Universidad Nacional del Litoral

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS MECÁNICA COMPUTACIONAL

Base Teórica de Métodos Numéricos

Autores:
Gerardo FRANCK
Carlos GENTILE
Norberto NIGRO
Diego SKLAR

E-mail: gerardofranck@yahoo.com.ar csgentile@gmail.com norberto.nigro@gmail.com diegosklar@gmail.com

JULIO, 2019



Índice

| 1. | | I - Método de Diferencias Finitas |
|----|------|---|
| | 1.1. | Descripción del Método |
| | 1.2. | Ecuación del Calor |
| | 1.3. | Ecuaciones en diferencias |
| | 1.4. | Sistema de ecuaciones |
| | 1.5. | Expresiones para mallas con espaciado no uniforme |
| | 1.6. | Condiciones de Borde |
| | | 6.1. Dirichlet |
| | | 6.2. Neumann |
| | | 6.3. Robin |
| | | |
| 2. | | I - Método de Volúmenes Finitos |
| | | Descripción del Método |
| | | Ecuación del Calor |
| | | FVM en mallas estructuradas bidimensionales |
| | | Coeficientes del término difusivo |
| | 2.5. | Condiciones de borde |
| | | 5.1. Dirichlet |
| | | 5.2. Neumann |
| | | 5.3. Robin |
| 2 | EEM | I - Método de Elementos Finitos 22 |
| ა. | | Descripción del Método |
| | | Ecuación del Calor |
| | | |
| | ა.ა. | Elementos y funciones de forma |
| | | 9 |
| | 0.4 | 3.2. Elementos cuadrangulares |
| | 3.4. | Cálculo de matrices |
| | | 4.1. Matriz de difusión |
| | ۰. | 4.2. Matriz de masa |
| | | Ensamble de matrices |
| | 3.6. | Condiciones de borde |
| | | 6.1. Neumann |
| | | 6.2. Robin |
| | | Fuentes por elemento |
| | | Fuentes puntuales |
| | 3.9. | Tensión/Deformación Plana |
| | | 9.1. Cálculo de matriz de rigidez |
| | | 9.2. Cálculo de vector de fuerzas volumétricas |
| | | 9.3. Condiciones de borde - Nodos fijos |
| | | 9.4. Condiciones de borde - Cargas distribuidas |
| | | 9.5. Cargas puntuales |
| 1 | Fear | uemas Temporales 42 |
| →. | | Discretización Temporal |
| | | Forward-Euler o Esquema Explícito |
| | | Backward-Euler o Esquema Implícito |
| | 4.J. | Daurwaru-Luier u Esquerra implicitu |

1. FDM - Método de Diferencias Finitas

En esta sección se presenta una revisión de los conceptos teóricos que sirvieron de base para la implementación del método de diferencias finitas en código de alto nivel. Si el lector está familiarizado con la formulación de ecuaciones en diferencias a partir del desarrollo de series de Taylor, puede omitir los primeros cuatro puntos de esta sección y avanzar hasta el desarrollo de ecuaciones para mallas con espaciado no uniforme.

1.1. Descripción del Método

El Método de Diferencias Finitas es un método que permite la resolución aproximada de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales definidas en un dominio simple. Es de una gran sencillez conceptual y constituye un procedimiento muy adecuado para la resolución de ecuaciones diferenciales en una o dos dimensiones.

El método consiste en una aproximación de las derivadas parciales a partir de expresiones algebraicas que representan una combinación de la variable incógnita en distintos puntos del dominio. Como resultado de la aproximación, la ecuación diferencial que describe el problema es remplazada por un número finito de ecuaciones algebraicas, en términos de los valores de la variable dependiente en los puntos seleccionados. Los valores en estos puntos se convierten en las incógnitas. A partir de la resolución del sistema de ecuaciones algebraicas se puede obtener la distribución aproximada de la variable dependiente en cada punto seleccionado de la malla.

Para simplificar el desarrollo de ecuaciones se introduce un dominio como el de la $\mathit{Fig.}\ 1$, donde el espaciado entre nodos en sentido eje-x es uniforme, y dado por Δx . Del mismo modo, el espaciado de nodos en sentido eje-y es también uniforme, y dado por Δy . De acuerdo a esta consideración, Δx y Δy son constantes, pero no necesariamente iguales entre sí. En la sección 1.5 se realiza la deducción de expresiones para el caso en que Δx y Δy no son uniformes.

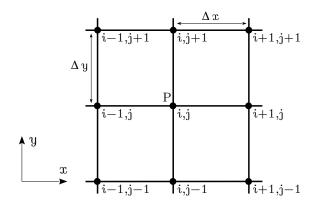


Figura 1: Discretización de una malla de para FDM.

Los puntos de la malla en la Fig. 1 están identificados por un índice i, el cual se incrementa en el sentido positivo del eje-x, y un índice j, el cual se incrementa en el sentido positivo del eje-y. Si (i,j) es el índice del punto P en la Fig. 1, luego el punto inmediatamente a la derecha se designa como (i+1,j) y el punto inmediatamente a la izquierda como (i-1,j). De manera similar, el punto arriba es (i,j+1), y el punto abajo es (i,j-1). La metodología básica del método de diferencias finitas es la de reemplazar las derivadas que gobiernan las ecuaciones diferenciales por ecuaciones en diferencias. Esto va a dar como resultado un sistema de ecuaciones algebraicas a partir del cual se puede obtener la solución aproximada para todos los puntos de la malla.

1.2. Ecuación del Calor

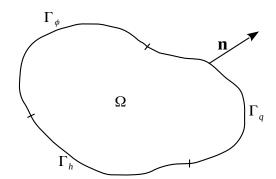


Figura 2: Dominio arbitrario Ω con fronteras Dirichlet (Γ_{ϕ}) , Neumann (Γ_{q}) y Robin (Γ_{h}) .

Aplicaremos las ecuaciones de FDM al modelo de transporte escalar en un dominio bidimensional, sin considerar fenómenos convectivos. Es decir, en la ecuación sólo se tienen en cuenta los fenónemos difusivos, reactivos y de producción, tanto en estado estacionario como transiente. Consideremos el transporte de una sustancia de concentración ϕ [1] en un medio arbitrario como el de la *Fig.* 2, donde el campo de velocidades es nulo ($\mathbf{v}=0$) y la difusividad k>0. Además consideramos que ϕ se consume con una reacción química de cinética de primer orden, con constante c>0 y que hay una producción de ϕ dada por una densidad de producción G. Luego,

$$\frac{D\phi}{Dt} = k\Delta\phi - c\phi + G$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla\phi = k\Delta\phi - c\phi + G$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = k\Delta\phi - c\phi + G$$
(1)

con condiciones de contorno

$$\phi = \bar{\phi}, \text{ en } \Gamma_{\phi}$$

$$-k\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = q, \text{ en } \Gamma_{q}$$

$$-k\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} = h(\phi - \phi_{\infty}), \text{ en } \Gamma_{h}$$
(2)

Los términos involucrados en (1) se denominan

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \text{Término temporal}$$

$$k\Delta \phi = \text{Término difusivo}$$

$$c\phi = \text{Término reactivo}$$

$$G = \text{Término fuente o producción}$$
(3)

Tanto k como c podrían ser funciones de la posición y del tiempo, pero aquí sólo se considerarán constantes. Por otro lado, al término producción G lo consideramos variando únicamente con la posición, es decir, G(x,y). Las dimensiones para dichos términos son [1]

$$k: \left[\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{sec}}\right]$$

$$c: \left[\frac{1}{\mathrm{sec}}\right]$$

$$G: \left[\frac{[\phi]}{\mathrm{sec}}\right]$$
(4)

Finalmente, la ec. (1) puede reescribirse de manera más conveniente como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - k \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + c\phi = G \tag{5}$$

1.3. Ecuaciones en diferencias

Las representaciones en diferencias finitas de los operadores diferenciales se derivan de las expansiones por series de Taylor. Por ejemplo, el valor de la magnitud ϕ en el punto (i+1,j) puede ser expresado en términos de las series de Taylor centradas en el punto (i,j) como

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{i,j} + \dots$$
 (6)

Matemáticamente, la ec. (6) es una expresión exacta para $\phi_{i+1,j}$ si la serie converge. En la práctica, para $\Delta x < 1$, cualquier término de orden mayor a Δx será menor que Δx . Por lo tanto, para cualquier función ϕ , la ec. (6) puede ser truncada en un número finito de términos. Por ejemplo, si se descartan los términos de orden $\mathcal{O}(\Delta x^3)$ o superiores, entonces la ec. (6) queda

$$\phi_{i+1,j} \approx \phi_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j}$$
 (7)

Si los términos de orden $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ y superiores son truncados, la $\it ec.$ (7) se reduce a

$$\phi_{i+1,j} \approx \phi_{i,j} + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j}$$
 (8)

En (7) y (8) los términos de orden superior que fueron descartados representan el error de truncamiento. Obviamente, este error puede ser reducido al considerar más términos de las series de Taylor así como también haciendo más pequeño el tamaño de Δx .

Volviendo a la *ec.* (6) y resolviendo para $(\partial \phi/\partial x)_{i,j}$ se llega a

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} - \frac{\Delta x^2}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{i,j} + \dots$$

o bien

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{9}$$

La expresión de la diferencia de primer orden de precisión para la derivada $(\partial \phi/\partial x)_{i,j}$ de la *ec.* (9) se denomina **diferencia hacia adelante** o *forward difference*. Considerando ahora la expansión en series de Taylor para $\phi_{i-1,j}$ alrededor de $\phi_{i,j}$

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} - \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_{i,j} + \dots$$
 (10)

Resolviendo para $(\partial \phi/\partial x)_{i,j}$, obtenemos

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{11}$$

la cual se denomina diferencia hacia atrás o backward difference de primer orden.

Restando la ec. (10) a la ec. (6) se obtiene

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{12}$$

expresión denominada **diferencia central** o *central difference*, la cual es una aproximación de segundo orden de precisión a la derivada $(\partial \phi/\partial x)$ centrada en el punto (i,j).

Hasta aquí hemos encontrado tres expresiones diferentes, con distintos órdenes de precisión y puntos de la malla involucrados en el cálculo, únicamente para la primer derivada de la función ϕ . Para obtener una derivada de segundo orden se suman las ec. (6) y (10) y luego se resuelve para $(\partial^2 \phi/\Delta x^2)_{i,j}$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{13}$$

la cual es una derivada de segundo orden centrada en el punto (i,j) con precisión de orden $\mathcal{O}(\Delta x^2)$. El razonamiento es análogo para deducir las expresiones de las derivadas con respecto a la variable independiente y.

En las ec. (14) se presenta el resumen de expresiones para las derivadas de primer y segundo orden.

Para la variable x:

Volviendo a la *ec.* (1), si consideramos ahora al sistema estacionario podemos despreciar el término de variación temporal y reformular la ecuación como

$$-k\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right) + c\phi = G \tag{15}$$

A partir de los resultados obtenidos en (14) podemos reescribir la *ec.* (15) reemplazando los operadores diferenciales por sus correspondientes expresiones en diferencias. Luego, el *stencil* para un punto

(i,j) interior de una malla será

$$-k\left(\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^2}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j}$$
(16)

donde se expresa también la variación de la fuente G para cualquier punto de la malla.

1.4. Sistema de ecuaciones

A lo largo de la sección hemos hecho referencia a encontrar la distribución de la magnitud escalar ϕ mediante la resolución de un sistema de ecuaciones algebraicas. Dicho sistema variará de acuerdo a los valores de las constantes del problema, la geometría de la malla y las condiciones de borde impuestas, entre otros. Se hará aquí una breve mención de la forma que adoptan los sistemas algebraicos que surgen de la aplicación del método de diferencias finitas. El lector encontrará un desarrollo más acabado del tema en Zienkiewicz y Morgan (1983) [2].

Resulta ilustrativo analizar un caso base sencillo: una placa rectangular de dimensiones $L \times M$ con espaciado uniforme $\Delta x = 1$ y $\Delta y = 1$, cuyas condiciones de contorno vienen dadas por

$$\phi_{i0} = \overline{\phi}, \quad i = 1 \dots L$$

$$\phi_{Lj} = \overline{\phi}, \quad j = 1 \dots M$$

$$\phi_{iM} = \overline{\phi}, \quad i = 1 \dots L$$

$$\phi_{0j} = \overline{\phi}, \quad j = 1 \dots M$$

$$(17)$$

Se puede demostrar que a partir de las *ec.* (16) y (17), la aplicación del método de diferencias finitas produce una solución del tipo

$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{F} \tag{18}$$

siendo K una matriz tri-diagonal por bloques

$$\mathbf{K} = k \begin{bmatrix} \overline{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & 0 & 0 \\ -\mathbf{I} & \overline{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} & \overline{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & -\mathbf{I} & \overline{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} \\ & & 0 & -\mathbf{I} & \overline{\mathbf{K}} \end{bmatrix}$$
(19)

donde ${\bf I}$ es una matriz identidad de $(M-1)\times (M-1)$ y $\overline{{\bf K}}$ se define convenientemente como

$$\overline{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} 4+c & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4+c & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4+c & -1 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & 4+c & -1 \\ & & & 0 & -1 & 4+c \end{bmatrix}$$
 (20)

Debe observarse en (20) la contribución a la diagonal principal de $\overline{\mathbf{K}}$ del término reactivo (constante c).

Por otro lado, ϕ y ${\bf F}$ son vectores, donde el primero contiene las incógnitas del problema y el segundo los valores que surgen de la presencia de fuentes de calor y la aplicación de las condiciones de borde. Ambos vectores serán de dimensiones $(L-1)\times (M-1)$, es decir, un valor para cada nodo de la malla. Los vectores tendrán la siguiente forma

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_{11} \\ \phi_{12} \\ \phi_{13} \\ \vdots \\ \phi_{1,M-1} \\ \phi_{21} \\ \phi_{22} \\ \phi_{23} \\ \vdots \\ \phi_{2,M-1} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,1} \\ \phi_{L-1,2} \\ \phi_{L-1,3} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,M-1} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ \vdots \\ F_{1,M-1} \\ F_{21} \\ F_{22} \\ F_{23} \\ \vdots \\ F_{L,M-1} \\ \vdots \\ F_{L-1,1} \\ F_{L-1,2} \\ F_{L-1,3} \\ \vdots \\ F_{L-1,M-1} \end{bmatrix}$$

$$(21)$$

1.5. Expresiones para mallas con espaciado no uniforme

En la sección anterior se hallaron las expresiones en diferencias para los operadores de derivadas de primer y segundo orden para el caso en que la malla es de espaciado uniforme en x y en y. Cuando la malla presenta un espaciado no uniforme ya no podemos asumir Δx y Δy como constantes y por lo tanto hay que reformular las expresiones para adaptarlas al nuevo contexto. Como se vio, la expresión del operador derivada segunda se puede aproximar con una precisión de segundo orden a partir de tres puntos de la malla. Por ejemplo, para la derivada en dirección x, el operador diferencial requiere de los puntos $\phi_{i+1,j}$, $\phi_{i,j}$ y $\phi_{i-1,j}$. La ec. (13) puede reescribirse como

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} = a_x^* \phi_{i+1,j} + b_x^* \phi_{i,j} + c_x^* \phi_{i-1,j}$$
(22)

donde

$$\phi_{i+1,j} : a_x^* = \frac{1}{\Delta x^2}$$

$$\phi_{i,j} : b_x^* = \frac{-2}{\Delta x^2}$$

$$\phi_{i-1,j} : c_x^* = \frac{1}{\Delta x^2}$$
(23)

Ahora bien, queremos encontrar una expresión similar a la de la *ec.* (22), pero donde los coeficientes asociados a cada nodo se adapten a una malla de espaciado no uniforme, como la de la *Fig.* 3.

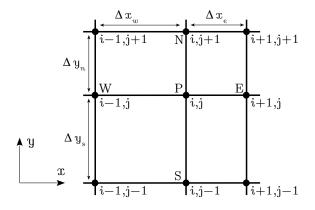


Figura 3: Discretización de una malla de para FDM con espaciado no uniforme.

Se introduce un leve cambio de notación para poder diferenciar las distancias entre nodos, ahora diferentes a derecha, izquierda, arriba y abajo. Para el punto P ubicado en la posición (i,j) sus nodos vecinos serán

$$(i+1,j):(E)$$
, a una distancia Δx_e de P
 $(i-1,j):(W)$, a una distancia Δx_w de P
 $(i,j+1):(N)$, a una distancia Δy_n de P
 $(i,j-1):(S)$, a una distancia Δy_s de P

Luego, queremos hallar los nuevos coeficientes que describen los operadores en diferencias para la derivada segunda en x e y

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} = a_x \phi_{i+1,j} + b_x \phi_{i,j} + c_x \phi_{i-1,j} \tag{24}$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_{i,j} = a_y \phi_{i,j+1} + b_y \phi_{i,j} + c_y \phi_{i,j-1}$$
(25)

Nótese que los coeficientes de la *ec.* (22) llevan un asterisco como superíndice para diferenciarlos de los coeficientes de las *ec.* (24) y (25) que hallaremos a continuación. Reformulando las expresiones de (6) y (10) para el nuevo esquema tenemos que

$$\phi_{i+1,j} = \phi_{i,j} + \Delta x_e \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x_e^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} + \mathcal{O}(\Delta x_e^3)$$

$$\phi_{i-1,j} = \phi_{i,j} - \Delta x_w \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x_w^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} + \mathcal{O}(\Delta x_w^3)$$
(26)

Luego, a partir de la *ec.* (26), se puede expresar el operador derivada de segundo orden como una combinación lineal de los puntos (i+1,j), (i,j) y (i-1,j)

$$\left(\frac{\partial^{2} \phi}{\partial x^{2}}\right)_{i,j} = a_{x} \left[\phi_{i,j} + \Delta x_{e} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x_{e}^{2}}{2} \left(\frac{\partial^{2} \phi}{\partial x^{2}}\right)_{i,j}\right] + b_{x}\phi_{i,j} + \dots
+ c_{x} \left[\phi_{i,j} - \Delta x_{w} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \frac{\Delta x_{w}^{2}}{2} \left(\frac{\partial^{2} \phi}{\partial x^{2}}\right)_{i,j}\right]$$
(27)

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \left[a_x + b_x + c_x\right] \phi_{i,j} + \left[a_x \Delta x_e - c_x \Delta x_w\right] \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{i,j} + \dots
+ \left[a_x \frac{\Delta x_e^2}{2} + c_x \frac{\Delta x_w^2}{2}\right] \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j}$$
(28)

Para que se cumpla la igualdad a ambos lados de la ec. (28) debe darse que

$$[ax + bx + cx] = 0$$

$$[ax\Delta x_e - cx\Delta x_w] = 0$$

$$\left[ax\frac{\Delta x_e^2}{2} + cx\frac{\Delta x_w^2}{2}\right] = 1$$
(29)

A partir de (29) puede expresarse el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{bmatrix} [1,5]1 & 1 & 1 \\ \Delta x_e & 0 & -\Delta x_w \\ \frac{\Delta x_e^2}{2} & 0 & \frac{\Delta x_w^2}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_x \\ b_x \\ c_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
(30)

Resolviendo el sistema de ecuaciones dado por (30) se obtiene

$$a_{x} = \frac{2}{\Delta x_{e}(\Delta x_{e} + \Delta x_{w})}$$

$$b_{x} = \frac{-2}{\Delta x_{e}\Delta x_{w}}$$

$$c_{x} = \frac{2}{\Delta x_{w}(\Delta x_{e} + \Delta x_{w})}$$
(31)

Debe observarse que cuando el espaciado de la malla es uniforme en dirección eje-x, es decir que $\Delta x_e = \Delta x_w = \Delta x$, las expresiones dadas por (31) resultan iguales a las introducidas previamente en (23).

Finalmente, arribamos a la expresión de la derivada segunda en dirección eje-x de la magnitud escalar ϕ

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_{i,j} = \frac{2\phi_{i+1,j}}{\Delta x_e (\Delta x_e + \Delta x_w)} - \frac{2\phi_{i,j}}{\Delta x_e \Delta x_w} + \frac{2\phi_{i-1,j}}{\Delta x_w (\Delta x_e + \Delta x_w)}$$
(32)

la cual es de primer orden de precisión. A diferencia de lo que ocurre cuando el espaciado es uniforme, la aproximación de la derivada segunda con tres puntos es $\mathcal{O}(\Delta \tilde{x})$, siendo $\Delta \tilde{x}$ la mayor de las distancias entre nodos en dirección x.

Se puede seguir el mismo razonamiento para encontrar que los coeficientes para la derivada en dirección eje-y son

$$a_{y} = \frac{2}{\Delta y_{n}(\Delta y_{n} + \Delta y_{s})}$$

$$b_{y} = \frac{-2}{\Delta y_{n} \Delta y_{s}}$$

$$c_{y} = \frac{2}{\Delta y_{s}(\Delta y_{n} + \Delta y_{s})}$$
(33)

y la derivada de segundo orden en dirección eje-y es

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\right)_{i,j} = \frac{2\phi_{i,j+1}}{\Delta y_n(\Delta y_n + \Delta y_s)} - \frac{2\phi_{i,j}}{\Delta y_n \Delta y_s} + \frac{2\phi_{i,j-1}}{\Delta y_s(\Delta y_n + \Delta y_s)} \tag{34}$$

Estamos ahora en condiciones de reformular el *stencil* de nodos interiores de la malla para el caso en que tanto Δx como Δy no son uniformes

$$-k\left(\frac{2\phi_{i+1,j}}{\Delta x_e(\Delta x_e + \Delta x_w)} - \frac{2\phi_{i,j}}{\Delta x_e\Delta x_w} + \frac{2\phi_{i-1,j}}{\Delta x_w(\Delta x_e + \Delta x_w)}\right) + \dots$$

$$-k\left(\frac{2\phi_{i,j+1}}{\Delta y_n(\Delta y_n + \Delta y_s)} - \frac{2\phi_{i,j}}{\Delta y_n\Delta y_s} + \frac{2\phi_{i,j-1}}{\Delta y_s(\Delta y_n + \Delta y_s)}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j}$$
(35)

Como ya se vio, la expresión de la ec. (35) es de carácter general y abarca también el caso en que el espaciado sea uniforme en x, en y o en ambos.

1.6. Condiciones de Borde

6.1. Dirichlet

Una condición de borde de tipo Dirichlet implica fijar el valor de la magnitud escalar en el borde, es decir, $\phi_{borde}=\overline{\phi}$, donde $\overline{\phi}$ es un valor arbitrario definido para una determinada frontera del dominio. Básicamente, aplicar una condición de frontera Dirichlet en FDM implica reemplazar el valor $\phi_{i,j}$ por $\overline{\phi}$ en todos los nodos $(i,j)\in\Gamma_{\phi}$. Luego, $\phi_{i,j}$ ya no es una incógnita sino un valor solución ya conocido. Una forma de adaptar el sistema de ecuaciones para los nodos pertenecientes a Γ_{ϕ} es reemplazar las ecuaciones por

$$\phi_{i,j} = \overline{\phi}, \, \forall \, (i,j) \in \Gamma_{\phi}$$
 (36)

Para llevar la ec. (36) al sistema de ecuaciones $\mathbf{K}\phi=\mathbf{F}$ se puede reemplazar cada fila de la matriz \mathbf{K} por la ecuación trivial $\phi_{i,j}=\overline{\phi}$. Esto equivale a transformar la fila en un vector de ceros con un 1 en la columna que integra la diagonal principal de la matriz. Luego, siguiendo la notación introducida en (21), tendremos que $\mathbf{F}_{i,j}=\overline{\phi}$.

6.2. Neumann

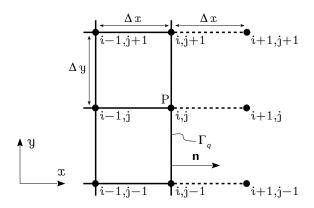


Figura 4: Frontera de una malla. Ubicación de nodos ficticios.

En la $\mathit{Fig.}$ 4 se plantea una sección de una malla donde a la frontera Γ_q (derecha) se le impone una condición de borde de tipo Neumann, es decir, se fija cuánto calor fluye en dirección normal a la frontera. Esta situación implica que ya no vamos a conocer el valor de temperatura asociada a cada nodo de la frontera Γ_q sino su valor de flujo normal.

Suponiendo una malla de espaciado uniforme tanto en x como en y, podemos expresar el *stencil* para un nodo $(i,j)\in\Gamma_q$ del mismo modo que se hizo en (16). A priori el resultado es idéntico a lo planteado

anteriormente, pero ahora se tiene que $\phi_{i+1,j}$ es una incógnita. Se introduce aquí el concepto de **nodo ficticio**, ya que como vemos en la *Fig.* 4 el nodo en la posición (i+1,j) está ubicado fuera de los límites de la malla, a una distancia Δx del nodo (i,j). Este nodo no tiene un significado físico, sino que se plantea como parte de la técnica numérica.

Ahora bien, necesitamos una ecuación más para obtener nuevamente un sistema con el mismo número de ecuaciones que incógnitas. Recordando las *ec.* (2) y (14), podemos reemplazar el operador derivada primera por su correspondiente ecuación en diferencias. Luego el flujo normal a través de la frontera queda definido como

$$-k\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} = q, \quad \forall (i,j) \in \Gamma_q$$

$$(37)$$

Obsérvese que la diferencia $(\phi_{i+1,j}-\phi_{i-1,j})$ es un vector paralelo al vector normal de la frontera Γ_q . Si se hubiera definido la diferencia como $(\phi_{i-1,j}-\phi_{i+1,j})$ también sería un vector en la misma dirección que el anterior, pero con sentido opuesto. Este último caso correspondería a una frontera cuyo vector normal apunta en sentido eje-x negativo.

Combinando los resultados de las ecuaciones (16) y (37) y realizando el análisis precedente para todas las fronteras arribamos finalmente a

$$-k\left(\frac{2\phi_{i-1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta x^{2}} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^{2}}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j} - \frac{2q}{\Delta x}, \quad [\text{frontera Este}]$$

$$-k\left(\frac{2\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j}}{\Delta x^{2}} + \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta y^{2}}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j} - \frac{2q}{\Delta x}, \quad [\text{frontera Oeste}]$$

$$-k\left(\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^{2}} + \frac{2\phi_{i,j-1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta y^{2}}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j} - \frac{2q}{\Delta y}, \quad [\text{frontera Norte}]$$

$$-k\left(\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta x^{2}} + \frac{2\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j}}{\Delta y^{2}}\right) + c\phi_{i,j} = G_{i,j} - \frac{2q}{\Delta y}, \quad [\text{frontera Sur}]$$

Se observa a partir de (38) que la aplicación de este tipo de condición de borde produce dos cambios en el *stencil* de la *ec.* (16):

- Se cambian algunos coeficientes de la matriz **K**, ya que se duplica la contribución del nodo anterior al borde y desaparece la contribución del nodo posterior al borde (nodo ficticio).
- Se agrega al vector F un coeficiente que depende del valor q de la condición Neumann, es decir, parte de la aplicación de la condición de borde implica la aparición de una fuente en el nodo de frontera.

El lector puede observar que a partir de las expresiones (38) se puede deducir la forma del *stencil* para nodos "esquina", es decir, nodos con dos aportes de frontera Neuman (uno en dirección \pm eje-x y el otro en dirección \pm eje-y).

6.3. Robin

El caso de las condiciones de contornos mixtas es un caso que combina las dos condiciones de contorno previamente tratadas, las Dirichlet o de valor impuesto para la incógnita y la de Neumann que impone condiciones sobre la derivada de esta función incógnita [1].

Si suponemos ahora que la frontera derecha de la Fig. 4 se encuentra sometida a una condición de frontera mixta o Robin, debemos encontrar la forma del stencil para el nuevo esquema. Recordando (2), podemos expresar la ecuación en diferencias para la frontera Γ_h

$$-k\frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta x} = h\left(\phi_{i,j} - \phi_{\infty}\right), \ \forall (i,j) \in \Gamma_h$$
(39)

Siguiendo la metodología aplicada para Neumann, encontramos que el *stencil* para todas las fronteras de la malla con condición Robin es

$$-k\left(\frac{2\phi_{i-1,j}-2\phi_{i,j}}{\Delta x^2}+\frac{\phi_{i,j+1}-2\phi_{i,j}+\phi_{i,j-1}}{\Delta y^2}\right)+\dots$$

$$\dots+\phi_{i,j}\left(c+\frac{2h}{\Delta x}\right)=G_{i,j}+\frac{2h\phi_{\infty}}{\Delta x}, \qquad [frontera\ Este]$$

$$-k\left(\frac{2\phi_{i+1,j}-2\phi_{i,j}}{\Delta x^2}+\frac{\phi_{i,j+1}-2\phi_{i,j}+\phi_{i,j-1}}{\Delta y^2}\right)+\dots$$

$$\dots+\phi_{i,j}\left(c+\frac{2h}{\Delta x}\right)=G_{i,j}+\frac{2h\phi_{\infty}}{\Delta x}, \qquad [frontera\ Oeste]$$

$$-k\left(\frac{\phi_{i+1,j}-2\phi_{i,j}+\phi_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{2\phi_{i,j-1}-2\phi_{i,j}}{\Delta y^2}\right)+\dots$$

$$\dots+\phi_{i,j}\left(c+\frac{2h}{\Delta y}\right)=G_{i,j}+\frac{2h\phi_{\infty}}{\Delta y}, \qquad [frontera\ Norte]$$

$$-k\left(\frac{\phi_{i+1,j}-2\phi_{i,j}+\phi_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{2\phi_{i,j+1}-2\phi_{i,j}}{\Delta y^2}\right)+\dots$$

$$\dots+\phi_{i,j}\left(c+\frac{2h}{\Delta y}\right)=G_{i,j}+\frac{2h\phi_{\infty}}{\Delta y}, \qquad [frontera\ Sur]$$

Aquí la imposición de este tipo de condición de borde realiza los siguientes cambios en el sistema:

- Al igual que Neumann, se cambian algunos coeficientes de la matriz K, ya que se duplica la contribución del nodo anterior al borde y desaparece la contribución del nodo posterior al borde (nodo ficticio). Pero también aparece una contribución al nodo (i,j), es decir, se suma un aporte que depende del coeficiente de convección h a la diagonal principal de la matriz.
- Se agrega al vector \mathbf{F} un coeficiente que depende del valor h de la condición Robin, es decir, parte de la aplicación de la condición de borde implica la aparición de una fuente en el nodo de frontera (si se compara con el caso Neumann podría pensarse en una equivalencia $q=-h\phi_{\infty}$).

2. FVM - Método de Volúmenes Finitos

2.1. Descripción del Método

Continuando con la descripción de los métodos numéricos que forman parte de este desarrollo, se presenta el Método de Volúmenes Finitos. Existen distintas formulaciones del mismo para hallar la solución de un sistema. Puntualmente en este trabajo, nos enfocamos en el método de volúmenes finitos para problemas bidimensionales, con tratamiento de celdas ortoédricas con los lados alineados a los ejes cartesianos. La solución del sistema se expresa en el centroide de cada celda [3].

En contraste a lo que sucede en FDM, donde se reemplazan los operadores diferenciales por ecuaciones en diferencias definidas para cada nodo de la malla, en el método de volúmenes finitos se plantea una solución del sistema a partir de la aplicación de un balance integral en todo el dominio, el cual se particiona en **celdas** o volúmenes finitos. Finalmente se arriba también a un sistema de ecuaciones de la forma $\mathbf{K}\phi = \mathbf{F}$ a partir del ensamble de todas las contribuciones individuales.

2.2. Ecuación del Calor

Volvamos a la ecuación del calor introducida en (1) y (2). Partimos nuevamente de un dominio arbitrario como el de la Fig. 2, donde ahora Ω se encuentra particionado en N celdas sin solapamiento entre sí. Si a la ec. (1) se le aplica un balance integral obtenemos

$$\iiint_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega - \iiint_{\Omega} k \Delta \phi d\Omega + \iiint_{\Omega} c \phi d\Omega = \iiint_{\Omega} G d\Omega$$
 (41)

lo cual puede ser expresado en términos de la discretización del dominio Ω como

$$\sum_{j=1}^{N} \left[\iiint_{\Omega_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega_{j} - \iiint_{\Omega_{j}} k \Delta \phi d\Omega_{j} + \iiint_{\Omega_{j}} c \phi d\Omega_{j} \right] = \sum_{j=1}^{N} \left[\iiint_{\Omega_{j}} G d\Omega_{j} \right]$$
(42)

siendo Ω_j la porción del dominio correspondiente al volumen de la celda j. La ec. (42) plantea que el balance integral en todo el dominio Ω puede ser expresado como una sumatoria de las contribuciones de cada balance local, es decir, el balance para cada celda. Asimismo, se observa que las integrales son volumétricas. Aplicando el Teorema de la Divergencia [4] al término difusivo, se puede pasar de una integral de volumen a una de superficie según

$$\sum_{j=1}^{N} \left[\iiint_{\Omega_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega_{j} - \sum_{i=1}^{M} \iint_{\Gamma_{i}} k \nabla \phi \cdot d\Gamma_{i} + \iiint_{\Omega_{j}} c \phi d\Omega_{j} \right] = \sum_{j=1}^{N} \left[\iiint_{\Omega_{j}} G d\Omega_{j} \right]$$
(43)

En (43) se plantea que la divergencia $div(\nabla\phi)$ en el volumen de control Ω_j puede ser evaluada como el gradiente $\nabla\phi$ sobre el contorno de la celda. Suponiendo que cada celda es un poliedro de M caras, luego el contorno puede descomponerse en M superficies. Debe observarse a su vez que se introduce un producto escalar entre el vector gradiente $\nabla\phi$ y los vectores normales a las superficies que forman el contorno de la celda, $d\Gamma_i$ (nótese el uso de negrita para indicar magnitud vectorial).

La ec. (43) puede reescribirse como

$$\sum_{j=1}^{N} \left[\iiint_{\Omega_{j}} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega_{j} + \iiint_{\Omega_{j}} c\phi d\Omega_{j} - \iiint_{\Omega_{j}} Gd\Omega_{j} \right] = \sum_{j=1}^{N} \left[\sum_{i=1}^{M} \iint_{\Gamma_{i}} k \nabla \phi \cdot d\Gamma_{i} \right]$$
(44)

donde se pone en evidencia que todo lo que se acumula o se pierde de la magnitud escalar ϕ en el interior del dominio Ω , debe estar en correspondencia con los flujos que atraviesan el contorno de dicho dominio [1].

Asumiendo ahora que el valor de ϕ será constante por celda y por cara, luego podemos realizar las siguientes simplificaciones:

$$\iiint_{\Omega_{j}} \phi d\Omega_{j} = \phi_{j} V_{j}$$

$$\iiint_{\Gamma_{i}} \phi d\Gamma_{i} = \phi_{i} \mathbf{A}_{i}$$
(45)

de donde se deduce que

- ϕ_j es el valor de la magnitud ϕ en el centroide de la celda j.
- V_i es el volumen de la celda j.
- ϕ_i es el valor de la magnitud ϕ en el centro de la cara i (perteneciente a la celda j).
- $\mathbf{A}_i = A_i \mathbf{n}_i$ es el vector normal a la superficie de la cara i, cuya magnitud es A_i y su dirección viene dada por el versor \mathbf{n}_i .

Finalmente, arribamos a

$$\sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial \phi_j}{\partial t} + c\phi_j - G \right] V_j = \sum_{j=1}^{N} \left[\sum_{i=1}^{M} k \nabla \phi_i \cdot \mathbf{A}_i \right]$$
 (46)

la cual corresponde a la expresión general del método de volúmenes finitos aplicado a la ecuación de calor con términos difusivo, reactivo y fuente, en estado transiente.

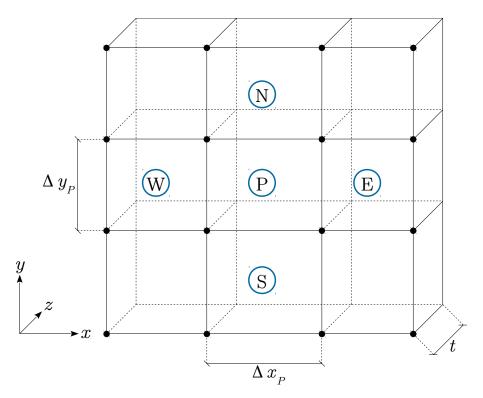


Figura 5: Vecindad de una celda P para el Método de Volúmenes Finitos.

2.3. FVM en mallas estructuradas bidimensionales

Nos interesa ahora adaptar el resultado obtenido en (46) a un dominio estructurado como el de la Fig. 5. Como puede verse, la malla se compone de celdas prismáticas, cuyos lados se encuentran alineados con los ejes cartesianos. Asimismo, los límites en el plano x-y de cada celda vienen dados por los nodos de la malla. Obsérvese que la malla posee un espesor t, el cual se considera constante en todo el dominio (aunque no es obligatorio) y permite definir el volumen de cada celda.

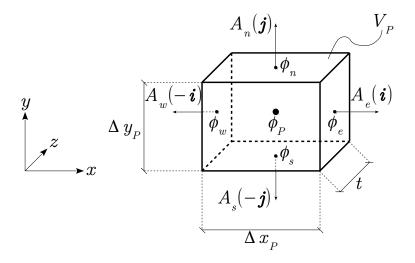


Figura 6: Propiedades de la celda P.

Analizando más en detalle la celda P, como puede verse en la Fig. 6, tenemos que:

- Sus dimensiones son $\Delta x_P \times \Delta y_P \times t$, siendo Δx_P ancho, Δy_P alto y t espesor.
- El volumen de la celda es $V_P = \Delta x_P \Delta y_P t$.
- En dos dimensiones nos interesa saber lo que sucede con las caras perpendiculares al plano x-y de cada celda, es decir, las áreas a izquierda, derecha, arriba y abajo (o bien *East*, *West*, *North* y *South*). Dichas áreas son:
 - o $A_e = A_w = \Delta y_P t$ (caras derecha e izquierda, respectivamente).
 - o $A_n = A_s = \Delta x_P t$ (caras superior e inferior, respectivamente).

A su vez, se indican los versores normales de cada una de estas áreas, siendo $\pm \pmb{i} = (\pm 1,0,0)$ para las caras derecha e izquierda, y $\pm \pmb{j} = (0,\pm 1,0)$ para las caras superior e inferior, respectivamente, dado la característica estructurada de la malla. En general, el versor normal a una cara se define como:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{x}_{neighb} - \mathbf{x}_{P}}{\|\mathbf{x}_{neighb} - \mathbf{x}_{P}\|}$$

- Como puede verse en la *Fig.* 6, la celda cuenta con 5 valores característicos:
 - Valor en el centroide de la celda, ϕ_P .
 - \circ Valores en los centros de cada cara, ϕ_e , ϕ_w , ϕ_n y ϕ_s .
- Las celdas vecinas son:
 - \circ E y W, con las que comparte las caras A_e y A_w , respectivamente.
 - o N y S, con las que comparte las caras A_n y A_s , respectivamente.

Debe observarse la notación aquí introducida, donde se especifican centroides de celdas con letras mayúsculas (P,E,W,N y S) y las caras de la celda con letras minúsculas (e, w, n y s).

Consideremos ahora el sistema de la *ec.* (46) como estacionario, es decir, podemos despreciar el término de variación temporal. A partir de las consideraciones previas, y suponiendo que la celda P posee sus cuatro vecinos, podemos expresar el *stencil* para dicha celda como:

$$c\phi_P V_P - G_P V_P = k_e \nabla \phi_e \cdot \mathbf{A}_e + k_w \nabla \phi_w \cdot \mathbf{A}_w + k_n \nabla \phi_n \cdot \mathbf{A}_n + k_s \nabla \phi_s \cdot \mathbf{A}_s \tag{47}$$

En (47) se ha expresado el balance para la celda P, donde en el lado derecho de la ecuación se especificó el gradiente de la magnitud ϕ a través del contorno de la celda, en el cual ya se identifican cada una de las áreas que componen dicho contorno.

En este punto, debemos definir cómo evaluar cada uno de los gradientes, ya que el sistema de ecuaciones que vamos a resolver, a partir de la aplicación del método de volúmenes finitos, permite hallar la distribución de la magnitud ϕ en toda la malla, pero los valores se ubican en el centroide de cada celda. Esto nos obliga a definir cada una de las expresiones de los gradientes en función de los valores de ϕ en centroides de celdas.

Tomemos por ejemplo el gradiente a través de la cara (e), es decir, $\nabla \phi_e$. Debemos hallar una expresión para el gradiente a través de la superficie A_e . Como puede verse en la Fig. 5, las celdas P y E comparten dicha superficie (aunque la notación si es a izquierda o derecha depende meramente de la celda P y no de E). Luego, a partir de aproximaciones en series de Taylor (como se vio ya para FDM) podemos hallar que

$$\nabla \phi_e = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_e (\mathbf{i}) = \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta_e}(\mathbf{i})$$
(48)

donde δ_e es la distancia entre los centroides de las celdas P y E. En (48) se halló el gradiente a través de la cara A_e como una expresión en diferencias entre los valores de ϕ en los centroides de las celdas P y E. Como el gradiente es un vector, en (48) se expresa también su correspondiente versor. Del mismo modo, ahora para la cara (w) hallamos que

$$\nabla \phi_w = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_w (-i) = \frac{\phi_P - \phi_W}{\delta_w} (-i) = \frac{\phi_W - \phi_P}{\delta_w} (i)$$
(49)

con δ_w la distancia entre los centroides de las celdas P y W. Siguiendo esta metodología, se pueden hallar las correspondientes expresiones para los gradientes a través de A_n y A_s . Luego la *ec.* (47) se puede reformular convenientemente como

$$c\phi_{P}V_{P} - G_{P}V_{P} = k_{e} \frac{\phi_{E} - \phi_{P}}{\delta_{e}}(\mathbf{i}) \cdot (\mathbf{i})A_{e} + k_{w} \frac{\phi_{W} - \phi_{P}}{\delta_{w}}(\mathbf{i}) \cdot (\mathbf{i})A_{w} + \dots$$

$$+ k_{n} \frac{\phi_{N} - \phi_{P}}{\delta_{n}}(\mathbf{j}) \cdot (\mathbf{j})A_{n} + k_{s} \frac{\phi_{S} - \phi_{P}}{\delta_{s}}(\mathbf{j}) \cdot (\mathbf{j})A_{s}$$

$$(50)$$

Evaluando los productos escalares en (50), arribamos a

$$c\phi_P V_P - G_P V_P = k_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\delta_e} A_e + k_w \frac{\phi_W - \phi_P}{\delta_w} A_w + \dots + k_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\delta_n} A_n + k_s \frac{\phi_S - \phi_P}{\delta_s} A_s$$

$$(51)$$

Finalmente, tenemos que el stencil para la celda P es

$$\phi_P (R_e + R_w + R_n + R_s + cV_P) - R_e \phi_E - R_w \phi_W - R_n \phi_N - R_s \phi_S = G_P V_P$$
 (52)

siendo

$$R_e = \frac{k_e A_e}{\delta_e}, \quad R_w = \frac{k_w A_w}{\delta_w}, \quad R_n = \frac{k_n A_n}{\delta_n}, \quad R_s = \frac{k_s A_s}{\delta_s}$$
 (53)

A partir de (52) y (53) se puede hallar el *stencil* que surge de la aplicación del método de volúmenes finitos a una celda P cuyos vecinos son E, W, N y S. Si se sigue el mismo procedimiento para todas las celdas del dominio, se arriba nuevamente a un sistema de ecuaciones de la forma $\mathbf{K}\phi=\mathbf{F}$, con características similares a lo visto anteriormente para FDM.

2.4. Coeficientes del término difusivo

En esta sección, se hace una breve mención sobre las constantes que forman parte de los coeficientes R_e , R_w , R_s y R_n de la ec. (53). Cada uno de estos coeficientes se desprenden de la presencia del término difusivo en la ecuación del calor y se componen de tres magnitudes que van a depender de la física del material y de la discretización del dominio:

- La conductividad térmica k_i, la cual es una propiedad física del material que mide su capacidad de conducción de calor.
- El área A_i , correspondiente a la porción del contorno de la celda en la que se evalúa el flujo térmico.
- La distancia δ_i , la cual mide la separación entre los dos centroides de las celdas que comparten la cara (i).

Veamos término a término cómo éstos se deducen a partir de los datos de entrada al método numérico. Solo a los fines de clarificar la exposición, se ve en detalle lo que sucede para una celda P con vecinos E y W, a derecha e izquierda, respectivamente. El lector encontrará luego que el análisis es idéntico para las relaciones de P con vecinos N y S.

Superficies en las caras (e) y (w) de la celda P

En la *Fig.* 7 se especifican todos los términos que forman parte de los coeficientes R_e y R_w . Las áreas sombreadas corresponden a las caras (e) y (w) donde se evalúa la difusión de ϕ .

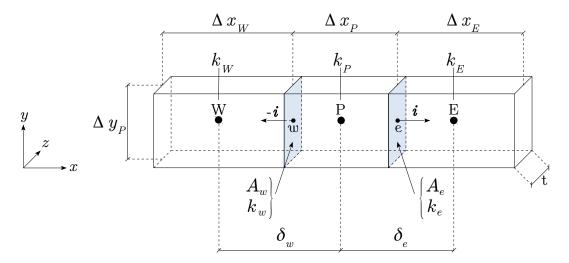


Figura 7: Propiedades de la celda P. Términos que intervienen en el cálculo de los coeficientes del término difusivo a izquierda y derecha.

Se deduce que las áreas a izquierda y derecha serán

$$A_e = A_w = \Delta y_P t \tag{54}$$

Distancias a los centroides de las celdas E y W

Para definir las distancias entre centroides de las celdas, basta con observar que se componen como la suma entre las mitades de cada celda en esa dirección. Esto es,

$$\delta_e = \frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_E}{2}$$

$$\delta_w = \frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_W}{2}$$
(55)

Conductividad térmica en las caras (e) y (w) de la celda P

También a partir de la Fig. 7, podemos ver que k_e y k_w representan la conductividad térmica en las caras derecha e izquierda de la celda P. Ahora bien, pensemos en cada una de las celdas con un valor de conductividad constante en todo su volumen. Luego P tendrá una conductividad k_P y E una conductividad k_E . Como se vio antes, ambas celdas comparten la superficie A_e , entonces si $k_P = k_E$ inmediatamente se obtiene el valor de la conductividad k_e sobre A_e . Pero si $k_P \neq k_E$, el valor de conductividad en A_e no es ni k_P ni k_E . Se habla en este caso de una "interfaz" entre ambas celdas y el valor correspondiente de conductividad debe ser promediado a partir de las conductividades en cada celda. Adoptamos aquí la media armónica (debido a que la media aritmética no garantiza la conservación de los flujos), a partir de definir una relación f_e que depende de las distancias entre centroides y desde cada centroide a la superficie A_e . De igual manera se define para el caso en que $k_P \neq k_W$. Recordando los resultados obtenidos en (55) se obtiene que

$$f_{e} = \frac{\frac{\Delta x_{E}}{2}}{\frac{\Delta x_{P}}{2} + \frac{\Delta x_{E}}{2}} = \frac{\Delta x_{E}}{2\delta_{e}}$$

$$f_{w} = \frac{\frac{\Delta x_{W}}{2}}{\frac{\Delta x_{P}}{2} + \frac{\Delta x_{W}}{2}} = \frac{\Delta x_{W}}{2\delta_{w}}$$
(56)

En (56) se definieron los coeficientes que permiten hallar las expresiones finales de las conductividades k_e y k_w según:

$$k_{e} = \frac{k_{P}k_{E}}{f_{e}k_{P} + (1 - f_{e})k_{E}}$$

$$k_{w} = \frac{k_{P}k_{W}}{f_{e}k_{P} + (1 - f_{w})k_{W}}$$
(57)

Finalmente, podemos hallar los valores de los coeficientes R_e y R_w a partir de los resultados obtenidos en las ecuaciones (54) a (57). El análisis precedente pone de manifiesto la gran dependencia de los coeficientes con la geometría de cada celda, siendo esto último una consecuencia de la discretización adoptada para el dominio.

A continuación, en las ecuaciones (58) a (61) se introducen las expresiones de las constantes que componen los coeficientes R_n y R_s .

Superficies en las caras (n) y (s) de la celda P

$$A_n = A_s = \Delta x_P t \tag{58}$$

Distancias a los centroides de las celdas N y S

$$\delta_n = \frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_N}{2}$$

$$\delta_s = \frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_S}{2}$$
(59)

Conductividad térmica en las caras (n) y (s) de la celda P

$$f_n = \frac{\frac{\Delta x_N}{2}}{\frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_N}{2}} = \frac{\Delta x_N}{2\delta_n}$$

$$f_s = \frac{\frac{\Delta x_S}{2}}{\frac{\Delta x_P}{2} + \frac{\Delta x_S}{2}} = \frac{\Delta x_S}{2\delta_s}$$
(60)

$$k_{n} = \frac{k_{P}k_{N}}{f_{n}k_{P} + (1 - f_{n})k_{N}}$$

$$k_{s} = \frac{k_{P}k_{S}}{f_{s}k_{P} + (1 - f_{s})k_{S}}$$
(61)

2.5. Condiciones de borde

En las siguientes secciones se muestra el desarrollo de ecuaciones para obtener el *stencil* de cada frontera para cada tipo de condición de borde. No se plantea el caso en que para una misma celda haya más de una condición de borde (celda ubicada en una esquina de la malla), ya que, como comprobará luego el lector, éstas pueden ser obtenidas a partir de las fórmulas y ecuaciones enunciadas a continuación.

5.1. Dirichlet

En el método de volúmenes finitos, las condiciones de borde de tipo Dirichlet implican fijar el valor de la magnitud ϕ en la cara de la celda que pertenece a la frontera. A diferencia de lo que ocurre con FDM, la solución del método de volúmenes finitos se obtiene en los centroides de celdas, es por esto, que debemos reemplazar el término difusivo con el valor de la condición de borde impuesta.

Como vimos anteriormente, el término difusivo queda siempre planteado de la siguiente forma:

$$k_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{A}_i = k_i \frac{\phi_F - \phi_P}{\delta_i} A_i, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
(62)

donde ϕ_F es el valor en el centroide del vecino F de P. Ahora bien, como estamos parados sobre un borde ya no habrá una celda vecina, de modo que ϕ_F tiene que ser reemplazado por el valor de la condición de borde. Dicho borde se encuentra a una distancia $\Delta_P/2$ desde el centroide de la celda P, al que se le impone un valor arbitrario $\phi_{borde}=\overline{\phi}$. Luego, podemos reformular la *ec.* (62) para hallar el término difusivo en el borde:

$$k_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{A}_i = k_i \frac{\overline{\phi} - \phi_P}{\frac{\Delta_P}{2}} A_i = R_i^* (\overline{\phi} - \phi_P), \quad i = \{e, w, n, s\}$$
 (63)

donde el coeficiente R_i^* es

$$R_i^* = \frac{2k_i A_i}{\Delta_P}, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
 (64)

con $\Delta_P = \Delta x_P$ para las fronteras a derecha e izquierda y $\Delta_P = \Delta y_P$ para las fronteras a arriba y abajo. Finalmente, podemos hallar el *stencil* para cada frontera de borde a partir de la combinación de las ecuaciones (52), (53), (63) y (64).

$$\phi_{P}(R_{e}^{*} + R_{w} + R_{n} + R_{s} + cV_{P}) - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + R_{e}^{*}\overline{\phi} \qquad (E)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{w}^{*} + R_{n} + R_{s} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + R_{w}^{*}\overline{\phi} \qquad (W)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{w} + R_{n}^{*} + R_{s} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + R_{n}^{*}\overline{\phi} \qquad (N)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{w} + R_{n} + R_{s}^{*} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} = G_{P}V_{P} + R_{s}^{*}\overline{\phi} \qquad (S)$$

siendo

$$R_e^* = \frac{2k_e A_e}{\Delta x_P}, \quad R_w^* = \frac{2k_w A_w}{\Delta x_P}, \quad R_n^* = \frac{2k_n A_n}{\Delta y_P}, \quad R_s^* = \frac{2k_s A_s}{\Delta y_P}$$
 (66)

Obsérvese en (65) que la condición de borde Dirichlet aporta un término fuente (lado derecho de la ecuación) que depende de la temperatura impuesta $\overline{\phi}$ y el coeficiente de difusión modificado.

5.2. Neumann

Como ya se vio, aplicar una condición de frontera Neumann implica imponer el valor de flujo normal en dicha frontera. Recordando la expresión para este tipo de condiciones de borde

$$-k_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}}\right)_i = -k_i \nabla \phi_i = \overline{q}, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
(67)

vemos que se especifica un valor \overline{q} para el flujo normal a través de la frontera, en este caso, la cara i de la celda. Luego podemos reemplazar el resultado de (67) en la expresión de la difusión en cada cara de la celda

$$-k_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{A}_i = -k_i \nabla \phi_i A_i = \overline{q} A_i, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
(68)

En (68) se observa, nuevamente, que el versor del gradiente es paralelo al versor de la cara de la celda, motivo que permite simplificar el producto interno entre ambos. Finalmente, podemos hallar el *stencil* para cada frontera Neumann a partir de la combinación de las ecuaciones (52), (53) y (68).

$$\phi_{P}(R_{w} + R_{n} + R_{s} + cV_{P}) - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} - \overline{q}A_{e} \qquad (E)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{n} + R_{s} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} - \overline{q}A_{w} \qquad (W)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{w} + R_{s} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} - \overline{q}A_{n} \qquad (N)$$

$$\phi_{P}(R_{e} + R_{w} + R_{n} + cV_{P}) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} = G_{P}V_{P} - \overline{q}A_{s} \qquad (S)$$

Obsérvese en (69), al igual que lo ocurrido con las fronteras Dirichlet, la condición de borde Neumann aporta un término fuente (lado derecho de la ecuación), pero este depende del valor de flujo impuesto \overline{q} y ya no habrá contribución en la diagonal principal de la matriz (desaparece el coeficiente R_i del lado i, con $i = \{e, w, n, s\}$).

5.3. Robin

En el método de volúmenes finitos podemos expresar la condición de borde Robin para una frontera i como

$$-k_i \left(\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}}\right)_i = h(\phi_i - \phi_\infty) \Rightarrow -k_i \nabla \phi_i = h(\phi_i - \phi_\infty), \quad i = \{e, w, n, s\}$$
 (70)

A partir de la *ec.* (70) podemos ver que ahora tenemos dos incógnitas, ya que desconocemos tanto el valor de ϕ en el borde como su gradiente. Necesitamos incorporar una ecuación más para tener dos

ecuaciones con dos incógnitas y resolver dicho sistema. A partir de Series de Taylor centradas en la cara de la celda podemos plantear:

$$\phi_P = \phi_i + \nabla \phi_i(\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_i), \quad i = \{e, w, n, s\}$$
(71)

donde $(\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_i) = \delta_i$, es la distancia (vectorial) desde el centroide de la celda P a la cara (i). Luego, a partir de (70) y (71) podemos armar el siguiente sistema de ecuaciones

$$h\phi_i + k_i \nabla \phi_i = h\phi_{\infty}$$

$$\phi_i + \nabla \phi_i \delta_i = \phi_P$$
(72)

o bien en forma de sistema compacto [1]

$$\begin{bmatrix} k_i & h \\ \delta_i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nabla \phi_i \\ \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h\phi_{\infty} \\ \phi_P \end{bmatrix}, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
 (73)

Las expresiones que surgen de la resolución del sistema dado en (73) son

$$\begin{bmatrix} \nabla \phi_i \\ \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [2] \frac{h\phi_{\infty}}{k - h\delta_i} & - & \frac{h\phi_P}{k - h\delta_i} \\ -\frac{h\phi_{\infty}\delta_i}{k - h\delta_i} & + & \frac{k\phi_P}{k - h\delta_i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_i + b_i\phi_P \\ c_i + d_i\phi_P \end{bmatrix}, \quad i = \{e, w, n, s\}$$
 (74)

Como puede observarse en (74), a partir de la resolución del sistema de ecuaciones de 2×2 se pudieron hallar expresiones de ϕ_i y $\nabla \phi_i$ como funciones lineales de ϕ_P , es decir, la temperatura en el centroide de la celda (no confundir la constante a_i con el área A_i). Esto nos permite a su vez reemplazar el término difusivo en fronteras Robin directamente por la expresión dada por (74). Así entonces

$$-k_i \nabla \phi_i \cdot \mathbf{A}_i = -k_i \nabla \phi_i A_i = -k_i \left(a_i + b_i \phi_P \right) A_i, \quad i = \{ e, w, n, s \}$$

$$(75)$$

Finalmente, combinando los resultados obtenidos en (52), (53), (74) y (75) hallamos el *stencil* para cada frontera de tipo Robin

$$\phi_{P} \left(-k_{e}b_{e}A_{e} + R_{w} + R_{n} + R_{s} + cV_{P} \right) - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + k_{e}a_{e}A_{e} \quad (E)$$

$$\phi_{P} \left(R_{e} - k_{w}b_{w}A_{w} + R_{n} + R_{s} + cV_{P} \right) - R_{e}\phi_{E} - R_{n}\phi_{N} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + k_{w}a_{w}A_{w} \quad (W)$$

$$\phi_{P} \left(R_{e} + R_{w} - k_{n}b_{n}A_{n} + R_{s} + cV_{P} \right) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{s}\phi_{S} = G_{P}V_{P} + k_{n}a_{n}A_{n} \quad (N)$$

$$\phi_{P} \left(R_{e} + R_{w} + R_{n} - k_{s}b_{s}A_{s} + cV_{P} \right) - R_{e}\phi_{E} - R_{w}\phi_{W} - R_{n}\phi_{N} = G_{P}V_{P} + k_{s}a_{s}A_{s} \quad (S)$$

$$(76)$$

La *ec.* (76) pone de manifiesto que la imposición de una frontera de tipo Robin producirá la aparición de un término fuente como contribución al vector \mathbf{F} , así como también un aporte a la diagonal principal de la matriz \mathbf{K} (término dependiente de ϕ_P).

3. FEM - Método de Elementos Finitos

3.1. Descripción del Método

La última de las técnicas numéricas que forman parte de este desarrollo es el Método de Elementos Finitos, a partir del cual hallaremos la solución de las ecuaciones diferenciales bajo estudio mediante el planteo de **Residuos Ponderados** con **funciones de prueba** arbitrarias. El lector encontrará un desarrollo más acabado acerca de formulaciones mediante Residuos Ponderados y la aplicación del método de elementos finitos en [1] y [2].

El **método de residuos ponderados** consiste en aproximar la solución mediante una expansión como la de la *ec.* (77)

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \psi + \sum_{m=1}^{M} a_m N_m \tag{77}$$

donde la función ψ está definida en todo el dominio y cumple con las condiciones de contorno. Asimismo, en (77) N_m son **funciones de prueba** definidas a lo largo de todo el dominio Ω y los coeficientes a_m son las incógnitas a resolver mediante un sistema lineal de ecuaciones algebraicas. La aplicación del método de residuos ponderados, implica hallar la solución al siguiente balance integral:

$$\int_{\Omega} W R_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \overline{W} R_{\Gamma} d\Gamma = 0 \tag{78}$$

con R_Ω y R_Γ residuos generados por la aproximación en el dominio Ω y la frontera Γ , respectivamente. Por otro lado W son funciones de peso adoptadas según la técnica numérica elegida, mientras que \overline{W} son funciones de peso arbitrarias establecidas en la frontera Γ .

En contraposición al método de Diferencias Finitas, basado en la aproximación de los operadores diferenciales mediante series de Taylor, el método de Residuos Ponderados propone aproximar la solución mediante una familia de funciones pesadas (ponderadas), las cuales se evalúan en la ecuación diferencial del problema para determinar el valor correcto de dichos pesos.

3.2. Ecuación del Calor

Nos centraremos en plantear el método de elementos finitos aplicado a la resolución de la ecuación del calor, con presencia de términos difusivo, reactivo y producción. Partimos nuevamente de un dominio Ω arbitrario, donde el campo de velocidades es nulo ($\mathbf{v}=0$), la conductividad térmica es k>0, la constante de reacción es c>0 y el término producción es $G\neq 0$. Luego, podemos plantear convenientemente el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales para hallar la distribución de la variable ϕ :

$$A(\phi) = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) - c\phi + G = 0 \right\}$$
 (79)

$$B(\phi) = \begin{cases} \phi - \overline{\phi} = 0, & \text{en } \Gamma_{\phi} \\ k \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} + \overline{q} = 0, & \text{en } \Gamma_{q} \\ k \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{n}} + h \left(\phi - \phi_{\infty} \right) = 0, & \text{en } \Gamma_{h} \end{cases}$$
 (80)

siendo (79) la ecuación principal del sistema y (80) las ecuaciones generales para las condiciones de borde de dicho sistema. Aplicamos ahora residuos ponderados:

$$\int_{\Omega} W R_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \overline{W} R_{\Gamma} d\Gamma = 0$$

$$\Rightarrow \int_{\Omega} W \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) - c \hat{\phi} + G \right] d\Omega + \dots$$

$$\dots + \int_{\Gamma_{\phi}} \overline{W} \left(\hat{\phi} - \overline{\phi} \right) d\Gamma + \int_{\Gamma_{q}} \overline{W} \left(k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \eta_x + k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \eta_y + \overline{q} \right) d\Gamma + \dots$$

$$\dots + \int_{\Gamma_{b}} \overline{W} \left(k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \eta_x + k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \eta_y + h(\hat{\phi} - \phi_{\infty}) \right) d\Gamma = 0$$
(81)

Se puede ver que si utilizamos el Teorema de la Divergencia [4] y expresamos en su forma débil el primer término de la ec. (81), a la vez que convenientemente definimos los pesos \overline{W} del residuo en la frontera como:

$$\begin{cases} \overline{W}=0 & \text{en } \Gamma \phi \\ \overline{W}=-W & \text{en } \Gamma_q \text{ y } \Gamma_h \end{cases} \tag{82}$$

podemos anular parte de los residuos en la frontera Neumann y Robin como puede verse en la ecuación (83).

$$\int_{\Omega} \left(k_x \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + k_y \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega} W c \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_h} W h \hat{\phi} d\Gamma = \dots$$

$$\dots \int_{\Omega} W G d\Omega - \int_{\Gamma_q} W \overline{q} d\Gamma - \int_{\Gamma_h} W h \phi_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}} W F_x^r d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}} W F_y^r d\Gamma$$
(83)

Obsérvese en (82) que en la frontera Dirichlet es propicio asignar un peso nulo, ya que no habrá residuo en dicha frontera debido a que conocemos exactamente el valor de ϕ en todo Γ_{ϕ} . Los términos F_x^r y F_y^r se denominan **flujos reactivos**. Ya que sobre la frontera Γ_{ϕ} conocemos el valor de ϕ , estos flujos no son tenidos en cuenta para calcular ϕ en el resto del dominio, pero sí son calculados una vez resuelto el sistema de ecuaciones, como una variable secundaria.

El balance formulado en (83) plantea la aplicación de residuos ponderados en el dominio Ω , siendo el mismo un balance global (visión macroscópica del problema). El método de elementos finitos parte de la idea de dividir la región [1] Ω en un conjunto de subdominios o **elementos** Ω^e sin solapamiento y que cubran todo el dominio, de forma que la aproximación $\hat{\phi}$ se construya a *pedazos* o *trozos* sobre cada subdominio. Expresando matemáticamente lo anterior en (84),

$$\bigcap_{e} \Omega^{e} = \varnothing \\
\bigcup_{e} \Omega^{e} = \Omega$$
(84)

De esta forma, y teniendo en cuenta la propiedad aditiva de las integrales, los términos en (83) se

pueden calcular agregando a la integral la contribución de cada elemento,

$$\sum_{e=1}^{E} \left[\int_{\Omega^{e}} \left(k_{x} \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + k_{y} \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega^{e}} W c \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_{h}^{e}} W h \hat{\phi} d\Gamma \right] = \dots$$

$$\dots \sum_{e=1}^{E} \left[\int_{\Omega^{e}} W G d\Omega - \int_{\Gamma_{q}^{e}} W \overline{q} d\Gamma - \int_{\Gamma_{h}^{e}} W h \phi_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^{e}} W F_{x}^{r} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^{e}} W F_{y}^{r} d\Gamma \right]$$
(85)

donde E es la cantidad total de elementos en los que se particiona Ω , y $\Gamma^e = \Gamma^e_\phi + \Gamma^e_q + \Gamma^e_h$ es el borde del elemento que cae sobre algún borde del dominio Γ y es tal que $\cup_e \Gamma^e = \Gamma$.

El método de elementos finitos es un caso particular del método de residuos ponderados, donde la aproximación a la solución $\hat{\phi}$ la expresamos como:

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \sum_{m=1}^{M} N_m^e \phi_m^e \tag{86}$$

siendo N_m^e las funciones de forma definidas para el elemento e, el cual se compone de M nodos. Nótese que (86) difiere de la aproximación definida previamente en (77) en dos aspectos:

- No se incluye la función ψ para ajustar los valores del contorno.
- Los coeficientes incógnita a_m son reemplazados por valores de la variable ϕ en los nodos del elemento (ϕ_m^e) .

La definición a trozos de la aproximación introduce discontinuidades en la solución o en alguna de sus derivadas. Cierto grado de discontinuidad es permisible y esto limita fuertemente la formulación a emplear. Por otro lado el hecho de que las funciones de prueba se elijan a trozos provoca un beneficio computacional importante respecto a la estructura de la matriz resultante. Una función a trozos en general tiene un soporte compacto, o sea, ésta no es nula solo en una región pequeña del dominio abarcando algunos pocos elementos del mismo. Esto produce matrices con estructura de banda, al igual que hemos visto anteriormente.

Resta definir qué tipo de funciones adoptar para los pesos W en (85). Para ello se aplica el **Método de Galerkin** [2], [1], el cual supone utilizar como pesos las mismas funciones de forma, es decir, $W=N_l^e$ para $l=1\ldots M$. Luego, la expresión completa de la aplicación del método de elementos finitos para la resolución del sistema de ecuaciones dado por (79) y (80), aplicado localmente a un elemento e, queda como:

$$\sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^{e}} \left(k_{x} \frac{\partial N_{l}^{e}}{\partial x} \frac{\partial N_{m}^{e}}{\partial x} \phi_{m}^{e} + k_{y} \frac{\partial N_{l}^{e}}{\partial y} \frac{\partial N_{m}^{e}}{\partial y} \phi_{m}^{e} \right) d\Omega \right] + \dots$$

$$\dots + \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^{e}} cN_{l}^{e} N_{m}^{e} \phi_{m}^{e} d\Omega + \int_{\Gamma_{h}^{e}} hN_{l}^{e} N_{m}^{e} \phi_{m}^{e} d\Gamma \right] = \dots$$

$$\dots \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^{e}} N_{l}^{e} G d\Omega - \int_{\Gamma_{q}^{e}} N_{l}^{e} \overline{q} d\Gamma - \int_{\Gamma_{h}^{e}} N_{l}^{e} h \phi_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^{e}} N_{l}^{e} F_{x}^{r} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^{e}} N_{l}^{e} F_{y}^{r} d\Gamma \right]$$

$$(87)$$

La notación indicial empleada en (87) pone en evidencia la presencia de términos matriciales y vectoriales. Entonces podemos reescribir la ecuación como sigue:

$$\left(\underline{\underline{D^e}} + \underline{\underline{C^e}} + \underline{\underline{H^e}}\right)\phi^e = \underline{F^e} \\
\underline{\underline{K^e}}\phi^e = \underline{F^e}$$
(88)

siendo

<u>D</u>^e: aporte matricial del término difusivo,

$$\underline{\underline{D^e}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial N_l^e}{\partial x} \frac{\partial N_m^e}{\partial x} + k_y \frac{\partial N_l^e}{\partial y} \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \right) d\Omega \right]$$

• <u>C</u>^e: aporte matricial del término reactivo,

$$\underline{\underline{C^e}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^e} cN_l^e N_m^e d\Omega \right]$$

• \underline{H}^e : aporte matricial debido a la presencia de frontera Robin,

$$\underline{\underline{H^e}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int\limits_{\Gamma_h^e} h N_l^e N_m^e d\Gamma \right]$$

<u>K^e</u>: matriz del elemento,

$$\underline{\underline{K^e}} = \underline{\underline{D^e}} + \underline{\underline{C^e}} + \underline{\underline{H^e}}$$

φ^e: vector de incógnitas del elemento,

$$\underline{\phi^e} = \sum_{m=1}^{M} \phi_m^e$$

• <u>F</u>^e: vector de de flujo, formado por aportes de fuentes de calor, términos provenientes de las condiciones de frontera y los flujos reactivos,

$$\underline{F^e} = \sum_{l=1}^M \left[\int\limits_{\Omega^e} N_l^e G d\Omega - \int\limits_{\Gamma_q^e} N_l^e \overline{q} d\Gamma - \int\limits_{\Gamma_h^e} N_l^e h \phi_\infty d\Gamma + \int\limits_{\Gamma_\phi^e} N_l^e F_x^r d\Gamma + \int\limits_{\Gamma_\phi^e} N_l^e F_y^r d\Gamma \right]$$

La resolución de las integrales depende del tipo de elemento considerado y las funciones de forma adoptadas. En el contexto de este trabajo se consideraron funciones de forma lineales y elementos triangulares y cuadrangulares. En las siguientes secciones se abordarán éstas y otras cuestiones relacionadas a la resolución de las integrales.

Hasta aquí, hemos encontrado las expresiones generales del método de elementos finitos aplicado a la resolución de la ecuación del calor, pero solamente desde el punto de vista de un elemento e que es parte del dominio Ω . Si recordamos, hablamos de particionar el dominio en porciones más pequeñas o elementos Ω^e cuyas funciones de forma se definan de manera local.

3.3. Elementos y funciones de forma

Como se mencionó previamente, la formulación del método de elementos finitos, tanto para la resolución de la Ecuación del Calor como para el modelo de Tensión/Deformación plana, se hizo contemplando la utilización de elementos triangulares y cuadrangulares, de tres y cuatro nodos, respectivamente y funciones de forma lineales. En la siguientes secciones se da una breve formulación sobre dichos elementos en **coordenadas naturales**. Se introduce un cambio de variables que permite adaptar los elementos cuando tienen lados no paralelos a los ejes cartesianos, transformándolos a un espacio con elementos normalizados, cuyas funciones de forma e integrales resultan más convenientes para el cálculo. Asimismo se ejemplifica el procedimiento para ensamblar matrices elementales en la matriz global del sistema.

3.1. Elementos triangulares

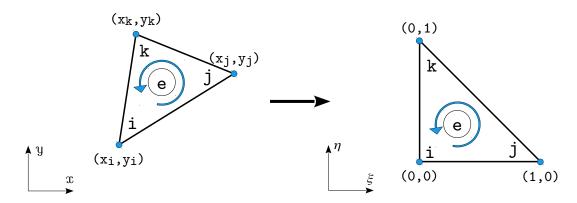


Figura 8: Representación bidimensional de un elemento triangular.

En la Fig.~8, a la izquierda se ejemplifica un elemento triangular en coordenadas cartesianas con ningún lado alineado a los ejes cartesianos, y a la derecha un elemento triangular **master** o normalizado en el espacio de coordenadas naturales (ξ, η) .

Funciones de Forma en Coordenadas Naturales

De la *Fig.* 8 se puede observar que las funciones de forma y sus derivadas, definidas para el triángulo normalizado, vienen dadas por las expresiones en (89)

$$N_{i}^{e}(\xi,\eta) = 1 - \xi - \eta, \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = -1, \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = -1$$

$$N_{j}^{e}(\xi,\eta) = \xi, \qquad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = 1, \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = 0$$

$$N_{k}^{e}(\xi,\eta) = \eta, \qquad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = 1$$
(89)

Al igual que en el caso de coordenadas cartesianas, las funciones de forma en (89) valen entre 0 y 1, y su suma siempre es igual a 1, para cualquier punto (ξ, η) dentro del elemento.

Mapeo de coordenadas

Para mapear las coordenadas (x,y) de un punto cualquiera dentro del elemento al dominio de las coordenadas naturales, parametrizamos según [1]:

$$x(\xi, \eta) = \sum_{m=1}^{3} x_m N_m^e(\xi, \eta)$$

$$= x_i (1 - \xi - \eta) + x_j \xi + x_k \eta$$

$$= x_i + \xi(x_j - x_i) + \eta(x_k - x_i)$$

$$y(\xi, \eta) = \sum_{m=1}^{3} y_m N_m^e(\xi, \eta)$$

$$= y_i (1 - \xi - \eta) + y_j \xi + y_k \eta$$

$$= y_i + \xi(y_j - y_i) + \eta(y_k - y_i)$$
(90)

de lo cual surge que dado un par $(\overline{\xi},\overline{\eta})$ podemos calcular su correspondiente $(\overline{x},\overline{y})$ y viceversa. Aplicando ahora este mapeo a la aproximación $\hat{\phi}^e$ para el elemento e, tenemos

$$\hat{\phi}^e = \phi_i + \xi(\phi_j - \phi_i) + \eta(\phi_k - \phi_i) \tag{91}$$

$$\nabla \hat{\phi}^e = \left(\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x}, \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial y}\right) = \left(\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}\right) \tag{92}$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} = \phi_j - \phi_i \tag{93}$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial n} = \phi_k - \phi_i \tag{94}$$

A partir de las ecuaciones (90) a (94) podemos deducir que las derivadas de las funciones de forma serán

$$\frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} = \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi}
\frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} = \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta}$$
(95)

Las expresiones de la *ec.* (95) plantean la relación de las derivadas de las funciones de forma con respecto a los sistemas cartesiano y natural. Aplicando ahora la regla de derivación en cadena,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix} = \underline{\underline{J}^e} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix}$$
(96)

donde la matriz $\underline{\underline{J^e}}$ es el **Jacobiano** de la transformación. Por lo tanto, la transformación inversa puede verse formulada en (97)

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{|\underline{\underline{J}^e}|} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = (\underline{\underline{J}^e})^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix}$$
(97)

3.2. Elementos cuadrangulares

En la Fig. 9, a la izquierda se ejemplifica un elemento cuadrangular en coordenadas cartesianas con ningún lado alineado a los ejes cartesianos, y a la derecha un elemento cuadrangular **master** o normalizado en el espacio de coordenadas naturales (ξ, η) .

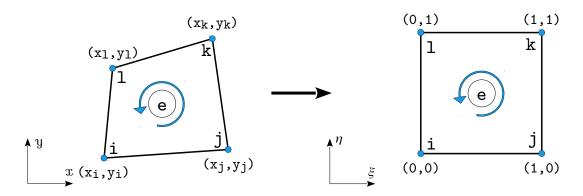


Figura 9: Representación bidimensional de un elemento cuadrangular.

Funciones de Forma en Coordenadas Naturales

De la Fig. 9 se puede observar que las funciones de forma y sus derivadas, definidas para el cuadrángulo normalizado, vienen dadas por las expresiones en (98)

$$N_{i}^{e}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = \frac{1}{4}(\eta-1), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = \frac{1}{4}(\xi-1)$$

$$N_{j}^{e}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = \frac{1}{4}(1-\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = \frac{1}{4}(-\xi-1)$$

$$N_{k}^{e}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = \frac{1}{4}(1+\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = \frac{1}{4}(1+\xi)$$

$$N_{l}^{e}(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} = \frac{1}{4}(-1-\eta), \quad \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} = \frac{1}{4}(1-\xi)$$
(98)

Mapeo de coordenadas

Utilizamos el mismo tipo de parametrizaciones definidas para elementos triangulares. Nuevamente, a partir de (99) y (100), dado un par $(\overline{\xi},\overline{\eta})$ podemos calcular su correspondiente $(\overline{x},\overline{y})$ pero no podemos plantear la correspondencia inversa ya que el sistema es no lineal. En la Sección 3.8 se plantea un método para poder realizar esta interpolación inversa, ya que es útil para algunos cálculos, como por ejemplo, la aplicación de una fuente puntual dentro de un elemento cuadrangular.

$$x(\xi,\eta) = \sum_{m=1}^{4} x_m N_m^e(\xi,\eta)$$

$$= \frac{1}{4} \left[x_i (1-\xi)(1-\eta) + x_j (1+\xi)(1-\eta) + x_k (1+\xi)(1+\eta) + x_l (1-\xi)(1+\eta) \right]$$

$$= \frac{x_i + x_j + x_k + x_l}{4} + \xi \left[\frac{(x_j + x_k) - (x_i + x_l)}{4} \right] + \dots$$

$$\dots + \eta \left[\frac{(x_k + x_l) - (x_i + x_j)}{4} \right] + \xi \eta \left[\frac{(x_i + x_k) - (x_j + x_l)}{4} \right]$$
(99)

$$y(\xi,\eta) = \sum_{m=1}^{4} y_m N_m^e(\xi,\eta)$$

$$= \frac{1}{4} \left[y_i (1-\xi)(1-\eta) + y_j (1+\xi)(1-\eta) + y_k (1+\xi)(1+\eta) + y_l (1-\xi)(1+\eta) \right]$$

$$= \frac{y_i + y_j + y_k + y_l}{4} + \xi \left[\frac{(y_j + y_k) - (y_i + y_l)}{4} \right] + \dots$$

$$\dots + \eta \left[\frac{(y_k + y_l) - (y_i + y_j)}{4} \right] + \xi \eta \left[\frac{(y_i + y_k) - (y_j + y_l)}{4} \right]$$
(100)

3.4. Cálculo de matrices

Hemos definido previamente cómo son las ecuaciones generales del método de elementos finitos y cómo son las expresiones de las funciones de forma y sus derivadas, tanto para elementos triangulares como cuadrangulares. En las siguientes secciones se formulará el cálculo de las matrices elementales mediante la utilización de coordenadas naturales e integración numérica.

4.1. Matriz de difusión

En la sección 3.2 definimos la matriz elemental de difusión como

$$\underline{\underline{D^e}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial N_l^e}{\partial x} \frac{\partial N_m^e}{\partial x} + k_y \frac{\partial N_l^e}{\partial y} \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \right) d\Omega \right]$$
(101)

donde podemos asumir $d\Omega = dxdy = |\underline{J^e}| d\xi d\eta$.

Asimismo, podemos reformular la *ec.* (101) de forma de suprimir las sumatorias y arribar a una expresión compuesta de producto de matrices:

$$\underline{\underline{D}^e} = \int_{\Omega_e} (\underline{\underline{B}^e})^T \, \underline{\underline{k}} \, \underline{\underline{B}^e} \, |\underline{\underline{J}^e}| \, d\xi d\eta \tag{102}$$

donde $\underline{k^e}$

$$\underline{\underline{k}} = \begin{bmatrix} k_x & 0\\ 0 & k_y \end{bmatrix} \tag{103}$$

Las matrices $\underline{\underline{B^e}}$ y $|\underline{\underline{J^e}}|$ dependen de la geometría del elemento y, en consecuencia, se calculan de maneras distintas para triángulos y cuadrángulos.

Triángulos

$$\underline{\underline{J^e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_j - x_i) & (y_j - y_i) \\ (x_k - x_i) & (y_k - y_i) \end{bmatrix}$$
(104)

$$\underline{\underline{B}^{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial x} & \frac{\partial N_{j}^{e}}{\partial x} & \frac{\partial N_{k}^{e}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial y} & \frac{\partial N_{j}^{e}}{\partial y} & \frac{\partial N_{k}^{e}}{\partial y} \end{bmatrix} = (\underline{\underline{J}^{e}})^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{j}^{e}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{k}^{e}}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_{i}^{e}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{j}^{e}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{k}^{e}}{\partial \eta} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\underline{B}^{e}} = (\underline{\underline{J}^{e}})^{-1} \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
(105)

Como se observa en las ecuaciones (103) a (105), las matrices están compuestas de coeficientes constantes, por lo que la integral en (102) queda reducida a:

$$\underline{\underline{D}^e} = (\underline{\underline{B}^e})^T \underline{\underline{k}} \underline{\underline{B}^e} |\underline{\underline{J}^e}| \int_{\Omega^e} d\xi d\eta = \frac{1}{2} (\underline{\underline{B}^e})^T \underline{\underline{k}} \underline{\underline{B}^e} |\underline{\underline{J}^e}|$$
(106)

En (106) la integral a resolver es en definitiva el área del triángulo normalizado, siendo ésta $A^e = 1/2$.

Cuadrángulos

$$\underline{\underline{J}^{e}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -(1-\eta) & (1-\eta) & (1+\eta) & -(1+\eta) \\ -(1-\xi) & -(1+\xi) & (1+\xi) & (1-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i} & y_{i} \\ x_{j} & y_{j} \\ x_{k} & y_{k} \\ x_{l} & y_{l} \end{bmatrix}$$
(107)

$$\underline{\underline{B^e}} = (\underline{\underline{J^e}})^{-1} \begin{bmatrix} -(1-\eta) & (1-\eta) & (1+\eta) & -(1+\eta) \\ \\ -(1-\xi) & -(1+\xi) & (1+\xi) & (1-\xi) \end{bmatrix}$$
(108)

A diferencia de lo que ocurría para el caso de triángulos, aquí las matrices son funciones de (ξ,η) y las integrales resultan complicadas de resolver analíticamente. Se emplea entonces integración numérica, para lo cual se aplica el método de Gauss eligiendo cuatro puntos con pesos w=1. Luego la integral surge de evaluar las funciones de (ξ,η) en dichos puntos y sumar las contribuciones. Matemáticamente esto se puede expresar como sigue:

$$\underline{\underline{D^e}} = \int_{\Omega^e} (\underline{\underline{B^e}}(\xi, \eta))^T \underline{\underline{k}} \underline{\underline{B^e}}(\xi, \eta) |\underline{\underline{J^e}}(\xi, \eta)| d\xi d\eta$$
(109)

$$\underline{\underline{D^e}} \simeq \sum_{p=1}^{4} (\underline{\underline{B^e}}(\xi_p, \eta_p))^T \underline{\underline{k}} \underline{\underline{B^e}}(\xi_p, \eta_p) \left| \underline{\underline{J^e}}(\xi_p, \eta_p) \right|$$
(110)

donde los puntos de Gauss (ξ_p, η_p) son

$$p = 1: \quad (\xi_1, \eta_1) = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3}\right) \quad p = 2: \quad (\xi_2, \eta_2) = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

$$p = 3: \quad (\xi_3, \eta_3) = \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right) \qquad p = 4: \quad (\xi_4, \eta_4) = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$
(111)

4.2. Matriz de masa

En la sección 3.2 definimos la matriz elemental de reacción (en ocasiones denominada matriz de masa) como

$$\underline{\underline{C^e}} = \sum_{m=1}^{M} \sum_{l=1}^{M} \left[\int_{\Omega^e} cN_l^e N_m^e d\Omega \right]$$
 (112)

Podemos reformular la *ec.* (112) de manera de expresarla como producto de matrices y vectores y de esta forma reemplazar las sumatorias. Nuevamente, la forma de estas matrices y vectores dependerá de la geometría del elemento. Las funciones de forma en coordenadas naturales y la matriz Jacobiana son las mismas definidas en la sección anterior.

Elementos triangulares

$$\underline{\underline{C^e}} = c \int_{\Omega^e} \begin{bmatrix} 1 - \xi - \eta \\ \xi \\ \eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \xi - \eta & \xi & \eta \end{bmatrix} |\underline{\underline{J^e}}| \, d\xi d\eta \tag{113}$$

Para resolver la integral en (113) utilizaremos integración numérica con tres puntos de Gauss con peso w=1/6.

$$\underline{\underline{C^e}} \simeq c \sum_{p=1}^{3} w \begin{bmatrix} 1 - \xi_p - \eta_p \\ \xi_p \\ \eta_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \xi_p - \eta_p & \xi_p & \eta_p \end{bmatrix} |\underline{\underline{J^e}}(\xi_p, \eta_p)|$$
(114)

donde los puntos de Gauss (ξ_p, η_p) son

$$p = 1: \quad (\xi_1, \eta_1) = \left(\frac{1}{2}, 0\right) \quad p = 2: \quad (\xi_2, \eta_2) = \left(0, \frac{1}{2}\right)$$

$$p = 3: \quad (\xi_3, \eta_3) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$
(115)

Elementos cuadrangulares

$$\underline{\underline{C^e}} = c \int_{\Omega^e} \underline{N}(\xi, \eta)^T \underline{N}(\xi, \eta) \left| \underline{\underline{J^e}} \right| d\xi d\eta$$
(116)

$$\underline{N}(\xi,\eta) = \frac{1}{4} \left[(1-\xi)(1-\eta) \quad (1+\xi)(1-\eta) \quad (1+\xi)(1+\eta) \quad (1-\xi)(1+\eta) \right] \tag{117}$$

Nuevamente aplicamos integración numérica con cuatro puntos de Gauss con peso w=1.

$$\underline{\underline{C^e}} \simeq c \sum_{p=1}^4 w(\underline{N}(\xi_p, \eta_p))^T \underline{N}(\xi_p, \eta_p) \left| \underline{\underline{J^e}}(\xi_p, \eta_p) \right|$$
(118)

3.5. Ensamble de matrices

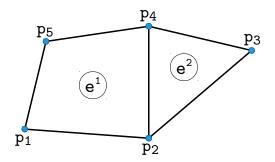


Figura 10: Representación bidimensional de una malla compuesta de elementos triangulares y cuadrangulares.

En la *Fig.* 10 puede observarse una malla genérica con un elemento triangular y cuadrangular. Para cada elemento de la malla se calculan las integrales definidas en (87) y (88) para luego proceder al **ensamble** de las componentes en las matrices y vectores globales del sistema. De la figura podemos ver, entre otras cosas, que:

- Los nodos p1, p3 y p5 no integran ninguna arista compartida, por lo que el aporte de coeficientes en el ensamble de la matriz global provendrá únicamente de dichos puntos.
- Los nodos p2, y p4 integran aristas compartidas por dos elementos, de forma que el aporte a la matriz global, en dichos nodos, será la suma de los coeficientes de ambos elementos.

Luego podemos plantear las matrices elementales compuestas por coeficientes de la siguiente forma:

$$\underline{\underline{K}^{1}} = \begin{pmatrix} K_{11}^{1} & K_{12}^{1} & 0 & K_{15}^{1} \\ K_{21}^{1} & K_{22}^{1} & K_{24}^{1} & 0 \\ 0 & K_{42}^{1} & K_{44}^{1} & K_{45}^{1} \\ K_{51}^{1} & 0 & K_{54}^{1} & K_{55}^{1} \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{K}^{2}} = \begin{pmatrix} K_{22}^{2} & K_{23}^{2} & K_{24}^{2} \\ K_{32}^{2} & K_{33}^{2} & K_{34}^{2} \\ K_{42}^{2} & K_{43}^{2} & K_{44}^{2} \end{pmatrix} \tag{119}$$

Obsérvese que e^1 está compuesto de cuatro nodos y su matriz elemental $\underline{\underline{K^1}}$ es de 4×4 , mientras que e^2 está compuesto de tres nodos y su matriz elemental $\underline{\underline{K^2}}$ es de 3×3 . La matriz global $\underline{\underline{K}}$ será de 5×5 , como era de esperarse ya que la malla está compuesta de cinco nodos y en dichos puntos se hallará la solución a las incógnitas del sistema de ecuaciones. Entonces, el ensamble de $\underline{\underline{K^1}}$ y $\underline{\underline{K^2}}$ en la matriz global $\underline{\underline{K}}$ queda de la siguiente forma:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} K_{11}^{1} & K_{12}^{1} & 0 & 0 & K_{15}^{1} \\ K_{21}^{1} & K_{22}^{1} + K_{22}^{2} & K_{23}^{2} & K_{24}^{1} + K_{24}^{2} & 0 \\ 0 & K_{32}^{2} & K_{33}^{2} & K_{34}^{2} & 0 \\ 0 & K_{42}^{1} + K_{42}^{2} & K_{43}^{2} & K_{44}^{1} + K_{44}^{2} & K_{45}^{1} \\ K_{51}^{1} & 0 & 0 & K_{54}^{1} & K_{55}^{1} \end{pmatrix}$$

$$(120)$$

3.6. Condiciones de borde

En esta sección se da la formulación de las expresiones para el cálculo de las matrices que surgen de las condiciones de frontera impuestas al dominio bajo estudio. En la Sección 6.1 se introdujo el tratamiento de condiciones de frontera Dirichlet para el método de diferencias finitas. Debido a que tanto en dicho método como en el de elementos finitos el tratamiento de la solución es nodal, es decir, se halla la distribución de la variable ϕ para todos los nodos de la malla, la forma de resolución de nodos con frontera Dirichlet es idéntica a la formulada en la Sección 6.1.

A continuación, se presenta la resolución de términos pertenecientes a fronteras Neumann y Robin.

6.1. Neumann

Recordando la *ec.* (87), queremos dar solución a la integral del lado derecho que proviene de la imposición de frontera de tipo Neumann, concretamente

$$F_q = \int_{\Gamma_q^e} N_l^e \overline{q} d\Gamma \tag{121}$$

La condición de frontera Neumann se aplica sobre cada par de nodos formando una arista que pertenece a la frontera delimitada como Neumann. Típicamente, un elemento sobre la frontera tendrá alguno de sus lados apoyado en dicha frontera. A continuación se formulan todos los posibles resultados de la integral (121), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [5].

Elementos triangulares

$$F_q^{ij} = \frac{\overline{q} \, d_{ij}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_q^{jk} = \frac{\overline{q} \, d_{jk}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_q^{ki} = \frac{\overline{q} \, d_{ki}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
 (122)

donde d_{ij} , d_{jk} y d_{ki} son las longitudes de cada lado del elemento, y \overline{q} es el valor impuesto de flujo en la condición de borde Neumann.

Elementos Cuadrangulares

$$F_{q}^{ij} = \frac{\overline{q} \, d_{ij}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_{q}^{jk} = \frac{\overline{q} \, d_{jk}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_{q}^{kl} = \frac{\overline{q} \, d_{kl}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_{q}^{li} = \frac{\overline{q} \, d_{li}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$
(123)

6.2. Robin

Recordando ahora la *ec.* (87), queremos dar solución a las dos integrales que provienen de la imposición de frontera de tipo Robin, concretamente

$$\underline{\underline{H}}^{e} = \int_{\Gamma_{b}^{e}} h N_{l}^{e} N_{m}^{e} \phi_{m}^{e} d\Gamma \tag{124}$$

$$F_h = -\int_{\Gamma_h^e} N_l^e h \phi_{\infty} d\Gamma \tag{125}$$

Como puede verse, la integral en (125) se resuelve de igual manera que para el caso Neumann, donde ahora $\overline{q}=h\phi_{\infty}$. A continuación se formulan todos los posibles resultados de la integral (124), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [5].

Elementos triangulares

$$\underline{\underline{H}}^{ij} = \frac{hd_{ij}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{jk} = \frac{hd_{jk}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{ik} = \frac{hd_{ik}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$
(126)

Elementos cuadrangulares

3.7. Fuentes por elemento

El último de los términos proveniente de la ec. (87) es el asociado al término producción o fuente. Para este trabajo consideramos que cada elemento puede contar con un valor de fuente G^e diferente.

Vamos a formular entonces las expresiones para el cálculo de la integral

$$F_G = \int_{\Omega^e} N_l^e G^e d\Omega \tag{128}$$

A continuación se formulan los posibles resultados de la integral (128), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [5].

$$F_G = \frac{A^e G^e}{3} \begin{bmatrix} 1\\1\\1\\1 \end{bmatrix}, \quad F_G = \frac{A^e G^e}{4} \begin{bmatrix} 1\\1\\1\\1 \end{bmatrix}$$
 (129)

donde A^e es el área del elemento e.

3.8. Fuentes puntuales

Las fuentes puntuales, definidas en un cierto punto $(\overline{x}, \overline{y})$ del dominio, son repartidas en cada nodo del elemento al que pertenece el punto, evaluando las funciones de forma definidas para ese elemento.

Elementos triangulares

$$F_{p} = G_{p} \begin{bmatrix} N_{i}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \\ N_{j}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \\ N_{k}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \end{bmatrix}$$
(130)

Elementos cuadrangulares

$$F_{p} = G_{p} \begin{bmatrix} N_{i}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \\ N_{j}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \\ N_{k}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \\ N_{l}(\overline{\xi}, \overline{\eta}) \end{bmatrix}$$
(131)

Las funciones de forma fueron definidas en las ecuaciones (89) y (98), mientras que los correspondientes mapeos de coordenadas entre ambos sistemas, $x(\xi,\eta)$ e $y(\xi,\eta)$ fueron presentados en las ecuaciones (90), (99) y (100).

Cómo vimos en la Sección 3.1, al trabajar en coordenadas naturales, conociendo el punto en el dominio (x,y) podemos obtener fácilmente su par (ξ,η) y así determinar cuál es el aporte de la fuente puntual sobre cada nodo del elemento triangular. Por otro lado, como fuera mencionado previamente en la Sección 3.2, presentamos aquí un método para el cálculo de la transformación inversa que permite, a partir de conocer un par (x,y) en coordenadas cartesianas, obtener el par (ξ,η) en coordenadas naturales, cuando estamos tratando con elementos cuadrangulares.

Tomando como referencia el trabajo realizado por Chongyu Hua [6], se puede formular de manera general la relación entre los dos sistemas de coordenadas para elementos cuadrangulares isoparamétricos como:

$$\begin{bmatrix} b_i & c_i \\ b_j & c_j \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_i - a_i \xi \eta \\ d_j - a_j \xi \eta \end{pmatrix}$$
 (132)

donde

$$d_i = 4x_p - (x_i + x_j + x_k + x_l) d_j = 4y_p - (y_i + y_j + y_k + y_l)$$
(133)

y los coeficientes $a_i, a_j, b_i, b_j, c_i, c_j$ son funciones de coordenadas globales de puntos nodales y dependen de esquemas de numeración de nodos locales.

Un posible ejemplo de numeración de los nodos locales para un elemento cuadrangular isoparamétrico en una malla de elementos finitos se muestra en la *Fig.* 11. Los coeficientes en la ecuación (132) se pueden obtener a partir de la ecuación (134).

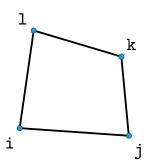


Figura 11: Ejemplo de numeración local de un cuadrángulo para determinar los coeficientes $a_i, a_j, b_i, b_j, c_i, c_j$.

Un sistema bilineal de ecuaciones en forma de la ec. (132) no se puede resolver en general de forma exacta. Sin embargo, se pueden proporcionar condiciones adicionales considerando las características geométricas de los elementos cuadrangulares isoparamétricos, bajo las cuales el sistema tiene solución única. Estas condiciones son enumeradas y demostradas en [6], donde a continuación se resume un conjunto de soluciones dependiendo de la combinación de resultados para los coeficientes $a_i, a_j, b_i, b_j, c_i, c_j$.

1. Si $a_i a_j a_b a_c \neq 0$ 2. Si $a_i = 0$ y $a_j c_i \neq 0$ 3. Si $a_j = 0$ y $a_i c_j \neq 0$ 4. Si $a_i a_j \neq 0$ y $a_b = 0$, $\xi = (a_i d_c)/(b_i a_c + a_i a_d)$, $\eta = a_d/a_c$ 5. Si $a_i a_j \neq 0$ y $a_c = 0$, $\xi = a_d/a_b$, $\eta = (a_i d_b)/(c_i a_b + a_i a_d)$ 6. Todas las demás condiciones, $\xi = d_c/(a_i d_j + b_c)$, $\eta = b_d/(a_j d_i + b_c)$

3.9. Tensión/Deformación Plana

Hasta aquí hemos desarrollado de manera completa el tratamiento del método de elementos finitos para la resolución de la ecuación del calor. Veremos ahora como aplicar el método a otro modelo físico: el de Tensión/Deformación Plana. Si bien las ecuaciones que gobiernan dicho modelo son diferentes a las vistas para la ecuación del calor, veremos que la formulación del método de elementos finitos es similar a lo planteado anteriormente.

Consideramos el problema de tensión plana bidimensional en elasticidad [2]. Aquí se considerará como incógnitas los desplazamientos u y v en las direcciones x e y, esto es,

$$\phi^T = (u, v) \tag{135}$$

Obsérvese el carácter vectorial de la incógnita del problema en (135). Las deformaciones, y por lo tanto las tensiones, pueden ser expresados en términos de estos desplazamientos. Las deformaciones se escriben como

$$\underline{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_{x} \\ \epsilon_{y} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \underline{\underline{\mathcal{L}}} \phi$$
 (136)

El vector de tensiones $\underline{\sigma}$ puede ser expresado en término de las deformaciones según

$$\underline{\sigma} = \underline{D}\,\underline{\epsilon} \tag{137}$$

donde $\underline{\underline{D}}$ es la denominada **Matriz Constitutiva**. Con sólo cambiar $\underline{\underline{D}}$ podemos estudiar el mismo sistema para tensión o para deformación plana.

Tensión Plana

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E}{1 - \nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1 - \nu}{2} \end{bmatrix} \underline{\epsilon} = \underline{\underline{D}}\underline{\epsilon}$$
 (138)

Deformación Plana

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \underline{\epsilon} = \underline{\underline{D}}\underline{\epsilon}$$
 (139)

En las ecuaciones (138) y (139), E es el **Módulo de Young** y ν el **Coeficiente de Poisson** para el material bajo consideración.

Resta resolver el sistema de ecuaciones de equilibrio el cual, utilizando las *ec.* (135) a (139), puede ser escrito como

$$A(\phi) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + X \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + Y \end{bmatrix} = \underline{\mathcal{L}}^T \underline{D} \underline{\mathcal{L}} \underline{\phi} + \underline{X} = \underline{0}$$
 (140)

en un dominio bidimensional Ω . En la *ec.* (140) X e Y son fuerzas externas por unidad de volumen, $\underline{X}^T = [X \ Y]$, y $\underline{0}^T = [0 \ 0]$.

Las condiciones de borde para un problema típico de elasticidad bidimensional pueden ser definidas mediante la especificación de tracciones o desplazamientos superficiales, y por lo tanto podríamos tener

$$B(\phi) = \begin{bmatrix} \sigma_x n_x + \sigma_{xy} n_y - \bar{t}_x \\ \sigma_{xy} n_x + \sigma_y n_y - \bar{t}_y \end{bmatrix} = \underline{0},$$
 sobre Γ_{σ} (141)

У

$$B(\phi) = \begin{bmatrix} u - \overline{u} \\ v - \overline{v} \end{bmatrix} = \underline{0},$$
 sobre Γ_{ϕ} (142)

donde n_x y n_y son los cosenos directores de la normal apuntando hacia afuera de la frontera Γ y \overline{t}_x , \overline{t}_y , \overline{u} y \overline{v} son las tracciones y desplazamientos especificados en los bordes. A partir de haber definido los sistemas $A(\phi)$ y $B(\phi)$ de esta forma, se puede aplicar residuos ponderados de la misma forma que se hizo en (81). Nuevamente planteamos una aproximación de la forma

$$\frac{\hat{\phi}}{\hat{v}} = \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{bmatrix} = \underline{\psi} + \sum_{m=1}^{M} \underline{N_m} \, \underline{a_m} \tag{143}$$

Luego, definiendo las funciones de peso como

$$\underline{\underline{W}_{l}} = \begin{bmatrix} W_{l,1} & 0 \\ 0 & W_{l,2} \end{bmatrix}, \qquad \underline{\underline{W}_{l}} \begin{bmatrix} \overline{W}_{l,1} & 0 \\ 0 & W_{l,2} \end{bmatrix} \tag{144}$$

Nuevamente, puede observarse en las ecuaciones (140) a (144) el tratamiento vectorial del problema y la definición de las aproximaciones y funciones de prueba.

La formulación de residuos ponderados en términos de tensiones para la ecuación de equilibrio puede ser escrita como

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_{x}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\sigma}_{xy}}{\partial y} + X \right) W_{l,1} d\Omega + \int_{\Gamma_{\sigma}} \left(n_{x} \hat{\sigma}_{x} + n_{y} \hat{\sigma}_{xy} - \overline{t}_{x} \right) \overline{W}_{l,1} d\Gamma = 0$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\sigma}_{y}}{\partial y} + Y \right) W_{l,2} d\Omega + \int_{\Gamma_{\sigma}} \left(n_{x} \hat{\sigma}_{xy} + n_{y} \hat{\sigma}_{y} - \overline{t}_{y} \right) \overline{W}_{l,2} d\Gamma = 0$$
(145)

donde $\hat{\underline{\sigma}} = \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \hat{\underline{\phi}}$. Aplicando el Teorema de la Divergencia [4] (proceso de debilitación), la *ec.* (145) queda como

$$-\int_{\Omega} \left(\hat{\sigma}_{x} \frac{\partial W_{l,1}}{\partial x} + \hat{\sigma}_{xy} \frac{\partial W_{l,1}}{\partial y} - W_{l,1} X \right) d\Omega + \int_{\Gamma_{\phi} + \Gamma_{\sigma}} \left(\hat{\sigma}_{x} n_{x} + \sigma_{xy} n_{y} \right) W_{l,1} d\Gamma + \dots$$

$$\dots + \int_{\Gamma_{\sigma}} \left(\hat{\sigma}_{x} n_{x} + \sigma_{xy} n_{y} - \bar{t}_{x} \right) \overline{W}_{l,1} d\Gamma = 0$$

$$-\int_{\Omega} \left(\hat{\sigma}_{xy} \frac{\partial W_{l,2}}{\partial x} + \hat{\sigma}_{y} \frac{\partial W_{l,2}}{\partial y} - W_{l,2} Y \right) d\Omega + \int_{\Gamma_{\phi} + \Gamma_{\sigma}} \left(\hat{\sigma}_{xy} n_{x} + \sigma_{y} n_{y} \right) W_{l,2} d\Gamma + \dots$$

$$\dots + \int_{\Gamma_{\sigma}} \left(\hat{\sigma}_{xy} n_{x} + \sigma_{y} n_{y} - \bar{t}_{y} \right) \overline{W}_{l,2} d\Gamma = 0$$

$$(146)$$

Limitando ahora la elección de las funciones de peso de forma que

$$W_{l,1}=W_{l,2}=0, \quad \text{ sobre } \Gamma_{\phi}$$

$$\overline{W}_{l,1}=-W_{l,1}\Big|_{\Gamma_{\sigma}}$$

$$\overline{W}_{l,2}=-W_{l,2}\Big|_{\Gamma_{\sigma}}$$
 (147)

Combinando los resultados de (146) y (147), y luego expresándolos de forma compacta tenemos

$$\int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{W_l}})^T \underline{\hat{\underline{\sigma}}} d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\underline{W_l}} \underline{\underline{X}} d\Omega - \int_{\Gamma_{\sigma}} \underline{\underline{W_l}} \underline{\overline{t}} d\Gamma = 0$$
(148)

donde $\overline{t}^T = [\overline{t}_x \ \overline{t}_y]$. Expresando las tensiones en (148) en términos de desplazamientos, tenemos que

$$\int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{W_l})^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \hat{\underline{\phi}} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{\underline{W_l}} \underline{\underline{X}} d\Omega + \int_{\Gamma_{\sigma}} \underline{\underline{W_l}} \underline{\overline{t}} d\Gamma$$
(149)

Hasta aquí hemos hecho el planteo de residuos ponderados a la ecuación de equilibrio. Usamos ahora la aproximación definida en (143) y tenemos

$$\sum_{m=1}^{M} \left(\int_{\Omega} (\underline{\mathcal{L}} \underline{W_{l}})^{T} \underline{\underline{D}} \underline{\mathcal{L}} \underline{N_{m}} d\Omega \right) \underline{a_{m}} = \dots$$

$$\dots \int_{\Omega} \underline{\underline{W_{l}}} \underline{X} d\Omega + \int_{\Gamma_{\sigma}} \underline{\underline{W_{l}}} \underline{\overline{t}} d\Gamma - \int_{\Omega} (\underline{\mathcal{L}} \underline{\underline{W_{l}}})^{T} \underline{\underline{D}} \underline{\mathcal{L}} \underline{\psi} d\Omega$$
(150)

lo que inmediatamente nos conduce a un sistema de la forma $\underline{\underline{K}}\,\underline{a}=\underline{F}$. En este caso, el uso de la aproximación de Galerkin resulta en una matriz $\underline{\underline{K}}$ simétrica en donde las submatrices $\underline{\underline{K}^e}$ son dadas por

$$\underline{\underline{K}^e} = \int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \, \underline{\underline{N_l}})^T \underline{\underline{D}} \, \underline{\underline{\mathcal{L}}} \, \underline{\underline{N_m}} d\Omega$$
 (151)

9.1. Cálculo de matriz de rigidez

Hallaremos ahora el resultado de la integral dada en la ec. (151). El cálculo es similar al realizado para la matriz de difusión introducido para la ecuación del calor, sólo que los términos matriciales que forman la matriz de rigidez para tensión/deformación plana son diferentes, como veremos a continuación. La matriz $\underline{\underline{D}}$ fue introducida previamente en las ecuaciones (138) y (139) para tensión y deformación plana, respectivamente. Por otro lado, y haciendo una analogía a lo visto para la ecuación del calor, introducimos nuevamente la matriz $\underline{\underline{B}^e}$ que surge de aplicar el operador $\underline{\underline{\mathcal{L}}}$ sobre las funciones de peso. Luego, podemos reescribir la ec. (151) como

$$\underline{\underline{K^e}} = \int_{\Omega^e} (\underline{\underline{B^e}})^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B^e}} |\underline{\underline{J^e}}| d\xi d\eta$$
 (152)

donde el cálculo de $\underline{B^e}$ depende de la geometría del elemento.

Elementos Triangulares

$$\underline{\underline{B}^{e}} = \underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{N_{m}}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} & 0\\ 0 & \frac{\partial}{\partial \eta}\\ \frac{\partial}{\partial \eta} & \frac{\partial}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_{1} & 0 & N_{2} & 0 & N_{3} & 0\\ 0 & N_{1} & 0 & N_{2} & 0 & N_{3} \end{bmatrix}$$
(153)

$$\underline{\underline{B}}^{e} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{1}}{\partial \xi} & 0 & \frac{\partial N_{2}}{\partial \xi} & 0 & \frac{\partial N_{3}}{\partial \xi} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_{1}}{\partial \eta} & 0 & \frac{\partial N_{2}}{\partial \eta} & 0 & \frac{\partial N_{3}}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_{1}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{1}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{2}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{2}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{3}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{3}}{\partial \xi} \end{bmatrix}$$
(154)

Nuevamente, la matriz $\underline{\underline{B^e}}$ para elementos triangulares está conformada por coeficientes constantes, de modo que el cálculo $\overline{\text{de}}$ la matriz de rigidez será

$$\underline{\underline{K^e}} = (\underline{\underline{B^e}})^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B^e}} |\underline{\underline{J^e}}| \int_{\Omega^e} d\xi d\eta = \frac{1}{2} (\underline{\underline{B^e}})^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B^e}} |\underline{\underline{J^e}}|$$
 (155)

Elementos Cuadrangulares

$$\underline{\underline{B}^{e}} = \underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{N_{m}}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} & 0\\ 0 & \frac{\partial}{\partial \eta}\\ \frac{\partial}{\partial n} & \frac{\partial}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_{1} & 0 & N_{2} & 0 & N_{3} & 0 & N_{4} & 0\\ 0 & N_{1} & 0 & N_{2} & 0 & N_{3} & 0 & N_{4} \end{bmatrix}$$
(156)

$$\underline{\underline{B}}^{e} = \begin{bmatrix}
\frac{\partial N_{1}}{\partial \xi} & 0 & \frac{\partial N_{2}}{\partial \xi} & 0 & \frac{\partial N_{3}}{\partial \xi} & 0 & \frac{\partial N_{4}}{\partial \xi} & 0 \\
0 & \frac{\partial N_{1}}{\partial \eta} & 0 & \frac{\partial N_{2}}{\partial \eta} & 0 & \frac{\partial N_{3}}{\partial \eta} & 0 & \frac{\partial N_{4}}{\partial \eta} \\
\frac{\partial N_{1}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{1}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{2}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{2}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{3}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{3}}{\partial \xi} & \frac{\partial N_{4}}{\partial \eta} & \frac{\partial N_{4}}{\partial \xi}
\end{bmatrix}$$
(157)

Como hemos visto, para elementos cuadrangulares las derivadas de las funciones de forma no son constantes, de modo que tendremos $\underline{B^e}(\xi,\eta)$ y por lo tanto la matriz $\underline{K^e}$ queda como

$$\underline{\underline{K^e}} \simeq \sum_{p=1}^{4} (\underline{\underline{B^e}}(\xi_p, \eta_p))^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{B^e}}(\xi_p, \eta_p) \left| \underline{\underline{J^e}}(\xi_p, \eta_p) \right|$$
(158)

La integral de la *ec.* (158) fue resuelta por integración numérica con cuatro puntos de Gauss con peso w=1. Estos puntos son los mismos introducidos previamente en (111).

9.2. Cálculo de vector de fuerzas volumétricas

Las fuerzas volumétricas consideradas para este trabajo fueron siempre aquellas que surgen de la acción de la fuerza de la gravedad. Hallaremos el término F_v que surge de dar solución a la integral

$$F_v = \int_{\Omega} \underline{\underline{N_l}} \underline{\underline{X}} d\Omega \tag{159}$$

donde $\underline{X}^T = [0, -\rho g]$, siendo ρ la densidad del material y g la aceleración de la gravedad. Nótese el signo negativo indicando el sentido de acción de la fuerza gravitatoria. A continuación se formulan los posibles resultados de la integral (159), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [5].

$$F_{v} = -\frac{A^{e}\rho g}{3} \begin{bmatrix} 0\\1\\0\\1\\0\\1 \end{bmatrix}, \quad F_{v} = -\frac{A^{e}\rho g}{4} \begin{bmatrix} 0\\1\\0\\1\\0\\1 \end{bmatrix}$$
(160)

donde A^e es el área del elemento.

9.3. Condiciones de borde - Nodos fijos

Un tipo de condición de borde posible es la fijación de uno o más nodos de la frontera. Se establece que el desplazamiento u en sentido eje-x, o el desplazamiento v en sentido eje-y, o ambos desplazamientos son nulos. El concepto es análogo a lo visto en el tratamiento de fronteras Dirichlet en ecuación del calor, con la salvedad que ahora la magnitud a fijar es vectorial y no escalar. Luego, el cálculo es idéntico a lo visto en la Sección 6.1.

9.4. Condiciones de borde - Cargas distribuidas

El otro tipo de condición de borde posible es la aplicación de una fuerza distribuida a lo largo de una parte de la frontera, típicamente un borde o una arista. Sobre la frontera Γ_{σ} se aplica una fuerza $\overline{t}^T = [\overline{t}_x \ \overline{t}_y]$, la cual se distribuye sobre todos los lados de elementos que apoyan sobre la frontera. El concepto es análogo a lo visto para fronteras de tipo Neumann en ecuación del calor, pero con tratamiento vectorial en vez de escalar. Luego, el cálculo es similar a lo visto en la Sección 6.1, donde ahora se fija el valor vectorial de fuerza, esto es

$$\underline{F_{\sigma}} = \int_{\Gamma_{\sigma}^{e}} N_{l}^{e} \overline{t} d\Gamma \tag{161}$$

A continuación se formulan todos los posibles resultados de la integral (161), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [5].

Elementos triangulares

$$\underline{F_{\sigma}}^{ij} = \frac{\overline{t}}{2} d_{ij} \begin{vmatrix} \overline{t}_{x} \\ \overline{t}_{y} \\ \overline{t}_{x} \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \underline{F_{\sigma}}^{jk} = \frac{\overline{t}}{2} d_{jk} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \overline{t}_{x} \\ \overline{t}_{y} \\ \overline{t}_{x} \\ \overline{t}_{y} \end{vmatrix}, \quad \underline{F_{\sigma}}^{ki} = \frac{\overline{t}}{2} d_{ki} \begin{vmatrix} \overline{t}_{x} \\ \overline{t}_{y} \\ 0 \\ 0 \\ \overline{t}_{x} \\ \overline{t}_{y} \end{vmatrix} \tag{162}$$

Elementos cuadrangulares

$$\underline{F_{\sigma}}^{ij} = \frac{\overline{t}}{2} d_{ij} \begin{vmatrix} \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \\ \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \underline{F_{\sigma}}^{jk} = \frac{\overline{t}}{2} d_{jk} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \\ \overline{t}_x \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \underline{F_{\sigma}}^{kl} = \frac{\overline{t}}{2} d_{kl} \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \\ \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \end{vmatrix}, \quad \underline{F_{\sigma}}^{li} = \frac{\overline{t}}{2} d_{li} \begin{vmatrix} \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \\ 0 \\ 0 \\ \overline{t}_x \\ \overline{t}_y \end{vmatrix} \tag{163}$$

9.5. Cargas puntuales

Para el tratamiento de cargas puntuales se especifica el punto (x_p,y_p) dentro del dominio Ω al que se le aplica una fuerza $\underline{F}^T=[F_x \ F_y]$. Como se vio en la Sección 3.8, para promediar el valor de la carga se utilizan las funciones de forma del elemento evaluadas en el punto (ξ_p,η_p) , en coordenadas naturales.

4. Esquemas Temporales

Hemos visto en las secciones precedentes cómo resolver la ecuación del calor cuando se considera al sistema estacionario, es decir, luego de que el mismo ha evolucionado durante un tiempo lo suficientemente grande como para lograr la estabilidad y que los valores asociados al dominio ya no varíen significativamente de un instante de tiempo a otro. Se puede pensar en una solución del tipo:

$$\underline{K}\,\phi = \underline{F} \tag{164}$$

donde $\underline{\phi}$ representa el vector de incógnitas a resolver, $\underline{\underline{K}}$ es la matriz del sistema y \underline{F} es el vector del lado derecho. Luego el sistema anterior se puede resolver según:

$$\phi = (\underline{K})^{-1}\underline{F} \tag{165}$$

4.1. Discretización Temporal

Si ahora nos interesa estudiar la evolución temporal del sistema, nos encontramos nuevamente frente a una expresión como la siguiente:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - k \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + c\phi = G \tag{166}$$

Para discretizar el término temporal de la *ec.* (166) se puede utilizar una aproximación de primer orden según:

$$\rho c_p \frac{\partial \phi}{\partial t} \simeq \rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] \tag{167}$$

donde, Δt es el paso temporal, $\underline{\phi}^n$ es el vector solución para el instante de tiempo n=t(n) y $\underline{\phi}^{n+1}$ es el correspondiente al instante $n+1=t(n)+\Delta t$. Luego podemos combinar los resultados de las *ec.* (166) y (167) de la siguiente manera:

$$\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+\theta} = \underline{F}^{n+\theta}$$
 (168)

siendo θ el parámetro temporal que determina el esquema a utilizar según:

heta=0, Forward-Euler o Esquema Explícito heta=1, Backward-Euler o Esquema Implícito

Obsérvese que $\underline{\underline{K}}$ es una matriz que agrupa los términos reactivo y difusivo de la *ec.* (166). A partir de (168) y con la correspondiente selección del parámetro θ se pueden encontrar las expresiones matriciales para cada esquema temporal. Vale aclarar que de aquí en adelante consideraremos el vector \underline{F} constante en el tiempo ($\underline{F} = \underline{F}^n = \underline{F}^{n+1}$).

4.2. Forward-Euler o Esquema Explícito

Se parte de la *ec.* (168) con $\theta = 0$:

$$\rho c_{p} \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n} = \underline{F}$$

$$\Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n} + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}} \right) \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}} \right) \underline{F}$$
(169)

Se debe recordar que un vector puede expresarse como el producto de él mismo por la matriz identidad: $\underline{\underline{I}} \underline{\phi}^n = \underline{\phi}^n$. En otras palabras, si multiplicamos un vector por una matriz cuadrada con 1 en la diagonal principal y 0 fuera de ella obtendremos como resultado el mismo vector. Luego aplicando esta propiedad en (169) se arriba a:

$$\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\underline{I}}\underline{\phi}^{n} + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{\underline{K}}\underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{F}$$

$$\Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{\underline{K}}\right]\underline{\phi}^{n} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{F}$$

$$\underline{\phi}^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{F} + \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_{p}}\right)\underline{\underline{K}}\right]\underline{\phi}^{n}$$
(170)

Puede comprobarse en la *ec.* (170) que el vector $\underline{\phi}^{n+1}$ puede ser obtenido como resultado de multiplicaciones entre matrices y vectores con datos conocidos para el tiempo n=t(n).

4.3. Backward-Euler o Esquema Implícito

Se parte de la *ec.* (168) con $\theta = 1$:

$$\rho c_{p} \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^{n}}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F}$$

$$\Rightarrow \left[\left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F} + \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n}$$

$$\underline{\phi}^{n+1} = \left[\left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right]^{-1} \left[\underline{F} + \left(\frac{\rho c_{p}}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n} \right]$$
(171)

Obsérvese que la *ec.* (171) conduce a la resolución de un sistema de ecuaciones similar al planteado previamente en la *ec.* (165):

$$\underline{\phi}^{n+1} = (\underline{\underline{K}}^{imp})^{-1} \, \underline{F}^{imp}$$

donde

$$\underline{\underline{\underline{K}}}^{imp} = \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{\underline{I}}} + \underline{\underline{\underline{K}}} \right]$$

$$\underline{\underline{F}}^{imp} = \left[\underline{\underline{F}} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{\phi}}^n \right]$$

Referencias

- [1] M. Storti, N. Nigro, G. Franck, y D. Sklar, *Notas de Mecánica Computacional*. Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas UNL, 2016.
- [2] O. Zienkiewicz y K. Morgan, Finite Elements and Approximation, 1st ed. Dover Publications, 2006.
- [3] F. Moukalled, L. Mangani, y M. Darwish, *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*, 1st ed. Springer, 2016.
- [4] G. B. J. Thomas, Cálculo Varias Variables, 11st ed. Pearson Education, 2005.
- [5] L. J. Segerlind, Applied Finite Element Analysis, 2nd ed. John Wiley and Sons, 1984.
- [6] C. Hua, "An inverse transformation for quadrilateral isoparametric elements: Analysis and aplication," *Finite Elements in Analysis and Design*, vol. 7, pp. 159–164, 1990.