

Comparison between Newton and Picard methods for the nonlinear heat transfer modeling

Priscila Dombrowski Zen¹, Marcio Augusto Villela Pinto², Sebastião Romero Franco³

¹*Graduate Program in Numerical Methods in Engineering, Federal University of Paraná
Curitiba, PR, Brazil
prisciladzen@ufpr.br*

²*Department of Mechanical Engineering, Federal University of Paraná
Curitiba, PR, Brazil
marcio_villela@ufpr.br*

³*Department of Mathematics, State University of Centro-Oeste
Iratí, PR, Brazil
romero@unicentro.br*

Abstract. A equação do calor não linear possui grandes aplicações em diversas áreas, como nas Engenharias, na Biologia e na Medicina. Neste trabalho comparamos os métodos de Newton e de Picard para resolver numericamente a equação do calor unidimensional não linear, onde a condutividade térmica depende da temperatura do meio. Primeiramente, discretizamos a equação no tempo usando o método de Euler implícito, obtendo-se uma sequência de problemas de valor de contorno não lineares e a varredura no tempo será realizada com o método padrão, Time-Stepping. Para a derivada espacial que também é dependente do gradiente da temperatura, usamos o Método das Diferenças Finitas. Os sistemas não lineares obtidos são linearizados usando o método de Newton e o método de Picard. Com base nos testes numéricos comparamos a quantidade de iterações e os tempos computacionais para resolver os sistemas com o uso de cada um dos métodos de solução e elencamos suas vantagens e desvantagens para este tipo de problema.

Keywords: Nonlinear Fourier, Time stepping, Número de Linearizações, Tempo Computacional.

1 Introduction

Os problemas envolvendo a transferência de calor tem estudos em diversas áreas de aplicação, em especial os iniciados com a Lei de Fourier, onde o fluxo de calor é proporcional ao gradiente da temperatura.

Em [1] foi resolvido a dependência da condutividade térmica da temperatura em semicondutores, com a equação de Fourier, aplicando o Método de Diferenças Finitas (MDF) e usando o método de Newton para linearização dos sistemas não lineares. Obtiveram bons resultados e o método utilizado se mostrou estável para o problema analisado. [2] resolveram a equação de Fourier usando coeficientes de condutividade térmica randômicos e usaram o método Multigrid para acelerar a convergência.

O método de Newton é um método típico para resolver problemas não lineares, o processo iterativo gera uma sequência de pontos que a cada iteração se aproximam da solução. A convergência é quadrática desde que a escolha da estimativa inicial seja adequada [1]. Por outro lado, o método de Picard é conhecido como método das aproximações sucessivas, ou seja, ele lineariza o sistema e depois resolve as equações resultantes do mesmo. Entre suas principais vantagens estão a facilidade de implementação, a manutenção da simetria do sistema de equações e um menor custo computacional para cada iteração. Mas tal método pode apresentar problemas de convergência em casos altamente não lineares, conforme reportado por [3], onde foi utilizado o Método dos Elementos Finitos de uma, duas e três dimensões envolvendo, tanto o estado estacionário quanto o transiente, na solução do problema de fluxo multidimensional saturado variável.

A solução de problemas altamente não lineares também foram objetos de estudos de [4] e [5], onde utilizaram os métodos de Newton e Picard e uma modificação para o método de Picard, para a equação de Richards.

[6] comparou métodos de linearização, L-esquema, Newton e Picard Modificado, para o fluxo multifásico acoplado e o transporte reativo em meios porosos. [7] compararam tais métodos propostos por [6] para o problema unidimensional de escoamento bifásico em meio poroso rígido, utilizando o método de volumes finitos para a

discretização espacial, e Euler implícito para a discretização temporal. Para a resolução dos sistemas lineares gerados utilizaram o solver Gauss-Seidel lexicográfico de forma acoplada, acelerando a convergência com o método Multigrid e Ciclo W.

Neste trabalho discretizaremos a equação de calor não linear unidimensional, usando o Método de Diferenças Finitas (MDF), para a discretização espacial e Euler implícito para a discretização temporal. E para as linearizações usamos os métodos de Newton e de Picard. Após isso, efetuamos um estudo para indicar as vantagens e desvantagens de cada um dos métodos.

2 Mathematical and Numerical model

Para [8], a transferência de calor é o trânsito de energia devido a uma diferença de temperatura no meio, e quando existe essa diferença, um corpo cede calor para o outro. Essa troca de calor gera uma taxa classificada como coeficiente de condutividade térmica, que em geral, em problemas realísticos, depende da própria temperatura.

Assim, a equação do calor unidimensional que será tratada neste trabalho, como descrita em [1] é

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f = 0, \quad (1)$$

no intervalo espacial $x \in [a, b]$ e tempo $t \in (0, t_f]$, onde ρ é a densidade, c_p é a capacidade térmica de pressurização, e k é a condutividade térmica. Observe que ρ e c_p são valores constantes, porém k depende da temperatura u .

As condições de contornos e iniciais, são dadas, respectivamente por:

$$u(a, t) = u_a, \quad u(b, t) = u_b, \quad t > 0, \quad (2)$$

e

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in [a, b], \quad (3)$$

onde $u(x, t)$ e $f(x, t)$ representam respectivamente, a temperatura e o termo fonte na posição x e no tempo t . E as condições de contorno são representadas por u_a e u_b .

Reescrevendo a Equation (1) e usando a regra da cadeia, temos

$$\rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} = \partial_u k(u) \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + k(u) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f, \quad (4)$$

onde ∂_u representa a derivada parcial em relação a variável u .

As soluções analíticas nem sempre são fáceis de serem encontradas, logo, a modelagem numérica pode ser usada. Vamos adotar aqui uma malha uniforme sobre o domínio espacial onde cada ponto $u(x_i)$ será denotado por u_i com x_i dado pela

$$x_i = a + (i - 1)h, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (5)$$

onde $h = \frac{b-a}{N-1}$ é o espaçamento entre os nós na malha espacial, com N sendo a quantidade de nós.

A partir da Equation (4), com passo de tempo $\tau = \frac{t_f}{M}$, onde M é a quantidade de passos de tempo e usando o método de Euler implícito para a discretização temporal, temos

$$\rho c_p \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} = \partial_u k_i^{n+1} \left(\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x} \right)^2 + k_i^{n+1} \frac{\partial^2 u_i^{n+1}}{\partial x^2} + f_i^{n+1}, \quad (6)$$

onde $n + 1$ é o passo de tempo atual e i indica a posição no espaço e k_i^{n+1} denota $k(u_i^{n+1})$. A discretização espacial das derivadas envolvidas na Equation (6) será dada pelo Método das Diferenças Finitas (MDF), com Diferenças Centradas (CDS) de segunda ordem. Portanto, temos

$$\frac{\partial u^{n+1}}{\partial x} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_{i-1}^{n+1}}{2h} \quad e \quad \frac{\partial^2 u^{n+1}}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i-1}^{n+1}}{h^2}. \quad (7)$$

Substituindo a Equation (7) na Equation (6), temos:

$$\rho c_p \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} \right) = \partial_u k_i^{n+1} \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - u_{i+1}^{n+1}}{2h} \right)^2 + k_i^{n+1} \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{h^2} \right) + f_i^{n+1}. \quad (8)$$

3 Métodos de Linearização

A não linearidade da equação do calor pode ser tratada através de diversos métodos. Neste trabalho usamos os métodos de linearização de Newton e de Picard.

3.1 Método de Newton

O esquema de iteração de Newton pode ser pensado como um método de corda paralela com atualização, ou seja, usamos a tangente da função como matriz de iteração e atualizamos essa matriz de inclinação a cada iteração. O esquema de Newton possui convergência quadrática, isso é garantido desde que a estimativa inicial seja próxima à solução [9]. Para a implementação do método de Newton [1] introduziremos um vetor coluna $\mathbf{G}^{n+1} = [G_1^{n+1}, G_2^{n+1}, \dots, G_N^{n+1}]^T$ com os componentes:

$$G_1^{n+1} = u_1^{n+1} - u_a, \quad G_N^{n+1} = u_N^{n+1} - u_b, \quad (9)$$

$$G_i^{n+1} = \rho c_p \left(\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\tau} \right) - \partial_u k_i^{n+1} \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - u_{i+1}^{n+1}}{2h} \right)^2 - k_i^{n+1} \left(\frac{u_{i-1}^{n+1} - 2u_i^{n+1} + u_{i+1}^{n+1}}{h^2} \right) - f_i^{n+1}, \quad (10)$$

para $i = 2, 3, \dots, N - 1$.

The system of nonlinear equations (10) and the boundary conditions, equation (9), are written as one equation

$$\mathbf{G}^{n+1}(\mathbf{u}^{n+1}) = 0, \quad (11)$$

onde

$$\mathbf{u}^{n+1} = [u_1^{n+1}, u_2^{n+1}, \dots, u_N^{n+1}]^T. \quad (12)$$

Introducing the iterative process on $\mathbf{u}^{n+1, \nu+1}$, where $\nu + 1$ is current iteration, and starting by some initial guess $\mathbf{u}^{n+1, 0}$, the nonlinear system (11) can be solved by the

$$\mathbf{u}^{n+1, \nu+1} = \mathbf{u}^{n+1, \nu} - (\mathbf{L}^{n+1, \nu})^{-1} \mathbf{G}^{n+1}(\mathbf{u}^{n+1, \nu}), \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (13)$$

onde $\mathbf{L}^{n+1,\nu}$ é a matriz Jacobiana de \mathbf{G}^{n+1} com respeito a $\mathbf{u}^{n+1,\nu}$. Assim:

$$\mathbf{L}^{n+1,\nu} = \frac{\partial \mathbf{G}^{n+1}}{\partial \mathbf{u}^{n+1}} (\mathbf{u}^{n+1,\nu}). \quad (14)$$

3.2 Método de Picard

É possível derivar um método simplório a partir do problema de ponto fixo, que é denominado de substituição sucessiva ou Picard, tem entre suas características a facilidade de implementação, a manutenção da simetria do sistema de equações e custo computacional menor para cada iteração [10], porém pode apresentar problemas de convergência em problemas altamente não lineares [3]. De acordo com [9] a técnica iterativa de Picard se apresenta como um método robusto de ponto fixo, que é globalmente convergente com uma taxa linear ou sublinear.

O método de Picard normalmente é utilizado nas iterações iniciais de uma estratégia geral de solução de sistemas de equações não lineares, para viabilizar a convergência de métodos mais rápidos, como por exemplo, o método de Newton, abordado anteriormente. Isto se deve ao fato de que o método apresenta um raio de convergência amplo, porém tem baixa taxa de convergência, surge aí o interesse de combinar o método com métodos mais rápidos que tenham raio de convergência baixo [3] [4].

A linearização utilizando o método de Picard, é classificada computacionalmente por [3] [5] [11][12] como de simples implementação, e mais barato computacionalmente, mas não é tão preciso devido à aproximação ser feita por uma parte linear e outra não linear, [7], fato esse na comparação com o método de Newton, pois é utilizado o esquema de eliminação gaussiana, ou método de Gauss-Seidel como solver.

Isolando a variável u_i^{n+1} na Equação (8) e criando o processo iterativo, temos o método de Picard dado por

$$u_i^{n+1,\nu+1} = \frac{u_i^n}{A} + \frac{A\chi k_0}{4h^2} \partial_u k_i^{n+1,\nu} \left(u_{i+1}^{n+1,\nu} - u_{i-1}^{n+1,\nu+1} \right)^2 + \frac{Ak_0}{h^2} k_i^{n+1,\nu} \left(u_{i+1}^{n+1,\nu} - 2u_i^{n+1,\nu} + u_{i-1}^{n+1,\nu+1} \right) + Af_i^{n+1}, \quad (15)$$

onde $A = \frac{\tau}{\rho c_p}$, $\nu + 1$ é a iterada atual e u_i^n representa a solução convergida no passo de tempo anterior.

Observe que quando temos as posições no espaço i e $i - 1$, usamos os resultados da iteração ν , enquanto na posição $i + 1$ usamos o $\nu + 1$.

4 Resultados

Este trabalho teve como objetivo a comparação entre os métodos de Newton e Picard para o modelo descrito em [1], ou seja, consideramos uma haste homogênea fina, ao longo do eixo x no intervalo $x \in [1, 3]$, sem fontes de calor e sem radiação. A densidade ρ e a capacidade calorífica c_p são constantes unitárias e a condutividade térmica é dada por

$$k(u) = \kappa_0 e^{\chi u}, \quad (16)$$

onde k_0 e χ constantes físicas associadas a maior ou menor não linearidade. Consideremos as condições de contorno expressas por

$$u(1, t) = 2, \quad u(3, t) = 1, t > 0, \quad (17)$$

e a condição inicial dada por

$$u(x, 0) = 2 - \frac{x-1}{2} + (x-1)(x-3), \quad x \in [1, 3]. \quad (18)$$

As simulações numéricas foram realizadas com o software Matlab, versão R2015a. A verificação do código para o método de Picard se deu através da comparação com os resultados apresentados por [1] para o método de Newton, e testadas para os pontos $M = N = 2^p + 1$, com $p \in \mathbb{Z}$ variando de 5 à 12. Apresentaremos os resultados para o caso $p = 12$, visto que os demais casos apresentaram resultados similares. Nas Eqs. 10 e 15, respectivamente, para os métodos de Newton e Picard, $\partial_u(k_i^{n+1,\nu}) = \chi \kappa_0 e^{(u_i^{n+1,\nu})}$. Usaremos a variação para κ_0 sendo os valores de 10^{-3} , 10^{-2} e 10^{-1} ; e χ sendo os valores de -9.0 , -7.0 , -5.0 , -3.0 e -1.0 . Utilizamos como critério de parada para resolver o sistema de equações lineares resultantes do processo de linearização, a norma l_2 da diferença entre as soluções de duas iterações consecutivas, com tolerância 10^{-8} , segundo [1].

Na Table 1, a comparação realizada entre os métodos se deu através do número de linearizações médias a cada passo de tempo, até que a tolerância fosse alcançada. Podemos observar que com o método de Newton, o número de linearizações mantém-se grosseiramente estável para qualquer valor de κ_0 e χ , enquanto que com o método de Picard esse número cresce com o aumento de κ_0 e χ . Esse comportamento pode ser confirmado ao medirmos o tempo computacional (t_{CPU}) necessário para obter a solução numérica em ambos os métodos, como mostra a Figure 1.

Table 1. Número de linearizações média dos métodos de Newton e de Picard considerando uma malha com $N = M = 4097$ pontos, para diversos valores de κ_0 e χ .

κ_0	10^{-3}			10^{-2}			10^{-1}			
	χ	-9.0	-5.0	-1.0	-9.0	-5.0	-1.0	-9.0	-5.0	-1.0
Newton		2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.0	2.1	2.6
Picard		3.0	7.0	36.9	10.7	51.1	315.8	72.7	332.6	1994.8

Podemos notar que o método de Picard, Figure 1, possui menor t_{CPU} na maioria dos casos, se comparando com o método de Newton, apesar de realizar um número maior de linearizações, observe os casos que $\kappa_0 = 10^{-1}$ e $\chi = -3.0$ ou $\chi = -1.0$ o método de Newton é mais eficiente que o método de Picard. Este fato também foi observado por [3] [6], onde os autores mostram que o método de Picard é mais eficiente quando se tem baixas não linearidades.

5 Conclusions

Neste trabalho, foi considerada a equação da transferência de calor unidimensional com condutividade térmica dependendo da própria temperatura. Esta equação foi resolvida numericamente utilizando o Método de Euler implícito para a discretização temporal e o MDF com aproximação do tipo CDS para a discretização espacial. Foram comparadas as linearizações de Newton e de Picard. Os resultados mostraram a eficiência do método de Picard comparando com o método de Newton quando tratamos de problemas com baixo grau de não linearidade. Nas informações coletadas observamos que o número de linearizações para o método de Newton se mantém grosseiramente constante e muito inferior ao método de Picard, porém quando se leva em consideração o tempo computacional, o método Newton perde sua eficiência.

References

- [1] S. M. Filipov and I. Faragó. Implicit Euler time discretization and FDM with Newton method in nonlinear heat transfer modeling, 2018.
- [2] P. Kumar, C. Rodrigo, F. Gaspar, and C. Oosterlee. On local Fourier analysis of multigrid methods for PDEs with jumping and random coefficients. *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 41, pp. A1385–A1413, 2019.
- [3] C. Paniconi, A. A. Aldama, and E. F. Wood. Numerical evaluation of iterative and noniterative methods for the solution of the nonlinear Richards equation. *Water Resources Research*, vol. 27, n. 6, pp. 1147–1163, 1991.
- [4] M. Celia, E. Bouloutas, and R. Zarba. A general mass-conservative numerical-solution for the unsaturated flow equation. *Water Resources Research - WATER RESOUR RES*, vol. 26, pp. 1483–1496, 1990.
- [5] R. L. Zarba. *A numerical investigation of unsaturated flow*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1988.
- [6] D. Illiano, I. Pop, and F. Radu. Iterative schemes for surfactant transport in porous media. *Computational Geosciences*, vol. 25, pp. 1–18, 2021.

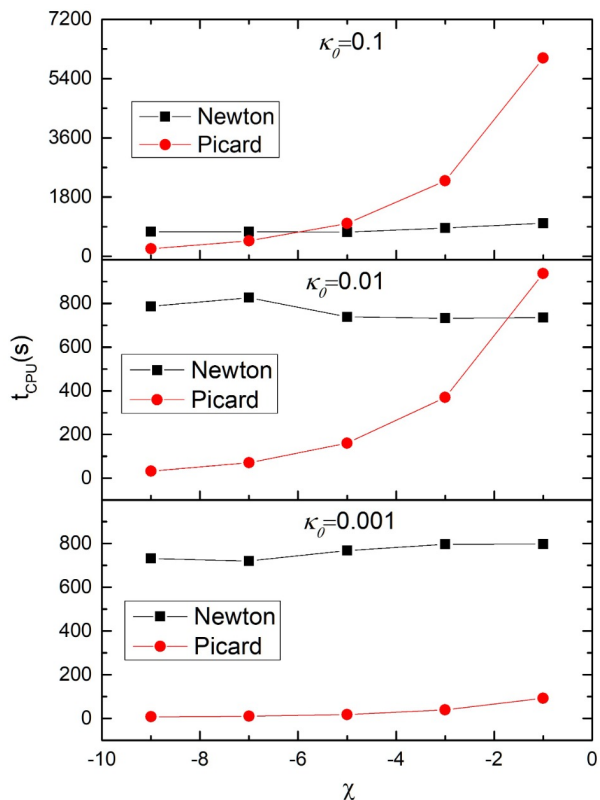


Figure 1. Tempo computacional usado pelos métodos de Newton e de Picard, considerando uma malha com $N = M = 4097$ pontos, para diversos valores de κ_0 e χ .

[7] M. Oliveira, M. Pinto, C. Rodrigo, F. Gaspar, and S. Franco. L-scheme and modified Picard with multigrid method for a 1D two-phase problem in rigid porous media with analytical solution, 2021.

[8] F. Incropera. *Fundamentals of heat and mass transfer*. LTC, 2008.

[9] G. Golub and J. Ortega. *Scientific Computing and Differential Equations: An Introduction to Numerical Methods*. ACADEMIC PressINC, 1991.

[10] R. Quevedo. Numerical implementation for 3D transient flow analysis in dams (in portuguese). *Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro PUC-RJ, Master in Civil Engineering*, 2008.

[11] W. L. Briggs, V. E. Henson, and S. F. McCormick. *A Multigrid Tutorial*. SIAM, Philadelphia, 2nd edition, 2000.

[12] K. Huang, B. Mohanty, F. Leij, and M. T. v. Genuchten. Solution of the nonlinear transport equation using modified picard iteration. *Advances in Water Resources*, vol. 21, n. 3, pp. 237–249, 1996.