

DISCRETIZACIÓN DE LA ECUACIÓN ESCALAR DE CONVECCIÓN-DIFUSIÓN UTILIZANDO MÉTODOS MIMÉTICOS

Franzyuri F. Hernández

fhernan@uc.edu.ve

Dpto. de Ciencias, Núcleo de Anzoátegui, Universidad de Oriente, Venezuela.

Carlos I. Bucharth

cibi3d@siggraph.org

Dpto. de Computación, Facultad de Ciencias y Tecnología, Universidad de Carabobo, Venezuela.

Resumen. En este artículo se muestra un estudio numérico de distintos esquemas de discretización en Diferencias Finitas, correspondientes al operador escalar de Convección-Difusión en una dimensión para aproximar sus derivadas. Algunos de estos esquemas usan el método de Operadores de Soporte y las técnicas de Castillo-Grone-Yasuda, basándose en la aproximación lateral para el Gradiente en nodos ubicados en la frontera de un mallado y en aproximaciones centradas para la Divergencia en las celdas del mismo. También se muestra un esquema que utiliza el método tradicional en Diferencias Finitas, en cuya formulación es necesario recurrir a ideas artificiales como el uso de nodos fantasmas en las fronteras de un mallado, con el propósito de aproximar a las derivadas con fórmulas centradas. El último esquema que se presenta utiliza un nuevo método no tradicional en Diferencias Finitas, sin el uso de nodos fantasmas, éste aproxima a la primera derivada con fórmulas laterales en las fronteras del mallado y a la segunda con fórmulas centradas en el interior del mismo. Una vez obtenidos los distintos esquemas numéricos, éstos son implementados en *MatLab*[®], con la intención de utilizarlos en la búsqueda de soluciones aproximadas de diversos problemas (entre los que se destaca la ecuación de Poisson con condiciones de frontera tipo Robin), resolverlos, generar gráficas donde se visualice el orden de convergencia de cada método utilizado y finalmente presentar las conclusiones respectivas.

Palabras y frases claves: Ecuación de convección-difusión, Discretización de dominios mediante el uso de mallados, Método no tradicional en diferencias finitas, Método tradicional en diferencias finitas.

1. INTRODUCCIÓN

Muchos procesos de distinta naturaleza física son descritos mediante ecuaciones en derivadas parciales. En la gran mayoría de ellos juega un papel fundamental la ecuación de Convección-Difusión para describir fenómenos de transporte independientes del tiempo. Esta ecuación es un caso particular de la ecuación elíptica de segundo orden, para la cual existe una gran variedad de bibliografía sobre el estudio de sus soluciones analíticas y numéricas.

Para el estudio numérico de estas soluciones, según [1], los métodos en Diferencias Finitas son los de mayor uso, por ser muy eficientes en términos de tiempo de ejecución y facilidad de implementación. En los últimos diez años una nueva versión del método en Diferencias Finitas, denominado Mimético, ha venido desarrollándose con la finalidad de obtener mejores resultados para la simulación de diversos fenómenos. Los esquemas provenientes de estos métodos gozan de las mismas ventajas que los esquemas derivados de los métodos en Diferencias Finitas Tradicional (DFT), pero superan a estos últimos al mantener los mismos órdenes de exactitud de los operadores discretos tanto en los nodos internos como en la frontera de la malla y además satisfacen versiones discretas de una ley de conservación global (teorema de la Divergencia) convirtiéndolos en métodos conservativos.

Uno de los métodos de este artículo es conocido en la literatura técnica con el nombre de Operadores de Soporte (OpS), el cual es de primer orden en la frontera del mallado y de segundo orden en el interior del mismo, ver [2].

Castillo y Grone [3], desarrollaron una metodología para obtener técnicas miméticas cuyos órdenes de exactitud en los nodos internos y en la frontera del mallado son los mismos. Posteriormente Castillo y Yasuda [4] desarrollaron, utilizando la misma metodología que [3], esquemas de segundo orden en sus versiones simétricas y no simétricas.

En este artículo se extienden los esquemas de segundo orden de exactitud descritos en [4], el esquema de primer orden de exactitud en la frontera del mallado descrito en [2], un esquema proveniente del método en DFT usando nodos fantasmas y un nuevo esquema derivado del método en Diferencias Finitas No Tradicional (DFnT) sin el uso de nodos fantasmas, al caso de la ecuación de Convección-Difusión en una dimensión.

2. ECUACIÓN ESCALAR DE CONVECCIÓN–DIFUSIÓN

Según [5] la ecuación escalar de Convección-Difusión en 1D sujeta a condiciones de frontera de tipo Robin, toma la forma de una ecuación diferencial ordinaria dada por:

$$\frac{d^2}{dx^2}u + \xi \frac{d}{dx}u = f, \text{ en } \Omega. \quad (1)$$

$$\begin{cases} \alpha u(0) - \beta \frac{d}{dx}u(0) = \gamma_1, & x = 0 \text{ (Cond. de frontera 1),} \\ \alpha u(1) + \beta \frac{d}{dx}u(1) = \gamma_2, & x = 1 \text{ (Cond. de frontera 2).} \end{cases} \quad (2)$$

Donde $u = u(x)$ es una función real de variable real desconocida, el dominio de u es $\Omega \cup \partial\Omega = (0, 1) \cup [0] \cup [1] = [0, 1]$, ξ es el parámetro de convección–difusión, $f = f(x)$ es una función real de variable real conocida y $\{\alpha, \beta, \gamma_i\}$ con $i = 1, 2$ son parámetros reales conocidos.

3. MÉTODO DE OPERADORES DE SOPORTE

Según [2] se introducen dos discretizaciones para la primera y segunda derivada basadas en las proyecciones de los operadores Gradiente (*grad*) y Divergencia (*div*) en una dimensión. Se requiere que las aproximaciones satisfagan propiedades de simetría que provienen de analogías de la *div*, *grad* y Laplaciano (*lap*) en dimensiones más altas. En el espacio continuo, la *div* y el *grad* son adjuntos negativos uno del otro, es decir $div^* = -grad$, lo que implica que el *lap* es un operador simétrico negativo. Una de las metas en este trabajo es la construcción de análogos discretos de segundo orden, de la Divergencia (*Div*) y el Gradiente (*Grad*) para que $Div^* = -Grad$ y así usar $Lap = Div Grad$ como una aproximación de la segunda derivada. Algunos de los más eficientes métodos para resolver estas ecuaciones requieren que el *Lap* sea un operador simétrico definido negativo. Las discretizaciones miméticas del *Lap* o, de una forma más general, operadores elípticos simétricos automáticamente producen operadores discretos que son simétricos y definidos negativos. En la figura 1 se muestra el mallado con el que se trabajó en este método.

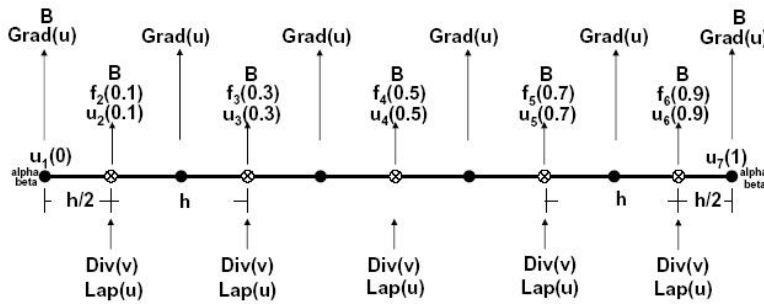


Figura 1. Mallado Escalonado Uniforme.

Las dos aproximaciones naturales más simples de los operadores **Div** y **Grad** para este método, ver [6], son:

$$Div(v_{i+1/2}) \approx \frac{v_{i+1} - v_i}{h} + O(h^2), \quad i = 1, \dots, N \quad (3)$$

$$Grad(u_i) \approx \begin{cases} \frac{2u_{3/2} - 2u_1}{h} + O(h), & i = 1 \\ \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{h} + O(h^2), & i = 2, \dots, N \\ \frac{2u_{N+1} - 2u_{N+1/2}}{h} + O(h), & i = N + 1. \end{cases} \quad (4)$$

El esquema resultante según [5], para el caso $N = 5$, es el siguiente:

$h^2\alpha + 2h\beta$	$-2h\beta$					
$2 - 2\xi h$	$-3 + 2\xi h$	1				
	$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1			
		$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1		
			$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1	
				$1 - \xi h$	$-3 + \xi h$	2
					$-2h\beta$	$h^2\alpha + 2h\beta$

Figura 2. Esquema del método de OpS.

4. MÉTODOS DE CASTILLO–GRONE–YASUDA

Estos esquemas se desarrollan en un mallado idéntico al del método de OpS en sus versiones simétrico y no simétrico, ver [3] y [4]. Para el método no simétrico se obtiene un operador \mathbf{B} (simple) idénticamente igual al caso del método de OpS. En el método simétrico se define un operador \mathbf{B} (completo), con el cual se produce un sistema estructuralmente simétrico [1] y [5]. Estas técnicas deben satisfacer la relación integral discreta $\langle \hat{D}iv(v), u \rangle_Q + \langle v, Grad(u) \rangle_P = \langle \mathbf{B}(v), u \rangle$, donde $\hat{D}iv$ es el patrón de la Divergencia aumentada con dos filas de ceros (la primera y la última), $Grad$ es el patrón del Gradiente, \mathbf{B} es un patrón apropiado para la frontera del mallado, Q es el patrón de peso de la Div , P es el patrón de peso del $Grad$, v es una función vectorial, u es una función escalar y $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es un producto interno especial [3]. En estas técnicas se define el $Grad(u)$ en los nodos x_1 y x_{N+1} como una aproximación de la derivada lateral con un error de truncamiento $O(h^2)$, y en los nodos x_i , con $i = 2, \dots, N$ se aproxima por diferencias centrales de segundo orden obteniendo así las discretizaciones siguientes [6]:

$$\mathbf{Grad}(u_i) \approx \begin{cases} \frac{-\frac{8}{3}u_1 + 3u_{3/2} - \frac{1}{3}u_{5/2}}{h} + O(h^2), & i = 1 \\ \frac{u_{i+1/2} - u_{i-1/2}}{h} + O(h^2), & i = 2, \dots, N \\ \frac{\frac{1}{3}u_{N-1/2} - 3u_{N+1/2} + \frac{8}{3}u_{N+1}}{h} + O(h^2), & i = N + 1. \end{cases} \quad (5)$$

Con los operadores discretos ya definidos, se generó un sistema de ecuaciones lineales (o esquema), de la forma $\mathbf{Mu} = \mathbf{b}$ para problemas con condiciones de frontera tipo Robin,

$$(\mathbf{h}^2\mathbf{B}_d + \mathbf{hB}_n\mathbf{BGrad} + \mathbf{D}\hat{iv}\mathbf{Grad} + \mathbf{h}\xi\mathbf{VGrad})\mathbf{u} = \mathbf{h}^2\mathbf{b}, \quad (6)$$

donde $(\mathbf{h}^2\mathbf{B}_d + \mathbf{hB}_n\mathbf{BGrad} + \mathbf{D}\hat{iv}\mathbf{Grad} + \mathbf{h}\xi\mathbf{VGrad}) \in \mathcal{M}_{(N+2),(N+2)}$, ver [5] y [7]. Para el caso $N = 5$, el esquema resultante para el método mimético no simétrico es:

$h^2\alpha + (8/3)h\beta$	$-3h\beta$	$(1/3)h\beta$				
$8/3 - (8/3)\xi h$	$-4 + 3\xi h$	$4/3 - (1/3)\xi h$				
	$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1			
		$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1		
			$1 - \xi h$	$-2 + \xi h$	1	
				$4/3 - \xi h$	$-4 + \xi h$	$8/3$
				$(1/3)h\beta$	$-3h\beta$	$h^2\alpha + (8/3)h\beta$

Figura 3. Esquema del método no Simétrico.

5. MÉTODO NO TRADICIONAL EN DIFERENCIAS FINITAS

En el método presentado por [5], se utilizó un mallado no escalonado uniforme sin el uso de nodos fantasmas como el que se muestra en la figura 4; esta malla es para el caso particular $N = 5$,

β	$2\alpha h$	$-\beta$					
$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$					
	$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$				
		$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$			
			$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$		
				$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$	
					$2 - \xi h$	-4	$2 + \xi h$
						$-\beta$	$2\alpha h$
							β

Figura 7. Esquema del método Tradicional en Diferencias Finitas.

7. PRUEBAS NUMÉRICAS

El problema con el que se trabajará en estas pruebas está dado por:

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \xi \frac{d}{dx}u(x) = \frac{\lambda e^{\lambda x}(\lambda + \xi)}{e^\lambda - 1}, \quad 0 < x < 1.$$

$$\begin{cases} \alpha u(0) - \beta \frac{d}{dx}u(0) = -1, & x = 0, \\ \alpha u(1) + \beta \frac{d}{dx}u(1) = 0, & x = 1. \end{cases}$$

La solución analítica del problema propuesto viene dada por:

$$u(x) = \frac{e^{\lambda x} - 1}{e^\lambda - 1}. \tag{7}$$

7.1. Prueba 1 ($\xi = 0$)

Al comparar la solución analítica dada por la Ecuación (7) y los resultados obtenidos con los diferentes métodos numéricos, se observan los órdenes de convergencia de cada método.

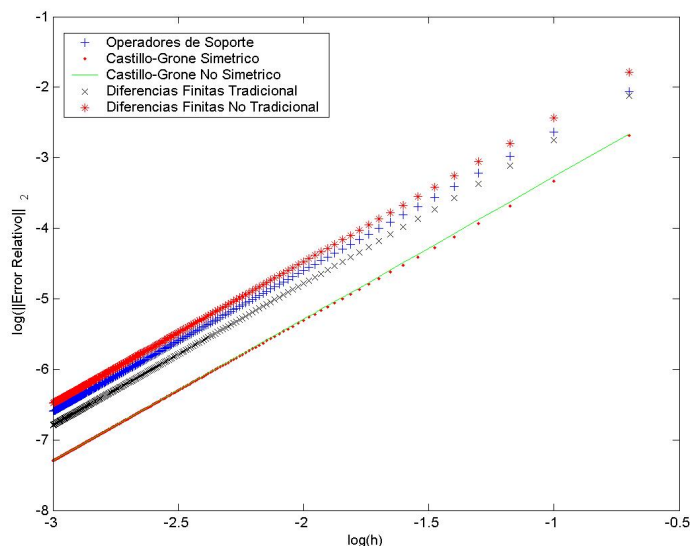


Figura 8. Orden de Convergencia de cada método, con $\xi = 0$.

En la figura 8 se puede observar que el método que presentó mayor error en su convergencia es el de DF_nT, seguido por el de OpS, luego le sigue DFT y por último el error más pequeño lo tienen los métodos de Castillo-Grone-Yasuda.

7.2. Prueba 2 ($\xi = 100$)

Al comparar la solución analítica dada por la Ecuación (7) y los resultados obtenidos con los métodos numéricos antes mencionados se observa, en la figura 9, que los métodos que presentaron mayor error en su convergencia son: OpS y los propuestos por Castillo-Grone-Yasuda, seguidos por el método en DF_nT y de último se puede observar que el error de convergencia más pequeño fue generado por el método en DFT.

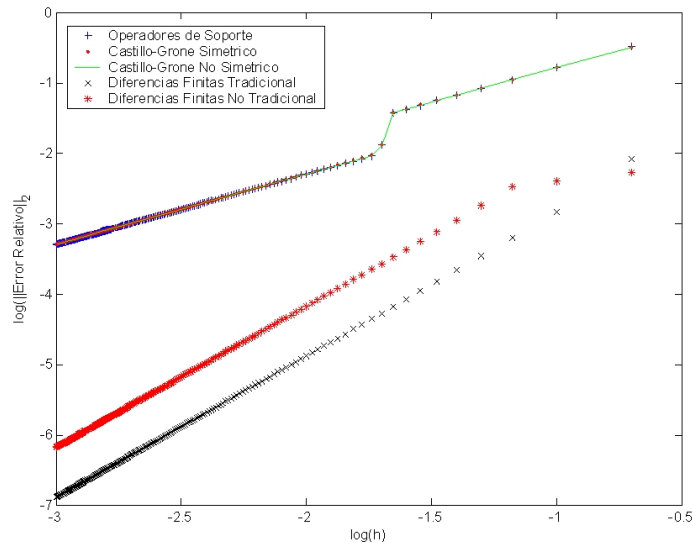


Figura 9. Orden de Convergencia de cada método, con $\xi = 100$.

8. CONCLUSIONES

A continuación se mencionan algunos de los resultados obtenidos de este artículo. Como por ejemplo, los métodos implementados en este trabajo convergen en todas las pruebas que se hicieron. Unas de las ventajas más importantes de los métodos miméticos sobre los demás métodos es que son conservativos, satisfacen identidades integrales del cálculo diferencial e integral, sus formulaciones en el interior y las fronteras del mallado son más consistentes, su implementación es mucho más robusta y no necesitan técnicas donde se usen nodos fantasmas.

Agradecimiento

Queremos agradecer a los Profesores Dr. Germán Larrazábal (CEMVICC-FACYT-UC, Venezuela) y Dr. Juan Guevara (UCV, Venezuela) por sus recomendaciones en la realización de este trabajo.

REFERENCIAS

- [1]. Freites, M., *Un Estudio Comparativo de Métodos Miméticos para la Ecuación Estacionaria de Difusión*. Trabajo Especial de Grado de Licenciatura no publicado, Escuela de Matemática, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela, Caracas, 2004.
- [2]. Shashkov, M., *Conservative Finite-Difference Methods on General Grids*. USA: CRC Press LLC, 1996.
- [3]. Castillo, J. and Grone, R., *A Matrix Analysis Approach to Higher-Order Approximations for Divergence and Gradients Satisfying a Global Conservation Law*. SIAM J. Matrix Anal. Appl., 25(1):128-142, 2003.
- [4]. Castillo, J. and M. Yasuda, *Linear Systems Arising for Second-Order Mimetic Divergence and Gradient Discretizations*. Journal on Mathematical Modelling and Algorithms, No. 4, pp 67-82, 2005.
- [5]. Hernández, F., *Estudio de los Sistemas Lineales Dispersos Provenientes de Diferentes Discretizaciones para un Operador de Convección-Difusión. Caso: Problema de Distribución de Potencial en una Región sin Carga*. Trabajo Especial de Grado de Maestría no publicado, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Bárbula, 2006.
- [6]. Fagundez, M., Medina, J., Cadenas, C. and Larrazábal, G., *Mimetic Discretizations for Computing Fluids Dynamics: One Dimensional Case*. Memorias del 7mo Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, 2004.
- [7]. Hernández, F., Castillo, J. and Larrazábal, G., *Large Sparse Linear Systems Arising from Mimetic Discretization*. Submitted to Computer & Mathematics with Applications. Elsevier Science, 2005.
- [8]. Freites, M., Guevara, J., Rojas, O., Castillo, J. and Rojas, S. *A Mimetic Finite Difference Scheme for Solving the Steady State Diffusion Equation With Singular Functions*. Memorias del 7mo Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, 2004.