

METODO TANGENTE COMBINADO PARA LA SOLUCION DE SISTEMAS ALTAMENTE
NO LINEALES ORIGINADOS EN PROBLEMAS DE CAMBIO DE FASE

Luis A. Crivelli

Mario Storti

Sergio R. Idelsohn

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria

Química - INTEC

CONICET-UNL

Santa Fe - Argentina

RESUMEN

Este trabajo presenta un estudio del procedimiento de solución para problemas de cambio de fase. La ecuación de transmisión de calor se discretiza empleando elementos finitos, en una formulación de dominio fijo. Se pone especial énfasis en la importancia de una evaluación precisa del vector residuo. Para esto, se recurre a una integración discontinua en los elementos que cambian de fase. La solución del sistema de ecuaciones no lineales que surge en este tipo de problemas se obtiene mediante una modificación adecuada del método de Newton. La matriz tangente verdadera propuesta inicialmente por los autores, es utilizada cuando la solución de prueba está en un entorno suficientemente próximo de la solución verdadera. Cuando esto no ocurre, se emplea una matriz de iteración apropiada, la cual es una modificación de la matriz tangente de modo de forzar la convergencia. Los ejemplos numéricos presentados muestran que el método propuesto mejora el comportamiento de los métodos clásicos.

ABSTRACT

This paper presents a study of the solution procedure for phase-change problems. The heat transfer equation is discretized using finite elements and a fixed domain formulation. It is stressed the importance of an accurate evaluation of the residual vector. To do this we resort to discontinuous integration in the phase-change elements. The solution of the nonlinear system of equation arising in this type of problems is achieved using an adequate modification of the Newton's method. The true tangent matrix proposed by the authors is used when the initial solution is in an adequately small neighborhood of the solution. Otherwise a consistent modification of this matrix is developed to enforce convergence when the initial solution is not near the solution. The numerical experiments show that the proposed method has enhanced behaviour compared to classical procedures.

INTRODUCCION

Los problemas de cambio de fase son frecuentes en muchos procesos de interés industrial, como el estudio del congelamiento de suelos (cálculos de pavimento y perforaciones), fusión de barras de combustible nuclear [1], sistemas de protección térmica y otros [2]. Este problema, conocido como problema de Stefan, está caracterizado por una discontinuidad en la función entalpía a la temperatura de cambio de fase, la cual origina una discontinuidad en el flujo térmico a través de la interfase. Esta diferencia en el flujo térmico es proporcional a la velocidad de la interfase. Por lo tanto, el dominio de cada fase varía con el tiempo. Debido a esta no linealidad "geométrica" es muy difícil, para los problemas de cambio de fase, obtener soluciones analíticas exactas [3,4].

En este trabajo nos concentraremos en la solución numérica de este tipo de problemas, supuestas condiciones de borde y de generación interna de calor, tales que no se originen zonas mushy o pastosas dentro del dominio. Básicamente hay dos grandes líneas para atacar este problema. Una realiza un seguimiento de la frontera móvil. La otra se base en la formulación débil, la cual contiene a la condición de movimiento de la interfase en la forma integral de la ecuación diferencial. Este procedimiento se conoce como método de dominio fijo. Los primeros artículos sobre los métodos de dominio fijo, recurren a la regularización de la relación temperatura-entalpía [5,6]. Esta metodología conduce a la aparición de zonas pastosas artificiales en problemas con interfases abruptas. La regularización sin embargo, es necesaria para resolver este problema como un problema no lineal de transmisión de calor, usando una capacidad calorífica equivalente para modelar el efecto del calor latente. Algunas desventajas de esta técnica son evidentes. La magnitud del parámetro de regularización es arbitraria, pero la solución depende fuertemente de este valor. Cuando es pequeño, el algoritmo puede resultar "confundido" y el problema ser resuelto como uno sin cambio de fase [7, 8]. Además, cuando la interfase atraviesa varios elementos en un solo paso de tiempo, se pierde el calor latente asociado a dichos elementos. Es aconsejable entonces, que la zona de regularización abarque más de un elemento. Sin embargo el valor apropiado del parámetro de regularización es desconocido a priori. No obstante, la regularización es inevitable cuando se usa una formulación en temperaturas para problemas donde surgen zonas pastosas.

Otra aproximación dentro de los métodos de dominio fijo consiste en usar a la entalpía como variable principal. Una vez obtenidos los valores nodales de la misma, puede calcularse la temperatura a través de la relación inversa entalpía-temperatura. La temperatura nodal se mantiene fija en su valor de fusión cuando la entalpía se encuentra dentro del rango de cambio de fase. Este procedimiento también origina zonas pastosa artificiales ya que la temperatura puede permanecer invariable durante varios pasos de tiempo. Un procedimiento equivalente dentro de la formulación en temperaturas es la modelización del efecto del calor latente mediante una fuente interna ficticia de generación [9,10], aplicada a aquellos elementos que están cambiando de fase. Las temperaturas nodales de estos elementos también permanecen fijas durante el período de fusión.

Recientemente, se ha replanteado la formulación en temperatura, presentando un algoritmo donde la regularización no es necesaria [8]. La idea principal consiste en utilizar integración discontinua en los ele-

mentos que cambian de fase, poniendo énfasis en la evaluación precisa del vector residuo. Los aspectos generales de este método pueden hallarse en las Referencias 8 y 11; sólo mencionaremos que este procedimiento es equivalente a una regularización que nunca excede el elemento que cambia de fase, evitando así la aparición de zonas pastosas.

El otro aspecto importante es el procedimiento empleado para resolver el sistema de ecuaciones no lineales. La función residuo de este problema es una función no convexa. Debe ponerse entonces un cuidado especial en el esquema iterativo utilizado para evitar tener una muy baja velocidad de convergencia o, de hecho, no convergencia del algoritmo. Dentro del contexto de elementos finitos un esquema de gran eficiencia es el método de Newton aplicado a la forma incremental del sistema de ecuaciones no lineales. El esquema tangente exacto desarrollado en la Referencia 12 tiene muy buenas propiedades aproximantes cuando el vector tomado como solución de prueba está próximo a la solución del sistema. Es común elegir como solución inicial a la solución del paso previo. Hay muchas situaciones para las cuales los datos del problema hacen que esta elección sea inapropiada. En tal caso, el algoritmo puede comportarse de manera oscilatoria y resulta esencial realizar line searches para estabilizar las iteraciones. Además, la velocidad de convergencia es muy lenta hasta que los vectores aproximantes pertenezcan a la región de convergencia cuadrática del método. Prácticamente, esta situación ocurre cuando la posición de la interfase predicha por la solución aproximante pertenece a los elementos en donde está la interfase solución. Este comportamiento puede interpretarse como que la matriz tangente conduce a una dirección de búsqueda inapropiada. En este trabajo se propone un esquema iterativo modificado, el cual recupera las propiedades de convergencia del método de Newton cuando las aproximaciones se acercan a la solución del sistema, pero que mejora en gran medida la velocidad de convergencia fuera de esta región. Se basa en establecer una matriz que acote al incremento del vector residuo. Esta propiedad es importante al aplicar conceptos de convergencia bajo orden parcial [13].

ECUACIONES BASICAS

El problema que nos ocupa es la solución de la ecuación de transmisión de calor en una región ocupada por dos fases de una sustancia dada. El dominio de ambas fases varía con el tiempo originando un problema de frontera móvil. Matemáticamente, este proceso está gobernado por la ecuación diferencial

$$\nabla (k \nabla T) + Q = \rho \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1)$$

en los dominios Ω_s y Ω_l del sólido y el líquido, siendo k la conductividad térmica, H la entalpía, T la temperatura, Q la fuente interna y t el tiempo. Para especificar completamente el problema, deben agregarse las condiciones de borde, temperatura impuesta sobre $\partial\Omega_T$ y flujo impuesto sobre $\partial\Omega_q$. La discontinuidad en la entalpía a la temperatura de cambio de fase T_m da lugar a la ecuación de acople

$$\underline{n}^T (k_s \underline{\nabla} T_s - k_l \underline{\nabla} T_l) = L \underline{n}^T \underline{v} \quad \text{sobre } \Gamma \quad (2)$$

donde L es la variación de entalpía entre las fases sólida y líquida y Γ , la interfase, es el conjunto de puntos dados por

$$\Gamma(t) = \{x, y, z / T(x, y, z, t) = T_m\}$$

De la ecuación (2) puede verse que la velocidad \underline{v} de la frontera móvil es proporcional a la diferencia de flujo térmico a través de la interfase. La base de los métodos de dominio fijo es la forma integral diferencial de las ecuaciones (1) y (2).

$$\begin{aligned} & \int_t \left[\sum_{i=1}^2 \int_{\Omega_i} \phi \left[\nabla \cdot (k \nabla T) + Q - \rho \frac{\partial H}{\partial t} \right] dv \right. \\ & + \int_{\Gamma} \underline{n}^T \left[L \underline{v} - (k_s \nabla T_s - k_l \nabla T_l) \right] \phi dA \\ & \left. + \int_{\partial \Omega_q} \underline{n}^T (\bar{q} - k \nabla T) \phi dA \right] dt = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

donde \bar{q} es el flujo impuesto sobre $\partial \Omega_q$ y \underline{n} el versor normal al contorno.

Adoptando funciones de forma que no varían con el tiempo, aplicando el teorema del transporte y suponiendo variación despreciable de la densidad a través de la interfase, la ecuación (3) puede escribirse como

$$- \int_t \left[\int_{\Omega} \nabla \phi \cdot k \nabla T dv - \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \phi H dv + \int_{\Omega} \phi Q dv + \int_{\partial \Omega_q} \phi \underline{n}^T \bar{q} dA \right] dt = 0 \quad (4)$$

siendo $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_l$.

Como la ecuación (4) es válida para todo intervalo de tiempo, el integrando debe ser cero. Este funcional escrito en forma compacta resulta:

$$\frac{d}{dt} i(T) + f(T) - g = 0 \quad (5)$$

siendo f el término integrado de conducción, i la contribución entálpica y g el flujo externo. Ahora puede procederse con una discretización por elementos finitos del funcional (5). Empleando el mismo espacio funcional para las funciones de ponderación como para las funciones de forma, la forma discreta de la ecuación (5) escrita en forma matricial resulta

$$\underline{K} \underline{u} + \frac{d}{dt} \underline{i}(u) - g = 0 \quad (7)$$

donde \underline{K} es la matriz de conductividad, \underline{i} es el vector entalpía, \underline{g} es el vector de flujo nodal y \underline{u} es el vector que agrupa a las incógnitas

tas nodales. Las componentes son

$$[\underline{K}]_{ij} = \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot k \nabla \phi_j \, dv \quad (7.1)$$

$$[\underline{i}]_i = \int_{\Omega} \phi_i \cdot \rho \cdot H \, dv \quad (7.2)$$

$$[\underline{g}]_i = \int_{\Omega} \phi_i \cdot Q \, dv + \int_{\partial \Omega_q} \phi_i \cdot \underline{n}^T \cdot \underline{q} \, dv \quad (7.3)$$

Para los elementos por los que pasa la interfase, se aplica la técnica de integración discontinua [8,11].

ESQUEMA DE SOLUCION

Esta sección se refiere a la resolución del sistema no lineal (6). Discretizando temporalmente a la ecuación (6) por un método de Euler implícito, el sistema, para el tiempo t_n , puede escribirse como

$$\Delta t \underline{K}_n \underline{u}_n + \underline{i}(\underline{u}_n) = \underline{\bar{g}}_n \quad (8)$$

y el problema puede definirse como la obtención de la raíz de la función residuo definido para cada paso de tiempo como:

$$\underline{r}(\underline{u}_n) = \underline{\bar{g}}_n - \Delta t \underline{K}_n \underline{u}_n - \underline{i}(\underline{u}_n)$$

El residuo puede aproximarse linealmente, i.e.

$$\underline{r}(\underline{u}_n^{m+1}) = \underline{r}(\underline{u}_n^m) + \frac{\partial \underline{r}(\underline{u}_n^m)}{\partial \underline{u}_n^m} (\underline{u}_n^{m+1} - \underline{u}_n^m) = 0$$

lo que conduce al esquema iterativo tangente

$$\begin{aligned} \underline{K}_T \Delta \underline{u}_n^m &= - \underline{r}(\underline{u}_n^m) \\ \underline{u}_n^{m+1} &= \underline{u}_n^m + \Delta \underline{u}_n^m \end{aligned} \quad (9)$$

siendo la matriz tangente la suma de tres matrices

$$\underline{K}_T = \underline{K} + \underline{M}^C + \underline{M}^L \quad (10)$$

donde \underline{K}_T es la matriz de conductividad, \underline{M}^C la de capacidad y \underline{M}^L la matriz que tiene en cuenta el efecto del calor latente [12].

El esquema tangente dado por las ecuaciones (9) y (10) tiene convergencia cuadrática local, es decir, una buena velocidad de convergen-

cia en un entorno de la solución. Sin embargo, cuando la solución de prueba no está suficientemente próxima a la solución, puede haber una gran pérdida de convergencia, y de hecho puede no lograrse la misma. Este comportamiento puede ser atribuido a la no convexidad de la función residuo. Para clarificar la siguiente discusión, reproduciremos algunas definiciones y propiedades de los sistemas no lineales. Para un tratamiento completo sobre el tema se debe referir a Ortega y Rheinbolt [13].

CONVERGENCIA BAJO ORDEN PARCIAL Y RESULTADOS RELACIONADOS

Puede definirse una relación de ordenamiento componente por componente, de forma que, para $x, y \in \mathbb{R}^n$, $\underline{x} \leq \underline{y} \Leftrightarrow x_i \leq y_i$. Dos vectores $\underline{x}, \underline{y}$ son comparables si $\underline{x} \leq \underline{y}$ o $\underline{y} \leq \underline{x}$. Un vector \underline{x} es no negativo si $\underline{x} \geq \underline{0}$. De modo similar se puede definir un ordenamiento por componentes para matrices.

Este concepto de ordenamiento parcial permite establecer algunas propiedades importantes de las matrices, útiles en el estudio de convergencia.

Propiedad 1

Una matriz $\underline{A} \in L(\mathbb{R}^n)$ es una M-matriz si

* \underline{A} es invertible

* $\underline{A}^{-1} \geq \underline{0}$

* $a_{ij} \leq 0$ $i \neq j$

Una propiedad importante que permite identificar M-matrices es la siguiente

Propiedad 2

Para que $\underline{A} \in L(\mathbb{R}^n)$, $a_{ij} \leq 0$ $i \neq j$ sea una M-matriz, es necesario y suficiente que

a) $\underline{D} = \text{diag}(\underline{A}) > \underline{0}$

b) $\underline{B} = \underline{I} - \underline{D}^{-1} \underline{A}$ tenga radio espectral $\rho(\underline{B}) < 1$

Para determinar cuando una matriz tiene un radio espectral menor que uno, es útil la siguiente propiedad

Propiedad 3

Para que una matriz \underline{B} irreducible, que verifique

$$\sum_{j=1}^n |b_{ij}| \leq 1 \quad i = 1, \dots, n$$

donde la desigualdad es estricta al menos para algún i , entonces $\rho(\underline{B}) < 1$.

Como corolario puede concluirse que si una matriz \underline{A} es irreducible diagonalmente dominante, con $a_{ij} \leq 0$, $i \neq j$, $a_{ij} > 0$ entonces

A es una M-matriz .

Propiedad 4

Sea \underline{A}_1 una M-matriz y $\underline{D}_1 = \text{diag } \underline{A}_1$, $-\underline{B}_1 = \underline{A}_1 - \underline{D}_1$. Sea $\underline{D}_2 \geq 0$ una matriz diagonal y $\underline{B}_2^{-1} \geq 0$ con diagonal nula tal que $\underline{B}_2 \leq \underline{B}_1$. Entonces la matriz \underline{A} definida como $\underline{A} = \underline{D}_1 + \underline{D}_2 - (\underline{B}_1 - \underline{B}_2)$ es una M-matriz con la propiedad $\underline{A}^{-1} \leq \underline{A}_1^{-1}$.

Como corolario resulta que para \underline{A} M-matriz y \underline{D} diagonal positiva $\underline{A} + \underline{D}$ también es una M-matriz y $(\underline{A} + \underline{D})^{-1} \leq \underline{A}^{-1}$.

Definición

Una función $\underline{F}: D \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ es orden convexa en $D_0 \subset D$ si

$$\underline{F}(\lambda \underline{x} + (1 - \lambda)\underline{y}) \leq \lambda \underline{F}(\underline{x}) + (1 - \lambda) \underline{F}(\underline{y})$$

$\underline{x}, \underline{y} \in D_0$ comparable, $\lambda \in (0, 1)$.

Propiedad 5

Para $\underline{F}: D_0 \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ G-diferenciable en D_0 , las siguientes propiedades son equivalentes:

\underline{F} es orden convexo en D_0 .

$\underline{F}(\underline{y}) - \underline{F}(\underline{x}) \geq \underline{F}'(\underline{x})(\underline{y} - \underline{x})$ para todo $\underline{x}, \underline{y} \in D_0$ comparable.

$[\underline{F}'(\underline{y}) - \underline{F}'(\underline{x})](\underline{y} - \underline{x}) \geq 0$ para todo $\underline{x}, \underline{y} \in D_0$ comparable.

Ahora podemos aplicar estas propiedades al sistema definido por la ecuación (6). Por simplicidad supondremos, sin pérdida de generalidad, que este sistema es homogéneo. Para estudiar sus propiedades será útil escribir al mismo en forma adimensional. Definamos las variables adimensionales:

$$\underline{x} \rightarrow \underline{x}/\ell \quad t \rightarrow t/t_c \quad T \rightarrow T/(T_1 - T_m)$$

siendo ℓ la longitud característica, t_c el tiempo característico y T_1 una temperatura de referencia sobre el contorno. Adoptaremos como longitud característica al diámetro del elemento y como tiempo característico el tamaño de paso temporal. La forma adimensional homogénea del sistema (6) puede escribirse para cada elemento como:

$$\sum_{j=1}^n \left[\underline{F}_0 \right]_{\Omega^n} \nabla \phi_i \cdot \mathbf{k} \nabla \phi_j \cdot |j| \, dv T_j + \left(\int_{\Omega^n} \phi_i \phi_j \cdot |J| \, dv + \text{Ste}^{-1} \int_{\Gamma^n} \ell \frac{\phi_i \phi_j}{|\nabla T_b|} |j_\ell| \, dA \right) T_j = 0 \quad (11)$$

donde Ω^m es el elemento master y ∇T_b es el gradiente en la interfase. El sistema completo se obtiene a partir del ensamble de las ecuaciones (10). Los jacobianos $|j|$ y $|j_\ell|$ son del orden de ℓ^N y ℓ^{N-1} respectivamente, donde N es la dimensión del problema (uni, bi o tridimensional). Por lo tanto la matriz tangente adimensional es

$$\hat{\underline{K}}_T = \underline{F}_0 \hat{\underline{K}} + \hat{\underline{M}}^C + \text{Ste}^{-1} \hat{\underline{M}}^L \quad (12)$$

donde las matrices se calculan a partir de las ecuaciones (7) empleando coeficientes unitarios. Los coeficientes adimensionales, números de Fourier y de Stefan, se definen como

$$F_o = \frac{k}{\rho c_p \ell^2} \Delta t \quad \text{Ste} = \frac{\rho c_p (T_1 - T_m)}{L}$$

La matriz de conductividad \hat{K} es irreducible, tiene diagonal positiva, los elementos no diagonales son negativos y es diagonalmente dominante. Por el corolario de la Propiedad 3, \hat{K} es una M-matriz. La matriz de capacidad \hat{M}^C y la matriz de interfase \hat{M}^L son matrices positivas. A partir de las ecuaciones (11) y (12) y de la Propiedad 4, puede verse que para que \hat{K}_T sea una M-matriz es necesario que

$$F_o \geq 1 + \frac{\text{Ste}^{-1}}{\min |\nabla T_b|} \quad (13)$$

La ecuación (13) de una relación entre los parámetros de la discretización y las propiedades físicas del problema. Es importante que la matriz \hat{K}_T sea una M-matriz para garantizar buenas propiedades de convergencia para el método de Newton, como se verá en el párrafo siguiente.

ANÁLISIS DE LA CONVERGENCIA

En este párrafo estudiaremos el comportamiento del algoritmo tangente. Para ilustrar la discusión recurriremos a un modelo de un solo grado de libertad. En la Figura 1 puede verse una malla de 3 nodos y 2 elementos unidimensionales. La temperatura en los nodos 1 y 3 es conocida. La incógnita nodal es la temperatura T del nodo 2. El origen del sistema coordenado se superpondrá a dicho nodo. La función de forma lineal utilizada es

$$\phi = 1 - \frac{|x|}{\ell}$$

El primer paso es evaluar la expresión adimensional del residuo. Aplicando la ecuación (6), la contribución entálpica al vector residuo es

$$i_r = i_r^c + i_r^L = \left[\frac{2}{3} + \frac{2 \text{Ste}^{-1}}{T - T_m} \hat{x} \left[\frac{1}{2} |\hat{x}| \left(1 - \frac{|\hat{x}|}{2} \right) \right] \right] T$$

siendo \hat{x} la posición de la interfase obtenida de

$$x = \begin{cases} \frac{T - T_m}{\bar{T}_1 - T} & \hat{x} < 0 \\ \frac{T - T_m}{T - \bar{T}_3} & \hat{x} > 0 \end{cases} \quad \hat{x} = 0 \quad T = T_m$$

La contribución de la conducción es

$$f_r = F_o [2T - (\bar{T}_1 + \bar{T}_3)]$$

Por lo tanto, la expresión adimensional del residuo resulta

$$r(T) = \left[\frac{2}{3} + \frac{2 \text{Ste}^{-1}}{T - T_m} \hat{x} \left(\frac{1}{2} |\hat{x}| \left(1 - \frac{|\hat{x}|}{2} \right) \right) \right] \bar{T} + 2 F_o T - F_o (\bar{T}_1 + \bar{T}_3)$$

Esta ecuación se discretiza temporalmente con un método de Euler implícito para obtener

$$r_n(T) = K_T T_n - m T_{n-1} - F_o (\bar{T}_1 + \bar{T}_3)$$

En la Figura 2 se grafica la función

$$r_n^* = r_n + F_o (\bar{T}_1 + \bar{T}_3) + m T_{n-1}$$

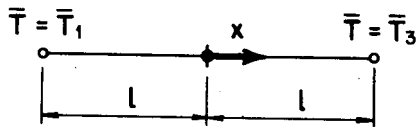


FIGURA 1 : Modelo de un grado de libertad

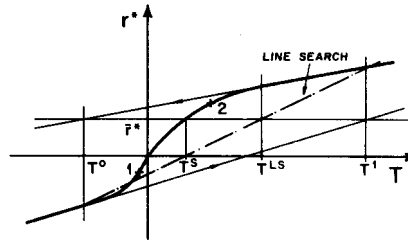


FIGURA 2 : Variación del residuo para un modelo de un grado de libertad

La solución para el tiempo t es la intersección de esta curva con la línea $\bar{r}^* = F_o (\bar{T}_1 + \bar{T}_3) + m T_{n-1}$. La tangente a la curva (matriz tangente unidimensional) y la matriz de masa unidimensional resultan

$$K_T = m + 2 F_o$$

$$m = \frac{2}{3} + \frac{2 \text{Ste}^{-1}}{T - T_m} \hat{x} \left[\frac{1}{2} |\hat{x}| \left(1 - \frac{|\hat{x}|}{2} \right) \right]$$

Puede verse que la tangente aumenta para $\hat{x} < 0$ y disminuye para $\hat{x} > 0$, ya que puede demostrarse que la curvatura es positiva para $\hat{x} < 0$ y negativa para $\hat{x} > 0$. Puede verse también que para $\hat{x} = 0$, la tangente no es única, ya que

$$\lim_{\substack{T \rightarrow T_m^- \\ \hat{x} \rightarrow 0^-}} K_T = \frac{2}{3} + Ste^{-1} + 2 F_0$$

$$\lim_{\substack{T \rightarrow T_n^+ \\ \hat{x} \rightarrow 0^+}} K_T = \frac{2}{3} + Ste^{-1} \frac{\bar{T}_1 - \bar{T}_m}{T_m - \bar{T}_3} + 2 F_0$$

Además se ve que el residuo es una función no convexa de T . En la Figura 2 se observa que para los puntos 1 y 2 no se verifica la segunda condición de la Propiedad 5.

En la Figura 2, T^S es la solución para tiempo t . Si T^0 es la solución de prueba inicial, y la primera iteración se realiza empleando la matriz tangente en T^0 , el nuevo punto obtenido resulta T^1 . Aplicando nuevamente la iteración tangente, retornamos al punto T^0 . Por lo tanto, el esquema no converge. Puede usarse line search para mejorar el comportamiento del sistema, evitando que la solución predicha se "aleje" de la solución. De hecho, para problemas de un sólo grado de libertad realizar line search es suficiente para obtener convergencia. Un esquema de line search, suponiendo variación lineal del residuo, puede verse en la Figura 2. Sin embargo para sistemas de muchos grados de libertad, el line search no es suficiente y puede no mejorar el comportamiento del sistema, sin embargo servirá para evitar soluciones demasiado distanciadas de la real. De hecho, si la dirección de búsqueda dada por la matriz tangente es muy mala, el parámetro del line search será muy pequeño, y la nueva solución resultará muy próxima a la inicial, sin mejorar la convergencia hacia la solución del sistema. Lo que se propone en este caso, es tomar otra matriz de iteración, digamos S con mayor pendiente, tal que

$$r(T^1) - r(T^0) \leq S(T^1 - T^0) \quad (14)$$

Las iteraciones a partir del punto T^1 se observan en la Figura 3. Puede notarse que $T^1 > T^2 > T^3 \dots > T^S$ y las iteraciones convergerán. Sin embargo la velocidad de convergencia puede mejorarse cerca del punto solución T^S usando en esta zona la verdadera matriz tangente.

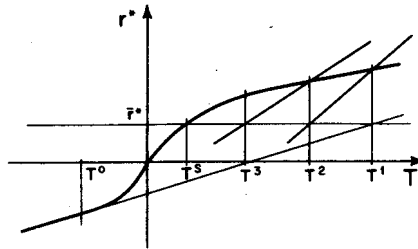


FIGURA 3 : Esquema secante para un modelo de un grado de libertad

Estas ideas pueden extenderse a problemas de muchos grados de libertad. La no convexidad del residuo puede verse a partir de la forma de la matriz tangente en la ecuación (10) y de la tercer condición de la Propiedad 5. Suponiendo que la única no linealidad presente se debe al cambio de fase (es decir, coeficientes de conducción y capacidad constantes), la no linealidad en $r(u^m)$ vendrá dada sólo por la matriz M^L . Esta es una no linealidad localⁿ que se mueve con la frontera móvil. Entonces puede verse directamente que la tercer condición de la Propiedad 5 no se verifica. Sin embargo en un entorno suficientemente cercano de la solución el residuo es orden convexo. Esta propiedad puede observarse en la Figura 2 para el modelo de un sólo grado de libertad. En esta región es deseable usar el esquema tangente de Newton. Enunciaremos la siguiente propiedad, equivalente a la ecuación (14) para el ejemplo de un grado de libertad.

Propiedad 6

Para $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ supongamos que $x^o \leq y^o$, $\langle x^o, y^o \rangle \subset D$ y $\frac{F x^o}{\langle x^o, y^o \rangle} \leq \frac{F y^o}{\langle x^o, y^o \rangle}$. Supongamos además que existe una función matricial A : $\langle x^o, y^o \rangle \rightarrow L(\mathbb{R}^n)$ tal que

$$F(y) - F(x) \leq A(y) (y - x) \quad (20)$$

Si $P_k: \langle x^o, y^o \rangle \rightarrow L(\mathbb{R}^n)$, $k = 0, 1, \dots$ son tales que $P_k(x)$ es una subinversa no negativa de $A(x) \forall x \in \langle x^o, y^o \rangle$, entonces las iteraciones

$$y^{k+1} = y^k - P_k^{-1}(y) F(y)$$

están bien definidas, además $y \rightarrow y^s$, solución de $F(y) = 0$ para $k \rightarrow \infty$.

Propiedad 7

Para $F: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ sea A una matriz, tal que exista su inversa A^{-1} , de modo que

$$Fy - Fx \geq A(x) (y - x)$$

la iteración $y = x - A^{-1} F(x) \in D_0$ verifica $Fy \geq 0$. Esta propiedad se demuestra fácilmente ya que

$$0 = Fx + A(x) (y - x) \leq Fy \quad (16)$$

Con estas definiciones describiremos el esquema iterativo propuesto. La solución de prueba inicial es la solución del paso previo. La matriz de iteración inicial es la matriz tangente lineal, es decir $S = K + M^c$. Por lo tanto la primer iteración satisface la ecuación (16) (Propiedad 7). Se realiza line search suponiendo variación lineal del residuo. La magnitud σ del parámetro de line search brinda una estimación de la bondad de la dirección de búsqueda. Cuando σ es demasiado pequeño, la dirección de búsqueda dada por la matriz tangente utilizada es muy mala. Para la siguiente iteración, se emplea la matriz tangente modificada de modo de satisfacer la ecuación (15). La corrección se realiza de manera que la nueva matriz sea una M-matriz. A la matriz tangen

te K_T se le agrega una matriz diagonal positiva, entonces por el corolario de la Propiedad 4 la matriz de iteración S es una M-matriz y satisface $0 < S^{-1} < K_T^{-1}$. Esta modificación se realiza de la siguiente manera. La diferencia entre $r(u_n^m) - r(u_n^{m-1})$ y $K_T(u_n^m - u_n^{m-1})$ es el calor latente liberado por aquellos elementos completamente fundidos en la iteración. La contribución nodal de esta diferencia se suma a la diagonal de la matriz tangente, de modo de verificar

$$\underline{r}(u_n^m) - \underline{r}(u_n^{m-1}) \leq S(u_n^m - u_n^{m-1})$$

Esta matriz se usa ahora para la nueva iteración, de modo de obtener una aproximación a la solución que satisface

$$\underline{u}_n^0 < \underline{u}_n^{m+1} < \underline{u}_n^m$$

Las siguientes iteraciones se realizan de un modo similar hasta que las sucesivas aproximaciones se acercan a la solución \underline{u}_n^S . La noción de proximidad viene dada por el hecho de que la interfase calculada por la solución aproximada pertenezca a los elementos donde yace la interfase verdadera. Cuando esto ocurre, las aproximaciones pertenecen a un subdominio D_0 donde la función residuo es localmente orden convexa, como puede verse en la Figura 2 para el modelo de un grado de libertad. Esta situación se logra cuando el parámetro de line search está próximo a la unidad y cuando ningún elemento resulta completamente fundido en la iteración. El dominio D_0 es el dominio de convergencia cuadrática del método de Newton. La matriz de iteración usada aquí será la matriz tangente verdadera dada por la ecuación (10). Ya que esta matriz es una M-matriz, por la relación (13), tendrá inversa no negativa K_T^{-1} . Entonces pueden aplicarse directamente los resultados de convergencia monótona [13] con velocidad cuadrática de convergencia.

El esquema propuesto tiene entonces un doble propósito. Primero, usar un esquema secante que asegure una aproximación a la región de convergencia monótona y evite comportamiento inestable u oscilatorio. Segundo, cuando se alcanza esta región, iterar con el método de Newton. Esta combinación produce un algoritmo de alta eficiencia.

EJEMPLOS NUMERICOS Y CONCLUSIONES

Se han realizado diferentes ejemplos numéricos para analizar el comportamiento del algoritmo propuesto. Presentaremos aquí el análisis de una barra semi-infinita inicialmente en estado líquido a la temperatura $T_i = 0.3^\circ\text{C}$. La misma se solidifica haciendo descender la temperatura en su extremo hasta $T_1 = -1^\circ\text{C}$. Las propiedades físicas de la misma son:

$$K = 1 \frac{\text{Kcal}}{\text{m seg } ^\circ\text{C}} \quad \rho c_p = 1 \frac{\text{Kcal}}{\text{m}^3 ^\circ\text{C}} \quad L = 10 \frac{\text{Kcal}}{\text{m}^3} \quad T_m = 0^\circ\text{C}$$

El sistema ha sido discretizado usando 10 elementos unidimensionales lineales separados cada 0.1 metros. De acuerdo a la fórmula (13), el tamaño de paso temporal a usar es $T = 0.1$ segundos. En la Figura 4 se grafica la posición teórica de la interfase y la predicha por este algoritmo.

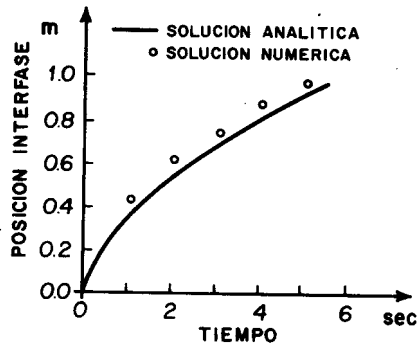


FIGURA 4 : Evolución de la posición de la interfase para el ejemplo 1

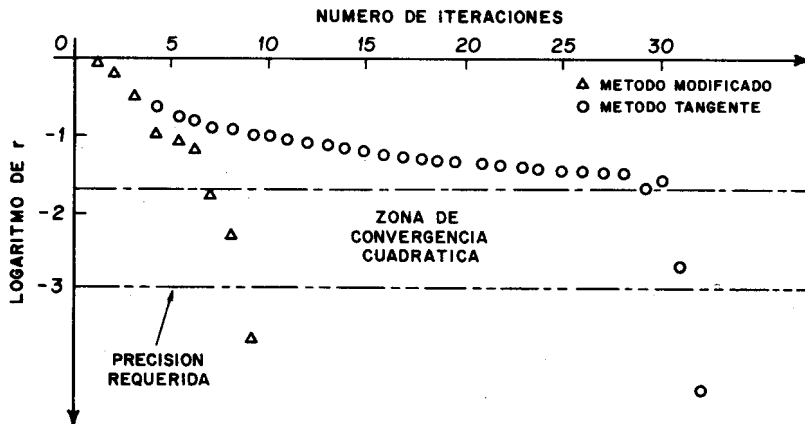


FIGURA 5 : Comparación entre el número de iteraciones requerido por el esquema tangente y el esquema modificado para $t = 2$ segundos

Este problema fue previamente tratado en la Referencia [12]. Allí puede verse que en el paso de tiempo $t = 2$ segundo se incrementa exageradamente el número de iteraciones necesarias. Este fenómeno se explica porque para ese instante la interfase pasa de un elemento a otro. El algoritmo propuesto reduce sensiblemente el número de iteraciones necesarias como puede verse del gráfico comparativo de la Figura 5. El mismo comportamiento se observa en otros instantes de tiempo, cuando la interfase debe cambiar de elementos. La zona de rápida convergencia de ambos algoritmos está asociada al hecho de que la interfase pertenece al elemento en el cual está la interfase solución. A partir de allí la convergencia es cuadrática, típica de un método tangente.

REFERENCIAS

- [1] Idelsohn, S; Crivelli, L.; "Numerical Analysis of the Fusion of Nuclear Combustible Rods under Loca-type Accidents", 7mo. Congresso Brasileiro de Engenharia Mecanica, Uberlandia, Brasil, Diciembre 13-16 de 1983.
- [2] Crivelli, L.; Idelsohn, S.; "Solución Numérica del Problema de Transmisión del Calor con Cambio de Fase". Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño de Ingeniería 1, 43-66, 1985.
- [3] Carslaw, H.S.; Jaeger, J.C.; "Conduction of Heat in Solids", Oxford Univ. Press, 1959.
- [4] Tao, L.; "The Exact Solutions of some Stefan Problems with Prescribed Heat Flux". Trans. ASME J. Appl. Mechanics 48, 732-736 (1981).
- [5] Bonacina, C.; Comini, G.; Fasano, A.; Primicerio, M.; "Numerical Solution of Phase-Change Problems", Int. J. Heat Mass Transfer 16, 1825-1832 (1973).
- [6] Comini, G.; Del Guidice, S.; Lewis, R.W.; Zienkiewicz, O.C.; "Finite Element Solution of non-linear Heat Conduction Problems with Special Reference to Phase Change". Int. J. Num. Meth. Engng. 8, 613-624 (1974).
- [7] Voller, V.; Cross, M.; Walton, P.; "Assessment of Weak Solution Numerical Techniques for Solving Stefan Problems", en Numerical Methods in Thermal Problems (R.W. Lewis, K. Morgan, Eds.). Pineridge Press, Swansea, U.K., 1979.
- [8] Crivelli, L.; Idelsohn, S.; "A Temperature-Based Finite Element Solution for Phase-Change Problems", a publicarse en Int. J. Num. Meth. Engng.
- [9] Rolph III, W.D.; Bathe, K.J.; "An Efficient Algorithm for Analysis of Non Linear Heat Transfer with Phase Changes", Int. J. Num. Meth. Engng. 18, 119-134 (1982).
- [10] Roose, J.; Storrer, O.; "Modelization of Phase Changes by Fictitious Heat Flow", Int. J. Num. Meth. Engng. 20, 217-225 (1984).
- [11] Storti, M.; Crivelli, L.; Idelsohn, S.; "Making Curved Interphases Straight in Phase-Change Problems", enviado para ser considerado para su publicación en Int. J. Num. Meth. Engng.
- [12] Storti, M.; Crivelli, L.; Idelsohn, S.; "Matriz de Capacidad de Interfase en Problemas Térmicos con Cambio de Fase", en este proceeding.
- [13] Ortega, J.M.; Rheinbolt, W.C.; "Iterative Solution of Non-Linear Equations in Several Variables", Academic Press, New York (1970).