MÉTODO DE LOS ELEMENTOS FINITOS. Modelos de Difusión

Felipe Gabaldón Castillo

Madrid, 28 de septiembre de 2017

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

Índice

1. Introducción
2. Formulación del problema de contorno
3. Formulación de Galerkin
4. Formulación de elementos finitos
5. Ensamblaje de las ecuaciones
6. Convergencia

La ecuación de Poisson

$$
\begin{aligned}
\operatorname{div}\mathbf{q} &= f \text{ en } \Omega && \text{(ecuación de balance)}\\
u &= \bar{u} \text{ en } \partial_u\Omega && \text{(condición esencial de contorno)}\\
\mathbf{q}\cdot\mathbf{n} &= q_n \text{ en } \partial_q\Omega && \text{(condición natural de contorno)}\\
\mathbf{q} &= -\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}_x u && \text{(ecuación constitutiva)}
\end{aligned}
$$

siendo:

u : función potencial (variable básica)

$\mathbf{q}$: vector flujo

f : fuente

$\mathbf{k}$: tensor constitutivo

El interés que tiene estudiar aquí la ecuación de Poisson es el amplio número de modelos físicos que se rigen por esta ecuación, y que la variable básica es un escalar

Conducción de calor

$$
\begin{aligned}
\operatorname{div}\mathbf{q} &= f\\
\mathbf{q} &= -\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}_x u
\end{aligned}
$$

u : Temperatura

$\mathbf{q}$: Flujo de calor por unidad de superficie

f : Calor generado por unidad de volumen

$\mathbf{k}$: Matriz de conductividades (Ley de Fourier)

Conducción de calor

Flujo en medios porosos

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = f$$
$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \boldsymbol{\nabla}_x u$$

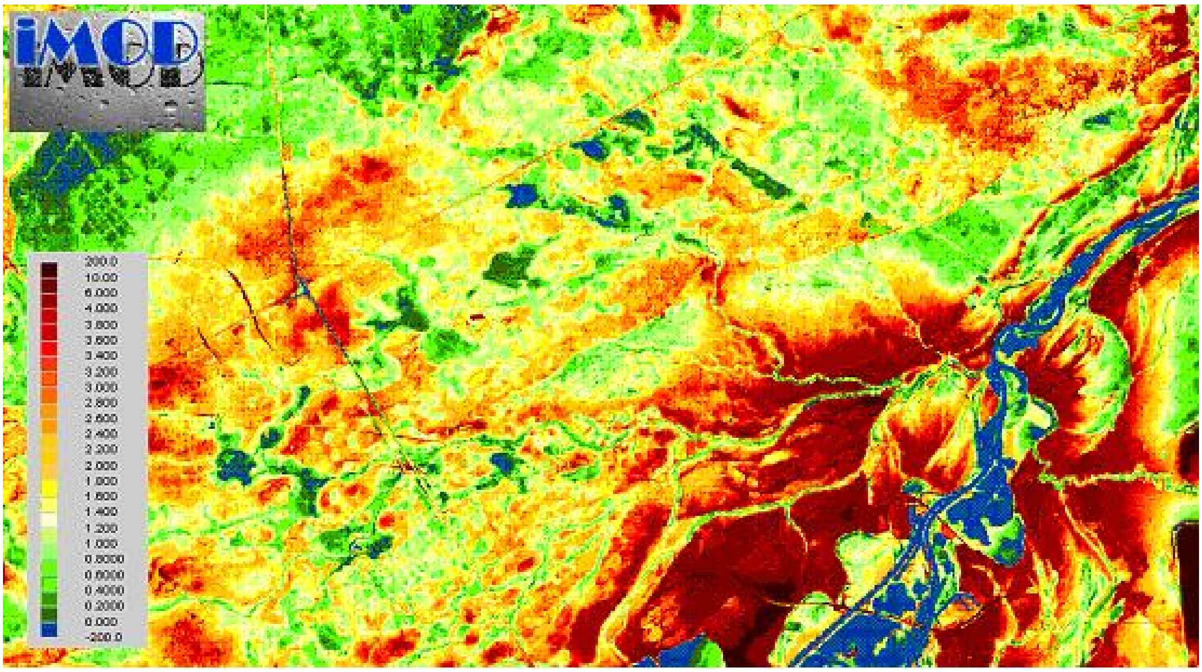
u : Altura piezométrica $\left(u = \dfrac{p}{\gamma} + z\right)$

$\mathbf{q}$: Velocidad

f : Caudal suministrado por unidad de volumen

$\mathbf{k}$: Matriz de permeabilidades (Ley de Darcy)

Flujo en medios porosos



Electrostática

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{q} &= f \\ \mathbf{q} &= -\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}_x u \end{aligned}$$

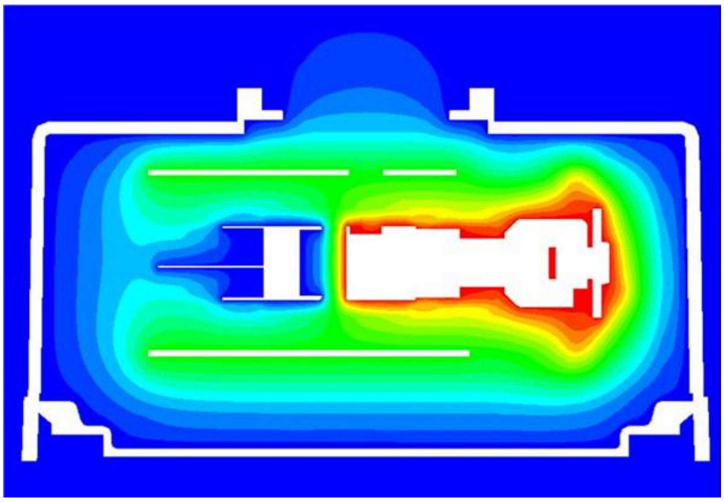
u : Potencial eléctrico

$\mathbf{q}$: Intensidad de campo eléctrico

f : Carga eléctrica generada por unidad de volumen

$\mathbf{k}$: Matriz de permitividades (Ley de Gauss)

Electrostática



Torsión uniforme

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

$$\operatorname{div}\mathbf{q} = f$$
$$\mathbf{q} = -\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla}_x u$$

u : Función de tensiones (constante en $\partial\Omega$)

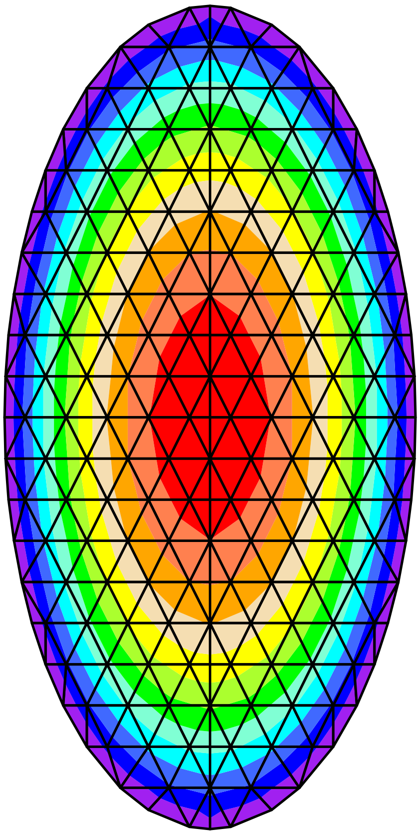
$\mathbf{q}$: Tensiones tangenciales

f : $2G\theta$, siendo θ el giro por unidad de longitud y G el módulo de cortante

$\sigma_{i3} = \dfrac{\partial u}{\partial x_i}$, sería la ecuación constitutiva

- Otros modelos físicos: flujo irrotacional de fluidos ideales, lubricación de cojinetes, magnetostática, presiones hidrodinámicas sobre superficies en movimiento, etc.

Torsión uniforme



Formulación fuerte

Sea $\overline{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ el dominio ocupado por un medio conductivo ($\overline{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$), cuyo contorno $\partial\Omega$ admite la descomposición $\partial\Omega = \partial_u\Omega \cup \partial_t\Omega$, $\partial_u\Omega \cap \partial_t\Omega = \emptyset$. La formulación fuerte del problema se establece en los siguientes términos:
Dados $f : \Omega \to \mathbb{R}$, $\quad \overline{u} : \partial_u\Omega \to \mathbb{R}$, $\quad \overline{q} : \partial_t\Omega \to \mathbb{R}$, encontrar el campo de temperaturas $u : \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$ que cumple:

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = f \text{ en } \Omega \tag{1}$$

$$u = \overline{u} \text{ en } \partial_u\Omega \tag{2}$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \overline{q} \text{ en } \partial_t\Omega \tag{3}$$

con $\mathbf{q} = -\mathbf{k}\boldsymbol{\nabla} u$

Formulación débil

Dados $f : \Omega \to \mathbb{R}$ y las funciones $\overline{u} : \partial_u\Omega \to \mathbb{R}, \quad \overline{q} : \partial_t\Omega \to \mathbb{R}$, encontrar el campo de temperaturas $u \in \delta \mid \forall \delta u \in \nu$ que cumple:

$$\int_\Omega (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nabla}\delta u + f\delta u)\, d\Omega - \int_{\partial_t\Omega} \overline{q}\delta u\, d\Gamma = 0 \tag{4}$$

siendo:

$$\delta = \left\{u \in H^1(\Omega, \mathbb{R}) \mid u(\mathbf{x}) = \overline{u} \quad \forall\, \mathbf{x} \in \partial_u\Omega\right\} \tag{5}$$

$$\mathcal{V} = \left\{\delta u \in H^1(\Omega, \mathbb{R}) \mid \delta u(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall\, \mathbf{x} \in \partial_u\Omega\right\} \tag{6}$$

y $H^1(\Omega, \mathbb{R})$ el espacio de Sobolev de orden 1 y grado 2:

$$H^1 = \left\{u : \Omega \to \mathbb{R} \quad \middle| \quad \int_\Omega \|u\|_{2,1}\, d\Omega < \infty\right\}$$

Equivalencia de las formulaciones fuerte y débil

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

1. u es solución de (S) $\Rightarrow$ u es solución de (W)
   Si u es solución de (S) $\Rightarrow u = \overline{u}$ en $\partial_u\Omega \Rightarrow u \in \delta$
   Por otra parte:

$$0 = \int_\Omega (\operatorname{div}\mathbf{q} - f)\,\delta u\, d\Omega =$$

$$-\int_\Omega \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nabla}\delta u\, d\Omega + \int_{\partial\Omega} \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}\delta u\, d\Gamma - \int_\Omega f\delta u\, d\Omega =$$

$$-\int_\Omega (\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nabla}\delta u + f\delta u)\, d\Omega + \int_{\partial_t\Omega} \overline{q}\delta u\, d\Gamma$$

2. u es solución de (W) $\Rightarrow$ u es solución de (S)
   Si u es solución de (W), $u \in \delta \Rightarrow u = g$ en $\partial_u \Omega$
   Por otra parte, $\forall \delta u \in \nu$ se verifica:

$$\begin{aligned} 0 &= \int_\Omega \mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\nabla} \delta u \, d\Omega + \int_\Omega f \delta u \, d\Omega - \int_{\partial_t \Omega} \overline{q} \delta u \, d\Gamma \\ &= \int_\Omega (-\operatorname{div} \mathbf{q} + f) \, \delta u \, d\Omega + \int_{\partial_t \Omega} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q}) \, \delta u \, d\Gamma \qquad (7) \end{aligned}$$

con lo que debe demostrarse:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad -\operatorname{div} \mathbf{q} + f = 0 \text{ en } \Omega \\ &\text{b)} \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q} = 0 \text{ en } \partial_t \Omega \end{aligned}$$

Equivalencia de las formulaciones fuerte y débil

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

a) $-\operatorname{div} \mathbf{q} + f = 0$ en Ω

Sea $\delta u = (-\operatorname{div} \mathbf{q} + f)\phi$, donde ϕ es una función que verifica:

$$\begin{aligned} &1)\phi > 0 \text{ en } \Omega \\ &2)\phi = 0 \text{ en } \partial\Omega \\ &3)\phi \text{ suave} \end{aligned}$$

Sustituyendo en (7):

$$0 = \int_\Omega (-\operatorname{div} \mathbf{q} + f)^2 \, \phi \, d\Omega + \underbrace{\int_{\partial_t \Omega} \phi \, (-\operatorname{div} \mathbf{q} + f) \, (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q}) \, d\Gamma}_{=0}$$

$$\Rightarrow -\operatorname{div} \mathbf{q} + f = 0 \text{ en } \Omega$$

Equivalencia de las formulaciones fuerte y débil

b) $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q} = 0 \text{ en } \partial_t \Omega$

Sea ahora $\delta u = (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q})\psi$, donde ψ verifica:

$$
\begin{aligned}
&1)\psi > 0 \text{ en } \partial_t \Omega \\
&2)\psi = 0 \text{ en } \partial_u \Omega \\
&3)\psi \text{ suave}
\end{aligned}
$$

Sustituyendo en (7) y teniendo en cuenta que ya se ha demostrado que $-\operatorname{div} \mathbf{q} + f = 0$ en Ω, resulta:

$$0 = \int_{\partial_t \Omega} (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q})^2 \, \psi \, d\Gamma$$

para lo que debe de verificarse:

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} - \overline{q} = 0 \text{ en } \partial_t \Omega$$

Formulación de Galerkin

Sean los conjuntos ν^h y δ^h aproximaciones de dimensión finita de ν y δ respectivamente. Partiendo de la descomposición (método de Bubnov-Galerkin):

$$u^h = v^h + \overline{u}^h \tag{8}$$

donde $v^h \in \nu^h$ y $\overline{u}^h = \overline{u}$ en $\partial_u \Omega$ (“aproximadamente”), la formulación de Galerkin se expresa en los siguientes términos: Dados $f : \Omega \to \mathbb{R}$ y las funciones $\overline{u} : \partial_u \Omega \to \mathbb{R}$, $\quad \overline{q} : \partial_t \Omega \to \mathbb{R}$, encontrar $u^h = v^h + \overline{u}^h \in \delta^h$ tal que $\forall \delta u^h \in \nu^h$ se cumple:

$$
\begin{aligned}
\int_\Omega \boldsymbol{\nabla}^T \delta u^h \cdot \mathbf{k} \boldsymbol{\nabla} v^h \, d\Omega = \int_\Omega f \delta u^h \, d\Omega - \int_{\partial_t \Omega} q \delta u^h \, d\Gamma - \\
\int_\Omega \boldsymbol{\nabla}^T \delta u^h \cdot \mathbf{k} \boldsymbol{\nabla} \overline{u}^h \, d\Omega
\end{aligned}
\tag{9}
$$

Formulación matricial

Sean $\eta = \{1, 2, \ldots, n_{\mathrm{nod}}\}$, $\eta_u \subset \eta$ el conjunto de nodos con temperaturas prescritas y $\eta - \eta_u$ el conjunto complementario de η_u en η: $\circ(\eta - \eta_u) = n_{\mathrm{eq}}$.
Los elemento de ν^h en (9) se expresan:

$$\delta u^h = \sum_{A \in \eta - \eta_u} c_A N_A \qquad v^h = \sum_{A \in \eta - \eta_u} d_A N_A \tag{10}$$

y por otra parte:

$$\overline{u}^h = \sum_{A \in \eta_u} \overline{u}_A N_A \qquad \text{siendo } \overline{u}_A = \overline{u}(x_A) \tag{11}$$

Formulación matricial

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia

Sustituyendo (10, 11) en (9), y teniendo en cuenta que los coeficientes c_A son arbitrarios, resulta el sistema de ecuaciones:

$$\sum_{B \in \eta - \eta_u} \int_\Omega \boldsymbol{\nabla} N_A \cdot \mathbf{k} \boldsymbol{\nabla} N_B \, d_B = \int_\Omega N_A f \, d\Omega + \int_{\partial_t \Omega} N_A \overline{q} \, d\Gamma$$
$$- \sum_{B \in \eta_u} \int_\Omega \boldsymbol{\nabla} N_A \cdot \mathbf{k} \boldsymbol{\nabla} N_B \, u_B \quad (A \in \eta - \eta_u) \tag{12}$$

Para expresar en forma matricial este sistema es necesario establecer la numeración global de las $\eta - \eta_u$ ecuaciones que lo constituyen:

$$id(A) = \begin{cases} P & \text{si } A \in \eta - \eta_u \\ 0 & \text{si } A \in \eta_u \end{cases} \tag{13}$$

siendo P el número de la ecuación global correspondiente al nodo A, y tal que $1 \leq P \leq n_{\mathrm{eq}}$. La dimensión de la matriz **id** es n_{nod}.

Formulación matricial

La expresión matricial del sistema de ecuaciones (12) es:

$$\mathbf{K}\mathbf{d} = \mathbf{F} \tag{14}$$

donde:

$$\mathbf{K} = [K_{PQ}], \quad \mathbf{d} = \{d_Q\}, \quad \mathbf{F} = \{F_P\}, \quad 1 \leq P, Q \leq n_{\mathrm{eq}} \tag{15}$$

siendo:

$$K_{PQ} = \int_{\Omega} k_{ij} \frac{\partial N_A}{\partial x_i} \frac{\partial N_B}{\partial x_j} d\Omega, \quad P = id(A), \quad Q = id(B) \tag{16}$$

$$F_P = \int_{\Omega} N_A f \, d\Omega + \int_{\partial_t \Omega} N_A \overline{q} \, d\Gamma - \sum_{B \in \eta_u} \left(\int_{\Omega} k_{ij} \frac{\partial N_A}{\partial x_i} \frac{\partial N_B}{\partial x_j} d\Omega \right) \overline{u}_B \tag{17}$$

La matriz de rigidez es simétrica.

Formulación de elementos finitos

Considerando un elemento genérico e de n_{nen} nodos, las expresiones de la matriz de rigidez elemental y del vector de fuerzas, son respectivamente:

$$\mathbf{K}^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^T \mathbf{k} \mathbf{B} \, d\Omega$$

$$\mathbf{F}^e = \int_{\Omega^e} \mathbf{N} f \, d\Omega - \int_{\partial_t \Omega^e} \mathbf{N} \overline{q} \, d\Gamma - \sum_{b=1}^{n_{\mathrm{nen}}} \left(\int_{\Omega^e} \nabla N_a \cdot \mathbf{k} \nabla N_b \, d\Omega \right) \overline{u}_b$$

siendo: $\mathbf{B} = [\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \ldots, \mathbf{B}_{\mathrm{nen}}]$, $\quad \mathbf{B}_a = \nabla N_a$ A partir de los vectores y matrices elementales se obtienen los globales mediante un operador de ensamble A[·]:

$$\mathbf{K} = \mathop{\mathrm{A}}_{e=1}^{n_{\mathrm{numel}}} \mathbf{k}^e \tag{18}$$

$$\mathbf{F} = \mathop{\mathrm{A}}_{e=1}^{n_{\mathrm{numel}}} \mathbf{f}^e \tag{19}$$

Ensamblaje de las ecuaciones

En las expresiones (18) y (19), el operador $\mathbf{A}$ genera la matriz de rigidez y el vector de fuerzas globales, a partir de las matrices y vectores calculados en cada elemento. A este proceso se le denomina *ensamble* o *ensamblaje*.

$$IEN(\underbrace{a}_{\text{nodo local}}, \underbrace{e}_{\text{elemento}}) = \underbrace{A}_{\text{nodo global}}$$

$$ID(A) = \underbrace{N}_{\text{ecuación}}$$

$$LM(a,e) = ID(IEN(a,e))$$

Las matrices *IEN* e *ID* se construyen a partir de los datos de entrada (conectividad y condiciones de contorno)

Ensamblaje de las ecuaciones. Ejemplo

Modelos de difusión

Felipe Gabaldón

Introducción

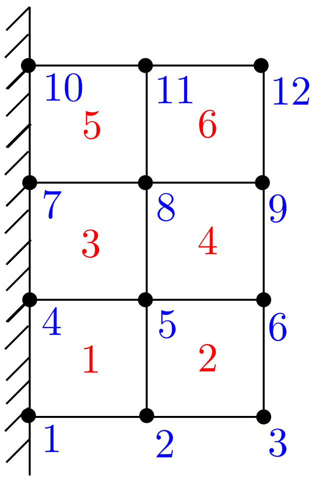
Formulación del problema de contorno

Formulación de Galerkin

Formulación de elementos finitos

Ensamblaje de las ecuaciones

Convergencia



$$ID = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 0 & 3 & 4 & 0 & 5 & 6 & 0 & 7 & 8 \end{pmatrix}$$

$$IEN = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 & 7 & 8 \\ 2 & 3 & 5 & 6 & 8 & 9 \\ 5 & 6 & 8 & 9 & 11 & 12 \\ 4 & 5 & 7 & 8 & 10 & 11 \end{pmatrix}$$

$$LM = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 0 & 3 & 0 & 5 & 0 & 7 \end{pmatrix}$$

Ensamblaje de las ecuaciones. Ejemplo

Por ejemplo, para el elemento 3:

$$LM(a,3) = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 5 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \qquad \begin{array}{c} K_{33} \leftarrow K_{33} + K^e_{22} \\ K_{35} \leftarrow K_{35} + K^e_{23} \\ K_{53} \leftarrow K_{53} + K^e_{32} \\ K_{55} \leftarrow K_{55} + K^e_{33} \\ F_3 \leftarrow F_3 + F^e_2 \\ F_5 \leftarrow F_5 + F^e_3 \end{array}$$

Concepto de convergencia

- Al refinar (disminuir el tamaño de los elementos), la solución numérica debe aproximarse tanto como se desee a la solución exacta.
- Consistencia = Complitud + Compatibilidad
  - Complitud: los elementos deben tener la suficiente *capacidad de aproximación* para capturar la solución exacta en límite del proceso de refinamiento.
  - Compatibilidad: Las funciones de forma deben de ser continuas entre los elementos
- Estabilidad: se puede interpretar como el requisito que garantiza que la solución de elementos finitos tiene las mismas propiedades de unicidad que la solución del modelo matemático que se desea resolver.
- La complitud es una condición necesaria para la convergencia, mientras que la relajación de los otros requisitos no excluye la convergencia.

Índice Variacional

- El índice variacional m es el orden de la derivada espacial más alta de u en el funcional de energía $\Pi(u)$.
- Ejemplo: elasticidad 1D

$$\Pi(u) = \int_0^L \left(\frac{1}{2} u' E A u' - q u \right) dx \Rightarrow m = 1$$

- Ejemplo: viga de Euler-Bernoulli

$$\Pi(u) = \int_0^L \left(\frac{1}{2} v'' E I v'' - q v \right) dx \Rightarrow m = 2$$

Complitud

Modelos de difusión
Felipe Gabaldón
Introducción
Formulación del problema de contorno
Formulación de Galerkin
Formulación de elementos finitos
Ensamblaje de las ecuaciones
Convergencia

Las funciones de forma deben de representar exactamente todos los polinomios de grado $\leq m$ en las coordenadas Cartesianas.

- Este requisito aplica a nivel de elemento y por tanto afecta al conjunto de funciones de forma del elemento.
- Elasticidad 2D (m=1)

$$u = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y \qquad v = \alpha_3 + \alpha_4 x + \alpha_5 \tag{20}$$

Se representan de manera exacta para valores cualesquiera de α_i (movimientos de sólido rígido y campos de deformación constante). La condición de complitud equivale a:

$$\sum_{a=1}^{n_{en}} N_a = 1$$

Complitud

Por ejemplo $u(x,y)$ debe poder expresarse como:

$$u(x,y) = \sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} u_A^e N_A(x,y) \tag{21}$$

siendo u_A^e el valor que toma $u(x,y)$ en el nodo A del elemento e:

$$u_A^e = a_0 + a_1 x_A^e + a_2 y_A^e \tag{22}$$

Sustituyendo (22) en (21):

$$\begin{aligned} u(x,y) &= \sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} (a_0 + a_1 x_A^e + a_2 y_A^e) N_A(x,y) \\ &= a_0 \sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} N_A(x,y) + a_1 \sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} x_A^e N_A(x,y) + a_2 \sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} y_A^e N_A(x,y) \end{aligned} \tag{23}$$

Identificando (20) y (23) resulta:

$$\sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} N_A(x,y) = 1 \tag{24}$$

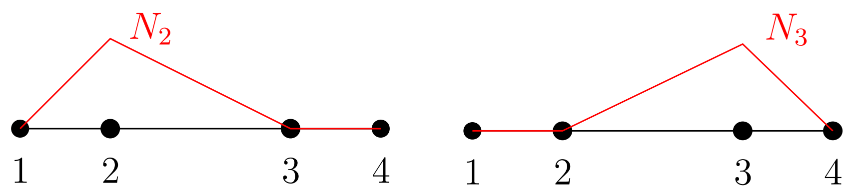
$$\sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} x_A^e N_A(x,y) = x \tag{25}$$

$$\sum_{A=1}^{n_{\mathrm{en}}} y_A^e N_A(x,y) = y \tag{26}$$

Compatibilidad

Las funciones de forma deben ser continuas de clase $\mathcal{C}^{m-1}$ en las fronteras de elementos adyacentes, y continuas de clase $\mathcal{C}^m$ en el interior de cada elemento.

- El requisito de continuidad $\mathcal{C}^{m-1}$ caracteriza a los *elementos conformes*
- El requisito de continuidad $\mathcal{C}^m$ caracteriza a las funciones de *energía finita*. Las funciones de forma que lo satisfacen son funciones cuya derivada m-ésima es de cuadrado integrable: $N(\mathbf{x}) \in H^m$
- El requisito de conformidad puede relajarse al límite asintótico (para $h \to 0$). La comprobación se realiza mediante la prueba de la parcela.



Para ampliar este tema . . .

- Hughes, T.J.R.
  The Finite Element Method. Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis.
  Dover Publications Inc., 2000.
- Ottosen, N. & Petersson, H.
  Introduction to the finite element method.
  Ed. Prentice-Hall, 1992.
- Felippa, C.A.
  Introduction to Finite Element Methods (ASEN 5007). Department of Aerospace Engineering Sciences University of Colorado at Boulder.
  http://www.colorado.edu/engineering/CAS/courses.d/IFEM.d/Home.html