

## Estimación del error de discretización en la solución aproximada de un sistema de ecuaciones químicas del tipo reacción-difusión

### Discretization error estimation of a chemical reaction-diffusion equations system approximate solution

Ulices Zavaleta<sup>1</sup> | Alvaro De Bortoli<sup>2</sup> | Mark Thompson<sup>3</sup>

#### RESUMEN

En este artículo se presenta un resultado sobre la estimación del error de discretización en la solución aproximada de un sistema no lineal de ecuaciones de tipo difusión-reacción que modela una reacción química binaria, exotérmica, irreversible y de un sólo paso, en un fluido incompresible, con condiciones de frontera de Newmann y condiciones iniciales no negativas. Para esto, se formula el problema continuo como un problema en el espacio de elementos finitos y para estimar el error entre la solución exacta del problema aproximado y su solución aproximada se utiliza método implícito de Euler de primer orden asumiendo algunas hipótesis sobre el operador en el espacio de elementos finitos, obteniéndose que el error de discretización es del orden de  $O(h\tau) + O(\tau^{1+\alpha})$  para  $h, \tau$  pequeños, y  $10 < \alpha \leq 1$ , en la norma del espacio de Hilbert  $L^2$ .

**Palabras clave:** Error, Discretización, Difusión, Reacción.

#### ABSTRACT

This paper describes a result of the discretization error estimation in the approximate solution of a system of a nonlinear of diffusion-reaction equations modelling a one step, binary, exothermic, irreversible chemical reaction, that occurs in an incompressible fluid, with Newmann boundary conditions and no negative initial conditions. For this, the continuous problem is formulated as a problem in the finite elements space. To estimate the error between the exact solution of the approximate problem and its approximate solution the first order implicit Euler method is used assuming some hypotheses on the operator in the finite element space. As a result, the discretization error is the order  $O(h\tau) + O(\tau^{1+\alpha})$  for  $h$  small in the norm of the Hilbert space  $L^2$ .

**Keywords:** Error, Discretization, Diffusion, Reaction

## 1. INTRODUCCIÓN

Muchos problemas en ingeniería son modelados por sistemas de ecuaciones de reacción-difusión, las cuales son de gran importancia en diferentes áreas de la ciencia: física, química, biología, ingeniería, matemática, etc. Debido a su importancia, por muchos años, ha concentrado el interés de investigadores de las diferentes áreas, de la ciencia y en particular de los matemáticos. Por ejemplo, son ampliamente conocidas las ecuaciones clásicas de Hodgkin y Huxley, que describen la transmisión de impulsos nerviosos a través del nervio axón, estudios que han facilitado el desarrollo de las neurociencias, las ecuaciones de Fitz-Hugh- Nagumo, que describen la transmisión de señales a través del axón, las ecuaciones de Lotka- Volterra, modelan la interacción entre las especies biológicas; los cuales continúan siendo estudiados debido que sistemas o modelos similares se presentan en diversos campos de la ciencia. Ver por ejemplo,<sup>1, 2</sup> y las referencias allí citadas.

Por otro lado, la teoría matemática de reacciones químicas tiene analogía con el estudio de la mecánica de fluidos que estudia el movimiento físico de un continuo. Para los reactores (modelos) basado en la difusión fickiniana se han realizado estudios matemáticos detallados que permiten determinar su estado estacionario y su comportamiento dinámico.<sup>3</sup> El estado de un reactor químico queda completamente descrito por la temperatura y la concentración de las sustancias que intervienen en la reacción. En ausencia de difusión, el reactor está gobernado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de la forma

$$\frac{du}{dt} = f(u)$$

Donde  $u$  es un vector cuyas componentes son la temperatura,  $T$ , y las diferentes concentraciones  $C_i$  que intervienen. Esto es,  $u=(C_1, C_2, \dots, C_N)$ . Un ejemplo de esto es el sistema

$$\begin{aligned} \frac{dC}{dt} &= aC + D(1-C)e^{\frac{T}{1+\epsilon T}} \\ \frac{dT}{dt} &= aT - b(T - T_C) + BD(1-C)e^{\frac{T}{1+\epsilon T}} \end{aligned}$$

el cual, ha sido ampliamente estudiado tanto en su comportamiento estacionario como en su comportamiento dinámico D.Cohen<sup>1</sup>.

La descripción de una reacción química en general es muy compleja, pues en la formación del producto de la reacción intervienen una serie de pasos intermedios, por ejemplo la oxidación del metano involucra 12 especies químicas y 22 reacciones, ver<sup>4</sup>. En este contexto, en<sup>5</sup>, han realizado el estudio de un sistema de ecuaciones que modela un proceso de combustión en presencia de

de química compleja<sup>5</sup>. El sistema de ecuaciones considerado es estudiado considerando un dominio bidimensional, y está dado por las ecuaciones:

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla)u - \text{Pr} \Delta u + \nabla p = \bar{e}_2 \sigma \theta \quad (1)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (v \cdot \nabla)\theta - \Delta \theta = \sum_{i=1}^N h_i \omega_i \quad (3)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + (v \cdot \nabla)c_i - \frac{1}{Le} \Delta c_i = \omega_i, \quad (4)$$

Donde  $1 \leq i \leq N$ ,  $\bar{e}_2 = \{e_1, e_2\}$  una base en  $\mathbb{R}^2$ ,  $v = (v_1, v_2)$  la velocidad,  $\theta$  la temperatura y  $c_i$  las concentraciones de  $N$  especies que participan en la reacción química. Además  $\text{Pr}$ ,  $h_i$  y  $Le$  son parámetros positivos. Asumiendo condiciones apropiadas investigan la propagación de la llama que se produce en el proceso de combustión al ingresar las especies químicas en un reactor aislado e impenetrable al flujo de fluidos. Bajo condiciones iniciales y de frontera apropiadas, utilizando resultados clásicos del análisis funcional, la teoría de semigrupos, y un proceso asociado del método de Galerkin demuestran la existencia y unicidad de la solución del problema (1)-(4). Además demuestran que la temperatura generada en el proceso de combustión es limitada, obteniendo una estimativa de la acotación de la temperatura.

El estudio analítico o numérico de este tipo de fluidos, incluyendo mezcla molecular y reacción química, se torna generalmente muy complejo, pues el movimiento del fluido produce incremento de la mezcla, lo cual puede originar que la reacción total se realice con mucha rapidez, con una liberación de calor produciendo cambios de masa específica y presión, originadas por la reacción, lo que afecta significativamente la mezcla,<sup>4, 6</sup>. En general, para procesos de reacción-difusión de la forma (1)-(4) no existen métodos analíticos para obtener su solución exacta, por ello, se recurre a métodos de aproximación para estimar el estado de las sustancias que participan en el proceso de reacción, y la evolución de los productos y temperatura que se producen.

Uno de los métodos para estimar el error global de la solución aproximada de problemas en ecuaciones diferenciales no lineales con interés dinámico es el Shadowing cuya teoría se basa en el hecho que en general los sistemas dinámicos presentan una dependencia muy sensible a las condiciones iniciales, debido a que pequeños cambios en cualquier punto de la órbita produce una nueva órbita, la cual tiende a apartarse de la órbita original, lo que da lugar a una gran cantidad de soluciones diferentes en pequeños intervalos de tiempo.

Debido a que en todo método numérico se producen perturbaciones debido a errores por redondeo o truncamiento, la pregunta natural es ¿cómo esos errores influyen en la validez de los resultados numéricos?. S.Chow<sup>7</sup> y D.Coomes<sup>8</sup> realizan un estudio al respecto mediante la utilización de Shadowing, que consiste en sustituir la solución exacta por una trayectoria verdadera del sistema dinámico que esté muy cerca de la trayectoria numérica<sup>7, 8</sup>.

El Shadowing es una rama de la teoría de sistemas dinámicos que lleva a demostrar que frente a la acumulación exponencial de pequeños errores, los resultados numéricos tienen validez. Esto se hace demostrando que para cualquier solución particular obtenida (solución ruidosa) existe una “solución verdadera” con condiciones iniciales ligeramente diferentes a las originales que permanece muy cerca de la solución calculada. Si esta solución existe, se llama verdadero Shadow de la solución, y una aproximación al verdadero Shadow se denomina Shadow numérico.

S.Pilyugin<sup>9</sup>, presenta una discretización detallada para el uso de Shadowing en el estudio de sistemas dinámicos<sup>9</sup>, W. Hayes<sup>10</sup> desarrolla un método para probar la existencia de Shadows en tiempo finito en la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias<sup>10</sup>. S.Larson<sup>11</sup> obtienen estimativas del error global para problemas de problemas de difusión-reacción<sup>11</sup>. Resultados de Shadowing para sistemas parabólicos continuos han sido obtenidos por A.Osterman<sup>12</sup>. Asumiendo ciertas hipótesis a priori sobre el operador no acotado han establecido estimativas de error para tiempos grandes<sup>13</sup>.

En este artículo se presenta un resultado sobre la estimación del error en la discretización para aproximar la solución de un sistema de ecuaciones de tipo reacción-difusión que modela un proceso de mezcla y reacción de dos sustancias químicas que dan lugar a un proceso irreversible con liberación de calor. Esto permitirá, en un trabajo posterior, hacer uso de la teoría de shadowing con las ideas de A. Osterman<sup>12</sup>, estimar el error global del sistema de ecuaciones químicas. El resultado obtenido complementa el estudio analítico y numérico del modelo, realizado por U Zavaleta et al.<sup>12, 14, 9</sup>.

## 2. MODELO

En general, los procesos de difusión-reacción son modelados por sistemas de ecuaciones en derivadas parciales. En nuestro caso se considera un proceso de difusión y reacción química de dos reactivos, A y B, que se mezclan en un reactor aislado e impenetrable al flujo de fluidos lo que da origen a la obtención de un producto P. Este proceso corresponde a una reacción binaria en una sola dirección, de la forma  $\nu_A A + \nu_B B \rightarrow \nu_P P$

Donde  $\nu_i$ ,  $i \in \{A, B, P\}$  son los coeficientes molares estequiométricos. La razón total de reacción es considerada de primer orden con respecto a cada uno de los reactivos, y la razón constante de la reacción específica es controlada por la temperatura cinética de Arrhenius  $k = Z e^{R/E T}$ , donde R, E, T son la constante universal de gases, la energía de activación y la temperatura absoluta, respectivamente<sup>15</sup>.

El modelo que gobierna el proceso de reacción-difusión es descrito por el sistema no lineal de ecuaciones, que tiene forma,

$$\frac{\partial w}{\partial t} + J(\phi(w)) - \frac{1}{\text{Re}} \Delta w = 0; \quad \Delta \phi = -w \quad (5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + J(\phi, T) - \frac{1}{\text{RePr}} \Delta T = \nu_P \text{Hec}_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + J(\phi, c_i) - \frac{1}{\text{ReSc}_i} \Delta c_i = \pm \nu_i \text{Dac}_A c_B e^{-Z_e/T} \quad (7)$$

Donde  $J(\phi, h) = \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial h}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial h}{\partial y}$  las ecuaciones (5) corresponden a las ecuaciones de Navier-Stokes en dos dimensiones. La función de valor real  $T: [0, \tau] \rightarrow \mathbf{R}$  es la temperatura y las funciones  $c_i: \Omega \rightarrow \mathbf{R}$  representan las concentraciones de las sustancias que se mezclan y producen la reacción química, para  $i \in \{A, B, C\}$  donde es un dominio  $\Omega = \{x = (x_1, x_2) : \text{con } x_1, x_2 \in \mathbf{R}\}$  es un dominio limitado en el espacio  $\mathbf{R}^2$  con frontera  $\partial\Omega$ . El signo, “+” en la ecuación (7) corresponde a  $i = P$  y el signo menos, “-” para  $i = A, B$ . Las constantes Re, Pr,  $Z_e$ , Sc y Da son los números de Reynolds, Prandtl, Zel'dovich, Schmidt y Damköhler, respectivamente;  $\nu$  para  $i \in \{A, B, P\}$  denotan los coeficientes estequiométricos y He un parámetro de liberación de calor C.Chang<sup>16</sup>.

El sistema (5)-(7) está sujeto a las condiciones de frontera

$$\frac{\partial c_A}{\partial \eta} = \frac{\partial c_B}{\partial \eta} = \frac{\partial c_P}{\partial \eta} = \frac{\partial T}{\partial \eta} = 0 \quad (8)$$

y condiciones iniciales no negativas

$$c_i(0) = c_{i0}, \quad T(0) = 0, \quad \phi(0) = \phi_0 \quad (9)$$

## 3. ALGUNOS RESULTADOS NUMÉRICOS

Existe una diversidad de publicaciones que presentan diversos métodos para simular las soluciones de la formulación de la función-vorticidad de corriente para fluidos incompresibles no estacionarios, ver por ejemplo<sup>2, 17, 18</sup>.

El problema en estudio ha sido abordado tanto del punto de vista analítico, como computacional por U. Zavaleta et al.<sup>19, 20, 21</sup>. La existencia y unicidad de la solución se realiza mediante el uso de la teoría de semigrupos, y el estudio numérico utilizando el método de diferencias finitas de segundo orden para la discretización espacial y el método de Runge-Kutta para el paso de tiempo, teniendo en cuenta que esos métodos son particularmente simples y eficientes, especialmente para el caso cuando las fronteras del dominio son paralelas a los ejes coordenados<sup>19, 20, 21</sup>. Para el

tiempo, debido a su eficiencia consideramos el esquema de Runge-Kutta con tres pasos<sup>22,17</sup>.

Considerando un reactor cuadrado [0,1]x[0,1] con fronteras impenetrables al flujo y condiciones iniciales  $c_{A0} = 1, c_{B0} = 1, c_{P0} = 0$  y  $\phi_0 = 0,01$ , los coeficientes estequiométricos, y los números de Prandtl y Schmidt son iguales a 1, respectivamente y una malla de 30 x 30 con el tamaño de celda  $\Delta x = \Delta y = \frac{1}{30}$ ,  $U^{20}$  han obtenido resultados numéricos sobre el comportamiento de la solución del sistema (5)-(9)<sup>14</sup>.

Tales resultados fueron simulados computacionalmente para valores de los parámetros correspondientes a los números de Reynolds, de 100 a 5000, Zel'dovich de 1 a 10 y Damköhler entre 30 y 600.

Las figuras 1 y 2, muestran el comportamiento tanto de la evolución del reactivo A como la razón de reacción.

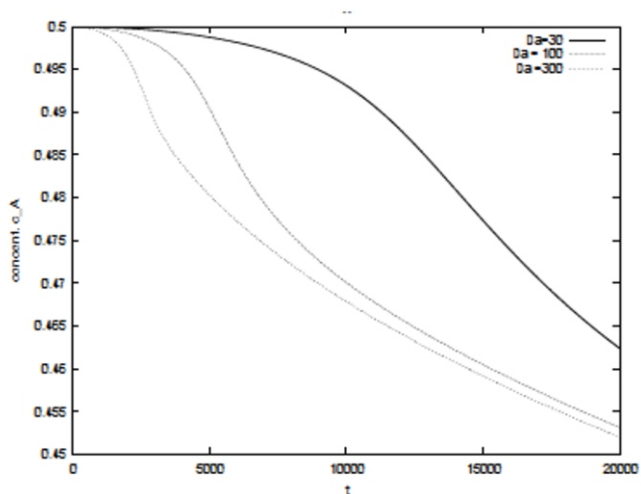


Figura 1. Evolución de la concentración de la sustancia A Fuente: Elaboración propia.

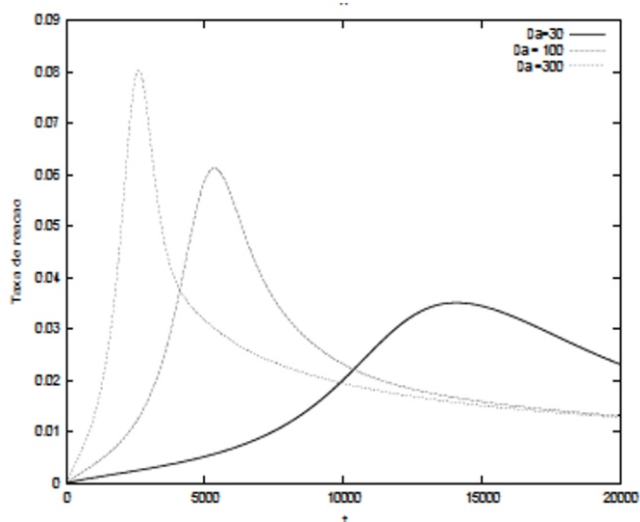


Figura 2. Evolución de la razón de reacción, donde se observa la velocidad inicial de reacción. Fuente: elaboración propia.

En ambos casos se observa la influencia del parámetro Da tanto para el consumo del reactivo A como también para la velocidad de reacción, en el sentido que cuando aumenta el número adimensional Da se acelera la formación del producto y la temperatura también es mayor.

#### 4. ESTIMACIÓN DEL ERROR DE DISCRETIZACIÓN

Como se ha expresado anteriormente, uno de los métodos para estimar el error global en la solución aproximada de ecuaciones diferenciales no lineales con interés dinámico, es el Shadowing, que consiste en sustituir una solución exacta por una verdadera trayectoria, la cual está muy cerca de la trayectoria numérica. Con la finalidad de aplicar, posteriormente, la teoría de Shadowing para estimar el error global en la obtención de la solución aproximada del problema (5)-(9) se obtiene un resultado que permite estimar el error local para el problema semidiscretizado formulado en el espacio de elementos finitos.

Considerando el espacio de funciones medibles integrables  $L^2(\Omega)$ ,  $S_h$  el espacio de elementos finitos y el operador proyección  $P_h: L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  el sistema de ecuaciones (5)-(9) se transforma en un problema discreto de valor inicial de la forma:

$$\frac{d}{dt} y_h = A_h(t) + F_h(y_h) + H_h(y), \quad (10)$$

$$y_h(0) = P_h(y_0)$$

Para los detalles de tal representación ver<sup>21</sup>. Para estimar el error global en la aproximación de la solución del problema (5)-(9) se considera el problema (10), y se utiliza el método de Euler hacia atrás, con el paso de tiempo  $tn = n\tau, 0 \leq n \leq N, 0 \leq \tau \leq 1$ .

Si se denota por  $y_h^n$  la aproximación de  $y_h$  y por  $A_h^n$  la aproximación de  $A_h(t)$  en cada paso de tiempo  $t_n$  entonces la aproximación del problema (10) toma la forma

$$\frac{y_h^{n+1} - y_h^n}{\tau} = A_h^{n+1} y_h^{n+1} + F_h(y_h^{n+1})$$

donde  $y_0^h = y_h(0) = P_h(y_0)$

Para la solución del problema (10) se asumen algunas hipótesis sobre el operador  $A_h$  para  $h$  suficientemente pequeño, para garantizar que éste operador herede las propiedades del operador del problema original  $A(t)$  que tiene las siguientes características:

$$A(t) : D(A_A(t)) \times D(A_A(t)) \times D(A_A(t)) \subset Z \rightarrow Z$$

con

$$A(t)y(t) = (A_A(t)y(t), A_B(t)y(t), A_T(t)y(t))$$

donde para  $i \in \{A, B, C\}$ ,  $\varpi = (\frac{\partial \phi}{\partial x_2}, -\frac{\partial \phi}{\partial x_1})$ ,

$$D(A_i(t)) = \{u \in W^{2,p}(\Omega) : A_i u \in C(\Omega), \forall p \geq 1,$$

$$\frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 \text{ sobre } \partial \Omega\}$$

el operador  $A_i(t)$  es definido por

$$A_i(t) = -\nu_A \Delta c_i + (\varpi \cdot \nabla) c_i$$

precisando que  $Z = C(\Omega) \times C(\Omega) \times C(\Omega)$ ,  $W^{2,m}(\Omega)$  es el espacio de Sobolev de funciones medibles en el espacio  $L^2(\Omega)$  que tienen derivada en el sentido de las distribuciones hasta el orden  $m$ , y  $C(\Omega)$  el espacio de las funciones continuas sobre la clausura de  $\Omega$ <sup>23</sup>.

#### 4.1. Hipótesis

Si  $I$  denota el operador identidad y  $B = (A_h(0) + \sigma I)$ , con  $0 < \sigma \leq 1$  una perturbación del operador  $A_h$  en  $t = 0$ , en el problema (10), entonces se asume la existencia de constantes  $C_1, C_2, C_3, C_4$  y  $C_5$  que cumplen las siguientes condiciones:

a)  $\sup_{0 \leq t \leq \tau} \|A_h(t)(B^{-1}y_h(t))\| \leq C_2$

b)  $\sup_t \|(A_h(t))y_h(t)\| \leq C_3 |\lambda_h|$ , donde  $|\lambda_h| = \sup_t |\lambda_h(t)|$ ,  $\lambda_h(t)$  es el máximo valor propio de  $A_h(t)$

c)  $\|(A_h(t) - A_h(s))B^{-1}\| \leq C_4 |t - s|^\alpha$ ,  $0 < \alpha \leq 1$

d)  $\sup_t \|(A_h(t) - A_h^{n+1})(y_h(t))\| \leq C_5 |\lambda_h| \tau^\alpha$

e)  $\sup_t \|B\| y_h(t) \leq C_1$

Teniendo en cuenta las hipótesis asumidas se demuestra el siguiente resultado.

**Teorema.** Si  $F'_h(y_h^{n+1})$  denota la derivada discreta de  $F_h(y_h^{n+1})$ , asumiendo las hipótesis (a)-(d) de 5.1, y que el operador  $H_n = (I - \tau(A_h^{n+1} + F'_h(y_h^{n+1})))$  es invertible que para cada  $n=0, 1, 2, \dots, N-1$ , entonces por el método de Euler hacia atrás, el error

$$\zeta_{n+1} = y_h^{n+1} - y_{h,\tau}(t_{n+1})$$

en la solución del problema (10) cumple la relación

$$\zeta_{n+1} = H_n \zeta_n + H_n(\Psi(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau)) \quad (11)$$

donde

$$\Psi(\zeta_{n+1}) = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) F_h''(y_h^{n+1} + E_h^{n+1}) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds$$

con  $E_h^{n+1} = (y_h^{n+1} + \delta_{h,\tau,n+1} - \theta \zeta_{n+1})$ , y

$$\delta_{h,\tau}^{n+1}(s) = y_{h,\tau}(s) - y_{h,\tau}(t_{n+1}).$$

Además,

$$\|\Theta_{n+1}(h, \tau)\| \leq O(ht) + O(\tau^{\alpha+1})$$

en la norma corresponde al espacio  $L^2(\Omega)$ .

**Prueba.** Defina,

$$y_{h,\tau}(t) = \frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t y_h(s) ds$$

con  $y_h(h) = y_h(0)$  para  $t \leq 0$ .

Entonces, considerando las hipótesis establecidas en 4.1 se tiene que para  $n=0, 1, 2, \dots, N-1$ , denotando  $r_1 = t_n + s'$  y  $r_2 = t_{n-1} + s'$ , existen constantes  $M_1, M_2, M_3$  y  $M_4$ , tales que

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (A_h(r_1) - A_h(r_2))(y_h(r_1)) ds' ds \right\| \leq M_1 |\lambda_h| \tau^{1+\alpha}$$

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (A_h(r_2))(y_h(r_1) - y_h(r_2)) ds' ds \right\| \leq M_2 |\lambda_h|^2 \tau^2$$

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_s^\tau (F_h(y_h(r_1)) - F_h(y_h(r_2))) ds' ds \right\| \leq M_3 |\lambda_h| \tau^2$$

$$\left\| \frac{1}{\tau} \int_0^\tau (y_h(t_{n+1}) - y_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_n} (y_h(t_n) - y_h(s)) ds \right\|$$

$$\leq M_4 (\tau^2 |\lambda_h|^2 + \tau^{1+\alpha} |\lambda_h| + |\lambda_h| \tau^2 + h\tau)$$

Finalmente, si  $\zeta_{n+1} = y_h^{n+1} - y_{h,\tau}(t_{n+1})$ , entonces existen  $\theta \in ]0, 1[$  y tales que:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} (F_h(y_h^{n+1}) - F(y_{h,\tau}(s))) = \tau F'(y_h^{n+1}) \zeta_{n+1} + I_1 + I_2 - I_3$$

donde

$$I_1 = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (F_h(y_h^{n+1}) - F_h(y_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds$$

$$I_2 = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta') (F_h''(y_h^{n+1} + \theta' \delta_{h,\tau}^{n+1}(s))) (\delta_{h,\tau}^{n+1}(s))^2 d\theta' ds$$

$$I_3 = \frac{1}{2} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_0^1 (1-\theta) (F_h''(y_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s) - \theta \zeta_{n+1})) \zeta_{n+1}^2 d\theta ds$$

donde

$$\delta_{h,\tau}^{n+1}(s) = y_{h,\tau}(s) - y_{h,\tau}(t_{n+1}) \text{ para } n=0, 1, 2, \dots, N-1.$$

Teniendo en cuenta que  $y_h$  satisface la ecuación

$$\frac{d}{dt} y_h = A_h y_h + F_h(y_h) + H_h(y) \quad (12)$$

$$y_h(0) = P_h(y_0)$$

Utilizando el método de Euler, para  $n=0, 1, 2, \dots, N-1$  se tiene que

$$\frac{y_h^{n+1} - y_h^n}{\tau} = A_h^{n+1} y_h^{n+1} + F_h(y_h^{n+1}),$$

Luego, integrando la primera ecuación de (12) en el intervalo de tiempo  $[t_n, t_{n+1}]$  y utilizando las desigualdades anteriormente descritas se obtiene

$$(I - (A_h^{n+1} + F'_h(y_h^{n+1}))) \zeta_{n+1} = \zeta_n + \Psi(\zeta_{n+1}) + \sum$$

donde

$$\sum = \sum_{k=1}^6 \Psi_k^{n+1}(h, \tau)$$

$$\Psi_1^{n+1}(h, \tau) = -\int_{t_n}^{t_{n+1}} (F_h(y_h(s)) - F_h(y_{h,\tau}(s))) ds$$

$$\Psi_2^{n+1}(h, \tau) = -\int_{t_n}^{t_{n+1}} (A_h(s) - A_h^{n+1})(y_h(s)) ds$$

$$\Psi_3^{n+1}(h, \tau) = -\int_{t_n}^{t_{n+1}} (H_h(y(s)) ds$$

$$\Psi_4^{n+1}(h, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (y_h(t_{n+1}) - y_h(s)) ds - \frac{1}{\tau} \int_{t_{n-1}}^{t_n} (y_h(t_n) - y_h(s)) ds$$

$$\Psi_5^{n+1}(h, \tau) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} (F_y(y_h^{n+1}) - F_h(y_h^{n+1} + \delta_{h,\tau}^{n+1}(s))) ds$$

$$\Psi_6^{n+1}(h, \tau) = I_2$$

$$\Psi(\zeta_{n+1}) = I_3$$

Finalmente, puesto que por hipótesis el operador el operador  $H_n$  es invertible para todo  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , entonces

$$\zeta_{n+1} = H_n \zeta_n + H_n (\Psi(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau))$$

donde

$$\Theta^{n+1}(h, \tau) = \sum_{k=1}^6 \Psi_k^{n+1}(h, \tau)$$

verifica la desigualdad,

$$\|\Theta^{n+1}(h, \tau)\| \leq O(ht) + O(\tau^{\alpha+1})$$

### 5. CONCLUSIONES

Los resultados de las simulaciones computacionales presentadas muestran la influencia de los diferentes parámetros no dimensionales en el proceso de reacción-difusión. Bajos números de Damköhler y relativamente altos números de Reynolds tornan el proceso lento, pero si el número de Damköhler es suficientemente alto y el número de Zel'dovich es apropiado, al inicio, la reacción se realiza con más rapidez, dependiendo aun de las condiciones iniciales impuestas. Los resultados numéricos obtenidos si bien no es posible contrastarlos con la realidad concuerdan con los resultados obtenidos por C. Chang<sup>6</sup>,

El resultado formulado y demostrado en la sección 4 establece que la ecuación del error entre la solución exacta del problema formulado en términos de elementos finitos (10) y la solución aproximada usando elementos finitos, queda formulada como una ecuación algebraica de la forma

$$\zeta_{n+1} = H_n \zeta_n + H_n (\Psi(\zeta_{n+1}) + \Theta_{n+1}(h, \tau))$$

éste resultado permitirá hacer de uso de Shadowing finito a posteriori para estimar el error global en la solución del problema (10).

Finalmente, es necesario preciar que el resultado obtenido

sobre el error es aún débil, pues sólo es apropiado para intervalos de tiempo fijos muy pequeños, esto indica que es necesario seguir profundizando en el estudio, análisis y obtención de resultados sobre la solución del problema (5)-(9).

### 6. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Cohen D. S, Alexander R, Physica D, Vol 20; 1986, 122-141. [2] Liu J-G, Winan J-G. Simple finite element method in vorticity formulation for incompressible flows. Math. Comp. 2001; Vol 70: 570-593.
- [2] Liu J-G, Winan J-G. Simple finite element method in vorticity formulation for incompressible flows. Math. Comp. 2001; Vol 70: 570-593.
- [3] Aris R. Physica D. Vol 20; 1986, 82-94.
- [4] Riley JJ. Metcalfe RW, Orszag SA. Direct numerical simulations of chemically reacting turbulent mixing layers. Phys. Fluids, 1986; 29: 406-422.
- [5] Manley O, Marion M, Temam R. Equations of combustion in the presence of complex chemistry. Indiana University Math. J. 1993; 42: 941-967.
- [6] Moser RD, Rogers MM. Mixing transition and the cascade to small scales in a plane mixing layer. Phys. Fluids A, 1991; 3(5): 1128-1134.
- [7] Chow SN, Van ES. Shadowing of lattice maps, in Chaotic Numerics. Contemporary Mathematics. 1994; 272: 97-113.
- [8] Coomes D. Shadowing orbits of ordinary differential equations in invariant submanifolds. Trans. Amer. Math. Soc. 1997; 34 (1), 203-216.
- [9] Pilyuguin S. Shadowing in Dinamical Systems, Vol 1706. Springer-Verlag; 1999.
- [10] Hayes W. Rigorous Shadowing of Numerical Solutions of Ordinary Differential Equations by Containment [Doctoral thesis]. University of Toronto; 2001.
- [11] Larson S, Sanz-Serna JM. A shadowing result with applications to nite element approximation of reaction-difusion equations, Mathematics of Computation; 1999: 55-72.

- [12] Ostermann A, Palencia C. Shadowing for Nonautonomous Parabolic Problems with Applications to Long-Time Error Bounds, SIAM, J. Numer. Anal. 2000; 37(5):1399-1419.
- [13] Quarteroni A, Valli A, Numerical approximation of partial differential equations, Berlin: Springer-Verlag; 1994.
- [14] Pazy A. Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations, New York, Springer-Verlag; 1983.
- [15] Ludford G, editor. Reacting flows: Combustion and chemical reactors, Rodhe Island: American Mathematical Society; 1986.
- [16] Chang CH, Dahm WJA, Tryggvason G. Phys. Fluids, Vol 3, 5th ed; 1991, 1300-1311.
- [17] Weinan E, Liu JG. Vorticity Boundary Condition and Related Issues for Finite Difference Schemes. J. Comp. Phys. 1996; 124(2): 368-390.
- [18] Young DL, Yang SK, Eldho TI. Solution of the Navier-Stokes equations in velocity-vorticity form using a Eulerian-Lagrangian boundary element method. Int J. for Num. Methods in Fluids. 2000; 34(7): 627-650.
- [19] Zavaleta U, Thompson M, De Bortoli A, Existence and Uniqueness of the Solution to a system of diffusion-reaction equations, SBA. 2002; 55: 473-488.
- [20] Zavaleta U, De Bortoli A, Thompson M. Analysis and simulation for a system of chemical reaction equations with a vortex formulation. Applied Numerical Mathematics. 2003; 47: 559-573.
- [21] Zavaleta U, Thompson M, Cardoso C, De Bortoli A. Numerical Simulation for Rotating Internal Weakly Viscoelastic Flows in Rectangular Ducts. International Journal for Numerical Methods in Fluids. 2002; 39: 485-496.
- [22] Jameson A, Schmidt E, Turkel E. Numerical Solution of the Euler Equations by Finite Volume Methods Using Runge-Kutta Time-Stepping Schemes, AIAA-1259; 1981.
- [23] Temam R. Infinite dimensional dynamical systems in mechanics and physics. NY: Springer Verlag; 1988. p. 41-100.
- [24] Ma J, Wang CN, Jin W, Wu Y. Transition from spiral wave to target wave and other coherent structures in the networks of Hodgkin-Huxley neurons. App. Math. Comp. 2010; 217(8): 3844-3852.
- [25] Smoller J. Shock waves and reaction-diffusion equations, NY: Springer-Verlag; 1983.
- [26] Csercsik D, Farkas I, Szederkényi G, Hrabovszky E, Liposits Z, Hangos KM. Hodgkin-Huxley type modelling and parameter estimation of GnRH neurons Biosystems, 2010; 100, 198-207.

