



ESQUEMA DEL TIPO MODIFIED PATANKAR RUNGE–KUTTA UTILIZANDO UNA PONDERACIÓN CONVEXA DE LOS PESOS PATANKAR WEIGHT DENOMINATORS

Johnny Fabián Villavicencio Delgado¹ , Galo Javier González Hernández² 

¹Estudiante de la Maestría Académica con Trayectoria de Investigación en Matemática, Instituto de Posgrado, Universidad Técnica de Manabí, Ecuador

²Facultad de Ciencias, Universidad Central del Ecuador, Ecuador

*Autor para correspondencia: jvillavicencio3084@utm.edu.ec

Recibido: 19-08-2022/ Aceptado: 12-12-2022/ Publicación: 26-12-2022

Editor Académico: Carmen Judith Vanegas Espinoza 

RESUMEN

Este trabajo presenta una introducción a los esquemas del tipo Modified Patankar Runge-Kutta (MPRK), los esquemas numéricos MPRK resuelven sistemas de Producción Destrucción positivos y conservativos. Se presenta las principales propiedades de los esquemas MPRK y en particular se detalla el esquema de segundo orden de dos etapas denominado MPRK22, para luego introducir una modificación del esquema MPRK22 y presentar un nuevo esquema de segundo orden haciendo una combinación convexa de los pesos Patankar Weight Denominators (PWD). Los resultados son confirmados por experimentos numéricos considerando un sistema de ecuaciones diferenciales no lineal.

Palabras clave: Conservativos, Modified Patankar Runge-Kutta (MPRK), Patankar Weight Denominators (PWD), Sistemas de Producción-Destrucción.

MODIFIED PATANKAR RUNGE-KUTTA SCHEME USING CONVEX WEIGHTING OF THE PATANKAR WEIGHT DENOMINATORS

ABSTRACT

The following presents an introduction to the modified patankar rungekutta schemes, which are known as numeric schemes that solve systems of production destruction positives and conservatives. It will show the main properties of MPRK schemes, in particular it stands out the second order schemes of two stages known as MPRK22. Further, it would introduce a modification of the MPRK22 scheme, and show a new scheme of second order by completing a convex combination of the Patankar Weight Denominators (PWD).

Keywords: Conservatives, Modified Patankar RungeKutta (MPRK), Patankar Weight Denominators (PWD), Systems of production destruction.





ESQUEMA DE TIPO PATANKAR RUNGE–KUTTA MODIFICADO USANDO UNA PONDERACIÓN CONVEXA DE DENOMINADORES DE PESO PATANKAR

RESUMO

Este trabalho apresenta uma introdução aos esquemas do tipo Modified Patankar RungeKutta (MPRK), o As soluções numéricas MPRK resolvem sistemas de Destrução de Produção positivos e conservadores. Apresenta os principais propriedades dos esquemas MPRK e, em particular, o esquema de segunda ordem de dois estágios chamado MPRK22, para então introduzir uma modificação do esquema MPRK22 e apresentar um novo esquema de segunda ordem fazendo uma combinação convexa dos Denominadores de Peso Patankar (PWD). Os resultados são confirmados por experimentos numéricos considerando um sistema de equações diferenciais não lineares.

Palavras chave: Conservadores, Denominadores de Peso Patankar (PWD), Modificados Patankar Runge Kutta (MPRK), Sistemas de Produção Destrução.

Citaci3n sugerida: Villavicencio, J., Gonz1lez, G. (2022) Esquema del tipo Modified Patankar Runge–Kutta utilizando una ponderaci3n convexa de los pesos Patankar Weight Denominators. Revista Bases de la Ciencia, Vol. 7, (No. Especial), Diciembre, 122 -134. DOI: <https://doi.org/10.33936/revbasdelaciencia.v7iESPECIAL.5084>



1. INTRODUCCIÓN

Muchos problemas de ciencia e ingeniería involucran sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), que se dan en forma de los sistemas de producción-destrucción (SPD) (Ávila y cols., 2021). Algunas EDO tienen "leyes de conservación", un ejemplo típico es la conservación de la energía (Shampine, 1999).

Se considera para el presente trabajo los sistemas de producción-destrucción de la forma:

$$\frac{dy_i}{dt}(t) = P_i(\mathbf{y}(t)) - D_i(\mathbf{y}(t)), \quad i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

con valores iniciales $\mathbf{y}_i(0) = y_i^0$ para $i = 1, \dots, N$, donde $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)^T$ denota el vector solución, que depende del tiempo t . Los términos producción \mathbf{P}_i y los términos destrucción \mathbf{D}_i son no negativos, es decir $P_i, D_i \geq 0$ para $i = 1, \dots, N$. Los términos de producción y destrucción se escriben de la siguiente manera:

$$\mathbf{P}_i(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^N p_{ij}(\mathbf{y}), \quad \mathbf{D}_i(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^N d_{ij}(\mathbf{y}), \quad (2)$$

donde, $d_{ij}(\mathbf{y}) \geq 0$ es la velocidad a la que el i -ésimo componente se transforma en el j -ésimo componente, mientras que $p_{ij}(\mathbf{y}) \geq 0$ es la velocidad a la que el j -ésimo componente se transforma en el i -ésimo componente.

Cuando se resuelve numéricamente un problema modelado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) y el esquema numérico devuelve aproximaciones negativas, los resultados numéricos son incorrectos (Shampine y cols., 2005), en base a eso consideramos SPD positivos y conservativos. Los SPD tienen muchas aplicaciones en la vida real, razón por la cual usaremos las siguientes definiciones (Kopecz y Meister, 2018a):

Definición 1. El SPD (1) se llama positivo, si valores iniciales positivos $\mathbf{y}_i(0) > 0$ implican soluciones positivas $\mathbf{y}_i(t) > 0$ para $i = 1, \dots, N$, para todos los tiempos $t > 0$.

Definición 2. El SPD (2) es llamado conservativo, si para todo $i, j = 1, \dots, N$, donde $\mathbf{y} \geq 0$, se tiene $p_{ij}(\mathbf{y}) = d_{ij}(\mathbf{y})$. Además se dice totalmente conservativo si $p_{ij}(\mathbf{y}) = d_{ij}(\mathbf{y}) = 0$ se mantiene para todo $\mathbf{y} \geq 0$, y $i = 1, \dots, N$.

Si un SPD es positivo y conservativo, a menudo es esencial mantener estas propiedades numéricamente, ya que ignorar la conservación puede causar la acumulación de grandes errores a lo largo del tiempo. Se remite a los lectores a los artículos de revisión (Burchard y cols., 2003) para obtener más detalles. Las aproximaciones negativas pueden conducir a soluciones numéricas sin sentido, consulte (Shampine, 1986) para detalles. En estos casos, los esquemas numéricos que son incondicionalmente positivos y conservativos son ventajosos.

Se va a asumir de ahora en adelante que los SPD serán totalmente conservativos y positivos. La siguiente definición es para que un esquema numérico cumpla la propiedad de positividad y conservación (Kopecz y Meister, 2019).



Definición 3. Sea \mathbf{y}^n denotada como una aproximación de $\mathbf{y}(t^n)$ en el nivel de tiempo t^n . El método de un solo paso

$$\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n + \Delta t \Phi(t^n, \mathbf{y}^n, \mathbf{y}^{n+1}, \Delta t),$$

donde Φ es una función cualquiera que relaciona $t^n, \mathbf{y}^n, \mathbf{y}^{n+1}, \Delta t$.
El método es llamado incondicionalmente conservativo, si:

$$\sum_{i=1}^N (y_i^{n+1} - y_i^n) = 0$$

para todo $n \in \mathbb{N}$ y $\Delta t > 0$.

Es llamado incondicionalmente positivo si garantiza $\mathbf{y}^{n+1} > 0$ para todo $\Delta t > 0$ y $\mathbf{y}^n > 0$.

Si $p_{ij} = d_{ij} \neq 0$ para algunos $i \in 1, \dots, N$ en (2), puede ser escrita de la siguiente manera:

$$P_i(\mathbf{y}) - D_i(\mathbf{y}) = \sum_{j=1; j \neq i}^N (p_{ij}(\mathbf{y}) - d_{ij}(\mathbf{y})) + \underbrace{p_{ii}(\mathbf{y}) - d_{ii}(\mathbf{y})}_{=0} = \sum_{j=1; j \neq i}^N (p_{ij}(\mathbf{y}) - d_{ij}(\mathbf{y})).$$

Configurando $\tilde{p}_{ij} = p_{ij}, \tilde{d}_{ij} = d_{ij}$, para $i \neq j$ y $\tilde{p}_{ii} = \tilde{d}_{ii} = 0$, obtenemos:

$$P_i(\mathbf{y}) - D_i(\mathbf{y}) = \sum_{j=1}^N (\tilde{p}_{ij}(\mathbf{y}) - \tilde{d}_{ij}(\mathbf{y})).$$

Si un SPD es conservativo, la suma de sus constituyentes $\sum_{i=1}^N y_i(t)$ permanece constante en el tiempo, ya que tenemos:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N y_i = \sum_{i=1}^N (P_i(\mathbf{y}) - D_i(\mathbf{y})) = \sum_{i,j=1}^N (p_{ij}(\mathbf{y}) - d_{ij}(\mathbf{y})) = \sum_{i,j=1}^N \underbrace{(p_{ij}(\mathbf{y}) - d_{ji}(\mathbf{y}))}_{=0} = 0.$$

Existen muchos casos de interés práctico que se pueden modelar mediante problemas de valor inicial positivo, como ejemplos típicos se mencionan los problemas de reacción, difusión y advección o una mezcla de ellos, donde las incógnitas son cantidades similares a concentraciones que también son positivas por su naturaleza física. Muy a menudo, se requiere la solución numérica de estos para reflejar rigurosamente la propiedad física, por lo que se necesita investigar los métodos numéricos aplicados a estos problemas y determinar si cumplen con preservación de la propiedad de positividad (Horváth, 2005). Existen varias obras que confían en la idea de realizar combinaciones convexas, es decir: primero se prueba la propiedad de conservación de la positividad para el esquema directo de Euler explícito de primer orden y luego obtener un esquema de orden superior en base al tiempo, mediante el uso de la discretización de tiempo Runge-Kutta (RK) (Huang y Shu, 2019). El esquema Modificado Patankar-Euler y el Modificado Patankar Runge-Kutta fueron introducidos en (Burchard y cols., 2003) para garantizar la conservación y la positividad de la solución numérica de un PDS conservativo y positivo. Ambos esquemas son miembros de la clase más general de esquemas Modified

Patankar-Runge-Kutta (MPRK) (Kopecz y Meister, 2018a).

El esquema modified Patankar-Euler es definido por:

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^n) \frac{y_j^{n+1}}{y_j^n} - d_{ij}(\mathbf{y}^n) \frac{y_i^{n+1}}{y_i^n} \right), \quad i = 1, \dots, N,$$

es incondicionalmente positivo y conservativo de primer orden de exactitud. Se le entiende como una modificación del método de Euler explícito, en el que los términos de producción y destrucción se ponderan de manera que se asegure la positividad incondicional y la conservación de la solución numérica. Se observa también que se pierde la explicitud del esquema de Euler y se requiere la solución de un sistema lineal de tamaño $N \times N$ para obtener la aproximación en el siguiente nivel de tiempo; incluso cuando el SPD no es lineal, solo se debe resolver un sistema lineal.

El esquema Modified Patankar-Runge-Kutta de segundo orden esta definido por:

$$y_i^{(2)} = y_i^n + \Delta t \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^n) \frac{y_j^{(2)}}{y_j^n} - d_{ij}(\mathbf{y}^n) \frac{y_i^{(2)}}{y_i^n} \right),$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \frac{\Delta t}{2} \sum_{j=1}^N \left((p_{ij}(\mathbf{y}^n) + p_{ij}(\mathbf{y}^{(2)})) \frac{y_j^{n+1}}{y_j^{(2)}} - (d_{ij}(\mathbf{y}^n) + d_{ij}(\mathbf{y}^{(2)})) \frac{y_i^{n+1}}{y_i^{(2)}} \right),$$

para $i = 1, \dots, N$, y se ha probado que ha sido satisfactoriamente aplicado a varias aplicaciones biológicas de la vida real (Kopecz y Meister, 2018b).

2. ESQUEMA MODIFICADO PATANKAR-RUNGE-KUTTA

Un método explícito de Runge-Kutta de k etapas para la solución de una ecuación diferencial ordinaria $y'(t) = f(t, y(t))$ viene dada por:

$$y^{(k)} = y^n + \Delta t \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv} f(t^n + c_v \Delta t, \mathbf{y}^{(v)}), \quad k = 1, \dots, s,$$

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k f(t^n + c_k \Delta t, \mathbf{y}^{(k)})$$

Este método se caracteriza por sus coeficientes a_{kv}, b_k, c_k para $k = 1, \dots, s, v = 1, \dots, k - 1$, se lo puede representar mediante la tabla de Butcher.

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{c} & \mathbf{A} \\ \hline & \mathbf{b} \end{array}$$

con $\mathbf{A} = (a_{kv})_{k,v=1,\dots,s}$, $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_s)^T$ y $\mathbf{b} = (b_1, \dots, b_s)$. Aplicándola en (1), el método se expresa de la siguiente manera:

$$y_i^{(k)} = y_i^n + \Delta t \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv} \sum_{j=1}^N (p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) - d_{ij}(\mathbf{y}^{(k)})), \quad k = 1, \dots, s, \quad (3)$$



$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k \sum_{j=1}^N (p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) - d_{ij}(\mathbf{y}^{(k)})) . \quad (4)$$

La idea de los esquemas modificados Patankar-Runge-Kutta es adaptar esquemas explícitos de Runge-Kutta de tal manera que se vuelvan positivos independientemente del tamaño del paso de tiempo Δt elegido, mientras mantienen su propiedad inherente de ser conservadores. Un enfoque para lograr la positividad incondicional es el llamado truco de Patankar, que consiste en modificar (4) agregando una ponderación de los términos de destrucción como (Kocepcz y Meister, 2018a):

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) - d_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) \frac{y_i^{n+1}}{\sigma_i} \right) ,$$

de donde se obtiene

$$y_i^{n+1} = \frac{y_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k \sum_{j=1}^N p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)})}{1 + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k \sum_{j=1}^N d_{ij}(\mathbf{y}^{(k)})/\sigma_i} .$$

Por lo tanto, si y_i^n , los pesos b_k para $k = 1, \dots, s$ y σ_i son positivos, así es y_i^{n+1} . La idea central del truco de Patankar es multiplicar los términos de destrucción con pesos que comprenden y_i^{n+1} como un factor en sí mismos.

Ponderando solo los términos de destrucción resultará en un esquema no conservador; por lo tanto, los términos de producción también deben ponderarse. Como tenemos $d_{ij}(\mathbf{y}) = p_{ji}(\mathbf{y})$, el peso adecuado para $p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)})$ es y_j^{n+1}/σ_j . (Kocepcz y Meister, 2018a)

De lo anteriormente mencionado en (Kocepcz y Meister, 2018a) presentan la siguiente definición.

Definición 4. Dada una matriz de Runge-Kutta no negativa $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1,\dots,s}$, ponderaciones no negativas b_1, \dots, b_s y $\delta \in \{0, 1\}$, el esquema

$$y_i^{(k)} = y_i^n + \Delta t \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv} \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^{(v)}) (1 - \delta) + p_{ij}(\mathbf{y}^{(v)}) \frac{y_j^{(k)}}{\pi_j^{(k)}} \delta - d_{ij}(\mathbf{y}^{(v)}) \frac{y_i^{(k)}}{\pi_i^{(k)}} \right) , \quad (5)$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{k=1}^s b_k \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) \frac{y_j^{n+1}}{\sigma_j} - d_{ij}(\mathbf{y}^{(k)}) \frac{y_i^{n+1}}{\sigma_i} \right) \quad (6)$$

y $\sigma_i, \pi_i^{(k)}$ son funciones reales para $k = 1, \dots, s$ y $i = 1, \dots, N$, se llama esquema modificado Patankar-Runge-Kutta (MPRK) si:

1. $\pi_i^{(k)}$ y σ_i son incondicionalmente positivos para $k = 1, \dots, s$ y $i = 1, \dots, N$.
2. $\pi_i^{(k)}$ es independiente de $y_i^{(k)}$ y σ_i es independiente de y_i^{n+1} para $k = 1, \dots, s$ y $i = 1, \dots, N$.

Las ponderaciones $1/\sigma_i$ y $1/\pi_i^{(k)}$ se denotan **PWD** por sus siglas en inglés (Patankar Weight Denominators).

Las siguientes observaciones comentan sobre los parámetros libres en la definición de esquemas MPRK. El parámetro $\delta \in \{0, 1\}$, si en (5) $\delta = 1$, el esquema es conservativo y si $\delta = 0$, el esquema no es conservativo. En este trabajo consideramos $\delta = 1$.

Se necesita que σ sea independiente de y_i^{n+1} para asegurar la positividad y la linealidad implícita del esquema. Si se elige $\sigma_i = y_i^{n+1}$, terminamos con el esquema original de Runge-Kutta, que no es incondicionalmente positivo. Si σ_i fuera una función no lineal de y_i^{n+1} , tendríamos que resolver un sistema no lineal en lugar de uno lineal para calcular y_i^{n+1} ; por la misma razón, requerimos que $\pi_i^{(k)}$ sea independiente de $y_i^{(k)}$. Se puede tener la impresión que σ_i y $\pi_i^{(k)}$ permanecen constantes durante la integración de tiempo. Como se puede observar, se eligen como funciones de los valores de etapa en todos los esquemas siguientes. Por lo tanto, cambiarán de un paso de tiempo a otro. Pero en aras de la simplicidad, esto no se reflejará en la notación. La Definición (4) se formula para parámetros de Runge-Kutta no negativos; pero también se pueden diseñar esquemas MPRK con parámetros Runge-Kutta negativos. En este caso, se debe intercambiar la ponderación de los términos de producción y destrucción que se multiplican por la ponderación negativa. Este procedimiento asegurará la positividad incondicional del esquema, pero puede tener un impacto en los requisitos necesarios para obtener un cierto orden de precisión. Para evitar múltiples distinciones de casos, exigimos parámetros positivos de Runge-Kutta. Los esquemas MPRK originales, así como los esquemas MPRK novedosos, utilizan y_i^n como PWD en la primera etapa del esquema; de esta manera se explica la restricción a valores iniciales positivos en la Definición (1), ya que los valores iniciales cero llevarían a divisiones entre ceros.

En muchos casos los términos de destrucción son de la forma $D_i(\mathbf{y}) = F_i(\mathbf{y})y_i$ con funciones continuas F_i . Esto permite cancelar las PWD en el esquema MPRK y se pueden manejar valores iniciales cero.

Debido a la introducción de los pesos de Patankar, es necesario resolver sistemas lineales de tamaño $N \times N$ para obtener los valores de etapa y la aproximación en el siguiente nivel de tiempo; considerando $p_{ii} = d_{ii} = 0$ para $i = 1, \dots, N$, el esquema (5) se puede escribir en notación matriz - vector:

$$\mathbf{M}^{(k)}\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{y}^n + (1 - \delta)\Delta t \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv}\mathbf{P}(\mathbf{y}^{(v)}) \quad k = 1, \dots, s, \tag{7}$$

$$\mathbf{M}\mathbf{y}^{n+1} = \mathbf{y}^n, \tag{8}$$

Donde $\mathbf{P}(\mathbf{y}^n) = (P_1(\mathbf{y}^n), \dots, P_N(\mathbf{y}^n))^T \mathbf{y}$

$$m_{ii}^{(k)} = 1 + \Delta t \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv} \sum_{j=1}^N d_{ij}(\mathbf{y}^{(v)})/\pi_i^{(k)} > 0, \quad i = 1, \dots, N, \tag{9}$$

$$m_{ij}^{(k)} = -\Delta t \delta \sum_{v=1}^{k-1} a_{kv} p_{ij}(\mathbf{y}^{(v)})/\pi_j^{(k)} \leq 0, \quad i, j = 1, \dots, N, i \neq j$$

3. ESQUEMA MODIFICADO DE PATANKAR RUNGE-KUTTA DE SEGUNDO ORDEN

El esquema MPRK de segundo orden introducido en (Burchard y cols., 2003) es una modificación del método de Heun. Un esquema MPRK con dos etapas se representa de la siguiente manera:

$$y_i^{(1)} = y_i^n, \tag{10}$$



$$y_i^{(2)} = y_i^n + a_{21}\Delta t \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(\mathbf{y}^{(1)})(1 - \alpha) + p_{ij}(\mathbf{y}^{(1)})\frac{y_j^{(2)}}{\pi_j}\alpha - d_{ij}(\mathbf{y}^{(1)})\frac{y_i^{(2)}}{\pi_i} \right), \quad (11)$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{j=1}^N \left((b_1 p_{ij}(\mathbf{y}^{(1)}) + b_2 p_{ij}(\mathbf{y}^{(2)}))\frac{y_j^{n+1}}{\sigma_j} - (b_1 d_{ij}(\mathbf{y}^{(1)}) + b_2 d_{ij}(\mathbf{y}^{(2)}))\frac{y_i^{n+1}}{\sigma_i} \right), \quad (12)$$

El siguiente teorema presenta las condiciones necesarias y suficientes para la precisión de segundo orden de los esquemas MPRK de dos etapas, ver (Kocepcz y Meister, 2018a).

Dados los parámetros no negativos de un esquema explícito de Runge-Kutta de segundo orden, esto es:

$$b_1 + b_2 = 1, \quad a_{21}b_2 = \frac{1}{2},$$

el esquema MPRK (12) es de segundo orden, si y solo si cumple las siguientes condiciones:

$$\pi_i = y_i^n + \mathcal{O}(\Delta t), \quad i = 1, \dots, N,$$

y

$$\sigma_i = y_i^n + \Delta t(P_i^n - D_i^n) + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad i = 1, \dots, N.$$

Para visualizar la convergencia del esquema, utilizamos los errores de truncamiento local e identificamos y_i^n a la solución aproximada de $y_i(t^n)$ para $i = 1, \dots, N$. En vista que estamos tratando con PDS positivos asumimos que $y_i^n > 0$ para $i = 1, \dots, N$,

Asumiendo que $\alpha \neq 0$, la tabla de Butcher proporciona un esquema general explícito de Runge-Kutta de dos etapas de segundo orden.

0		
α		α
		$1 - \frac{1}{2\alpha} \quad \frac{1}{2\alpha}$

Para hacer del esquema (10,11,12) un esquema MPRK positivo, se debe asegurar la no negatividad de los parámetros de Runge-Kutta $a_{21} = \alpha$, $b_1 = 1 - 1/(2\alpha)$, y $b_2 = 1/(2\alpha)$; por lo tanto, tenemos que restringir α a $\alpha \geq 1/2$. Ejemplos destacados son el método de Heun ($\alpha = 1$), el método de Ralston ($\alpha = 2/3$) y el método del punto medio ($\alpha = 1/2$).

Para $\alpha \geq 1/2$, se introduce una familia de un parámetro de esquemas MPRK de dos etapas de segundo orden.

$$y_i^{(1)} = y_i^n, \quad (13)$$

$$y_i^{(2)} = y_i^n + \alpha\Delta t \sum_{j=1}^N \left(p_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)})\frac{y_j^{(2)}}{y_j^{(1)}} - d_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)})\frac{y_i^{(2)}}{y_i^{(1)}} \right), \quad (14)$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{j=1}^N \left[\left(\left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right)p_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)}) + \frac{1}{2\alpha}p_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(2)}) \right) \frac{y_j^{n+1}}{(y_j^{(2)})^{\frac{1}{\alpha}}(y_j^n)^{1-\frac{1}{\alpha}}} - \left(\left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right)d_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)}) + \frac{1}{2\alpha}d_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(2)}) \right) \frac{y_i^{n+1}}{(y_i^{(2)})^{\frac{1}{\alpha}}(y_i^n)^{1-\frac{1}{\alpha}}} \right] \quad (15)$$

para $i = 1, \dots, N$, esta familia de esquemas son denotados por MPRK22(α).

4. MÉTODO Y DESARROLLO

Siguiendo la sugerencia de Kopecz y Meister (Kopecz y Meister, 2018a) de hacer una combinación convexa de los PWD, encontramos un nuevo esquema que depende de dos parámetros, este esquema podría tener mas variedad de posibilidades para mejorar la aproximación numérica de los modelos de prueba. Para comprobar los resultados numéricos del nuevo esquema, se utilizó el mismo test no lineal que plantean los autores anteriormente mencionados.

4.1. Nuevo Esquema MPRKW22(α, ω) de segundo orden

El nuevo esquema de dos parámetros α y ω esta definido por

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \sum_{j=1}^N \left[\left(\left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right) p_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)}) + \frac{1}{2\alpha} p_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(2)}) \right) \frac{y_j^{n+1}}{\omega y_j^n \left(\frac{y_j^{(2)}}{y_j^{(n)}}\right)^{s_1} + (1-\omega) y_j^n \left(\frac{y_j^{(2)}}{y_j^{(n)}}\right)^{s_2}} - \left(\left(1 - \frac{1}{2\alpha}\right) d_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(1)}) + \frac{1}{2\alpha} d_{ij}(t^n, \mathbf{y}^{(2)}) \right) \frac{y_i^{n+1}}{\omega y_i^n \left(\frac{y_i^{(2)}}{y_i^{(n)}}\right)^{s_1} + (1-\omega) y_i^n \left(\frac{y_i^{(2)}}{y_i^{(n)}}\right)^{s_2}} \right]$$

con $0 \leq \omega \leq 1$ y $s_2 = \frac{\alpha\omega s_1}{\alpha(\omega-1)}$, donde $s_1 \geq 0$.

Este esquema mantiene las propiedades de los esquemas MPRK y las dos primeras etapas se calculan con las mismas formulas del esquema MPRK.

Dado que el nuevo esquema propuesto está basado en el MPRK, el cual es un esquema de segundo orden de exactitud y debido a que los PWD están dados por una combinación convexa, las propiedades del orden de exactitud se mantienen para el nuevo esquema propuesto, es decir el MPRKW22 es de segundo orden de exactitud. Para una revisión más detallada del orden ver (Kopecz y Meister, 2018a).

4.2. Test no Lineal

A continuación se presenta un ejemplo de test no lineal, este sistema representa un problema bio-geoquímico para la descripción de un modelo de un florecimiento de algas, que transforma nutrientes (y_1) vía fitoplancton (y_2) en detrito (y_3). (Burchard y cols., 2003)

$$y_1'(t) = -\frac{y_1(t)y_2(t)}{y_1(t)+1}, \quad y_2'(t) = \frac{y_1(t)y_2(t)}{y_1(t)+1} - 0.3y_2(t), \quad y_3'(t) = 0.3y_2(t)$$

con

$$p_{21}(t, \mathbf{y}(t)) = d_{12}(t, \mathbf{y}(t)) = \frac{y_1(t)y_2(t)}{y_1(t)+1}, \quad p_{32}(t, \mathbf{y}(t)) = d_{23}(t, \mathbf{y}(t)) = 0.3y_2(t).$$



5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las simulaciones numéricas desarrolladas en el programa Matlab, se usaron las condiciones iniciales $y_1(0) = 9.98$, $y_2(0) = 0.01$ y $y_3(0) = 0.01$. La solución es aproximada sobre el intervalo de tiempo $[0, 30]$.

Se utilizó valores para $\omega = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ y $s_1 = \frac{1}{2}$ con $\alpha = 1/2$ fijo.

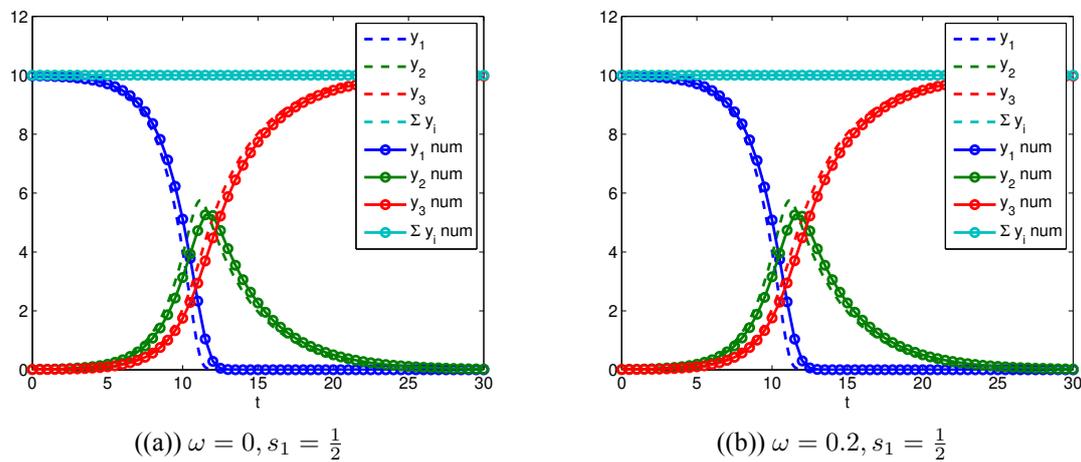


Figura 1. Valores para $\omega \in (0, 0.2)$

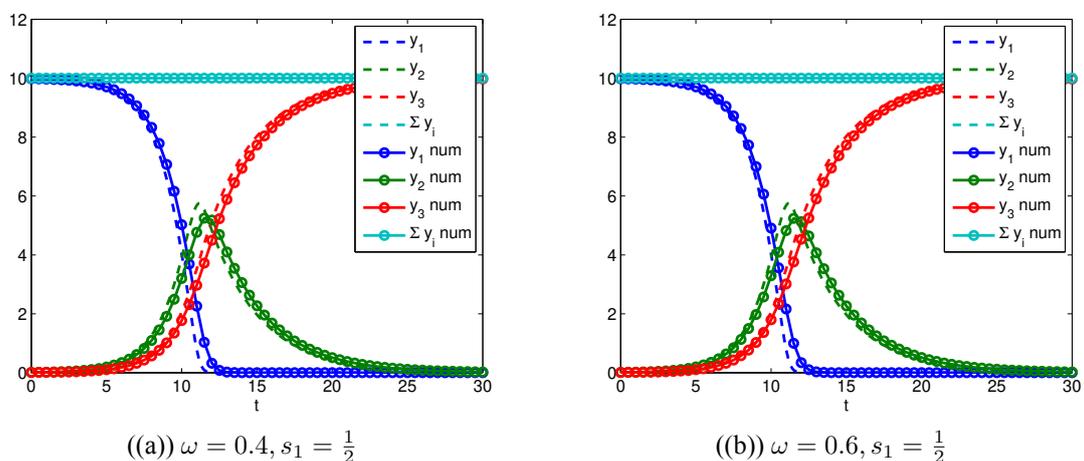


Figura 2. Valores para $\omega \in (0.4, 0.6)$

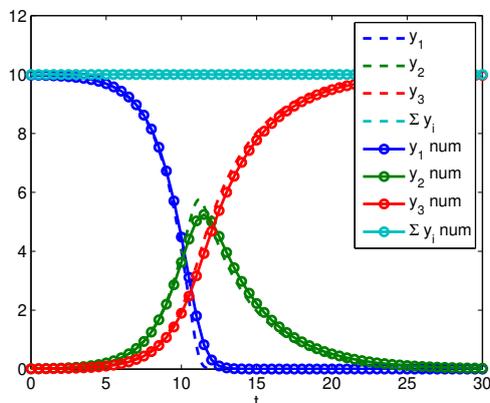


Figura 3. $\omega = 0.8, s_1 = \frac{1}{2}$

Como podemos observar en la gráficas anteriores, el método numérico aplicado cumple las propiedades de ser conservativo y positivo; además los resultados obtenidos para diferentes valores de ω se comprueba que el esquema es de segundo orden, tal como se muestra en la siguiente gráfica:

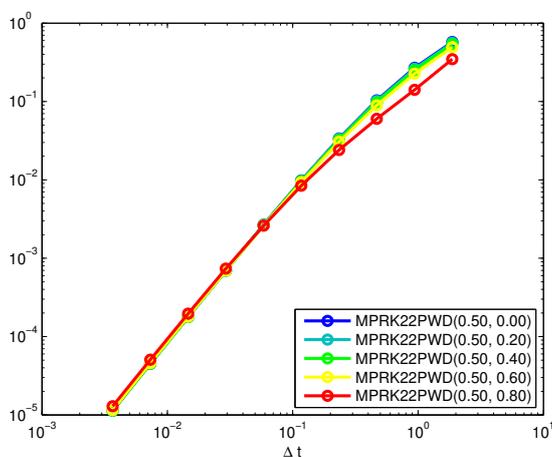


Figura 4. Error del esquema numérico para diferentes valores de ω , se usa escala logarítmica

6. CONCLUSIONES

En este artículo se pudo comprobar que el esquema MPRKW22 es de segundo orden de exactitud (ver Figura 4), para varios valores de $\omega = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ se obtiene menor error de truncamiento. La Figura 4 muestra que para $\Delta t = 1$ el esquema con menor error de truncamiento corresponde a $\omega = 0.8$ y para $\Delta t = 10^{-2}$ el esquema con menor error de truncamiento corresponde a $\omega = 0.6$. El esquema implementado es incondicionalmente positivo y conservativo como se aprecia en los gráficos anteriores resuelve satisfactoriamente el modelo test no lineal. El valor de ω nos permite encontrar diferentes opciones en los resultados numéricos, como tópico de



investigación futura es encontrar cual es la combinación óptima de los parámetros que produzcan el menor error de truncamiento.

RECOMENDACIÓN: Un tópico de investigación futura, es determinar el valor óptimo de ω que minimice el error de truncamiento y que permita obtener la mejor aproximación de la solución exacta al modelo no lineal.

7. DECLARACIÓN DE CONFLICTO DE INTERÉS DE LOS AUTORES

Los autores declaran no tener conflicto de intereses.

8. REFERENCIAS

- Burchard, H., Deleersnijder, E., y Meister, A. (2003). A high-order conservative patankar-type discretisation for stiff systems of production–destruction equations. *Applied Numerical Mathematics*, 47(1), 1-30. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927403001016> doi: [https://doi.org/10.1016/S0168-9274\(03\)00101-6](https://doi.org/10.1016/S0168-9274(03)00101-6)
- Horváth, Z. (2005). On the positivity step size threshold of runge–kutta methods. *Applied Numerical Mathematics*, 53(2), 341-356. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016892740400159X> (Tenth Seminar on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations (NUMDIFF-10)) doi: <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2004.08.026>
- Huang, J., y Shu, C.-W. (2019). Positivity-preserving time discretizations for production–destruction equations with applications to non-equilibrium flows. *Journal of Scientific Computing*, 78(3), 1811–1839.
- Kopecz, S., y Meister, A. (2018a). On order conditions for modified patankar–runge–kutta schemes. *Applied Numerical Mathematics*, 123, 159-179. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168927417301861> doi: <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2017.09.004>
- Kopecz, S., y Meister, A. (2018b). Unconditional positive and conservative third order modified patankar runge kutta discretizations of production destruction systems. *BIT Num. Math.*, 58(4), 694–728.
- Kopecz, S., y Meister, A. (2019). On the existence of three-stage third-order modified patankar–runge–kutta schemes. *Numerical Algorithms*, 81(4), 1473–1484.
- Shampine, L. (1986). Conservation laws and the numerical solution of odes. *Computers Mathematics with Applications*, 12(5, Part 2), 1287-1296. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0898122186902531> doi: [https://doi.org/10.1016/0898-1221\(86\)90253-1](https://doi.org/10.1016/0898-1221(86)90253-1)

Shampine, L. (1999). Conservation laws and the numerical solution of odes, ii. *Computers & Mathematics with Applications*, 38(2), 61–72.

Shampine, L., Thompson, S., Kierzenka, J., y Byrne, G. (2005). Non-negative solutions of odes. *Applied Mathematics and Computation*, 170(1), 556-569. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300304009683> doi: <https://doi.org/10.1016/j.amc.2004.12.011>

Ávila, A. I., González, G. J., Kopecz, S., y Meister, A. (2021). Extension of modified patankar–runge–kutta schemes to nonautonomous production–destruction systems based on oliver’s approach. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 389, 113350. Descargado de <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042720306415> doi: <https://doi.org/10.1016/j.cam.2020.113350>

CONTRIBUCIÓN DE AUTORES

Autor	Contribución
Johnny Fabián Villavicencio Delgado	Metodología, revisión y búsqueda bibliográfica.
Galo Javier González Hernández	Concepción y redacción.