

Esquemas WENO de alto orden en volúmenes finitos aplicados a problemas de convección-reacción-difusión.

R. CASTEDO¹, A. HIDALGO¹

¹ Dpto. de Matemática Aplicada y Métodos Informáticos, E.T.S.I. Minas-U.P.M., C/Alenza nº 4, E-28003 Madrid. E-mails: ricardo.castedo@upm.es, arturo.hidalgo@upm.es.

Palabras clave: Volúmenes finitos, Alto orden, ADER, WENO.

Resumen

En este artículo se trata de construir esquemas numéricos de orden arbitrario para la resolución de problemas que involucren mecanismos de convección-reacción-difusión en 1D. En los esquemas numéricos utilizados, se ha empleado para la reconstrucción temporal el método ADER, que constituye una reciente aproximación para la reconstrucción de alto orden de esquemas en volúmenes finitos (ver [5]).

Por otro lado, para la reconstrucción espacial de los polinomios de orden arbitrario, utilizaremos el método WENO [3]. En lo que se refiere a la obtención de flujos en las interfases entre volúmenes, en esta comunicación se utilizan diversas formas de obtener el flujo convectivo, como son G-FORCE [2, 3], RUSANOV [1], WAF-TVD (ver por ejemplo [2, 3]); y el difusivo, con una media aritmética de los flujos a izquierda y derecha de cada interfase (ver [4]). Además se comparan sus comportamientos en algunos casos test.

1. Esquema Numérico

En este apartado, se describe brevemente un esquema en volúmenes finitos para sistemas hiperbólicos no conservativos, dados, en su forma 1D (ver por ejemplo [2]):

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x, t)) = \mathbf{S}(x, t, \mathbf{U}(x, t)) \quad (1)$$

junto con condiciones iniciales y de contorno. Aquí $\mathbf{U}(x, t)$ es el vector incógnita de las variables conservativas, $\mathbf{F}(\mathbf{U}(x, t))$ es el vector del flujo físico y $\mathbf{S}(x, t, \mathbf{U}(x, t))$ es un término reactivo no lineal. El marco general de la formulación en volúmenes finitos que se va a emplear consiste en integrar la ecuación (1) en el volumen de control espacio-temporal $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$, resultando:

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x_i} [\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}] + \Delta t \mathbf{S}_i \quad (2)$$

con una dimensión espacial $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, y temporal $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$. Siendo \mathbf{U}_i^n la solución promedio en el instante t^n , $\mathbf{F}_{i+1/2}$ es el promedio en tiempo del flujo físico en $x_{i+1/2}$ y \mathbf{S}_i el promedio en tiempo y espacio del término reactivo sobre el volumen de control i :

$$\mathbf{U}_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{U}(x, t^n) dx, \mathbf{F}_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U}(x_{i+1/2}, t^n)) dt, \quad (3)$$

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{\Delta x_i} \frac{1}{\Delta t^n} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{S}(\mathbf{U}_i(x, t)) dx dt. \quad (4)$$

2. Método Numérico de Resolución

La aproximación ADER se usa para construir métodos de orden arbitrario con el fin de resolver el sistema de ecuaciones hiperbólicas (1), con o sin términos fuente (ver [2]). Esta aproximación consiste en 3 pasos principales:

1. Reconstrucción espacial, mediante una función polinómica a trozos, de valores puntuales, como son los $\mathbf{U}(x_{i+1/2}, t^n)$, que aparecen en las expresiones (2)-(3)-(4), a partir de los valores promedio en cada volumen de control \mathbf{U}_i^n . La técnica de resolución elegida para este trabajo es la conocida WENO, ver [3], debido a las buenas propiedades para evitar oscilaciones espúreas cercanas a frentes abruptos.
2. La reconstrucción realizada, conlleva la aparición de problemas de tipo DRP en cada interfase común a dos volúmenes de control y en cada paso de tiempo; así para un extremo genérico $x_{i+1/2}$, se tiene:

$$\left. \begin{array}{l} \text{EDP : } \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}(x, t, \mathbf{U}) \\ \text{CI : } \mathbf{U}(x, 0) = \begin{cases} \mathbf{u}_L(x) \equiv \mathbf{p}_i(x), x < x_{i+1/2}, \\ \mathbf{u}_R(x) \equiv \mathbf{p}_{i+1}(x), x > x_{i+1/2}. \end{cases} \end{array} \right\} \quad (5)$$

donde el término fuente es una función no lineal de \mathbf{U} . Nos centraremos de ahora en adelante en un problema escalar de convección-reacción-difusión, donde $F(U) = v(x)U(x, t) - K(x) \frac{\partial}{\partial x} U(x, t)$ y $S(x, t, U) = q(x)U(x, t)$. La solución del DRP (5) en $x_{i+1/2}$, se puede calcular siguiendo [2], obteniendo las expresiones de $U(x_{i+1/2}, \tau)$ y de $\frac{\partial}{\partial x} U(x_{i+1/2}, \tau)$ que dependen solamente de los parámetros físicos y de derivadas espaciales de la propia incógnita U .

Una vez obtenidos los valores anteriores, la determinación de los flujos convectivo y difusivo en el punto $x_{i+1/2}$, $F_{c_{i+1/2}}$ y $F_{d_{i+1/2}}$ respectivamente, se realiza aplicando la fórmula:

$$F_{c_{i+1/2}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} v(x_{i+1/2}, \tau) U(x_{i+1/2}, \tau) d\tau, \quad (6)$$

$$F_{d_{i+1/2}} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t^n}^{t^{n+1}} K(x_{i+1/2}, \tau) \frac{\partial}{\partial x} U(x_{i+1/2}, \tau) d\tau. \quad (7)$$

Finalmente, se obtiene el flujo total en $x_{i+1/2}$ como $F_{i+1/2} = Fc_{i+1/2} + Fd_{i+1/2}$.

Para obtener el flujo convectivo Fc se han utilizado los esquemas G-FORCE, RUSANOV (Lax-Friedrichs local - LLF) y WAF-SUPERBEE (versión TVD). Ver descripción y desarrollo en [2, 3], [1] y [2, 3] respectivamente; mientras que el flujo difusivo Fd se ha aproximado mediante la media aritmética de los flujos a la derecha y a la izquierda de cada extremo de volumen de control. Así, para $x_{i+1/2}$, se tiene:

$$Fd_{i+1/2} = \frac{1}{2}[F_{i+1/2}^R + F_{i+1/2}^L]. \quad (8)$$

3. Evaluación del término reactivo S_i , ecuación (4), integrando el desarrollo de Taylor en tiempo de la solución dentro de cada volumen (ver, por ejemplo, [2]).

3. Resultados Numéricos

3.1. Ecuación lineal de la advección

Vamos a resolver el problema presentado en [2, 3]:

$$u(x, t) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) = 0, & x \in (-1, 1), \quad t > 0, \\ \exp(-\ln 2(x + 0,7)^2/0,0009); & -0,8 \leq x \leq -0,6; \\ 1; & 0,4 \leq x \leq -0,2; \\ 1 - |10x - 1|; & 0,0 \leq x \leq 0,2; \\ (1 - 100(x - 0,5)^2)^{1/2}; & 0,4 \leq x \leq 0,6; \\ 0; & \text{en el resto del dominio } (-1, 1). \end{array} \right\} \quad (9)$$

y con condiciones de contorno periódicas.

Se ha utilizado un valor del número de Courant $Co = 0,4$, de manera análoga a lo realizado en [2, 3], donde se aplican los esquemas WENO de 5° orden para la reconstrucción espacial y TVD Runge-Kutta de 3° orden para la reconstrucción temporal.

Es fácil observar (ver figura 1) que el esquema con errores más pequeños y de más rápida convergencia, es el WENO-WAF (ver tabla 1), siendo el error unas tres veces más pequeño que en el esquema WENO-GFORCE (ver tabla 1). Sin embargo, el esquema de peor resolución es el WENO-RUSANOV (ver tabla 2).

3.2. Ecuación lineal con término reactivo

Vamos a resolver el problema de advección-reacción

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) = 5u(x, t), \quad x \in (-1, 1), \quad t > 0, \quad (10)$$

con la condición inicial [2]:

$$u(x, 0) = \sin^4(\pi x), \quad (11)$$

y con condiciones de contorno periódicas. Cuya solución exacta es una función de crecimiento rápido y está dada por:

$$u(x, t) = \sin^4(\pi(x - t)) e^{5t}. \quad (12)$$

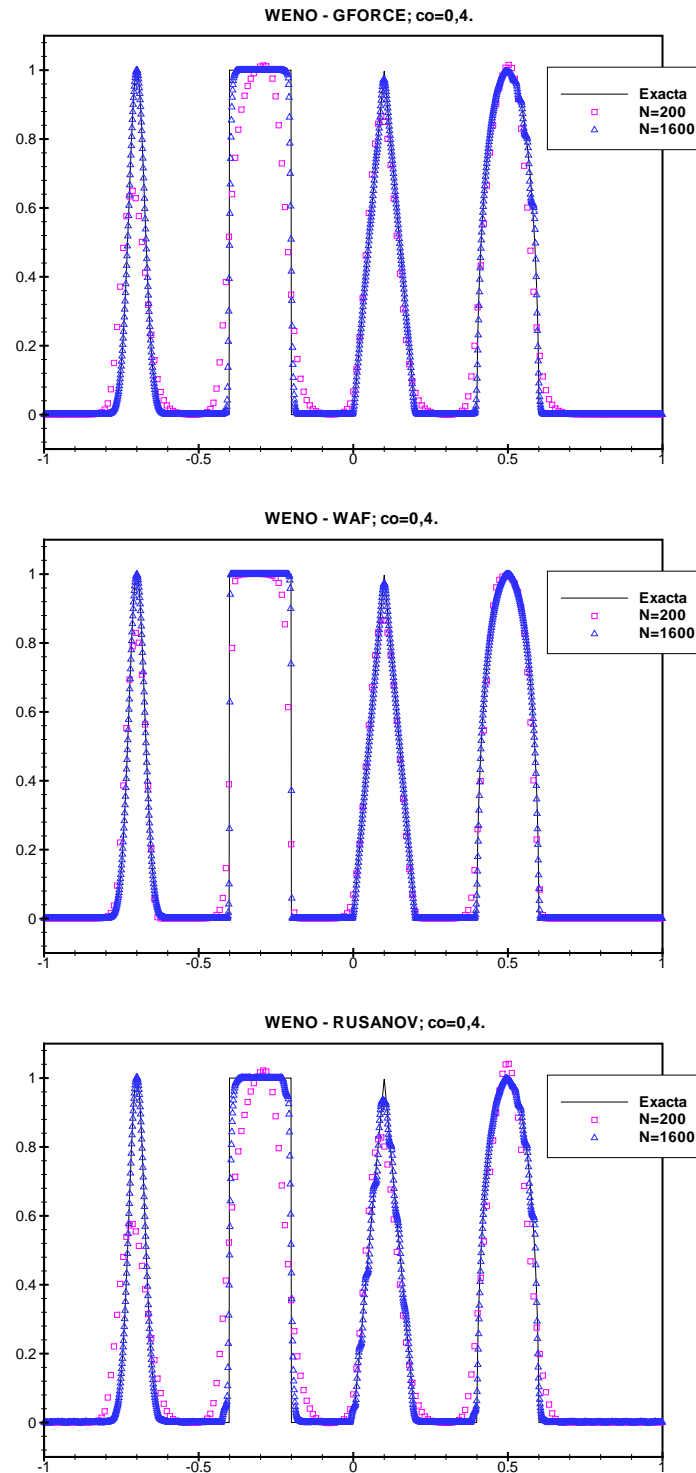


Figura 1: Soluciones exactas (líneas continuas) y aproximadas (símbolos), $Co=0.4$.

Esquemas WENO de alto orden en V.F.

<i>Esquemas</i>	<i>N</i>	<i>Calculado</i>		<i>Referencias</i>	
		L_1	r_1	L_1	r_1
<i>WENO – GFORCE</i>	200	$1,11 \times 10^{-1}$		$1,16 \times 10^{-1}$	
	400	$4,84 \times 10^{-2}$	1,19	$5,09 \times 10^{-2}$	1,19
	800	$2,37 \times 10^{-2}$	1,03	$2,45 \times 10^{-2}$	1,06
	1600	$1,26 \times 10^{-2}$	0,91	$1,65 \times 10^{-2}$	0,57
<i>WENO – WAF</i>	200	$4,84 \times 10^{-2}$		$7,58 \times 10^{-2}$	
	400	$2,19 \times 10^{-2}$	1,14	$3,50 \times 10^{-2}$	1,17
	800	$8,80 \times 10^{-3}$	1,31	$1,66 \times 10^{-2}$	1,07
	1600	$4,30 \times 10^{-3}$	1,03	$8,71 \times 10^{-3}$	0,93

$Co = 0,4$ y $t = 20$.

Tabla 1: Estudio de la convergencia para varios esquemas numéricos y su comparación con datos de la bibliografía [3].

<i>Esquemas</i>	<i>N</i>	<i>Calculado</i>	
		L_1	r_1
<i>WENO – RUSANOV</i>	200	$1,35 \times 10^{-1}$	
	400	$6,09 \times 10^{-2}$	1,14
	800	$3,31 \times 10^{-2}$	0,88
	1600	$2,07 \times 10^{-2}$	0,67

$Co = 0,4$ y $t = 20$.

Tabla 2: Estudio de la convergencia para el esquema numérico Rusanov.

<i>Esquemas</i>	<i>N</i>	<i>Calculado</i>		<i>Referencias</i>	
		L_1	r_1	L_1	r_1
<i>ADER3 – WAF</i>	10	$9,48 \times 10^3$		<i>ADER3</i>	$1,54 \times 10^5$
	20	$2,59 \times 10^3$	1,73		$3,19 \times 10^4$
	40	$1,83 \times 10^2$	3,69		$5,17 \times 10^3$
	80	$2,07 \times 10^1$	3,08		$9,14 \times 10^2$
	160	$2,23 \times 10^0$	3,19		$1,20 \times 10^2$
<i>ADER4 – WAF</i>	10	$6,35 \times 10^3$		<i>ADER4</i>	$3,99 \times 10^4$
	20	$9,68 \times 10^2$	2,52		$3,72 \times 10^3$
	40	$4,17 \times 10^1$	4,37		$4,48 \times 10^2$
	80	$2,38 \times 10^0$	4,06		$3,18 \times 10^1$
	160	$1,57 \times 10^{-1}$	3,88		$2,14 \times 10^{-1}$

$Co = 0,4$ y $t = 2$.

Tabla 3: Estudio de la convergencia para varios esquemas numéricos y su comparación con datos de la bibliografía [2].

Esquemas	N	Calculado			Calculado	
		L_1	r_1		L_1	r_1
ADER3–	10	$1,02 \times 10^4$		ADER3–	$1,01 \times 10^4$	
GFORCE	20	$3,20 \times 10^3$	1,56	RUSANOV	$3,82 \times 10^3$	1,30
	40	$2,31 \times 10^2$	3,65		$5,56 \times 10^2$	2,68
	80	$2,85 \times 10^1$	2,96		$6,00 \times 10^1$	3,15
	160	$3,23 \times 10^0$	3,11		$6,94 \times 10^0$	3,08

$Co = 0,4$ y $t = 2$.

Tabla 4: Estudio de la convergencia para los esquemas numéricos GFORCE y RUSANOV.

En la bibliografía con la que se comparan los resultados obtenidos [2], se utilizan los esquemas ADER clásicos de 3º y 4º orden, usando el limitador *Upwind*. En la *tabla 3* se muestra el estudio de convergencia con la norma de error L_1 . Los métodos ADER - WENO, operan con el orden de precisión designado en soluciones suaves como en este ejemplo. Se observa que los esquemas ADER3 clásicos funcionan peor que los ADER3-WAF (SUPERBEE), GFORCE o RUSANOV (*tabla 4*) del orden de unas 50 veces peor, aunque todos los esquemas tengan una convergencia de orden 3. Conviene resaltar que los esquemas ADER4 clásicos y los ADER4-WAF son similares en cuanto a los errores, sin embargo, para un mallado más grueso ($N = 10$ o $N = 20$) funciona ostensiblemente mejor el esquema WAF.

3.3. Problema de convección, reacción, difusión lineal: convergencia y aplicación práctica

Comprobada la validez de los métodos con términos convectivos y reactivos, se trata de ver cómo funcionan añadiendo fenómenos difusivos (existen escasas publicaciones al respecto). El flujo convectivo se obtiene mediante el esquema WENO-GFORCE de orden 5 mientras que el flujo difusivo y el término reactivo con una reconstrucción espacial centrada de orden 6.

La ecuación lineal a la que nos enfrentamos si tenemos términos convectivo-reactivo-difusivo, y parámetros físicos constantes, es:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + v \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) - K \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) = qu(x, t). \quad (13)$$

Para estudiar ratios de convergencia se propone el siguiente test:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + 1,5 \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) - 0,8 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) &= 3u(x, t), \quad -10 < x < 10, t > 0, \\ u(x, 0) &= e^{-x^2}, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

imponiendo condiciones de contorno periódicas. La solución exacta para este problema es:

$$u(x, t) = \frac{e^{3t}}{2\sqrt{0,8\pi t}} \int_{-10}^{10} e^{-(\xi^2)} e^{-\left(\frac{x-1,5t-\xi}{4 \cdot 0,8t}\right)^2} d\xi. \quad (15)$$

Con los datos obtenidos en este test y expuestos en la *tabla 5*, podemos decir, que el esquema con el que estamos trabajando es también de alto orden (orden 6), para problemas en que nos encontremos fenómenos de convección-reacción-difusión.

Esquemas	N	Calculado	
		L_1	r_1
WENO	10	$1,77 \times 10^2$	
	20	$4,28 \times 10^1$	1,90
	40	$7,27 \times 10^0$	2,47
	80	$1,41 \times 10^{-1}$	5,59
	160	$2,53 \times 10^{-3}$	5,75

$Co = 0,4$ y $t = 2$.

Tabla 5: Estudio de la convergencia para el problema test (14).

Como aplicación práctica se muestran los resultados numéricos de un ejemplo en el que la incógnita $u(x, t)$ es la concentración de una sustancia que discurre por un medio geológico poroso y saturado mediante mecanismos de convección - dispersión (difusión) y además, tiene un aporte externo y proporcional a su propia concentración $u(x, t)$. Se va a variar el valor del coeficiente de difusión K , con el objetivo de ver su efecto.

$$\left. \begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) + 0,1 \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) - K \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) = 0,1 u(x, t), \quad x \in [-10, 10], \\ u(x, 0) &= \begin{cases} u_L = 5 & \text{si } x < 0, \\ u_R = 0,5 & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

con un $co = 0,4$, e imponiendo condiciones de contorno tipo Dirichlet:

$$\begin{cases} u(-10, t) = 5 e^{0,1t}, \\ u(10, t) = 0,5 e^{0,1t}. \end{cases} \quad (17)$$

Siendo la solución exacta de este problema:

$$u(x, t) = \frac{e^{0,1t}}{2\sqrt{K\pi t}} \left[\int_{-10}^0 5e^{(-\frac{(x-0,1t-\xi)^2}{4\cdot kt})} d\xi + \int_0^{10} 0,5e^{(-\frac{(x-0,1t-\xi)^2}{4\cdot kt})} d\xi \right]. \quad (18)$$

El paso espacial considerado es $\Delta x = \frac{1}{15}$ mientras que el paso de tiempo se calcula, por razones de estabilidad, a partir del número de Courant ($co = 0,4$) y de un parámetro de difusión ($\alpha = 0,4$), como $\Delta t = \min(co \frac{\Delta x}{0,1}, \alpha \frac{\Delta x^2}{K})$. En la figura 2 se muestra la evolución que tendrá el frente abrupto que se propone como condición inicial al cabo de un tiempo $t = 10$. Debido al efecto de la reacción, las concentraciones de $u(x, t)$ a lo largo del tiempo han ido aumentando, desde los valores iniciales de 5 y 0,5. Es inmediato observar que a medida que la difusión aumenta el salto ya no es tan abrupto, y por tanto, que la concentración de sustancia tiende a suavizarse más en el mismo tiempo de simulación.

4. Conclusiones

Los resultados numéricos presentados para los esquemas WENO-GFORCE, WENO-RUSANOV y WENO-WAF, sugieren que es posible alcanzar alto orden de precisión para soluciones suaves y producir perfiles esencialmente no oscilatorios para discontinuidades. Además se observan mejoras significantes en la precisión según aumentamos el orden del

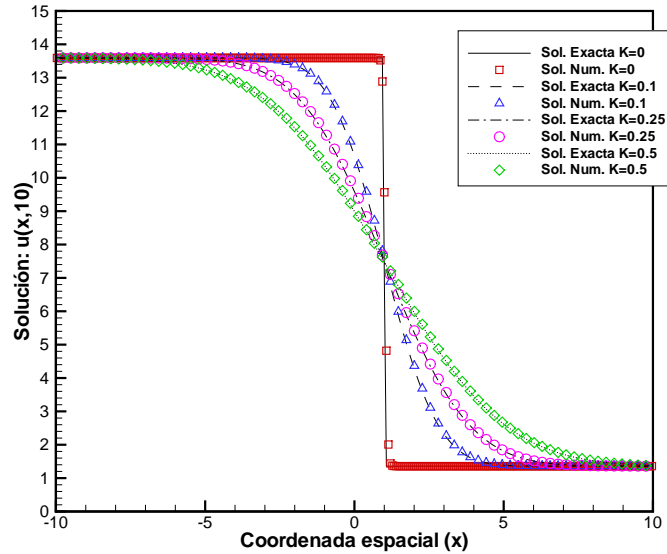


Figura 2: Soluciones exactas (líneas) y aproximadas (símbolos), para distintos valores de K y un tiempo $t = 10$, con un mallado formado por 300 celdas.

esquema y también una mejora en el cambio de flujos centrados (GFORCE y RUSANOV), a flujos *Upwind* (WAF). En cuanto al esquema de reconstrucción temporal ADER, los ejemplos presentados en este trabajo ilustran el alto orden alcanzado y sus propiedades esencialmente no oscilatorias, mejorando métodos clásicos como el Runge-Kutta.

Como líneas futuras, se propone la generalización a 2D y 3D, así como la resolución de sistemas, especialmente hiperbólicos, como es el caso de las ecuaciones de Euler o las de Navier-Stokes, además de aplicaciones en Ingeniería Geológica.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado como parte de la tesis doctoral del primer autor, becario de la UPM dentro del programa "Ayudas en el marco del programa propio del personal investigador en formación para la realización del doctorado en sus Departamentos e Institutos (RR01/2007)", contando siempre con la tutela y supervisión del segundo autor profesor titular del departamento de Matemática Aplicada y Métodos Informáticos de la E.T.S.I Minas (UPM).

Referencias

- [1] R.J. LeVeque, *Finite volume methods for conservation laws*, Cambridge University Press, 2002.
- [2] V.A. Titarev, *Derivative Riemann problem and ADER schemes*, PhD Thesis, Trento - Italia, 2005.
- [3] V.A. Titarev and E.F. Toro, *WENO schemes based on upwind and centred TVD fluxes*, Computers & Fluids, Volume 34, 2005, Pages 705-720.
- [4] E.F. Toro and A. Hidalgo, *ADER finite volume schemes for nonlinear reaction-diffusion equations*, Applied Numerical Mathematics, Volume 59, Issue 1, January 2009, Pages 73-100.
- [5] E.F. Toro and V.A. Titarev, *Solution of the generalized Riemann problem for advection-reaction equations*, Proc. Roy. Soc. London, 458 (2018): 271-281, 2002.