

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO	AÑO
1	1978

00.78.22

CNEA-NT. 29 /78

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

ALGORITMO GENERAL PARA LA RESOLUCION DE LA ECUACION DIFERENCIAL
PARCIAL DE SEGUNDO ORDEN POR EL METODO DE GALERKIN CON ELEMENTOS FINITOS
(PROGRAMA ANISEF)

MARIA E. OLIVETO* y G. SANCHEZ SARMIENTO**

* Instituto Balseiro, Universidad Nac. de Cuyo
8400 - San Carlos de Bariloche (Río Negro)

** Centro Atómico Bariloche, C.N.E.A.
8400 - San Carlos de Bariloche (Río Negro)

BUENOS AIRES

Agosto de 1978

RESUMEN

Se expone en el presente trabajo la resolución de la ecuación diferencial general de segundo orden a derivadas parciales con dos variables, con coeficientes variables, en un recinto de geometría arbitraria pudiendo ser múltiplemente conexo, con condiciones de contorno libres y forzadas. Se ha empleado el método de elementos finitos con una formulación residual del tipo nodal, con elementos triangulares trinodales y polinomios de primer grado para la variación de la incógnita dentro de ellos.

Se describen asimismo las características fundamentales del Programa ANISEF, implementado en FORTRAN IV a tal efecto, y las especificaciones para su uso.

Por último se presentan algunos problemas resueltos, de aplicación en oceanografía y en conducción térmica con frontera móvil.

A. GENERALIDADES

Se expone en el presente trabajo un algoritmo general para la resolución numérica, por el método de Galerkin con elementos finitos, de la ecuación diferencial de segundo orden siguiente:

$$(b_1\phi_x)_x + (b_2\phi_y)_y + a_1\phi_x + a_2\phi_y = g \quad (1)$$

donde b_1 , b_2 , a_1 , a_2 y g son funciones regulares conocidas de x e y , y la función incógnita $\phi(x,y)$ está definida en un dominio regular $\Omega \in R^2$ arbitrario, sujeta a las siguientes condiciones de contorno en su frontera Γ :

$$\phi \Big|_{\Gamma^*} = \delta \quad (\text{Condición "forzada" o de Dirichlet sobre la porción } \Gamma^* \text{ de } \Gamma) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} \Big|_{\Gamma'} = \gamma \quad (\text{Condición "libre" o de Neumann sobre la porción } \Gamma' \text{ de } \Gamma)$$

En la segunda de las (2) n es la normal interior a Ω , y Γ^* y Γ' son tales que:

$$\begin{aligned} \Gamma^* \cap \Gamma' &= \Gamma \\ \Gamma^* \cup \Gamma' &= \phi \end{aligned}$$

(Γ^* es un conjunto cerrado), y además, δ y γ pueden ser variables sobre ambas porciones de la frontera.

B. RESOLUCION POR EL METODO DE GALERKIN CON ELEMENTOS FINITOS

La ecuación (1) equivale a imponer a $\phi(x,y)$ la condición:

$$\iint_{\Omega} \left| (b_1\phi_x)_x + (b_2\phi_y)_y + a_1\phi_x + a_2\phi_y - g \right| v dx dy = 0 \quad (3)$$

para todas las funciones v definidas en Ω , llamadas "funciones de ensayo", que pertenecen a un cierto espacio vectorial V , al cual pertenece también $\phi^h(x,y)$.

A los propósitos de aplicar en (3) el esquema de aproximación que expondremos seguidamente, mediante el teorema de la divergencia y de las condiciones de contorno (2) se puede re

ducir la (3) a la forma:

$$a(\phi, v) = L(v) \quad \forall v \in V \quad (4)$$

donde

$$a(\phi, v) = \iint_{\Omega} (b_1 \phi_x v_x + b_2 \phi_y v_y - a_1 v \phi_x - a_2 v \phi_y) dx dy \quad (4')$$

y

$$L(v) = - \iint_{\Omega} g v dx dy - \int_{\Gamma} \gamma v ds \quad (4'')$$

Supondremos en lo que sigue, que la ecuación (4) tiene una solución ϕ que satisface las condiciones (2), tal que ϕ , ϕ_x y ϕ_y son continuas y de cuadrado integrable en Ω . El método de aproximación que emplearemos, ampliamente conocido [1-2], consiste en aplicar la condición (4) a funciones v^h pertenecientes a subespacios M_h de V de dimensión finita, y encontrar una función $\phi_h(x, y)$ que también pertenezca a M_h y cumpla:

$$a(\phi_h, v^h) = L(v^h) \quad \forall v^h \in M_h \quad (5)$$

Dividiendo el recinto Ω en un número finito de subrecintos de forma triangular arbitraria, llamados "elementos" (cada uno de ellos definidos por sus tres vértices, llamados "nodos"), tomaremos como subespacios M_h a los conjuntos de funciones que varían linealmente dentro de cada elemento, y que se anulan sobre la porción de frontera Γ^* . Obsérvese que nos estamos restringiendo al caso en que δ en (2) es idénticamente nulo. Es sabido [3] que esto no limita la generalidad siempre y cuando δ sea lo suficientemente adecuado como para que exista una función, con las condiciones enunciadas para ϕ , que restringida a Γ^* coincida con δ . Esta reducción a un problema homogéneo se hace por simplicidad técnica, y como se verá, luego incorporaremos en las ecuaciones valores cualesquiera de δ .

Obsérvese también que si la frontera Γ posee porciones curvas, esta subdivisión del recinto Ω trae aparejado un error que proviene de aproximar dichas curvas por líneas quebradas de tramos rectos. Si el número de elementos finitos es lo suficientemente grande, esta aproximación no tiene relevancia práctica.

Tomaremos como funciones "base" en M_h , al conjunto de funciones $\chi_k^h(x,y)$, una para cada uno de los nodos, que valen 1 sobre el respectivo nodo k , varían como un polinomio de primer grado en x e y en todos los elementos adyacentes a k , hasta tomar el valor 0 en los demás nodos y en el resto de los elementos valen cero.

Sea M el número total de nodos y $M-N$ los que están sobre la frontera Γ^* .

Ennumeraremos primeramente los N nodos interiores y, posteriormente, los $M-N$ restantes. Suponiendo una variación lineal de ϕ en los lados que definen estos últimos, la aproximación $\phi^h(x,y)$ de la función incógnita $\phi(x,y)$ puede escribirse entonces como:

$$\phi^h(x,y) = \sum_{k=1}^N \phi_k^h \chi_k^h(x,y) - R(x,y) \quad (6)$$

$$R(x,y) = - \sum_{k=N+1}^M \delta_k \chi_k^h(x,y) \quad (6')$$

donde los ϕ_k^h son los valores de ϕ^h en cada uno de los nodos interiores, y los δ_k los valores impuestos de ϕ sobre los nodos en Γ^* .

Reemplazando las (6) en la (5) se tiene:

$$\iint_{\Omega} \left[\left(b_1 \frac{\partial \chi_r^h}{\partial x} - a_1 \chi_r^h \right) \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{k=1}^N \phi_k^h \chi_k^h + R \right) + \right. \quad (7)$$

$$\left. + \left(b_2 \frac{\partial \chi_r^h}{\partial y} - a_2 \chi_r^h \right) \frac{\partial}{\partial y} \left(\sum_{k=1}^N \phi_k^h \chi_k^h + R \right) \right] dx dy =$$

$$= - \iint_{\Omega} g \chi_r^h dx dy - \int_{\Gamma^*} \gamma \chi_r^h ds \quad r=1,2,\dots,N$$

con lo cual la ecuación diferencial (1) con las condiciones (2) ha quedado aproximada por un sistema lineal de N ecuaciones en las N incógnitas ϕ_r^h . Este puede escribirse en notación matricial:

$$\mathbb{K} \underline{\phi}^h = \underline{F} \quad (8)$$

con:

$$\underline{\phi}^h = (\phi_1^h, \phi_2^h, \dots, \phi_N^h)^T \quad (9)$$

$$\underline{F} = (F_1, F_2, \dots, F_N)^T \quad (10)$$

$$y \quad \mathbf{K} = (K_{rk}) \quad (11)$$

donde:

$$K_{rk} = \iint_{\Omega} \left[\left(b_1 \frac{\partial \chi_r^h}{\partial x} - a_1 \chi_r^h \right) \frac{\partial \chi_k^h}{\partial x} + \left(b_2 \frac{\partial \chi_r^h}{\partial y} - a_2 \chi_r^h \right) \frac{\partial \chi_k^h}{\partial y} \right] dx dy$$

$$y \quad F_r = L(\chi_r^h) - a(R, \chi_r^h) \quad (12)$$

Ahora bien; a los fines de comodidad computacional, como es usual en los programas de elementos finitos, resulta útil explicitar la contribución de cada elemento al sistema lineal total (8). Para ello designaremos con i, j, m a los tres nodos que son vértices de un elemento genérico "e". De acuerdo con la definición adoptada para M_n , dentro del elemento e la función incógnita aproximada podrá expresarse en la forma:

$$\phi^h(x, y) = N_i^e(x, y) \phi_i^h + N_j^e(x, y) \phi_j^h + N_m^e(x, y) \phi_m^h \quad (13)$$

donde las $N_k^e(x, y)$ se denominan "funciones de desplazamiento". Con esta notación, podemos decir entonces que toda función base $\chi_k^h(x, y)$ toma el valor de las respectivas funciones $N_k^e(x, y)$ en cada uno de los elementos e que tienen por vértice al nodo k. Por lo tanto, si expresamos ahora cada una de las ecuaciones del sistema (8) en término de las funciones $N_k^e(x, y)$, y descomponemos las respectivas integrales (12-14) en suma de integrales sobre casa uno de los elementos e, aquellas se podrán escribir en la forma:

$$\sum_e (\delta_{ri} + \delta_{rj} + \delta_{rm}) \iiint_e \left[\left(b_1 \frac{\partial N_r^e}{\partial x} - a_1 N_r^e \right) \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x} \phi_i^h + \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \phi_j^h + \frac{\partial N_m^e}{\partial x} \phi_m^h \right) + \right. \\ \left. + \left(b_2 \frac{\partial N_r^e}{\partial y} - a_2 N_r^e \right) \left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y} \phi_i^h + \frac{\partial N_j^e}{\partial y} \phi_j^h + \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \phi_m^h \right) \right] dx dy = \quad (14)$$

$$= - \sum_e (\delta_{ri} + \delta_{rj} + \delta_{rm}) \left[\iint_e g N_r^e dx dy + \int_{\lambda'} \gamma N_r^e ds + \right. \\ \left. + \iint_e \left\{ \left(b_1 \frac{\partial N_r^e}{\partial x} - a_1 N_r^e \right) \frac{\partial R}{\partial x} + \left(b_2 \frac{\partial N_r^e}{\partial y} - a_2 N_r^e \right) \frac{\partial R}{\partial y} \right\} dx dy \right]$$

(r= 1,2,...,N)

donde las δ_{rs} son delta de Kroneker; los índices i,j,m corresponden a los vértices del elemento genérico "e"; y λ' es el lado de los elementos e que yacen sobre la porción de frontera Γ' con condiciones de Neumann. La tercera integral del segundo miembro incorpora al sistema lineal (8) las condiciones de contorno de Dirichlet sobre Γ^* , y será obviamente nula para los elementos que no tengan vértices sobre dicha porción de frontera.

La contribución de cada elemento al sistema lineal de ecuaciones (8), puede escribirse en forma matricial:

$$K_e \underline{\phi}_e^h = \underline{F}_e \quad (15)$$

donde:

$$K_e = \iint_e b_1(x,y) \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \right)^2 & \frac{\partial N_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial x} & \frac{\partial N_i}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_m}{\partial x} \\ \frac{\partial N_j}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_i}{\partial x} & \left(\frac{\partial N_j}{\partial x} \right)^2 & \frac{\partial N_j}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_m}{\partial x} \\ \frac{\partial N_m}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_i}{\partial x} & \frac{\partial N_m}{\partial x} \cdot \frac{\partial N_j}{\partial x} & \left(\frac{\partial N_m}{\partial x} \right)^2 \end{bmatrix} dx dy +$$

$$\begin{aligned}
 & + \iint_e b_2(x, y) \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial N_i}{\partial y}\right)^2 & \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} & \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \\ \frac{\partial N_j}{\partial y} \frac{\partial N_i}{\partial y} & \left(\frac{\partial N_j}{\partial y}\right)^2 & \frac{\partial N_j}{\partial y} \frac{\partial N_m}{\partial y} \\ \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_i}{\partial y} & \frac{\partial N_m}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} & \left(\frac{\partial N_m}{\partial y}\right)^2 \end{bmatrix} dx dy - \\
 & - \iint_e a_1(x, y) \begin{bmatrix} N_i \frac{\partial N_i}{\partial x} & N_i \frac{\partial N_j}{\partial x} & N_i \frac{\partial N_m}{\partial x} \\ N_j \frac{\partial N_i}{\partial x} & N_j \frac{\partial N_j}{\partial x} & N_j \frac{\partial N_m}{\partial x} \\ N_m \frac{\partial N_i}{\partial x} & N_m \frac{\partial N_j}{\partial x} & N_m \frac{\partial N_m}{\partial x} \end{bmatrix} dx dy - \\
 & - \iint_e a_2(x, y) \begin{bmatrix} N_i \frac{\partial N_i}{\partial y} & N_i \frac{\partial N_j}{\partial y} & N_i \frac{\partial N_m}{\partial y} \\ N_j \frac{\partial N_i}{\partial y} & N_j \frac{\partial N_j}{\partial y} & N_j \frac{\partial N_m}{\partial y} \\ N_m \frac{\partial N_i}{\partial y} & N_m \frac{\partial N_j}{\partial y} & N_m \frac{\partial N_m}{\partial y} \end{bmatrix} dx dy \quad (16)
 \end{aligned}$$

y además:

$$\underline{\underline{e}}^h = (\phi_i^u, \phi_j^h, \phi_m^h)^T \quad (17)$$

$$\begin{aligned}
 \underline{F}_e = & - \iint_e g(x,y) \begin{bmatrix} N_i^e \\ N_j^e \\ N_m^e \end{bmatrix} dx dy - \int_{\lambda, \gamma} \begin{bmatrix} N_i^e \\ N_j^e \\ N_m^e \end{bmatrix} ds - \\
 & - \iint_e b_1(x,y) \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_m^e}{\partial x} \end{bmatrix} \frac{\partial R}{\partial x} dx dy - \iint_e b_2(x,y) \begin{bmatrix} \frac{\partial N_i^e}{\partial y} \\ \frac{\partial N_j^e}{\partial x} \\ \frac{\partial N_m^e}{\partial y} \end{bmatrix} \frac{\partial R}{\partial y} dx dy + \\
 & + \iint_e a_1(x,y) \begin{bmatrix} N_i^e \\ N_j^e \\ N_m^e \end{bmatrix} \frac{\partial R}{\partial x} dx dy + \iint_e a_2(x,y) \begin{bmatrix} N_i^e \\ N_j^e \\ N_m^e \end{bmatrix} \frac{\partial R}{\partial y} dx dy \quad (18)
 \end{aligned}$$

Obsérvese que la formulación hecha hasta aquí prácticamente vale para cualquier otro tipo de elementos con mayor número de nodos. Sólo basta generalizar las ecuaciones para más de tres nodos en cada elemento.

Para los elementos triangulares trinodales que nos ocupa, las funciones de desplazamiento son [1]:

$$N_i^e(x,y) = \frac{1}{2\Delta} (\alpha_i + \beta_i x + \gamma_i y) \quad (19-a)$$

$$N_j^e(x,y) = \frac{1}{2\Delta} (\alpha_j + \beta_j x + \gamma_j y) \quad (19-b)$$

$$N_m^e(x,y) = \frac{1}{2\Delta} (\alpha_m + \beta_m x + \gamma_m y) \quad (19-c)$$

donde:

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

$$\beta_i = y_j - y_m \quad (20)$$

$$\gamma_i = x_m - x_j ;$$

el resto de los coeficientes resulta de permutar cíclicamente los índices i, j, m en las (20), y Δ es el área del elemento.

En la aproximación que consiste en tomar todos los coeficientes de la ecuación (1) constantes dentro de cada elemento, si reemplazamos las (19) y las (20) en las (16) y (18) y si llamamos x_c, y_c a las coordenadas del centroide, resolviendo las integrales de (16) y (18) resulta:

$$\begin{aligned}
 K_e = & \frac{b_1^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \beta_i^2 & \beta_i\beta_j & \beta_i\beta_m \\ \beta_j\beta_i & \beta_j^2 & \beta_j\beta_m \\ \beta_m\beta_i & \beta_m\beta_j & \beta_m^2 \end{pmatrix} + \frac{b_2^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \gamma_i^2 & \gamma_i\gamma_j & \gamma_i\gamma_m \\ \gamma_j\gamma_i & \gamma_j^2 & \gamma_j\gamma_m \\ \gamma_m\gamma_i & \gamma_m\gamma_j & \gamma_m^2 \end{pmatrix} - \\
 & - \frac{a_1^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \beta_i & (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \beta_j & (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \beta_m \\ (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \beta_i & (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \beta_j & (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \beta_m \\ (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \beta_i & (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \beta_j & (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \beta_m \end{pmatrix} - \\
 & - \frac{a_2^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \gamma_i & (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \gamma_j & (\alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c) \gamma_m \\ (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \gamma_i & (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \gamma_j & (\alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c) \gamma_m \\ (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \gamma_i & (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \gamma_j & (\alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c) \gamma_m \end{pmatrix} \quad (21)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 F_e = & - \frac{g_e}{2} \begin{pmatrix} \alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c \\ \alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c \\ \alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \rho_i \\ 0 \\ \rho_m \end{pmatrix} - \frac{b_1^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \beta_i \\ \beta_j \\ \beta_m \end{pmatrix} \delta_j \beta_j - \frac{b_2^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \gamma_i \\ \gamma_j \\ \gamma_m \end{pmatrix} \delta_j \gamma_j + \\
 & + \frac{a_1^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c \\ \alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c \\ \alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c \end{pmatrix} \delta_j \beta_j + \frac{a_2^e}{4\Delta} \begin{pmatrix} \alpha_i + \beta_i x_c + \gamma_i y_c \\ \alpha_j + \beta_j x_c + \gamma_j y_c \\ \alpha_m + \beta_m x_c + \gamma_m y_c \end{pmatrix} \delta_j \gamma_j \quad (22)
 \end{aligned}$$

En la (22) hemos supuesto, para ejemplificar, que el elemento e posee un lado λ' de longitud ℓ con nodos i, m sobre la porción de frontera de Neumann, siendo

$$\rho_k = \frac{\gamma^e \ell}{2} \quad (k=i, m) ; \quad \rho_j = 0$$

y que el nodo j del elemento e , además, cae sobre la porción de frontera Γ^* , con dato de Dirichlet $\phi_j^h = \delta_j$.

Si se acoplan ahora todos los sistemas lineales (15), con las expresiones (21) y (22), resulta el sistema lineal completo (8), en que la matriz \mathbb{K} de orden $N \times N$ y el vector \underline{F} de N elementos resultan de sumar ordenadamente los elementos de cada una de las matrices \mathbb{K}_e y vectores \underline{F}_e respectivamente, que corresponden a todos los nodos internos de la red (o sea que no caen sobre la porción de frontera Γ^*). El vector $\underline{\phi}^h$ de (8), que se obtiene resolviendo dicho sistema, es la solución aproximada buscada del problema planteado.

Puede resultar también cómodo, por razones de construcción automática de la red y por compatibilización con otros programas en elementos finitos, que en la red los nodos que caen sobre Γ^* no sean necesariamente los ennumerados al final. Para tener en cuenta las condiciones de Dirichlet en esta situación, se procede de la siguiente manera, muy usual [1]:

El tratamiento es completamente igual al expuesto, para la totalidad de los M nodos (incluidos los $M-N$ que caen sobre Γ^*), considerándolos a todos como incógnitas, con la única diferencia que R es idénticamente nulo en todas las ecuaciones, y no aparece en ellas ningún valor δ_r .

Formado entonces el sistema completo (8), con \mathbb{K} de orden $M \times M$ y $\underline{\phi}$ y \underline{F} de orden $M \times 1$, se multiplican todos los elementos diagonales de \mathbb{K} que corresponden a cada uno de los nodos r sobre Γ^* con valores δ_r , por un número grande, digamos 10^8 , y sustituyendo simultáneamente los $M-N$ elementos F_r de \underline{F} por $K_{rr} \cdot 10^8 \cdot \delta_r$. Por ejemplo, si el nodo 1 tiene un dato de Dirichlet δ_1 , \mathbb{K} y \underline{F} quedarán modificados según:

$$K'_{11} = K_{11} \cdot 10^8 \quad ; \quad F'_1 = K_{11} \cdot 10^8 \cdot \delta_1$$

y los demás elementos permanecen inalterables.

Es fácil ver que así resultará ϕ_1 prácticamente igual a δ_1 .

Se observa que, de acuerdo con su formación, la matriz K es no simétrica, y puede considerarse, a los fines de economía computacional, como de tipo banda con igual semiancho de banda n_D en ambos sentidos. Es fácil demostrar que el valor de este último está dado por la máxima diferencia, más uno, entre las designaciones de los nodos interiores que son vértices de un mismo elemento (nodos adyacentes), considerando todos los elementos de la red. De allí que sea importante una correcta enumeración de los nodos a fin de que sea mínimo dicho semiancho de banda.

C. DESCRIPCION DEL CODIGO ANISEF

C.1. Generalidades

El código ANISEF, implementado en Lenguaje FORTRAN IV para su operación en una computadora IBM 360/Mod.44(*), tiene una estructura similar a los demás programas en elementos finitos [5] desarrollados en el Centro de Cómputos del Centro Atómico Bariloche (C.N.E.A.) en particular el CUARM [4].

Está compuesto de un programa principal cuya única finalidad es llamar a las subrutinas que realizan los pasos necesarios para el cálculo propuesto.

El programa completo está dividido en cinco fases, para un mejor aprovechamiento de la memoria.

Las subrutinas, algunas de las cuales pertenecen también a otros de los programas mencionados, se describen sucintamente a continuación. Su designación guarda relación con el resto de dichos programas.

- - - - -

(*) Perteneciente al Centro de Cómputos del Centro Atómico Bariloche, C.N.E.A.

C.2. Subprogramas

C.2.1. Subrutina DATOS9:

Lee todos los datos del problema: coordenadas de los no dos, definición de los elementos por los nodos que lo forman, parámetros a_1^e , a_2^e , b_1^e , b_2^e , g^e , γ^e de cada elemento, de acuerdo con las especificaciones que se darán en C.3. Si se requiere pa ra control del cálculo, se imprimirán los datos leídos.

C.2.2. Subrutina KELEM9:

Esta subrutina calcula, para cada elemento, la matriz K_e y el término independiente F_e de acuerdo con las expresiones (21) y (22). Es llamada sucesivamente por la KCOMP8.

C.2.3. Subrutina KCOMP8:

Acopla dicha subrutina las matrices K_e y los vectores F_e de todos los elementos, conformando la matriz total K y el vector término independiente F del sistema (8) de la manera in dicada en B.

Dado el carácter de matriz "banda" de K , son almacenadas únicamente las diagonales no nulas de ésta, por filas, en un único vector A . Si n_b es el semiancho de banda de K , de acuerdo con los requerimientos de la subrutina GELB que resuelve el sistema lineal, el vector A , de dimensión:

$$m_a = m \cdot m_c - \frac{1}{2}(n_b - 1)n_b, \quad \text{donde } m_c = \min(m, 2n_b - 1),$$

debe ser llenado con todos los elementos no idénticamente nu los de las sucesivas filas de la matriz K , ordenada en la forma:

$$\begin{array}{ccccccc}
 k_{11} & k_{12} & \dots\dots\dots & k_{1,n_b} & 0 & \dots\dots\dots & 0 \\
 k_{21} & k_{22} & \dots\dots\dots & k_{2,n_b} & k_{2,n_b+1} & 0\dots\dots & 0 \\
 \vdots & & & & & & \\
 \vdots & & & & & & 0 \\
 k_{n_b,1} & k_{n_b,2} & \dots\dots\dots & & & & k_{n_b,m_c} \\
 k_{n_b+1,2} & k_{n_b+1,3} & \dots\dots\dots & & & & k_{n_b+1,m_c+1} \\
 k_{n_b+2,3} & k_{n_b+2,4} & \dots\dots\dots & & & & k_{n_b+2,m_c+2} \\
 \vdots & & & & & & \vdots \\
 \vdots & & & & & & \vdots \\
 \vdots & & & & & & \vdots \\
 k_{m-n_b+1,m-2n_b+2} & & & & \dots\dots\dots & & k_{m-n_b+1,m} \\
 k_{m-n_b+2,m-2n_b+3} & & & & & & k_{m-n_b+2,m} \\
 \vdots & & & & & & \vdots \\
 \vdots & & & & & & \vdots \\
 k_{m,m-n_b+1} & \dots\dots\dots & & k_{m,m} & & &
 \end{array} \tag{23}$$

para el caso obviamente más común en que $m_c = 2n_b - 1$.

C.2.4. Subrutina GELB

Pertenece al paquete de subrutinas científicas IBM [6], resuelve el sistema lineal (6) por el método de eliminación de Gauss, aprovechando el mencionado carácter de banda de la matriz K, con ésta almacenada de la manera indicada en C.2.

C.2.5. Subrutina IMPRI7:

Imprime los resultados del cálculo: los valores nodales ϕ_i^h de la función $\phi^h(x,y)$ para todos los nodos interiores.

C.2.6. Subrutinas GRAF y NIVTAB, y función externa FAREA.

La subrutina GRAF, llamando a NIVTAB y a AREA, imprime gráficos consistentes en curvas de nivel de valores equidistantes de la función $\phi^h(x,y)$.

C.3. Limitaciones y tiempo de cálculo

El número de nodos interiores m y el semiancho de banda n_b deben ser tales que $m \cdot (2n_b + 1) \leq 16000$. El número de elementos, por su parte, no puede ser mayor que 800. Sin embargo, esta capacidad puede incrementarse algo más con leves modificaciones.

El tiempo total CPU de cálculo, en la máquina para la que este programa fue puesto en operación, es de 1.5 minutos aproximadamente para el problema de aplicación descrito más adelante en D, con 361 nodos interiores, 800 elementos, y semiancho de banda igual a 20.

C.4. Especificaciones para la entrada de datos

Tarjeta	Designación	Formato	Columnas	Descripción
1	NPROB	I5	1 a 5	Número de problemas a resolver.
Repetir tarjetas 2 a 14 para cada uno de los NPROB problemas:				
2	NPRINT	3I5	1 a 5	=1: Imprime datos de entrada =0: No los imprime.
	IC		6 a 10	=1: Imprime los resultados. =0: No los imprime.
	IG		11 a 15	=1: Grafica la función ϕ^h . =0: No la grafica.
3	TIT(I)	20A4	1 a 80	Título y/o comentarios del problema.
	I=1,20			

Tarjeta	Designación	Formato	Columnas	Descripción
4	NPI MPE NP NELEM	4I5	1 a 5 6 a 10 11 a 15 16 a 20	Número de nodos incógnita Número de nodos c/cond. Dirichlet. Número de nodos c/cond. Neumann. Número de elementos.
5	IHOM	I5	1 a 5	=1: $b_1^e, b_2^e, a_1^e, a_2^e$ y g^e iguales en todos los elementos. =2: $b_1^e, b_2^e, a_1^e, a_2^e$ y a_2^e iguales en todos los elementos. =3: g^e igual en todos los elementos. =4: $b_1^e, b_2^e, a_1^e, a_2^e$ y g^e no necesariamente iguales para todos los elementos
6	((XY(I,J), J=1,2), I=1,NPI+MPE)	8E10.4	1 a 80	Cada fila I está formada por las coordenadas x,y del nodo I
7	((IJM(I,J), J=1,3), I=1,NELEM)	15I5	1 a 75	Cada fila I está formada por los nodos vértices del elemento I.
Si IHOM=1, leer las tarjetas 8.a y 9.a.				
Si IHOM=2, leer las tarjetas 8.a y 9.b.				
Si IHOM=3, leer las tarjetas 8.b.1 a 8.b.4, y 9.a.				
Si IHOM=4, leer las tarjetas 8.b.1 a 8.b.4, y 9.b:				
8.a	BH1U BH2U AH1U AH2U	4E10.4	1 a 10 11 a 20 21 a 30 31 a 40	Coef. b_1^e igual para todos los elementos. Coef. b_2^e igual para todos los elementos. Coef. a_1^e igual para todos los elementos. Coef. a_2^e igual para todos los elementos.
8.b.1.	(BH1(I), I=1,NELEM)	8E10.4	1 a 80	Coef. b_1^e p/cada elemento.
8.b.2.	(BH2(I), I=1,NELEM)	8E10.4	1 a 80	Coef. b_2^e p/cada elemento.

Tarjeta	Designación	Formato	Columnas	Descripción
8.b.3.	(AH1(I), I=1,NELEM)	8E10.4	1 a 80	Coef. a_1^e p/cada elemento.
8.b.4	(AH2(I), I=1,NELEM)	8E10.4	1 a 80	Coef. a_2^e p/cada elemento.
9.a	GEU	E10.4	1 a 10	Coef. g^e igual para todos los elementos.
9.b	(GE(I), I=1,NELEM)	8E10.4	1 a 80	Coef. g^e igual p/cada elem.
Si NP \neq 0, leer la tarjeta siguiente:				
10	(NOD(I), NOD1(I), NOD2(I), GAMH(I), I=1, NP).	3(3I5, E10.4)	1 a 75	Designación del elemento sobre Γ' . Nodos que definen el lado λ' del elemento NOD(I) sobre Γ' . γ (Dato de Neumann sobre λ').
11	IDIR	*I5	1 a 5	=0: Los nodos sobre Γ^* son los MPE últimos. =1: Los nodos sobre Γ^* son los (NCD(I), I=1,MPE).
12	(DELH(I), I=1,MPE)	8E10.4	1 a 80	Datos de Dirichlet δ_i para los MPE nodos sobre Γ^* .
Si IDIR=1, leer tarjeta siguiente:				
13	(NCD(I), I=1,MPE)	16I5	1 a 80	Nodos sobre Γ^* , para IDIR=1.
14	NC	15,	1 a 5	Número de franjas a graficar cuyos bordes son curvas de nivel equiespaciadas.
	FOC	E10.4	6 a 15	Foco de las franjas (=0.25)

D. PRUEBAS Y ALGUNAS APLICACIONES DEL CODIGO

El código fue probado resolviendo varias ecuaciones de solución exacta conocida, con toda generalidad tanto en sus coeficientes como en sus condiciones de contorno. Para un problema general con una red de 441 nodos y 800 elementos, se constató que el error medio cuadrático de la solución obtenida con respecto a la exacta fue de 0.36%, y el máximo error relativo detec

tado, del 0.39%.

A título de ejemplos se exponen a continuación dos aplicaciones del código de indudable importancia:

D.1. APLICACION EN OCEANOGRAFIA: MODELO DE CIRCULACION DE STOMMEL

Es importante en Oceanografía el modelo de circulación de Stommel [7,8], que bajo ciertas hipótesis simplificativas permite predecir, con satisfactoria aproximación para algunos fines, el complejo problema del movimiento de la masa de agua sobre la superficie de un océano, inducido por un dado flujo de viento arbitrario aplicado sobre ella.

En general, con las hipótesis de océano homogéneo, movimiento no acelerado, y con fuerzas de fricción que respondan a las hipótesis de Guldberg y Mohn [7,8], si definimos una función de corriente $\psi(x,y)$ tal que las componentes horizontales $u(x,y)$ y $v(x,y)$ de la velocidad del agua sobre la superficie estén dadas por:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y} ; \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

puede demostrarse [7,8] que $\psi(x,y)$ verifica la ecuación diferencial

$$\nabla^2 \psi + \alpha(x,y) \cdot \psi_x = g(x,y) \quad (24)$$

en toda la región Ω de interés, con la condición de contorno tipo Dirichlet:

$$\psi = 0 \quad (25)$$

sobre toda la frontera Γ de Ω .

Las funciones $a(x,y)$ y $g(x,y)$ son datos del problema. La primera está dada por:

$$\alpha(x,y) = \frac{D}{R} \beta$$

donde:

$D = D(x,y)$ es la profundidad del océano;

$R = R(x,y)$ es el coeficiente de fricción;

y $\beta = \beta(x,y) = \partial f / \partial y$ es la variación del parámetro de Coriolis f con la latitud.

Por su parte, el término independiente $g(x,y)$ de (24) depende del flujo de viento propuesto [8].

Para la resolución por elementos finitos de este problema, el segundo autor de este trabajo había desarrollado con anterioridad un código, denominado STOMMEL [9], que constituyó una versión preliminar del presente, limitado respecto de las posibilidades de este último.

A los fines de prueba, se resolvió la ecuación (24-25) para el caso:

$$\alpha = 10^{-7} \text{ cm}^{-1}; \quad g(x,y) = \gamma \sin \frac{\pi}{b} y; \quad \gamma = 1$$

en un rectángulo de base $\lambda = 10^9$ cm y altura $b = 2\pi \times 10^8$ cm. Esta situación, de solución exacta conocida [7] y también resuelta en [8], corresponde en el modelo de Stommel a un océano no rotante (o aproximadamente de esas características en el caso de altas latitudes [8]).

La red de elementos finitos empleada es la esquematizada en la figura 1, con la única observación de que entre $x=0$ y $x=0.05\lambda$ en lugar de una sola capa de elementos triangulares como la que se muestra a los fines ilustrativos, hay cinco capas, dada la fuerte variación que se espera para la solución en esa zona.

En las figuras 2,3 y 4 y en la TABLA 1 se muestra la solución obtenida, comparada con la solución exacta determinada en [7]. Los acuerdos son altamente satisfactorios en todo el recinto.

D.2. APLICACION A UN PROBLEMA DE TRANSFERENCIA TERMICA CON CONTORNO MOVIL: QUEMADO DE UN PROPULSANTE SOLIDO DE COHETES.

El propulsante de cohetes de combustible sólido, durante su ignición, se encuentra sujeto a severas condiciones termomecánicas que llegan a afectar frecuentemente su integridad. Análisis de tensiones termoelásticas o termoeviscoelásticas dependientes del tiempo, del sistema en cuestión, son ciertamente de importancia básica desde el punto de vista de su resistencia estructural y performance operacional.

En la figura 5.a se representa una sección típica de cohete de propulsante sólido, de geometría cilíndrica indefinida en la dirección axial, compuesta por combustible de grano con una perforación interior estrellada, y por una carcasa metálica que recubre al primero.

Para el cálculo de las tensiones y deformaciones térmicas producidas por el quemado del propulsante, se debe obtener previamente la distribución espacial y temporal de la temperatura. Esta última está gobernada por la clásica ecuación de conducción del calor bidimensional:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial T}{\partial y} \right) = c \delta \frac{\partial T}{\partial t} \quad (26)$$

donde: $T(x,y,t)$ es la temperatura, dependiente de las coordenadas espaciales (x,y) y del tiempo t ;

$K(x,y)$ es la conductividad térmica, diferente para cada uno de los dos materiales y uniforme dentro de ellos;

$\delta(x,y)$ es el peso específico de cada material; y

$c(x,y)$ es su calor específico.

La solución $T(x,y,t)$ de la (26) debe estar sujeta a una da condición inicial sobre todo el recinto de cálculo Ω , y a valores impuestos de T o de $\partial T / \partial n$ sobre todo su contorno. A fin de obtener resultados adimensionales del problema, supondremos que dichas condiciones son:

$$T(x,y,t=0)=0 \quad \forall (x,y) \in \Omega ;$$

$T=T_c$ (temperatura de quemado) sobre el contorno interior (móvil) del combustible; y:

(27)

$T=0$ sobre la superficie exterior de la carcasa.

Durante la ignición, que comienza a $t=0$, supondremos que el propulsante se consume de manera tal que el frente de quemado en los puntos de mayor radio (puntas de la estrella) avanza a velocidad constante v_c , y en el resto de dicha superficie de quemado en la forma que luego especificaremos.

El problema planteado, esencialmente de tres variables, pue

de aproximarse de una manera suficientemente satisfactoria por una ecuación bidimensional del tipo de las que puede resolver el código ANISEF, de la siguiente manera:

Llamemos

$$w = f(\xi), \quad (28)$$

donde

$$w = x + iy ; \quad \xi = \rho e^{i\theta}$$

a la transformación conforme que lleva el recinto dado (figura 5.a) al cuerpo cilíndrico de la figura 5.b, de radio exterior unitario. La (26), que en término de w puede expresarse como:

$$4 \frac{\partial}{\partial w} \left(K \frac{\partial T}{\partial \bar{w}} \right) = c \delta \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (29)$$

aplicándole la transformación (28) queda:

$$4 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(K f'(\bar{\xi})^{-1} \frac{\partial T}{\partial \bar{\xi}} \right) = c \delta f'(\xi) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (30)$$

La aproximación propuesta consiste en suponer ahora que, en el plano ξ , la solución $T(\xi, t)$ de la ecuación (30) es independiente de la coordenada azimutal θ , es decir que las isotermas en el plano w se transforman a círculos concéntricos en el plano ξ . Basta entonces con considerar la transformación (28) y la ecuación (30) por ejemplo para $\theta = 0$:

$$x = f(\rho, \theta=0) = \varphi(\rho); \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left[K(\rho) \cdot \varphi'(\rho)^{-1} \frac{\partial T}{\partial \rho} \right] - \frac{c \delta}{4} \varphi'(\rho) \frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (32)$$

y el problema queda reducido a uno de solo dos variables ρ y t .

Como la ecuación (32) es un caso particular de la (1), conocida la transformación (31) puede resolverse el problema mediante el código ANISEF, en el plano (ρ, t) .

Como las suposiciones mencionadas sobre el avance del frente de quemado, en el plano ξ la velocidad radial de dicha superficie, transformada según (28), vale entonces:

$$\frac{d\rho_c}{dt} = \frac{v_c}{\varphi'(\rho_c)} \quad (33)$$

Por lo tanto el instante de tiempo $t_c = \varphi(\rho_c)$ en que el radio del frente de quemado transformado vale ρ_c , resulta:

$$\begin{aligned} t_c = \varphi(\rho_c) &= \int_{\rho_1}^{\rho_c} \frac{dt}{d\rho_c'} d\rho_c' = \int_{\rho_1}^{\rho_c} \frac{1}{v_c} \varphi'(\rho_c') d\rho_c' = \\ &= \frac{1}{v_c} [\varphi(\rho_c) - \varphi(\rho_1)] = \frac{1}{v_c} [\varphi(\rho_c) - a] \end{aligned} \quad (34)$$

donde ρ_1 es el radio interior del recinto en el plano ξ (figura 5.b.). De acuerdo con la misma figura, el tiempo total de quemado del combustible valdrá entonces:

$$t_f = \frac{1}{v_c} (2.449 a - a) = \frac{1.449 a}{v_c} \quad (35)$$

De estas consideraciones resulta finalmente el recinto de cálculo de la figura 7. Para el caso dibujado en las figuras 5.a y 6, la transformación (28) es $|10|$:

$$w = a(0.8803\xi + 0.1461\xi^{-7} - 0.02642\xi^{-15} + \dots) \quad (36)$$

y de aquí:

$$x = \varphi(\rho) = a(0.8803\rho + 0.1461\rho^{-7} - 0.02642\rho^{-15} + \dots)$$

Resolviendo esta última ecuación para $x = 2.4187 a$, y $x = 2.4490a$, resulta:

$$\rho_2 = 2.747$$

$$\rho_3 = 2.781$$

Los coeficientes de la ecuación (32) valen:

$$\begin{aligned} K(\rho) &= \begin{cases} K_1 & \text{si } \rho_1 \leq \rho \leq \rho_2 \\ K_2 & \text{si } \rho_2 < \rho < \rho_3 \end{cases} \\ C(\rho) &= \begin{cases} C_1 & \text{si } \rho_1 \leq \rho \leq \rho_2 \\ C_2 & \text{si } \rho_2 < \rho < \rho_3 \end{cases} \\ \delta(\rho) &= \begin{cases} \delta_1 & \text{si } \rho_1 \leq \rho \leq \rho_2 \\ \delta_2 & \text{si } \rho_2 < \rho < \rho_3 \end{cases} \end{aligned} \quad (37)$$

o sea, adjudicamos el índice 1 al material combustible y el índice 2 al metal de la carcasa exterior.

Con el código ANISEF se resolvió la ecuación (32) en el recinto de la figura 7, en función del parámetro adimensional $\eta = K_1/C_1 \delta_1 v_c a$, con las propiedades de ambos materiales tales que

$$\frac{K_2}{c_2 \delta_2} = 10 \frac{K_1}{c_1 \delta_1}$$

En las figuras 8,a, 8,b y 8.c se muestran las curvas de nivel de T/T_0 obtenidas, para $\eta = 0.02; 0.05$ y 0.10 respectivamente.

Con estas soluciones, para todo punto (x,y) del plano físico w , y para cualquier instante t , el valor de la solución $T(x,y,t)$ del problema diferencial (26-27) planteado (para los valores indicados de η), se obtiene finalmente aplicando la inversa de la transformación (36).

AGRADECIMIENTOS:

Queremos expresar aquí nuestro reconocimiento a los Dres. Sergio Pissanetzky y Patricio Laura, y al Ing. Fernando G. Basombrío, por la revisión crítica del manuscrito y por sus valiosas indicaciones y sugerencias. Asimismo, agradecemos al Ing. R. Grossi por el cálculo de la transformación conforme para el segundo problema analizado.

REFERENCIAS

- |1| O.C. ZIENKIEWICZ: "The finite element method in engineering science". McGraw Hill, London, 1971.
- |2| G.STRANG y G.FIX: "An analysis of the finite element method". Prentice Hall, New Jersey, 1973.
- |3| F.G. BASOMBRIO y B.CRUIZ: "Ecuación cuasiarmónica con derivada temporal. Su resolución por el método de Faedo-Galerkin con elementos finitos (Programas CTR y CTR1)". Revista de la Unión Matemática Argentina, Vol.28, 1978.
- |4| F.G. BASOMBRIO y B.CRUIZ: "Resolución por elementos finitos de la ecuación cuasiarmónica bidimensional (Programas CUARM, AXICUARM y NOLICUARM)". CAB/1976/2. Centro Atómico Bariloche (1976).
- |5| F.G. BASOMBRIO, G.SANCHEZ S. y S. PISSANETZKY: "El método de elementos finitos en la física del continuo. Desarrollo adquirido y trabajos realizados en el Centro Atómico Bariloche". Informe CNEA-NT. En impresión, Agosto de 1978.
- |6| IBM System/360 Scientific Subroutine Package (360A-CM-03X). Versión III. Programmer's Manual. pp.137-141.
- |7| H. STOMMEL. "The westward intensification of wind-driven ocean currents", Trans. Am.Geophys.Un.29 (1948), pp.202-206.
- |8| R. GELOS. "Algunos resultados en la determinación numérica de líneas de corrientes en modelos matemáticos del océano", Instituto Argentino de Oceanografía (Armada Argentina). Octubre 1975.
- |9| G.SANCHEZ S. "Aplicación del método de elementos finitos al modelo de circulación de Stommel". Informe CAB/1977/9. Centro Atómico Bariloche (1977).
- |10| R.GROSSI y P.A.A. LAURA: Comunicación personal.

x/λ	$(\psi/\gamma \lambda^2) \times 10^3$	
	Esté trabajo	Solución exacta Ref. [7]
0.0	0.0	0.0
0.05	-8.378	-8.379
0.10	-8.043	-8.041
0.15	-7.649	-7.6404
0.20	-7.240	-7.2345
0.25	-6.829	-6.823
0.30	-6.412	-6.407
0.35	-5.991	-5.9856
0.40	-5.563	-5.5588
0.45	-5.131	-5.1267
0.50	-4.693	-4.6891
0.55	-4.251	-4.246
0.60	-3.900	-3.797
0.65	-3.345	-3.343
0.70	-2.887	-2.8833
0.75	-2.419	-2.4176
0.80	-1.947	-1.946
0.85	-1.471	-1.4686
0.90	-0.9848	-0.9851
0.95	-0.4946	-0.4956
1.00	0.0	0.0

TABLA 1 - Solución adimensionalizada de la ecuación (24-25) para $y = b/2$.

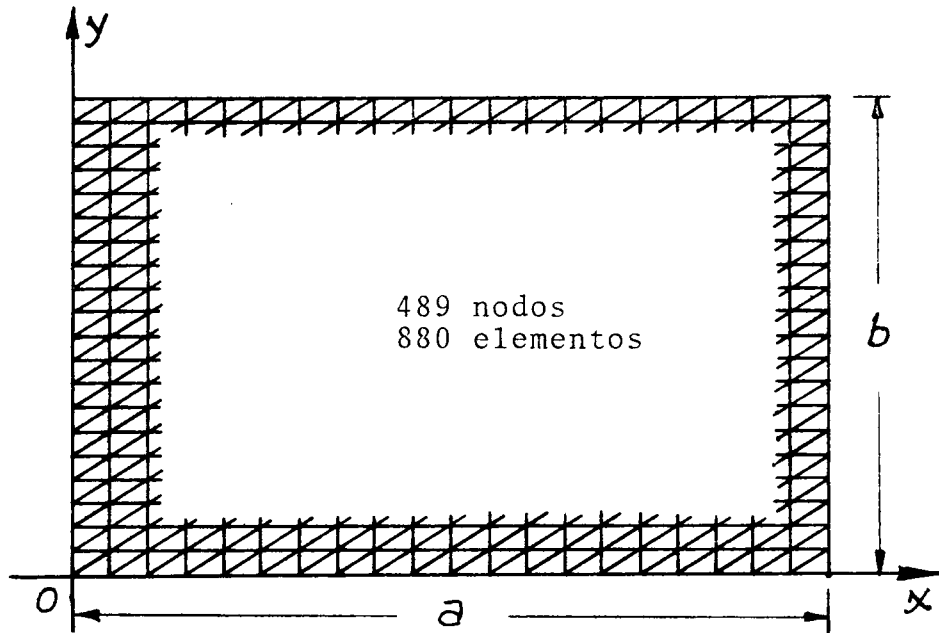


FIGURA 1: recinto de cálculo y red de elementos finitos para el problema analizado en D.1.

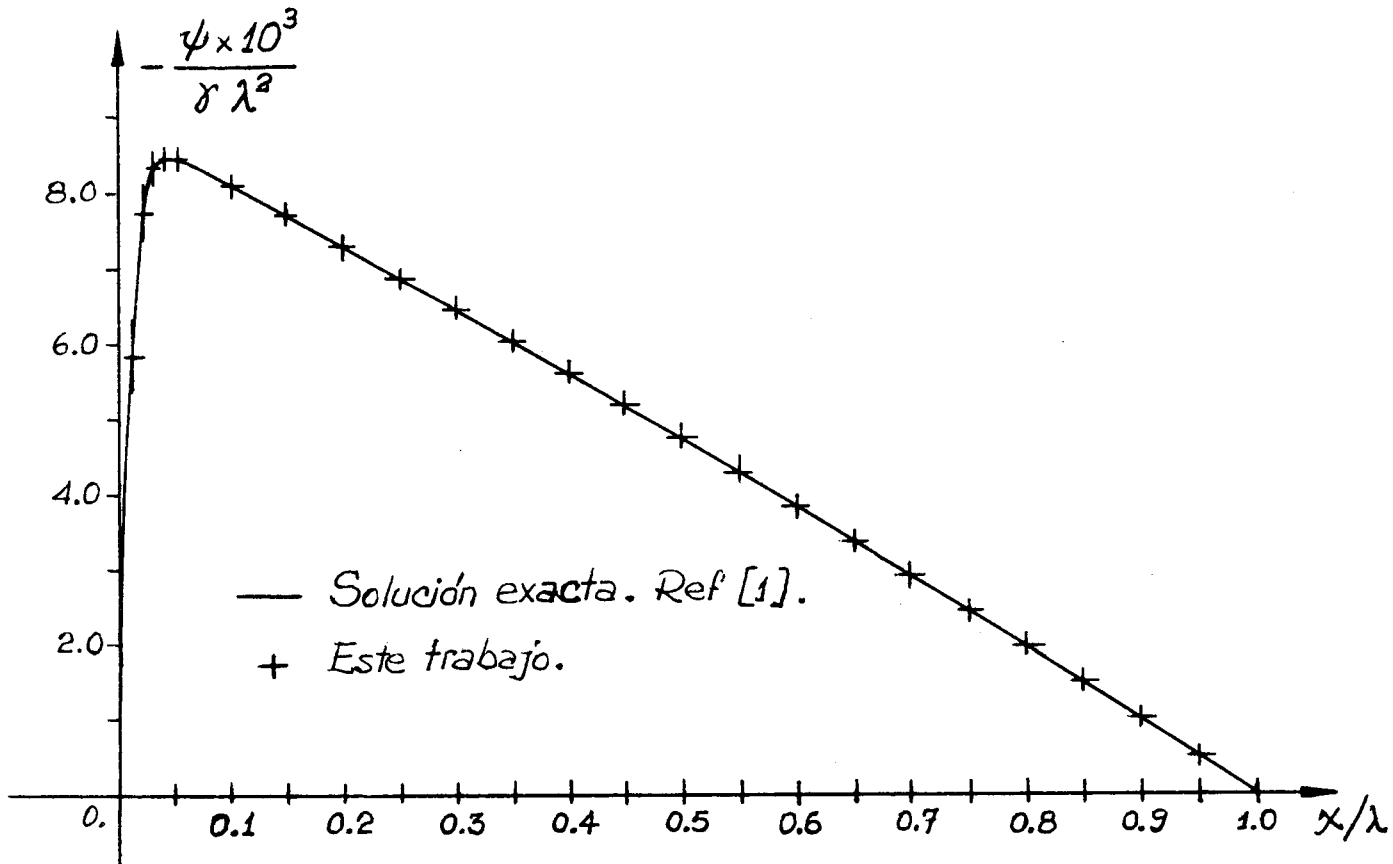


FIGURA 2.- Solución adimensionalizada de la ecuación (24-25) para $y=b/2$ (TABLA 1).

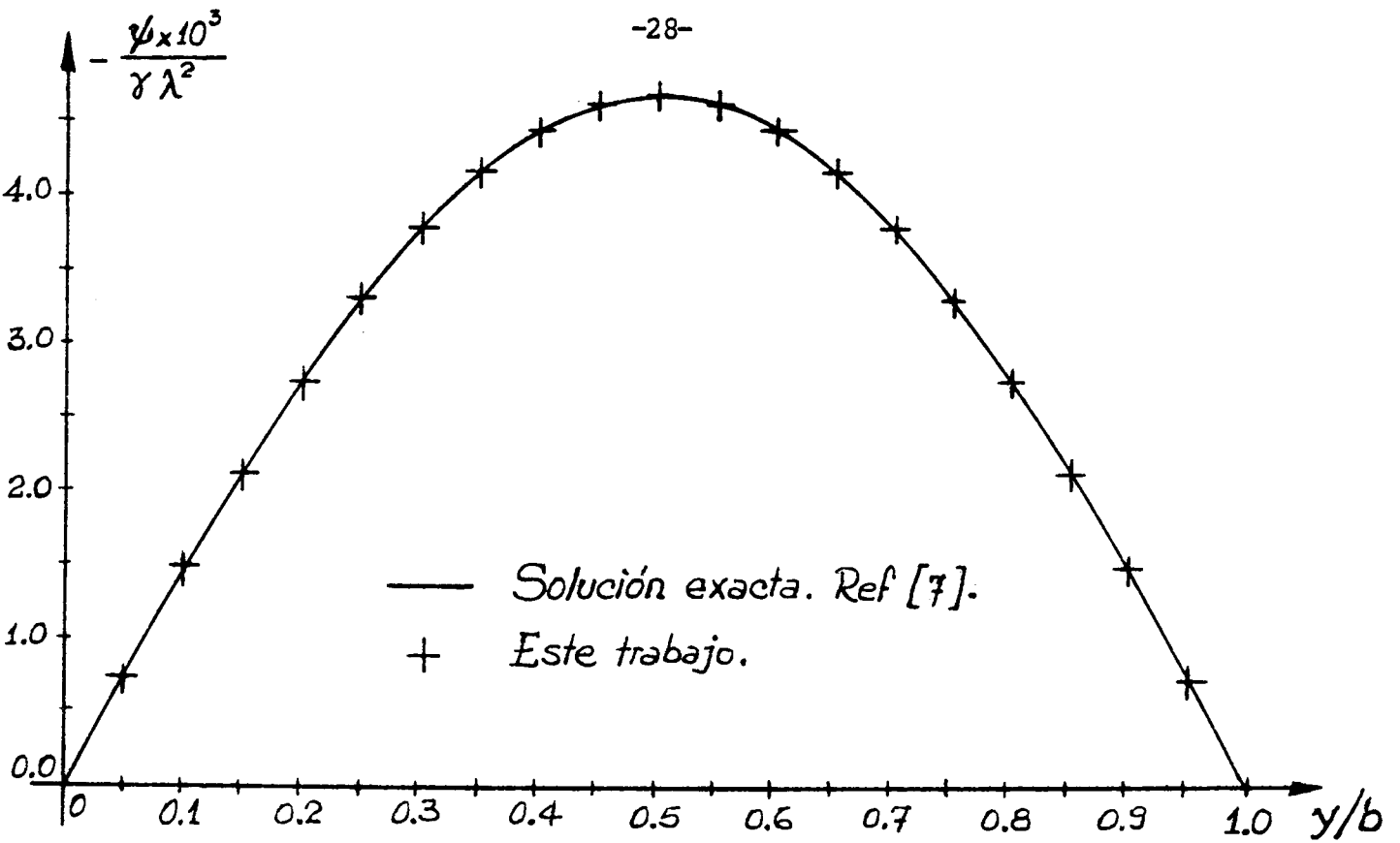


FIGURA 3.- Curvas de nivel de la solución de la ecuación (24-25) para $x=\lambda/2$.

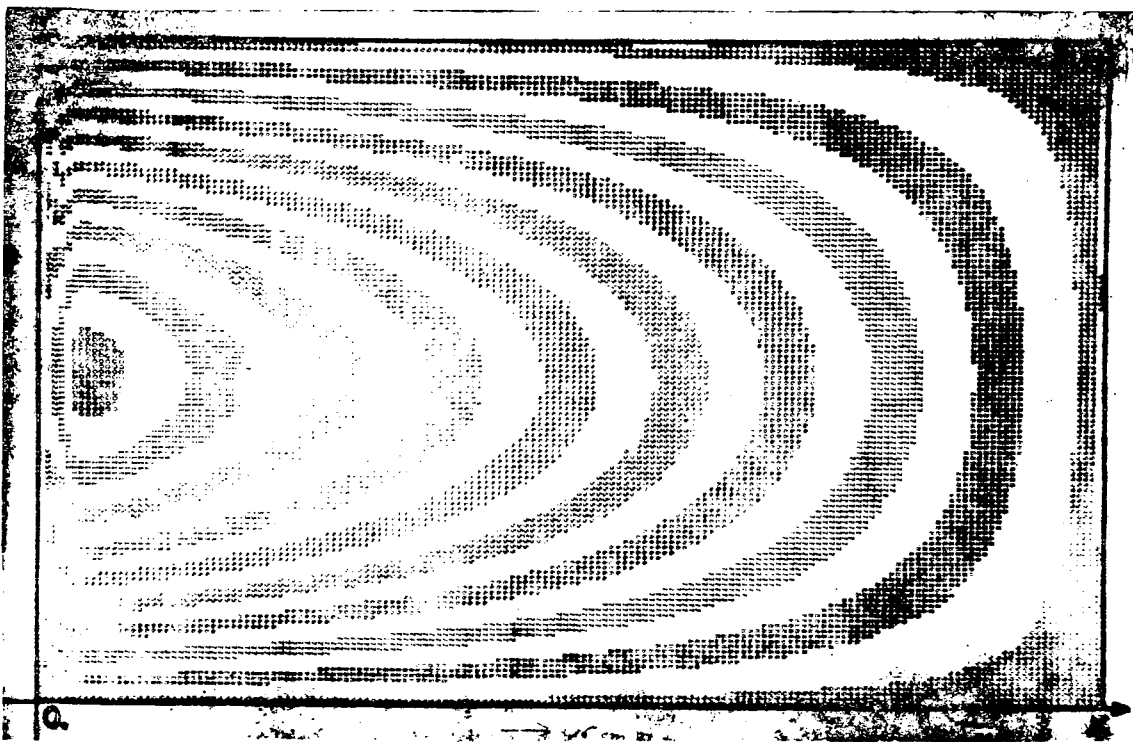


FIGURA 4.- Curvas de nivel de la solución de la ecuación (24-25). Los bordes de cada franja corresponden a valores equiespaciados.

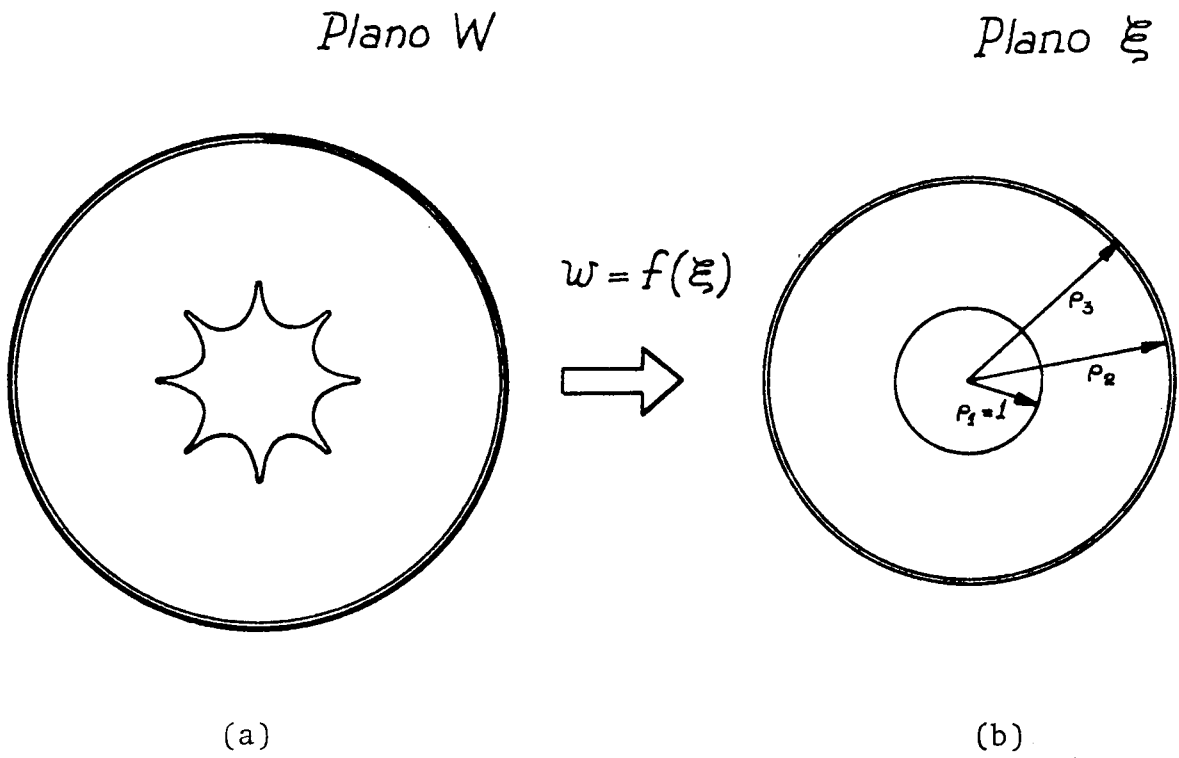


FIGURA 5: Sección transversal de un cohete de combustible sólido y transformación conforme correspondiente.

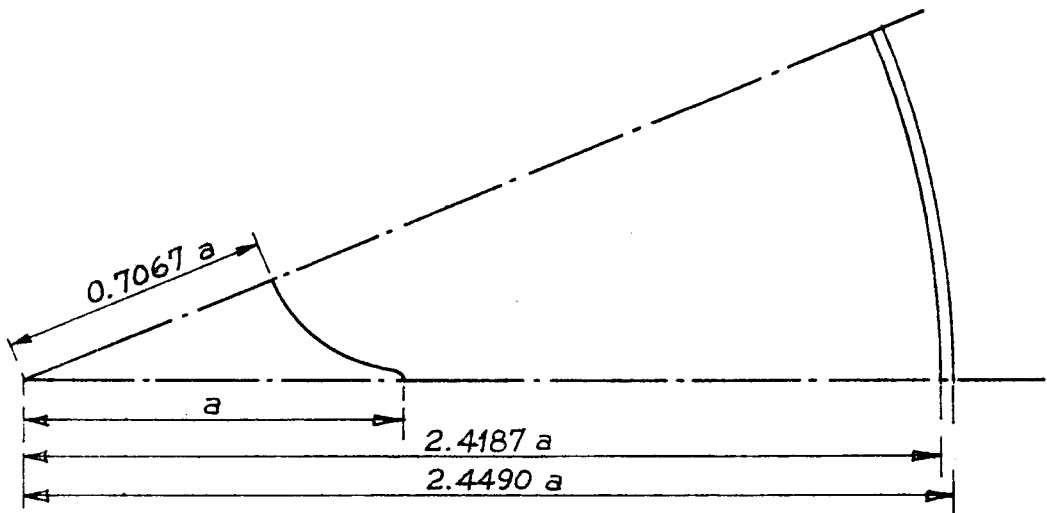


FIGURA 6: Detalle de recinto de cálculo de la FIGURA 5(a).

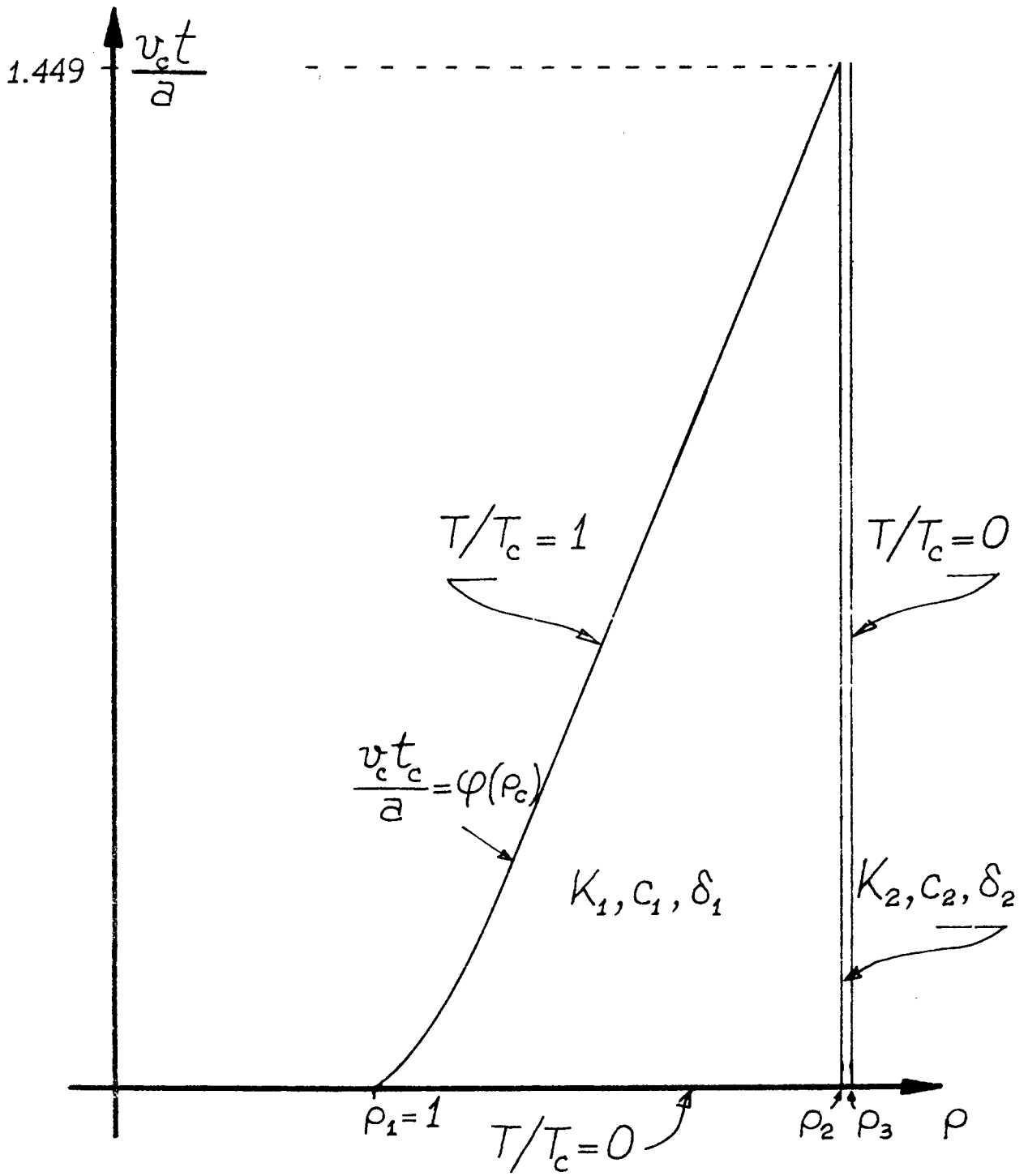


FIGURA 7: Recinto de cálculo correspondiente a la ecuación (32).

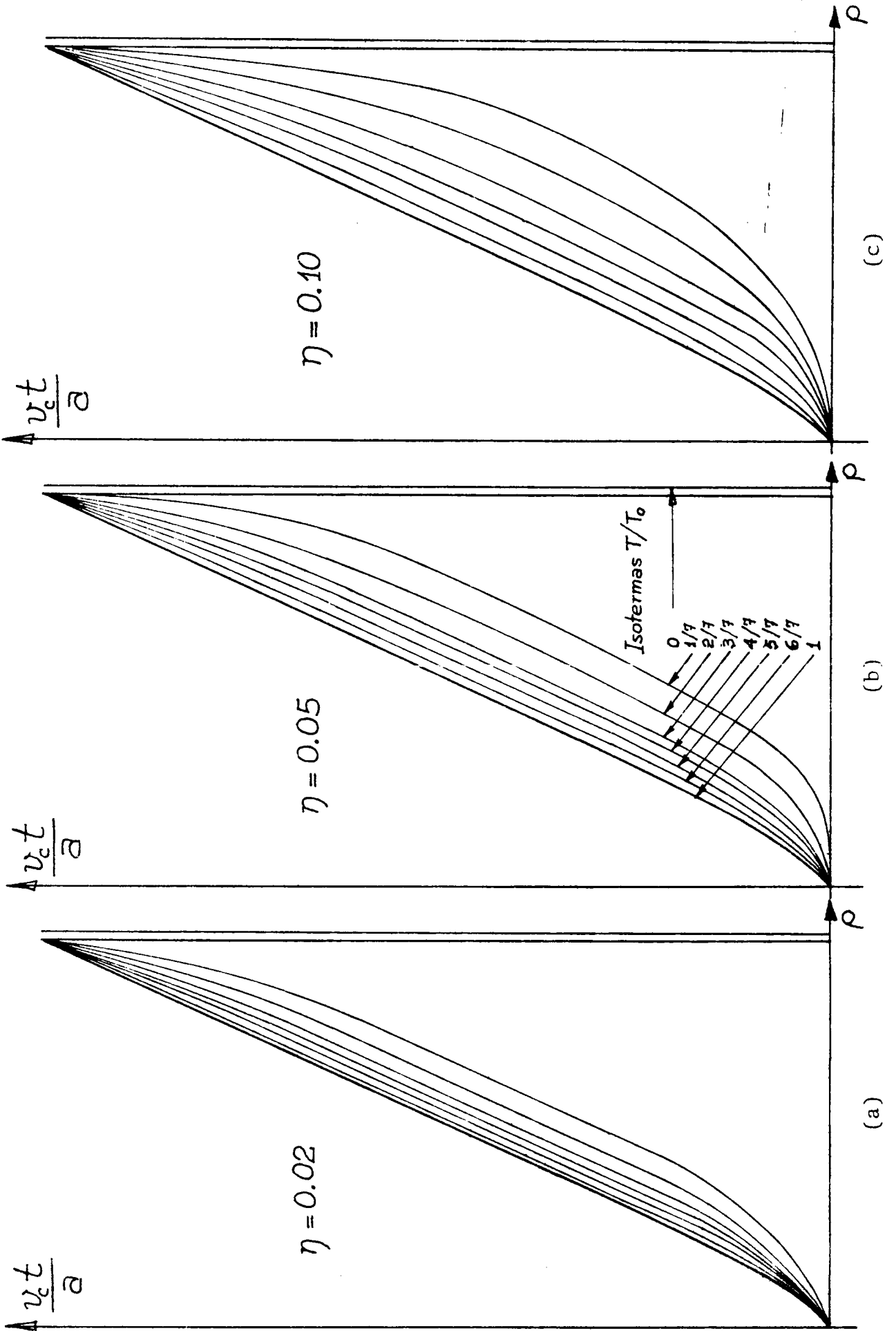


FIGURA 8: Isothermas del problema analizado en D.2. para $\eta = 0.02$; 0.05 y 0.10 .

