

## Método de Elementos Finitos Para la Ecuación de Reacción-Difusión en Medios Heterogéneos

### Finite Element Method for the Reaction-Diffusion Equation in Heterogeneous Media

Juan David Hernández Ramírez<sup>a</sup>

**Resumen.** Se estudia el cálculo eficiente de soluciones de un problema en reacción-difusión en dos dimensiones con énfasis en medios heterogéneos. Para obtener aproximaciones numéricas usamos el método de elementos finitos para una variable espacial combinada con una discretización de Euler. Nos enfocamos en la eficiencia de las soluciones de los sistemas lineales en cada paso de tiempo. Para esto usamos técnicas de descomposición de dominios que emplean preconditionadores desarrolladas en [4, 7] para problemas de difusión heterogéneos. Estas técnicas recientes incorporan ideas de los métodos de elementos finitos multiescala en la construcción de los preconditionadores. En particular, mostramos numéricamente que estas técnicas pueden ser usadas para las ecuaciones de reacción-difusión con difusión heterogénea. Para esto consideramos una adaptación, a medios heterogéneos, del modelo de Fisher. La adaptación consiste en cambiar el término difusivo homogéneo por un término heterogéneo e isotrópico. El tipo de coeficiente considerado, es un coeficiente con variación multiescala (varia en cualquier parte del dominio con ciertas escalas de tamaño) y con alto contraste (medido como el cociente entre el mayor y menor valor del coeficiente de difusión).

**Palabras claves:** Medio heterogéneo, medios multiescala y de alto contraste, método de descomposición de dominios, método de elementos finitos multiescala.

**Abstract.** The efficient calculation of solutions of a problem in reaction-diffusion in two dimensions with emphasis on heterogeneous media is studied. To obtain numerical approximations we use the finite element method for a spatial variable combined with a Euler discretization. We focus on the efficiency of the solutions of the linear systems in each step of time. For this we use domain decomposition techniques that employ preconditioners developed in [4, 7] for heterogeneous diffusion problems. These recent techniques incorporate ideas from multiscale finite element methods in the construction of preconditioners. In particular, we show numerically that these techniques can be used for reaction-diffusion equations with heterogeneous diffusion. For this we consider an adaptation, to heterogeneous means, of the Fisher model. The adaptation consists of changing the homogeneous diffusive term by a heterogeneous and isotropic term. The type of coefficient considered is a coefficient

<sup>1</sup>Departamento de Matemática, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

<sup>a</sup>juadhernandezram@unal.edu.co

with multiscale variation (it varies anywhere in the domain with certain size scales) and with high contrast (measured as the quotient between the highest and lowest value of the diffusion coefficient).

**Keywords:** Heterogeneous media, multiscale media, high-contrast media, domain decomposition methods, multiscale finite element method.

Mathematics Subject Classification: 74S05, 35K57.

Recibido: diciembre de 2018

Aceptado: marzo de 2019

## 1. Introducción

Muchos problemas físicos pueden ser formulados matemáticamente al analizar el balance de dos fenómenos: la reacción y la difusión [1]. La primera se define como el proceso de interacción mediante el cual se generan o se consumen las especies o sustancias involucradas en el fenómeno estudiado. La difusión se define como la dispersión de las especies o sustancias involucradas en el proceso a lo largo del dominio físico de el problema. En general, la ecuación de reacción-difusión utiliza estos dos fenómenos para formar

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa(x)\nabla u) = f(u), \quad t \geq 0, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad (1)$$

donde  $u = u(x, t) \in \mathbb{R}$  es la concentración de una especie o sustancia,  $t \geq 0$  el tiempo,  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$  la posición espacial y  $\kappa(x)$  el coeficiente de difusión. Observe que el lado derecho de la ecuación,  $f(u)$ , representa la reacción y modela cambios en las cantidades de interés debido a, por ejemplo: crecimiento, interacciones entre cantidades, cambios de estado de un tipo de sustancias a otra, e.t.c.

Por otro lado, el coeficiente de difusión  $\kappa(x) = (\kappa_{i,j}(x))_{1 \leq i,j \leq n}$ , considerada simétrica y definida positiva, puede presentarse como la conductividad (o permeabilidad) e indica que tan fácil puede ocurrir el fenómeno de difusión en  $x$ . La conductividad puede ser constante, en este caso, las entradas de  $\kappa(x)$  son todas constantes y por tanto las propiedades de difusión no dependen de la posición en el dominio o región a estudiar. En general, el medio puede ser heterogéneo, es decir, la conductividad no es una constante. En la práctica, cuando en alguna de las entradas de la conductividad es una función continua con variación moderada puede considerarse como un fenómeno de difusión homogénea. Se considera realmente difusión heterogénea cuando las variaciones en las entradas de la conductividad difusiva son considerables. Por ejemplo, en este caso la facilidad con lo que la difusión ocurre es distinta en diferentes regiones del dominio. En aplicaciones reales esto es más general, ya que, en algunas poblaciones, la facilidad de difundirse puede depender del entorno (como por ejemplo en la difusión de animales puede influir la vegetación o tipo de suelo o inclinación del mismo). Observe que el tensor  $\kappa(x)$  puede depender o no de las direcciones de preferenciales de la difusión. En este caso se presentan los

medios isotrópico, ortotrópico y anisotrópico. Para este trabajo consideramos por ejemplo, para  $n = 2$  el caso isotrópico donde el coeficiente  $\kappa$  es de la forma

$$\kappa(x) = \kappa(x) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

donde en este caso, no hay direcciones preferenciales de difusión.

En este trabajo consideramos coeficientes de difusión heterogéneos con variación en múltiples escalas y alto contraste. Un coeficiente  $\kappa$  varía en una escala  $\epsilon$  si al tomar una región cualquiera de tamaño  $\epsilon$ , se observan variaciones del coeficiente en esa región. Si esto es cierto para varias escalas  $\epsilon$  se dice que el coeficiente presenta variación en múltiples escalas. El contraste se mide como el cociente entre el mayor y el menor valor del coeficiente de difusión (el cual es positivo) y el contraste también puede variar en múltiples escalas.

Un ejemplo en reacción-difusión en aplicaciones de tipo biológicas es el modelo de Fisher [6]. Consiste en la difusividad de un gen en una población, es decir, dado una población distribuida uniformemente en un hábitat  $\Omega$ , se presenta una mutación de un gen que se difunde en una determinada región y después en sus alrededores. El modelo está constituido como

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma u(1 - u) + D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

donde  $u = u(x, t)$  es la concentración de los miembros de una población, la variable  $\sigma$  es la tasa de propagación del gen y  $D > 0$  es el coeficiente difusivo. Para ilustrar los métodos estudiados se considera en este trabajo este modelo pero planteado en medios heterogéneos con difusión heterogénea y con la misma reacción que en el modelo original de Fisher.

La utilidad de la ecuación reacción-difusión para el estudio de fenómenos biológicos y otros campos, se dificulta al restringir el uso de métodos analíticos clásicos para analizar las soluciones, es decir, en los casos que es posible analizar la ecuación, la solución formal es tan complicada que hace imposible cualquier interpretación posterior o simplemente no existen métodos analíticos capaces de proporcionar soluciones al problema. Por ese motivo son útiles las técnicas numéricas, que mediante una labor de cálculo científico, proporcionan soluciones aproximadas. Uno de los métodos numéricos más conocidos es el método de elementos finitos el cual aproxima la solución de una ecuación diferencial parcial por una discretización temporal de soluciones de sistemas lineales.

En general el método de elementos finitos sigue los siguientes tres pasos: formulación fuerte, la cual está representada por condiciones de frontera y condición inicial. La formulación débil o variacional, la cual transforma la ecuación diferencial parcial en una ecuación integral en un espacio de Hilbert. El problema obtenido en el paso anterior es aproximado a un problema en un espacio de dimensión finita, es decir, elementos finitos. Esta formulación, conocida como Galerkin, plantea unas funciones base, para encontrar la solución numérica mediante la resolución de un sistema lineal.

Mencionamos también que para el caso de coeficiente que varían en múltiples escalas y tiene alto contraste las dificultades son mayores. Esto debido a que si el coeficiente de difusión varía en una escala  $\epsilon$  la resolución de las mallas de elementos finitos deben ser de tamaño varias veces menor que  $\epsilon$ , ver [5]. Para complicar más la situación la condición de los sistemas lineales (de método con difusión implícita) es afectada negativamente por el contraste en el medio. Recordamos que para sistemas lineales resultantes de discretización de elementos finitos, debido al tamaño e dispersidad de las matrices, se prefieren métodos iterativos para su solución, y es sabido, que el desempeño de los métodos iterativos depende de la condición de la matriz asociada.

En este trabajo nos enfocamos en la solución eficiente de los sistemas lineales cuya solución es requerida en la aproximación de la solución de ecuaciones de reacción-difusión heterogénea. En particular usamos los métodos introducidos recientemente en [4, 7, 9] propuestos inicialmente para ecuaciones lineales de difusión. Estos métodos combinan técnicas de elementos finitos multiescala con técnicas de descomposición de dominio, [5, 8].

Este trabajo se concentra en la eficiencia de método de descomposición de dominios de [7] aplicados a reacción-difusión en medios heterogéneos adaptado al modelo de Fisher, donde se considera un coeficiente con variación multiescala y con alto contraste.

Para la variable temporal, un método numérico sencillo que permite discretizar el tiempo en un intervalo finito que depende de un valor inicial son de tipo Euler explícito e implícito [2]. En este caso consideramos el método de discretización de Euler semi-implícito, donde difusividad se considera implícita y la no-linealidad explícita.

El resto del documento está organizado de la siguiente forma: en la siguiente sección aplicamos el método de elementos finitos al problema de Fisher en medios heterogéneo e isotrópico con un coeficiente que presenta una variación multiescala y de alto contraste. En la Sección 3 presentamos el marco del método de elementos finitos multiescala. En la Sección 4 se describe los métodos iterativos de descomposición de dominio. Finalmente se presentan resultados numéricos en la Sección 5.

## 2. Problema de Fisher en un medio con múltiples escalas y alto contraste

El problema de Fisher está dada por la siguiente formulación fuerte. Sea el dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  con condición de frontera de Dirichlet homogénea  $u(x, t) = 0$  y condición inicial  $u_0(x)$ , esto es,

$$\begin{aligned} &\text{calcular } u : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \text{ tal que,} \\ &\begin{cases} u_t = \sigma u(1 - u) + \operatorname{div}(\kappa(x)\nabla u), & (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ u(x, t) = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x). \end{cases} \end{aligned} \quad (2)$$

donde  $x$  es el vector  $x = (x_1, x_2)$  y  $u = u(x, t)$ . Recalamos que un coeficiente  $\kappa$  es conocido como coeficiente con múltiples escalas si tiene variaciones en todo el dominio a diferentes escalas. Por ejemplo, un coeficiente  $\kappa$  varía a escala  $\epsilon$  si al tomar una región cualquiera de tamaño  $\epsilon$ , se observan variaciones del coeficiente en esa región. El contraste se mide como el cociente entre el mayor valor y el menor valor del coeficiente de difusión (el cual es positivo).

Al discretizar (2) por el método de Euler con difusión implícita y no-linealidad explícita, la iteración obtenida es de la siguiente forma: dado  $u^{(0)}$  calcular,  $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots$ , al resolver,

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} u^{(n+1)} - \operatorname{div} \left( \kappa(x) \nabla u^{(n+1)} \right) = \sigma u^{(n)} (1 - u^{(n)}) + \frac{1}{\Delta t} u^{(n)}, & \text{en } \Omega, \\ u^{(1)} = 0, & x \in \partial\Omega. \end{cases} \quad (3)$$

Al multiplicar por una función de prueba  $v$  en la ecuación anterior, aplicar integración definida e formulación de Green y definir el espacio de soluciones de  $u$  y el espacio de función de prueba por  $V = H_0^1(\Omega)$ . Se obtiene la formulación débil, esto es,

Calcular  $u \in V$ , tal que para todo  $v \in V$ ,

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} u^{(n+1)} v + \int_{\Omega} \kappa(x) \nabla u^{(n+1)} \cdot \nabla v = \int_{\Omega} \left[ \sigma u^{(n)} (1 - u^{(n)}) \right] v \\ \quad + \frac{1}{\Delta t} \int_{\Omega} u^{(n)} v, \\ u(x, 0) = u_0(x). \end{cases} \quad (4)$$

Al considerar  $V^h = \mathbb{P}^1(\tau^h)$ , como el espacio de las funciones lineales por partes con respecto a la triangulación  $\tau^h$ , la formulación de Galerkin genera un sistema lineal

$$A \mathbf{u}_h^{(n+1)} = \mathbf{b}^{(n+1)}, \quad (5)$$

donde  $\mathbf{b}^{(n+1)}$  depende de  $\mathbf{u}_h^{(n)}$ .

Siguiendo [3, 4, 7] se hacen algunas observaciones del sistema lineal obtenido. El tamaño del sistema lineal matricial (5) es proporcional al tamaño de la malla ( $h^{-2}$ ). Para problemas multiescala con alto contraste en el coeficiente  $\kappa(x)$ , el número de condición de la matriz  $A$  depende del valor del contraste definido como  $\eta = \kappa_{\max}/\kappa_{\min}$ . El número de condición depende asimismo de las variaciones locales del coeficiente de difusión  $\kappa$  en  $\Omega$ . Se tiene entonces que el método de elementos finitos estándar, con caso en que  $\kappa$  tenga alto contraste y variaciones en varias escalas, aproxima una solución que debe ser calculada al resolver un sistema lineal con una matriz mal condicionada y de dimensión alta, con número de condición que depende de  $h^{-2}$  y  $\eta$ . Ver por ejemplo [7].

Dos alternativas que permiten solucionar de manera eficiente estos sistemas lineales dispersos, de dimensión alta y mal condicionados, como (5), son las siguientes:

1. Elementos finitos multiescala/Homogenización numérica/Upcaling: A grandes rasgos, la homogenización numérica o upscaling, dado en [4], consiste en proyectar el sistema lineal (5) a un sistema menor, generalmente asociado a una malla gruesa  $\tau^H$  con tamaño que puede ser manejado de manera eficiente. La malla  $\tau^H$  no necesita resolver todas las variaciones del coeficiente.
2. Construcción de un preconditionador usando técnicas de descomposición de dominios: para solucionar el sistema (5) se construye un preconditionador  $M^{-1}$ . En este caso se resuelve

$$M^{-1}A\mathbf{u}_h^{(n+1)} = M^{-1}\mathbf{b}^{(n+1)}.$$

La idea de esta construcción es que el nuevo sistema no dependa de  $h^{-2}$  ni de  $\eta$ . Una técnica numérica muy conocida para construir preconditionadores es usar métodos de descomposición de dominios como lo referencia [7].

A continuación se ilustra con más en detalle estas dos alternativas.

### 3. Método de elementos finitos multiescala

Sea  $\tau^H$  una triangulación de la malla gruesa de  $\Omega$  en elementos finitos (triángulos, cuadriláteros, etc.). Suponga que la malla gruesa se puede resolver a través de una triangulación fina  $\tau^h$ , como lo ilustrado en la Figura 1. Sea  $\varphi_i$  las funciones base del espacio de elementos finitos estándar  $V^h = \mathbb{Q}^1(\tau^h)$  (que es el espacio de funciones bi-lineales por partes con respecto a la triangulación  $\tau^h$ ). La aproximación por elementos finitos estándar en la malla fina esta dada como  $u_h = \sum_i \alpha_i \varphi_i$  que genera el sistema lineal  $A\mathbf{u}_h = \mathbf{b}$ .

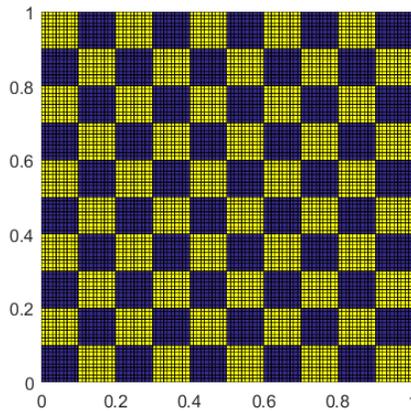


Figura 1: Cuadrícula de malla gruesa y fina.

Sea  $R_0 = [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N]$  una matriz (u operador) que transforma funciones definidas en la malla gruesa a funciones definidas en la malla fina. Conformada por los vectores  $\psi_i$  (funciones base multiescala, las cuales son funciones de elementos finitos de la malla fina). Se usa la aproximación

$$\mathbf{u}_h \approx R_0 \delta, \quad \text{con } \delta \in \mathbb{R}^M, \quad M \ll n. \tag{6}$$

Aquí  $M$  denota la dimensión del espacio de funciones asociado a la malla gruesa y  $n$  denota la dimensión del espacio de elementos finitos de la malla fina. Al remplazar (6) en el sistema lineal fino se obtiene que  $\delta$  debe satisfacer el sistema sobredeterminado  $AR_0\delta = \mathbf{b}$ . Para resolver el sistema se multiplica por el operador de escalamiento  $R_0^T$  (transforma funciones definidas en la malla fina a funciones definidas en la malla gruesa) a ambos lados de la igualdad para obtener  $R_0^T AR_0\delta \approx R_0^T \mathbf{b}$ . Al denotar  $A_0 = R_0^T AR_0$  y  $b_0 = R_0^T \mathbf{b}$ , podemos obtener los coeficientes  $\delta$  resolviendo el siguientes sistema lineal,

$$A_0 \delta = b_0.$$

De [4] se plantea una forma de construir las funciones base multiescala. Para introducir este método, sea  $\{x_i\}_{i=1}^N$  los vértices de la malla gruesa  $\tau^H$  y definimos la vecindad de los nodos  $x_i$  como

$$\omega_i = \bigcup \{E_j \in \tau^H \mid x_i \in \bar{E}_j\},$$

donde  $E_j$  son los elementos de la triangulación  $\tau^H$ . Sea  $\chi_i$  una familia de funciones que particiona la unidad subordinada a las vecindades  $\omega_i$ . Se define entonces los vectores  $\psi_i$  de la matriz  $R_0$  como

$$\psi_{i,\ell} = \chi_i \varphi_\ell, \tag{7}$$

donde  $\varphi_\ell$  es una función con dominio  $\omega_i$  que representa la solución de malla fina. Una representación de la construcción de estas funciones base en la malla gruesa  $\tau^H$  esta dado en la Figura 2.

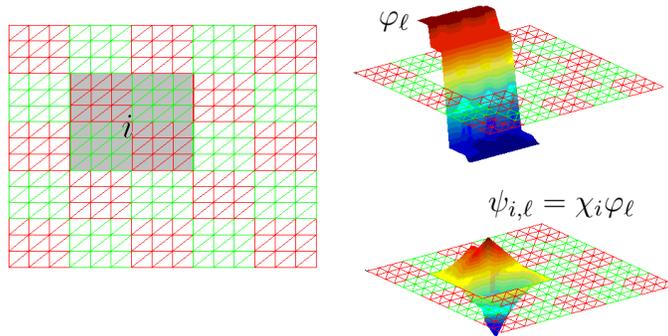


Figura 2: Construcción de las funciones base  $\psi_{i,\ell}$  de la malla gruesa  $\tau^H$ .

Al seguir el método de elementos finitos multiescala generalizados, los vectores locales  $\varphi_\ell$  son aproximaciones del problema de valores y vectores propios generalizados,

$$-\operatorname{div}(\kappa \nabla \varphi) = \lambda \kappa \varphi.$$

Se complementa este problema de vectores propios con condiciones de frontera de Neumann, donde se usan solamente los vectores propios asociados a los menores valores propios  $\lambda_\ell$ . En [4] se muestra que el método de elementos finitos multiescala generalizado es adecuado para aproximar soluciones a la ecuación de difusión en medio heterogéneos con alto contraste, en comparación con algunos otros métodos multiescala que no muestran buen desempeño para este tipo de problemas. Para mas detalles [9].

## 4. Método de descomposición de dominio

Los métodos de descomposición de dominio se refieren a una colección de técnicas que giran en torno a dividir el dominio del problema en subdominios de tal forma que combinando soluciones de problemas en subdominios se puedan construir aproximaciones de las soluciones en el dominio original, [10]. La idea original fue introducida por Hermann Schwarz, el cual estaba interesado en la existencia y unicidad del problema de Poisson. Schwarz ideó los siguientes métodos iterativos para resolver el problema de Poisson en una unión de geometrías simples.

### 4.1. Método alternado de Schwarz

Para ilustrar la idea del método, considere el dominio  $\Omega$  formado por la unión de un círculo  $\Omega_1$  y un rectángulo  $\Omega_2$ , como se observa en la Figura 3, de esta forma, el problema de Poisson con condición de frontera de Dirichlet es

$$\begin{cases} -\Delta u = f, & \text{en } \Omega, \\ u = g, & \text{en } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8)$$

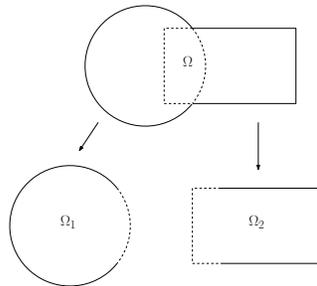


Figura 3: Dominio  $\Omega$  formado por la unión de círculo  $\Omega_1$  y rectángulo  $\Omega_2$ .

La idea es dividir el problema de Poisson (8) en

$$\begin{cases} -\Delta u_1 = f, & \text{en } \Omega_1, \\ u_1 = g_1, & \text{en } \partial\Omega_1, \end{cases} \quad (9)$$

y

$$\begin{cases} -\Delta u_2 = f, & \text{en } \Omega_2, \\ u_2 = g_2, & \text{en } \partial\Omega_2. \end{cases} \quad (10)$$

De tal forma que siguiendo estos cuatro pasos, Schwarz verificó convergencia en el dominio  $\Omega$ :

1. Resolver (9) al completar  $g_1$  arbitrariamente en  $\partial\Omega_1$ .
2. Resolver (10) al usar la solución del paso 1 para completar los datos de frontera.
3. Resolver (9) al usar la solución de (8) para completar el dato de frontera.
4. Iterar hasta convergencia.

## 4.2. Método en paralelo de Schwarz

Otra forma que implementó Schwarz para resolver problemas con uniones de geometrías simples es el denominado método en paralelo de Schwarz. Este método consiste en resolver iteradamente los siguientes dos pasos:

1. Resolver los problemas de Poisson (9) y (10) al mismo tiempo en paralelo, de tal forma que las soluciones  $u_1$  y  $u_2$  respectivamente de los problemas se tiene que

$$v = B_1 u_1 + B_2 u_2.$$

Aquí,  $B_1$  y  $B_2$  son extensiones por cero fuera del dominio  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$ , respectivamente.

2. Implementar nuevamente 1 y usar  $v$  para completar datos de frontera.

Al aplicar el método de elementos finitos a los problemas (9) y (10), las soluciones numéricas están dadas por los sistemas  $A_1 \alpha_1 = b_1$  y  $A_2 \alpha_2 = b_2$  respectivamente.

Para las soluciones  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$  se define el primer paso de el método en paralelo de Schwarz, esto es,  $v = B_1 \alpha_1 + B_2 \alpha_2$ . Observe que al definir los sistemas lineales de los problemas (9) y (10), de la forma  $\alpha_1 = A_1^{-1} b_1$  y  $\alpha_2 = A_2^{-1} b_2$  respectivamente, y multiplicar  $B_i^T$  (operador de restricción) se tiene  $v = (B_1 A_1^{-1} B_1^T + B_2 A_2^{-1} B_2^T) b$ . Se puede considerar entonces  $M^{-1} = B_1 A_1^{-1} B_1^T + B_2 A_2^{-1} B_2^T$  como un preconditionador de la matriz  $A$ .

La construcción del preconditionador permite retomar la idea en resolver el sistema obtenido (5) a través del siguiente sistema con preconditionador

$$M^{-1} A \mathbf{u}_h^{(n+1)} = M^{-1} \mathbf{b}^{(n+1)}, \quad (11)$$

donde la complejidad computacional depende ahora de  $\text{cond}(M^{-1}A)$  (condición de la matriz  $M^{-1}A$ ) y se espera que  $\text{cond}(M^{-1}A)$  sea mejor que la condición de la matriz  $A$ .

Para resolver el sistema (11) con preconditionador, aplicado a través del método en paralelo de Schwarz, se hace necesario un método iterativo que permita resolver los sistemas resultantes. Para este trabajo consideramos el método del gradiente conjugado con preconditionador [10].

Por otro lado, al considerar el método en paralelo de Schwarz para varios subdominios, el preconditionador se define como  $M_1^{-1}b = \sum_{i=1}^N B_i A_i^{-1} B_i^T b$ . Esta condición es conocida como método aditivo de un nivel de Schwarz. Es de mencionar que entre más subdominios se presenta más lenta es la convergencia. Al considerar la malla gruesa del dominio para obtener un mejor preconditionador, se tiene  $M_2^{-1}b = M_1^{-1}b + R_0 A_0^{-1} R_0^T b$ , donde el segundo término corresponde a la corrección dada por la malla gruesa. Esta última parte se define por el método de elementos finitos multiescala; dado en la Sección 3. Este método arriba es referido como el método aditivo de dos niveles de Schwarz.

Teniendo en cuenta este último método, en [7] se determina que para problemas elípticos

$$\text{cond}(M_2^{-1}A) \leq C\Lambda \left(1 + \frac{H^2}{\hat{\delta}^2}\right),$$

la cual  $C$  es una constante,  $\hat{\delta}$  es un subreposición,  $H$  es el diámetro de la vecindad  $\omega_i$  y

$$\Lambda = \max_{1 \leq i \leq N_s} \frac{1}{\lambda_{L_{i+1}}},$$

donde en la vecindad  $\omega_i$  se usan los vectores propios  $\{\varphi_\ell\}$  asociados a los menores valores propios  $\{\lambda_\ell\}$  para  $1 \leq \ell \leq L_i$ . Observe que  $C\Lambda$  no depende del contraste  $\eta$  si se toma suficientes valores propios.

## 5. Resultados Numéricos

Los siguientes resultados se presentan al resolver el sistema lineal obtenido del problema de Fisher (2) a través de los casos de método aditivo de dos niveles de Schwarz clásico y multiescala usando el método iterativo del gradiente conjugado con preconditionador.

### 5.1. Simulación del modelo de Fisher en medio difusivo heterogéneo con el método aditivo de dos niveles clásico

Nos referimos al método aditivo de dos niveles clásico cuando el segundo nivel no usa funciones base multiescala, en este caso las funciones base de la malla gruesa corresponden a polinomios bi-lineal.

Consideremos el problema de Fisher (2) con las siguientes condiciones: sea el dominio  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  y una triangulación  $10 \times 10$  subdominios cuadrados

iguales. Dentro de cada subdominio se presenta una triangulación a escala fina  $10 \times 10$  cuadrados, como se observa en la Figura 1. El coeficiente difusivo isotrópico  $\kappa(x)$  correspondiente a un coeficiente con fondo uno y alto  $\eta$ , dada en la Figura 4. Se toma la condición de frontera de Dirichlet homogénea y condición inicial  $u_0(x) = \exp\left(-\frac{x_1^2}{h^2} - \frac{x_2^2}{h^2}\right)$ .

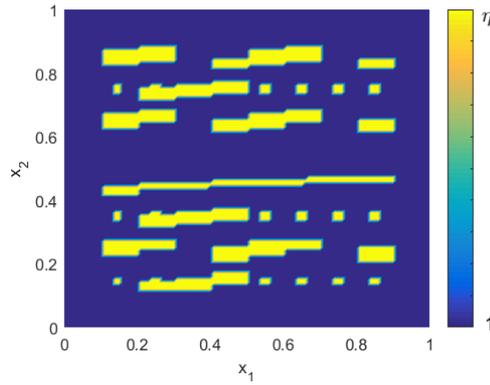
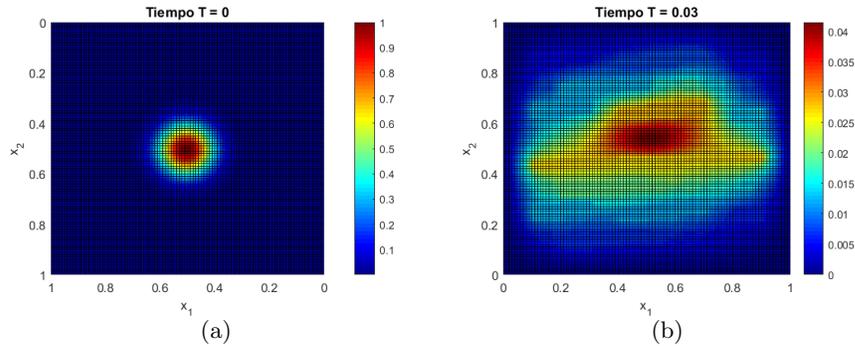


Figura 4: Coeficiente  $\kappa(x)$ .

Observe que la Figura 5, muestra soluciones numéricas que convergen en forma heterogénea para un coeficiente  $\kappa(x)$  con contraste  $\eta = 10^4$ , tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.01$  en los tiempos finales  $T = 0.03$  y  $T = 0.1$ , para  $n = 3$  y  $n = 10$  pasos de tiempo respectivamente. De forma similar, para un contraste  $\eta = 10^4$ , la Figura 6, presenta soluciones numéricas que convergen en forma heterogénea con un tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.001$  en los tiempos finales  $T = 0.03$  y  $T = 0.1$ , para  $n = 30$  y  $n = 100$  pasos de tiempo respectivamente.



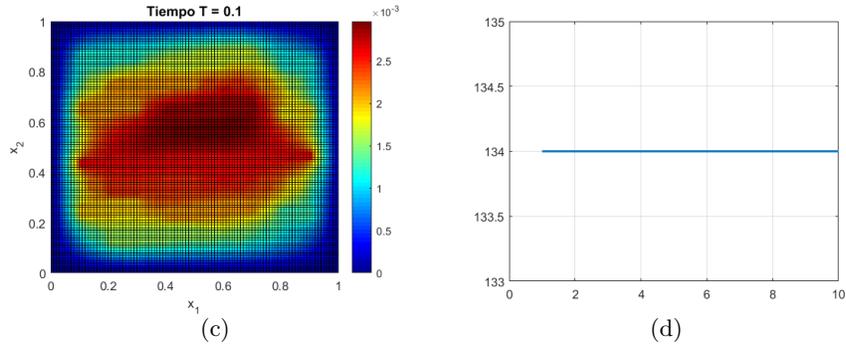
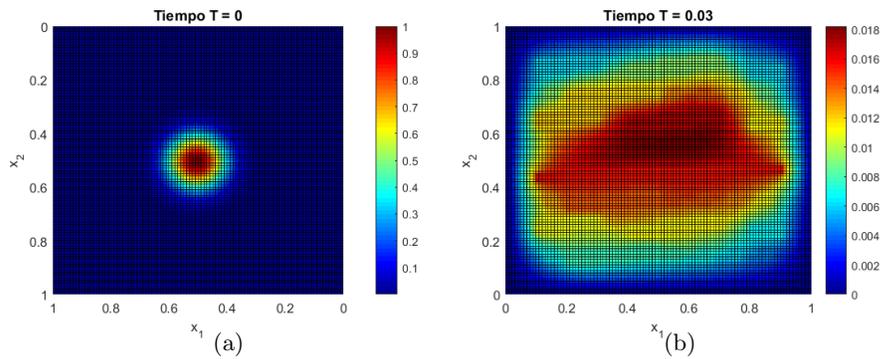


Figura 5: Solución  $u(x, t)$  del problema de Fisher (3), coeficiente  $\kappa(x)$  representado en la Figura 4 para  $\eta = 10^4$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t = 0.01$  y diferentes  $n$  pasos de tiempo. (a) Solución inicial con  $n = 0$  en  $T = 0$ . (b) Todas las aproximaciones  $u^{(n)}$  con  $n = 3$  hasta  $T = 0.03$ . (c) Todas las aproximaciones  $u^{(n)}$  con  $n = 10$  hasta  $T = 0.1$ . (d) Número de iteraciones del método del gradiente conjugado con preconditionar.



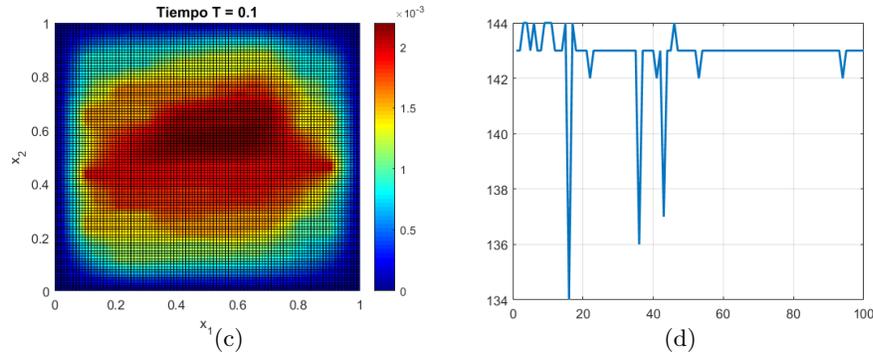


Figura 6: Solución  $u(x, t)$  del problema de Fisher (3), coeficiente  $\kappa(x)$  representado en la Figura 4 para  $\eta = 10^4$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t = 0.001$  y diferentes  $n$  pasos de tiempo. (a) Solución inicial con  $n = 0$  en  $T = 0$ . (b) Todas las aproximaciones  $u^{(n)}$  con  $n = 30$  hasta  $T = 0.03$ . (c) Todas las aproximaciones  $u^{(n)}$  con  $n = 100$  hasta  $T = 0.1$ . (d) Número de iteraciones del método del gradiente conjugado con preconditionar.

La Tabla 1 muestra el número de iteraciones de el método del gradiente conjugado con preconditionador, obtenidas de las simulaciones para diferentes casos de contraste  $\eta$  para cada paso de tiempo  $n$  con un tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.01$  y  $\Delta t = 0.001$  hasta un tiempo final  $T = 0.1$ .

La Tabla 2 muestra el número de condición de las simulaciones, para cada paso de tiempo  $n$  con un tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.01$  y  $\Delta t = 0.001$  hasta un tiempo final  $T = 0.1$ , definidas para los diferentes casos de contraste  $\eta$ .

Concluimos que el número de iteraciones y el número de condición del sistema lineal preconditionado se mantiene estable en el tiempo, pero esta aumenta drásticamente al aumentar el contraste en el coeficiente. Recuerde que el algoritmo usado es el de gradiente conjugado preconditionado. Sin preconditionador el número de condición es todavía peor. Esto torna a este tipo de aproximaciones imprácticas para este tiempo de aplicaciones. Se requiere entonces usar método iterativos especialmente diseñados para problemas de alto contraste como los presentados en la Sección 4.

$\eta$	$\Delta t$	$n$ pasos de tiempo	iteraciones
$10^0$	0.01	10	21 – 23
$10^0$	0.001	100	33 – 36
$10^2$	0.01	10	60 – 61
$10^2$	0.001	100	56 – 57
$10^4$	0.01	10	134
$10^4$	0.001	100	134 – 144
$10^6$	0.01	10	202 – 204
$10^6$	0.001	100	226 – 232

Tabla 1: Número de iteraciones del método iterativo del gradiente conjugado con preconditionador de las soluciones numéricas del problema de Fisher (3) con el método aditivo de dos niveles clásico para diferentes contrastes  $\eta$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t$  y  $n$  pasos de tiempo.

$\eta$	$\Delta t$	$n$ pasos de tiempo	número de condición
$10^0$	0.01	10	6.88 – 6.92
$10^0$	0.001	100	54.6 – 55.4
$10^2$	0.01	10	29.31978
$10^2$	0.001	100	71.8 – 73
$10^4$	0.01	10	2729.327
$10^4$	0.001	100	6063.0861
$10^6$	0.01	10	$2.7274 \times 10^5$
$10^6$	0.001	100	$6.0506 \times 10^5$

Tabla 2: Número de condición del problema de Fisher (3) con el método aditivo de dos niveles clásico para diferentes contrastes  $\eta$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t$  y  $n$  pasos de tiempo.

A continuación presentamos el comportamiento de estos métodos.

## 5.2. Simulación del modelo de Fisher en medio difusivo heterogéneo con el método aditivo de dos niveles multi-escala

Las condiciones del problema de Fisher (3), necesarias para esta simulación, se presentan de forma análoga a la sección anterior.

Observe que la Tabla 3 muestra el número de iteraciones de el método del gradiente conjugado con preconditionador, obtenidas de las simulaciones para diferentes casos de contraste  $\eta$  para cada paso de tiempo  $n$  con un tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.01$  y  $\Delta t = 0.001$  hasta un tiempo final  $T = 0.1$ .

$\eta$	$\Delta t$	$n$ pasos de tiempo	iteraciones
$10^0$	0.01	10	20 – 22
$10^0$	0.001	100	25 – 29
$10^2$	0.01	10	61
$10^2$	0.001	100	50 – 52
$10^4$	0.01	10	37 – 38
$10^4$	0.001	100	43 – 47
$10^6$	0.01	10	39 – 40
$10^6$	0.001	100	44 – 49

Tabla 3: Número de iteraciones del método iterativo del gradiente conjugado con preconditionador de las soluciones numéricas del problema de Fisher (3) con el método aditivo de dos niveles multiescala para diferentes contrastes  $\eta$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t$  y  $n$  pasos de tiempo.

La Tabla 4 muestra el número de condición de las simulaciones, para cada paso de tiempo  $n$  con un tamaño de intervalo de tiempo  $\Delta t = 0.01$  y  $\Delta t = 0.001$  hasta un tiempo final  $T = 0.1$ , definidas para los diferentes casos de contraste  $\eta$ .

$\eta$	$\Delta t$	$n$ pasos de tiempo	número de condición
$10^0$	0.01	10	6.95 – 7
$10^0$	0.001	100	51 – 54
$10^2$	0.01	10	29.42634 – 29.42637
$10^2$	0.001	100	71.4 – 72.4
$10^4$	0.01	10	9.6355 – 9.6362
$10^4$	0.001	100	55.345 – 55.365
$10^6$	0.01	10	9.670025 – 9.670055
$10^6$	0.001	100	55.633 – 55.639

Tabla 4: Número de condición del problema de Fisher (3) con el método aditivo de dos niveles multiescala para diferentes contrastes  $\eta$ , tamaño de intervalos de tiempo  $\Delta t$  y  $n$  pasos de tiempo.

Concluimos que el número de iteraciones del gradiente conjugado y el número de condición del sistema lineal preconditionado se mantiene estable en el tiempo, pero presenta una reducción significativa comparado con la sección anterior, como se puede observar en la Tabla 3 en comparación con la Tabla 1 y la Tabla 4 con la Tablas 2.

## Referencias

- [1] J. Bouhours, *Reaction Diffusion Equation in Heterogeneous: Persistence, Propagation and Effect of the Geometry*, Ph.D. thesis, Universidad Pierre y Marie Curie, 2014.
- [2] R. Burden and J. Faires, *Análisis numérico*, séptima edición, Thompson, 2003.
- [3] J. Claes, *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, segunda edición, Editorial Cambridge, New York, 1987.
- [4] Y. Efendiev, J. Galvis, and X. Wu, *Multiscale Finite Element Methods for High-Contrast Problems Using Local Spectral Basis Functions*, Journal of Computational Physics **230** (2011), 937–955.
- [5] Y. Efendiev and Hou T, *Multiscale Finite Element Methods*, Editorial Springer, New York, 2009.
- [6] R. Fisher, *The Genetical Theory of Natural Selection*, Oxford University Press, 1930.
- [7] J. Galvis, W. Leung, and Y. Efendiev, *On Overlapping Domain Decomposition Methods for High-Contrast Multiscale Problems*, *siam* **8** (2010), no. 4, 1461–1483.
- [8] W. Olof and A. Toselli, *Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory*, segunda edición, Springer, 2004.
- [9] J. Galvis Y. Efendiev and T. Hou, *Generalized multiscale finite element methods (GMsFEM)*, Journal of Computational Physics **251** (2013), 116–135.
- [10] S. Yousef, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, segunda edición, Siam, 2003.