Rev. int. métodos numér. cálc. diseño ing. 2014;**30(1)**:60–67

Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería

www.elsevier.es/rimni

Esquema adaptativo para problemas tridimensionales de convección-difusión

L. Monforte y A. Pérez-Foguet*

Universitat Politècnica de Catalunya – BarcelonaTech, Laboratorio de Cálculo Numérico, Departamento de Matemática Aplicada III, Jordi Girona 1-3, 08034, Barcelona, España

INFORMACIÓN DEL ARTÍCULO

Historia del artículo:
Recibido el 23 de diciembre de 2011
Aceptado el 20 de noviembre de 2012
On-line el 8 de julio de 2013

Palabras clave:
Ecuaciones de transporte
Estabilización por mínimos cuadrados
Coste computacional
Precisión
Indicador de error
Transporte de contaminantes

RESUMEN

Se presenta un esquema adaptativo para problemas tridimensionales de convección-difusión discretizados mediante el Método de Elementos Finitos. El esquema adaptativo incluye una estrategia de remallado basada en la imposición de un volumen máximo de los elementos a partir de una malla de referencia. El remallado permite aumentar o disminuir drásticamente el tamaño de los elementos en un solo paso, de forma automática. Se mantiene una calidad de la malla adecuada; y, como consecuencia, el número de iteracciones necesarias para solucionar el sistema de ecuaciones lineales mediante algoritmos iterativos se mantiene constante. Se presentan 2 ejemplos de características muy distintas que permiten analizar la propuesta para un amplio rango de situaciones. Uno es una extensión tridimensional del problema de Smolarkiewicz y el otro es una versión simplificada del problema de transporte de contaminación emitida por un emisor puntual. Los resultados muestran la flexibilidad de la propuesta. Es posible encontrar un valor óptimo de frecuencia de remallado, desde el punto de vista de coste computacional y precisión de los resultados, para ambas tipologías extremas de problemas.

Adaptive scheme for three-dimensional convection – diffusion problems

Keywords:
Transport equations
Least-square stabilization
Computational cost
Accuracy
Error indicator
Pollutant transport

ABSTRACT

We present an adaptive scheme for three-dimensional convection-diffusion problems discretized by the Finite Element Method. The adaptive scheme is based on a remeshing strategy that applies a maximum volume constraint to the elements of a reference mesh. The remeshing can increase or decrease drastically the size of the elements in a single step automatically. With this strategy, the mesh quality does not deteriorate; as a consequence, the number of iterations required to solve the system of linear equations using iterative algorithms is kept constant. Two examples of very different characteristics are presented in order to analyze the proposal for a wide range of situations. The first is a three-dimensional extension of the Smolarkiewicz problem and the second is a simplified version of a point source pollutant transport problem. The results show the flexibility of the proposal. An optimal remeshing frequency, from a computational cost and accuracy of the results point of view, can be defined for both kinds of problems.

1. Introducción

Los esquemas adaptativos se emplean para resolver numéricamente ecuaciones en derivadas parciales con discretizaciones diseñadas para minimizar o controlar el error de la solución. Mediante la adaptatividad de la discretización espacial se puede ajustar la precisión de la solución numérica según se requiera, optimizando las necesidades de memoria motivadas por el tamaño del sistema de ecuaciones a resolver. Los esquemas adaptativos requieren un indicador o estimador del error que cuantifique la necesidad de incrementar o disminuir la densidad de la discretización, así como una estrategia de remallado eficiente [1].

Uno de los esquemas de remallado más habituales es la bisección de elementos [2–4], que consiste en insertar nodos nuevos en las aristas, las caras o el interior de los elementos que tengan una medida del error superior a una tolerancia. Este algoritmo se aplica de forma recursiva, dividiendo sucesivamente los elementos en un número prefijado de elementos en su interior. La calidad de los nuevos elementos creados es ligeramente inferior a la de los de la malla anterior, pudiendo aparecer elementos de mala calidad

* Autor para correspondencia.
Correo electrónico: agusti.perez@upc.edu (A. Pérez-Foguet).

0213-1315/$ – see front matter © 2011 CIMNE (Universitat Politècnica de Catalunya). Publicado por Elsevier España, S.L. Todos los derechos reservados.
http://dx.doi.org/10.1016/j.rimni.2012.11.003

en la frontera de las zonas que se deben refinar y las que no [5,6], especialmente en geometrías complejas o donde la variación fijada del tamaño de los elementos es grande. La disminución de la calidad de la malla provoca el mal condicionamiento de los sistemas lineales que aparecen al resolver el problema, cosa que a su vez hace que sean necesarias más iteraciones para converger cuando se resuelven estos sistemas mediante esquemas iterativos [7,8]. La pérdida de calidad de la malla puede solventarse recolocando los nodos de la discretización mediante técnicas de suavizado [9,10]. Existen métodos que permiten mejorar la calidad de la malla manteniendo el tamaño de los elementos [11]. Sin embargo, al emplear suavizados se pierde una de las ventajas principales de los métodos de bisección que es la facilidad de proyección de la solución entre mallas sucesivas.

Otra técnica de remallado, típicamente empleada para generar elementos anisotrópicos, consiste en generar una nueva malla basándose en una métrica definida a partir del estimador o indicador del error [12]. Se genera la malla de forma que el error presente una distribución uniforme, tomando como criterio de medida la métrica definida. Esta estrategia ha sido utilizada en problemas de convección-difusión para generar mallas de cuadriláteros en problemas bidimensionales [13,14] o tetraedros en tridimensionales [15].

En este trabajo se propone utilizar un esquema de remallado de este segundo tipo, de forma que se pueda aumentar y disminuir drásticamente, en un solo remallado, la densidad de elementos donde se considere necesario, manteniendo mallas de cálculo de buena calidad. El esquema adaptativo se utiliza para resolver problemas tridimensionales de convección-difusión lineales, discretizados mediante el Método de los Elementos Finitos. En la siguiente sección se introduce el problema matemático, la estrategia de resolución numérica y el esquema adaptativo. Posteriormente, se describe la estrategia de remallado y su aplicación a 2 ejemplos: una extensión tridimensional del problema de Smolarkiewicz [16] y una versión simplificada del problema de transporte de contaminación emitida por un emisor puntual [4]. Los 2 ejemplos tienen soluciones con características muy diferentes. En el primer caso la solución presenta grandes y crecientes variaciones en una zona acotada del dominio. En el segundo la solución tiene variaciones más suaves, pero valores de interés varios órdenes de magnitud inferiores a los impuestos en las condiciones de contorno y se traslada a lo largo del dominio. Se finaliza destacando las principales conclusiones del estudio.

2. Esquema adaptativo

Se considera el siguiente problema genérico de convección-difusión:

$$\begin{cases} \partial_t u + \mathbf{a}\cdot\nabla u - \nabla\cdot(\mathbf{D}\cdot\nabla u) = s & \text{en } \Omega\times(0,T) \\ u(\mathbf{x},0) = u_0(\mathbf{x}) & \text{en } \Omega \\ \mathcal{M}u = 0 & \text{en } \partial\Omega\times(0,T) \end{cases} \tag{1}$$

donde $\mathbf{a}$ es la velocidad advectiva, $\mathbf{D}$ es el tensor de difusiones, s el témino fuente y $\mathcal{M}$ las condiciones de contorno, que deben cumplir las condiciones de regularidad necesarias, véase Verfurth [17].

El problema se integra en el tiempo mediante el esquema de Crank-Nicolson. La discretización espacial se realiza con Elementos Finitos estabilizados mediante la formulación de Mínimos Cuadrados [18]. El sistema lineal de ecuaciones se resuelve mediante Gradientes Conjugados Precondicionados con una factorización incompleta de Cholesky [19,20].

En el algoritmo 1 se presenta la propuesta, siendo $\mathbf{u}_n$ el vector que contiene la solución en los nodos en el instante $t_n = n\Delta t$ con $\Delta t = m\delta t$. El esquema adaptativo se aplica únicamente a la discretización espacial, manteniendo constante el paso de tiempo δt. El valor de m es el número de pasos de tiempo que se calculan con una misma malla de cálculo. Se remalla cada Δt.

Habitualmente los esquemas recalculan la solución de cada bloque de pasos de tiempo, hasta que el indicador o el estimador de error de la solución o la sucesión de mallas generadas cumplen un determinado criterio de convergencia [21,22]. Los esquemas que no recalculan la solución tienden a acumular más error en la solución [15], en cambio, presentan un coste computacional más reducido. En el esquema propuesto se propone no recalcularla, a excepción del primer bloque de pasos de tiempo. Esta estrategia es adecuada si es la primera malla de cálculo la que determina los resultados posteriores o si la variación espacial de la solución entre remallados no es muy elevada. En otras situaciones puede ser conveniente incorporar el recálculo y la verificación de la convergencia para cada Δt.

Algoritmo 1. Esquema adaptativo

while No convergencia **do**
  Calcular $[0, \Delta t]$ (m pasos de δt)
  Remallar
end while
Interpolar
Guardar $\mathbf{u}_1$
$i = 1$
while $i\Delta t < T$ **do**

Calcular $[i\Delta t, (i+1)\Delta t]$ (m pasos de δt)
Remallar
Interpolar
Guardar $\mathbf{u}_{(i+1)}$
$i = i + 1$
end while

La malla de cálculo inicial se utiliza como malla de referencia a lo largo de todo el problema. Es una discretización muy poco densa, comparada con las de cálculo posterior, establecida fundamentalmente con criterios de representación geométrica del dominio. Puede incluir información sobre la solución y su evolución si se dispone de ella.

Tras la convergencia del primer bloque de pasos de tiempo de cálculo, en los siguientes se calcula la solución, se aproxima el error, se genera una nueva malla y se interpola la solución a la nueva malla.

El error se aproxima mediante un indicador del error. En la literatura se encuentran distintos indicadores de error para problemas de convección-difusión [23]; por ejemplo, el valor de la propia solución, su gradiente [4] o su curvatura [24]. La elección es más crítica en esquemas r-adaptativos que en esquemas h-adaptativos, como el planteado en esta propuesta [25]. En los primeros, el indicador de error actúa como criterio en un proceso de optimización que busca el mínimo de error para un número de grados de libertad fijado. Sin embargo, en los segundos se incorporan nuevos grados de libertad con el fin de que la precisión de los resultados aumente. Los primeros están más condicionados, por lo que requieren que el indicador sea más preciso.

Los indicadores definidos a partir del gradiente o de la máxima diferencia de la solución en los elementos son habituales; por ejemplo:

$$\eta_e = \|\nabla u\|_{\Omega^e} \tag{2}$$

siendo $\|\cdot\|_{\Omega^e}$ la norma de $\cdot$ en los elementos Ω^e. Este tipo de indicadores tienden a producir mallas refinadas donde el gradiente de la solución aproximada es mayor. Esto es útil en diversos problemas, por ejemplo en los que se quiere localizar una capa límite [26], pero no para otros. En problemas de calidad de aire con emisores