

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

MECÁNICA COMPUTACIONAL

Apuntes Mecánica Computacional - Métodos Numéricos y Simulación

Autores:

Dr. Ing. Norberto NIGRO
Ing. Carlos GENTILE
Ing. Diego SKLAR
MSc. Ing. Gerardo FRANCK

E-mail:

norberto.nigro@gmail.com
csgentile@gmail.com
diegosklar@gmail.com
gerardofranck@yahoo.com.ar

AGOSTO, 2023



*"Este apunte fue originalmente concebido en colaboración con el Dr. Mario Alberto Storti,
quién colaboraba en ese momento con la cátedra"*

Índice general

1. MODELOS FISICOS Y MATEMATICOS	7
1.1. Planteo Teórico	7
1.1.1. Aplicación de los métodos numéricos a los modelos matemáticos que vienen de la ciencia	13
2. METODO DE DIFERENCIAS FINITAS (FDM)	19
2.1. Introducción	19
2.2. Base Teórica del Método de Diferencias Finitas	20
2.3. Diferencias Finitas en una dimensión	21
2.3.1. Aplicación a problemas estacionarios, solo conducción y términos fuentes	21
2.3.2. Desarrollo en Serie de Taylor	21
2.3.3. Aproximaciones de mayor orden	22
2.3.4. Aproximación de derivadas de orden superior	23
2.3.5. Número de puntos requeridos	23
2.3.6. Ejemplo de derivadas de orden superior con mallas homogéneas	24
2.3.7. Solución de la ecuación diferencial por el método de diferencias finitas	25
2.3.8. Ejemplo de Aplicación	28
2.3.9. Análisis de Error. Teorema de Lax	29
2.3.10. Condiciones de contorno tipo Neumann (“flujo impuesto”)	30
2.3.11. Problemas No-Lineales	34
2.3.12. Precisión y número de puntos en el esquema de Diferencias Finitas	44
2.4. Método de Diferencias Finitas en problemas no estacionarios	46
2.4.1. Discretización temporal por métodos semidiscretos	46
2.4.2. Discretización temporal por diferencias finitas	46
2.4.3. Esquema explícito	47
2.4.4. Esquema implícito	47
2.4.5. Esquema semi-implícito	47
2.5. Método de Diferencias Finitas en más de una dimensión	47
2.5.1. Aproximación en Diferencias Finitas para derivadas parciales	48
2.5.2. Stencil del operador discreto	50
2.6. Resolución del sistema de ecuaciones	52
2.6.1. Estructura banda	52
2.6.2. Requerimientos de memoria y tiempo de procesamiento para matrices banda	52
2.6.3. Ancho de banda y numeración de nodos	54
2.7. La ecuación de Convección-Reacción-Difusión	55
2.7.1. Interpretación de los diferentes términos	56
2.7.2. Discretización de la ecuación de Advección-Difusión	58
2.7.3. Desacoplamiento de las ecuaciones	61
2.7.4. Esquemas de diferencias contracorriente (upwinded)	61
2.7.5. El caso 2D	63

2.7.6. Resolución de las ecuaciones temporales en el caso con advección	65
---	----

3. METODO DE VOLUMENES FINITOS (FVM) 67

3.1. Método de los Volúmenes Finitos - Conceptos Básicos	67
3.1.1. Sus fundamentos a partir del MRP	67
3.1.2. Aplicación al transporte de un escalar pasivo	70
3.1.3. Método de Volúmenes Finitos en 1D	75
3.1.4. Extensión del FVM a mas dimensiones espaciales	91
3.1.5. Discretización espacial	100
3.1.6. Ejemplos	117
3.1.7. Discretización Temporal	128
3.1.8. Forward-Euler o Esquema Explícito	128
3.1.9. Backward-Euler o Esquema Implícito	129

4. METODO DE ELEMENTOS FINITOS (FEM) 131

4.0.1. Descripción del Método	131
4.0.2. Ecuación de Transporte general para el caso 1D	132
4.0.3. Ecuación de Poisson con fuente	132
4.0.4. Ejemplo 1D	138
4.0.5. Elementos y funciones de forma	140
4.0.6. Cálculo de matrices	145
4.0.7. Ensamble de matrices	147
4.0.8. Condiciones de borde	148
4.0.9. Fuentes por elemento	150
4.0.10. Fuentes puntuales	150
4.1. Elasticidad lineal bidimensional	154
4.1.1. Tensión/Deformación Plana	154
4.2. Elasticidad lineal con FEM	156
4.2.1. Campo de desplazamientos	156
4.2.2. Campo de deformaciones	157
4.2.3. Campo de tensiones	157
4.2.4. Relación tensión con deformación	158
4.2.5. Principio de los trabajos virtuales	159
4.2.6. Discretización	160
4.2.7. Implementación computacional	168

5. Barras 173

5.1. Introducción	173
5.2. Equilibrio en los nodos	174
5.2.1. Ejemplo básico de barras	174
5.3. Elemento de barra	176
5.3.1. Sistema de barras	179
5.3.2. Ejemplo 2	180
5.3.3. Ejemplo 3	184
5.4. Reticulados (trusses)	184
5.4.1. Formulación del elemento de barra	185
5.4.2. Tensiones en el elemento de barra	186
5.4.3. Ejemplo de un reticulado simple en 2D	187
5.4.4. Segundo ejemplo de reticulado	187
5.4.5. Tercer ejemplo de reticulado incluyendo un resorte	188
5.4.6. Reticulados en 3D	189

6. Vigas	193
6.1. Vigas Bernoulli	193
6.1.1. Problemas viga Euler-Bernoulli	195
6.1.2. Problemas viga Euler-Bernoulli con resorte	197
6.2. 2D Frames	197
6.2.1. Un ejemplo de una armadura (frame) 2D	199
6.2.2. Otro ejemplo de armaduras en 2D	201
6.3. 3D Frames	203
6.3.1. Primer ejemplo de una armadura o portico en 3D	204
6.3.2. Segundo ejemplo de una armadura o portico en 3D	205
6.4. Timoshenko Beams	205
6.4.1. Formulación del análisis estático	205
6.4.2. Caso con soporte elástico	208
6.4.3. Caso con vibraciones de vigas	209
6.5. Vigas con apoyos sometidos a esfuerzos dinámicos	209
6.6. Vigas en 3D	214
6.6.1. Ejemplo 1:	214
6.6.2. Ejemplo 2:	215
6.6.3. Ejemplo 3:	215
6.7. Estructuras con apoyos sometidos a esfuerzos dinámicos	215

Capítulo 1

MODELOS FISICOS Y MATEMATICOS

En este capítulo se presentan los principios o leyes físicas que gobiernan el flujo de fluidos, las reglas que definen el comportamiento de los materiales involucrados, las relaciones termodinámicas entre las variables que caracterizan el fenómeno y finalmente los modelos matemáticos conformados por sistemas de ecuaciones diferenciales que serán el punto de partida hacia la búsqueda de soluciones a diversos problemas de mecánica de fluidos y transferencia de calor.

1.1. Planteo Teórico

Sea $\phi(x, y, z)$ una magnitud escalar, por ejemplo la temperatura, definida sobre Ω un dominio en \mathbf{R}^3 siendo Γ su frontera, el balance de energía se puede escribir en forma integral como:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi \, d\Omega}_{\text{acumulación}} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{q} \, d\Omega}_{\text{flujos}} + \underbrace{\int_{\Omega} Q \, d\Omega}_{\text{fuentes}} = \int_{\Gamma} \vec{q} \cdot d\Gamma + \int_{\Omega} Q \, d\Omega \quad (1.1)$$

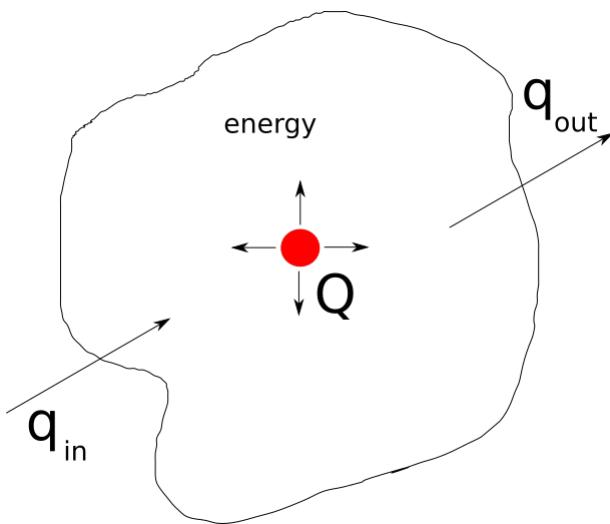


Figura 1.1: Balance sobre el dominio del problema - Visión macroscópica global

donde ϕ representa la energía del sistema, en este caso relacionado con la temperatura. En la figura siguiente se ve la acumulación de la cantidad como la tasa de cambio en el tiempo de la energía, en este caso íntimamente ligada a la temperatura T , se ven los flujos que ingresan q_{in} y egresan q_{out} y las fuentes Q .

En la expresión 1.1 la segunda igualdad utiliza el teorema de la divergencia para poder convertir una integral de volumen en una de superficie donde los flujos ingresan o salen.

Todas las variables por el momento son dependientes de las 3 coordenadas espaciales (x, y, z) y del tiempo t , denominadas "*variables independientes del problema*".

La idea es trabajar sobre la visión macroscópica local para luego por un proceso de extensión arribar a la visión macroscópica global (ver Figura 1.2)

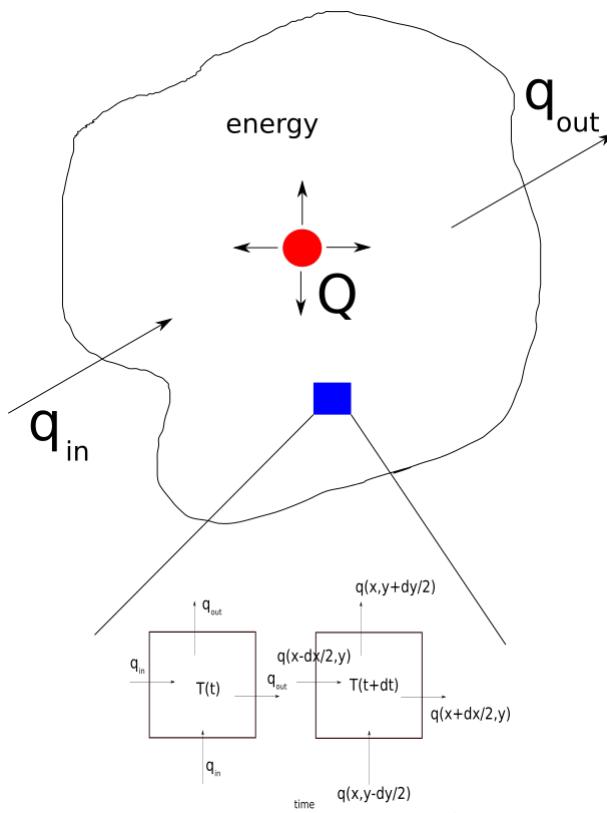


Figura 1.2: Pasaje de la visión macroscópica global a la local

En la visión local los dos volúmenes de control difieren por su instante en el tiempo marcado por el eje temporal en la figura. Los flujos coinciden porque se suponen congelados en el instante de tiempo pero se denotan de una manera diferente, a izquierda como una entidad genérica y a derecha como una función de la posición. En la figura hemos reducido el problema a 2D pero en general el problema es 3D.

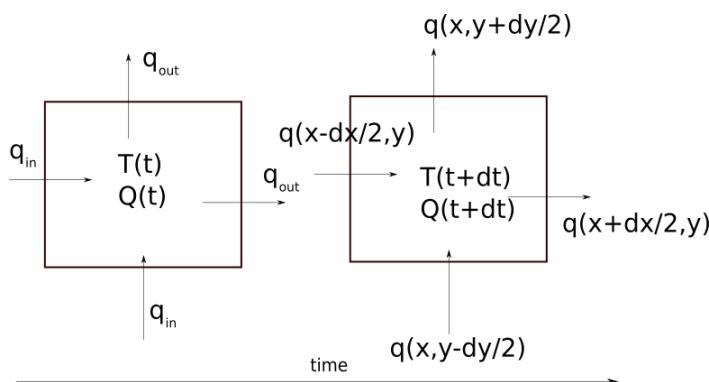


Figura 1.3: Balance sobre un volúmen de control - Visión macroscópica local

En esta figura se ve los 3 términos presentes en la ecuación 1.1, el término de flujos representado por $q(x, t)$, la fuente por $Q(x, t)$ y el hecho de poner 2 cubos elementales en 2 instantes diferentes pretende incluir el término de acumulación. En esta visión 2D al hablar de cubo en realidad estamos hablando del cuadrado de la figura 1.3. Entonces el cubo hace las veces de un recipiente que recibe flujo por sus caras y en su interior hay fuentes y que en el tiempo produce un cambio en la variable analizada, en esta figura $T(x, t)$. En la cara izquierda del cubo izquierdo el flujo es $q(x - \delta x/2, y, t)$, en la cara derecha es $q(x + \delta x/2, y, t)$, en la cara inferior es $q(x, y - \delta y/2, t)$ y en la superior es $q(x, y + \delta y/2, t)$. Lo mismo en el cubo de la derecha son: $q(x - \delta x/2, y, t + \delta t)$ $q(x + \delta x/2, y, t + \delta t)$, $q(x, y - \delta y/2, t + \delta t)$ y $q(x, y + \delta y/2, t + \delta t)$. Si cada flujo lo expresamos como una expansión en series de Taylor, es decir

$$q(x \pm \delta x/2, y, t) = q(x, y, t) \pm \frac{\partial q}{\partial x} \delta x/2 + O(\delta x^2)$$

Los flujos en las caras se consideran positivos cuando salen y negativos cuando entran, por una cuestión de convención (podría ser al revés y debería concluir en lo mismo) y esa convención está relacionada con la proyección del mismo en la normal a las caras que siempre consideramos normales en las caras orientadas hacia afuera del cubo.

Entonces si por un momento consideramos solo las caras izquierda y derecha y usamos la segunda igualdad de 1.1 donde la integral de superficie sobre las caras consideran la proyección del flujo sobre la normal a la superficie, entonces vemos que

$$q(x + \delta x/2, y, t) - q(x - \delta x/2, y, t) = \frac{\partial q}{\partial x} \delta x + O(\delta x^2)$$

la cual insertado en la expresión 1.1 multiplicado por el $d\Gamma$ nos retorna al mismo término de flujo expresado en la primera igualdad, expresado en función de la divergencia y el volumen del cubo. Solo a modo de recordatorio, $\frac{\partial q}{\partial x}$ es una de las componentes del operador divergencia

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}$$

Podemos realizar el mismo análisis con la variable temporal, usando Taylor en el tiempo para arribar a una expresión diferencial para el término de acumulación.

Para eso definimos la variable a analizar, en este caso la temperatura en la figura, y en general cualquier variable ϕ , entonces,

$$\left(\int_{\Omega} \phi d\Omega \right)(t + \delta t) = \left(\int_{\Omega} \phi d\Omega \right)(t) + \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{\Omega} \phi d\Omega \right) \delta t$$

Al incluir el tiempo en el cubo equivale a agregar casi una dimensión al problema. Esto hace que el δt pase a formar parte del volumen espacio temporal del análisis. Sacando factor común el volumen de ese cubo espacio temporal arribamos a:

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \phi d\Omega}_{\text{acumulación}} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q} d\Omega}_{\text{flujos}} + \underbrace{\int_{\Omega} Q d\Omega}_{\text{fuentes}}. \quad (1.2)$$

Como para contextualizar un poco el problema vamos a introducir un ejemplo de la vida diaria, el caso de la disipación de calor en un microprocesador.

Lo primero que hay que identificar es como escribir este problema físico en un problema matemático

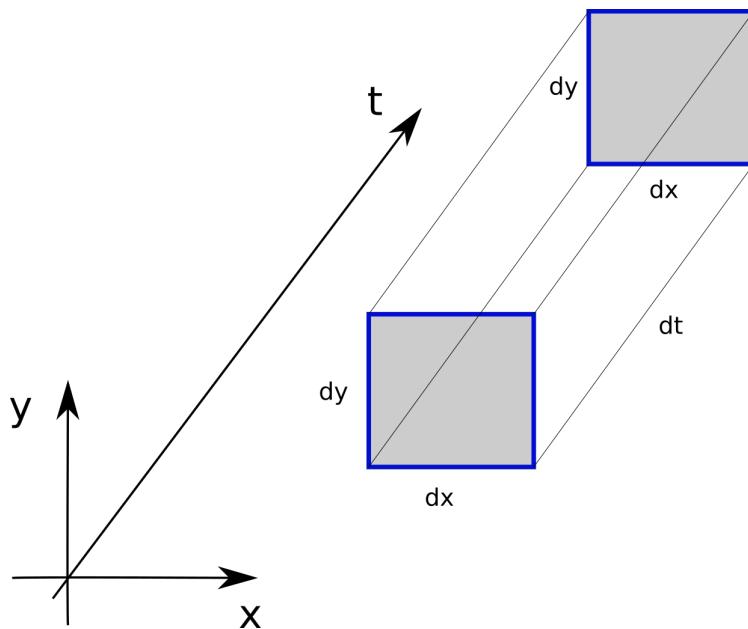


Figura 1.4: Volúmen de control espacio temporal

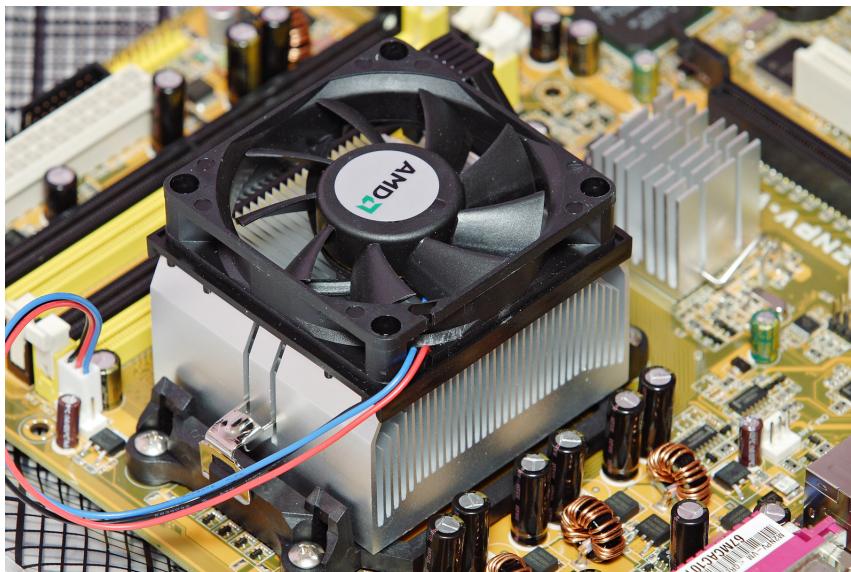


Figura 1.5: Disipador de calor de un microprocesador AMD

Del modelo físico al modelo matemático

- Donde está puesto el interés ?
- Qué quiero obtener del estudio ?
- Qué recursos dispongo ?
- Toma de decisiones \Rightarrow qué modelo empleo ?

Supongamos que en nuestro caso

- El interés está puesto en el comportamiento térmico del material del microprocesor
- Del estudio quiero obtener la distribución espacial de temperaturas en el microprocesador
- De una simple laptop
- Decido emplear un modelo a lo sumo 2D, pero quisiera primero hacer algunas pruebas 1D y por

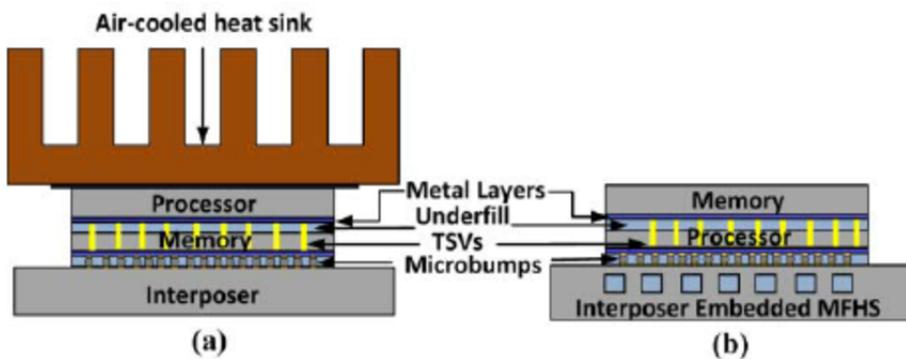


Figura 1.6: Esquema de disipación

el momento mi interés está en la respuesta estacionaria del problema

Construcción del modelo matemático

De la ecuación 1.1 vemos

- variable de acumulación : energía $\Rightarrow E = \rho C_p T$
- flujos entrantes y salientes de calor:
 - conducción del calor a través de la conductividad del material k
 - convección del calor a través de la velocidad del aire que mueve el ventilador \mathbf{v}
- Las fuentes de calor Q

Si el modelo a emplear fuera un modelo 2D no estacionario por ejemplo, el sistema anterior luce de esta forma:

$$E = \rho C_p T \quad (1.3)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}^v + \mathbf{q}^k \quad (1.4)$$

$$Q = Q^0 - c T \quad (1.5)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} E d\Omega}_{\text{temporal}} + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q}^v d\Omega}_{\text{convectivo}} + \underbrace{\int_{\Omega} c T d\Omega}_{\text{reactivo}} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{q}^k d\Omega}_{\text{difusivo (conductivo)}} + \underbrace{\int_{\Omega} Q^0 d\Omega}_{\text{fuente}}. \quad (1.6)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho C_p T d\Omega}_{\text{temporal}} + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{v} \rho C_p T) d\Omega}_{\text{convectivo}} + \underbrace{\int_{\Omega} c T d\Omega}_{\text{reactivo}} = \underbrace{\int_{\Omega} \nabla \cdot k \nabla T d\Omega}_{\text{difusivo (conductivo)}} + \underbrace{\int_{\Omega} Q^0 d\Omega}_{\text{fuente}}. \quad (1.7)$$

- ecuación en general lineal
- no estacionaria
- término convectivo dependiente del movimiento del medio material
- término reactivo, proveniente de la ley de Arrhenius, $k = A e^{-E_a/RT}$
- término difusivo o conductivo, mecanismo de transporte a escala molecular
- término fuente

Quedarian las condiciones de contorno

- Condiciones Dirichlet $\Rightarrow T = T_D \Gamma \in \Gamma_D$

- Condiciones Neumann $\Rightarrow \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = q_N \Gamma \in \Gamma_N$
- Condiciones mixtas o Robin $\Rightarrow \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} + h(T - T_\infty) = 0 \Gamma \in \Gamma_R$

Para el problema que tenemos que resolver asumimos :

- Dominio Ω : el microprocesador considerado una paralelepípedo en 3D y en 2D un dominio rectangular
- Los coeficientes o datos físicos de los materiales deben ser provistos, ρ , C_p , k y h
- los datos operativos también v , la fuente Q^0 y la temperatura del medio ambiente T_∞ .
- las condiciones de contorno
 - la base del microprocesador está aislada, es decir que por ese contorno $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$
 - el resto del contorno está refrigerado por la corriente de aire por lo que aplicaremos condiciones de contorno del tipo Robin o mixtas allí.
 - un detalle a tener en cuenta, la velocidad que incluye este modelo es la velocidad del medio material en el dominio analizado. Como en este caso el medio material es el material sólido del microprocesador y este no se mueve , entonces la velocidad aquí no entra en el análisis. La velocidad del aire no corresponde porque nosotros no analizamos el aire. Lo que remueve de calor el aire entra en la condición Robin

Para transformar este modelo en un modelo estacionario y 1D asumimos que:

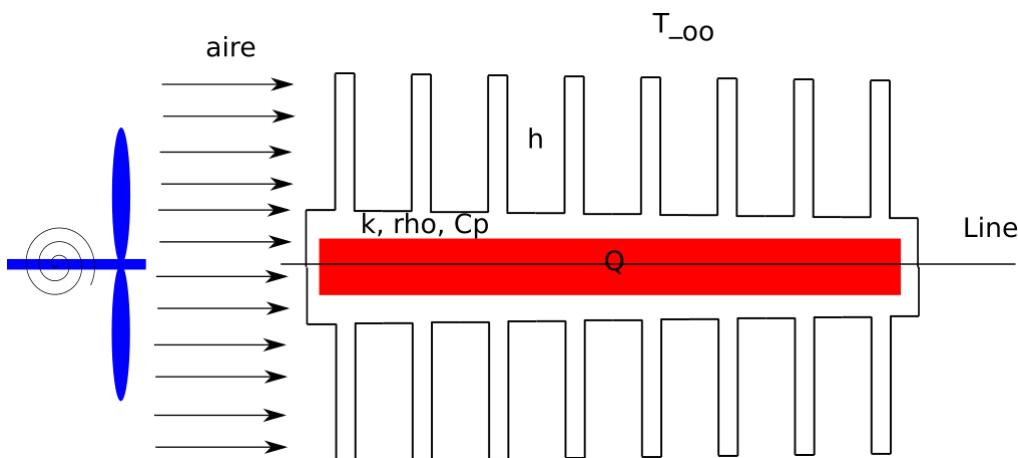


Figura 1.7: Modelo de dissipador

- el dominio pasa a ser la linea denominada Line en la figura anterior
- el calor evacuado por la refrigeración que en el modelo anterior se incluía mediante la condición de contorno Robin o mixta ahora debe ingresarse como un sumidero de calor (fuente inversa) y para eso usaremos el término denominado anteriormente como reactivo.

Si hubiéramos querido resolver el problema 2D pero ahorrando un poco de recursos podríamos haber apelado a la condición de simetría con el fin de reducir el dominio a la mitad.

$$\underbrace{\int_{\Omega} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} dx}_{\text{temporal}} + \underbrace{\int_{\Omega} \rho C_p v \frac{\partial T}{\partial x} dx}_{\text{convectivo}} + \underbrace{\int_{\Omega} h (T - T_\infty) dx}_{\text{reactivo}} = \underbrace{\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x} (k \frac{\partial T}{\partial x}) dx}_{\text{difusivo (conductivo)}} + \underbrace{\int_{\Omega} Q dx}_{\text{fuente}}. \quad (1.8)$$

Para el método de diferencias finitas usamos la forma diferencial de la ecuación anterior que equivale a extraer los términos de las integrales bajo una única integral y luego asumir que la ecuación no solo se cumple a nivel integral sino punto a punto, con lo cual se puede sacar ese único integrando afuera quedando la siguiente ecuación diferencial:

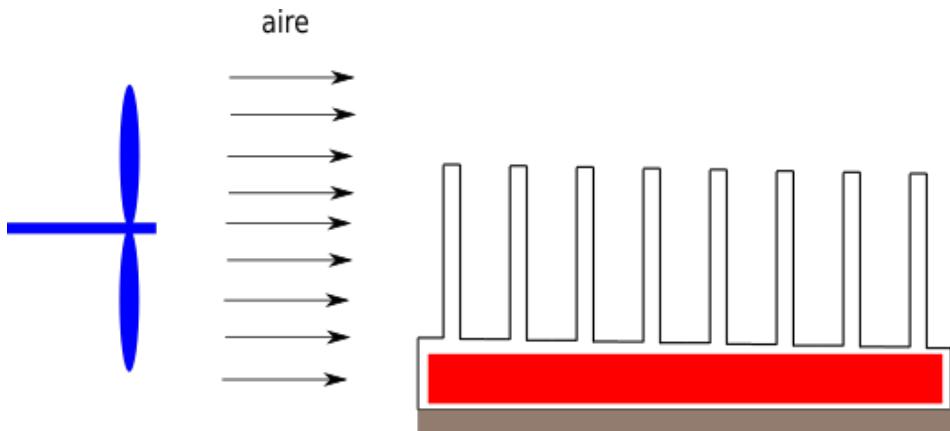


Figura 1.8: Modelo de disipador simétrico

$$\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} + c(T - T_{\infty}) = \frac{\partial}{\partial x} (\alpha \frac{\partial T}{\partial x}) + Q^0 \quad (1.9)$$

Como veremos mas adelante esto equivale a usar un método como el de residuos ponderados usando como peso la delta de Dirac, es decir

$$\int_{\Omega} \delta(x) \left[\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} + c(T - T_{\infty}) - \frac{\partial}{\partial x} (\alpha \frac{\partial T}{\partial x}) - Q^0 \right] d\Omega \quad (1.10)$$

Dado que la velocidad v del término convectivo se refiere a la velocidad con la que se mueve el medio material que forma parte del sistema, en nuestro caso, el microprocesaor, eso implica que el término convectivo debe anularse para este caso. Distinto sería el caso de que nuestro interés fuera resolver del lado del aire siendo el microprocesador parte de nuestro medio ambiente. Por este motivo el problema a resolver queda como:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + c(T - T_{\infty}) = \frac{\partial}{\partial x} (\alpha \frac{\partial T}{\partial x}) + Q^0 \quad (1.11)$$

con $\alpha = \frac{k}{\rho C_p}$, $c = \frac{h}{\rho C_p}$ y $Q^0 = \frac{Q}{\rho C_p}$

En el caso estacionario

$$c(T - T_{\infty}) = \frac{\partial}{\partial x} (\alpha \frac{\partial T}{\partial x}) + Q^0 \quad (1.12)$$

si las propiedades fueran constantes, no dependiendo de la posición, entonces:

$$c(T - T_{\infty}) = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q^0 \quad (1.13)$$

1.1.1. Aplicación de los métodos numéricos a los modelos matemáticos que vienen de la ciencia

Una buena parte de los problemas de la ciencia se conceptualizan mediante modelos matemáticos que vienen gobernados por ecuaciones diferenciales. Estas ecuaciones diferenciales, dependiendo de la complejidad que se desee y se pueda abordar pueden ser del tipo ordinarias, cuando solo existe

una variable independiente del problema o a derivadas parciales cuando son mas de una. La mayor parte de los modelos mas conocidos usan las coordenadas espaciales y el tiempo como variables independientes, aunque pueden ser de otro tipo. En nuestro curso la idea es trabajar exclusivamente con estos, coordenadas espaciales y/o tiempo. Ejemplos de ecuaciones diferenciales ordinarias los tenemos cuando reducimos los problemas en dimensiones espaciales de 3D a 1D sin incorporar el tiempo en el estudio, o cuando reducimos las coordenadas a un punto (cero dimensional) y lo que nos interesa es la evolución temporal de ese punto. Por otro lado las ecuaciones diferenciales a derivadas parciales rigen la mayoría de los problemas en los cuales no se plantea una reducción tan drástica, por ejemplo si vamos de 3D a 2D plano o axisimétrico, o cuando resolvemos en 1D pero ademas le incluimos el tiempo, etc. A menos de los problemas cero dimensionales (0D) el resto de los casos serán tratados a lo largo del curso motivo por el cual lo posponemos para las proximas secciones. Hay muchos problemas gobernados por modelos 0D los cuales suelen denominarse a parámetros concentrados, a diferencia de aquellos a parámetros distribuidos que justamente tratan de formas de abordar problemas cuyas soluciones dependen de mas de una variable independiente. Problemas típicos de modelos a parámetros concentrados es el cálculo de la trayectoria de una partícula planteado en términos de las leyes de la mecánica como:

$$m \mathbf{a} = \sum_j \mathbf{F}_j \quad (1.14)$$

Cómo llegamnos de esta expresión algebraica a una ecuación diferencial, es incluyendo relaciones entre estas variables dinámicas y sus respectivas variables cinemáticas. Normalmente de esta expresión nos interesa conocer como es la trayectoria de la partícula gobernada por esta ley, es decir $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$, siendo \mathbf{x} la posición respecto a un sistema de coordenadas fijo. \mathbf{x} normalmente es un vector que se relaciona con la aceleración a través de

$$\mathbf{a} = \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} \quad (1.15)$$

lo cual reemplazandola en lo anterior nos da

$$m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \sum_j \mathbf{F}_j \quad (1.16)$$

que si lo descomponemos en componentes nos termina dando un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \sum_j F_{x,j} \quad (1.17)$$

$$m \frac{d^2y}{dt^2} = \sum_j F_{y,j} \quad (1.18)$$

$$m \frac{d^2z}{dt^2} = \sum_j F_{z,j} \quad (1.19)$$

(1.20)

Este es un sistema de ecuaciones ordinarias (ODE) de segundo orden el cual puede convertirse en otro de primer orden duplicando la cantidad de ecuaciones a resolver pero bajando el orden, es decir,

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (1.21)$$

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (1.22)$$

donde hemos usado la relación que existe entre posición, velocidad y aceleración, conceptos ampliamente conocidos por el ser humano.

Si ahora lo escribimos en términos de sus componentes llegamos a

$$m \frac{dv_x}{dt} = \sum_j F_{x,j} \quad (1.23)$$

$$m \frac{dv_y}{dt} = \sum_j F_{y,j} \quad (1.24)$$

$$m \frac{dv_z}{dt} = \sum_j F_{z,j} \quad (1.25)$$

y además

$$\frac{dx}{dt} = v_x \quad (1.27)$$

$$\frac{dy}{dt} = v_y \quad (1.28)$$

$$\frac{dz}{dt} = v_z \quad (1.29)$$

$$(1.30)$$

Para continuar tenemos que identificar todas las fuerzas puestas en juego. Supongamos que incorporamos el peso propio de la partícula y la interacción de la partícula con el medio en que se encuentra, supongamos aire, que esta moviéndose a una velocidad dada \mathbf{v}_{air} que depende de la altura respecto al suelo. Como información complementaria si pensamos en el aire atmosférico, este normalmente varía desde un valor nulo en el suelo hasta su valor de referencia (dado por la estación meteorológica) con una ley de variación que se puede medir.

Entonces

$$\mathbf{v}_{air} = v_\infty \tanh(z) \quad (1.31)$$

ley que al cabo de aproximadamente 3 metros de altura provoca un cambio desde un valor nulo al valor de referencia.

Asumiendo que por moverse en un medio que posee una densidad y una viscosidad la partícula experimenta un arrastre (Drag) que es proporcional a la diferencia de velocidad entre la partícula y el aire, es decir,

$$\mathbf{F} \propto \mathbf{v}_{air} - \mathbf{v} \quad (1.32)$$

entonces nos queda que la fuerza compuesta puede definirse como:

$$\frac{1}{m} \mathbf{F} = \left(1 - \frac{\rho_{air}}{\rho}\right) \mathbf{g} - \frac{3}{4} \frac{1}{d_p} \frac{\rho_{air}}{\rho} C_D |\mathbf{v}_{air}(z) - \mathbf{v}| (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{air}(z)) \quad (1.33)$$

donde vemos que la fuerza depende de la velocidad que a su vez depende de la posición, lo cual hace que el sistema sea no lineal por la forma en que la fuerza depende de la velocidad relativa en este caso.

Para ello hay que recurrir a una integración de las ecuaciones con el condimento adicional que es no lineal.

Aquí es donde vemos la importancia de algunos conceptos y herramientas aprendidos del cálculo numérico, como la resolución de problemas no lineales y la integración de ODEs.

Por lo tanto el sistema vectorial de ODEs a resolver sería:

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left(1 - \frac{\rho_{air}}{\rho}\right)\mathbf{g} - \frac{3}{4} \frac{1}{d_p} \frac{\rho_{air}}{\rho} C_D |\mathbf{v}_{air}(z) - \mathbf{v}| (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{air}(z)) \quad (1.34)$$

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} \quad (1.35)$$

Esto se puede escribir como un sistema de ecuaciones vectoriales de la forma

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{\rho_{air}}{\rho}\right)\mathbf{g} - \frac{3}{4} \frac{1}{d_p} \frac{\rho_{air}}{\rho} C_D |\mathbf{v}_{air}(z) - \mathbf{v}| (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{air}(z)) \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

Para resolverlo vamos a utilizar o bien cualquier método de integración de los que aprendieron en cálculo numérico. Una alternativa puede ser un método de un paso simple, la otra alguna de paso múltiple, alguno de la familia de los Runge-Kutta. Como por el momento estamos pensando en una breve introducción a los métodos numéricos elegimos un método de paso simple. Entre ellos como es bien sabido podemos apelar al método de diferencias finitas para definir la derivada temporal. La definición de la derivada temporal depende del orden de precisión que se pretenda tener. Comenzamos con algo simple para ir cerrando esta introducción. En ese caso tomamos

$$\frac{d\Phi}{dt} \approx \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t} \quad (1.37)$$

donde n representa un instante en el tiempo donde se evalúa la solución a nuestro problema y siendo $\Delta t = t^{n+1} - t^n$. Lo que resta es ver en qué instante se evalúa el miembro derecho del sistema de ODEs, es decir, lo que se suele llamar la *driving force*.

Para ello hay varias opciones como veremos durante el curso, por el momento para poder continuar con la definición de la estrategia de cálculo vamos a evaluar el miembro derecho en el tiempo actual t^n .

Antes de terminar la definición matemática de un problema como este, donde la única variable independiente es el tiempo, se lo denomina *problema a valores iniciales (IVP)* y para lo cual se precisa definir la condición inicial para poder comenzar el cálculo. Esto ustedes ya lo han visto en cálculo numérico pero también en las materias de física introductorias. Cuando resolvemos la trayectoria de una partícula lo primero que nos preguntamos es de dónde sale y con qué velocidad sale. Eso en términos matemáticos significa decir:

$$\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}(t = 0) = \mathbf{x}^{n=0} \quad (1.38)$$

$$\mathbf{v}^0 = \mathbf{v}(t = 0) = \mathbf{v}^{n=0} \quad (1.39)$$

$$(1.40)$$

Entonces, si conocemos el vector incógnita a $t = 0$ es decir a $n = 0$, podemos comenzar el cálculo de la siguiente manera:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}^{n=1} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}^{n=0} + \Delta t \left[\begin{pmatrix} \left((1 - \frac{\rho_{air}}{\rho}) \mathbf{g} - \frac{3}{4} \frac{1}{d_p} \frac{\rho_{air}}{\rho} C_D |\mathbf{v}_{air}(z^{n=0}) - \mathbf{v}^{n=0}| (\mathbf{v}^{n=0} - \mathbf{v}_{air}(z^{n=0})) \right) \\ \mathbf{v}^{n=0} \end{pmatrix} \right] \quad (1.41)$$

y así sucesivamente. Hemos resaltado nuestras incógnitas agregandole el supraindice n , el resto son parámetros del problema que gozan de una definición del problema y son fijos durante toda la simulación.

Así como por cuestiones de simplicidad hemos presentado un problema bien conocido de la mecánica donde la única variable es el tiempo, podemos también definir un problema donde la única variable independiente sea una coordenada espacial, como veremos en el siguiente capítulo.

Capítulo 2

METODO DE DIFERENCIAS FINITAS (FDM)

2.1. Introducción

Las ecuaciones diferenciales han sido utilizadas extensamente para modelar una gran variedad de problemas en mecánica de sólidos y fluidos, biología, ciencia de materiales, economía, ecología, ciencias computacionales, etc., por ejemplo, las ecuaciones de Navier Stokes en dinámica de fluidos, las ecuaciones de Maxwell para electromagnetismo, entre otras. Desafortunadamente, aunque las ecuaciones diferenciales pueden describir una gran cantidad y variedad de estos problemas, solo una pequeña parte de ellos pueden ser solucionados de manera exacta o analítica en términos de funciones elementales (polinomios, seno, coseno, logaritmos, etc.) y sus combinaciones (funciones compuestas). Frecuentemente, aun cuando una ecuación diferencial puede ser resuelta analíticamente, se requiere para esto grandes esfuerzos y utilización de teorías matemáticas avanzadas. La forma cerrada de la solución puede ser muy complicada para ser realmente útil. Si la solución analítica no está disponible, se desea encontrar una solución aproximada a la ecuación diferencial. Esto se logra utilizando métodos numéricos. Este capítulo muestra la forma de resolver numéricamente ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) y parciales (PDE), utilizando el método de diferencias finitas (FDM). Este es un método numérico que se utiliza para calcular soluciones aproximadas de ecuaciones diferenciales. En las próximas secciones se irán desarrollando los conceptos básicos y las técnicas necesarias para este tipo de formulación numérica.

En la aproximación por diferencias finitas, el dominio continuo es "discretizado", tal que las variables dependientes son consideradas que existen solamente en puntos discretos. Las derivadas son aproximadas por ecuaciones en diferencias, resultando en una representación algebraica de las ecuaciones diferenciales parciales (PDE), resultando que el problema ha sido transformado en un sistema algebraico. La naturaleza del sistema algebraico resultante depende del carácter del problema que resuelve la PDE original. Tenemos dos tipos de problemas: con y sin dependencia temporal. Si el problema carece de dependencia temporal el método podemos denominarlo simplemente método de las diferencias finitas (FDM- Finite Difference Method). Si el problema incluye la variable temporal se denomina método de las diferencias finitas en el dominio temporal (FDTD – Finite Difference Time Domain–). Aunque nos referimos a ambos, nos ocuparemos principalmente del método FDM en la mayor parte de los problemas tratados.

El método de diferencias Finitas está basado en aproximaciones que permiten reemplazar ecuaciones diferenciales por ecuaciones de diferencia. Estas aproximaciones de Diferencias Finitas son de forma algebraica; relacionan el valor de la variable dependiente, en un punto dentro de la región de solución, con sus valores en algunos puntos vecinos. En base a esto, la solución por Diferencias Finitas básicamente involucra 3 pasos:

- (1) Discretización.

(2) Aproximación de la Ecuación Diferencial.

(3) Solución de las Ecuaciones en Diferencias.

2.2. Base Teórica del Método de Diferencias Finitas

De la mecánica del continuo surgen modelos matemáticos que sirven para resolver muchos problemas de la ingeniería. Entre ellos un modelo muy utilizado es el de *transporte de escalares*.

Una ecuación de transporte general se puede expresar de la siguiente manera:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi \right) + c\phi = \nabla \cdot (\kappa \nabla \phi) + Q \quad (2.1)$$

con $\phi(\mathbf{x}, t)$ el escalar a transportar, función de la posición y del tiempo en general, por ejemplo, la temperatura o la concentración de algún contaminante o especie químicamente reactiva, \mathbf{v} el vector velocidad normalmente asociado con la *advección*, c un término reactivo que mide la producción o destrucción del escalar en forma proporcional al escalar transportado, término muchas veces presente cuando hay reacciones químicas y asociado al calor de reacción, κ la conductividad, ρ la densidad y C_p el calor específico a presión constante del medio donde se lleva a cabo el transporte y Q una fuente de calor tratada separadamente y que no depende del escalar.

Con el objetivo de simplificar la ecuación anterior, cuando ρC_p son constantes, se suele redefinir los coeficientes de la anterior expresión de forma que desaparezcan los coeficientes de los términos fuentes y la conductividad de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} c &\Leftarrow \frac{c}{\rho C_p} \\ Q &\Leftarrow \frac{Q}{\rho C_p} \\ \kappa &\Leftarrow \frac{\kappa}{\rho C_p} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Definimos Ω tal que represente el dominio de definición de nuestro problema, en nuestro caso restringido a coordenadas cartesianas sobre dominios rectangulares y alineados con los ejes cartesianos. i.e. $\Omega = [x_0, x_1] \times [y_0, y_1]$, con (x_0, y_0) el vértice inferior izquierdo del dominio rectangular y (x_1, y_1) el rincón superior derecho. El contorno del dominio Ω es representado por $\Gamma = \Gamma_\phi \cup \Gamma_q \cup \Gamma_h$, siendo cada uno de los Γ , la parte del contorno donde se aplican condiciones de tipo Dirichlet, Neumann o Mixtas (Robin).

Las condiciones de borde expresadas matemáticamente, las podemos definir como:

$$\begin{aligned} \phi &= \bar{\phi} & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_\phi \\ -\kappa \nabla \phi \cdot \eta &= \bar{q} & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_q \\ \kappa \nabla \phi \cdot \eta + h(\phi - \phi_\infty) &= 0 & \forall \mathbf{x} \in \Gamma_h \end{aligned} \quad (2.3)$$

El primer término, llamado *temporal*, tiene en cuenta el carácter transitorio del problema, es decir, el escalar a transportar puede cambiar con el tiempo, cosa que no sucede en problemas estacionarios donde la solución ya no evoluciona más en el tiempo y solo depende de su posición espacial.

A continuación haremos una serie de simplificaciones a los efectos de introducir el tema en los casos más simples para luego ir incorporando los otros términos.

2.3. Diferencias Finitas en una dimensión

2.3.1. Aplicación a problemas estacionarios, solo conducción y términos fuentes

En esta etapa, el objetivo es simplificar el problema y sólo utilizar una dimensión espacial asumiendo un estado estacionario. Las variables independientes, normalmente $\mathbf{x} = [x, y, z]$ y t se reducen simplemente a x con lo cual las ecuaciones a derivadas parciales (PDEs) se transforman en ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs).

$$c\phi = \frac{d}{dx}(\kappa \frac{d\phi}{dx}) + Q \quad (2.4)$$

Queremos resolver el campo de temperaturas a través de una pared de material ($-\infty \leq y, z \leq +\infty$, $0 \leq x \leq L_x$). La temperatura en $x = 0, L_x$ es mantenida a $\bar{\phi}_0$, $\bar{\phi}_{L_x}$ y hay una fuente de calor repartida $Q(x)$:

$$\begin{aligned} k \frac{d^2\phi}{dx^2} &= -Q(x) \\ \phi(0) &= \bar{\phi}_0 \\ \phi(L_x) &= \bar{\phi}_{L_x} \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde se asume un valor constante de conductividad.

Dividimos el intervalo en L segmentos de longitud $\Delta x = L_x/L$ y llamaremos “nodos” o “puntos de la grilla” a los extremos de dichos segmentos:

$$x_l = l\Delta x, \quad l = 0, 1, 2, \dots, L, \quad x_0 = 0, \quad x_L = L_x \quad (2.6)$$

2.3.2. Desarrollo en Serie de Taylor

Si bien la ecuación que debemos resolver es de segundo orden, empezaremos, por simplicidad, por desarrollar aproximaciones en diferencias para la derivada de primer orden,

$$\begin{aligned} \phi(x_{l+1}) &= \phi(x_l + \Delta x) \\ &= \phi(x_l) + \Delta x \frac{d\phi}{dx} \Big|_{x=x_l} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2\phi}{dx^2} \Big|_{x=x_l+\theta_1\Delta x} \quad \text{donde: } 0 \leq \theta_1 \leq 1 \end{aligned} \quad (2.7)$$

Indicando $f_l = f(x_l)$ para cualquier función $f(x)$, tenemos:

$$\phi_{l+1} = \phi_l + \Delta x \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l + \frac{\Delta x^2}{2!} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \quad (2.8)$$

Donde el subíndice $l + \theta_1$ es una extensión de la notación que indica evaluación en $(l + \theta_1)\Delta x$. Despejando la derivada de primer orden:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l = \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \quad (2.9)$$

A esta aproximación para la derivada de primer orden la denominamos “*por diferencia hacia adelante*” (*forward difference*):

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} \quad (2.10)$$

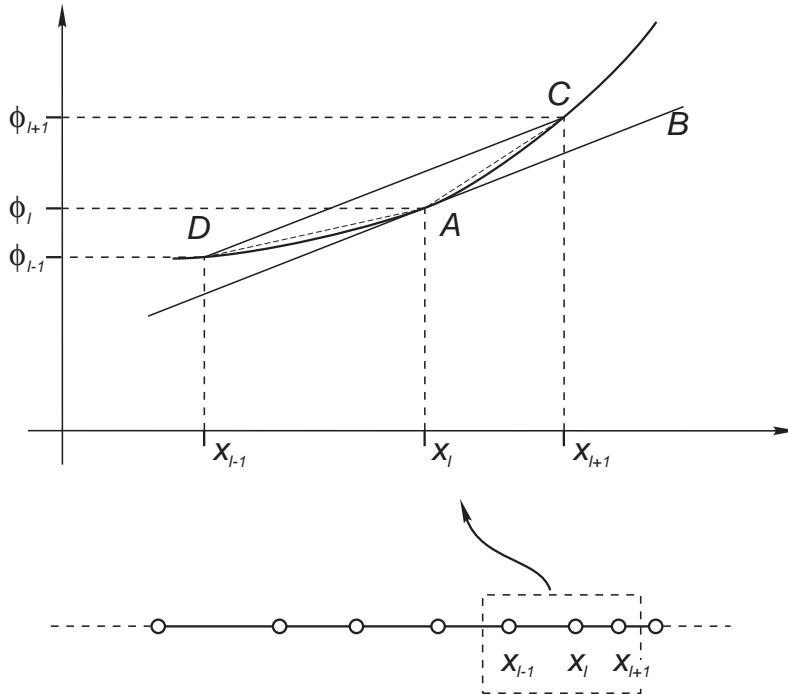


Figura 2.1: Interpretación geométrica de las diferentes aproximaciones por diferencias finitas a la derivada.

Véase la Figura 2.1 para una interpretación gráfica de esta aproximación. Hemos aproximado la derivada en el punto x_l por la pendiente de la secante a la curva que pasa por los puntos x_l y x_{l+1} (segmento AC). El error de esta aproximación es:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\Delta x}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_{l+\theta_1} \\ |E| &\leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_l, x_{l+1}]} \left| \frac{d^2\phi}{dx^2} \right| \leq C' \Delta x, \quad \Delta x \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

En forma similar, la aproximación hacia atrás (“*backward difference*”) da:

$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_l \approx \frac{\phi_l - \phi_{l-1}}{\Delta x} \quad (2.12)$$

$$|E| \leq \frac{\Delta x}{2} \max_{[x_{l-1}, x_l]} \left| \frac{d^2\phi}{dx^2} \right| \leq C' \Delta x, \quad \Delta x \rightarrow 0 \quad (2.13)$$

que corresponde a la pendiente del segmento DA en la Figura.

2.3.3. Aproximaciones de mayor orden

Realizando desarrollos de mayor orden:

$$\phi_{l\pm 1} = \phi_l \pm \Delta x \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_{l\pm\theta_{3,4}}, \quad 0 \leq \theta_{3,4} \leq 1 \quad (2.14)$$

de donde:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - \phi_{l-1}}{2\Delta x} \quad (2.15)$$

que corresponde al segmento *DC* de la Figura 2.1. La correspondiente estimación del error es:

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{6} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^3 \phi}{dx^3} \right| \leq C'' \Delta x^2 \quad (2.16)$$

A esta la llamamos una “*aproximación centrada*”, ya que involucra a los dos nodos vecinos del nodo l . Notar que, al contrario de las otras, esta es simétrica con respecto al punto en cuestión. Además el error resulta ser un orden mayor, con lo cual en principio se pueden obtener mejores aproximaciones con menos puntos usando una de mayor orden como esta. Pero, como veremos más adelante, en la sección §2.3.9, el hecho de que la aproximación sea de un mayor orden no es una condición “*suficiente*” para obtener un orden de convergencia mayor.

2.3.4. Aproximación de derivadas de orden superior

Para obtener una estimación de la derivada segunda comenzamos haciendo una expansión hasta cuarto orden de $\phi_{l\pm 1}$:

$$\begin{aligned} \phi_{l\pm 1} &= \phi_l \pm \Delta x \frac{d\phi}{dx}_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{d^3 \phi}{dx^3} \right)_l \\ &\quad + \frac{\Delta x^4}{24} \left(\frac{d^4 \phi}{dx^4} \right)_{l \pm \theta_{5,6}}, \quad 0 \leq \theta_{5,6} \leq 1 \end{aligned} \quad (2.17)$$

de donde:

$$\left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_l = \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{24} \left[\left(\frac{d^4 \phi}{dx^4} \right)_{l+\theta_5} + \left(\frac{d^4 \phi}{dx^4} \right)_{l+\theta_6} \right] \quad (2.18)$$

o sea que:

$$\left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_l \approx \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2} \quad (2.19)$$

$$|E| \leq \frac{\Delta x^2}{12} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^4 \phi}{dx^4} \right| \quad (2.20)$$

Esta es una “*aproximación centrada*”.

2.3.5. Número de puntos requeridos

Nos cuestionamos cuantos puntos son necesarios para obtener una aproximación de un dado orden (digamos $O(\Delta x)$) para una derivada de orden k . Por ejemplo para obtener una aproximación a la derivada primera es obvio que necesitamos al menos dos puntos ya que por dos puntos pasa una recta y la recta es el polinomio de bajo orden que posee una derivada de primer orden no nula. El mismo razonamiento nos dice que se necesitan tres puntos para aproximar una derivada segunda. Por otra parte, parece también obvio que si queremos una aproximación de mayor orden entonces necesitaremos más puntos. La expresión que relaciona

- N el número de puntos,
- p la precisión del método y
- k el orden de la derivada a aproximar,

es:

$$N \geq k + p \quad (2.21)$$

Por lo tanto, con N puntos o más podemos desarrollar una aproximación de orden p (es decir $|E| \leq C\Delta x^p$) para $\frac{d^k\phi}{dx^k}$. Verificamos esto en los desarrollos anteriores,

Aproximación	Precisión (p)	Orden de la derivada (k)	Puntos utilizados	Puntos req. Eq. (2.21)
descentralizada	1	1	2	2
centrada	2	1	3	3
centrada	2	2	3	4

Tabla 1: Número de puntos utilizados en las diferentes aproximaciones por diferencias utilizadas.

2.3.6. Ejemplo de derivadas de orden superior con mallas homogéneas

Supongamos que queremos obtener una derivada tercera a segundo orden, en ese caso tener en cuenta que el término que involucra a la derivada tercera tiene un Δx^3 con lo cual si quiero que la aproximación sea de segundo orden debo subir dos términos más para que cuando divida por Δx^3 me quede un Δx^2 , es decir

$$\begin{aligned} \phi_{l\pm 1} &= \phi_l \pm \Delta x \frac{d\phi}{dx}_l + \frac{\Delta x^2}{2} \left(\frac{d^2\phi}{dx^2} \right)_l \pm \frac{\Delta x^3}{6} \left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_l + \frac{\Delta x^4}{24} \left(\frac{d^4\phi}{dx^4} \right)_l \\ &\quad \pm \frac{\Delta x^5}{120} \left(\frac{d^5\phi}{dx^5} \right)_{l\pm\theta}, \quad 0 \leq \theta \leq 1 \end{aligned} \quad (2.22)$$

Las condiciones que debemos cumplir para que nos quede una derivada tercera libre y orden 2 es que

- el término de la derivada primera, segunda y cuarta se anule
- el término de la derivada tercera quede unitario

es decir, hay 4 condiciones (4 ecuaciones) a cumplir por lo tanto deberíamos emplear al menos 4 incógnitas o 4 puntos.

$$\left(\frac{d^3\phi}{dx^3} \right)_l = \alpha_1 \phi_{l+1} + \alpha_2 \phi_{l-1} + \alpha_3 \phi_{l+2} + \alpha_4 \phi_{l-2} - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) \phi_l + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (2.23)$$

con

$$\begin{aligned} \Delta x (\alpha_1 - \alpha_2 + 2\alpha_3 - 2\alpha_4) &= 0 \\ \frac{\Delta x^2}{2} (\alpha_1 + \alpha_2 + 4\alpha_3 + 4\alpha_4) &= 0 \\ \frac{\Delta x^3}{6} (\alpha_1 - \alpha_2 + 8\alpha_3 - 8\alpha_4) &= 1 \\ \frac{\Delta x^4}{24} (\alpha_1 + \alpha_2 + 16\alpha_3 + 16\alpha_4) &= 0 \end{aligned} \quad (2.24)$$

A continuación resolvemos este sistema de ecuaciones.

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 4 & 4 \\ 1 & -1 & 8 & -8 \\ 1 & 1 & 16 & 16 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Los 4 coeficientes son:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

Una vez resuelto los 4 coeficientes armamos el stencil de la derivada tercera como

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^3 \phi}{dx^3} \right)_l &= \frac{\alpha_1 \phi_{l+1} + \alpha_2 \phi_{l-1} + \alpha_3 \phi_{l+2} + \alpha_4 \phi_{l-2} - (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4) \phi_l}{\Delta x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \\ &= \frac{(-1) \phi_{l+1} + (1) \phi_{l-1} + \frac{1}{2} \phi_{l+2} - \frac{1}{2} \phi_{l-2}}{\Delta x^3} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (2.27)$$

y luego comprobamos el error usando una función analítica $f(x)$ que posea varias derivadas continuas y no nulas, mas que 3 al menos, y vemos si refinando Δx recursivamente vamos mejorando el error en forma cuadrática. A continuación mostramos la solución para el caso de la función

$$f(x) = \tanh(x^3/\sigma)$$

cuya derivada tercera analítica da

$$\frac{d^3 f}{dx^3} = -\frac{(\Phi^2 - 1) 6 (27 x^6 \Phi^2 + \sigma^2 - 9x^6 - 18x^3 \sigma \Phi)}{\sigma^3}$$

$$\text{con } \Phi = \tanh\left(\frac{x^3}{\sigma}\right)$$

2.3.7. Solución de la ecuación diferencial por el método de diferencias finitas

Consideremos primero, por simplicidad, el caso de condiciones Dirichlet $\phi(0) = \bar{\phi}_0$, y $\phi(L_x) = \bar{\phi}_{L_x}$. Evaluando la ecuación diferencial en x_l :

$$k \left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_l = -Q_l \quad (2.28)$$

y aproximando la derivada segunda por diferencias finitas de segundo orden centradas:

$$k \frac{\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1}}{\Delta x^2} = -Q_l \quad (2.29)$$

hay una ecuación para cada $l = 1, 2, \dots, L - 1$, que son los *puntos interiores*.

Concretamente, las ecuaciones resultan ser:

$$\begin{aligned}
 +2\phi_1 & -\phi_2 & = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} & +\bar{\phi}_0 \\
 -\phi_1 & +2\phi_2 & -\phi_3 & = \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\
 -\phi_2 & +2\phi_3 & -\phi_4 & = \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\
 & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -\phi_{L-3} & +2\phi_{L-2} & -\phi_{L-1} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\
 -\phi_{L-2} & +2\phi_{L-1} & & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} & +\bar{\phi}_{L_x}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

Lo anterior se obtiene simplemente reemplazando el stencil interior en cada uno de los nodos interiores y para los nodos inmediatamente vecinos a aquellos que forman parte del contorno y que incluyen a la incógnita al contorno, se le aplica la condición de contorno conocida.

Es decir, la ecuación del nodo 1 es:

$$-\phi_0 + 2\phi_1 - \phi_2 = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} \tag{2.31}$$

$$\phi_0 = \bar{\phi}_0 \tag{2.32}$$

reemplazando

$$2\phi_1 - \phi_2 = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} + \bar{\phi}_0 \tag{2.34}$$

similar a la primera fila del sistema de ecuaciones anterior

(2.35)

(2.36)

Idem con el último nodo. Esto **reduce el sistema de ecuaciones** en 2 ecuaciones porque hay 2 BCs.

Esto desde el punto de vista matemático es válido pero desde lo informático no es lo más directo.

Otra alternativa mejor desde lo informático es mantener la misma cantidad de ecuaciones originales, una para cada nodo y para los nodos del contorno agregar las ecuaciones correspondientes a sus condiciones de contorno, por ej.

$$\begin{aligned}
 & \phi_0 & = \bar{\phi}_0 \\
 -\phi_0 & +2\phi_1 & -\phi_2 & = \frac{\Delta x^2 Q_1}{k} \\
 -\phi_1 & +2\phi_2 & -\phi_1 & = \frac{\Delta x^2 Q_2}{k} \\
 -\phi_2 & +2\phi_3 & -\phi_4 & = \frac{\Delta x^2 Q_3}{k} \\
 & \vdots & \vdots & \vdots \\
 -\phi_{L-3} & +2\phi_{L-2} & -\phi_{L-1} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-2}}{k} \\
 -\phi_{L-2} & +2\phi_{L-1} & -\phi_{Lx} & = \frac{\Delta x^2 Q_{L-1}}{k} \\
 & \phi_{Lx} & = \bar{\phi}_{Lx}
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

Lo anterior implica el siguiente trozo de código que permite cargar el anterior sistema en un simple código 1D de MDF (método de diferencias finitas).

for i=2:L

```

A(i,i-1) = -1
A(i,i) = +2
A(i,i+1) = -1
b(i,1) =  $\frac{\Delta x^2 Q(i)}{k}$ 
end for
A(1,1) = 1
A(L+1,L+1) = 1
b(1,1) =  $\bar{\phi}_0$ 
b(L+1,1) =  $\bar{\phi}_{Lx}$ 

```

Otra forma de cargarlo aprovechando las capacidades de manejar sistemas lineales ralos ("sparse")

`row=[]; col=[]; coe=[];`

for i=1:L-1

diagonal

`row = [row; i];`

`col = [col; i];`

`coe = [coe; 2];`

vecina anterior

`row = [row; i];`

`col = [col; i-1];`

`coe = [coe; -1];`

vecina posterior

`row = [row; i];`

`col = [col; i+1];`

`coe = [coe; -1];`

end

`A=sparse(row,col,coe)`

Definiendo un vector de incógnitas ϕ , que contiene sólo los nodos interiores:

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{L-1} \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^{L-1} \quad (2.38)$$

Tenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{f} \quad (2.39)$$

con:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & -1 & 2 & \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \bar{\phi}_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_{L-1}/k + \bar{\phi}_{L_x} \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

Nótese la analogía:

$$\begin{array}{ccc} \frac{d^2}{dx^2} \phi & = & -Q/k \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ \mathbf{K} \phi & = & \mathbf{f} \end{array} \quad (2.42)$$

El operador del continuo $\frac{d^2}{dx^2}$ es reemplazado por la matriz \mathbf{K} , el campo del continuo ϕ es reemplazado por el conjunto de valores nodales ϕ y, finalmente, la fuente interna $Q(x)$ es reemplazada por el vector miembro derecho \mathbf{f} . A su vez, la condiciones de contorno tipo Dirichlet también generan un término en el miembro derecho.

La matriz \mathbf{K} es simétrica ($K_{ij} = K_{ji}$ para todos i, j) y definida positiva ($\mathbf{v}^T \mathbf{K} \mathbf{v} > 0$ para todo $\mathbf{v} \in \mathbf{R}^{L-1}$). Esto tiene mucha importancia: se puede demostrar la existencia y unicidad de la solución discreta y además tiene importancia práctica ya que permite el desarrollo de rutinas de resolución especialmente diseñadas.

2.3.8. Ejemplo de Aplicación

Resolver:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} - \phi = 0, \quad \phi(0) = 0, \quad \phi(1) = 1 \quad (2.43)$$

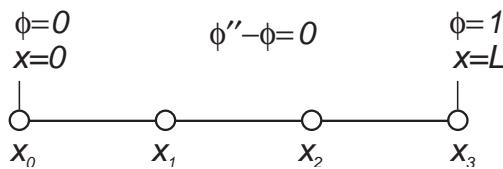


Figura 2.2: Problema unidimensional con condiciones de contorno Dirichlet en ambos extremos

Usaremos $\Delta x = \frac{1}{3}$ (ver Figura 2.2). Tenemos 4 valores nodales ϕ_0, ϕ_1, ϕ_2 y ϕ_3 , de los cuales ϕ_0 y ϕ_3 son conocidos de las condiciones de contorno y sólo restan dos incógnitas ϕ_1 y ϕ_2 . La ecuación en los nodos interiores es:

$$\phi_{l+1} - 2\phi_l + \phi_{l-1} - \Delta x^2 \phi_l = 0 \quad (2.44)$$

para $l = 1$:

$$\phi_2 - 2\phi_1 + \phi_0 - \Delta x^2 \phi_1 = 0 \quad (2.45)$$

pero $\phi_0 = 0$ por la condición de contorno, de manera que la ecuación resultante es:

$$\phi_2 - \frac{19}{9}\phi_1 = 0 \quad (2.46)$$

Para $l = 2$ la ecuación resultante es:

$$-\frac{19}{9}\phi_2 + \phi_1 = -1 \quad (2.47)$$

Resolviendo el sistema (2.46 y 2.47) obtenemos:

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \frac{1}{(\frac{19}{9})^2 - 1} = 0,2893\dots \\ \phi_2 &= \frac{19}{9}\phi_1 = 0,6107\dots \end{aligned} \quad (2.48)$$

La solución exacta a este problema puede ser encontrada fácilmente. Proponiendo soluciones de la forma $e^{-\alpha x}$, se obtiene la ecuación característica $\alpha^2 = 1$ de donde $\alpha = \pm 1$. Proponemos entonces soluciones de la forma $\phi = ae^x + be^{-x}$, donde a y b se obtienen de imponer las condiciones de contorno, y resulta ser:

$$\phi = \frac{\sinh(x)}{\sinh(1)} \quad (2.49)$$

Los resultados numéricos y exactos son comparados en la Tabla 2, se incluyen también los resultados obtenidos para $\Delta x = \frac{1}{6}$:

x	Exacta		$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
	ϕ	ϕ	Error	ϕ	Error	
1/3.	0.28892	0.28929	3.6×10^{-4} (0.12 %)	0.28901	9.2×10^{-5} (0.032 %)	
2/3	0.61024	0.61071	4.7×10^{-4} (0.077 %)	0.61036	1.2×10^{-4} (0.019 %)	

Tabla 2: Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi(1) = 1$, para $\Delta x = \frac{1}{3}$ y $\frac{1}{6}$

Nótese que tanto en $x = \frac{1}{3}$ como en $x = \frac{2}{3}$ el error ha bajado en un factor $\frac{1}{4}$ al reducir el paso de la malla en un factor $\frac{1}{2}$. Primero vemos que, cualitativamente, el esquema de discretización es *convergente*, es decir el error, en alguna norma predeterminada, se reduce, al reducir el paso de la malla. Cuantitativamente, podemos decir que el error tiene un comportamiento $\propto \Delta x^2$. También se dice que el “orden de convergencia” es $\propto h^2$, donde h representa el paso de la malla (Δx en nuestro caso). Esto es consistente con el error de truncamiento que encontramos en el desarrollo de Taylor usado.

2.3.9. Análisis de Error. Teorema de Lax

Si denotamos por ϕ_{ex} los valores nodales de la solución exacta, es decir

$$\phi_{ex,i} = \phi(x_i) \quad (2.50)$$

entonces ϕ_{ex} satisface (2.29) pero con un error de truncamiento, es decir

$$k \frac{\phi_{ex,l+1} - 2\phi_{ex,l} + \phi_{ex,l-1}}{\Delta x^2} = -Q_l - E_{trunc,l} \quad (2.51)$$

donde $E_{trunc,l}$ es el error correspondiente a la ecuación l -ésima. Sabemos que el error de truncamiento es

$$|E_{trunc,l}| \leq k \frac{\Delta x^2}{12} \max_{[x_{l-1}, x_{l+1}]} \left| \frac{d^4 \phi}{dx^4} \right| \leq C \Delta x^2 \quad (2.52)$$

Expresado en forma matricial, quedará de la siguiente manera:

$$\mathbf{K} \phi_{ex} = \mathbf{f} + \mathbf{E}_{trunc} \quad (2.53)$$

Restando (2.39) de (2.53) obtenemos una ecuación para el error $\mathbf{E}_\phi = \phi - \phi_{ex}$ en los valores nodales

$$\mathbf{K} \mathbf{E}_\phi = -\mathbf{E}_{trunc} \quad (2.54)$$

y entonces,

$$\mathbf{E}_\phi = -\mathbf{K}^{-1} \mathbf{E}_{trunc} \quad (2.55)$$

Al hecho de que el error de truncamiento $E_{trunc,i} \rightarrow 0$ para $\Delta x \rightarrow 0$ lo llamamos “consistencia” del método. Queremos saber bajo qué condiciones, el esquema es “convergente”, es decir $\|\mathbf{E}_\phi\| \rightarrow 0$ para $\Delta x \rightarrow 0$. Por lo que vemos, esto está relacionado con alguna propiedad de \mathbf{K} , es decir que de alguna forma la inversa de \mathbf{K} “se mantenga acotada”, para $\Delta x \rightarrow 0$.

Tomando normas

$$\|\mathbf{E}_\phi\| \leq \|\mathbf{K}^{-1}\| \|\mathbf{E}_{trunc}\| \quad (2.56)$$

Recordemos que la norma (Euclídea) de un vector está definida como:

$$\|\mathbf{v}\|^2 = \sum_{i=1}^{L-1} v_i^2 \quad (2.57)$$

y la norma de una matriz está definida como el máximo autovalor de la misma. Puede verse entonces que $\|\mathbf{K}^{-1}\|$ es la inversa del mínimo autovalor de \mathbf{K} , y usando (2.16)

$$\sqrt{\sum (\phi_{ex,i} - \phi_i)^2} \leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{\sum E_{trunc,i}^2} \quad (2.58)$$

$$\leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{L-1} C \Delta x^2 \quad (2.59)$$

de manera que

$$\sqrt{\frac{1}{L-1} \sum_{i=1}^{L-1} (\phi_{ex,i} - \phi_i)^2} \leq \frac{1}{\lambda_{min}} \sqrt{\sum E_{trunc,i}^2} \quad (2.60)$$

$$\leq \frac{1}{\lambda_{min}} C \Delta x^2 \quad (2.61)$$

El miembro izquierdo de esta ecuación representa el “error cuadrático medio” de la solución numérica. Esta expresión nos dice que este error es del mismo orden que el error de truncamiento, con la condición de que λ_{min} se mantenga acotado (es decir, que no tienda a cero) cuando Δx tiende a cero. Si se cumple esta condición decimos que la discretización es “estable”. Entonces, la condición para la convergencia es

$$\text{Consistencia} + \text{Estabilidad} \implies \text{Convergencia} \quad (2.62)$$

Este resultado es conocido como *Teorema de Lax* y es la base del análisis de error para el método de Diferencias Finitas.

2.3.10. Condiciones de contorno tipo Neumann (“flujo impuesto”)

El problema a resolver es:

$$k \frac{d^2 \phi}{dx^2} = -Q(x), \quad (2.63)$$

$$\phi(0) = 0 \quad (2.64)$$

$$k \frac{d\phi}{dx} \Big|_{L_x} = \bar{q} \quad (2.65)$$

Ahora ϕ_L pasa a ser una incógnita más:

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{L-1} \\ \phi_L \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^L \quad (2.66)$$

Para determinar esta incógnitas tenemos $L - 1$ ecuaciones que provienen de aproximar el operador diferencial por diferencias finitas de segundo orden en puntos interiores como en la ecuación (2.29). Para dar cuenta de la condición de contorno tipo Neumann en L_x agregamos la siguiente aproximación:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_L \approx \frac{\phi_L - \phi_{L-1}}{\Delta x} = \frac{\bar{q}}{k} \quad (2.67)$$

Ahora sí, tenemos L ecuaciones en L incógnitas. Volviendo al ejemplo anterior del problema (2.43), pero ahora con condición de tipo Neumann en $x = 1$: $\phi'(1) = 1$ el sistema resultante es:

$$\begin{aligned} -\phi_2 + \frac{19}{9}\phi_1 &= 0 \\ -\phi_3 + \frac{19}{9}\phi_2 - \phi_1 &= 0 \\ \phi_3 - \phi_2 &= 3 \end{aligned} \quad (2.68)$$

Resolviendo el sistema, se encuentran los valores discretos que pueden observarse en la Tabla 3. (se incluyen también los resultados obtenidos para $\Delta x = 1/6$):

	Exacta	$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
		ϕ	Error	ϕ	Error
1/3	0.2200	0.2477	0.0277 (12 %)	0.2340	0.0140 (6 %)
2/3	0.4648	0.5229	0.0582 (12 %)	0.4942	0.0294 (6 %)
1	0.7616	0.8563	0.0947 (12 %)	0.8097	0.0481 (6 %)

Tabla 3: : Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$, para $\Delta x = \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$

La solución exacta puede obtenerse de la misma forma que en el caso Dirichlet y resulta ser:

$$\phi(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(1)} \quad (2.69)$$

Notamos que los errores resultan ser notablemente mayores que en el caso Dirichlet puro, concretamente son dos órdenes de magnitud mayores. Un indicio de la causa del problema la da el hecho de que, al reducir el paso de la malla a la mitad, el error no ha bajado en un factor 1/4 como antes, sino que apenas ha bajado un factor 1/2, exhibiendo una convergencia $\propto \Delta x$. La causa es que hemos usado una expansión orden $O(\Delta x)$ para la condición de Neumann, ecuación (2.67), si bien la expansión en los nodos interiores es $O(\Delta x^2)$. Podemos deducir una regla muy importante que es que *"el orden de convergencia está dictado por el más bajo orden de las expansiones utilizadas, tanto para el interior del dominio como para las condiciones de contorno"*.

En consecuencia, si queremos recuperar el orden de convergencia $\propto \Delta x^2$, necesariamente debemos desarrollar una aproximación $O(\Delta x^2)$ para la condición tipo Neumann. Una forma de hacer esto es

introduciendo un “*nodo ficticio*” (ver Figura 2.3) x_{L+1} y aproximando la condición de contorno como:

$$\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_L \approx \frac{\phi_{L+1} - \phi_{L-1}}{2\Delta x} = \frac{\bar{q}}{k} \quad (2.70)$$

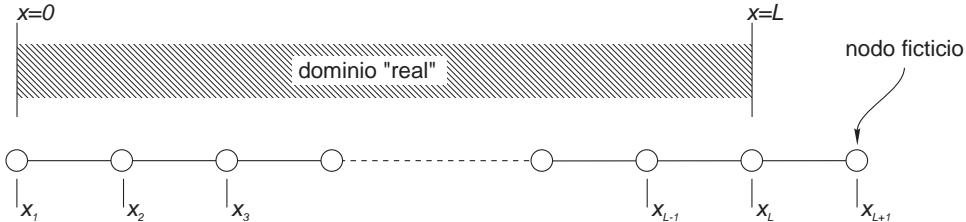


Figura 2.3: Inclusión de un nodo ficticio para obtener una discretización más precisa de la condición de contorno tipo Neumann.

Para resolver el problema con esta condición de contorno, hemos introducido una incógnita más: ϕ_{L+1} , de manera que agregamos la ecuación para nodos interiores en el nodo de contorno L :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} \approx \frac{\phi_{L+1} - 2\phi_L + \phi_{L-1}}{\Delta x^2} = -\frac{Q_L}{k} \quad (2.71)$$

El sistema es:

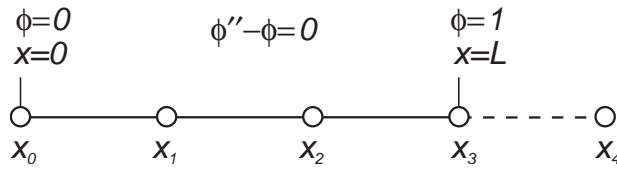
$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{f} \quad (2.72)$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.73)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \bar{\phi}_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_L/k \\ 2\bar{q}\Delta x/k \end{bmatrix} \quad (2.74)$$

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_L \\ \phi_{L+1} \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^{L+1} \quad (2.75)$$

Volviendo al ejemplo de la ecuación $\phi'' - \phi = 0$ con condiciones $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$ y discretizado con $\Delta x = 1/3$ (ver Figura 2.4), los resultados con este nuevo método pueden observarse en la Tabla 4.

Figura 2.4: Malla 1D con $\Delta x = 1/3$ y un nodo ficticio.

	Exacta	$\Delta x = 1/3$		$\Delta x = 1/6$	
		x	ϕ	ϕ	Error
1/3	0.2200	0.2168	0.0033 (1.5 %)	0.2192	0.0008 (0.4 %)
2/3	0.4648	0.4576	0.0071 (1.5 %)	0.4629	0.0018 (0.4 %)
1	0.7616	0.7493	0.0123 (1.6 %)	0.7585	0.0031 (0.4 %)

Tabla 4: *Errores para $\phi'' - \phi = 0$, $\phi(0) = 0$, $\phi'(1) = 1$, para $\Delta x = 1/3, 1/6$, con esquema $O(\Delta x^2)$*

El error es ahora un orden de magnitud menor y se recupera la convergencia cuadrática. Sin embargo el sistema ha dejado de ser simétrico. Para recuperar la simetría de la matriz del sistema, podemos obtener una ecuación para ϕ_L y ϕ_{L-1} , eliminando ϕ_{L+1} de las dos últimas ecuaciones:

$$\phi_L - \phi_{L-1} = \frac{\Delta x^2 Q_L}{2k} + \frac{\bar{q}\Delta x}{k} \quad (2.76)$$

Nótese que esta ecuación es la misma que la (2.69) pero con el agregado del término $\Delta x^2 Q_L/2k$ en el miembro derecho. De hecho, esta misma ecuación puede obtenerse planteando un balance de energía en el intervalo $[L - 1/2, L]\Delta x$. El sistema total es:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.77)$$

$$\mathbf{f} = \begin{bmatrix} \Delta x^2 Q_1/k + \phi_0 \\ \Delta x^2 Q_2/k \\ \vdots \\ \Delta x^2 Q_L/2k + \bar{q}\Delta x/k \end{bmatrix}, \quad (2.78)$$

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_L \end{bmatrix}, \quad \phi \in \mathbf{R}^L \quad (2.79)$$

2.3.11. Problemas No-Lineales

Consideremos el siguiente problema uni-dimensional, no-lineal debido a la dependencia de la conductividad k con la temperatura:

$$\frac{d}{dx} \left[k(\phi) \frac{d\phi}{dx} \right] = -Q(x) \quad (2.80)$$

Hasta ahora nosotros buscábamos encontrar la solución $\phi(x)$ teniendo todos los parámetros del problema conocidos, ya sea como constantes o como variables con la posición y/o con el tiempo. La idea detrás de todo esto es que si el problema es lineal y su solución es $\bar{\phi}$, la solución $\bar{\phi} + C$ también satisface la misma ecuación diferencial, cosa que no ocurre si cualquier parámetro del problema depende de la propia solución, porque el cambio de la solución hace cambiar el problema a través de sus parámetros. Es decir, si el problema es lineal entonces

$$\bar{\phi} \text{ es solución del problema} \iff \bar{\phi} + C \text{ es solución del problema}$$

Esto quiere decir que si un problema tiene parámetros que dependen de la propia solución estos problemas son de naturaleza no lineal. Para ellos se debe partir de una solución estimada del problema e iterar hasta lograr que la solución satisfaga la ecuación diferencial planteada. Esto nos lleva a varias propuestas de metodologías que analizaremos a continuación.

Antes de continuar con la metodología mencionaremos algunos problemas de la mecánica del continuo que presentan no-linealidad:

- *Material hiperelástico*: $E = E(\epsilon)$, $G = G(\epsilon)$, coeficientes elásticos dependientes de las deformaciones
- *Flujo potencial subsónico (compresible)*: $\nabla \cdot [\rho(|\nabla\phi|)\nabla\phi] = 0$, donde ϕ es el potencial $\mathbf{v} = \nabla\phi$, \mathbf{v} =velocidad, ρ =densidad. Aquí ρ juega el papel de la conductividad en el problema térmico. En contraste con áquel, ρ depende de las derivadas de ϕ , y no del valor de ϕ .
- *Ecuación de Burgers*: $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$,

En nuestro caso escalar, la regla es diferenciar en forma *conservativa*. Llamando ψ al flujo:

$$\psi = k(\phi) \frac{d\phi}{dx} \quad (2.81)$$

La ecuación de balance para el nodo l , puede ser escrita a segundo orden como:

$$\frac{\psi_{l+1/2} - \psi_{l-1/2}}{\Delta x} = -Q_l \quad (2.82)$$

donde $\psi_{l+1/2}$ indica el valor de ψ en nodos ubicados en el punto medio entre los nodos reales: $x_{l+1/2} = (x_l + x_{l+1})/2$. Una aproximación de segundo orden para los flujos es:

$$\begin{aligned} \psi_{l+1/2} &= k(\phi_{l+1/2}) \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{l+1/2} \\ &= k(\phi_{l+1/2}) \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \\ &= k\left(\frac{[\phi_l + \phi_{l+1}]}{2}\right) \frac{\phi_{l+1} - \phi_l}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \end{aligned} \quad (2.83)$$

La ecuación resultante para nodos interiores es:

$$\begin{aligned} -k(\phi_{l+1/2})\phi_{l+1} + [k(\phi_{l+1/2}) + k(\phi_{l-1/2})]\phi_l - k(\phi_{l-1/2})\phi_{l-1} &= \Delta x^2 Q_l, \\ l &= 1, 2, \dots, L-1 \end{aligned} \quad (2.84)$$

Sumando sobre las ecuaciones sobre l

$$\begin{array}{cccccccccc} \dots & \dots \\ -\psi_{l-5/2} & +\psi_{l-3/2} & & & & & & = \Delta x^2 Q_{l-2} \\ -\psi_{l-3/2} & +\psi_{l-1/2} & & & & & & = \Delta x^2 Q_{l-1} \\ -\psi_{l-1/2} & +\psi_{l+1/2} & & & & & & = \Delta x^2 Q_l \\ -\psi_{l+1/2} & +\psi_{l+3/2} & & & & & & = \Delta x^2 Q_{l+1} \\ -\psi_{l+3/2} & +\psi_{l+5/2} & & & & & & = \Delta x^2 Q_{l+2} \\ \dots & \dots \end{array} \quad (2.85)$$

obtenemos un *principio de conservación discreta*:

$$\psi_{L-1/2} - \psi_1/2 = -\Delta x(Q_1 + Q_2 + \dots + Q_{L-1}) \quad (2.86)$$

de allí viene el nombre de “*esquema conservativo*”, ya que reproduce el balance de energía que satisface la ecuación del continuo (ver Figura 2.5):

$$\int_{x=\Delta x/2}^{L_x-\Delta x/2} Q(x) dx = - \int_{x=0}^{L_x} \frac{d}{dx} \left(k(x) \frac{d\phi}{dx} \right) dx = \bar{q}_0 + \bar{q}_{L_x} \quad (2.87)$$

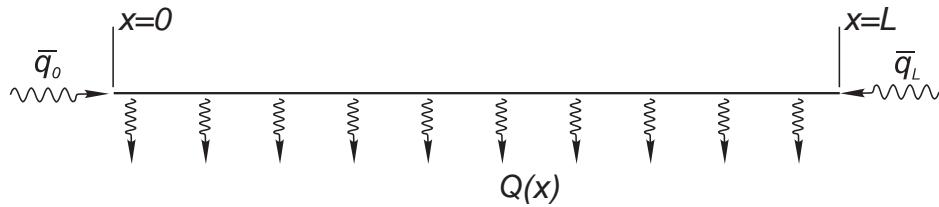


Figura 2.5: Balance global de calor para el problema unidimensional.

Esto es muy importante en problemas donde puede llegarse a esperar variaciones abruptas de las variables en intervalos muy pequeños, como es el caso de las *ondas de choque* (“shock waves”) en fluidos compresibles.

El sistema de ecuaciones es ahora no-lineal:

$$\mathbf{K}(\phi)\phi = \mathbf{f} \quad (2.88)$$

y no puede resolverse, en general, en forma cerrada, pero puede resolverse en forma aproximada generando una sucesión de valores $\phi^0, \phi^1, \dots, \phi^n, \dots$ de tal forma que converja a la solución exacta del sistema (2.88):

$$\phi^n \rightarrow \phi, \quad \text{para } n \rightarrow \infty \quad (2.89)$$

Una forma apropiada de generar estas sucesiones es llevando el sistema anterior a una forma de “*punto fijo*”:

$$\phi = \mathbf{O}(\phi) \quad (2.90)$$

donde \mathbf{O} es un mapeo de \mathbf{R}^{L-1} en sí mismo, fácilmente evaluable. Además, debe elegirse un vector de inicialización ϕ^0 y la secuencia se genera recursivamente como:

$$\phi^{n+1} = \mathbf{O}(\phi^n) \quad (2.91)$$

En la práctica, esta forma de recurrencia es ejecutada un número finito de iteraciones N , de tal manera que ϕ^N esté suficientemente cerca de ϕ . Obviamente, como no conocemos ϕ , el criterio para detener el proceso iterativo, no puede basarse en una evaluación directa de $\|\phi^N - \phi\|$. Aquí, $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n v_i^2}$ es la norma L_2 del vector. Una posibilidad es analizar la diferencia entre dos iteraciones consecutivas de la sucesión:

$$\|\phi^{N+1} - \phi^N\| < \epsilon \quad (2.92)$$

donde ϵ es la “tolerancia” deseada. Este criterio puede hacerse adimensional poniendo:

$$\frac{\|\phi^{N+1} - \phi^N\|}{\|\phi^0\|} < \epsilon \quad (2.93)$$

Este criterio puede ser engañoso, por ejemplo, si la sucesión está convergiendo muy lentamente. Un criterio más robusto se basa en el *residuo* del sistema de ecuaciones:

$$\frac{\|\mathbf{R}(\phi^N)\|}{\|\mathbf{f}\|} < \epsilon \quad (2.94)$$

donde el residuo \mathbf{R} se define como:

$$\mathbf{R}(\phi^j) = \mathbf{K}(\phi^j)\phi^j - \mathbf{f} \quad (2.95)$$

y el factor $\|\mathbf{f}\|$ en el denominador ha sido agregado para hacer el criterio adimensional.

El valor de la tolerancia ϵ , en ambos casos, depende de múltiples factores:

- Obviamente, cuanto menor sea la tolerancia mayor es el costo computacional. La mayoría de los métodos exhiben *convergencia lineal*, de manera que veremos que el costo computacional es proporcional a $\log \epsilon$.
- Debido a errores de redondeo, es de esperarse que, ambos criterios no puedan bajar más allá de un cierto valor ϵ_{mach} . Con esto queremos decir que $\|\mathbf{R}(\phi^n)\| > \epsilon_{mach}$ para $n \rightarrow \infty$, en vez de tender a cero, como sería en una máquina de precisión infinita. Para problemas bien condicionados, y si el criterio ha sido convenientemente adimensionalizado la precisión de la máquina está en $\epsilon_{mach} = 10^{-13}$, $\epsilon_{mach} = 10^{-16}$, si todos los cálculos se hacen en doble precisión. Si los cálculos se hacen en simple precisión entonces la precisión cae a: $\epsilon_{mach} = 10^{-6}$, $\epsilon_{mach} = 10^{-8}$.
- Debe recordarse siempre que ϕ (la solución exacta al problema discreto) posee un error debido a la discretización. Llamando ϕ^* a los valores nodales de la solución del continuo, tenemos que:

$$(\phi^N - \phi^*) = (\phi^N - \phi) + (\phi - \phi^*) \quad (2.96)$$

El error que interesa es el miembro izquierdo de esta desigualdad, es decir, el error con respecto a la solución del continuo. El primer término del miembro derecho es el *error en la resolución del sistema no-lineal*, mientras que el segundo es el *error de discretización*. A medida que se itera, el error de resolución se va reduciendo, hasta anularse, en el límite:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|\phi^N - \phi^*\| = \|\phi - \phi^*\| \quad (2.97)$$

Este expresión quiere decir que, por más que se itere, el error con respecto a la solución exacta no va a bajar del error propio de discretización. De poder estimarse, el error de discretización, puede fijarse la tolerancia en una fracción (digamos $\frac{1}{10}$) del error de discretización. Poner una tolerancia más baja, aumenta el costo sin mejorar notablemente la solución.

2.3.11.1. Método secante

Una forma simple de poner el sistema de ecuaciones (2.92) en forma de punto fijo es reescribirla de la siguiente forma

$$\phi = \mathbf{O}(\phi) = \mathbf{K}(\phi)^{-1}\mathbf{f}. \quad (2.98)$$

Notar que el miembro derecho $\mathbf{O}(\phi)$ es *computable* es decir que se puede calcular fácilmente dado el vector ϕ .

El esquema de iteración puede entonces ponerse simplemente como:

$$\phi^{j+1} = \mathbf{K}(\phi^j)^{-1}\mathbf{f} \quad (2.99)$$

La implementación es muy simple. En la Figura 2.6 vemos el esquema aplicado a la resolución de una ecuación unidimensional $k(\phi)\phi = f$, con $k(\phi) = \phi^m$, $m = -0,7$ y $f = 1$. Nótese que el esquema puede ser también puesto de la forma:

$$\phi^{j+1} = \frac{\phi^j}{k(\phi^j)\phi^j} f = \frac{f}{s^j} \quad (2.100)$$

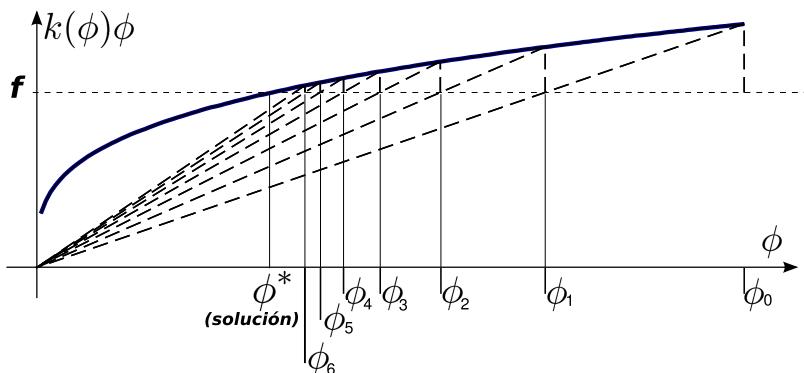


Figura 2.6: El esquema de punto fijo (2.99) aplicado a un problema unidimensional con $k(\phi) = \phi^{-0,7}$.

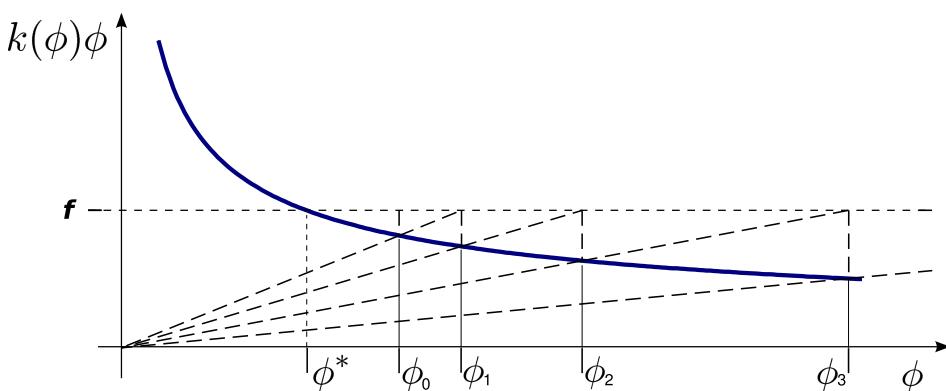


Figura 2.7: Idem, para $k(\phi) = \phi^{-1,5}$.

Dado el valor de ϕ^j , se puede obtener una pendiente aproximada entre el punto $P_j = (\phi^j, k(\phi^j)\phi^j)$ y el origen O . La intersección de esta recta con $y = f$ marca el nuevo punto ϕ^{j+1} . El esquema es convergente si $k(\phi)\phi$ es monótona creciente. En caso contrario es divergente (ver Figura 2.7, para el caso $m = -1,5$). Esta condición se cumple en muchos casos físicos, ya que está asociado a una *condición de estabilidad* del sistema. Pensemos por ejemplo en un resorte no-lineal, para el cual k es la constante del resorte, ϕ la elongación y f la fuerza aplicada. Entonces $k(\phi)\phi$ creciente quiere decir: *a mayor elongación, mayor fuerza*, lo cual coincide con el criterio de estabilidad. Sin embargo, la convergencia puede ser muy lenta, como por ejemplo en la Figura 2.8, que corresponde a $m = -0,9$, $f = 1$, $\phi_0 = 3$.

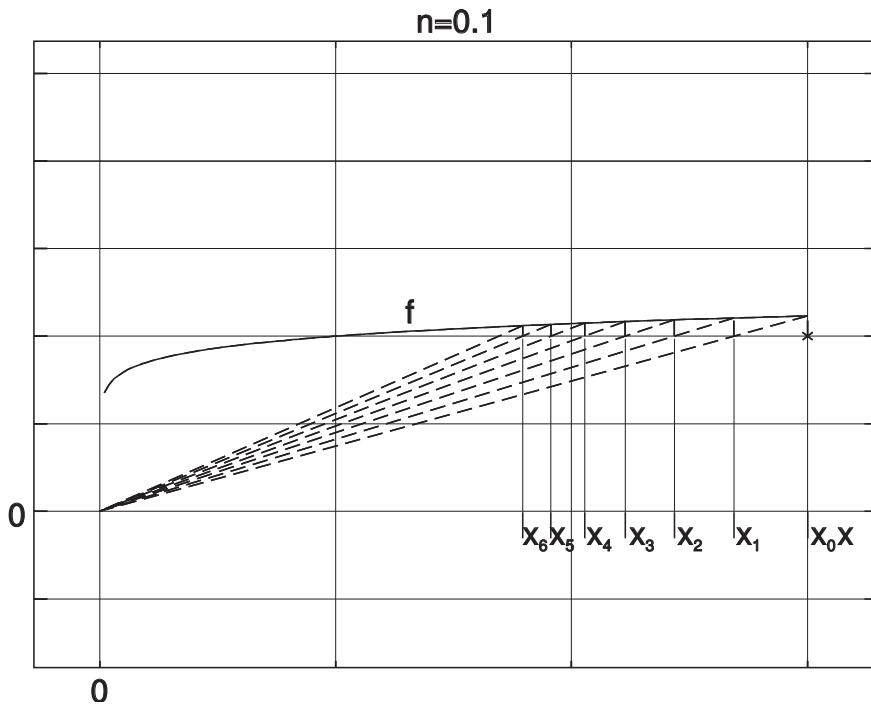


Figura 2.8: Idem, para $k(\phi) = \phi^{-0.9}$.

2.3.11.2. Análisis de convergencia del método secante

Consideremos por simplicidad un problema de un sólo grado de libertad:

$$\phi^{j+1} = O(\phi^j) \quad (2.101)$$

Supongamos que ϕ^j está suficientemente cerca de la solución ϕ , de manera que podemos hacer un desarrollo de Taylor alrededor de ϕ :

$$\phi^{j+1} = O(\phi) + O'(\phi^j - \phi) + (1/2)O''(\phi^j - \phi)^2 \quad (2.102)$$

pero ϕ es un punto fijo de O , de manera que $O(\phi) = \phi$. Reemplazando en (2.101):

$$\phi^{j+1} - \phi = O'(\phi^j - \phi) + (1/2)O''(\phi^j - \phi)^2 \quad (2.103)$$

Si $|O'| < 1$ entonces ϕ^{j+1} estará todavía más cerca de la solución y podremos despreciar el término cuadrático para todo los j .

$$|\phi^{j+1} - \phi| \leq C|\phi^j - \phi| \quad (2.104)$$

con $C = |O'|$. A este tipo de convergencia se le llama, “convergencia lineal”. Usando en forma recursiva esta relación:

$$|\phi^j - \phi| \leq C|\phi^{j-1} - \phi| \leq C^2|\phi^{j-2} - \phi| \leq \dots \leq C^j|\phi^0 - \phi| \quad (2.105)$$

Además, podemos poner:

$$R(\phi^j) \approx R(\phi) + R'(\phi^j - \phi) = R'(\phi^j - \phi) \quad (2.106)$$

De manera que (2.105) puede ponerse como:

$$|R(\phi^j)| \leq C^j|R(\phi^0)| \quad (2.107)$$

Es común graficar $\log |R|$ en función de j :

$$\log \left| \frac{R(\phi^j)}{R(\phi^0)} \right| \leq j \log C \quad (2.108)$$

De manera que, asintóticamente, es una recta de pendiente $\log C$. Cuanto más pequeño es C , más empinada es la pendiente y se llega a una dada precisión con menos iteraciones.

2.3.11.3. Método tangente

Dada una solución aproximada ϕ , el objetivo es encontrar la solución ϕ' tal que $\mathbf{R}(\phi') = 0$. La idea es hacer un desarrollo en serie de esta ecuación alrededor de ϕ , es decir

$$0 = \mathbf{R}(\phi') \approx \mathbf{R}(\phi) + \mathbf{J}(\phi' - \phi), \quad (2.109)$$

donde $\mathbf{J} = \mathbf{R}' = \frac{d\mathbf{R}}{d\phi}$ se define como el Jacobiano del sistema de ecuaciones. De aquí podemos obtener un esquema de punto fijo

$$\phi' = \mathbf{O}(\phi) = \phi - \mathbf{J}^{-1}\mathbf{R}(\phi). \quad (2.110)$$

Ahora analizaremos la convergencia del esquema en el caso escalar (dimensión unitaria), considerando un $J(\phi)$ genérico, no necesariamente el Jacobiano; posteriormente veremos que si J es el Jacobiano entonces la convergencia es mucho mejor (cuadrática). La constante C en (2.104), que equivale al módulo de la derivada de O dada por la (2.110) es, en este caso:

$$\begin{aligned} C &= \left| \frac{d}{d\phi} \left\{ \phi - \frac{k(\phi)\phi - f}{J(\phi)} \right\} \right| \\ &= \left| 1 - \frac{R'J - RJ'}{J^2} \right| \end{aligned} \quad (2.111)$$

En ϕ vale que $R(\phi) = 0$, de manera que:

$$C = \left| 1 - \frac{R'}{J} \right| \quad (2.112)$$

Si J se parece mucho a R' entonces C es muy pequeño y la tasa de convergencia es muy alta. El caso óptimo es poner $J = R'$, en cuyo caso la convergencia deja de ser lineal y pasa a ser “cuadrática”:

$$|\phi^{j+1} - \phi| \leq C|\phi^j - \phi|^2 \quad (2.113)$$

Esta estrategia es el “método de Newton” o “tangente”. Cuando $J \neq R'$ entonces decimos que es un método “secante”, si bien por supuesto se debe tratar que J se parezca lo más posible a R' , ($J \approx R'$). La estimación correspondiente para residuos es:

$$R(\phi^{j+1}) \leq CR(\phi^j)^2 \quad (2.114)$$

Usando esta estimación en forma recursiva:

$$R(\phi^n) \leq CR(\phi^{n-1})^2 \quad (2.115)$$

$$\leq C^{1+2}R(\phi^{n-2})^4 \quad (2.116)$$

$$\leq C^{1+2+4}R(\phi^{n-2})^{2^3} \quad (2.117)$$

$$\leq C^{1+2+4+\dots+2^{n-1}}R(\phi^0)^{2^n} \quad (2.118)$$

$$= C^{2^n-1}R(\phi^0)^{2^n} \quad (2.119)$$

$$= \frac{1}{C} [CR(\phi^0)]^{2^n} \quad (2.120)$$

$$= \frac{1}{C} [CR(\phi^0)]^{2^n} \quad (2.121)$$

$$\log R(\phi^n) \leq -\log C - 2^n \log (CR(\phi^0)) \quad (2.122)$$

Esto es una exponencial cuando se grafica como $\log R$ en función de j (ver Figura 2.9).

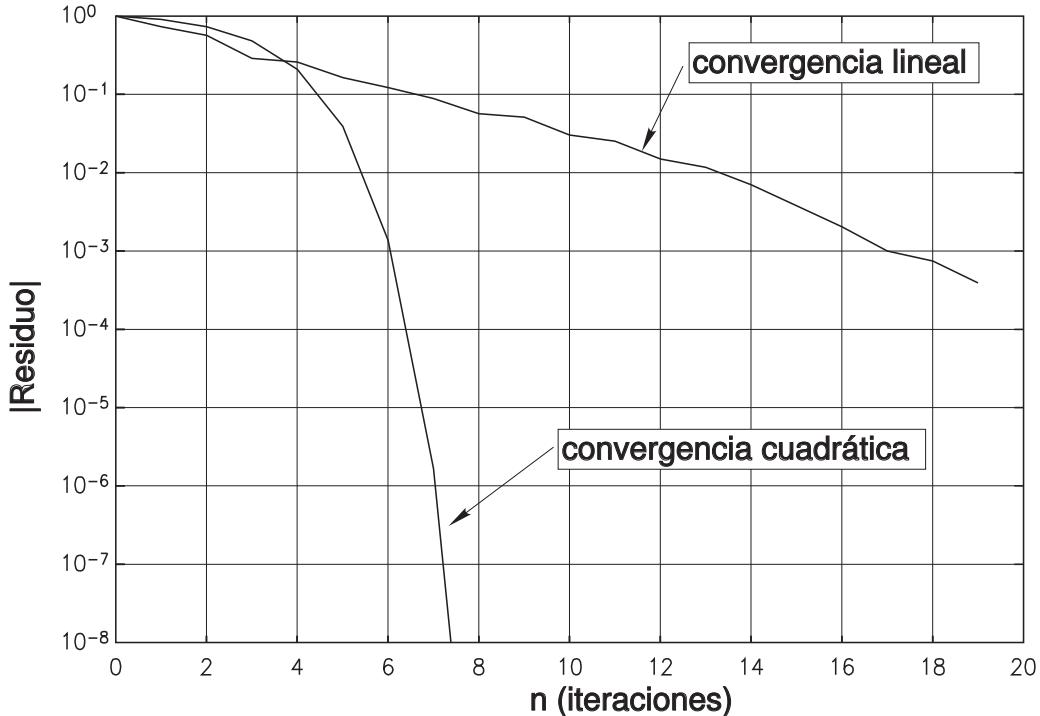


Figura 2.9: Tipos de convergencia lineal y cuadrático.

2.3.11.4. Misceláneas

Para finalizar esta sección vamos a mostrar que el método tangente también puede aplicarse a un caso lineal, con la salvedad que en estos casos no hace falta iterar ya que la solución obtenida después de la primera iteración es la solución buscada.

Para ello tomemos una ecuación lineal, como la que solemos tomar de referencia, el transporte de un escalar pasivo ϕ ,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi + c\phi = \nabla \cdot (k\nabla \phi) + Q \quad (2.123)$$

Para contextualizar el método de la tangente definimos el residuo como:

$$\mathcal{R}(\phi) = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \phi + c\phi - \nabla \cdot (k\nabla \phi) - Q \quad (2.124)$$

y por el hecho de asumir que la ecuación es lineal ninguno de los parámetros depende de la solución buscada ϕ .

Para comprender mejor el carácter de la anterior definición imaginemos que en el discreto la solución buscada ϕ es un vector ϕ y por ende el residuo también será un vector. Esto significa que en forma indicial vamos a escribir ambos vectores con un subíndice que refiere a su componente en el vector, es decir ϕ_j sería la variable dependiente $\phi(x_j)$ y el residuo \mathcal{R}_i es el vector residuo obtenido para la ecuación correspondiente al nodo i . Entonces, si nosotros derivamos el vector residuo respecto a la incógnita obtendríamos una matriz definida como:

$$J_{ij} = \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_j} \quad (2.125)$$

cuyo coeficiente refiere a una fila del sistema de ecuaciones relacionada con la ecuación correspondiente al nodo i y cuya columna refiere a la incógnita ϕ_j .

Si como en el método tangente nosotros partimos de una solución denominada semilla ϕ_0 cuyo residuo no es nulo, es decir,

$$\mathcal{R}(\phi_0) \neq 0$$

y buscamos incrementarla de forma tal de anular el residuo, es decir

$$\mathcal{R}(\phi_0 + \Delta\phi) = 0$$

usando la 2.109 con una solución semilla inicial nula , es decir,

$$\phi_0 = \mathbf{0}$$

esto implica que

$$\mathcal{R}(\phi_0) = \mathbf{0} - \mathbf{Q} = -\mathbf{Q} \quad (2.126)$$

entonces la Eq. 2.109 queda como

$$0 = \mathbf{R}(\Delta\phi) = -\mathbf{Q} + \mathbf{J}(\Delta\phi), \quad (2.127)$$

donde el signo aproximado en 2.109 aquí deviene en una igualdad porque la derivada segunda del residuo respecto a la incógnita es nula por la hipótesis de linealidad, es decir, en 2.102, la derivada líder del error del desarrollo en serie, la derivada segunda, es nula, es decir

$$\frac{\partial J}{\partial \phi} = \frac{\partial}{\partial \phi} \underbrace{\left(\frac{\partial \mathcal{R}}{\partial \phi} \right)}_{=cte} \quad (2.128)$$

A partir de la Eq. 2.127 vemos que si $\Delta\phi = \phi$ dado que partimos de una semilla nula, entonces el sistema a resolver es:

$$\mathbf{J}\Delta\phi = \mathbf{Q} \quad (2.129)$$

que corresponde al mismo sistema a resolver que en 2.88 con la única salvedad que

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{K}$$

Conclusión: la matriz tangente equivale a la derivada del residuo respecto a la incógnita. En el caso lineal es una constante y en el caso no lineal es variable, siendo $\mathbf{K}(\phi)$

La interpretación gráfica de esto es la siguiente: Antes que nada en la abscisa del gráfico se muestra la solución ϕ que en este caso se ha denominado u y en ordenadas el residuo. Supondremos por simplicidad que vamos a trabajar con una sola ecuación, la extensión a sistemas con muchas incógnitas

hereda todo lo que se va a decir y por supuesto agrega algo más de complejidad, en particular, la interpretación gráfica se complica muchísimo.

Mientras que en un caso no lineal como el de la figura la búsqueda requiere de un proceso iterativo de allí muestra como la solución inicial $u_0 = 0$ genera un residuo inicial $r_0 \gg 0$, y que genera una pendiente dada por la recta $(0, r_0) - (u_1, 0)$ que produce una actualización de la incógnita de $u_0 \rightarrow u_1$, la cual produce un residuo $r_1 < r_0$ pero aún no nulo, el cual a su vez produce una nueva tangente ahora definida por la recta $(u_1, r_1) - (u_2, 0)$, lo cual muestra que esa pendiente va cambiando, esto hace pensar que como esa única pendiente representa en algún sentido la matriz del sistema a resolver, por la no linealidad queda de manifiesto que a medida que vamos convergiendo la matriz va cambiando y debe re-computarse. Este proceso, simple porque hay una sola incógnita, muestra que conforme la solución se acerca a la deseada (marcada con un punto azul), el residuo se va achicando.

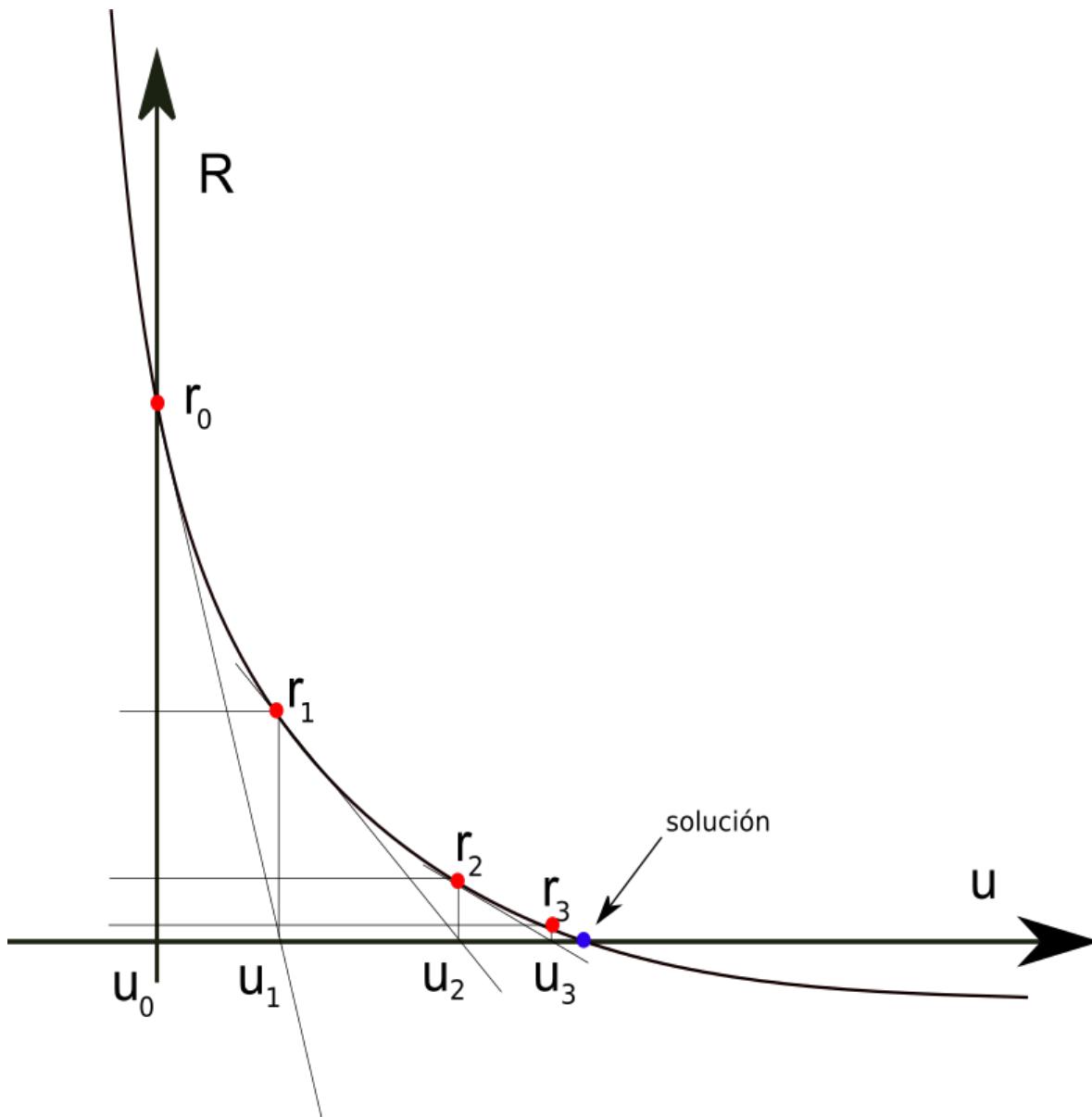


Figura 2.10: proceso de convergencia no lineal con un método tangente

Este comportamiento simple, obviamente se puede complicar aún en el caso de una sola incógnita. La siguiente figura muestra un caso donde el proceso no es convergente a la solución buscada y debe o bien partir de una semilla mejor elegida o buscar algún algoritmo de búsqueda de raíces mejor

adaptado a estos casos.

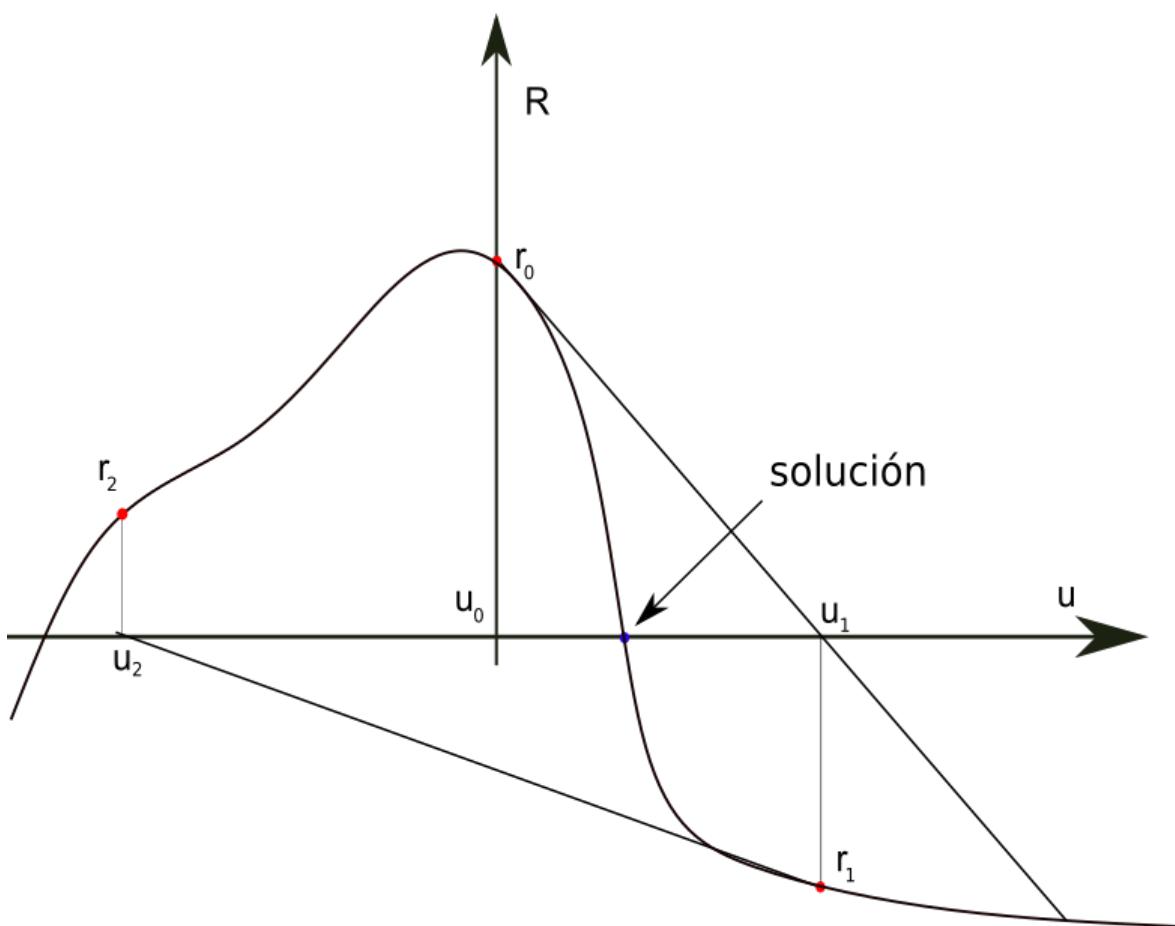


Figura 2.11: proceso de convergencia no lineal con un método tangente

Por último veamos el caso lineal. Si la ecuación a resolver es lineal el residuo también lo es por definición, motivo por el cual su representación gráfica es una recta.

Se deja como ejercicio para el alumno graficar un residuo lineal y partiendo de cualquier solución inicial repetir el procedimiento explicado aquí para identificar varias cosas, a saber:

- la solución encontrada no depende de la solución inicial, cualquiera sea esta, la solución alcanzada siempre es la misma
- la pendiente no varía lo cual implica que la matriz tangente sea constante, independiente de la solución por la cual pase el proceso iterativo
- el proceso iterativo converge en una sola iteración
- dado que la solución deseada no depende de la solución de partida, si elijo la semilla como la solución trivial, es decir, $\phi = \mathbf{0}$ y si la solución inicial del problema también es la trivial, entonces el residuo inicial coincide con el término fuente del problema. Para independizarnos de la importancia de este término fuente siempre conviene evaluar el residuo normalizado respecto al residuo inicial para medir cuánto ha convergido el proceso, es decir, evaluar como criterio de convergencia la relación $\frac{|R|}{|R(\phi_0)|}$

Finalmente vamos a ejemplificar un caso muy conocido. Supongamos que estamos resolviendo la ecuación diferencial proveniente de la ecuación de conducción del calor con fuente y un término reactivo, es decir:

$$\frac{d}{dx} \left(k \frac{d\phi}{dx} \right) + Q - c\phi = 0 \quad (2.130)$$

y que lo vamos a discretizar por diferencias finitas con un esquema centrado asumiendo los parámetros constantes para no introducir mayor complejidad por el momento, es decir, la ecuación del nodo i se lee como

$$k \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + Q - c\phi_i = 0 \quad (2.131)$$

con lo cual el residuo del nodo i se lee como:

$$\mathcal{R}_i = k \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + Q - c\phi_i \quad (2.132)$$

Si como mostramos antes procedemos a calcular la derivada del residuo respecto al vector de incógnitas vemos que

$$\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_i} = \frac{-2k}{\Delta x^2} - c \quad (2.133)$$

$$\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_{i+1}} = \frac{k}{\Delta x^2} \quad (2.134)$$

$$\frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_{i-1}} = \frac{k}{\Delta x^2} \quad (2.135)$$

$$(2.136)$$

representando los tres coeficientes no nulos que tiene la fila i de la matriz tangente \mathbf{K} , es decir

$$\mathbf{K}_{i,i} = \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_i} = \frac{-2k}{\Delta x^2} - c \quad (2.137)$$

$$\mathbf{K}_{i,i+1} = \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_{i+1}} = \frac{k}{\Delta x^2} \quad (2.138)$$

$$\mathbf{K}_{i,i-1} = \frac{\partial \mathcal{R}_i}{\partial \phi_{i-1}} = \frac{k}{\Delta x^2} \quad (2.139)$$

$$(2.140)$$

mostrando la utilidad que tiene saber escribir el residuo discreto de una ecuación diferencial porque allí radica casi la totalidad de la definición del problema. El resto son operaciones matemáticas para poder arribar a una solución precisa, robusta y eficiente.

2.3.12. Precisión y número de puntos en el esquema de Diferencias Finitas

Ahora veremos como generar esquemas en diferencias de una forma general. Veremos que para una aproximación para un cierto orden de derivación se requiere un número mínimo de puntos y que cada vez que querramos aumentar el orden de aproximación, deberemos incrementar el número de puntos en el stencil.

Consideremos N puntos arbitrarios $\{x_l\}_{l=1}^N$, expandimos los valores de $\phi_l = \phi(x_l)$ alrededor de un cierto punto x_0 (que no necesariamente debe coincidir con uno de los x_l , $l \geq 1$).

$$\begin{aligned}\phi_l &= \phi_0 + \phi'_0(x_l - x_0) + \phi''_0 \frac{(x_l - x_0)^2}{2} + \\ &\dots + \phi_l^{(N-1)} \frac{(x_l - x_0)^{N-1}}{(N-1)!} + O(|x_l - x_0|^N)\end{aligned}\quad (2.141)$$

Ahora suponemos que el stencil se va reduciendo, hacia el punto x_0 pero manteniendo las distancias relativas invariantes, es decir:

$$\Delta x_l = x_l - x_0 = \epsilon \xi_l \quad (2.142)$$

con $\xi_l = \text{cte}$ y $\epsilon \rightarrow 0$. Poniendo el sistema anterior en forma matricial:

$$\boldsymbol{\phi} = \mathbf{A}\mathbf{d} + \epsilon^N \mathbf{e} \quad (2.143)$$

donde:

$$\boldsymbol{\phi} = \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_L \end{bmatrix}, \quad (2.144)$$

$$\mathbf{d} = \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi'_0 \epsilon \\ \vdots \\ \phi_l^{(N-1)} \epsilon^{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.145)$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \xi_1 & \xi_1^2/2 & \cdots & \xi_1^{N-1}/(N-1)! \\ 1 & \xi_2 & \xi_2^2/2 & \cdots & \xi_2^{N-1}/(N-1)! \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \xi_N & \xi_N^2/2 & \cdots & \xi_N^{N-1}/(N-1)! \end{bmatrix} \quad (2.146)$$

y \mathbf{e} es un vector que depende en principio de ϵ pero cuyas componentes se mantienen acotadas al hacer tender $\epsilon \rightarrow 0$. Resolviendo el sistema lineal, podemos obtener una expresión para cualquiera de las derivadas, digamos, por ejemplo, la k -ésima:

$$\phi_0^{(k)} \epsilon^k = \sum_{l=1}^N c_{kl} (\phi_l - \epsilon^N e_l) \quad (2.147)$$

Ahora bien, \mathbf{A} no depende de ϵ de manera que tampoco dependen los coeficientes de su inversa c_{kl} , de manera que:

$$\phi_0^{(k)} = \epsilon^{-k} \sum_{l=1}^N c_{kl} \phi_l + O(\epsilon^{N-k}) \quad (2.148)$$

De manera que llegamos a la siguiente regla simple que vincula la el orden de la derivada k , el número de puntos del stencil N y el orden de la aproximación p :

$$p = N - k \quad (2.149)$$

En particular, si se quiere aproximar una derivada k -ésima, entonces es necesario al menos $k+1$ puntos para que la aproximación sea “convergente”, es decir $p \geq 1$. Por ejemplo, podemos obtener la

derivada de primer orden $k = 1$ con precisión $O(\Delta x)^2$ ($p = 2$), con $N = 3$ puntos. Por el contrario, para la derivada segunda ($k = 2$) sólo podemos esperar una precisión $O(\Delta x)$ ($p = 1$) con $N = 3$ puntos. En el caso de una malla de paso constante, y con diferencias centradas se puede obtener una precisión un orden mayor por cuestiones de simetría.

2.4. Método de Diferencias Finitas en problemas no estacionarios

Muchos de los problemas en ingeniería son de carácter transitorio, es decir, la solución evoluciona en el tiempo e interesa conocer cómo es esta evolución. En estos casos las ecuaciones contienen un término temporal como el que se ve en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[k \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + Q(x) \quad (2.150)$$

Existen varias formas de discretizar el tiempo en el contexto de diferencias finitas. Entre las mas empleadas podemos mencionar:

- métodos semidiscretos donde la ecuación diferencial parcial (PDE) se discretiza solo en el espacio reduciendo la PDE a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE). En este caso se aplican los métodos de integración vistos en cálculo numérico, entre los mas conocidos se encuentra el método de Runge-Kutta, pero existen muchos más.
- discretización del tiempo en diferencias finitas que convierten la PDE en un sistema algebraico lineal o no lineal dependiente del problema, similarmente a lo visto antes.

2.4.1. Discretización temporal por métodos semidiscretos

Habíamos visto que discretizando espacialmente la 2.150 usando diferencias finitas llegábamos a un forma algebraica para ese operador, que cuando se reemplaza en la expresión luce como:

$$\frac{d\phi}{dt} = \mathbf{K}\phi + \mathbf{Q} \quad (2.151)$$

donde en lugar de arribar a un sistema algebraico lineal (LAS: linear algebraic system) llegamos a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, donde normalmente se expresan como:

$$\frac{d\phi}{dt} = \mathbf{f}(\phi, t) \quad (2.152)$$

donde la función \mathbf{f} equivale a aplicar la misma función que normalmente empleamos para resolver el problema estacionario.

2.4.2. Discretización temporal por diferencias finitas

$$\frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + c\phi_i^{n+\theta} = \kappa \frac{(\phi_{i+1}^{n+\theta} - 2\phi_i^{n+\theta} + \phi_{i-1}^{n+\theta})}{\Delta x^2} + Q_i^{n+\theta} \quad (2.153)$$

2.4.3. Esquema explícito

Equivale a poner en la expresión 2.153 el valor de $\theta = 0$

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + \Delta t \left(-c\phi_i^n + \kappa \frac{(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n)}{\Delta x^2} + Q_i^n \right) \quad (2.154)$$

2.4.4. Esquema implícito

Equivale a poner en la expresión 2.153 el valor de $\theta = 1$

$$\left(\frac{1}{\Delta t} + c_i + 2 \frac{\kappa}{\Delta x^2} \right) \phi_i^{n+1} - \kappa \frac{\phi_{i+1}^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} = \frac{\phi_i^n}{\Delta t} + Q_i^{n+1} \quad (2.155)$$

2.4.5. Esquema semi-implícito

Equivale a poner en la expresión 2.153 el valor de $\theta = \frac{1}{2}$

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} c \phi_i^{n+1} + \frac{1}{2} c \phi_i^n = \\ \frac{1}{2} \kappa \frac{(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n)}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} \kappa \frac{(\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1})}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} Q_i^n + \frac{1}{2} Q_i^{n+1} \end{aligned} \quad (2.156)$$

reacomodando la ecuación, nos queda:

$$\begin{aligned} \frac{\phi_i^{n+1}}{\Delta t} + \frac{1}{2} c \phi_i^{n+1} - \frac{1}{2} \kappa \frac{(\phi_{i+1}^{n+1} - 2\phi_i^{n+1} + \phi_{i-1}^{n+1})}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} Q_i^{n+1} = \\ \frac{\phi_i^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} c \phi_i^n + \frac{1}{2} \kappa \frac{(\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n)}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} Q_i^n \end{aligned} \quad (2.157)$$

2.5. Método de Diferencias Finitas en más de una dimensión

Empecemos por un dominio rectangular con condiciones Dirichlet (ver Figura 2.12):

$$k \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) = -Q(x, y), \quad \text{en } \Omega = \{x, y / 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y\} \quad (2.158)$$

$$\phi(0, y) = \bar{\phi}_1 \quad (2.159)$$

$$\phi(x, 0) = \bar{\phi}_2 \quad (2.160)$$

$$\phi(L_x, y) = \bar{\phi}_3 \quad (2.161)$$

$$\phi(x, L_y) = \bar{\phi}_4 \quad (2.162)$$

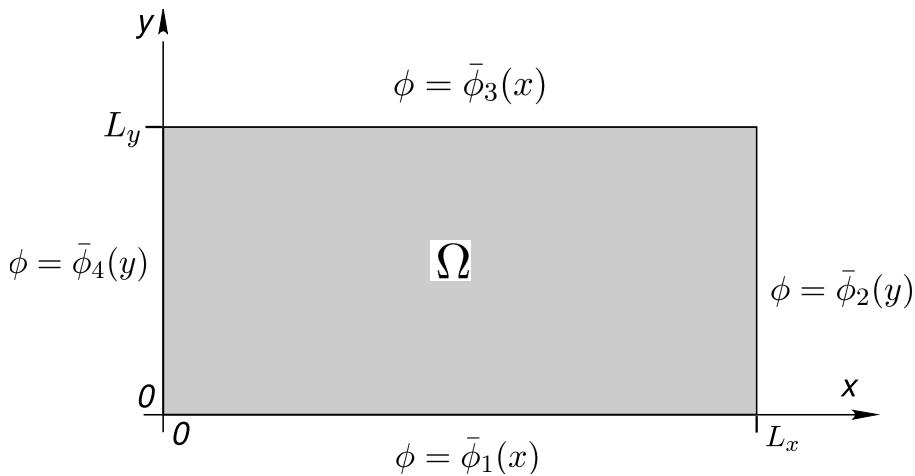


Figura 2.12: Problema bidimensional de conducción del calor en un rectángulo.

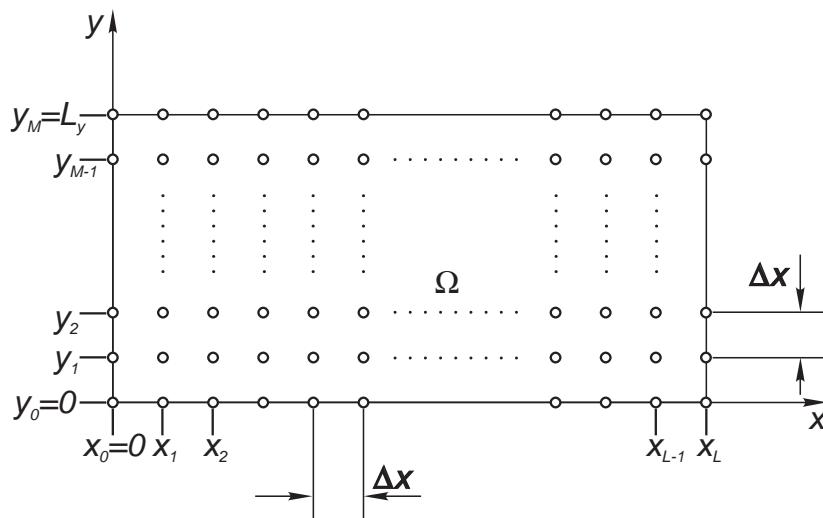


Figura 2.13: Malla homogénea de Diferencias Finitas.

Generamos una malla de paso constante $\Delta x, \Delta y$ (ver Figura 2.13):

$$\Delta x = \frac{L_x}{L}, \quad \Delta y = \frac{L_y}{M} \quad (2.163)$$

llamamos “nodo lm ” al punto de coordenadas:

$$(x_l, y_m) = (l\Delta x, m\Delta y), \quad 0 \leq l \leq L, \quad 0 \leq m \leq M \quad (2.164)$$

2.5.1. Aproximación en Diferencias Finitas para derivadas parciales

Consideramos una expansión en x de la forma (ver Figura 2.14):

$$\phi_{l+1,m} = \phi(x_l + \Delta x, y_m) \quad (2.165)$$

$$= \phi(x_l, y_m) + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{lm} + (1/2)\Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{l+\theta_l, m}, \quad 0 \leq \theta_l \leq 1 \quad (2.166)$$

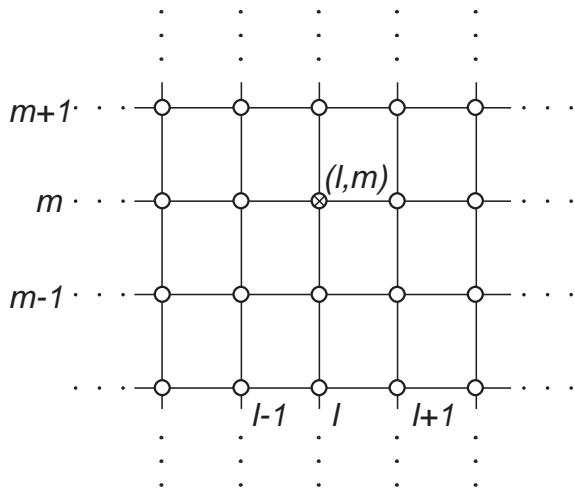


Figura 2.14: Nodo típico en una malla estructurada bidimensional.

Igual que en 1D, se obtienen expresiones aproximadas para las derivadas de primer y segundo orden:

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{lm} = \frac{\phi_{l+1,m} - \phi_{l,m}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (2.167)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{lm} = \frac{\phi_{l,m} - \phi_{l-1,m}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (2.168)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{lm} = \frac{\phi_{l+1,m} - \phi_{l-1,m}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (2.169)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_{lm} = \frac{\phi_{l+1,m} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l-1,m}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (2.170)$$

y expresiones similares en y .

La discretización se hace remplazando las derivadas segundas por expresiones en diferencias de segundo orden para los nodos interiores:

$$k \left(\frac{\phi_{l+1,m} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l-1,m}}{\Delta x^2} + \frac{\phi_{l,m+1} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l,m-1}}{\Delta y^2} \right) = -Q_{lm} \text{ para } l = 1, \dots, L-1 \quad (2.171)$$

$$m = 1, \dots, M-1$$

y las condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} \phi_{0m} &= \bar{\phi}_4(y_m) & m = 0, \dots, M \\ \phi_{l0} &= \bar{\phi}_1(x_l) & l = 0, \dots, L \\ \phi_{Lm} &= \bar{\phi}_2(y_m) & m = 0, \dots, M \\ \phi_{lM} &= \bar{\phi}_3(x_l) & l = 0, \dots, L \end{aligned} \quad (2.172)$$

El sistema quedará, tal como lo venimos utilizando:

$$\mathbf{K}\phi = \mathbf{f} \quad (2.173)$$

donde \mathbf{K} es ahora una matriz tri-diagonal por bloques:

$$\mathbf{K} = \frac{k}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\mathbf{I} & \bar{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -\mathbf{I} & \bar{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & -\mathbf{I} & \bar{\mathbf{K}} & -\mathbf{I} & \\ & & & & 0 & -\mathbf{I} & \bar{\mathbf{K}} & \end{bmatrix} \quad (2.174)$$

siendo $\bar{\mathbf{K}}$:

$$\bar{\mathbf{K}} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -1 & 4 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 4 & -1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & -1 & 4 & -1 & \\ & & & & 0 & -1 & 4 & \end{bmatrix} \quad (2.175)$$

(esto es para el caso especial $\Delta x = \Delta y$). El vector de incógnitas es:

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_{11} \\ \phi_{12} \\ \phi_{13} \\ \vdots \\ \phi_{1,M-1} \\ \phi_{21} \\ \phi_{22} \\ \phi_{23} \\ \vdots \\ \phi_{2,M-1} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,1} \\ \phi_{L-1,2} \\ \phi_{L-1,3} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,M-1} \end{bmatrix} \quad (2.176)$$

que corresponde a haber numerado las incógnitas primero según y y después según x (ver Figura 2.15).

2.5.2. Stencil del operador discreto

Consideremos la fila de la matriz correspondiente a la ecuación para el nodo lm . De todos los coeficientes sólo cinco son no nulos, correspondiente al nodo en cuestión y los cuatro vecinos. Estos

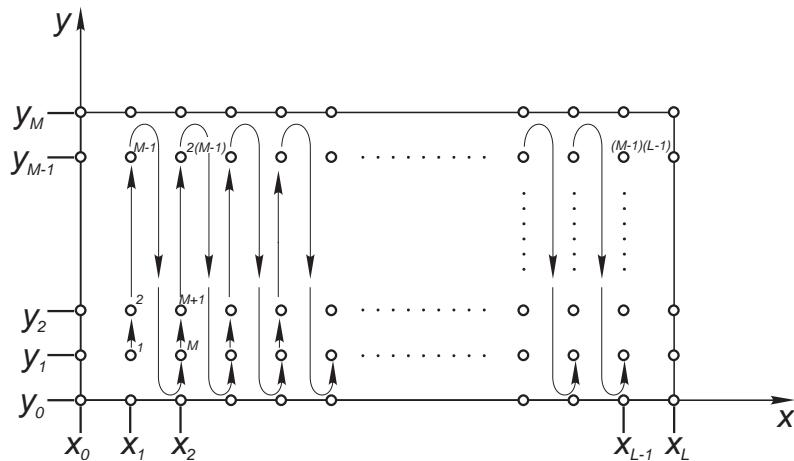


Figura 2.15: Orden de numeración de los grados de libertad en el sistema lineal.

coeficientes son los mismos para todos los nodos de la malla, y entonces podemos caracterizar el operador discreto por una sola de las líneas. Para ser más grafico aún, podemos poner los coeficientes en los nodos asociados. A esto se le llama el *"stencil"* o *"estrella"* del operador discreto. Para el caso de la ecuación de Poisson que estamos tratando, con $\Delta x = \Delta y$, el stencil obtenido consta de 5 puntos involucrados y tiene como coeficientes 4 para el nodo central y -1 para todos los otros (ver Figura 2.16)

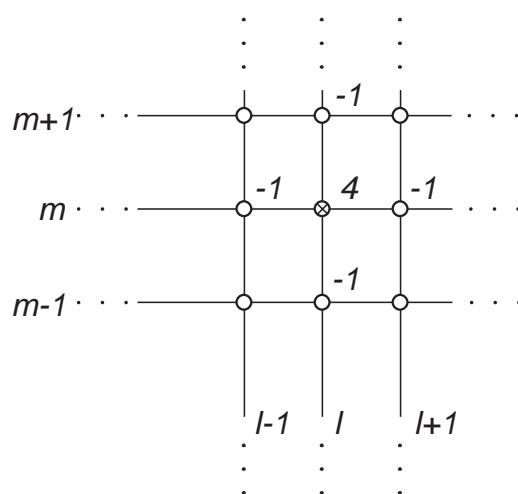


Figura 2.16: Stencil de 5 puntos para el operador de Laplace en 2D.

2.6. Resolución del sistema de ecuaciones

2.6.1. Estructura banda

Consideremos el caso $L_x = 3$, $L_y = 3$, $M = 5$, $\Delta x = \Delta y = 1$, por simplicidad (ver Figura 2.17), la matriz quedará de la siguiente manera:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \quad (2.177)$$

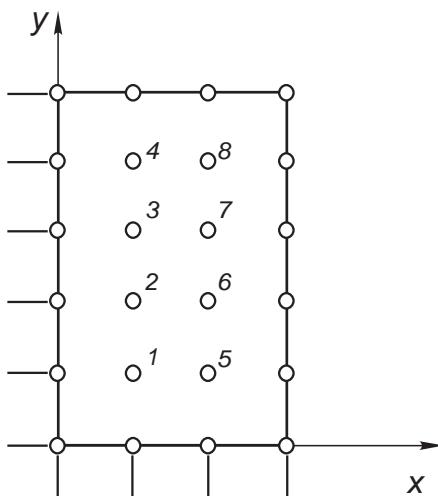


Figura 2.17: Malla de Diferencias Finitas para un problema con condiciones Dirichlet.

vemos que los elementos no nulos se encuentran sólo sobre la diagonal y sus cuatro codiagonales superiores e inferiores, es decir (ver Figura 2.18):

$$K_{ij} = 0, \text{ para } |i - j| > a \quad (2.178)$$

con $a = 4$. Toda matriz que satisface (2.178) para algún a es llamada una *matriz banda* y a el *ancho de banda* de la matriz. Obviamente, el interés surge cuando a es mucho menor que la dimensión N de la matriz, que es el caso para las matrices de Diferencias Finitas. Veremos que en ese caso se puede ganar mucho tanto en requerimientos de memoria para factorizar la matriz, como en tiempo de procesamiento. Podemos ver que en el caso que nos ocupa $a = M - 1$.

2.6.2. Requerimientos de memoria y tiempo de procesamiento para matrices banda

Consideremos una matriz simétrica de $N \times N$, con ancho de banda a . Puede verse que al factorizar la matriz por un método de eliminación tipo Gauss o Cholesky los elementos fuera de la banda no

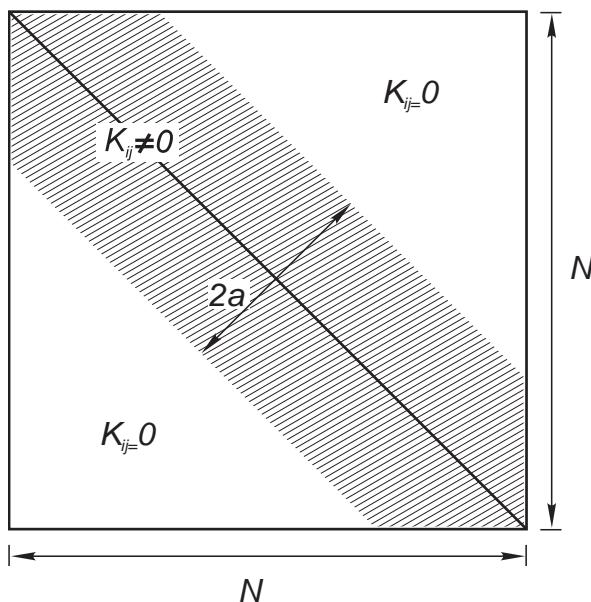


Figura 2.18: Definición del ancho de banda de una matriz.

se “llenan”, esto es, siguen siendo nulos después del proceso de factorización. Mediante algoritmos especialmente diseñados, se puede trabajar sólo sobre las diagonales activas de manera que sólo se requieren almacenar $N + (N - 1) + (N - 2) + \dots + (N - a) \approx Na$ elementos, contra los $N(N + 1)/2$ elementos que hace falta almacenar, si no se tiene en cuenta la estructura banda de la matriz. El factor de ganancia en memoria es:

$$\frac{\text{(almacenamiento matriz banda)}}{\text{(almacenamiento matriz llena)}} = \frac{2a}{N} \quad (2.179)$$

Consideremos ahora el costo computacional en términos de tiempo de CPU del método de eliminación de Gauss para una matriz llena. Para eliminar la primera columna, debemos hacer $N - 1$ operaciones de fila, cada una de las cuales tiene N elementos, lo cual requiere $N(N - 1)e$ operaciones, donde e es el número de operaciones necesarios para eliminar un elemento. Usualmente se necesita una suma y una multiplicación, de manera que $e = 2$, sin embargo, dependiendo de la máquina y de detalles de implementación, debe tenerse en cuenta las operaciones de traer los elementos desde la RAM el procesador y de incrementar los contadores. Para eliminar la segunda columna, debemos realizar $N - 2$ operaciones de $N - 1$ elementos, es decir $(N - 1)(N - 2)e$ operaciones. El número total de operaciones es de:

$$\begin{aligned} (\text{Costo computacional matriz llena}) &= \\ &= [N(N - 1) + (N - 1)(N - 2) + \dots + 3 \times 2 + 2 \times 1]e \\ &= e \sum_{j=1}^N j(j - 1) = eN^3/3 + O(N^2) \end{aligned} \quad (2.180)$$

Si la matriz es banda, entonces en la primera columna solo hay $a + 1$ elementos no nulos. Por lo tanto, solo debemos hacer a operaciones de fila. Además, en cada una de las filas sólo los $2a$ primeros elementos están dentro de la banda, de manera que deben efectuarse $2ea^2$ operaciones para eliminar la primera columna. Para las otras columnas, ocurre algo parecido y el costo total es:

$$(\text{Costo computacional matriz banda}) = N \times 2ea^2 = 2eNa^2 \quad (2.181)$$

La relación de costos es:

$$\frac{(\text{Costo computacional matriz banda})}{(\text{Costo computacional matriz llena})} = \frac{2eNa^2}{eN^3} = 2\left(\frac{a}{N}\right)^2 \quad (2.182)$$

Para fijar ideas, consideremos el caso de una malla de $L = M = 200$ nodos. El número total de grados de libertad es $N = (L - 1) \times (M - 1) \approx LM = 40000$. El número total de elementos a almacenar como matriz llena es $\approx N^2/2 = 8.0 \times 10^8$ elementos. En el caso de utilizar doble precisión esto equivale a 6.4 Gbytes de memoria RAM. Utilizando almacenamiento banda tenemos $a = 200$ y el número de elementos a almacenar es $Na = 200 \times 40000 = 8000000$, 64.0 Mbyte de memoria en doble precisión.

Con respecto al costo computacional, para la matriz llena es $40000^3/3e \approx 2.15 \times 10^{13}e$ operaciones, mientras que para matriz banda es de sólo $2 \times 200^2 \times 40000e = 3.2 \times 10^9e$ operaciones. Considerando $e = 2$ y una velocidad de procesamiento de 1 Gflops (1 Gflop=10⁹ operaciones de punto flotante por segundo) los tiempos de procesamiento resultan ser de:

$$(\text{tiempo de CPU matriz llena}) = \frac{4.3 \times 10^{13} \text{flops}}{1 \times 10^9 \text{flops/sec}} = 11.94 \text{ horas} \quad (2.183)$$

$$(\text{tiempo de CPU matriz banda}) = \frac{6.4 \times 10^9 \text{flops}}{1 \times 10^9 \text{flops/sec}} = 6.4 \text{ segundos} \quad (2.184)$$

2.6.3. Ancho de banda y numeración de nodos

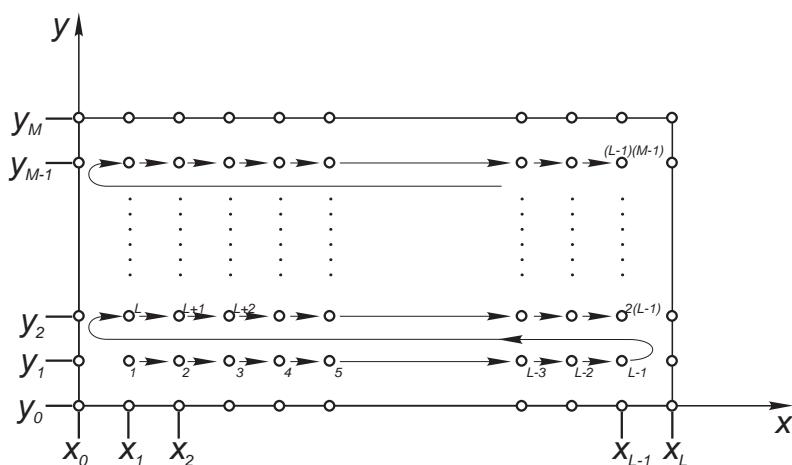


Figura 2.19: Numeración alternativa para reducir el ancho de banda.

El ancho de banda es altamente dependiente de la *numeración de los nodos*, esto es, del orden en que las incógnitas son puestas en el vector ϕ . Por ejemplo si la numeración se hace primero en x y

después en y (ver Figura 2.19):

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_{11} \\ \phi_{21} \\ \phi_{31} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,1} \\ \vdots \\ \phi_{1,M-1} \\ \phi_{2,M-1} \\ \phi_{3,M-1} \\ \vdots \\ \phi_{L-1,M-1} \end{bmatrix} \quad (2.185)$$

entonces el ancho de banda pasa a ser de $a = L - 1$. La regla es, entonces, "numerar siempre primero en aquella dirección en la cual hay menos nodos".

2.7. La ecuación de Convección-Reacción-Difusión

Consideremos el transporte de una sustancia de concentración ϕ en un medio fluido con campo de velocidades \mathbf{v} y difusividad $\kappa > 0$. 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

$$\begin{aligned} \frac{D\phi}{Dt} &= \kappa \Delta \phi - c\phi + g \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \phi &= \kappa \Delta \phi - c\phi + g \end{aligned} \quad (2.186)$$

con condiciones de contorno

$$\begin{aligned} \phi &= \bar{\phi}, \quad \text{en } \Gamma_\phi \\ -\kappa \frac{\partial \phi}{\partial n} &= q, \quad \text{en } \Gamma_q \\ -\kappa \frac{\partial \phi}{\partial n} &= h(\phi - \phi_h), \quad \text{en } \Gamma_h \end{aligned} \quad (2.187)$$

Los términos involucrados en (2.186) se denominan

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} &= \text{Término temporal} \\ \mathbf{v} \cdot \nabla \phi &= \text{convectivo o de transporte} \\ \kappa \Delta \phi &= \text{difusivo} \\ c\phi &= \text{reacción} \\ g &= \text{producción} \end{aligned} \quad (2.188)$$

Tanto \mathbf{v} como c , g y κ pueden ser funciones de la posición y del tiempo $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$, etc. Las dimensiones de las constantes son:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} &= [\text{m/sec}] \\ \kappa &= [\text{m}^2/\text{sec}] \\ c &= [\text{sec}^{-1}] \\ g &= [[\phi]/\text{sec}] \end{aligned} \quad (2.189)$$

2.7.1. Interpretación de los diferentes términos

Los términos de reacción y producción pueden agruparse como $-c(\phi - \phi_{eq})$, donde $\phi_{eq} = g/c$ es la concentración de ϕ que está en “equilibrio local” con la producción. En estado estacionario y con condiciones homogéneas tal que ϕ no depende de x entonces $\phi \rightarrow \phi_{eq}$. (Nota: si $g = f(\phi)$ entonces los ceros de f son puntos de equilibrio.)

Para entender mejor el significado de los diferentes términos involucrados vamos a considerar algunos casos particulares.

2.7.1.1. No hay dependencia espacial.

Si consideramos que ϕ no depende de x ($\phi = \phi(x)$) entonces los términos convectivo y difusivo son nulos y llegamos a una ODE para el valor de ϕ (constante en todo el dominio)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + c(\phi - \phi_{eq}) = 0 \quad (2.190)$$

cuya solución es

$$\phi = \phi_{eq} + (\phi(t=0) - \phi_{eq})e^{-ct} \quad (2.191)$$

y vemos que ϕ decae exponencialmente hacia ϕ_{eq} . Podemos deducir de esto que en zonas donde los gradientes son bajos ϕ tiende a aproximarse a ϕ_{eq} .

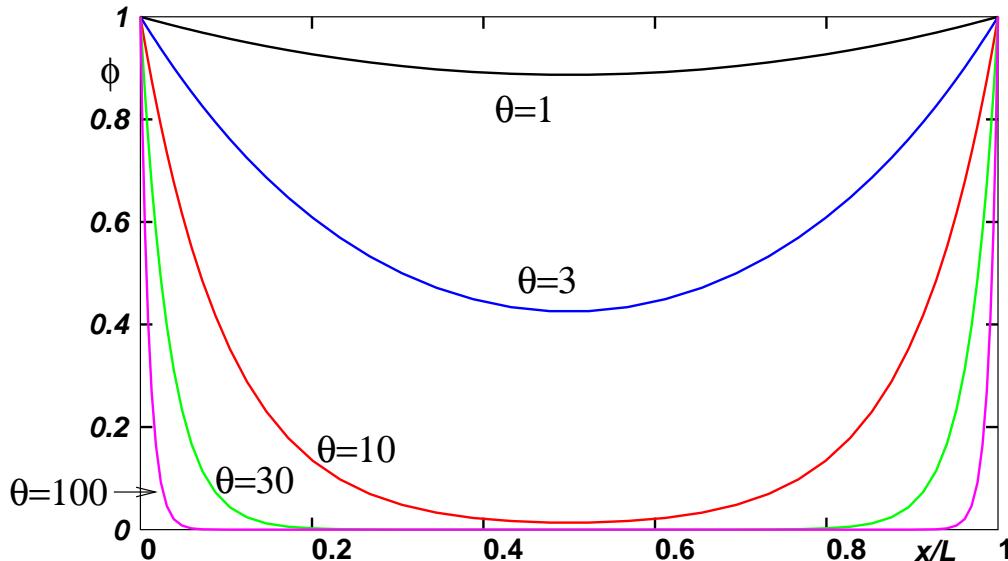


Figura 2.20: Concentración para diferentes valores del módulo de Thiele

2.7.1.2. Reacción-Difusión.

Ahora, si incluimos la difusión, pero estacionario y con $v = 0$, entonces la ecuación es

$$\kappa \Delta \phi - c(\phi - \phi_{eq}) = 0 \quad (2.192)$$

Si $\phi_{eq} = \text{cte}$, pero la condición de contorno es $\phi_w \neq \phi_{eq}$ entonces ϕ va a tratar de estar cerca de ϕ_{eq} en el interior del dominio, yendo suavemente hacia ϕ_w en los contornos. La rapidez con la cual el

valor interior empalma con la condición de contorno dependerá de la importancia relativa entre c y κ . Consideremos, para fijar ideas, el siguiente problema

$$\begin{aligned}\kappa \Delta \phi - c\phi &= 0, & \text{en } 0 \leq x \leq L \\ \phi &= 1, & \text{en } x = 0, L\end{aligned}\tag{2.193}$$

entonces la solución es

$$\phi = \frac{\cosh(\theta(x/L - 1/2))}{\cosh(\theta/2)}, \quad \theta = \sqrt{c/\kappa} L\tag{2.194}$$

donde θ es el “módulo de Thiele” o “número de reacción”. La solución se observa en la Figura 2.20 y vemos que para números de Thiele altos la solución se pega al valor de equilibrio en el interior del dominio y empalma con la condición de contorno en una capa límite de espesor $\sqrt{\kappa/c} = L/\theta$. Estas capas límites representan grandes gradientes para la solución y pueden traer problemas (falta de convergencia) para los métodos numéricos.

En el caso térmico ϕ es la temperatura, κ la difusividad térmica y g una fuente de calor distribuida. c puede provenir de una reacción endotérmica proporcional a la temperatura. También en el caso 2D el término $-c(\phi - \phi_{eq})$ puede pensarse como un término de enfriamiento Newtoniano.

Notar que si $v = 0$, los restantes términos sólo contienen derivadas espaciales de orden par (0 ó 2) y por lo tanto son invariantes ante inversión de coordenadas ($x \rightarrow -x$). Esto dará lugar después a que las matrices de los métodos numéricos resulten simétricas.

2.7.1.3. Advección-Difusión.

En el caso estacionario ($\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$) y si no hay reacción ni producción ($c, g = 0$) queda la “ecuación de advección-difusión”. Consideremos el caso 1D en un intervalo de longitud L con condiciones Dirichlet

$$\begin{aligned}v \frac{\partial \phi}{\partial x} - \kappa \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} &= 0, & \text{en } 0 \leq x \leq L \\ \phi &= 0, & \text{en } x = 0 \\ \phi &= 1, & \text{en } x = L\end{aligned}\tag{2.195}$$

Esto representa el transporte de temperatura ϕ por un fluido con difusividad κ y velocidad v . La solución puede encontrarse por métodos operacionales estándar, proponiendo soluciones de la forma $e^{\lambda x}$, resolviendo el polinomio característico en λ y buscando la combinación lineal que satisface las condiciones de contorno. La solución resulta ser

$$\phi = \frac{e^{2Pe(x/L)} - 1}{e^{2Pe} - 1}, \quad Pe = \frac{vL}{2\kappa}\tag{2.196}$$

(ver Figura 2.21). Para valores de v muy pequeños la solución se aparta poco de la correspondiente a conducción pura

$$\phi = x/L\tag{2.197}$$

A medida que v aumenta las temperaturas bajan ya que el movimiento del fluido tiende a contrarrestar el efecto de la condición de contorno en $x = L$ y refrigerará más que cuando el fluido está quieto. La importancia relativa de ambos términos (difusivo y convectivo) se puede cuantificar a través del “número de Péclet” Pe dado por (2.196). A medida que el Pe aumenta, el gradiente de ϕ se concentra más y más cerca de la pared $x = 1$, formando una capa límite de espesor

$$\delta = O(k/v) = O(L/Pe)\tag{2.198}$$

De nuevo, estos altos gradientes son una fuente de problemas para los métodos numéricos.

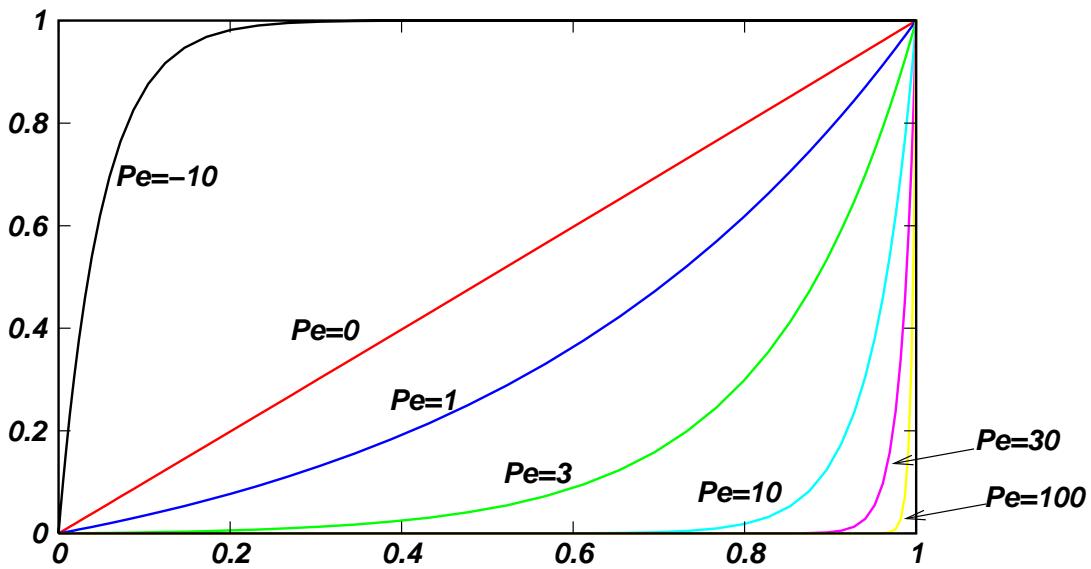


Figura 2.21: Solución al problema de advección pura 1D con coeficientes constantes

Si la velocidad se invierte entonces la discontinuidad se produce en $x = 0$ que es la nueva salida siendo $x = L$ la entrada.

Una forma diferente de ver este fenómeno es considerar que, a medida que $\kappa \rightarrow 0$, el problema se hace cada vez más advectivo ($Pe \rightarrow \infty$). Ahora bien, para el problema advectivo puro la ecuación es de primer orden y por lo tanto requiere de una sola condición de contorno. La teoría de sistemas hiperbólicos indica que la condición de contorno debe aplicarse donde las líneas características entran. El valor de la variable en un contorno donde las características salen resulta de la integración de la ecuación dentro del dominio. Si se pretende imponer un valor diferente como condición de contorno Dirichlet, la diferencia se absorbe en una capa límite.

Debido a que la ecuación de advección pura propaga los valores a lo largo de las características, también se pueden producir altos gradientes en el interior del dominio. Por ejemplo consideremos advección pura en un dominio rectangular $ADD'A'$ como se muestra en la Figura 2.23. El flujo entra por el lado AA' y sale por DD' . La condición a la entrada es $\phi = \bar{\phi}$ donde $\bar{\phi}$ contiene un salto cerca del punto W . El transporte convectivo tiende a propagar esta discontinuidad a lo largo de la característica WW' , pero debido a la difusión la discontinuidad se va suavizando y termina en un escalón suavizado a la salida DD' .

2.7.2. Discretización de la ecuación de Advección-Difusión

Consideremos el problema 1D de advección-difusión con coeficientes constantes (2.195). Consideremos una malla uniforme de N segmentos de longitud $\Delta x = L/N$. Los nodos son $x_j = (j - 1)\Delta x$, para $j = 1, \dots, N + 1$. Una discretización centrada de segundo orden es

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - k \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (2.199)$$

Notar que la derivada de primer orden introduce un término antisimétrico. Este esquema funciona bien mientras la velocidad se mantenga por debajo de un cierto límite, que resulta ser $v_{crit} = 2\kappa/\Delta x$ (En la figura $\kappa = 1$ y el número de puntos es $N = 20$, de manera que $\Delta x = 0.05$ y $v_{crit} = 40$). Para velocidades mayores la solución numérica se vuelve oscilatoria y para velocidades mucho más grandes que la crítica las oscilaciones contaminan todo el dominio. Nótese que la velocidad crítica se produce cuando

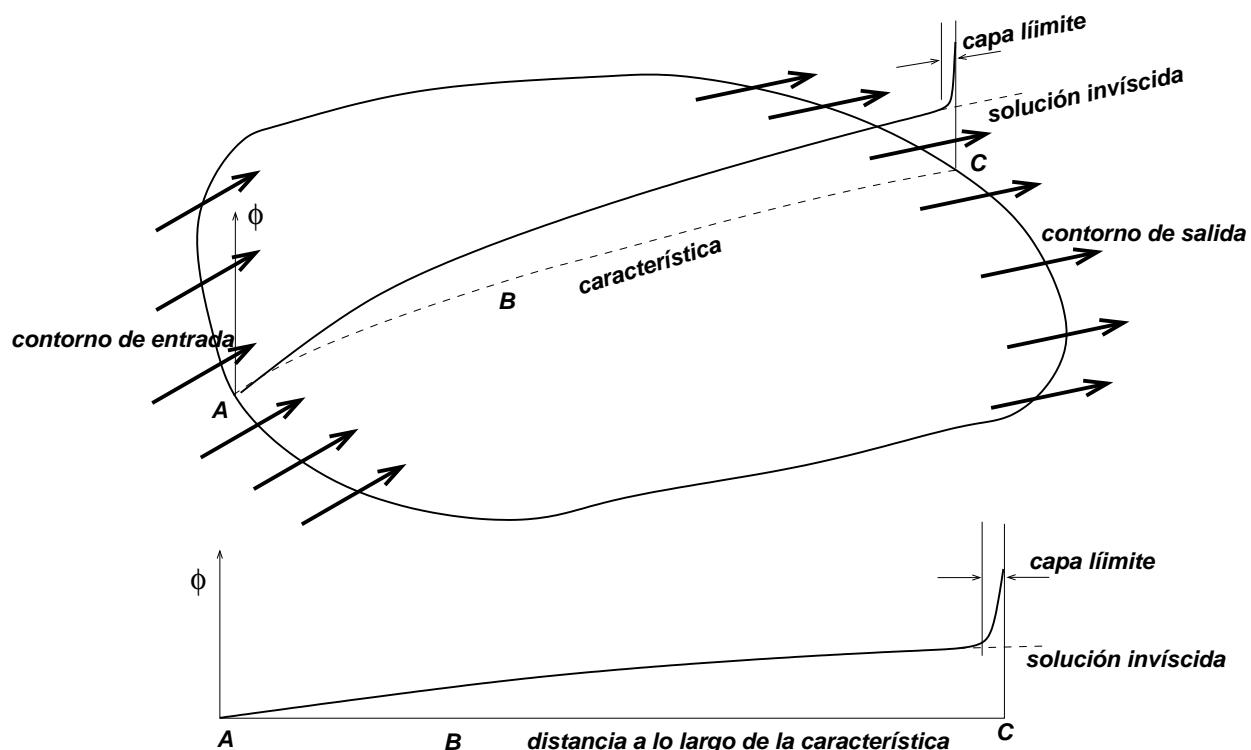


Figura 2.22: Sistemas fuertemente advectivos en 2D

el Péclet de la malla es

$$Pe_{\Delta x} = \frac{v \Delta x}{2k} = 1 \quad (2.200)$$

Estas oscilaciones pueden asociarse a un falta de estabilidad del esquema numérico, sin embargo el esquema es estable, estrictamente hablando, ya que si refinamos suficientemente entonces $Pe_{\Delta x}$ pasará a ser menor que uno y se recupera la convergencia $O(\Delta x^2)$. Sin embargo vemos que si tomamos la estimación de error estándar

$$\|\mathbf{E}_\phi\| \leq C \Delta x^2, \quad (2.201)$$

la constante C depende de Pe . O sea, no existe un C independiente de Pe tal que (2.201) valga para todo Δx y Pe , es decir *no se puede obtener una cota de error uniforme sobre Pe*. Bajo esta definición de estabilidad más estricta el esquema es inestable.

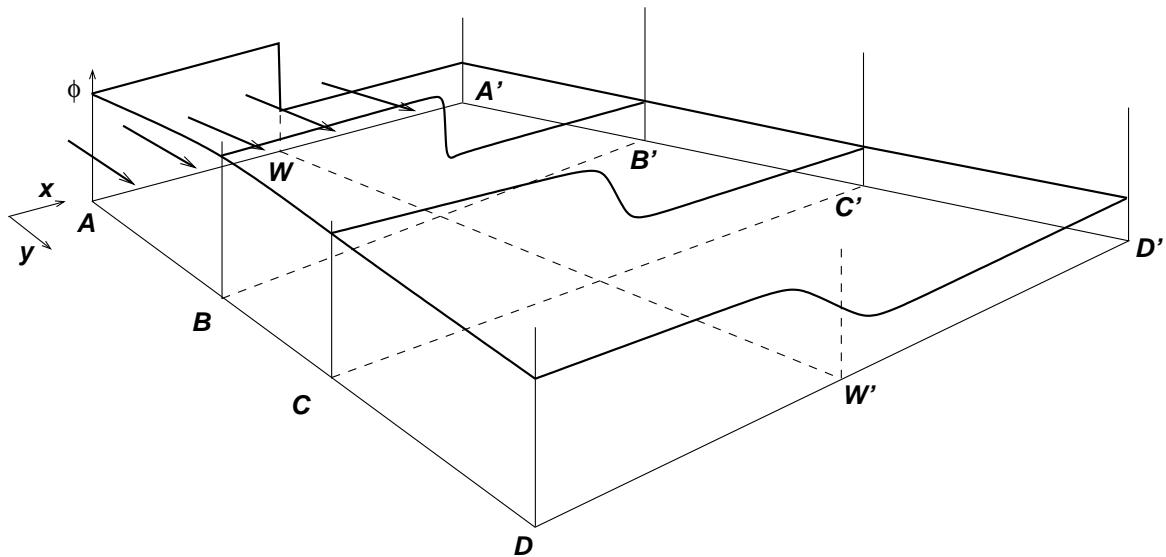


Figura 2.23: Discontinuidad interna propagada desde la condición de en un sistema fuertemente advecitivo

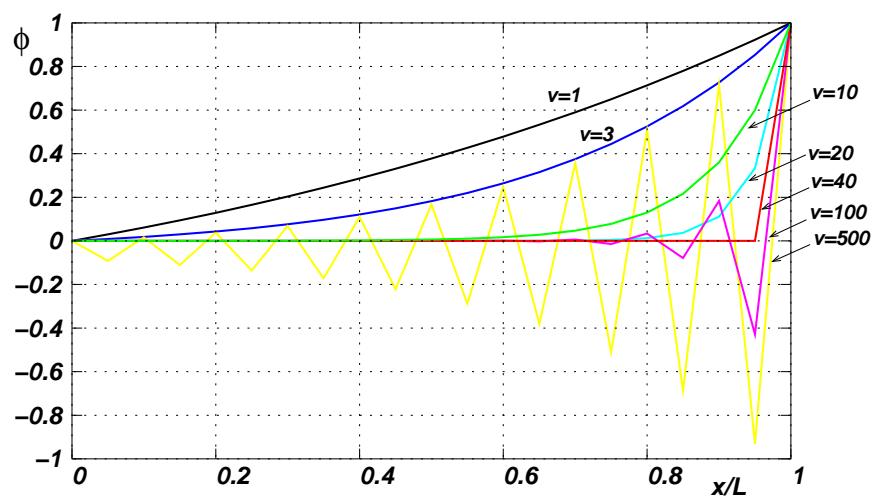


Figura 2.24: Solución numérica al problema de advección difusión con un esquema centrado

2.7.3. Desacoplamiento de las ecuaciones

Si consideramos las ecuaciones discretas del esquema centrado (2.199) para $Pe \rightarrow \infty$, es decir $k = 0$, obtenemos

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} = 0, \quad j = 2, \dots, N \quad (2.202)$$

Esta ecuación dice que

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \phi_3 = \phi_5 = \dots = \phi_{2n+1} = \dots \\ \phi_{N+1} &= \phi_{N-1} = \phi_{N-3} = \dots \end{aligned} \quad (2.203)$$

Entonces, si N es impar existe una solución que es

$$\phi_j = \begin{cases} 0 & ; \text{ si } j = \text{ impar} \\ 1 & ; \text{ si } j = \text{ par} \end{cases} \quad (2.204)$$

y por otro lado no existe solución si N es par.

Se dice que hay un “desacoplamiento” de las ecuaciones para los nodos pares e impares, lo cual es asociado normalmente a una falta de estabilidad del esquema numérico.

2.7.4. Esquemas de diferencias contracorriente (upwinded)

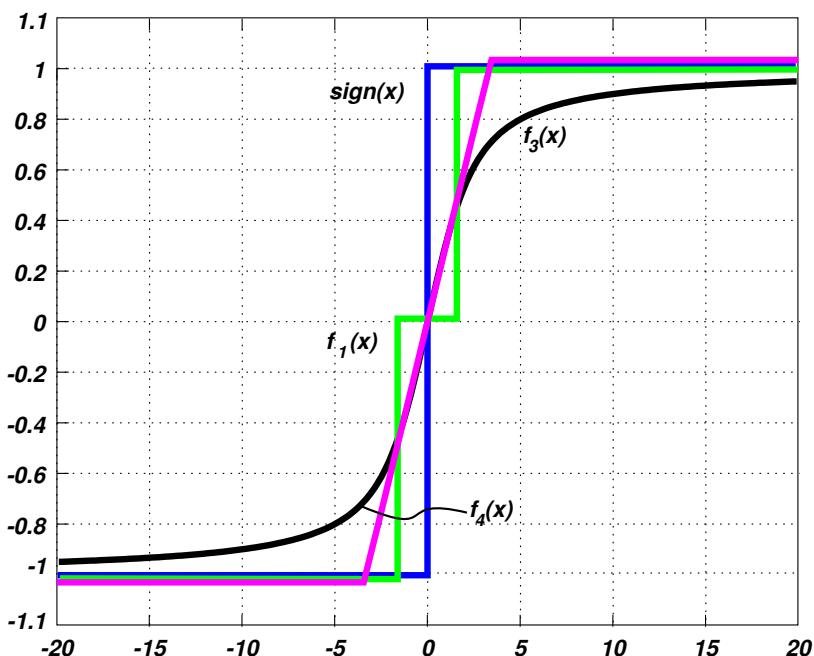


Figura 2.25: Diferentes propuestas para el parámetro de estabilidad

Notemos que, en el caso de advección pura ($Pe = \infty$) la solución numérica debería ser

$$\phi_j = \begin{cases} 0 & ; \text{ si } j \leq N \\ 1 & ; \text{ si } j = N + 1 \end{cases} \quad (2.205)$$

y esto se lograría si reemplazamos la derivada centrada en (2.202) por una derivada lateral a izquierda (también llamada “contracorriente” o “upwinded”)

$$v \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\Delta x} = 0, \quad \text{tal que } j = 2, \dots, N \quad (2.206)$$

Pero esto se puede reescribir como

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - \left(\frac{v\Delta x}{2} \right) \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (2.207)$$

o, poniendo $k_{num} = v\Delta x/2$,

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - k_{num} \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (2.208)$$

donde k_{num} es una difusión “*numérica artificial*” que “*estabiliza*” el esquema. Notar que, si $v < 0$, entonces el esquema debe estar descentrado a derecha

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\Delta x} \quad (2.209)$$

y entonces debe ser $k_{num} = -v\Delta x/2$, de manera que, en general

$$k_{num} = \frac{|v|\Delta x}{2} \quad (2.210)$$

Ahora bien, para $Pe < \infty$ podemos tomar

$$v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - (k + k_{num}) \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (2.211)$$

Este esquema no presenta más inestabilidades y para $Pe \gg 1$ se aproxima al “*Upwindado*” pero para Pe pequeños sigue agregando difusión, incluso para $Pe_{\Delta x} < 1$ cuando sabemos que el esquema es estable, resultando en un esquema demasiado difusivo. Entonces surge la idea de tratar de reducir la difusión numérica para valores de $Pe_{\Delta x}$ pequeños. Notemos que (2.210) puede reescribirse como

$$k_{num} = \frac{|v|\Delta x}{2} = k|Pe_{\Delta x}| = kPe_{\Delta x} f(Pe_{\Delta x}) = \frac{v\Delta x}{2} f(Pe_{\Delta x}) \quad (2.212)$$

con

$$f(x) = \text{sign}(x) \quad (2.213)$$

de manera que podríamos reemplazar la “*función de upwinding*” $\text{sign}()$ por otra que anule la difusión numérica para $|Pe_{\Delta x}| \leq 1$, por ejemplo podemos usar

$$k_{num} = \frac{v\Delta x}{2} f_1(Pe_{\Delta x}) \quad (2.214)$$

con

$$f_1(x) = \begin{cases} \text{sign}(x) & ; \text{ si } |x| > 1 \\ 0 & ; \text{ si } |x| \leq 1 \end{cases} \quad (2.215)$$

o también, para hacerlo más continuo

$$f_2(x) = \begin{cases} \text{sign}(x) & ; \text{ si } |x| > 1 \\ x & ; \text{ si } |x| \leq 1 \end{cases} \quad (2.216)$$

Puede demostrarse que, si elegimos $f(x)$, como la siguiente “*función mágica*”

$$f_3(x) = \alpha(x) = \frac{1}{\tanh(x)} - \frac{1}{x} \quad (2.217)$$

entonces, en este caso simple se obtiene la solución exacta (2.196) (de ahí el nombre de función mágica). Sin embargo, esto sólo vale mientras el problema sea 1D, con coeficientes constantes, paso de la malla constante y sin término fuente. De todas formas es una función de upwinding interesante, ya que en forma muy suave satisface todos los límites necesarios.

Como $\frac{d\alpha}{dx}\Big|_{x=0} = 1/3$ otra función comúnmente utilizada es

$$f_4(x) = \begin{cases} x/3 & ; |x| < 3 \\ \text{sign}(x) & ; |x| > 3 \end{cases} \quad (2.218)$$

2.7.5. El caso 2D

El primer intento por extender el esquema upwindado a 2D (o 3D) es agregar una viscosidad numérica según cada una de las direcciones principales de la malla. Sea un dominio rectangular $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$, dividido en N_x , N_y intervalos de longitud $\Delta x = L_x/N_x$, $\Delta y = L_y/N_y$. Los puntos de la malla están ubicados en $x_{jk} = ((j - 1)\Delta x, (k - 1)\Delta y)$ y sea $\phi(x_{jk}) \approx \phi_{j,k}$. Además, consideremos $\mathbf{v} = (v_x, v_y) = \text{cte}$,

$$v_x \frac{\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k}}{2\Delta x} + v_y \frac{\phi_{j,k+1} - \phi_{j,k-1}}{2\Delta y} - (k + k_{num}^x) \frac{\phi_{j+1,k} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j-1,k}}{\Delta x^2} - (k + k_{num}^y) \frac{\phi_{j,k+1} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j,k-1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (2.219)$$

donde

$$\begin{aligned} k_{num}^x &= \frac{v_x \Delta x}{2} f(Pe_x) \\ k_{num}^y &= \frac{v_y \Delta y}{2} f(Pe_y) \end{aligned} \quad (2.220)$$

Este esquema resulta ser estable. Si el flujo está alineado con la malla, es decir $v_x = 0$ o $v_y = 0$, entonces el esquema reproduce exactamente sus virtudes en el caso 1D. En general la viscosidad numérica es “anisotrópica”, por ejemplo, si $\mathbf{v} = (v, 0)$ entonces

$$\begin{aligned} k_{num}^x &= \frac{v \Delta x}{2} f(Pe_x) \\ k_{num}^y &= 0 \end{aligned} \quad (2.221)$$

o, en forma tensorial

$$\mathbf{k}_{num} = \begin{bmatrix} k_{num}^x & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.222)$$

y, en general, \mathbf{k}_{num} es un tensor anisotrópico, con ejes principales a lo largo de los ejes principales de la malla.

Si consideramos una velocidad cruzada con la malla, entonces el esquema resulta ser demasiado dissipativo. Por ejemplo, consideremos $\mathbf{v} = v(1, 1)/\sqrt{2}$, y $\Delta x = \Delta y = h$. Entonces

$$k_{num}^x = k_{num}^y = k_{num} = \frac{v \Delta x}{2} f(Pe_x) \quad (2.223)$$

es decir que el tensor de difusión numérica es escalar

$$\mathbf{k}_{num} = \begin{bmatrix} k_{num} & 0 \\ 0 & k_{num} \end{bmatrix} = k_{num} \mathbf{I}_{2 \times 2} \quad (2.224)$$

donde $\mathbf{I}_{2 \times 2}$ es el tensor identidad de 2 por 2. Ahora bien, si consideramos un sistema de coordenadas alineado con la velocidad, es decir $x' \parallel \mathbf{v}$ e $y' \perp \mathbf{v}$, entonces el tensor difusividad numérica sigue siendo

$$\mathbf{k}'_{num} = \begin{bmatrix} k_{num} & 0 \\ 0 & k_{num} \end{bmatrix} = k_{num} \mathbf{I}_{2 \times 2} \quad (2.225)$$

mientras que lo deseable sería tener una difusividad según x' pero no según y'

$$\mathbf{k}'_{num} = \begin{bmatrix} k'^x_{num} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.226)$$

con

$$k'_{num}^{tx} = \frac{vh_s}{2} f(Pe_s) \quad (2.227)$$

donde el subíndice s indica valores según la línea de corriente, así por ejemplo

$$\begin{aligned} h_s &= \sqrt{2}h \\ Pe_s &= \frac{vh_s}{2k} \end{aligned} \quad (2.228)$$

Antittransformando el tensor (2.226) a los ejes $x - y$ obtenemos

$$k_{ij} = \frac{vh_s}{2} s_i s_j f(Pe_s) \quad (2.229)$$

donde $\hat{s} = \mathbf{v}/v$ es el versor según la línea de corriente.

Finalmente el esquema es

$$\begin{aligned} v_x \frac{\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k}}{2h} + v_y \frac{\phi_{j,k+1} - \phi_{j,k-1}}{2h} - \\ - (k + k_{num,xx}) \frac{\phi_{j+1,k} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j-1,k}}{h^2} \\ - (k + k_{num,yy}) \frac{\phi_{j,k+1} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j,k-1}}{h^2} \\ - 2k_{num,xy} \frac{\phi_{j+1,k+1} - \phi_{j+1,k-1} - \phi_{j-1,k+1} + \phi_{j-1,k-1}}{4h^2} = 0. \end{aligned} \quad (2.230)$$

Para el caso $\Delta x \neq \Delta y$ tenemos

$$\begin{aligned} v_x \frac{\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k}}{2\Delta x} + v_y \frac{\phi_{j,k+1} - \phi_{j,k-1}}{2\Delta y} - \\ - (k + k_{num,xx}) \frac{\phi_{j+1,k} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j-1,k}}{\Delta x^2} \\ - (k + k_{num,yy}) \frac{\phi_{j,k+1} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j,k-1}}{\Delta y^2} \\ - 2k_{num,xy} \frac{\phi_{j+1,k+1} - \phi_{j+1,k-1} - \phi_{j-1,k+1} + \phi_{j-1,k-1}}{4\Delta x \Delta y} = 0. \end{aligned} \quad (2.231)$$

Notar la expresión en diferencias de la última fila que es una aproximación $O(\Delta x \Delta y)$ para $(\partial^2 \phi / \partial x \partial y)$.

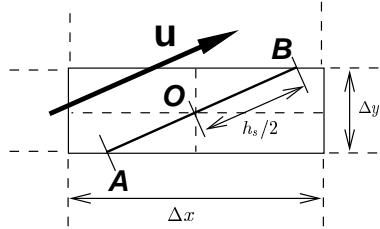


Figura 2.26: Definición del tamaño de la celda según la línea de corriente

Falta definir la expresión general para h_s en función del ángulo que forma \mathbf{v} con la malla. Existen varias propuestas para esto, no siendo ninguna de ellas totalmente satisfactoria. La más simple podría ser tomar alguna media de los parámetros de la malla $h = (\Delta x + \Delta y)/2$ o $h = \sqrt{\Delta x \Delta y}$. Notar que en realidad estas definiciones no son "según la línea de corriente". Consecuentemente, es de esperarse que puedan ser muy sobre- o sub-difusivas en ciertos casos. Una posibilidad mejor es tomar la mayor distancia dentro de la celda a lo largo de una dirección paralela a \mathbf{v} como el segmento AB en la figura 2.26. La expresión resulta ser

$$h_s = \min_j \frac{\Delta x_j}{|s_j|} \quad (2.232)$$

2.7.6. Resolución de las ecuaciones temporales en el caso con advección

Hasta ahora vimos como discretizar las ecuaciones espacialmente para obtener un estado estacionario y como tratar el caso transitorio sin advección. Consideremos ahora un problema no estacionario donde incluimos también el término advectivo. Como hicimos antes la idea es primero discretizar solo en el espacio, tal cual como se ha hecho hasta ahora y mostrar que este proceso, denominado semi-discretización produce un sistema de ODEs en lugar de un sistema de ecuaciones algebraicas. O sea, el hecho de que las derivadas espaciales se transformen en stenciles algebraicos, lineales o no lineales dependiendo del problema de partida, nos deja un operador en derivada aún remanente, el de la derivada temporal. Por ejemplo consideremos la ecuación de advección-reacción-difusión lineal 1D,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v \frac{\partial \phi}{\partial x} = k \Delta \phi - c \phi + Q \quad (2.233)$$

entonces un esquema estabilizado posible sería

$$\dot{\phi}_j + v \frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} - (k + k_{num}) \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} + c\phi_j = Q_j \quad (2.234)$$

o sino su equivalente

$$\dot{\phi}_j + v \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{\Delta x} - k \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} + c\phi_j = Q_j \quad (2.235)$$

que habíamos visto que evitaba la aparición de inestabilidades espaciales producidas por un alto número de Peclet.

En las dos expresiones anteriores $\dot{\phi}$ significa la derivada temporal de ϕ . Estas ecuaciones representan un “sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias” (ODE’s) acoplado

$$\dot{\phi} + \mathbf{K}\phi = \mathbf{f}. \quad (2.236)$$

que en el caso estacionario deviene en el mismo sistema algebraico a resolver que ya hemos presentado antes. A este sistema se le puede aplicar una serie de esquemas de integración temporal, producidos por las definiciones que nos provee el método de Diferencias Finitas en este caso para una derivada temporal, por ejemplo :

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \mathbf{K}\phi^n &= \mathbf{f}^n, \text{ forward Euler} \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \mathbf{K}\phi^{n+1} &= \mathbf{f}^{n+1}, \text{ backward Euler} \\ \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \mathbf{K} \frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} &= \mathbf{f}^{n+1/2}, \text{ Crank Nicholson} \end{aligned} \quad (2.237)$$

Donde $\phi(t^n) \approx \phi^n$, $t^n = n\Delta t$.

El método de forward Euler permite avanzar un paso de tiempo con un costo en tiempo de procesamiento y memoria de almacenamiento muy bajos, ya que no necesita resolver ningún sistema lineal, son todas operaciones producto matriz vector que hacen el cálculo verdaderamente muy económico. Por el contrario, en los otros dos casos sí se necesita resolver un sistema. Si el problema es lineal, entonces podemos notar que la matriz del sistema \mathbf{K} es constante (no varía con el tiempo) de manera que podemos factorizarla una vez y posteriormente hacer solamente una retro-sustitución. De todas formas el tiempo y memoria necesarios para avanzar un paso de tiempo en el backward Euler es mucho mayor que para el forward. Como no podría ser de otro modo, toda ventaja siempre trae aparejada una desventaja. Cuál es ? El método forward Euler tiene la limitación de que, para pasos de tiempo grandes la solución se hace inestable y diverge. El paso de tiempo crítico viene dado por

$$\Delta t_{cr} < \min\left(\frac{h}{v}, \frac{h^2}{4k}\right). \quad (2.238)$$

Notar que estos criterios pueden ponerse como

$$Co = \frac{v\Delta t}{h} < 1, \quad Fo = \frac{k\Delta t}{4h^2} < 1 \quad (2.239)$$

donde Co , Fo son los números adimensionales de Courant y Fourier que representan la relación entre los mecanismos de transporte por advección y por difusión tanto físicos como numéricos. Por ejemplo, en el número de Courant, v es la velocidad física del problema, mientras que el cociente $\frac{h}{\Delta t}$ nos marca con qué velocidad la grilla es capaz de transmitir esa información. Cuando la malla no es capaz de seguir el ritmo de la física, el método se inestabiliza y diverge. Quiere decir que no puedo agrandar el paso de tiempo sin tener en cuenta la resolución espacial de la grilla para poder seguirle el ritmo al proceso físico. Lo mismo sucede con la difusión, con la salvedad que en este último caso la situación es peor porque mientras que en el Courant la relación entre paso de tiempo y paso espacial de malla es lineal en el caso difusivo es cuadrático, lo cual obliga a refinar el paso de tiempo mucho más si la grilla se refinara por cuestiones obvias de resolución de la solución (precisión). Todo estos comentarios se basan en un análisis lineal que se puede hacer de las ecuaciones usando análisis numérico, en particular mediante análisis de Fourier. En conclusión, los métodos más económicos resultan inestables y los estables más costosos, motivo por el cual la selección depende del problema y no hay una recomendación que valga en todos los casos. Si es cierto que con el advenimiento de una gran potencia de cálculo como la que hay hoy, los métodos puramente explícitos pocas veces resultan competitivos.

Capítulo 3

METODO DE VOLUMENES FINITOS (FVM)

3.1. Método de los Volúmenes Finitos - Conceptos Básicos

3.1.1. Sus fundamentos a partir del MRP

Continuando con la presentación de los diferentes métodos numéricos que se proponen en el curso a continuación presentamos el método de los volúmenes finitos. Este método, así como otros surgen de una teoría de métodos más general, conocida como método de los residuos ponderados donde a diferencia del método de finitas donde uno busca una solución que satisfaga la ecuación en los puntos de la grilla o puntos de muestreo, en estos métodos se busca una solución que en promedio satisfaga la ecuación diferencial de partida. Como muchos promedios estos se basan en métodos integrales y su definición genérica para ecuaciones típicas de conservación se presenta como:

$$\int_{\Omega} \mathbf{W} \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} - \mathbf{Q} \right)}_{\mathcal{R}} d\Omega = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

$$\int_{\Omega} \mathbf{W} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{W} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{W} \mathbf{Q} \quad (3.2)$$

donde \mathcal{R} es el residuo de la ecuación o del sistema de ecuaciones a resolver, planteado en forma continua, \mathbf{W} es la función de peso y al estar todo bajo una integral que ocupa todo el dominio del problema le da el nombre genérico al método, como *método de los residuos ponderados*.

La interpretación de estos métodos es que uno al elegir la función de peso a usar determina qué método esta definiendo. Veremos los tres casos tratados en el curso corresponden a tres elecciones diferentes de la función de peso.

El método de las diferencias finitas equivale a usar como función de peso la colocación puntual. Estos métodos se basan en pesar el integrando con una delta de Dirac, entonces, al reemplazar nos queda:

$$\int_{\Omega} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} - \mathbf{Q} \right)}_{\mathcal{R}} d\Omega = \mathbf{0} \quad (3.3)$$

$$\mathcal{R}_i = \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} - \mathbf{Q} \right)_i = \mathbf{0} \quad (3.4)$$

es decir, la ecuación integral se convierte en una diferencial o lo que es lo mismo, se anula el residuo en cada punto i de la grilla. En la siguiente figura vemos como luce una colocación puntual.

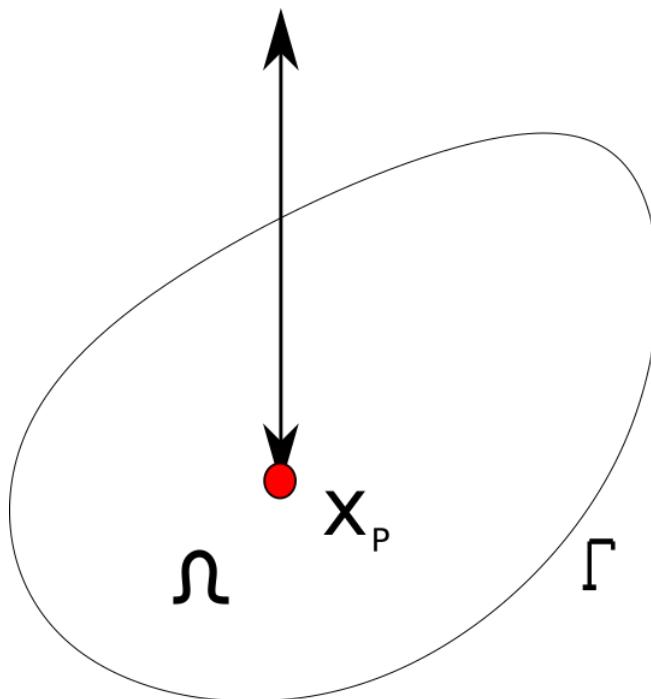


Figura 3.1: Interpretación geométrica de las diferentes aproximaciones por diferencias finitas a la derivada.

Los otros dos casos más conocidos son el de los volúmenes finitos y el de los elementos finitos. En el primero de ellos, en el de volúmenes finitos, la función de peso que se adopta es una colocación por subdominios. A diferencia de la anterior donde la delta es puntual o se aplica en un punto del dominio (nodo de la grilla), en este caso se adopta una función característica que es unitaria sobre una porción del dominio, normalmente una de sus celdas y cero en el resto del dominio. En la siguiente figura mostramos como luce esta colocación en un subdominio.

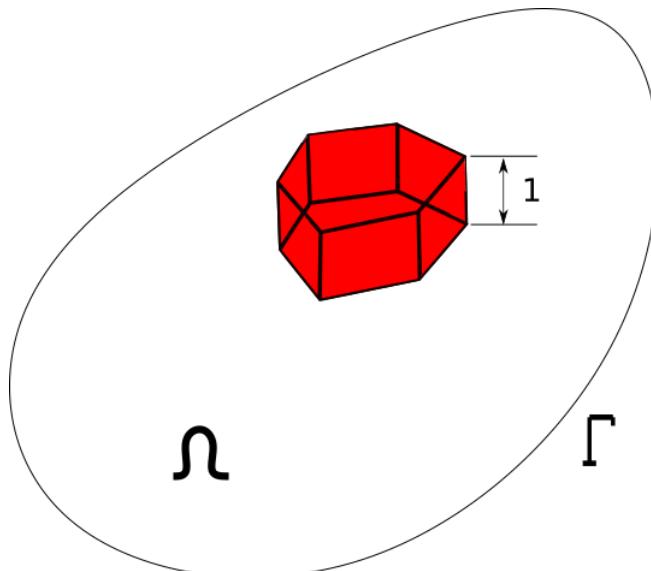


Figura 3.2: Interpretación geométrica de las diferentes aproximaciones por diferencias finitas a la derivada.

El método de los residuos ponderados (MRP) tienen la particularidad de que si la función de peso es derivable pueden permitir descargar algún orden de derivación del residuo y de esta forma reducir la complejidad del problema como ya veremos cuando analicemos el método de los elementos finitos. Esto no sucede para los casos de colocación puntual ni por subdominios porque estas funciones de peso no permiten derivarse dado que no son continuas. En esos casos el abordaje es otro. En el caso de diferencias finitas vimos que el peso tiene la particularidad de que produce la extracción del residuo en cada nodo de la grilla como vimos en 3.1

Si a cada porción j del dominio le asignamos un subdominio Ω_j y si tomamos una función de peso definida como:

$$\begin{aligned} W_j(\mathbf{x}) &= 0 & \mathbf{x} \notin \Omega_j \\ W_j(\mathbf{x}) &= 1 & \mathbf{x} \in \Omega_j \end{aligned} \quad (3.5)$$

que aplicada a (3.1) nos da:

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \quad (3.6)$$

que equivale a la misma ley de conservación aplicada a cada subdominio. La idea detrás del FVM es discretizar cada integral siendo esta la principal diferencia del método respecto al de diferencias finitas que nos lleva el problema a una formulación diferencial. A esta altura conviene decir que si bien el subdominio puede ser arbitrario y genérico, para hacer el problema tratable informáticamente este subdominio debe estar vinculado a una incógnita del problema, motivo por el cual se lo suele asociar directamente a una celda o volúmen de la grilla, versión discreta del dominio. En la figura 3.2 el subdominio marcado en rojo coincidiría con una celda de la malla y sobre el debemos identificar una incógnita, por ejemplo, la variable a resolver o variable dependiente ϕ en el centroide de la celda.

No hay una única forma de discretizar el problema, en la siguiente figura vemos una misma porción del dominio dividida de la misma manera, la misma malla, pero a izquierda vemos que los subdominios se eligen coincidentes con cada celda como en 3.2 y se las denomina *centrada en las celdas* mientras que a derecha vemos una elección denominada *centrada en los vértices* o nodos de la malla. Ambas son posibles y nosotros para enfocarnos más en lo central de la metodología seleccionamos de aquí en adelante la primera opción, la centrada en las celdas.

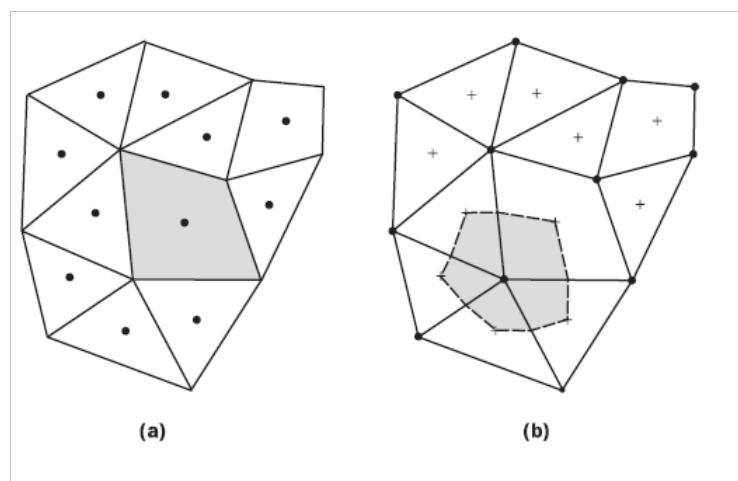


Figura 3.3: Construcción de volúmenes de control en 2D sobre mallas no estructuradas: (a) cell-centred control volumes; (b) vertex-based control volumes

Si observamos la expresión 3.6 vemos que esta consta de 3 integrales, la que tiene en cuenta la tasa de cambio, la primera, la segunda tiene la divergencia de los flujos y la tercera el aporte de las fuentes

o sumideros. Como es sabido el teorema de la divergencia nos provee una forma de pasar una integral de volúmen que posea como integrando la divergencia de un campo vectorial o tensorial a una integral de superficie de ese campo proyectado en la normal al contorno. El concepto detrás de ese concepto matemático es que si integro una derivada recupero la propia función evaluada en los límites, como lo explica el teorema fundamental del cálculo, solo que al ser el problema multidimensional evaluar la función en los límites significa proyectarla en su normal. Si el campo en cuestión es un vector, entonces la proyección de ese vector en la normal nos dice cuanto de esa cantidad entra y sale, es decir, nos da el flujo neto.

Si ese campo vectorial fuera el vector flujo de calor por ejemplo, es decir

$$\mathbf{F} = -k \nabla T$$

entonces

$$\int_{\Omega_j} \nabla \cdot \mathbf{F} d\Omega = \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} \quad (3.7)$$

lo cual representa cuánto flujo de calor por conducción entra al dominio descontando cuánto sale del mismo, es decir el flujo neto de energía.

Entonces, aplicando lo anterior a (3.6) arribamos a la siguiente forma del MRP con colocación por subdominio,

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} d\Omega + \oint_{\Gamma_j} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = \int_{\Omega_j} \mathbf{Q} d\Omega \quad (3.8)$$

(3.8) es la ecuación básica del FVM que tiene como una de sus principales ventajas la de trabajar con el término de los flujos sobre el contorno del dominio, con lo cual si el costo computacional es dominado por esta operación la reducción del mismo puede ser notable. A partir de (3.8) se necesita discretizar las integrales de alguna forma y lograr el sistema discreto final a resolver. Ya que el método es planteado sobre la forma integral de las leyes de conservación es de notar que al satisfacer las mismas sobre cada subdominio implica satisfacerlas sobre el dominio global en el caso del continuo. El desafío esta en mantener esta propiedad al caso discreto.

3.1.2. Aplicación al transporte de un escalar pasivo

Como ya hemos presentado en el caso de diferencias finitas vamos a trabajar sobre un problema similar. Sea $\phi(x, y, z)$ una magnitud escalar, Ω un dominio en \mathcal{R}^3 y Γ su frontera, podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma diferencial como:

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot \vec{f}^{adv}}_{\text{convectivo}} + \underbrace{c\phi}_{\text{reactivo}} = \underbrace{\nabla \cdot \vec{f}^{dif}}_{\text{difusivo}} + \underbrace{q}_{\text{fuente}}. \quad (3.9)$$

Las características de la misma la podemos resumir de la siguiente manera:

- Ecuación en general lineal
- No estacionaria
- Término convectivo dependiente del movimiento del medio material $\vec{f}^{adv} = \vec{v}\phi$

- Término reactivo $c\phi$, puede asumirse como proveniente de una linealización de la ley de Arrhenius que rige mucho de los mecanismos del calor de las reacciones químicas.
- Término difusivo, mecanismo de transporte a escala molecular, $\vec{f}^{dif} = \alpha \nabla \phi$ donde $\alpha = \frac{\kappa}{\rho C_p}$ representa la difusividad térmica calculada a partir de la conductividad κ , la densidad ρ y el calor específico C_p .
- Término fuente q

A modo de ejemplo, tal como fue establecido en el primer Capítulo, analizamos el mecanismo de enfriamiento de un microprocesador de una PC, SOLO QUE AHORA VAMOS A CONCENTRARNOS NO EN EL MATERIAL DEL MICRO SINO EN EL AIRE QUE LO RODEA

- ¿Que sucede si se descompone el ventilador que lo refrigerara?
- ¿Que término de los anteriores representa el ventilador?
- ¿Cual es físicamente la fuente?
- Explique cual es el mecanismo de difusión involucrado.

3.1.2.1. ¿Cómo surge el método de Volúmenes Finitos?

- **Planteamiento Intuitivo**

El método de los volúmenes finitos los podemos plantear en una forma intuitiva o de manera formal a través del Método de Residuos Ponderados (MRP). Con una visión intuitiva queremos significar que si tomamos la ecuación que representa la conservación de la cantidad intensiva ϕ , a través de la ecuación escalar y lineal 3.9, y si se la aplicamos a un problema definido en la termodinámica a través de un sistema (que es lo queremos resolver) y un entorno o medio ambiente (que no se resuelve pero que afecta al sistema a calcular), dicha ecuación 3.9 tendrá vigencia tanto si tomo como dominio de calculo el sistema como un todo, como si tomo una porción del mismo o si se lo aplico punto a punto.

Tomando la ecuación diferencial anterior e integrándola en todo el dominio arribamos a un balance integral, si a la misma le aplicamos el teorema de Gauss-Green a los términos que poseen divergencia de flujos estos generan en lugar de integrales de volumen, integrales de superficie como se ve en la siguiente ecuación:

- **Visión macroscópica global del problema**

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} Q d\Omega. \\ \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right) d\Omega + \int_{\Gamma} \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) \cdot d\vec{\Gamma} = 0 \quad (3.10)$$

donde las integrales de volumen son reunidas en el primer termino y las de superficie en el segundo lo cual tiene la siguiente interpretación:

Todo lo que se acumula o se pierde de la cantidad intensiva ϕ descontado las fuentes o sumideros de esa cantidad presentes en el dominio de calculo debe estar en correspondencia con los flujos que atraviesan el contorno de dicho dominio

Esto normalmente se lo conoce como **visión macroscópica global del problema**, visión que ha sido utilizada en la ingeniería durante muchos años cuando no existía el desarrollo informático en términos de hardware, software y métodos numéricos que hoy existe. De esta forma los ingenieros han diseñado, calculado y construido muchas de las estructuras, puentes, obras civiles, mecánica, aeronáuticas, etc. que hoy tenemos a disposición.

La figura pretende mostrar un dispositivo que intercambia calor, por el cual un fluido ingresa por el borde *IN* con una temperatura T_{in} y sale por un borde denominado *OUT* con una temperatura T_{out} . Por las paredes del problema podrían plantearse distintos tipos de situaciones, supongamos para simplificar que estas paredes están aisladas, es decir, no hay intercambio de calor. En el codo hay una zona donde se produce un aporte de calor externo que podría caracterizarse por una energía por unidad de tiempo y de volúmen. Entonces, a la visión macroscópica global solo le interesa tomar un recinto como el marcado en linea punteada e identificar los flujos que hay a través de sus contornos, en este caso solo el *IN* y el *OUT* y balancear la energía que entra/sale por ellos con la energía que aporta la fuente externa y eventualmente determinar si el fluido se irá calentando, enfriando o permanecerá en equilibrio.

Sería equivalente a tomar el volúmen del dispositivo como un todo, sin importar lo que sucede dentro del mismo punto a punto, solo ver su evolución temporal.

Suponiendo que el flujo sea mayormente por advección, es decir $\mathbf{F} = \rho C_p \mathbf{v} T$ y que queremos conocer la situación estacionaria del problema y que el fluido sea agua ($\rho = 1 \frac{\text{kg}}{\text{litr}} , C_p = 4,186 \frac{\text{Joules}}{\text{gK}}$) y que el aporte energético sea de 10000 Watts repartido en un volúmen de 1m^3 y el caño tenga a la entrada una sección del doble que a la salida con un caudal de 100 litros/minuto.

Para hacer las cuentas hay que tener presente qué es lo que se quiere calcular y cómo se lo hará. La primera pregunta se responde diciendo que con los datos que nos dan solo podemos calcular cual será el incremento de temperatura entre la entrada y la salida ya que no nos dan la temperatura a la entrada, dato necesario si queríramos calcular la temperatura a la salida. Cómo ?, aplicando la expresión 3.10 teniendo en cuenta que muchos términos se anulan, quedando solo

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} &= \int_{\Omega} Q \, d\Omega \\ \int_{\Gamma} \rho C_p \vec{v} T \cdot d\vec{\Gamma} &= \int_{\Omega} Q \, d\Omega \\ (\rho C_p v T |\Gamma|)_{\text{OUT}} - (\rho C_p v T |\Gamma|)_{\text{IN}} &= \int_{\Omega} Q \, d\Omega \\ (\dot{m} C_p T)_{\text{OUT}} - (\dot{m} C_p v T)_{\text{IN}} &= \int_{\Omega} Q \, d\Omega \end{aligned} \quad (3.11)$$

siendo $\dot{m} = \rho v |\Gamma|$ el caudal máscico

$$\begin{aligned} \dot{m} C_p (T_{\text{OUT}} - T_{\text{IN}}) &= \dot{m} C_p \Delta T = \int_{\Omega} Q \, d\Omega = 10000 \text{ Watts} \\ \therefore \Delta T &= \frac{10000 \text{ Watts}}{1000 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} (0,1/60) \frac{\text{m}^3}{\text{seg}} 4186 \frac{\text{Joules}}{\text{KgK}}} = 1,43K \end{aligned}$$

Partiendo de esto el FVM pretende aportar mayor detalle al ingeniero a través de una versión discretizada de todo el dispositivo con el fin de conocer lo que sucede en forma macroscópica local, es decir, saber no solo cual será el incremento global de temperatura sino como se va a distribuir espacialmente ese incremento. Habrá zonas mas calentadas que otras ? Se llegará a situaciones límites que impliquen revisar los diseños ? Estas y otras preguntas pueden responderse con un análisis un tanto pormenorizado del problema como lo posibilita la mecánica computacional.

Antes de presentar la forma intuitiva debemos discretizar las variables independientes, o al menos la parte correspondiente con las coordenadas espaciales. Para ello recurrimos a un generador de mallas lo cual consiste en tomar la geometría de todo el dominio de calculo y dividirla en porciones denominadas celdas o volúmenes finitos que cubrirán todo el dominio de calculo.

- **Discretización de las variables independientes - Generación de la malla - Celda o Volumen**

de Control (CV)**• Visión macroscópica local**

el balance se satisface tanto para Ω como para una parte de Ω , en particular para Ω_j

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} q d\Omega. \quad (3.12)$$

• Del balance local al global

$$\sum_{j=1}^m \left[\int_{\Omega_j} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{adv} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega \right] = \int_{\Gamma_j} \vec{f}^{dif} \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega_j} q d\Omega. \quad (3.13)$$

• Mediante el Método de los Residuos Ponderados

Por otro lado, si lo analizamos por este método:

$$\int_{\Omega} w \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} w \nabla \cdot \vec{f}^{adv} d\Omega + \int_{\Omega} w c\phi d\Omega = \int_{\Omega} w \nabla \cdot \vec{f}^{dif} d\Omega + \int_{\Omega} w q d\Omega. \quad (3.14)$$

$$\sum_{j=1}^m \left[\int_{\Omega_j} w \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Omega_j} w \left(\nabla \cdot \vec{f}^{adv} - \nabla \cdot \vec{f}^{dif} \right) d\Omega \right] = 0 \quad (3.15)$$

y usando como función de ponderación una función característica (colocación por subdominios), definida por:

$$\begin{aligned} w_j(\vec{x}) &= 0 & \vec{x} \notin \Omega_j \\ w_j(\vec{x}) &= 1 & \vec{x} \in \Omega_j \end{aligned} \quad (3.16)$$

que aplicada a 3.15 nos da:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Omega_j} \nabla \cdot \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) d\Omega &= 0 \\ \int_{\Omega_j} \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - q \right) d\Omega + \int_{\Gamma_j} \left(\vec{f}^{adv} - \vec{f}^{dif} \right) \cdot d\vec{\Gamma} &= 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

- es decir, podemos ir de lo global a lo local y volver a lo global sin perder propiedades de conservación lo cual garantiza que en el proceso todos sus pasos son conservativos.

3.1.2.2. Forma discreta de las ecuaciones de conservación escalar

Habiendo definido la visión macroscópica local lo cual nos permite conocer punto a punto los detalles del problema de conservación a resolver expresado como una ecuación diferencial parcial (PDE), presentaremos ahora el problema con el fin de llegar a un sistema discreto y algebraico de ecuaciones que luego resolveremos para obtener la solución discreta.

Sea $\phi(x, y, z)$ una magnitud escalar, Ω un dominio en \mathcal{R}^3 y Γ su frontera, podemos escribir una ecuación de conservación de esta cantidad en forma integral como

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega + \int_{\Gamma} \vec{v}\phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} c\phi d\Omega = \int_{\Gamma} \kappa \nabla \phi \cdot d\vec{\Gamma} + \int_{\Omega} Q d\Omega. \quad (3.18)$$

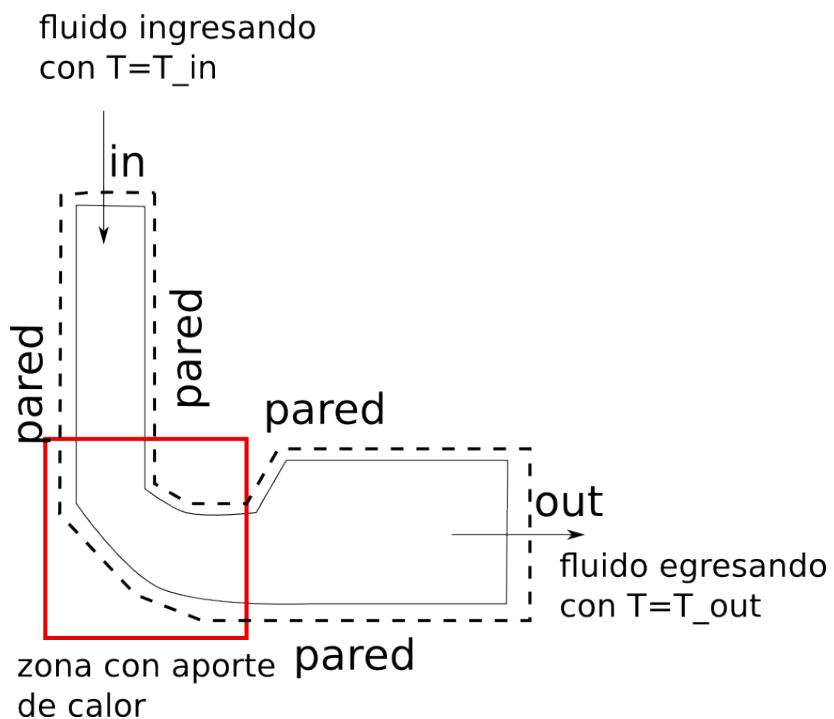


Figura 3.4: Visión macroscópica global del problema

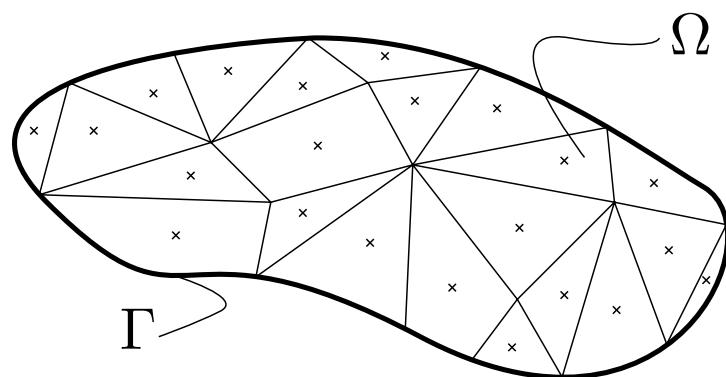


Figura 3.5: Dominio discretizado.

El primero de los términos representa la variación de ϕ en el tiempo, el segundo el flujo a través de Γ debido al campo de velocidades, el tercero la producción o destrucción de ϕ debido a reacciones, el cuarto el flujo debido a la difusión y finalmente el quinto la fuente. Reordenando los términos podemos ver que

$$\int_{\Omega} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega = \int_{\Gamma} [\kappa \nabla \phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma}, \quad (3.19)$$

de donde se ve que el desbalance de ϕ en el interior de Ω es simplemente lo que atraviesa la frontera Γ .

Dividiremos ahora el dominio Ω en m elementos cuyos volúmenes no se solapan, tal como en la Figura (3.5).

Reescribiendo (3.19) como suma parcial de los volúmenes que constituyen a Ω se tiene

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \int_{\Gamma_j} [\kappa \nabla \phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma} = 0. \quad (3.20)$$

Para el caso de las integrales volumétricas, la interpretación es directa, no así para las de superficie. En este caso se debe tener en cuenta que las caras de los volúmenes que no coinciden con la frontera del dominio son incluidas en las integrales de sus vecinos, es así como los flujos en estas caras se anulan. Finalmente (3.20) se reduce a (3.19).

Podemos avanzar en el análisis si consideramos que los volúmenes correspondientes a la discretización son poliedros, es decir, volúmenes facetados con una cantidad finita n de caras. Tenemos entonces que (3.20) puede reescribirse como

$$\sum_{j=1}^m \int_{\Omega_j} \left[\frac{\partial \phi}{\partial t} + c\phi - Q \right] d\Omega - \left\{ \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} [\kappa \nabla \phi - \vec{v}\phi] \cdot d\vec{\Gamma}_i \right\}_j = 0. \quad (3.21)$$

Si se consideran los valores de ϕ constantes por celda y por cara se pueden realizar las siguientes aproximaciones

$$\int_{\Omega_j} \phi d\Omega_j = \bar{\phi} V_j \quad (3.22)$$

$$\int_{\Gamma_i} \phi d\vec{\Gamma}_i = \bar{\phi} \vec{S}_{f_i} \quad (3.23)$$

con lo cual (eliminando las barras en pos de la claridad de la exposición) se tiene que

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial t} + c\phi_j - Q \right) V_j - \left\{ \sum_{i=1}^n (\kappa \nabla \phi - \vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = 0, \quad (3.24)$$

siendo ésta la expresión discretizada, espacialmente, de una ecuación de conservación para una magnitud escalar. Desde ya es necesario definir la manera de expresar los operadores diferenciales en tiempo y espacio, así como los valores de ϕ en las caras a partir de los valores de ϕ en los centros de los volúmenes, estos últimos las incógnitas de la formulación.

3.1.3. Método de Volúmenes Finitos en 1D

3.1.3.1. Difusión estacionaria en 1D

Sea un problema de difusión estacionaria 1D con condiciones de borde Dirichlet homogéneas en ambos extremos, tal como se ilustra en la Figura (3.6), dividimos el problema en N segmentos y

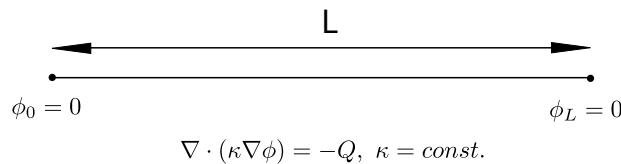


Figura 3.6: Problema de difusión estacionaria.

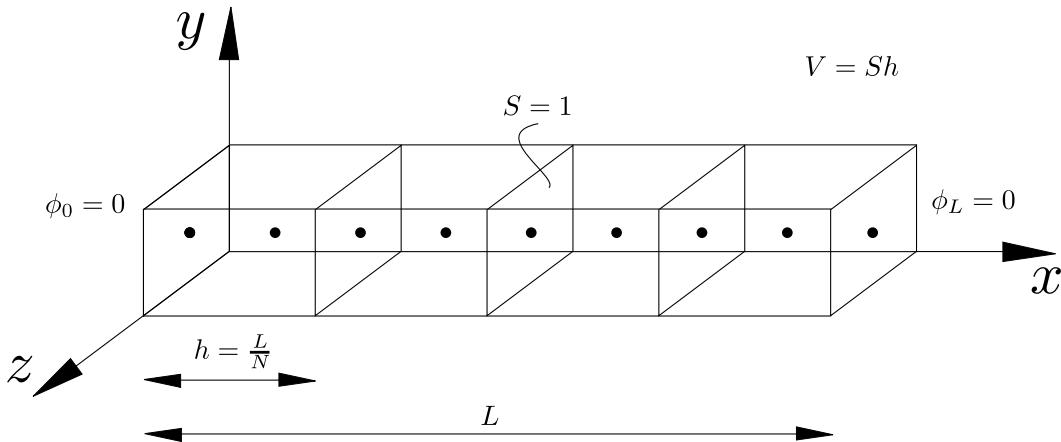


Figura 3.7: Discretización para el problema de la Figura (3.6).

representamos el dominio como si fuera tridimensional pero cuya área transversal resulta unitaria. Esto se muestra en la Figura (3.7).

Aplicando (3.24) al dominio de la Figura (3.7) y, en particular, a un volumen j , se tiene que

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\kappa \nabla \phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j = -Q_j V_j, \quad (3.25)$$

la cual suele escribirse en forma abreviada como

$$\left\{ \sum_f (\kappa \nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -Q V_j. \quad (3.26)$$

Sea ahora el volumen el que se desea analizar, se hace necesario pues definir los vectores \vec{S}_f , los cuales son normales a la cara y en magnitud igual a su área. Como convención se suele considerar que cada celda es propietaria de una cierta cantidad de caras que lo conforman. Es así como, entonces, para una cara dada, de un lado se encuentra su volumen propietario y del otro su vecino (Owner Cell and Neighbour Cell).

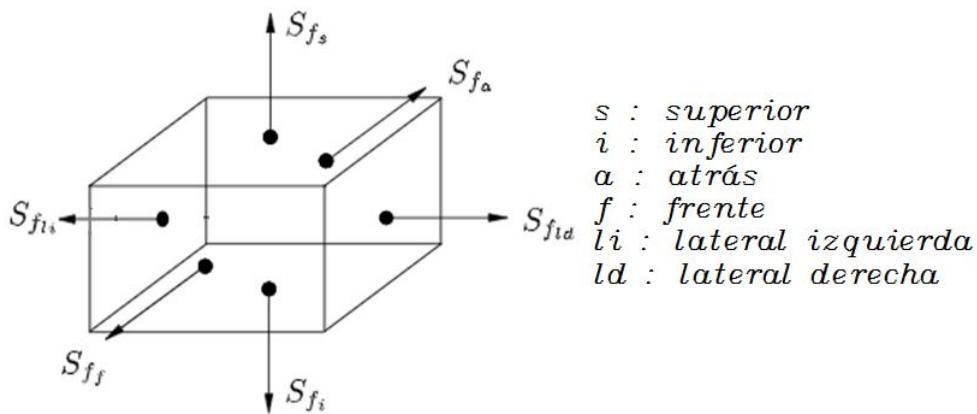
Las normales apuntarán siempre desde la celda propietaria en dirección a su vecina. Así pues aislando el volumen 2 se tendrá lo indicado en la Figura (3.7). Recordando la definición adoptada, se ve cada volumen que es propietario de todas sus caras a excepción de la izquierda.

Para el cálculo del gradiente utilizamos una aproximación centrada, considerando que la variación de ϕ es lineal entre dos centros (centroides) de volumen, tal y como es esquematizado en la Figura (3.9).

Si se considera la dirección del gradiente se tendrá entonces

$$(\nabla \phi)_f = \left(\frac{\phi_N - \phi_P}{h}; 0; 0 \right). \quad (3.27)$$

Dado que (3.26) requiere el producto escalar $(\nabla \phi) \cdot \vec{S}_f$ se puede ver que éste sólo será no nulo en aquellas caras no ortogonales a $\hat{i} = (1; 0; 0)$, es decir, a izquierda y derecha de cada volumen. Se tiene



$$S_{f_{li}} = S_{f_{ld}} = (S; 0; 0), S_{f_s} = -S_{f_i} = (0; S; 0), S_{f_f} = -S_{f_a} = (0; 0; S)$$

Figura 3.8: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

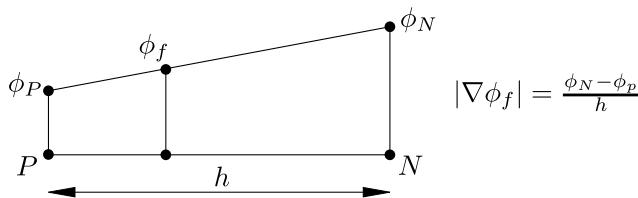


Figura 3.9: Vectores normales a las caras del segundo volumen del dominio.

entonces

$$\left\{ \kappa \sum_{f=li,ld} (\nabla \phi)_f \cdot \vec{S}_f \right\}_j = -QV_j, \quad (3.28)$$

que expandiendo resulta

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{h} \right) (-\hat{i}) \cdot (-S; 0; 0) + \left(\frac{\phi_3 - \phi_2}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (S, 0, 0) \right]_j = -QV_j, \quad (3.29)$$

y, finalmente

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h} \right) S = -QV_j. \quad (3.30)$$

En el cálculo de las expresiones anteriores se ha tenido en cuenta que para el cálculo del gradiente se realiza la resta de la magnitud en la celda vecina con la de la celda en análisis. La expresión obtenida en (3.30) puede reducirse a un **Stencil** de Diferencias Finitas ya que $V_j = Sh$, con lo cual

$$\kappa \left(\frac{\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3}{h^2} \right) S = -Q. \quad (3.31)$$

Esta ecuación representa el Stencil Laplaciano de segundo orden. Se debe considerar que en Volúmenes Finitos la magnitud característica de la discretización es V_j y no h_j .

Una nota especial merece ser introducida para el tratamiento de las condiciones de borde. Como surge de la Figura (3.8) éstas están impuestas en las caras de las celdas y no en los centros, con lo cual es necesario algún tipo de reconstrucción o interpolación. Esto se debe a que se ha adoptado un esquema de Volúmenes Finitos centrado en celda (cell based), cada uno con sus ventajas y desventajas. Utilizamos de esta manera para la cara izquierda de la primera celda una aproximación descentrada del

gradiente, y de esta forma

$$(\nabla\phi)_{f_{li}} = \frac{\phi_1 - \phi_o}{h/2}, \quad (3.32)$$

con lo cual aplicando (3.26) a la celda 1 se tendrá

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_1 - \phi_o}{h/2} \right) (\hat{i}) \cdot (-S; 0; 0) + \left(\frac{\phi_2 - \phi_1}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (S, 0, 0) \right]_j = -QV_1, \quad (3.33)$$

y de esta forma

$$\kappa \left(\frac{2\phi_o - 3\phi_1 + \phi_2}{h} \right) S = -QV_1. \quad (3.34)$$

En realidad la expresión para el gradiente en la cara que pisa el contorno surge o bien en forma explícita de una condición Neumann o bien de una aproximación por Series de Taylor, a saber:

$$\phi_1 = \phi_o + \nabla\phi|_o(x_1 - x_o) \quad (3.35)$$

donde la condición de contorno involucra una celda del interior, aquella en contacto con el borde, modificando la matriz en consecuencia.

Para el caso de la celda 4 se tendrá que

$$\kappa \left[\left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{h/2} \right) (-\hat{i}) \cdot (-S; 0; 0) + \left(\frac{\phi_L - \phi_4}{h} \right) (\hat{i}) \cdot (S, 0, 0) \right]_j = -QV_4, \quad (3.36)$$

y así

$$\kappa \left(\frac{\phi_3 - 3\phi_4 + 2\phi_L}{h} \right) S = -QV_4. \quad (3.37)$$

Considerando que las normales de caras pertenecientes a otra celda tienen dirección opuesta. Finalmente para todas las celdas se obtiene el siguiente sistema lineal

$$\begin{cases} \frac{\kappa}{h} (-3\phi_1 + \phi_2) S &= -QV_1 - \frac{2\kappa}{h} \phi_0 S \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_1 - 2\phi_2 + \phi_3) S &= -QV_2 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_2 - 2\phi_3 + \phi_4) S &= -QV_3 \\ \frac{\kappa}{h} (\phi_3 - 3\phi_4) S &= -QV_4 - \frac{2\kappa}{h} \phi_L S \end{cases}, \quad (3.38)$$

que puede ser escrito matricialmente como $\mathbf{A}\phi = \mathbf{b}$, o bien $\sum_{j=1}^m a_{ij}\phi_j = b_i$, siendo esta última similar a (3.24). Resolviendo el sistema es posible hallar los valores de ϕ para cada centro de celda de la discretización.

3.1.3.2. Términos Advectivos

En los términos advectivos es necesario evaluar sobre las caras de cada celda de la malla el valor interpolado de la variable ϕ_f para poder calcular el flujo advectivo o convectivo que como hemos visto se define como $f_{adv} = \vec{v}\phi$. Sabiendo que el FVM que estamos empleando utiliza como incógnitas a las variables centradas en las celdas es necesario ver como llevar valores en centro de celdas a valores en centro de caras. El término convectivo aporta en la ecuación contribuciones sobre las caras como la siguiente:

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (\vec{v}\phi)_{f_i} \cdot \vec{S}_{f_i} \right\}_j, \quad (3.39)$$

es decir, se requiere conocer la expresión de los valores ϕ en las caras. Estos valores se obtienen a partir de los valores de ϕ en los centros de celda, que es el lugar donde las incógnitas se alojan en esta versión en los centros de celda. Las dos aproximaciones más sencillas corresponden al valor aguas arriba y a la interpolación lineal. Consideré entonces el esquema presentado en la Figura (3.10).

Tomar el valor aguas arriba (Upwind) corresponde a hacer

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & \text{si } \vec{v} \cdot \vec{S} \geq 0 \\ \phi_F & \text{si } \vec{v} \cdot \vec{S} < 0 \end{cases} \quad (3.40)$$

mientras que la interpolación lineal como se muestra en la figura 3.10 resulta ser

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N \quad (3.41)$$

con $f_x = \frac{d_{fF}}{d_{FP}}$, coeficiente de partición que relaciona la distancia del centroide de cara a la celda vecina respecto a la distancia entre celdas, atendiendo a la siguiente figura:

En el caso de una celda unidimensional con dos caras, la contribución de cada una de ellas es:

$$(v, 0, 0) \cdot (S, 0, 0)(f_x^+ \phi_P + (1 - f_x^+) \phi_F^+) + (v, 0, 0) \cdot (-S, 0, 0)(f_x^- \phi_P + (1 - f_x^-) \phi_F^-) \quad (3.42)$$

con lo cual la contribución al stencil, para el caso con área constante y velocidad constante resulta ser

$$(v, 0, 0) \cdot (S, 0, 0)((f_x^+ - f_x^-) \phi_P + (1 - f_x^+) \phi_F^+ - (1 - f_x^-) \phi_F^-) \quad (3.43)$$

que para el caso particular de malla uniforme $f_x^+ = f_x^- = 1/2$ resulta ser

$$\frac{1}{2}(v, 0, 0) \cdot (S, 0, 0)(\phi_F^+ - \phi_F^-) \quad (3.44)$$

que equivale a una diferencia finita centrada.

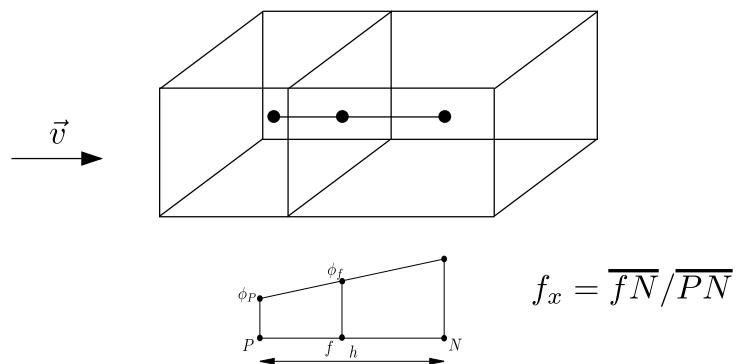
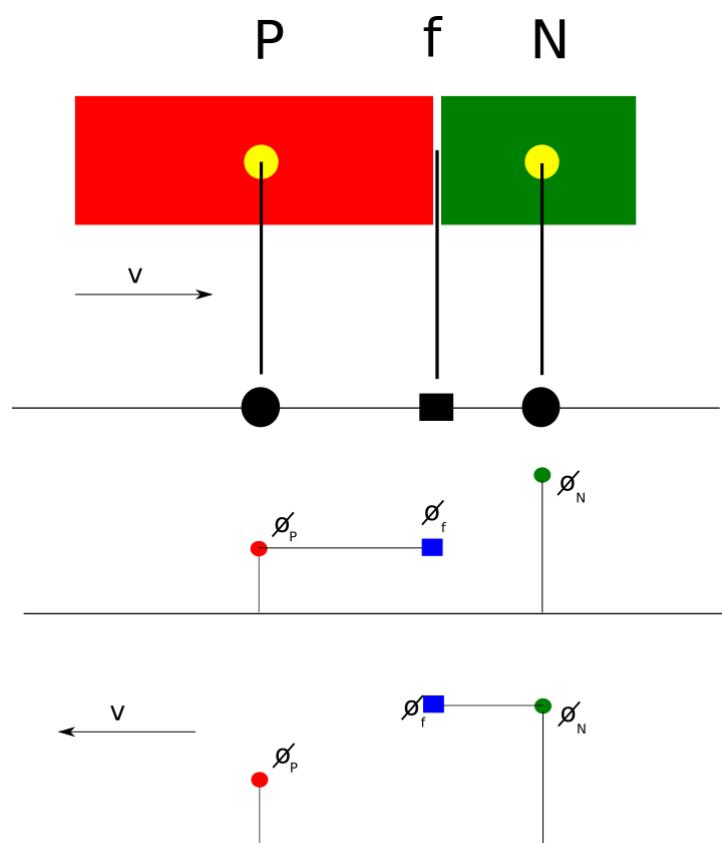
Con esto recuperamos los dos esquemas de advección o convección que hemos presentado en el contexto de Diferencias Finitas ahora en Volúmenes Finitos.

3.1.3.3. Imposición de las condiciones de borde para un problema convectivo

En cuanto a las condiciones de borde aplicadas a un término convectivo, aquellas de valor fijo, o tipo Dirichlet, se aplican directamente como $\phi_f = \phi_{borde}$, a menos que se utilice el esquema Upwind. Es bien sabido que el término convectivo requiere que le demos el valor de ϕ_f en la cara. Si esta es de contorno y si allí se aplica una condición Dirichlet esto implica que se reemplace directamente $\vec{v} \cdot \vec{S}_f \phi_f = \vec{v} \cdot \vec{S}_f \phi_{borde}$ lo cual no depende de ninguna componente del vector incógnita modificando solo el miembro derecho del sistema de ecuaciones.

En cambio, si aplicáramos condiciones Neumann, es decir, $-\kappa \nabla \phi \cdot \vec{n} = q_N$ entonces para poder calcular ϕ_{borde} debemos recurrir a alguna aproximación. Lo que se suele usar es un truncamiento a segundo orden de la serie de Taylor, es decir:

$$\phi_{borde} = \phi_P - (\nabla \phi)_{borde} \cdot \vec{d} \quad (3.45)$$

Figura 3.10: Aproximación para ϕ_f .

UPWIND SCHEME

Figura 3.11: Aproximación para ϕ_f en el caso Upwind .

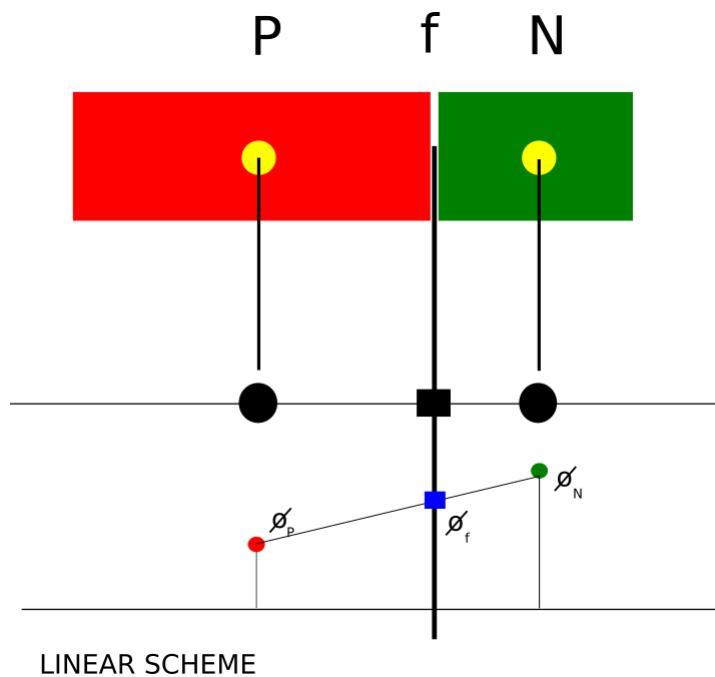
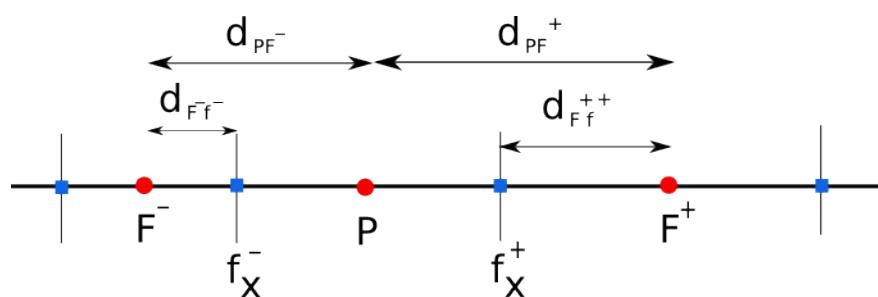
Figura 3.12: Aproximación para ϕ_f en el caso lineal.

Figura 3.13: Partición para la interpolación

con $\vec{d} = x_P - x_{borde}$, lo cual es una reconstrucción del valor en el borde a partir del correspondiente al del centroide propietario de la cara y el gradiente extraído de la condición Neumann.

Por lo tanto la parte del contorno que aporta el término convectivo es:

$$\begin{aligned}\vec{v} \cdot \vec{S}_f \phi_f &= \vec{v} \cdot \vec{S}_f (\phi_P - (\nabla \phi)_{borde} \cdot \vec{d}) = \\ &= \vec{v} \cdot \vec{S}_f (\phi_P - \kappa (\nabla \phi)_{borde} \cdot \vec{n} \frac{|\vec{d}|}{\kappa}) = \\ &= \vec{v} \cdot \vec{S}_f (\phi_P + q_N \frac{|\vec{d}|}{\kappa})\end{aligned}\quad (3.46)$$

3.1.3.4. Condiciones de contorno mixtas o 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.

La condición suele escribirse como:

$$\kappa \nabla \phi \cdot \mathbf{n} + h(\phi - \phi_\infty) = 0 \quad (3.47)$$

Con el fin de entender muy bien esta condición veamos como se interpreta físicamente.

En la Figura 3.14, se alcanza a ver una pared sólida de espesor e y conductividad κ con dos fluidos, una a cada lado. A la derecha un fluido caliente *hot* (h) y a la izquierda uno frio o refrigerante *cold* (c), cada uno con su respectiva temperatura T_{fh} y T_{fc} . Esto representa por ejemplo la refrigeración de cualquier proceso que genera calor y necesita ser refrigerado. Podríamos asimilarlo a lo que sucede en un motor a explosión donde el fluido caliente son los gases de la cámara de combustión y el refrigerante es el agua que ustedes echan en el botellón del radiador. El sólido sería la pared del cilindro inserta en el block del motor que separa ambos medios. Por el hecho de que el fluido que circula por ambos costados del sólido se mueve con una velocidad dada, pudiendo estar ambos moviéndose en igual sentido o en sentido contrario, en la interfase entre el sólido y el fluido aparece un fenómeno de trasmisión del calor por convección, caracterizado por un coeficiente h que regula la cantidad de calor que el fluido es capaz de extraerle al sólido. Esa cantidad de calor q también es proporcional al área de intercambio de calor y a la diferencia de temperatura entre el sólido y el fluido, es decir que:

$$q = A h \Delta T$$

A su vez en la mecánica del continuo se define el flujo de calor de la siguiente forma:

$$q = -A \kappa \nabla T \cdot \mathbf{n} = -A \kappa \frac{\partial T}{\partial n}$$

Siendo que en un problema 1D la derivada direccional en la normal coincide con la única dirección de cálculo, es decir: $\frac{\partial T}{\partial n} = \pm \frac{dT}{dx}$ queda solo por definir como medir el salto térmico ΔT y la normal de acuerdo a que estemos analizando, si del lado del fluido o del lado del sólido. La normal siempre se piensa orientada hacia afuera del dominio de análisis, por lo tanto si nos paramos en el fluido de la derecha, el mas caliente, entonces la normal se orienta hacia las X negativas y si nos paramos en el sólido en su interacción con el fluido caliente, la normal se orientará en el sentido positivo de las X . Con todo esto, tenemos que definir ese salto térmico. Para ellos debemos pensar el problema

físicamente, es decir, se sabe que el flujo de calor va desde la zona mas caliente a la mas fría, en nuestra Figura tiene el sentido de derecha a izquierda. Entonces el ΔT tiene que tener un signo tal que el flujo se dirija en ese sentido. Uniendo ambas expresiones anteriores llegamos a que:

$$\begin{aligned} q &= A h \Delta T = -A\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \\ A \left(h \Delta T + \kappa \frac{\partial T}{\partial n} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (3.48)$$

Parados en el fluido caliente, como la normal se dirige en el sentido negativo de las X , el gradiente es negativo, es decir, la temperatura decrece en el sentido negativo de las X o sea en el sentido que marca su normal exterior, entonces el ΔT debe ser positivo para compensar. Por lo tanto del lado del fluido caliente el salto se define como $\Delta T = T_{fh} - T_s$. Si por otro lado lo pensamos del lado del sólido, la normal es $n = (+1, 0, 0)$ y en ese sentido la temperatura crece, por lo tanto el gradiente es positivo y el incremento debe ser negativo, con lo cual $\Delta T = T_s - T_{fh}$. Si ahora nos paramos en la interfase entre el sólido y el fluido refrigerante, para el sólido, la normal es $n = (-1, 0, 0)$ y entonces el gradiente es negativo y el salto debe ser positivo, con lo cual nuevamente el $\Delta T = T_s - T_{fc}$. Se puede ver que independientemente del borde considerado y de cual es el medio frío y el medio caliente, la condición de contorno debe escribirse como:

$$h(T - T_\infty) + \kappa \frac{\partial T}{\partial n} = 0 \quad (3.49)$$

donde T es la temperatura del medio considerado bajo el análisis y T_∞ es la temperatura del medio externo y la normal se define como siempre, hacia afuera del dominio analizado.

En la parte inferior de la figura se esquematiza un símil circuito eléctrico, donde por analogía un problema térmico puede asimilarse a uno eléctrico, donde la diferencia de tensión equivale al salto de temperatura, la corriente al flujo de calor y las resistencias son aquellas provenientes de cada fenómeno de transmisión de calor, tenemos una resistencia por conducción en el sólido y dos resistencias por convección a cada lado. De esta manera quien tiene mas familiaridad con los circuitos eléctricos puede entender como se comporta un problema térmico.

Para terminar con esta introducción al tema de condiciones mixtas se puede definir un número adimensional que rige como se comporta esta condición de contorno, se llama *número de Biot*, y se lo define como:

$$Bi = \frac{hL}{\kappa}$$

Observando la ecuación anterior correspondiente a esta condición de contorno podríamos re-escribirla en forma adimensional definiendo una longitud adimensional tales como $x^* = \frac{x}{L}$, por lo tanto podemos expresar a: $\nabla T \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial T}{\partial x_j^*} \frac{\partial x_j^*}{\partial x_j} n_j = \frac{1}{L} \frac{\partial T}{\partial n^*}$, en consecuencia la condición de contorno quedará:

$$h(T - T_\infty) + \kappa \frac{\partial T}{\partial n} = \frac{Bi}{L} (T - T_\infty) + \frac{1}{L} \frac{\partial T}{\partial n^*} = Bi(T - T_\infty) + \frac{\partial T}{\partial n^*} = 0 \quad (3.50)$$

con lo cual se alcanza a ver como el número de Biot regula que tipo de condición de contorno tenemos, a medida que $Bi \rightarrow \infty$ la condición se transforma en una condición Dirichlet y a medida que $Bi \rightarrow 0$ se convierte en una condición Neumann homogénea, es decir:

$$\begin{aligned} \lim_{Bi \rightarrow \infty} \left(Bi(T - T_\infty) + \frac{\partial T}{\partial n^*} \right) &= (T - T_\infty) = 0 \Rightarrow T = T_\infty \\ \lim_{Bi \rightarrow 0} \left(Bi(T - T_\infty) + \frac{\partial T}{\partial n^*} \right) &= \frac{\partial T}{\partial n^*} = 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Ahora vayamos a ver como establecer una condición de contorno de este tipo en forma numérica dentro del contexto de FVM. Sabiendo que los dos términos que requieren evaluar en las caras de las celdas y que podrían verse afectados por la condición de contorno son el término convectivo y el difusivo, veamos que requiere cada uno de ellos.

El término convectivo requiere evaluar el valor de la incógnita en la cara de la celda que pisa el contorno, es decir $\phi_f \in \text{borde}$.

Por otro lado el término difusivo requiere evaluar el valor de la derivada en aquellas caras de las celdas que pisas el contorno, es decir $(\frac{\partial \phi}{\partial x})_{f \in \text{borde}}$

Sabiendo que la condición de contorno establece una única ecuación que relaciona ambas incógnitas, ϕ_f y $(\frac{\partial \phi}{\partial x})_f$ deberíamos encontrar una segunda expresión para poder cerrar el sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas. Para ello, como ya hemos hecho antes, usaremos la relación entre ambas que proporciona la expansión de una función en series de Taylor (ver ecuación 3.45), con lo cual nos queda un sistema a resolver como el siguiente:

$$\begin{aligned} h(\phi_{\text{borde}} - \phi_\infty) + \kappa \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} &= 0 \\ \phi_{\text{borde}} - \left(\phi_P - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} \cdot (x_P - x_{\text{borde}}) \right) &= 0 \\ h \phi_{\text{borde}} + \kappa \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} &= h \phi_\infty \\ \phi_{\text{borde}} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} \cdot (x_P - x_{\text{borde}}) &= \phi_P \end{aligned} \quad (3.52)$$

que en forma de un sistema compacto, quedará:

$$\begin{pmatrix} h & \kappa \\ 1 & x_P - x_{\text{borde}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\text{borde}} \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h \phi_\infty \\ \phi_P \end{pmatrix}$$

Resolviendo este sistema de 2×2 es posible encontrar expresiones para ambas variables que luego pueden ser directamente insertadas en las versiones discretas de los términos convectivos y difusivos.

Las expresiones que surgen de este sistema son:

$$\begin{pmatrix} \phi_{\text{borde}} \\ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{\text{borde}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\phi_P \kappa}{\kappa + h x_{\text{borde}} - h x_P} + \frac{\phi_\infty h (x_{\text{borde}} - x_P)}{\kappa + h x_{\text{borde}} - h x_P} \\ \frac{\phi_\infty h}{\kappa + h x_{\text{borde}} - h x_P} - \frac{\phi_P h}{\kappa + h x_{\text{borde}} - h x_P} \end{pmatrix} \quad (3.53)$$

Como se alcanza a ver tanto ϕ como $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ en la cara del borde tienen dependencia con ϕ_P , el valor de la incógnita en la celda que pisa el contorno así como de varios parámetros del problema, especialmente aquellos de la condición de contorno. Con esto queda claro que una condición mixta modifica tanto la matriz como el miembro derecho.

En resumen, la siguiente tabla pretende compactar lo visto de algún modo. En ella vemos que la N simboliza las situaciones con condiciones de contorno que son naturales porque justamente lo que

aplican coincide directamente con aquello que el término necesita agregar. Por ejemplo el caso de una condición Dirichlet sobre el término advectivo, ambos dependen de la temperatura. Del mismo modo la difusión y una condición Neuman, ambos dependen del gradiente de la temperatura.

	Advección ($\propto \phi$)	Difusión ($\propto \nabla\phi$)
Dirichlet (ϕ)	N	TS
Neuman ($\nabla\phi$)	TS	N
Robin ($\alpha\nabla\phi + \beta\phi$)	TS	TS

Tabla 1: *resumen de las condiciones de contorno en MVF. (N) natural , (TS) Taylor series*

En el resto de los casos hay que agregar al cómputo una expansión en series de Taylor entre la celda que pisa el contorno y la cara sobre el contorno.

En la figura vemos una celda con 5 caras (pentagono) no regular, 2 de sus caras pisarán el contorno y si la combinación condiciones de contorno aplicadas y término de flujo a computar requieren una expansión en series como lo muestra la anterior tabla, entonces hay que establecer una relación entre T_{f_1}, T_{f_2} y T_P via Taylor:

$$\phi_P = \phi_{f_1} + (\nabla\phi)_{f_1} \cdot (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{f_1}) \quad (3.54)$$

$$\phi_P = \phi_{f_2} + (\nabla\phi)_{f_2} \cdot (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{f_2}) \quad (3.55)$$

Dependiendo lo que se conozca y lo que se requiera se despeja de 3.54 conforme a la necesidad.

3.1.3.5. Tratamiento de los términos fuentes

Los términos fuentes que vamos a considerar en estas notas son de dos tipos:

- Fuentes que no dependen de la incógnita , es decir, términos del tipo $Q(x, t) \neq f(\phi)$
- Fuentes que si dependen linealmente de la incógnita , es decir, términos del tipo $c(x, t)\phi$

En ambos casos las fuentes requieren una integración en el volumen lo cual se aproxima como:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_j} Q(x, t) d\Omega_j &= Q(x_C, t)V_j \\ \int_{\Omega_j} c\phi d\Omega_j &= c\phi_j V_j \end{aligned} \quad (3.56)$$

donde se alcanza a ver que en el primer caso, con fuente no dependiente de la incógnita, el aporte es solo al término derecho del sistema lineal final. Cuando estamos en el caso de una fuente que depende linealmente de la incógnita esto modifica el término diagonal de la matriz.

3.1.3.6. Tratamiento del término temporal

Para el término temporal usaremos la aproximación siguiente:

$$\int_{\Omega_j} \frac{\partial \phi}{\partial t} d\Omega_j = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_j V_j = \frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} V_j \quad (3.57)$$

donde el resto de la ecuación debe ser evaluada en algún instante de tiempo en particular dependiendo del esquema de integración aplicado.

En forma similar a lo visto en diferencias finitas podemos generalizar el método trapezoidal de integración temporal con el método θ , que expresa la integración del siguiente modo:

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} V_j = \mathcal{L}_h^{n+\theta}(\phi^{n+\theta}) \quad (3.58)$$

donde $\mathcal{L}_h^{n+\theta}$ representa a versión discreta del operador a resolver, en nuestro caso, la ecuación de transporte de un escalar pasivo presentada más arriba evaluada en un instante de tiempo particular dado por el parámetro θ .

Si $\theta = 0$ el esquema será explícito y con $\theta = 1$ será implícito. Ambos son esquemas de primer orden en el tiempo, es decir que el error depende del paso de tiempo en forma lineal con este y la diferencia entre ambos está en el costo y la estabilidad. Mientras los esquemas explícitos son eficientes pero condicionalmente estables, los implícitos son mucho más estables pero mas costosos en tiempos de CPU. Una forma de aumentar el orden de convergencia temporal es usando $\theta = 1/2$, método denominado Crank-Nicholson, el cual equivale a evaluar la parte derecha de la ecuación anterior en la mitad del paso de tiempo. Esto requiere alguna interpolación temporal, la normalmente empleada es:

$$\frac{\phi_j^{n+1} - \phi_j^n}{\Delta t} V_j = \frac{1}{2} \left(\mathcal{L}_h^n(\phi^n) + \mathcal{L}_h^{n+1}(\phi^{n+1}) \right) \quad (3.59)$$

3.1.3.7. Resumen del aporte de los términos revisados para el problema 1D

A continuación vamos a incluir todos las versiones discretas 1D de los términos analizados.

Para las celdas interiores tenemos el siguiente stencil:

$$\underbrace{\left(\frac{\phi_P^{n+1} - \phi_P^n}{\Delta t} + c_P \phi_P^{n+\theta} - Q_P^{n+\theta} \right)}_{\text{términos de volumen}} V_P + \underbrace{\left(\vec{v}_{f^+} \cdot \vec{S}_{f^+} \right) \left(f_{x^+} \phi_P^{n+\theta} + (1 - f_{x^+}) \phi_{F^+}^{n+\theta} \right) + \left(\vec{v}_{f^-} \cdot \vec{S}_{f^-} \right) \left(f_{x^-} \phi_P^{n+\theta} + (1 - f_{x^-}) \phi_{F^-}^{n+\theta} \right) - \underbrace{\left(\kappa_{f^+} \frac{\phi_{F^+}^{n+\theta} - \phi_P^{n+\theta}}{|x_{F^+} - x_P|} (1, 0, 0) \cdot \vec{S}_{f^+} + \kappa_{f^-} \frac{\phi_P^{n+\theta} - \phi_{F^-}^{n+\theta}}{|x_P - x_{F^-}|} (1, 0, 0) \cdot \vec{S}_{f^-} \right)}_{\text{términos difusivos de superficie}} = 0 \quad (3.60)$$

Para tener en cuenta el grado de explicitud e implicitud dado por el parámetro θ vamos a incluir esto de forma de separar la parte que se incluye en la matriz del sistema de ecuaciones, proporcional a θ y la parte que va al miembro derecho proporcional a $(1 - \theta)$.

$$\begin{aligned}
& \frac{V_P}{\Delta t} \phi_P^{n+1} + \theta c_P V_P \phi_P^{n+1} + \\
& + \theta (\vec{v}_{f^+} \cdot \vec{S}_{f^+}) (f_{x^+} \phi_P^{n+1} + (1 - f_{x^+}) \phi_{F^+}^{n+1}) + (\vec{v}_{f^-} \cdot \vec{S}_{f^-}) (f_{x^-} \phi_P^{n+1} + (1 - f_{x^-}) \phi_{F^-}^{n+1}) - \\
& - \theta \left(\kappa_{f^+} \frac{\phi_{F^+}^{n+1} - \phi_P^{n+1}}{|x_{F^+} - x_P|} |S_{f^+}| + \kappa_{f^-} \frac{\phi_{F^-}^{n+1} - \phi_P^{n+1}}{|x_P - x_{F^-}|} |S_{f^-}| \right) = \\
& = Q_P^{n+\theta} V_P + \frac{V_P}{\Delta t} \phi_P^n - (1 - \theta) c_P V_P \phi_P^n - \\
& - (1 - \theta) (\vec{v}_{f^+} \cdot \vec{S}_{f^+}) (f_{x^+} \phi_P^n + (1 - f_{x^+}) \phi_{F^+}^n) + (\vec{v}_{f^-} \cdot \vec{S}_{f^-}) (f_{x^-} \phi_P^n + (1 - f_{x^-}) \phi_{F^-}^n) + \\
& + (1 - \theta) \left(\kappa_{f^+} \frac{\phi_{F^+}^n - \phi_P^n}{|x_{F^+} - x_P|} |S_{f^+}| + \kappa_{f^-} \frac{\phi_{F^-}^n - \phi_P^n}{|x_P - x_{F^-}|} |S_{f^-}| \right)
\end{aligned} \tag{3.61}$$

Para el caso de celdas que pisán el contorno lo único que se modifica de lo anterior son los términos de superficie. Por este motivo vamos a resumir los distintos aportes de las condiciones de contorno.

3.1.3.8. Condición Dirichlet

$$\phi = \phi_D$$

$$\begin{aligned}
& \text{término convectivo} \\
& (\vec{v}_{borde} \cdot \vec{S}_{borde}) \phi_D \\
& \text{término difusivo} \\
& \kappa_{borde} \frac{\phi_P - \phi_D}{x_P - x_{borde}} (1, 0, 0) \cdot \vec{S}_{borde}
\end{aligned} \tag{3.62}$$

3.1.3.9. Condición Neumann

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{borde}$$

$$\begin{aligned}
& \text{término convectivo} \\
& (\vec{v}_{borde} \cdot \vec{S}_{borde}) \left(\phi_P - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{borde} (x_P - x_{borde}) \right) \\
& \text{término difusivo} \\
& \kappa_{borde} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{borde} (1, 0, 0) \cdot \vec{S}_{borde}
\end{aligned} \tag{3.63}$$

3.1.3.10. Condición Mixta

Para el caso de condición mixta tenemos:

$$h(\phi_{borde} - \phi_\infty) + \kappa(\nabla\phi \cdot \mathbf{n})_{borde} = 0 \quad (3.64)$$

$$\phi_P = \phi_{borde} + (\nabla\phi)_{borde} \cdot (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{borde}) \quad (3.65)$$

$$(3.66)$$

Habíamos arribado a que esta condición de contorno no fija ninguna de las variables que se necesitan para los términos convectivos y difusivos y por tal motivo hay que resolver un sistema como el 3.52 que da soluciones mostradas en 3.53. Ingresando estas expresiones en el aporte de la cara de contorno en cada término que lo precisa alcanza para tener en cuenta esta condición.

$$\begin{aligned}
 & \text{término convectivo} \\
 & (\vec{v}_{borde} \cdot \vec{S}_{borde}) \phi_{borde} \\
 & \text{término difusivo} \\
 & \kappa_{borde} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{borde} (1, 0, 0) \cdot \vec{S}_{borde}
 \end{aligned} \quad (3.67)$$

3.1.3.11. BC para los términos convectivos

Con el fin de compendiar todo los casos posibles en una estrategia de cálculo mas compacta vamos a continuar a escribir como quedaría la aplicación de las condiciones de contorno empezando por el término convectivo.

if Dirichlet

$$\phi_f = \phi_D$$

$$\begin{cases} \text{if upwind} \Rightarrow \begin{cases} \vec{v}_f \cdot \vec{S}_f > 0 & \rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_P^{n+1} + (1-\theta) \phi_P^n \\ \vec{v}_f \cdot \vec{S}_f \leq 0 & \rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_D^{n+1} + (1-\theta) \phi_D^n \end{cases} \\ \text{else} \Rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_D^{n+1} + (1-\theta) \phi_D^n \end{cases}$$

if Neumann

$$-k_f \frac{d\phi}{dx} \Big|_f \operatorname{sign}(x_f - x_P) = -k_f \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = q_N$$

$$\text{Taylor 1st order} \Rightarrow \phi_P = \phi_f + \frac{d\phi}{dx} \Big|_f (x_P - x_f) \rightarrow \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = \frac{\phi_f - \phi_P}{\Delta/2}$$

$$\text{then } \phi_f \rightarrow \phi_N = \phi_P - \frac{q_N}{k_f} \Delta/2 \text{ con } \Delta \text{ cell length}$$

$$\text{Taylor 2nd order} \Rightarrow \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = \frac{3\phi_f - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{2\Delta/2}$$

$$\text{then } \phi_f \rightarrow \phi_N = \frac{(4-f_x^+) \phi_P - (1-f_x^+) \phi_{PP} - \frac{q_N}{k_f} \Delta}{3}$$

idem condición Dirichlet con ϕ_N en lugar de ϕ_D

es decir

(3.68)

$$\phi_f = \phi_N$$

$$\begin{cases} \text{if upwind} \Rightarrow \begin{cases} \vec{v}_f \cdot \vec{S}_f > 0 & \rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_P^{n+1} + (1-\theta) \phi_P^n \\ \vec{v}_f \cdot \vec{S}_f \leq 0 & \rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_N^{n+1} + (1-\theta) \phi_N^n \end{cases} \\ \text{else} \Rightarrow \phi_f^{n+\theta} = \theta \phi_N^{n+1} + (1-\theta) \phi_N^n \end{cases}$$

if Robin (mixta)

$$k_f \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f + h_f (\phi_f - \phi_\infty) = 0$$

$$\text{Taylor 1st order} \Rightarrow \phi_P = \phi_f + \frac{d\phi}{dx} \Big|_f (x_P - x_f) \rightarrow \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = \frac{\phi_f - \phi_P}{\Delta/2}$$

$$\text{then } \phi_f \rightarrow \phi_R = \frac{h_f \phi_\infty + \frac{2k_f}{\Delta} \phi_P}{h_f + \frac{2k_f}{\Delta}} \text{ con } \Delta \text{ cell length}$$

$$\text{Taylor 2nd order} \Rightarrow \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = \frac{3\phi_f - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{2\Delta/2}$$

$$\text{then } \phi_f \rightarrow \phi_R = \frac{h_f \phi_\infty + \frac{k_f}{\Delta} [(4-f_x^+) \phi_P - (1-f_x^+) \phi_{PP}]}{h_f + \frac{3k_f}{\Delta}}$$

idem condición Dirichlet con ϕ_R en lugar de ϕ_D

3.1.3.12. BC para los términos difusivos

Siguiendo con el caso difusivo, ahora lo que tenemos que despejar de las condiciones de contorno es el término

$$k_f (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f$$

if Dirichlet

$$\phi_f = \phi_D$$

then $\frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_f = \begin{cases} \frac{\phi_D - \phi_P}{\Delta/2} & \text{if 1st order} \\ \frac{3\phi_D - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{\Delta} & \text{if 2nd order} \end{cases}$

then $k_f (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f|$

if Neumann

$$-k_f \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f = q_N$$

then $k_f (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| = -q_N |\mathbf{S}_f|$

if Robin (mixta)

$$k_f \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_f + h_f(\phi_f - \phi_\infty) = 0$$

then $\frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_f = \begin{cases} \frac{\phi_f - \phi_P}{\Delta/2} & \text{if 1st order} \\ \frac{3\phi_f - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{\Delta} & \text{if 2nd order} \end{cases}$

Taylor 1st order $\phi_f \rightarrow \phi_R = \frac{h_f \phi_\infty + \frac{2k_f}{\Delta} \phi_P}{h_f + \frac{2k_f}{\Delta}}$ con Δ cell length

Taylor 2nd order $\phi_f \rightarrow \phi_R = \frac{h_f \phi_\infty + \frac{k_f}{\Delta} [(4 - f_x^+) \phi_P - (1 - f_x^+) \phi_{PP}]}{h_f + \frac{3k_f}{\Delta}}$

then $k_f (\nabla \phi)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| = -h_f(\phi_R - \phi_\infty) |\mathbf{S}_f|$

(3.69)

3.1.3.13. BC no lineal para problemas que tengan radiación térmica

La radiación es una fenómeno más de transferencia de calor a los ya estudiados. Mientras la convección se basa en el movimiento de la materia (macro) y la difusión en el movimiento a escala molecular (micro) la radiación responde a un proceso de generación de ondas electromagnéticas emitida por el movimiento aleatorio de partículas de la propia materia y transmitida a distancia, es decir que a diferencia de la difusión no se necesita estar en contacto con ella. La luz solar es un ejemplo de lo que estamos definiendo, el calor que irradia una llama cuando se prende fuego es otro. El fenómeno de radiación es muy complejo y equivale a una fuente de volumen que depende de varios factores, la longitud de onda que depende de la temperatura, del ángulo de incidencia y de parámetros propios del medio material en que esta radiación se transmite. Aquí simplemente vamos a considerarla como una condición de contorno del campo lejano que esta a una temperatura ϕ_∞ y que arriba a nuestro contorno a una temperatura ϕ_b generando un flujo como el que se expresa en la siguiente ecuación en la cual aparecen el parámetro ϵ la emisividad de la radiación y que tiene que ver con la capacidad del medio que separa el campo lejano de nuestro sistema de absorber parte de la radiación y de una constante σ denominada constante de Boltzmann.

$$-k_f \frac{d\phi}{d\eta} \Big|_b = \epsilon \sigma (\phi_b^4 - \phi_\infty^4) \quad (3.70)$$

Si aproximamos la derivada normal a primer y segundo orden como vimos anteriormente llegamos a

una expresión para la variable temperatura del borde que es no lineal, como se muestra a continuación.

$$\frac{\partial \phi_f}{\partial \eta} \Big|_b = \begin{cases} \frac{\phi_b - \phi_P}{\Delta/2} & \text{if 1st order} \\ \frac{3\phi_b - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{\Delta} & \text{if 2nd order} \end{cases}$$

reemplazando en la condición de contorno llegamos a: (3.71)

$$\begin{cases} k_f \frac{\phi_b - \phi_P}{\Delta/2} + \epsilon \sigma (\phi_b^4 - \phi_\infty^4) = 0 & \text{if 1st order} \\ k_f \frac{3\phi_b - 4\phi_P + f_x^+ \phi_P + (1-f_x^+) \phi_{PP}}{\Delta} + \epsilon \sigma (\phi_b^4 - \phi_\infty^4) = 0 & \text{if 2nd order} \end{cases}$$

De estas expresiones se deduce iterativamente la temperatura ϕ_b en el contorno que se puede usar para el término convectivo y/o la derivada normal que como vimos antes participa casi directamente en el término difusivo.

El único detalle a tener en cuenta es que dada la no linealidad de la condición de contorno el algoritmo a emplear se puede escribir como:

1. Lazo temporal
 - a) Lazo de Newton
 - 1) Actualizar la $\phi_b = f(\phi_P)$ o $f(\phi_P, \phi_{PP})$ por la condición de radiación según usemos una aproximación a primer o segundo orden
 - 2) Calculamos todas las contribuciones al residuo con todas las condiciones de contorno actualizadas
 - 3) Resolvemos el sistema de ecuaciones
 - b) end Lazo Newton
2. end Lazo temporal

3.1.4. Extensión del FVM a mas dimensiones espaciales

3.1.4.1. Mallas estructuradas y no estructuradas, concepto de poliedros generales

La discretización del dominio computacional produce una malla computacional sobre la cual las ecuaciones de gobierno son posteriormente resueltas. La discretización también determina las posiciones de los puntos en el espacio y en el tiempo donde la solución se obtiene, como si fuera un muestreo. El procedimiento de discretización puede ser dividido en dos partes: uno asociado a la geometría y que produce la malla denominado generación de mallas y el otro asociado a los instantes de tiempo en que se resuelve el problema.

- discretización espacial o generación de mallas, produce vértices y elementos.
 - Mallas estructuradas
 - Mallas estructuradas por bloques
 - Mallas no estructuradas
 - Mallas híbridas
- discretización temporal, produce una partición del eje de tiempo en rodajas o *slabs*, como si fuera una dimensión mas pero no vinculadas con las coordenadas espaciales

3.1.4.2. Mallas estructuradas

La generación de la malla puede hacerse bajo ciertas normas de acuerdo al tipo de geometría involucrada. En los casos de geometrías simples puede emplearse mallas denominadas estructuradas. Estas mallas son normalmente de muy buena calidad aunque en casos donde haya refinamiento localizado pueden propagar el refinamiento hacia zonas donde no se precisa tal característica. Normalmente contornean bien a los cuerpos y presentan ortogonalidad con el contorno con lo cual son en ese sentido óptimas. No obstante las situaciones donde se puede recurrir a este tipo de mallado son poco frecuentes.

En la Figura 3.16 vemos una malla sobre un perfil alar con las características propias de una malla estructurada, es decir, que una celda puede identificar muy rápidamente a sus celdas vecinas con una simple operación sobre los índices de la malla. De ahí proviene el mote de estructurada, la malla posee un orden o una estructura regular que se repite en toda su extensión.

- Ventajas:

- Son mallas de buena calidad
- Se puede controlar la ortogonalidad
- Tienen un patrón o estructura uniforme,
- Hay una transformación posible entre posición e índices topológicos
- Cada celda puede identificar fácilmente a sus vecinas

- Desventajas:

- Propaga el refinamiento en forma no controlada
- Solo posible para geometrías muy simples

En la Figura 3.17 vemos la malla sobre la mitad de un cilindro en 2D donde se ve la ortogonalidad de la malla sobre el cilindro lo cual presenta muchas ventajas en términos de precisión.

Finalmente en la Figura 3.18 vemos el caso de un arreglo de cilindros, como por ejemplo en un intercambiador de calor, y la malla en una porción representativa de este arreglo.

3.1.4.3. Mallas estructuradas por bloques

A veces la geometría puede dividirse en forma no estructurada en bloques que en su interior pueden mallarse en forma estructurada. Esto se lo conoce como *mallas estructuradas por bloques*. Estas mallas gozan de muchas de las ventajas anteriores y pretenden extender el rango de aplicación de la técnica. No obstante requieren un trabajo humano importante para poderlas emplear y por esta razón no son muy atractivas.

Aquí en las Figuras 3.19 y 3.20 vemos un caso típico en la ingeniería mecánica, un cilindro de un motor de combustión interna. Para resolver un problema de este tipo normalmente se recurre al código KIVA III, que requiere mallas estructuradas por bloques (*multiblock*).

Similar al caso estructurado solo que permite hacer una partición gruesa en bloques que puede ser no estructurada dandole un poco mas de aplicabilidad. Aquí vemos su uso para KIVA III

3.1.4.4. Mallas no estructuradas

Cuando la geometría es compleja se recurre a mallas no estructuradas. Este es el caso más habitual. La calidad de las mallas suele empeorar a expensas de la robustez y del ahorro del trabajo humano. A escala industrial la mayoría de los problemas caen en esta categoría.

La siguiente Figura 3.21 es un ejemplo de un perfil muy empleado en la industria aeronáutica, compuesto por 3 cuerpos y que por su complejidad geométrica normalmente es mallado en forma no estructurada.

Se pierde calidad y control sobre la calidad a expensas de robustez y aplicabilidad a situaciones complejas en 3D.

3.1.4.5. Mallas híbridas

Finalmente es posible mezclar mallas estructuradas con no estructuradas, especialmente cuando se requiere cierta calidad en las cercanías de objetos se suele mallar la zona próxima con mallas estructuradas que contorneen el cuerpo con mallas lo mas ortogonales posibles a los contornos y en el exterior se deja que el generador de mallas no estructuradas termine el trabajo.

El siguiente ejemplo contiene una malla híbrida, en la vecindad de los cilindros es estructurada y en el resto es no estructurada con el fin de ahorrar en cantidad de elementos.

- Una mezcla de mallas estructuradas con no estructuradas.
- Porción estructurada en las zonas donde la geometría lo permite y se requiere calidad
- El resto con mallas no estructuradas para facilitar la tarea de completar el mallado

Otra forma de usar mallas híbridas es lo que en OpenFOAM se conoce como técnica *snappyHexMesh*. Dada la complejidad en la geometría se suele hacer una malla que se obtiene por refinamiento recursivo de una malla de base en torno al objeto que se quiere resolver con detalle. Esta técnica de refinamiento se basa en una partición diádica hasta lograr el grado de detalle necesario (*tipo immersed boundary*) y para evitar el contorno escalonado se suele finalmente proyectar la malla que resulta sobre la silueta del cuerpo normalmente expresada en formato STL (un formato de puntos y normales).

- OpenFOAM incorpora la técnica *snappyHexMesh*, apta para situaciones complejas que trata de mantener la calidad lo mas alta posible. Simil a *immersed boundary*

En el caso de los volúmenes finitos podemos emplear cualquiera de estas formas de mallar. Siendo el caso no estructurado el mas general, a modo de simplificar el análisis presentaremos en una próxima sección la técnica en este caso.

3.1.4.6. Método centrado en los vértices o centrado en las celdas

Las grillas no estructuradas son la forma mas general de arreglo de grillas para tratar la mayoría de las geometrías complejas que suelen presentarse en la tarea profesional y científica. Aquí se presenta una breve introducción a las técnicas de discretización sobre grillas no estructuradas con celdas de forma completamente arbitraria (un poliedro general), acotadas por un número arbitrario de superficies (un polígono general).

- Mallas no estructuradas
- Generadores de mallas de poliedros con caras poligonales

Hay dos formas de definir un volumen de control sobre mallas no estructuradas:

- (i) Volúmenes de control centrados en las celdas (cell-centred control volumes) y
- (ii) Volúmenes de control centrados en los vértices (vertex-centred control volumes)

Estas dos variantes son ilustradas en la Figura 3.24 para un problema en 2D.

En el método centrado en las celdas los nodos (según esta nomenclatura los nodos se definen como

los puntos donde se establece el vector solución del problema) se ubican en los centroides de los volúmenes de control, como se muestra en la parte (a) de la Figura 3.24.

En el método centrado en los vértices los nodos o puntos de cálculo se establecen sobre los vértices de la grilla. En esta metodología una partición denominada *median-dual tessellation* se debe efectuar, donde se generan sub-volumenes uniendo los centroides de los elementos de la grilla con los puntos medios de las aristas de la grilla como se ilustra en la parte (b) de la Figura 3.24

Los sub-volumenes que rodean un nodo de cálculo forman el volumen de control para la discretización. Ambas metodologías, la cell-centred como la vertex-centred son frecuentemente empleadas en la práctica. En lo que sigue nosotros nos concentraremos sobre las ideas de discretización sobre mallas no estructuradas en torno al método centrado en las celdas ya que es mas simple de entender, requiere un poco menos de almacenamiento que el método centrado en el vértice y fundamentalmente porque el software que emplearemos en la parte práctica, OpenFOAM, está basado en esta metodología.

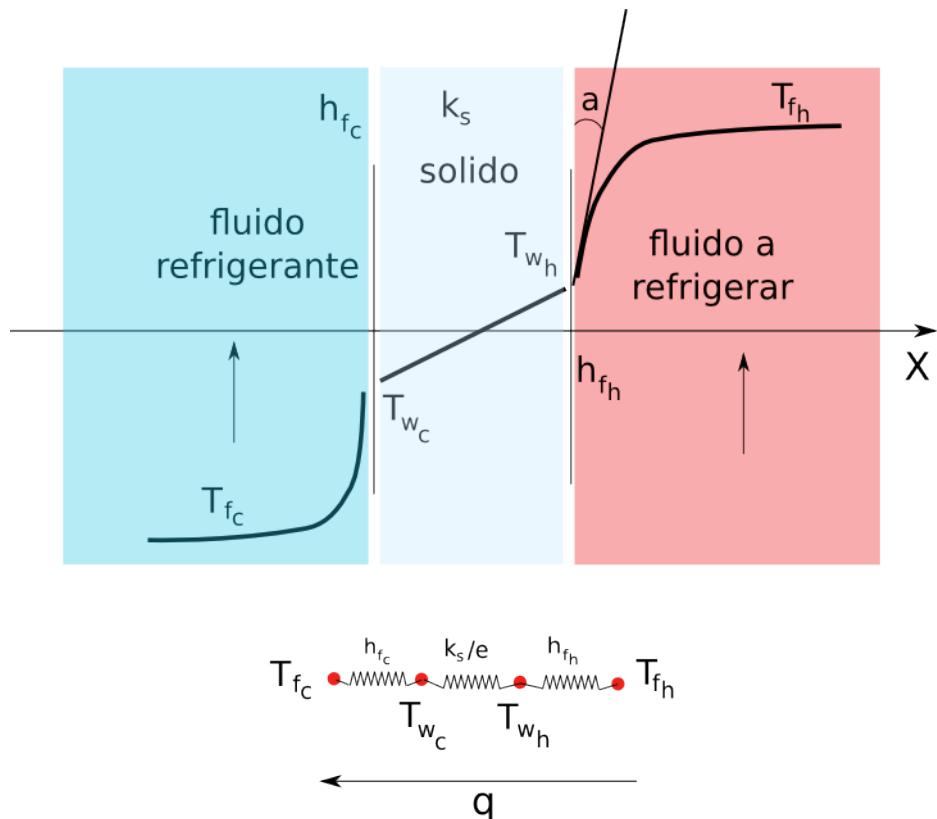
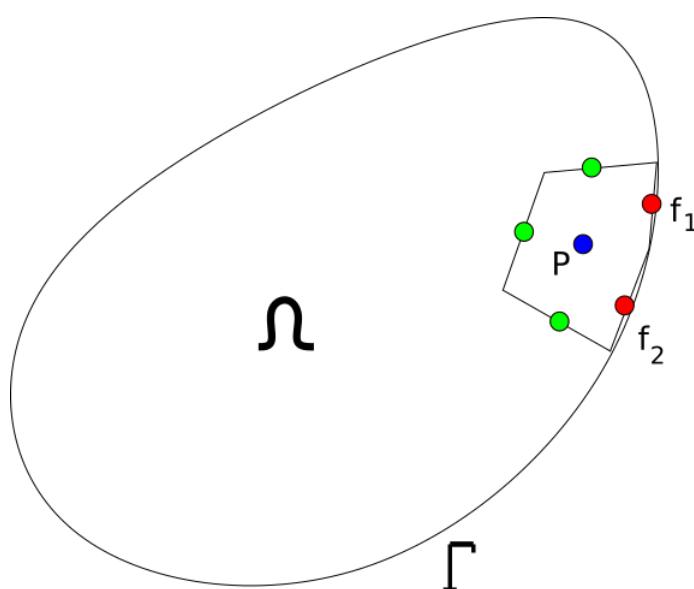


Figura 3.14: Condición de contorno mixta

Figura 3.15: Celda sobre el contorno donde establecer la expansión en series de Taylor entre el centro de la celda P y las caras que están sobre el contorno f_1 y f_2 .

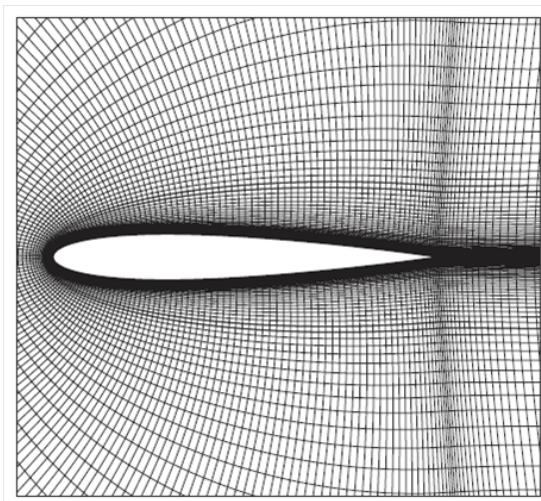


Figura 3.16: Ejemplo de malla estructurada. Perfil Alar

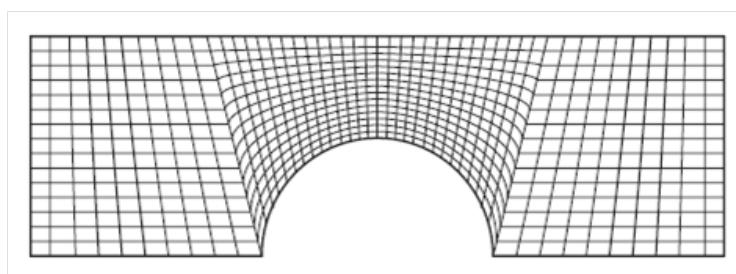


Figura 3.17: Ejemplo de malla estructurada. Un cilindro

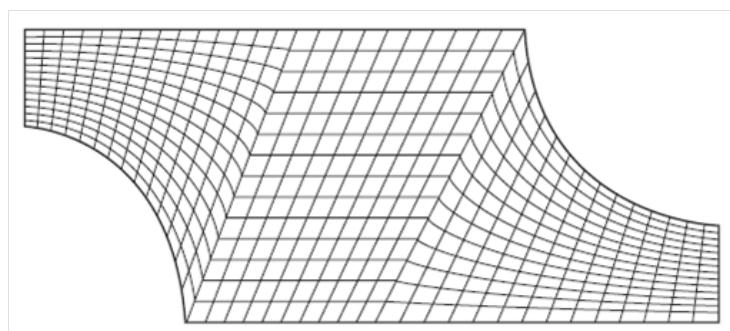


Figura 3.18: Ejemplo de malla estructurada. Zona entre 2 cilindros

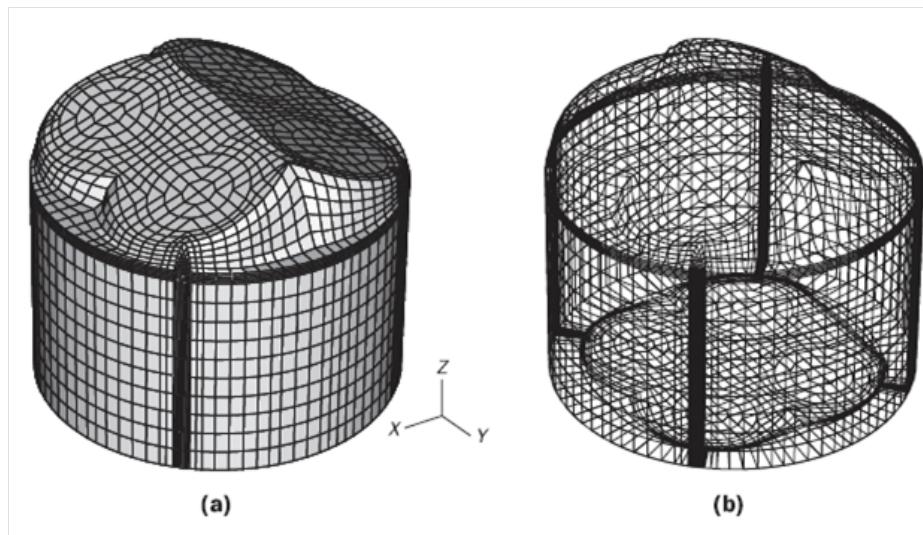


Figura 3.19: Ejemplo de malla estructurada por bloques. Cilindro de un motor de combustión interna

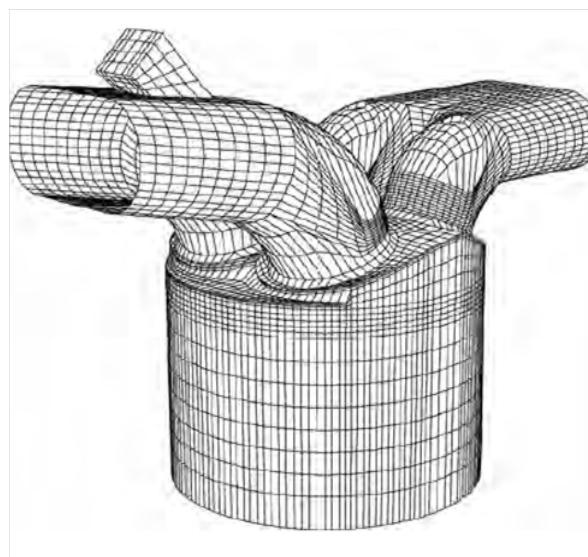


Figura 3.20: Ejemplo de malla estructurada por bloques. Cilindro de un motor de combustión interna

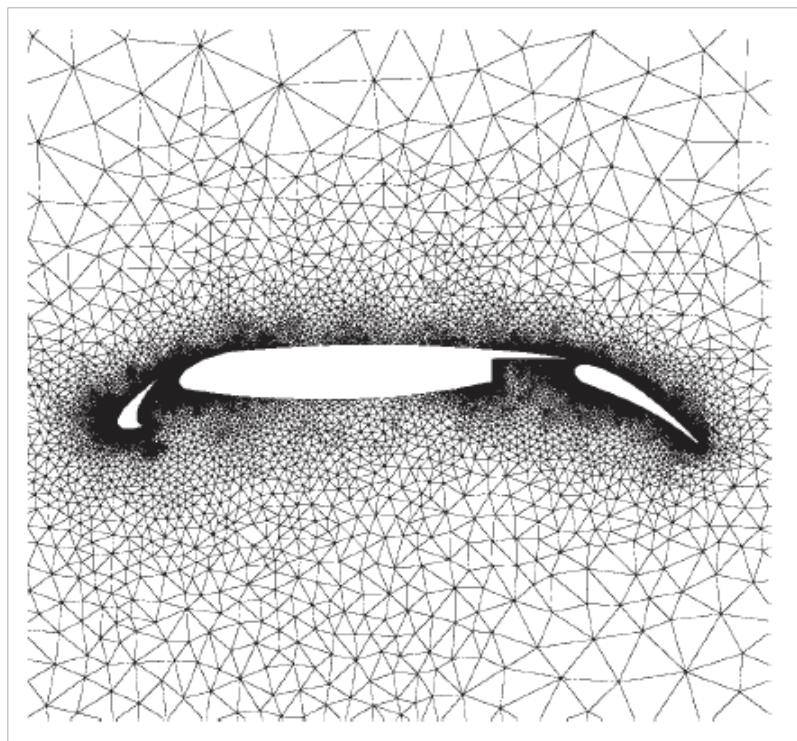


Figura 3.21: Ejemplo de malla no estructurada. Un perfil aeronáutico compuesto

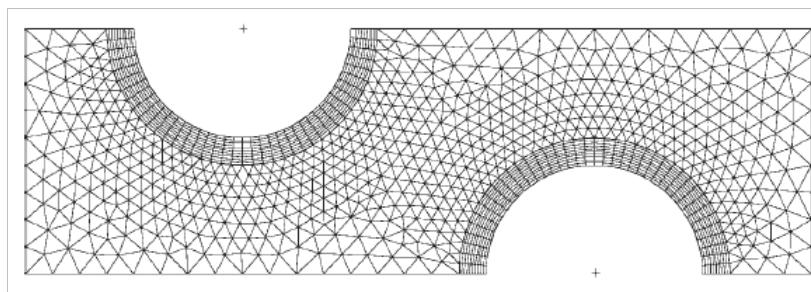


Figura 3.22: Ejemplo de malla híbrida. Un cilindro refinado cerca de su pared

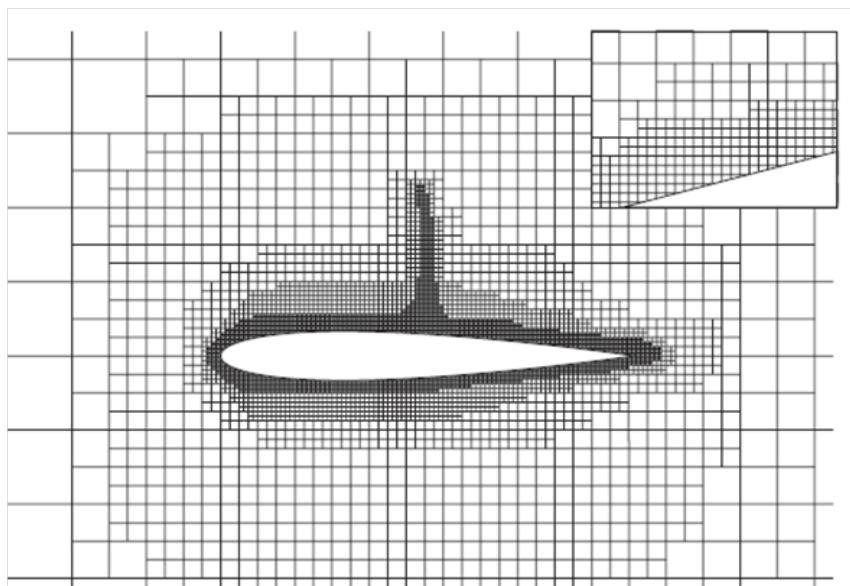


Figura 3.23: Ejemplo de malla híbrida. Perfil Alar

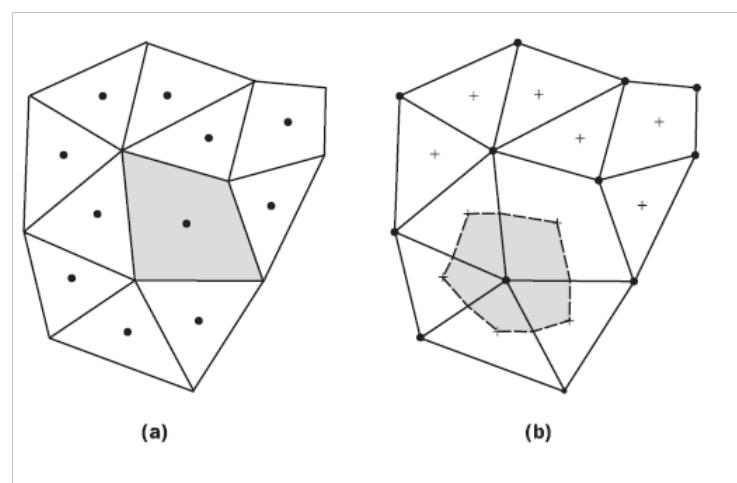


Figura 3.24: Construcción de volúmenes de control en 2D sobre mallas no estructuradas: (a) cell-centred control volumes; (b) vertex-based control volumes

3.1.5. Discretización espacial

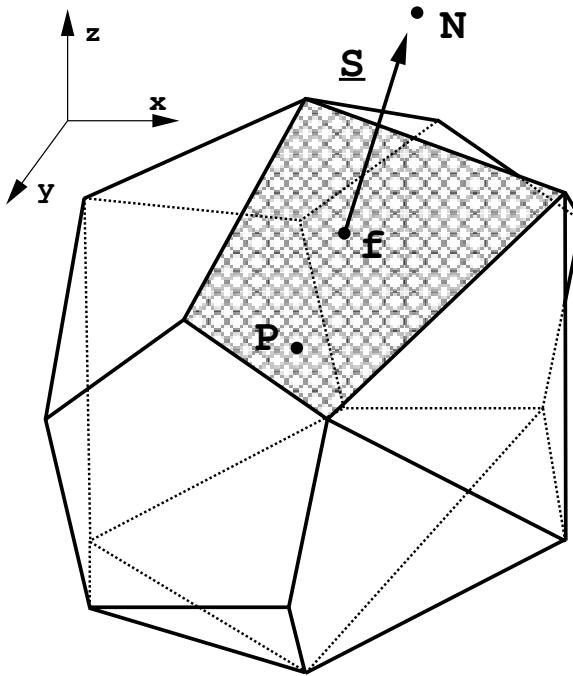


Figura 3.25: Volumen de Control

$$\int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV = 0 \quad (3.72)$$

- Centroide de la celda P
- Vecino de la celda N
- Poliedro general
- Caras poligonales
 - Owner
 - Neighbor
- Normal apuntando hacia afuera de la cara owner
- Facilidad en la generación de la malla
- Facilidad para el refinamiento del grilla

3.1.5.1. Discretización de la ecuación de transporte

La forma estándar de la ecuación de transporte para una propiedad escalar, en general pasiva, ϕ es:

$$\underbrace{\frac{\partial \rho\phi}{\partial t}}_{\text{derivada temporal}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \mathbf{U}\phi)}_{\text{término convectivo}} - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi)}_{\text{término difusivo}} = \underbrace{S_\phi(\phi)}_{\text{término fuente}} \quad (3.73)$$

- Acotación o *boundedness* tanto espacial como temporal (estabilidad)
- Orden de precisión

Para obtener una precisión de segundo orden, esta variación debe ser lineal, tanto en el espacio como

en el tiempo, *i.e.* se asume que:

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\phi)_P \quad (3.74)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi^t + \Delta t \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^t \quad (3.75)$$

donde

$$\phi_P = \phi(\mathbf{x}_P) \quad (3.76)$$

$$\phi^t = \phi(t) \quad (3.77)$$

Asumiendo variación lineal de las variables tanto en las coordenadas espaciales como temporales garantiza segundo orden, es decir $O(\Delta x^2, \Delta t^2)$

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi \, dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) \, dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{V_P} (S_u + S_p \phi) \, dV \right) dt \end{aligned} \quad (3.78)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi \, dV - \int_{V_P} (S_u + S_p \phi) \, dV}_{(1)} + \underbrace{\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) \, dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) \, dV}_{(2)} \right] dt = 0 \quad (3.79)$$

En la siguientes figuras vemos algunas celdas típicas de una malla de volúmenes finitos con una celda no estructurada que pisa el contorno y una parte de una malla estructurada embebida en el dominio interior. Los círculos en azul representan el centro de la celda en cuestión. Para la celda de contorno los círculos verdes representan los centros de las caras interiores mientras que los rojos los centros de las caras de borde. Para la porción estructurada los círculos verdes representan los centros de las celdas vecinas mientras que los rojos representan los los centros de las caras de borde.

En la figura 3.27 vemos un detalle de la zona estructurada que nos sirve para poder hacer algún análisis de como se construye un stencil en volúmenes fintos.

La discretización de la Eqn.(3.79) será a continuación examinada término a término.

3.1.5.2. Discretización de los términos espaciales

- **Integrales del grupo (1)**

Para las integrales de volumen que dependen de ϕ pero no de ninguna derivada espacial $\nabla\phi$, se puede concluir que:

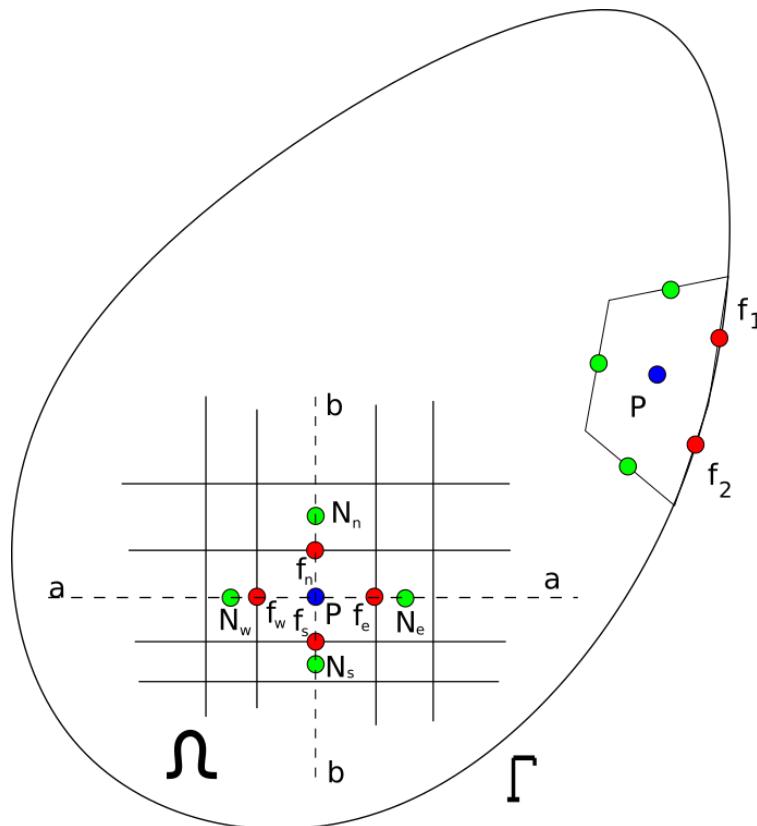


Figura 3.26: Discretización espacial de FVM. Visión global

$$\begin{aligned}
 \int_{V_P} \phi(\mathbf{x}) dV &= \int_{V_P} [\phi_P + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot (\nabla\phi)_P] dV \\
 &= \phi_P \int_{V_P} dV + \left[\int_{V_P} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) dV \right] \cdot (\nabla\phi)_P \\
 &= \phi_P V_P
 \end{aligned} \tag{3.80}$$

- **Integrales del grupo (2)**

Algunas integrales de volúmenes se expresan como integrales de superficie vía el teorema de Gauss y Stokes:

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} \tag{3.81}$$

$$\int_V \nabla \phi dV = \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S} \tag{3.82}$$

De esta expresión se puede calcular el gradiente de la solución en celdas, suponiendo que de la hipótesis de linealidad por celda su gradiente es constante y sale fuera de la integral, de forma que:

$$\nabla\phi_P = \frac{1}{V_P} \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S} = \frac{1}{V_P} \sum_f \phi_f \mathbf{S}_f \tag{3.83}$$

Esta expresión sigue siendo usada en el caso que se requiera el gradiente de un campo vectorial, cuya operación involucra álgebra tensorial.

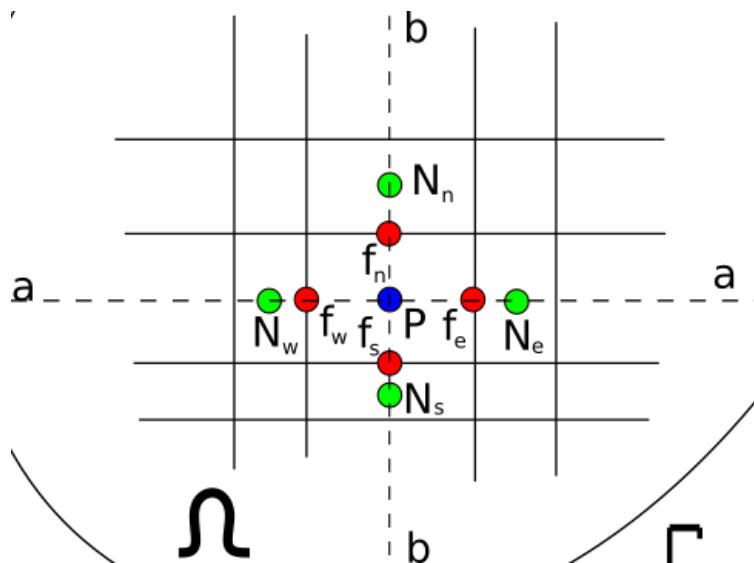


Figura 3.27: Discretización espacial de FVM. Visión elemental

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V} \mathbf{a} \otimes d\mathbf{S} \quad (3.84)$$

Entonces las integrales de superficie que involucran operadores divergencia, tal como hemos visto para nuestro problema, se expresan como sumas sobre caras:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_{\partial V_P} \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} = \sum_f \left(\int_f \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} \right) \quad (3.85)$$

Teniendo en cuenta que $\mathbf{a} = \mathbf{a}_f + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) : (\nabla \mathbf{a})_f$, entonces:

$$\int_f \mathbf{a} \cdot d\mathbf{S} = \left(\int_f d\mathbf{S} \right) \cdot \mathbf{a}_f + \left[\int_f (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} \right] : (\nabla \mathbf{a})_f = \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f$$

$$(\nabla \cdot \mathbf{a}) V_P = \sum_f \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f \quad (3.86)$$

Por razones de eficiencia informática la suma sobre caras se realiza de la siguiente forma:

$$\sum_f \mathbf{S} \cdot \mathbf{a}_f = \sum_{\text{owner}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{a}_f - \sum_{\text{neighbour}} \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{a}_f \quad (3.87)$$

3.1.5.3. Términos de convección

La discretización del término de convectivo es la siguiente:

$$\begin{aligned}
 \int_{V_P} \nabla \cdot \left(\underbrace{\rho \mathbf{U} \phi}_{\mathbf{a}} \right) dV &= \sum_f \mathbf{S} \cdot \left(\underbrace{\rho \mathbf{U} \phi}_{\mathbf{a}} \right)_f \\
 &= \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \phi_f \\
 &= \sum_f F \phi_f
 \end{aligned} \tag{3.88}$$

donde F en Eqn. (3.88) representa el flujo de masa que atraviesa una cara:

$$F = \mathbf{S} \cdot (\rho \mathbf{U})_f \tag{3.89}$$

- Como calcular el valor de ϕ_f a partir de los valores de ϕ_P y ϕ_N
- Propiedades físicas de la convección: acotación de ϕ . Preservación de las formas y de los valores extremos.

3.1.5.4. Esquema de Diferenciación de la Convección

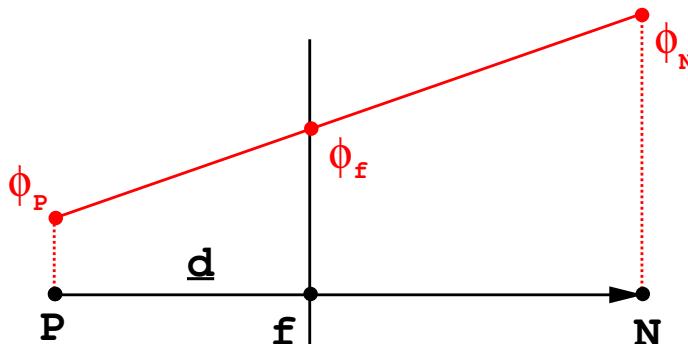


Figura 3.28: Interpolación en la cara

Asumiendo una variación lineal de ϕ entre P y N , Figura 3.28, el valor en la cara se calcula de acuerdo con:

$$\phi_f = f_x \phi_P + (1 - f_x) \phi_N \tag{3.90}$$

el factor de interpolación f_x se define como la relación de distancias \overline{fN} y \overline{PN} :

$$f_x = \frac{\overline{fN}}{\overline{PN}} \tag{3.91}$$

- **Central Differencing (CD)**
- Segundo orden
- No está acotado para el operador de convección

Un esquema de discretización alternativo que garantiza esta acotación es conocido como **Upwind Differencing (UD)**. El valor de ϕ en las caras se determina de acuerdo con la dirección del flujo:

$$\phi_f = \begin{cases} \phi_P & \text{for } F \geq 0 \\ \phi_N & \text{for } F < 0 \end{cases} \quad (3.92)$$

- **Upwind Differencing (UD)**
- Primer orden
- Es acotado para el operador de convección

Blended Differencing (BD) ([ver [5] ref. 109]) representa una propuesta de preservar ambas características, acotación y precisión en la solución. Es una combinación lineal de un esquema UD, Eqn. (3.90) con uno CD, Eqn. (3.93):

$$\phi_f = (1 - \gamma) (\phi_f)_{UD} + \gamma (\phi_f)_{CD} \quad (3.93)$$

o

$$\begin{aligned} \phi_f = & [(1 - \gamma) \max(\operatorname{sgn}(F), 0) + \gamma f_x] \phi_P \\ & + [(1 - \gamma) \min(\operatorname{sgn}(F), 0) + \gamma (1 - f_x)] \phi_N \end{aligned} \quad (3.94)$$

El factor de blending γ , el cual varía de $0 \leq \gamma \leq 1$, determina cuanta difusión numérica será introducida.

3.1.5.5. Término de Difusión

El término de difusión será discretizado en una forma similar. Usando la hipótesis de variación lineal de ϕ y la Eqn. 3.86), tenemos:

$$\begin{aligned} \int_{V_P} \nabla \cdot \left(\underbrace{\rho \Gamma_\phi \nabla \phi}_\mathbf{a} \right) dV &= \sum_f \mathbf{S} \cdot \left(\underbrace{\rho \Gamma_\phi \nabla \phi}_\mathbf{a} \right)_f \\ &= \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \end{aligned} \quad (3.95)$$

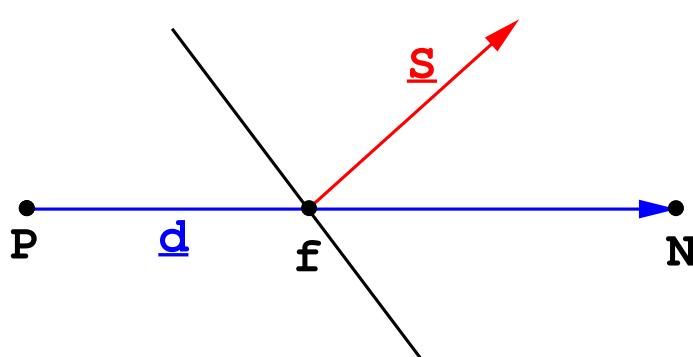


Figura 3.29: Vector d and S on a non-orthogonal mesh

Si la malla es ortogonal,i.e. los vectores \mathbf{d} y \mathbf{S} en la Figura 3.29 son paralelos, es posible usar la siguiente expresión:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla\phi)_f = |\mathbf{S}| \frac{\phi_N - \phi_P}{|\mathbf{d}|} \quad (3.96)$$

Usando la Eqn. (3.96), el gradiente de ϕ en la cara se puede calcular a partir de los dos valores alrededor de la cara. Una alternativa sería calcular el gradiente pero centrado en la celda para las dos celdas que comparten la cara como ¹:

$$(\nabla\phi)_P = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S}\phi_f \quad (3.97)$$

interpolándolo sobre la cara:

$$(\nabla\phi)_f = f_x (\nabla\phi)_P + (1 - f_x) (\nabla\phi)_N \quad (3.98)$$

y luego multiplicándolo escalarmente con \mathbf{S} para ser aplicado en 3.95

- Ambos métodos son de segundo orden, aunque el primero es ligeramente mas preciso
- El segundo requiere involucrar mayor número de celdas haciendo crecer el stencil o molécula computacional
- Al primero así como está definido no puedo emplearse en mallas no ortogonales

Desafortunadamente la ortogonalidad de la malla es mas una excepción que una regla. Para poder aprovechar la mayor precisión de Eqn. (3.96), el producto $\mathbf{S} \cdot (\nabla\phi)_f$ se lo divide en dos partes:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla\phi)_f = \underbrace{\Delta \cdot (\nabla\phi)_f}_{\text{orthogonal contribution}} + \underbrace{\mathbf{k} \cdot (\nabla\phi)_f}_{\text{non-orthogonal correction}} \quad (3.99)$$

Los dos vectores introducidos en Eqn. (3.99), Δ and \mathbf{k} , satisfacen la siguiente condición:

$$\mathbf{S} = \Delta + \mathbf{k} \quad (3.100)$$

El vector Δ se elige paralelo con \mathbf{d} . Esto nos permite usar Eqn. (3.96) sobre la contribución ortogonal, limitando el método en cuanto a su menor precisión solo a la parte no ortogonal que no puede ser tratada de otra forma.

Existen muchas posibles descomposiciones, aquí examinamos las siguientes tres de ellas:

- **Minimum correction approach.** La decomposición de \mathbf{S} , Figura 3.30, se hace de forma tal de mantener la corrección no ortogonal en Eqn. (3.99) tan pequeña como sea posible, haciendo que Δ y \mathbf{k} sean ortogonales:

¹Por el teorema de Gauss

$$\int_{V_P} \nabla\phi dV = \oint_{\partial V} \phi d\mathbf{S}$$

$$\nabla\phi V_P = \sum_f \mathbf{S}\phi$$

$$\nabla\phi = \frac{1}{V_P} \sum_f \mathbf{S}\phi$$

$$\Delta = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}} \mathbf{d} \quad (3.101)$$

con k calculado a partir de Eqn. (3.100). A medida que la no ortogonalidad crece, la contribución desde ϕ_P y ϕ_N decrece.

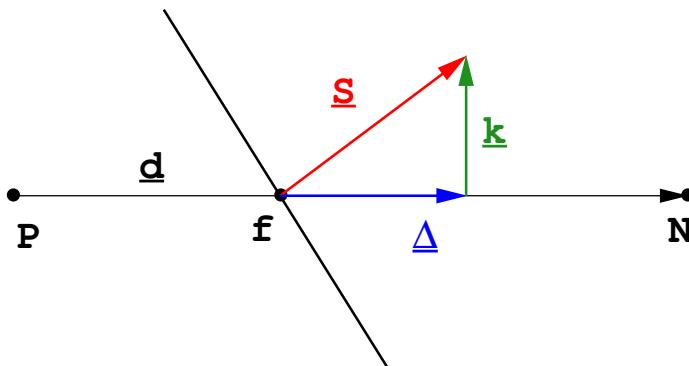


Figura 3.30: Non-orthogonality treatment in the 'minimum correction' approach

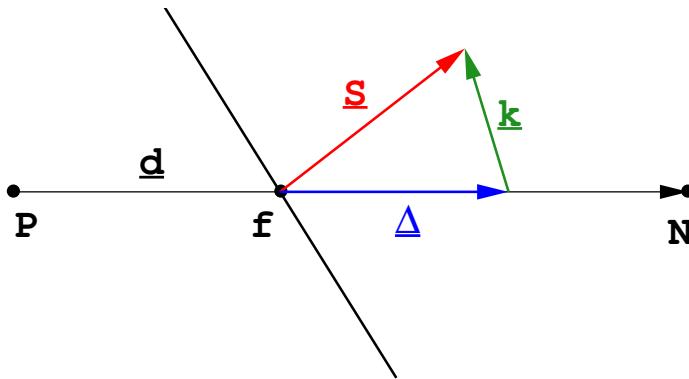


Figura 3.31: Non-orthogonality treatment in the 'orthogonal correction' approach

- **Orthogonal correction approach.** (Figura 3.31) Esta aproximación mantiene la misma contribución de ϕ_P y ϕ_N que aquella de la parte ortogonal independientemente de la no ortogonalidad.

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{|\mathbf{d}|} |\mathbf{S}| \quad (3.102)$$

- **Over-relaxed approach** (Figura 3.32). En esta aproximación la importancia del término en ϕ_P y ϕ_N aumenta con el incremento de la no ortogonalidad:

$$\Delta = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}} |\mathbf{S}|^2 \quad (3.103)$$

- El término difusivo exhibe un comportamiento acotado.
- La corrección no ortogonal compromete potencialmente la acotación.
- la *Over-relaxed approach* es la que exhibe las mejores propiedades de estabilidad y precisión.

Finalmente resumiendo tenemos:

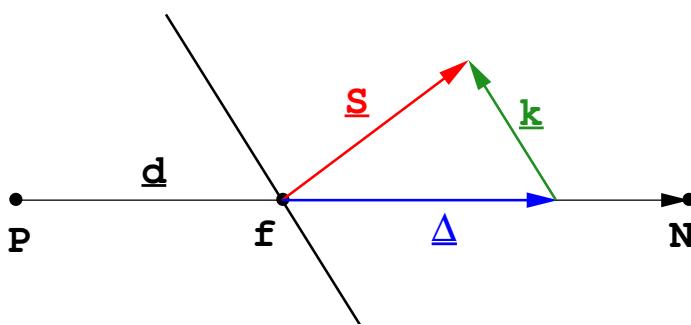


Figura 3.32: Non-orthogonality treatment in the 'over-relaxed' approach

$$\Delta \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} \quad (3.104)$$

$$S \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N - \phi_P}{|d|} + k \cdot (\nabla \phi)_f \quad (3.105)$$

3.1.5.6. Términos Fuentes

Version linealizada:

$$S_\phi(\phi) = Su + Sp\phi \quad (3.106)$$

donde Su es la parte constante de la fuente y Sp es la parte que depende linealmente de ϕ . Siguiendo Eqn. 3.106, la integral de volumen se calcula como:

$$\int_{V_P} S_\phi(\phi) dV = Su V_P + Sp V_P \phi_P \quad (3.107)$$

La importancia de la linealización se vuelve clara en cálculos implícitos. Es aconsejable tratar el término fuente de la forma mas implícita posible. Esto será posteriormente explicado cuando abordemos las estrategias de solución de la técnica

3.1.5.7. Discretización Temporal

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_P} \rho \phi dV + \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV - \int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV \right] dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{V_P} S_\phi(\phi) dV \right) dt \end{aligned}$$

Usando Eqs. (3.88, 3.105 y 3.107), y asumiendo que los volúmenes de control no cambian en el tiempo, la Eqn. (3.79) puede escribirse como:

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P V_P + \sum_f F \phi_f - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \right] dt = \int_t^{t+\Delta t} (Su V_P + Sp V_P \phi_P) dt \quad (3.108)$$

(3.109)

La expresión anterior es normalmente llamada la forma 'semi-discretizada' de la ecuación de transporte ([6]).

Teniendo en mente la variación prescrita de la función en el tiempo, Eqn. (3.75), las integrales temporales y las derivadas temporales se pueden calcular directamente como:

$$\left(\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P^n \phi_P^n - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \quad (3.110)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \phi(t) dt = \frac{1}{2} (\phi^0 + \phi^n) \Delta t \quad (3.111)$$

donde

$$\begin{aligned} \phi^n &= \phi(t + \Delta t) \\ \phi^0 &= \phi(t) \end{aligned} \quad (3.112)$$

Asumiendo que la densidad y la difusividad no cambian en el tiempo, Eqs.(3.109, 3.110 y 3.111) dan:

$$\begin{aligned} &\frac{\rho_P \phi_P^n - \rho_P \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \frac{1}{2} \sum_f F \phi_f^n - \frac{1}{2} (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^n \\ &+ \frac{1}{2} \sum_f F \phi_f^0 - \frac{1}{2} (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^0 \\ &= Su V_P + \frac{1}{2} Sp V_P \phi_P^n + \frac{1}{2} Sp V_P \phi_P^0 \end{aligned} \quad (3.113)$$

Esta forma de discretización temporal es conocido como el método de **Crank-Nicholson**.

- Es de segundo orden en el tiempo
- Método de discretización temporal de Crank-Nicholson es incondicionalmente estable
- No garantiza acotación

En términos generales, el esquema de integración temporal θ se escribe como

$$\begin{aligned} &\frac{\rho_P \phi_P^n - \rho_P \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f^{n+\theta} - (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^{n+\theta} \\ &= Su V_P + Sp V_P \phi_P^{n+\theta} \end{aligned} \quad (3.114)$$

donde $\theta = \frac{1}{2}$ equivale al método de segundo orden de Crank-Nicholson, $\theta = 0$ sería el caso explícito y $\theta = 1$ el implícito.

Quedando el stencil computacional de la siguiente forma:

$$a_P \phi_P^n + \sum_N a_N \phi_N^n = R_P \quad (3.115)$$

Tenemos una ecuación de esta forma para todos los volúmenes de control. El valor de ϕ_P^n depende sobre los valores en las celdas vecinas, creando de esta forma un sistema de ecuaciones:

$$[A] [\phi] = [R] \quad (3.116)$$

donde $[A]$ es una matriz rala (*sparse matrix*), con coeficientes a_P sobre la diagonal y a_N fuera de la diagonal, $[\phi]$ son los vectores de ϕ -s para todos los volúmenes de control y $[R]$ es el vector de términos fuente.

3.1.5.8. Esquemas de primer orden

Como habíamos visto la integración temporal la podemos generalizar usando 3.114, la cual volvemos a escribir aquí

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P \phi_P^n - \rho_P \phi_P^0}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f^{n+\theta} - (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^{n+\theta} \\ = S_u V_p + S_p V_p \phi_P^{n+\theta} \end{aligned} \quad (3.117)$$

En la **discretización explícita**, en 3.117 $\theta = 0$, los valores sobre las caras de ϕ y $\nabla \phi$ necesarios para evaluar las contribuciones advecivas y difusivas, se determinan exclusivamente a partir del campo solución del paso de tiempo anterior:

$$\phi_f = f_x \phi_P^0 + (1 - f_x) \phi_N^0 \quad (3.118)$$

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N^0 - \phi_P^0}{|d|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f^0 \quad (3.119)$$

La parte lineal del término fuente se evalúa también usando enteramente el valor en el paso de tiempo anterior. De esta forma la Eqn. (3.117) puede escribirse de la siguiente manera:

$$\phi_P^n = \phi_P^0 + \frac{\Delta t}{\rho_P V_P} \left[\sum_f F \phi_f^0 - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^0 + S_u V_P + S_p V_p \phi_P^0 \right] \quad (3.120)$$

- No requiere resolver ningún sistema de ecuaciones, lo cual implica un reducido costo computacional, orden N , siendo N el número de incógnitas del problema.
- Es de primer orden, es decir que puedo reducir el error solo a la mitad refinando el paso de tiempo a la mitad, con el doble de costo aproximadamente para arribar al mismo tiempo final.
- Limitación en el paso de tiempo por problemas de estabilidad numérica, falta de acotación temporal si el paso de tiempo es excesivo.

- Esta es una severa limitación, especialmente si esta tratando de resolver un problema en estado estacionario. En la siguiente sección veremos algunos detalles acerca de esta severa limitación.

Otra alternativa de integración temporal es usar un método de diferencias hacia atrás en el tiempo, conocido como *Método de Euler* o **discretización implícita**. Este método expresa los términos que definen la tasa de cambio temporal (todos los términos de la ecuación 3.117 menos el término temporal) usando campos o valores a calcular, tanto sobre las caras como sobre las celdas, empleando aquellos sobre las celdas que corresponden al paso de tiempo actual, es decir:

$$\phi_f = f_x \phi_P^n + (1 - f_x) \phi_N^n \quad (3.121)$$

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f = |\Delta| \frac{\phi_N^n - \phi_P^n}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \phi)_f \quad (3.122)$$

- Requiere resolver un sistema de ecuaciones, lo cual en términos de costo involucra uno de $O(N^3)$, significativamente mayor respecto al caso explícito.
- Es de primer orden como el explícito, es decir, solo podemos aspirar a reducir el error de integración temporal linealmente con el refinamiento en el paso de tiempo.
- No tiene limitación en el paso de tiempo en el caso lineal, una ventaja que contrapesa la desventaja propia del excesivo costo.
- En general suele ser una estrategia conveniente para resolver problemas en estado estacionario. En el caso transitorio hay que evaluar si el fenómeno físico tiene una frecuencia natural temporal mayor o menor a la que restringe la estabilidad numérica temporal. En la próxima sección ampliaremos un poco mas sobre esto.

Hay muchas otras propuestas para discretizar la variable tiempo. En OpenFOAM existe una denominada **Backward Differencing in time** que es de segundo orden de precisión en el tiempo pero no centrada.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\frac{3}{2}\phi^n - 2\phi^0 + \frac{1}{2}\phi^{00}}{\Delta t} \quad (3.123)$$

que surge de una manera similar a los esquemas estudiados en diferencias finitas que requieren un cierto orden de precisión, en este caso segundo orden, con algunas restricciones, en este caso que sea no centrado.

$$\begin{aligned} \frac{\frac{3}{2}\rho_P \phi^n - 2\rho_P \phi^0 + \frac{1}{2}\rho_P \phi^{00}}{\Delta t} V_P + \sum_f F \phi_f^n - \sum_f (\rho \Gamma_\phi) \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f^n \\ = S_u V_P + S_p V_P \phi_P^n \end{aligned} \quad (3.124)$$

Esto produce un sistema de ecuaciones algebraico que debe resolverse para ϕ_P^n .

$$\begin{aligned}
 & \frac{\frac{3}{2}\rho_P\phi_P^n - 2\rho_P\phi_P^0 + \frac{1}{2}\rho_P\phi_P^{00}}{\Delta t} V_P \\
 & + \sum_f F \left(f_x \phi_P^n + (1 - f_x) \phi_N^n(f) \right) \\
 & - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f |\mathbf{S}_f| (\phi_N^n(f) - \phi_P^n) \\
 & = Su V_P + Sp V_P \phi_P^n
 \end{aligned} \tag{3.125}$$

donde se ha asumido que la malla es ortogonal y sin skewness, es decir, la recta que une los centros de celdas vecinas por una cara pasan por el centroide de la cara (no skewness) y es paralela a la normal a la cara (ortogonalidad). Un detalle no menor, la ecuación anterior se ha escrito reemplazando valores en cara por valores en celda, usando diferencias centradas o aproximaciones lineales (no upwind) por una cuestión de simplicidad de notación. En ella vemos la presencia de $\phi_N^n(f)$ que representa para cada cara f de la celda P en cuestión, su vecino por dicha cara.

La expresión 3.142 resume el contenido de un stencil producido por el método de los volúmenes finitos.

Problemas estacionarios son bastante comunes en la mecánica computacional. Su característica es que la solución a largo plazo no depende del tiempo, y nuestro interés es saber la solución en esa condición, *i.e.* la ecuación de transporte anterior se reduce a:

$$\nabla \cdot (\rho \nabla \phi) - \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) = Su + Sp \phi \tag{3.126}$$

lo cual numéricamente equivale a

$$\begin{aligned}
 & \sum_f F \left(f_x \phi_P^n + (1 - f_x) \phi_N^n(f) \right) - \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f |\mathbf{S}_f| (\phi_N^n(f) - \phi_P^n) \\
 & = Su V_P + Sp V_P \phi_P^n
 \end{aligned} \tag{3.127}$$

3.1.5.9. Estabilidad numérica

Como hemos mencionado uno de los principales inconvenientes de los métodos explícitos es su limitada estabilidad numérica asociada con la integración temporal.

Sin entrar en detalles sobre como se analiza esta estabilidad, lo que nos llevaría a incluir un análisis de Fourier asumiendo que la solución es una onda con varias armónicas y viendo como se amplifica cada una de ellas de acuerdo a como se lo integra en el tiempo, el resultado al que se llega, en el caso exclusivamente lineal, es a que existe un paso de tiempo critico que nos obliga a usar un $\Delta t < \Delta t_{\text{crit}}$ motivo por el cual no podemos avanzar en el tiempo con toda la libertad que nos provee un método implícito. Ese Δt_{crit} se puede calcular en los casos extremos, puramente advectivos (sin difusión) o puramente difusivos (sin advección) y luego usar una combinación para el caso en que existan ambos. En general una forma de interpretar la estabilidad es recurriendo a evaluar las formas en que se transmite la información, tanto física como numéricamente. En el caso puramente advectivo la velocidad \vec{v} es el medio que nos provee la física para transportar información, mientras que es la discretización espacial y temporal la que genera una velocidad de transporte numérico, $\vec{v}_{\text{num}} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ que debe permitir contener a la primera, es decir, que debe ser capaz de poder seguir la evolución física del problema en este caso con la dinámica impuesta por la velocidad \vec{v} .

Entonces, la condición es que

$$\vec{v} < \vec{v}_{\text{num}} = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

para lo cual definimos un numero adimensional entre ambas velocidades, denominado, **Courant** (Co)

$$Co = \frac{|\vec{v}| \Delta t}{\Delta x} \quad (3.128)$$

con la condición que el número de Courant sea menor que la unidad, caso contrario el sistema explícito se vuelve inestable. Esa condición se la conoce con el nombre de **condición CFL** en honor a las letras iniciales de tres investigadores que trabajaron para ello.

$$Co = \frac{|\vec{v}| \Delta t}{\Delta x} < O(1) \quad (3.129)$$

En realidad lo de menor a la unidad puede variar de acuerdo a varias razones, motivo por el cual resulta mas apropiado decir que es $O(1)$ con un valor que se ajusta muchas veces por la experiencia.

En el caso difusivo puro, el mecanismo de transporte es la difusión Γ_ϕ la cual tiene unidades de $\frac{m^2}{sec}$. Para generar un numero adimensional haría falta generar un cociente $\Gamma_{\phi,\text{num}} = \frac{\Delta x^2}{\Delta t}$ el cual nos permite definir el numero adimensional conocido como **Fourier**, en honor a quien ha sido uno de los investigadores en el área de las soluciones analíticas a problemas de conducción del calor y que se define como:

$$Fo = \frac{\Gamma_\phi \Delta t}{\Delta x^2} < O(1) \quad (3.130)$$

Ambas condiciones se deberían cumplir si están presentes ambos términos, siendo la variable de ajuste nuevamente la experiencia en poder determinar con precisión para cada problema, cual es la verdadera cota que se puede usar, siempre considerando ser conservativos para evitar problemas numéricos que nos lleven a divergencia en el proceso numérico.

Normalmente se adopta

$$\Delta t < \min\left(\frac{\Delta x}{|\vec{v}|}; \frac{\Delta x^2}{\Gamma_\phi}\right) \quad (3.131)$$

3.1.5.9.1. Nota final No hay que confundir la estabilidad que hemos tratado, motivada por la forma de integrar temporalmente una ecuación, característica de cualquier sistema dinámico, con la estabilidad espacial que secciones atrás hemos analizado para el termino advectivo cuando se lo discretiza en forma centrada o usando interpolación lineal.

3.1.5.10. Implementación de las Condiciones de Contorno

- Condiciones de contorno numéricas
- Condiciones de contorno físicas

3.1.5.10.1. Condiciones de contorno numéricas

- Condiciones de contorno Dirichlet o Fixed Value
- Condiciones de contorno von Neumann o Fixed Gradient

Entre las otras condiciones de contorno, las de naturaleza física, podemos citar:

- Para problemas de la mecánica de fluidos,
 - Planos de simetría ,
 - Paredes Sólidas impenetrables y no deslizantes,
 - Paredes sólidas impenetrables pero deslizantes,
 - Entradas y
 - Salidas
- Para problemas de transferencia de calor,
 - Adiabáticas o
 - Temperatura impuesta.
 - Radiación
- Para problemas de elasticidad lineal,
 - Tracción impuesta
 - Desplazamiento impuesto.

3.1.5.11. Condiciones de contorno numéricas

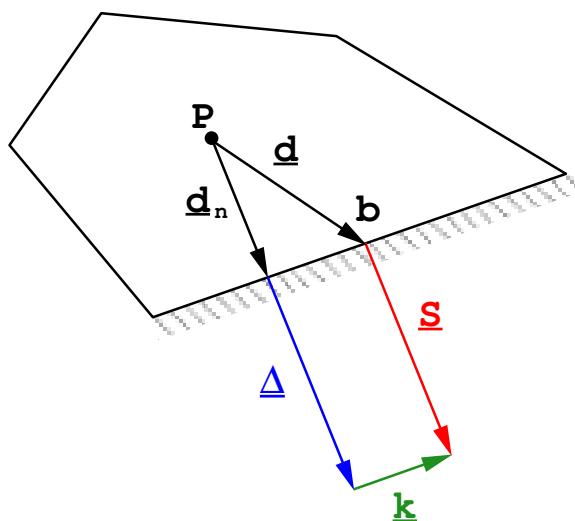


Figura 3.33: Control volume with a boundary face

$$\mathbf{d}_n = \frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \quad (3.132)$$

y en ese caso el vector de corrección \mathbf{k} no se usa degradando la precisión a primer orden. Se puede obtener segundo orden pero eso lo dejamos como lectura avanzada.

- Condición de contorno tipo Dirichlet o Fixed Value

Esta condición de contorno prescribe el valor de ϕ sobre la cara b a ser ϕ_b . Esto debe tenerse en cuenta a la hora de discretizar los términos de convección y difusión sobre las caras del borde.

Término de convección. Acorde a la Eqn. (3.88), el término de convección se discretiza como:

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \phi) dV = \sum_f F \phi_f \quad (3.133)$$

Sabiendo que el valor de ϕ sobre la cara del contorno es ϕ_b . Entonces, el término a incluir en la sumatoria sobre las caras cuando esta sumatoria visite una cara del contorno es:

$$F_b \phi_b \quad (3.134)$$

donde F_b es el flujo máscico sobre la cara.

Término de difusión. El término de difusión se discretiza acorde a la Eqn.(3.95).

$$\int_{V_P} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\phi \nabla \phi) dV = \sum_f (\rho \Gamma_\phi)_f \mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_f \quad (3.135)$$

El gradiente en la cara en b se calcula a partir de los valores conocidos en la cara como en el centroide de la celda:

$$\mathbf{S} \cdot (\nabla \phi)_b = |\mathbf{S}| \frac{\phi_b - \phi_P}{|\mathbf{d}_n|} \quad (3.136)$$

ya que \mathbf{S} y \mathbf{d}_n son paralelos.

- **Condición de contorno von Neumann o Fixed Gradient**

En el caso de una condición de contorno expresada en función del gradiente, el producto escalar del gradientes y la normal al contorno apuntando hacia afuera del mismo se prescribe como:

$$\left(\frac{\mathbf{S}}{|\mathbf{S}|} \cdot \nabla \phi \right)_b = g_b \quad (3.137)$$

Término de convección. Ahora el valor de ϕ en la cara debe calcularse a partir del valor en el centro de la celda propietaria de la cara de contorno y del gradiente prescrito:

$$\begin{aligned} \phi_b &= \phi_P + \mathbf{d}_n \cdot (\nabla \phi) \\ &= \phi_P + |\mathbf{d}_n| g_b \end{aligned} \quad (3.138)$$

Término difusión. El producto interno entre el vector área de la cara y $(\nabla \phi)_b$ es conocido y vale

$$|\mathbf{S}| g_b \quad (3.139)$$

y entonces el término resultante es

$$(\rho \Gamma_\phi)_b |\mathbf{S}| g_b \quad (3.140)$$

Como el vector \mathbf{d}_n no apunta al centroide de la cara de borde, las integrales de la cara en esta condición de contorno donde se prescribe el gradiente se calculan solo a primer orden de precisión. Esto puede ser mejorado agregando una corrección basada en el vector \mathbf{k} (Figura 3.33) y la componente del gradiente paralelo a la cara en la primer celda próxima al contorno. [...]².

²ver la tesis de Jasak, Section 3.6

3.1.6. Ejemplos

3.1.6.1. Ejercicio 2D sobre malla estructurada cartesiana

Este simple ejemplo nos permite recorrer algunas de las potencialidades del método vistas en apartados anteriores. La geometría es un rectángulo de $0,6 \times 0,3$ metros dividido en 3×3 celdas rectangulares de diferentes tamaños, como se muestra en la figura. Por otro lado se aplican sobre sus contornos distintas condiciones, en el contorno izquierdo una condición Dirichlet con una temperatura impuesta a $T^{\text{left}} = 320\text{ K}$, en el contorno derecho una condición de contorno de aislamiento o adiabática. En el borde superior una condición mixta o Robin con los parámetros $T_{\infty} = 300\text{ K}$ y un coeficiente pelicular $h = 20 \frac{W}{m^2 K}$. Finalmente en el borde inferior se aplican 2 condiciones de contorno, una de aislamiento para los primeros 0.1 metros en la dirección horizontal y un flujo uniforme impuesto de $q = 100 \frac{W}{m^2}$ en los restantes 0.5 metros. El dominio se haya compuesto de 2 tipos de materiales o medios continuos como muestra la figura, la porción de ancho 0.1 metros ubicada mas a la izquierda del dominio tiene una conductividad de $k = 10^{-3} \frac{W}{mK}$ mientras que la zona derecha de ancho 0.5 metros tienen una conductividad de $k = 10^2 \frac{W}{mK}$.

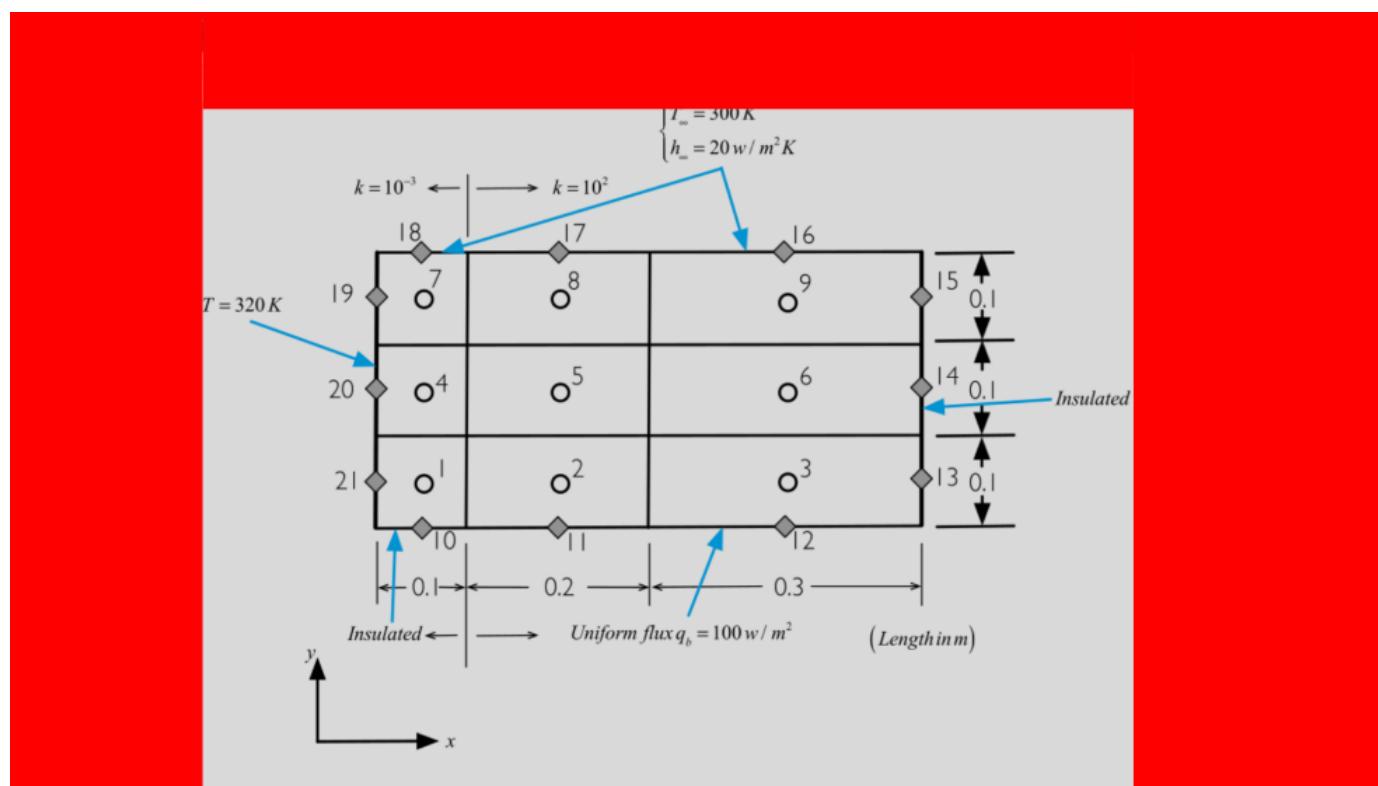


Figura 3.34: Ejercicio sobre malla estructurada cartesiana en 2D

Tomemos una celda de todas estas y tratemos de escribir el stencil de esa celda, y para comenzar tomamos una celda interior, la única que hay en este caso, la celda 5. Todas las otras celdas tienen al menos alguna de sus caras pisando el contorno del dominio general.

Supongamos que elegimos un esquema temporal de segundo orden descentrada en el tiempo, y un esquema de segundo orden centrado en el espacio. En volúmenes finitos, lo centrado de diferencias finitas equivale a una interpolación lineal, como ya hemos visto en las figuras 3.10 y en 3.12. En ese caso el stencil que habíamos escrito era

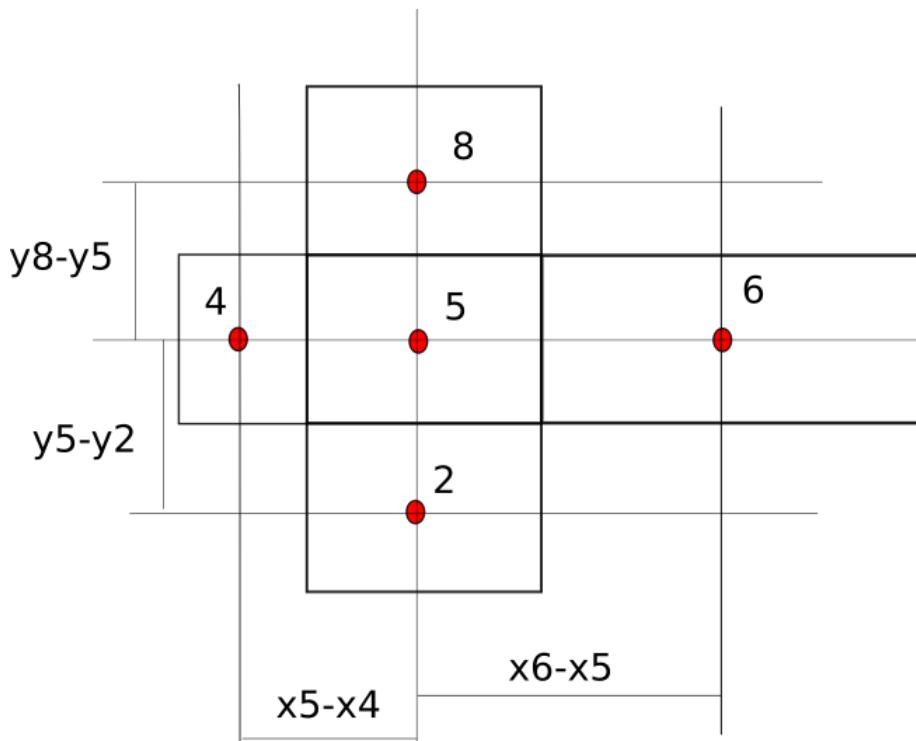


Figura 3.35: Cálculo sobre la Celda 5

$$\begin{aligned}
 & \frac{\frac{3}{2}\rho_P\phi_P^n - 2\rho_P\phi_P^0 + \frac{1}{2}\rho_P\phi_P^{00}}{\Delta t} V_P \\
 & + \sum_f F_f \left(f_x \phi_P^n + (1-f_x) \phi_N^n(f) \right) \\
 & - \sum_f (\rho\Gamma_\phi)_f |\mathbf{S}_f| (\phi_N^n(f) - \phi_P^n) \\
 & = S_u V_P + S_p V_P \phi_P^n
 \end{aligned} \tag{3.141}$$

donde en este caso $P = 5$ mientras que $N(f)$ depende de la cara, por ejemplo si recorro las caras en algún sentido, no es importante este hecho, lo importante es recorrer todas, sin importar el orden. Supongamos que recorro las caras comenzando con Este, la Norte, la Oeste y finalmente la Sur. En ese caso $f = 1 \rightarrow N = 6$, $f = 2 \rightarrow N = 8$, $f = 3 \rightarrow N = 4$ y $f = 4 \rightarrow N = 2$.

Asumiremos $\rho, \Gamma_\phi, S_u, S_p$ como constantes. Además f_x dependerá de cada cara, entonces usaremos una nomenclatura tal como $f_{x,56}$ para la cara que comparten las celdas 5 y 6. Del mismo modo F_{56} es el flujo másico a través de la cara que separa las celdas 5 y 6. Entonces, para la celda 5, el residuo \mathcal{R}_5

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_5 = & \frac{\frac{3}{2}\rho\phi_5^n - 2\rho\phi_5^0 + \frac{1}{2}\rho\phi_5^{00}}{\Delta t} V_5 \\
& + F_{56}(f_{x,56}\phi_5^n + (1-f_{x,56})\phi_6^n) \\
& + F_{58}(f_{x,58}\phi_5^n + (1-f_{x,58})\phi_8^n) \\
& + F_{54}(f_{x,54}\phi_5^n + (1-f_{x,54})\phi_4^n) \\
& + F_{52}(f_{x,52}\phi_5^n + (1-f_{x,52})\phi_2^n) \\
& - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,56}|(\phi_6^n - \phi_5^n) \\
& - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,58}|(\phi_8^n - \phi_5^n) \\
& - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,54}|(\phi_4^n - \phi_5^n) \\
& - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,52}|(\phi_2^n - \phi_5^n) \\
& - S_u V_5 - S_p V_5 \phi_5^n
\end{aligned} \tag{3.142}$$

Para calcular la matriz tangente, sea que residuo lineal o no lineal en cuanto a su dependencia con la incógnita ϕ , se deriva este residuo respecto a cada una de las variables del problema. Como el residuo de una celda solo están vinculado con la celda en cuestión y sus vecinas, esta derivada solo es no nula para aquellos casos en que la celda esté conectada con la incógnita. Esto está relacionado con lo siguiente:

$$\mathcal{R}(\phi^*) \neq 0 \tag{3.143}$$

$$\mathcal{R}(\phi^* + \Delta\phi) = \mathcal{R}(\phi^*) + \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\phi}|_{\phi^*} \Delta\phi + O(\Delta\phi^2) = 0 \tag{3.144}$$

$$\mathcal{K} = \frac{\partial\mathcal{R}}{\partial\phi}|_{\phi^*} \tag{3.145}$$

$$\mathcal{K} \Delta\phi = \mathcal{R}(\phi^*) \tag{3.146}$$

$$\Delta\phi = -\mathcal{K}^{-1}\mathcal{R}(\phi^*) \tag{3.147}$$

donde ϕ^* es una solución inicial o semilla.

Es decir, para el caso específico de la celda P , la fila P de la matriz \mathcal{K} tiene algunos elementos no nulos. Respecto a la columna N ese coeficiente en particular se calcula de la siguiente manera:

$$\mathcal{K}_{P,N} = \frac{\partial\mathcal{R}_P}{\partial\phi_N^n} \tag{3.148}$$

en nuestro caso, la celda 5 y sus vecinas, tenemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_{5,6} &= \frac{\partial\mathcal{R}_5}{\partial\phi_6} = F_{56}((1-f_{x,56})) - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,56}| \\
\mathcal{K}_{5,8} &= \frac{\partial\mathcal{R}_5}{\partial\phi_8} = F_{58}((1-f_{x,58})) - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,58}| \\
\mathcal{K}_{5,4} &= \frac{\partial\mathcal{R}_5}{\partial\phi_4} = F_{54}((1-f_{x,54})) - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,54}| \\
\mathcal{K}_{5,2} &= \frac{\partial\mathcal{R}_5}{\partial\phi_2} = F_{56}((1-f_{x,52})) - (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,52}| \\
\mathcal{K}_{5,5} &= \frac{\partial\mathcal{R}_5}{\partial\phi_5} = F_{56}f_{x,56} + F_{58}f_{x,58} + F_{54}f_{x,54} + F_{52}f_{x,52} + (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,56}| + (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,58}| + (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,54}| \\
&+ (\rho\Gamma_\phi)|\mathbf{S}_{f,52}| - S_p V_5 + \frac{\frac{3}{2}\rho}{\Delta t} V_5
\end{aligned}$$

Todo lo que no depende de las incógnitas van a parar al miembro derecho cuando uno evalúa el residuo en la solución inicial semilla ϕ^* . Por ejemplo el término $S_u V_5$ no entra en la matriz porque no depende de la incógnita pero si ingresa al sistema cuando evalúo el residuo que va a parar al miembro derecho.

3.1.6.2. Ejemplo 2D con triángulos pero sin skewness y ortogonal

El siguiente ejemplo muestra un caso de interés para una malla triangular, que al no tener skewness porque la recta que une centro de celdas pasa por el centrode de cada cara y la malla ser ortogonal porque la normal a cada cara es perpendicular a la recta que une los centros de celda, posibilita un cálculo directo a partir de lo ya aprendido. En la figura vemos que los 4 triángulos poseen 1 cara de contorno y 2 caras interiores y el sistema final a resolver seria de 4×4 .

Se recomienda resolver ese problema usando todo lo visto hasta ahora dejando libertad para elegir qué terminos incluir en la ecuación diferencial y qué condiciones de contorno usar.

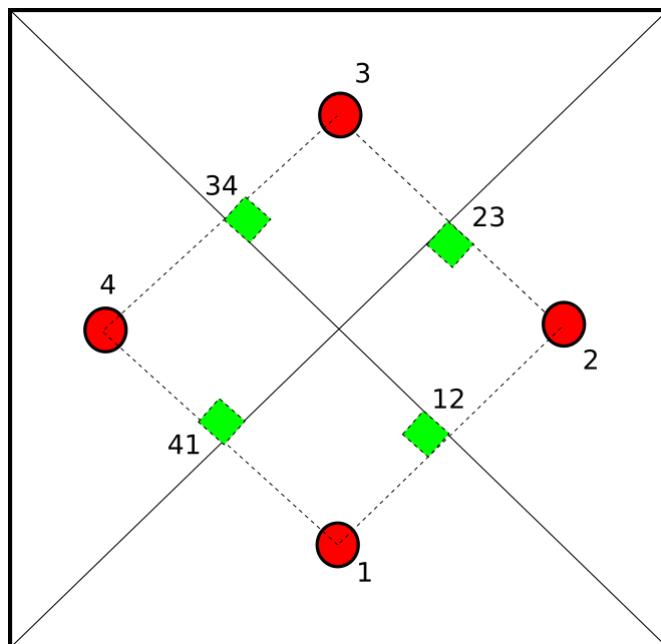


Figura 3.36: Ejemplo con 4 triángulos sin skewness y ortogonales

3.1.6.3. Ejemplo 1D. (exámen 2022)

En la siguiente figura vemos un dominio 1D con $L=1$ metro de longitud, dividido uniformemente en 4 celdas de tamaño h . La sección es constante con $A=2$ m². La difusividad es de 0.1 m²/seg y la convección está gobernada por una velocidad de 10 m/seg. Si imponemos como condiciones de contorno la temperatura en ambos extremos a un valor $T_L=10$ C y $T_R = 100$ C, en el dibujo T_1 y T_2 respectivamente, calcule:

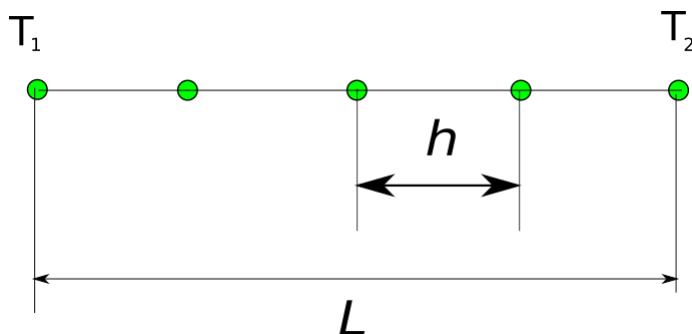


Figura 3.37: Ejemplo 1D de FVM

La distribución de temperaturas en el estado estacionario. La distribución de temperaturas a tiempo $t=0.05$ segundos si partimos de una condición inicial de temperatura uniforme igual al valor de la temperatura T_1 usando un esquema explícito. ¿Cómo elige el paso del tiempo?

3.1.6.3.1. Resolución Para resolver este problema de convección difusión no estacionario en principio usamos lo siguiente:

$$\rho C_p \left(\int_{\Omega} \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot (\mathbf{v} T) d\Omega \right) = \int_{\Omega} \nabla \cdot \kappa \nabla T d\Omega \quad (3.149)$$

De la teoría de volúmenes finitos surge la siguiente ecuación

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_P V_P = \sum_f \frac{\kappa}{\rho C_p} \nabla T \Big|_f \cdot \mathbf{S}_f - \sum_f \mathbf{v} \cdot \mathbf{S}_f T_f = \sum_f \frac{\kappa}{\rho C_p} \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| - \sum_f F_f T_f \quad (3.150)$$

Antes de continuar con el tratamiento de los términos de flujo debemos verificar si el número de Peclet del problema nos obliga a usar una discretización del operador de advección con upwind o podemos usar una interpolación lineal.

$$Pe = \frac{vh}{(\kappa/\rho C_p)} = \frac{10m/s \times 0,25m}{0,1m^2/s} = 25$$

evidentemente debemos usar una discretización con upwind.

Para las 2 celdas interiores tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_P V_P = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_{P+1} - T_P}{h} - \frac{T_P - T_{P-1}}{h} \right) |\mathbf{S}_f| - F_f (T_P - T_{P-1}) \quad (3.151)$$

con $F_f = v|\mathbf{S}_f|$ para $P = 2, 3$

Si $V_P = |\mathbf{S}_f|h$ podemos simplificar la participación del área transversal.

Para la celda $P = 1$ tenemos

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{P=1} V_P = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_{P+1} - T_P}{h} - \frac{T_P - T_L}{h/2} \right) |\mathbf{S}_f| - F_f(T_P - T_L) \quad (3.152)$$

y de manera similar para la celda $P = 4$

$$\frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{P=4} V_P = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_R - T_P}{h/2} - \frac{T_P - T_{P-1}}{h} \right) |\mathbf{S}_f| - F_f(T_P - T_{P-1}) \quad (3.153)$$

Combinando las 4 ecuaciones nos queda el siguiente sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} h = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_2 - T_1}{h} - \frac{T_1 - T_L}{h/2} \right) - v(T_1 - T_L) \quad (3.154)$$

$$\frac{\partial T_2}{\partial t} h = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_3 - T_2}{h} - \frac{T_2 - T_1}{h} \right) - v(T_2 - T_1) \quad (3.155)$$

$$\frac{\partial T_3}{\partial t} h = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_4 - T_3}{h} - \frac{T_3 - T_2}{h} \right) - v(T_3 - T_2) \quad (3.156)$$

$$\frac{\partial T_4}{\partial t} h = \frac{\kappa}{\rho C_p} \left(\frac{T_R - T_4}{h/2} - \frac{T_4 - T_3}{h} \right) - v(T_4 - T_3) \quad (3.157)$$

Dada la condición inicial donde $T_P = T_L \forall P = 1 : 4$, se resuelve la dinámica de esta evolución y si elegimos un paso de tiempo suficientemente largo veremos el estado de equilibrio , que equivale a anular los términos a la izquierda de la igualdad, es decir calcular el siguiente sistema:

$$\begin{pmatrix} 3 + Pe & -1 & 0 & 0 \\ -(1 + Pe) & 2 + Pe & -1 & 0 \\ 0 & -(1 + Pe) & 2 + Pe & -1 \\ 0 & 0 & -(1 + Pe) & 3 + Pe \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (2 + Pe) T_L \\ 0 \\ 0 \\ 2 T_R \end{pmatrix} \quad (3.158)$$

Integrando y tomando la solución a los $t = 0,05$ segundos tenemos

$$\begin{pmatrix} 1,0000e + 01 \\ 1,0003e + 01 \\ 1,0157e + 01 \\ 1,5829e + 01 \end{pmatrix} \quad (3.159)$$

y la solución estacionaria es

$$\begin{pmatrix} 1,0000e + 01 \\ 1,0010e + 01 \\ 1,0256e + 01 \\ 1,6667e + 01 \end{pmatrix} \quad (3.160)$$

3.1.6.4. Ejemplo 2D con 1 solo triángulo. (exámen 2022)

La siguiente figura nos muestra un dominio triangular equilátero que consta de una única celda en la cual se pretende resolver el balance térmico cuando solo el modo de transferencia por conducción se tiene en cuenta, en principio en estado estacionario. Si la longitud característica del triángulo es de 1 m, la conducción $k=205 \text{ W/m/K}$, y se aplican 3 tipos diferentes de condiciones de contorno sobre cada una de sus 3 caras. En la cara 1, la inferior, se aplica una condición mixta con un coeficiente pelicular $h=100 \text{ W/m}^2/\text{K}$ y una temperatura de referencia de 50 Celsius. En la cara marcada como 2 en la figura se aplica una condición Neumann con un flujo $\bar{q}= 100 \text{ W/m}^2$ y en la restante, la cara 3, una condición Dirichlet a una temperatura $T=40 \text{ Celsius}$. Siendo la densidad del material (aluminio) de 2700 kg/m^3 y su calor específico de 900 J/kg/K ,

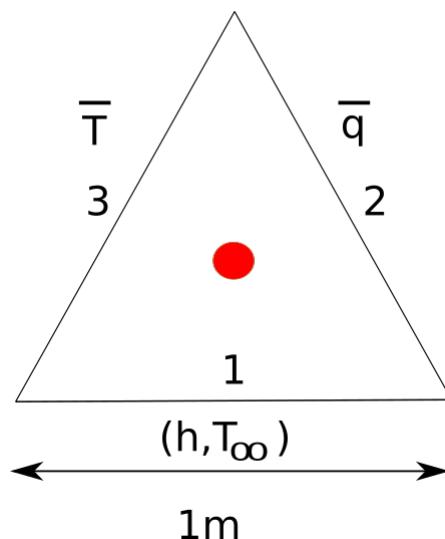


Figura 3.38: Ejemplo con 1 solo triángulo

Se pide calcular: La ecuación diferencial a resolver. El stencil del único grado de libertad que queda por resolver, la temperatura de la celda en cuestión. Cuál es la temperatura que alcanza la celda en estado estacionario. Si suponemos que deseamos resolver la evolución temporal de la temperatura de la celda, ¿cuál es la ecuación a resolver? Si la temperatura inicial de la celda fuera de 10 Celsius, ¿cuál sería la temperatura de la celda al cabo de 1 hora si lo resolvemos con un esquema temporal de al menos segundo orden de precisión?

3.1.6.4.1. Resolución Vamos a plantear el problema de conducción del calor no estacionario a resolver.

$$\int_{\Omega} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \cdot \kappa \nabla T d\Omega \quad (3.161)$$

De la teoría de volúmenes finitos surge la siguiente ecuación a resolver

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_P V_P = \sum_f \kappa \nabla T \Big|_f \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f \kappa \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| \quad (3.162)$$

donde hemos considerado que la densidad ρ , el calor específico C_p y la conductividad κ son constantes y además por tratarse de 1 sola celda, más aún.

Vamos a calcular la contribución por cara.

1. Cara 1 (inferior). Condición mixta

$$\begin{aligned}
 k_f \frac{dT}{d\eta} \Big|_f + h_f(T_f - T_\infty) &= 0 \\
 \text{then if Taylor 1st order } \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \Big|_f &= \frac{T_f - T_P}{\Delta} \\
 \text{so } T_f \rightarrow T_R = \frac{h_f T_\infty + \frac{k_f}{\Delta} T_P}{h_f + \frac{k_f}{\Delta}} &= \frac{T_P + Bi T_\infty}{1 + Bi} \\
 \text{then } k_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| &= k_f \frac{T_R - T_P}{\Delta} |\mathbf{S}_f| \\
 \text{finally } k_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f &= k_f \frac{\frac{T_P + Bi T_\infty}{1 + Bi} - T_P}{\Delta} |\mathbf{S}_f| \\
 \text{simplificando } k_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f &= k_f \frac{Bi (T_\infty - T_P)}{\Delta (1 + Bi)} |\mathbf{S}_f|
 \end{aligned} \tag{3.163}$$

con el número adimensional frecuentemente asociado al número de Biot inspirado en la longitud característica Δ como:

$$Bi = \frac{h_f \Delta}{k_f}$$

2. Cara 2 (derecha). Condición Neumann

$$\begin{aligned}
 -\kappa_f \frac{\partial T}{\partial \eta} \Big|_f &= \bar{q} \\
 \text{then } k_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| &= -\bar{q} |\mathbf{S}_f|
 \end{aligned} \tag{3.164}$$

3. Cara 3 (izquierda). Condición Dirichlet

$$\begin{aligned}
 T_f &= \bar{T} \\
 \text{then } \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \Big|_f &= \frac{\bar{T} - T_P}{\Delta/2} \\
 \text{then } \kappa_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f &= \kappa_f \frac{\partial T_f}{\partial \eta} \Big|_f |\mathbf{S}_f| = \kappa_f \frac{\bar{T} - T_P}{\Delta} |\mathbf{S}_f|
 \end{aligned} \tag{3.165}$$

con $\Delta = 1/3$ de la altura del triángulo que es de $\sqrt{3}/2 \times L$.

Agrupando todas las contribuciones nos queda:

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} \Big|_P V_P = \sum_f \kappa \nabla T \Big|_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f (\nabla T)_f \cdot \mathbf{S}_f = k_f \frac{Bi (T_\infty - T_P)}{\Delta (1 + Bi)} |\mathbf{S}_f| - \bar{q} |\mathbf{S}_f| + \kappa_f \frac{\bar{T} - T_P}{\Delta} |\mathbf{S}_f| \tag{3.166}$$

Resaltando la única incógnita de nuestro problema

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} \Big|_P V_P = k_f \frac{Bi (T_\infty - T_P)}{\Delta (1 + Bi)} |\mathbf{S}_f| - \bar{q} |\mathbf{S}_f| + \kappa_f \frac{\bar{T} - T_P}{\Delta} |\mathbf{S}_f| \tag{3.167}$$

esta ecuación diferencial ordinaria se puede resolver apelando a algún método de integración de los comúnmente empleados como Runge-Kutta (ODE45 en Octave) o sino a un simple integrador de manufactura propia siguiendo un método tipo Euler, explícito, implícito o semi-implícito.

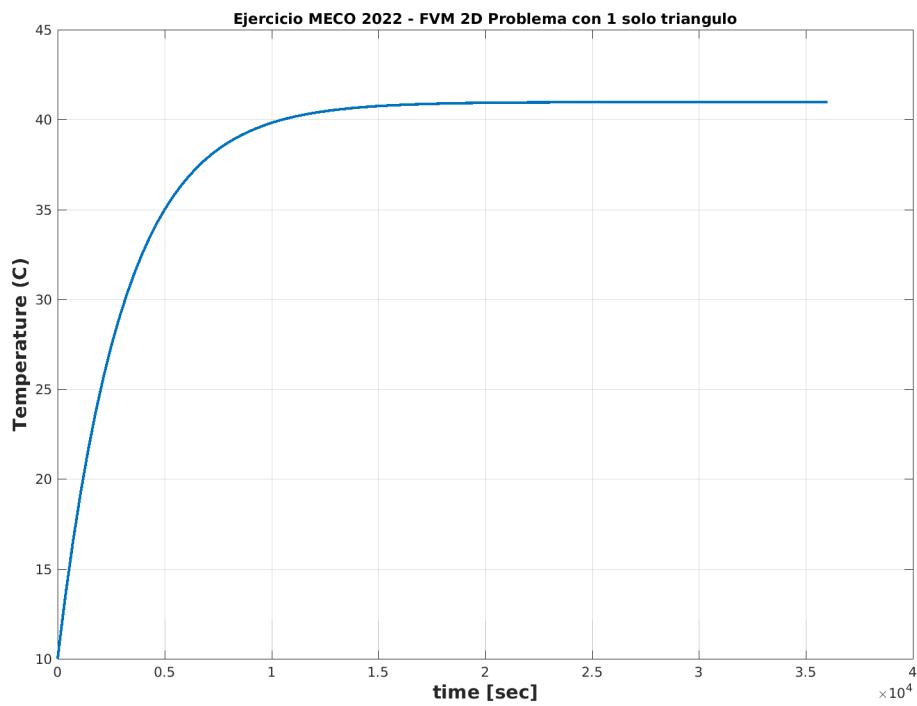


Figura 3.39: Ejemplo con 1 solo triángulo - Evolución temporal de la temperatura

La temperatura estacionaria que alcanza es de $T = 40,624$ Celsius , valor que por encima de 10 mil segundos no cambia, es decir algo cercano a 3 horas. Los flujos de calor por las 3 caras al estado estacionario se deben cancelar entre si, como lo muestran sus valores:

$$q_1 = 791,26; q_2 = -100; q_3 = -691,07$$

expresados en Watts. Por la cara 1 ingresa calor que sale por las caras 2 y 3.

3.1.6.5. Ejemplo 2D con condiciones de radiación

COMPLETARLO DE ACUERDO AL EXAMEN MNFT 2022

Bibliografía

- [1] <http://en.wikipedia.org/wiki/OpenFOAM>
- [2] <http://www.openfoam.org>
- [3] Ferziger, J.H.; Peric, M. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 1995
- [4] Versteeg, H.K.; Malalasekera, W. *An introduction to Computational Fluid Dynamics*, 1st. edition.
- [5] Jasak, H. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1996.
- [6] Hirsch, C. *Numerical Computation of internal and external flows*, 1991.
- [7] Patankar, S.V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, 1981.
- [8] Karrholm, F.P. *Rhie-Chow interpolation in OpenFOAM*, 2006.
- [9] Jasak, H. *Numerical Solution Algorithms for Compressible Flows*, Lecture Notes for University of Zagreb.
- [10] Hirt, C.W.; Nichols B.D. *Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries*, Journal of Computational Physics, Vol. 39, 1, p. 201-225
- [11] Ubbink, O. *Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1997.
- [12] Ubbink, H. *Computational Fluid Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows at High Phase Fractions*, Ph.D Thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 2002.
- [13] Berberovic, E.; Van Hinsberg, N.P.; Jakirlic, S.; Roisman, I.V; Tropea, C. *Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution*, Physical Review E, 79, 2009.
- [14] OpenCFD, Technical Report No. TR/HGW/02, 2005 (unpublished).
- [15] A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques, Computers in Physics, Vol. 12, 6, p. 620-631, 1998
- [16] OpenCFD Ltd. *OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox, User Guide*, 2009.
- [17] OpenCFD Ltd. *OpenFOAM, The Open Source CFD Toolbox, Programmer's Guide*, 2009.
- [18] <http://openfoamwiki.net/index.php/IcoFoam>
- [19] Prosperetti, A *Motion of Two Superposed Viscous Fluids*, Physics of Fluids, 24(7):1217-1223, 1981.

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:

$$\underline{\underline{K}} \underline{\phi} = \underline{F} \quad (3.168)$$

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:

$$\underline{\phi} = (\underline{\underline{K}})^{-1} \underline{\underline{F}} \quad (3.169)$$

3.1.7. Discretización Temporal

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - k \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + c \phi = G \quad (3.170)$$

Para discretizar el término temporal de la ec. (3.170) se puede utilizar una aproximación de primer orden según:

$$\rho c_p \frac{\partial \phi}{\partial t} \simeq \rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] \quad (3.171)$$

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. (3.170) y (3.171) de la siguiente manera:

$$\rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+\theta} = \underline{\underline{F}} \quad (3.172)$$

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

$\theta = 0,$	Forward-Euler o Esquema Explícito
$\theta = 1,$	Backward-Euler o Esquema Implícito

Obsérvese que $\underline{\underline{K}}$ es una matriz que agrupa los términos reactivo y difusivo de la ec. (3.170). A partir de (3.172) y con la correspondiente selección del parámetro θ se pueden encontrar las expresiones matriciales para cada esquema temporal.

3.1.8. Forward-Euler o Esquema Explícito

Se parte de la ec. (3.172) con $\theta = 0$:

$$\begin{aligned} & \rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^n = \underline{\underline{F}} \\ & \Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^n = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{F}} \end{aligned} \quad (3.173)$$

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 (3.173) se arriba a:

$$\begin{aligned} & \underline{\phi}^{n+1} - \underline{\underline{I}} \underline{\phi}^n + \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^n = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{F}} \\ & \Rightarrow \underline{\phi}^{n+1} - \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^n = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{F}} \end{aligned}$$

$$\underline{\phi}^{n+1} = \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{F} + \left[\underline{\underline{I}} - \left(\frac{\Delta t}{\rho c_p} \right) \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^n \quad (3.174)$$

Puede comprobarse en la ec. (3.174) que el vector $\underline{\phi}^{n+1}$ puede ser obtenido como resultado de multiplicaciones entre matrices y vectores con datos conocidos para el tiempo $n = t(n)$.

3.1.9. Backward-Euler o Esquema Implícito

Se parte de la ec. (3.172) con $\theta = 1$:

$$\begin{aligned} & \rho c_p \left[\frac{\underline{\phi}^{n+1} - \underline{\phi}^n}{\Delta t} \right] + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F} \\ & \Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^n + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F} \\ & \Rightarrow \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} \underline{\phi}^{n+1} - \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^n + \underline{\underline{K}} \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F} \\ & \Rightarrow \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right] \underline{\phi}^{n+1} = \underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^n \end{aligned}$$

$$\underline{\phi}^{n+1} = \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right]^{-1} \left[\underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^n \right] \quad (3.175)$$

Obsérvese que la ec. (3.175) conduce a la resolución de un sistema de ecuaciones similar al planteado previamente en la ec. (3.169):

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

donde

$$\begin{aligned} \underline{\underline{K}}^{imp} &= \left[\left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{K}} \right] \\ \underline{F}^{imp} &= \left[\underline{F} + \left(\frac{\rho c_p}{\Delta t} \right) \underline{\phi}^n \right] \end{aligned}$$

Capítulo 4

METODO DE ELEMENTOS FINITOS (FEM)

4.0.1. Descripción del Método

La última de las técnicas numéricas que forman parte de los temas a tratar en la materia 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 [?] y [?].

El **método de residuos ponderados** consiste en pesar el residuo de la ecuación a resolver en forma integral para despejar de ahí un sistema de ecuaciones algebraicas lineal o no lineal, dependiendo del problema, para ser resuelto en una computadora. A diferencia del método de diferencias finitas en el cual aproximamos derivadas mediante cociente de diferencias o el de volúmenes finitos donde si bien pesamos el residuo en forma integral como en FEM empleamos un concepto simplificado sobre como es el campo solución asumiendo que podría ser lineal a trozos, aquí en FEM enriquecemos ese espacio funcional de manera de tener información sobre como aproxima a la solución en el interior de cada elemento. Es decir que lo primero que vamos a proponer es un espacio o conjunto de funciones con la cuales vamos a representar la solución para luego mediante combinaciones lineales con ellas podamos aproximar la solución al problema.

Para fijar ideas adoptamos una aproximación a la solución mediante una expansión como la de la ec. (4.1)

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \psi(\mathbf{x}) + \sum_{m=1}^M a_m N_m(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

donde la función ψ está definida en todo el dominio y la usaremos solo por un momento para poder simplificar el tratamiento de las condiciones de contorno. Luego esta función veremos que tiene poca utilidad cuando querremos ir a mas dimensiones. Asimismo, en (4.1) N_m son **funciones de prueba** definidas también por el usuario a lo largo de todo el dominio Ω y los coeficientes a_m son las únicas incógnitas de nuestro problema a resolver mediante un sistema lineal de ecuaciones algebraicas. Debido a que ψ satisface las condiciones de contorno en sentido estricto, esto hace que el MRP pueda aplicarse exclusivamente al dominio y no debamos preocuparnos por el ajuste en el contorno.

$$\int_{\Omega} W R_{\Omega} d\Omega = 0 \quad (4.2)$$

Como es sabido encontrar tal ψ solo es factible en casos muy particulares y simples, por ejemplo en 1D o en mas dimensiones solo en geometrías muy alineadas con los ejes del espacio adoptado (cartesiano, cilíndrico, esférico, etc), motivo por el cual en la práctica del método esta opción se abandona

y una forma de satisfacer las condiciones de contorno es incluirla en el residuo del MRP. Esto se debe hacer aquí y no se hizo en el método de los volúmenes finitos porque a diferencia de este en FEM las incógnitas se hallan ubicadas sobre los nodos de la malla y estos caen en la frontera. Entonces la aplicación del método de residuos ponderados, implica hallar la solución al siguiente balance integral:

$$\int_{\Omega} W R_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{W} R_{\Gamma} d\Gamma = 0 \quad (4.3)$$

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 \bar{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.

4.0.2. Ecuación de Transporte general para el caso 1D

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} W^c \mathcal{R}(\hat{\phi}) d\Omega &= 0 \\ \int_{\Omega} W^c \left(\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} - u \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + c \hat{\phi} - \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right) - Q \right) d\Omega &= 0 \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\int_{\Omega} \left(W^c \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} - \frac{\partial W^c}{\partial x} u \hat{\phi} + W^c c \hat{\phi} \right) d\Omega + \int_{\Omega} k \frac{\partial W^c}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} d\Omega = \int_{\Omega} W^c Q d\Omega + \text{términos de contorno} \quad (4.5)$$

4.0.3. Ecuación de Poisson con fuente

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 :

$$A(\hat{\phi}) = \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) - c \hat{\phi} + G = 0 \right. \quad (4.6)$$

$$B(\phi) = \begin{cases} \hat{\phi} - \bar{\phi} = 0, & \text{en } \Gamma_{\phi} \\ k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \mathbf{n}} + \bar{q} = 0, & \text{en } \Gamma_q \\ k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \mathbf{n}} + h (\hat{\phi} - \phi_{\infty}) = 0, & \text{en } \Gamma_h \end{cases} \quad (4.7)$$

siendo (4.6) la ecuación principal del sistema y (4.7) las ecuaciones generales para las condiciones de borde de dicho sistema. Aplicamos ahora residuos ponderados:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} WR_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{W} R_{\Gamma} d\Gamma = 0 \\ \Rightarrow & \int_{\Omega} W \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) - c\hat{\phi} + G \right] d\Omega + \dots \\ \dots + & \int_{\Gamma_{\phi}} \bar{W} (\hat{\phi} - \bar{\phi}) d\Gamma + \int_{\Gamma_q} \bar{W} \left(k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \eta_x + k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \eta_y + \bar{q} \right) d\Gamma + \dots \\ \dots + & \int_{\Gamma_h} \bar{W} \left(k_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \eta_x + k_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \eta_y + h(\hat{\phi} - \phi_{\infty}) \right) d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (4.8)$$

Se puede ver que si utilizamos integración por partes [?] sobre el primer término de la ec. (4.8) arribamos a su forma débil a la vez que convenientemente definimos los pesos \bar{W} del residuo en la frontera como:

$$\begin{cases} \bar{W} = 0 & \text{en } \Gamma_{\phi} \\ \bar{W} = -W & \text{en } \Gamma_q \text{ y } \Gamma_h \end{cases} \quad (4.9)$$

podemos anular parte de los residuos en la frontera Neumann y Robin como puede verse en la ecuación (4.10).

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left(k_x \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + k_y \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega} W c \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_h} W h \hat{\phi} d\Gamma = \dots \\ \dots - & \int_{\Omega} W G d\Omega - \int_{\Gamma_q} W \bar{q} d\Gamma - \int_{\Gamma_h} W h \phi_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}} W F_x^r d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}} W F_y^r d\Gamma \end{aligned} \quad (4.10)$$

Obsérvese en (4.9) que en la frontera Dirichlet es propio 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 $\hat{\phi}$ en el resto del dominio, pero sí son calculados una vez resuelto el sistema de ecuaciones, como una variable secundaria o de posproceso.

El balance formulado en (4.10) 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 [?] 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 (4.11),

$$\begin{aligned} \cap_e \Omega^e &= \emptyset \\ \cup_e \Omega^e &\subseteq \Omega \end{aligned} \quad (4.11)$$

Como se ve en la fig. 4.1 el dominio en forma de donut se partitiona en pedazos de formas geométricas simples, en general trináculares y cuadrangulares, pero también podrían usarse polígonos en 2D o poliedros en 3D con mayor número de lados o caras respectivamente. Es de destacar en la figura que existen elementos que pisan la frontera con 1 nodo, 2 nodos o con más dependiendo del caso. En el caso del triángulo que pisa la frontera con 2 nodos, el celeste, pone en evidencia porqué decimos que el cubrimiento es aproximado, es decir :

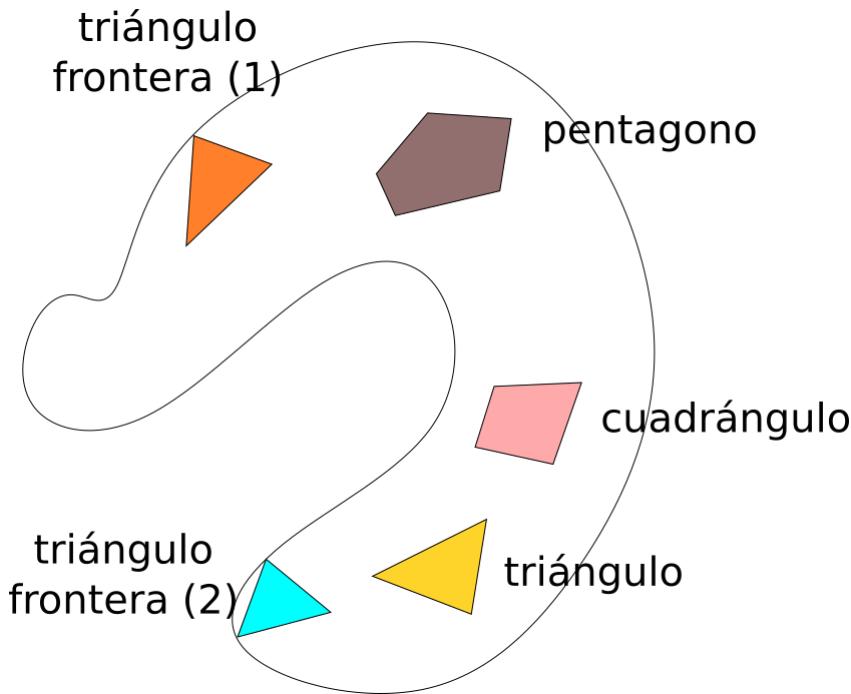


Figura 4.1: Cubrimiento malla por FEM

$$\sum_e |\Omega^e| \neq |\Omega|$$

siendo $|\Omega^e|$ la medida de cada elemento y $|\Omega|$ la medida de todo el dominio. Se entiende por medida, el área en 2D o el volumen en 3D.

De esta forma, y teniendo en cuenta la propiedad aditiva de las integrales,

$$\int_{\Omega} = \sum_{e=1}^E \int_{\Omega^e}$$

los términos en (4.10) se pueden calcular agregando a la integral la contribución de cada elemento,

$$\begin{aligned} \sum_{e=1}^E \left[\int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + k_y \frac{\partial W}{\partial y} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Omega^e} W c \hat{\phi} d\Omega + \int_{\Gamma_h^e} W h \hat{\phi} d\Gamma \right] &= \dots \\ \dots \sum_{e=1}^E \left[\int_{\Omega^e} W G d\Omega - \int_{\Gamma_q^e} W \bar{q} d\Gamma - \int_{\Gamma_h^e} W h \phi_{\infty} d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^e} W F_x^r d\Gamma + \int_{\Gamma_{\phi}^e} W F_y^r d\Gamma \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

donde E es la cantidad total de elementos en los que se partitiona Ω , y $\Gamma^e = \Gamma_{\phi}^e + \Gamma_q^e + \Gamma_h^e$ es el borde del elemento que cae sobre algún borde del dominio Γ y es tal que $\cup_e \Gamma^e \simeq \Gamma$.

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:

$$\phi \simeq \hat{\phi} = \sum_{m=1}^M N_m^e \phi_m^e \quad (4.13)$$

siendo N_m^e las funciones de forma definidas para el elemento e , el cual se compone de M nodos. Nótese que (4.13) difiere de la aproximación definida previamente en (4.1) 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).

Esto se logra asumiendo que la base de funciones empleadas, las N_m^e sean una partición de la unidad y eso requiere que las funciones de forma que se definen tengan la propiedad que

$$\sum_{m=1}^M N_m(x) = 1$$

en cualquier punto x del dominio.

En general esto se logra definiendo funciones que valen la unidad en el nodo donde se las define y son nulas en los restantes nodos en que se discretiza el dominio. Es decir:

$$N_m(x_j) = \delta_{mj} = \begin{cases} 1 & m = j \\ 0 & m \neq j \end{cases}$$

Esto luce gráficamente en 4.2 del siguiente modo: En el punto azul, marcado con x y en cualquier punto del dominio vale la partición de la unidad.

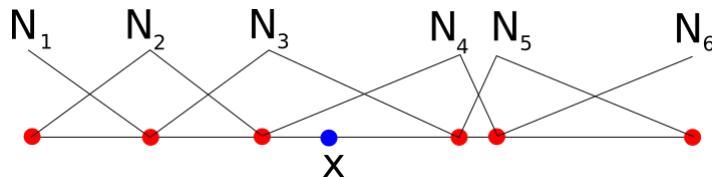


Figura 4.2: Funciones de forma en FEM

Las funciones dibujadas son lineales, esto no quita que puedan ser polinomios de mayor orden, por ejemplo cuadráticos (paráolas) o de mayor orden.

La definición a trozos de la aproximación introduce discontinuidades en la solución o en alguna de sus derivadas. Esto se ve en la figura 4.3

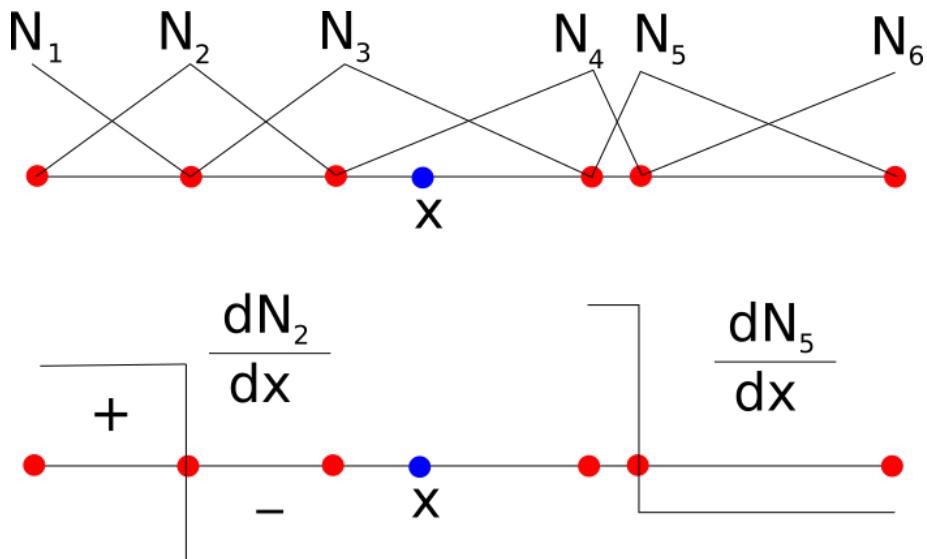


Figura 4.3: Funciones de forma y su derivada en FEM

Cierto grado de discontinuidad es permisible y esto limita fuertemente la formulación a emplear. Por ejemplo, las funciones discontinuas son integrables pero no derivables como funciones motivo por el cual con funciones base como las dibujadas en 4.2 que son solamente C^0 no es posible manejar mayores derivadas que la primera. La siguiente figura muestra una función discontinua cuya integral vale:

$$(x_2 - x_1)h_1 - (x_3 - x_2)h_2$$

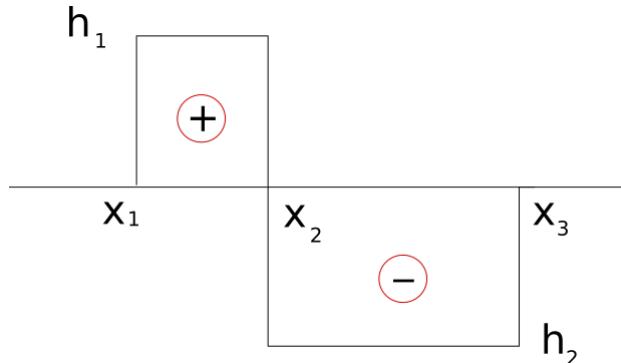


Figura 4.4: Integración de una función discontinua

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 en los métodos anteriormente descriptos.

Esta limitación en la cantidad de derivadas que puedo manejar es la razón por la cual debemos integrar por partes el término de la derivada segunda.

Recordamos que la integración por partes es una operación matemática que consiste en la siguiente equivalencia:

$$\int_a^b d(uv) = \int_a^b (udv + vdu)$$

y agregando que $\int_a^b d(uv) = uv|_a^b$

Si esto lo aplicamos a un caso simple como es el caso 1D difusivo tenemos

$$\int_a^b \underbrace{W_l^e}_{u} \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right)}_{dv} dx = - \int_a^b \underbrace{\left(k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right)}_{v} \underbrace{\frac{\partial W_l^e}{\partial x}}_{du} dx + \underbrace{W_l^e}_{u} \underbrace{k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x}}_{v} \Big|_a^b \quad (4.14)$$

y si lo aplicamos a nuestro término difusivo 2D podemos convertir la derivada segunda en lo siguiente:

$$\int_{\Omega^e} W_l^e \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) \right) d\Omega = - \int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial W_l^e}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} + k_y \frac{\partial W_l^e}{\partial y} \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \right) d\Omega + \int_{\Gamma^e} W_l^e \left(k_x \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial x} \eta_x + k_y \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial y} \eta_y \right) d\Gamma \quad (4.15)$$

Resta definir qué tipo de funciones adoptar para los pesos W en (4.12). Para ello se aplica el **Método de Galerkin** [?], [?], el cual supone utilizar como pesos las mismas funciones de forma, es decir, $W_l^e = N_l^e$ para $l = 1 \dots M$. Luego, la expresión completa de la aplicación del método de elementos finitos para la resolución del sistema de ecuaciones dado por (4.6) y (4.7), aplicado localmente a un elemento e , queda como:

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \left[\int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial N_l^e}{\partial x} \frac{\partial N_m^e}{\partial x} \phi_m^e + k_y \frac{\partial N_l^e}{\partial y} \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \phi_m^e \right) d\Omega \right] + \dots \\ & \dots + \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \left[\int_{\Omega^e} c N_l^e N_m^e \phi_m^e d\Omega + \int_{\Gamma_h^e} h N_l^e N_m^e \phi_m^e d\Gamma \right] = \dots \quad (4.16) \\ & \dots \sum_{l=1}^M \left[\int_{\Omega^e} N_l^e G d\Omega - \int_{\Gamma_q^e} N_l^e \bar{q} d\Gamma + \int_{\Gamma_h^e} N_l^e h \phi_\infty d\Gamma + \int_{\Gamma_\phi^e} N_l^e F_x^r d\Gamma + \int_{\Gamma_\phi^e} N_l^e F_y^r d\Gamma \right] \end{aligned}$$

La notación indicial empleada en (4.16) pone en evidencia la presencia de términos matriciales y vectoriales. Entonces podemos reescribir la ecuación como sigue:

$$\begin{aligned} (\underline{\underline{D}}^e + \underline{\underline{C}}^e + \underline{\underline{H}}^e) \underline{\phi}^e &= \underline{\underline{F}}^e \\ \underline{\underline{K}}^e \underline{\phi}^e &= \underline{\underline{F}}^e \end{aligned} \quad (4.17)$$

siendo

- $\underline{\underline{D}}^e$: aporte matricial del término difusivo,

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

- $\underline{\underline{C}}^e$: aporte matricial del término reactivo,

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

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

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

- $\underline{\underline{K}}^e$: matriz del elemento,

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

- $\underline{\phi}^e$: vector de incógnitas del elemento,

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

- $\underline{\underline{F}}^e$: vector de flujo, formado por aportes de fuentes de calor, términos provenientes de las condiciones de frontera y los flujos reactivos,

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

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 definen de manera local.

4.0.4. Ejemplo 1D

En esta sección presentamos un caso concreto en 1D como para ir consolidando los conceptos previamente incluidos.

Supongamos que tenemos un dominio 1D de longitud L dividido en N elementos cada uno puede tener su propios parámetros como por ejemplo k, c y las fuentes, de forma que cuando mencionamos estos parámetros nos estamos refiriendo a los propios de cada elemento porque nosotros escribiremos las expresiones por cada elemento y luego trataremos de ver como se ensambla.

A continuación escribimos el residuo de la ecuación del calor a resolver en el caso 1D del siguiente modo:

$$\mathcal{R}_i^e = \int_{x_1}^{x_2} \left(N_i^e \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial t} + N_i^e c^e \hat{\phi} \right) dx + \int_{x_1}^{x_2} k^e \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x} dx - \underbrace{N_i^e k^e \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x} \Big|_{x_1 \cap x_L}^{x_2 \cap x_R}}_{\text{término de contorno}} - \int_{x_1}^{x_2} N_i^e Q^e dx \quad (4.18)$$

El término indicado como de contorno surge de la integración por partes y lo que quiere decir esta etiqueta es que ese término normalmente se alimenta a partir de las condiciones de contorno en ambos extremos del elemento. Como en los bordes internos del elemento el flujo debería compensarse entre elementos se arriba a que este término solo adquiere relevancia en los extremos del dominio global, denotados aquí como x_L y x_R para los extremos izquierdo y derecho respectivamente.

En el caso que sea Dirichlet se toma $N_i = 0$ y se impone en forma fuerte el valor de $\hat{\phi}$ en el contorno, en el caso Neumann se usa la condición

$$-k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} = \bar{q}$$

donde η representa la normal, que coincide con x o con $-x$ según el extremo del que se trate.

En el caso Robin se debe usar

$$k \frac{\partial \hat{\phi}}{\partial \eta} + h(\hat{\phi} - \hat{\phi}_\infty) = 0$$

A partir de aqui omitimos el supraíndice e asumiendo que todos los valores son del elemento en cuestión. Para poder escribir el residuo en función de las incógnitas del problema. Para ello

Ahora hay que definir como representar la incógnita en término de las funciones de forma. Para ello escribimos

$$\hat{\phi}^e = \hat{\phi}_1^e N_1^e(x) + \hat{\phi}_2^e N_2^e(x)$$

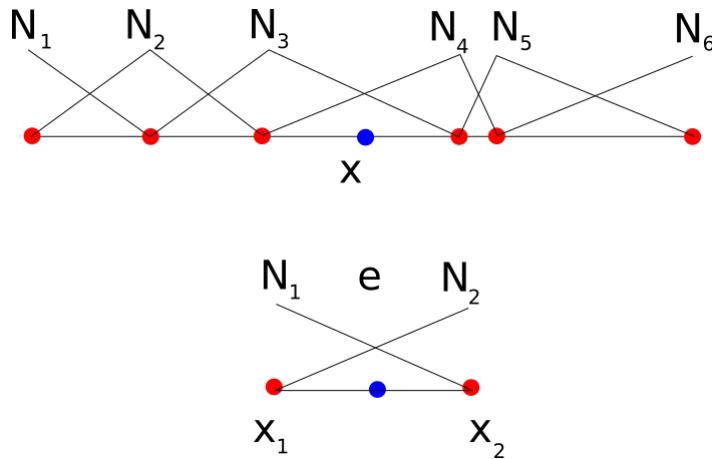


Figura 4.5: Funciones de forma a nivel global y a nivel elemental

$$N_1^e(x) = \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} = \frac{x_2 - x}{H^e}$$

$$\frac{\partial N_1^e}{\partial x} = \frac{-1}{H^e}$$

$$N_2^e(x) = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x - x_1}{H^e}$$

$$\frac{\partial N_2^e}{\partial x} = \frac{1}{H^e}$$

$$x^e = x_1^e N_1^e(x) + x_2^e N_2^e(x)$$

La idea ahora sería independizarnos de lo propio de cada elemento, es decir, buscar algún sistema de coordenadas común a todos y no que haya que particularizar el álgebra a cada elemento. Para ello usamos un elemento de referencia o máster, que en el caso 1D puede parecer un poco irrelevante, en más dimensiones adquiere mayor relevancia, en especial por la necesidad de evaluar integrales.

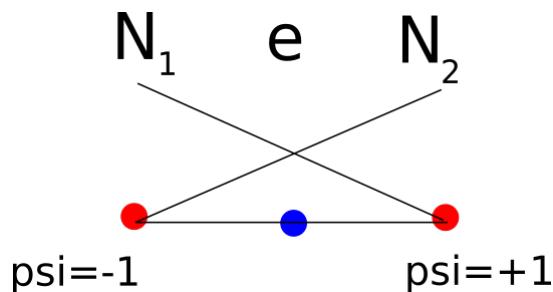


Figura 4.6: Funciones de forma a nivel elemental definidos sobre el elemento master

Escribiendo las funciones de forma en términos de las coordenadas del elemento máster tenemos:

$$N_i^e(\psi) = \frac{1}{2}(1 + \psi_i\psi)$$

donde $\psi_1 = -1$ y $\psi_2 = 1$ para el caso 1D.

Por lo tanto la transformación de coordenadas se escribe como:

$$\begin{aligned} x^e &= x_1^e N_1^e(\psi) + x_2^e N_2^e(\psi) = \frac{1}{2} \left(x_1^e(1 - \psi) + x_2^e(1 + \psi) \right) = \\ &= \frac{x_2^e + x_1^e}{2} + \psi \frac{x_2^e - x_1^e}{2} = \frac{x_2^e + x_1^e}{2} + \psi \frac{H^e}{2} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial x} &= \frac{\partial N_i^e}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\psi_i}{2} \frac{2}{H^e} = \frac{\psi_i}{H^e} \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\mathcal{R}_i^e = \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial t} + N_i^e c^e \hat{\phi} \right) dx + \int_{x_1}^{x_2} k^e \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x} dx - \underbrace{N_i^e k^e \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x} \Big|_{x_1 \cap x_L}^{x_2 \cap x_R}}_{\text{término de contorno}} - \int_{x_1}^{x_2} N_i^e Q^e dx \quad (4.20)$$

4.0.5. 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.

Para poder discutir detalles necesitamos presentar las funciones de forma más empleadas en este contexto, en este caso mostramos las funciones de forma sobre triángulos, donde se cumple el requisito de ser partición de la unidad.

En el caso cuadrangular la idea es similar, por razones de brevedad solo mostramos 2 de las 4 funciones de forma en la figura 4.8:

Un detalle de mencionar es que en el caso triangular, al tener el elemento 3 nodos, las funciones de forma son planos que pasan por esos 3 puntos asumiendo un valor unitario en uno de los nodos y nulo en los 2 restantes. En cambio en cuadrángulos al haber 4 nodos las funciones lineales no generan un plano o forma lineal sino una forma cuadrática incompleta, formada por el producto cartesiano de funciones lineales en cada dimensión, lo cual deja un término cruzado del tipo xy .

Es decir, en triángulos tenemos funciones de forma del tipo

$$N_m = a_m + b_m x + c_m y$$

mientras que en cuadrángulos tenemos

$$N_m = (a_m + b_m x)(c_m + d_m y) = a_m c_m + c_m b_m x + a_m d_m y + b_m d_m xy$$

Esto provoca que las funciones de forma tengan cierta curvatura como se intenta mostrar (algo exagerada) en la figura 4.8.

En las 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

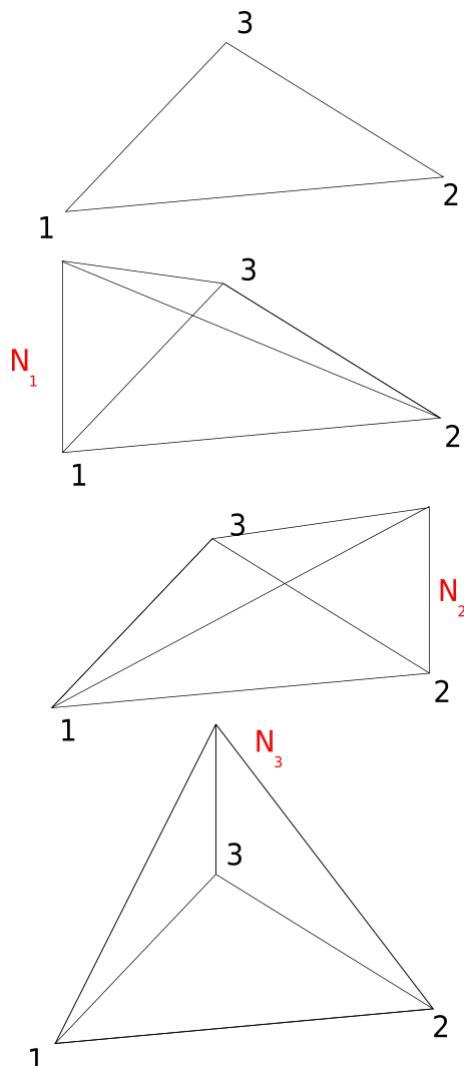


Figura 4.7: Funciones de forma lineales en triángulos

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.

4.0.5.1. Elementos triangulares

En la *Fig. 4.9*, 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. 4.9* se puede observar que las funciones de forma y sus derivadas, definidas para el triángulo

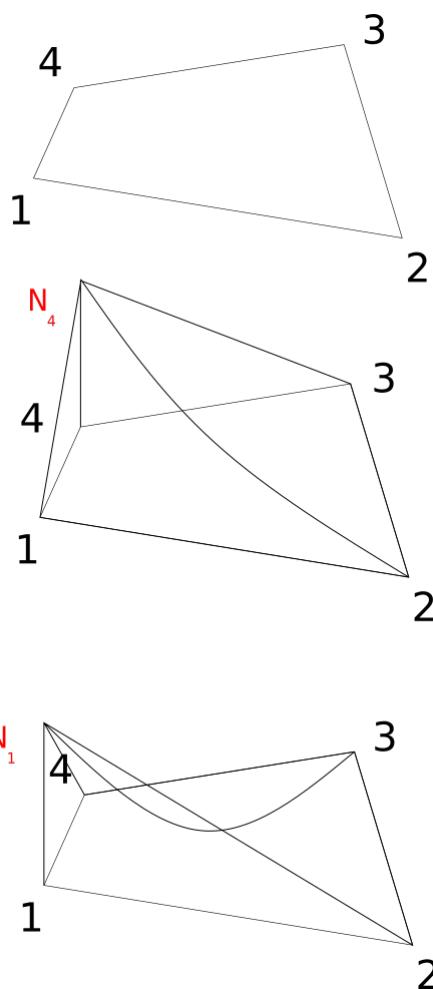


Figura 4.8: Funciones de forma bi-lineales en cuadrángulos

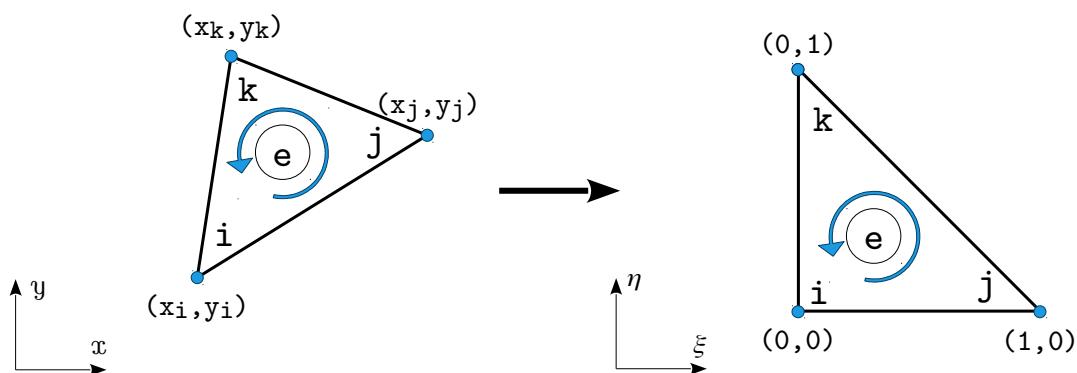


Figura 4.9: Representación bidimensional de un elemento triangular.

normalizado, vienen dadas por las expresiones en (4.21)

$$\begin{aligned}
 N_i^e(\xi, \eta) &= 1 - \xi - \eta, & \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} &= -1, & \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} &= -1 \\
 N_j^e(\xi, \eta) &= \xi, & \frac{\partial N_j^e}{\partial \xi} &= 1, & \frac{\partial N_j^e}{\partial \eta} &= 0 \\
 N_k^e(\xi, \eta) &= \eta, & \frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} &= 0, & \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} &= 1
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Al igual que en el caso de coordenadas cartesianas, las funciones de forma en (4.21) 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 [?]:

$$\begin{aligned} x(\xi, \eta) &= \sum_{m=1}^3 x_m N_m^e(\xi, \eta) \\ &= x_i(1 - \xi - \eta) + x_j\xi + x_k\eta \\ &= x_i + \xi(x_j - x_i) + \eta(x_k - x_i) \\ y(\xi, \eta) &= \sum_{m=1}^3 y_m N_m^e(\xi, \eta) \\ &= y_i(1 - \xi - \eta) + y_j\xi + y_k\eta \\ &= y_i + \xi(y_j - y_i) + \eta(y_k - y_i) \end{aligned} \quad (4.22)$$

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

$$\hat{\phi}^e = \phi_i + \xi(\phi_j - \phi_i) + \eta(\phi_k - \phi_i) \quad (4.23)$$

$$\nabla \hat{\phi}^e = \left(\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial x}, \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial y} \right) = \left(\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \xi} = \phi_j - \phi_i \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial \hat{\phi}^e}{\partial \eta} = \phi_k - \phi_i \quad (4.26)$$

A partir de las ecuaciones (4.22) a (4.26) podemos deducir que las derivadas de las funciones de forma serán

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} &= \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} &= \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Las expresiones de la ec. (4.27) 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,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix} = \underline{\underline{J}}^e \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (4.28)$$

donde la matriz $\underline{\underline{J}}^e$ es el **Jacobiano** de la transformación. Por lo tanto, la transformación inversa puede verse formulada en (4.29)

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{\underline{\underline{J}}^e} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} = (\underline{\underline{J}}^e)^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

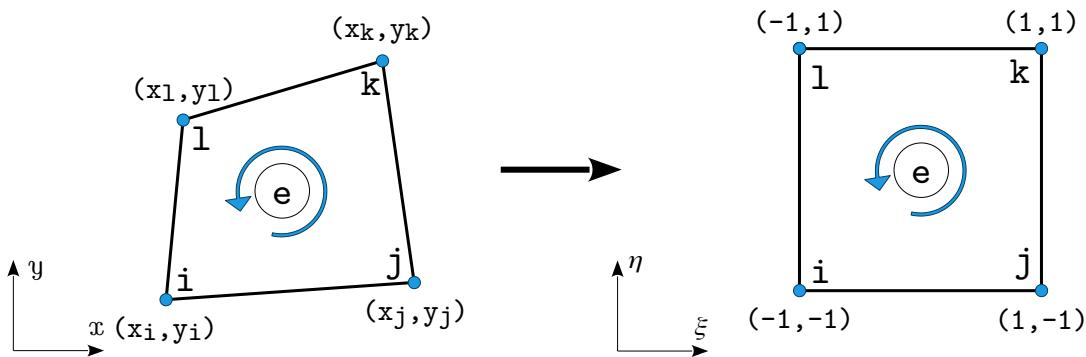


Figura 4.10: Representación bidimensional de un elemento cuadrangular.

4.0.5.2. Elementos cuadrangulares

En la *Fig. 4.10*, 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).

Funciones de Forma en Coordenadas Naturales

De la *Fig. 4.10* se puede observar que las funciones de forma y sus derivadas, definidas para el cuadrángulo normalizado, vienen dadas por las expresiones en (4.30)

$$\begin{aligned}
 N_i^e(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta), & \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} &= \frac{1}{4}(\eta-1), & \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} &= \frac{1}{4}(\xi-1) \\
 N_j^e(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta), & \frac{\partial N_j^e}{\partial \xi} &= \frac{1}{4}(1-\eta), & \frac{\partial N_j^e}{\partial \eta} &= \frac{1}{4}(-\xi-1) \\
 N_k^e(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta), & \frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} &= \frac{1}{4}(1+\eta), & \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} &= \frac{1}{4}(1+\xi) \\
 N_l^e(\xi, \eta) &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta), & \frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} &= \frac{1}{4}(-1-\eta), & \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} &= \frac{1}{4}(1-\xi)
 \end{aligned} \tag{4.30}$$

Mapeo de coordenadas

Utilizamos el mismo tipo de parametrizaciones definidas para elementos triangulares. Nuevamente, a partir de (4.31) y (4.32), dado un par $(\bar{\xi}, \bar{\eta})$ podemos calcular su correspondiente (\bar{x}, \bar{y}) pero no podemos plantear la correspondencia inversa ya que el sistema es no lineal. En la Sección 4.0.10 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.

$$\begin{aligned}
 x(\xi, \eta) &= \sum_{m=1}^4 x_m N_m^e(\xi, \eta) \\
 &= \frac{1}{4} [x_i(1-\xi)(1-\eta) + x_j(1+\xi)(1-\eta) + x_k(1+\xi)(1+\eta) + x_l(1-\xi)(1+\eta)] \\
 &= \frac{x_i + x_j + x_k + x_l}{4} + \xi \left[\frac{(x_j + x_k) - (x_i + x_l)}{4} \right] + \dots \\
 &\dots + \eta \left[\frac{(x_k + x_l) - (x_i + x_j)}{4} \right] + \xi \eta \left[\frac{(x_i + x_k) - (x_j + x_l)}{4} \right]
 \end{aligned} \tag{4.31}$$

$$\begin{aligned}
y(\xi, \eta) &= \sum_{m=1}^4 y_m N_m^e(\xi, \eta) \\
&= \frac{1}{4} [y_i(1-\xi)(1-\eta) + y_j(1+\xi)(1-\eta) + y_k(1+\xi)(1+\eta) + y_l(1-\xi)(1+\eta)] \\
&= \frac{y_i + y_j + y_k + y_l}{4} + \xi \left[\frac{(y_j + y_k) - (y_i + y_l)}{4} \right] + \dots \\
&\dots + \eta \left[\frac{(y_k + y_l) - (y_i + y_j)}{4} \right] + \xi \eta \left[\frac{(y_i + y_k) - (y_j + y_l)}{4} \right]
\end{aligned} \tag{4.32}$$

4.0.6. 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.

4.0.6.1. Matriz de difusión

En la sección 4.0.3 definimos la matriz elemental de difusión como

$$\underline{\underline{D}}^e = \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \left[\int_{\Omega^e} \left(k_x \frac{\partial N_l^e}{\partial x} \frac{\partial N_m^e}{\partial x} + k_y \frac{\partial N_l^e}{\partial y} \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \right) d\Omega \right] \tag{4.33}$$

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

Asimismo, podemos reformular la ec. (4.33) de forma de suprimir las sumatorias y arribar a una expresión compuesta de producto de matrices:

$$\underline{\underline{D}}^e = \int_{\Omega^e} (\underline{\underline{B}}^e)^T \underline{\underline{k}} \underline{\underline{B}}^e |\underline{\underline{J}}^e| d\xi d\eta \tag{4.34}$$

donde $\underline{\underline{k}}$

$$\underline{\underline{k}} = \begin{bmatrix} k_x & 0 \\ 0 & k_y \end{bmatrix} \tag{4.35}$$

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

$$\underline{\underline{J}}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (x_j - x_i) & (y_j - y_i) \\ (x_k - x_i) & (y_k - y_i) \end{bmatrix} \tag{4.36}$$

$$\underline{\underline{B}}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} & \frac{\partial N_j^e}{\partial x} & \frac{\partial N_k^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial y} & \frac{\partial N_j^e}{\partial y} & \frac{\partial N_k^e}{\partial y} \end{bmatrix} = (\underline{\underline{J}}^e)^{-1} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial \xi} & \frac{\partial N_j^e}{\partial \xi} & \frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i^e}{\partial \eta} & \frac{\partial N_j^e}{\partial \eta} & \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \end{bmatrix} \tag{4.37}$$

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

Como se observa en las ecuaciones (4.35) a (4.37), las matrices están compuestas de coeficientes constantes, por lo que la integral en (4.34) queda reducida a:

$$\underline{\underline{D}}^e = (\underline{\underline{B}}^e)^T \underline{k} \underline{\underline{B}}^e |\underline{\underline{J}}^e| \int_{\Omega^e} d\xi d\eta = \frac{1}{2} (\underline{\underline{B}}^e)^T \underline{k} \underline{\underline{B}}^e |\underline{\underline{J}}^e| \quad (4.38)$$

En (4.38) la integral a resolver es en definitiva el área del triángulo normalizado, siendo ésta $A^e = 1/2$.

Cuadrángulos

$$\underline{\underline{J}}^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} -(1-\eta) & (1-\eta) & (1+\eta) & -(1+\eta) \\ -(1-\xi) & -(1+\xi) & (1+\xi) & (1-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i & y_i \\ x_j & y_j \\ x_k & y_k \\ x_l & y_l \end{bmatrix} \quad (4.39)$$

$$\underline{\underline{B}}^e = (\underline{\underline{J}}^e)^{-1} \begin{bmatrix} -(1-\eta) & (1-\eta) & (1+\eta) & -(1+\eta) \\ -(1-\xi) & -(1+\xi) & (1+\xi) & (1-\xi) \end{bmatrix} \quad (4.40)$$

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:

$$\underline{\underline{D}}^e = \int_{\Omega^e} (\underline{\underline{B}}^e(\xi, \eta))^T \underline{k} \underline{\underline{B}}^e(\xi, \eta) |\underline{\underline{J}}^e(\xi, \eta)| d\xi d\eta \quad (4.41)$$

$$\underline{\underline{D}}^e \approx \sum_{p=1}^4 (\underline{\underline{B}}^e(\xi_p, \eta_p))^T \underline{k} \underline{\underline{B}}^e(\xi_p, \eta_p) |\underline{\underline{J}}^e(\xi_p, \eta_p)| w(\xi_p, \eta_p) \quad (4.42)$$

donde los puntos de Gauss (ξ_p, η_p) son

$$\begin{aligned} p = 1 : \quad (\xi_1, \eta_1) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3} \right) & p = 2 : \quad (\xi_2, \eta_2) &= \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, -\frac{\sqrt{3}}{3} \right) \\ p = 3 : \quad (\xi_3, \eta_3) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right) & p = 4 : \quad (\xi_4, \eta_4) &= \left(\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3} \right) \end{aligned} \quad (4.43)$$

siendo $w(\xi_p, \eta_p)$ el peso del punto de Gauss p -ésimo.

4.0.6.2. Matriz de masa

En las sección 4.0.3 definimos la matriz elemental de reacción (en ocasiones denominada matriz de masa) como

$$\underline{\underline{C}}^e = \sum_{m=1}^M \sum_{l=1}^M \left[\int_{\Omega^e} c N_l^e N_m^e d\Omega \right] \quad (4.44)$$

Podemos reformular la ec. (4.44) 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

$$\underline{\underline{C}}^e = c \int_{\Omega^e} \begin{bmatrix} 1 - \xi - \eta \\ \xi \\ \eta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \xi - \eta & \xi & \eta \end{bmatrix} |\underline{\underline{J}}^e| d\xi d\eta \quad (4.45)$$

Para resolver la integral en (4.45) utilizaremos integración numérica con tres puntos de Gauss con peso $w = 1/6$.

$$\underline{\underline{C}}^e \simeq c \sum_{p=1}^3 w_p(\xi_p, \eta_p) \begin{bmatrix} 1 - \xi_p - \eta_p \\ \xi_p \\ \eta_p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 - \xi_p - \eta_p & \xi_p & \eta_p \end{bmatrix} |\underline{\underline{J}}^e(\xi_p, \eta_p)| \quad (4.46)$$

donde los puntos de Gauss (ξ_p, η_p) son

$$\begin{aligned} p = 1 : \quad (\xi_1, \eta_1) &= \left(\frac{1}{2}, 0 \right) & p = 2 : \quad (\xi_2, \eta_2) &= \left(0, \frac{1}{2} \right) \\ p = 3 : \quad (\xi_3, \eta_3) &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (4.47)$$

Elementos cuadrangulares

$$\underline{\underline{C}}^e = c \int_{\Omega^e} \underline{\underline{N}}(\xi, \eta)^T \underline{\underline{N}}(\xi, \eta) |\underline{\underline{J}}^e| d\xi d\eta \quad (4.48)$$

$$\underline{\underline{N}}(\xi, \eta) = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} (1 - \xi)(1 - \eta) & (1 + \xi)(1 - \eta) & (1 + \xi)(1 + \eta) & (1 - \xi)(1 + \eta) \end{bmatrix} \quad (4.49)$$

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

$$\underline{\underline{C}}^e \simeq c \sum_{p=1}^3 w(\xi_p, \eta_p) (\underline{\underline{N}}(\xi_p, \eta_p))^T \underline{\underline{N}}(\xi_p, \eta_p) |\underline{\underline{J}}^e(\xi_p, \eta_p)| \quad (4.50)$$

4.0.7. Ensamble de matrices

En la *Fig. 4.11* puede observarse una malla genérica con un elemento triangular y cuadrangular. Para cada elemento de la malla se calculan las integrales definidas en (4.16) y (4.17) para luego proceder al **ensamblaje** 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 ensamblaje de la matriz global provendrá únicamente de dichos puntos.
- Los nodos p6, 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:

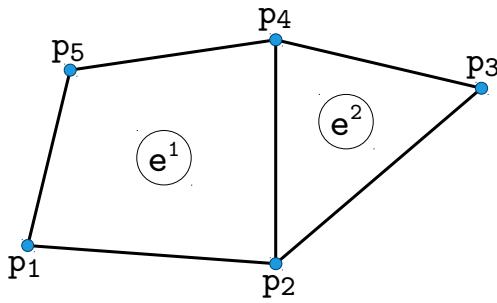


Figura 4.11: Representación bidimensional de una malla compuesta de elementos triangulares y cuadrangulares.

$$\underline{\underline{K}}^1 = \begin{pmatrix} K_{11}^1 & K_{12}^1 & K_{14}^1 & K_{15}^1 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 & K_{24}^1 & K_{25}^1 \\ K_{41}^1 & K_{42}^1 & K_{44}^1 & K_{45}^1 \\ K_{51}^1 & K_{52}^1 & K_{54}^1 & K_{55}^1 \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{K}}^2 = \begin{pmatrix} K_{22}^2 & K_{23}^2 & K_{24}^2 \\ K_{32}^2 & K_{33}^2 & K_{34}^2 \\ K_{42}^2 & K_{43}^2 & K_{44}^2 \end{pmatrix} \quad (4.51)$$

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:

$$\underline{\underline{K}} = \begin{pmatrix} K_{11}^1 & K_{12}^1 & 0 & K_{14}^1 & K_{15}^1 \\ K_{21}^1 & K_{22}^1 + K_{22}^2 & K_{23}^2 & K_{24}^1 + K_{24}^2 & K_{25}^1 \\ 0 & K_{32}^2 & K_{33}^2 & K_{34}^2 & 0 \\ K_{41}^1 & K_{42}^1 + K_{42}^2 & K_{43}^2 & K_{44}^1 + K_{44}^2 & K_{45}^1 \\ K_{51}^1 & K_{52}^1 & 0 & K_{54}^1 & K_{55}^1 \end{pmatrix} \quad (4.52)$$

donde los coeficientes provenientes de cada elemento han sido distinguidos en colores negro para el primer elemento y rojo para el segundo, quedando en azul aquellos valores nulos que son productos de la no conexión que existen entre los nodos correspondientes a dichas filas y columnas, por ejemplo los nodos 1 con 3 y 3 con 5.

En resumen, cada elemento aporta una submatriz cuadrada de tamaño el número de nodos del elemento y su ubicación en filas y columnas se obtiene a partir de la numeración global de los nodos de cada elemento. Es decir, supongamos que tenemos un gran sistema producto de una malla en 2D que posee 1000 nodos, entonces la matriz global sera de 1000×1000 . El aporte de un elemento triangular de nodos 21, 32, 43 será una submatriz de 3×3 que deberá sumar a las filas y columnas 21, 32, 43. De manera similar si hay un elemento cuadrangular de nodos 27, 37, 47, 53, el aporte al sistema global será el de una submatriz de 4×4 en las filas y columnas 27, 37, 47, 53.

4.0.8. 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 ?? 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 ??.

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

4.0.8.1. Neumann

Recordando la ec. (4.16), queremos dar solución a la integral del lado derecho que proviene de la imposición de frontera de tipo Neumann, concretamente

$$F_q = \int_{\Gamma_q^e} N_l^e \bar{q} d\Gamma \quad (4.53)$$

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 (4.53), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [?].

Elementos triangulares

$$F_q^{ij} = \frac{\bar{q} d_{ij}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_q^{jk} = \frac{\bar{q} d_{jk}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_q^{ki} = \frac{\bar{q} d_{ki}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.54)$$

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

Elementos Cuadrangulares

$$F_q^{ij} = \frac{\bar{q} d_{ij}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_q^{jk} = \frac{\bar{q} d_{jk}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad F_q^{kl} = \frac{\bar{q} d_{kl}}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_q^{li} = \frac{\bar{q} d_{li}}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

4.0.8.2. Robin

Recordando ahora la ec. (4.16), queremos dar solución a las dos integrales que provienen de la imposición de frontera de tipo Robin, concretamente

$$\underline{\underline{H}}^e = \int_{\Gamma_h^e} h N_l^e N_m^e \phi_m^e d\Gamma \quad (4.56)$$

$$F_h = - \int_{\Gamma_h^e} N_l^e h \phi_\infty d\Gamma \quad (4.57)$$

Como puede verse, la integral en (4.57) se resuelve de igual manera que para el caso Neumann, donde ahora $\bar{q} = h\phi_\infty$. A continuación se formulan todos los posibles resultados de la integral (4.56), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [?].

Elementos triangulares

$$\underline{\underline{H}}^{ij} = \frac{hd_{ij}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{jk} = \frac{hd_{jk}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{ik} = \frac{hd_{ik}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (4.58)$$

Elementos cuadrangulares

$$\begin{aligned} \underline{\underline{H}}^{ij} &= \frac{hd_{ij}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{jk} = \frac{hd_{jk}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \underline{\underline{H}}^{kl} &= \frac{hd_{kl}}{6} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{H}}^{li} = \frac{hd_{li}}{6} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.59)$$

4.0.9. Fuentes por elemento

El último de los términos proveniente de la ec. (4.16) 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

$$F_G = \int_{\Omega^e} N_l^e G^e d\Omega \quad (4.60)$$

A continuación se formulan los posibles resultados de la integral (4.60), tanto para elementos triangulares como cuadrangulares [?].

$$F_G = \frac{A^e G^e}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad F_G = \frac{A^e G^e}{4} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.61)$$

donde A^e es el área del elemento e .

4.0.10. Fuentes puntuales

Las fuentes puntuales, definidas en un cierto punto (\bar{x}, \bar{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

$$F_p = G_p \begin{bmatrix} N_i(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \\ N_j(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \\ N_k(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \end{bmatrix} \quad (4.62)$$

Elementos cuadrangulares

$$F_p = G_p \begin{bmatrix} N_i(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \\ N_j(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \\ N_k(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \\ N_l(\bar{\xi}, \bar{\eta}) \end{bmatrix} \quad (4.63)$$

Las funciones de forma fueron definidas en las ecuaciones (4.21) y (4.30), mientras que los correspondientes mapeos de coordenadas entre ambos sistemas, $x(\xi, \eta)$ e $y(\xi, \eta)$ fueron presentados en las ecuaciones (4.22), (4.31) y (4.32).

Cómo vimos en la Sección 4.0.5.1, 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 4.0.5.2, 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 [?], se puede formular de manera general la relación entre los dos sistemas de coordenadas para elementos cuadrangulares isoparamétricos como:

$$\begin{bmatrix} b_i & c_i \\ b_j & c_j \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_i - a_i \xi \eta \\ d_j - a_j \xi \eta \end{pmatrix} \quad (4.64)$$

donde

$$\begin{aligned} d_i &= 4x_p - (x_i + x_j + x_k + x_l) \\ d_j &= 4y_p - (y_i + y_j + y_k + y_l) \end{aligned} \quad (4.65)$$

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.

$$\begin{bmatrix} a_i & a_j \\ b_i & b_j \\ c_i & c_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_i & y_i \\ x_j & y_j \\ x_k & y_k \\ x_l & y_l \end{bmatrix} \quad (4.66)$$

La idea es obtener las coordenadas (ξ, η) para un dado punto que aquí denominamos x_p . Usando una numeración posible para los nodos locales para un elemento cuadrangular isoparamétrico en una malla de elementos finitos como se muestra en la Fig. 4.12, los coeficientes en la ecuación (4.64) se pueden obtener a partir de la ecuación (4.65) y (4.66) .

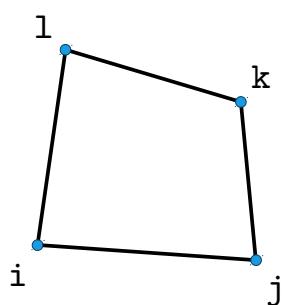


Figura 4.12: Ejemplo de numeración local de un cuadrágulo para determinar los coeficientes $a_i, a_j, b_i, b_j, c_i, c_j$.

Un sistema bilineal de ecuaciones en forma de la ec. (4.64) 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 [?], 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 $a_b = 0$,
 5. Si $a_i a_j \neq 0$ y $a_c = 0$,
 6. Todas las demás condiciones,
- $$\left. \begin{array}{l} a_b \xi^2 + (c_b + d_a) \xi + d_c = 0, \\ \eta = (a_d + b_a \xi) / a_c, \\ -1 \leq \xi \leq 1 \end{array} \right\}$$
- $$\begin{array}{ll} \xi = (a_i d_c) / (b_i a_c + a_i a_d), & \eta = a_d / a_c \\ \xi = a_d / a_b, & \eta = (a_i d_b) / (c_i a_b + a_i a_d) \\ \xi = d_c / (a_i d_j + b_c), & \eta = b_d / (a_j d_i + b_c) \end{array}$$

4.1. Elasticidad lineal bidimensional

4.1.1. 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 [?]. Aquí se considerará como incógnitas los desplazamientos u y v en las direcciones x e y , esto es,

$$\underline{\phi}^T = (u, v) \quad (4.67)$$

Obsérvese el carácter vectorial de la incógnita del problema en (4.67). Las deformaciones, y por lo tanto las tensiones, pueden ser expresados en términos de estos desplazamientos. Las deformaciones se escriben como

$$\underline{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \underline{\underline{L}} \underline{\phi} \quad (4.68)$$

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

$$\underline{\sigma} = \underline{\underline{D}} \underline{\epsilon} \quad (4.69)$$

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

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \underline{\epsilon} = \underline{\underline{D}} \underline{\epsilon} \quad (4.70)$$

Deformación Plana

$$\underline{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{bmatrix} \underline{\epsilon} = \underline{\underline{D}} \underline{\epsilon} \quad (4.71)$$

En las ecuaciones (4.70) y (4.71), 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. (4.67) a (4.71), puede ser escrito como

$$A(\phi) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + X \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + Y \end{bmatrix} = \underline{\underline{L}}^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{L}} \underline{\phi} + \underline{X} = \underline{0} \quad (4.72)$$

en un dominio bidimensional Ω . En la ec. (4.72) 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

$$B(\phi) = \begin{bmatrix} \sigma_x n_x + \sigma_{xy} n_y - \bar{t}_x \\ \sigma_{xy} n_x + \sigma_y n_y - \bar{t}_y \end{bmatrix} = \underline{0}, \quad \text{sobre } \Gamma_\sigma \quad (4.73)$$

y

$$B(\phi) = \begin{bmatrix} u - \bar{u} \\ v - \bar{v} \end{bmatrix} = \underline{0}, \quad \text{sobre } \Gamma_\phi \quad (4.74)$$

donde n_x y n_y son los cosenos directores de la normal apuntando hacia afuera de la frontera Γ y \bar{t}_x , \bar{t}_y , \bar{u} y \bar{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 (4.8). Nuevamente planteamos una aproximación de la forma

$$\hat{\underline{\phi}} = \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} \end{bmatrix} = \underline{\psi} + \sum_{m=1}^M \underline{\underline{N}_m} \underline{a_m} \quad (4.75)$$

Luego, definiendo las funciones de peso como

$$\underline{\underline{W}_l} = \begin{bmatrix} W_{l,1} & 0 \\ 0 & W_{l,2} \end{bmatrix}, \quad \underline{\underline{\overline{W}}_l} = \begin{bmatrix} \overline{W}_{l,1} & 0 \\ 0 & \overline{W}_{l,2} \end{bmatrix} \quad (4.76)$$

Nuevamente, puede observarse en las ecuaciones (4.72) a (4.76) 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

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_x}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\sigma}_{xy}}{\partial y} + X \right) W_{l,1} d\Omega + \int_{\Gamma_\sigma} (n_x \hat{\sigma}_x + n_y \hat{\sigma}_{xy} - \bar{t}_x) \overline{W}_{l,1} d\Gamma &= 0 \\ \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{\sigma}_y}{\partial y} + Y \right) W_{l,2} d\Omega + \int_{\Gamma_\sigma} (n_x \hat{\sigma}_{xy} + n_y \hat{\sigma}_y - \bar{t}_y) \overline{W}_{l,2} d\Gamma &= 0 \end{aligned} \quad (4.77)$$

donde $\hat{\underline{\phi}} = \underline{\underline{N}} \underline{a}$. Aplicando integración por partes, la ec. (4.77) queda como

$$\begin{aligned} - \int_{\Omega} \left(\hat{\sigma}_x \frac{\partial W_{l,1}}{\partial x} + \hat{\sigma}_{xy} \frac{\partial W_{l,1}}{\partial y} - W_{l,1} X \right) d\Omega + \int_{\Gamma_\phi + \Gamma_\sigma} (\hat{\sigma}_x n_x + \sigma_{xy} n_y) W_{l,1} d\Gamma + \dots \\ \dots + \int_{\Gamma_\sigma} (\hat{\sigma}_x n_x + \sigma_{xy} n_y - \bar{t}_x) \overline{W}_{l,1} d\Gamma = 0 \\ - \int_{\Omega} \left(\hat{\sigma}_{xy} \frac{\partial W_{l,2}}{\partial x} + \hat{\sigma}_y \frac{\partial W_{l,2}}{\partial y} - W_{l,2} Y \right) d\Omega + \int_{\Gamma_\phi + \Gamma_\sigma} (\hat{\sigma}_{xy} n_x + \sigma_y n_y) W_{l,2} d\Gamma + \dots \\ \dots + \int_{\Gamma_\sigma} (\hat{\sigma}_{xy} n_x + \sigma_y n_y - \bar{t}_y) \overline{W}_{l,2} d\Gamma = 0 \end{aligned} \quad (4.78)$$

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

$$\begin{aligned} W_{l,1} &= W_{l,2} = 0, \quad \text{sobre } \Gamma_\phi \\ \overline{W}_{l,1} &= -W_{l,1} \Big|_{\Gamma_\sigma} \\ \overline{W}_{l,2} &= -W_{l,2} \Big|_{\Gamma_\sigma} \end{aligned} \quad (4.79)$$

Combinando los resultados de (4.78) y (4.79), y luego expresándolos de forma compacta tenemos

$$\int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{W}}_l)^T \underline{\underline{\hat{\sigma}}} d\Omega - \int_{\Omega} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{X}} d\Omega - \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{\bar{t}}} d\Gamma = 0 \quad (4.80)$$

donde $\underline{\underline{\bar{t}}}^T = [\bar{t}_x \ \bar{t}_y]$. Expresando las tensiones en (4.80) en términos de desplazamientos, tenemos que

$$\int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{W}}_l)^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \hat{\phi} d\Omega = \int_{\Omega} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{X}} d\Omega + \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{\bar{t}}} d\Gamma \quad (4.81)$$

Hasta aquí hemos hecho el planteo de residuos ponderados a la ecuación de equilibrio. Usamos ahora la aproximación definida en (4.75) y tenemos

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^M \left(\int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{W}}_l)^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{N}}_m d\Omega \right) \underline{a}_m &= \dots \\ \dots \int_{\Omega} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{X}} d\Omega + \int_{\Gamma_\sigma} \underline{\underline{W}}_l \underline{\underline{\bar{t}}} d\Gamma - \int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{W}}_l)^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\psi} d\Omega \end{aligned} \quad (4.82)$$

lo que inmediatamente nos conduce a un sistema de la forma $\underline{\underline{K}} \underline{a} = \underline{\underline{F}}$. 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

$$\underline{\underline{K}}^e = \int_{\Omega} (\underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{N}}_l)^T \underline{\underline{D}} \underline{\underline{\mathcal{L}}} \underline{\underline{N}}_m d\Omega \quad (4.83)$$

4.2. Elasticidad lineal con FEM

Estas notas que a continuación se incluyen son un breve resumen del capítulo 5 del libro de Eugenio Oñate *Calculo de Estructuras por el Método de Elementos Finitos*.

4.2.1. Campo de desplazamientos

Los desplazamientos suelen representar la incógnita principal en el problema de la elasticidad. Es un campo vectorial que denotaremos como:

$$\mathbf{u}(x, y) = \begin{pmatrix} u(x, y) \\ v(x, y) \end{pmatrix} \quad (4.84)$$

4.2.2. Campo de deformaciones

Del campo vectorial de desplazamientos se pueden deducir el campo tensorial de las deformaciones como:

$$\boldsymbol{\epsilon}(x, y) = \nabla \mathbf{u}(x, y)$$

Asumiendo la hipótesis de un estado de deformaciones o tensiones bidimensionales donde ϵ_z o σ_z son nulos, entonces el producto de ambos, que participa en el principio de los trabajos virtuales, es nulo, motivo por el cual no es tenido en cuenta de aquí en mas. Con estas hipótesis el tensor deformación y el de tensiones se pueden simplificar en sus versiones vectoriales para de esta forma simplificar el análisis. Por lo tanto de ahora en mas asumiremos a ambos como campos vectoriales, y en el caso de la deformación definido como:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix}$$

donde

$$\begin{aligned} \epsilon_x &= \frac{\partial u}{\partial x} & (4.85) \\ \epsilon_y &= \frac{\partial v}{\partial y} \\ \epsilon_z &= 0 \\ \gamma_{xy} &= \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \\ \gamma_{xz} &= \gamma_{yz} = 0 \end{aligned}$$

Tambien podríamos escribir lo anterior como:

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} & \frac{\partial v}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \nabla^{\epsilon-\sigma} \mathbf{u} \quad (4.86)$$

La notación $\nabla^{\epsilon-\sigma}$ responde a que el operador ∇ no es el comúnmente definido operador gradiente sino una versión especial de la teoría de la elasticidad que nos permite operar con los tensores deformación y tensión como vectores.

4.2.3. Campo de tensiones

Del mismo modo el campo tensorial de tensiones lo asumiremos un campo vectorial con sus componentes significativas:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} \quad (4.87)$$

4.2.4. Relación tensión con deformación

Esta relación se deduce de la ecuación constitutiva de la elasticidad tridimensional mediante un tensor de 4to orden \mathbf{C} que relaciona ambos tensores de 2do orden, $\boldsymbol{\sigma}$ y $\boldsymbol{\epsilon}$

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \mathbf{C}_{ijkl}\boldsymbol{\epsilon}_{kl}$$

Con las hipótesis simplificativas bidimensionales $\epsilon_z = 0$ y $\gamma_{xz} = \gamma_{yz} = 0$ la citada relación se puede escribir como:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D}\boldsymbol{\epsilon} \quad (4.88)$$

donde nuevamente tanto $\boldsymbol{\sigma}$ como $\boldsymbol{\epsilon}$ son considerados con sus componentes significativas, es decir, como vectores.

La matriz \mathbf{D} asume una forma general:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & 0 \\ d_{12} & d_{22} & 0 \\ 0 & 0 & d_{33} \end{pmatrix} \quad (4.89)$$

donde se ha asumido el teorema de Maxwell-Betty que impone la simetría de esta matriz y si además consideramos isotropía llegamos a la definición de los siguientes coeficientes:

Tensión Plana

$$\begin{aligned} d_{11} = d_{22} &= \frac{E}{1 - \nu^2} \\ d_{12} &= \nu d_{11} \\ d_{33} &= \frac{E}{2(1 + \nu)} = G \end{aligned} \quad (4.90)$$

Deformación Plana

$$\begin{aligned} d_{11} = d_{22} &= \frac{E(1 - \nu)}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \\ d_{12} &= \frac{\nu}{1 - \nu} d_{11} \\ d_{33} &= \frac{E}{2(1 + \nu)} = G \end{aligned} \quad (4.91)$$

con E el módulo de Young y ν el coeficiente de Poisson, datos que caracterizan a un material.

El caso ortotropo lo omitimos por razones de brevedad. Para mayor detalle ver la bibliografía citada en este apunte.

4.2.5. Principio de los trabajos virtuales

Esta es una forma energética que permite resolver el equilibrio local y global. Se define una función objetivo que representa la energía puesta en juego y se busca minimizarla. Esto redonda en la siguiente expresión integral:

$$\begin{aligned} & \int \int_A (\delta\epsilon_x\sigma_x + \delta\epsilon_y\sigma_y + \delta\gamma_{xy}\tau_{xy})t dA = \\ &= \int \int_A (\delta ub_x + \delta vb_y)t dA + \oint_l (\delta ut_x + \delta vt_y)t ds + \sum_i (\delta u_i U_i + \delta v_i V_i) \end{aligned} \quad (4.92)$$

El miembro derecho representa el trabajo de las fuerzas repartidas por unidad de volumen $\mathbf{b} = (b_x, b_y)$, de las fuerzas repartidas sobre el contorno $\mathbf{t} = (t_x, t_y)$ y de las fuerzas puntuales $\mathbf{q}_i = (U_i, V_i)$ sobre los desplazamientos virtuales $\delta\mathbf{u} = [\delta u, \delta v]$, mientras que el miembro izquierdo representa el trabajo de las tensiones sobre los desplazamientos virtuales. A es el área y t su espesor. En problemas de tensión plana t debería coincidir con el espesor real mientras que en el caso de deformación plana debería ser la unidad. Escribiendo la misma ecuación de una forma más compacta:

$$\int \int_A \delta\boldsymbol{\epsilon}^T \boldsymbol{\sigma} t dA = \int \int_A \delta\mathbf{u}^T \mathbf{b} t dA + \oint_l \delta\mathbf{u}^T \mathbf{t} t ds + \sum_i \delta\mathbf{u}_i^T \mathbf{q}_i \quad (4.93)$$

Estas ecuaciones son el punto de partida para el proceso de discretización que se introduce a continuación.

Esto mismo también puede lograrse a partir del método de los residuos ponderados, definiendo el residuo como:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{W}_i \mathbf{R}_i^{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} \tilde{\mathbf{W}}_i \mathbf{R}_i^{\Gamma} d\Gamma = \\ &= \int_{\Omega} \mathbf{W}^T (\nabla^{\epsilon-\sigma} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b}) d\Omega - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{W}^T (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n) d\Gamma + \sum_i \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.94)$$

donde las cargas puntuales están expresadas como deltas de *Dirac*.

Recurriendo a la forma débil de 4.94 tenemos

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} (\nabla^{\epsilon-\sigma} \mathbf{W})^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{b} d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{W}^T \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \\ & - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{W}^T (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n) d\Gamma + \sum_i \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = 0 \\ & - \int_{\Omega} (\nabla^{\epsilon-\sigma} \mathbf{W})^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{b} d\Omega + \underbrace{\int_{\Gamma_u} \mathbf{W}^T \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d\Gamma}_{=0 \text{ (Dirichlet)}} + \\ & + \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{W}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n d\Gamma + \sum_i \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.95)$$

y terminamos con una forma equivalente a 4.93 donde \mathbf{W} equivale a $\delta\mathbf{u}$ y $\nabla^{\epsilon-\sigma} \mathbf{W}$ equivale a $\delta\boldsymbol{\epsilon}$ habiendo usado una formulación Galerkin donde la función de peso y la aproximante de la solución coinciden.

La forma débil se emplea para reducir los requisitos de regularidad en los espacios funcionales y de esa forma generar formulaciones más simples.

Usando 4.100 y 4.88 en 4.95 llegamos a:

$$\begin{aligned} & - \int_{\Omega} \mathbf{W}^T (\nabla^{\epsilon-\sigma})^T \mathbf{D} \nabla^{\epsilon-\sigma} \mathbf{u} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{b} d\Omega + \\ & + \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{W}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n d\Gamma + \sum_i \int_{\Omega} \mathbf{W}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (4.96)$$

4.2.6. Discretización

A continuación daremos los lineamientos generales de la discretización para luego particularizar a los elementos finitos frecuentemente empleados.

Nosotros trabajaremos sobre un elemento denominado *máster* definido en un espacio de coordenadas naturales (ξ, η) para lo cual necesitamos definir las transformaciones necesarias para poder transformar el problema desde el espacio real (x, y) al máster.

Del mismo modo con las variables dependientes, en este caso los desplazamientos $(\delta u, \delta v)$.

En ambos casos apelaremos a la forma discreta:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(\xi, \eta) &= \sum_j \mathbf{x}_j N_j(\xi, \eta) \\ \mathbf{u}(\xi, \eta) &= \sum_j \mathbf{u}_j N_j(\xi, \eta) \end{aligned} \quad (4.97)$$

con

$$\mathbf{u}_j = (u_j, v_j)$$

Con estas expresiones es posible relacionar los gradientes en el dominio real (x, y) a aquellos en el dominio máster (ξ, η) , de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \nabla \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} \\ (\nabla \mathbf{u})_{ij} &= \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \\ &= \frac{\partial u_i}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x_j} + \frac{\partial u_i}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x_j} \\ \nabla_x u_i &= \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial x} \\ \frac{\partial u_i}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial u_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ \frac{\partial \xi}{\partial y} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{pmatrix}}_{\mathbf{J}} \nabla_{\xi} u_i = \mathbf{J} \nabla_{\xi} u_i \end{aligned} \quad (4.98)$$

Del mismo modo para transformar al revés tenemos

$$\nabla_{\xi} u_i = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial u_i}{\partial \eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial u_i}{\partial x} \\ \frac{\partial u_i}{\partial y} \end{pmatrix}}_{\mathbf{J}^{-1}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix} \nabla_x u_i = \mathbf{J}^{-1} \nabla_x u_i \quad (4.99)$$

Del mismo modo el operador $\nabla^{\epsilon-\sigma}$ de acuerdo a su definición dada en 4.100 y a la transformación recién definida en 4.98 y 4.99 llegamos a

$$\nabla^{\epsilon-\sigma} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) & 0 \\ 0 & \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) & \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \end{pmatrix} \quad (4.100)$$

Otro elemento de la discretización es la partición del dominio Ω en elementos, de forma tal queda

$$\begin{aligned} \Omega &= \cup_e \Omega^{(e)} \\ &\text{tal que} \\ \cap_e \Omega^{(e)} &= \emptyset \end{aligned} \quad (4.101)$$

4.2.6.1. Elementos triangulares de 3 nodos

La expresión anterior 4.97 en forma expandida se puede escribir para el caso de un elemento lineal de 3 nodos (triángulo)

para las coordenadas $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \end{pmatrix}$

y para los desplazamientos $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ u_3 \\ v_3 \end{pmatrix}$ (4.102)

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \mathbf{a}^{(e)}$$

$$\mathbf{N} = [\mathbf{N}_1 \ \mathbf{N}_2 \ \mathbf{N}_3] \quad ; \quad \mathbf{N}_i = \begin{pmatrix} N_i & 0 \\ 0 & N_i \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}^{(e)} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{(e)} \\ \mathbf{a}_2^{(e)} \\ \mathbf{a}_3^{(e)} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathbf{a}_i^{(e)} = \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$$

Para las deformaciones usando 4.85, tenemos

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N_1}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_2}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_3}{\partial y} \\ \frac{\partial N_1}{\partial y} & \frac{\partial N_1}{\partial x} & \frac{\partial N_2}{\partial y} & \frac{\partial N_2}{\partial x} & \frac{\partial N_3}{\partial y} & \frac{\partial N_3}{\partial x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ u_3 \\ v_3 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{B} \mathbf{a}^{(e)} \quad ; \quad \mathbf{B} = (\mathbf{B}_1 \ \mathbf{B}_2 \ \mathbf{B}_3) \quad ; \quad \mathbf{B}_i \begin{pmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{pmatrix}$$

Siendo el elemento triangular un soporte de un polinomio lineal completo, su gradiente es constante con lo cual las matrices \mathbf{B}_i tienen coeficientes constantes por elemento.

De 4.93 y 4.96 llegamos a:

$$\begin{aligned}
 & - \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega + \\
 & + \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{N}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}_n} d\Gamma + \sum_i \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = 0
 \end{aligned} \tag{4.104}$$

Si usamos la partición presentada en 4.101 entonces a nivel elemental las expresiones que quedan son:

$$\sum_{(e)} \left\{ \underbrace{- \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} \mathbf{a} d\Omega}_{-\mathbf{K}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)}} + \underbrace{\int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega}_{\mathbf{f}_b^{(e)}} + \underbrace{\int_{\Gamma_{\sigma} \cap \Gamma^{(e)}} \mathbf{N}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}_n} d\Gamma}_{\mathbf{f}_t^{(e)}} + \underbrace{\sum_i \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega}_{\mathbf{f}_q^{(e)}} \right\} = 0 \tag{4.105}$$

donde quedan definidas la matriz de rigidez elemental y los vectores de fuerzas de cuerpo, de contorno por tracción y de cargas puntuales.

En particular para el elemento de 3 nodos tenemos

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}^{(e)} &= \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} d\Omega \\
 \mathbf{f}_b^{(e)} &= \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega \\
 \mathbf{f}_t^{(e)} &= \int_{\Gamma_{\sigma} \cap \Gamma^{(e)}} \mathbf{N}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}_n} d\Gamma \\
 \mathbf{f}_q^{(e)} &= \sum_i \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega
 \end{aligned} \tag{4.106}$$

Como normalmente las fuerzas puntuales son pocas en lugar de aplicarlas en cada elemento de la malla se las recorre en otro lazo y se las aplica solo sobre los elementos donde se ubican sus puntos de aplicación.

A continuación recorremos elemento a elemento y computamos en forma genérica las cuentas sobre uno de ellos en particular a modo de ejemplo.

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}^{(e)} &= \int_{\Omega^{(e)}} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^T \\ \mathbf{B}_2^T \\ \mathbf{B}_3^T \end{pmatrix}}_{6 \times 3} \underbrace{\mathbf{D}}_{3 \times 3} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_3 \end{pmatrix}}_{3 \times 6} d\Omega \\
 \mathbf{K}_{ij}^{(e)} &= \int_{\Omega^{(e)}} \underbrace{\mathbf{B}_i^T}_{2 \times 3} \underbrace{\mathbf{D}}_{3 \times 3} \underbrace{\mathbf{B}_j}_{3 \times 2} d\Omega
 \end{aligned} \tag{4.107}$$

Para las fuerzas

$$\begin{aligned}
 \mathbf{f}_b^{(e)} &= \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{b} d\Omega = \int_{\Omega^{(e)}} \begin{pmatrix} \mathbf{N_1}^T \mathbf{b} \\ \mathbf{N_2}^T \mathbf{b} \\ \mathbf{N_3}^T \mathbf{b} \end{pmatrix} d\Omega \\
 \mathbf{f}_t^{(e)} &= \int_{\Gamma_\sigma \cap \Gamma^{(e)}} \mathbf{N}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n d\Gamma = \int_{\Gamma_\sigma \cap \Gamma^{(e)}} \begin{pmatrix} \mathbf{N_1}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n \\ \mathbf{N_2}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n \\ \mathbf{N_3}^T \tilde{\boldsymbol{\sigma}}_n \end{pmatrix} d\Gamma \\
 \mathbf{f}_q^{(e)} &= \sum_i \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{N}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d\Omega = \sum_i \int_{\Omega^{(e)}} \begin{pmatrix} \mathbf{N_1}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \\ \mathbf{N_2}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \\ \mathbf{N_3}^T \mathbf{q}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \end{pmatrix} d\Omega = \\
 &= \sum_i \begin{pmatrix} \mathbf{N_1}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{q}_i \\ \mathbf{N_2}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{q}_i \\ \mathbf{N_3}^T(\mathbf{x}_i) \mathbf{q}_i \end{pmatrix} \quad \forall \mathbf{x}_i \in e
 \end{aligned} \tag{4.108}$$

Como dijimos anteriormente la integral la hacemos en el elemento máster $\hat{\Omega}$ por lo cual hay que tener en cuenta que los elementos del integrando deben ser considerados acorde a la transformación, entonces:

- $N_i(x(\xi, \eta), y(\xi, \eta)) \rightarrow N_i(\xi, \eta)$, es decir que a cada punto del dominio real le corresponde 1 y solo 1 del transformado por lo que el reemplazo es directo
- \mathbf{B}_i es una matriz construida en función de $\frac{\partial N_i}{\partial x}$ y $\frac{\partial N_i}{\partial y}$
- $\nabla_x N_i = \mathbf{J} \nabla_\xi N_i$
- las funciones de forma triangulares en el master son

$$\begin{aligned}
 N_1 &= 1 - \xi - \eta \\
 N_2 &= \xi \\
 N_3 &= \eta
 \end{aligned} \tag{4.109}$$

- los gradientes son

$$\begin{aligned}
 (\nabla_\xi N_1)^T &= \left(\frac{\partial N_1}{\partial \xi}, \frac{\partial N_1}{\partial \eta} \right) = (-1, -1) \\
 (\nabla_\xi N_2)^T &= \left(\frac{\partial N_2}{\partial \xi}, \frac{\partial N_2}{\partial \eta} \right) = (1, 0) \\
 (\nabla_\xi N_3)^T &= \left(\frac{\partial N_3}{\partial \xi}, \frac{\partial N_3}{\partial \eta} \right) = (0, 1)
 \end{aligned} \tag{4.110}$$

- los gradientes en el dominio real son:

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial N_1}{\partial x}, \frac{\partial N_1}{\partial y} \right)^T &= \mathbf{J} \nabla_{\xi} N_1 \\
 \left(\frac{\partial N_2}{\partial x}, \frac{\partial N_2}{\partial y} \right)^T &= \mathbf{J} \nabla_{\xi} N_2 \\
 \left(\frac{\partial N_3}{\partial x}, \frac{\partial N_3}{\partial y} \right)^T &= \mathbf{J} \nabla_{\xi} N_3
 \end{aligned} \tag{4.111}$$

- con \mathbf{J} calculada a partir de la inversa de las derivadas $\frac{\partial x_i}{\partial \xi_j}$ (4.99), es decir:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}^{-1}$$

con

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^{j=3} x_j \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \\
 \frac{\partial x}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^{j=3} x_j \frac{\partial N_j}{\partial \eta} \\
 \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^{j=3} y_j \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \\
 \frac{\partial y}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^{j=3} y_j \frac{\partial N_j}{\partial \eta}
 \end{aligned} \tag{4.112}$$

con (x_j, y_j) las coordenadas de los vértices del elemento triangular considerado.

- el diferencial de volumen $d\Omega$ también se transforma al master como

$$d\Omega = |\mathbf{J}| d\hat{\Omega}$$

con $|\mathbf{J}|$ el determinante de la matriz jacobiana que transforma el dominio real en el máster y por lo tanto la integral sobre el volumen del elemento (area en 2D) se escribe como:

$$\mathbf{K}_{ij}^{(e)} = \int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} \mathbf{B}_i^T(\xi, \eta) \mathbf{D} \mathbf{B}_j(\xi, \eta) |\mathbf{J}| d\eta \tag{4.113}$$

De esta forma la integral queda definida en un dominio fijo (máster) lo cual requiere conocer la matriz jacobiana de la transformación entre el dominio real y el máster (\mathbf{J}) y en la cual aparece explícitamente a través del determinante de la citada matriz y por otro lado el cálculo de la matriz \mathbf{B}_i también requiere conocer la citada matriz ya que las derivadas hay que calcularlas en el dominio físico original y no en el dominio de integración (máster).

- las cargas de volumen se integran en forma directa como:

$$\mathbf{f}_b^{(e)} = \int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} \begin{pmatrix} \mathbf{N}_1^T(\xi, \eta) \mathbf{b} \\ \mathbf{N}_2^T(\xi, \eta) \mathbf{b} \\ \mathbf{N}_3^T(\xi, \eta) \mathbf{b} \end{pmatrix} |\mathbf{J}| d\eta \tag{4.114}$$

- las cargas puntuales

$$\mathbf{f}_q^{(e)} = \sum_i \begin{pmatrix} \mathbf{N}_1^T(\mathbf{x}_i)(\xi, \eta) \mathbf{q}_i \\ \mathbf{N}_2^T(\mathbf{x}_i)(\xi, \eta) \mathbf{q}_i \\ \mathbf{N}_3^T(\mathbf{x}_i)(\xi, \eta) \mathbf{q}_i \end{pmatrix} \quad \forall \mathbf{x}_i \in e \quad (4.115)$$

- las cargas sobre el contorno también se pueden integrar mediante una transformación al elemento máster respectivo, que en el caso 2D sería una integración de línea entre $x \in (x_1, x_2)$ y en el máster sería $\xi \in (-1, 1)$

4.2.6.2. Elementos cuadrangulares de 4 nodos

Para el elemento de 4 nodos o vértices son pocas cosas las que cambian. Las enunciamos a continuación:

- las funciones de forma ahora son el producto cartesiano de 2 funciones en 1D, es decir:

$$\begin{aligned} N_i &= \frac{1}{2}(1 + \xi_i \xi) \times \frac{1}{2}(1 + \eta_i \eta) \\ N_1 &= \frac{1}{2}(1 - \xi) \times \frac{1}{2}(1 - \eta) \\ N_2 &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \times \frac{1}{2}(1 - \eta) \\ N_3 &= \frac{1}{2}(1 + \xi) \times \frac{1}{2}(1 + \eta) \\ N_4 &= \frac{1}{2}(1 - \xi) \times \frac{1}{2}(1 + \eta) \end{aligned} \quad (4.116)$$

con (ξ_i, η_i) las coordenadas de los 4 vértices del cuadrángulo máster.

- Siendo estas funciones de forma polinomios de segundo orden incompletos (contienen un término $\xi \times \eta$, o $x \times y$) ya los gradientes no son mas constantes por elemento como en el caso triangular.

•

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{pmatrix}^{-1}$$

con

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^{j=4} x_j \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^{j=4} x_j \frac{\partial N_j}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} &= \sum_{j=1}^{j=4} y_j \frac{\partial N_j}{\partial \xi} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} &= \sum_{j=1}^{j=4} y_j \frac{\partial N_j}{\partial \eta} \end{aligned} \quad (4.117)$$

donde ahora para construir la matriz jacobiana y su inversa hay que extender el lazo a los 4 vértices.

- del mismo modo la matriz \mathbf{B} se construye como

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 & \mathbf{B}_3 & \mathbf{B}_4 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{B}_i \begin{pmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \end{pmatrix} \quad (4.118)$$

- y por lo tanto la matriz de rigidez es ahora

$$\mathbf{K}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1^T \\ \mathbf{B}_2^T \\ \mathbf{B}_3^T \\ \mathbf{B}_4^T \end{pmatrix}}_{8 \times 3} \underbrace{\mathbf{D} \left(\mathbf{B}_1 \quad \mathbf{B}_2 \quad \mathbf{B}_3 \quad \mathbf{B}_4 \right)}_{3 \times 8} d\Omega \quad (4.119)$$

$$\mathbf{K}_{ij}^{(e)} = \int_{\Omega^{(e)}} \underbrace{\mathbf{B}_i^T}_{2 \times 3} \underbrace{\mathbf{D}}_{3 \times 3} \underbrace{\mathbf{B}_j}_{3 \times 2} d\Omega$$

- y el vector de incógnitas elementales es ahora

para las coordenadas $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \\ x_4 \\ y_4 \end{pmatrix}$

y para los desplazamientos $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 & 0 \\ 0 & N_1 & 0 & N_2 & 0 & N_3 & 0 & N_4 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} u_1 \\ v_1 \\ u_2 \\ v_2 \\ u_3 \\ v_3 \\ u_4 \\ v_4 \end{pmatrix}}_{\mathbf{a}^{(e)}}$

$$\mathbf{u} = \mathbf{N} \mathbf{a}^{(e)}$$

$$\mathbf{N} = [\mathbf{N}_1 \ \mathbf{N}_2 \ \mathbf{N}_3 \ \mathbf{N}_4] \quad ; \quad \mathbf{N}_i = \begin{pmatrix} N_i & 0 \\ 0 & N_i \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}^{(e)} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{(e)} \\ \mathbf{a}_2^{(e)} \\ \mathbf{a}_3^{(e)} \\ \mathbf{a}_4^{(e)} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathbf{a}_i^{(e)} = \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}$$
(4.120)

- la integración sobre el elemento máster $\hat{\Omega}$ definido como $(\xi, \eta) \in (-1, 1) \times (-1, 1)$ se realiza en forma similar al caso triangular solo cambian los los límites de integración, a saber:

$$\mathbf{K}_{ij}^{(e)} = \int_{-1}^1 d\xi \int_{-1}^1 \mathbf{B}_i^T(\xi, \eta) \mathbf{D} \mathbf{B}_j(\xi, \eta) |\mathbf{J}| d\eta \quad (4.121)$$

4.2.7. Implementación computacional

Un código de elementos finitos (FEM) requiere a grosso modo lo siguiente:

- un lazo sobre todos los elementos
- para cada elemento, contar con sus coordenadas $x_{nod} = (x_j, y_j)$ y sus conectividades $icone = (i_1, i_2, i_3)$ en el caso de triángulos y (i_1, i_2, i_3, i_4) en el caso de cuadráculos.

- con sus coordenadas x_{nod} se calcula la matriz jacobiana \mathbf{J} como se explicó previamente, su inversa y su determinante
- se calcula la matriz \mathbf{B} y la matriz constitutiva \mathbf{D}
- se evalúa el integrando $\mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} |\mathbf{J}|$
- se integra analíticamente o numéricamente el integrando, generando una matriz elemental de $(nen \times ndf) \times (nen \times ndf)$, con $nen = 3$ para triángulos, $nen = 4$ para cuadrángulos y $ndf = 2$ para elasticidad bidimensional, $ndf = 1$ para problemas escalares como el caso térmico.
- Tambien se ensambla el miembro derecho que aporta el elemento, sea las cargas de volúmen, las puntuales y las de contorno que le correspondan.
- Se lleva la contribución elemental a la matriz global usando el arreglo de conectividades $icone$
- se aplican las condiciones de contorno Dirichlet con algún criterio, sea tachando sus filas y columnas respectivas previa modificación del miembro derecho acorde a esta fijación, o sea anulan sus contribuciones y se introduce la asignación al sistema de ecuaciones agregando un 1 en la diagonal y el valor de la fijación al miembro derecho, o alguna otra forma equivalente.
- finalmente se resuelve el sistema de ecuaciones.

A continuación presentamos un caso testigo. Se trata de una viga en voladizo como muestra la siguiente figura ya discretizada con una malla de triángulos.

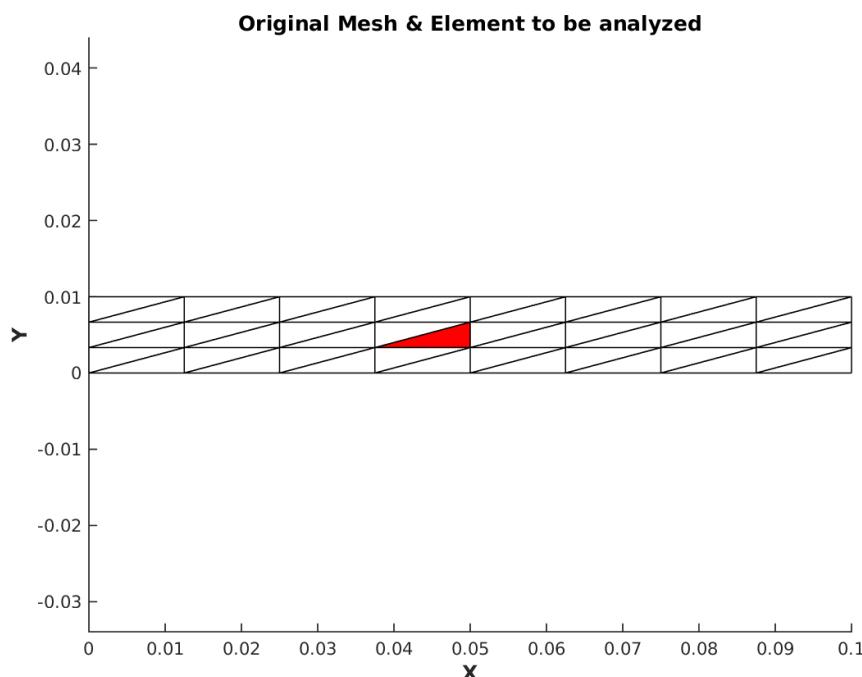


Figura 4.13: Viga en voladizo - Malla de triángulos

El triángulo marcado en rojo es el que será analizado en detalle. Este triángulo es el elemento 12 de esta malla que tiene 48 elementos en total, 8 según la dirección x , 3 según y y esos 24 cuadrángulos originales son luego divididos por su diagonal en 48 triángulos. Ese triángulo tiene como nodos

$$icone(12, 1 : 3) = (13 \quad 14 \quad 23)$$

y las coordenadas de esos 3 nodos son

$$x_{nod}([13, 14, 23], :) = \begin{pmatrix} 3,75e - 02 & 3,3333e - 03 \\ 5,00e - 02 & 3,3333e - 03 \\ 5,00e - 02 & 6,6667e - 03 \end{pmatrix}$$

No hemos entrado mucho en detalle respecto a la integración numérica pero usamos cuadratura Gaussiana, por lo tanto la integral se reemplaza por la suma sobre unos puntos de Gauss que tienen coordenadas preestablecidas en el máster ponderados de forma de obtener la precisión deseada. En este caso usamos 3 puntos de Gauss cuyas coordenadas son:

$$\xi_{pg} = \begin{pmatrix} 1,6667e - 01 & 6,6667e - 01 & 1,6667e - 01 \end{pmatrix}$$

$$\eta_{pg} = \begin{pmatrix} 1,6667e - 01 & 1,6667e - 01 & 6,6667e - 01 \end{pmatrix}$$

y sus pesos son los tres iguales a $w_{pg} = \frac{1}{6}$.

Por lo tanto la integral $\int_0^1 d\xi \int_0^{1-\xi} I(\xi, \eta) d\eta$ se reemplaza por la suma $\sum_{pg} I(\xi_{pg}, \eta_{pg}) w_{pg}$, donde I es el integrando a integrar.

Para cada punto de Gauss evaluamos el integrando y esto requiere entre otras cosas evaluar la matriz \mathbf{B} y la matriz jacobiana \mathbf{J} . Por lo tanto armamos una rutina que nos construya la matriz jacobiana , que evaluada en el elemento en cuestión sobre el primer punto de Gauss arroja lo siguiente:

$$(\mathbf{J}^{-1})_{e=12}^{pg=1} = \frac{\partial x_i}{\partial \xi_j} = \begin{pmatrix} 1,2500e - 02 & 0 \\ 1,2500e - 02 & 3,3333e - 03 \end{pmatrix}$$

lo cual arroja

$$(\mathbf{J})_{e=12}^{pg=1} = \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} = \begin{pmatrix} 8,0000e + 01 & 0 \\ -3,0000e + 02 & 3,0000e + 02 \end{pmatrix}$$

con el determinante de la matriz jacobiana de valor $4,1667e - 05$.

En cuanto a la matriz \mathbf{B} tenemos

$$(\mathbf{B}_1)_{e=12}^{pg=1} = \begin{pmatrix} -8,0000e + 01 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & -8,0000e + 01 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{B}_2)_{e=12}^{pg=1} = \begin{pmatrix} 8,0000e + 01 & 0 \\ 0 & -3,0000e + 02 \\ -3,0000e + 02 & 8,0000e + 01 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{B}_3)_{e=12}^{pg=1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 3,0000e+02 \\ 3,0000e+02 & 0 \end{pmatrix}$$

Una vez recorrido los 3 puntos de Gauss y el integrando correspondiente a cada punto de Gauss se obtiene una matriz elemental, en este caso de 6×6 compuesta por un arreglo de 3×3 matrices de 2×2 . Cada una de estas matrices de 2×2 la presentamos a continuación para que la puedan cotejar con sus resultados.

$$(\mathbf{K}_{1,1})_{e=12} = \begin{pmatrix} 3,0769e+10 & 0 \\ 0 & 1,0769e+10 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{1,2})_{e=12} = \begin{pmatrix} -3,0769e+10 & 3,4615e+10 \\ 4,0385e+10 & -1,0769e+10 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{1,3})_{e=12} = \begin{pmatrix} 0 & -3,4615e+10 \\ -4,0385e+10 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{2,1})_{e=12} = \begin{pmatrix} -3,0769e+10 & 4,0385e+10 \\ 3,4615e+10 & -1,0769e+10 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{2,2})_{e=12} = \begin{pmatrix} 1,8221e+11 & -7,5000e+10 \\ -7,5000e+10 & 4,4346e+11 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{2,3})_{e=12} = \begin{pmatrix} -1,5144e+11 & 3,4615e+10 \\ 4,0385e+10 & -4,3269e+11 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{3,1})_{e=12} = \begin{pmatrix} 0 & -4,0385e+10 \\ -3,4615e+10 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{3,2})_{e=12} = \begin{pmatrix} -1,5144e+11 & 4,0385e+10 \\ 3,4615e+10 & -4,3269e+11 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{K}_{3,3})_{e=12} = \begin{pmatrix} 1,5144e+11 & 0 \\ 0 & 4,3269e+11 \end{pmatrix}$$

TAREA: Queda como tarea repetir lo mismo para un elemento cuadrangular si hubieramos prescindido de la partición de cada cuadrángulo por su diagonal en triángulos.

Capítulo 5

Barras

5.1. Introducción

Para introducir el tema FEM aplicado a la elasticidad en 1D pensaremos en una teoría de las mas simples como es la teoría de barras. Una barra es un elemento elástico que se supone que solo soporta esfuerzos axiales de tracción y/o de compresión. De este tipo de elementos elásticos uno de los más estudiados es el resorte, un elemento 1D que soporta solo esfuerzos en su eje y que tiene como ley constitutiva aquella que relaciona la fuerza F y el desplazamiento δx mediante la conocida constante del resorte, introducida por Hooke.

$$F = k\delta x \quad (5.1)$$

La tracción está asociada con un estiramiento de la barra mientras que la compresión con un acortamiento de la misma.

Del mismo modo una barra es un elemento 1D elástico de longitud $L^{(e)}$ y área $A^{(e)}$ cuyos extremos sufren desplazamiento definidos como $u_1^{(e)}$ y $u_2^{(e)}$, los cuales generan una deformación

$$\epsilon = \frac{u_2^{(e)} - u_1^{(e)}}{L^{(e)}} \quad (5.2)$$

mientras que para la tensión se emplea la ley de Hooke que en este caso vincula tensión con deformación

$$\sigma = E^{(e)} \epsilon = E^{(e)} \frac{u_2^{(e)} - u_1^{(e)}}{L^{(e)}} \quad (5.3)$$

La fuerza resultante se obtiene integrando las tensiones en el área, pero siendo el modelo 1D se asume que esa tensión se distribuye uniformemente en todo el área, siendo entonces la fuerza

$$N = A^{(e)} \sigma = (E A)^{(e)} \frac{u_2^{(e)} - u_1^{(e)}}{L^{(e)}} \quad (5.4)$$

Teniendo en cuenta el equilibrio estático de las fuerzas axiales, tenemos

$$R_1^{(e)} + R_2^{(e)} = 0 \rightarrow R_2^{(e)} = -R_1^{(e)} = N = \left(\frac{E A}{L}\right)^{(e)} (u_2^{(e)} - u_1^{(e)}) \quad (5.5)$$

lo cual podemos simplificar la expresión anterior asumiendo una constante elástica de la barra similar al resorte como

$$k^{(e)} = \left(\frac{E A}{L}\right)^{(e)}$$

lo cual nos permite escribir

$$\mathbf{q}^{(e)} = \begin{pmatrix} R_1^{(e)} \\ R_2^{(e)} \end{pmatrix} = k^{(e)} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{pmatrix} = \mathbf{K}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)} \quad (5.6)$$

Si sobre la barra actúan fuerzas distribuidas en la dirección axial (la única que puede soportar la barra) entonces

$$\mathbf{q}^{(e)} = \begin{pmatrix} R_1^{(e)} \\ R_2^{(e)} \end{pmatrix} = k^{(e)} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{pmatrix} - \frac{(b l)^{(e)}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \mathbf{K}^{(e)} \mathbf{a}^{(e)} - \mathbf{f}^{(e)} \quad (5.7)$$

siendo $\mathbf{q}^{(e)}$, $\mathbf{f}^{(e)}$ los vectores de fuerzas nodales totales y su equivalente por la acción exclusiva de las fuerzas distribuidas (b) respectivamente. $\mathbf{a}^{(e)}$ es el vector desplazamiento elemental y $\mathbf{K}^{(e)}$ la matriz de rigidez elemental.

5.2. Equilibrio en los nodos

Lo mismo que hemos planteado para una barra se puede replicar para un conjunto de ellas que forman una estructura, para lo cual el sistema global se termina de definir estableciendo el equilibrio en los nodos que vinculan todas las barras entre si. En términos matemáticos tenemos

$$\sum_{e=1}^{ne} \mathcal{A} \Big|_{j(e)} R^{(e)} = R_j \quad (5.8)$$

donde $\mathcal{A} \Big|_{j(e)}$ se puede interpretar como un operador de montaje (*assembly*) que relaciona cada nodo **local** de un elemento de barra con un nodo **global** de la estructura. Esta operación de montaje de las reacciones en cada nodo extremo de cada barra también se puede plantear como la resolución de un sistema de ecuaciones si reemplazamos 5.7 en 5.8,

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{n1} & K_{n2} & \dots & K_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

5.2.1. Ejemplo básico de barras

Ver Ferreira pagina 21

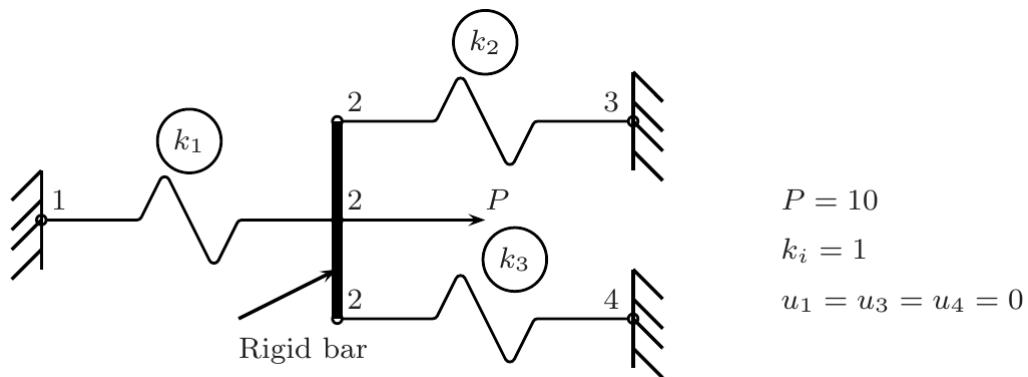


Figura 5.1: Ej basico de barras

El procedimiento se basa en calcular el sistema local de ecuaciones por cada barra o resorte y luego ensamblar esos sistemas locales en uno global.

Cada resorte aporte un sistema del tipo 5.6

$$\begin{pmatrix} R_1^{(e)} \\ R_2^{(e)} \end{pmatrix} = k^{(e)} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{(e)} \\ u_2^{(e)} \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

con $e = 1, 2, 3$.

A modo de ejemplo veamos como se construye el sistema global.

Barra 1: nodos globales 1 y 2

$$\begin{pmatrix} k^{(1)} & -k^{(1)} & 0 & 0 \\ -k^{(1)} & k^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1^{(1)} \\ R_2^{(1)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

Barra 2: nodos globales 2 y 3

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k^{(2)} & -k^{(2)} & 0 \\ 0 & -k^{(2)} & k^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ R_1^{(2)} \\ R_2^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

Barra 3: nodos globales 2 y 4

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k^{(3)} & 0 & -k^{(3)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -k^{(3)} & 0 & k^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ R_1^{(3)} \\ 0 \\ R_2^{(3)} \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Al ensamblar el sistema global, lo cual equivale a sumar todas las contribuciones, llegamos a:

$$\begin{pmatrix} k^{(1)} & -k^{(1)} & 0 & 0 \\ -k^{(1)} & k^{(1)} + k^{(2)} + k^{(3)} & -k^{(2)} & -k^{(3)} \\ 0 & -k^{(2)} & k^{(2)} & 0 \\ 0 & -k^{(3)} & 0 & k^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1^{(1)} \\ R_2^{(1)} + R_1^{(2)} + R_1^{(3)} \\ R_2^{(2)} \\ R_2^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ P \\ F_3 \\ F_4 \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

donde F_1, F_3, F_4 serían las reacciones que genera la pared para evitar que esos nodos se desplacen. Entonces el sistema final a resolver es:

$$\begin{pmatrix} k^{(1)} & -k^{(1)} & 0 & 0 \\ -k^{(1)} & k^{(1)} + k^{(2)} + k^{(3)} & -k^{(2)} & -k^{(3)} \\ 0 & -k^{(2)} & k^{(2)} & 0 \\ 0 & -k^{(3)} & 0 & k^{(3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ u_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ P \\ F_3 \\ F_4 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

donde podemos plantear 2 alternativas de solución:

1. Reducir el sistema y resolver solo para la incógnita $u_2 = \tilde{u}_2$. Luego, con \tilde{u}_2 resuelta multiplicar la matriz por el vector solución y despejar F_1, F_3, F_4 las reacciones.
2. Re escribir el sistema para un nuevo vector de incógnita formado por

$$(F_1 \ u_2 \ F_3 \ F_4)$$

5.3. Elemento de barra

Consideremos un elemento de barra como el de la figura, de sección transversal A uniforme y longitud $L = 2a$. Debajo se grafica el mismo elemento solo que expresado en las coordenadas naturales del elemento de referencia o master.

Una de las formas de formular este tipo de elemento es a través del principio de los trabajos virtuales. Para ello definimos un funcional energía

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a \sigma_x \epsilon_x A dx \quad (5.16)$$

asumiendo un comportamiento lineal elástico

$$\sigma_x = E \epsilon_x \quad (5.17)$$

entonces

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E A \epsilon_x^2 dx \quad (5.18)$$

con la deformación relacionada con el desplazamiento a través de

$$\epsilon_x = \frac{du}{dx} \quad (5.19)$$

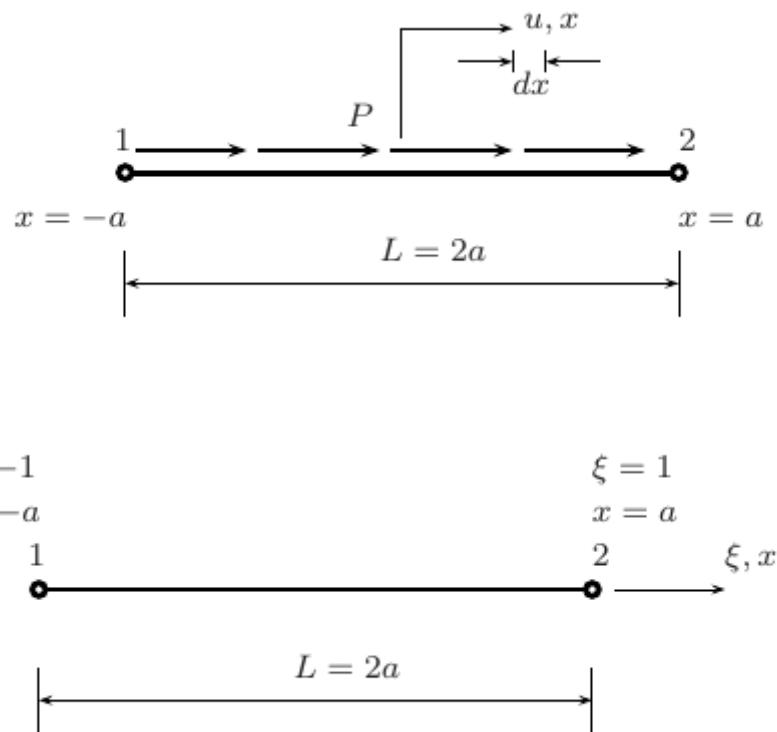


Figura 5.2: Elemento de barra

entonces

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E A \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx \quad (5.20)$$

Si consideramos como trabajo virtual al que surge de aplicar una fuerza por un desplazamiento virtual

$$\delta W = \int_{-a}^a p \delta u dx \quad (5.21)$$

Si aproximamos el desplazamiento de la barra de cada nodo usando las funciones de forma de FEM expresadas en el elemento master, entonces

$$u = \sum_j N_j(\xi) u_j = N_1(\xi) u_1 + N_2(\xi) u_2 \quad (5.22)$$

con

$$N_1(\xi) = \frac{1}{2}(1 - \xi); \quad N_2(\xi) = \frac{1}{2}(1 + \xi) \quad (5.23)$$

$$u = \begin{pmatrix} N_1 & N_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \mathbf{N} \mathbf{u}^{(e)} \quad (5.24)$$

Por lo tanto, la energía de deformación del elemento se expresa como

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E A \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 E A \left(\frac{du}{d\xi} \right)^2 \left(\frac{dx}{d\xi} \right)^2 d\xi = \frac{1}{2} (\mathbf{u}^{(e)})^T \int_{-1}^1 \frac{EA}{a} \mathbf{N}'^T \mathbf{N}' d\xi \mathbf{u}^{(e)} \quad (5.25)$$

donde $\mathbf{N}' = \frac{d\mathbf{N}}{d\xi}$

De forma que por comparación la matriz elemental resulta

$$\mathbf{K}^{(e)} = \frac{EA}{a} \int_{-1}^1 \mathbf{N}'^T \mathbf{N}' d\xi \quad (5.26)$$

Siendo la relación entre coordenadas físicas y naturales

$$x = a \xi$$

entonces, el jacobiano es

$$|J| = \frac{dx}{d\xi} = a$$

y las derivadas de las funciones de forma

$$\frac{dN_1}{d\xi} = -\frac{1}{2}; \quad \frac{dN_2}{d\xi} = \frac{1}{2}$$

En este caso la matriz es

$$\mathbf{K}^{(e)} = \frac{EA}{a} \int_{-1}^1 \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} d\xi = \frac{EA}{2a} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

En cuanto al trabajo virtual hecha por las fuerzas exteriores tenemos

$$\delta W^{(e)} = \int_{-1}^1 p \delta u dx = \int_{-1}^1 p \delta u a d\xi = \delta \mathbf{u}^{(e)T} a \int_{-1}^1 p \mathbf{N}^T d\xi \quad (5.28)$$

con p la fuerza distribuida actuando en el sentido axial como se muestra en la figura.

En forma compacta

$$\delta W^{(e)} = \delta \mathbf{u}^{(e)T} \mathbf{f}^{(e)} \quad (5.29)$$

con

$$\mathbf{f}^{(e)} = a \int_{-1}^1 p \mathbf{N}^T d\xi = \frac{ap}{2} \int_{-1}^1 \begin{pmatrix} 1 - \xi \\ 1 + \xi \end{pmatrix} d\xi = ap \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

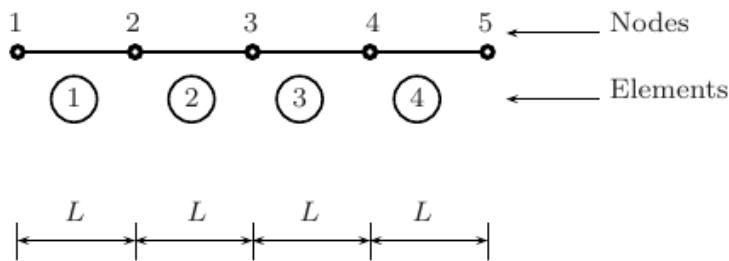


Figura 5.3: Elemento de barra

5.3.1. Sistema de barras

A continuación planteamos un ejemplo con un sistema de barras como el de la figura consistente de 4 elementos de barra.

El vector de incógnitas es

$$\mathbf{u}^T = (u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4 \ u_5)$$

Sumando la contribución de todos los elementos de barra obtenemos la energía de deformación como:

$$U = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \sum_{e=1}^4 \mathbf{K}^{(e)} \mathbf{u} = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T \mathbf{K} \mathbf{u}$$

y

$$\delta W^{(e)} = \delta \mathbf{u}^T \sum_{e=1}^4 \mathbf{f}^{(e)} = \delta \mathbf{u}^T \mathbf{f}$$

con

$$\mathbf{K} = \frac{EA}{L} \left\{ \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \dots \right\} = \frac{EA}{L} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

mientras que el vector de fuerzas equivales es

$$\mathbf{f} = ap \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

con el sistema a resolver dado por

$$\mathbf{K} \mathbf{u} = \mathbf{f}$$

sobre el cual se deben imponer las condiciones de contorno

Ver código alusivo a este ejemplo en Chapter_2/Ej_1/Ej_Ferreira_1.m del archivo comprimido con rutinas sobre barras.

Integración

La integración se puede llevar a cabo tanto en forma numérica (repasar lo aprendido en la asignatura cálculo numérico) o sino en forma analítica (repasar lo visto en las matemáticas del ciclo básico).

5.3.2. Ejemplo 2

A continuación vemos un ejemplo como se muestra en la siguiente figura con su script de OCTAVE.

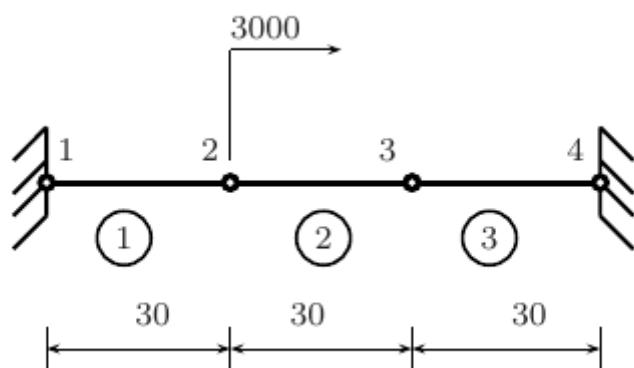


Figura 5.4: Ejemplo 2: Elementos de barra

Ver código alusivo a este ejemplo en Chapter_2/Ej_2/Ej_2.m del archivo comprimido con rutinas sobre barras.

```
%.....  
  
% MATLAB codes for Finite Element Analysis  
% problem2Structure.m  
% antonio ferreira 2008  
  
% clear memory  
clear all  
  
% p1 : structure  
p1=struct();  
  
% E; modulus of elasticity  
% A: area of cross section  
% L: length of bar  
E = 30e6;A=1;EA=E*A; L = 90;  
  
% generation of coordinates and connectivities  
% numberElements: number of elements  
p1.numberElements=3;  
% generation equal spaced coordinates  
p1.nodeCoordinates=linspace(0,L,p1.numberElements+1);
```

Figura 5.5: Ejemplo 2: Script usando el concepto de programación de estructura de datos

```
p1.xx=p1.nodeCoordinates;
% numberNodes: number of nodes
p1.numberNodes=size(p1.nodeCoordinates,2);

% elementNodes: connections at elements
ii=1:p1.numberElements;
p1.elementNodes(:,1)=ii;
p1.elementNodes(:,2)=ii+1;

% GDof: total degrees of freedom
p1.GDof=p1.numberNodes;

% % numberElements: number of Elements
% p1.numberElements=size(p1.elementNodes,1);
%
% % numberNodes: number of nodes
% p1.numberNodes=4;

% for structure:
    % displacements: displacement vector
    % force : force vector
    % stiffness: stiffness matrix
p1.displacements=zeros(p1.GDof,1);
p1.force=zeros(p1.GDof,1);
p1.stiffness=zeros(p1.GDof);

% applied load at node 2
p1.force(2)=3000.0;

% computation of the system stiffness matrix
for e=1:p1.numberElements;
    % elementDof: element degrees of freedom (Dof)
    elementDof=p1.elementNodes(e,:);
    nn=length(elementDof);
    length_element=p1.nodeCoordinates(elementDof(2))...
        -p1.nodeCoordinates(elementDof(1));
    detJacobian=length_element/2;invJacobian=1/detJacobian;

    % central Gauss point (xi=0, weight W=2)
    shapeL2=shapeFunctionL2Structure(0.0);
    Xderivatives=shapeL2.naturalDerivatives*invJacobian;

    % B matrix
```

Figura 5.6: Ejemplo 2: Script usando el concepto de programación de estructura de datos

```
B=zeros(1,nn); B(1:nn) = Xderivatives(:);
p1.stiffness(elementDof,elementDof)=...
    p1.stiffness(elementDof,elementDof)+B'*B*2*detJacobian*EA;
end

% prescribed dofs
p1.prescribedDof=find(p1.xx==min(p1.nodeCoordinates(:)) ...
    | p1.xx==max(p1.nodeCoordinates(:)))';

% solution
p1.displacements=solutionStructure(p1)

% output displacements/reactions
outputDisplacementsReactionsStructure(p1)
```

Figura 5.7: Ejemplo 2: Script usando el concepto de programación de estructura de datos

```
% .....
function shapeL2=shapeFunctionL2Structure(xi)

% shape function and derivatives for L2 elements
% shape : Shape functions
% naturalDerivatives: derivatives w.r.t. xi
% xi: natural coordinates (-1 ... +1)

shapeL2=struct()
shapeL2.shape=([1-xi,1+xi]/2)';
shapeL2.naturalDerivatives=[-1;1]/2;

end % end function shapeFunctionL2
```

Figura 5.8: Ejemplo 2: Script usando el concepto de programación de estructura de datos

5.3.3. Ejemplo 3

A continuación vemos un ejemplo como se muestra en la siguiente figura con su script de OCTAVE.

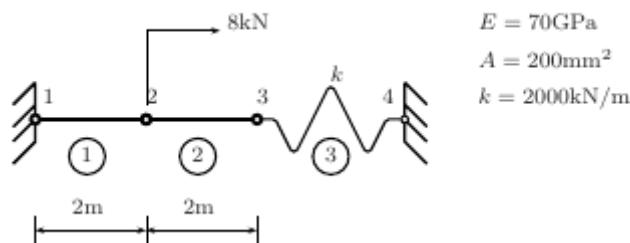


Figura 5.9: Ejemplo 3: Elementos de barra

Ver código alusivo a este ejemplo en Chapter_2/Ej_3.m del archivo comprimido con rutinas sobre barras.

5.4. Reticulados (trusses)

También llamado armadura son estructuras de barras que cuando trianguladas soportan esfuerzas generales trasmitiendo entre las barras solo aquellos de tracción/compresión.



Figura 5.10: Imagen de un reticulado real

Dado que el reticulado está formado por un conjunto finito de barras orientadas en forma arbitraria la forma de manejar las diferentes orientaciones y poder generar un sistema global a resolver es plantear las ecuaciones en coordenadas locales (x', y', z') y luego llevarlas al sistema global mediante la transformación de coordenadas dada por los cosenos directores.

5.4.1. Formulación del elemento de barra

En la siguiente figura representamos como hacer esta operación

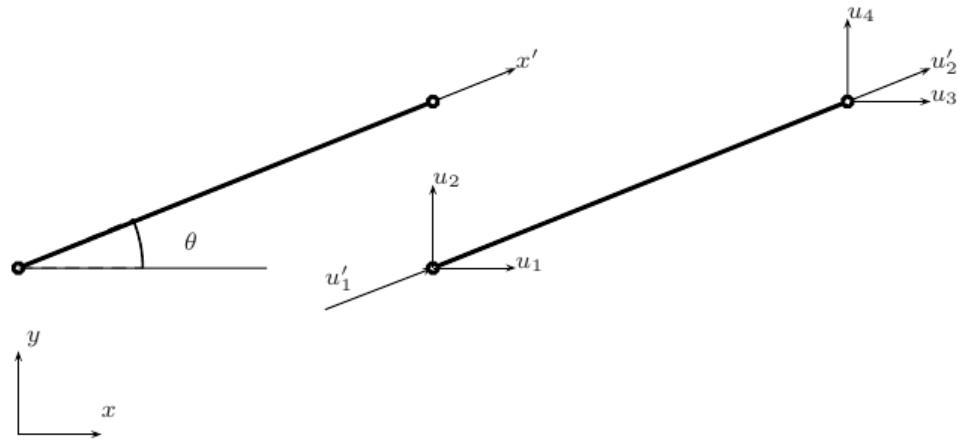


Figura 5.11: Teoría de reticulado

La incógnita en el sistema local se escribe como

$$\mathbf{u}'^T = \begin{pmatrix} u'_1 & u'_2 \end{pmatrix}$$

mientras que en el sistema global se escribe como

$$\mathbf{u}^T = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 \end{pmatrix}$$

y la relación entre ambas es

$$\begin{aligned} u'_1 &= u_1 \cos(\theta) + u_2 \sin(\theta) \\ u'_2 &= u_3 \cos(\theta) + u_4 \sin(\theta) \end{aligned} \quad (5.31)$$

Esto lo vamos a escribir de una forma compacta como

$$\mathbf{u}'^T = \mathbf{L} \mathbf{u} \quad (5.32)$$

con la matriz para el caso 2D definida como

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l & m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l & m \end{pmatrix} \quad (5.33)$$

con

$$l = \frac{x_2 - x_1}{L_e} ; \quad m = \frac{y_2 - y_1}{L_e} ; \quad L_e = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} \quad (5.34)$$

El caso 3D se escribe como

$$u'_1 = u_1 \cos(\theta_{x1}) + u_2 \cos(\theta_{y1}) + u_3 \cos(\theta_{z1}) \quad (5.35)$$

$$u'_2 = u_4 \cos(\theta_{x2}) + u_5 \cos(\theta_{y2}) + u_6 \cos(\theta_{z2}) \quad (5.36)$$

donde θ_{ab} es el ángulo formado por el eje global a y el local b siendo (u_1, u_2, u_3) las coordenadas globales del nodo 1 de la barra y u_4, u_5, u_6 las coordenadas globales del nodo 2 de la misma barra.

Es decir, que la matriz \mathbf{L} en 2D es de 2×4 mientras que en 3D es de 2×6 , es decir $2 \times 2 * ndm$, siendo ndm el número de dimensiones.

La matriz de rigidez sigue siendo la misma que vimos en el caso en que la barra estaba alineada con el eje global, es decir cuando $x' = x$, solo que ahora por cuestiones de notación la llamaremos \mathbf{K}' , siendo:

$$\mathbf{K}' = \frac{EA}{L_e} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.37)$$

De modo que la energía de deformación viene dada por:

$$U_e = \frac{1}{2} \mathbf{u}'^T \mathbf{K}' \mathbf{u}' \quad (5.38)$$

Reemplazando 5.32 en 5.38 llegamos a

$$U_e = \frac{1}{2} \mathbf{u}^T [\mathbf{L}^T \mathbf{K}' \mathbf{L}] \mathbf{u} \quad (5.39)$$

es decir que

$$\mathbf{K} = \mathbf{L}^T \mathbf{K}' \mathbf{L} \quad (5.40)$$

Reemplazando 5.33 en 5.40 llegamos a:

$$\mathbf{K} = \frac{EA}{L_e} \begin{pmatrix} l^2 & lm & -l^2 & -lm \\ lm & m^2 & -lm & -m^2 \\ -l^2 & -lm & l^2 & lm \\ -lm & -m^2 & lm & m^2 \end{pmatrix} \quad (5.41)$$

5.4.2. Tensiones en el elemento de barra

$$\sigma = E \frac{u'_2 - u'_1}{L_e} = \frac{E}{L_e} (-1 \ 1) \begin{pmatrix} u'_1 \\ u'_2 \end{pmatrix} = \frac{E}{L_e} (-1 \ 1) \mathbf{u}' \quad (5.42)$$

y escribiéndolo en términos de las incógnitas globales sería

$$\sigma = \frac{E}{L_e} \begin{pmatrix} -l & -m & l & m \end{pmatrix} \mathbf{u} \quad (5.43)$$

5.4.3. Ejemplo de un reticulado simple en 2D

La estructura a resolver se muestra en la siguiente figura:

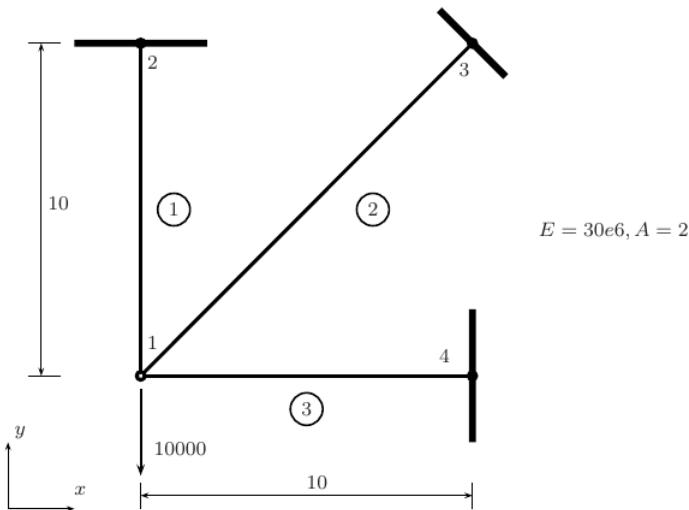


Figura 5.12: Ejemplo simple de reticulado. Definicion física

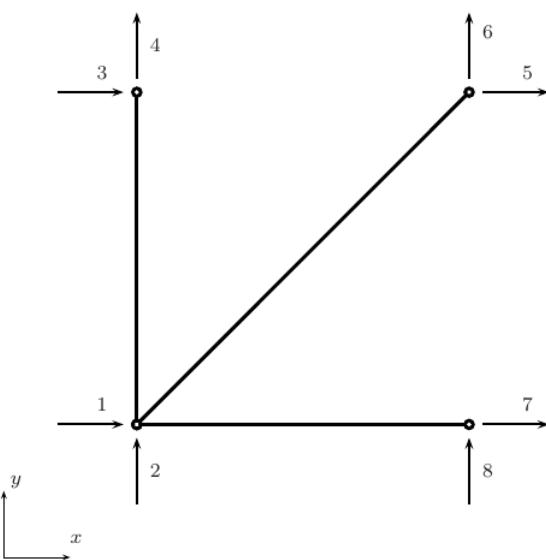


Figura 5.13: Ejemplo simple de reticulado. Mallado

Ver rutina Chapter_4/Problem_4.m donde consta la resolución de este problema.

5.4.4. Segundo ejemplo de reticulado

Ver rutina Chapter_4/Problem_5.m donde consta la resolución de este problema y se puede ver la forma que adopta la estructura deformada, deformación exagerada en mas de 40 veces para poder

$$E = 70 \text{ GPa}, A = 3e^{-4} \text{ m}^2$$

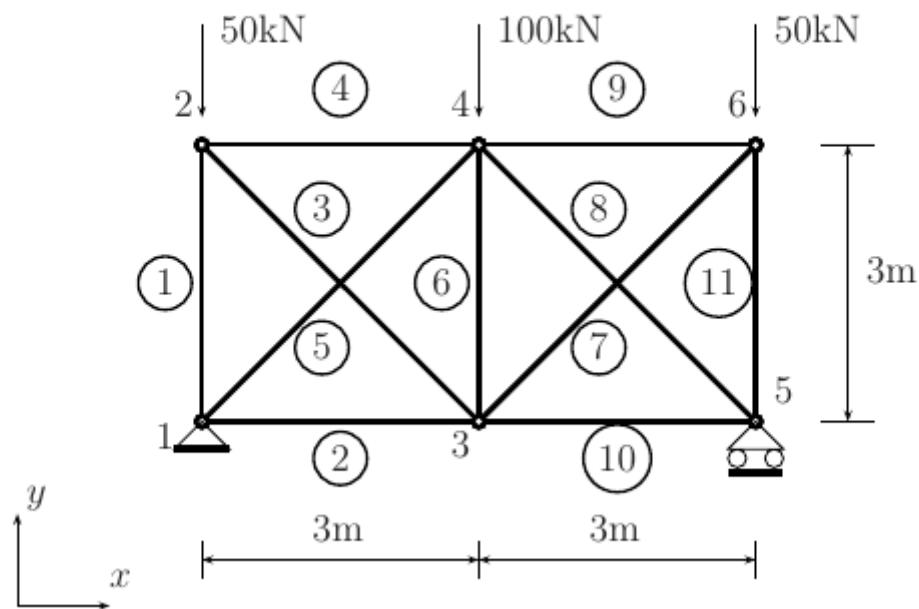


Figura 5.14: Ejemplo de reticulado.

apreciar algo.

5.4.5. Tercer ejemplo de reticulado incluyendo un resorte

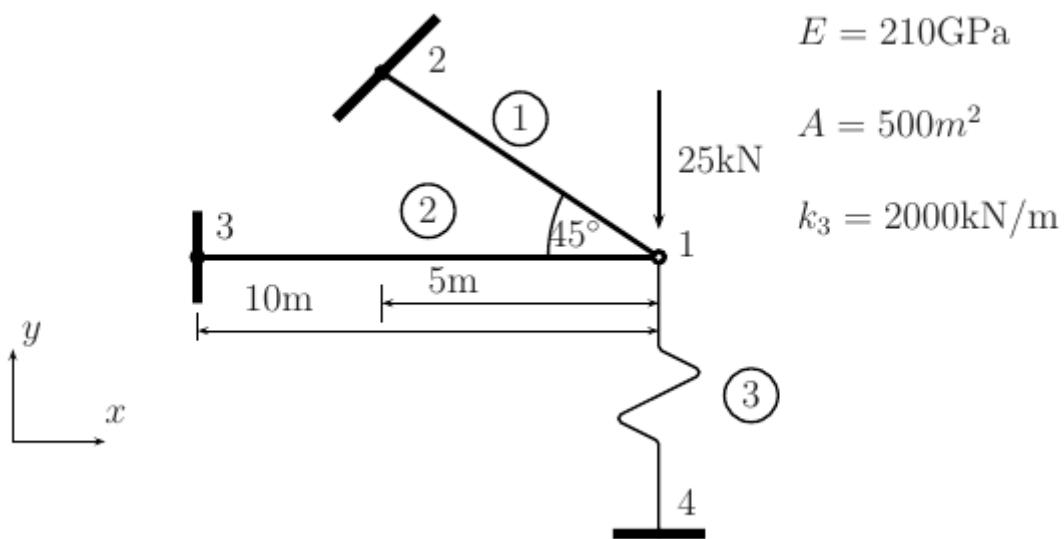


Figura 5.15: Ejemplo de reticulado combinado con un resorte

Ver rutina Chapter_4/Problem_6.m donde consta la resolución de este problema.

Para mayor detalle ver bibliografía

MATLAB Codes for Finite Element Analysis. Solids and Structures, by A.J.M. Ferreira, from Universidade do Porto, Portugal Editorial Springer.

5.4.6. Reticulados en 3D

La extensión a 3D del caso de reticulado plano es bastante directa. Simplemente hay que tener en cuenta la proyección del eje de la barra, ahora en el espacio 3D, con sus 3 ejes cartesianos a través de sus 3 cosenos directores. Por lo tanto la matriz de rigidez ahora quedaría expresada como:

$$K = \frac{E A}{L} \begin{pmatrix} C_x^2 & C_x C_y & C_x C_z & -C_x^2 & -C_x C_y & -C_x C_z \\ C_y C_x & C_y^2 & C_y C_z & -C_x C_y & -C_y^2 & -C_y C_z \\ C_z C_x & C_z C_y & C_z^2 & -C_x C_z & -C_y C_z & -C_z^2 \\ -C_x^2 & -C_x C_y & -C_x C_z & C_x^2 & C_x C_y & C_x C_z \\ -C_y C_x & -C_y C_z & -C_z C_x & C_y^2 & C_y C_z & C_z^2 \\ -C_z C_x & -C_z C_y & -C_z C_y & C_z^2 & C_z^2 & C_z^2 \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

symmetry

con los cosenos directores como

$$C_x \frac{x_2 - x_1}{L}; \quad C_y \frac{y_2 - y_1}{L}; \quad C_z \frac{z_2 - z_1}{L}$$

El resto del procedimiento es el mismo que en 2D, se ensambla la contribución elemental de cada barra en la matriz de rigidez global así como el vector de fuerzas elementales y luego de aplicar las condiciones de contorno se resuelve el sistema.

5.4.6.1. Problema de un reticulado en 3D

El siguiente ejemplo de la figura 5.16 se resuelve en la rutina Chapter_5/Problem_7.m

Observando el código lo mas distintivo es que las coordenadas de los nodos ahora tienen 3 componentes y no 2 como en el caso plano, mientras que la matriz de conectividades sigue siendo de $N \times 2$ con N el número de barras del problema, en este caso 3. Las propiedades mecánicas al ser por barra no cambia respecto al caso 2D, es decir, hay N áreas, módulos de Young y longitudes. Lo que si cambia es la matriz de rigidez elemental y el vector de fuerzas elementales como vimos más arriba. La matriz es de 6×6 y el vector de 6×1 dado que hay 2 nodos por barra y cada nodo tiene 3 grados de libertad, sus desplazamientos en cada una de las 3 direcciones. Vea la rutina para entender todo el proceso de cálculo.

5.4.6.2. Segundo ejemplo de un reticulado en 3D

Este ejemplo se plantea y en función de las rutinas empleadas en el ejercicio anterior se las debería modificar para poder resolver este ejemplo.

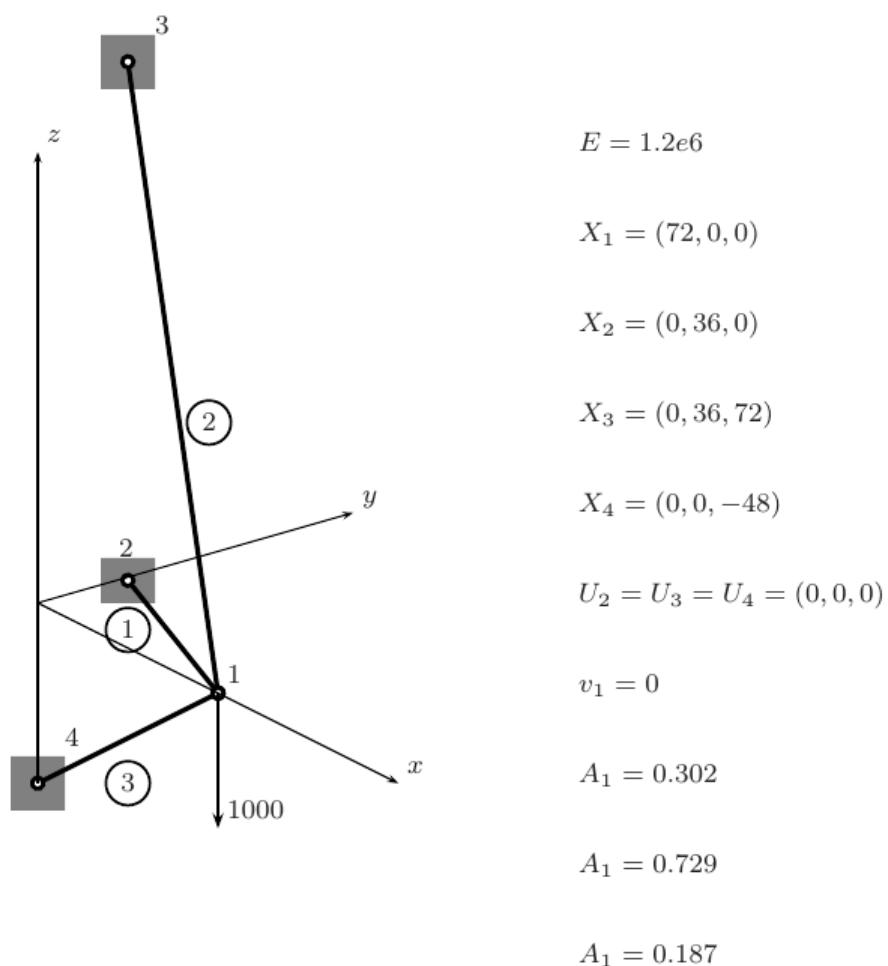


Figura 5.16: Ejemplo de reticulado 3D

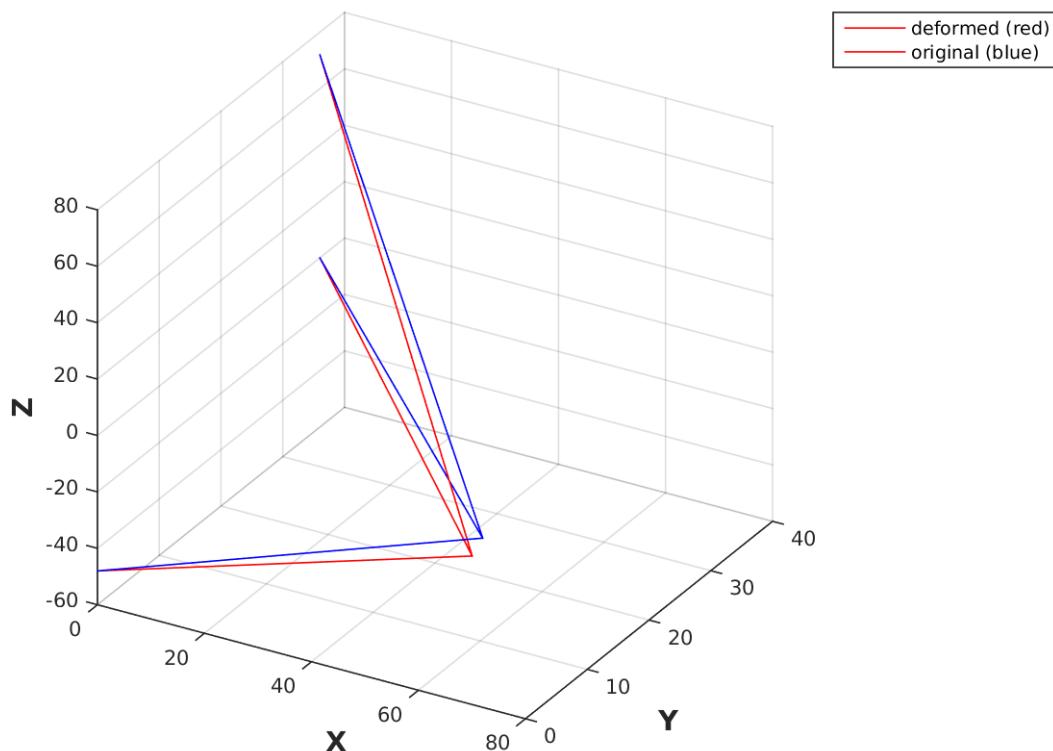


Figura 5.17: Ejemplo de reticulado 3D. Estructura original y deformada

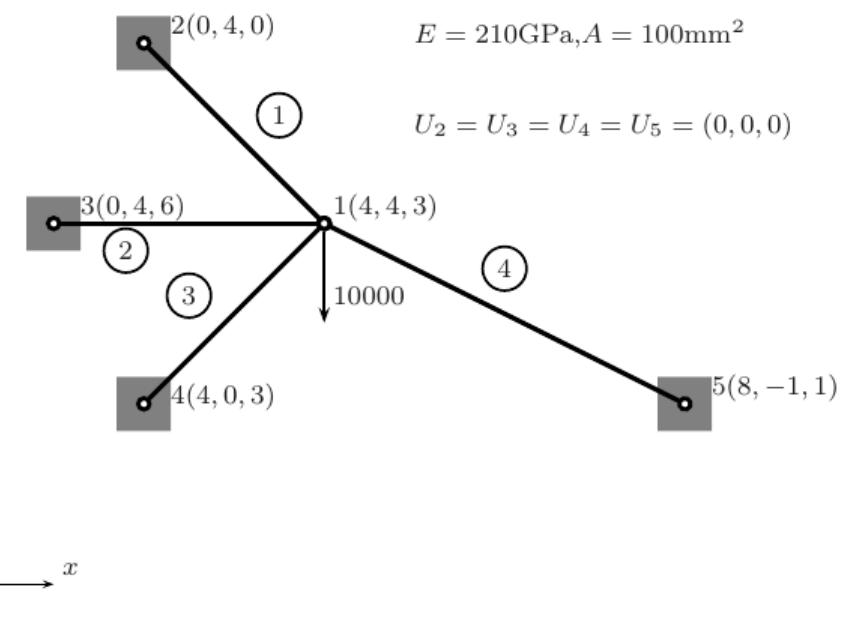


Figura 5.18: Segundo ejemplo de reticulado 3D

Capítulo 6

Vigas

6.1. Vigas Bernoulli

Vamos a considerar ahora el caso de vigas. A diferencia de las barras las vigas pueden soportar esfuerzas de flexión además de la compresión y/o tracción. Para comenzar consideraremos vigas que se hallan en el plano xy , de área trasversal constante A . La teoría Euler-Bernoulli asume que las secciones planas del estado inicial no deformado permanecen planas después de la aplicación de las cargas y su correspondiente deformación. La siguiente figura muestra una viga y sus respectivos grados de libertad, donde podemos apreciar que lo que se busca es el desplazamiento en la dirección normal al eje de la viga en cada punto de la misma, denominado aquí como $w(x)$. Es decir que para una dada viga, de cierta altura h y ancho b tal que su área sea $A = b \times h$, cada punto a una altura y respecto a su centro denominado *eje neutro* se desplaza según

$$u = -y \frac{dw}{dx} \quad (6.1)$$

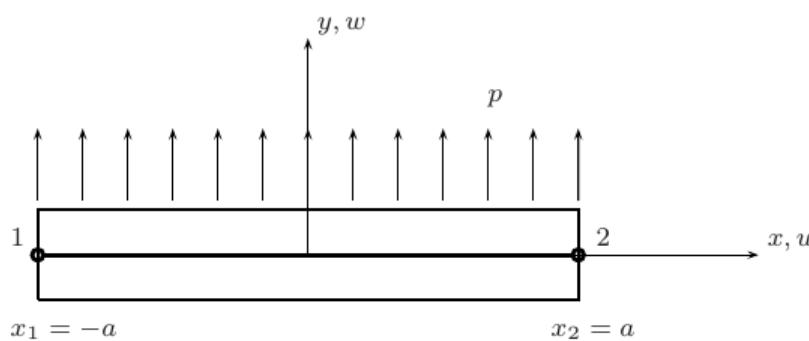


Figura 6.1: Viga Euler-Bernoulli en 2D

Usando los mismos conceptos de la teoría de barras de definir la deformación, la tensión y la energía de deformación que nos provee la mecánica del continuo llegamos a:

$$\epsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} = -y \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \quad \gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} = 0 \quad (6.2)$$

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a \sigma_x \epsilon_x A dx \quad (6.3)$$

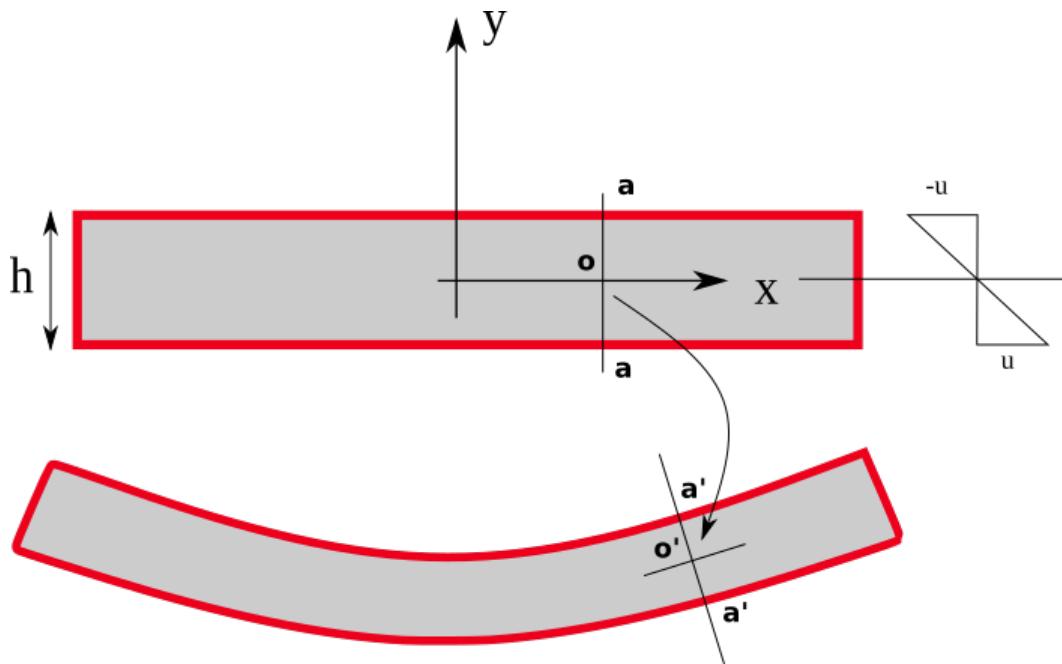


Figura 6.2: Viga. Teoría básica

asumiendo un comportamiento lineal elástico

$$\sigma_x = E \epsilon_x \quad (6.4)$$

entonces

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E A \epsilon_x^2 dx = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E A \left(-y \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right)^2 dx = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E \underbrace{(y^2 A)}_{I_z} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right)^2 dx \quad (6.5)$$

siendo I_z el momento de inercia de la sección trasversal de la viga.

Del mismo modo que en barras, las fuerzas exteriores, ahora actuando en la normal al eje de la viga $p(x)$ y desplazando la misma en la misma dirección $w(x)$, produce un trabajo virtual como

$$\delta W = \int_{-a}^a p \delta w dx \quad (6.6)$$

Siendo la energía función de la derivada segunda de los desplazamiento y no como en barra que era función de la derivada primera de los mismos, si pensamos en llevar el sistema a uno de primer orden tendremos que duplicar la cantidad de incógnitas por nodo, entonces nos queda que el vector de grados de libertad local en una viga son 4 en lugar de 2 como había en barras, a saber:

$$\mathbf{w}^{eT} = \left(w_1 \frac{dw_1}{dx} w_2 \frac{dw_2}{dx} \right) \quad (6.7)$$

con lo cual los desplazamientos trasversales se interpolan con funciones de forma de Hermite como:

$$\mathbf{w} = \mathbf{N}(\xi) \mathbf{w}^e \quad (6.8)$$

siendo las funciones de forma

$$\begin{aligned}
 N_1(\xi) &= (1/4)(2 + \xi)(1 - \xi)^2 \\
 N_2(\xi) &= (he/8)(1 + \xi)(1 - \xi)^2 \\
 N_3(\xi) &= (1/4)(2 - \xi)(1 + \xi)^2 \\
 N_4(\xi) &= (he/8)(\xi - 1)(1 + \xi)^2
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

con $he = 2a$

ATENCION: En el libro de Ferreira las funciones de forma de Hermite estan erradas.

Con todo lo anterior la energía de deformación se puede escribir como:

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a EI_z \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \right)^2 dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{EI_z}{a^4} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \xi^2} \right)^2 a d\xi = \frac{1}{2} \mathbf{w}^{eT} \frac{EI_z}{a^3} \int_{-1}^1 \mathbf{N}''^T \mathbf{N}'' d\xi \mathbf{w}^e \tag{6.10}$$

con

$$\mathbf{N}'' = \frac{d^2 N}{d\xi^2}$$

Este aumento del requerimiento de continuidad justifica el uso de funciones de Hermite.

La matriz de rigidez elemental local queda entonces conformada por:

$$\mathbf{K} = \frac{EI_z}{a^3} \int_{-1}^1 \mathbf{N}''^T \mathbf{N}'' d\xi = \frac{EI_z}{2a^3} \begin{pmatrix} 3 & 3a & -3 & 3a \\ 3a & 4a^2 & -3a & 2a^2 \\ -3 & -3a & 3 & -3a \\ 3a & 2a^2 & -3a & 4a^2 \end{pmatrix} \tag{6.11}$$

y el vector de cargas elementales locales se puede escribir como

$$\mathbf{f}^e = ap \int_{-1}^1 \mathbf{N}^T d\xi = \frac{ap}{3} \begin{pmatrix} 3 \\ a \\ 3 \\ -a \end{pmatrix} \tag{6.12}$$

6.1.1. Problemas viga Euler-Bernoulli

A continuación presentamos 2 problemas típicos de la teoría de vigas del tipo Euler-Bernoulli que son el caso de vigas simplemente apoyadas y vigas doblemente empotradas.

El primero es el caso simplemente apoyado y se muestra en la figura 6.3

El segundo es el caso doblemente empotrada 6.4

En ambos casos la carga está uniformemente repartida en la longitud y se cuenta con la solución exacta de la deformación máxima que por la simetría de las cargas y las condiciones de contorno en este caso la carga máxima se da en el centro de la luz de la viga.

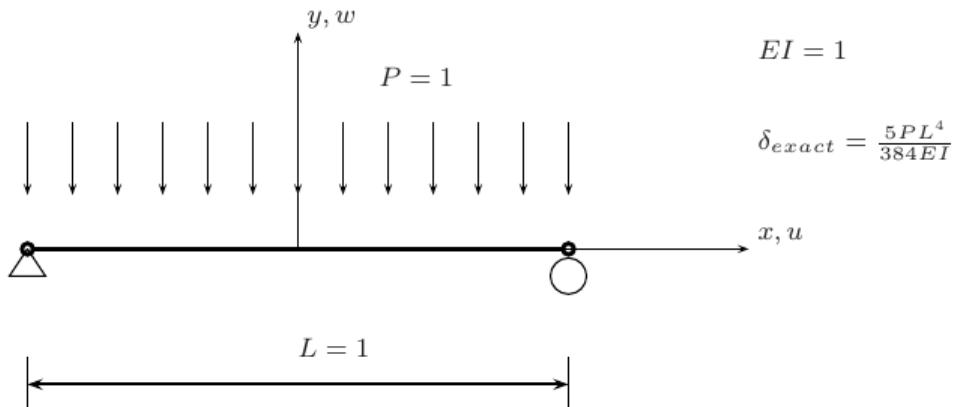


Figura 6.3: Viga Euler-Bernoulli. Ejemplo # 1. Simplemente apoyada

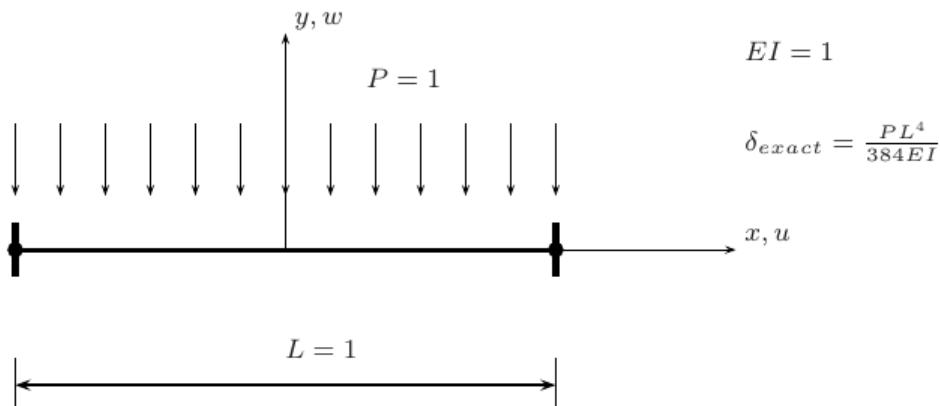


Figura 6.4: Viga Euler-Bernoulli. Ejemplo # 1. Dblemente empotrada

En el Chapter_6/Problem_9.m resolvemos estos problemas donde uno como usuario puede elegir el tipo de condiciones de contorno a emplear para resolver ambos problemas.

Lo más significativo de la rutina que resuelve el problema anterior es la función que calcula la matriz de rigidez y el vector de fuerzas elementales. A continuación mostramos un detalle de esta función.

```

k1=EI/(LElem)^3*[12   6*LElem -12 6*LElem;
 6*LElem 4*LElem^2 -6*LElem 2*LElem^2;
 -12 -6*LElem 12 -6*LElem ;
 6*LElem 2*LElem^2 -6*LElem 4*LElem^2];

f1=[P*LElem/2 P*LElem*LElem/12 P*LElem/2 ...
 -P*LElem*LElem/12];

```

Figura 6.5: Viga Euler-Bernoulli. Cálculo de la matriz de rigidez y del vector de fuerzas elementales

Esta matriz de rigidez coincide con la presentada en 6.11 considerando que $a = LElem/2$.

El resto reside en tener precaución a la hora de ensamblar los grados de libertad locales en los glo-

bales, asignar las cargas concentradas e imponer las condiciones de contorno para poder finalmente resolver el problema.

6.1.2. Problemas viga Euler-Bernoulli con resorte

A continuación le agregamos un apoyo elástico a la viga como el que se muestra en la figura.

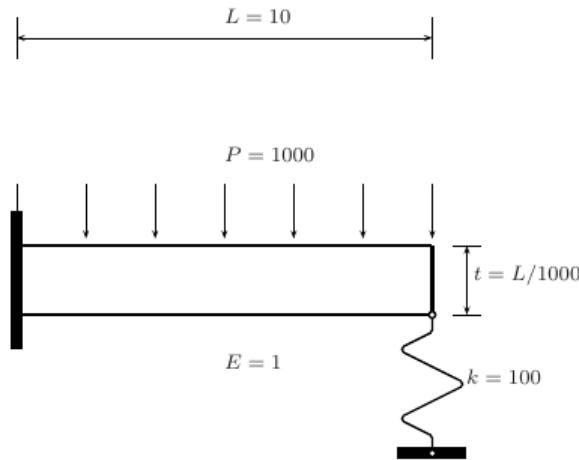


Figura 6.6: Viga Euler-Bernoulli. Ejemplo con resorte.

Este ejemplo es muy similar al anterior solo que en el anterior el extremo derecho de la viga estaba empotrado, con sus grados de libertad fijados, mientras que aquí el extremo izquierdo esta libre pero vinculada verticalmente a un resorte con lo cual se crea un elemento 1D tipo barra(resorte). Si la viga la dividimos en 3 elementos y 4 nodos entonces hay 8 grados de libertad para la viga (desplazamientos verticales y rotaciones) y 1 grado de libertad adicional para el nodo del resorte que se halla restringido a tierra.

Entonces

$$K = K^{\text{beam}} + K^{\text{spring}} = K^{\text{beam}} + \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{6 \times 6} & \mathbf{0}_{6 \times 3} \\ \mathbf{0}_{3 \times 6} & \begin{pmatrix} k & 0 & -k \\ 0 & 0 & 0 \\ -k & 0 & k \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (6.13)$$

6.2. 2D Frames

En la siguiente figura vemos como manejamos las variables para una viga no alineada con los ejes cartesianos y que cuando se las componen forman lo que se llama un pórtico o armadura (frame). Empezaremos por el caso 2D y luego lo extendemos a 3D.

En la figura vemos una viga orientada en 2D con 3 grados de libertad en cada uno de sus dos nodos extremos. Estos seis grados de libertad los representamos tanto en la terna local como en la global como:

$$\mathbf{u}^T = (u_1, u_2, u_3, u_4, u_5, u_6) \quad (6.14)$$

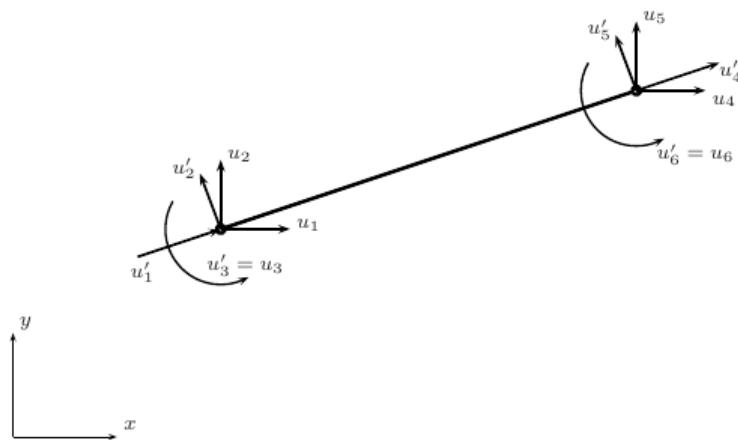


Figura 6.7: Frames en 2D

$$\mathbf{u}'^T = (u'_1, \ u'_2, \ u'_3, \ u'_4, \ u'_5, \ u'_6) \quad (6.15)$$

Siendo que la rotación es en el eje Z, normal al plano XY esta transforma en forma idéntica, $u_3 = u'_3$ y $u_6 = u'_6$, el resto como es habitual, entonces

$$\mathbf{u}' = \mathbf{L} \ \mathbf{u} = \quad (6.16)$$

con \mathbf{L}

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l & m & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -m & l & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l & m & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -m & l & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.17)$$

Observando la figura vemos que el primer grado de libertad local u'_1 corresponde al esfuerzo axial (tracción o compresión) de la viga como barra mientras que los restantes dos grados de libertad (u'_2, u'_3) corresponden a la viga, desplazamiento normal al eje de la viga y rotación. Con esto tenido en cuenta la matriz de rigidez elemental en terna local se escribe como:

$$\mathbf{K}'^e = \begin{pmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 \\ 12\frac{EI}{L^3} & 6\frac{EI}{L^2} & 0 & 12\frac{EI}{L^3} & 6\frac{EI}{L^2} & 0 \\ 4\frac{EI}{L} & 0 & -6\frac{EI}{L^2} & 2\frac{EI}{L} & 0 & 0 \\ \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 12\frac{EI}{L^3} & -6\frac{EI}{L^2} & 4\frac{EI}{L} \\ \text{symm} & & & & & \end{pmatrix} \quad (6.18)$$

Para transformar esta matriz elemental local a la matriz de rigidez global usamos la matriz de transformación \mathbf{L} , como:

$$\mathbf{K} = \mathcal{A}_e^G [\mathbf{L}^T \mathbf{K}'^e \mathbf{L}] \quad (6.19)$$

donde hemos indicado el operador \mathcal{A}_e^G como una forma de efectuar el montaje de la contribución elemental local en la matriz global una vez efectuada la transformación de coordenadas.

6.2.1. Un ejemplo de una armadura (frame) 2D

En la figura siguiente mostramos un ejemplo a los fines de poder entender como se procede a la resolución de una estructura de este tipo.

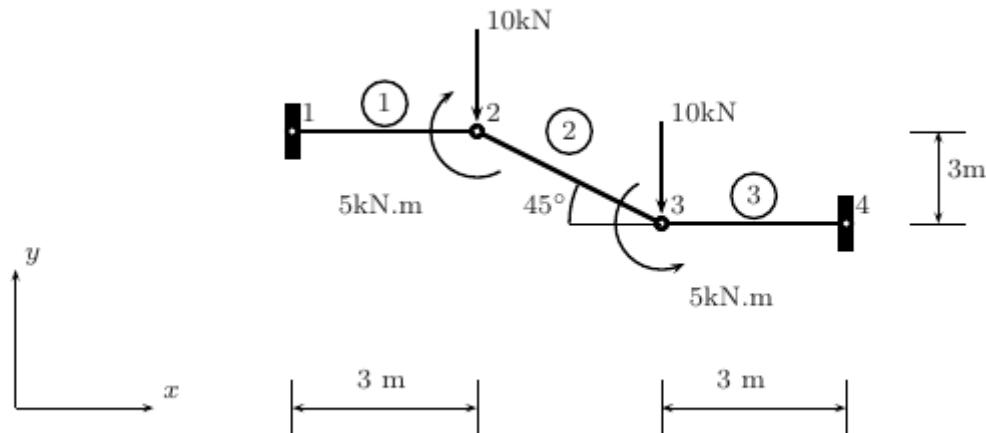


Fig. 7.2 A 2D frame example, problem10.m

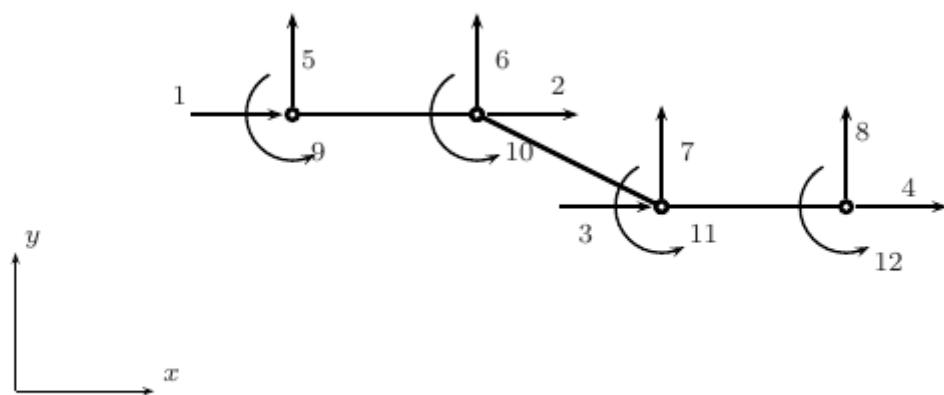


Fig. 7.3 Degrees of freedom for problem 10

Figura 6.8: Frames en 2D. Primer ejemplo

Del análisis de la figura surgen las dimensiones de cada barra, la 1 y la 3 tienen 3 metros de largo mientras que la 2 tiene $\sqrt{(3)^2 + (3)^2} = \sqrt{18}$ algo mas de 4 metros. En la figura superior se ve también el estado de carga al que se halla sometida la estructura, 2 cargas concentradas verticales de 10 kN cada una en los nodos de la malla marcados como 2 y 3 y dos momentos concentrados en los mismos

nodos 2 y 3 de 5 kN.m. Finalmente los 2 nodos extremos, el 1 y el 4 se hallan empotrados. La figura inferior muestra los grados de libertad de la estructura, importante para poder armar el sistema global. Como vemos los desplazamientos horizontales en cada nodo extremo de las barra se numeran del 1 al 4, los desplazamientos verticales del 5 al 8 y los giros de los 4 nodos del 9 al 12. Como chequeo habiendo 4 nodos y 3 grados de libertad por nodo la cantidad total de grados de libertad termina siendo 12. Las fuerzas generalizadas (fuerzas y momentos) que se aplican sobre los nodos son entonces

$$\begin{pmatrix} \mathbf{f}_x \\ \mathbf{f}_y \\ \mathbf{M}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -10000 & -10000 & 0 \\ 0 & -5000 & 5000 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.20)$$

$$\mathbf{f} = (\mathbf{f}_x \quad \mathbf{f}_y \quad \mathbf{M}_z) \quad (6.21)$$

Para los desplazamientos las fuerzas generalizadas son fuerzas mientras que para los giros son momentos. El producto de ambos, fuerzas y desplazamientos generalizados siempre da unidades de trabajo o energía.

Los grados de libertad prescriptos para este caso son

$$(1 \quad 5 \quad 9 \quad 4 \quad 8 \quad 12) \quad (6.22)$$

Si observamos la rutina *formStiffness2Dframe* vemos que se calcula la matriz L como

```
L= [cosa*eye(2) sena*eye(2) zeros(2);
     -sena*eye(2) cosa*eye(2) zeros(2);
     zeros(2,4) eye(2)];

oneu=[1 -1;-1 1];
oneu2=[1 -1;1 -1];
oneu3=[1 1;-1 -1];
oneu4=[4 2;2 4];

k1=[EA/l1*oneu zeros(2,4);
     zeros(2) 12*EI/l1^3*oneu 6*EI/l1^2*oneu3;
     zeros(2) 6*EI/l1^2*oneu2 EI/l1*oneu4];

stiffness(elementDof,elementDof)=...
    stiffness(elementDof,elementDof)+L'*k1*L;
end
```

Figura 6.9: Frames en 2D. Rutina que calcula la matriz de rigidez elemental

donde los grados de libertad elementales son

$$u'_1 u'_4 u'_2 u'_3 u'_5 u'_6$$

los dos desplazamientos axiales primero, luego los dos trasversales y finalmente los dos giros.

Por ese motivo la matriz \mathbf{L} tiene un bloque de 4×4 para rotar los desplazamientos lineales y el bloque final de 2×2 es la identidad ya que la rotación en 2D queda idéntica. Lo mismo con la matriz \mathbf{K} , el primer bloque de 2×2 es para el comportamiento como barra, es decir su desplazamiento axial, y el restante de 4×4 para el comportamiento como viga, es decir, desplazamiento trasversal y giro.

Si procedemos al montaje de las matrices de rigidez y los vectores de carga elementales llegamos a obtener la solución del problema. En la siguiente figura vemos como se deforma la estructura al someterla al citado estado de carga.

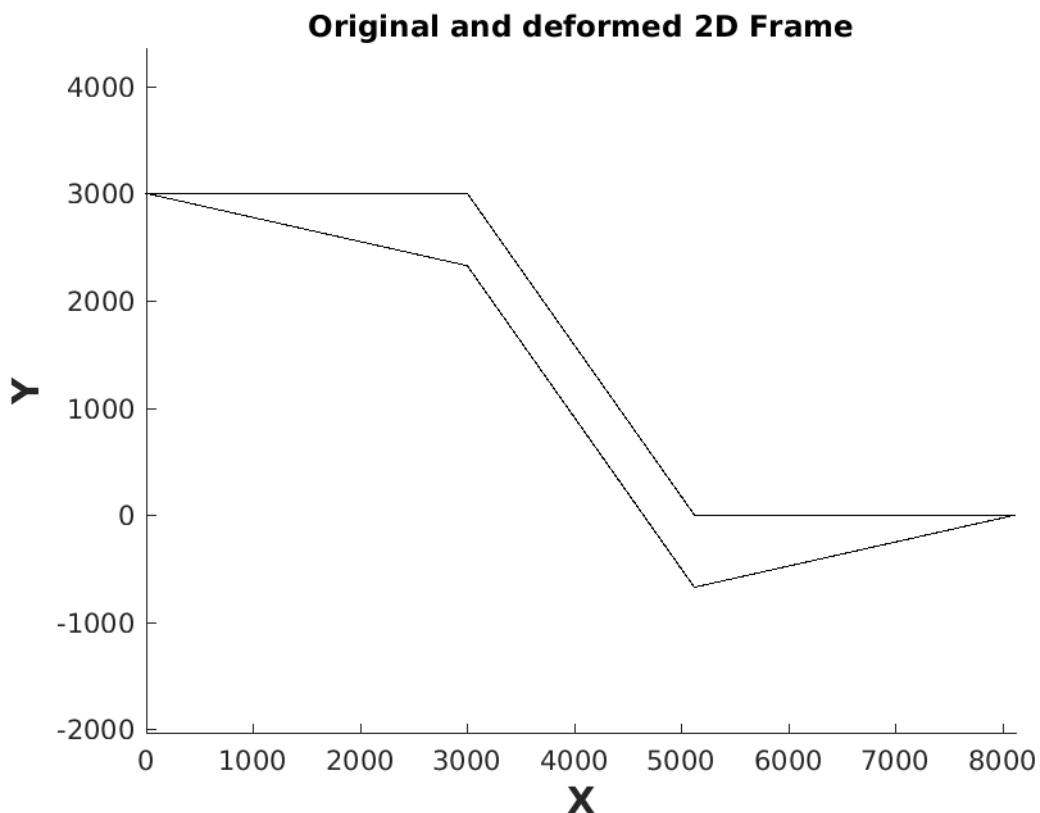


Figura 6.10: Frames en 2D. Estructura antes y después de aplicar las cargas

Los 2 nodos libres, el 2 y el 3 se desplazan hacia abajo y las vigas rotan entre si, en un caso aumentando el ángulo entre ellas y en el otro reduciéndolo.

Las reacciones en los nodos extremos también surgen del cálculo, las primeras dos son reacciones axiales, las siguientes dos son transversales y las últimas dos son los momentos en ambos extremos.

Las fuerzas y las reacciones deberían dar un sistema en equilibrio. Verifíquelo !!!

6.2.2. Otro ejemplo de armaduras en 2D

En la siguiente figura vemos definido el próximo ejemplo

resuelto en la rutina *Problem11.m*. La forma de ordenar los grados de libertad, arbitraria de por si, sigue la misma lógica que el ejemplo anterior. Nuevamente son 4 los nodos, dispuestos de otra forma, y los primeros 4 grados de libertad son desplazamientos en X, los siguientes 4 son desplazamientos en Y y los últimos 4 son las rotaciones. El resto es similar así que no vale la pena volver a explicarlo.

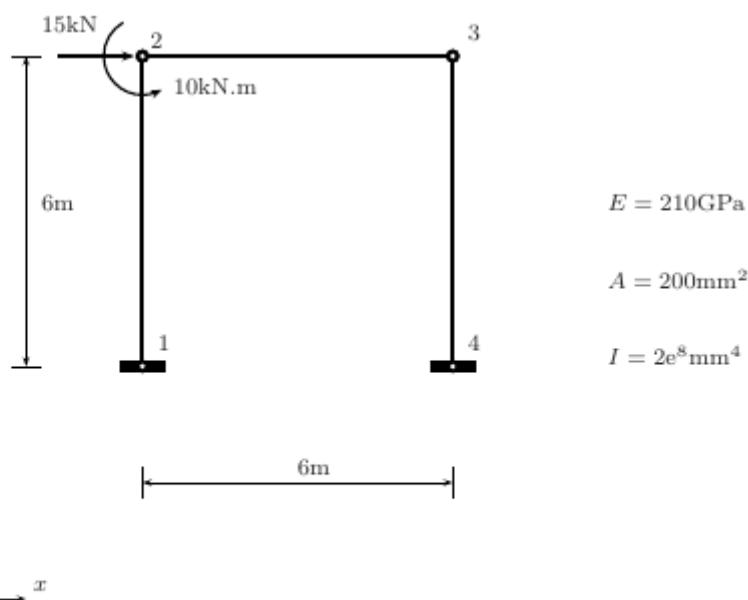


Fig. 7.5 A 2D frame example: geometry, materials and loads, problem11.m

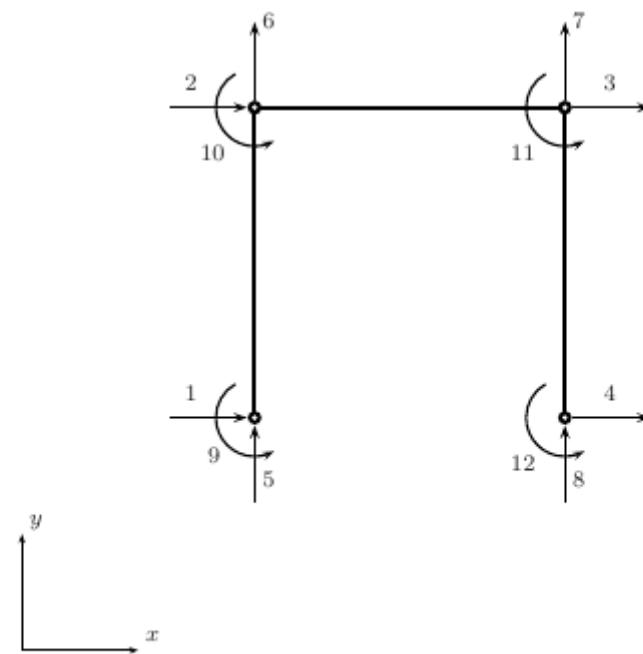


Fig. 7.6 A 2D frame example: degree of freedom ordering

Figura 6.11: Frames en 2D. Segundo ejemplo

Lea la rutina *Problem11.m* y ejecútela para ver lo que produce.

6.3. 3D Frames

La diferencia significativa con el caso 2D radica en que las rotaciones ahora no transforman en forma idéntica. El resto sigue los mismos conceptos ya vertidos para el caso 2D.

Nos concentraremos entonces en esto. Para comenzar la matriz elemental de rigidez en terna local a la viga se escribe como una extensión directa de la vista en 2D, teniendo en cuenta que ahora hay 6 grados de libertad por nodo, lo cual da una matriz de 12×12 .

$$\mathbf{K}'^e = \begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} & 0 & -\frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_z}{L^2} \\ \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & -\frac{6EI_y}{L^2} & 0 & 0 & 0 & -\frac{12EI_y}{L^3} & 0 & -\frac{6EI_y}{L^2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{GJ}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{GJ}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4EI_y}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & \frac{2EI_y}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4EI_z}{L} & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2EI_z}{L} & 0 & 0 \\ \frac{EA}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{12EI_z}{L^3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{6EI_z}{L^2} & 0 & 0 \\ \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 & 0 & 0 & \frac{12EI_y}{L^3} & 0 & 0 & 0 & \frac{6EI_y}{L^2} & 0 \\ \frac{GJ}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4EI_y}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{4EI_z}{L} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{sym.}$$

Figura 6.12: Frames en 3D. Matriz de rigidez local

donde la primera fila representa la rigidez axial en el eje de la viga, las segunda y tercera las rigideces trasversales en las 2 direcciones perpendiculares a la axial y mutualmente perpendiculares entre sí. La cuarta fila representa la rigidez a girar en el eje de la viga, es decir, la torsión, mientras que la quinta y sexta representan las rotaciones alrededor de los ejes trasversales que dan flexión. Lo mismo se repite para el otro nodo y la matriz es simétrica por eso es que luce solo triangular superior.

En cuanto a la matriz de rotación que transforma la matriz de rigidez en ejes locales en otro en ejes globales.

$$\mathbf{K} = \mathbf{R}^T \mathbf{K}' \mathbf{R} \quad (6.23)$$

donde la matriz de rotación queda definida por

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r & 0 & 0 & 0 \\ 0 & r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

con

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} C_{Xx} & C_{Yx} & C_{Zx} \\ C_{Xy} & C_{Yy} & C_{Zy} \\ C_{Xz} & C_{Yz} & C_{Zz} \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

con

$$C_{Xx} = \cos(\theta_{Xx})$$

donde θ_{Xx}, θ_{Yx} y θ_{Zx} son los ángulos medidos desde el eje local x a los ejes globales X, Y y Z .

Obtenida la solución en desplazamientos nodales \mathbf{U} , las reacciones se calculan como

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}\mathbf{U}$$

mientras que las fuerzas elementales se calculan como

$$\mathbf{f}_e = \mathbf{k}_e \mathbf{R} \mathbf{U}^e$$

6.3.1. Primer ejemplo de una armadura o portico en 3D

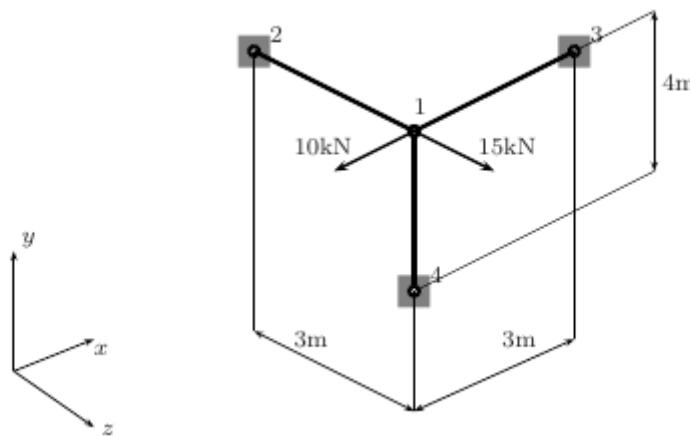


Figura 6.13: Frames en 3D. Problem12.m

La rutina *Problem12.m* resuelve este problema.

6.3.2. Segundo ejemplo de una armadura o portico en 3D

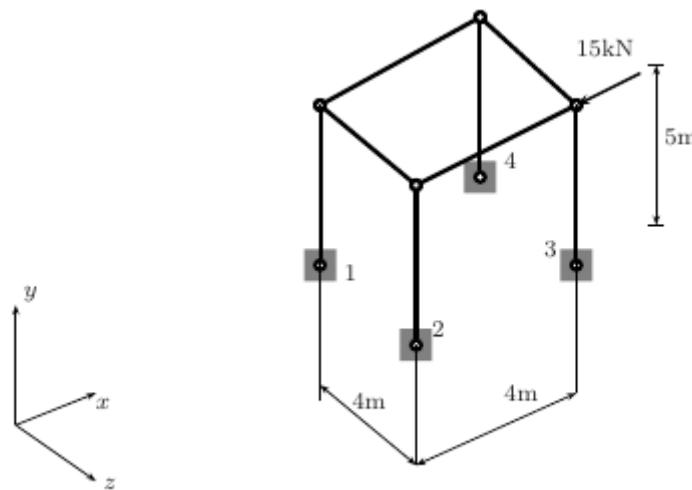


Figura 6.14: Frames en 3D. Problem13.m

La rutina *Problem13.m* resuelve este problema.

6.4. Timoshenko Beams

A diferencia de las vigas que siguen la teoría de Euler-Bernoulli las de Timoshenko tienen en cuenta las deformaciones transversales por corte. De esta forma se pueden modelizar tanto vigas delgadas como gruesas. A continuación analizaremos los casos de flexión estática, vibraciones libres y pandoe.

6.4.1. Formulación del análisis estático

La principal hipótesis de las vigas de Timoshenko es que si bien comparten con las de Euler-Bernoulli que las secciones transversales permanecen planas durante la deformación, ya no son normales al eje medio o eje neutro de la viga. Por lo tanto el campo de desplazamiento se puede escribir como:

$$u = y \theta_z \quad ; \quad w = w_0 \quad (6.26)$$

donde $\theta_z(x)$ es la rotación del plano de la sección transversal alrededor de una normal al eje medio x y w_0 es el desplazamiento transversal del eje medio de la viga.

Las deformaciones se escriben como

$$\epsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} = y \frac{\partial \theta_z}{\partial x} \quad (6.27)$$

$$\gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial x} = \theta_z + \frac{\partial w}{\partial x} \quad (6.28)$$

La energía de deformación considera ambos la flexión y el corte,

$$U = \frac{1}{2} \int_V \sigma_x \epsilon_x dV + \frac{1}{2} \int_V \tau_{xy} \gamma_{xy} dV \quad (6.29)$$

donde la relación entre tensión y deformación por flexión y corte se establece como

$$\sigma_x = E \epsilon_x \quad (6.30)$$

$$\tau_{xy} = k G \gamma_{xy} \quad (6.31)$$

siendo el módulo de corte

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

y k el factor de corrección por corte. Este factor depende de la sección transversal y del problema. Un valor de $k = 5/6$ es frecuentemente usado en problemas estacionarios.

Integrando teniendo en cuenta que $dV = A dx$ llegamos a

$$U = \frac{1}{2} \int_{-a}^a E I_z \left(\frac{\partial \theta_z}{\partial x} \right)^2 dx + \frac{1}{2} \int_{-a}^a k A G \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \theta_z \right)^2 dx \quad (6.32)$$

Cada nodo de este elemento de 2 nodos considera el desplazamiento transversal w y una única rotación θ_z como se ilustra en la siguiente figura.

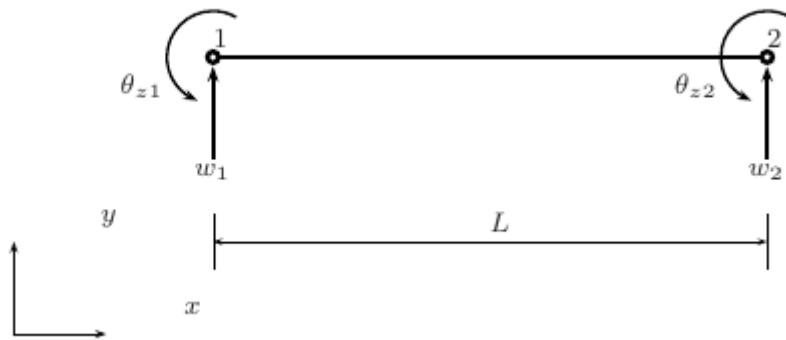


Figura 6.15: Timoshenko. Grados de libertad del elemento de 2 nodos

A diferencia de la viga de Euler-Bernoulli aquí los desplazamientos transversales y la rotación son interpolados en forma independiente,

$$\mathbf{w} = \mathbf{N} \mathbf{w}^e \quad (6.33)$$

$$\theta_z = \mathbf{N} \theta_z^e \quad (6.34)$$

$$(6.35)$$

con funciones de forma del tipo

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(1-\xi) & \frac{1}{2}(1+\xi) \end{bmatrix}$$

lo cual en coordenadas naturales se traduce en una matriz local elemental del tipo

$$\mathbf{K}^e = \int_{-1}^1 \frac{EI_z}{a^2} \left(\frac{\partial N}{\partial \xi} \right)^T \left(\frac{\partial N}{\partial \xi} \right) a d\xi + \int_{-1}^1 kGA \left(\frac{1}{a} \frac{\partial N}{\partial \xi} + N \right)^T \left(\frac{1}{a} \frac{\partial N}{\partial \xi} + N \right) a d\xi \quad (6.36)$$

Las integrales pueden ser computadas por cuadratura de Gauss en cuyo caso la rigidez a la flexión se computa con 2×2 puntos de Gauss mientras que la rigidez al corte con 1 solo punto de Gauss. De esta forma selectiva se puede evitar el bloqueo por corte, típico de estos casos.

A continuación se resuelve un caso de flexión de vigas con la hipótesis de Timoshenko en el problema *problem16.m*. El código llama a la rutina *formStiffnessMassTimoshenkoBeam.m* la cual calcula la componente de rigidez y eventualmente si se lo requiere la matriz de masa de este tipo de viga así como el miembro derecho a nivel elemental.

En la siguiente figura vemos el caso definido donde una carga distribuida uniforme se aplica a todo el largo de la viga.

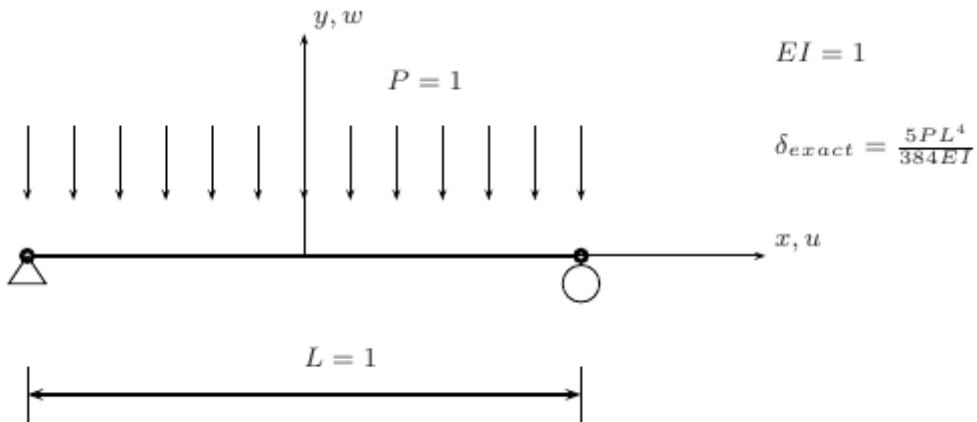


Figura 6.16: Simply-supported Timoshenko problem, under uniform load, problem16.m

La rutina esta preparada tanto para viga simplemente apoyada como empotrada en ambos extremos. De todas formas se puede introducir nuevas fijaciones de ser necesario. Para el caso de simplemente apoyado como muestra la figura la solución exacta tiene una flecha máxima de

$$w_{max} = \frac{5PL^4}{384EI}$$

Podemos analizar el error en el desplazamiento máximo para comprobar que este no supera el 0,1%. El modelo sirve tanto para vigas delgadas como para vigas gruesas. Para comparar con la solución exacta a continuación mostramos la solución exacta de este modelo que es:

$$w(x) = \frac{PL^4}{24D} \left(\frac{x}{L} - \frac{2x^3}{L^3} + \frac{x^4}{L^4} \right) + \frac{PL^2}{2S} \left(\frac{x}{L} - \frac{x^2}{L^2} \right)$$

donde $S = kGA$ es la rigidez de corte y $D = EI$ la rigidez a la flexión.

La solución analítica del caso cantilever es :

$$w(x) = \frac{PL^4}{24D} \left(6 \frac{x}{L} - 4 \frac{x^3}{L^3} + \frac{x^4}{L^4} \right) + \frac{PL^2}{2S} \left(2 \frac{x}{L} - \frac{x^2}{L^2} \right)$$

Discretizando la viga de longitud L en 100 partes ante varios espesores de viga h llegamos a diferentes resultados como lo muestra la tabla a continuación.

Table 10.1 Comparation of central displacement for Timoshenko beam

	h/L	Exact [14]	Present solution
SS	0.001	1.5625	1.5623
	0.01	0.0015631	0.0015626
	0.1	1.62099e ⁻⁶	1.620124e ⁻⁶
CF	0.001	15.0	15.0
	0.01	0.0150	0.0150
	0.1	1.5156e ⁻⁵	1.5156e ⁻⁵

Figura 6.17: Timoshenko , under uniform load, con distintas fijaciones y distinto grado de discretización.

6.4.2. Caso con soporte elástico

Veamos el caso de la figura, donde una viga uniformemente cargada se empotra en el extremo izquierdo y tiene un soporte elástico en el extremo derecho de constante k . El caso libre sería cuando $k \rightarrow 0$ mientras que el caso apoyado sería cuando $k \rightarrow \infty$.

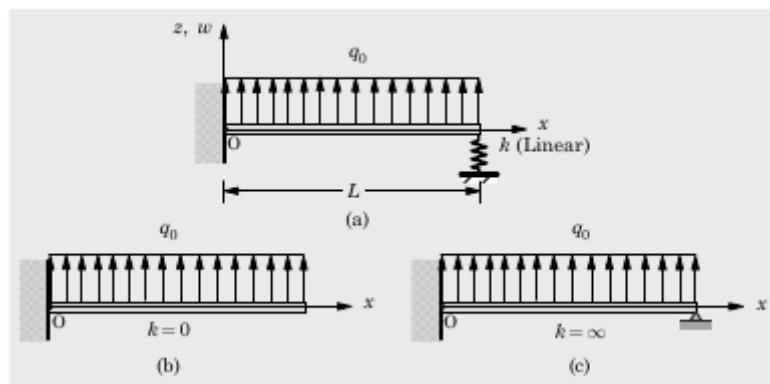


Figura 6.18: Timoshenko , under uniform load, con fijación elástica extremo derecho

Resolviendo en forma analítica el problema llegamos a una expresión para la defecación transversal (flexión) a la viga como:

$$w(x) = \frac{Px^4}{24D} - \frac{PLx^3}{6D} + \frac{PL^2x^2}{4D} + \frac{k}{6D}(x^3 - 3Lx^2)\frac{PL^4}{8D}(1 + \frac{kL^3}{3D})^{-1}$$

- **Caso $k \rightarrow 0$**

$$w(x) = \frac{Px^4}{24D} - \frac{PLx^3}{6D} + \frac{PL^2x^2}{4D} = \frac{Px^2}{24D}(6L^2 - 4Lx + x^2)$$

- **Caso $k \rightarrow \infty$**

$$w(x) = \frac{Px^2}{48D}(3L^2 - 5Lx + 2x^2)$$

Hemos resuelto estos problemas usando la rutina "Problem16_v2.m" donde el resorte se introduce como en el "problem9.m" como si fuera un elemento de barra con rigidez k vinculando los dos grados de libertad extremos del resorte. En este problema el desplazamiento vertical w del extremo derecho de la viga con un punto fijo a la tierra que se agrega como nodo pero fijando su desplazamiento vertical en cero.

Tambien he agregado un caso "Problem16_v3.m" simplemente para chequear contra un resultado como el del problema "problem9.m" que resuelve un caso parecido pero con la teoría de viga de Euler-Bernoulli.

6.4.3. Caso con vibraciones de vigas

Hemos implementado el problema "Problem16_vibrations.m" que emula lo que escribe Ferreira. Los resultados para el caso cantilever fueron chequeados según la tabla 10.2 dando OK. Los primeros 4 modos de vibración cualitativamente estarían bien. A continuación Ferreira cita un trabajo de Lee Schultz los cuales usan una forma de adimensionalizar las frecuencias naturales distintas. Estuve mirando el paper de estos autores y me parece que en lugar de definir la frecuencia natural adimensional como se suele hacer normalmente ellos asumen como que esa frecuencia es el cuadrado de otra (no comprendo porque y para ello habría que seguir el hilo del paper) y si usamos esa transformación con la raíz cuadrada los resultados reportados por Ferreira se verifican. En fin, no creo por el momento conveniente seguir con esto. Pasaremos a lo que nos interesa que es verificar con estas herramientas alguna estructura sometida a cargas dinámicas algo más complejas.

6.5. Vigas con apoyos sometidos a esfuerzos dinámicos

La idea de esta sección es verificar en qué medida uno puede resolver un problema de dinámica vehicular sobre un chasis flexible representado por un pórtico de vigas de una forma simplificada resolviendo primero la parte de dinámica como si el chasis fuera rígido y luego cargar un modelo de vigas estático con las fuerzas que las masas no suspendidas trasladan al chasis mas las fuerzas iniciales en alguna configuración de las más críticas para evaluar si el nivel tensional es equivalente.

Para ello resolveremos varios problemas aumentando en complejidad.

Dado que el problema simplificado no cuenta con fijaciones sino que se asume una viga cargada con un sistema de fuerzas en equilibrio se suele usar unos resortes para evitar modos rígidos que pueden aparecer y que hacen indeterminada la solución.

Entonces partiremos de un problema simple, una viga apoyada en un extremo y soportada por un resorte en el otro extremo y cargada con una carga uniforme como si fuera el peso propio (*Problem_9a.m*) y la iremos transformando en lo que nos interesa.

La solución en desplazamientos del problema de partida, con apoyo tanto a izquierda como a derecha es:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -5,0000e + 05 \\ -1,3580e + 06 & -2,4074e + 05 \\ -1,3580e + 06 & 2,4074e + 05 \\ 0 & 5,0000e + 05 \end{pmatrix}$$

La solución en desplazamientos del problema de partida, con apoyo a izquierda y resorte a derecha es:

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -5,0005e + 05 \\ -1,3582e + 06 & -2,4079e + 05 \\ -1,3584e + 06 & 2,4069e + 05 \\ -5,0000e + 02 & 4,9995e + 05 \\ 0 & \end{pmatrix}$$

La ultima fila tiene un solo valor porque es el desplazamiento del extremo del resorte en este caso conectado a tierra firme. Hay un desplazamiento del nodo derecho de la viga debido a la flexibilidad del resorte. En este caso se uso $k = 10$. Si usamos $k = 1000$ por ejemplo, su desplazamiento se reduce en 100 veces, siendo lineal con el resorte usado. Es decir que podemos controlar el desplazamiento con este valor.

- *Problem_9b.m* : reemplazamos el apoyo a izquierda por otro resorte. Ambos resortes se han rigidizado con una constante $k = 10^5$

$$U = \begin{pmatrix} -5,0000e - 02 & -5,0000e + 05 \\ -1,3580e + 06 & -2,4074e + 05 \\ -1,3580e + 06 & 2,4074e + 05 \\ -5,0000e - 02 & 5,0000e + 05 \\ 0 & \\ 0 & \end{pmatrix}$$

- *Problem_9c.m* : aplicamos cargas en ambos extremos que están en balance con el peso propio.

$$U = \begin{pmatrix} -1,0000e - 01 & -5,0000e + 05 \\ -1,3580e + 06 & -2,4074e + 05 \\ -1,3580e + 06 & 2,4074e + 05 \\ -1,0000e - 01 & 5,0000e + 05 \\ 0 & \\ 0 & \end{pmatrix}$$

Los desplazamientos son similares a menos de los extremos donde se han duplicado a causa de la aplicación localizada de las cargas. No obstante son 7 órdenes de magnitud menores a los desplazamientos principales.

Si aumentamos el número de elementos de la discretización llegamos en el caso del problema *Problem_9b.m* a

$$U = \begin{pmatrix} -5,0000e - 02 & -5,0000e + 05 \\ -9,2800e + 05 & -3,9600e + 05 \\ -1,4880e + 06 & -1,4800e + 05 \\ -1,4880e + 06 & 1,4800e + 05 \\ -9,2800e + 05 & 3,9600e + 05 \\ -5,0000e - 02 & 5,0000e + 05 \\ 0 & \\ 0 & \end{pmatrix}$$

y en el caso del modelo *Problem_9c.m* a :

$$U = \begin{pmatrix} -1,0000e - 01 & -5,0000e + 05 \\ -9,2800e + 05 & -3,9600e + 05 \\ -1,4880e + 06 & -1,4800e + 05 \\ -1,4880e + 06 & 1,4800e + 05 \\ -9,2800e + 05 & 3,9600e + 05 \\ -1,0000e - 01 & 5,0000e + 05 \\ 0 & \\ 0 & \end{pmatrix}$$

Otra vez con respuestas similares y con desplazamientos en los extremos despreciables respecto al resto.

- *Problem_9d.m* :

A continuación agregamos ademas de los 2 resortes que veníamos usando para garantizar la fijación, cargas en los extremos que junto con el peso propio y las cargas iniciales aplicadas en el centro de masa de la viga están en equilibrio, emulando una de las condiciones por las que pasa la viga (chasis) durante alguna de las maniobras de ensayo.

Usando constantes del resorte de $k = 10^6$ tenemos los siguientes desplazamientos

$$U = \begin{pmatrix} -1,0292e - 02 & -5,5625e + 05 \\ -8,8194e + 05 & -4,7731e + 05 \\ -1,5239e + 06 & -2,7755e + 05 \\ -1,7708e + 06 & -1,2500e + 04 \\ -1,5471e + 06 & 2,7338e + 05 \\ -9,0046e + 05 & 4,8565e + 05 \\ -8,0417e - 03 & 5,6875e + 05 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Con $k = 10^8$

$$U = \begin{pmatrix} -1,0292e-04 & -5,5625e+05 \\ -8,8194e+05 & -4,7731e+05 \\ -1,5239e+06 & -2,7755e+05 \\ -1,7708e+06 & -1,2500e+04 \\ -1,5471e+06 & 2,7338e+05 \\ -9,0046e+05 & 4,8565e+05 \\ -8,0417e-05 & 5,6875e+05 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- *Problem_17a.m :*

Someteremos una viga que emula un chasis con dos apoyos que emulan sus ejes a un camino sinuoso y trataremos de ver si resolver un problema estático con un estado de carga a determinar equivale desde el punto del vista del dimensionamiento a resolver el problema completo. Para ello haremos 3 cálculos

1. Considerar la viga (chasis) rígida y resolver las ecuaciones de la dinámica para calcular además de la serie de tiempo del desplazamiento vertical y del ángulo de cabeceo del centro de masa, la serie de tiempo de las respectivas velocidades verticales y angulares del mismo centro de masa y aquellas de las fuerzas que hay en los resortes considerando el peso propio.

De estas ecuaciones se desprende el postproceso que da lugar a esas series de tiempo que luego usaremos para estimar los esfuerzos a los que se haya sometido la viga para su análisis estructural, tanto dinámico como pseudo-estático.

Desplazamiento vertical del tren trasero.

$$y_r = y_{CG} + (x_r - x_{CG}) \tan(\theta_{CG})$$

Desplazamiento vertical del tren delantero.

$$y_f = y_{CG} + (x_f - x_{CG}) \tan(\theta_{CG})$$

Suponiendo que la masa de ambos ejes se relacionan mediante

$$\gamma = \frac{m_f}{m_r}$$

el centro de gravedad se ubica de forma de satisfacer

$$m_f(x_f - x_{CG}) + m_r(x_r - x_{CG}) = 0$$

$$\gamma(x_f - x_{CG}) + (x_r - x_{CG}) = 0$$

siendo

$$L = x_f - x_r$$

$$x_{CG} = x_r + \frac{\gamma}{1 + \gamma} L$$

si asumimos que el tren trasero se ubica en el origen de coordenadas, entonces

$$x_{CG} = \frac{\gamma}{1 + \gamma} L$$

y si las masas en ambos ejes son iguales, $\gamma = 1$, nos queda

$$x_{CG} = \frac{L}{2}$$

con

$$m = m_r + m_f$$

En cuanto a la posición vertical y_{CG} , habiendo calculado que

$$(x_r - x_{CG}) = -\frac{\gamma}{1 + \gamma} L$$

y siendo que $x_f = x_r + L$, entonces

$$(x_f - x_{CG}) = \frac{1}{1 + \gamma} L$$

entonces sumando ambas expresiones del desplazamiento vertical

$$\frac{y_r + y_f}{2} = y_{CG} + \frac{1}{2} \left(\frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} \right) L \tan(\theta_{CG})$$

El caso mas simple sería cuando las masas están equidistribuidas por ejes ($\gamma = 1$) en cuyo caso el segundo término de la derecha se anula y queda el promedio de los desplazamientos delanteros y traseros.

Respecto a los giros tenemos que restar ambas ecuaciones en lugar de sumar, lo cual nos da que,

$$y_f - y_r = (x_f - x_r) \tan(\theta_{CG}) = L \tan(\theta_{CG})$$

$$\theta_{CG} = \tan^{-1} \left(\frac{y_f - y_r}{x_f - x_r} \right)$$

En resumen, con la serie de tiempo de las posiciones verticales de los ejes delantero y trasero, extremos de la viga, podemos calcular la serie de tiempo del desplazamiento vertical del centro de gravedad y giro de la viga.

$$(y_f(t), y_r(t)) \Rightarrow (y_{CG}(t), \theta_{CG}(t))$$

A continuación calcularemos lo mismo pero para las velocidades. Derivando la expresión de los desplazamientos verticales,

$$\dot{y}_r = \dot{y}_{CG} - \frac{\gamma}{1 + \gamma} L (1 + \tan^2(\theta_{CG})) \dot{\theta}_{CG}$$

$$\dot{y}_f = \dot{y}_{CG} + \frac{1}{1 + \gamma} L (1 + \tan^2(\theta_{CG})) \dot{\theta}_{CG}$$

Con lo cual sumando llegamos a

$$\dot{y}_{CG} = \frac{1}{2} (\dot{y}_r + \dot{y}_f) + \frac{1 - \gamma}{1 + \gamma} L (1 + \tan^2(\theta_{CG})) \dot{\theta}_{CG}$$

y restando llegamos a

$$y_f - y_r = L (1 + \tan^2(\theta_{CG})) \dot{\theta}_{CG}$$

con lo cual

$$\dot{\theta}_{CG} = \frac{y_f - y_r}{L (1 + \tan^2(\theta_{CG}))}$$

de lo cual se despeja que

$$\dot{y}_{CG} = \frac{1}{2}(\dot{y}_r + \dot{y}_f) + \frac{1-\gamma}{1+\gamma}(\dot{y}_f - \dot{y}_r)$$

En resumen, con la serie de tiempo de las velocidades verticales de los ejes delantero y trasero, extremos de la viga, podemos calcular la serie de tiempo de la velocidad vertical del centro de gravedad y de la velocidad angular con que giro la viga.

$$(\dot{y}_f(t), \dot{y}_r(t)) \Rightarrow (\dot{y}_{CG}(t), \dot{\theta}_{CG}(t))$$

Por último, con las aceleraciones, tenemos que generarlas a partir, o bien de la serie de tiempo de la fuerzas en los resortes o sino derivando numéricamente las expresiones de la velocidad vertical por un lado y angular por el otro. Esto último introduce un error numérico que la primera metodología no introduce, motivo por el cual tomaremos la primera opción. Para ello consideramos las 2 ecuaciones de balance de Euler, de fuerzas y momentos y despejamos de allí las respectivas aceleraciones lineales (verticales) y angulares:

$$\ddot{y}_{CG} = \frac{F_f + F_r}{m}$$

$$\ddot{\theta}_{CG} = \frac{F_f(x_{CG} - x_f) + F_r(x_{CG} - x_r)}{I}$$

2. Resolver el problema completo considerando el chasis (viga) flexible y los resortes apoyados sobre un camino rugoso con el peso distribuido
3. resolver un problema estático con algún estado de carga representativo del problema 1 que mas se acerque a los esfuerzos tensionales producidos por el problema 2. La idea es ver si tomar los esfuerzos máximos producidos por 1 es conservativo respecto a resolver el problema completo 2.

QUEDA POR HACER Ver Chapter_7/Problem17a.m

6.6. Vigas en 3D

A continuación resolveremos ejemplos para vigas formuladas en 3 dimensiones, tanto Euler-Bernoulli como Timoshenko.

6.6.1. Ejemplo 1:

Referencia: [0] School of Engineering Brown University, FEA Project, Finite Element Analysis of a Timoshenko Beam, Instructor: Prof. Bower, PhD student: Alireza Khorshidi, 2013

Ver Chapter_7/Problem16b.m que resuelve los dos mismos casos que la referencia, uno para viga simplemente apoyada y otro para cantilever, usando por un lado la formulación de viga extraida del libro

[1] Janusz S Przemieniecki.

Theory of matrix structural analysis.

Courier Corporation, 1985.

y el articulo escrito por

[2] EN234: Three-dimentional Timoshenko beam element undergoing axial, torsional and bending deformations, Wenqiang Fang, December 16, 2015

y por otro la extraida del paper

[3] An efficient 3D Timoshenko beam element with consistant shape functions, Yunhua Luo Yunhua Luo, October 2008

De resolver Chapter_7/Problem16b.m vemos que tanto para el caso simplemente apoyado como el cantilever los resultados usando [1] y [2] coinciden con una de las predicciones presentadas en [0] como de Euler-Bernoulli mientras que usando las expresiones de [3] coinciden con lo que [0] asigna a la formulación de Timoshenko. No está claro lo de Euler-Bernoulli porque [1] y [2] difieren de [3] no en considerar o no los esfuerzos cortantes como dice la teoría sino en algunas utilizas de las expresiones que debo indagar a que se deben. Lo cierto es que se pudieron obtener ambos resultados. A partir de ahora usaremos las expresiones de [3] para seguir avanzando.

6.6.2. Ejemplo 2:

6.6.3. Ejemplo 3:

6.7. Estructuras con apoyos sometidos a esfuerzos dinámicos

Tareas para el retorno

- Tema Beams: tratar de ver el tema de apoyos elasticos estacionario, luego introducir la dinamica incluso ver tema vibraciones en vigas y luego intentar resolver un ejemplo de estructura sometida a apoyos elasticos con un movimiento armonico impuesto y ver si la respuesta pseudo estacionaria se puede usar para dimensionar conservativamente la estructura cuando se la compara con la respuesta dinamica del mismo caso.
- IISD: ver de implementar el calculo de los dofs de la interfase usando la idea esa de strip (N layers)
- una vez implementado lo de IISD pasar a ver lo de supersteps de Oñate en el caso Stokes
- PETSCFEM: ver si se puede replotar el uso de PetscFem para el proyecto pseudo-DNS
- ver si puede usar Matlab en modo comando usando (nodisplay) en servidor y ver si puedo paralelizarlo (ver <https://research.reading.ac.uk/act/knowledgebase/running-matlab-scripts-as-batch-jobs/>)
- ver el tema de stability rollover para YPF
- tema compra equipamiento exterior
- tema cobro parte II Ternium
- facturacion INVAP
- acta examen MINFT
- Siradig y OJO con que no me descuenten meses Abril y Mayo este año.

POR EL MOMENTO SACO LOS EJERCICIOS DE EXAMEN