

SECRETARIA DE RECURSOS HIDRICOS
INSTITUTO NACIONAL DE CIENCIA Y TECNICA HIDRICAS
LABORATORIO DE HIDRAULICA APLICADA

INTRODUCCION A LA SIMULACION NUMERICA
DE PROBLEMAS HIDRAULICOS

por

Dr. Angel N. Menéndez
Jefe del Dto. de Modelos Matemáticos y Estudios Especiales

Informe LHA 064 - 003 - 87
EZEIZA, setiembre de 1987

RESUMEN

Este trabajo es un apunte, donde se introducen los conceptos y metodologías básicas para la simulación numérica de problemas hidráulicos. Se describen los distintos tipos de formulaciones analíticas que admiten los problemas de la mecánica del continuo, y, a partir de ellas, los métodos numéricos más utilizados en la actualidad.

DESCRIPTORES TEMATICOS:

Simulación numérica, modelación matemática, diferencias finitas, elementos finitos, elementos de contorno.

PROLOGO

El objetivo del presente apunte es introducir nociones elementales sobre los métodos de simulación numérica más difundidos en relación a los problemas hidráulicos. Está dirigido tanto al usuario de software que pretende comprender los fundamentos de las técnicas que utiliza, como al profesional que se está iniciando en tareas de desarrollo y quiere adquirir una visión panorámica del tema. En consecuencia, a veces se ha sacrificado un tanto el rigor matemático, en aras de simplificar los planteos.

Esta primera versión del apunte, que sirve de base para el curso que el autor dictará para profesionales de HIDRONOR durante 1987, es aún incompleta. Consta de un capítulo introductorio, donde se analiza toda la problemática de la simulación numérica; un segundo capítulo, donde se desarrollan las distintas formulaciones analíticas que admite un problema; y un tercer y último capítulo, donde se presentan los métodos numéricos que surgen a partir de las distintas formulaciones.

Ezeiza, setiembre de 1987

INDICE

| | Pág. |
|--|------|
| Capítulo 1. INTRODUCCION | |
| 1.1. Simulación | 1 |
| 1.2. Formulaci3n continua y discretizaci3n | 2 |
| 1.3. Programas computacionales | 4 |
| Capítulo 2. FORMULACION CONTINUA | |
| 2.1. Formulaci3n diferencial | 6 |
| 2.1.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias | 6 |
| 2.1.2. Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales | 8 |
| 2.2. Formulaci3n d3bil | 11 |
| 2.3. Formulaci3n variacional | 13 |
| 2.4. Formulaci3n integral | 14 |
| 2.4.1. Formulaci3n directa | 15 |
| 2.4.2. Funci3n de Green | 17 |
| 2.4.3. Formulaci3n indirecta | 17 |
| Capítulo 3. DISCRETIZACION | |
| 3.1. Diferencias finitas | 19 |
| 3.2. Residuos ponderados | 24 |
| 3.3. Elementos finitos | 26 |
| 3.4. Elementos de contorno | 30 |
| REFERENCIAS | 34 |
| FIGURAS | 35 |

CAPITULO 1

INTRODUCCION

1.1. Simulación

Por simulación de un fenómeno físico, se entiende su reproducción bajo condiciones de control. Los objetivos de la simulación son el estudio del fenómeno y/o la predicción de su evolución en situaciones particulares de interés.

A partir de la observación de un fenómeno físico se pasa a un primer nivel de abstracción, que se denominará modelo teórico físico. Este se basa en la conceptualización del fenómeno (identificación del sistema, fuerzas interiores significativas, acción externa), que surge a partir de los conocimientos brindados por la Física y el conocimiento empírico del problema. Este modelo queda plasmado en un cuerpo de hipótesis. A partir de él, es posible proceder a la simulación física del fenómeno, es decir, su reproducción a escala (reducida o aumentada, dependiendo del problema). En la jerga de la ingeniería hidráulica, a esto se lo denomina modelo físico.

Una vez establecido el modelo teórico físico, es posible avanzar a un segundo nivel de abstracción: el modelo teórico matemático. Este no es más que la representación simbólica del problema mediante las herramientas provistas por el Análisis Matemático (ecuaciones diferenciales, integrales, etc.). Para dar este paso, es necesario recurrir a las leyes físicas generales (por ejemplo, teoremas de conservación) que gobiernan el fenómeno. A partir del modelo teórico matemático, es posible proceder a la simulación analógica, que consiste en estudiar un fenómeno distinto (por ejemplo, un fenómeno eléctrico en el caso de utilizarse una computadora analógica), pero regido por las mismas ecuaciones. También es posible, en algunas situaciones (ya sea muy simplificadas o correspondientes a geometrías muy simples), buscar la solución del problema matemático recurriendo a técnicas analíticas de resolución. Este procedimiento se denomina simulación analítica.

En muchos problemas prácticos la solución por métodos analíticos no es actualmente posible. En consecuencia, puede procederse a discretizar el modelo teórico matemático, para transformar el problema analítico en uno algebraico, y así poder recurrir al uso de la computadora digital. Esto se denomina simulación numérica. En la jerga de la ingeniería, a éstos se los identifica como modelos matemáticos. En la práctica, también se incluye en esta denominación a cualquier procedimiento de cálculo implementado en una computadora.

En el presente apunte, se desarrollarán con carácter introductorio los principales aspectos de la simulación numérica.

1.2. Formulación continua y discretización

La mayoría de los problemas de la Hidráulica se formulan sobre la hipótesis de que el sistema es continuo, es decir, sus propiedades (densidad, presión, velocidad, etc.) se especifican a través de funciones continuas. La aplicación de las leyes de la Física (en general, en la forma de teoremas de conservación) a un tal modelo teórico requiere, en general, la utilización de procesos de paso al límite, que conducen a expresiones diferenciales y/o integrales (que constituyen el modelo teórico matemático).

En primer lugar, se considera que el medio (agua, aire, etc.) es continuo. Esto, denominado hipótesis del continuo, significa que se hace abstracción de su estructura microscópica, ya que las escalas de movimiento que interesan son mucho mayores que las moleculares. Sin embargo, los movimientos microscópicos no están desacoplados de los macroscópicos, sino que los primeros adquieren su energía de los segundos, en un proceso que se conoce como "disipación" de la energía mecánica. Para expresar matemáticamente esta disipación, es necesario recurrir a leyes empíricas. Las ecuaciones de Navier-Stokes surgen, precisamente, de incorporar relaciones empíricas entre el tensor de las tensiones (que engloba la influencia de las escalas moleculares) y la velocidad de deformación del medio (que es una cantidad macroscópica), introduciendo los coeficientes de viscosidad (de Newton y de volumen) (Batchelor, 1967).

El tema de la existencia de movimientos de escala muy diferente entre sí, y el efecto de las escalas no resueltas sobre aquellas resueltas, no se agota en la división entre movimientos microscópicos y macroscópicos. Aún dentro de lo macroscópico existen escalas de movimiento disímiles, lo cual conduce a que, en muchas situaciones, sea aconsejable, e incluso necesario, proceder a nuevos "filtrados". Por ejemplo, en el caso de flujos turbulentos es común, desde Reynolds, descomponer a las variables en valores medios y fluctuaciones. Los primeros son promedios estadísticos. Las fluctuaciones turbulentas están alimentadas por el movimiento medio (en realidad, existe una cascada de energía desde las escalas mayores a las menores). Si se aplica este tratamiento a las ecuaciones de Navier-Stokes, se obtiene, en primer lugar, las ecuaciones de Reynolds para el movimiento medio (Hinze, 1975). En ellas, la influencia de las escalas no resueltas (es decir, las escalas de las fluctuaciones turbulentas) se manifiesta a través de las tensiones de Reynolds. Para expresar a estas tensiones en términos de cantidades medias, se recurre a los denominados "modelos de turbulencia", de variados grados de complejidad (Bradshaw, 1976).

Cuando los movimientos de escalas disímiles están alimentados externamente, es decir, no hay un trasvase de energía del uno al otro, cada uno de ellos puede estudiarse independientemente. Tal es lo que sucede, por ejemplo, entre los movimientos generados por las olas y aquellos producidos por las mareas (en una primera aproximación).

Dada la gran variedad de problemas a los que se enfrenta la Hidráulica, el modelo teórico matemático cambia, en general, de un estudio a otro. En efecto, si bien la base común está constituida, en principio, por las ecuaciones de Navier-Stokes, los necesarios filtrados y simplificaciones conducen a expresiones matemáticas que, en muchos casos, solo conservan un lejano parecido con aquellas. Esto significa que las técnicas de resolución a las que debe apelarse son también variadas. De ahí la necesidad de adquirir, al menos, una visión panorámica de los diferentes métodos disponibles, con sus alcances y limitaciones, que es lo que pretende el presente apunte.

Tal cual se ha dicho en la sección anterior, la resolución de las ecuaciones del modelo teórico matemático por técnicas analíticas solo es posible en muy contados casos. Generalmente, se hace necesario recurrir a métodos numéricos. Esto significa que debe procederse a discretizar el problema, hasta aquí planteado en términos analíticos. La discretización, que se realiza de acuerdo a técnicas que se discutirán en capítulos siguientes, transforma el problema analítico en uno algebraico, el cual puede resolverse utilizando la computadora.

El hecho es que la discretización introduce un error de truncamiento, denominado error de discretización. Este error puede manifestarse en la solución numérica como si se tratara de fenómenos de difusión y/o dispersión. En algunos problemas, estos fenómenos no estaban presentes en la formulación continua original, lo cual da lugar a imprecisiones. En otros, se produce una contra-difusión que provoca la inestabilidad de la solución numérica. Precisamente, una de las claves de una adecuada simulación numérica está en poder controlar los efectos del error de discretización.

La convicción de que el proceso de discretización puede llevar, en algunos casos, a variar sustancialmente el problema que se está tratando de resolver, condujo a desarrollar una metodología específica de discretización basada en consideraciones físicas. Se trata de interpretar el proceso de discretización como una fase más del filtrado de escalas de movimiento. La idea es integrar las ecuaciones originales sobre las celdas, elementos, segmentos, etc., que componen la grilla (la cual determina un sistema discretizado), y definir adecuadamente las variables medias. Los términos que no admiten una expresión directa en función de las variables medias, constituyen los términos de interacción entre las escalas resueltas y las no resueltas (denominadas escalas sub-grilla). Para cerrar el planteo, se necesitan leyes para expresar esos términos de interacción, lo cual no es un problema sencillo. En definitiva, los resultados de las formulaciones basadas en este punto de vista, en poco difieren de los obtenidos directamente a partir de la formulación continua.

1.3. Programas computacionales

El proceso de discretización convierte al problema analítico en uno algebraico, apto para ser resuelto por una computadora digital. La resolución requiere diseñar un procedimiento de cálculo; éste se denomina algoritmo. La descripción detallada de los pasos de cálculo que constituyen un algoritmo es un programa, que puede, o no, involucrar el uso de una computadora. Un programa, para ser implementado en una computadora, debe ser escrito en uno de los lenguajes que la máquina es capaz de interpretar. Generalmente, se programa en lenguajes de alto nivel (BASIC, FORTRAN, PASCAL, etc.), que son aquellos adaptados a la forma expresiva del usuario (palabras, símbolos matemáticos, etc.). La computadora misma lo traduce (mediante intérpretes o compiladores) a lenguaje de máquina, y los convierte en instrucciones.

Una computadora no vale solo por lo que es como equipo, es decir, por su "hardware", sino también por la calidad y cantidad de programas de que dispone, es decir, por su "software". Este incluye no solo el propio sistema operativo de la máquina, absolutamente necesario para su operación, sino también las librerías de funciones matemáticas, de graficación, etc.

El programador (que, en la actualidad, puede ser prácticamente cualquier profesional o técnico), utilizando la base de hardware y software provista por la máquina, desarrolla programas específicos para una determinada disciplina. Un paquete de programas interconectados, dirigido a resolver una determinada familia de problemas, constituye un sistema computacional. Estos, en general, están preparados para ser "amigables" con el usuario. Es decir, la forma de alimentarlo de datos es clara y simple, y la presentación de resultados (tablas, gráficos) concisa y significativa. En este caso, los sistemas son productos comercializables y, a veces, altamente cotizados.

Un programa de cálculo requiere, en general, que los datos se entren y almacenen de una forma muy particular. Para lograrlo, partiendo de la información virgen de que se dispone (mediciones, esquemas, etc.), es necesario un proceso de elaboración (depuración, tabulación, análisis estadístico, etc.). Este proceso es conveniente automatizarlo, dando lugar a los denominados programas de preprocesamiento. Estos, en algunos casos, pueden involucrar el uso de periféricos especiales, tales como un digitalizador, o de interfases, tales como un conversor analógico-digital.

Todo proceso de cálculo requiere la elección de ciertos parámetros numéricos: intervalos de discretización, intervalos de tabulación, etc. El criterio de elección de esos parámetros depende de consideraciones particulares al problema a resolver; básicamente, está asociado a la escala de resolución deseada y/o posible. Sin embargo, ellos se hallan, en general, interrelacionados, es decir, la elección de alguno de ellos determina el rango de elección de los restantes, de modo de conseguir la precisión requerida y, en algunos casos, de mantener la estabilidad del proceso de cálculo.

Los resultados directos del cálculo no son, en general, los más significativos para el usuario, sino que éstos requieren aún cierta elaboración para proveer salidas útiles. Por ejemplo, en muchos casos se obtienen valores nodales de una o más variables; si se trata de un dominio bidimensional, estos resultados adquieren mayor significación, y producen mayor provecho, si se representan vistas tridimensionales, curvas de nivel, perfiles a lo largo de cortes especificados, etc. Estos procedimientos se implementan en los denominados programas de posprocesamiento.

CAPITULO 2

FORMULACION CONTINUA

2.1. Formulación diferencial

La forma más común de expresar matemáticamente las leyes físicas que gobiernan un fenómeno, es a través de ecuaciones diferenciales, es decir, expresiones que involucran derivadas de las variables.

2.1.1. Ecuaciones diferenciales ordinarias

Las ecuaciones diferenciales se denominan ordinarias cuando solo existe una variable independiente. Por ejemplo, si la función incógnita es u , y ésta depende solo de la variable t , una ecuación diferencial ordinaria de orden n para $u(t)$ es una expresión de la forma

$$(2.1) \quad F \left(t, u, \frac{du}{dt}, \frac{d^2u}{dt^2}, \dots, \frac{d^nu}{dt^n} \right) = 0$$

Para determinar completamente a la función $u(t)$, deben agregarse n condiciones complementarias, en la forma de condiciones iniciales y/o de contorno (las cuales pueden involucrar derivadas de hasta orden $n-1$). Si el problema está "bien planteado", la solución existe y es única. Si bien hay teoremas de existencia y unicidad para formas específicas de ecuaciones diferenciales, es, en general, la física del problema la mejor guía para determinar correctamente cuáles deben ser las condiciones complementarias a especificar.

Cuando las condiciones complementarias se especifican en un solo punto (condiciones iniciales), se está frente a un problema de valores iniciales. En caso contrario, se trata de un problema de valores de contorno. Los primeros se hallan asociados a procesos evolutivos, mientras que los segundos corresponden a situaciones estacionarias (o, en particular, de equilibrio).

Un tema importante en relación a las soluciones de ecuaciones diferenciales, es el de la estabilidad. Esta está asociada a la sensibilidad de la solución frente a cambios en las condiciones iniciales o de borde. Cuando cambios pequeños en los valores iniciales y/o de borde producen cambios también pequeños en la solución, ésta se dice estable, y viceversa. En problemas de valores iniciales, la estabilidad requiere que la diferencia entre la solución perturbada y la no perturbada tienda a cero a medida que éstas evolucionan. Si la diferencia tiende a crecer, la solución es inestable. En el caso intermedio en el que la diferencia permanece finita, se habla de una solución neutralmente estable. La inestabilidad de una solución muestra la existencia de un proceso físico inestable, que, en general, evoluciona hacia un estado que ya no puede ser descrito por la ecuación diferencial resuelta (es decir, debe redefinirse el modelo teórico).

A título de ejemplo, sea el siguiente problema de valores iniciales:

$$(2.2) \quad \frac{du}{dt} + au = 0 \quad ; \quad u(t=0)=u_0$$

para $t > 0$, donde a y u_0 son valores constantes. La Ec. (2.2) puede transformarse en

$$(2.3) \quad \int_{u_0}^u \frac{du}{u} = - \int_0^t a dt$$

Procediendo a la integración, se obtiene

$$(2.4) \quad u(t) = u_0 e^{-at}$$

La solución (2.4) es decreciente o creciente, dependiendo de si a es positivo o negativo, respectivamente. Para establecer la estabilidad de la solución, supóngase que se perturba el valor inicial en la cantidad δu . La solución perturbada \tilde{u} está dada, entonces, por una expresión idéntica a la (2.4), solo que debe reemplazarse u_0 por $u_0 + \delta u$. La diferencia entre ambas soluciones vale

$$(2.5) \quad \tilde{u} - u = \delta u e^{-at}$$

La Ec. (2.5) muestra que la solución u es estable si $a > 0$, y viceversa (si $a = 0$, es neutralmente estable, pero éste es un caso trivial).

El ejemplo anterior desarrolló una técnica de resolución directa de una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, el tipo de solución obtenida, de forma exponencial, es característica de cualquier ecuación diferencial lineal homogénea. Sea, por ejemplo, el siguiente problema de valores de contorno:

$$(2.6) \quad \frac{d^2 u}{dx^2} + u + x = 0 \quad ; \quad u(0)=0, \quad \frac{du}{dx}(1)=\bar{q}$$

para $0 < x < 1$. Esta ecuación es lineal, pero inhomogénea. Su solución general es suma de una solución particular y de la solución general de la homogénea. Una solución particular de la Ec. (2.6) es

$$(2.7) \quad u(x) = -x$$

(nótese que ésta no verifica las condiciones de contorno). La forma de la solución de la ecuación homogénea es, de acuerdo a lo discutido,

$$(2.8) \quad u(x) = A e^{\lambda x}$$

Introduciendo la Ec. (2.8) en la ecuación homogénea se obtiene la siguiente ecuación característica

$$(2.9) \quad \lambda^2 + 1 = 0$$

que provee las dos soluciones $\lambda_1=+i$ y $\lambda_2=-i$. La solución general de la homogénea es una superposición de las dos formas de solución resultantes de introducir estos dos valores de λ . En consecuencia, la solución general de la inhomogénea es de la forma

$$(2.10) \quad u(x) = -x + a \cos x + b \sin x$$

donde a y b son constantes a ser determinadas en base a las condiciones de contorno. De esta forma se obtiene la solución final:

$$(2.11) \quad u(x) = (1+\bar{q}) \frac{\sin x}{\cos 1} - x$$

Es fácil demostrar, siguiendo la metodología anterior, que la solución (2.11) es neutralmente estable frente a variaciones del valor \bar{q} .

Existen una variedad de técnicas y procedimientos para obtener soluciones exactas de ecuaciones diferenciales ordinarias más generales que las mostradas en los ejemplos anteriores. Sin embargo, con ellos solo se pueden resolver una cantidad limitada de problemas. El espectro se amplía si se recurre a métodos analíticos para obtener soluciones aproximadas. En este sentido, existen técnicas de perturbación y análisis asintóticos que, en muchos casos, proveen resultados más útiles que la propia solución exacta, al poner de manifiesto la importancia relativa de los mecanismos físicos intervinientes. Todos estos métodos pueden generalizarse, en principio, para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (Bender and Orszag, 1978).

2.1.2. Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

Cuando existe más de una variable independiente (por ejemplo, el tiempo t y la coordenada espacial x), las ecuaciones diferenciales involucran derivadas parciales de las variables dependientes. Los problemas resultantes adquieren una complejidad, en general, bastante mayor que los asociados a ecuaciones diferenciales ordinarias.

Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales se clasifican en tres tipos: hiperbólicas, parabólicas y elípticas. Las dos primeras clases están asociadas a problemas evolucionarios (es decir, a problemas puros de valores iniciales o mixtos de valores iniciales y de contorno). Las ecuaciones hiperbólicas corresponden a problemas de propagación de ondas, es decir, de transmisión de información a velocidad finita. Las ecuaciones parabólicas, en cambio, corresponden a un proceso de difusión, es decir, transmisión de información con velocidad infinita. Las ecuaciones elípticas, por su parte, están asociadas a problemas estacionarios (es decir, a problemas puros de valores de contorno).

La determinación del carácter de una ecuación, se lleva a cabo utilizando la metodología de hallar las curvas características asociadas a dicha ecuación. Desde el punto de vista matemático, éstas son las curvas en el plano x,t (o, en general, las hipersuperficies en el espacio de las variables independientes) a lo largo de las cuales pueden ser discontinuas las derivadas de mayor orden de la ecuación diferencial. Físicamente, las curvas

interpretarse como la trayectoria de propagación de la información. En rigor, ellas tienen existencia real solo en problemas evolucionarios. En problemas elípticos, las curvas características resultan complejas, lo cual es el criterio para determinar este carácter. En problemas parabólicos, algunas curvas son reales y otras complejas, o son reales pero perpendiculares al eje de los tiempos (con este criterio se diferencian los problemas parabólicos de los hiperbólicos, ya que, entonces, la velocidad de propagación resulta infinita).

Para ilustrar la aplicación del método de obtención de las curvas características, se lo desarrollará para la siguiente ecuación diferencial lineal de segundo orden (a la cual pueden reducirse muchas ecuaciones de mayor orden):

$$(2.14) \quad a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + d \frac{\partial u}{\partial t} + e \frac{\partial u}{\partial x} + f u = g$$

donde a, b, c, d, e, f, g son constantes. Si se define

$$(2.15) \quad v = \frac{\partial u}{\partial t}$$

$$(2.16) \quad w = \frac{\partial u}{\partial x}$$

la Ec. (2.14) puede ser transformada en una ecuación diferencial de primer orden

$$(2.17) \quad a \frac{\partial v}{\partial t} + b \frac{\partial v}{\partial x} + c \frac{\partial w}{\partial x} + d v + e w + f u = g$$

La variación de las cantidades v y w (es decir, de las derivadas de u) a lo largo de un segmento infinitesimal en el plano x, t está dada por

$$(2.18) \quad dv = \frac{\partial v}{\partial t} dt + \frac{\partial v}{\partial x} dx$$

$$(2.19) \quad dw = \frac{\partial w}{\partial t} dt + \frac{\partial w}{\partial x} dx$$

Si se complementan las Ecs. (2.17) a (2.19) con la siguiente relación entre v y w

$$(2.20) \quad \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial t}$$

queda determinado el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden

$$(2.21) \quad \begin{bmatrix} a & b & 0 & c \\ dt & dx & 0 & 0 \\ 0 & 0 & dt & dx \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial v}{\partial t} \\ \frac{\partial v}{\partial x} \\ \frac{\partial w}{\partial t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -d v - e w - f u + g \\ dv \\ dw \end{bmatrix}$$

Nótese que las incógnitas de las Ecs. (2.21) son las derivadas de mayor orden de la ecuación diferencial. Para que éstas puedan ser discontinuas sobre ciertas trayectorias del plano x,t , dicho sistema debe de estar indeterminado a lo largo de ellas. En particular, el determinante de la matriz de coeficientes debe anularse, lo cual conduce a la condición

$$(2.22) \quad a \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - b \frac{dx}{dt} + c = 0$$

Las raíces de la Ec. (2.22), que definen la ecuación para las curvas características (en este caso particular son rectas), están dadas por

$$(2.23) \quad \frac{dx}{dt} = \frac{b \pm (b^2 - 4ac)^{1/2}}{2a}$$

Si el discriminante es positivo, la Ec. (2.23) define dos familias de trayectorias sobre el plano x,t , que corresponden a sendas familias de curvas características, y el problema es hiperbólico. En cambio, si el discriminante es negativo dichas trayectorias son complejas, lo cual muestra que el problema es elíptico. En el caso de transición, es decir cuando el discriminante es nulo, las dos familias de trayectorias coinciden (aunque apuntan en sentidos contrarios), y el problema es parabólico. En este caso, si t es la coordenada temporal, consideraciones físicas llevan a concluir que las trayectorias deben ser normales al eje de los tiempos.

Dado que muchas de las formulaciones diferenciales de problemas físicos parten de leyes de conservación, una de las formas básicas y más comunes de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (de tipo hiperbólico) es

$$(2.24) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = G$$

donde u puede ser un vector (que incluye masa, cantidad de movimiento, etc.), $F(u)$ es una densidad de flujo de la cantidad u , y G es un término fuente (aporte de masa, campo de fuerzas, etc.). Por ejemplo, la ecuación de conservación de la masa (o de continuidad) para el escurrimiento de agua en un canal es

$$(2.25) \quad \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial (hu)}{\partial x} = q$$

donde h es el tirante, u la velocidad y q el aporte lateral por unidad de ancho.

Como en el caso de las ecuaciones diferenciales ordinarias, existen una variedad de procedimientos para obtener soluciones exactas de ecuaciones en derivadas parciales, muchos de ellos siendo extensiones de métodos desarrollados para las primeras. En problemas hiperbólicos resulta de gran utilidad el método de las curvas características. Para las ecuaciones parabólicas y elípticas, una técnica muy utilizada es separación de variables, que transforma al problema en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. También pueden utilizarse transformaciones de similitud o las transformadas de Fourier, Laplace, etc. (Morse y Feshbach, 1953).

2.2. Formulaci3n d3bil

Existen formas alternativas de formular un problema en lugar de hacerlo en forma diferencial. Estas formas alternativas permiten, como se ver3, ampliar la categor3a de soluciones posibles al problema en cuesti3n. Adem3s, constituyen nuevos puntos de partida para desarrollar m3todos aproximados de resoluci3n.

Para ilustrar qu3 se entiende por una formulaci3n d3bil, se partir3 del siguiente problema diferencial el3ptico en el plano x, y :

$$(2.26) \quad \nabla^2 u + f(u, x, y) = 0 \quad \text{en } \Omega$$

$$(2.27) \quad u = \bar{u} \quad \text{sobre } \Gamma_1$$

$$(2.28) \quad \frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q} \quad \text{sobre } \Gamma_2$$

donde f es una funci3n arbitraria, aunque conocida, \bar{u} y \bar{q} son datos, $\Gamma_1 + \Gamma_2 = \Gamma$, siendo Γ el contorno total del dominio Ω , y n es la normal exterior a Ω . N3tese que la soluci3n $u(x, y)$ a este problema debe ser continua hasta la segunda derivada, es decir, u debe pertenecer a la clase C^2 .

Una forma de encarar la obtenci3n de una soluci3n aproximada al sistema (2.26)-(2.28), es requerir que esas ecuaciones se satisfagan en un sentido medio. Por ejemplo, se puede pedir que

$$(2.29) \quad \int_{\Omega} (\nabla^2 u + f) w d\Omega + \int_{\Gamma_1} (u - \bar{u}) \tilde{w} d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \bar{q} \right) \hat{w} d\Gamma = 0$$

donde w , \tilde{w} y \hat{w} son funciones de peso (o de prueba) que distribuyen el error. Est3 claro que si la Ec. (2.29) debe satisfacerse para funciones de peso arbitrarias, 3sta es equivalente a las Ecs. (2.26)-(2.28).

Si se integra por partes el primer t3rmino de la Ec. (2.29), es decir, se aplica la primera f3rmula de Green:

$$(2.30) \quad \int_{\Omega} \nabla^2 \phi \psi d\Omega = - \int_{\Omega} \nabla \phi \cdot \nabla \psi d\Omega + \int_{\Gamma} \psi \frac{\partial \phi}{\partial n} d\Gamma$$

donde ϕ y ψ son funciones arbitrarias, se obtiene

$$(2.31) \quad - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w d\Omega + \int_{\Omega} f w d\Omega + \int_{\Gamma} w \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma + \int_{\Gamma_1} (u - \bar{u}) \tilde{w} d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \bar{q} \right) \hat{w} d\Gamma = 0$$

Ahora pueden realizarse algunas simplificaciones: en primer lugar, se toma (sin perder generalidad) $\hat{w} = -w$; en segundo lugar, se elige que $w = 0$ sobre Γ_1 (lo cual tampoco restringe la generalidad del planteo); finalmente, se impone que $u = \bar{u}$ sobre Γ_1 (aunque la soluci3n sea aproximada en el resto del dominio). Entonces, la Ec. (2.31) se reduce a

$$(2.32) \quad - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w \, d\Omega + \int_{\Omega} f w \, d\Omega + \int_{\Gamma_2} \bar{q} w \, d\Gamma = 0$$

La Ec. (2.32), junto con la Ec. (2.27), es la formulación débil del problema diferencial (2.26)-(2.28). Si la función de peso w es arbitraria (pero perteneciente a C^1 y haciéndose nula sobre Γ_1) esta formulación se reduce a la anterior. Sin embargo, ella es más amplia, en el sentido de que permite la existencia de soluciones con una restricción menor en cuanto a continuidad. En efecto, la Ec. (2.32) muestra que solo es necesario que u pertenezca a C^1 , es decir, puede tener derivada segunda discontinua. De existir, éstas se denominan soluciones débiles o generalizadas (Richtmyer, 1978).

La consideración de soluciones débiles es crucial en problemas hiperbólicos no lineales. Sea, por ejemplo, un problema de valores iniciales definido por la Ec. (2.24), con $G=0$, es decir

$$(2.33) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} = 0$$

con condiciones iniciales dadas por

$$(2.34) \quad u(x, t=0) = u_0(x)$$

Nótese que este borde ($t=0$) es del tipo Γ_1 . Tal como está formulado, la solución de este problema debe pertenecer a la clase C^0 (ya que las derivadas primeras pueden ser discontinuas sobre las curvas características). Introduciendo, como antes, una función de peso w , la Ec. (2.33) conduce a

$$(2.35) \quad \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \right) w = 0$$

Si se integra por partes la Ec. (2.35) se obtiene

$$(2.36) \quad - \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(u \frac{\partial w}{\partial t} + F \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \int_{-\infty}^{\infty} dx (uw) \Big|_{t=0}^{t \rightarrow \infty} + \int_0^{\infty} dt (Fw) \Big|_{x \rightarrow -\infty}^{x \rightarrow \infty} = 0$$

De acuerdo a las simplificaciones discutidas más arriba, es conveniente tomar $w=0$ sobre el borde $t=0$ (ya que es del tipo Γ_1). Si, además, se admite que w se anula fuera de un dominio finito (es decir, tiene soporte acotado), la Ec. (2.36) se reduce a:

$$(2.37) \quad \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(u \frac{\partial w}{\partial t} + F \frac{\partial w}{\partial x} \right) = 0$$

Si la Ec. (2.37) debe satisfacerse para cualquier función de prueba (perteneciente a C^1 y sujeta a las restricciones ya explicitadas), constituye una formulación alternativa a la Ec. (2.33) (en realidad, la Ec. (2.37) es la definición de derivada en el sentido de las distribuciones). Esta es la formulación débil del problema que, como en el caso anterior, es algo más general que la formulación diferencial, al permitir soluciones

discontinuas. Estas soluciones aparecen asociadas a fenómenos físicos de gran interés: ondas de choque en gases, ondas de frente abrupto en canales, etc. A partir de la Ec. (2.37) es posible obtener explícitamente la relación algebraica entre los valores de la solución inmediatamente hacia ambos lados de la discontinuidad. Esta es

$$(2.38) \quad \dot{x} [u] = [F]$$

donde $\dot{x}=dx/dt$ es la velocidad con que se desplaza la discontinuidad, y el símbolo $[F]$ significa diferencia entre los valores límites de la función F sobre ambos lados de la discontinuidad. La Ec. (2.38) se denomina relación de Rankine-Hugoniot (Richtmyer, 1978).

2.3. Formulación variacional

La formulación variacional de un problema, como alternativa a la formulación diferencial, ya es clásica en la Mecánica. Sin embargo, ella no siempre existe.

El problema que plantea una formulación variacional es encontrar una función (o funciones) que hace estacionaria (es decir, maximiza o minimiza) una funcional (o sistema de funcionales), y que está sujeta a ciertas condiciones de borde. Una funcional es una función de funciones que, en la mayoría de los problemas, representa una cantidad física (por ejemplo, la energía).

El funcional, como en el caso de la formulación débil, contiene derivadas de un orden menor que el operador diferencial, por lo cual permite soluciones de una clase más amplia de funciones. En realidad, existe un parentesco entre las formulaciones débil y variacional. Por ejemplo, supóngase que la función de peso w es una variación (débil) de u , y denótesela, entonces, como δu . Si, además, se supone que en la Ec. (2.32) la función $f(u, x, y)$ es de la forma $f = u + g(x, y)$, donde g es una función arbitraria, dicha ecuación puede escribirse como

$$(2.39) \quad -\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla \delta u \, d\Omega + \int_{\Omega} (u+g) \delta u \, d\Omega + \int_{I_2} \bar{q} \delta u \, d\Gamma = 0$$

que es equivalente a:

$$(2.40) \quad \int_{\Omega} \left[-\frac{1}{2} \delta(\nabla u)^2 + \frac{1}{2} \delta(u^2) + \delta(gu) \right] d\Omega + \int_{I_2} \delta(\bar{q}u) \, d\Gamma = 0$$

Si se define el funcional

$$(2.41) \quad I(u) = \int_{\Omega} \left[\frac{(\nabla u)^2}{2} - \frac{u^2}{2} - gu \right] d\Omega - \int_{I_2} \bar{q}u \, d\Gamma$$

la Ec. (2.40) es equivalente a requerir que

$$(2.42) \quad \delta I = 0$$

es decir, que el funcional sea estacionario. Esta es la formulación variacional del problema en cuestión (Elsgolts, 1969).

Recuérdese que, para que la Ec. (2.39) sea válida, se requiere que $\delta u = 0$ sobre I_1 . Esta se denomina condición de borde geométrica, ya que debe ser impuesta explícitamente. En cambio, la condición de contorno sobre I_2 se ha de cumplir automáticamente, por lo cual se denomina condición de borde natural.

En el caso particular de una dimensión espacial, y tomando $g(x) = x$, $x = 0$ como el contorno I_1 y $x = 1$ como el contorno I_2 , se tiene el problema cuya formulación diferencial se presenta en la Ec. (2.6). De acuerdo a la Ec. (2.41), el funcional asociado es

$$(2.43) \quad I(u) = \int_0^1 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{u^2}{2} - xu \right] dx - \bar{q}u(1)$$

Para verificar que la formulación variacional provee el mismo resultado que la diferencial, se tomará una solución de la forma

$$(2.44) \quad u(x) = a \sin x + bx$$

donde las constantes a y b se ajustarán de manera de hacer estacionario el funcional. Reemplazando la Ec. (2.44) en la Ec. (2.43) y operando, se obtiene

$$(2.45) \quad I(u) = \frac{\sin 2}{4} a + \frac{b^2}{3} + \cos 1 ab + [\cos 1 - (1 + \bar{q}) \sin 1] a - (\bar{q} + \frac{1}{3}) b$$

Para extremar la funcional (2.45) se impone que $\partial I / \partial a = \partial I / \partial b = 0$, lo cual conduce al siguiente sistema de ecuaciones:

$$(2.46) \quad \begin{bmatrix} \frac{\sin 2}{2} & \cos 1 \\ \cos 1 & \frac{2}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\cos 1 + (1 + \bar{q}) \sin 1 \\ \bar{q} + \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

cuya solución es

$$(2.47) \quad \begin{cases} a = \frac{1 + \bar{q}}{\cos 1} \\ b = -1 \end{cases}$$

la cual, reemplazada en la Ec. (2.44), da la solución (2.11), tal como se quería mostrar.

2.4. Formulación integral

La formulación integral de un problema surge de avanzar un paso más en la integración por partes que condujo a la formulación débil. Aplicando, entonces, nuevamente la primera fórmula de Green, Ec. (2.30) = 1 - Ec. (2.31), se obtiene

$$(2.48) \int_{\Omega} u \nabla^2 w \, d\Omega + \int_{\Omega} f w \, d\Omega - \int_{\Gamma} u \frac{\partial w}{\partial n} \, d\Gamma + \int_{\Gamma} w \frac{\partial u}{\partial n} \, d\Gamma + \\ + \int_{\Gamma_1} (u - \bar{u}) \tilde{w} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_2} \left(\frac{\partial u}{\partial n} - \bar{q} \right) \hat{w} \, d\Gamma = 0$$

Si se elige, sin pérdida de generalidad, que $\hat{w} = -w$ y $\tilde{w} = \partial w / \partial n$, la Ec. (2.48) se reduce a

$$(2.49) \int_{\Omega} u \nabla^2 w \, d\Omega + \int_{\Omega} f w \, d\Omega + \int_{\Gamma_1} w \frac{\partial u}{\partial n} \, d\Gamma + \int_{\Gamma_2} w \bar{q} \, d\Gamma - \\ - \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial w}{\partial n} \, d\Gamma - \int_{\Gamma_2} u \frac{\partial w}{\partial n} \, d\Gamma = 0$$

Nótese que la restricción sobre la categoría de la solución u es aún más suave que antes: sólo es necesario que sea continua (en cambio, w debe pertenecer a C^2).

A partir de la Ec. (2.49) se generan dos clases distintas de formulaciones integrales: la directa y la indirecta. En lo que sigue se analizará el caso particular en que

$$(2.50) \quad f(u, x, y) = \alpha u + g(x, y)$$

donde α es una constante y g una función arbitraria.

2.4.1. Formulación directa

Cuando la función f está dada por la Ec. (2.50), las integrales de área de la Ec. (2.49) pueden reescribirse como

$$(2.51) \quad \int_{\Omega} u (\nabla^2 w + \alpha w) \, d\Omega + \int_{\Omega} g w \, d\Omega$$

Sea, ahora, la siguiente ecuación diferencial:

$$(2.52) \quad \nabla^2 u^* + \alpha u^* + \delta(x - x_p, y - y_p) = 0$$

donde δ es la función generalizada delta de Dirac y x_p, y_p , las coordenadas, fijas pero arbitrarias, de un punto P . La solución $u^*(x, y; x_p, y_p)$ de la Ec. (2.52) sobre un dominio infinito (con $u^* \rightarrow 0$ en el infinito) se denomina solución fundamental del operador diferencial $(\nabla^2 + \alpha)$, y representa el efecto de una fuente (de intensidad unitaria) concentrada en el punto P . Por ejemplo, la solución fundamental para el caso particular $\alpha = 0$ es

$$(2.53) \quad u^*(x, y; x_p, y_p) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{1}{r}$$

donde $r = [(x - x_p)^2 + (y - y_p)^2]^{1/2}$.

Si se elige $w = u^*$, el primer término de la Ec. (2.51) da

$$(2.54) \quad \int_{\Omega} u (\nabla^2 w + \alpha w) \, d\Omega = \begin{cases} -u(x_p, y_p) & \text{si } P \text{ es interior a } \Omega \\ -\frac{1}{2} u(x_p, y_p) & \text{si } P \text{ está sobre } \Gamma \\ 0 & \text{si } P \text{ es exterior a } \Omega \end{cases}$$

FE DE ERRATAS

(LHA 064-003-B7)

En la pág. 15:

...intensidad unitaria) concentrada en el punto P. La solución fundamental para el presente problema es

$$(2.53) \quad u^*(x, y; x_p, y_p) = \frac{1}{4i} H_0^{(2)}(\sqrt{\alpha} r)$$

donde $r = [(x-x_p)^2 + (y-y_p)^2]^{1/2}$.

Si se elige $w = u^*$, el primer término de la Ec. (2.51) da

$$(2.54) \quad \int_{\Omega} u(\nabla^2 w + \alpha w) d\Omega = \begin{cases} -u(x_p, y_p) & \text{si } P \text{ es interior a } \Omega \\ 0 & \text{si } P \text{ es exterior a } \Omega \end{cases}$$

Si el punto P cae sobre la frontera Γ es necesario desarrollar un tratamiento especial para evaluar su contribución, ya que la solución fundamental es singular para $r=0$. El tratamiento, clásico en este contexto, consiste en evitar el punto P, deformando la frontera Γ en su derredor mediante una semicircunferencia Γ_ϵ de radio ϵ , que luego se hace tender a cero. Si el punto P permanece en el interior, tal como se muestra en la Fig. 2.1, la integral de área da, de acuerdo a la Ec. (2.54), una contribución $-u(x_p, y_p)$. Pero también hay que considerar, en la Ec. (2.49), los términos de la forma

$$(2.54a) \quad \int_{\Gamma_\epsilon} u \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma$$

En efecto, para la solución fundamental dada en la Ec. (2.53) el término dominante de su expansión es

$$(2.54b) \quad \frac{\partial u^*}{\partial n} = \frac{du^*}{dr} \approx -\frac{1}{2\pi r}$$

por lo cual la contribución (2.54a) puede evaluarse como

$$(2.54c) \quad \int_{\Gamma_\epsilon} u \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma \approx u(x_p, y_p) \left(-\frac{1}{2\pi\epsilon}\right) \pi\epsilon = -\frac{1}{2} u(x_p, y_p)$$

que es exacta en el límite $\epsilon \rightarrow 0$. Es fácil demostrar, siguiendo la misma metodología, que los términos de la forma

$$(2.54d) \int_{\Gamma_\epsilon} u^* \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma$$

dan una contribución nula en ese límite.

Entonces, si se toma al punto P sobre el contorno Γ' , la Ec. (2.49), de acuerdo a las Ecs. (2.51), (2.54) y (2.54c), se convierte en

$$(2.55) \dots\dots\dots$$

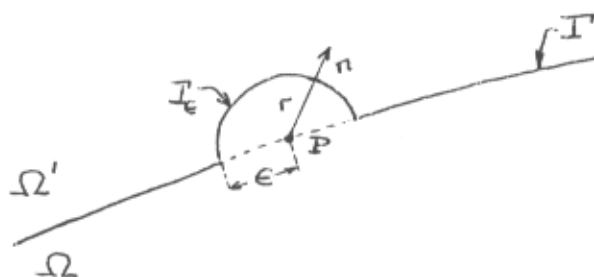


Figura 2.1. Artificio para calcular la contribución cuando el punto P cae sobre la frontera.

Entonces, si se toma al punto P sobre el contorno Γ , la Ec. (2.49), de acuerdo a las Ecs. (2.51) y (2.54), se convierte en

$$(2.55) \quad -\frac{1}{2} u(x_p, y_p) + \int_{\Gamma_1} u^* \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma - \int_{\Gamma_2} u \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma = \\ = - \int_{\Omega} g u^* d\Omega - \int_{\Gamma_2} u^* \bar{q} d\Gamma + \int_{\Gamma_1} \bar{u} \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma$$

La Ec. (2.55) es una ecuación integral, cuyas incógnitas son los valores de u sobre Γ_2 y los de $\partial u / \partial n$ sobre Γ_1 . Los términos del miembro de la derecha no contienen incógnitas, por lo cual pueden evaluarse (en forma exacta o aproximada).

Una vez resuelta la Ec. (2.55), se conocen u y $\partial u / \partial n$ completamente sobre todo el contorno Γ . Para obtener la solución en el interior de Ω , puede tomarse el punto P en esa zona, con lo cual la Ec. (2.49) conduce a

$$(2.56) \quad u(x_p, y_p) = \int_{\Omega} g u^* d\Omega + \int_{\Gamma} u^* \frac{\partial u}{\partial n} d\Gamma - \int_{\Gamma} u \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma$$

que es una fórmula explícita, ya que los términos de la derecha no contienen incógnitas. Se completa así el planteo de la formulación integral directa (Brebbia and Walker, 1980).

A título de ejemplo, considérese el caso unidimensional ya discutido en la sección 2.4. La solución fundamental, teniendo en cuenta que $\alpha = 1$, es

$$(2.57) \quad u^*(x; x_p) = -\frac{1}{2} \text{sen}|r|$$

donde $r = x - x_p$. La ecuación correspondiente a la Ec. (2.55), cuando P coincide con el borde $x=0$, es

$$(2.58) \quad -\frac{1}{2} u(0) + \left[u^* \frac{\partial u}{\partial n} \right]_{x=0} - \left[u \frac{\partial u^*}{\partial n} \right]_{x=1} = \\ = - \int_0^1 x u^* dx - \left[u^* \right]_{x=1} \bar{q} + u(0) \left[\frac{\partial u^*}{\partial n} \right]_{x=0}$$

Dado que

$$(2.59) \quad \left\{ \begin{array}{l} u(0) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial n} \Big|_{x=0} = - \frac{\partial}{\partial x} \Big|_{x=0} \\ \frac{\partial}{\partial n} \Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial x} \Big|_{x=1} \\ u^* = -\frac{1}{2} \text{sen } x \\ \frac{\partial u^*}{\partial x} = -\frac{1}{2} \cos x \end{array} \right.$$

la Ec. (2.58) da

$$(2.60) \quad u(x=1) = \frac{\operatorname{sen} 1}{\cos 1} (1+\bar{q}) - 1$$

que, lógicamente, coincide con lo calculado por medio de la Ec. (2.11).

En forma totalmente similar puede plantearse la Ec. (2.55) para el caso en que P coincida con el borde $x=1$, de donde surge el valor de $\partial u / \partial x$ en $x = 0$. Finalmente, con $0 < x_p < 1$, puede utilizarse la Ec. (2.56) para obtener la solución completa.

2.4.2. Función de Green

Una variante de la formulación integral directa es el método de la función de Green. La función de Green, o de influencia, está emparentada a la solución fundamental, pero, a diferencia de ésta, debe satisfacer ciertas condiciones de borde sobre Γ .

Supóngase, para simplificar, que el borde Γ es enteramente del tipo I_1 (es decir, se trata de un problema con condiciones de borde del tipo de Dirichlet). La función de Green $G(x,y;x_p,y_p)$ asociada a este problema es la que satisface la Ec. (2.52) y la condición de borde

$$(2.57) \quad G = 0$$

si (x,y) está sobre Γ . Nótese que si se conoce la función de Green para el problema en cuestión, puede utilizarse directamente la Ec. (2.56) para calcular la solución, es decir

$$(2.58) \quad u(x_p,y_p) = \int_{\Omega} gG \, d\Omega - \int_{\Gamma} u \frac{\partial G}{\partial n} \, d\Gamma$$

Obviamente, la dificultad se traslada a obtener la función de Green para un dado problema, lo cual requiere, precisamente, resolver ecuaciones integrales del tipo de la Ec. (2.55). La ventaja del método, entonces, solo se manifiesta cuando es necesario resolver una familia de problemas con contornos fijos, ya que, en este caso, la ecuación integral debe resolverse una sola vez.

2.4.3. Formulación indirecta

La formulación integral indirecta, como se verá, no resulta en una ventaja operativa. Sin embargo, conduce a una interpretación del proceso de cálculo conceptualmente más rica.

La idea básica consiste en plantear en el exterior de Ω (que se denominará Ω') un problema simplificado, pero que produce, en el interior de Ω , el mismo efecto que el problema físico real. Específicamente, se considera que esa zona está libre de fuentes, es decir, se plantea que la solución u' en Ω' satisface

$$(2.59) \quad \nabla^2 u' + \alpha u' = 0$$

y que existe una distribución de elementos (fuentes o dipolos) sobre Γ que da cuenta del efecto neto sobre la región Ω .

Obviamente, es posible plantear el problema en Ω' en forma integral. Si se elige el punto P en el exterior de Ω' (es decir, en el interior de Ω), la Ec. (2.49), con $w=u^*$, conduce a

$$(2.60) \quad \int_{\Gamma} u^* \frac{\partial u'}{\partial n'} d\Gamma - \int_{\Gamma} u' \frac{\partial u^*}{\partial n'} d\Gamma = 0$$

donde se ha supuesto que $u' \rightarrow 0$ en el infinito, y donde $\partial/\partial n' = -\partial/\partial n$. A partir de aquí existen dos alternativas posibles. La primera, que se desarrollará en cierto detalle, consiste en suponer que $u' = u$ sobre Γ , pero que $\partial u/\partial n$ puede ser discontinuo, lo cual equivale a admitir que hay una distribución de fuentes sobre Γ .

En este caso, sumando miembro a miembro las Ecs. (2.55) y (2.60) se obtiene

$$(2.61) \quad -\frac{1}{2} u(x_p, y_p) + \int_{\Gamma} \sigma u^* d\Gamma = - \int_{\Omega} g u^* d\Omega$$

donde $\sigma = \partial u/\partial n + \partial u'/\partial n' = \partial u/\partial n - \partial u'/\partial n$ es la intensidad, por unidad de área, de la distribución de fuentes. Diferenciando la Ec. (2.61) en la dirección de la normal a Γ se llega a

$$(2.62) \quad -\frac{1}{2} \frac{\partial u(x_p, y_p)}{\partial n_p} + \int_{\Gamma} \sigma \frac{\partial u^*}{\partial n_p} d\Gamma - \frac{1}{2} \sigma(x_p, y_p) = \\ = - \int_{\Omega} g \frac{\partial u^*}{\partial n_p} d\Omega$$

Las Ecs. (2.61) y (2.62) son ecuaciones integrales para la función incógnita σ . La primera se utiliza cuando el punto P está sobre Γ_1 (ya que, entonces, $u(x_p, y_p)$ es dato), y la segunda cuando P está sobre Γ_2 . Una vez conocida σ , la solución en Ω se calcula de acuerdo a la fórmula que surge de sumar miembro a miembro las Ecs. (2.56) y (2.60), es decir

$$(2.63) \quad u(x_p, y_p) = \int_{\Omega} g u^* d\Omega + \int_{\Gamma} u^* \sigma d\Gamma$$

Queda así completada la formulación indirecta con fuentes (Brebbia and Walker, 1980).

La segunda alternativa es la formulación indirecta con dipolos. En este caso se supone que $\partial u'/\partial n = \partial u/\partial n$ sobre Γ , pero que u puede ser discontinuo. La ecuación equivalente a la Ec. (2.61) es

$$(2.64) \quad -\frac{1}{2} u(x_p, y_p) + \int_{\Gamma} \mu \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma = - \int_{\Omega} g u^* d\Omega$$

donde $\mu = u' - u$ es la intensidad, por unidad de área, de la distribución de dipolos. Para obtener la ecuación equivalente a la Ec. (2.62) hay que diferenciar (2.64). Esto conduce a una expresión más complicada desde el punto de vista operativo, ya que aparece la derivada segunda de u^* . Es por eso que la formulación con fuentes es la más utilizada en la práctica.

En la pág. 18:

...de fuentes sobre Γ .

Si el punto P está sobre Γ , puede utilizarse la metodología ya descrita para circunvalar este punto. Si se hace como en la Fig. 2.1, la integral de área de la Ec. (2.49) aún se anula, pero hay una contribución extra dada por

$$(2.60a) \int_{\Gamma_\epsilon} u' \frac{\partial u^*}{\partial n'} d\Gamma_\epsilon = - \int_{\Gamma_\epsilon} u' \frac{du^*}{dr} d\Gamma_\epsilon = \frac{1}{2} u'(x_p, y_p)$$

con lo cual la Ec. (2.49) da

$$(2.60b) -\frac{1}{2} u'(x_p, y_p) + \int_{\Gamma} u^* \frac{\partial u'}{\partial n'} d\Gamma - \int_{\Gamma} u' \frac{\partial u^*}{\partial n'} d\Gamma = 0$$

Entonces, sumando las Ecs. (2.55) y (2.60b) se obtiene

$$(2.61) -u(x_p, y_p) + \int_{\Gamma} \epsilon u^* d\Gamma = - \int_{\Omega} g u^* d\Omega$$

donde $\epsilon = \dots$

En la Ec. (2.62):

donde dice: $-\frac{1}{2} \frac{\partial u(x_p, y_p)}{\partial n_p}$ debe decir $\frac{\partial u(x_p, y_p)}{\partial n_p}$

En la Ec. (2.64):

donde dice: $-\frac{1}{2} u(x_p, y_p)$ debe decir $-u(x_p, y_p) - \frac{1}{2} \mu$

CAPITULO 3
DISCRETIZACION

3.1. Diferencias finitas

El método de las diferencias finitas es una técnica de resolución aproximada que parte de la formulación diferencial del problema. La idea básica del método consiste en aproximar las derivadas por cocientes en diferencias, que involucran valores de la solución en una serie de puntos del espacio de definición del problema denominados nodos (Forsythe and Wasow, 1960; Richtmyer and Morton, 1967; Marshall, 1985 y 1986).

Por ejemplo, sea un problema unidimensional donde debe aproximarse la derivada du/dx . La posibilidad más simple consiste en expresarla de la siguiente manera:

$$(3.1) \quad \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=\xi} = \frac{u_{j+1} - u_j}{x_{j+1} - x_j}$$

donde el subíndice identifica el nodo. Ahora bien, la precisión de la aproximación expresada en la Ec. (3.1) depende de cual es el punto ξ en el cual se quiere aproximar la derivada, en relación con los puntos x_j y x_{j+1} . Si ξ coincide con x_j , la Ec. (3.1) es una aproximación en adelanto para du/dx , y, tal cual se observa en la Fig. 3.1, es menos precisa, en general, que en el caso en que ξ es interior al intervalo (x_j, x_{j+1}) . Lo mismo sucede cuando ξ coincide con x_{j+1} , que constituye una aproximación en atraso.

Para determinar el orden de precisión de la aproximación, se desarrolla la función en serie de Taylor alrededor de ξ , es decir,

$$(3.2) \quad u_j = u(\xi) + \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=\xi} (x_j - \xi) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x=\xi} (x_j - \xi)^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=\xi} (x_j - \xi)^3 + O(4)$$

$$(3.3) \quad u_{j+1} = u(\xi) + \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=\xi} (x_{j+1} - \xi) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x=\xi} (x_{j+1} - \xi)^2 + \frac{1}{6} \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=\xi} (x_{j+1} - \xi)^3 + O(4)$$

donde $O(4)$ significa términos de orden cuatro en el respectivo incremento. Reemplazando las Ecs. (3.2) y (3.3) en la expresión en diferencias dada en la Ec. (3.1) se obtiene

$$(3.4) \quad \frac{u_{j+1} - u_j}{x_{j+1} - x_j} = \left. \frac{du}{dx} \right|_{x=\xi} + \left(\frac{x_{j+1} + x_j}{2} - \xi \right) \left. \frac{d^2u}{dx^2} \right|_{x=\xi} + \frac{1}{2} \left[\frac{x_{j+1}^2 + x_{j+1}x_j + x_j^2}{3} - (x_{j+1} + x_j)\xi + \xi^2 \right] \left. \frac{d^3u}{dx^3} \right|_{x=\xi} + \dots$$

Cuando $\xi = x_j$, la Ec. (3.4) se reduce a

$$(3.5) \quad \frac{u_{j+1} - u_j}{x_{j+1} - x_j} = \frac{du}{dx} \Big|_{x=x_j} + \frac{h}{2} \frac{d^2u}{dx^2} \Big|_{x=x_j} + \frac{h^2}{6} \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x=x_j} + \dots$$

donde $h = x_{j+1} - x_j$. Es decir, la aproximación en adelante tiene un orden 1 de precisión en el incremento h , ya que ese es el mayor orden del error de truncamiento. La aproximación en atraso tiene el mismo orden de precisión. En cambio, cuando $\bar{x} = (x_{j+1} + x_j)/2$, que se denomina aproximación centrada, se tiene que

$$(3.6) \quad \frac{u_{j+1} - u_j}{x_{j+1} - x_j} = \frac{du}{dx} \Big|_{x=\bar{x}} + \frac{h^2}{24} \frac{d^3u}{dx^3} \Big|_{x=\bar{x}} + \dots$$

es decir, el orden de precisión es 2.

Para obtener un orden de precisión mayor que 2 en una derivada primera, es necesario utilizar más de dos nodos. Para aproximar una derivada segunda deben utilizarse no menos de tres nodos. La fórmula que relaciona el orden de la derivada (OD), el orden de precisión de la aproximación (OP) y el número de nodos involucrados (NN) es

$$(3.7) \quad OP = NN - OD$$

salvo en el caso de tratarse de una aproximación centrada y que la paridad de NN y OD sean distintas, en cuyo caso se gana un orden de precisión (por ejemplo, una aproximación centrada con 5 nodos para una derivada segunda tiene un orden de precisión 4, en lugar de 3).

Si bien existen diversas maneras de construir una aproximación en diferencias para una derivada, la técnica más sistemática es el conocido método de los coeficientes indeterminados (Marshall, 1985).

Lo dicho hasta ahora apunta a construir una aproximación en diferencias para una derivada. Pero éste es solo el primer escalón en el establecimiento de una aproximación en diferencias para una ecuación diferencial. En efecto, no cualquier combinación constituye un esquema numérico apto para el cálculo.

Para ilustrar el procedimiento de discretización y cálculo se tomará, en primer lugar, el siguiente problema de valores iniciales:

$$(3.8) \quad \frac{du}{dt} + f(u,t) = 0 \quad ; \quad u(t=0) = u_0$$

Nótese que se trata de una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, siendo f una función arbitraria y u_0 una constante. La forma más sencilla de discretizar la Ec. (3.8) es mediante el método de Euler:

$$(3.9) \quad \frac{u^{n+1} - u^n}{t^{n+1} - t^n} + f(u^n, t^n) = 0$$

donde el supraíndice n identifica el nodo en la dimensión temporal t . Nótese que, respecto del punto de evaluación de la función f , la aproximación de la derivada es en adelante.

La Ec. (3.9) puede reescribirse como

$$(3.10) \quad u^{n+1} = u^n - (t^{n+1} - t^n) f^n$$

donde $f^n = f(u^n, t^n)$. La Ec. (3.10) permite evaluar en forma explícita la solución en el nivel temporal $n+1$, en función de su valor en el nivel n . Por eso es que se dice que el método de Euler pertenece a la categoría de los métodos explícitos. La Ec. (3.10) es la fórmula operativa del método, es decir, partiendo de $u^0 = u(t=0) = u_0$, dato, permite calcular, mediante un procedimiento de marcha, la solución u^n , para $n \geq 1$.

Por ejemplo, en el caso particular en que $f(u,t) = u$ y los nodos están equiespaciados, es decir, $t^{n+1} - t^n = k = \text{cte.}$ para todo valor de n , la Ec. (3.10) se reduce a

$$(3.11) \quad u^{n+1} = (1 - k)u^n$$

Si $u_0 = 1$, la solución exacta del problema diferencial, Ec. (3.8), es, de acuerdo a la Ec. (2.4),

$$(3.12) \quad U(t) = e^{-t}$$

Tomando $k = 0,1$, la Tabla 3.1 muestra los valores de la solución numérica obtenidos mediante la Ec. (3.11), y los correspondientes valores de la solución analítica, dados por la Ec. (3.12), para los primeros pasos de cálculo. Allí se observa que el método de cálculo es adecuado, aunque no muy preciso.

Tabla 3.1. Resultados numéricos para el problema de la Ec. (3.8)

| n | t ⁿ | U(t ⁿ) | u ⁿ | |
|----|----------------|--------------------|----------------|----------------|
| | | | Euler | Crank-Nicolson |
| 0 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| 1 | 0,1 | 0,9048 | 0,9000 | 0,9048 |
| 2 | 0,2 | 0,8187 | 0,8100 | 0,8186 |
| 3 | 0,3 | 0,7408 | 0,7290 | 0,7406 |
| 4 | 0,4 | 0,6703 | 0,6561 | 0,6701 |
| 5 | 0,5 | 0,6065 | 0,5905 | 0,6063 |
| 6 | 0,6 | 0,5488 | 0,5314 | 0,5485 |
| 7 | 0,7 | 0,4966 | 0,4783 | 0,4963 |
| 8 | 0,8 | 0,4493 | 0,4305 | 0,4490 |
| 9 | 0,9 | 0,4066 | 0,3874 | 0,4063 |
| 10 | 1,0 | 0,3679 | 0,3487 | 0,3676 |

Una alternativa posible al método de Euler es el esquema fuertemente implícito, que, aplicado a la Ec. (3.8), da

$$(3.13) \quad \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + f^{n+1} = 0$$

es decir, ahora la aproximación de la derivada es en atraso. Nótese que la incógnita, u^{n+1} , es uno de los argumentos de f , por lo cual la Ec. (3.13) es una fórmula implícita para u^{n+1} , de ahí el nombre del método. Salvo en el caso en que f sea lineal en u , la obtención de u^{n+1} debe realizarse por medio de técnicas iterativas (secante, Newton-Raphson, etc.).

Otra alternativa, muy conocida, es el método de Crank-Nicolson, que da

$$(3.14) \quad \frac{u^{n+1} - u^n}{t^{n+1} - t^n} + \frac{1}{2} (f^n + f^{n+1}) = 0$$

Nótese que se trata de un método implícito, y que la aproximación está centrada en el punto intermedio entre t^n y t^{n+1} . Para el caso particular del problema $f = u$, $u_0 = 1$, los valores de la solución numérica también se muestran en la Tabla 3.1. Obsérvese que éstos son mucho más precisos que los obtenidos por el método de Euler. Es que este método solo tiene un orden de precisión 1 (es decir, el error de truncamiento o discretización es de orden k), mientras que el Crank-Nicolson, al ser centrado, tiene un orden de precisión 2 (error del orden de k^2). Esto puede comprobarse reemplazando la solución analítica en el esquema numérico, y efectuando desarrollos en serie de Taylor alrededor del nivel temporal n . Para el método de Euler se obtiene que el error de discretización es

$$(3.15) \quad \epsilon_E = \frac{k}{2} \frac{d^2 u}{dt^2} + \frac{k^2}{6} \frac{d^3 u}{dt^3} + O(k^3)$$

mientras que para el Crank-Nicolson se tiene

$$(3.16) \quad \epsilon_{CN} = \frac{k}{2} \left(\frac{d^2 u}{dt^2} + \frac{df}{dt} \right) + \frac{k^2}{2} \left(\frac{1}{3} \frac{d^3 u}{dt^3} + \frac{1}{2} \frac{d^2 f}{dt^2} \right) + O(k^3)$$

Pero el factor entre paréntesis del primer término del segundo miembro de la Ec. (3.16) se anula, ya que u satisface la Ec. (3.8), lo cual muestra que el método es de segundo orden de precisión.

Sea ahora el siguiente problema de valores de contorno:

$$(3.17) \quad \frac{d^2 u}{dx^2} + u + x = 0 \quad ; \quad u(0) = u(1) = 0$$

cuya solución analítica es

$$(3.18) \quad u(x) = \frac{\sin x}{\sin 1} - x$$

A fin de ilustrar el procedimiento, dividase al intervalo $(0,1)$ en tres tramos iguales de longitud $h = 1/3$. Ahora se trata de calcular la solución en los dos nodos interiores. La siguiente es una aproximación centrada para la Ec. (3.17):

$$(3.19) \quad \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{h^2} + u_j + jh = 0 \quad ; \quad j=1,2.$$

que puede reescribirse como

$$(3.20) \quad u_{j+1} - (2-h^2)u_j + u_{j-1} = -jh^3$$

Sabiendo que $u_0 = u_3 = 0$, la Ec. (3.20) conduce al siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$(3.21) \begin{bmatrix} \frac{17}{9} & -1 \\ -1 & \frac{17}{9} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{27} \\ \frac{2}{27} \end{bmatrix}$$

cuya solución se presenta en la Tabla 3.2. Comparando con los valores que surgen de la solución analítica, Ec. (3.18), que también se muestran en esa tabla, se observa que el método de cálculo es adecuado a pesar del escaso número de nodos utilizados.

Tabla 3.2. Resultados numéricos para el problema de la Ec. (3.17)

| Método | $u_1 = u(1/3)$ | $u_2 = u(2/3)$ |
|---|----------------|----------------|
| Solución analítica, Ec. (3.18) | 0,05550 | 0,06820 |
| Diferencias finitas, Ec. (3.21) | 0,05609 | 0,06891 |
| Residuos ponderados, momentos, Ec. (3.34) | 0,05433 | 0,06688 |
| Residuos ponderados, Galerkin, Ec. (3.36) | 0,05540 | 0,06805 |
| Elementos finitos, Ec. (3.57) | 0,05494 | 0,06751 |
| Elementos de contorno, Ec. (3.80) | 0,05550 | 0,06820 |

Como último ejemplo, supóngase que se quiere resolver el siguiente problema elíptico:

$$(3.22) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + f(u, x, y) = 0 \quad \text{en } \Omega$$

donde Ω es un dominio definido sobre el plano x, y , con frontera Γ sobre la cual se especifican condiciones de borde del tipo de Dirichlet. La Ec. (3.22) se puede discretizar con un esquema centrado como sigue:

$$(3.23) \frac{u_{i+1j} - 2u_{ij} + u_{i-1j}}{\Delta x^2} + \frac{u_{ij+1} - 2u_{ij} + u_{ij-1}}{\Delta y^2} + f(u_{ij}, x, y) = 0$$

donde se ha supuesto que la grilla de discretización es rectangular, con pasos Δx y Δy en las direcciones x e y , respectivamente, y donde los índices i y j identifican los nodos a

lo largo de los ejes x e y , respectivamente. Utilizando la Ec. (3.23) y las condiciones de borde, puede construirse un sistema de ecuaciones lineales en el cual todas las incógnitas (los u_{ij}) aparecen acopladas. La matriz de coeficientes es rala, pero no presenta una estructura banda. La resolución de sistemas de este tipo es común encararla por medio de métodos iterativos (Jacobi, Gauss-Seidel, SOR).

3.2. Residuos ponderados

En la sección 2.3 se explicó que una forma de encarar la obtención de una solución aproximada a un problema diferencial, consiste en distribuir el error (o residuo) sobre el dominio de cálculo de acuerdo a ciertas funciones de peso. Por ejemplo, para el problema definido por las Ecs. (2.26)-(2.28), se plantea la Ec. (2.29). Esta no es más que la formulación del método de los residuos ponderados.

En general, se impone que la solución aproximada satisfaga exactamente las condiciones de borde, Ecs. (2.27)-(2.28). La función de peso w se toma como una combinación lineal de una familia de funciones ψ_i linealmente independientes, es decir,

$$(3.24) \quad w = \sum_{i=1}^N \beta_i \psi_i$$

donde los β_i son coeficientes arbitrarios. En consecuencia, la Ec. (2.29) conduce a

$$(3.25) \quad \int_{\Omega} (\nabla^2 u + f) \psi_i \, d\Omega = 0 \quad ; \quad i=1,2,\dots,N$$

Por su parte, la solución u se expresa en términos de funciones aproximantes ϕ_i , es decir

$$(3.26) \quad u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i$$

Los coeficientes α_i , en la Ec. (3.26), se determinan de acuerdo a las Ecs. (3.25), lo cual permite obtener la solución aproximada.

Existe una gran variedad de métodos de residuos ponderados, determinados por la particular elección de las funciones de peso ψ_i . En el método de los momentos, las funciones de peso son tales que las Ecs. (3.25) son momentos del residuo. Por ejemplo, en el caso unidimensional se tiene que

$$(3.27) \quad \psi_i = x^{i-1}$$

Supóngase que se quiere resolver el problema definido en el Ec. (3.17) con este método. Como funciones aproximantes se puede elegir

$$(3.28) \quad \phi_i = x^i (1-x)$$

que satisfacen idénticamente las condiciones de borde. Si se toma $N = 2$, la forma de la solución es, de acuerdo a la Ec. (3.26),

$$(3.29) \quad u = \alpha_1 x(1-x) + \alpha_2 x^2(1-x)$$

Entonces, el residuo ϵ se expresa como

$$(3.30) \quad \epsilon \equiv \underline{d^2 u} + u + x = (-2+x-x^2) \alpha_1 + (2-6x+x^2-x^3) \alpha_2 + x$$

Las ecuaciones equivalentes a las Ecs. (3.25) son, de acuerdo a la Ec. (3.27),

$$(3.31) \quad \begin{cases} \int_0^1 \epsilon^1 dx = 0 \\ \int_0^1 \epsilon x dx = 0 \end{cases}$$

Reemplazando la Ec. (3.30) en las Ecs. (3.31) y operando se llega al siguiente sistema

$$(3.32) \quad \begin{bmatrix} \frac{11}{6} & \frac{11}{12} \\ \frac{1}{2} & \frac{19}{20} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

de donde surge que

$$(3.33) \quad \begin{cases} \alpha_1 = \frac{122}{649} \\ \alpha_2 = \frac{110}{649} \end{cases}$$

Es decir que la solución, Ec. (3.29), es

$$(3.34) \quad u = x(1-x) \left(\frac{122}{649} + \frac{110}{649} x \right)$$

En la Tabla 3.2 se presentan valores calculados con la Ec. (3.34).

Otra variante del método de los residuos ponderados, denominada método de Galerkin, consiste en tomar las funciones de peso idénticas a las funciones aproximantes, es decir,

$$(3.35) \quad \psi_i = \phi_i$$

Aplicando este método al ejemplo antes considerado, se obtiene

$$(3.36) \quad u = x(1-x) \left(\frac{71}{369} + \frac{7}{41} x \right)$$

que da los valores mostrados en la Tabla 3.2.

También existen los métodos de colocación, de subdominio, etc. (Nakamura, 1977).

La diferencia conceptual entre el método de los residuos ponderados y el de diferencias finitas, radica en la forma en que el error se distribuye sobre el dominio de la solución. Mientras que el segundo minimiza el error en un número finito de nodos (es decir, es un método nodal), el primero lo distribuye sobre todo el dominio de un modo determinado (es decir, es un método modal). Sin embargo, el método de las diferencias finitas puede ser formalmente considerado como un caso particular del método de los residuos ponderados, cuando las funciones de peso son deltas de Dirac, es decir

$$(3.37) \quad \psi_i = \delta(x-x_i)$$

en cuyo caso los coeficientes α_i devienen los valores nodales u_i .

3.3. Elementos finitos

El método de los elementos finitos parte de la formulación débil o, en caso de existir, la formulación variacional del problema. Básicamente, el método consiste en aproximar la función (o funciones) incógnita por medio de una función continua a trozos. Esta función aproximante es continua sobre cada uno de los elementos en que se ha dividido al dominio de cálculo, y allí se expresa en términos de los valores nodales de la función incógnita. Estos trozos de funciones continuas se denominan funciones interpolantes o de forma. La forma y distribución de los elementos depende, en cierta medida, del problema particular (Zienkiewicz, 1977; Norrie and de Vries, 1978; Huebner and Thornton, 1982).

La forma de elemento más simple y, a la vez, la más utilizada cuando el dominio es bidimensional, es la triangular. Si los vértices de un elemento triangular genérico se identifican con los índices i, j, k , la función incógnita en dicho elemento se expresa como

$$(3.38) \quad u^{(e)}(x, y) = N_i^{(e)}(x, y) u_i + N_j^{(e)}(x, y) u_j + N_k^{(e)}(x, y) u_k$$

donde las funciones de forma $N_\ell^{(e)}$, con $\ell = i, j$ o k , son bilineales, es decir, tienen la forma

$$(3.39) \quad N_\ell^{(e)}(x, y) = \frac{a_\ell^{(e)} + b_\ell^{(e)} x + c_\ell^{(e)} y}{2\Delta^{(e)}}$$

Los coeficientes de la Ec. (3.39) valen, en términos de las coordenadas de los vértices,

$$(3.40) \quad \begin{cases} a_i = x_j y_k - x_k y_j \\ b_i = y_j - y_k \\ c_i = x_k - x_j \\ \Delta = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{vmatrix} = \text{Área del elemento} \end{cases}$$

donde se ha suprimido, por simplicidad, el supraíndice (e) , y se ha supuesto que los nodos i, j, k están ordenados en sentido antihorario. Siendo así, las expresiones para los coeficientes correspondientes a los otros nodos surgen de las Ecs. (3.40) mediante permutaciones cíclicas.

Si se supone que las funciones $u^{(e)}$, dadas por la Ec. (3.38), se anulan idénticamente fuera del elemento (e) , la función incógnita se puede expresar como

$$(3.41) \quad u(x, y) = \sum_{e=1}^M u^{(e)}(x, y)$$

donde M es el número total de elementos.

Ahora bien, si el problema admite una formulación variacional, la técnica consiste en reemplazar en el funcional $I(u)$ la expresión dada por la Ec. (3.41), cuyas incógnitas son, en última instancia, los valores nodales u_n . En consecuencia, la condición expresada en la Ec. (2.42) conduce a

$$(3.42) \quad \delta I = \sum_{n=1}^N \frac{\partial I}{\partial u_n} \delta u_n = 0$$

donde N es el número total de nodos. Como las variaciones δu_n son arbitrarias, la Ec. (3.42) conduce a las siguientes ecuaciones:

$$(3.43) \quad \frac{\partial I}{\partial u_n} = 0 \quad ; \quad n=1, 2, \dots, N$$

La resolución del sistema (3.43) permite hallar los valores nodales u_n , y, por medio de la Ec. (3.41), calcular la función en cualquier punto.

Considérese, a título de ejemplo, nuevamente el problema unidimensional definido en la Ec. (3.17). El funcional asociado es el de la Ec. (2.43) si se elimina el último término, es decir,

$$(3.44) \quad I(u) = \int_0^1 \left[\frac{1}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - \frac{u^2}{2} - xu \right] dx$$

Las ecuaciones equivalentes a las Ecs. (3.38)-(3.40) son

$$(3.45) \quad \begin{cases} u^{(e)}(x) = N_i^{(e)}(x) u_i + N_j^{(e)}(x) u_j \\ N_i^{(e)}(x) = \frac{x_j - x}{x_j - x_i} \\ N_j^{(e)}(x) = \frac{x - x_i}{x_j - x_i} \end{cases}$$

de donde surge que

$$(3.46) \quad \frac{du^{(e)}}{dx} = \frac{dN_i^{(e)}}{dx} u_i + \frac{dN_j^{(e)}}{dx} u_j = \frac{u_j - u_i}{x_j - x_i}$$

Nótese que, siendo el problema unidimensional, los elementos son segmentos.

La parte del funcional correspondiente al elemento (e) es, de acuerdo a las Ecs. (3.44)-(3.46),

$$(3.47) \quad I^{(e)}(u_i, u_j) = \int_{x_i}^{x_j} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{u_j - u_i}{x_j - x_i} \right)^2 - \frac{1}{2} (N_i^{(e)} u_i + N_j^{(e)} u_j)^2 - x (N_i^{(e)} u_i + N_j^{(e)} u_j) \right] dx$$

Las derivadas de $I^{(e)}$ respecto de las incógnitas u_i y u_j , pueden calcularse directamente a partir de la Ec. (3.47):

$$(3.48) \quad \frac{\partial I^{(e)}}{\partial u_i} = - \int_{x_i}^{x_j} (u_j - u_i) dx - \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i^2 dx \right) u_i - \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i N_j dx \right) u_j -$$

$$(3.49) \quad \frac{\partial I^{(e)}}{\partial u_j} = \left(\frac{u_j - u_i}{x_j - x_i} \right) - \left(\int_{x_i}^{x_j} N_j^2 dx \right) u_j - \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i N_j dx \right) u_i - \left(\int_{x_i}^{x_j} N_j x dx \right)$$

Teniendo en cuenta que, de acuerdo a las Ecs. (3.45),

$$(3.50) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int_{x_i}^{x_j} N_i^2 dx = \int_{x_i}^{x_j} N_j^2 dx = \frac{x_j - x_i}{3} \\ \int_{x_i}^{x_j} N_i N_j dx = \frac{x_j - x_i}{6} \\ \int_{x_i}^{x_j} N_i x dx = \frac{1}{6} (x_j^2 + x_i x_j - 2x_i^2) \\ \int_{x_i}^{x_j} N_j x dx = -\frac{1}{6} (x_i^2 + x_i x_j - 2x_j^2) \end{array} \right.$$

las Ecs. (3.48) y (3.49) se transforman en

$$(3.51) \quad \frac{\partial I^{(e)}}{\partial u_i} = \left(\frac{1}{x_j - x_i} - \frac{x_j - x_i}{3} \right) u_i - \left(\frac{1}{x_j - x_i} + \frac{x_j - x_i}{6} \right) u_j - \frac{1}{6} (x_j^2 + x_i x_j - 2x_i^2)$$

$$(3.52) \quad \frac{\partial I^{(e)}}{\partial u_j} = \left(\frac{1}{x_j - x_i} - \frac{x_j - x_i}{3} \right) u_j - \left(\frac{1}{x_j - x_i} + \frac{x_j - x_i}{6} \right) u_i + \frac{1}{6} (x_i^2 + x_i x_j - 2x_j^2)$$

Obviamente, el funcional total es la superposición de las partes correspondientes a cada elemento, es decir

$$(3.53) \quad I = \sum_{e=1}^M I^{(e)}$$

Para plantear las Ecs. (3.43) es necesario, entonces, proceder a ensamblar las contribuciones correspondientes a cada elemento que converge al nodo n . En un problema unidimensional, como el presente, a cada nodo convergen sólo dos elementos; para uno de ellos el nodo n juega el rol del nodo i del elemento genérico considerado más arriba, mientras que para el restante el nodo n es como el nodo j (ver Fig. 3.2). En consecuencia, de acuerdo a las Ecs. (3.51) y (3.52), se tiene que

$$(3.54) \quad \frac{\partial I}{\partial u_n} = \left(\frac{1}{x_{n+1} - x_n} - \frac{x_{n+1} - x_n}{3} \right) u_n - \left(\frac{1}{x_{n+1} - x_n} + \frac{x_{n+1} - x_n}{6} \right) u_{n+1} - \frac{1}{6} (x_{n+1}^2 + x_{n+1} x_n - 2x_n^2) + \left(\frac{1}{x_n - x_{n-1}} - \frac{x_n - x_{n-1}}{3} \right) u_n - \left(\frac{1}{x_n - x_{n-1}} + \frac{x_n - x_{n-1}}{6} \right) u_{n-1} + \frac{1}{6} (x_{n-1}^2 + x_{n-1} x_n - 2x_n^2) = 0$$

que puede reescribirse como

$$(3.55) \quad -\left(\frac{1}{x_n - x_{n-1}} + \frac{x_n - x_{n-1}}{6}\right) u_{n-1} + \left(\frac{1}{x_{n+1} - x_n} + \frac{1}{x_n - x_{n-1}} - \frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{3}\right) u_n - \left(\frac{1}{x_{n+1} - x_n} + \frac{x_{n+1} - x_n}{6}\right) u_{n+1} - \left(\frac{x_{n+1} - x_{n-1}}{6}\right) (x_{n+1} + x_{n-1} + x_n) = 0$$

Si, como cuando se resolvió este problema por diferencias finitas, se toma un paso $h = 1/3$ uniforme, la Ec. (3.55) se reduce a

$$(3.56) \quad \left(1 + \frac{h^2}{6}\right) u_{n+1} - \left(2 - \frac{2}{3} h^2\right) u_n + \left(1 + \frac{h^2}{6}\right) u_{n-1} = -nh^3$$

La Ec. (3.56) es muy similar a la Ec. (3.20) obtenida por diferencias finitas. En realidad, puede obtenerse directamente de un planteo como el de la Ec. (3.19), si se reemplaza el segundo término, u_j , por el promedio pesado $(u_{j-1} + 4u_j + u_{j+1})/6$.

La fórmula genérica (3.56), juntamente con las condiciones de contorno geométricas en los nodos de borde, conduce al siguiente sistema

$$(3.57) \quad \begin{bmatrix} \frac{52}{27} & -\frac{55}{54} \\ -\frac{55}{54} & \frac{52}{27} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{27} \\ \frac{2}{27} \end{bmatrix}$$

de donde surgen los valores mostrados en la Tabla 3.2.

Supóngase ahora que se parte de una formulación débil, como la Ec. (2.32), en lugar de una variacional. Es necesario, entonces, definir la función de peso w . Si, como en el método de los residuos ponderados, ésta se expresa de acuerdo a la Ec. (3.24), lo que deben definirse son las funciones ψ_i . La elección más común, que da lugar al método de Bubnov-Galerkin (o Galerkin a secas), consiste en tomar las funciones de peso igual a las de forma, es decir

$$(3.58) \quad \psi_i(e) = N_i(e)$$

Si esta condición no se cumple, se trata de un método de Petrov-Galerkin.

Si, una vez más, se toma como ejemplo el problema definido por la Ec. (3.17), su formulación débil es

$$(3.59) \quad \int_0^1 \left[-\frac{du}{dx} \frac{dw}{dx} + (u+x)w \right] dx = 0$$

En un elemento genérico, la función incógnita se aproxima de acuerdo a las Ecs. (3.45). Tomando como función de peso $\psi_i(e) = N_i(e)$, la parte de la Ec. (3.59) que corresponde a ese elemento da lugar a

$$(3.60) \quad \left(\frac{u_j - u_i}{x_j - x_i}\right) + \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i^2 dx\right) + \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i N_j dx\right) u_j + \left(\int_{x_i}^{x_j} N_i x dx\right)$$

que es idéntica a la contribución (3.48) de la formulación variacional. Es decir, el método de Bubnov-Galerkin, que se aplica a la formulación débil de un problema, da el mismo resultado que el método de los elementos finitos aplicado a la formulación variacional (cuando ésta existe).

3.4. Elementos de contorno

El punto de partida del método de los elementos de contorno es la formulación integral del problema. La esencia del método consiste en dividir al contorno del dominio en segmentos o elementos, sobre los cuales se formulan aproximaciones para evaluar las integrales que involucran a la función incógnita (Brebbia and Walker, 1980).

Supóngase que se parte de la formulación directa dada en la Ec. (2.55). Si se toman elementos "constantes" (también denominado método panel), es decir, se considera que u y $q \equiv \partial u / \partial n$ son constantes sobre cada segmento Γ_j , dicha ecuación puede aproximarse por

$$(3.61) \quad -\frac{1}{2} u_i + \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma \right) q_j - \sum_{j=1}^N \left(\int_{\Gamma_j} \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma \right) u_j + \int_{\Omega} g u^* d\Omega = 0 ;$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

donde N es el número total de elementos de contorno. Las integrales que aparecen en las Ecs. (3.61) pueden calcularse, ya sea en forma exacta o aproximada. Se denominarán

$$(3.62) \quad G_{ij} = \int_{\Gamma_j} u^* d\Gamma$$

$$(3.63) \quad \hat{H}_{ij} = \int_{\Gamma_j} \frac{\partial u^*}{\partial n} d\Gamma$$

$$(3.64) \quad B_i = \int_{\Omega} g u^* d\Omega$$

Si, además, se define

$$(3.65) \quad H_{ij} = \begin{cases} \hat{H}_{ij} & \text{si } i \neq j \\ \hat{H}_{ij} + \frac{1}{2} & \text{si } i = j \end{cases}$$

las Ecs. (3.61) pueden reescribirse como

$$(3.66) \quad \sum_{j=1}^N G_{ij} q_j - \sum_{j=1}^N H_{ij} u_j + B_i = 0$$

Si de los N elementos de la frontera Γ , N_1 están asociados a la parte Γ_1 y $N_2 (= N - N_1)$ a la parte Γ_2 , las Ecs. (3.66) forman un sistema de N ecuaciones algebraicas lineales con N_1 incógnitas q_j y N_2 incógnitas u_j , es decir, está bien determinado.

Una vez conocidos u y q sobre los elementos de contorno, los valores de la solución en puntos interiores a Ω se obtienen discretizando la Ec. (2.56), es decir

$$(3.67) \quad u_i = \sum_{j=1}^N G_{ij} q_j - \sum_{j=1}^N \hat{H}_{ij} u_j + B_i$$

En general, las integrales G_{ij} y \hat{H}_{ij} , dadas por las Ecs. (3.62) y (3.63), respectivamente, se evalúan numéricamente utilizando la cuadratura de Gauss más simple, salvo las correspondientes a $i=j$, que requieren mayor precisión. En el caso de elementos constantes estas últimas pueden ser calculadas analíticamente; por ejemplo, en problemas bidimensionales se tiene que

$$(3.68) \quad \begin{cases} \hat{H}_{ii} = 0 \\ G_{ii} = \frac{r_i}{\pi} \left[\ln\left(\frac{1}{r_i}\right) + 1 \right] \end{cases}$$

donde r_i es la semi-longitud del elemento i .

Por su parte, para calcular la integral B_i , dada por la Ec. (3.64), es común dividir el dominio Ω en pequeños subdominios (por ejemplo, de forma triangular), y efectuar aproximaciones locales (en general, cuadratura de Gauss), es decir

$$(3.69) \quad B_i = \sum_{k=1}^M \left(\int_{\Omega_k} g u^* d\Omega \right)$$

donde M es el número total de subdominios o elementos internos.

Si se toma, nuevamente, como ejemplo de aplicación al problema unidimensional definido por la Ec. (3.17), los elementos de contorno no son más que los puntos extremos del intervalo, $x=0$ y $x=1$, que se denominarán a y b , respectivamente. La solución fundamental está dada en la Ec. (2.57), con lo cual se obtiene inmediatamente, de acuerdo a la Ec. (3.62),

$$(3.70) \quad \begin{cases} G_{aa} = G_{bb} = 0 \\ G_{ab} = G_{ba} = -\frac{1}{2} \operatorname{sen} 1 \end{cases}$$

Las integrales dadas por las Ecs. (3.63) no necesitan ser evaluadas, ya que u se anula en los bordes. Por su parte, las integrales correspondientes a las Ecs. (3.64) son

$$(3.71) \quad \begin{cases} B_a = -\frac{1}{2} \int_0^1 x \operatorname{sen} x \, dx \\ B_b = -\frac{1}{2} \int_0^1 x \operatorname{sen}(1-x) \, dx \end{cases}$$

Siguiendo la idea del método, las integrales de las Ecs. (3.71) se calcularán dividiendo el dominio en tres intervalos iguales, y utilizando cuadratura de Gauss para cada uno de ellos (a pesar de que esas integrales pueden evaluarse exactamente). Por ejemplo, B_a puede escribirse como

$$(3.72) \quad B_a = \int_{-1}^1 \left[f_1(\xi) + f_2(\xi) + f_3(\xi) \right] d\xi$$

donde

$$(3.73) \quad \begin{cases} f_1(\xi) = \frac{1}{6} g\left(\frac{\xi+1}{6}\right) \\ f_2(\xi) = \frac{1}{6} g\left(\frac{\xi+3}{6}\right) \\ f_3(\xi) = \frac{1}{6} g\left(\frac{\xi+5}{6}\right) \end{cases}$$

siendo

$$(3.74) \quad g(x) = -\frac{1}{2} x \operatorname{sen} x$$

Entonces, aplicando la fórmula de cuadratura de Gauss con dos puntos, la Ec. (3.72) da

$$(3.75) \quad B_a = (f_1 + f_2 + f_3)_{\xi=-0,57735} + (f_1 + f_2 + f_3)_{\xi=0,57735} = -0,15059$$

De manera análoga, pero con

$$(3.76) \quad g(x) = -\frac{1}{2} x \operatorname{sen}(1-x)$$

en lugar de la Ec. (3.74), se obtiene que

$$(3.77) \quad B_b = -0,07926$$

Las Ecs. (3.66) dan, en este caso,

$$(3.78) \quad \begin{cases} G_{aa} q_a + G_{ab} q_b + B_a = 0 \\ G_{ba} q_a + G_{bb} q_b + B_b = 0 \end{cases}$$

Reemplazando los valores dados en las Ecs. (3.70), (3.75) y (3.77) en las Ecs. (3.78), se obtiene

$$(3.79) \quad \begin{cases} q_a = -0,18838 \\ q_b = -0,35792 \end{cases}$$

(que tienen cuatro dígitos correctos, comparados con los valores exactos).

Ahora pueden calcularse los valores de la solución en el interior, de acuerdo con la Ec. (3.67). Para comparar con los métodos discutidos anteriormente, se evaluará la solución en $x=1/3$ y $x=2/3$, que se identificarán como los puntos 1 y 2, respectivamente. Entonces, se tiene que

$$(3.80) \quad \begin{cases} u_1 = G_{1a} q_a + G_{1b} q_b + B_1 \\ u_2 = G_{2a} q_a + G_{2b} q_b + B_2 \end{cases}$$

Pero

$$(3.81) \quad \begin{cases} G_{1a} = G_{2b} = -\frac{1}{2} \operatorname{sen} \frac{1}{3} \\ G_{1b} = G_{2a} = -\frac{1}{2} \operatorname{sen} \frac{2}{3} \end{cases}$$

Además, con $g(x) = -(x/2)\text{sen}|x-1/3|$ y con $g(x) = -(x/2)\text{sen}|x-2/3|$ se obtienen, respectivamente,

$$(3.82) \quad \begin{cases} B_1 = -0,08598 \\ B_2 = -0,04860 \end{cases}$$

Reemplazando los valores dados en las Ecs. (3.79), (3.81) y (3.82) en las Ecs. (3.80), se obtienen los resultados mostrados en la Tabla 3.2, cuyos dígitos significativos son todos correctos.

REFERENCIAS

- 1.- Batchelor, G. K. (1967), "An Introduction to Fluid Dynamics", Cambridge Univ. Press.
- 2.- Bender, C. M., Orszag, S. A. (1978), "Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers", McGraw-Hill.
- 3.- Bradshaw, P., ed. (1976), "Turbulence", Springer-Verlag.
- 4.- Brebbia, C. A., Walker, S. (1980), "Boundary Element Techniques in Engineering", Newnes-Butterworths.
- 5.- Elsgoltz, L. (1969), "Ecuaciones diferenciales y cálculo variacional", Mir.
- 6.- Forsythe, G. E., Wasow, W. R. (1960), "Finite Difference Methods for Partial Differential Equations", Wiley.
- 7.- Hinze, J. (1975), "Turbulence", McGraw-Hill.
- 8.- Huebner, K. H., Thornton, E. A. (1982), "The Finite Element Method for Engineers", Wiley.
- 9.- Marshall, G. (1985), "Solución numérica de ecuaciones diferenciales", Tomo 1, Reverté.
- 10.- Marshall, G. (1986), "Solución numérica de ecuaciones diferenciales", Tomo 2, Reverté.
- 11.- Morse, P. M., Feshbach, H. (1953), "Methods of Theoretical Physics", McGraw-Hill.
- 12.- Nakamura, S. (1977), "Computational Methods in Engineering and Science", Wiley.
- 13.- Norrie, D. H., de Vries, G. (1978), "An Introduction to Finite Element Analysis", Academic Press.
- 14.- Richtmyer, R. D., Morton, K. W. (1967), "Difference Methods for Initial-Value Problems", Wiley.
- 15.- Richtmyer, R. D. (1978), "Principles of Advanced Mathematical Physics", Vol. I, Springer-Verlag.
- 16.- Zienkiewicz, D. C. (1977), "The Finite Element Method", McGraw-Hill.

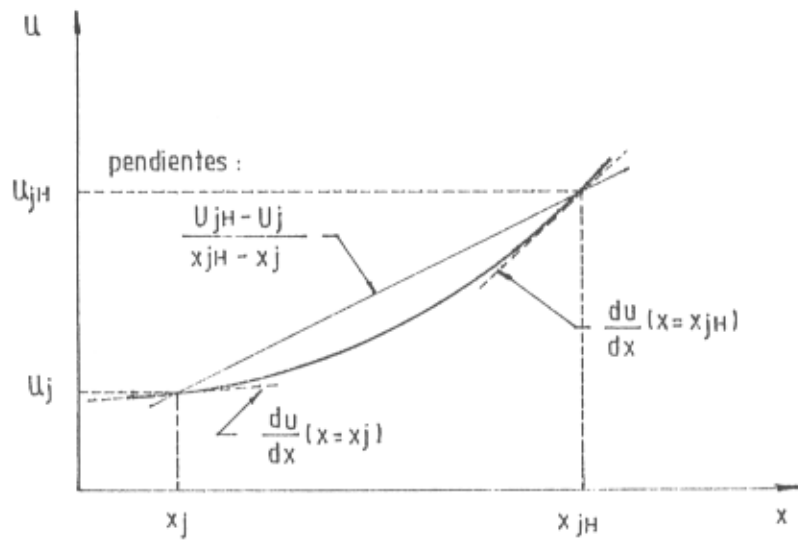


Figura 3.1. Aproximación de una derivada por diferencias finitas.-

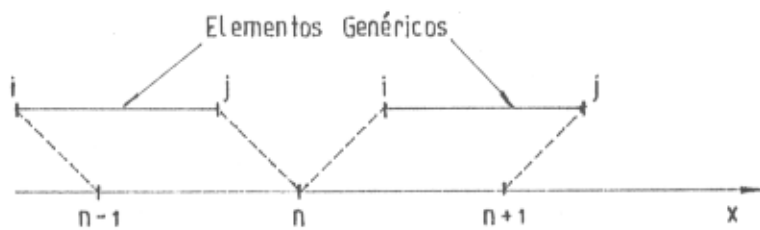


Figura 3.2. Elementos finitos en un problema unidimensional.-