

**APLICACIÓN DEL MÉTODO LOCAL DISCONTINUOUS GALERKIN A  
ECUACIONES CON DERIVADAS FRACCIONARIAS**

Por

Sergio Alejandro Gómez Macías

Tesis sometida en cumplimiento parcial de los requerimientos para el grado de

MAESTRÍA EN CIENCIAS

en

MATEMÁTICA APLICADA

UNIVERSIDAD DE PUERTO RICO  
RECINTO UNIVERSITARIO DE MAYAGÜEZ

2018

Aprobada por:

---

Angel Cruz, Ph.D

Miembro, Comité Graduado

---

Fecha

---

Rafael Ramos, Ph.D

Miembro, Comité Graduado

---

Fecha

---

Paul Castillo, Ph.D

Presidente, Comité Graduado

---

Fecha

---

Silvina Cancelos, Ph.D

Representante de Estudios Graduados

---

Fecha

---

Victor Ocasio, Ph.D

Director del Departamento

---

Fecha

Abstract of Disertación Presented to the Graduate School  
of the University of Puerto Rico in Partial Fulfillment of the  
Requirements for the Degree of Master in Sciences

**APLICACION OF THE LOCAL DISCONTINUOUS GALERKIN METHOD  
TO EQUATIONS WITH FRACTIONAL DERIVATIVES**

By

Sergio Alejandro Gómez Macías

2018

Chair: Paul Castillo  
Major Department: Mathematic

We consider a time dependent model problem with the Riesz or the Riemann-Liouville fractional differential operator of order  $1 < \alpha < 2$ . We obtain optimal rates of convergence for the semi-discrete minimal dissipation Local Discontinuous Galerkin (mdLDG) method by penalizing the primary variable with a term of order  $h^{1-\alpha}$ . Using a von Neumann analysis, stability conditions proportional to  $h^\alpha$  are derived for the forward Euler method and both fractional operators. The CFL condition is numerically studied with respect to the approximation degree and the stabilization parameter. Our analysis and computations carried out using explicit high order strong stability preserving Runge-Kutta schemes reveals that the proposed penalization term is suitable for high order approximations and explicit time advancing schemes when  $\alpha$  close to one.

On the other hand, using the primal formulation of the Local Discontinuous Galerkin (LDG) method, discrete analogues of the energy and the Hamiltonian of a general class of fractional nonlinear Schrödinger (FNLS) equation are shown to be conserved for two stabilized versions of the method. Accuracy of these invariants is numerically studied with respect to the stabilization parameter and two different projection operators applied to the initial

conditions. The fully discrete problem is analyzed for two implicit time step schemes: the midpoint and the modified Crank-Nicolson; and the explicit circularly exact Leapfrog scheme. Stability conditions for the Leapfrog scheme and a stabilized version of the LDG method applied to the fractional linear Schrödinger equation are derived using a von Neumann stability analysis.

Resumen de Disertación Presentado a Escuela Graduada  
de la Universidad de Puerto Rico como requisito parcial de los  
Requerimientos para el grado de Maestría en Ciencias

## **APLICACIÓN DEL MÉTODO LOCAL DISCONTINUOUS GALERKIN A ECUACIONES CON DERIVADAS FRACCIONARIAS**

Por

Sergio Alejandro Gómez Macías

2018

Consejero: Paul Castillo  
Departamento: Matemática

Se considera un problema modelo transitorio con el operador diferencial de Riemann-Liouville o de Riesz de orden  $1 < \alpha < 2$ . Penalizando la variable primaria con un término de orden  $h^{1-\alpha}$ , se obtienen tasas óptimas de convergencia para el método semi-discreto minimal dissipation Local Discontinuous Galerkin (mdLDG). Utilizando un análisis de von Neumann, se derivan condiciones de estabilidad proporcionales a  $h^\alpha$  para el método forward Euler y ambos operadores fraccionarios. La condición CFL se estudia numéricamente con respecto al grado de aproximación y el parámetro de estabilidad. Nuestro análisis y cálculos utilizando métodos explícitos de alto orden strong stability preserving Runge-Kutta revelan que el término de penalización propuesto es adecuado para aproximaciones de alto orden y esquemas de avance en tiempo explícitos cuando  $\alpha$  está cercano a uno.

Por otra parte, utilizando la formulación primaria del método Local Discontinuous Galerkin (LDG), se prueba la conservación de los análogos discretos de la energía y del Hamiltoniano de una clase general de ecuaciones fraccionarias no lineales de Schrödinger (FNLS) para dos versiones estabilizadas del método. La precisión de estos invariantes se estudia numéricamente con respecto al parámetro de estabilización y dos operadores de proyección

diferentes aplicados a la condición inicial. El problema completamente discreto es analizado para dos métodos de avance en tiempo implícitos: el método de Punto Medio y el método modificado de Crank-Nicolson; y el método explícito circularly exact Leapfrog. Utilizando el análisis de von Neumann se derivan condiciones de estabilidad para el esquema de Leapfrog y una versión estabilizada del método LDG aplicado a la ecuación fraccionaria lineal de Schrödinger.

Copyright © 2018

por

Sergio Alejandro Gómez Macías

*A Dios y a mis padres José y Argentina, gracias por su dirección, y el ánimo para seguir adelante.*

## AGRADECIMIENTOS

A Dios primeramente, por forjar mi camino hasta culminar la meta.

A mi asesor Paul Castillo, por su amistad y ayudarme a crecer no solo en lo académico sino también como persona.

A mis padres José y Argentina por su apoyo incondicional en todos los planes que he emprendido.

A Olga, Hector y María por cuidarme como su hijo en todo mi tiempo en Puerto Rico.

A toda la iglesia adventista Mayagüez IV, por su cariño y atención.

A Ivan Henriquez por prepararme y motivarme para realizar mis estudios de maestría.

Al Departamento de Matemática de la Universidad de Puerto Rico en Mayagüez por brindarme esta gran oportunidad de realizar mi maestría.

A los miembros de mi Comité por sus comentarios y sugerencias para mejorar la presentación de este trabajo.

## Índice general

	<u>página</u>
ABSTRACT ENGLISH . . . . .	II
RESUMEN EN ESPAÑOL . . . . .	IV
AGRADECIMIENTOS . . . . .	VIII
Índice de Tablas . . . . .	XI
Índice de figuras . . . . .	XIII
LISTA DE ABREVIATURAS . . . . .	XV
LISTA DE SIMBOLOS . . . . .	XVI
1. Introducción . . . . .	1
2. Preliminares . . . . .	6
3. Método LDG . . . . .	8
4. Método LDG y ecuación de difusión fraccionaria . . . . .	12
4.1. Estimado de error . . . . .	13
4.2. Condición Courant Friedrich Levy (CFL) para el método Forward Euler– LDG. . . . .	16
4.3. Experimentos numéricos . . . . .	24
4.3.a. Orden de convergencia . . . . .	25
4.3.b. Restricciones en tiempo y CFL . . . . .	28
4.3.c. Métodos de avance en tiempo de alto orden . . . . .	31
5. Método LDG y ecuación de Schrödinger no lineal fraccionaria . . . . .	34
5.1. Conservación de energía y Hamiltoniano . . . . .	34
5.2. Discretizaciones en tiempo . . . . .	37
5.2.a. Esquema de Punto Medio . . . . .	37
5.2.b. Crank-Nicolson Modificado . . . . .	38
5.2.c. Esquemas de Leapfrog . . . . .	40
5.3. Experimentos Numéricos . . . . .	45
5.3.a. Método CELF-LDG . . . . .	46
5.3.b. Conservación de energía . . . . .	48
5.3.c. Conservación del Hamiltoniano . . . . .	49

5.3.d.	Conservación de los invariantes de la ecuación NLS utilizando otros métodos dG . . . . .	52
5.3.e.	Convergencia . . . . .	54
5.3.f.	Comentarios adicionales . . . . .	54
6.	Conclusiones y trabajos futuros . . . . .	59
6.1.	Conclusiones . . . . .	59
6.2.	Trabajos Futuros . . . . .	61
7.	Bibliografía . . . . .	62

## Índice de Tablas

1–1. Trabajos previos de métodos LDG para problemas con operadores fraccionarios. . . . .	2
4–1. Autovalor no nulo $\lambda_1$ de $\widehat{S}$ . . . . .	20
4–2. Tasas de convergencia para $u_h$ , método mdLDG con flujo derecho y operador de Riesz, $\eta_N = h^{1-\alpha}$ en $T = 1$ . . . . .	26
4–3. Tasas de convergencia para $u_h$ , método mdLDG con flujo derecho y operador de Riemann-Liouville, $\eta_N = h^{1-\alpha}$ en $T = 1$ . . . . .	27
4–4. Tasas de convergencia del método mdLDG para $\alpha$ cercano a 1, utilizando aproximaciones lineales. . . . .	27
4–5. Tasas de convergencia del método LDG con flujo izquierdo. . . . .	28
4–6. Tasas de convergencia del método LDG con flujo derecho. . . . .	29
4–7. Restricción de paso en tiempo del método FE-mdLDG para el operador de Riesz con aproximaciones cuadráticas. . . . .	30
4–8. Restricción de paso en tiempo del método FE-mdLDG para el operador de Riemann-Liouville con aproximaciones cuadráticas. . . . .	31
4–9. Rendimiento del método mdLDG-SSP(5,3) para el operador de Riesz. . . . .	33

4–10. Rendimiento del método LDG-SSP(5,3) para el operador de Riemann Liouville.	33
5–1. CFL para el método de Leapfrog-LDG-II, $\gamma = 1$ y aproximaciones cuadráticas.	47
5–2. Variación del paso en tiempo para el método CELF-LDG-II. . . . .	48
5–3. Tasas de convergencia para el potencial cúbico ( $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ ) y flujo central de la ecuación FNLS. . . . .	54
5–4. Tasas de convergencia para el potencial cúbico ( $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ ) y flujo derecho de la ecuación FNLS. . . . .	55
5–5. Tasas de convergencia para el potencial quintico ( $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$ ) y flujo central de la ecuación FNLS. . . . .	55
5–6. Tasas de convergencia para el potencial quintico ( $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$ ) y flujo derecho de la ecuación FNLS. . . . .	56

## Índice de figuras

4-1. Autovalor mínimo de $\widehat{I}_\alpha^R(\omega)$ , $\omega \in [-\pi, \pi]$ , $\alpha \in \{1.3, 1.5, 1.7, 1.9\}$ . . . . .	19
4-2. CFL con respecto al grado de aproximación. . . . .	24
4-3. Efecto del parámetro de estabilidad $\gamma$ en la CFL. . . . .	25
4-4. Oscilaciones para aproximaciones cúbicas y $\alpha = 1.5$ . . . . .	29
4-5. Inestabilidades del método FE-mdLDG utilizando $\eta_N = \mathcal{O}(h^{-1})$ y tamaño de paso en tiempo, $\tau_\alpha$ , correspondiente a $\eta_N = \mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ . . . . .	31
5-1. Condicionamiento espectral $\kappa_2(A_\alpha)$ para el operador de Riesz con condiciones de borde de Dirichlet. . . . .	35
5-2. Condición CFL para el método Leapfrog-md-LDG. . . . .	44
5-3. CFL como función de $\gamma$ para el método estabilizado Leapfrog-LDG-II. . . . .	45
5-4. CFL como función de $\gamma$ para el método estabilizado de Leapfrog-LDG-II, y diferentes valores de $\alpha$ . . . . .	45
5-5. Conservación de la energía de la ecuación clásica de Schrödinger por el método de Leapfrog y el método CELF-LDG-II. . . . .	47

5-6. Energía para la ecuación FNLS con potencial logarítmico el método de Leap-frog (línea punteada) y el método CELF-LDG-II (línea continua) con flujos central y derecho. . . . .	48
5-7. Error de la energía para ambas versiones estabilizadas del método LDG y diferentes valores de $\alpha$ . . . . .	49
5-8. Error inicial del Hamiltoniano como una función del tamaño de la malla $h$ utilizando las proyecciones $\Pi_h$ y $R_h^\pm$ . . . . .	50
5-9. Error inicial del Hamiltoniano para el método MD-LDG y diferentes valores de $\alpha$ utilizando las proyecciones $\Pi_h$ y $R_h^\pm$ . . . . .	50
5-10. Error del Hamiltoniano como una función del parámetro de estabilización $\eta$ . . . . .	51
5-11. Error del Hamiltoniano como una función del parámetro de estabilización $\eta$ para diferentes valores de $\alpha$ . . . . .	51
5-12. Comportamiento del error del Hamiltoniano para diferentes valores de $\alpha$ . . . . .	52
5-13. Conservación de la energía para diferentes métodos DG. . . . .	53
5-14. Conservación del Hamiltoniano para diferentes métodos dG. . . . .	53
5-15. Aproximación del método LDG para la ecuación FNLS con potencial logarítmico para diferentes valores de $\alpha$ . . . . .	57
5-16. Efecto de la tolerancia en el método de Newton en la variación del error en la energía y el Hamiltoniano. . . . .	58

## LISTA DE ABREVIATURAS

LDG	Local Discontinuous Galerkin.
DG	Discontinuous Galerkin.
RL	Riemann-Liouville.
FNLS	Fractional nonlinear Schrödinger.
FE	Forward Euler.
IP	Interior Penalty.
CELF	Circularly exact Leapfrog.
PM	Punto medio.
MCN	Modified Crank Nicolson.

## LISTA DE SIMBOLOS

$\mathbb{R}$	Conjunto de números reales.
$\mathcal{L}_\alpha(\cdot)$	Operador fraccionario genérico.
$\Omega$	Dominio acotado.
$\alpha$	Parámetro del orden fraccionario.
$t$	Variable temporal.
$\tau$	Tamaño de paso en tiempo.
$h$	Tamaño de la malla.
$\mathcal{E}_h$	Energía discreta.
$\mathcal{H}_h$	Hamiltoniano discreto.
$\mathcal{T}_h$	Partición de $\Omega$ .
$k$	Grado de aproximación.
$I_\alpha^{RL}$	Operador integral de Riemann Liouville.
$I_\alpha^R$	Operador integral de Riesz.
$\mathbb{P}_k(I_m)$	Espacio local de polinomios de grado a lo más $k$ restringido a la celda $I_m$ .
$\mathcal{V}_h$	Espacio de elemento finito discontinuo.
$\hat{u}$	Flujo de la variable primaria $u$ .
$\hat{q}$	Flujo de la variable auxiliar $q$ .
$S_p$	Término de estabilización en la variable auxiliar $p$ .
$S_u$	Término de estabilización en la variable primaria $u$ .
$\pi_h$	Operador de proyección en la norma $L_2$ .
$R_h^\pm$	Operador de proyección de Gauss Radau.

# Capítulo 1

## INTRODUCCIÓN

Aunque la teoría del cálculo fraccionario se remonta a la misma época del cálculo clásico, en las últimas décadas, experimentos físicos han mostrado que una gran variedad de fenómenos pueden ser modelados de una manera más adecuada a través de ecuaciones diferenciales que involucran operadores fraccionarios o no-locales. No obstante, el proceso de encontrar soluciones exactas para estos modelos conlleva una tarea ardua, y en la mayoría de casos resulta imposible. Por esta razón se ha desarrollado un creciente interés en generar métodos numéricos o adaptar métodos ya existentes, para aproximar la solución de dichos problemas.

El centro de atención de este trabajo será el método Local Discontinuous Galerkin (LDG por sus siglas en inglés), el cual es un método de elemento finito Galerkin discontinuo que ha probado tener propiedades deseables de rendimiento, estabilidad y convergencia. Éste método fue introducido originalmente por Cockburn y Shu en [1] para problemas transitorios de convección-difusión clásicos. En la actualidad ha sido aplicado a una amplia variedad de problemas, incluyendo algunos con operadores diferenciales fraccionarios. Aunque este trabajo se concentra en el método LDG se espera que algunos de los resultados obtenidos puedan ser fácilmente extendidos a otros métodos de elemento finito discontinuos con propiedades similares.

En particular se estudiarán las propiedades del método LDG relacionadas a los siguientes problemas:

1. **Ecuación de difusión fraccionaria con operador de Riesz o de Riemann Liouville:**

Modelos de difusión fraccionaria pueden ser encontrados en una amplia variedad de problemas en diferentes áreas, como por ejemplo: problemas de viscoelasticidad [2, 3], dinámica del caos [4], medicina y biología [5]; una revisión del desarrollo en sistemas de difusión-reacción anómala fue presentada en [6] y modelos de dinámica fraccionaria de la tierra son discutidas en [7].

Se considera el problema de valores iniciales en  $\mathbb{R} \times (0, T]$

$$\partial_t u = \mathcal{L}_\alpha(u) + f(x, t), \quad (1.1)$$

o el problema de valores en la frontera en el dominio acotado  $\Omega = (a, b)$  con condiciones nulas de Dirichlet, donde  $\mathcal{L}_\alpha(\cdot)$  es el operador fraccionario de Riemann-Liouville (RL) o el operador diferencial de Riesz de orden  $1 < \alpha < 2$ .

La Tabla 1–1 resume los trabajos previos relevantes sobre el método Local Discontinuous Galerkin aplicado a ecuaciones de difusión fraccionaria.

Tabla 1–1: Trabajos previos de métodos LDG para problemas con operadores fraccionarios.

Trabajo	Derivada	Penalización		Análisis	Dimensión
		$u_h$	$\mathbf{p}_h$		
Ji y Tang [8]	Caputo	–	–	Numérico	1D/2D
Deng y Hesthaven [9]	RL	–	$\mathcal{O}(h^\alpha)$	Teórico	1D
Qiu <i>et al.</i> [10]	RL	–	–	Numérico	2D
Xu y Hesthaven, [11]	Riesz	$\mathcal{O}(h^{-1})$	–	Teórico	1D
Ahmadinia <i>et al.</i> [12]	RL	$\mathcal{O}(h^{-1})$	–	Teórico	1D
<b>Castillo y Gómez [13]</b>	<b>RL/Riesz</b>	<b><math>\mathcal{O}(h^{1-\alpha})</math></b>	–	<b>Teórico</b>	<b>1D</b>

Existen algunos trabajos adicionales en métodos dG, Wang *et al.* [14] analizaron el método discontinuous Galerkin híbrido para el operador de Riemann-Liouville en 2D. Recientemente, Li *et al.* [15] propusieron un nuevo método de volúmenes finitos (dG de bajo orden) para una ecuación de advección difusión fraccionaria de orden distribuido.

Al aplicar un método Galerkin discontinuo a los problemas antes mencionados, la matriz de masa posee una estructura diagonal por bloques, por lo cual resulta innecesario emplear

técnicas de “mass lumping” al combinarse con un método de avance en tiempo explícito, como es característico en el método de elemento finito clásico.

Como resultado de utilizar el término clásico de estabilización  $\mathcal{O}(h^{-1})$ , donde  $h$  es el tamaño de la malla, la matriz de rigidez global es espectralmente de orden  $\mathcal{O}(h^{-2})$ , para todo  $\alpha \in (1, 2]$ ; lo cual no parece ser adecuado para esquemas de avance en tiempo explícitos, tales como el método de Euler, ya que produce una restricción para el tamaño de paso en tiempo severa de orden  $\mathcal{O}(h^2)$ . En el caso de difusión clásica, esquemas en tiempo implícitos son preferidos, ya que generan restricciones en tiempo menos severas; las cuales se imponen solamente por precisión; y además, utilizando esquemas iterativos eficientes preconditionados para resolver los sistemas lineales generados, donde el rendimiento computacional es proporcional al costo de la acción de un operador discreto sobre un vector. Desafortunadamente, debido a su naturaleza global, los operadores fraccionarios, como los tratados en este trabajo, no se benefician de esta propiedad, ya que su discretización produce matrices densas. Por esta razón optamos por introducir un término de estabilidad más adecuado de orden  $\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$  que apoye el uso de métodos explícitos para valores de  $\alpha$  pequeños.

Para nuestro conocimiento, el estudio de la condición de Courant-Friedrich-Levy (CFL) para discretizaciones espaciales Galerkin discontinuas ha sido abordado solamente para problemas hiperbólicos clásicos. Aquí se realiza por primera vez el estudio de las restricciones de tamaño de paso en tiempo del método LDG para el problema modelo (1.1).

Los resultados presentados en este trabajo referentes al método LDG aplicado a la ecuación de difusión fraccionaria fueron sometidos a publicación por Castillo y Gómez, [13].

## 2. Ecuación fraccionaria no lineal de Schrödinger:

Como una extensión de la ecuación no lineal de Schrödinger (NLS por sus siglas en inglés), ecuación fundamental utilizada para describir la mecánica cuántica relativística, Laskin en [16] propuso en el año 2000 la ecuación fraccionaria no lineal de Schrödinger (FNLS por sus siglas en inglés), reemplazando el operador Laplaciano clásico por el operador diferencial

fraccionario de Riesz  $(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}$ , de orden  $\alpha \in (1, 2)$ . Dicha ecuación es planteada en  $\mathbb{R}$  de la siguiente manera:

$$iu_t = (-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u - f'(|u|^2) u. \quad (1.2)$$

Para una descripción detallada de algunas de las aplicaciones de la ecuación FNLS puede referirse al trabajo realizado por Guo en [17].

Utilizando una técnica de dispersión inversa, Shabat y Zakharov [18] probaron que la ecuación NLS clásica exhibe un conjunto numerable de invariantes, los cuales están relacionados con la integrabilidad del problema. Un resultado similar de conservación fue obtenido por Guo, Han y Xin en [19] para la ecuación FNLS.

Al respecto de esta ecuación estamos interesados en el desempeño de dos versiones estabilizadas del método LDG. El objetivo del presente trabajo es analizar la conservación de la energía y del Hamiltoniano para la formulación semi-discreta; y para el método completamente discretizado utilizando tres métodos clásicos de avance en tiempo:

- Método de punto medio (implícito).
- Método modificado de Crank Nicolson (implícito).
- Método de Leapfrog (explícito).

Estos invariantes están definidos en su versión continua y sus análogos discretos de la siguiente manera:

	<b>Energía</b>	<b>Hamiltoniano</b>
<b>Continua :</b>	$\mathcal{E}(t) = \int_{\Omega}  u ^2,$	$\mathcal{H}(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left(  (-\Delta)^{\frac{\alpha}{4}} u ^2 - f( u ^2) \right),$
<b>Discreta :</b>	$\mathcal{E}_h(t) = \int_{\Omega}  u_h ^2,$	$\mathcal{H}_h(t) = \frac{1}{2} \left( \mathcal{A}_{\alpha}(u_h; \overline{u_h}) - \int_{\Omega} f( u_h ^2) \right),$

donde  $\mathcal{A}_{\alpha}(\cdot; \cdot)$  es la discretización del método LDG del operador de Riesz  $(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}$ .

Diferentes estudios realizados, como por ejemplo el realizado por Sanz Serna [20] y las referencias contenidas en su trabajo, muestran que el fallo de un método numérico en la conservación de estos invariantes aplicado a la ecuación clásica NLS puede producir un crecimiento al infinito del módulo de  $u$  en tiempo finito, fenómeno conocido como “blow-up” en inglés.

La primera aplicación del método LDG a ecuaciones NLS fue analizada por Xu y Shu en [21] y para una ecuación linealizada de Schrödinger en [22]. Recientemente, Aboelenen en [23], mostró orden óptimo de convergencia  $\mathcal{O}(h^{k+1})$  para el método minimal dissipation LDG (versión no estabilizada del método) aplicado a la ecuación FNLS y a un sistema de ecuaciones FNLS fuertemente acopladas.

Al utilizar el marco abstracto de los métodos dG aplicado a problemas elípticos presentado por Arnold, Brezzi, Cockburn y Marini [24], se mostrará que la conservación de ambos invariantes puede ser probada para otras discretizaciones espaciales que comparten la propiedad de preservar la simetría del operador de Riesz. Se estudiará la precisión de estos invariantes con respecto al parámetro de estabilización del método y la aproximación de la condición inicial. Se propone una nueva penalización para el método en los saltos de la variable primaria con un término dependiente de la malla de orden  $\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ ; y se muestra que el tamaño de paso en tiempo,  $\tau$ , del esquema de Leapfrog debe satisfacer una condición dependiente del orden fraccionario  $\alpha$  de la forma  $\tau \leq C_\alpha h^\alpha$  lo cual es muy atractivo ya que sugiere el uso de métodos explícitos en tiempo cuando el coeficiente de difusión,  $\alpha$ , es cercano a 1.

Los resultados presentados en este trabajo, referentes al método LDG aplicado a la ecuación no lineal de Schrödinger, fueron publicados por Castillo y Gómez para la versión clásica en [25] y para el caso fraccionario en [26].

## Capítulo 2

### PRELIMINARES

Antes de presentar la formulación débil del método LDG aplicado a los problemas introducidos anteriormente, comenzaremos con algunas definiciones relevantes y resultados básicos del cálculo fraccionario.

#### Definición 2.1 Integrales de Riemann-Liouville [27]

Las integrales izquierda y derecha de Riemann-Liouville de orden  $\alpha$ , con  $0 < \alpha < 1$ , están definidas, respectivamente, como sigue

$$({}_{-\infty}I_x^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_{-\infty}^x \frac{f(s)ds}{(x-s)^{1-\alpha}}, \quad ({}_xI_\infty^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^\infty \frac{f(s)ds}{(s-x)^{1-\alpha}}.$$

#### Definición 2.2 Derivadas de Riemann-Liouville [27]

Las derivadas fraccionarias izquierda y derecha de Riemann-Liouville de orden  $\alpha$ , están definidas para  $n-1 < \alpha < n$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , de la siguiente manera

$$({}_{-\infty}D_x^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left( \frac{d}{dx} \right)^n \int_{-\infty}^x \frac{f(s)ds}{(x-s)^{-n+1+\alpha}},$$
$$({}_xD_\infty^\alpha f)(x) = \frac{1}{\Gamma(n-\alpha)} \left( \frac{-d}{dx} \right)^n \int_x^\infty \frac{f(s)ds}{(s-x)^{-n+1+\alpha}}.$$

**Definición 2.3 Derivada de Riesz [28]**

Para  $\alpha > 0$ , la derivada fraccionaria de Riesz está dada por

$$\frac{\partial^\alpha}{\partial |x|^\alpha} u(x, t) = -(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}} u(x, t) = -\frac{(-\infty D_x^\alpha u(x, t)) + (x D_\infty^\alpha u(x, t))}{2 \cos\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}.$$

Para  $\alpha < 0$ , el Laplaciano fraccionario, se convierte en el operador fraccionario integral, el cual está definido formalmente como sigue

$$\Delta_{-\frac{\alpha}{2}} u(x) = -\frac{-\infty D_x^{-\alpha} u(x) + x D_\infty^{-\alpha} u(x)}{2 \cos\left(\frac{(2-\alpha)\pi}{2}\right)} = \frac{-\infty I_x^\alpha u(x) + x I_\infty^\alpha u(x)}{2 \cos\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}.$$

**Lema 2.1 (véase [27])**

Suponga que  $u^{(j)}(x) = 0$ , cuando  $x \rightarrow \pm\infty$ ,  $\forall 0 \leq j \leq n$ , ( $n-1 < \alpha < n$ ), entonces,

$$\begin{aligned} (-\infty D_x^\alpha u(x)) &= D^n (-\infty I_x^{n-\alpha} u(x)) = -\infty I_x^{n-\alpha} (D^n u(x)), \\ (x D_\infty^\alpha u(x)) &= (-D)^n (x I_\infty^{n-\alpha} u(x)) = x I_\infty^{n-\alpha} ((-D)^n u(x)). \end{aligned}$$

Para propósitos numéricos, se asume que existe un dominio  $\Omega = [a, b] \subset \mathbb{R}$  en el cual  $u$  tiene soporte compacto y se restringirá el problema a  $\Omega$ . Como una consecuencia, se imponen condiciones de borde de Dirichlet homogéneas para obtener:

$$(-\Delta)^{\alpha/2} u(x) = \frac{{}_a D_x^\alpha u(x) + x D_b^\alpha u(x)}{2 \cos\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right)}. \quad (2.1)$$

**Lema 2.2 (véase [29])**

. Los operadores derecho e izquierdo de Riemann-Liouville son adjuntos con respecto al producto interior de la norma  $L^2(a, b)$ , i.e.,

$$\langle {}_a I_x^\alpha u, v \rangle = \langle u, {}_x I_b^\alpha v \rangle, \quad \forall \alpha > 0.$$

## Capítulo 3

# MÉTODO LDG

La discretización del método LDG para un operador diferencial fraccionario genérico  $\mathcal{L}_\alpha(\cdot)$  de orden  $1 < \alpha < 2$ , como la presentada por Deng y Hesthaven en [9]; y, Xu y Hesthaven en [11], se deriva a partir de la siguiente descomposición abstracta de operadores y dos variables auxiliares

$$\mathcal{L}_\alpha := \frac{\partial}{\partial x} \circ I_\alpha \circ \frac{\partial}{\partial x}; \quad \mathbf{p} = -\frac{\partial u}{\partial x}, \quad \text{y} \quad \mathbf{q} = I_\alpha(\mathbf{p}),$$

donde

$$I_\alpha(v) = \begin{cases} I_\alpha^{RL}(v) := {}_{-\infty}I_x^{2-\alpha}(v) & \text{para el operador de Riemann-Liouville,} \\ I_\alpha^R(v) := c_\alpha ({}_{-\infty}I_x^{2-\alpha}(v) + {}_xI_\infty^{2-\alpha}(v)) & \text{para el operador de Riesz,} \\ & \text{donde } c_\alpha^{-1} = 2 \cos\left(\frac{2-\alpha}{2}\pi\right). \end{cases}$$

La idea general de utilizar, al menos en espíritu, una descomposición de este tipo no es nueva; por ejemplo, en [30], Perugia y Schötzau obtuvieron estimados de error en  $hp$  para el método LDG aplicado al problema de difusión dependiente del espacio en estado estacionario. En su análisis, el operador integral  $I_\alpha$  puede ser interpretado como la proyección  $L_2$  del operador de difusión.

Para una partición dada  $\mathcal{T}_h = \{x_m\}_{m=0}^N$  de  $\Omega$ , sea  $\mathbb{P}_k(I_m)$  el espacio de polinomios de grado a lo más  $k \geq 1$ , restringido a la celda  $I_m = [x_m, x_{m+1}]$ ; y el espacio de elemento finito  $\mathcal{V}_h = \prod_{I_m \in \mathcal{T}_h} \mathbb{P}_k(I_m)$ . Por simplicidad, asumimos un grado de distribución uniforme. Para todo  $t \in [0, T]$ , el método LDG busca aproximaciones  $u_h, \mathbf{p}_h$  y  $\mathbf{q}_h$  en  $\mathcal{V}_h$  tal que los siguientes sistemas de ecuaciones se cumplan respectivamente para cada celda  $I_m$ , y para toda función de prueba  $v, \mathbf{w}, \mathbf{z} \in \mathcal{V}_h$ :

- Ecuación de difusión fraccionaria:

$$\int_{I_m} \mathbf{p}_h \mathbf{z} = -\widehat{u}_h \mathbf{z} \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} + \int_{I_m} u_h \mathbf{z}_x, \quad (3.1a)$$

$$\int_{I_m} \mathbf{q}_h \mathbf{w} = \int_{I_m} I_\alpha(\mathbf{p}_h) \mathbf{w}, \quad (3.1b)$$

$$\int_{I_m} \frac{du_h}{dt} v = -v \widehat{\mathbf{q}}_h \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} + \int_{I_m} \mathbf{q}_h v_x + v S_u(u_h) \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} + \int_{I_m} f v, \quad (3.1c)$$

donde  $\mathbb{P}_k(I_m)$  es el espacio de polinomios de valores reales en la celda  $I_m$ .

- Ecuación fraccionaria no lineal de Schrödinger:

$$\int_{I_m} \mathbf{p}_h \bar{\mathbf{z}} = -\widehat{u}_h \bar{\mathbf{z}} \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} + \int_{I_m} u_h \bar{\mathbf{z}}_x, \quad (3.2a)$$

$$\int_{I_m} \mathbf{q}_h \bar{\mathbf{w}} = \int_{I_m} I_\alpha^R(\mathbf{p}_h) \bar{\mathbf{w}} + S_p(\mathbf{p}_h) \bar{\mathbf{w}} \Big|_{x_m}^{x_{m+1}}, \quad (3.2b)$$

$$i \int_{I_m} \frac{du_h}{dt} \bar{v} = \widehat{\mathbf{q}}_h \bar{v} \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} - \int_{I_m} \mathbf{q}_h \bar{v}_x + \bar{v} S_u(u_h) \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} - \int_{I_m} f'(|u_h|^2) u_h \bar{v}, \quad (3.2c)$$

donde  $\mathbb{P}_k(I_m)$  es el espacio de polinomios de valores complejos en la celda  $I_m$  y  $\bar{v}$  denota el conjugado complejo de  $v$ .

Los flujos numéricos,  $\widehat{u}$  y  $\widehat{\mathbf{q}}$ , son aproximaciones de  $u$  y  $\mathbf{q}$ , respectivamente, en la frontera de  $I_m$ , y son definidos como combinaciones lineales de la forma

$$\widehat{u}(x_m) = (1 - \lambda_m) u_m^+ + \lambda_m u_m^-, \quad \widehat{\mathbf{q}}(x_m) = \lambda_m \mathbf{q}_m^+ + (1 - \lambda_m) \mathbf{q}_m^-, \quad \text{con } \lambda_m \in \mathbb{R}, \quad (3.3)$$

donde  $u_m^\pm := \lim_{x \rightarrow x_m^\pm} u(x)$ . Sin embargo, en la práctica, se toma  $\lambda_m$  como un valor constante, para todo  $m$ . Las selecciones típicas son los flujos izquierdo, derecho y central ( $\Lambda_L, \Lambda_R, \Lambda_C$ ) los cuales corresponden a las constantes 0, 1 y 1/2 respectivamente.

Contrario al flujo central, los flujos direccionales (izquierdo y derecho), son atractivos ya que el estencil del operador Laplaciano es compacto; sin embargo, esto no es relevante para los operadores fraccionarios, ya que su discretización produce matrices densas. Las funciones  $S_p(\cdot)$  y  $S_u(\cdot)$  son los términos de estabilización. Para la ecuación FNLS consideramos dos elecciones diferentes:

a) LDG-I: representando la estabilización para el método LDG, cuando es aplicada solo a la variable auxiliar  $\mathbf{p}_h$ , Ecn.(3.2b);  $S_u(\cdot) \equiv 0$ . Como fue sugerido por Deng y Hesthaven en [9] para obtener orden de convergencia óptimo para el operador de Riemann Liouville, la estabilización tiene la siguiente forma

$$S_p(\mathbf{p}_h)(x_m) \stackrel{def}{=} \eta_m h^\alpha \left( \mathbf{p}_h^{m+1}(x_m^+) - \mathbf{p}_h^m(x_m^-) \right), \quad \eta_m > 0. \quad (3.4)$$

b) LDG-II: representando la estabilización para el método LDG donde  $S_p(\cdot) \equiv 0$ . Consideramos el siguiente término de estabilización aplicado solo a la variable primaria  $u_h$ , Ecn. (3.2c), similarmente al usado para el operador Laplaciano en [31]:

$$S_u(u_h)(x_m) \stackrel{def}{=} \eta_m h^{1-\alpha} \left( u_h^{m+1}(x_m^+) - u_h^m(x_m^-) \right), \quad \eta_m > 0. \quad (3.5)$$

Nos referiremos al método estabilizado; o simplemente, el método LDG donde una penalización ( $\eta_m > 0$ ) es utilizada en todos los puntos de la malla; y como el método minimal dissipation LDG (mdLDG), como fue sugerido por Cockburn y Dong en [32], donde la penalización es impuesta solo en uno de los puntos extremos.

Denotando por  $U_h$  la expansión de  $u_h$  en una base fija de  $\mathcal{V}_h$ ; y por  $M, B, I_\alpha, S$  la matriz de masa global, y los operadores discretos del gradiente, integral fraccionaria y penalización, respectivamente; a partir de la definición particular de los flujos numéricos Ecn. (3.3); los sistemas de ecuaciones (3.1a)-(3.1c) y (3.2a)-(3.2c) pueden reducirse a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, respectivamente, para la variable primaria de la siguiente manera:

- Ecuación de difusión fraccionaria:

$$M \frac{dU_h}{dt} = -A_\alpha U_h + F_h(t), \quad (3.6)$$

donde solamente se considerará la versión LDG-II, es decir:  $A_\alpha = B^T M^{-1} I_\alpha M^{-1} B + S_u$ .

- Ecuación fraccionaria no lineal de Schrödinger:

$$iM \frac{dU_h}{dt} = A_\alpha U_h - N_h(U_h), \quad (3.7)$$

donde  $N_h(\cdot)$  es la discretización del potencial no lineal y  $A_\alpha$  es la matriz real que representa la forma bilineal del LDG:

$$A_\alpha = \begin{cases} B^T M^{-1}(I_\alpha + S_p)M^{-1}B, & \text{LDG-I,} \\ B^T M^{-1}I_\alpha M^{-1}B + S_u, & \text{LDG-II.} \end{cases}$$

Por la propiedad de adjuntos del operador de Riemann-Liouville, Lema 2.2, la matriz de coeficientes reales  $I_\alpha$  correspondiente al operador de Riesz es simétrica. Denotando por  $\Delta_0 := I_d$  (el operador identidad), la matriz  $I_\alpha$  es simplemente la matriz de masa  $M$  para el problema de difusión clásica,  $\alpha = 2$ ; de manera que, usando nuestra formulación, LDG-II, podemos recuperar la discretización original del método LDG del operador Laplaciano,  $A_2 = B^T M^{-1}B + S_u$ , [31], lo cual no es el caso para la formulación del LDG-I. Sin embargo, la matriz  $A_\alpha$  es simétrica para  $1 < \alpha \leq 2$  y ambas versiones estabilizadas.

# Capítulo 4

## MÉTODO LDG Y ECUACIÓN DE DIFUSIÓN FRACCIONARIA

En este capítulo se considerará la ecuación de difusión fraccionaria con operadores diferenciales de Riemann-Liouville o de Riesz de orden  $1 < \alpha < 2$ . Nuestro interés es realizar un análisis de error para el método mdLDG al introducir un término de penalización para la variable primaria, de orden  $\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ ; y además, utilizando un análisis de von Neumann, encontrar condiciones de estabilidad para el método de Euler explícito y ambos operadores fraccionarios.

Sea  $\langle u, v \rangle_h := \sum_{m=0}^{N-1} \int_{x_m}^{x_{m+1}} u(x)v(x)dx$ . Sumando la ecuaciones (3.1a)-(3.1c) sobre todas las celdas en  $\mathcal{T}_h$ ; y, utilizando la relación de los saltos en los flujos  $\hat{u} \llbracket v \rrbracket - \llbracket uv \rrbracket = -\hat{v} \llbracket u \rrbracket$ , la solución  $(u_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h)$  del método LDG semi-discreto satisface, para toda  $v, \mathbf{w}, \mathbf{z} \in \mathcal{V}_h$ ; y para todo  $t \in (0, T]$ ,

$$\mathcal{A}_\alpha((u_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h); (v, \mathbf{w}, \mathbf{z})) = \mathcal{L}((v, \mathbf{w}, \mathbf{z})),$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_\alpha((u_h, \mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h); (v, \mathbf{w}, \mathbf{z})) &:= \langle \mathbf{p}_h, \mathbf{z} \rangle_h - \langle u_h, \mathbf{z}_x \rangle_h - \sum_{m=1}^{N-1} \widehat{u}_h \llbracket \mathbf{z} \rrbracket (x_m, t) \\ &+ \langle \mathbf{q}_h, \mathbf{w} \rangle_h - \langle I_\alpha(\mathbf{p}_h), \mathbf{w} \rangle_h + \left\langle \frac{du_h}{dt}, v \right\rangle_h - \langle \mathbf{q}_h, v_x \rangle_h \\ &- \sum_{m=1}^{N-1} \widehat{\mathbf{q}}_h \llbracket v \rrbracket (x_m, t) - (\mathbf{q}_h v)(a^+, t) + (\mathbf{q}_h v)(b^-, t) \\ &+ \sum_{m=1}^{N-1} \eta_m \llbracket u_h \rrbracket \llbracket v \rrbracket (x_m, t) + \eta_0(u_h v)(a^+, t) + \eta_N(u_h v)(b^-, t), \end{aligned} \quad (4.1a)$$

$$\mathcal{L}((v, \mathbf{w}, \mathbf{z})) := \langle f, v \rangle_h \quad (4.1b)$$

#### 4.1. Estimado de error

Para motivar el uso del término propuesto de estabilidad, de orden  $\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ , se muestra que bajo algunas condiciones adicionales de regularidad las tasas de convergencia óptimas pueden ser alcanzadas. Aunque la prueba utiliza una técnica similar a la presentada en trabajos previos [9, 11, 12, 33], el análisis teórico es llevado a cabo por completitud. El análisis recae en tres ingredientes básicos:

- 1) Algunos resultados importantes sobre derivadas fraccionarias, presentados en [9, 11], los cuales fueron obtenidos por aplicación directa de las propiedades de semigrupo, Lema 2.1, y adjunto, Lema 2.2, de las integrales de Riemann-Liouville:

##### Lema 4.1

Sea  $s = (2 - \alpha)/2$  entonces

$$\langle I_\alpha^{RL}(w), w \rangle_h = \cos(s\pi) \|w\|_{H^{-s}}^2, \quad \text{Lema 2.6, p. 1850. [9]} \quad (4.2)$$

$$\langle I_\alpha^R(w), w \rangle_h = \|w\|_{H^{-s}}^2, \quad \text{Lema 2.9, p. 409. [11],} \quad (4.3)$$

donde la norma  $\|\cdot\|_{H^{-s}}$ , para algún  $s > 0$ , es obtenido por  $\|u\|_{H^{-s}} := \|\omega|^{-s}\hat{u}\|$  y  $\hat{u}$  es la transformada de Fourier de  $u$ .

- 2) Un tipo de desigualdad de Gronwall, presentado en [33]:

##### Lema 4.2

Sean  $R$ ,  $A$  y  $B$  funciones no negativas, tal que para toda  $t \geq 0$  la siguiente desigualdad se satisface

$$x^2(t) + R(t) \leq A(t) + 2 \int_0^t B(\zeta)x(\zeta)d\zeta.$$

Entonces para algún  $T > 0$  tenemos  $\sqrt{x^2(T) + R(T)} \leq \sup_{0 \leq t \leq T} \sqrt{A(t)} + \int_0^T B(\zeta)d\zeta$ .

3) Operadores de proyección adecuados: la proyección  $L_2$ , la cual se denotará por  $\pi_h$ ; y los operadores de proyección  $R_h^\pm$  analizados en [33], definidos por

$$\int_{-1}^1 (u - R_h^\pm u) v = 0, \quad \forall v \in \mathbb{P}^{k-1}([-1, 1]); \quad R_h^\pm u(1) = u(\mp 1).$$

**Proposición 4.1 [Estimado de error para el mdLDG con operador de RL]**

Asuma que existe  $h_0 > 0$  tal que  $\mathbf{q} \in W^{k+1, \infty}([h_0, b])$ , entonces para  $0 < h < \min\{h_0, 1\}$  se tiene

$$\|u(\cdot, t) - u_h(\cdot, t)\| \leq Ch^{k+1},$$

donde la constante  $C$  depende de  $|u|_{H^{k+1}(\Omega)}$ ,  $|\mathbf{p}|_{H^{k+1}(\Omega)}$ ,  $|\mathbf{q}|_{H^{k+1}(\Omega)}$  y  $|\mathbf{q}|_{W^{k+1, \infty}((h_0, b])}$ .

**Prueba.**

Utilizando el flujo izquierdo,  $\Lambda_L$ , el método mdLDG está definido estableciendo  $\eta_0 = \eta_1 = \dots = \eta_{N-1} = 0$  y  $\eta_N = \gamma h^{1-\alpha}$ , con  $\gamma > 0$ . Sea  $e = (u - u_h, \mathbf{p} - \mathbf{p}_h, \mathbf{q} - \mathbf{q}_h)$  el vector del error;  $\pi_u = R_h^-$ ,  $\pi_p = \pi_h$  y  $\pi_q = R_h^+$ ; y  $\pi$  el operador proyector  $(\pi_u(\cdot), \pi_p(\cdot), \pi_q(\cdot))$ . Por ortogonalidad de Galerkin, para cualquier  $v_h, \mathbf{w}_h, \mathbf{z}_h \in \mathcal{V}_h$ ,

$$\mathcal{A}_\alpha(\pi(e); (v_h, \mathbf{w}_h, \mathbf{z}_h)) = \mathcal{A}_\alpha(\xi; (v_h, \mathbf{w}_h, \mathbf{z}_h)) \quad (4.4)$$

donde  $\xi = (\pi_u(u) - u, \pi_p(\mathbf{p}) - \mathbf{p}, \pi_q(\mathbf{q}) - \mathbf{q})$ . Sea  $(v_h, \mathbf{w}_h, \mathbf{z}_h) = (\pi_u(e_u), -\pi_p(e_p), \pi_q(e_q))$ , entonces por las propiedades de ortogonalidad de los operadores de proyección y la definición de la forma bilineal  $\mathcal{A}_\alpha(\cdot; \cdot)$ , (4.1a), se obtiene a partir de la Ecn. (4.4)

$$\frac{1}{2} \frac{d\|v_h\|^2}{dt} + \langle I_\alpha^{RL}(\mathbf{w}_h), \mathbf{w}_h \rangle_h + \eta_N v_h^2(b^-, t) = \left\langle \frac{d\xi_u}{dt}, v_h \right\rangle_h + \langle \xi_q - I_\alpha^{RL}(\xi_p), \mathbf{w}_h \rangle_h + (\xi_q v_h)(b^-, t).$$

Aplicando la desigualdad de Young a los últimos dos términos, se obtiene la siguiente desigualdad

$$\frac{1}{2} \frac{d\|v_h\|^2}{dt} + \langle I_\alpha^{RL}(\mathbf{w}_h), \mathbf{w}_h \rangle_h \leq \left\langle \frac{d\xi_u}{dt}, v_h \right\rangle_h + \frac{1}{\epsilon} \|\xi_{\mathbf{q}} - I_\alpha^{RL}(\xi_{\mathbf{p}})\|^2 + \epsilon \|\mathbf{w}_h\|^2 + \frac{1}{\eta_N} \xi_{\mathbf{q}}^2(b^-, t),$$

para algún  $\epsilon > 0$ . Por el Lema 4.1 Ecn. (4.2), tenemos

$$\langle I_\alpha^{RL}(\mathbf{w}_h), \mathbf{w}_h \rangle_h = \cos(s\pi) \|\mathbf{w}_h\|_{H^{-s}}^2.$$

Por la equivalencia de las normas en un espacio de dimensión finita,  $\mathcal{V}_h$ , existe una constante positiva  $C_\alpha$  tal que la siguiente desigualdad se cumple

$$\frac{1}{2} \frac{d\|v_h\|^2}{dt} + (\cos(s\pi) - \epsilon C_\alpha) \|\mathbf{w}_h\|_{H^{-s}}^2 \leq \left\langle \frac{d\xi_u}{dt}, v_h \right\rangle_h + \frac{1}{\epsilon} \|\xi_{\mathbf{q}} - I_\alpha^{RL}(\xi_{\mathbf{p}})\|^2 + \frac{1}{\eta_N} \xi_{\mathbf{q}}^2(b^-, t). \quad (4.5)$$

Escogiendo  $\epsilon$  suficientemente pequeño se obtiene

$$\frac{1}{2} \frac{d\|v_h\|^2}{dt} \leq \left\langle \frac{d\xi_u}{dt}, v_h \right\rangle_h + \frac{1}{\epsilon} \|\xi_{\mathbf{q}} - I_\alpha^{RL}(\xi_{\mathbf{p}})\|^2 + \frac{1}{\eta_N} \xi_{\mathbf{q}}^2(b^-, t).$$

Aplicando el Lema 4.2, para algún  $T > 0$  tenemos

$$\|v_h(T)\| \leq \sup_{0 \leq t \leq T} \sqrt{\int_0^t A(\zeta) d\zeta} + \int_0^T \left\| \frac{d\xi_u}{dt}(\zeta) \right\| d\zeta.$$

donde

$$A(t) = \frac{1}{\epsilon} \|\xi_{\mathbf{q}} - I_\alpha^{RL}(\xi_{\mathbf{p}})\|^2 + \frac{1}{\eta_N} \xi_{\mathbf{q}}^2(b^-, t).$$

A partir de las asunciones de regularidad de  $\mathbf{q}$  y el Lema de Bramble-Hilbert, existe una constante positiva  $C_b$ , independiente de  $h$  y  $\mathbf{q}$ , tal que

$$|\xi_{\mathbf{q}}(b^-, t)| \leq C_b h^{k+1} |\mathbf{q}|_{W^{k+1, \infty}([h_0, b])}.$$

Entonces, como  $1 < \alpha < 2$ , se obtiene la siguiente cota superior

$$\frac{1}{\eta_N} \xi_{\mathbf{q}}^2(b^-, t) \leq \frac{C_b}{\gamma} h^{2k+1+\alpha} |\mathbf{q}|_{W^{k+1, \infty}([h_0, b])}^2 \leq \frac{C_b}{\gamma} h^{2k+2} |\mathbf{q}|_{W^{k+1, \infty}([h_0, b])}^2, \quad \text{para } h < 1.$$

La cota deseada se obtiene por las propiedades de aproximación de los proyectores, y el hecho que  $\|I_\alpha^{RL}(\xi \mathbf{p})\| = \mathcal{O}(h^{k+1})$  como se muestra en el Lema 2.14 p. 5, [11].  $\square$

**Proposición 4.2 [Estimado de error para el mdLDG con operador de Riesz]**

Asumamos que existe  $h_0 > 0$  tal que  $\mathbf{q} \in W^{k+1,\infty}([h_0, b])$ , entonces para  $0 < h < \min\{h_0, 1\}$  tenemos

$$\|u(\cdot, t) - u_h(\cdot, t)\| \leq Ch^{k+1},$$

donde la constante  $C$  depende de  $|u|_{H^{k+1}(\Omega)}$ ,  $|\mathbf{p}|_{H^{k+1}(\Omega)}$ ,  $|\mathbf{q}|_{H^{k+1}(\Omega)}$  y  $|\mathbf{q}|_{W^{k+1,\infty}((h_0, b])}$ .

**Prueba.**

La prueba es similar a la del operador de Riemann-Liouville, y utiliza la propiedad del Lema 4.1 Ecn. (4.3).

$\square$

**Observación 1.** Seleccionando  $\pi_u = \pi^+$  y  $\pi_q = \pi^-$ , e imponiendo la condición de regularidad extra en el extremo izquierdo, los estimados de las Proposiciones 4.2 y 4.1 se cumplen para los flujos numéricos en la dirección opuesta.

**4.2. Condición Courant Friedrich Levy (CFL) para el método Forward Euler-LDG.**

El concepto de estabilidad numérica es fundamental en la simulación de problemas transitorios; el cual consiste en establecer la relación que debe ocurrir entre la resolución temporal y la espacial de un esquema numérico para que la aproximación no presente oscilaciones, las cuales podrían crecer sin control, degradando completamente la calidad de la aproximación; particularmente, en discretizaciones temporales explícitas. Denotamos por  $\tau, h \in \mathbb{R}^+$  los parámetros de la discretización temporal y espacial; y por  $\eta_\alpha \geq 0$  el coeficiente de estabilización; los cuales se consideran constantes para llevar a cabo el análisis de estabilidad de von Neumann; y por,  $u_m^n$ , la aproximación de  $u(mh, n\tau)$  para todo  $m \in \mathbb{Z}$  y  $n \in \mathbb{N}$ . A diferencia de un esquema de diferencias finitas, las condiciones de estabilidad de un método Galerkin discontinuo aplicado a un problema escalar son más difíciles de obtener ya que son

derivadas del análisis aplicado a sistemas de ecuaciones diferenciales parciales; por lo tanto el factor de amplificación,  $G$ , es una matriz aún para una ecuación escalar. Recordamos que en sistemas la condición de estabilidad, en la norma  $L_2$ , requiere que para cada  $T > 0$  haya una constante  $C_T$ , la cual no depende de  $\tau$  o de  $h$ , y tal que para  $0 \leq n\tau \leq T$  tenemos

$$\|G^n\|_2 \leq C_T.$$

Ya sea para el operador diferencial de Riesz o de Riemann-Liouville, la formulación del LDG (3.1a)–(3.1c) se escribe localmente como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_m &= M_m^{-1} B_1(\mathbf{u}_{m-1}, \mathbf{u}_m, \mathbf{u}_{m+1}) \\ \mathbf{q}_m &= M_m^{-1} I_\alpha(\dots, p_{m-1}, p_m, p_{m+1}, \dots), \\ \frac{d\mathbf{u}_m}{dt} &= -B_2(\mathbf{q}_{m-1}, \mathbf{q}_m, \mathbf{q}_{m+1}) - \eta S(\mathbf{u}_{m-1}, \mathbf{u}_m, \mathbf{u}_{m+1}). \end{aligned} \quad (4.6a)$$

El método completamente discreto FE-LDG, Euler explícito en tiempo y el método LDG en espacio, está definido para toda celda  $I_m$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ , como sigue

$$P_m^n = \frac{2}{h} M_o^{-1} B_1(U_{m-1}^n, U_m^n, U_{m+1}^n), \quad (4.7a)$$

$$Q_m^n = \left(\frac{h}{2}\right)^{2-\alpha} M_o^{-1} I_\alpha(\dots, P_{m-1}^n, P_m^n, P_{m+1}^n, \dots), \quad (4.7b)$$

$$U_m^{n+1} = U_m^n - 2\frac{\tau}{h} M_o^{-1} \left( B_2(Q_{m-1}^n, Q_m^n, Q_{m+1}^n) - \eta_\alpha S(U_{m-1}^n, U_m^n, U_{m+1}^n) \right), \quad (4.7c)$$

donde  $M_o$  es la matriz de masa local en la celda de referencia  $[-1, 1]$  y;  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $I_\alpha$  y  $S$  son operadores lineales. Contrario al operador Laplaciano clásico; donde  $I_\alpha$  puede ser pensado como la proyección local  $L_2$ ; para los valores  $1 < \alpha < 2$ ,  $I_\alpha$  es un operador global, actuando así en todas las celdas, (4.7b).

A partir de una definición particular de los flujos numéricos, Ecn. (3.3), tenemos  $\widehat{B}_2 = \widehat{B}_1^*$ . Entonces las condiciones de estabilidad del método FE-LDG aplicado al problema de

valores iniciales se obtienen de las propiedades de la matriz

$$\widehat{A}_\alpha = \widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}, \quad 1 < \alpha < 2,$$

donde  $\widehat{B}_1, \widehat{B}_2, \widehat{I}_\alpha$  y  $\widehat{S}$  son los símbolos de los operadores discretos  $B_1, B_2, I_\alpha$  y  $S$ , respectivamente. Permítanos recordar que los símbolos son matrices cuadradas complejas de orden  $k+1$  y dependen de la frecuencia  $\omega \in [-\pi, \pi]$ . Nuestro análisis recae en el supuesto de que, para todo  $\omega \in [-\pi, \pi]$ , el símbolo  $\widehat{I}_\alpha^R$  es Hermítica definida positiva para toda  $\alpha \in (1, 2]$ , así  $\widehat{A}_\alpha^R$  es Hermítica no negativa. El hecho que  $\|\cdot\|_{H^{-\frac{2-\alpha}{2}}}$  es una norma para  $1 < \alpha < 2$  sugiere que éste es un supuesto razonable. La Figura 4-1 muestra que para toda frecuencia  $\omega \in [-\pi, \pi]$ ; para valores diferentes de  $\alpha$  y grados de aproximación; el mínimo autovalor de  $\widehat{I}_\alpha^R$  es positivo, confirmando nuestra hipótesis. Nótese sin embargo, que para el operador Laplaciano clásico,  $\alpha = 2$ , el supuesto puede ser fácilmente probado, como se muestra en la Proposición 4.5.

### Lema 4.3

Para cualquier grado de aproximación  $k \geq 0$ , el símbolo  $\widehat{S}$  del operador de estabilización  $S(\cdot)$  es Hermítico no negativo.

#### *Prueba.*

Utilizando los polinomios de Legendre como base local en la celda de referencia  $[-1, 1]$ , obtenemos

$$\begin{aligned} \widehat{S} &= e^{-i\omega} [L_i(-1)L_j(1)] + [L_i(-1)L_j(-1) + L_i(1)L_j(1)] + e^{i\omega} [L_i(1)L_j(-1)], \\ &= 2 \begin{bmatrix} a & ib & a & ib & \dots \\ -ib & c & -ib & c & \dots \\ a & ib & a & ib & \dots \\ -ib & c & -ib & c & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

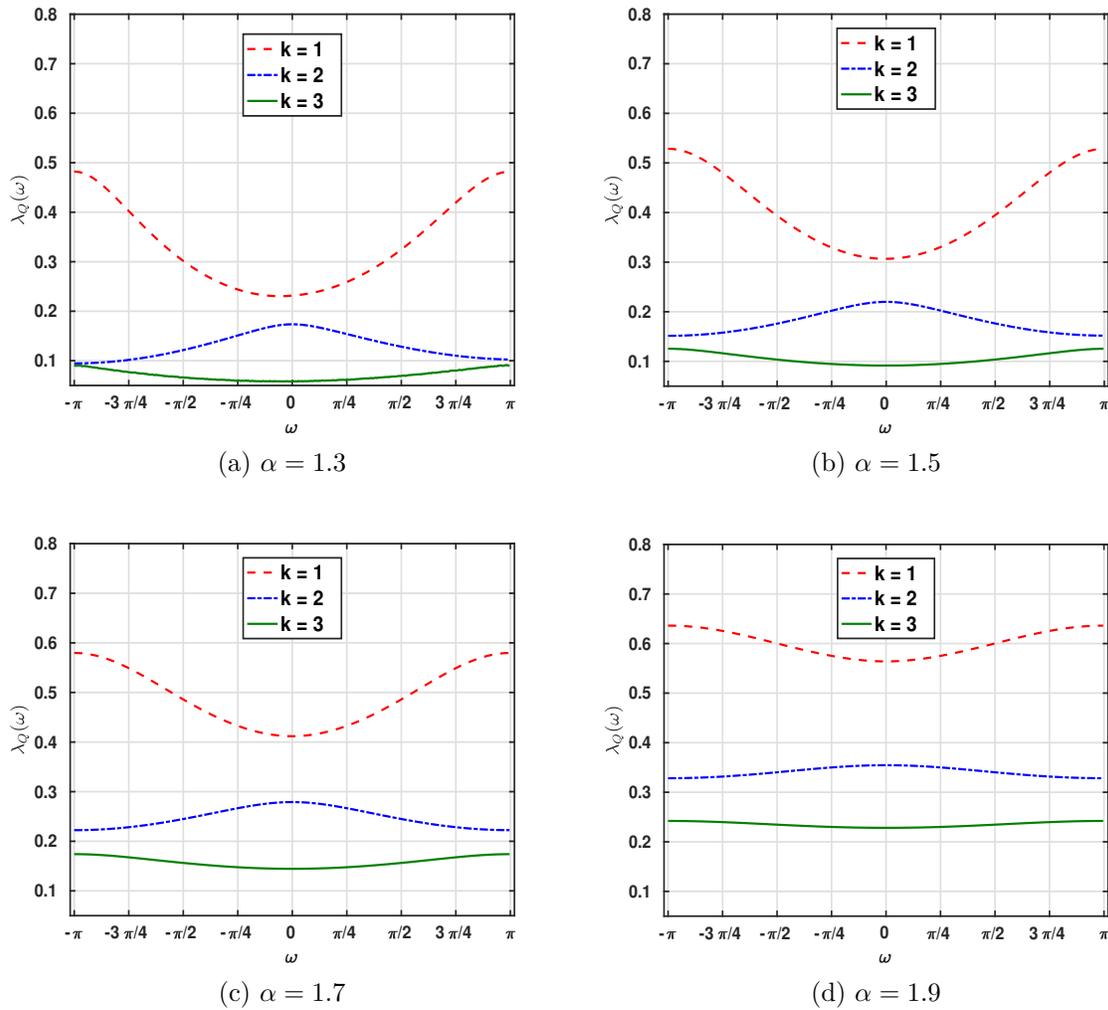


Figura 4-1: Autovalor mínimo de  $\widehat{I}_\alpha^R(\omega)$ ,  $\omega \in [-\pi, \pi]$ ,  $\alpha \in \{1.3, 1.5, 1.7, 1.9\}$

donde  $a = 1 - \cos(\omega)$ ,  $b = \sin(\omega)$  y  $c = 1 + \cos(\omega)$ . Notando que  $a$ ,  $b$  y  $c$  satisfacen la siguiente relación

$$\frac{a}{ib} = \frac{-ib}{c}, \quad \text{para } \omega \neq \pm\pi, 0,$$

deducimos que, para algún  $\omega \in [-\pi, \pi]$ ,  $\widehat{S}$  es una matriz de rango uno; aún para  $\omega = \pm\pi$  y 0. Ya que  $\widehat{S}$  es, obviamente Hermítica, por lo tanto diagonalizable, solamente posee dos autovalores: 0 con multiplicidad  $k$  y un autovalor no nulo,  $\lambda_1$ , cuyo valor exacto se presenta en la Tabla 4-1. El resultado se mantiene ya que  $\lambda_1 > 0$ .  $\square$

Tabla 4-1: Autovalor no nulo  $\lambda_1$  de  $\widehat{S}$ 

$k$	$\omega$		
	$\pm\pi$	0	$\neq \pm\pi, 0$
$2m$	$4(m+1)$	$4m$	$2(2m+1 - \cos(\omega))$
$2m+1$	$4(m+1)$	$4m$	$4(m+1)$

**Proposición 4.3**

Para cualquier grado de aproximación y  $\gamma \geq 0$ , la matriz  $\widehat{A}_\alpha^R = \widehat{B}_2 M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$  es Hermítica no negativa; y todos los autovalores de  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R$  son no negativos.

**Prueba.**

Primero, nótese que  $\widehat{A}_\alpha^R = \widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$ . Así  $\widehat{A}_\alpha^R$  es Hermítica. Por el Lema 4.3, es suficiente mostrar que para alguna frecuencia dada  $\omega$ ,  $\widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1$  es no negativa. Ya que la matriz de masa local,  $M_o$ , es simétrica definida positiva; y por las propiedades de  $\widehat{I}_\alpha^R$ , tenemos

$$\langle \widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 x, x \rangle = \langle \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 x, M_o^{-1} \widehat{B}_1 x \rangle \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{C}^{k+1}.$$

Sea  $LL^T$  la factorización de Cholesky de  $M_o^{-1}$ . Como  $\sigma(M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R) = \sigma(L^{-1} \widehat{A}_\alpha^R L^{-T})$ , donde  $\sigma(A)$  denota el espectro de la matriz  $A$ . Para algún autovalor  $\lambda$  de  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R$ ; existe un vector no nulo  $x \in \mathbb{C}^{k+1}$  tal que  $L^{-1} \widehat{A}_\alpha^R L^{-T} x = \lambda x$ . Ya que  $\widehat{A}_\alpha^R$  es Hermítica no negativa, tenemos

$$\lambda \|x\|^2 = \langle L^{-1} \widehat{A}_\alpha^R L^{-T} x, x \rangle = \langle \widehat{A}_\alpha^R L^{-T} x, L^{-T} x \rangle \geq 0 \quad \therefore \quad \lambda \geq 0.$$

□

Comparado a la restricción en tiempo del método de Euler impuesta para el problema de difusión clásica ( $\alpha = 2$ ), la cual es de orden  $h^2$ , los siguientes resultados muestran que las condiciones de estabilidad requeridas para la ecuación de difusión fraccionaria, con orden fraccionario ( $1 < \alpha < 2$ ), son proporcionales a  $h^\alpha$ , lo cual significa que hay una restricción

mucho menos severa para la variable de discretización temporal  $\tau$ , para valores de  $\alpha$  cercanos a 1.

#### Proposición 4.4

Para cualquier grado de aproximación, una condición necesaria y suficiente de estabilidad para el método FE-LDG aplicado al problema modelo fraccionario unidimensional con el operador diferencial de Riesz es

$$\tau \leq \left( \frac{1}{2^{\alpha-1} \lambda_{max}(k)} \right) h^\alpha, \quad (4.8)$$

donde  $\lambda_{max}(k)$  es el valor propio más grande de  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R$ .

#### *Prueba.*

Sea  $I_k$  la matriz identidad de orden  $k + 1$  y  $\mu = \tau/h^\alpha$ . Seleccionamos, por conveniencia,  $\eta_\alpha = \gamma(2/h)^{\alpha-1}$  con  $\gamma \geq 0$ . Entonces el símbolo  $\widehat{G}_\alpha$  del esquema FE-LDG se reduce a  $\widehat{G}_\alpha = I_k - 2^\alpha \mu M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R$ . Por lo tanto una condición necesaria de estabilidad es

$$|1 - 2^\alpha \mu \lambda| \leq 1, \quad \forall \lambda \in \sigma(M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R), \quad (4.9)$$

$$1 - 2^{\alpha+1} \mu \lambda + 2^{2\alpha} \mu^2 \lambda^2 \leq 1, \quad \forall \lambda \in \sigma(M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^R), \quad (4.10)$$

la cual, despejando y por la Proposición 4.3, es equivalente a la condición Ecn. (4.8).

Sea  $\widehat{H}_\alpha = I_k - 2^\alpha \mu L^{-1} \widehat{A}_\alpha^R L^{-T}$ . Nótese que  $\widehat{H}_\alpha$  es Hermítica, por lo tanto el radio espectral  $\rho(\widehat{H}_\alpha) = \|\widehat{H}_\alpha\|$ , donde  $\|\cdot\|$  es la norma matricial inducida por la norma  $l_2$ . Como  $\widehat{G}_\alpha = L^{-T} \widehat{H}_\alpha L^T$ ,  $\rho(\widehat{H}_\alpha) = \rho(\widehat{G}_\alpha)$ . Entonces, para toda  $n \in \mathbb{N}$ , se tiene

$$\|\widehat{G}_\alpha^n\| \leq \|L^{-T}\| \|L^T\| \|\widehat{H}_\alpha^n\| = \|L^{-T}\| \|L^T\| \rho(\widehat{H}_\alpha)^n = \|L^{-T}\| \|L^T\| \rho(\widehat{G}_\alpha)^n.$$

Si la condición de estabilidad (4.9) se satisface,  $\|\widehat{G}_\alpha^n\|_2$  está acotada por  $\|L^{-T}\| \|L^T\|$  y el método es estable.  $\square$

### Proposición 4.5

Para cualquier grado de aproximación, una condición necesaria y suficiente de estabilidad para el método FE-LDG aplicado a la ecuación de difusión clásica unidimensional es

$$\tau \leq \frac{1}{2\lambda_{\max}(k)} h^2 \quad (4.11)$$

donde  $\lambda_{\max}(k)$  es el valor propio más grande de  $M_o^{-1}\widehat{A}_2$ .

#### *Prueba.*

Para el operador Laplaciano clásico, las Ecns (4.7a)-(4.7c) se pueden reducir a

$$\begin{aligned} Q_m^n &= \frac{2}{h} M_o^{-1} B_1(U_{m-1}^n, U_k^n, U_{m+1}^n), \\ U_m^{n+1} &= U_m^n - 2\frac{\tau}{h} M_o^{-1} \left( B_2(Q_{m-1}^n, Q_k^n, Q_{m+1}^n) - \eta S(U_{m-1}^n, U_m^n, U_{m+1}^n) \right). \end{aligned}$$

En este caso, la matriz  $\widehat{A}_2 = \widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$ . Considerando la descomposición de Cholesky,  $M_o = LL^T$ ,  $\widehat{A}_2 = (L^{-1} \widehat{B}_1)^* L^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$ , luego, el resultado se obtiene de manera análoga a la Proposición 4.4.  $\square$

**Observación 2.** Un simple cálculo muestra que la condición CFL para aproximaciones contantes,  $k = 0$  es  $1/2$ ; la cual coincide con aquella del esquema de diferencias finitas clásicas forward in time central in space (FTCS).

**Observación 3.** El análisis de estabilidad de von Neumann también incluye el caso cuando todas las celdas son estabilizadas con un término proporcional a  $h^{1-\alpha}$ . Aunque hemos observado, numéricamente, tasas óptimas de convergencia para la variable primaria, esto no puede ser justificado con la técnica y las propiedades de aproximación de los operadores de proyección utilizadas en la Proposición 4.2.

Utilizando una relación entre los operadores integrales  $I_\alpha^R$  y  $I_\alpha^{RL}$ ; y con ligeras modificaciones de su argumento, condiciones de estabilidad análogas pueden ser derivadas para el

FE-LDG aplicado al operador diferencial de Riemann-Liouville. Si bien la pérdida de simetría del operador integral  $I_\alpha^{RL}$  impide obtener una demostración de la suficiencia de estas condiciones, experimentos numéricos parecen indicar que podrían ser suficientes.

#### Proposición 4.6

Para cualquier grado de aproximación y  $\gamma \geq 0$ , la matriz  $\widehat{A}_\alpha^{RL} = \widehat{B}_1^* M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^{RL} M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$  es no negativa y la parte real de cualquier valor propio de  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha$  es no negativa.

#### Prueba.

Por las propiedades de  $\widehat{I}_\alpha^R$  y como  $\frac{1}{2} (\widehat{I}_\alpha^{RL} + (\widehat{I}_\alpha^{RL})^*) = c_\alpha \widehat{I}_\alpha^R$ , donde  $c_\alpha = \cos\left(\frac{\alpha-2}{2}\pi\right) \geq 0$ , el símbolo  $\widehat{I}_\alpha^{RL}$  es positivo. Entonces, procediendo como en la Proposición 4.3 y utilizando el Lema 4.3, puede deducirse que  $\widehat{A}_\alpha^{RL}$  es no negativa.

Sea  $(\lambda, x)$  un eigenpar  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^{RL}$  (o  $L^{-1} \widehat{A}_\alpha^{RL} L^{-T}$ ); donde  $x \in \mathbb{C}^{k+1}$ ,  $x \neq 0$ . Sea  $a = \text{Re}(\lambda)$  y  $b = \text{Im}(\lambda)$  las partes real e imaginaria de  $\lambda$ , respectivamente. Como  $\widehat{A}_\alpha^{RL}$  es no negativo; tenemos

$$a\|x\|^2 = \text{Re}(\langle L^{-1} \widehat{A}_\alpha^{RL} L^{-T} x, x \rangle) = \text{Re}(\langle \widehat{A}_\alpha^{RL} L^{-T} x, L^{-T} x \rangle) \geq 0 \quad \therefore \quad a \geq 0. \quad \square$$

#### Proposición 4.7

Para cualquier grado de aproximación, una condición de estabilidad necesaria para el método FE-LDG aplicado al problema modelo fraccionario unidimensional con el operador diferencial de Riemann-Liouville es

$$\tau \leq \frac{\Lambda}{2^{\alpha-1}} h^\alpha, \quad (4.12)$$

donde  $\Lambda = \min \left\{ \text{Re}(\lambda)/|\lambda|^2 : \lambda \in \sigma \left( M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^{RL} \right) \right\}$ .

#### Prueba.

Sean  $\mu = \tau/h^\alpha$  y  $\eta_\alpha = \gamma(2/h)^{\alpha-1}$  con  $\gamma \geq 0$ . Como el símbolo  $\widehat{G}_\alpha$  del método FE-LDG se reduce a  $\widehat{G}_\alpha = I_k - 2^\alpha \mu M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha^{RL}$ ; una condición de  $L_2$  estabilidad necesaria es que para

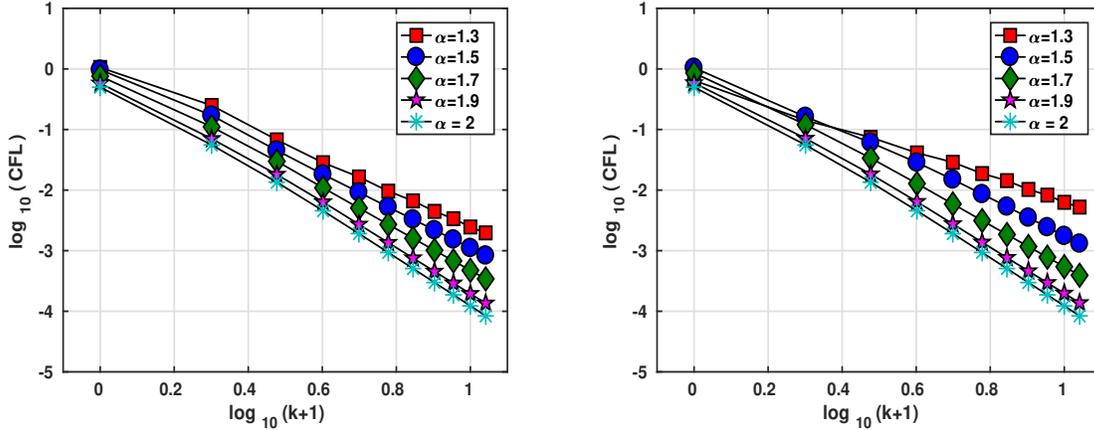
todo  $\lambda \in \sigma\left(M^{-1}\widehat{A}_\alpha^{RL}\right)$  la siguiente desigualdad

$$|1 - 2^\alpha \mu \lambda| \leq 1 \iff -\operatorname{Re}(\lambda) + 2^{\alpha-1} \mu |\lambda|^2 \leq 0,$$

es satisfecha. Por la Proposición 4.6,  $\operatorname{Re}(\lambda) \geq 0$ , el resultado es válido.  $\square$

**Observación 4.** Nótese que, en el caso límite,  $\alpha \rightarrow 2$ , la condición CFL obtenida en la Proposición 4.4 y 4.7 coincide con el del operador Laplaciano clásico, Ecn. (4.11).

El comportamiento de la CFL con respecto al grado de aproximación y el parámetro de estabilización se ilustra en las Figuras 4-2 y 4-3, respectivamente; para valores diferentes de  $\alpha = 1.3, 1.5, 1.7, 1.9, 2$ . Para ambos operadores fraccionarios, observamos un comportamiento de orden  $\mathcal{O}((k+1)^{-2\alpha})$  con respecto al grado de aproximación; esto se refleja en una condición de estabilidad más atractiva para aproximaciones de alto orden y orden fraccionario cerca de uno. En la Figura 4-3 se ilustra la influencia del parámetro de estabilización  $\gamma$  para aproximaciones cuadráticas. Para ambos operadores, la CFL decae con orden  $\mathcal{O}(\gamma^{-1})$  para todos los valores de  $\alpha$ .



(a) Operador de Riesz

(b) Operador de Riemann Liouville

Figura 4-2: CFL con respecto al grado de aproximación.

### 4.3. Experimentos numéricos

Los experimentos numéricos presentados en esta sección son llevados a cabo utilizando un código orientado a objetos en MATLAB. Con el propósito de obtener los resultados más

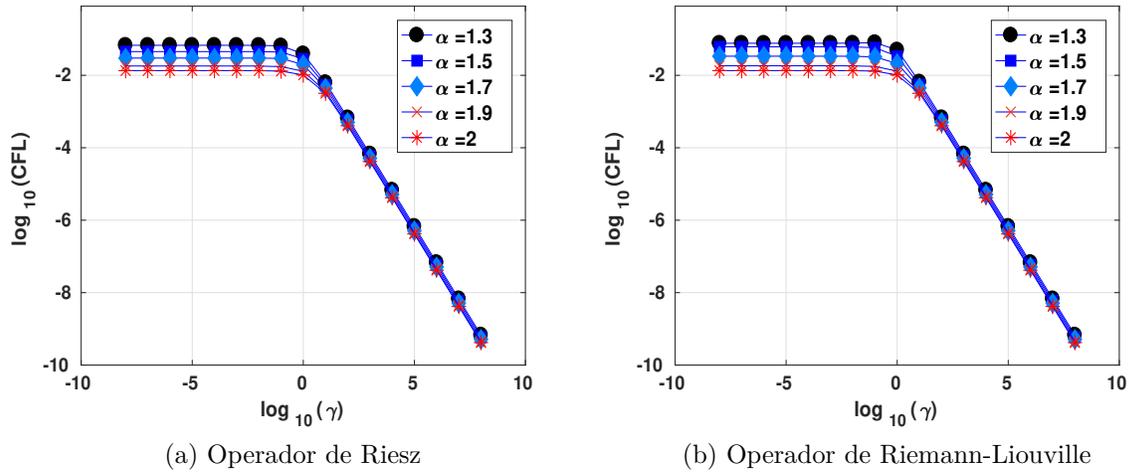


Figura 4-3: Efecto del parámetro de estabilidad  $\gamma$  en la CFL.

precisos posibles, se utilizaron puntos suficientes de cuadratura en la discretización de los operadores integrales fraccionarios. La matriz de rigidez se almacenó utilizando un formato denso en MATLAB; y no se utilizaron algoritmos para realizar la multiplicación matriz-vector de manera rápida. Los tiempos de ejecución reportados en este trabajo corresponden a los cálculos realizados en una laptop DELL con un procesador Intel Core i5 y 4Gb de memoria RAM, en Linux.

#### 4.3.a. Orden de convergencia

Validamos el estimado de error de las Proposiciones 4.1 y 4.2 para el problema modelo con solución exacta suave  $u(x, t) = 100e^{-t}x^6(1-x)^6$ . Las tasas de convergencia en espacio, en el tiempo final  $T = 1$ , son calculadas utilizando una sucesión de mallas uniformes en  $[0, 1]$ , de tamaño  $h = 1.00 \times 10^{-1}, 5.00 \times 10^{-2}, 2.50 \times 10^{-2}, 1.25 \times 10^{-2}$ ; y el método de Crank-Nicolson. Para equilibrar el orden de convergencia, de ambas variables, espacial y temporal, un tamaño de paso en tiempo  $\tau = 0.125h^{\frac{k+1}{2}}$  es utilizado. Como los problemas son pequeños, los sistemas lineales son resueltos por eliminación Gaussiana. Tasas óptimas de convergencia para la variable primaria  $u_h$ , como predice el análisis, son ilustradas en las Tablas 4-2 y 4-3 para varios valores de  $\alpha$ . También hemos observado tasas óptimas de convergencia para  $u_h$

cuando la penalización propuesta es aplicada a todos los puntos de malla interiores; esto es, el método LDG.

Tabla 4-2: Tasas de convergencia para  $u_h$ , método mdLDG con flujo derecho y operador de Riesz,  $\eta_N = h^{1-\alpha}$  en  $T = 1$ .

$k$	$\alpha = 1.1$		$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
	Error	Tasa								
0	7.94e-04	—	7.69e-04	—	7.47e-04	—	7.24e-04	—	7.01e-04	—
	3.53e-04	<b>1.17</b>	3.49e-04	<b>1.14</b>	3.46e-04	<b>1.11</b>	3.44e-04	<b>1.08</b>	3.41e-04	<b>1.04</b>
	1.71e-04	<b>1.05</b>	1.70e-04	<b>1.04</b>	1.70e-04	<b>1.03</b>	1.70e-04	<b>1.02</b>	1.69e-04	<b>1.01</b>
	8.47e-05	<b>1.01</b>	8.45e-05	<b>1.01</b>	8.45e-05	<b>1.01</b>	8.44e-05	<b>1.01</b>	8.44e-05	<b>1.00</b>
1	1.75e-04	—	1.51e-04	—	1.38e-04	—	1.31e-04	—	1.26e-04	—
	4.28e-05	<b>2.03</b>	3.59e-05	<b>2.08</b>	3.30e-05	<b>2.07</b>	3.18e-05	<b>2.04</b>	3.12e-05	<b>2.01</b>
	1.03e-05	<b>2.06</b>	8.56e-06	<b>2.07</b>	8.02e-06	<b>2.04</b>	7.85e-06	<b>2.02</b>	7.79e-06	<b>2.00</b>
	2.47e-06	<b>2.05</b>	2.07e-06	<b>2.05</b>	1.97e-06	<b>2.02</b>	1.95e-06	<b>2.01</b>	1.95e-06	<b>2.00</b>
2	1.20e-05	—	1.13e-05	—	1.12e-05	—	1.12e-05	—	1.13e-05	—
	1.53e-06	<b>2.97</b>	1.41e-06	<b>3.00</b>	1.37e-06	<b>3.02</b>	1.36e-06	<b>3.04</b>	1.36e-06	<b>3.05</b>
	1.93e-07	<b>2.98</b>	1.76e-07	<b>3.00</b>	1.72e-07	<b>3.00</b>	1.70e-07	<b>3.00</b>	1.70e-07	<b>3.00</b>
	2.41e-08	<b>3.00</b>	2.19e-08	<b>3.01</b>	2.14e-08	<b>3.01</b>	2.12e-08	<b>3.01</b>	2.11e-08	<b>3.01</b>
3	1.06e-06	—	9.51e-07	—	9.12e-07	—	9.14e-07	—	9.43e-07	—
	6.65e-08	<b>4.00</b>	5.80e-08	<b>4.03</b>	5.52e-08	<b>4.05</b>	5.43e-08	<b>4.07</b>	5.42e-08	<b>4.12</b>
	4.02e-09	<b>4.05</b>	3.50e-09	<b>4.05</b>	3.37e-09	<b>4.03</b>	3.33e-09	<b>4.03</b>	3.32e-09	<b>4.03</b>
	2.45e-10	<b>4.04</b>	2.15e-10	<b>4.03</b>	2.09e-10	<b>4.01</b>	2.10e-10	<b>3.98</b>	2.08e-10	<b>4.00</b>

Ahora, llevamos a cabo un estudio de convergencia para el operador de Riemann-Liouville con orden cercano a 1, en un problema modelo cuya solución exacta es  $u(x, t) = e^{-t}x^5$ , utilizando aproximaciones lineales y ambos flujos numéricos. Algunos comentarios sobre el rendimiento del método mdLDG se realizan en orden.

- La Tabla 4-4 revela una degradación notoria de las tasas de convergencia calculadas, para ambos flujos numéricos, cuando la derivada fraccionaria de orden  $\alpha$  aproxima a 1. Como fue notado por Deng y Hesthaven [9], una posible explicación es la siguiente. El término izquierdo de la desigualdad (4.5) para el operador de Riemann-Liouville requiere que  $\epsilon$  satisfaga

$$0 < \cos\left(\frac{2-\alpha}{2}\pi\right) - \epsilon C_\alpha \iff 0 < \epsilon < \frac{1}{C_\alpha} \cos\left(\frac{2-\alpha}{2}\pi\right).$$

Tabla 4-3: Tasas de convergencia para  $u_h$ , método mdLDG con flujo derecho y operador de Riemann-Liouville,  $\eta_N = h^{1-\alpha}$  en  $T = 1$ .

$k$	$\alpha = 1.1$		$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
	Error	Tasa								
0	7.87e-04	—	7.84e-04	—	7.77e-04	—	7.46e-04	—	7.06e-04	—
	3.48e-04	<b>1.18</b>	3.49e-04	<b>1.17</b>	3.48e-04	<b>1.16</b>	3.45e-04	<b>1.11</b>	3.41e-04	<b>1.05</b>
	1.70e-04	<b>1.03</b>	1.70e-04	<b>1.04</b>	1.70e-04	<b>1.04</b>	1.70e-04	<b>1.02</b>	1.69e-04	<b>1.01</b>
	8.45e-05	<b>1.01</b>	8.45e-05	<b>1.01</b>	8.45e-05	<b>1.01</b>	8.44e-05	<b>1.01</b>	8.44e-05	<b>1.00</b>
1	1.96e-04	—	8.80e-05	—	1.02e-04	—	1.18e-04	—	1.24e-04	—
	9.38e-05	<b>1.07</b>	2.09e-05	<b>2.07</b>	2.60e-05	<b>1.98</b>	2.95e-05	<b>2.00</b>	3.08e-05	<b>2.01</b>
	2.92e-05	<b>1.68</b>	5.48e-06	<b>1.93</b>	6.75e-06	<b>1.94</b>	7.51e-06	<b>1.98</b>	7.74e-06	<b>1.99</b>
	6.90e-06	<b>2.08</b>	1.37e-06	<b>2.00</b>	1.75e-06	<b>1.95</b>	1.90e-06	<b>1.98</b>	1.94e-06	<b>2.00</b>
2	1.36e-05	—	1.02e-05	—	1.01e-05	—	1.07e-05	—	1.12e-05	—
	9.81e-07	<b>3.79</b>	1.11e-06	<b>3.20</b>	1.23e-06	<b>3.03</b>	1.31e-06	<b>3.02</b>	1.35e-06	<b>3.05</b>
	1.18e-07	<b>3.05</b>	1.40e-07	<b>2.99</b>	1.57e-07	<b>2.97</b>	1.66e-07	<b>2.98</b>	1.70e-07	<b>2.99</b>
	1.48e-08	<b>3.00</b>	1.80e-08	<b>2.96</b>	2.00e-08	<b>2.97</b>	2.10e-08	<b>2.99</b>	2.13e-08	<b>3.00</b>
3	8.54e-07	—	7.22e-07	—	6.97e-07	—	8.02e-07	—	9.08e-07	—
	9.11e-08	<b>3.23</b>	4.05e-08	<b>4.15</b>	4.68e-08	<b>3.90</b>	5.20e-08	<b>3.95</b>	5.39e-08	<b>4.08</b>
	1.13e-08	<b>3.02</b>	2.38e-09	<b>4.09</b>	3.03e-09	<b>3.95</b>	3.25e-09	<b>4.00</b>	3.31e-09	<b>4.02</b>
	8.06e-10	<b>3.80</b>	1.60e-10	<b>3.90</b>	1.94e-10	<b>3.97</b>	2.04e-10	<b>3.99</b>	2.07e-10	<b>4.00</b>

Como  $\epsilon \rightarrow 0$  cuando  $\alpha \rightarrow 1$ , se necesitan mallas más finas para alcanzar el régimen asintótico de la cota del error. Esto no es el caso para el operador de Riesz donde  $0 < \epsilon < 1/C_\alpha$ .

Tabla 4-4: Tasas de convergencia del método mdLDG para  $\alpha$  cercano a 1, utilizando aproximaciones lineales.

	$h$	$\alpha = 1.0005$		$\alpha = 1.001$		$\alpha = 1.01$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
$\Lambda_L$	4.000e-03	1.99e-03	—	1.89e-03	—	8.89e-04	—
	2.000e-03	9.46e-04	<b>1.07</b>	8.56e-04	<b>1.14</b>	2.77e-04	<b>1.68</b>
	1.000e-03	4.30e-04	<b>1.14</b>	3.60e-04	<b>1.25</b>	7.79e-05	<b>1.83</b>
	5.000e-04	1.81e-04	<b>1.25</b>	1.35e-04	<b>1.41</b>	2.06e-05	<b>1.92</b>
	2.500e-04	6.78e-05	<b>1.41</b>	4.44e-05	<b>1.61</b>	5.28e-06	<b>1.97</b>
$\Lambda_R$	4.000e-03	2.00e-03	—	1.89e-03	—	8.90e-04	—
	2.000e-03	9.48e-04	<b>1.07</b>	8.57e-04	<b>1.14</b>	2.77e-04	<b>1.68</b>
	1.000e-03	4.30e-04	<b>1.14</b>	3.60e-04	<b>1.25</b>	7.79e-05	<b>1.83</b>
	5.000e-04	1.81e-04	<b>1.25</b>	1.35e-04	<b>1.42</b>	2.06e-05	<b>1.92</b>
	2.500e-04	6.78e-05	<b>1.41</b>	4.44e-05	<b>1.61</b>	5.27e-06	<b>1.97</b>

- Como se muestra en las Tablas 4-5 y 4-6, las tasas de convergencia son mejoradas sustancialmente cuando la penalización propuesta de orden  $h^{1-\alpha}$  se impone en todos los puntos

interiores de la malla; esto es, cuando se utiliza el método LDG estabilizado. Tasas óptimas son alcanzadas con mallas más gruesas comparadas con aquellas obtenidas por el método mdLDG, para diferentes grados de aproximación y valores de  $\alpha$  cercanos a 1. Esto sugiere un beneficio potencial de utilizar estabilización en todas las celdas.

Tabla 4–5: Tasas de convergencia del método LDG con flujo izquierdo.

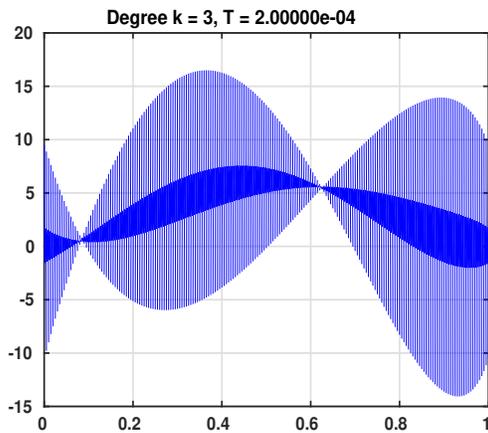
$k$	$h$	$\alpha = 1.0005$		$\alpha = 1.001$		$\alpha = 1.01$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
0	1.00e-01	8.15e-02	—	8.14e-02	—	7.97e-02	—
	5.00e-02	5.13e-02	<b>0.67</b>	5.13e-02	<b>0.67</b>	5.05e-02	<b>0.66</b>
	2.50e-02	2.89e-02	<b>0.83</b>	2.89e-02	<b>0.83</b>	2.87e-02	<b>0.82</b>
	1.25e-02	1.52e-02	<b>0.93</b>	1.52e-02	<b>0.93</b>	1.52e-02	<b>0.92</b>
1	1.00e-01	5.13e-03	—	5.12e-03	—	5.01e-03	—
	5.00e-02	1.34e-03	<b>1.94</b>	1.34e-03	<b>1.94</b>	1.31e-03	<b>1.94</b>
	2.50e-02	3.42e-04	<b>1.97</b>	3.42e-04	<b>1.97</b>	3.34e-04	<b>1.97</b>
	1.25e-02	8.65e-05	<b>1.98</b>	8.64e-05	<b>1.98</b>	8.46e-05	<b>1.98</b>
2	1.00e-01	2.71e-04	—	2.71e-04	—	2.59e-04	—
	5.00e-02	3.77e-05	<b>2.85</b>	3.76e-05	<b>2.85</b>	3.59e-05	<b>2.85</b>
	2.50e-02	4.98e-06	<b>2.92</b>	4.97e-06	<b>2.92</b>	4.73e-06	<b>2.92</b>
	1.25e-02	6.40e-07	<b>2.96</b>	6.38e-07	<b>2.96</b>	6.08e-07	<b>2.96</b>
3	1.00e-01	2.31e-06	—	2.31e-06	—	2.25e-06	—
	5.00e-02	1.47e-07	<b>3.97</b>	1.47e-07	<b>3.97</b>	1.43e-07	<b>3.97</b>
	2.50e-02	9.29e-09	<b>3.99</b>	9.28e-09	<b>3.99</b>	9.06e-09	<b>3.98</b>
	1.25e-02	5.80e-10	<b>4.00</b>	5.79e-10	<b>4.00</b>	5.69e-10	<b>3.99</b>

#### 4.3.b. Restricciones en tiempo y CFL

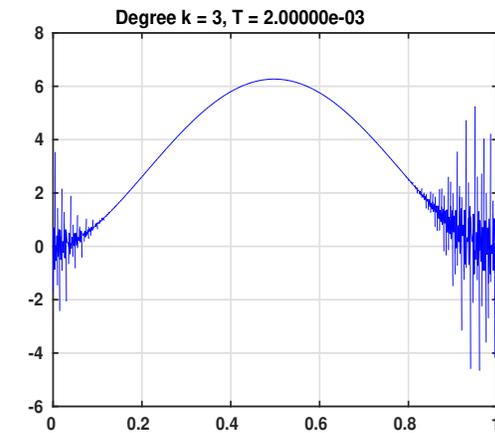
Primeramente, probamos la severidad de la CFL obtenida en las Proposiciones 4.4 y 4.7. Para aproximaciones cúbicas, la CFL predicha es  $1.8289 \times 10^{-2}$  y  $2.86545 \times 10^{-2}$  para los operadores de Riesz y Riemann-Liouville, respectivamente; y sus correspondientes tamaños de paso en tiempo, para una malla uniforme de tamaño  $h = 0.005$ , es  $\tau_R \approx 6.3946 \times 10^{-6}$  y  $\tau_{RL} \approx 1.0040 \times 10^{-5}$ . La Figura 4–4 revela una rápida aparición de oscilaciones cuando la CFL es violada; en  $T = 2.0 \times 10^{-4}$  para el operador de Riesz; y, en  $T = 2.0 \times 10^{-3}$  para el operador de Riemann-Liouville. Sin embargo, estas no ocurren cuando se utiliza el tamaño de paso en tiempo apropiado, aún para un tiempo final más largo.

Tabla 4–6: Tasas de convergencia del método LDG con flujo derecho.

$k$	$h$	$\alpha = 1.0005$		$\alpha = 1.001$		$\alpha = 1.01$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
0	1.00e-01	7.42e-02	—	7.43e-02	—	7.49e-02	—
	5.00e-02	4.30e-02	<b>0.79</b>	4.31e-02	<b>0.79</b>	4.42e-02	<b>0.76</b>
	2.50e-02	2.32e-02	<b>0.89</b>	2.33e-02	<b>0.89</b>	2.44e-02	<b>0.86</b>
	1.25e-02	1.21e-02	<b>0.94</b>	1.21e-02	<b>0.94</b>	1.30e-02	<b>0.91</b>
1	1.00e-01	9.16e-03	—	9.15e-03	—	8.88e-03	—
	5.00e-02	2.50e-03	<b>1.87</b>	2.50e-03	<b>1.87</b>	2.41e-03	<b>1.88</b>
	2.50e-02	6.55e-04	<b>1.93</b>	6.53e-04	<b>1.94</b>	6.25e-04	<b>1.95</b>
	1.25e-02	1.68e-04	<b>1.97</b>	1.67e-04	<b>1.97</b>	1.59e-04	<b>1.98</b>
2	1.00e-01	3.05e-04	—	3.04e-04	—	2.86e-04	—
	5.00e-02	4.00e-05	<b>2.93</b>	3.99e-05	<b>2.93</b>	3.72e-05	<b>2.94</b>
	2.50e-02	5.13e-06	<b>2.96</b>	5.11e-06	<b>2.97</b>	4.72e-06	<b>2.98</b>
	1.25e-02	6.49e-07	<b>2.98</b>	6.46e-07	<b>2.98</b>	5.94e-07	<b>2.99</b>
3	1.00e-01	4.45e-06	—	4.44e-06	—	4.24e-06	—
	5.00e-02	2.86e-07	<b>3.96</b>	2.85e-07	<b>3.96</b>	2.70e-07	<b>3.97</b>
	2.50e-02	1.81e-08	<b>3.98</b>	1.80e-08	<b>3.98</b>	1.71e-08	<b>3.98</b>
	1.25e-02	1.14e-09	<b>3.99</b>	1.13e-09	<b>3.99</b>	1.08e-09	<b>3.99</b>



(a) Operador de Riesz



(b) Operador de Riemann-Liouville

Figura 4–4: Oscilaciones para aproximaciones cúbicas y  $\alpha = 1.5$ .

Ahora, investigamos las restricciones en tiempo del método FE-mdLDG aplicado a un problema de difusión fraccionaria con condiciones de borde de Dirichlet. Debido a las limitaciones bien conocidas del análisis de estabilidad de von Neumann, calculamos el tamaño

de paso en tiempo más largo,  $\tau_{max}$ , tal que  $\rho(I - \tau_{max}M^{-1}A_\alpha) \leq 1$ :

$$\tau_{max} = \begin{cases} \frac{2}{\lambda_{max}} : \lambda_{max} = \max \{ \lambda \in \sigma(M^{-1}A_\alpha^R) \} & \text{para el operador de Riesz,} \\ 2 \min \left\{ \frac{\text{Re}(\lambda)}{|\lambda|^2} : \lambda \in \sigma(M^{-1}A_\alpha^{RL}) \right\} & \text{para el operador de Riemann-Liouville.} \end{cases}$$

En las Tablas 4-7 y 4-8 se muestra la restricción en tiempo,  $\tau_{max}$ , como una función del tamaño de la malla  $h$  para ambos operadores diferenciales. Un conjunto de mallas uniformes de tamaño  $h = 1.00 \times 10^{-1}, 5.00 \times 10^{-2}, 2.50 \times 10^{-2}, 1.25 \times 10^{-2}, 6.25 \times 10^{-3}$  fueron utilizadas. Con el término de estabilidad propuesto  $\eta = \mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ ,  $\tau_{max}$  decrece como  $\mathcal{O}(h^\alpha)$ ; mientras que al utilizar  $\eta = \mathcal{O}(h^{-1})$ ,  $\tau_{max}$  tiene un decaimiento más rápido, y por lo tanto menos adecuado, de orden  $\mathcal{O}(h^2)$  para todo  $\alpha \in (1, 2)$ . Se observa que la mayor ganancia teórica en el tamaño de paso máximo permitido entre ambas estabilizaciones, la cual es de orden  $h^{\alpha-2}$ , se alcanza para valores de  $\alpha$  cercanos a 1 y tamaños de malla pequeños  $h$ .

Tabla 4-7: Restricción de paso en tiempo del método FE-mdLDG para el operador de Riesz con aproximaciones cuadráticas.

$\eta$	$\alpha = 1.1$		$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
	$\tau_{\text{máx}}$	Tasa								
$\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$	1.88e-03	—	1.08e-03	—	5.87e-04	—	2.99e-04	—	1.39e-04	—
	8.72e-04	<b>1.11</b>	4.35e-04	<b>1.31</b>	2.07e-04	<b>1.51</b>	9.15e-05	<b>1.71</b>	3.72e-05	<b>1.91</b>
	4.06e-04	<b>1.10</b>	1.76e-04	<b>1.30</b>	7.29e-05	<b>1.50</b>	2.81e-05	<b>1.70</b>	9.94e-06	<b>1.90</b>
	1.89e-04	<b>1.10</b>	7.16e-05	<b>1.30</b>	2.58e-05	<b>1.50</b>	8.65e-06	<b>1.70</b>	2.66e-06	<b>1.90</b>
	8.83e-05	<b>1.10</b>	2.91e-05	<b>1.30</b>	9.11e-06	<b>1.50</b>	2.66e-06	<b>1.70</b>	7.14e-07	<b>1.90</b>
$\mathcal{O}(h^{-1})$	2.75e-04	—	2.65e-04	—	2.42e-04	—	1.95e-04	—	1.27e-04	—
	6.88e-05	<b>2.00</b>	6.72e-05	<b>1.98</b>	6.26e-05	<b>1.95</b>	5.15e-05	<b>1.92</b>	3.27e-05	<b>1.95</b>
	1.73e-05	<b>1.99</b>	1.70e-05	<b>1.98</b>	1.61e-05	<b>1.96</b>	1.35e-05	<b>1.93</b>	8.46e-06	<b>1.95</b>
	4.33e-06	<b>2.00</b>	4.28e-06	<b>1.99</b>	4.11e-06	<b>1.97</b>	3.52e-06	<b>1.94</b>	2.19e-06	<b>1.95</b>
	1.08e-06	<b>2.00</b>	1.08e-06	<b>1.99</b>	1.04e-06	<b>1.98</b>	9.13e-07	<b>1.95</b>	5.66e-07	<b>1.95</b>

Para ilustrar mejor la ventaja del término de penalización propuesto, aplicamos el método FE-mdLDG, con aproximaciones cuadráticas, a un problema modelo con condiciones de borde de Dirichlet cuya solución exacta es  $u(x, t) = 100e^{-t}x^2(1-x)^2$ . El término de penalización tradicional de orden  $\mathcal{O}(h^{-1})$  fue considerado, pero en cambio, se utilizó el tamaño de paso en tiempo,  $\tau_\alpha$ , requerido por el término de penalización propuesto. Ambas Figuras,

Tabla 4–8: Restricción de paso en tiempo del método FE-mdLDG para el operador de Riemann-Liouville con aproximaciones cuadráticas.

$\eta$	$\alpha = 1.1$		$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
	$\tau_{\text{máx}}$	Tasa								
$\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$	1.76e-03	—	1.09e-03	—	6.62e-04	—	3.85e-04	—	1.92e-04	—
	8.20e-04	<b>1.10</b>	4.42e-04	<b>1.30</b>	2.34e-04	<b>1.50</b>	1.19e-04	<b>1.70</b>	5.14e-05	<b>1.90</b>
	3.83e-04	<b>1.10</b>	1.80e-04	<b>1.30</b>	8.28e-05	<b>1.50</b>	3.65e-05	<b>1.70</b>	1.38e-05	<b>1.90</b>
	1.79e-04	<b>1.10</b>	7.30e-05	<b>1.30</b>	2.93e-05	<b>1.50</b>	1.12e-05	<b>1.70</b>	3.69e-06	<b>1.90</b>
	8.33e-05	<b>1.10</b>	2.96e-05	<b>1.30</b>	1.03e-05	<b>1.50</b>	3.46e-06	<b>1.70</b>	9.89e-07	<b>1.90</b>
$\mathcal{O}(h^{-1})$	2.22e-04	—	2.21e-04	—	2.18e-04	—	2.09e-04	—	1.72e-04	—
	5.55e-05	<b>2.00</b>	5.54e-05	<b>2.00</b>	5.48e-05	<b>1.99</b>	5.29e-05	<b>1.98</b>	4.43e-05	<b>1.96</b>
	1.39e-05	<b>2.00</b>	1.39e-05	<b>2.00</b>	1.38e-05	<b>1.99</b>	1.34e-05	<b>1.99</b>	1.13e-05	<b>1.97</b>
	3.47e-06	<b>2.00</b>	3.47e-06	<b>2.00</b>	3.45e-06	<b>2.00</b>	3.36e-06	<b>1.99</b>	2.90e-06	<b>1.97</b>
	8.68e-07	<b>2.00</b>	8.67e-07	<b>2.00</b>	8.64e-07	<b>2.00</b>	8.46e-07	<b>1.99</b>	7.37e-07	<b>1.97</b>

4–5a y 4–5b, revelan oscilaciones en el borde derecho donde la penalización ha sido impuesta, confirmando restricciones en tiempo más severas para el término de penalización tradicional.

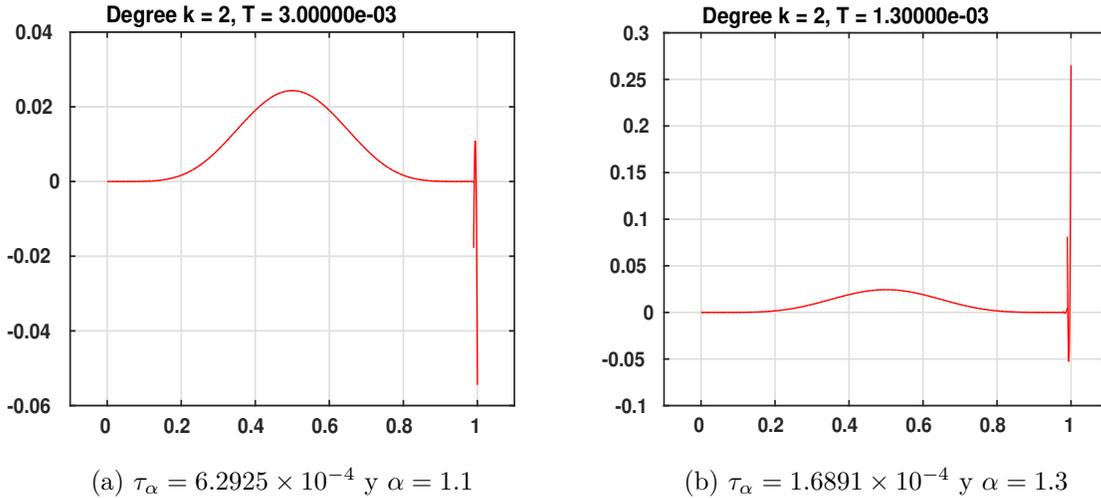


Figura 4–5: Inestabilidades del método FE-mdLDG utilizando  $\eta_N = \mathcal{O}(h^{-1})$  y tamaño de paso en tiempo,  $\tau_\alpha$ , correspondiente a  $\eta_N = \mathcal{O}(h^{1-\alpha})$ .

### 4.3.c. Métodos de avance en tiempo de alto orden

Ahora investigamos el uso de los métodos de avance en tiempo explícitos de alto orden SSPRK en combinación con la discretización espacial del LDG. Utilizando la notación de Shu-Osher, [34], la formulación de un método de  $s$  etapas de orden  $k$ , SSPRK( $s,k$ ), aplicado a nuestro problema modelo, puede ser escrito como una combinación convexa de pasos de

Euler explícito de la forma:

$$\begin{aligned}
 u_h^{(0)} &= u_h^n, \\
 u_h^{(i)} &= \sum_{j=0}^{i-1} \left\{ \alpha_{i,j} u_h^{(j)} + \tau \beta_{i,j} M^{-1} \left( f_h(t_n + c_j \tau) - A_\alpha u_h^{(j)} \right) \right\}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \\
 u_h^{n+1} &= u_h^{(s)}.
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

La principal propiedad de tales métodos se resume en el siguiente teorema:

**Teorema 1** ([34]). *Si el método de Euler explícito es fuertemente estable,  $\|u^n + \tau L(u^n)\| \leq \|u^n\|$ , con una restricción CFL  $\tau \leq \tau_{FE}$ , entonces el método de Runge-Kutta (4.13) es también un método fuertemente estable y conservativo provisto de la siguiente restricción en tiempo:*

$$\tau \leq C_{(s,k)} \tau_{FE}, \quad \text{donde } C_{(s,k)} = \min_{i,j} \left( \frac{\alpha_{i,j}}{\beta_{i,j}} \right).$$

Comparamos el rendimiento de esquema de avance en tiempo SSPRK(5,3), propuesto por Spiteri y Ruuth [35] y el método LDG en espacio, utilizando términos de penalización de orden  $h^{-1}$  y  $h^{1-\alpha}$ , para diferentes valores de  $\alpha$ . Como este método es de tercer orden en tiempo, aproximaciones cuadráticas en espacio son utilizadas. Las Tablas 4–9 y 4–10 resumen el rendimiento global, en el tiempo  $T = 10$ , del método SSPRK(5,3)-mdLDG y el método completamente estabilizado SSPRK(5,3)-LDG, aplicado a los operadores de Riesz y Riemann Liouville, respectivamente; en una sucesión de mallas uniformes de tamaño  $h = 1 \times 10^{-1}, 5 \times 10^{-2}, 2.5 \times 10^{-2}, 1.25 \times 10^{-2}$ , para el problema modelo con solución exacta  $u(x, t) = 100e^{-t}x^3(1-x)^3$ .

Para cada término de penalización, el correspondiente tamaño de paso fue escogido como dicta el Teorema 1, aplicado al método SSPRK(5,3); el cual incrementa el tamaño de paso por un factor de aproximadamente 2.6, comparado al del método de forward Euler. La reducción sustancial en tiempo de ejecución obtenida para el penalizado con un término de orden  $h^{1-\alpha}$ , apoya el uso del término de penalización propuesto y discretizaciones en tiempo explícitas para valores de  $\alpha$  cercanos a 1.

Tabla 4–9: Rendimiento del método mdLDG-SSP(5,3) para el operador de Riesz.

$\alpha$	$\eta = h^{1-\alpha}$				$\eta = h^{-1}$			
	Error	Tasa	Tiempo(s)	Pasos	Error	Tasa	Tiempo(s)	Pasos
1.00001	5.89e-08	—	<b>2.75</b>	314	5.59e-08	—	<b>14.39</b>	1758
	7.18e-09	3.04	<b>9.24</b>	628	7.31e-09	2.94	<b>101.04</b>	6907
	9.63e-10	2.90	<b>35.96</b>	1256	9.44e-10	2.95	<b>780.61</b>	27391
	1.26e-10	2.94	<b>138.48</b>	2512	1.21e-10	2.97	<b>5973.02</b>	109106
1.001	5.89e-08	—	<b>2.56</b>	316	5.59e-08	—	<b>14.31</b>	1758
	7.18e-09	3.04	<b>9.24</b>	631	7.30e-09	2.94	<b>100.58</b>	6907
	9.62e-10	2.90	<b>35.96</b>	1263	9.43e-10	2.95	<b>770.53</b>	27393
	1.25e-10	2.94	<b>139.56</b>	2527	1.20e-10	2.97	<b>5745.82</b>	109108
1.1	5.53e-08	—	<b>3.89</b>	477	5.24e-08	—	<b>13.70</b>	1792
	6.64e-09	3.06	<b>15.15</b>	1021	6.78e-09	2.95	<b>96.63</b>	6982
	8.82e-10	2.91	<b>62.67</b>	2189	8.63e-10	2.98	<b>747.17</b>	27562
	1.13e-10	2.96	<b>258.20</b>	4691	1.08e-10	2.99	<b>5692.08</b>	109497
1.3	5.19e-08	—	<b>8.50</b>	1120	4.84e-08	—	<b>14.51</b>	1957
	6.14e-09	3.08	<b>36.42</b>	2757	6.31e-09	2.94	<b>97.17</b>	7352
	8.14e-10	2.91	<b>176.39</b>	6787	7.99e-10	2.98	<b>729.65</b>	28452
	1.04e-10	2.97	<b>826.51</b>	16711	9.99e-11	3.00	<b>5525.05</b>	111706

Tabla 4–10: Rendimiento del método LDG-SSP(5,3) para el operador de Riemann Liouville.

$\alpha$	$\eta = h^{1-\alpha}$				$\eta = h^{-1}$			
	Error	Tasa	Tiempo(s)	Pasos	Error	Tasa	Tiempo(s)	Pasos
1.00001	1.12e-07	—	<b>2.38</b>	419	3.48e-07	—	<b>24.92</b>	4473
	2.80e-08	2.00	<b>8.64</b>	880	6.95e-08	2.32	<b>189.65</b>	18802
	4.81e-09	2.54	<b>38.54</b>	1891	2.03e-08	1.77	<b>1370.98</b>	76030
	6.99e-10	2.78	<b>198.57</b>	5384	5.62e-09	1.85	<b>10453.01</b>	303724
1.001	1.12e-07	—	<b>2.29</b>	415	2.33e-07	—	<b>25.44</b>	4474
	2.79e-08	2.00	<b>8.60</b>	873	3.60e-08	2.69	<b>179.52</b>	18053
	4.79e-09	2.54	<b>40.45</b>	2099	7.72e-09	2.22	<b>1463.68</b>	72379
	6.96e-10	2.78	<b>228.20</b>	6103	1.63e-09	2.25	<b>10774.3</b>	289686
1.1	8.42e-08	—	<b>2.81</b>	511	8.43e-08	—	<b>27.14</b>	4516
	1.91e-08	2.14	<b>12.02</b>	1149	3.51e-08	1.26	<b>200.23</b>	18149
	3.23e-09	2.56	<b>50.00</b>	2597	1.21e-08	1.54	<b>1402.17</b>	72592
	4.78e-10	2.76	<b>214.19</b>	5774	2.86e-09	2.08	<b>10658.5</b>	290153
1.3	5.51e-08	—	<b>6.15</b>	1057	1.04e-07	—	<b>26.48</b>	4793
	1.06e-08	2.38	<b>27.37</b>	2678	2.99e-08	1.80	<b>186.59</b>	18886
	1.72e-09	2.62	<b>134.63</b>	6981	5.97e-09	2.32	<b>1430.28</b>	74501
	2.53e-10	2.77	<b>662.76</b>	17925	9.71e-10	2.62	<b>10827.5</b>	295023

# Capítulo 5

## MÉTODO LDG Y ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER NO LINEAL FRACCIONARIA

En este capítulo nos concentraremos en dos aspectos importantes del método LDG aplicado a la versión fraccionaria de la ecuación de Schrödinger :

1. El estudio de las propiedades de conservación de los análogos discretos de la energía y del Hamiltoniano de una clase general de ecuaciones fraccionarias no lineales de Schrödinger (FNLS) para dos versiones estabilizadas del método LDG.
2. El análisis de von Neumann para encontrar las condiciones de estabilidad del esquema de Leapfrog y una versión estabilizada del método LDG aplicado a la ecuación fraccionaria lineal de Schrödinger.

Una motivación del uso del término de estabilización propuesto Ecn. (3.5) está relacionada al condicionamiento espectral,  $\kappa_2(A_\alpha)$ , del operador Laplaciano fraccionario con condiciones de borde de Dirichlet. Considerando la formulación del minimal dissipation analizada en [11], el cual solo penaliza en los puntos de borde con un término  $\mathcal{O}(h^{-1})$ ; y la formulación md-LDG-II, la Figura 5-1 ilustra que nuestra formulación produce un mejor condicionamiento, de orden  $h^{-\alpha}$ , mientras que el del primero es de orden  $h^{-2}$  para todos los valores de  $\alpha$ .

### 5.1. Conservación de energía y Hamiltoniano

Ahora mostraremos que el método LDG aplicado a las ecuaciones NLS y FNLS conserva energía y Hamiltoniano. Más aún, a partir del marco abstracto de los métodos dG para problemas elípticos desarrollado en [24], utilizando la formulación primaria de un método

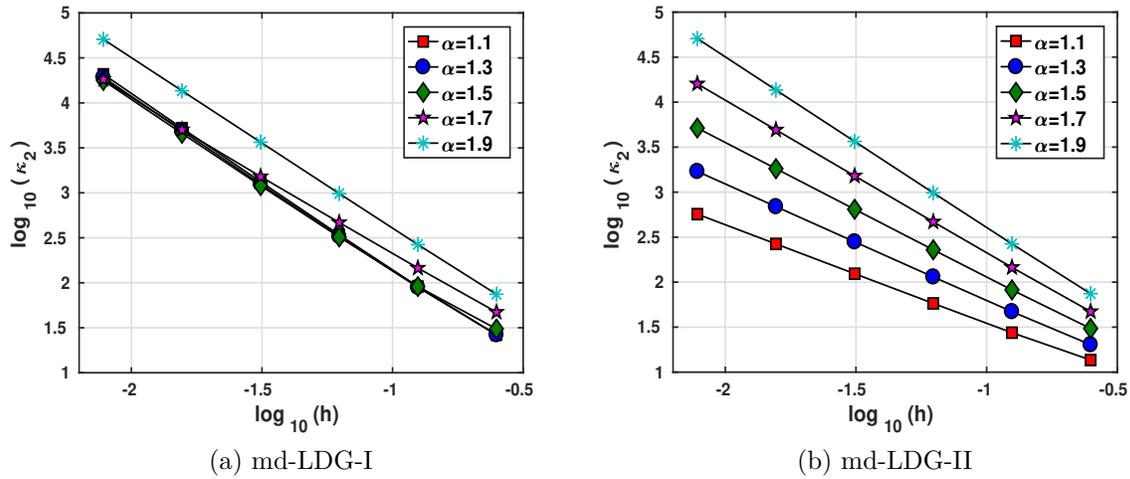


Figura 5–1: Condicionamiento espectral  $\kappa_2(A_\alpha)$  para el operador de Riesz con condiciones de borde de Dirichlet.

dG, la conservación de los análogos discretos de la energía y el Hamiltoniano puede ser deducida para aquellos métodos dG cuyo Laplaciano discreto es simétrico.

### Proposición 5.1

La formulación semi-discreta del método LDG preserva la energía discreta; es decir,  
 $\mathcal{E}_h(t) = \mathcal{E}_h(0), \forall t \geq 0.$

#### *Prueba.*

Nótese que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_a^b |u_h|^2 &= 2\text{Re} \int_a^b \frac{du_h}{dt} \overline{u_h} \\ &= 2\text{Re} \left\langle M \frac{dU_h}{dt}, U_h \right\rangle. \end{aligned}$$

Además, por Ecn. (3.7) se tiene

$$i \left\langle M \frac{dU_h}{dt}, U_h \right\rangle = \langle A_\alpha U_h, U_h \rangle - \langle N_h(U_h), U_h \rangle. \quad (5.1)$$

Por lo tanto considerando la parte imaginaria en la ecuación anterior y observando que  $\langle N_h(U_h), U_h \rangle = \int_a^b f'(|u_h|^2) |u_h|^2$  y  $\langle A_\alpha U_h, U_h \rangle$  son, ambas, cantidades reales, se deduce que

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_a^b |u_h|^2 = 0. \quad \square$$

### Proposición 5.2

La formulación semi-discreta del método LDG preserva el Hamiltoniano discreto; es decir,  $\mathcal{H}_h(t) = \mathcal{H}_h(0)$ ,  $\forall t \geq 0$ .

#### *Prueba.*

Por (3.7) se tiene

$$\begin{aligned} i \int_a^b \left| \frac{du_h}{dt} \right|^2 &= i \left\langle M \frac{dU_h}{dt}, \frac{dU_h}{dt} \right\rangle \\ &= \left\langle A_\alpha U_h, \frac{dU_h}{dt} \right\rangle - \left\langle N_h(U_h), \frac{dU_h}{dt} \right\rangle. \end{aligned}$$

Por lo que, considerando la parte real de la expresión anterior y notando que  $M$  es una matriz simétrica definida positiva, se deduce la siguiente ecuación

$$\operatorname{Re} \left( \left\langle A_\alpha U_h, \frac{dU_h}{dt} \right\rangle - \left\langle N_h(U_h), \frac{dU_h}{dt} \right\rangle \right) = 0. \quad (5.2)$$

Como  $A_\alpha$  es una matriz real simétrica entonces

$$\frac{d \langle A_\alpha U_h, U_h \rangle}{dt} = 2 \operatorname{Re} \left\langle A_\alpha U_h, \frac{dU_h}{dt} \right\rangle. \quad (5.3)$$

Por otro lado, nótese que también se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_a^b f(|u_h|^2) &= \int_a^b f'(|u_h|^2) \frac{d|u_h|^2}{dt} \\ &= 2 \operatorname{Re} \int_a^b f'(|u_h|^2) u_h \frac{d\bar{u}_h}{dt} \\ &= 2 \operatorname{Re} \left\langle N_h(U_h), \frac{dU_h}{dt} \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Substituyendo las expresiones obtenidas en las Ecns. (5.3) y (5.4) en la Ecn. (5.2), se obtiene la relación deseada

$$\langle A_\alpha U_h, U_h \rangle - \int_a^b f(|u_h|^2) = Cte. \quad \square$$

## 5.2. Discretizaciones en tiempo

Un cuidado especial sobre el potencial no lineal es obligatorio para asegurar la conservación al discretizar la variable temporal, en particular para el Hamiltoniano. Consideramos tres esquemas bien conocidos: 1) el método clásico de punto medio; 2) una modificación del método implícito de Crank-Nicolson; y, 3) un esquema explícito derivado del método de Leapfrog. Para describir estos métodos, adoptamos la siguiente notación:  $\tau$  denota el incremento en tiempo; el cual se considera constante;  $u_h^n = u_h(x, t_n)$ ;  $u_h^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_h^{n+1} + u_h^n)$ , y  $\delta_\tau u_h^n = \frac{1}{\tau}(u_h^{n+1} - u_h^n)$ .

### 5.2.a. Esquema de Punto Medio

La aplicación del esquema implícito de punto medio a la ecuación NLS ha sido analizada extensivamente por Verwer y Dekker [36] y, Sanz-Serna y Verwer [37], ambos utilizando la fórmula estándar de segundo orden de diferencias finitas. Estudios numéricos del método de punto medio y elemento finito continuo con aproximaciones lineales fue llevado a cabo por Griffiths, Mitchell y Morris [38]; donde la iteración de Newton fue reemplazada por un esquema predictor-corrector; y por, Herbst, Morris y Mitchell [39]; donde la estabilidad numérica del potencial cúbico fue investigada a fondo. En ambos artículos, una de las mayores preocupaciones fue el desempeño del método cuando “mass-lumping” es usado. Deseamos señalar, que esto es irrelevante para nosotros ya que la matriz de masa para una discretización espacial dG es diagonal por bloques y puede ser fácilmente invertible. En mallas Cartesianas y utilizando polinomios ortogonales, por ejemplo polinomios de Legendre, esta matriz es incluso diagonal. El método del punto medio con la discretización espacial del LDG (PM-LDG) está dado por

$$iM\delta_\tau U_h^n = A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2}} - N_h(U_h^{n+\frac{1}{2}}). \quad (5.5)$$

**Proposición 5.3**

El esquema PM-LDG preserva la energía discreta:  $\mathcal{E}_h(t_n) = \mathcal{E}_h(0)$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ .

**Prueba.**

Sea  $v = u_h^{n+\frac{1}{2}}$ , entonces, de acuerdo a la definición del método PM se tiene

$$\begin{aligned} i \left\langle M\delta_\tau U_h^n, U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle &= \left\langle A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2}}, U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle \\ &\quad - \left\langle f'_h \left( |U_h^{n+\frac{1}{2}}|^2 \right) U_h^{n+\frac{1}{2}}, U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Considerando, únicamente, la parte imaginaria en la Ecn. (5.6), y puesto que la matriz  $A$  es simétrica, se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= \operatorname{Re} \left\langle M\delta_\tau U_h^n, U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\tau} \left( \left\langle MU_h^{n+1}, U_h^{n+1} \right\rangle - \left\langle MU_h^n, U_h^n \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{2\tau} \left( \int_a^b |u_h^{n+1}|^2 - \int_a^b |u_h^n|^2 \right). \quad \square \end{aligned}$$

**5.2.b. Crank-Nicolson Modificado**

A diferencia del método de punto medio el cual solamente conserva energía, el método de paso en tiempo modificado de Crank-Nicolson, originalmente propuesto por Strauss y Vazquez [40] para una ecuación no lineal de Klein-Gordon, también conserva el Hamiltoniano. Este método fue estudiado por Delfour, Fortin y Payre en [41] para la ecuación clásica NLS con potencial cúbico y discretizado espacialmente con la fórmula de segundo orden de diferencias finitas; y, luego analizado por Sanz-Serna [20] para un potencial general y el método de elemento finito continuo. El esquema completamente discreto será denotado por MCN-LDG. Siguiendo Sanz-Serna [20], el esquema MCN-LDG lee de la siguiente manera

$$iM\delta_\tau U_h^n = A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2}} - N_h \left( U_h^{n+\frac{1}{2}} \right), \quad (5.7)$$

donde  $N_h(\cdot)$  es la discretización del operador no lineal tal que para todo  $v \in \mathcal{V}_h$  se tiene

$$\left\langle N_h(U_h^{n+\frac{1}{2}}), V \right\rangle = \int_a^b F(u_h^{n+1}, u_h^n) u_h^{n+\frac{1}{2}} \bar{v},$$

y la función auxiliar  $F(\cdot, \cdot)$ , que puede pensarse como una aproximación de  $f'(|u_h^{n+1}|^2)$ , está definida como en [20] por

$$F(z_1, z_2) = \begin{cases} \frac{f(|z_1|^2) - f(|z_2|^2)}{|z_1|^2 - |z_2|^2}, & |z_1| \neq |z_2|, \\ f'(|z_1|^2), & |z_1| = |z_2|. \end{cases}$$

Contrario a su formulación original, esta nueva formulación posee la propiedad deseada de conservar energía y Hamiltoniano. Debemos señalar que el método modificado de Crank-Nicolson también puede derivarse utilizando la misma función auxiliar en el esquema de punto medio.

#### Proposición 5.4

El esquema MCN-LDG conserva la energía discreta:  $\mathcal{E}_h(t_n) = \mathcal{E}_h(0), \forall n \in \mathbb{N}$ .

*Prueba.*

La prueba es similar a la del PM-LDG, Proposición 5.3.  $\square$

#### Proposición 5.5

El esquema MCN-LDG conserva el Hamiltoniano discreto:  $\mathcal{H}_h(t_n) = \mathcal{H}_h(0), \forall n \in \mathbb{N}$ .

*Prueba.*

Sea  $v = \delta_\tau u_h^{n+\frac{1}{2}}$ , entonces, considerando, esta vez, la parte real se tiene

$$\begin{aligned} 0 &= \operatorname{Re} \left\langle A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2}}, \delta_\tau U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle \\ &\quad - \operatorname{Re} \left\langle N_h \left( U_h^{n+\frac{1}{2}} \right), \delta_\tau U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle. \end{aligned} \tag{5.8}$$

Siendo  $A_\alpha$  una matriz simétrica se tiene

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left\langle A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2}}, \delta_\tau U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle &= \frac{1}{2\tau} \left\langle A_\alpha U_h^{n+1}, U_h^{n+1} \right\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \left\langle A_\alpha U_h^n, U_h^n \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Por otro lado también se tiene

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left\langle N_h \left( U_h^{n+\frac{1}{2}} \right), \delta_\tau U_h^{n+\frac{1}{2}} \right\rangle &= \frac{1}{2\tau} \int_a^b f(|u_h^{n+1}|^2) \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \int_a^b f(|u_h^n|^2). \end{aligned} \quad (5.10)$$

El resultado se obtiene por substitución de las expresiones de las Ecns. (5.9) y (5.10) en la Ecn. (5.8).  $\square$

Proposiciones 5.4 y 5.5 se cumplen también para la ecuación NLS utilizando otras formulaciones dG. En la Sección 5.3.d se valida numéricamente los resultados anteriores para el método Interior Penalty (IP) de Arnold [42] y el método Ultra Weak DG, propuesto por Cheng y Shu [43] para la ecuación de convección difusión. Es también importante observar que el valor inicial de la energía,  $\mathcal{E}_h(0)$ , el cual es comúnmente obtenido de la proyección  $L_2$  de la condición inicial, es la cantidad conservada de la discretización espacial usada. Por otro lado, el valor inicial del Hamiltoniano,  $\mathcal{H}_h(0)$ , el cual es la cantidad conservada depende de la discretización ya que éste se calcula a partir de la aproximación del gradiente. La precisión en la aproximación de ambos invariantes será investigada numéricamente en las Secciones 5.3.b y 5.3.c proyectando las condiciones iniciales con dos operadores diferentes.

### 5.2.c. Esquemas de Leapfrog

Una de las mayores críticas de los métodos implícitos es que la conservación solamente se alcanza en la precisión en la cual los problemas no lineal son resueltos. Por otro lado, puede probarse que no hay métodos explícitos conservativos, con un tamaño de paso en tiempo fijo. Sin embargo, Sanz-Serna y Manorajan [44], propusieron una modificación del método de Leapfrog tradicional; llamado, el método circularly exact Leapfrog (CELF), el cual conserva energía; y, contrario al método de Leapfrog original, este utiliza un tamaño de paso

variable. Ellos también observaron, numéricamente, que la estabilidad del método CELF es similar al esquema de Leapfrog original; i.e.  $\tau \leq h^2/4$ . Ya que ningún análisis de estabilidad para el esquema de Leapfrog-LDG-II, aplicado a la ecuación lineal de Schrödinger clásica o fraccionario; i.e.  $f(\cdot) \equiv 0$  en (1.2), es conocido, llevamos a cabo un análisis de estabilidad de von Neumann para derivar las condiciones de estabilidad para aproximaciones de alto orden. Considerando la simplificación de la ecuación FNLS, discutida en las secciones anteriores; y asumiendo condiciones de borde periódicas, para cada celda  $I_m$ , el método Leapfrog-LDG-II puede escribirse de la siguiente manera:

$$Q_m^n = -\frac{2}{h} M_o^{-1} B_1(U_{m-1}^n, U_m^n, U_{m+1}^n), \quad (5.11a)$$

$$P_m^n = \left(\frac{h}{2}\right)^{2-\alpha} M_o^{-1} I_\alpha^R(\dots, Q_{m-1}^n, Q_m^n, Q_{m+1}^n, \dots), \quad (5.11b)$$

$$U_m^{n+1} = U_m^{n-1} - 4i\frac{\tau}{h} M_o^{-1} \left( B_2(P_{m-1}^n, P_m^n, P_{m+1}^n) + \tilde{\eta} S_u(U_{m-1}^n, U_m^n, U_{m+1}^n) \right), \quad (5.11c)$$

Donde  $M_o$  es la matriz de masa local en la celda de referencia  $[-1, 1]$  y  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $I_\alpha^R$  y  $S$  son operadores lineales.

### Proposición 5.6

Sean  $\widehat{B}_1$ ,  $\widehat{B}_2$ ,  $\widehat{I}_\alpha^R$  y  $\widehat{S}$  los símbolos de los operadores  $B_1(\cdot)$ ,  $B_2(\cdot)$ ,  $I_\alpha^R(\cdot)$  y  $S(\cdot)$  respectivamente. Entonces para todo  $\gamma \geq 0$ , los autovalores de la matriz  $M_o^{-1} \widehat{A}_\alpha$ , donde  $\widehat{A}_\alpha = -\widehat{B}_2 M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \gamma \widehat{S}$ , son no-negativos.

#### *Prueba.*

Escribiendo, por conveniencia, el parámetro de estabilización como  $\tilde{\eta} = \left(\frac{2}{h}\right)^{\alpha-1} \gamma$ , con  $\gamma \geq 0$ ; por la definición de los flujos numéricos, Ecn. (3.3), se sigue que  $\widehat{B}_2 = -\widehat{B}_1^*$ , de manera que el símbolo,  $\widehat{(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}}$ , del método LDG aplicado al operador  $(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}$  es una matriz hermítica y no negativa,  $\widehat{(-\Delta)^{\frac{\alpha}{2}}} = \left(\frac{2}{h}\right)^{\alpha-1} \widehat{B}_2 M_o^{-1} \widehat{I}_\alpha^R M_o^{-1} \widehat{B}_1 + \left(\frac{2}{h}\right)^{\alpha-1} \gamma \widehat{S} = \left(\frac{2}{h}\right)^{\alpha-1} \widehat{A}_\alpha$ . Entonces la matriz  $\widehat{A}_\alpha$  es también hermítica no negativa, para algún  $\gamma \geq 0$ . Ya que  $M_o$  es la matriz de

masa local, ésta es simétrica y definida positiva. Considerando su factorización de Cholesky,  $M_o = LL^T$ , el espectro de las matrices  $M_o^{-1}\widehat{A}_\alpha$  y  $L^{-1}\widehat{A}_\alpha L^{-T}$  son idénticos. Por lo tanto para algún eigenpar  $(\lambda, x)$  de  $L^{-1}\widehat{A}_\alpha L^{-T}$ , y ya que  $\widehat{A}_\alpha$  es no negativa, tenemos que

$$\lambda\|x\|^2 = \langle L^{-1}\widehat{A}_\alpha L^{-T}x, x \rangle = \langle \widehat{A}_\alpha L^{-T}x, L^{-T}x \rangle \geq 0 \implies \lambda \geq 0.$$

□

### Proposición 5.7

El método de Leapfrog-LDG-II aplicado a la ecuación de Schrödinger lineal unidimensional es condicionalmente estable para toda aproximación  $k \geq 0$ . Una condición de estabilidad necesaria y suficiente es

$$\tau \leq \left( \frac{1}{2^\alpha \lambda_{max}(k)} \right) h^\alpha, \quad (5.12)$$

donde  $\lambda_{max}(k)$  es el máximo autovalor de  $M_o^{-1}\widehat{A}$ .

#### *Prueba.*

Utilizando la transformada discreta de Fourier, de las ecuaciones Ecns. (5.11a)–(5.11b) obtenemos las siguientes ecuaciones en el dominio de frecuencias

$$\tilde{G}_1 = -\frac{2}{h}M_o^{-1}\widehat{B}_1, \quad \tilde{G}_2 = \left(\frac{h}{2}\right)^{2-\alpha} M_o^{-1}\widehat{I}_\alpha^R. \quad (5.13)$$

Sea  $I_k$  la matriz identidad de orden  $k+1$  y  $\mu = \tau/h^\alpha$ . por la Ecn. (5.13), el símbolo  $G$  del esquema de Leapfrog-LDG satisface la siguiente ecuación matricial

$$G = G^{-1} - i2^{\alpha+1}\mu M_o^{-1}\widehat{A} \iff G^2 + 2^{\alpha+1}i\mu M_o^{-1}\widehat{A}G - I_k = 0. \quad (5.14)$$

Algún eigenpar  $(\lambda, x)$  de  $G$  satisface la siguiente ecuación

$$\lambda^2 x + 2^{\alpha+1}i\mu\lambda M_o^{-1}\widehat{A}x - x = 0.$$

De donde,  $\lambda \neq 0$  y

$$M_o^{-1}\widehat{A}x = i\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2^{\alpha+1}\mu\lambda}\right)x \quad \therefore \quad i\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2^{\alpha+1}\mu\lambda}\right) \in \sigma(M_o^{-1}\widehat{A}).$$

Sea  $\lambda_o \in \sigma(M_o^{-1}\widehat{A})$  tal que

$$\lambda_o = i\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2^{\alpha+1}\mu\lambda}\right).$$

Escribiendo  $\lambda = a + ib$ , por la Proposición 5.6, la matriz  $M_o^{-1}\widehat{A}$  tiene un espectro real y no negativo; entonces las siguientes condiciones deben ser satisfechas

$$a(|\lambda|^2 - 1) = 0 \quad \text{y} \quad b \leq 0.$$

- Si  $a = 0$ ,

$$\lambda_o = i\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2^{\alpha+1}\mu\lambda}\right) = -\frac{1 + b^2}{2^{\alpha+1}\mu b} \iff b = -2^\alpha \lambda_o \mu \pm \sqrt{(2^\alpha \lambda_o \mu)^2 - 1}.$$

Como  $b \in \mathbb{R}$ , este caso no puede ocurrir, cuando  $(2^\alpha \lambda_o \mu)^2 - 1 \leq 0$ . Observe que de otra manera, el método es inestable ya que una de las raíces,  $b$ , es tal que  $|\lambda| = 2^\alpha \lambda_o \mu + \sqrt{(2^\alpha \lambda_o \mu)^2 - 1} > 1$ .

- Si  $|\lambda|^2 = 1$ ,

$$\lambda_o = i\left(\frac{\lambda^2 - 1}{2^{\alpha+1}\mu\lambda}\right) = -\frac{b}{2^\alpha \mu} \iff b = -2^\alpha \mu \lambda_o.$$

Como  $a \in \mathbb{R}$  se debe tener

$$0 \leq a^2 = 1 - b^2 = 1 - (2^\alpha \mu \lambda_o)^2.$$

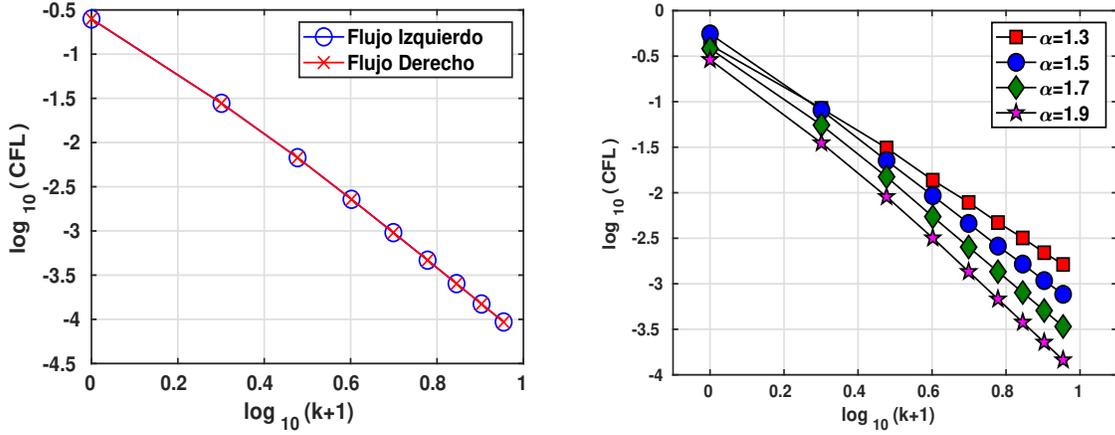
Sea  $\lambda_{max}(k)$  el mayor autovalor de  $M_o^{-1}\widehat{A}$ , entonces para que el método sea estable se debe cumplir

$$\mu \leq \frac{1}{2^\alpha \lambda_{max}(k)}.$$

□

La condición de Courant-Friedrich-Levy,  $CFL(k) = 1/(2^\alpha \lambda_{max}(k))$ , fue calculada truncando la serie del símbolo  $\widehat{I}_\alpha^R$  con 20 términos, y se muestra como una función del grado

de aproximación  $k$  en la Figura 5–2 para el esquema Leapfrog-md-LDG, utilizando flujos direccionales. Una regresión lineal muestra que  $CFL(k)$  decrece como  $(k+1)^{-2\alpha}$ . Mientras tanto, su comportamiento como una función del parámetro de estabilización  $\gamma$  se muestra en la Figura 5–3 para la ecuación clásica lineal de Schrödinger y en la Figura 5–4 para la ecuación fraccionaria lineal de Schrödinger utilizando aproximaciones cuadráticas. En ambos casos observamos una ligera mejora en la estabilidad; esto es, una CFL más grande, para el flujo central comparado con los flujos direccionales; y un comportamiento similar para todos los flujos: este converge a la CFL del md-LDG cuando  $\gamma$  se aproxima 0; y decrece como  $\mathcal{O}(\gamma^{-1})$  para  $\gamma \gg 1$ .



(a) Ecuación lineal clásica de Schrödinger

(b) Ecuación lineal fraccionaria de Schrödinger

Figura 5–2: Condición CFL para el método Leapfrog-md-LDG.

El método CELF propuesto por Sanz-Serna y Manoranjan [44] adaptado a la discretización espacial (CELF-LDG) lee, en aritmética compleja, como sigue

$$U_h^{n+1} = U_h^{n-1} - i2\tau_n M^{-1} (A_\alpha U_h^n + N_h(U_h^n)), \quad (5.15)$$

y; para imponer conservación de energía, el tamaño de paso en tiempo variable  $\tau_n$  es definido como

$$\tau_n = -\frac{\text{Im} \langle N_h(U_h^n), U_h^{n-1} \rangle}{\langle N_h(U_h^n), M^{-1} N_h(U_h^n) \rangle}.$$

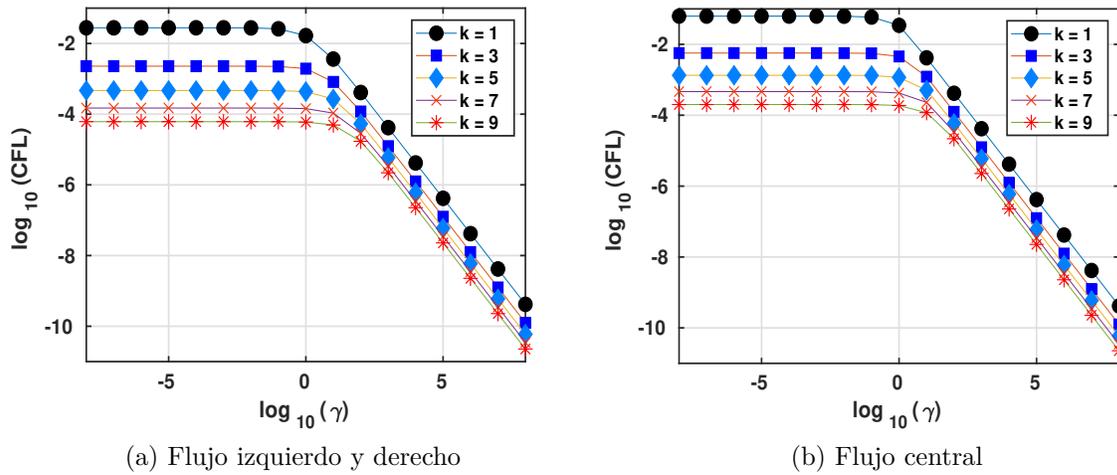


Figura 5-3: CFL como función de  $\gamma$  para el método estabilizado Leapfrog-LDG-II.

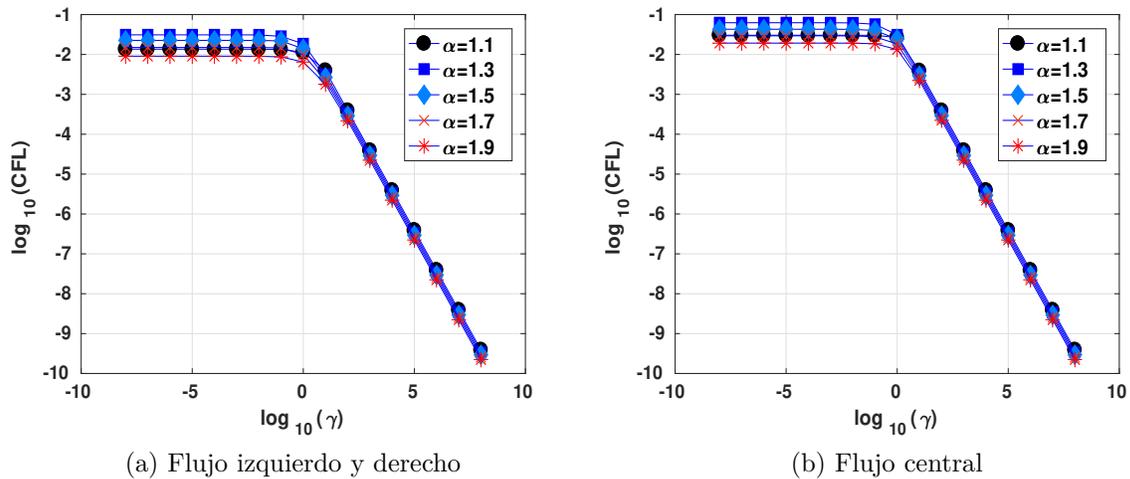


Figura 5-4: CFL como función de  $\gamma$  para el método estabilizado de Leapfrog-LDG-II, y diferentes valores de  $\alpha$ .

### 5.3. Experimentos Numéricos

Una serie de experimentos numéricos son llevados a cabo utilizando tres potenciales no lineales y varios valores de  $\alpha$ , incluyendo  $\alpha = 2$ . El valor exacto de la energía y el Hamiltoniano han sido numéricamente aproximados para la ecuación FNLS. Los problemas son descritos como sigue

- Potencial Cúbico-quíntico:

$$iu_t - (-\Delta^{\frac{\alpha}{2}})u + \beta_1|u|^2u + \beta_2|u|^4u = 0, \quad (5.16)$$

- Potencial logarítmico:

$$iu_t - \frac{1}{2}(-\Delta^{\frac{\alpha}{2}})u + \log(\beta_3|u|^2)u = 0, \quad (5.17)$$

La implementación fue realizada en el entorno de MATLAB utilizando aritmética compleja. Un tamaño de paso constante,  $\tau \approx h^{\frac{k+1}{2}}$ , fue utilizado con el fin de equiparar el orden de convergencia de ambas variables, temporal y espacial. Los problemas no lineales fueron resueltos utilizando la iteración del método predictor-corrector propuesto por Sanz-Serna y Verwer [37], el cual para el método MCN-LDG lee

$$iM\delta_\tau U_h^{n,s+1} = A_\alpha U_h^{n+\frac{1}{2},s+1} - F(U_h^{n+1,s}, U_h^n)U_h^{n+\frac{1}{2},s}, \quad (5.18)$$

donde  $U_h^{n+\frac{1}{2},s} = \frac{1}{2}(U_h^{n+1,s} + U_h^n)$ , y  $\delta_\tau U_h^{n,s} = \frac{1}{\tau}(U_h^{n+1,s+1} - U_h^n)$ . Se utilizó la norma  $L_2$  del error entre dos iteraciones consecutivas y una tolerancia de  $10^{-14}$  como criterios de parada. Ya que se están resolviendo problemas en una dimensión, se utilizó el método de eliminación de Gauss para resolver los sistemas lineales en cada paso.

### 5.3.a. Método CELF-LDG

Primero estudiaremos el rendimiento del esquema CELF-LDG aplicado a la ecuación clásica NLS para el potencial cúbico,  $\beta_1 = 2$ ,  $\beta_2 = 0$ , y condiciones iniciales  $u_o(x) = \text{sech}(x + 10)\exp(2ix)$ . Utilizamos flujo central y aproximaciones cuadráticas. La evolución de la energía discreta del esquema original de Leapfrog y el esquema CELF-LDG-II es ilustrado en la Figura 5–5a. Como se esperaba, los experimentos confirman la conservación de la energía, por el contrario al esquema original de Leapfrog-LDG-II. Mientras tanto, en la Figura 5–5b monitoreamos el tamaño de paso,  $\tau_n$ . En promedio, éste permanece cercano al tamaño de paso inicial,  $\tau_0$ , el cual fue establecido de acorde a la condición CFL obtenido en la Proposición 5.7, e incluido en la Tabla 5–1.

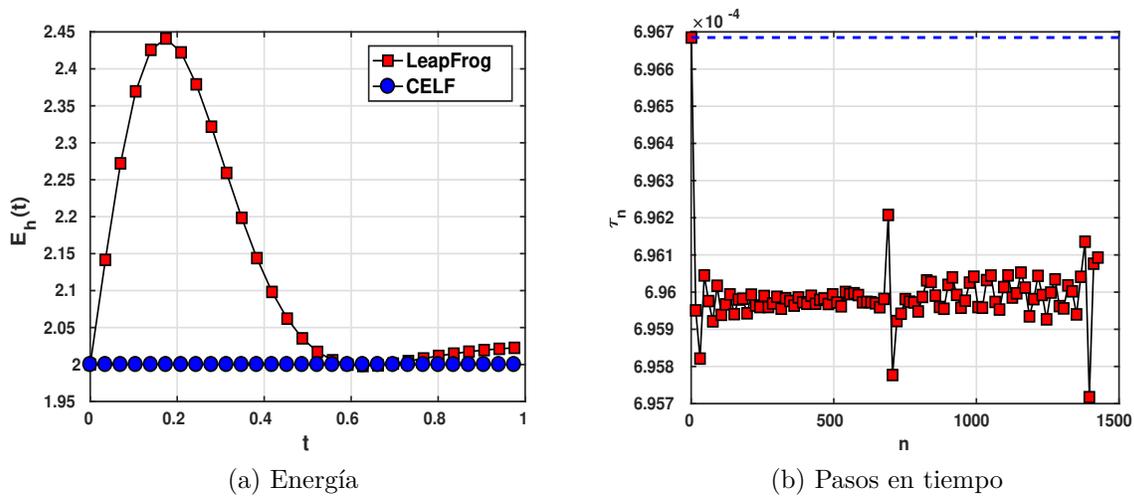


Figura 5–5: Conservación de la energía de la ecuación clásica de Schrödinger por el método de Leapfrog y el método CELF-LDG-II.

El comportamiento de la energía, ilustrado en la Figura 5–6 para la ecuación FNLS con potencial logarítmico y diferentes valores de  $\alpha$ , muestra la conservación de la energía por el método CELF-LDG-II, en contraposición al esquema no conservativo Leapfrog-LDG-II. Resultados similares fueron obtenidos para la otra técnica de estabilización y diferentes potenciales no lineales. No se observó “blow-up” u oscilaciones estableciendo el tamaño de paso en tiempo inicial como la condición CFL dada en la Tabla 5–1. El paso en tiempo mínimo y su promedio presentados en la Tabla 5–2 no muestran una reducción severa del tamaño de paso en tiempo y confirma una mejor estabilidad para el flujo central comparado al flujo derecho.

Tabla 5–1: CFL para el método de Leapfrog-LDG-II,  $\gamma = 1$  y aproximaciones cuadráticas.

$\alpha$	Flujo derecho	Flujo central
1.3	1.8483141052e-02	<b>3.0969794262e-02</b>
1.5	1.3855954190e-02	<b>2.4235213736e-02</b>
1.7	9.8775738544e-03	<b>1.8253025336e-02</b>
1.9	6.4602356179e-03	<b>1.3279394403e-02</b>
2.0	5.1104967161e-03	<b>1.1146956703e-02</b>

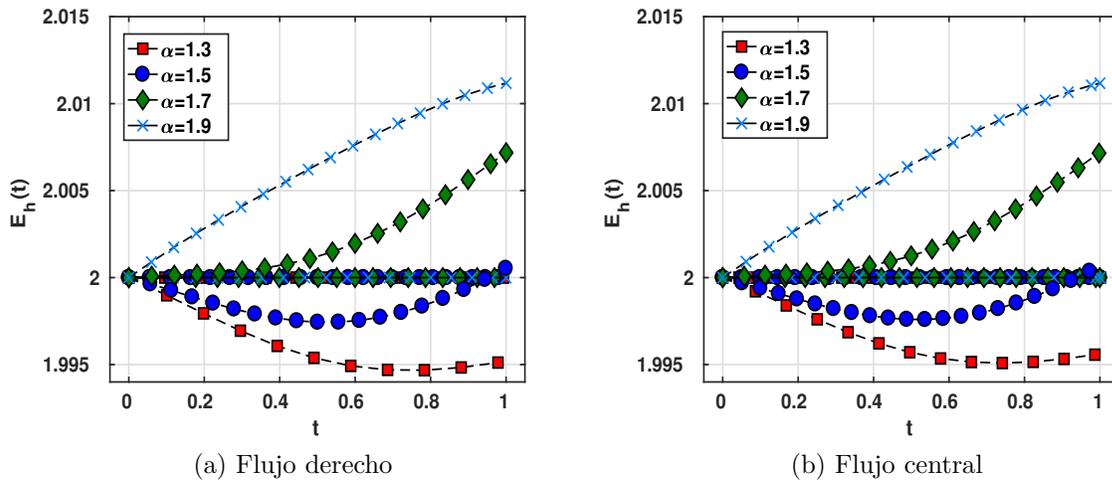


Figura 5–6: Energía para la ecuación FNL con potencial logarítmico el método de Leapfrog (línea punteada) y el método CELF-LDG-II (línea continua) con flujos central y derecho.

Tabla 5–2: Variación del paso en tiempo para el método CELF-LDG-II.

$\alpha$	Flujo derecho			Flujo central		
	min	max	prom	min	max	prom
1.3	1.580e-03	3.049e-03	<b>2.210e-03</b>	2.651e-03	5.108e-03	<b>3.719e-03</b>
1.5	1.071e-03	1.732e-03	<b>1.325e-03</b>	1.872e-03	3.029e-03	<b>2.316e-03</b>
1.7	7.119e-04	9.357e-04	<b>7.945e-04</b>	1.314e-03	1.729e-03	<b>1.467e-03</b>
1.9	4.257e-04	4.638e-04	<b>4.425e-04</b>	8.743e-04	9.534e-04	<b>9.095e-04</b>

### 5.3.b. Conservación de energía

Validamos la conservación de energía para ambas versiones estabilizadas del método LDG utilizando el problema FNL con potencial logarítmico Ecn. (5.17) en el dominio del espacio-tiempo  $\Omega = (-20, 20) \times (0, 15]$ ; con  $\beta_3 = e\sqrt{\frac{\pi}{2}}$ , condiciones iniciales

$$u_o(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{2} (\exp(-0.4i(x-4) - (x-4)^2) + \exp(0.4i(x+4) - (x+4)^2));$$

y diferentes valores de  $\alpha$ . La evolución del error de la energía para aproximaciones cuadráticas y flujo derecho se muestra en la Figura 5–7, para  $\alpha = 1.3, 1.5, 1.7$  y  $1.9$ . La escala del error de  $10^{-14}$  confirma la conservación de la energía para ambas versiones del método LDG. Ningún comportamiento particular dependiendo del parámetro difusión  $\alpha$  es observado.

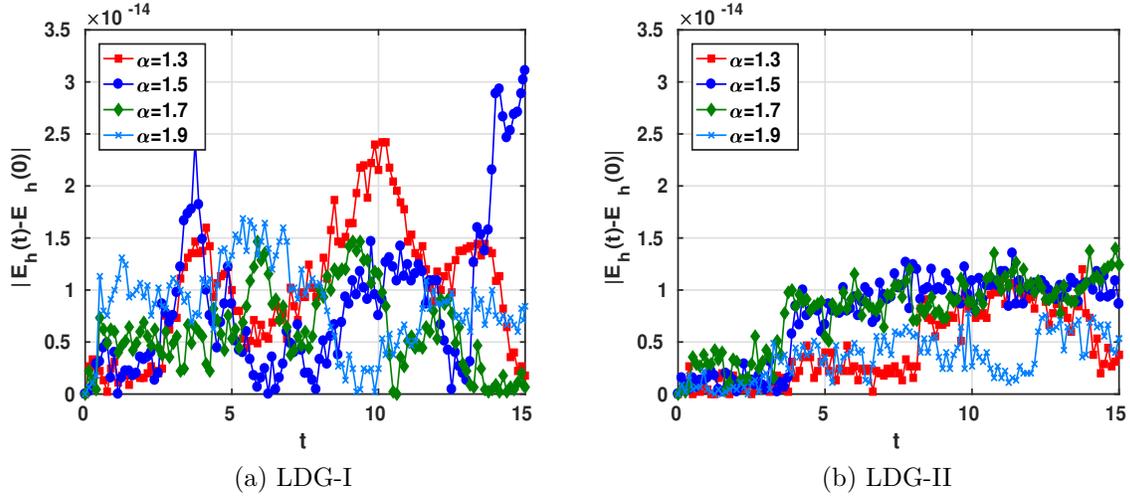


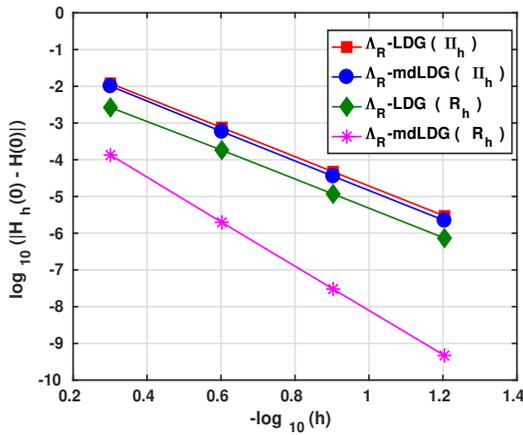
Figura 5–7: Error de la energía para ambas versiones estabilizadas del método LDG y diferentes valores de  $\alpha$ .

### 5.3.c. Conservación del Hamiltoniano

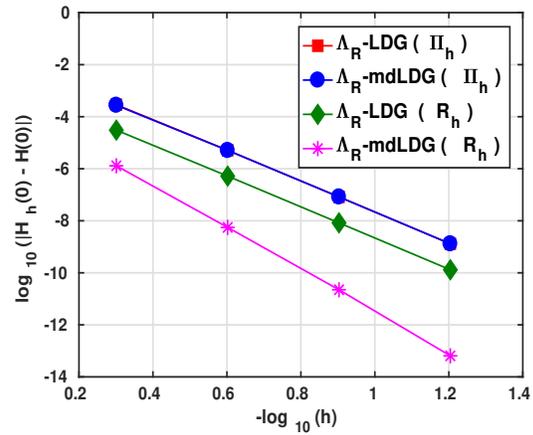
En [33, 45], utilizando un flujo direccional y un operador de proyección particular, un orden de convergencia óptimo para ambas variables fue obtenido teóricamente y numéricamente para el método md-LDG aplicado al problema unidimensional de convección-difusión transitorio lineal. Motivados por tal resultado, y utilizando un esquema en tiempo que conserva Hamiltoniano, la precisión del Hamiltoniano está determinada por su condición inicial. Por lo tanto se investiga su convergencia utilizando los operadores de proyección de Gauss-Radau  $R_h^\pm : H^1(I_m) \rightarrow \mathbb{P}_k(I_m)$  definidos, para algún  $u \in H^1(I_m)$ , por

$$\int_{I_m} (R_h^\pm(u) - u) v = 0, \quad \forall v \in \mathbb{P}_{k-1}(I_m), \quad R_h^-(x_m) = u(x_m^-); \quad R_h^+(x_{m-1}) = u(x_{m-1}^+). \quad (5.19)$$

Como se ilustra en la Figura 5–8, para la ecuación NLS con un potencial cúbico; y en la Figura 5–9 para la ecuación FNLS con un potencial cúbico; la convergencia del Hamiltoniano discreto es mejorada sustancialmente aplicando los operadores de proyección mencionados arriba para la condición inicial. Una convergencia de orden  $\mathcal{O}(h^{2k+2})$  es alcanzada para la proyección  $R_h^\pm$  pero solamente de orden  $\mathcal{O}(h^{2k})$  para la proyección  $L_2, \Pi_h$ , para la discretización del md-LDG.

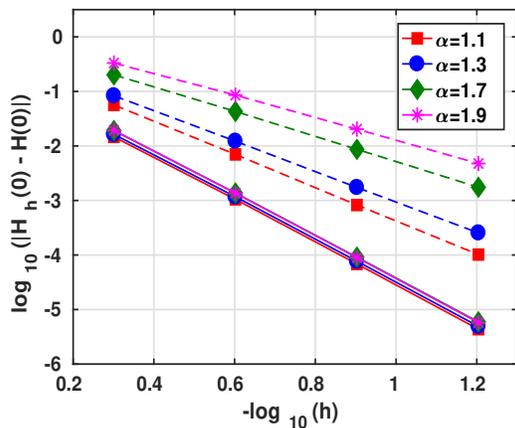


(a) Aproximación cuadrática

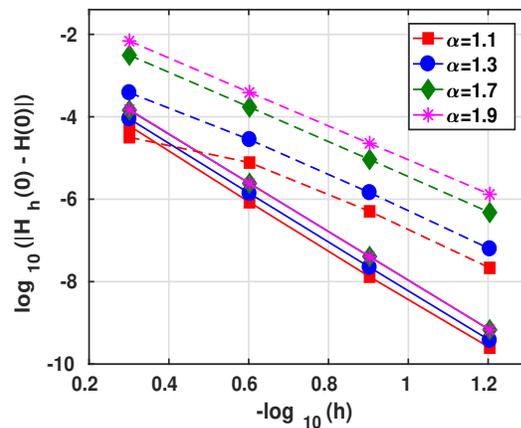


(b) Aproximación cúbica

Figura 5–8: Error inicial del Hamiltoniano como una función del tamaño de la malla  $h$  utilizando las proyecciones  $\Pi_h$  y  $R_h^\pm$ .



(a) md-LDG con aproximaciones lineales

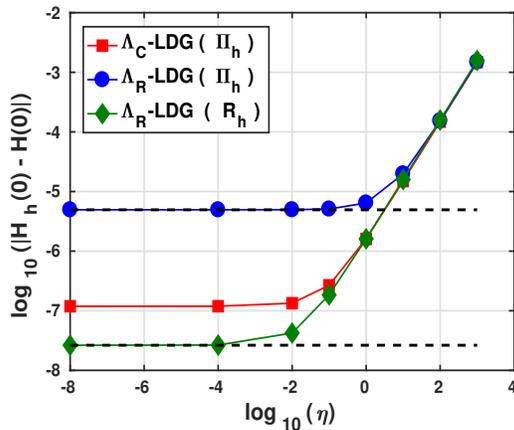


(b) md-LDG con aproximaciones cuadráticas

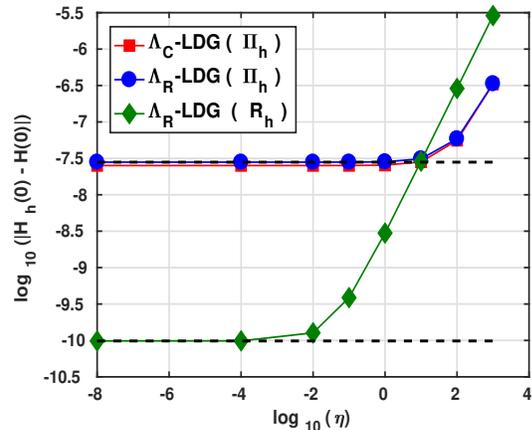
Figura 5–9: Error inicial del Hamiltoniano para el método MD-LDG y diferentes valores de  $\alpha$  utilizando las proyecciones  $\Pi_h$  y  $R_h^\pm$ .

Ahora evaluaremos la calidad de la aproximación del Hamiltoniano con respecto al parámetro de estabilización  $\eta$ . Aunque resultados similares fueron obtenidos utilizando diferentes potenciales, solamente se presentan, aquellos para la ecuación clásica NLS con potencial quintico, donde el Hamiltoniano inicial fue calculado utilizando las proyecciones  $\Pi_h(u_o)$  y  $R_h(o)$ ; y aquellos para la ecuación FNLS con potencial logarítmico, donde el Hamiltoniano de referencia fue calculado con una malla fina y polinomios de grado 6. Como se muestra

en las Figuras 5–10 y 5–11, el comportamiento del error es el mismo para todos los grados de aproximación; orden de difusión fraccionaria  $\alpha$  y los potenciales: el Hamiltoniano discreto converge al correspondiente del md-LDG cuando  $\eta$  se aproxima a cero y el error  $|\mathcal{H}_h(0) - \mathcal{H}(0)| = \mathcal{O}(\eta)$  para  $\eta \gg 1$ .

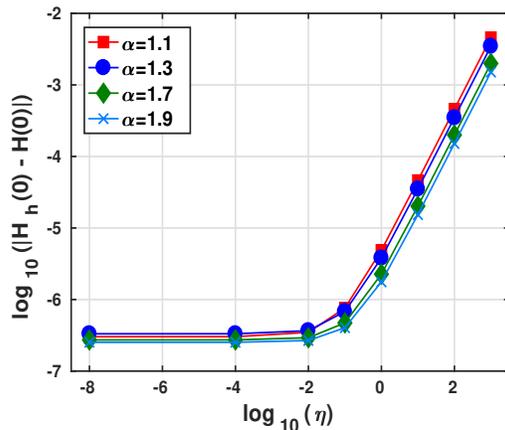


(a) Aproximaciones cuadráticas

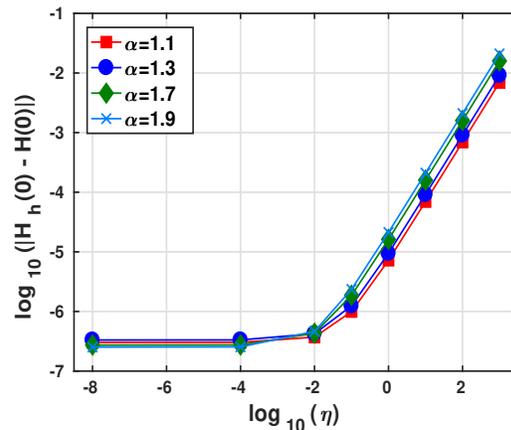


(b) Aproximaciones cúbicas

Figura 5–10: Error del Hamiltoniano como una función del parámetro de estabilización  $\eta$ .



(a) LDG-I



(b) LDG-II

Figura 5–11: Error del Hamiltoniano como una función del parámetro de estabilización  $\eta$  para diferentes valores de  $\alpha$ .

La evolución del error del Hamiltoniano para ambas versiones estabilizadas del método LDG con flujo derecho y aproximaciones cuadráticas es presentado en la Figura 5–12 para

$\alpha = 1.3, 1.5, 1.7$  y  $1.9$ . La escala de  $10^{-14}$  confirma la conservación del Hamiltoniano para todos los valores de  $\alpha$  y ambas técnicas de estabilización.

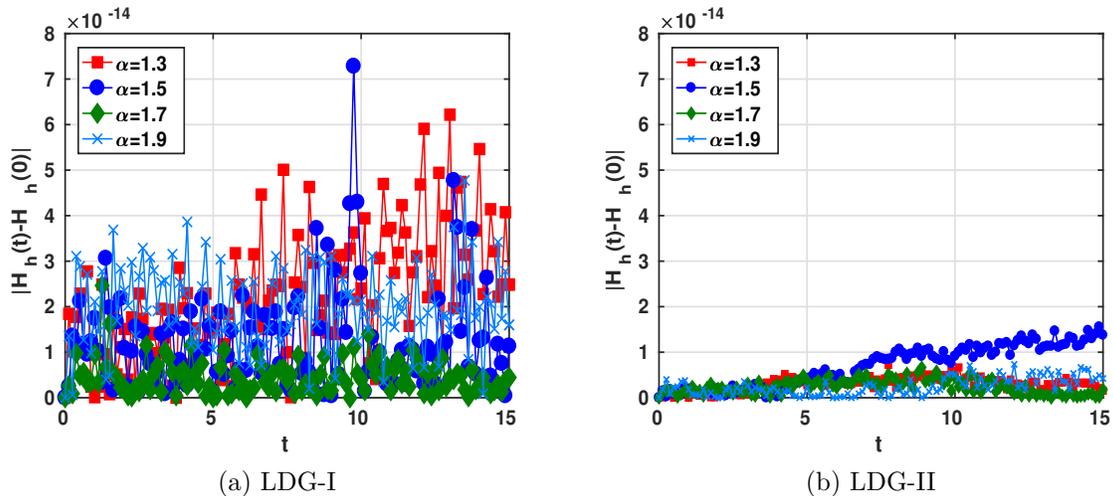


Figura 5–12: Comportamiento del error del Hamiltoniano para diferentes valores de  $\alpha$ .

### 5.3.d. Conservación de los invariantes de la ecuación NLS utilizando otros métodos dG

Como nuestra prueba todavía se mantiene para una clase general de discretizaciones espaciales discontinuas; siempre y cuando la simetría es preservada, validamos la conservación de los invariantes para la ecuación clásica NLS utilizando el bien conocido método Interior Penalty (IP) [42]; y, una discretización más reciente, llamada, el método Ultra Weak discontinuous Galerkin propuesto por Cheng y Shu [43]. Su formulación débil aplicada al operador Laplaciano está dada, en la celda  $I_m$ , por

$$-\int_{x_m}^{x_{m+1}} uv_{xx} + \widehat{u}_h v_x \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} - v(\widehat{u}_h)_x \Big|_{x_m}^{x_{m+1}} + s(u_h)v \Big|_{x_m}^{x_{m+1}}, \quad \forall v \in \mathbb{P}_k(I_m),$$

donde los flujos numéricos están definidos como los promedios estándar de  $u_h$  y  $(u_h)_x$ ; y el operador de estabilización está definido como en (3.5). Luego de repetir integración por partes un simple cálculo muestra que la forma bilineal asociada es también simétrica.

Como en todos nuestros problemas modelos hemos observado el mismo comportamiento, solamente presentamos los resultado del potencial quintico;  $\beta_1 = 0$  y  $\beta_2 = 1$ . La conservación de la energía es ilustrada en la Figura 5–13a para los métodos LDG, IP y Ultra Weak DG;

la evolución del error de la energía se muestra en la Figura 5–13b; y la conservación del Hamiltoniano se muestra para aproximaciones cuadráticas y cúbicas en la Figura 5–14. El parámetro de estabilización para todos los métodos es  $\eta = 10^2$ . Debemos señalar que utilizar la proyección  $R_h^\pm$  no mejora la precisión del Hamiltoniano; ésta es una característica particular del método LDG. No podemos asegurar qué método es más preciso ya que experimentos con otros potenciales y diferentes parámetros de estabilización revelan resultados diferentes.

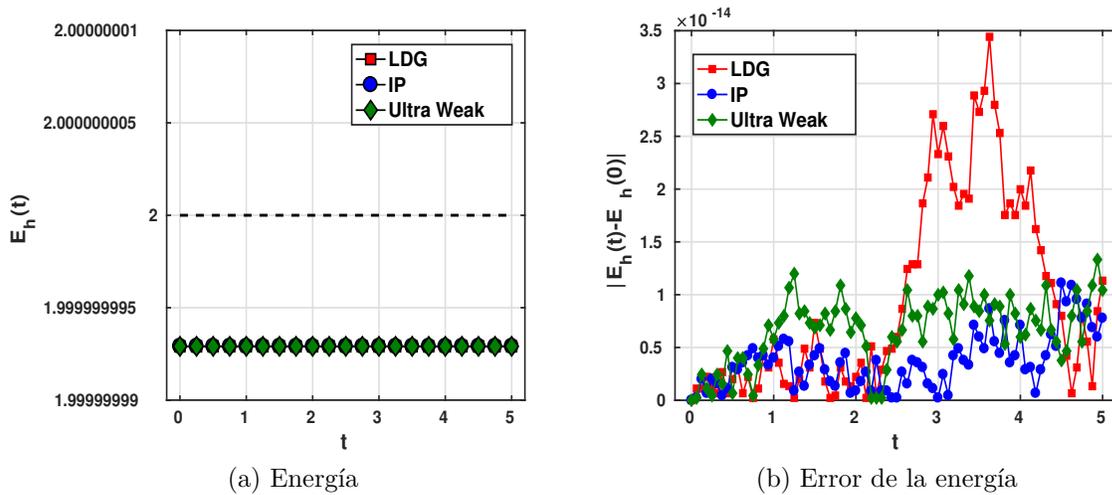


Figura 5–13: Conservación de la energía para diferentes métodos DG.

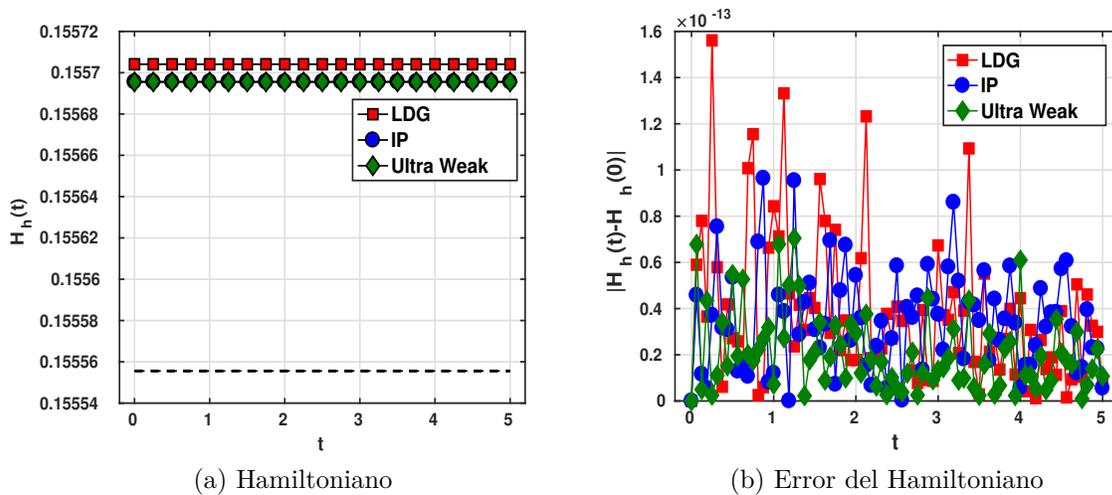


Figura 5–14: Conservación del Hamiltoniano para diferentes métodos dG.

### 5.3.e. Convergencia

Finalmente, experimentos numéricos muestran orden óptimo de convergencia  $\mathcal{O}(h^{k+1})$ , para todo  $\alpha \in (1, 2)$ . Debido a que, en general, para  $\alpha \in (1, 2)$  no son conocidas las soluciones exactas de la ecuación FNLS; se consideró como solución de referencia, la aproximación cúbica con  $h = 0.0325$ . Las tasas de convergencia del método LDG-II, para la ecuación (5.16), con condición inicial  $u_o(x) = \text{sech}(x) \exp(2ix)$ , en  $(x, t) \in [-15, 15] \times [0, 1]$ , se muestran para los flujos, central y derecho, en las Tablas 5-3 y 5-4 para el potencial cúbico ( $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ ) y en las Tablas 5-5 y 5-6 para el potencial quíntico ( $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$ ).

Tabla 5-3: Tasas de convergencia para el potencial cúbico ( $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ ) y flujo central de la ecuación FNLS.

	$h$	$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
$k = 1$	5.00e-01	3.56e-01	—	4.16e-01	—	4.28e-01	—	4.57e-01	—
	2.50e-01	1.04e-01	<b>1.77</b>	1.40e-01	<b>1.57</b>	1.57e-01	<b>1.45</b>	1.50e-01	<b>1.61</b>
	1.25e-01	2.65e-02	<b>1.97</b>	3.88e-02	<b>1.86</b>	4.33e-02	<b>1.85</b>	3.65e-02	<b>2.04</b>
	6.25e-02	6.74e-03	<b>1.97</b>	1.03e-02	<b>1.92</b>	1.14e-02	<b>1.92</b>	9.22e-03	<b>1.99</b>
$k = 2$	5.00e-01	1.46e-01	—	2.38e-01	—	3.24e-01	—	4.19e-01	—
	2.50e-01	2.71e-02	<b>2.43</b>	4.74e-02	<b>2.33</b>	6.29e-02	<b>2.37</b>	7.51e-02	<b>2.48</b>
	1.25e-01	3.50e-03	<b>2.95</b>	6.06e-03	<b>2.97</b>	7.90e-03	<b>2.99</b>	9.33e-03	<b>3.01</b>
	6.25e-02	4.62e-04	<b>2.92</b>	7.67e-04	<b>2.98</b>	9.90e-04	<b>3.00</b>	1.16e-03	<b>3.01</b>
$k = 3$	5.00e-01	9.04e-02	—	1.58e-01	—	2.17e-01	—	2.72e-01	—
	2.50e-01	6.93e-03	<b>3.70</b>	1.22e-02	<b>3.70</b>	1.60e-02	<b>3.76</b>	1.88e-02	<b>3.85</b>
	1.25e-01	4.57e-04	<b>3.92</b>	7.67e-04	<b>3.99</b>	9.92e-04	<b>4.01</b>	1.16e-03	<b>4.02</b>
	6.25e-02	2.86e-05	<b>3.99</b>	5.29e-05	<b>3.86</b>	5.59e-05	<b>4.15</b>	6.04e-05	<b>4.27</b>

### 5.3.f. Comentarios adicionales

El comportamiento de la solución de la ecuación FNLS con potencial logarítmico se ilustra en la Figura 5-15 donde se observa que el tiempo necesario para la coalición de ambos gausones está directamente relacionado al orden fraccionario de difusión.

Es importante resaltar el efecto de la tolerancia del criterio de convergencia en el método de Newton sobre el cálculo de los invariantes. En la Figura 5-16 se muestra la evolución del error en la energía y el Hamiltoniano para tres valores distintos en la tolerancia. La gráfica

Tabla 5–4: Tasas de convergencia para el potencial cúbico ( $\beta_1 = 1, \beta_2 = 0$ ) y flujo derecho de la ecuación FNLS.

	$h$	$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
$k = 1$	5.00e-01	3.46e-01	—	4.13e-01	—	4.70e-01	—	5.68e-01	—
	2.50e-01	1.02e-01	<b>1.76</b>	1.51e-01	<b>1.45</b>	1.89e-01	<b>1.31</b>	2.25e-01	<b>1.34</b>
	1.25e-01	2.77e-02	<b>1.88</b>	4.33e-02	<b>1.80</b>	5.40e-02	<b>1.81</b>	6.09e-02	<b>1.88</b>
	6.25e-02	7.16e-03	<b>1.95</b>	1.13e-02	<b>1.94</b>	1.39e-02	<b>1.95</b>	1.53e-02	<b>1.99</b>
$k = 2$	5.00e-01	1.45e-01	—	2.36e-01	—	3.19e-01	—	4.14e-01	—
	2.50e-01	2.69e-02	<b>2.43</b>	4.70e-02	<b>2.33</b>	6.26e-02	<b>2.35</b>	7.50e-02	<b>2.46</b>
	1.25e-01	3.52e-03	<b>2.93</b>	6.06e-03	<b>2.95</b>	7.90e-03	<b>2.99</b>	9.33e-03	<b>3.01</b>
	6.25e-02	4.65e-04	<b>2.92</b>	7.68e-04	<b>2.98</b>	9.91e-04	<b>3.00</b>	1.16e-03	<b>3.01</b>
$k = 3$	5.00e-01	9.06e-02	—	1.59e-01	—	2.17e-01	—	2.72e-01	—
	2.50e-01	6.97e-03	<b>3.70</b>	1.22e-02	<b>3.69</b>	1.60e-02	<b>3.77</b>	1.89e-02	<b>3.85</b>
	1.25e-01	4.57e-04	<b>3.93</b>	7.68e-04	<b>4.00</b>	9.92e-04	<b>4.01</b>	1.16e-03	<b>4.02</b>
	6.25e-02	2.94e-05	<b>3.96</b>	5.29e-05	<b>3.86</b>	5.59e-05	<b>4.15</b>	6.04e-05	<b>4.27</b>

Tabla 5–5: Tasas de convergencia para el potencial quíntico ( $\beta_1 = 0, \beta_2 = 1$ ) y flujo central de la ecuación FNLS.

	$h$	$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
$k = 1$	5.00e-01	2.35e-01	—	2.45e-01	—	2.73e-01	—	4.72e-01	—
	2.50e-01	7.79e-02	<b>1.59</b>	9.73e-02	<b>1.33</b>	1.04e-01	<b>1.39</b>	1.62e-01	<b>1.54</b>
	1.25e-01	2.31e-02	<b>1.75</b>	2.99e-02	<b>1.70</b>	3.34e-02	<b>1.64</b>	4.51e-02	<b>1.84</b>
	6.25e-02	6.30e-03	<b>1.88</b>	8.28e-03	<b>1.85</b>	9.63e-03	<b>1.79</b>	1.23e-02	<b>1.87</b>
$k = 2$	5.00e-01	1.32e-01	—	1.97e-01	—	2.76e-01	—	4.53e-01	—
	2.50e-01	2.71e-02	<b>2.28</b>	4.07e-02	<b>2.27</b>	5.47e-02	<b>2.33</b>	8.53e-02	<b>2.41</b>
	1.25e-01	3.50e-03	<b>2.95</b>	5.12e-03	<b>2.99</b>	7.06e-03	<b>2.95</b>	1.11e-02	<b>2.94</b>
	6.25e-02	4.40e-04	<b>2.99</b>	6.15e-04	<b>3.06</b>	8.45e-04	<b>3.06</b>	1.35e-03	<b>3.04</b>
$k = 3$	5.00e-01	8.77e-02	—	1.34e-01	—	1.81e-01	—	2.90e-01	—
	2.50e-01	7.01e-03	<b>3.64</b>	1.04e-02	<b>3.69</b>	1.42e-02	<b>3.66</b>	2.22e-02	<b>3.71</b>
	1.25e-01	4.62e-04	<b>3.92</b>	6.51e-04	<b>4.00</b>	8.92e-04	<b>4.00</b>	1.43e-03	<b>3.96</b>
	6.25e-02	2.97e-05	<b>3.96</b>	4.77e-05	<b>3.77</b>	4.79e-05	<b>4.22</b>	7.58e-05	<b>4.24</b>

muestra una pérdida de precisión sustancial en el cálculo de ambos invariantes, a medida que dicha tolerancia aumenta.

Tabla 5–6: Tasas de convergencia para el potencial quíntico ( $\beta_1 = 0$ ,  $\beta_2 = 1$ ) y flujo derecho de la ecuación FNLS.

	$h$	$\alpha = 1.3$		$\alpha = 1.5$		$\alpha = 1.7$		$\alpha = 1.9$	
		Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa	Error	Tasa
$k = 1$	5.00e-01	2.60e-01	—	3.02e-01	—	3.97e-01	—	6.34e-01	—
	2.50e-01	9.08e-02	<b>1.52</b>	1.22e-01	<b>1.30</b>	1.52e-01	<b>1.38</b>	2.49e-01	<b>1.35</b>
	1.25e-01	2.64e-02	<b>1.78</b>	3.63e-02	<b>1.75</b>	4.65e-02	<b>1.71</b>	7.30e-02	<b>1.77</b>
	6.25e-02	6.87e-03	<b>1.94</b>	9.47e-03	<b>1.94</b>	1.24e-02	<b>1.91</b>	1.92e-02	<b>1.93</b>
$k = 2$	5.00e-01	1.32e-01	—	1.95e-01	—	2.73e-01	—	4.50e-01	—
	2.50e-01	2.68e-02	<b>2.30</b>	4.04e-02	<b>2.27</b>	5.46e-02	<b>2.32</b>	8.53e-02	<b>2.40</b>
	1.25e-01	3.52e-03	<b>2.93</b>	5.15e-03	<b>2.97</b>	7.10e-03	<b>2.94</b>	1.12e-02	<b>2.93</b>
	6.25e-02	4.66e-04	<b>2.92</b>	6.51e-04	<b>2.98</b>	8.91e-04	<b>3.00</b>	1.43e-03	<b>2.97</b>
$k = 3$	5.00e-01	8.77e-02	—	1.35e-01	—	1.81e-01	—	2.90e-01	—
	2.50e-01	7.05e-03	<b>3.64</b>	1.04e-02	<b>3.69</b>	1.42e-02	<b>3.66</b>	2.22e-02	<b>3.71</b>
	1.25e-01	4.63e-04	<b>3.93</b>	6.51e-04	<b>4.00</b>	8.92e-04	<b>4.00</b>	1.43e-03	<b>3.96</b>
	6.25e-02	3.02e-05	<b>3.94</b>	4.77e-05	<b>3.77</b>	4.79e-05	<b>4.22</b>	7.58e-05	<b>4.24</b>

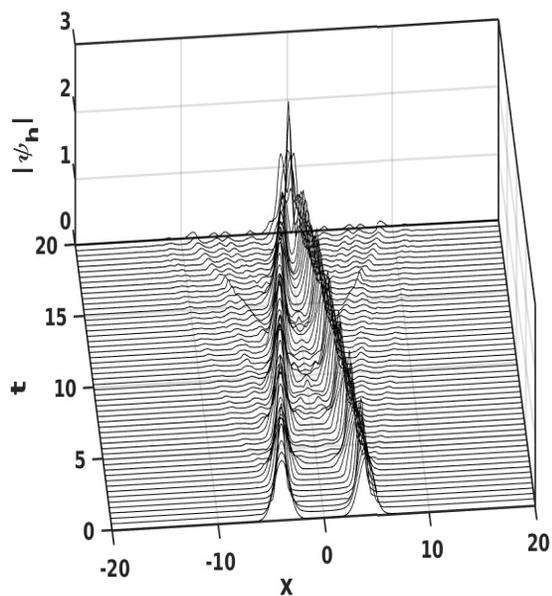
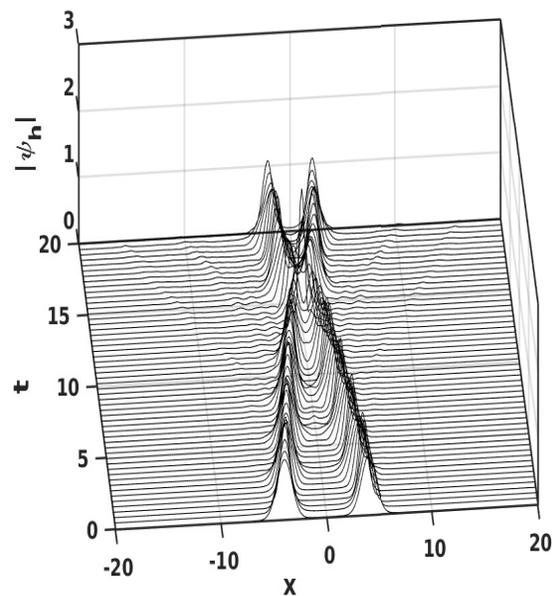
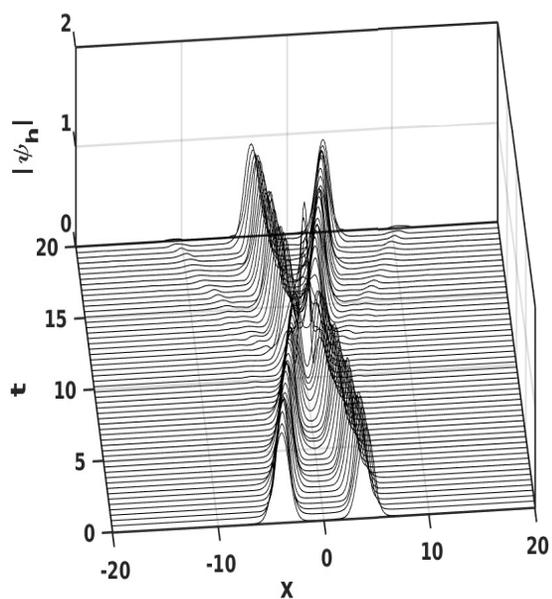
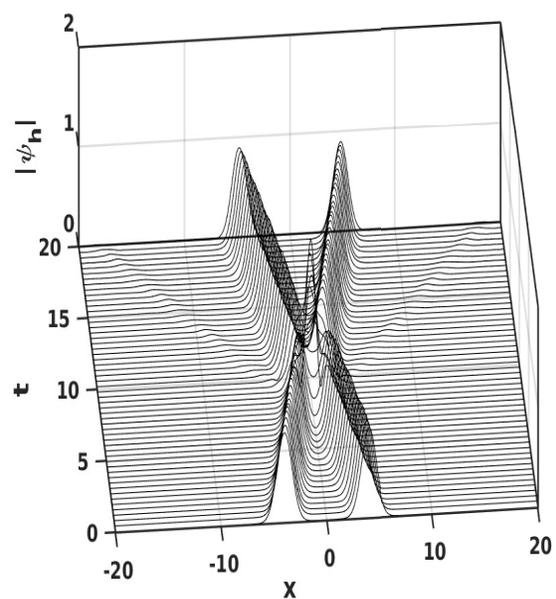
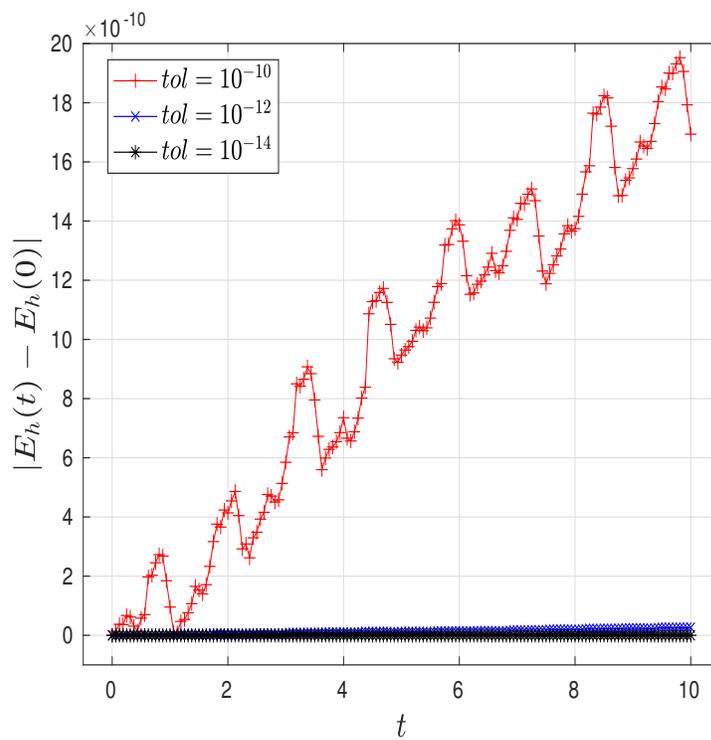
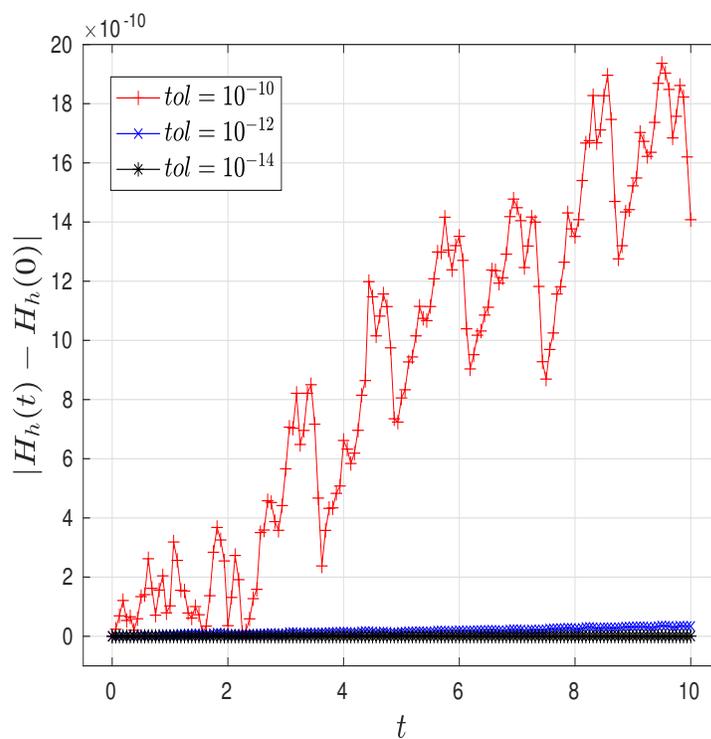
(a)  $\alpha = 1.3$ (b)  $\alpha = 1.5$ (c)  $\alpha = 1.7$ (d)  $\alpha = 1.9$ 

Figura 5–15: Aproximación del método LDG para la ecuación FNLS con potencial logarítmico para diferentes valores de  $\alpha$ .



(a) Energía



(b) Hamiltoniano

Figura 5–16: Efecto de la tolerancia en el método de Newton en la variación del error en la energía y el Hamiltoniano.

# Capítulo 6

## CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

### 6.1. Conclusiones

#### ■ Ecuación de difusión fraccionaria

En este trabajo, se ha analizado la convergencia del método minimal dissipation LDG, aplicado a un problema transitorio de difusión fraccionaria, utilizando ambos operadores fraccionarios espaciales: el de Riesz y el de Riemann-Liouville, de orden  $1 < \alpha < 2$ . Utilizando un término de penalización, de orden  $h^{1-\alpha}$ , más adecuado; se muestra que tasas óptimas de convergencia para la variable primaria pueden ser alcanzadas para soluciones con una condición extra de regularidad.

Condiciones necesarias y suficientes de estabilidad con respecto al grado de aproximación y orden de la derivada fraccionaria  $\alpha$  fueron obtenidos, por primera vez, para el método forward Euler en tiempo y el método mdLDG en espacio. Comparado con el término de penalización tradicional de orden  $h^{-1}$ , el término de penalización propuesto muestra restricciones en tiempo menos severas. Además, como la CFL para el método forward Euler es de orden  $\mathcal{O}((k+1)^{-2\alpha})$  aproximaciones de alto orden podrían ser utilizadas para valores de  $\alpha$  cercanos a 1.

Nuestros experimentos numéricos utilizando métodos de Runge Kutta fuertemente estables y conservativos sugieren el uso de métodos de avance en tiempo explícitos para el mismo rango de orden de derivada fraccionaria.

Para el operador diferencial de Riemann-Liouville, los experimentos numéricos muestran que para alcanzar las tasas de convergencia óptimas, mallas finas deben ser utilizadas para valores de  $\alpha$  cercanos a 1. Sin embargo, para el método LDG completamente estabilizado;

es decir, cuando la penalización se impone en todos los puntos de la malla, tasas óptimas de convergencia son recuperadas en mallas más gruesas.

### ■ Ecuación fraccionaria de Schrödinger no lineal

Utilizando la formulación primaria del método LDG, la conservación de dos importantes invariantes, la energía y el Hamiltoniano, de una ecuación FNLS general (1.2) han sido probadas teóricamente para los problemas semi-discreto y completamente discreto. Ya que el análisis llevado a cabo en este artículo no hace uso de algún detalle intrínseco de un método particular éste se mantiene para una clase general de discretizaciones espaciales discontinuas aplicada a la ecuación clásica NLS. Esta afirmación fue numéricamente comprobada con los métodos IP y Ultra Weak DG.

La discretización del término no lineal se vuelve relevante para la conservación de las cantidades de interés cuando un esquema de avance en tiempo es usado. Se mostró que los esquemas de tiempo, tales como el punto medio, el método modificado de Crank-Nicolson y el esquema circularly exact Leapfrog; en combinación con la discretización espacial del LDG tiene propiedades similares de conservación cuando son aplicados a ecuaciones FNLS. Por primera vez, han sido obtenidas condiciones de estabilidad, utilizando un análisis de von Neumann para el esquema en tiempo de Leapfrog en combinación con la discretización espacial del LDG aplicado a la ecuación FNLS. La condición CFL del método LDG-II decrece como  $\mathcal{O}((k+1)^{-2\alpha})$  para  $\alpha \in (1, 2)$ , lo cual es consistente con los casos clásicos convectivo,  $\alpha = 1$ ; y difusivo  $\alpha = 2$ . La restricción del paso en tiempo es de orden  $\mathcal{O}(h^\alpha)$  donde  $h$  es el tamaño de la malla; lo cual es extremadamente atractivo para métodos explícitos y valores de  $\alpha$  cercanos a 1.

La precisión de la aproximación del Hamiltoniano ha sido numéricamente investigada, mostrando que el error incrementa linealmente con respecto al parámetro de estabilización  $\eta$ .

Nuestros experimentos numéricos también confirmaron una ventaja particular de la discretización del LDG sobre otros métodos DG obteniendo una mejor aproximación del Hamiltoniano cuando un flujo direccional es utilizado y proyectando las condiciones iniciales con el operador de Gauss-Radau.

## 6.2. Trabajos Futuros

A continuación se describen algunos trabajos futuros que pueden desarrollarse como resultado del estudio presentado en este trabajo:

- Con el fin de mejorar la eficiencia del método, en especial para problemas multidimensionales, investigar técnicas de preconditionamiento para los sistemas discretos de ecuaciones.
- Realizar un análisis de error utilizando el nuevo término de penalización de orden  $\mathcal{O}(h^{1-\alpha})$  para la ecuación FNLS.
- Estudiar otros métodos de alto orden en tiempo en combinación con la discretización espacial LDG para la Ecn. FNLS y sus propiedades de conservación.
- Desarrollar una implementación en paralelo del método para problemas multidimensionales en mallas no estructuradas.

## Capítulo 7

### Bibliografía

- [1] Cockburn, B. y Shu, C.W. The Local Discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems. *SIAM J. Num. Anal.*, 35(6):2440–2463, 1998.
- [2] Mainardi, F. *Fractional calculus and waves in linear viscoelasticity: an introduction to mathematical models*. World Scientific, 2010.
- [3] Carpinteri, A. y Mainardi, F. *Fractals and fractional calculus in continuum mechanics*, volume 378. Springer, 2014.
- [4] Zaslavsky, G.M. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. *Physics Reports*, 371(6):461–580, 2002.
- [5] Ionescu, C., Lopes, A., Copot, D., Machado, J., y Bates, J. The role of fractional calculus in modeling biological phenomena: A review. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 51:141 – 159, 2017.
- [6] Volpert, V. A., Nec, Y., y Nepomnyashchy, A. A. Fronts in anomalous diffusion–reaction systems. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 371(1982), 2013.
- [7] Zhang, H. y Hu, Q. Existence of the global solution for fractional logarithmic Schrödinger equation. *Comp. & Math. with Applic.*, 2017.
- [8] Ji, X. y Tang, H. High order accurate Runge-Kutta (Local) Discontinuous Galerkin methods for one and two dimensional fractional diffusion equations. *Numer. Math. Theor. Meth. Appl.*, 5(3):333–358, 2012.
- [9] Deng, W.H. y Hesthaven, J.S. Local Discontinuous Galerkin methods for fractional diffusion equations. *ESAIM: M2AN*, 47(6):1845–1864, 2013.

- [10] Qiu, L., Deng, W., y Hesthaven, J.S. Nodal discontinuous Galerkin methods for fractional diffusion equations on 2D domain with triangular meshes. *J. Comput. Phys.*, 298:678–694, 2015.
- [11] Xu, Q. y Hesthaven, J.S. Discontinuous Galerkin method for fractional convection-diffusion equations. *SIAM J. Num. Anal.*, 52(1):405–423, 2014.
- [12] Ahmadiania, M., Safari, Z., y Fouladi, S. Analysis of local discontinuous Galerkin method for time space fractional convection diffusion equations. *Bit Numer. Math.*, 2018. doi:10.1007/s10543-018-0697-x.
- [13] Castillo, P. y Gómez, S. Optimal stabilization and time step constraints for the forward Euler-Local Discontinuous Galerkin method applied to fractional diffusion equations. *Sometido*, 2018.
- [14] Wang, S., Yuan, J., Deng, W., y Wu, Y. A hybridized discontinuous Galerkin method for 2D fractional convection-diffusion equations. *J. Scientific Computing.*, 68(2):826–847, 2016.
- [15] Li, J., Liu, F., Feng, L., y Turner, I. A novel finite volume method for the Riesz space distributed-order advection-diffusion equation. *Applied Mathematical Modelling*, 46:536–553, 2017.
- [16] Laskin, N. Fractional quantum mechanics. *Phys. Rev. E*, 62(3):3135, 2000.
- [17] Guo, X. y Xu, M. Some physical applications of fractional Schrödinger equation. *J. Math. Phys.*, 47, 2006.
- [18] Shabat, A. y Zakharov, V. Exact theory of two-dimensional self-focusing and one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media. *Soviet physics JETP*, 34(1):62, 1972.
- [19] Guo, B., Han, Y., y Xin, J. Existence of the global smooth solution to the period boundary value problem of fractional nonlinear Schrödinger equation. *App. Math. and Comp.*, 204(1):468–477, 2008.

- [20] Sanz-Serna, J.M. Methods for the numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation. *Math. Comp.*, 43(167):21–27, 1984.
- [21] Xu, Y. y Shu, C.W. Local Discontinuous Galerkin methods for nonlinear Schrödinger equations. *J. Comput. Phys.*, 205(1):72–97, 2005.
- [22] Xu, Y. y Shu, C.W. Optimal error estimates of the semidiscrete Local Discontinuous Galerkin methods for high order wave equations. *SIAM J. Num. Anal.*, 50(1):79–104, 2012.
- [23] Aboelenen, T. A high-order nodal Discontinuous Galerkin method for nonlinear fractional Schrödinger type equations. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 54:428–452, 2018.
- [24] Arnold, D.N., Brezzi, F., Cockburn, B., y Marini, L.D. Unified analysis of Discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. *SIAM J. Num. Anal.*, 39(5):1749–1779, 2002.
- [25] Castillo, P. y Gómez, S. Conservación de invariantes de la ecuación de Schrödinger no lineal por el método LDG. *Revista Mexicana de Física E*, 64(1):52–60, 2018.
- [26] Castillo, P. y Gómez, S. On the conservation of fractional nonlinear Schrödinger equation's invariants by the LDG method. *J. Scientific Computing*, 2018. doi:10.1007/s10915-018-0708-8.
- [27] Podlubny, I. *Fractional differential equations: an introduction to fractional derivatives, fractional differential equations, to methods of their solution and some of their applications*, volume 198. Academic press, 1998.
- [28] El-Sayed, AMA y Gaber, M. On the finite Caputo and finite Riesz derivatives. *Electronic J. of Theor. Phys.*, 3(12):81–95, 2006.
- [29] Deng, W.H. Finite element method for the space and time fractional Fokker-Planck equation. *SIAM J. Num. Anal.*, 47(1):204–226, 2008.
- [30] Perugia, I. y Schötzau, D. An hp-analysis of the Local Discontinuous Galerkin method for diffusion problems. *J. Scientific Computing.*, 17(1-4):561–571, 2002.

- [31] Castillo, P., Cockburn, B., Perugia, I., y Schötzau, D. An a priori error analysis of the Local Discontinuous Galerkin method for elliptic problems. *SIAM J. Num. Anal.*, 38(5):1676–1706, 2000.
- [32] Cockburn, B. y Dong, B. An analysis of the minimal dissipation Local Discontinuous Galerkin method for convection diffusion problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 32:233–262, 2007.
- [33] Castillo, P., Cockburn, B., Schötzau, D., y Schwab, Ch. An optimal a priori error estimate for the *hp*-version of the Local Discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems. *Math. Comp.*, 71(238):455–478, 2001.
- [34] Shu, C.W. y Osher, S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *J. Comput. Phys.*, 77(2):439–471, 1988.
- [35] Spiteri, R.J. y Ruuth, S.J. A new class of optimal high-order strong-stability-preserving time discretization methods. *SIAM J. Num. Anal.*, 40(2):469–491, 2002.
- [36] Verwer, J.G. y Dekker, K. Step by step stability in the numerical solution of partial differential equations. Technical Report 161-83, Centre for Math. and Comp. Sc., Amsterdam, 1983.
- [37] Sanz-Serna, J.M. y Verwer, J.G. Conservative and nonconservative schemes for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 6:25–42, 1986.
- [38] Griffiths, D.F., Mitchell, A.R., y Morris, J.Li. A numerical study of the nonlinear Schrödinger equation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 45(1):177–215, 1984.
- [39] Herbst, B.M., Morris, J.Li., y Mitchell, A.R. Numerical experience with the nonlinear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 60:282–305, 1985.
- [40] Strauss, W. y Vazquez, L. Numerical solution of a nonlinear Klein-Gordon equation. *J. Comput. Phys.*, 28(2):271 – 278, 1978.
- [41] Delfour, M., Fortin, M., y Payré, G. Finite-difference solutions of a non-linear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 44(2):277–288, 1981.

- [42] Arnold, D.N. An interior penalty finite element method with discontinuous elements. *SIAM J. Num. Anal.*, 19:742–760, 1982.
- [43] Cheng, Y. y Shu, C.W. A Discontinuous Galerkin finite element method for time dependent partial differential equations with higher order derivatives. *Math. of Comp.*, 77(262):699–730, 2008.
- [44] Sanz-Serna, J.M. y Manoranjan, V.S. A method for the integration in time of certain partial differential equations. *J. Comput. Phys.*, 52(2):273–289, 1983.
- [45] Castillo, P. An optimal error estimate for the Local Discontinuous Galerkin method. In Cockburn, B., Karniadakis, G.E., y Shu, C.-W., editors, *Discontinuous Galerkin Methods: Theory, Computation and Applications*, volume 11 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 285–290. Springer Verlag, 2000.