

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 2	AÑO 1978

00.78.08

CNEA-NT 31/78

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
CENTRO ATOMICO BARILOCHE
CENTRO DE COMPUTOS

RESOLUCION POR ELEMENTOS FINITOS DE LA
ECUACION CUASIARMONICA BIDIMENSIONAL.
(Programas "CUARM", "NOLICUARM" , "AXICUARM")

Por

Fernando G. Basombrío

Implementación de la parte computacional a cargo de:

Bibiana Cruz

RESUMEN:

Se presenta en forma completa y con ejemplos resueltos, un tipo de programas destinados a resolver la ecuación cuasiarmónica lineal y no lineal de dos variables independientes, para los casos de simetría plana y cilíndrica. El método utilizado es el de los elementos finitos.-

ABSTRACT

A set of programs to solve, by the finite element method, the linear (and non-linear) quasi-harmonic equations in two independent variables for the cases of plane and axial symmetry is presented.

Two application examples are described in the text.

* * *

GENERALIDADES

Se trata de resolver en forma aproximada, el siguiente problema:

$$(b\phi_x)_x + (b\phi_y)_y = g(x,y) \quad (1)$$

$$\phi|_{\Gamma^*} = \delta : \text{condición forzada}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma'} = \gamma : \text{condición libre}$$

$$c \geq |b(x,y)| \geq c > 0 \quad \text{en } \bar{\Omega}$$

Ω : dominio regular del plano donde interesa la solución (1)

n : normal interior a Ω

Γ : frontera de Ω

$\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$: clausura de Ω

$\Gamma = \Gamma' \cup \Gamma^*$

Γ' : frontera de condiciones de contorno "naturales"

Γ^* : frontera de condiciones de contorno "forzadas"

Nota : Γ^* se considera un conjunto cerrado y $\Gamma \cap \Gamma^* = \emptyset$

A la ecuación (1) se la denomina "cuasi-armónica". Tiene innumerables aplicaciones a problemas físicos: distribución de temperaturas a régimen estacionario con coeficiente de conducción variable; campos electrostáticos y magnetostáticos; campos de velocidades en régimen hidráulico estacionario, etc.

El método de aproximación elegido es el de "elementos finitos", con triángulos de Courant y polinomios de primer grado.

1. PROBLEMA MATEMATICO

Brevemente se caracteriza el problema a resolver.

1.1. Formulación clásica

Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, abierto simplemente conexo, acotado y regular (pensar en un dominio donde sea aplicable el teorema integral de Gauss en su forma usual), sea el siguiente conjunto de funciones:

$$M = \{v \mid v \in \mathcal{C}^2(\bar{\Omega}), \quad v|_{\Gamma^*} = \delta\} \quad (2)$$

δ : dato de Dirichlet adecuadamente regular

Si existe en M un mínimo absoluto " u " del funcional,

$$J(v) = \iint_{\Omega} [b(v_x^2 + v_y^2) + 2g v] dx dy + 2 \int_{\Gamma} b \gamma v ds \quad (3)$$

b, g, γ : adecuadamente regulares

entonces u debe ser solución del problema (1) (Ver [1], [2]).

El funcional (3) suele representar a la energía del problema físico.

1.2 Formulación moderna

Para evitar complicaciones técnicas se supone que $\delta \equiv 0$, lo que como es sabido, no quita generalidad si δ es mínimamente adecuado.

Sean los siguientes espacios de Sobolev,

$$H^m(\Omega) = \{f \mid f \in L^2(\Omega) ; D^j f \in L^2(\Omega), \quad |j| \leq m\}$$

D^j : derivada de orden j según notación de Schwarz

$H_0^m(\Omega)$: clausura en $H^m(\Omega)$, del espacio de funciones $\mathcal{C}_0^\infty$ de soporte compacto en Ω .

y el conjunto:

$$H_E^1(\Omega) = \{f \mid f \in H^1(\Omega) ; f|_{\Gamma^*} = 0\}$$

que es un subespacio cerrado de $H^1(\Omega)$ que cumple

$$H_0^1(\Omega) \hookrightarrow H_E^1(\Omega) \hookrightarrow H^1(\Omega) \quad (4)$$

$\hookrightarrow$: inclusión topológica

Se considera que g, b son funciones de cuadrado integrable en Ω y que $b|_{\Gamma}$ y γ son también de cuadrado integrable en la frontera Γ .

Sea la forma bilineal y simétrica en $H_E^1(\Omega)$:

$$a(u, v) = \iint_{\Omega} b(u_x v_x + u_y v_y) dx dy \quad (6)$$

y la forma lineal continua en el mismo espacio,

$$L(v) = - \iint_{\Omega} g v dx dy - \int_{\Gamma} b \gamma v ds \quad (7)$$

$a(u, v)$ es además continua y coercitiva en $H_E^1(\Omega)$. La continuidad es fácil de verificar y la coercitividad,

$$a(v, v) \geq c \|v\|_1^2, \quad \forall v \in H_E^1(\Omega) \quad (8)$$

proviene de la aplicación de la desigualdad de Poincaré (ver por ejemplo [3] p.69). Se utiliza la acotación superior e inferior de b que figura en (1).

Entonces el siguiente problema: encontrar $u \in H_E^1(\Omega)$ tal que

$$a(u, v) = L(v) \quad \forall v \in H_E^1(\Omega) \quad (9)$$

tiene una y solo una solución, por el teorema de Lax-Milgram o "de las proyecciones" (ver por ejemplo [4]).

Además por la simetría de $a(u, v)$, el problema (9) admite la formulación variacional equivalente [4]: u es solución del problema (9) si y solo si u es el mínimo absoluto en $H_E^1(\Omega)$ del funcional

$$J(v) = a(v, v) - 2 L(v) \quad (10)$$

que es ni más ni menos (3)

Si eventualmente u está en $\mathcal{MCH}_{\frac{1}{2}}^1(\Omega)$, ($\delta \equiv 0$), la solución del problema generalizado (9) ó (10) es también solución en el sentido clásico (punto 1,1).

2. APROXIMACION NUMERICA

Por simplicidad se admitirá que la frontera Γ está constituida por tramos rectos, y en consecuencia resulta factible suponer que Ω es reunión exacta de triángulos. De no ser así, se introduce un error adicional sin importancia práctica [3].

Si $h > 0$ es la norma de la triangulación de Courant (máximo de los lados), sea $\chi_i^h(x,y)$ la función base asociada al nodo "i", igual a 1 en i, nula en todo triángulo que no contenga al nodo "i" como vértice, coincidente con un polinomio de primer grado dentro de cualquier triángulo, y continua en Ω . Se designa como "función poliédrica" a toda combinación lineal de las χ_i^h .

El convexo $\mathcal{M}_h$ donde se busca la solución aproximada, es la interpretación "discretizada" de $H_E^1(\Omega)$ para el caso no homogéneo; o sea el conjunto de funciones poliédricas en Ω tales que en los nodos "P" de la triangulación pertenecientes a Γ^* , toman el valor de Dirichlet $\delta(P)$. Es decir, aquí también se introduce un pequeño error al reemplazar el dato δ por una poligonal inscripta, en correspondencia con los vértices pertenecientes a Γ^* .

Enumerando de 1 a n los nodos que tienen una incógnita asociada, y de $n+1$ a $n+m$ a los que no tienen una incógnita asociada es decir, a los que pertenecen a Γ^* , toda función poliédrica $u_h \in \mathcal{M}_h$ puede escribirse,

$$\begin{aligned} u_h(x,y) &= \sum_{k=1}^n u_k^h \chi_k^h(x,y) - R(x,y) \\ R(x,y) &= - \sum_{k=n+1}^{n+m} \delta_k \chi_k^h(x,y) \end{aligned} \quad (11)$$

u_k^h = parámetro nodal a determinar.

δ_k = valor del dato de Dirichlet en correspondencia con el nodo "k" perteneciente a Γ^* .

Reemplazando $u_k(x,y)$ en el funcional (3), (10), se obtiene la expresión cuadrática no homogénea en los parámetros nodales:

$$J(u_h) = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^m a(\chi_k^h, \chi_j^h) u_k^h u_j^h - 2 \sum_{k=1}^m [L(\chi_k^h) + a(R, \chi_k^h)] u_k^h + 2 L(R) + a(R, R) \quad (12)$$

de donde se obtiene el sistema de n ecuaciones de "minimización"

$$\sum_{k=1}^m a(\chi_k^h, \chi_r^h) u_k^h = L(\chi_r^h) + a(R, \chi_r^h) \quad ; \quad r=1, \dots, n \quad (13)$$

para las n incógnitas nodales u_s^h , $s = 1, \dots, n$. La simetría de la forma bilineal (6) lleva a una matriz de coeficientes $A_{ks} = a(\chi_k^h, \chi_s^h)$ que es simétrica. Además es positiva definida gracias a la coercitividad de $a(u,v)$ (8), y en consecuencia el sistema (13) es de Cramer.

Esto en cuanto a la formulación "nodal" de la aproximación. Es sabido que la misma no es la adecuada desde el punto de vista computacional y que en cambio se procede a analizar la contribución que elemento a elemento se realiza para el armado final de la matriz de coeficientes. Más precisamente, a partir de la definición de $J(u_h)$ las ecuaciones de minimización resultan, (permutando suma con derivada):

$$0 = \frac{\partial}{\partial u_r^h} J(u_1^h, \dots, u_n^h) = 2 \sum_e \iint_e b(x,y) \left[\frac{\partial u_h}{\partial x} \frac{\partial}{\partial u_r^h} \left(\frac{\partial u_h}{\partial x} \right) + \frac{\partial u_h}{\partial y} \frac{\partial}{\partial u_r^h} \left(\frac{\partial u_h}{\partial y} \right) \right] dx dy + 2 \sum_e \iint_e g(x,y) \frac{\partial u_h}{\partial u_r^h} dx dy + 2 \sum_{\lambda'} \int_{\lambda'} b \gamma \frac{\partial u_h}{\partial u_r^h} ds \quad (14)$$

$r = 1, 2, \dots, n$

e : elemento triangular genérico

λ' : lado genérico de triángulo que pertenece a Γ' .

Considerando que

$$u_n(x,y) = \frac{1}{2\Delta} [(\alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y) u_i^h + (\alpha_j + \beta_j x + \gamma_j y) u_j^h + (\alpha_m + \beta_m x + \gamma_m y) u_m^h] \quad ; \quad x, y \in e \quad (15)$$

$$\alpha_i = x_j y_m - x_m y_j$$

$$\beta_i = y_j - y_m$$

$$\gamma_i = x_m - x_j$$

x, y : coordenadas de los vértices i, j, m del triángulo "e"

Δ : área del triángulo "e"

(donde se ha adoptado la notación de Zienkiewicz [5]), las ecuaciones (14) finalmente quedan

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\Delta^2} \sum_e \iint_e b [\beta_i u_i^h + \beta_j u_j^h + \beta_m u_m^h] \beta_r + (\gamma_i u_i^h + \gamma_j u_j^h + \\ & \gamma_m u_m^h) \gamma_r] dx dy + \frac{1}{\Delta} \sum_e \iint_e g (\alpha_r + \beta_r x + \gamma_r y) dx dy + \\ & \frac{1}{\Delta} \sum_k \int_{\Delta_k} b g (\alpha_r + \beta_r x + \gamma_r y) d\omega = 0 \quad r=1, \dots, n \end{aligned} \quad (16)$$

Si el vértice "r" correspondiente a la incógnita u_r^h respecto de la cual se deriva no pertenece al triángulo genérico "e" que se analiza ($r \neq i, j, m$), entonces la contribución respectiva en (14) y (16) es nula. Esto lleva a matrices A_{ks} del tipo banda. Sea V_r el conjunto de nodos incógnita vecinos del nodo "r", es decir, el conjunto de vértices incógnita de la red unidos a "r" por un lado de un triángulo. El "radio de V_r " se define como

$$\text{rad}(V_r) = \max_{q \in V_r} |q - r| \quad (17)$$

r : número asignado al nodo cuya ecuación se considera.

q : números asignados a los nodos de V_r .

El semiancho de banda en la ecuación "r" está entonces dado por $\text{rad}(V_r) + 1$ y el semiancho de banda de la matriz será

$$\max_{r=1, \dots, n} \{ \text{rad}(V_r) \} + 1 \quad (18)$$

Esto se ve con claridad en (13), puesto que $A_{kr} = a(x_k^h, x_r^h)$ es cero salvo que $k, r \in V_k \cap V_r$.

De allí la necesidad de enumerar correctamente los nodos a efectos de disminuir el ancho de banda.

La matriz A_{ks} tiene dominio diagonal si ningún ángulo de la triangulación excede 90° ([3] p.78)

Con fines computacionales la expresión (16) puede reorganizarse en forma matricial, elemento a elemento. La "contribución" del triángulo "e" será del tipo

$$A^e u^e + B^e \quad ; \quad u^e = \begin{pmatrix} u_i^h \\ u_j^h \\ u_m^h \end{pmatrix} \quad (19)$$

si "e" no contiene nodos con datos de Dirichlet. En caso contrario la sub-matriz A^e será de un orden igual a tres, menos el número de nodos "de Dirichlet". Se verifica que,

$$A^e = \frac{B}{2\Delta^2} \begin{pmatrix} \beta_i \beta_i & \beta_j \beta_i & \beta_m \beta_i \\ \beta_i \beta_j & \beta_j \beta_j & \beta_m \beta_j \\ \beta_i \beta_m & \beta_j \beta_m & \beta_m \beta_m \end{pmatrix} + \frac{B}{2\Delta^2} \begin{pmatrix} \delta_i \delta_i & \delta_j \delta_i & \delta_m \delta_i \\ \delta_i \delta_j & \delta_j \delta_j & \delta_m \delta_j \\ \delta_i \delta_m & \delta_j \delta_m & \delta_m \delta_m \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$B^e = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} \alpha_i q & + \beta_i q_x & + \delta_i q_y \\ \alpha_j q & + \beta_j q_x & + \delta_j q_y \\ \alpha_m q & + \beta_m q_x & + \delta_m q_y \end{pmatrix} \quad (21)$$

$$B = \iint_e b(x,y) dx dy ; q = \iint_e q(x,y) dx dy ; q_x = \iint_e x q(x,y) dx dy ; q_y = \iint_e y q(x,y) dx dy \quad (22)$$

con A^e simétrica.

Falta tener en cuenta la suma sobre los $\lambda' \subset \Gamma'$ de (16). Esta podría evaluarse aparte, pero conviene considerarla también elemento a elemento. Si el triángulo "e" tiene al menos dos nodos en la frontera Γ y al menos uno en Γ' (ver nota página 1), es decir al menos un lado $\lambda' \subset \Gamma'$, dicho triángulo contribuye a la suma en λ' . Si i, j son los nodos de λ' , ambos pueden pertenecer a Γ' o bien, por ejemplo, "i" a Γ' y "j" a Γ^* . Cada lado $\lambda' \subset \Gamma'$ de "e" contribuirá entonces al vector general de términos independientes, respectivamente con los subvectores:

$$-2 \cdot \begin{pmatrix} \beta_i \\ \beta_j \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad -2 \cdot \begin{pmatrix} \beta_i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$P_i = \int_{\gamma(i)=0}^{\gamma(i)=\ell} b(x(s), y(s)) \gamma(x(s), y(s)) \frac{1}{\ell} ds ; P_j = \int_{\gamma(i)=0}^{\gamma(j)=\ell} b(x(s), y(s)) \gamma(x(s), y(s)) \frac{1}{\ell} ds ; \ell: \text{long. de } \lambda' \quad (24)$$

pues de (15) se deduce que $\partial u_r^h / \partial u_r^h$ varía linealmente en λ' tomando el valor 1 en el extremo "r" y cero en el otro extremo de λ' ($r = i, j$).

Aún en el caso en que las integraciones (22) y (24) puedan hacerse exactamente, la posibilidad de realizarlas en forma aproximada bien puede acarrear ventajas [3]. Ello introduce en el cálculo de los coeficientes de la matriz, errores que compensan a otros propios del método. En tal sentido, aquí se procederá a reemplazar las funciones b, g, δ, γ por sus interpoladas $b_h, g_h, \delta_h, \gamma_h$, es decir las poliédricas que coinciden con b y g en los nodos de la triangulación o las correspondientes poligonales en lo que se refiere a δ y γ , para luego efectuar (22) y (24). Si b_h y g_h se escriben mediante la expresión (15) con $b_i^h, g_i^h, b_j^h, g_j^h, b_m^h, g_m^h$, (valores nodales de b y g) en lugar de u_i^h, u_j^h, u_m^h y si se utilizan para el cálculo las coordenadas X, Y paralelas respectivamente a x, y , cuyo origen es el centroide del elemento "e" en consideración,

$$X = x - x_e \quad Y = y - y_e \quad (25)$$

$$x_e = \frac{1}{3}(x_i + x_j + x_m) ; y_e = \frac{1}{3}(y_i + y_j + y_m) \quad (26)$$

Se obtiene

$$B = \frac{\Delta}{3} (b_i^h + b_j^h + b_m^h) \quad (27)$$

$$g = \frac{\Delta}{3} (g_i^h + g_j^h + g_m^h) \quad (28)$$

$$g_x = x_e g + \frac{1}{24} \{ (B_i g_i^h + B_j g_j^h + B_m g_m^h) (X_i^2 + X_j^2 + X_m^2) + (T_i g_i^h + T_j g_j^h + T_m g_m^h) (X_i Y_i + X_j Y_j + X_m Y_m) \} \quad (29)$$

$$g_j = y_e g + \frac{1}{24} \{ (B_i g_i^h + B_j g_j^h + B_m g_m^h) (X_i Y_i + X_j Y_j + X_m Y_m) + (F_i g_i^h + F_j g_j^h + F_m g_m^h) (Y_i^2 + Y_j^2 + Y_m^2) \} \quad (30)$$

$$X_j Y_m - X_m Y_j = \frac{2\Delta}{3} ; B_i = Y_i - Y_m ; F_i = X_m - X_j \quad (31)$$

Se procede ahora análogamente con las (24). Si el lado genérico λ' tiene longitud l y los extremos i, j , las integrales toman la forma

$$\begin{aligned} I_i &= l \left[\frac{(b_i^h - b_j^h)(\gamma_i^h - \gamma_j^h)}{4} + \frac{(b_i^h - b_j^h)\gamma_j^h + b_j^h(\gamma_i^h - \gamma_j^h)}{3} + \frac{b_j^h \gamma_j^h}{2} \right] \\ I_j &= l \left[\frac{(b_j^h - b_i^h)(\gamma_j^h - \gamma_i^h)}{4} + \frac{(b_j^h - b_i^h)\gamma_i^h + b_i^h(\gamma_j^h - \gamma_i^h)}{3} + \frac{b_i^h \gamma_i^h}{2} \right] \end{aligned} \quad (32)$$

$b_i^h, b_j^h, \gamma_i^h, \gamma_j^h$: valores nodales en i, j de b y γ .

Se analizará por último la convergencia de algoritmo. Debe tenerse presente la existencia de errores adicionales a los propios del método, algunos ya comentados: a) Integración no exacta de coeficientes variables, b) Aproximación de un dominio general con frontera curva, por otro de frontera poligonal y aproximación de los datos de Dirichlet por su interpolada c) Errores de redondeo.

De no existir estos errores y en el caso en que la solución sea adecuadamente regular, el algoritmo es convergente en orden h^2 en la norma L^2 y en orden h en norma $H^1(\Omega)$, o norma de la energía ($|||u|||^2 = a(u, u)$), gracias a la coercitividad de $a(u, v)$ siempre y cuando en el proceso de refinamiento de la retícula todo ángulo se mantenga acotado inferiormente por una constante estrictamente positiva (ver [3], p.105, Sec.3.4 y p.138).

Según STRANG y FIX[3] la acción de los tres errores adicionales es, en resumen, la siguiente:

a) Tienen un efecto favorable de compensación de errores "de rigidez", propios del método. La convergencia subsiste si las derivadas primeras de la función de aproximación u_h son integradas exactamente por el algoritmo de integración numérica usado.

Esto permitiría en el caso presente, aún procedimientos de integración que tomen valores intermedios constantes de la función dentro de cada triángulo (pgs. 98,99,109 y Sec. 4.3)

- b) Introduce errores $\mathcal{O}(h)$ en la primera derivada de la solución en la proximidad de la frontera que decaen rápidamente en el interior de Ω . El error medio es $\mathcal{O}(h^{3/2})$, y es absorbido por el error propio del algoritmo general. (p. 108 y Sec.4.4)
- c) Para problemas como el (1), no tiene importancia en las triangulaciones usuales; no se hace necesaria entonces la doble precisión. (p.110).

Si alguno o varios de los datos no es regular, y es por ejemplo continuo por trozos, el tratamiento teórico adecuado es el de "interfaces" (Ver [3] p.260).

3. PROGRAMA DE CALCULO

La lógica general es la de un programa corriente de elementos finitos, en la que se considera la contribución triángulo por triángulo a la matriz de rigidez y al vector términos independientes. Esta rutina, junto con la de resolución del sistema de ecuaciones (método de eliminación de Gauss), constituyen sus partes más importantes.

La versión actual del programa permite una red de 700 triángulos y 500 nodos como máximo, capacidad que pueda ser optimizada sin dificultad mayor. La red debe estar construida de manera tal de que ningún vértice de triángulo caiga en la mitad de un lado de otro triángulo. Además, por un problema de sencillez interna, no debe haber ningún triángulo con sus tres vértices en la frontera Γ . A efectos del cálculo, el dominio Ω puede ser múltiplemente conexo.

Los nodos que corresponden a incógnitas propiamente dichas del problema, es decir todos aquellos que no pertenecen a la frontera de Dirichlet Γ^* , se enumeran de 1 a n ; y los de Γ^* de $n+1$

a $n+m$. Una enumeración adecuada de los nodos conduce a anchos de banda reducidos.

Es aconsejable por problemas de error, que los ángulos de la triangulación no superen los 90° ([3], p.78).

El tiempo de máquina empleado para resolver un problema de 255 nodos y 512 triángulos es del orden de los 110 segundos. La memoria ocupada es de 108Kb, y no se utilizan archivos adicionales. Se trabaja siempre en precisión simple.

Los resultados que se extraen son: el valor de la función incógnita ϕ en correspondencia con cada nodo no perteneciente a la frontera de Dirichlet Γ^* , y los valores de $b \frac{\partial \phi}{\partial x}$ y $b \frac{\partial \phi}{\partial y}$ que presentan interés físico; en correspondencia con los centroides de cada triángulo. Se dan también las coordenadas x e y de los puntos considerados. Esta información se presenta en forma de tablas.

Se puede obtener además un gráfico de la función ϕ por curvas de nivel realizado con la impresora. Se ha previsto como opción la graficación del campo $b \cdot \text{grad.} \phi$ mediante "plotter"

De ser requeridos como control, se imprimen antes de la ejecución todos los datos del problema.

Los valores de $b(x,y)$ deben darse en los $m+n$ puntos nodales de Γ^* ; y los de γ , dato de Neumann, en los puntos nodales de Γ' , incluidos los puntos colindantes con Γ^* .

4. PRUEBAS EFECTUADAS Y EJEMPLOS RESUELTOS

Además de las triviales, se diseñaron tres pruebas con solución exacta conocida a efectos de control de los distintos aspectos del programa: funcionamiento general, coeficiente b variable, valores de " $g(x,y)$ ", " δ " y " γ " no idénticamente nulos. Se agregan también dos ejemplos de aplicación resueltos.

4.1. Región cuadrada con solución lineal. Ecuación de Laplace

El objetivo de esta prueba es controlar el armado general del sistema de ecuaciones, ya que en ella se presentan los tipos fundamentales de triángulos (interior, sobre frontera de Dirichlet

y/o de Neumann), resolución del mismo y funcionamiento global del programa.

La región cuadrada de cálculo se extiende en x e y de 0 a N . Consta de 512 triángulos, 289 puntos nodales y 255 nodos incógnita. La frontera Γ^* está constituida por los lados horizontales del cuadrado y la Γ' por los verticales.

A continuación se consigna el resto de la información relativa a la prueba:

$$N = 16$$

$$\text{Ecuación: } b \equiv 1, \quad g \equiv 0$$

$$\text{Dato de Dirichlet: } \phi(x, 0) = 0 \quad ; \quad \phi(x, N) = N$$

$$\text{Dato de Neumann: } \gamma \equiv 0$$

$$\text{Solución exacta: } \phi(x, y) = y \quad ; \quad b\phi_x = 0 \quad ; \quad b\phi_y = 1$$

$$\text{Error en el cálculo de } \phi : 10^{-4} \text{ (relativo)}$$

$$\text{" " " " " } b\phi_x : 10^{-5} \text{ (absoluto)}$$

$$\text{" " " " " } b\phi_y : 10^{-4} \text{ (relativo)}$$

$$\text{Tiempo de ejecución: 97 seg.}$$

4.2. Región cuadrada. b variable

Se trata aquí de probar el funcionamiento del programa para el caso $b(x, y)$ variable usando la misma triangulación que en la prueba anterior con la salvedad de que ahora la región de cálculo se extiende en y de $-N/2$ a $N/2$. También se han mantenido las fronteras de Dirichlet y Neumann.

$$N = 16$$

$$\text{Ecuación: } b(x, y) = \left[\frac{6-N}{3/2 N^2} y^2 - \frac{N}{6} \right]^{-1} \quad ; \quad g \equiv 0$$

$$\text{Dato de Dirichlet: } \phi(x, -N/2) = N/2 \quad ; \quad \phi(x, N/2) = -N/2$$

$$\text{Dato de Neumann: } \gamma \equiv 0$$

$$\text{Solución exacta: } \phi(x, y) = - \left(\frac{6-N}{4,5 N^2} y^3 + \frac{N}{6} y \right) \frac{18}{6+2N}$$

$$b\phi_x = 0 \quad ; \quad b\phi_y = - \frac{18}{6+2N}$$

$$\text{Error en el cálculo de } \phi : 0,6 \%$$

$$\text{Error en el cálculo de } b\phi_x : 10^{-3} \text{ (absoluto)}$$

Error en el cálculo de $b\phi_y = 4 \%$

Tiempo de ejecución: 110 seg.

El error en $b\phi_x$ y $b\phi_y$ es debido a la forma cruda en que se realiza el cálculo de gradiente, forma propia del método.

4.3. Región cuadrada. Ecuación de Poisson con dato de Neumann distinto de cero.

Con una red exactamente igual a la de la prueba precedente, se ensaya ahora un segundo miembro no nulo y una condición de Neumann distinta de cero. Se mantienen también aquí las mismas fronteras de Dirichlet y Neumann.

$N = 16$

Ecuación: $b \equiv 1$, $g(x,y) = 6x$

Dato de Dirichlet: $\phi(x, N/2) = \phi(x, N/2) = x^3$

Dato de Neumann: $\frac{\partial \phi}{\partial n}(0,y) = 0$; $\frac{\partial \phi}{\partial n}(N,y) = -3N^2$

Solución exacta: $\phi(x,y) = x^3$; $b\phi_x = 3x^2$; $b\phi_y = 0$

Error en el cálculo de ϕ : 0,2 %

Error en el cálculo de $b\phi_x$: 6 %

Error en el cálculo de $b\phi_y$: ~ 1 (absoluto)

Tiempo de ejecución: 112 seg.

Se observa el mismo efecto de error comentado en la prueba previa.

4.4. Primer ejemplo de aplicación: campo eléctrico en un deflector de partículas cargadas.

Se trata de obtener una distribución de potencial y campo eléctrico, a efectos de estudiar luego la balística de

partículas cargadas incidentes. Se describirá aquí solamente el primer aspecto.

El dispositivo presenta en esencia una geometría plana y simétrica respecto del eje "y" (ver figura 1). La región Ω en donde se requiere la solución (solamente la mitad contenida en el primer cuadrante por obvias razones de simetría), es rectangular y múltiplemente conexa, ya que en su interior existe una placa deflectora cuyo potencial está prescripto en -3500 volt. La frontera exterior posee potencial nulo, y como la otra placa simétrica debe tener un potencial de +3500 volt, el eje de simetría (eje "y") debe estar también a potencial cero.

En definitiva, se dan solo datos de Dirichlet en la frontera exterior de Ω ($\delta = 0$) y en la interior ($\delta = -3500$). El coeficiente b es idénticamente igual a 1 y g es nulo.

La máxima densificación de la red (de 732 triángulos, 288 nodos incógnita y 125 nodos de Dirichlet) se encuentra entre las placa y sobre el eje de simetría. Fuera de ellas, la triangulación es deliberadamente gruesa.

Los resultados se exhiben en la figura 2, mediante un gráfico de los equipotenciales realizado con la impresora. Estas líneas deben ser rectas dentro de los triángulos hecho que se manifiesta en la zona de triangulación gruesa.

El tiempo de máquina fué de 130 seg. (no incluye compilación, ni tiempo empleado en la confección del gráfico).

4.5 Segundo ejemplo de aplicación: estudio no lineal de la distribución de temperaturas en una sección transversal de una barra combustible de reactor nuclear.

Aquí se trata de obtener la distribución de temperaturas en un plano perpendicular al eje de una barra combustible del reactor de la Central Nuclear Atucha (C.N.E.A.). Como los coeficientes de conducción del calor son funciones de la temperatura, el problema es no lineal.

Una vaina de reactor es un tubo cilíndrico fabricado con una aleación especial, de aproximadamente 1 cm de diámetro y unos 6 m de longitud, en el presente caso. Contiene en su interior las pastillas de óxido de uranio, objeto de la reacción nuclear.

Al conjunto vaina-pastillas se lo denomina "barra combustible". Con motivo de dicha reacción se genera calor en la pastilla, y este es transmitido por conducción al exterior atravesando la vaina. Tales barras están agrupadas en haces de 36 elementos. Cada haz está armado con separadores equidistantes. A cada vaina se le sueldan tres patines a 120° en correspondencia con los separadores, los que rompen la simetría cilíndrica del problema de distribución de temperaturas en un plano que allí sea perpendicular al eje.

No obstante el problema presenta tres ejes de simetría, por lo que es solamente necesario analizar una cuña de 60° de apertura angular (Ver figura 3).

Entre la pastilla y la vaina existe una interfaz resistente al paso del calor cuyo comportamiento fue necesario simular.

La temperatura exterior de la vaina se supone constante e igual a 324°C .

La generación de calor por unidad de volumen es desde luego solo distinta de cero en la pastilla donde se supuso que obedece a una ley del tipo exponencial del radio al cuadrado

La región Ω de cálculo se muestra en la figura 3, con su frontera Γ . La frontera Γ' está constituida por los ejes de simetría ya que el flujo calórico que los atraviesa perpendicularmente debe ser cero allí. Como dicho flujo es el producto del coeficiente de conducción b por el gradiente de la temperatura ϕ con signo cambiado la condición antes citada resulta ser una condición usual de Neumann.

La frontera Γ^* es simplemente la que corresponde a la cara exterior de la vaina, ya que allí debe prefijarse la temperatura igual a 324°C , dato de Dirichlet. Se trata entonces de un problema mixto.

En definitiva, los datos son:

Generación de calor

$$g = \begin{cases} 0 & : \text{ en la vaina e interfase} \\ A e^B r^2 & : \text{ en la pastilla.} \end{cases}$$

A y B: constantes

r : radio

coeficientes de conducción

$$-b(\phi) = \begin{cases} a + b \phi & : \text{ en la vaina} \\ \frac{1}{c + d (\phi + 273)} + e (\phi + 273)^3 & : \text{ en la pastilla} \end{cases}$$

a,b,c,d,e, : constantes

dato de Dirichlet: $\delta = 324$ en Γ^*

dato de Neumann: $\gamma = 0$ en Γ'

La red de triángulos consistió en 776 elementos 437 puntos nodales y 394 nodos-incógnita.

Parte de los resultados se exhibe en la figura 4. Consiste en un mapa de líneas isotermas realizado con la impresora.

Fueron solo necesarias siete iteraciones para que los ajustes en el coeficiente b estuviesen en todo punto dentro del 1 %. (Para detalles ver Apéndice 1). Cada iteración llevó unos 40 seg. de máquina.

BIBLIOGRAFIA

- [1] FORSYTHE-WASOV : "Finite difference methods for partial differential equations" (1960).
- [2] BASOMBRIIO, F.: "Notas sobre métodos elementales de aproximación a problemas elípticos" . Laboratorio de Hidráulica Aplicada. INCYTH (1975).
- [3] STRANG-FIX : "An analysis of the finite element method" (1973).
- [4] TEMAM : "Analyse numérique" (1970)
- [5] ZIENKIEWICZ : "The finite element method" (1971).

APENDICE 1 : Programa "NOLICUARM"

Esta variante del programa "CUARM" (*) previamente descrito, incluye los cambios mínimos necesarios como para que puedan además ser resueltos problemas no lineales en los cuales el coeficiente "b" es también función de " ϕ ".

El método iterativo es el de más simple concepción. Se resuelve primero un problema con un valor de "b" adecuado en algún sentido. Obtenida entonces la solución " ϕ ", se recalcula "b" y se reinicia el proceso, y así sucesivamente. Las iteraciones concluyen cuando el reajuste porcentual de "b" (en valor absoluto) no excede en ningún punto nodal un valor " ϵ " máximo prefijado.

Se adoptó tal criterio con base física. El coeficiente "b" es un dato que suele obtenerse empíricamente o sea con un cierto margen de error. Se admite que el problema es estable, en el sentido que pequeñas perturbaciones en "b" originarán pequeñas perturbaciones en " ϕ ". Consecuentemente se entiende que no merece la pena proseguir el proceso iterativo cuando los ajustes porcentuales en "b" sean menores que una cierta cota máxima, relacionada con el error propio de "b".

En problemas usuales se requieren pocas iteraciones (5 a 7) para reajustes menores del 1% en "b". Cada iteración lleva unos 40 seg. de máquina (Ver segundo ejemplo en punto 4.5).

(*) Así se ha denominado al programa que responde a los lineamientos antes descritos

APENDICE 2: Programa "AXICUARM"

Esta segunda variante del programa "CUARM" permite encarar problemas con simetría de revolución.

Los cambios respecto de la descripción general plana que antecede son mínimos y los enumeramos sucintamente:

a) Sistema de coordenadas de referencia : r, z

b) Problema a resolver

$$(b\phi_r)_r + (b\phi_z)_z + \frac{b}{r}\phi_r = g(r, z) \quad (1')$$

$$\phi|_{\Gamma^*} = \delta \quad ; \quad b\frac{\partial\phi}{\partial n}|_{\Gamma^*} = \gamma$$

NOTA: Por comodidad, ahora en la condición de Neumann se ha tomado un " γ " que sería el correspondiente a (1) en el problema plano, dividido por "b". En consecuencia se modifica el segundo término del funcional que sigue.

c) Funcional

$$J(v) = \iint_{\Omega} [b(v_r^2 + v_z^2) + 2gv] r dr dz + 2 \int_{\Gamma} \gamma v r ds \quad (3')$$

d) Polinomio de interpolación dentro de cada triángulo

$$u_h(r, z) = \frac{1}{2\Delta} [(\alpha_i + \beta_i r + \gamma_i z) u_i^h + (\alpha_j + \beta_j r + \gamma_j z) u_j^h + (\alpha_m + \beta_m r + \gamma_m z) u_m^h] \quad ; \quad r, z \in e \quad (15')$$

Nota: ver [5] Cap.5

e) Expresiones finales de cálculo

Nota: Por simplicidad y practicidad se supone aquí que "b" y "g" toman valores constantes dentro de cada elemento:

b_e^h, g_e^h . De la misma forma γ toma el valor constante γ_λ^h , en cada lado λ' de la frontera Γ' . En cambio δ continúa tomando valores nodales δ_i^h $i = n+1, \dots, n+m$

$$\mathcal{B} = b_e^h \iint_e r dr dz \quad ; \quad \mathcal{G} = g_e^h \iint_e r dr dz \quad (22')$$

$$\mathcal{G}_r = g_e^h \iint_e r^2 dr dz \quad ; \quad \mathcal{G}_z = g_e^h \iint_e z r dr dz$$

$$R = r - r_e \quad Z = z - z_e \quad (25')$$

$$r_e = \frac{1}{3} (r_i + r_j + r_m) \quad z_e = \frac{1}{3} (z_i + z_j + z_m) \quad (26')$$

$$\mathcal{B} = \Delta b_e^h r_e \quad (27')$$

$$\mathcal{G} = \Delta g_e^h r_e \quad (28')$$

$$\mathcal{G}_r = \frac{\Delta g_e^h}{12} (R_i^2 + R_j^2 + R_m^2) + \Delta g_e^h r_e^2 \quad (29')$$

$$\mathcal{G}_z = \frac{\Delta g_e^h}{12} (R_i Z_i + R_j Z_j + R_m Z_m) + \Delta g_e^h r_e z_e \quad (30')$$

$$\mathcal{F}_i = \frac{\gamma_i^h \ell}{6} (2r_i + r_j) \quad ; \quad \mathcal{F}_j = \frac{\gamma_j^h \ell}{6} (2r_j + r_i) \quad (32')$$

Es clara la generalización de este programa al caso no lineal siguiendo las pautas del Apéndice 1.

Se efectuaron pruebas equivalentes a las del programa "CUARM".

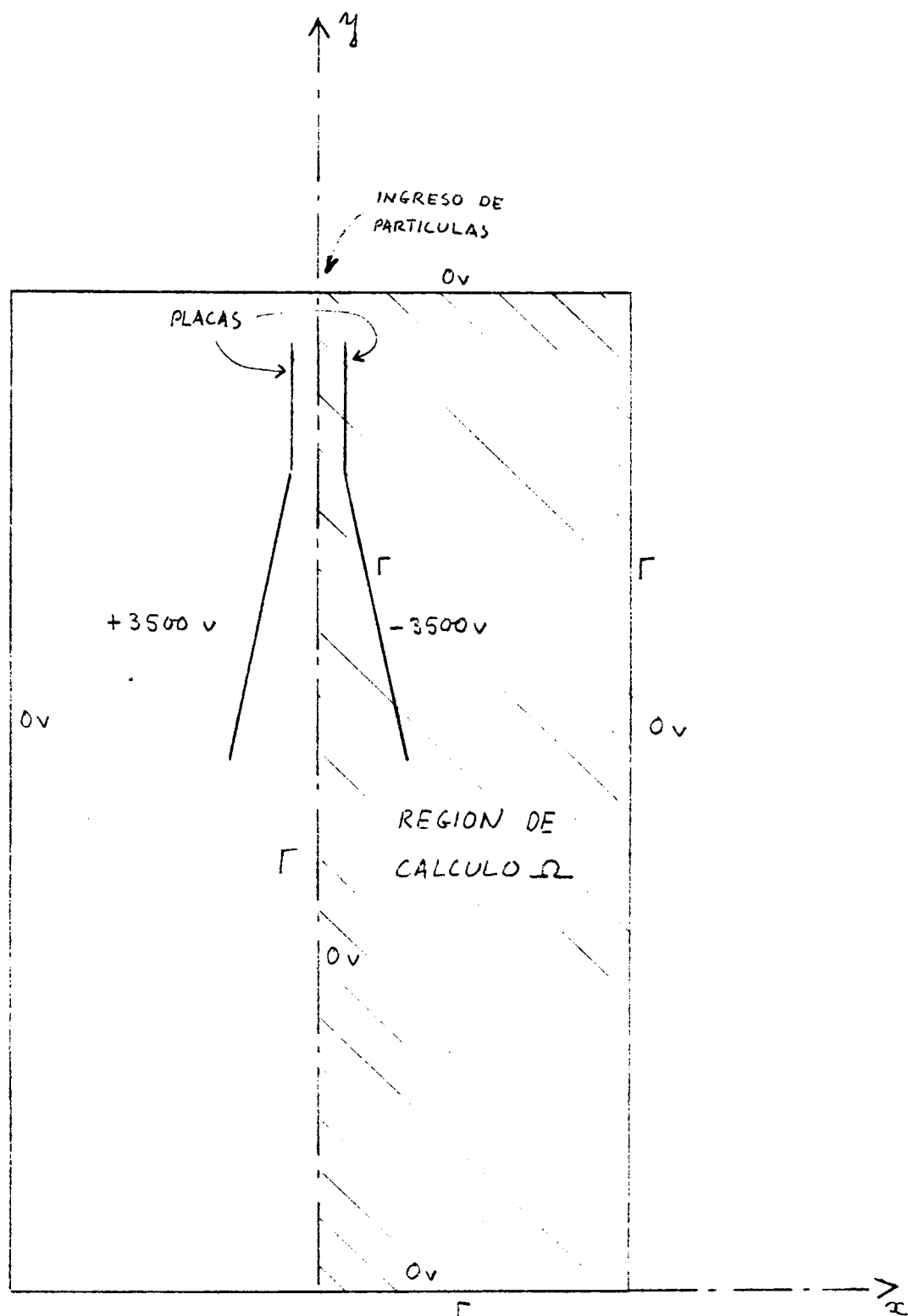


FIGURA 1

Deflector de partículas cargadas

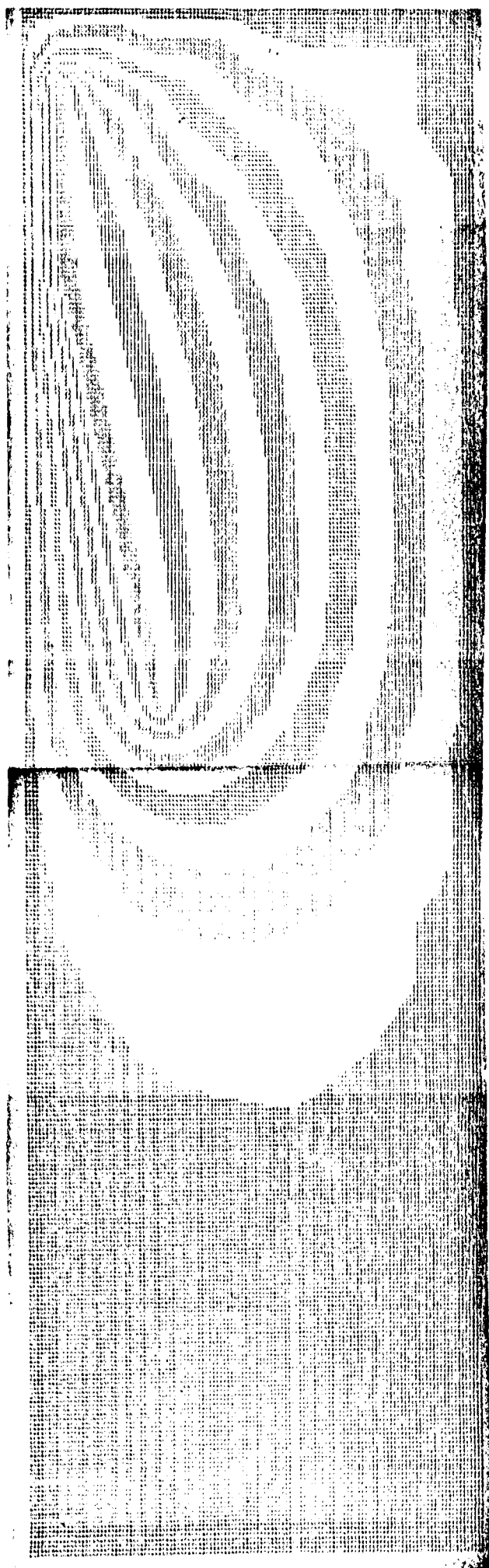


FIGURA 2

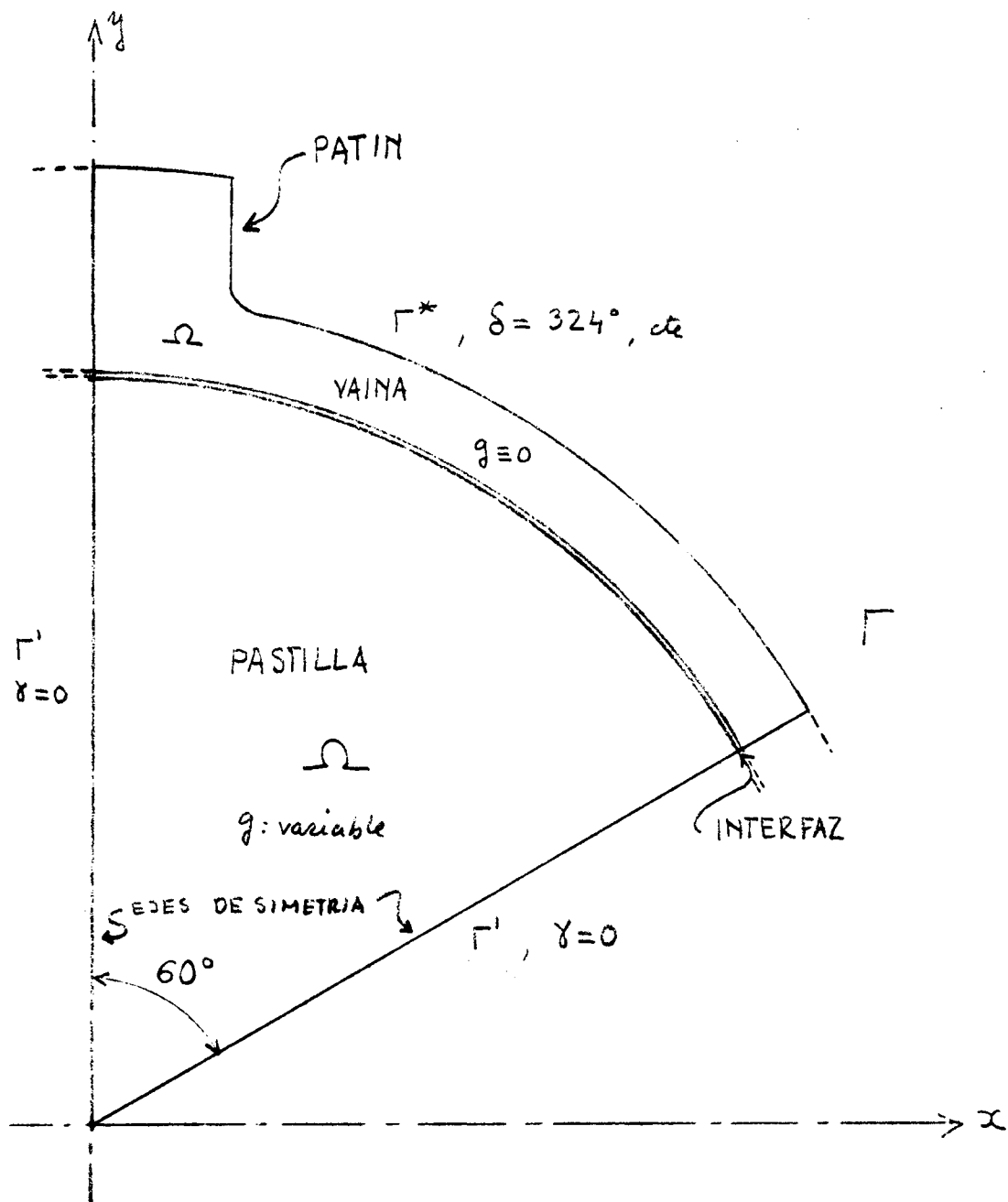


FIGURA 3

Corte transversal de una barra
combustible de reactor nuclear
(sexta parte)

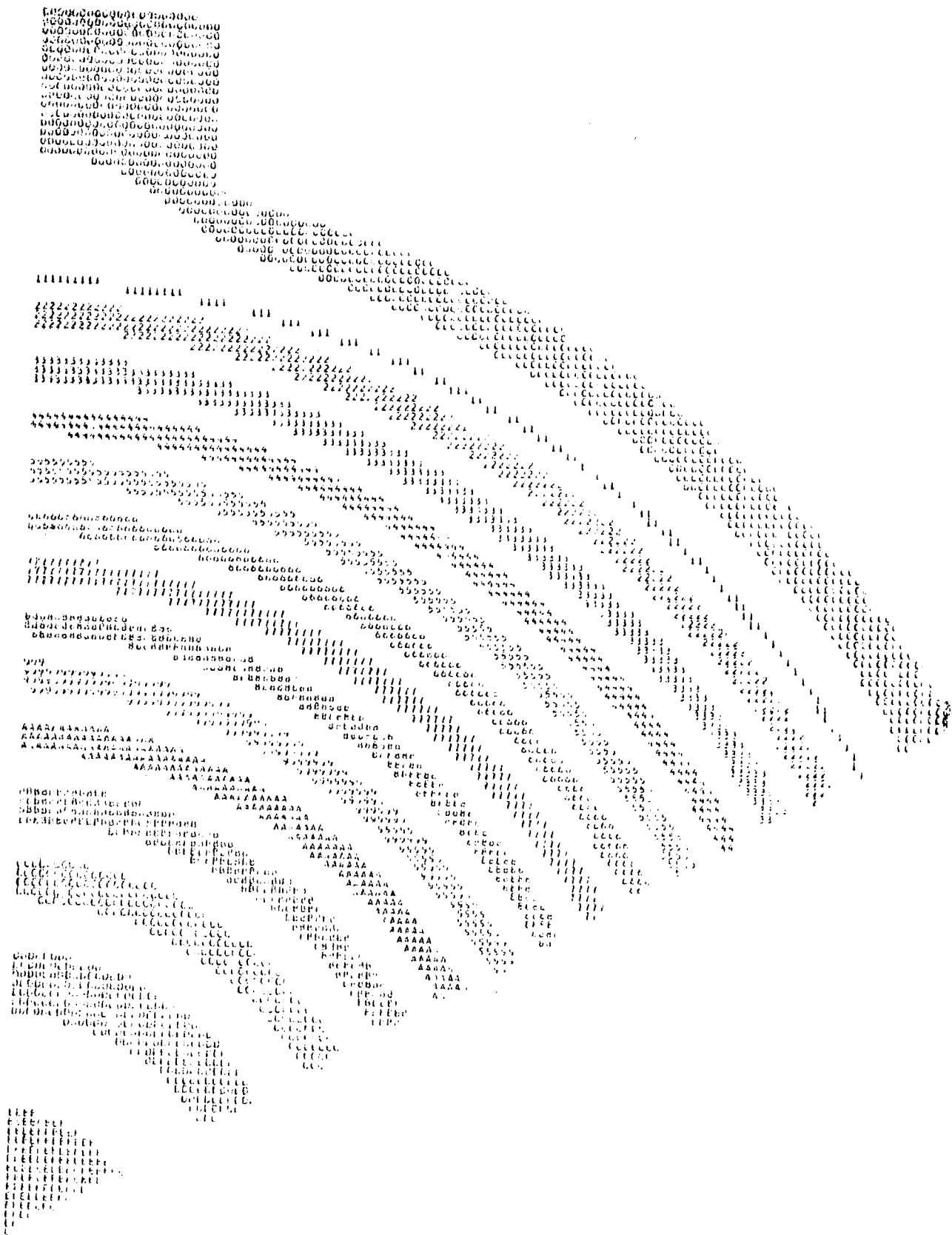


FIGURA 4

