

UNIVERSITATEA "OVIDIUS" DIN CONSTANȚA  
ȘCOALA DOCTORALĂ DE ȘTIINȚE APLICATE  
DOMENIUL DE DOCTORAT MATEMATICĂ

TEZĂ DE DOCTORAT  
REZUMAT

TEHNICI DE DISCRETIZARE ȘI  
PRECONDITIONARE CU  
APLICAȚII LA PROBLEMELE DE  
DIFUZIE MULTICOMPONENTĂ

Conducător de doctorat  
Prof. univ. dr. Constantin POPA

Student-doctorand  
Elena-Gabriela STROILĂ (CURCĂ)

CONSTANȚA, 2014

# Cuprins

|                                                                                  |           |
|----------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| Introducere                                                                      | 2         |
| <b>1 Preliminarii</b>                                                            | <b>5</b>  |
| <b>2 Probleme de difuzie-reacție multicomponentă, staționare</b>                 | <b>5</b>  |
| 2.1 Formularea problemei . . . . .                                               | 6         |
| 2.2 Metode numerice . . . . .                                                    | 7         |
| 2.2.1 Discretizarea problemei . . . . .                                          | 7         |
| 2.2.2 Algoritmi numerici iterativi . . . . .                                     | 7         |
| 2.2.3 Tehnici de preconditionare . . . . .                                       | 8         |
| 2.3 Rezultate numerice . . . . .                                                 | 13        |
| 2.4 Concluzii . . . . .                                                          | 14        |
| <b>3 Probleme de difuzie-convecție-reacție multicomponentă, staționare</b>       | <b>14</b> |
| 3.1 Formularea problemei . . . . .                                               | 14        |
| 3.2 Metode numerice . . . . .                                                    | 16        |
| 3.2.1 Discretizarea problemei . . . . .                                          | 16        |
| 3.2.2 Algoritmi numerici iterativi . . . . .                                     | 17        |
| 3.2.3 Tehnici de preconditionare . . . . .                                       | 18        |
| 3.3 Rezultate numerice . . . . .                                                 | 19        |
| 3.4 Concluzii . . . . .                                                          | 20        |
| <b>4 Probleme de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare</b>     | <b>20</b> |
| 4.1 Formularea problemei . . . . .                                               | 20        |
| 4.2 Metode numerice . . . . .                                                    | 21        |
| 4.2.1 Discretizarea problemei . . . . .                                          | 21        |
| 4.2.2 Algoritmi numerici iterativi . . . . .                                     | 22        |
| 4.3 Analiza pozitiv definirii unor clase de matrice bloc triunghiulare . . . . . | 23        |
| 4.3.1 Pozitiv definirea unor clase de matrice bloc de ordin $3n$ reale . . . . . | 23        |
| 4.3.2 Pozitiv definirea unor clase de matrice bloc de ordin $4n$ reale . . . . . | 24        |
| 4.4 Concluzii . . . . .                                                          | 26        |
| <b>Concluzii finale și dezvoltări viitoare</b>                                   | <b>27</b> |

# Introducere

Fenomenul de transfer de masă, în multe procese din viața cotidiană și inginerie, guvernează adesea cinetica întregului proces. O modelare precisă a transferului de masă este, prin urmare, necesară, oportună, și în principal posibilă, în cazul sistemelor multicomponentă. Din aceste motive, difuzia multicomponentă a dobândit un interes crescut în ultimele decenii.

Pentru a descrie difuzia mutuală în sistemele multicomponentă se utilizează cu precădere, în literatura de specialitate, două abordări [4][19]: legea generalizată a lui Fick și teoria Stefan-Maxwell [13][17]. Cele două formulări sunt echivalente. Mai multe detalii sunt prezentate în lucrările [2], [10], [11], [15], [20]. Trebuie precizat că, într-un amestec multicomponentă, difuzia unei specii chimice nu este dictată doar de gradientul concentrației sale ci și de gradientii concentrațiilor celorlalte specii.

În urma unei analize a cercetărilor din domeniu, în această teză ne-am propus:

- dezvoltarea unei strategii de investigare care să evidențieze clar influența interacțiunii prin difuzie și numărul de specii chimice implicate în proces, asupra vitezei de convergență a algoritmilor numerici;

- dezvoltarea unor tehnici de preconditionare specifice pentru sistemele algebrice obținute în cazul problemelor de transfer de masă multicomponentă, care vor fi folosite în cadrul metodelor iterative proiective pe un subspațiu Krylov (cunoscute și ca metode de tip gradient conjugat): BiCGSTAB și GMRES;

- folosirea metodelor multigrid (MG) (pentru cazul problemelor liniare/nelineare) și Picard modificată (pentru cazul problemelor neliniare) la rezolvarea problemelor de difuzie multicomponentă;

- aplicarea metodei splitting la rezolvarea problemelor de difuzie multicomponentă nestaționare (probleme în care apare și timpul ca variabilă).

Forma generală a sistemelor de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II, care modelează problemele de transfer de masă multicomponentă abordate în teză, este dată de următorul sistem

$$\frac{\partial Z_i}{\partial \tau} + \epsilon Pe u(y) \frac{\partial Z_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^p \left( \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x} (D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial y}) \right) + k_i Z_i, \quad i = \overline{1, p},$$

$$(x, y) \in (0, 1) \times (0, 1), \quad \tau \in (0, T_{final}).$$

Necunoscutele  $Z_i$  reprezintă concentrațiile adimensionale ale speciilor chimice. Primul termen din membrul drept modelează fenomenul de transfer de masă prin difuzie. Funcțiile  $D_{ij}(x, y)$  reprezintă coeficienții de difuzie multicomponentă Fick și prin intermediul lor este exprimată interacțiunea prin difuzie dintre speciile chimice implicate în proces. Al doilea termen din membrul stâng modelează fenomenul de transfer de masă prin convecție, când amestecului îi este imprimată o viteză de curgere. Numărul Peclet  $Pe$  crează un ba-

lans între fenomenul de difuzie și cel de convecție. Dacă  $Pe \gg 1$  dominant este fenomenul de convecție. În caz contrar, dacă  $Pe \ll 1$  dominant devine fenomenul de difuzie. Termenul al doilea din membrul drept reprezintă termenul de reacție. Acesta modelează reacțiile chimice dintre specii. Termenul  $\frac{\partial Z_i}{\partial \tau}$  exprimă dependența de timp a transferului de masă.[21]

Teza este structurată în patru capitole.

**Capitolul 1 Preliminarii** prezintă câteva noțiuni și concepte de bază de algebră liniară și analiză numerică folosite pe parcursul lucrării.

În **Capitolul 2** abordăm rezolvarea, prin metode numerice, a unor probleme de difuzie-reacție multicomponentă liniare și neliniare, staționare. Aceste probleme sunt modelate prin sisteme de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II.

Contribuția proprie constă în:

- selectarea metodelor numerice adecvate pentru rezolvarea unor astfel de probleme;

- construirea unei matrice de preconditionare bazate pe un singur tip de bloc diagonal, ce poate fi folosită în cadrul tehnicilor de preconditionare pentru sistemele algebrice obținute în urma discretizării problemelor de difuzie-reacție multicomponentă, pentru îmbunătățirea performanțelor algoritmilor iterativi GMRES restartat și BiCGSTAB; am analizat din punct de vedere teoretic caracterul de bun preconditioner al matricei de preconditionare propuse;

- analiza influenței interacțiunii prin difuzie, dintre speciile chimice, asupra performanțelor algoritmilor numerici folosiți; în cadrul testelor numerice am folosit mai multe seturi de valori pentru parametrii problemei.

În **Capitolul 3** abordăm rezolvarea, prin metode numerice, a unor probleme de difuzie-convecție-reacție multicomponentă liniare și neliniare, staționare. Aceste probleme sunt modelate prin sisteme de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II.

Contribuția proprie constă în:

- selectarea metodelor numerice adecvate pentru rezolvarea unor astfel de probleme;

- construirea unei matrice de preconditionare bazate pe un singur tip de bloc diagonal, ce poate fi folosită în cadrul tehnicilor de preconditionare pentru sistemele algebrice obținute în urma discretizării problemelor de difuzie-convecție-reacție multicomponentă, pentru îmbunătățirea performanțelor algoritmului iterativ GMRES restartat; la construirea matricei am ținut cont și de termenul convectiv al problemei;

- analiza influenței interacțiunii prin difuzie, dintre speciile chimice cât și influența fenomenului de convecție, asupra performanțelor algoritmilor numerici folosiți; în cadrul testelor numerice am folosit mai multe seturi de valori pentru parametrii problemei.

În **Capitolul 4** abordăm rezolvarea, prin metode numerice, a unor probleme de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare, adică carac-

terizarea unor procese de difuzie-convecție evolutive în timp. Aceste probleme sunt modelate prin sisteme de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II, în care apare, pe lângă derivatele variabilelor spațiale, și derivata de ordinul I în raport cu timpul.

Contribuția proprie constă în:

- proponerea unei descompuneri a operatorului spațial în cadrul metodei splitting folosită la rezolvarea acestei clase de probleme;
- determinarea unor condiții suficiente ce trebuie îndeplinite pentru a putea fi asigurată stabilitatea metodei splitting.

Rezultatele originale prezentate în această teză sunt cuprinse în următoarele lucrări:

- Gh. Juncu, A. Nicola, C. Popa, E. Stroilă, *Preconditioned conjugate gradient and multigrid methods for numerical solution of multicomponent mass transfer equations I. Diffusion-reaction-equations*, Numer. Heat Transfer A 66 (11) pp. 1268-1296, 2014, Impact Factor - 1.80. [7]
- Gh. Juncu, A. Nicola, C. Popa, E. Stroilă, *Preconditioned conjugate gradient and multigrid methods for numerical solution of multicomponent mass transfer equations II. Convection-diffusion-reaction equations*, Numer. Heat Transfer A 66 (11) pp. 1297-1319, 2014, Impact Factor - 1.80. [8]
- E. Stroilă, *Splitting method for multicomponent mass transfer equations*, in Topics in Mathematical Modelling of Life Science Problems - Proceedings of the ninth workshop, Editura Matrix Rom, Bucuresti, pp. 77-91, 2013. [18]

## Mulțumiri

Doresc să mulțumesc domnului prof. univ. dr. Constantin Popa, conducătorul științific al tezei mele de doctorat, pentru permanenta îndrumare științifică și sprijinul acordat pe tot parcursul studiilor doctorale, cât și în elaborarea acestei teze.

Mulțumesc de asemenea domnului prof. univ. dr. Gheorghe Juncu din cadrul Universității Politehnica din București pentru sprijinul acordat pe parcursul stagiului de cercetare.

De asemenea, doresc să mulțumesc domnilor profesori cu care am colaborat din cadrul Facultății de Matematică și Informatică a Universității Ovidius din Constanța, cât și conducerii și colegilor din cadrul Centrului de Cercetare Științifică pentru Forțele Navale, Constanța pentru susținerea și sprijinul acordat.

Mulțumesc Comisiei de Îndrumare pentru sfaturi și timpul acordat.

## 1 Preliminarii

Capitolul 1 prezintă:

- câteva noțiuni și concepte de bază de algebră liniară și analiză matriceală folosite pe parcursul lucrării: definițiile produsului scalar canonic și a normei euclidiene din  $\mathbb{R}^n$ , descompuneri matriceale, proprietăți spectrale ale matricelor pătratice, produsul Kronecker (1.1 Noțiuni introductive de analiză matriceală);
- modalități de aproximare a operatorilor diferențiali în cadrul metodei schemelor cu diferențe finite aplicate la discretizarea problemelor de difuzie multicomponentă (1.2 Scheme cu diferențe finite);
- metodele de rezolvare a problemelor neliniare discrete (1.3 Metoda multi-grid neliniar, 1.4 Metoda Picard modificată);
- metodele iterative proiective folosite la rezolvarea sistemelor algebrice liniare obținute în cadrul unui pas al metodei Picard modificată, sau în cazul problemelor liniare - GMRES și BiCGSTAB (1.5 Metode iterative proiective);
- metoda splitting folosită la rezolvarea problemelor de difuzie multicomponentă nestaționare și condițiile de stabilitate ale metodei (1.6 Metoda splitting);
- conceptului de preconditionare și tehnici generale de preconditionare a sistemelor algebrice liniare (1.7 Prezentare generală a tehnicilor de preconditionare).

## 2 Probleme de difuzie-reacție multicomponentă, staționare

Rezultatele prezentate în acest capitol au fost publicate în [7].

## 2.1 Formularea problemei

Considerăm o reacție chimică complexă de ordinul I, izotermă, care are loc într-o particulă catalizator de tip placă plană cu secțiune pătrată.

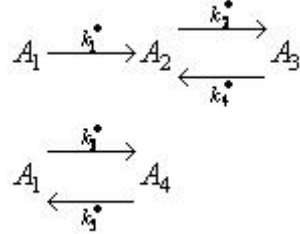


Figura 1: Schema reacției chimice

Rezistența la transportul interfazic este considerată neglijabilă (valorile concentrațiilor pe suprafața exterioară a particulei catalizator sunt la fel ca cele din interior). Considerând particula un mediu poros și omogen și concentrația totală a amestecului constantă, profilul concentrațiilor adimensionale ale speciilor chimice implicate în reacție, în starea staționară, în interiorul particulei catalizator, este dat de următorul sistem de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II

$$\sum_{j=1}^4 \left( \frac{\partial}{\partial x} D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial y} \right) + R_i = 0, \quad i = \overline{1, 4}, \quad (1)$$

$$(x, y) \in \Omega = (0, 1) \times (0, 1)$$

unde

$$R_1 = -k_1 Z_1 - k_3 Z_1 + k_5 Z_4, \quad R_2 = k_1 Z_1 - k_2 Z_2 + k_4 Z_3,$$

$$R_3 = k_2 Z_2 - k_4 Z_3, \quad R_4 = k_3 Z_1 - k_5 Z_4,$$

$Z_i = \frac{A_i}{A_{1b}}$  sunt concentrațiile adimensionale,  $A_{1b}$  este concentrația molară totală a speciei  $A_1$ ,  $k_i = \frac{k_i^* L^2}{D_{ref}}$  sunt vitezele de reacție adimensionale,  $L$  este lungimea secțiunii pătrate,  $D_{ij}(x, y)$  sunt coeficienții Fick de difuzie multicomponentă raportați la coeficientul de difuzie de referință  $D_{ref}$ . Pentru sistemele de difuzie-reacție poate fi folosit cadrul mediei molare. Condițiile pe frontieră sunt:

$$Z_1 = 1, \quad Z_i = 0, \quad i = 2, 3, 4 \quad (x, y) \in \partial\Omega \quad (2)$$

Modelul matematic prezentat reprezintă cazul neliniar al problemei de difuzie-reacție abordate. Cazul problemei liniare se obține din cazul neliniar considerând coeficienții Fick, de difuzie multicomponentă, constanți.

## 2.2 Metode numerice

### 2.2.1 Discretizarea problemei

Derivatele spațiale ale ecuațiilor (1) au fost discretizate folosind scheme cu diferențe finite simetrice, de ordinul 2 de aproximare, pe o grilă uniformă cu  $N \times N$  puncte

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1, \quad x_k = (k-1)h;$$

$$0 = y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N = 1, \quad y_l = (l-1)h, \quad k, l = \overline{0, N},$$

unde  $h = \frac{1}{(N-1)}$  mărimea pasului grilei. Aproximația discretă obținută pentru ecuațiile (1) este

$$\sum_{j=1}^4 \left[ \frac{D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l}(Z_j^{k+1,l} - Z_j^{k,l}) - D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l}(Z_j^{k,l} - Z_j^{k-1,l})}{h^2} + \frac{D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}}(Z_j^{k,l+1} - Z_j^{k,l}) - D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}(Z_j^{k,l} - Z_j^{k,l-1})}{h^2} \right] + R_i^{k,l} = 0, \quad i = \overline{1,4} \quad (3)$$

Valorile coeficienților de difuzie au fost calculate ca medie aritmetică a valorilor din punctele grilei.

Modalitatea de calcul a valorilor coeficienților Fick din punctele grilei este prezentată în cadrul tezei în Secțiunea 2.1. Formula de derivare folosită în cazul termenilor  $\frac{\partial}{\partial x} D_{ij}(x, y) \frac{\partial Z_j}{\partial x}$  și  $\frac{\partial}{\partial y} D_{ij}(x, y) \frac{\partial Z_j}{\partial y}$  este următoarea formulă de aproximare de ordinul 2 [16] pg. 50:

$$\frac{d}{dx} \left[ a(x) \frac{d}{dx} \right] \approx \frac{a_{i+\frac{1}{2}}(u_{i+1} + u_i) - a_{i-\frac{1}{2}}(u_i + u_{i-1})}{h^2}. \quad (4)$$

Aproximarea discretă a problemei liniare este

$$\sum_{j=1}^4 D_{ij} \frac{Z_j^{k+1,l} + Z_j^{k-1,l} + Z_j^{k,l+1} + Z_j^{k,l-1} - 4Z_j^{k,l}}{h^2} + R_i^{k,l} = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (5)$$

unde  $\frac{Z_j^{k+1,l} + Z_j^{k-1,l} + Z_j^{k,l+1} + Z_j^{k,l-1} - 4Z_j^{k,l}}{h^2}$  reprezintă expresia operatorului laplace discret. În acest caz coeficienții Fick de difuzie multicomponentă  $D_{ij}$  sunt constanți.

### 2.2.2 Algoritmi numerici iterativi

Două metode numerice folosite pentru rezolvarea cazului nelinier au fost folosite: metoda multigrid (MG) nelinier [1] [9] și metoda Picard modificat [12]. Algoritmul MG nelinier folosit este algoritmul FAS (Full Approximation Storage) [1][9] adecvat pentru ambele cazuri liniar și nelinier.

Structura unui ciclu MG este: 1) ciclu de tip V; 2) doi pași de netezire înainte de corecția de pe grila rară și una după aceasta; 3) prelungirea prin interpolare biliniară pentru corecții; 4) restricția reziduurilor prin ponderare completă. Două metode de netezire au fost testate: PGS (point Gauss-Seidel) și ALGS (alternating line Gauss-Seidel).

Metoda Picard modificată, numită și metoda punctului fix, pentru problema (3) este dată de relațiile

$$\begin{aligned} A(Z^m)\delta Z^{m+1} &= b(Z^m) - A(Z^m)Z^m \\ Z^{m+1} &= Z^m + \delta Z^{m+1} \end{aligned} \quad (6)$$

unde  $m$  este numărul iterației  $Z^m = [Z_1^m, Z_2^m, Z_3^m, Z_4^m]$ , iar  $Z_0$  este estimarea inițială. Matricea  $A(Z^m)$  este definită de

$$A(Z^m) = \begin{bmatrix} A_{11}^m & A_{12}^m & A_{13}^m & A_{14}^m \\ A_{21}^m & A_{22}^m & A_{23}^m & A_{24}^m \\ A_{31}^m & A_{32}^m & A_{33}^m & A_{34}^m \\ A_{41}^m & A_{42}^m & A_{43}^m & A_{44}^m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (k_1 + k_3)h^2 I & 0 & 0 & -k_5 h^2 I \\ -k_1 h^2 I & k_2 h^2 I & -k_4 h^2 I & 0 \\ 0 & -k_2 h^2 I & k_4 h^2 I & 0 \\ -k_3 h^2 I & 0 & 0 & k_5 h^2 I \end{bmatrix} \quad (7)$$

unde  $I$  este matricea identitate de ordinul  $(N - 2)^2$ . Blocurile  $A_{ij}^m$  pătrate de ordinul  $(N - 2)^2$  sunt matrice pentadiagonale corespunzând matriței de discretizare

$$\begin{bmatrix} CN \\ CW & CM & CE \\ CS \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$CM = D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l} + D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l} + D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}} + D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}$$

$$CE = -D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l}, \quad CW = -D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l}, \quad CS = -D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}, \quad CN = -D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}}$$

și ele variază la fiecare pas iterativ.

Solverii liniari implicați într-o iterație Picard modificată sunt implementări ale algoritmilor BiCGSTAB și GMRES în Matlab R2010b, descrierea lor este prezentată în Secțiunea 1.5. Acești algoritmi sunt folosiți și la rezolvarea problemei liniare. Codurile pentru metoda Picard modificat și tehnicile de preconditionare sunt implementări proprii în Matlab R2010b, respectiv pentru metoda MG în FORTRAN 77.

### 2.2.3 Tehnici de preconditionare

Considerăm sistemul de ecuații liniar ce trebuie rezolvat într-un pas al metodei Picard sau în cazul problemei liniare

$$AZ = B \quad (9)$$

unde

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \\ Z_4 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}.$$

Blocurile  $A_{ij}$  sunt matrice pătratice de ordinul  $(N-2)^2$  și blocurile  $A_{ii}$ ,  $i = \overline{1, 4}$  sunt matrice simetrice și pozitiv definite. Metoda clasică de construcție a unei matrice de preconditionare pentru sistemul (9) se bazează pe descompunerea de tip Choleski, completă sau incompletă a blocurilor diagonale:

$$A_{ii} = C_i C_i^T + R_i, \quad i = \overline{1, 4} \quad (10)$$

(dacă  $R_i = 0$ ,  $i = \overline{1, 4}$  ne referim la descompunerea completă, altfel avem cazul descompunerii incomplete [14] [16]).

Tehnicile de preconditionare de tip bloc-diagonal Jacobi dau rezultate destul de bune, dar necesită patru descompuneri, complete sau incomplete, de tip Choleski ale blocurilor diagonale, lucru care devine costisitor din punct de vedere computațional în cazul aplicațiilor practice.

În continuare propunem o matrice de preconditionare care nu se mai bazează pe blocurile diagonale  $A_{ii}$  ci pe un singur bloc. Rezultatele prezentate în continuare au fost publicate în [7].

În urma discretizării ecuațiilor (1) în cazul liniar, blocurile  $A_{ij}$  au următoarea structură

$$A_{11} = D_{11}\Delta_0 + (k_1 + k_3)h^2 I; \quad A_{12} = D_{12}\Delta_0; \quad A_{13} = D_{13}\Delta_0; \quad A_{14} = D_{14}\Delta_0 - k_5 h^2 I;$$

$$A_{21} = D_{21}\Delta_0 - k_1 h^2 I; \quad A_{22} = D_{22}\Delta_0 + k_2 h^2 I; \quad A_{23} = D_{23}\Delta_0 - k_4 h^2 I; \quad A_{24} = D_{24}\Delta_0;$$

$$A_{31} = D_{31}\Delta_0; \quad A_{32} = D_{32}\Delta_0 - k_2 h^2 I; \quad A_{33} = D_{33}\Delta_0 + k_4 h^2 I; \quad A_{34} = D_{34}\Delta_0; \quad (11)$$

$$A_{41} = D_{41}\Delta_0 - k_3 h^2 I; \quad A_{42} = D_{42}\Delta_0; \quad A_{43} = D_{43}\Delta_0; \quad A_{44} = D_{44}\Delta_0 + k_5 h^2 I.$$

unde  $I$  este matricea unitate de ordinul  $(N-2)^2$  și  $\Delta_0$  este matricea obținută în urma discretizării, folosind scheme cu diferențe finite, a ecuației  $-\Delta z = 0$  cu aceeași condiție pe frontiera  $\partial\Omega$  ca  $Z_1$ ,  $z = 1$  (vezi (2)). Matricea  $\Delta_0$  este simetrică și pozitiv definită.

Definim

$$\tilde{\Delta}_0 = \Delta_0 + h^2 I. \quad (12)$$

Din construcție  $\tilde{\Delta}_0$  este o matrice simetrică și pozitiv definită ( $\langle \tilde{\Delta}_0 x, x \rangle = \langle \Delta_0 x, x \rangle + h^2 \|x\|^2 > 0, \forall x \neq 0$ ) și admite o descompunere de tip Choleski (pentru  $R=0$  este completă, altfel este incompletă)

$$\tilde{\Delta}_0 = CC^T + R. \quad (13)$$

Propunem ca matrice de preconditionare următoarea matrice

$$\begin{aligned} P &= \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\Delta}_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} C & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C^T & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C^T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C^T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C^T \end{bmatrix} = \Gamma \cdot \Gamma^T \end{aligned} \quad (14)$$

și folosim următoarele tipuri de preconditionare

- preconditionare la dreapta

$$AU = B \Leftrightarrow \tilde{A}_1 \tilde{U}_1 = \tilde{B}_1, \tilde{A}_1 = AP^{-1}, \tilde{U}_1 = PU, \tilde{B}_1 = B \quad (15)$$

- preconditionare la stânga

$$AU = B \Leftrightarrow \tilde{A}_2 \tilde{U}_2 = \tilde{B}_2, \tilde{A}_2 = P^{-1}A, \tilde{U}_2 = U, \tilde{B}_2 = P^{-1}B \quad (16)$$

- preconditionare stânga-dreapta

$$AU = B \Leftrightarrow \tilde{A}_3 \tilde{U}_3 = \tilde{B}_3, \tilde{A}_3 = \Gamma^{-1}A\Gamma^{-T}, \tilde{U}_3 = \Gamma^T U, \tilde{B}_3 = \Gamma^{-1}B \quad (17)$$

### Analiza spectrului matricei preconditionate

Din relațiile (11) matricea sistemului  $A$  se scrie ca sumă de

$$\begin{bmatrix} D_{11}\Delta_0 & D_{12}\Delta_0 & D_{13}\Delta_0 & D_{14}\Delta_0 \\ D_{21}\Delta_0 & D_{22}\Delta_0 & D_{23}\Delta_0 & D_{24}\Delta_0 \\ D_{31}\Delta_0 & D_{32}\Delta_0 & D_{33}\Delta_0 & D_{34}\Delta_0 \\ D_{41}\Delta_0 & D_{42}\Delta_0 & D_{43}\Delta_0 & D_{44}\Delta_0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (k_1 + k_3)h^2 I & 0 & 0 & -k_5 h^2 I \\ -k_1 h^2 I & k_2 h^2 I & -k_4 h^2 I & 0 \\ 0 & -k_2 h^2 I & k_4 h^2 I & 0 \\ -k_3 h^2 I & 0 & 0 & k_5 h^2 I \end{bmatrix} \quad (18)$$

unde  $I$  este matricea unitate de ordinul  $(N-2)^2$ , iar

$$D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & D_{14} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} & D_{24} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} & D_{34} \\ D_{41} & D_{42} & D_{43} & D_{44} \end{bmatrix}, \aleph = h^2 \begin{bmatrix} (k_1 + k_3) & 0 & 0 & -k_5 \\ -k_1 & k_2 & -k_4 & 0 \\ 0 & -k_2 & k_4 & 0 \\ -k_3 & 0 & 0 & k_5 \end{bmatrix} \quad (19)$$

sunt matricea coeficienților de difuzie, respectiv a coeficienților de reacție. Dacă folosim produsul Kronecker ( $\otimes$ ) a două matrice (vezi secțiunea 1.1), relația (18) poate fi scrisă

$$A = (D \otimes \Delta_0) + (\aleph \otimes I). \quad (20)$$

Mai mult, din relația (14) rezultă

$$P^{-1} = \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_0^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\Delta}_0^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0^{-1} \end{bmatrix} = I_4 \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1} \quad (21)$$

unde  $I_4$  este matricea unitate de ordinul 4.

$$\tilde{A}_1 = AP^{-1} = [(D \otimes \Delta_0) + (\aleph \otimes I)](I_4 \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1}) = (D \otimes \Delta_0 \tilde{\Delta}_0^{-1}) + (\aleph \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1}). \quad (22)$$

Dacă cele două matrice  $D \otimes \Delta_0 \tilde{\Delta}_0^{-1}$  și  $\aleph \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1}$  ar fi simetrice, potrivit teoremei Weyl's (vezi Secțiunea 1.1), am obține informații despre valorile proprii ale sumei, adică ale matricei  $\tilde{A}_1$ . Dar, din păcate, acesta nu este cazul general al problemelor și informații legate de spectrul matricelor  $D \otimes \Delta_0 \tilde{\Delta}_0^{-1}$  și  $\aleph \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1}$  nu se pot obține decât considerate separat.

În urma calculelor obținem

$$\sigma(D \otimes \Delta_0 \tilde{\Delta}_0^{-1}) = \left\{ \frac{\lambda d_i}{\lambda + h^2}, \lambda \in \sigma(\Delta_0), i = 1, 2, 3, 4 \right\}, \quad (23)$$

$$\sigma(\aleph \otimes \tilde{\Delta}_0^{-1}) = \left\{ \frac{\alpha_i}{\lambda + h^2}, \lambda \in \sigma(\Delta_0), i = 1, 2, 3, 4 \right\}, \quad (24)$$

unde  $\sigma(D)$ ,  $\sigma(\aleph)$  reprezintă spectrele matricelor  $D$  și  $\aleph$ ,

$$\sigma(D) = \{d_1, d_2, d_3, d_4\}, \quad \sigma(\aleph) = \{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4\}. \quad (25)$$

Valorile proprii ale matricei  $\aleph$  se obțin ușor prin calcul direct

$$\sigma(\aleph) = \{0, h^2(k_2 + k_4), h^2 x_1, h^2 x_2\} \quad (26)$$

unde  $x_1, x_2$  sunt soluțiile reale ale ecuației

$$x^2 - (k_1 + k_2 + k_5)x + k_1 k_5 = 0. \quad (27)$$

### Proprietăți spectrale ale blocurilor matricei de preconditionare în cazul preconditionării stânga-dreapta

**Definiția 1.** Pentru o matrice nesingulară  $S$  de ordin  $n$  definim numărul de condiționare spectral [6]

$$\text{cond}_2(S) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(S^T S)}{\lambda_{\min}(S^T S)}}, \quad (28)$$

unde  $\lambda_{\max}(S^T S) \geq \lambda_{\min}(S^T S) > 0$  sunt valorile proprii extreme ale matricei simetrice și pozitiv definite  $S^T S$ . Dacă matricea  $S$  este simetrică și pozitiv definită atunci numărul de condiționare are expresia

$$\text{cond}_2(S) = \frac{\lambda_{\max}(S)}{\lambda_{\min}(S)}. \quad (29)$$

**Definiția 2.** Două matrice simetrice și pozitiv definite  $S, T$  de ordin  $n$  sunt spectral echivalente dacă [3] există constantele  $\alpha_1, \alpha_2$  independente de dimensiunea  $n$  astfel încât

$$\alpha_1 \leq \frac{\langle Sx, x \rangle}{\langle Tx, x \rangle} \leq \alpha_2, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0, \quad (30)$$

unde  $\langle \cdot, \cdot \rangle, \|\cdot\|$  reprezintă produsul scalar canonic, respectiv norma euclidiană.

**Propoziția 1.** [6], [14] Fie matricele  $S, T$  spectral echivalente ca în (30) și

$$T = QQ^T \quad (31)$$

o descompunere Choleski. Atunci

$$\text{cond}_2(Q^{-1}SQ^{-T}) \leq \frac{\alpha_2}{\alpha_1}, \quad (32)$$

adică  $T$  este un bun preconditioner pentru  $S$ . Mai mult, acest rezultat este independent de descompunerea (31).

Prezentăm relații de spectral echivalență ca (30) pentru  $S = A_{ij}$  și  $T = \tilde{\Delta}_0 = CC^T$ . Folosind Propoziția 1 demonstrăm că numărul de condiționare spectral al matricei  $C^{-1}A_{ii}C^{-T}$  satisface

$$\text{cond}_2(C^{-1}A_{ii}C^{-T}) \leq \frac{\alpha_2}{\alpha_1}, \quad (33)$$

unde

$$\alpha_1 = \min\{\min_{1 \leq i \leq 4} D_{ii}, (k_1 + k_3), k_2, k_4, k_5\}, \quad \alpha_2 = \max\{\max_{1 \leq i \leq 4} D_{ii}, (k_1 + k_3), k_2, k_4, k_5\}.$$

Fie acum

$$B = d\Delta_0 - kh^2I = d\Delta_0 - kh^2I = d\tilde{\Delta}_0 - (k + d)h^2I, \quad (34)$$

unde  $d \in \{D_{ij}, i, j = \overline{1, 4}, i \neq j\}$ ,  $k \in \{0, k_i, i = \overline{1, 5}\}$  cu combinațiile potrivite (vezi(11)), o notație generică pentru blocurile care nu se află pe diagonală  $A_{ij}$ ,  $i, j = \overline{1, 4}$ ,  $i \neq j$ .

Folosind din nou relația (32) și considerând  $\lambda_{\min}(\Delta_0) = ch^2$  [5] cu  $c$  independent de  $h$  obținem

$$\text{cond}_2(C^{-1}A_{ij}C^{-T}) \leq \gamma, \quad (35)$$

cu  $\gamma = \frac{\max\{d, k\}(c+1)}{dc-k} > 0$  independent de  $N$ .

Am arătat că numerele de condiționare spectrale obținute atât pentru blocurile de pe diagonală cât și cele din afara diagonalei nu depinând de desimea grilei.

## 2.3 Rezultate numerice

Obiectivul principal al acestui studiu, este acela, de a analiza, influența interacțiunii dintre speciile chimice prin difuzie, asupra performanțelor algoritmilor numerici. Pentru a realiza acest obiectiv am considerat, pentru fiecare set de parametrii, următoarele patru structuri pentru matricea Fick de difuzie multicomponentă:

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} D_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 & 0 \\ D_{21} & D_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & 0 \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} & 0 \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D_{44} \end{bmatrix}, \\
 & \qquad (a) \qquad \qquad \qquad (b) \qquad \qquad \qquad (c) \\
 & \qquad \qquad \qquad \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} & D_{14} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} & D_{24} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} & D_{34} \\ D_{41} & D_{42} & D_{43} & D_{44} \end{bmatrix}, \qquad (36) \\
 & \qquad \qquad \qquad (d)
 \end{aligned}$$

În cazul (a) nu avem interacțiune prin difuzie. Speciile interacționează doar prin reacție chimică. Pentru cazurile (b) - (d) gradul de interacțiune prin difuzie crește progresiv, de la interacțiunea a două specii (cazul (b)) la interacțiunea tuturor speciilor (cazul (d)). Pentru a ne referii la aceste cazuri am făcut următoarele notații: cazul (a) CPL1; cazul (b) CPL2; cazul (c) CPL3; cazul (d) CPL4. În aceste cazuri, pentru problema liniară, constantele de interacție sunt selectate din matricele coeficienților Fick de difuzie multicomponentă prezentate în Anexa A a tezei. Pentru problema neliniară, valorile coeficienților de difuzie Stefan-Maxwell folosite în calculul coeficienților Fick sunt date în Anexa B a tezei.

Performanțele algoritmilor numerici sunt monitorizate prin factorul mediu de reducere,  $\bar{\rho}$  și eficiența,  $\tau$ , care se calculează după formulele

$$\bar{\rho} = \left( \frac{\|res_i\|}{\|res_0\|} \right)^{\frac{1}{i}}, \quad (37)$$

$$\tau = \frac{W}{|\ln \bar{\rho}|}. \quad (38)$$

unde  $res_i = \|b_i - A_i Z_i\|$  este reziduul după  $i$  iterații,  $\|\cdot\|$  norma vectorială euclidiană și  $W$  (the work) este numărul de operații aritmetice pentru un punct al grilei la un pas iterativ.

În secțiunile 2.3.1 și 2.3.2 sunt prezentate rezultatele experimentelor numerice efectuate, însoțite de o analiză a acestora.

## 2.4 Concluzii

În această secțiune prezentăm concluziile analizei performanțelor numerice ale metodelor MG neliniar și Picard modificată, cu solverii liniari GMRES(m) și BiCGSTAB preconditionați, folosite la rezolvarea unor probleme de difuzie-reacție multicomponentă, staționare, liniare/neliniare în două coordonate spațiale. Am folosit diferite seturi de coeficienți de difuzie Stefan-Maxwell/ Fick, cât și diferite seturi de viteze de reacție adimensionale.

Pe baza rezultatelor experimentelor numerice prezentate în acest capitol, putem formula următoarele concluzii:

- în cazul problemei liniare influența interacțiunii prin difuzie, asupra vitezei de convergență și asupra eficienței algoritmilor numerici, depinde de: (1) algoritmul de netezire/relaxare al metodei MG; (2) tehnica de preconditionare și de metoda de tip proiectiv folosită; creșterea interacțiunii prin difuzie a speciilor chimice scade viteza de convergență și eficiența algoritmilor; scăderea este neglijabilă pentru MG-ALGS și GMRES(m) preconditionat cu CC (cazul descompunerii complete Choleski), este relativ semnificativă pentru BiCGSTAB preconditionat cu CC, GMRES(m) preconditionat cu IC (cazul descompunerii incomplete Choleski) și MG-PGS, și este semnificativă pentru BiCGSTAB preconditionat cu IC, GMRES(m), BiCGSTAB nepreconditionate;

- în cazul problemei neliniare influența interacțiunii prin difuzie, asupra vitezei de convergență și eficienței algoritmilor numerici, este mai puțin evidentă; pentru o desime a grilei și un set de valori al parametrilor date, interacțiunea prin difuzie nu influențează semnificativ pe  $\bar{\rho}$  și  $\tau$ ; parametrul cheie pare a fi raportul de diluție,  $Z_{5b}$ ; valorile ridicate ale raportului de diluție scade semnificativ valorile coeficienților Fick de difuzie și implicit, influența lor asupra performanțelor numerice ale algoritmilor.

## 3 Probleme de difuzie-convecție-reacție multicomponentă, staționare

Rezultatele prezentate în acest capitol au fost publicate în [8].

### 3.1 Formularea problemei

Considerăm cazul unei curgeri laminare, staționare a unui fluid incompresibil, printr-un canal cu secțiune transversală de lățime  $d$ , în care are loc următoarea reacție chimică complexă, izotermă, de ordinul I.

Considerând densitatea amestecului constantă, profilul concentrațiilor adimensionale în starea staționară, printr-o secțiune transversală, este dat de

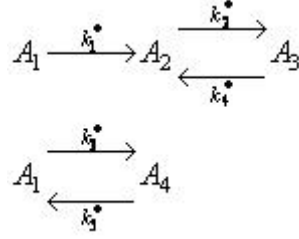


Figura 2: Schema reacției chimice

următorul sistem de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II

$$\epsilon Pe u(y) \frac{\partial Z_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^4 \left( \epsilon^2 \frac{\partial}{\partial x} D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial y} \right) + R_i, \quad i = \overline{1, 4}, \quad (39)$$

$$(x, y) \in \Omega = (0, 1) \times (0, 1)$$

unde

$$u(y) = -\frac{1}{2}(y^2 - y), \quad \epsilon = \frac{d}{L}, \quad Pe = \frac{U_0 d}{D_{ref}},$$

$$R_1 = -k_1 Z_1 - k_3 Z_1 + k_5 Z_4, \quad R_2 = k_1 Z_1 - k_2 Z_2 + k_4 Z_3,$$

$$R_3 = k_2 Z_2 - k_4 Z_3, \quad R_4 = k_3 Z_1 - k_5 Z_4,$$

$Z_i = \frac{A_i}{A_{1b}}$  sunt concentrațiile adimensionale de masă,  $A_{1b}$  este concentrația speciei  $A_1$  la intrarea în canal, adică  $x = 0$ ,  $d$  este grosimea canalului,  $k_i = \frac{k_i^* d^2}{D_{ref}}$  sunt vitezele de reacție adimensionale,  $L$  este lățimea canalului,  $Pe$  este numărul Peclet,  $U_0$  este constanta vitezei de curgere uniformă,  $D_{ij}(x, y)$  sunt coeficienții Fick de difuzie multicomponentă, raportați la coeficientul de difuzie de referință  $D_{ref}$ .

Condițiile pe frontieră sunt:

$$x = 0, \quad Z_1 = 1, \quad Z_i = 0, \quad i = 2, 3, 4,$$

$$x = 1, \quad J_i = 0, \quad i = \overline{1, 4}, \quad (40)$$

$$y = 0, \quad J_i = 0, \quad i = \overline{1, 4},$$

$$y = 1, \quad J_i = 0, \quad i = \overline{1, 4},$$

unde

$$J_i = \sum_{j=1}^4 D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial x}, \quad \text{sau} \quad J_i = \sum_{j=1}^4 D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial y}, \quad i = \overline{1, 4} \quad (41)$$

este fluxul transportului de masă al speciei  $i$  în raport cu viteza medie de masă.

Modelul matematic prezentat reprezintă cazul neliniar al problemei de difuzie-convecție-reacție abordate. Cazul problemei liniare se obține din cazul neliniar considerând coeficienții Fick, de difuzie multicomponentă, constanți.

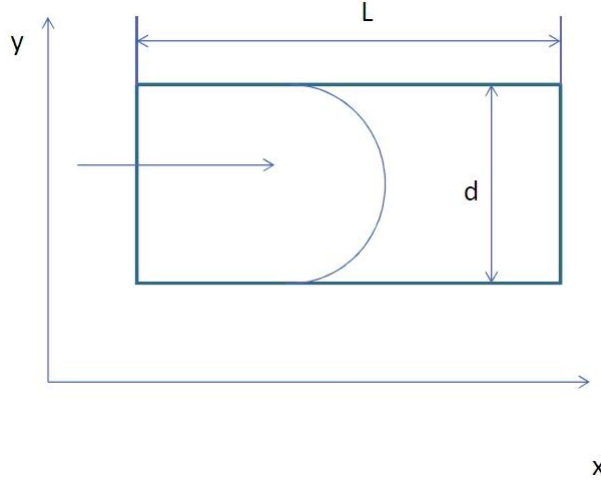


Figura 3: Reprezentarea schematică a domeniului problemei

## 3.2 Metode numerice

### 3.2.1 Discretizarea problemei

Derivatele spațiale ale ecuațiilor (39) au fost discretizate folosind scheme cu diferențe finite upwind de ordinul 2 de aproximare pe o grilă uniformă cu  $N \times N$  puncte

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1, \quad x_k = (k-1)h;$$

$$0 = y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N = 1, \quad y_l = (l-1)h, \quad k, l = \overline{0, N},$$

unde  $h = \frac{1}{(N-1)}$  mărimea pasului grilei. Aproximarea discretă obținută pentru ecuațiile (39) este

$$\begin{aligned} & \frac{\epsilon Peu(y_l) - |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \frac{Z_i^{k+1,l} - Z_i^{k,l}}{h} + \frac{\epsilon Peu(y_l) + |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \frac{Z_i^{k,l} - Z_i^{k-1,l}}{h} = \\ & = \sum_{j=1}^4 \left[ \epsilon^2 \frac{D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l} (Z_j^{k+1,l} - Z_j^{k,l}) - D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l} (Z_j^{k,l} - Z_j^{k-1,l})}{h^2} + \right. \\ & \left. + \frac{D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}} (Z_j^{k,l+1} - Z_j^{k,l}) - D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}} (Z_j^{k,l} - Z_j^{k,l-1})}{h^2} \right] + R_i^{k,l}, \quad i = \overline{1, 4} \end{aligned} \quad (42)$$

Valorile coeficienților de difuzie au fost calculate ca medie aritmetică a valorilor din punctele grilei.

Modalitatea de calcul a valorilor coeficienților Fick din punctele grilei este prezentată în cadrul tezei în secțiunea 3.1.

Pentru cazul problemei liniare, coeficienții Fick de difuzie multicomponentă  $D_{ij}$  sunt considerați constanți. Aproximarea discretă obținută în acest caz este:

$$\begin{aligned} & \frac{\epsilon Peu(y_l) - |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \frac{Z_i^{k+1,l} - Z_i^{k,l}}{h} + \frac{\epsilon Peu(y_l) + |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \frac{Z_i^{k,l} - Z_i^{k-1,l}}{h} = \\ & = \sum_{j=1}^4 D_{ij} \frac{\epsilon^2 Z_j^{k+1,l} + Z_j^{k,l+1} + \epsilon^2 Z_j^{k-1,l} + Z_j^{k,l-1} - (2+2\epsilon^2) Z_j^{k,l}}{h^2} + R_i^{k,l}, \quad i = \overline{1, 4} \end{aligned} \quad (43)$$

Pentru ambele cazuri liniar și neliniar datorită condițiilor de pe frontieră de tip Neumann, în punctele de pe frontieră s-au folosit formule de aproximare simetrice de ordinul 2, extrapolând simetric soluția într-un punct al grilei din afara frontierei.

### 3.2.2 Algoritmi numerici iterativi

Am folosit aceeași algoritmi pentru cazul neliniar: algoritmul multigrid neliniar (MG) [1] [9] și algoritmul Picard modificat [12]. În cazul problemelor de difuzie-convecție-reacție algoritmul de netezire PGS (point Gauss-Seidel) nu funcționează bine. Din acest motiv am folosit ca algoritm de netezire doar algoritmul ALGS (alternating line Gauss-Seidel). Algoritmul MG neliniar folosit este algoritmul clasic FAS (Full Approximation Storage) [1] [9]. Structura ciclului MG este: 1) ciclu de tip V; 2) netezire prin ALGS; 3) doi pași de netezire sunt efectuați înainte de corecția pe grila rară și unul după; 4) prelungirea prin interpolare biliniară pentru corecții; 5) restricția rezidurilor prin ponderare completă.

Metoda Picard modificată, numită și metoda punctului fix, pentru problema (39) este dată de relațiile

$$\begin{aligned} A(Z^m)\delta Z^{m+1} &= b(Z^m) - A(Z^m)Z^m \\ Z^{m+1} &= Z^m + \delta Z^{m+1} \end{aligned} \quad (44)$$

unde  $m$  este numărul iterației  $Z^m = [Z_1^m, Z_2^m, Z_3^m, Z_4^m]$ , iar  $Z_0$  este estimarea inițială. Matricea  $A(Z^m)$  este definită de

$$A(Z^m) = \begin{bmatrix} A_{11}^m & A_{12}^m & A_{13}^m & A_{14}^m \\ A_{21}^m & A_{22}^m & A_{23}^m & A_{24}^m \\ A_{31}^m & A_{32}^m & A_{33}^m & A_{34}^m \\ A_{41}^m & A_{42}^m & A_{43}^m & A_{44}^m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (k_1 + k_3)h^2I & 0 & 0 & -k_5h^2I \\ -k_1h^2I & k_2h^2I & -k_4h^2I & 0 \\ 0 & -k_2h^2I & k_4h^2I & 0 \\ -k_3h^2I & 0 & 0 & k_5h^2I \end{bmatrix} \quad (45)$$

unde  $I$  este matricea identitate de ordinul  $N(N-1)$ . Blocurile  $A_{ii}^m$  pătratice de ordinul  $N(N-1)$  sunt matrice pentadiagonale corespunzând matriței de discretizare

$$\begin{bmatrix} & CN & & \\ CW & CM & CE & \\ & CS & & \end{bmatrix} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} CM &= \epsilon^2 D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l} + \epsilon^2 D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l} + D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}} + D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}} + h|\epsilon Peu(y_l)| \\ CE &= -\epsilon^2 D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l} + h \frac{\epsilon Peu(y_l) - |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \\ CW &= -\epsilon^2 D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l} - h \frac{\epsilon Peu(y_l) + |\epsilon Peu(y_l)|}{2} \end{aligned}$$

$$CS = -D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}, \quad CN = -D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}},$$

în timp ce, blocurile  $A_{ij}^m, i \neq j$  pătratică de ordinul  $N(N-1)$  sunt matrice pentadiagonale corespunzând matriței de discretizare

$$CM = \epsilon^2 D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l} + \epsilon^2 D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l} + D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}} + D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}$$

$$CE = -\epsilon^2 D_{ij}^{k+\frac{1}{2},l}, \quad CW = -\epsilon^2 D_{ij}^{k-\frac{1}{2},l}$$

$$CS = -D_{ij}^{k,l-\frac{1}{2}}, \quad CN = -D_{ij}^{k,l+\frac{1}{2}}$$

Aceste blocuri variază la fiecare pas iterativ.

Solverii liniari implicați într-o iterație Picard modificată sunt implementări ale algoritmilor BiCGSTAB și GMRES în Matlab R2010b, descrierea lor este prezentată în Secțiunea 1.5. Acești algoritmi au fost folosiți și la rezolvarea problemei liniare. Codurile pentru metoda Picard modificat și tehnicile de preconditionare sunt implementări proprii în Matlab R2010b, respectiv pentru metoda MG în FORTRAN 77.

### 3.2.3 Tehnici de preconditionare

Considerăm sistemul de ecuații liniar ce trebuie rezolvat într-un pas al metodei Picard sau în cazul problemei liniare

$$AZ = B \tag{47}$$

unde

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44} \end{bmatrix}, \quad Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \\ Z_4 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}.$$

Blocurile  $A_{ij}$  sunt matrice pătratică de ordinul  $N(N-1)$  și blocurile diagonale  $A_{ii}, i = \overline{1,4}$  nu mai sunt simetrice și pozitiv definite. Metoda clasică de construcție a unei matrice de preconditionare pentru sistemul (47) se bazează pe descompunerea de tip LU, completă sau incompletă a blocurilor diagonale:

$$A_{ii} = L_i U_i + R_i, \quad i = \overline{1,4} \tag{48}$$

(dacă  $R_i = 0, i = \overline{1,4}$  ne referim la descompunerea completă, altfel avem cazul descompunerii incomplete [14], [16]).

Tehnicile de preconditionare de tip bloc Jacobi dau rezultate destul de bune, dar sunt necesare patru descompuneri, complete sau incomplete, de tip LU ale blocurilor diagonale, lucru care conduce la consum de timp și resurse computaționale.

Propunem o altă metodă de preconditionare care folosește în locul blocurilor diagonale  $A_{ii}$  un singur bloc. Fie  $\Delta_0$  matricea care se obține din discretizarea problemei

$$-(\epsilon^2 \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial y^2}) + \epsilon P e u(y) \frac{\partial z}{\partial x} = 0 \quad (49)$$

cu aceleași condiții la frontieră ca specia  $Z_1$ . Definim ca matrice de preconditionare

$$\begin{aligned} P &= \begin{bmatrix} \tilde{\Delta}_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\Delta}_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\Delta}_0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} L & 0 & 0 & 0 \\ 0 & L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U & 0 & 0 \\ 0 & 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (50)$$

unde  $\tilde{\Delta}_0 = \Delta_0 + h^2 I$ .

### 3.3 Rezultate numerice

Și în cazul problemelor de difuzie-convecție-reacție multicomponentă obiectivul principal propus este acela de a analiza influența interacțiunii speciilor chimice prin difuzie, asupra performanțelor algoritmilor numerici. Pentru a realiza acest obiectiv am considerat, pentru fiecare set de parametri, aceleași patru structuri pentru matricea Fick de difuzie multicomponentă ca în cazul problemei de difuzie-reacție.

Pentru a ne referii la aceste structuri am folosit aceleași notații: cazul (a) CPL1; cazul (b) CPL2; cazul (c) CPL3; cazul (d) CPL4. În aceste cazuri, pentru problema liniară, constantele de interacțiune sunt selectate din matricele coeficienților Fick de difuzie multicomponentă, prezentate în Anexa A a tezei. Performanțele algoritmilor numerici sunt monitorizate prin factorul mediu de reducere,  $\bar{\rho}$  și eficiența,  $\tau$ , care se calculează după formulele

$$\bar{\rho} = \left( \frac{\|res_i\|}{\|res_0\|} \right)^{\frac{1}{i}}, \quad (51)$$

$$\tau = \frac{W}{|\ln \bar{\rho}|}. \quad (52)$$

unde  $res_i = \|b_i - A_i Z_i\|$  este reziduul după  $i$  iterații,  $\|\cdot\|$  norma vectorială euclidiană și  $W$  (the work) este numărul de operații aritmetice pentru un punct al grilei la un pas iterativ.

În secțiunile 3.3.1 și 3.3.2 sunt prezentate rezultatele experimentelor numerice efectuate, însoțite de o analiză a acestora.

### 3.4 Concluzii

În acest capitol analizăm influența interacțiunii prin difuzie dintre speciile chimice și fenomenul de convecție, asupra performanțelor numerice ale algoritmilor iterativi (MG neliniar, Picard modificat -cazul neliniar; MG liniar, GMRES(m)- cazul liniar) în cazul problemelor de difuzie-convecție-reacție în două coordonate spațiale.

În urma experimentelor numerice efectuate prezentăm următoarele concluzii:

- în cazul problemei liniare, influența interacțiunii prin difuzie, asupra vitezei de convergență și asupra eficienței algoritmului GMRES(m) preconditionat, depinde de valorile numărului  $Pe$ ; pentru valori mari ale acestui număr,  $Pe = 10^4$ , influența interacțiunii prin difuzie asupra vitezei de convergență și asupra eficienței nu este semnificativă; pentru valori moderate  $Pe = 100$  interacțiunea prin difuzie influențează viteza de convergență și eficiența algoritmului GMRES(m) preconditionat; viteza de convergență a algoritmului MG-ALGS este mai puțin sensibil la influența interacțiunii prin difuzie și a numărului  $Pe$  față de algoritmul GMRES(m) preconditionat;

- în cazul neliniar influența interacțiunii prin difuzie, asupra vitezei de convergență și asupra eficienței algoritmilor numerici folosiți, este mai complexă; interacțiunea prin difuzie, practic, nu influențează viteza de convergență a algoritmului Picard modificat; totuși, eficiența algoritmului Picard scade odată cu creșterea gradului de interacțiune prin difuzie în cazul setului  $B_2$  de coeficienți de difuzie Stefan-Maxwell; viteza de convergență și eficiența algoritmului MG depind de gradul de interacțiune prin difuzie; creșterea raportului de diluție crește viteza de convergență și eficiența ambelor metode; totuși, acest efect este mai puțin semnificativ decât în cazul problemei de difuzie-reacție.

- în ambele cazuri, liniar și neliniar creșterea numărului  $Pe$  scade efectul interacțiunii prin difuzie asupra performanțelor numerice ale algoritmilor; pentru valori mari și foarte mari ale numărului  $Pe$ , convecția este mecanismul dominant din ambele puncte de vedere fizic și numeric.

## 4 Probleme de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare

### 4.1 Formularea problemei

În acest capitol abordăm rezolvarea, prin metode numerice, a unor probleme de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare, adică caracterizarea unor procese de difuzie-convecție evolutive în timp. Aceste probleme sunt modelate prin sisteme de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II, în care apare, pe lângă derivatele variabilelor spațiale, și derivata de ordinul I în raport cu timpul. Am considerat ca problemă de test un sistem de ecuații cu

derivate parțiale care modelează o problemă de difuzie-convecție multicomponentă liniară, dependentă de timp, cu  $p = 2, 3, 4$  specii chimice:

$$\frac{\partial Z_i}{\partial \tau} + \epsilon Pe u(y) \frac{\partial Z_i}{\partial x} = \sum_{j=1}^p D_{ij} (\epsilon^2 \frac{\partial^2 Z_j}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Z_j}{\partial y^2}), \quad i = \overline{1, p}, \quad (53)$$

$$(x, y) \in (0, 1) \times (0, 1), \quad \tau \in (0, T_{final})$$

unde

- $Z_i$  este concentrația de masă adimensională a speciei chimice  $i$ ,
- $D_{ij}$  coeficienții Fick de difuzie multicomponentă,
- $\epsilon = \frac{d}{L}$ ,  $Pe = \frac{U_0 d}{D_{11}}$ ,  $\tau = \frac{t D_{11}}{d^2}$
- $u(y) = -\frac{1}{2}(y^2 - y)$ .

Condițiile pe frontieră ale problemei sunt

$$x = 0, \quad Z_i = 0, \quad i = \overline{1, p}$$

$$x = 1, \quad J_i = 0, \quad i = \overline{1, p}$$

$$y = 0, \quad Z_i = A_i \sin(C_i x) (1 + \omega_i \sin(\alpha_i \tau)), \quad x \leq X < 1$$

$$Z_i = 0 \quad X \leq x \leq 1, \quad i = \overline{1, p}$$

$$y = 1, \quad Z_i = 0, \quad i = \overline{1, p}$$

unde  $J_i = \sum_{j=1}^p D_{ij} \frac{\partial Z_j}{\partial x}$  este fluxul de difuzie al masei speciei  $i$  în raport cu viteza medie a masei.

Condițiile inițiale sunt

$$\tau = 0, \quad y = 0, \quad Z_i = A_i \sin(C_i x) (1 + \omega_i \sin(\alpha_i \tau)), \quad x \leq X < 1$$

și în rest  $Z_i = 0, \quad \overline{1, p}$ .

## 4.2 Metode numerice

### 4.2.1 Discretizarea problemei

Prima etapă în rezolvare reprezintă discretizarea problemei în raport cu variabilele spațiale folosind scheme cu diferențe finite. Derivatele spațiale au fost approximate folosind formule simetrice de ordinul 2, pe o grilă uniformă cu  $N \times N$  puncte

$$0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{N-1} < x_N = 1, \quad x_k = (k-1)h;$$

$$0 = y_1 < y_2 < \dots < y_{N-1} < y_N = 1, \quad y_l = (l-1)h, \quad k, l = \overline{0, N},$$

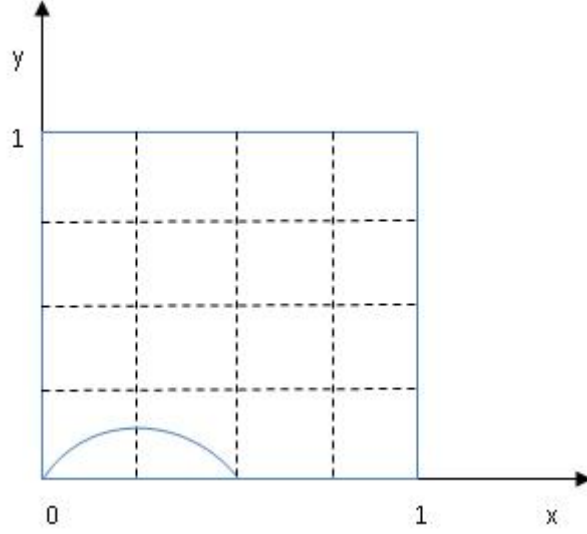


Figura 4: Discretizarea domeniului

unde  $h = \frac{1}{(N-1)}$  mărimea pasului grilei. Aproximarea discretă obținută este

$$\begin{aligned} & \frac{\partial Z_i^{k,l}}{\partial \tau} + \epsilon P e u^{k,l} \frac{Z_i^{k+1,l} - Z_i^{k-1,l}}{2h} - \\ & - \sum_{j=1}^p D_{ij} \left( \epsilon^2 \frac{Z_j^{k+1,l} - 2Z_j^{k,l} + Z_j^{k-1,l}}{h^2} + \frac{Z_j^{k,l+1} - 2Z_j^{k,l} + Z_j^{k,l-1}}{h^2} \right) = 0, \quad i = \overline{1, p} \end{aligned} \quad (54)$$

În cazul unei probleme cu 3 specii chimice ajungem astfel la următorul sistem de ecuații liniare

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_1}{\partial \tau} + \Lambda_h Z_1 &= D_{11} \Delta_h Z_1 + D_{12} \Delta_h Z_2 + D_{13} \Delta_h Z_3 \\ \frac{\partial Z_2}{\partial \tau} + \Lambda_h Z_2 &= D_{21} \Delta_h Z_1 + D_{22} \Delta_h Z_2 + D_{23} \Delta_h Z_3 \\ \frac{\partial Z_3}{\partial \tau} + \Lambda_h Z_3 &= D_{31} \Delta_h Z_1 + D_{32} \Delta_h Z_2 + D_{33} \Delta_h Z_3 \end{aligned} \quad (55)$$

unde  $\Delta_h$  este o matrice simetrică și pozitiv definită și  $\Lambda_h$  este o matrice trans-simetrică ( $\Lambda_h = -\Lambda_h^T$ ) în cazul folosirii schemelor cu diferențe finite simetrice.[3] În teză sunt prezentate și cazurile cu 2 sau 4 specii chimice.

#### 4.2.2 Algoritmi numerici iterativi

Am aplicat metoda splitting problemei (53) prin descompunerea operatorului spațial într-o sumă de doi operatori. Propunem o descompunere algebrică a

matricei de discretizare în raport cu variabilele spațiale care ne conduce la obținerea a două matrice superior, respectiv inferior triunghiulare

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} D_{11}\Delta_h - \Lambda_h & D_{12}\Delta_h & D_{13}\Delta_h \\ D_{21}\Delta_h & D_{22}\Delta_h - \Lambda_h & D_{23}\Delta_h \\ D_{31}\Delta_h & D_{32}\Delta_h & D_{33}\Delta_h - \Lambda_h \end{bmatrix} = \\
& \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(D_{11}\Delta_h - \Lambda_h) & D_{12}\Delta_h & D_{13}\Delta_h \\ 0 & \frac{1}{2}(D_{22}\Delta_h - \Lambda_h) & D_{23}\Delta_h \\ 0 & 0 & \frac{1}{2}(D_{33}\Delta_h - \Lambda_h) \end{bmatrix} + \\
& \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(D_{11}\Delta_h - \Lambda_h) & 0 & 0 \\ D_{21}\Delta_h & \frac{1}{2}(D_{22}\Delta_h - \Lambda_h) & 0 \\ D_{31}\Delta_h & D_{32}\Delta_h & \frac{1}{2}(D_{33}\Delta_h - \Lambda_h) \end{bmatrix}, \quad (56)
\end{aligned}$$

Avantajul folosirii unei astfel de descompuneri este acela că, sistemele algebrice ce trebuie rezolvate sunt bloc triunghiulare. Sistemul (55) se rezolvă aplicând metoda splitting prezentată în secțiunea 1.6. Pentru a asigura stabilitatea schemelor de integrare în raport cu timpul și implicit stabilitatea metodei splitting trebuie verificată condiția ca cele două matrice bloc triunghiulare să fie pozitiv definite.

### 4.3 Analiza pozitiv definirii unor clase de matrice bloc triunghiulare

Deoarece dorim să rezolvăm probleme de difuzie-convecție multicomponentă în care apar 3 sau 4 specii chimice ne-am propus să determinăm pozitiv definirea unor clase de matrice bloc triunghiulare de ordin  $3n$  sau  $4n$  pentru a ne asigura stabilitatea metodei splitting. Rezultatele au fost publicate în [18]

#### 4.3.1 Pozitiv definirea unor clase de matrice bloc de ordin $3n$ reale

**Propoziția 2.** *Dacă presupunem că, pentru o matrice reală pătratică de ordin 3*

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix}, \quad (57)$$

*există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f$  cu proprietățile*

$$|a_{12}| < 2\sqrt{ab}, \quad |a_{13}| < 2\sqrt{cd}, \quad |a_{23}| < 2\sqrt{ef}, \quad (58)$$

*și*

$$a + c \leq a_{11}, \quad b + e \leq a_{22}, \quad d + f \leq a_{33}. \quad (59)$$

*atunci  $A$  din (57) este pozitiv definită.*

Fie  $A$  o matrice reală de ordin  $3n$  având forma

$$A = \begin{bmatrix} \alpha\Delta^* & \gamma_1\Delta & \gamma_2\Delta \\ 0 & \beta_1\Delta^* + \delta_1\Delta & \gamma_3\Delta \\ 0 & 0 & \beta_2\Delta^* + \delta_2\Delta \end{bmatrix} \quad (60)$$

unde  $\Delta^*$  și  $\Delta$  sunt blocuri  $n \times n$ ,  $\Delta$  este o matrice simetrică și pozitiv definită, și  $\alpha, \beta_1, \beta_2, \delta_1, \delta_2, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  sunt numere reale pozitive.

**Propoziția 3.** Dacă  $\Delta^* = \Delta$  și  $\Delta$  este o matrice simetrică și pozitiv definită atunci matricea  $A$  din (60) este pozitiv definită dacă există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f$  cu proprietățile

$$|\gamma_1| < 2\sqrt{ab}, \quad |\gamma_2| < 2\sqrt{cd}, \quad |\gamma_3| < 2\sqrt{ef},$$

și

$$a + c \leq \alpha, \quad b + e \leq \beta_1 + \delta_1, \quad d + f \leq \beta_2 + \delta_2. \quad (61)$$

**Propoziția 4.** Dacă există un număr real pozitiv  $C$  astfel încât

$$\Delta = C(\Delta^* + (\Delta^*)^T) \quad (62)$$

atunci matricea  $A$  din (60) este pozitiv definită dacă există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f$  cu proprietățile

$$|\gamma_1| < 2\sqrt{ab}, \quad |\gamma_2| < 2\sqrt{cd}, \quad |\gamma_3| < 2\sqrt{ef},$$

și

$$a + c \leq \frac{\alpha}{2C}, \quad b + e \leq \left(\frac{\beta_1}{2C} + \delta_1\right), \quad d + f \leq \left(\frac{\beta_2}{2C} + \delta_2\right). \quad (63)$$

#### 4.3.2 Pozitiv definirea unor clase de matrice bloc de ordin $4n$ reale

**Propoziția 5.** Dacă presupunem că, pentru o matrice reală pătratică de ordin 4

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix} \quad (64)$$

există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l$  cu proprietățile

$$|a_{12}| < 2\sqrt{ab}, \quad |a_{13}| < 2\sqrt{cd}, \quad |a_{14}| < 2\sqrt{ef}, \quad |a_{23}| < 2\sqrt{gh},$$

$$|a_{24}| < 2\sqrt{ij}, \quad |a_{34}| < 2\sqrt{kl}, \quad a + c + e \leq a_{11},$$

$$b + g + i \leq a_{22}, \quad d + h + k \leq a_{33}, \quad f + j + l \leq a_{44}, \quad (65)$$

atunci matricea  $A$  din (64) este pozitiv definită.

Fie  $A$  o matrice reală de ordin  $4n$  având forma

$$A = \begin{bmatrix} \alpha\Delta^* & \gamma_1\Delta & \gamma_2\Delta & \gamma_3\Delta \\ 0 & \beta_1\Delta^* + \delta_1\Delta & \gamma_4\Delta & \gamma_5\Delta \\ 0 & 0 & \beta_2\Delta^* + \delta_2\Delta & \gamma_6\Delta \\ 0 & 0 & 0 & \beta_3\Delta^* + \delta_3\Delta \end{bmatrix} \quad (66)$$

unde  $\Delta^*$  și  $\Delta$  sunt blocuri  $n \times n$ ,  $\Delta$  este o matrice simetrică și pozitiv definită și  $\alpha, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \delta_1, \delta_2, \delta_3, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5, \gamma_6$  sunt numere reale pozitive.

**Propoziția 6.** *Dacă  $\Delta^* = \Delta$  și  $\Delta$  este o matrice simetrică și pozitiv definită atunci matricea  $A$  din (66) este pozitiv definită dacă există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l$  cu proprietățile*

$$\begin{aligned} |\gamma_1| &< 2\sqrt{ab}, \quad |\gamma_2| < 2\sqrt{cd}, \quad |\gamma_3| < 2\sqrt{ef}, \quad |\gamma_4| < 2\sqrt{gh}, \\ |\gamma_5| &< 2\sqrt{ij}, \quad |\gamma_6| < 2\sqrt{kl}, \quad a + c + e \leq \alpha, \end{aligned}$$

$$b + g + i \leq \beta_1 + \delta_1, \quad d + h + k \leq \beta_2 + \delta_2, \quad f + j + l \leq \beta_3 + \delta_3. \quad (67)$$

**Propoziția 7.** *Dacă există un număr real pozitiv  $C$  astfel încât*

$$\Delta = C(\Delta^* + (\Delta^*)^T)$$

*atunci matricea  $A$  din (66) este pozitiv definită dacă există numerele reale pozitive  $a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l$  cu proprietățile*

$$\begin{aligned} |\gamma_1| &< 2\sqrt{ab}, \quad |\gamma_2| < 2\sqrt{cd}, \quad |\gamma_3| < 2\sqrt{ef}, \quad |\gamma_4| < 2\sqrt{gh}, \\ |\gamma_5| &< 2\sqrt{ij}, \quad |\gamma_6| < 2\sqrt{kl}, \quad a + c + e \leq \frac{\alpha}{2C}, \end{aligned}$$

$$b + g + i \leq \frac{\beta_1}{2C} + \delta_1, \quad d + h + k \leq \frac{\beta_2}{2C} + \delta_2, \quad f + j + l \leq \frac{\beta_3}{2C} + \delta_3. \quad (68)$$

Facem notațiile

$$\begin{aligned} \Delta_h^* &= \frac{1}{2}(D_{11}\Delta_h - \Lambda_h) \\ \alpha &= \beta_1 = \beta_2 = \beta_3 \\ \delta_1 &= \frac{1}{2}(D_{22} - D_{11}) \quad \delta_2 = \frac{1}{2}(D_{33} - D_{11}) \quad \delta_3 = \frac{1}{2}(D_{44} - D_{11}) \\ \gamma_1 &= D_{12} \quad \gamma_2 = D_{13} \quad \gamma_3 = D_{14} \quad \gamma_4 = D_{23} \quad \gamma_5 = D_{24} \quad \gamma_6 = D_{34} \end{aligned}$$

Matricea superior triunghiulară din relația (60) capătă forma matricei superior triunghiulare din descompunerea (56). Propozițiile enunțate se verifică și pentru matrice inferior triunghiulare. Astfel, am găsit o modalitate de verificare a pozitiv definirii pentru matricele obținute cu metoda splitting în cazul problemelor de difuzie -convecție liniare nestaționare.

## 4.4 Concluzii

Am prezentat metoda splitting, ca metodă de rezolvare a problemelor de difuzie-convecție liniare, nestaționare, propunând o descompunere a operatorului spațial pentru care matricele sistemelor algebrice rezolvate la fiecare pas de integrare numerică în raport cu timpul sunt superior/inferior triunghiulare.

Am propus o strategie de verificare a pozitiv definirii unor clase de matrice bloc triunghiulare reale de ordin  $2n$ ,  $3n$ ,  $4n$  care asigură stabilitatea metodei splitting.

## Concluzii finale și dezvoltări viitoare

În cadrul acestei teze am abordat rezolvarea unor probleme de transfer de masă multicomponentă. Aceste probleme sunt modelate prin sisteme de ecuații cu derivate parțiale de ordinul II.

Pentru selectarea metodelor numerice adecvate de rezolvare, am împărțit problemele de transfer de masă abordate în următoarele clase:

- probleme de difuzie-reacție multicomponentă liniare și neliniare, staționare;
- probleme de difuzie-convecție-reacție multicomponentă liniare și neliniare, staționare;
- probleme de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare.

Metodele numerice selectate pentru cazul problemelor neliniare din primele două clase sunt algoritmi multigrid (MG) neliniar și Picard modificat. În cazul problemelor liniare solverii folosiți sunt metodele iterative GMRES(m) cu restart și BiCGSTAB. Am realizat o analiză a influenței interacțiunii prin difuzie, dintre speciile chimice, asupra performanțelor algoritmilor numerici folosiți, cât și a influenței fenomenului de convecție în cazul problemelor de difuzie-convecție-reacție. În cadrul testelor numerice am folosit mai multe seturi de valori pentru parametrii problemei.

Am propus, pentru problemele de difuzie-reacție, respectiv pentru problemele de difuzie-convecție-reacție, câte o matrice de preconditionare, bazată pe un singur tip de bloc diagonal, ce poate fi folosită în cadrul tehnicilor de preconditionare, pentru a îmbunătăți performanțele algoritmilor iterativi GMRES restartat și BiCGSTAB. Am analizat din punct de vedere teoretic, caracterul de bun preconditioner al matricei de preconditionare propuse în cazul problemei de difuzie-reacție.

În cazul clasei problemelor de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare, sunt caracterizate procese de difuzie-convecție evolutive în timp.

Pentru rezolvarea acestor probleme am selectat metoda splitting. În cadrul acestei metode, am propus o descompunere a operatorului spațial astfel încât, matricele sistemelor algebrice obținute sunt superior triunghiulare, respectiv inferior triunghiulare. Am determinat condiții suficiente ce trebuie îndeplinite pentru a putea fi asigurată stabilitatea metodei splitting în cazul problemelor cu 3 sau 4 specii chimice.

Ca preocupări viitoare dorim să aplicăm metoda splitting în cazul problemelor de difuzie-convecție multicomponentă liniare, nestaționare, pentru cazul cu 3 sau 4 specii chimice și analiza influenței interacțiunii prin difuzie, dintre speciile chimice, asupra performanțelor metodei, cât și a influenței fenomenului de convecție.

## Bibliografie

- [1] A. Brandt, *Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems*, Math. Comput., vol. 31, pp. 333-390, 1977.
- [2] C.F. Curtiss and R.B. Bird, *Multicomponent diffusion*, Ind. Eng. Chem. Res., vol. 38, pp. 2515-2522, 1999.
- [3] H.C. Elman and M.H. Schultz, *Preconditioning by fast direct methods for nonself-adjoint nonseparable elliptic equations*, SIAM J. Numer. Anal., vol. 23, pp. 44-57, 1986.
- [4] S.R. de Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics* 2nd ed., Dover, New York, 1984.
- [5] W. Hackbusch, *Elliptic differential equations. Theory and numerical treatment*, Springer, Berlin 1992.
- [6] R.A. Horn and C.R. Johnson, *Matrix analysis*, Cambridge University Press, New York, 1990.
- [7] Gh. Juncu, A. Nicola, C.Popa, E. Stroilă, *Preconditioned conjugate gradient and multigrid methods for numerical solution of multicomponent mass transfer equations I. Diffusion-reaction equations*, Numer. Heat Transfer A 66 (11) pp. 1268–1296, 2014.
- [8] Gh. Juncu, A. Nicola, C.Popa, E. Stroilă, *Preconditioned conjugate gradient and multigrid methods for numerical solution of multicomponent mass transfer equations II. Convection-diffusion-reaction equations*, Numer. Heat Transfer A 66 (11) pp. 1297–1319, 2014.
- [9] Gh. Juncu, C. Popa *Introduce în metoda multigrid* Ed. Tehnică, București, pp.12-44, 63-68, 1991.
- [10] N. Kobayashi and I. Yamamoto, *Comparison of definitions of ordinary diffusion coefficients in multi-component mixture*, J. Nuclear Sci. Tech., vol. 33, pp. 663-667, 1996.
- [11] S.H. Lam, *Multicomponent diffusion revisited*, Phys. Fluids, vol. 18, art. no. 073101, 2006.
- [12] F. Lehmann and Ph. Ackerer, *Comparison of iterative methods for improved solutions of the fluid flow equation in partially saturated porous media*, Transp. Porous Media, vol. 31, pp. 275-292, 1998.
- [13] J.C. Maxwell, *On the dynamic theory of gases*, Philos. Trans. R. Soc., vol. 157, pp. 49-88, 1867.

- [14] C.D. Meyer, *Matrix analysis and applied linear algebra*, SIAM, Philadelphia, 2000.
- [15] J. Mitrovic, *The Fick and Lagrange equations as a basis for the Maxwell-Stefan diffusion equations*, Int. J. Heat Mass Transfer, vol. 40, pp. 2373-2377, 1997.
- [16] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, 2003.
- [17] J. Stefan, *Über das Gleichgewicht und die Bewegung insbesondere die Diffusion von Gasgemengen*, Akad. Wiss. Wien, vol. 63, pp. 63-124, 1871.
- [18] E.Stroilă, *Splitting method for multicomponent mass transfer equations*, in Topics in Mathematical Modelling of Life Science Problems - Proceedings of the ninth workshop, Editura Matrix Rom, Bucuresti, pp. 77-91, 2013.
- [19] R. Taylor and R. Krishna, *Multicomponent Mass Transfer*, Wiley, New York, 1993.
- [20] Y. Wang and M.D. LeVan, *Mixture diffusion in nanoporous adsorbents: equivalence of Fickian and Maxwell-Stefan approach*, J.Phys. Chem. B, vol. 112, pp. 8600-8604, 2008.
- [21] P. Wesseling, *Principles of Computational Fluid Dynamics*, Springer, Berlin, 2001.