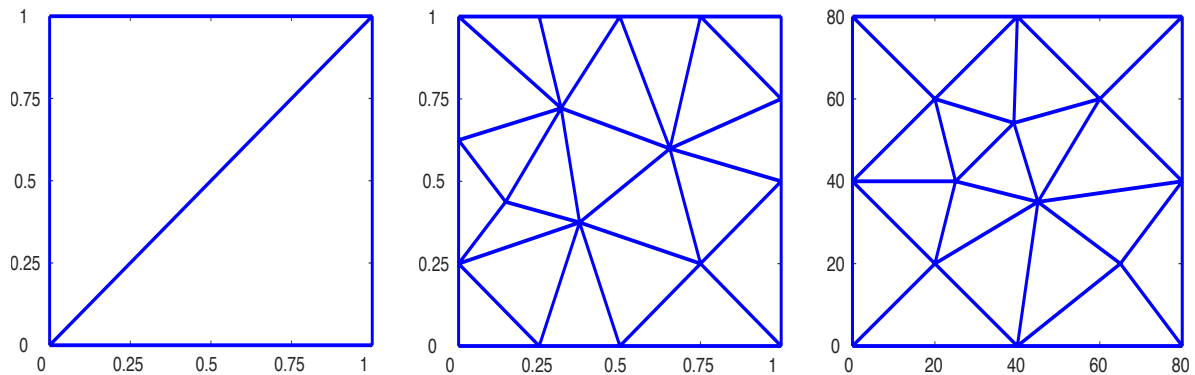


Fig. 1: De izquierda a derecha, mallas iniciales m_0^A , m_0^B y m_0^C , respectivamente.

Los esquemas implícitos utilizados para el término de reacción, sistemas no lineales locales, se resuelven mediante la iteración clásica de Newton. Además puesto que estos sistemas son de dimensión pequeña, se utilizó el método de Eliminación Gaussiana en cada iteración de Newton. En todos los esquemas, para el cálculo de la parte rígida, operador de difusión global, se utilizó el método iterativo del Gradiente Conjugado. Los cálculos fueron realizados en una laptop de 8Gb de RAM, CPU Intel(R) Core(TM) i7-2670QM de 2.20GHz. Nuestro software fue compilado con gcc versión 4.8.4 en ambiente Linux Mint Debian 2.

4.1. Reacción lineal

Se considera el problema escalar lineal $\frac{\partial c}{\partial t} - \sigma \Delta c - \lambda c = 0$, en $\Omega \times [0, 1]$; con condiciones iniciales, $c(x, y, 0) = \cos(\pi x) \cos(\pi y)$ y condiciones de frontera de flujo nulo. El dominio espacial es $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ y $\sigma = 1/(2\pi^2)$. La solución exacta para este ejemplo es $c(x, y, t) = e^{(\lambda - 2\pi^2 \sigma)t} \cos(\pi x) \cos(\pi y)$.

4.1.1. Precisión y decaimiento de la concentración

Se estudia el efecto, en la precisión, del término, λ , que controla el decaimiento de la concentración. En las Tablas (1) y (2) se muestra el comportamiento del error L^2 en el tiempo final $T = 1,0$ y aproximaciones de primer grado, para $\lambda = -1,0$ (decaimiento rápido) y $\lambda = 0,9$ (decaimiento lento), respectivamente. El incremento en el paso de tiempo

fue, el máximo posible, $\tau \approx 11h_{min}$. Para ambos tipos de reacción, todos los métodos convergen en tiempo con el orden esperado, 2. Sin embargo se observa una diferencia sustancial en la precisión. En particular, para decaimientos lentos, los métodos IMEX son considerablemente más precisos que los métodos de descomposición. Esto se debe a que, en los métodos de descomposición, el paso de reacción aleja considerablemente la solución del equilibrio. Un comportamiento similar fue reportado recientemente en Hundsdorfer y Verwer (2013).

4.1.2. Aproximaciones espaciales de alto orden

A continuación se ilustra la ventaja de las aproximaciones de alto orden para problemas cuya solución es de suficiente regularidad. En la Tabla (3) se muestra la malla y grado para los cuales se obtuvo un error L^2 de aproximadamente 10^{-6} . Los tiempos de ejecución correspondientes, presentados en la Tabla (4), evidencian la superioridad del uso de alto orden; menor cantidad de grados de libertad sin sacrificar precisión. Cabe resaltar que a pesar de haber escogido un incremento en tiempo τ de orden menor o igual a $O(h^{(p+1)/2})$ para coincidir con el orden de la discretización espacial, el costo computacional es muchísimo menor para aproximaciones de alto orden. Experimentos donde se muestra orden óptimo de $p + 1$, en la variable espacial, cuando se utilizan aproximaciones de grado p fueron realizados en Henríquez (2013).

Tabla 1: Reacción lineal con decaimiento rápido: $\lambda = -1,0$

	OS-SS		OS-TR		IMEX-BDF2		IMEX-RK2	
	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa
MDLDG-1	3.78e-03	-	2.62e-03	-	3.23e-02	-	1.23e-02	-
	7.60e-04	2.31	4.90e-04	2.42	7.64e-03	2.08	2.06e-03	2.58
	1.70e-04	2.16	1.04e-04	2.24	1.72e-03	2.15	4.24e-04	2.28
	4.03e-05	2.08	2.38e-05	2.13	3.93e-04	2.13	9.64e-05	2.14
LDG-1	3.76e-03	-	2.59e-03	-	3.23e-02	-	1.23e-02	-
	7.54e-04	2.32	4.84e-04	2.42	7.64e-03	2.08	2.06e-03	2.58
	1.69e-04	2.16	1.03e-04	2.24	1.72e-03	2.15	4.23e-04	2.28
	4.00e-05	2.08	2.34e-05	2.13	3.93e-04	2.13	9.61e-05	2.14
LDG-0	3.73e-03	-	2.57e-03	-	3.23e-02	-	1.23e-02	-
	7.48e-04	2.32	4.78e-04	2.43	7.63e-03	2.08	2.05e-03	2.58
	1.67e-04	2.16	1.01e-04	2.24	1.72e-03	2.15	4.21e-04	2.28
	3.96e-05	2.08	2.30e-05	2.13	3.92e-04	2.13	9.57e-05	2.14

Tabla 2: Reacción lineal con decaimiento lento: $\lambda = 0,9$

	OS-SS		OS-TR		IMEX-BDF2		IMEX-RK2	
	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa	$\ c - c_h\ _0$	Tasa
MDLDG-1	1.23e-02	-	1.95e-02	-	7.65e-04	-	6.44e-04	-
	3.53e-03	1.80	5.30e-03	1.88	2.51e-04	1.61	1.72e-04	1.90
	9.47e-04	1.90	1.39e-03	1.93	7.25e-05	1.79	4.48e-05	1.94
	2.45e-04	1.95	3.56e-04	1.96	1.93e-05	1.91	1.15e-05	1.97
LDG-1	1.24e-02	-	1.96e-02	-	8.77e-04	-	7.04e-04	-
	3.57e-03	1.80	5.34e-03	1.88	2.81e-04	1.64	1.84e-04	1.94
	9.56e-04	1.90	1.40e-03	1.93	8.02e-05	1.81	4.71e-05	1.96
	2.48e-04	1.95	3.58e-04	1.97	2.12e-05	1.92	1.20e-05	1.98
LDG-0	1.26e-02	-	1.98e-02	-	1.03e-03	-	8.03e-04	-
	3.61e-03	1.80	5.38e-03	1.88	3.20e-04	1.69	2.06e-04	1.97
	9.67e-04	1.90	1.41e-03	1.93	9.02e-05	1.83	5.21e-05	1.98
	2.50e-04	1.95	3.61e-04	1.97	2.37e-05	1.93	1.31e-05	1.99

Tabla 3: Error L^2 para aproximaciones espaciales de grado $p = 1, 2, 3, 4$ con $\lambda = -1,0$.

	grados de libertad	$(p = 1, m_8)$	$(p = 2, m_5)$	$(p = 3, m_3)$	$(p = 4, m_2)$
		393216	12288	1280	480
MDLDG-1	OS-SS	1.06e-06	8.57e-07	2.34e-06	2.68e-06
	OS-TR	1.06e-06	8.57e-07	2.34e-06	2.68e-06
	IMEX-BDF2	1.03e-06	1.02e-06	2.40e-06	2.73e-06
	IMEX-RK2	1.03e-06	8.66e-07	2.34e-06	2.68e-06
LDG1	OS-SS	1.15e-06	8.02e-07	2.24e-06	2.61e-06
	OS-TR	1.15e-06	8.01e-07	2.24e-06	2.61e-06
	IMEX-BDF2	9.55e-07	9.72e-07	2.30e-06	2.67e-06
	IMEX-RK2	1.09e-06	8.10e-07	2.24e-06	2.61e-06
LDG0	OS-SS	1.40e-06	6.06e-07	2.12e-06	2.48e-06
	OS-TR	1.42e-06	6.05e-07	2.12e-06	2.48e-06
	IMEX-BDF2	1.07e-06	8.16e-07	2.19e-06	2.54e-06
	IMEX-RK2	1.34e-06	6.17e-07	2.13e-06	2.48e-06

4.1.3. Reacción lineal rígida

En muchos fenómenos físicos, las reacciones químicas se realizan a escalas de tiempo muy distintas por lo que el término de reacción es rígido, lo cual dificulta su simulación numérica. De ahí nuestro interés en comparar el desempeño de las dos técnicas de integración en tiempo.

Un análisis de estabilidad lineal, en la norma L^2 , muestra que la matriz de amplificación de un método de descomposición de operadores se reduce a la multiplicación de los factores de amplificación de los pasos intermedios. Sean $A_{\mathcal{R}}$ y $A_{\mathcal{D}}$ las matrices de amplificación de los pasos de reacción y difusión respectivamente del método OS-SS. Puesto que la

discretización espacial es discontinua, el paso de reacción se reduce a un sistema desacoplado de ecuaciones diferenciales ordinarias, por lo tanto

$$A_{\mathcal{D}} = \left(I - \frac{\tau}{4} M^{-1} \Delta_h \right)^{-1} \left(I + \frac{\tau}{4} M^{-1} \Delta_h \right) \quad \text{y}$$

$$A_{\mathcal{R}} = \left(1 + \lambda\tau + \frac{(\lambda\tau)^2}{2} \right) I \quad (18)$$

Así, la matriz de amplificación

$$A_{OS-SS} = \left(1 + \lambda\tau + \frac{(\lambda\tau)^2}{2} \right) \left(\left(I - \frac{\tau}{4} M^{-1} \Delta_h \right)^{-1} \left(I + \frac{\tau}{4} M^{-1} \Delta_h \right) \right)^2 \quad (19)$$

Tabla 4: Tiempos de ejecución (en segundos) para aproximaciones espaciales de grado $p = 1, 2, 3, 4$ con $\lambda = -1, 0$.

grados de libertad		$(p = 1, m_8)$	$(p = 2, m_5)$	$(p = 3, m_3)$	$(p = 4, m_2)$
		393216	12288	1280	480
MDLDG-1	OS-SS	9559.21	114.46	8.81	4.64
	OS-TR	7533.34	81.20	5.01	2.50
	IMEX-BDF2	8191.24	82.07	4.68	2.31
	IMEX-RK2	7833.75	83.25	5.14	2.54
LDG-1	OS-SS	10085.30	121.24	8.45	4.76
	OS-TR	7906.39	84.93	4.64	2.50
	IMEX-BDF2	8617.79	84.22	4.50	2.51
	IMEX-RK2	8219.29	86.44	4.85	2.51
LDG-0	OS-SS	10093.60	143.57	8.71	4.08
	OS-TR	7631.87	94.01	5.77	2.71
	IMEX-BDF2	8583.81	92.94	5.33	2.47
	IMEX-RK2	8063.98	96.00	5.79	2.74

Tabla 5: Reacción lineal rígida: $\lambda = -10, \sigma = 1/(2\pi^2)$

	IMEX-BDF2	IMEX-RK2	Reacción explícita		Reacción implícita	
			OS-SS	OS-TR	OS-SS	OS-TR
Malla de 2048 celdas						
MDLDG-1	4.879e+00	3.369e+00	1.279e+00	1.274e+00	1.960e-05	1.949e-05
LDG-1	4.877e+00	3.369e+00	1.277e+00	1.272e+00	1.957e-05	1.946e-05
LDG-0	4.875e+00	3.368e+00	1.276e+00	1.270e+00	1.953e-05	1.942e-05
Malla de 8192 celdas						
MDLDG-1	4.882e+00	3.369e+00	1.280e+00	1.275e+00	1.964e-05	1.953e-05
LDG-1	4.881e+00	3.369e+00	1.280e+00	1.275e+00	1.963e-05	1.952e-05
LDG-0	4.881e+00	3.369e+00	1.280e+00	1.275e+00	1.962e-05	1.951e-05

Es claro que una condición suficiente para la A-estabilidad es que el radio espectral de A_{OS-SS} satisfaga $\rho(A_{OS-SS}) \leq 1$. Por lo tanto, el tamaño del incremento en tiempo estará limitado por las restricciones de estabilidad impuestas por el método de integración del término de reacción. Sin embargo, una ventaja del método de descomposición de operadores, sobre los IMEX, en combinación con una discretización espacial discontinua, es que el primero permite el uso de un método más apropiado (implícito) para el término de reacción. Esto se ilustra en el siguiente ejemplo, donde se considera el método del trapecoide implícito para ambos métodos: OS-SS y OS-TR. Nótese que la matriz de amplificación de este método es

$$\begin{pmatrix} 2 + \tau\lambda \\ 2 - \tau\lambda \end{pmatrix} I$$

Para $\lambda = -10$, la propiedad de A-estabilidad del

trapecoide explícito requiere que $\tau \in (0, 0.2)$. En la Tabla 5 se muestra el error L^2 en el tiempo final $T = 1, 0$, para $\tau = 0.25$, valor que viola la condición de estabilidad absoluta. A diferencia de los esquemas que avanzan en tiempo de manera implícita (en la reacción), todos los que utilizan una técnica explícita para la reacción son inestables.

Nótese que el uso de una discretización implícita para la reacción en un método IMEX, carece de sentido, ya que convertiría este método en uno completamente implícito que es lo que precisamente se está evitando.

4.2. Reacción no lineal

En esta sección se consideran tres modelos de reacción no lineal, en $\Omega \times [0, 1]$ y condiciones de borde de flujo nulo:

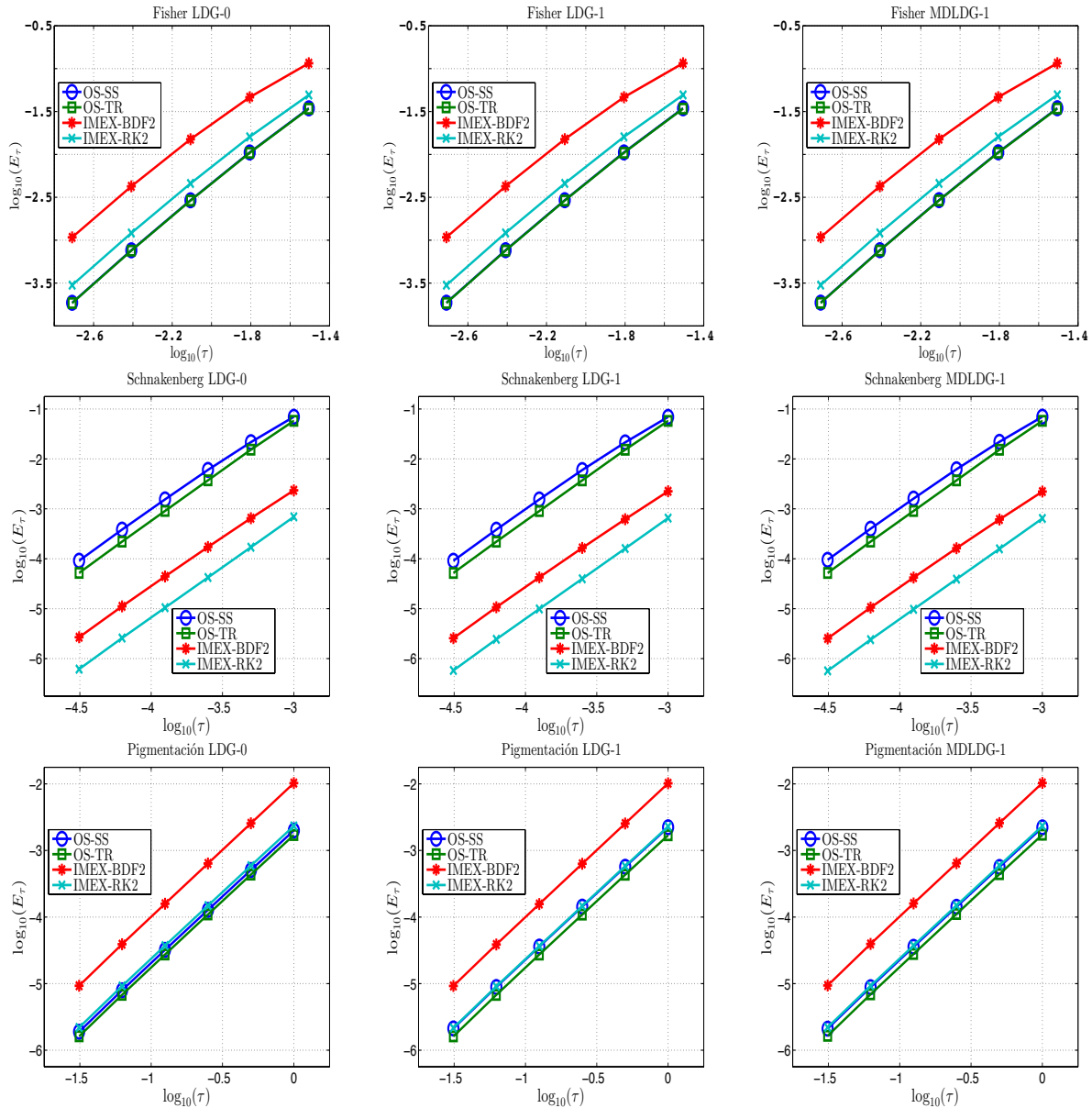


Fig. 2: Precisión en tiempo, por filas, modelo de Fisher, de Schnakenberg y de pigmentación.

1. Modelo escalar de Fisher (1937):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \sigma \Delta c + \lambda c(1 - c),$$

con $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$, y condiciones iniciales $c(x, y, 0) = 10^{-2}e^{-500((x-1/2)^2+(y-1/2)^2)}$, $\sigma = 10^{-3}$ y $\lambda = 20$.

2. Modelo de Schnakenberg (1979):

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \Delta c_1 \\ \sigma_2 \Delta c_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \kappa(a - c_1 + c_1^2 c_2) \\ \kappa(b - c_1^2 c_2) \end{pmatrix},$$

con $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$. Se utilizó la siguiente configuración de parámetros $(\sigma_1, \sigma_2) = (0,05, 1,0)$, $\kappa = 100$ y $(a, b) = (0,1305, 0,7695)$; y la misma condición inicial utilizada en Zhu y

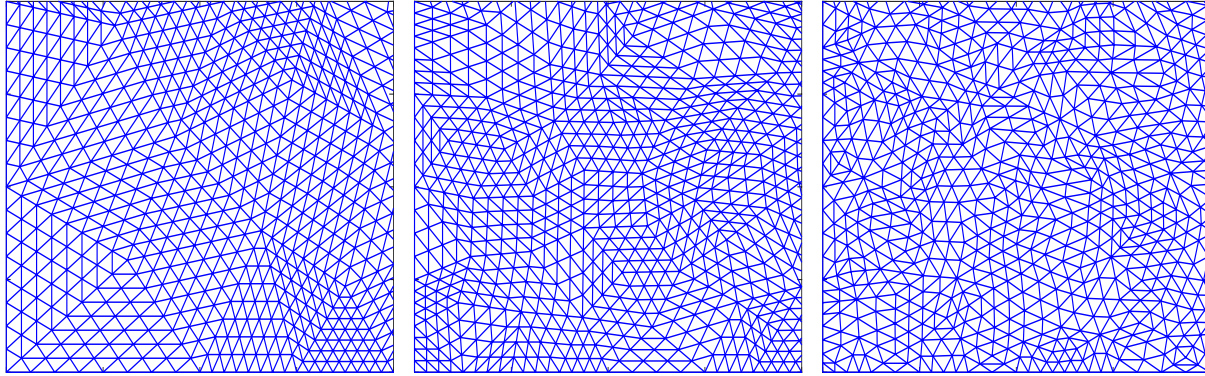


Fig. 3: Zoom de la malla en $(0, 20) \times (0, 20)$.

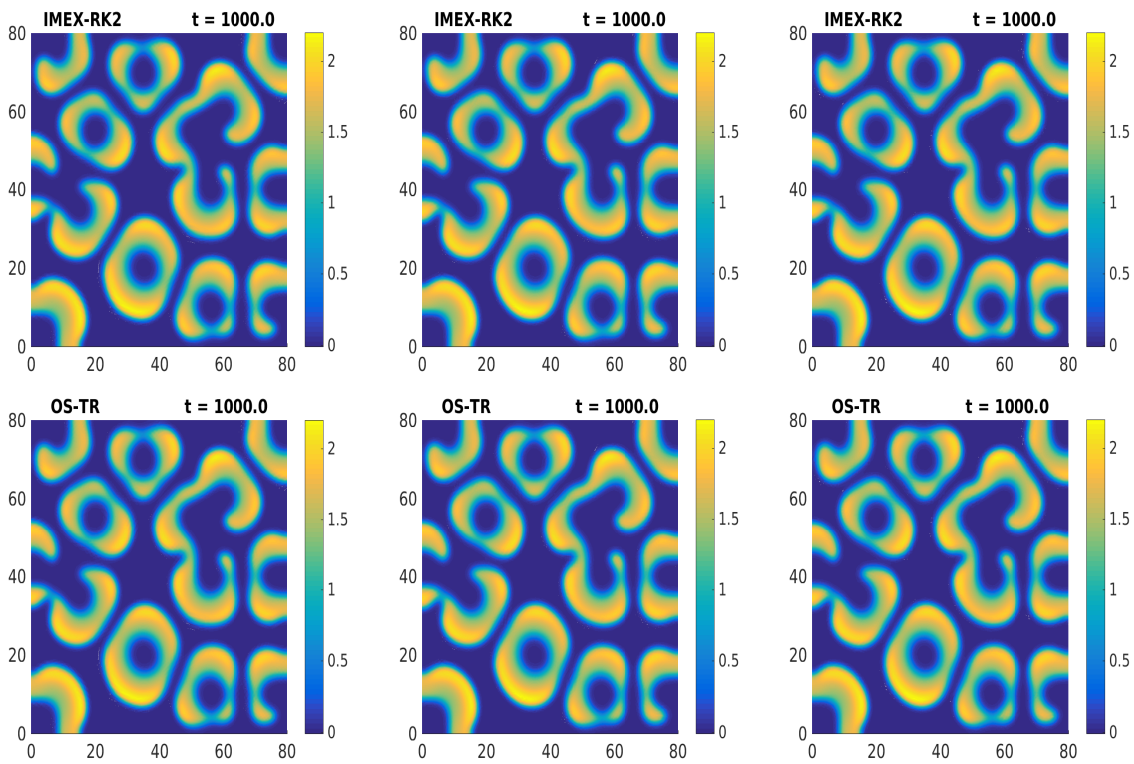


Fig. 4: Distribución del morfógeno $c_1(x, y, T)$ del modelo de pigmentación para $T = 1000,0$.

col. (2009):

$$c_1(0, x) = a + b + 10^{-3} \exp(-100((x_0 - 1/3)^2 + (x_1 - 1/2)^2))$$

$$c_2(0, x) = \frac{b}{(a + b)^2}$$

Meinhardt (1994):

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \Delta c_1 \\ \sigma_2 \Delta c_2 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \rho_1 \left(\frac{\rho_2 c_1^2 c_2}{1 + \kappa_1 c_1^2} - c_1 \right) \\ \frac{\beta_2}{1 + \kappa_2 c_3} + \frac{\rho_2 c_1^2 c_2}{1 + \kappa_1 c_1^2} - \mu_2 c_2 \\ \rho_3 \frac{c_3^2}{1 + \kappa_3 c_3^2} - \mu_3 c_3 + \beta_3 c_1 \end{pmatrix},$$

3. Modelo de pigmentación de piel, Koch y

con $\Omega = (0, 80) \times (0, 80)$.

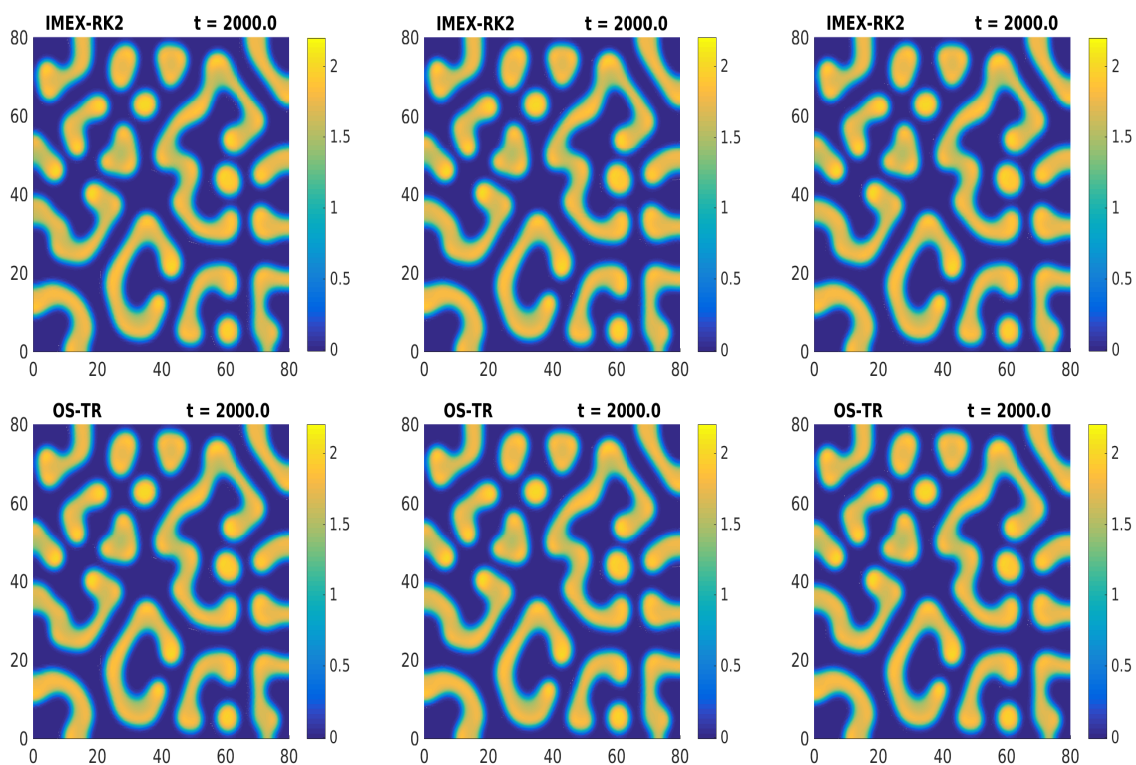


Fig. 5: Distribución del morfógeno $c_1(x, y, T)$ del modelo de pigmentación para $T = 2000,0$.

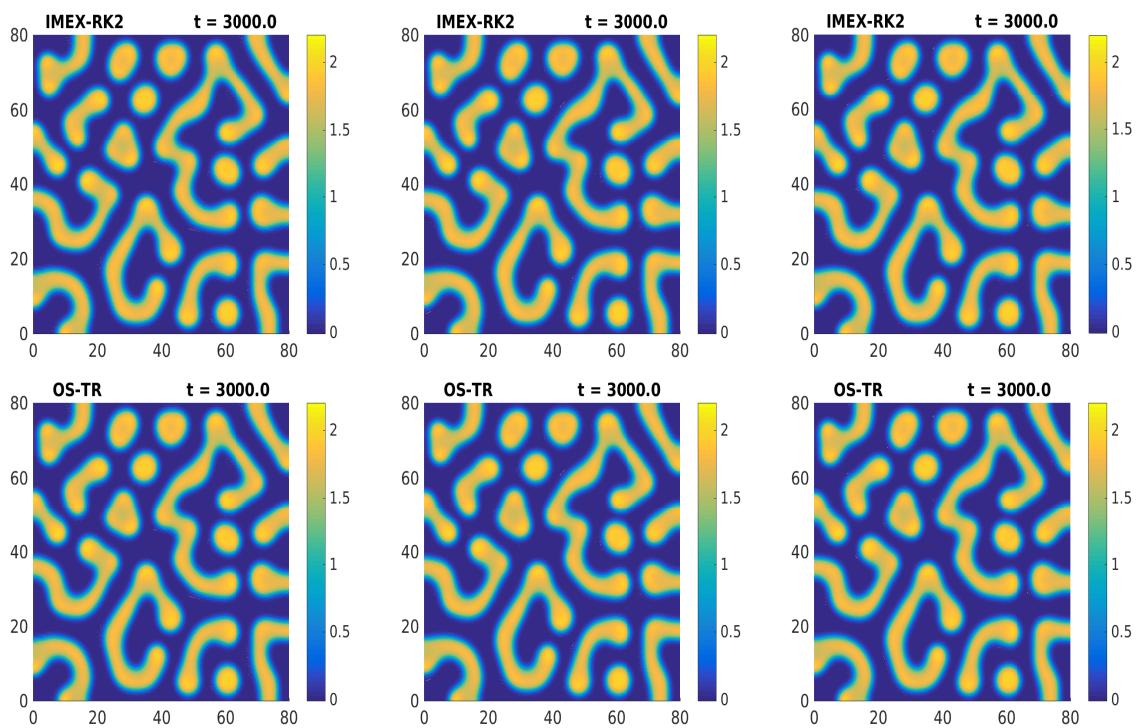


Fig. 6. Distribución del morfógeno $c_1(x, y, T)$ del modelo de pigmentación para $T = 3000,0$.

Los siguientes parámetros, obtenidos de Koch y Meinhardt (1994), fueron utilizados: $(\sigma_1, \sigma_2) = (0,015, 0,03)$, $(\rho_1, \rho_2, \rho_3) = (0,025, 0,0025, 0,03)$, $(\mu_2, \mu_3) = (0,00075, 0,003)$, $(\sigma_2, \sigma_3) = (0,00225, 0,00015)$ y $(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3) = (0,1, 20,0, 22,0)$. Las condiciones iniciales son $c_1 = 0$, $c_2 = 3$ y $c_3 = 0$ en todas partes, excepto en ciertos puntos aleatorios donde $c_1 = 5$.

El comportamiento del error en el tiempo final $T = 1$, para diferentes incrementos de tiempo τ , se muestra en la Fig. 2. Para la discretización espacial se consideró aproximaciones de grado 1. Puesto que en ninguno de estos ejemplos se conoce la solución exacta, se consideró como solución exacta la obtenida con un incremento en tiempo τ^* suficientemente pequeño. Nótese que para cada técnica de integración en tiempo y para todas las discretizaciones en espacio, se obtuvo la tasa de convergencia óptima de orden 2 en tiempo. Sin embargo se observa diferencias en cuanto a la precisión. Un comportamiento similar fue reportado en Henríquez (2013) para aproximaciones espaciales de alto orden.

En las Figuras 4, 5 y 6. presentamos las soluciones obtenidas en distintas mallas del dominio $\Omega = (0, 80) \times (0, 80)$ y en distintos tiempos, $T = 1000,0$, $2000,0$ y $3000,0$; para el modelo de pigmentación, utilizando ambas técnicas de integración en tiempo y el método MDLDG-1 como discretización espacial con polinomios de grado 1. Con el fin de mostrar la diferencia entre las mallas, en la Fig. 3 se muestra la porción de cada malla que corresponde a la zona $(0, 20) \times (0, 20)$. En ningún caso se observa una variación significativa en la solución que altere el patrón de la solución.

Conclusiones

En este trabajo se realizó, por primera vez, una comparación numérica de dos clases de técnicas particulares para integración en tiempo: descomposición de operadores y métodos IMEX; en combinación con dos variantes del método LDG para la discretización espacial. Estas fueron aplicadas a problemas de reacción-difusión tanto para reacción lineal como no lineal. Ambas técnicas en tiempo toman ventaja de la localidad que ofrecen las aproximaciones de elemento finito Galerkin discontinuo; desacoplando el término global de reacción, en un conjunto de problemas independientes

de menor tamaño; y de esta manera, evitando el resolver un sistema no lineal grande.

Independientemente de la técnica de integración utilizada, no se observa ninguna diferencia sustancial, en términos de precisión, entre el método LDG original y su variante de mínima disipación, MD-LDG. Lo cual se debe en parte, a que el problema modelo es de por sí difusivo. Sin embargo, es muy probable que en problemas con transporte dominante, el método MD-LDG sea más apropiado, eso es algo que estamos analizando. La relativa ventaja que ofrece el método MD-LDG es que, en el caso de condiciones de flujo nulo, no se requiere de la selección de un parámetro de estabilidad como lo requiere el método LDG original. Se observa que para descomposiciones basadas en procesos físicos subyacentes: reacción y difusión; los métodos de descomposición de operadores pueden ser más apropiados que los métodos IMEX ya que los primeros, permiten el uso de técnicas implícitas en el caso de reacciones rígidas, preservando el desacoplamiento de la difusión y reacción. En los métodos IMEX esto carece de sentido ya que resultaría en un sistema no lineal global, lo cual es precisamente lo que se pretende evitar. La desventaja potencial de esta técnica es quizás su bajo orden de convergencia en tiempo. Como trabajo futuro, estamos considerando explorar discretizaciones temporales de orden superior a 2, como por ejemplo las propuestas recientemente en Jia y Li (2011).

Los resultados sobre precisión obtenidos de los ejemplos de naturaleza variada: problemas lineales y no lineales; ecuaciones escalares y sistemas de ecuaciones, no permiten concluir una ventaja de una técnica particular. La precisión, por lo general, depende del problema. Además, para un esquema de discretización temporal fijo, las discretizaciones espaciales no muestran diferencia sustancial.

Finalmente es importante resaltar, la superioridad en el uso de aproximaciones de alto orden en combinación con mallas gruesas; lo cual es evidentemente favorable para aquellos problemas que poseen soluciones con alta regularidad. Por un lado se reduce el número total de grados de libertad; y además, se puede aprovechar la localidad; por ejemplo, se puede utilizar un método directo por bloques para la resolución de la parte lineal en lugar de un método iterativo el cual por lo general debe ser preconditionado para obtener un buen rendimiento.

Referencias

- Alvarado, A. y Castillo, P. (2016). Computational performance of LDG methods applied to time harmonic Maxwell equation in polyhedral domains. *Journal of Scientific Computing* 67, 453–474.
- Ascher, U.M., Ruuth, S.J., y Spiteri, R.J. (1997). Implicit-explicit Runge-Kutta methods for time-dependent partial differential equations. *Applied Numerical Mathematics* 25, 151–167.
- Castillo, P. (2000). An optimal error estimate for the Local Discontinuous Galerkin method. In B. Cockburn, G.E. Karniadakis, and C.-W. Shu, editors, *Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications*, volume 11 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 285–290. Springer Verlag.
- Castillo, P. (2002). Performance of discontinuous Galerkin methods for elliptic PDEs. *SIAM Journal of Scientific Computing* 24, 524–547.
- Castillo, P. (2010a). Stencil reduction algorithms for the Local Discontinuous Galerkin method. *International Journal of Numerical Methods in Engineering* 81, 1475–1491.
- Castillo, P. (2010b). Computational aspects of the Local Discontinuous Galerkin method for non conforming meshes in 2D. *Revista Internacional de Métodos Numéricos y Cálculos de Diseño en Ingeniería* 24, 283–303.
- Castillo, P. y Sequeira, F. (2013). Computational aspects of the Local Discontinuous Galerkin method on unstructured grids in three dimensions. *Mathematical and Computer Modelling* 57, 2279–2288.
- Castillo, P., Cockburn, B., Perugia, I. y Schötzau, D. (2000). An *a priori* error analysis of the Local Discontinuous Galerkin method for elliptic problems. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 38, 1676–1706.
- Castillo, P., Cockburn, B., Schötzau, D. y Schwab, Ch. (2001). An optimal *a priori* error estimate for the *hp*-version of the Local Discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems. *Mathematics and Computers* 71, 455–478.
- Cockburn, B. y Dawson, C. (2000). Some extensions of the Local Discontinuous Galerkin method for convection diffusion equations in multidimensions. In J. Whiteman, editor, *Proceedings of the 10th Conference on the Mathematics of Finite Elements and Applications*, pages 225–238.
- Cockburn, B. y Dong, B. (2007). An analysis of the minimal dissipation Local Discontinuous Galerkin method for convection diffusion problems. *SIAM Journal of Scientific Computing* 32, 233–262.
- Cockburn, B. y Shu, C.W. (1998). The Local Discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 35, 2440–2463.
- Cockburn, B., Kanschat, G., Perugia, I. y Schötzau, D. (2001). Superconvergence of the Local Discontinuous Galerkin method for elliptic problems on Cartesian grids. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 39, 264–285.
- Epshteyn, Y. (2009). Discontinuous Galerkin methods for the chemotaxis and haptotaxis models. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 224, 168 – 181.
- Fisher, R.A. (1937). The wave of advance of advantageous genes. *Annals of Eugenics* 7, 355–369, 1937.
- Henríquez, I. (2013). Aplicaciones del método LDG a sistemas químicos y biológicos con estructuras de Turing. Master's thesis, Universidad de Puerto Rico at Mayagüez.
- Hundsdorfer, W. (1998). Trapezoidal and midpoint splittings for initial-boundary value problems. *Mathematics and Computers* 67, 1047–1062.
- Hundsdorfer, W. y Jaffré, J. (2003). Implicit-explicit time stepping with spatial discontinuous finite elements. *Applied Numerical Mathematics* 45, 231–254.
- Hundsdorfer, W. y Verwer, J.G. (2013). *Numerical solution of time dependent advection-diffusion reaction equations*, volume 33. Springer Science & Business Media.
- Jia, H. y Li, K. (2011). A third accurate operator splitting method. *Mathematical and Computer Modelling* 53, 387–396.
- Kavnesky, A., Carpenter, M.H., Gottlieb, D. y Hesthaven, J.S. (2007). Application of implicit-explicit high order Runge-Kutta methods to

- discontinuous-Galerkin schemes. *Journal of Computational Physics* 225, 1753–1781.
- Koch, A.J. y Meinhardt, H. (1994). Biological pattern formation: from basic mechanisms to complex structures. *Reviews of Modern Physics* 66, 1481–1507.
- Madzvamuse, A. (2006). Time-stepping schemes for moving grid finite elements applied to reaction-diffusion systems on fixed and growing domains. *Journal of Computational Physics* 214, 239–263.
- Madzvamuse, A. y Maini, P.K. (2007). Velocity-induced numerical solutions of reaction-diffusion systems on continuously growing domains. *Journal of Computational Physics* 225, 100–119.
- Marchuk, G.I. (1968). Some application of splitting-up methods to the solution of mathematical physics problems. *Aplikace Matematiky* 13, 103–132.
- Marcon, L. y Sharpe, J. (2012). Turing patterns in development: what about the horse part? *Current Opinion in Genetics and Development* 22, 578 – 584.
- Mikhailov, A.S. y Showalter, K. (2006). Control of waves, patterns and turbulence in chemical systems. *Physics Reports* 425, 79–194.
- Perugia, I. y Schötzau, D. (2002). An hp-analysis of the Local Discontinuous Galerkin method for diffusion problems. *Journal of Scientific Computing* 17, 561–571.
- Ruuth, S.J. (1995). Implicit-explicit methods for reaction-diffusion problems in pattern formation. *Journal of Mathematical Biology* 34, 148–176.
- Schnakenberg, J. (1979). Simple chemical reaction systems with limit cycle behaviour. *Journal of Theoretical Biology* 81, 389–400.
- Sgura, I., Bozzini, B. y Lascignola, D. (2012). Numerical approximation of Turing patterns in electrodeposition by ADI methods. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 236, 4132–4147.
- Strang, G. (1968). On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal of Numerical Analysis* 5, 506–517, 1968.
- Turing, A. (1952). The chemical basis of morphogenesis. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological Sciences* 237, 37–72.
- Tyson, R., Stern, L.G. y LeVeque, R.J. (2000). Fractional step methods applied to a chemotaxis model. *Journal of Mathematical Biology* 41, 455–475.
- Zhu, J., Zhang, Y.T., Newman, S. y Alber, M. (2009). Application of discontinuous Galerkin methods for reaction-diffusion systems in developmental biology. *Journal of Scientific Computing* 40, 391–418.