

ESTUDIO DE ESQUEMAS PARA LA INTEGRACION TEMPORAL EN PROBLEMAS TRANSITORIOS DE DIFUSIÓN-REACCION

Rodrigo Módena, Marcelo Vénere, Fernando Quintana
Mecánica Computacional
Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche, C.N.E.A.
Centro Atómico, 8400 Bariloche, Argentina

RESUMEN

En el presente trabajo se resumen los estudios realizados en la búsqueda de un esquema adecuado para la integración temporal en problemas difusión-reacción transitorios con coeficientes no-lineales. Para la resolución del problema espacial se utilizó el método de elementos finitos con elementos triangulares lineales.

En primer lugar se describen los esquemas analizados y se muestra con ejemplos sencillos la convergencia de cada uno. Se buscaron esquemas que fueran incondicionalmente estables de forma de permitir fuertes densificaciones en la discretización espacial. Se incluye una evaluación del costo computacional de los mismos para un dado error aceptable y finalmente se muestra una implementación que permite controlar automáticamente el error mediante el ajuste del paso de tiempo.

ABSTRACT

In the present work the behaviour of various schemes for the temporal integration in non-linear transient diffusion-reaction problems was analyzed. The finite element method with linear triangles was used to solve the spatial problem.

The analyzed schemes were first described and their convergence was shown with examples of known solution. Unconditionally stable methods were searched to allow strong densifications of the spatial discretization. The computational cost referred to an acceptable error was measured. Finally, the automatic control of the error was performed with a time step adjustment.

INTRODUCCION

Las ecuaciones de difusión-reacción para problemas transitorios pueden escribirse como:

$$c \frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla u) + s u = f \quad \text{en } \Omega \quad (1)$$

donde $c > 0$ representa una densidad volumétrica, $k > 0$ es el coeficiente de difusión, $s \geq 0$ es el coeficiente de reacción y f es el término fuente. Para que el problema quede correctamente planteado se deben especificar condiciones de contorno sobre toda la frontera Γ del dominio Ω . Las mismas se expresan como:

$$\begin{aligned} u &= \delta \quad \text{en } \Gamma_1 \\ k \frac{\partial u}{\partial n} &= \gamma \quad \text{en } \Gamma_2 \end{aligned} \quad (2)$$

con $\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma$ y $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$

La primera es una condición de tipo Dirichlet y la segunda de tipo Neumann.

La discretización de la parte espacial de este problema se realizó utilizando el método de elementos finitos. La formulación débil de (1) puede escribirse como [5, 6, 7]:

$$\left(c \frac{\partial u}{\partial t}, v \right) + a(u, v) - L(v) = 0 \quad \forall v \in W \quad (3)$$

donde el espacio $W = H_0^1(\Omega)$ y se ha empleado la siguiente notación:

$$\begin{aligned} \left(c \frac{\partial u}{\partial t}, v \right) &= \int_{\Omega} c \frac{\partial u}{\partial t} v \, d\Omega \\ a(u, v) &= \int_{\Omega} (k \nabla u \nabla v + s u v) \, d\Omega \\ L(v) &= \int_{\Omega} f v \, d\Omega + \int_{\Gamma_2} \gamma v \, d\Gamma \end{aligned} \quad (4)$$

La discretización de (3) escribiendo las funciones v y u en la base de elementos finitos conduce al siguiente sistema de ecuaciones:

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{u}} + \mathbf{A} \mathbf{u} = \mathbf{B} \quad (5)$$

siendo

$$\begin{aligned} M_{ji} &= (c \phi_i, \phi_j) \\ A_{ji} &= a(\phi_i, \phi_j) \\ B_j &= L(\phi_j) \end{aligned} \quad (6)$$

donde \mathbf{u} es un vector formado por los valores nodales de la función escalar u en la base de elementos finitos (ϕ_i) . \mathbf{M} , \mathbf{A} y \mathbf{B} son respectivamente la matrices de masa y rigidez y el vector término independiente.

Para la discretización de la variable temporal, se emplearon varios métodos los cuales se describirán en detalle en la próxima sección. Todos ellos requerirán la solución de un sistema lineal de ecuaciones en cada paso de tiempo. Para resolver el mismo puede utilizarse métodos *iterativos* o *directos*. En este caso se prefirió el uso de un método iterativo por dos razones:

- Dado que este trabajo se piensa extender a problemas tridimensionales, donde el número de incógnitas puede ser muy elevado (superior a 10^5), los métodos directos resultan inapropiados debido a su excesivo requerimiento de memoria.
- Como se trata de resolver un problema transitorio, la solución de cada paso servirá como semilla para el paso siguiente, con lo cual los métodos iterativos podrán converger en muy pocas iteraciones. Los métodos directos no utilizan esta ventaja.

Entre los métodos iterativos se disponía de las siguientes opciones:

- *MCG* (gradientes conjugados modificados)
- *BGC* (gradientes biconjugados)
- *CGS* (gradientes conjugados cuadrados)
- *GMRES* (método del residuo mínimo generalizado)

Se optó por el *CGS* debido a su probada performance [2] y su bajo costo computacional (mayor velocidad y con un menor requerimiento de memoria). Se realizó además un preconditionamiento de la matriz de rigidez para la cual se utilizó una descomposición LU incompleta de dicha matriz.

En este trabajo se considera además que los coeficientes intervinientes pueden tener una dependencia suave con la solución con lo cual el problema resulta no-lineal. Para resolver estas no-linealidades se utiliza el método de *Picard* que consiste en realizar iteraciones sucesivas dentro de cada paso de tiempo, recalculando los coeficientes.

DISCRETIZACIÓN TEMPORAL

Dentro de la amplia gama de posibilidades de métodos para resolver problemas de valores iniciales [4], se optó por los de *paso simple*, ya que al requerir la solución en solo un paso anterior, simplifica la implementación y el control del tamaño del paso temporal, tema que se abordará más adelante.

Se describen a continuación los métodos estudiados:

Método ponderado

También conocido como método alfa, se basa en aproximar la derivada primera en forma ponderada (adelantada, centrada o atrasada). Partiendo de la ec. 5 se obtiene:

$$\frac{\mathbf{M} \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{M} \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \alpha \mathbf{A}^{n+1} \mathbf{u}^{n+1} + (1-\alpha) \mathbf{A}^n \mathbf{u}^n = \alpha \mathbf{B}^{n+1} + (1-\alpha) \mathbf{B}^n \quad (7)$$

donde el supraíndice indica a qué tiempo se debe evaluar pensando que se trabaja en el intervalo $[t_n, t_{n+1}]$. Las matrices tienen esta dependencia a través de los coeficientes de la ecuación, los cuales pueden ser no-lineales o función del tiempo.

Los casos particulares de este método que se analizaron son los clásicos, según la elección de α :

- $\alpha=0$: Euler
- $\alpha=1$: Fuertemente implícito
- $\alpha=0.5$: Crank Nicholson

Método de Runge Kutta

Se estudió el comportamiento del método de Runge-Kutta orden 2, que para el problema que nos interesa se escribe como:

$$\begin{aligned} \text{paso 1: } & \frac{\mathbf{M} \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{M} \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{A}^n \mathbf{u}^n = \mathbf{B}^n \quad \Rightarrow \quad \mathbf{u}^{n+1} = \text{estimación de } \mathbf{u}^{n+1} \\ \text{paso 2: } & \frac{\mathbf{M} \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{M} \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \frac{\mathbf{A}^n \mathbf{u}^n + \mathbf{A}^{n+1} \mathbf{u}^{n+1}}{2} = \frac{\mathbf{B}^n + \mathbf{B}^{n+1}}{2} \end{aligned} \quad (8)$$

Extrapolación de Richardson

Conocido el orden de convergencia p de un dado esquema, el método de extrapolación de Richardson permite obtener un nuevo esquema de orden $p+1$ realizando dos cálculos para un mismo tiempo T con dos pasos Δt diferentes.

La nueva solución estará dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t_{n+1}) &= \frac{\mathbf{u}_{q_h}(t_{n+1}) - q^p \mathbf{u}_h(t_{n+1})}{1 - q^p} + O(\Delta t)^{p+1} \\ \Delta t &= t_{n+1} - t_n \\ q &= \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (10)$$

donde \mathbf{u}_h es la solución hallada usando el paso Δt , \mathbf{u}_{q_h} resulta de haber dividido el intervalo en r pasos iguales. Se destaca que todo lo dicho es válido sin importar cuál es el método de partida, sólo se necesita conocer el orden de convergencia p . En este trabajo se realizó la extrapolación de Richardson sobre el método de Crank-Nicholson. Dado que este último es de orden dos, el método finalmente obtenido es de orden tres.

Normalmente esta extrapolación se realiza utilizando un paso Δt y dos pasos mitad $\Delta t/2$, ya que en esta forma se minimiza el número de cálculos. Lamentablemente como se mostrará más adelante, en el caso de Crank-Nicholson esto conduce a un esquema condicionalmente estable. Esto no ocurre si se utiliza un paso Δt y tres pasos $\Delta t/3$.

ESTUDIO DE CONVERGENCIA

La caracterización de un dado método numérico contempla el análisis de estabilidad, el orden de convergencia y el costo computacional. Se incluyen a continuación los resultados según esta secuencia.

Estabilidad de los esquemas

Los rangos de estabilidad de los diferentes esquemas se determinan en general analizando el factor de amplificación del método. Este estudio arroja como resultado una condición sobre el

paso de tiempo que si se respeta hace que el esquema sea estable. Como se parte de métodos consistentes, el rango de estabilidad también resulta ser rango de convergencia.

Los rangos de estabilidad de los diferentes esquemas se analizan con el método de von Neumann [1, 3], obteniéndose la siguiente clasificación:

Esquema	Estabilidad	Convergencia
Fuertemente implícito	Incondicional	Δt
Crank-Nicholson		Δt^2
Extrapolación de Richardson ($r = 3$)		Δt^3
Euler	Condicional	Δt
Runge-Kutta segundo orden		Δt^2
Extrapolación de Richardson ($r = 2$)		Δt^3

Tabla 1: Estabilidad y orden de convergencia de los esquemas analizados

Como ya se mencionó, es interesante destacar que aunque Crank-Nicholson es incondicionalmente estable, la extrapolación de Richardson sobre el mismo que resulta usando sólo dos medios pasos ($r = 2$) es condicionalmente estable. La condición desaparece si se toman tres pasos ($r = 3$).

Esta clasificación se comprobó mediante un experimento numérico analizando un problema consistente en un recinto cuadrado $[0,1] \times [0,1]$ con coeficientes $k=c=1.0$ y $s=f=0.0$; con condiciones de Dirichlet nula en un lado y unitaria en el opuesto y condiciones de Neumann nulas en los otros dos. La condición inicial es $u=0.0$ en todo el recinto. Se trata en realidad de un problema unidimensional cuya solución en función del tiempo se muestra en la figura 1.

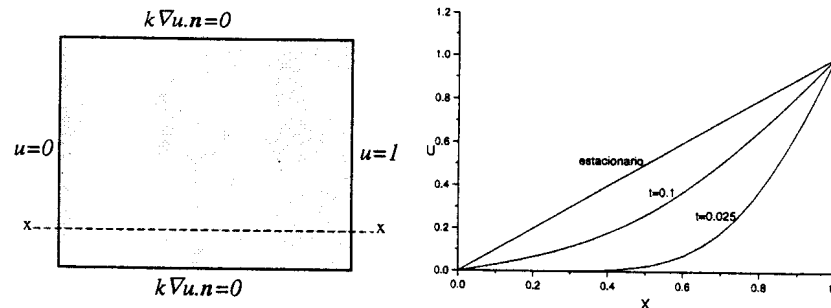


Figura 1: Problema para el estudio de estabilidad

Para el cálculo se utilizó una malla uniforme con elementos triangulares lineales con un tamaño especificado de $h=0.02$. La misma tiene 2968 nodos y 5734 elementos.

La estabilidad de cada esquema se pudo comprobar resolviendo el problema con diferentes pasos Δt y midiendo el error en la solución para un dado tiempo fijo $T=0.1$. En la figura que sigue a continuación se muestra los resultados obtenidos para los casos de extrapolación de

Richardson con $r=2$ y $r=3$. Como es de esperar, el caso de $r=2$ presenta inestabilidades para Δt mayores que 10^{-5} , mientras que para $r=3$ el método es incondicionalmente estable. Obsérvese que para Δt muy grandes ($\Delta t=0.05$), incluso este último esquema presenta algunas oscilaciones, pero en ningún momento llegan a inestabilizar la solución. Las mismas seguramente están relacionadas con la falta de monotonicidad de los esquemas de orden mayor que uno (teorema de Godunov).

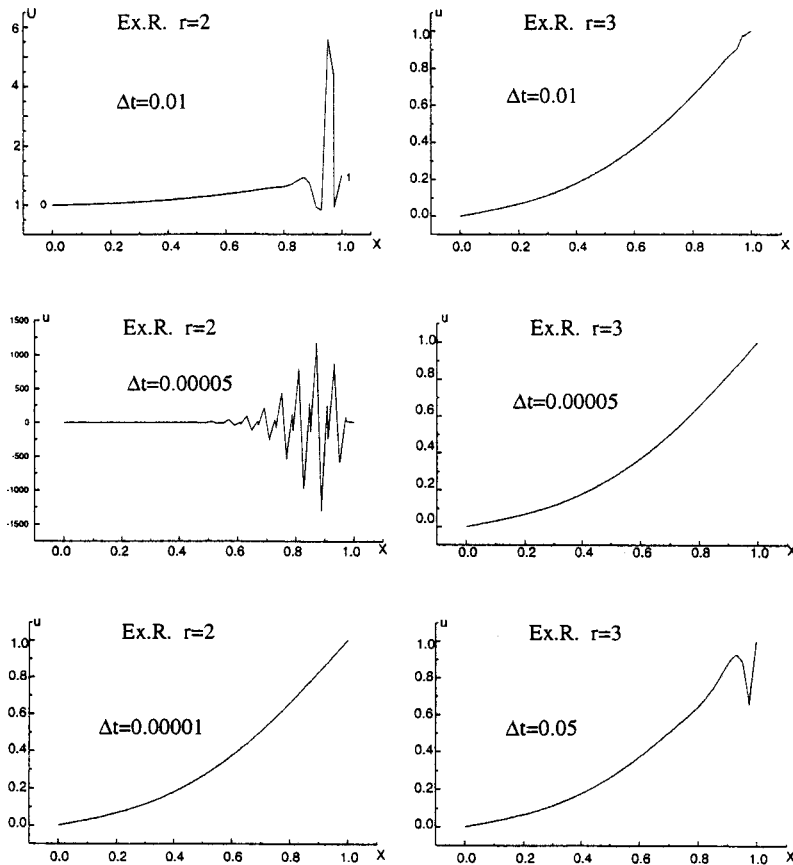


Figura 2: Estabilidad del método de Extrapolación de Richardson sobre el Crank-Nicholson

Orden de convergencia

Para la verificación del orden de convergencia se tomó también un problema simple sobre el mismo recinto de la figura 1, pero con fuente ($f=1.0$) y condición de Dirichlet nula en los dos bordes verticales. La solución a este problema se muestra en la figura 3.

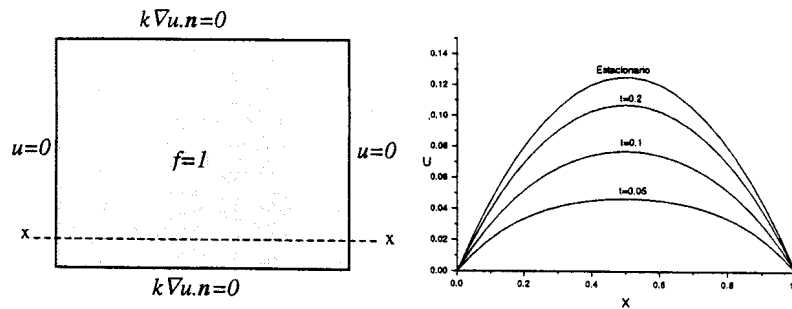


Figura 3: Problema para el estudio de la convergencia

En la figura 4 se observan los errores obtenidos por los diferentes métodos en el centro del dominio a un tiempo de 0.2. En dicha figura no se muestran los esquemas condicionalmente estables (Euler, Runge-Kutta y Extrapolación de Richardson con $r=2$) debido a que la condición de estabilidad impone un paso de tiempo muy pequeño frente a los otros métodos. Por ejemplo para el método de Euler, este límite requiere un paso Δt máximo de $2 \cdot 10^{-4}$, es decir fuera de la zona de interés de la figura 4.

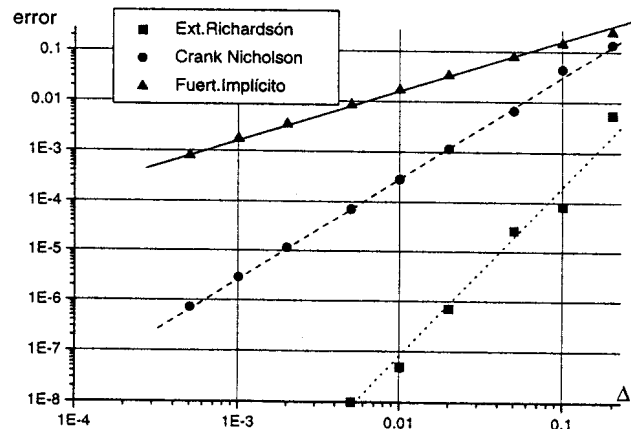


Figura 4: Orden de convergencia para los tres esquemas incondicionalmente estables analizados

Se destaca que si se desea obtener un error más pequeño en el cálculo por elementos finitos, es necesario refinar la malla y dado que la condición de estabilidad es función del tamaño mínimo de elemento, los métodos condicionalmente estables requerirán un paso de tiempo aún menor. Ciertamente con este paso se cometerá un error muy pequeño en la integración temporal, pero a un costo computacional demasiado grande para el error requerido.

Los órdenes de convergencia de los distintos esquemas se resumen en la tabla 1 antes mostrada.

Costo computacional

Resulta interesante comparar el costo computacional de los diferentes métodos, para obtener un dado error máximo aceptable. La mayor parte del tiempo de máquina se concentra en la solución del sistema de ecuaciones, cálculo que es el mismo en todos los esquemas. Por ello mediremos el costo computacional como el número de pasos temporales multiplicado por el número de resoluciones del sistema de ecuaciones por paso de tiempo.

De la figura 4 podemos comparar los métodos según este criterio. Sea por ejemplo un error admisible de 10^{-4} . Vemos que los incrementos de tiempo (Δt) necesarios son $7 \cdot 10^{-5}$, $5 \cdot 10^{-3}$ y $7 \cdot 10^{-2}$, para los métodos Fuertemente Implícito, Crank Nicholson y Extrapolación de Richardson (con $r=3$), respectivamente, lo cual se resume en la tabla 2. El último esquema requiere cuatro evaluaciones por cada paso de tiempo en lugar de una como los otros dos. A pesar de ello la Extrapolación de Richardson tiene un costo considerablemente inferior.

Esquema	Fuertemente Implícito	Crank Nicholson	Richardson (con $r=3$)
Paso de tiempo	$7 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$7 \cdot 10^{-2}$
Núm. de evaluaciones por paso	1	1	4
Costo (núm. total de evaluaciones)	2857	40	11

Tabla 2.- Costo computacional

CONTROL DEL ERROR

En base al análisis realizado en los puntos anteriores la mejor opción es utilizar un esquema CN con extrapolación de Richardson y $r=3$. Este método además permite calcular fácilmente una estimación del error que se comete en la integración temporal en cada paso, como diferencia entre la solución calculada con CN y la extrapolada.

Con esta información es posible modificar el paso temporal de forma de mantener el error estimado dentro de un rango dado: Dada una cota para el error máximo aceptable en un paso, si la misma es superada, se recalcula con un paso Δt menor. Por el contrario, dada otra cota para el error mínimo a partir del cual no interesa aumentar la precisión, si el error estimado resulta menor, se permite utilizar un paso Δt mayor, reduciendo así el costo computacional.

En nuestro caso se utilizó un error en la norma L^∞ : *el error estimado es el máximo de los errores nodales*. La norma L^∞ se adopta por ser la más exigente y para que la cota de error que se debe especificar tenga una interpretación física simple y práctica (por ejemplo: el máximo error en la temperatura en cualquier punto en un problema de conducción del calor).

Como se emplean tres pasos un tercio ($r = 3$) para asegurar estabilidad incondicional, no habrá limitaciones para ampliar el paso temporal. Para adaptar el paso Δt se compara el error estimado con las cotas mencionadas según el siguiente algoritmo:

1. En cada paso de tiempo se calcula la solución siguiente usando una iteración simple de CN (u_n) con el paso dado y tres con un paso un tercio ($u_{n/3}^1, u_{n/3}^2, u_{n/3}^3$)

2. Se extrapola usando el método de Richardson y se estima el error como la diferencia entre el resultado de la extrapolación y el obtenido con tres pasos un tercio $u_{h/3}^3$.
3. Si el error es mayor que la cota superior se reduce el paso al tercio y se recalcula la solución, volviendo al punto 1.¹
4. Si el error es menor que la cota inferior se toma a la solución encontrada como válida pero se estipula que el paso siguiente deberá realizarse con el doble de incremento.

Cotas del error

La cota máxima es especificada por el usuario, mientras que la cota mínima se define internamente teniendo cierto cuidado, ya que podría pasar que se cumpla el punto 4 del algoritmo de adaptatividad y en la próxima iteración se sobrepase la cota superior. Si esto ocurriera se produciría una oscilación del paso temporal. La forma de evitarlo es hacer que entre ambas cotas exista una relación mayor que r^p , donde p es el orden del error del esquema ($p = 3$, en nuestro caso -Richardson-, con lo cual la franja debería tener una relación superior a 27. Como forma conservativa hemos tomado, arbitrariamente, una relación de 100).

Comportamiento frente a variaciones de los coeficientes

Con el esquema antes descrito se realizaron algunas experiencias numéricas con el objeto de estudiar el comportamiento de la estrategia propuesta para el control del incremento de tiempo frente a problemas típicos (evolución hacia un estacionario) o problemas donde los coeficientes son no-lineales o presentan una fuerte variación temporal.

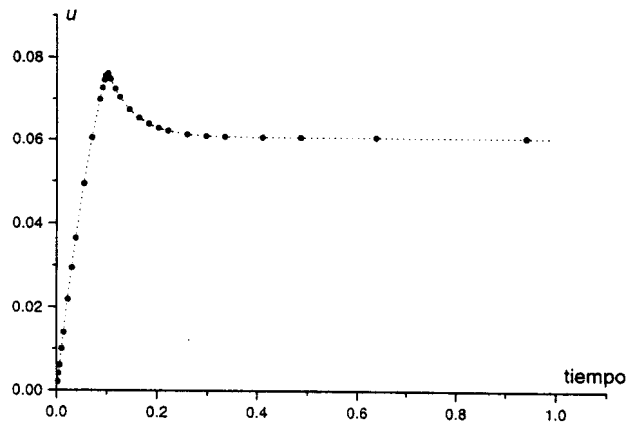


Figura 5: Evolución de la solución en un punto para un problema de difusión-reacción con el coeficiente de reacción dependiente del tiempo

En la figura 5 se muestra uno de los ejemplos analizados. Corresponde al mismo problema de los casos anteriores, en el que se ha tomado el coeficiente de reacción variable ($s=0$ hasta

¹ En realidad se puede aprovechar la solución $u_{h/3}^1$ como la nueva u_h

$t=0.1$ y $s=10$ en adelante). Puede observarse como el esquema ajusta el incremento de tiempo, de forma de capturar correctamente el cambio en la solución a $t=0.1$, y como el mismo crece a medida que la solución se aproxima al estacionario.

CONCLUSIONES

Se han presentado algunos esquemas para la integración temporal en problemas difusión-reacción transitorios con coeficientes no-lineales utilizando el método de elementos finitos con elementos triangulares lineales para la discretización espacial.

Ante la necesidad de emplear mallas de elementos finitos con fuertes densificaciones locales, fué necesario el empleo de esquemas que fueran incondicionalmente estables. Se obtuvo un algoritmo de orden Δt^3 y un método que permite ajustar el incremento de tiempo paso a paso, de forma de reducir el costo computacional para alcanzar el estacionario y poder además capturar cambios fuertes en el tiempo en la solución.

Los resultados de este trabajo son parte de uno más amplio que pretende resolver las ecuaciones de convección-difusión-reacción en tres dimensiones.

REFERENCIAS

- [1] **Marshall G.**, *Solución Numérica de Ecuaciones Diferenciales*, ed. Reverté, 1985.
- [2] **Larreteguy A.**, *Una Concepción Multidimensional para el Método de Elementos Finitos por Volúmenes de Control*, Instituto Balseiro, 1992.
- [3] **Henrici P.**, *Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations*, Wiley & Sons, 1962.
- [4] **Gear C. W.**, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall, 1971.
- [5] **Basombrío G. Vénere M.**, *Notas Introductorias al Método de Elementos Finitos*. Instituto Balseiro, 1990.
- [6] **Morton K.W.**, *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*. Chapman & Hall, ISBN 0 412 56440 8. 1996.
- [7] **Codina R.**, *Comparison of Some Finite Element Methods for Solving the Diffusion-Convection-Reaction Equation*. Comp. Meth. in Ap. Mech. and Eng. 1997.