UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA Instituto Universitario de Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en la Ingeniería



Máster en Sistemas Inteligentes y Aplicaciones Numéricas en Ingeniería

Trabajo Fin de Máster

Formulación e implementación de un modelo 3D de elementos de contorno para la resolución de problemas de electrodeposición

Autor: Jacob David Rodríguez Bordón

Tutor: Juan José Aznárez González

División de Mecánica de los Medios Continuos y Estructuras

Agradecimientos

L

Este Trabajo Fin de Máster es fundamentalmente fruto de un periodo intenso de aprendizaje bajo la batuta de Juan José Aznárez, cuya abnegación por transmitir sus conocimientos a todos sus pupilos es digno de mención. También quiero agradecer la inestimable ayuda de todos los miembros de la División de Mecánica de los Medios Continuos, porque contagian su entusiasmo y voluntad por hacer las cosas bien.

A mis padres, Agustín y Carmen, porque me han enseñado a perseverar.

A María, por su sonrisa y enorme apoyo.

Ш

Este trabajo ha sido posible gracias a la financiación obtenida del Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO), la Agencia Canaria de Investigación, Innovación y Sociedad de la Información (ACIISI) del Gobierno de Canarias y el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través de los Proyectos de Investigación BIA2010-21399-C02-01 y ProID20100224.

Índice de contenidos

Abreviaturas						
Pr	Presentación del documento IX 1. Electrodeposición IX 1.1. Introducción IX 1.2. Electrodeposición de metales IX					
1.	Electrodeposición					
	1.1.	Introdu	ucción	1		
	1.2.	Electro	deposición de metales	3		
		1.2.1.	Doble capa eléctrica	3		
		1.2.2.	Deposición electrolítica	4		
		1.2.3.	Polarización	5		
	1.3.	Modeli	zación del fenómeno	8		
	1.4.	Conclu	siones	9		
2.	Modelo con condiciones de contorno tipo Robin no lineales					
	2.1.	Introdu	ucción	11		
	2.2.	Formul	ación diferencial	11		
	2.3.	Métod	os iterativos de resolución	14		
		2.3.1.	Método de Newton-Raphson	14		
		2.3.2.	Método del Punto Fijo	15		
		2.3.3.	Método combinado	16		
	2.4.	Motivo	is para utilizar el MEC ¹ en problemas de electrodeposición \ldots	16		
	2.5.	Ensam	blaje y tratamiento de las CC ² tipo Robin no lin. en el metodo iterativo	17		
	26	y en ei	MEC	17		
	2.0.	Conciu	siones	20		
3.	Мос	lelo line	eal mediante el Método de los Elementos de Contorno	21		
	3.1.	Ecuaci	ón integral	21		
	3.2.	Solució	ón fundamental	22		
	3.3.	Ecuaci	ones integrales en el contorno	25		
		3.3.1.	Carácter de las integrales	27		
		3.3.2.	Formulaciones del Método de los Elementos de Contorno	29		
		3.3.3.	Integración $orall i \in \Gamma$ para la formulación singular (directa) $\ldots \ldots$	29		
		3.3.4.	Integración $\forall i \in \Omega$	32		
	3.4.	Discret	ización	32		
		3.4.1.	Partición en elementos	33		
		3.4.2.	Interpolación en los elementos	33		
		3.4.3.	Solución en el contorno	38		
		3.4.4.	Solución en el dominio	39		

¹Método de los Elementos de Contorno ²Condiciones de Contorno

ÍNDICE DE CONTENIDOS

	3.5.		39		
		3.5.1. Condición de contorno tipo Dirichlet	40		
		3.5.2. Condición de contorno tipo Neumann	40		
		3.5.3. Condición de contorno tipo Robin	40		
		3.5.4. Construcción del sistema de ecuaciones	40		
	3.6.	Integración numérica	41		
		3.6.1. Integración singular	41		
		3.6.2. Integración cuasi-singular	42		
	3.7.	Cálculo del término libre c_i	44		
4.	Solu	ición fundamental para la inclusión de planos no discretizables	45		
	4.1.	Introducción	45		
	4.2.	Algoritmo de generación de los puntos de colocación	47		
	4.3.	Consideraciones cuando el punto de colocación se sitúa en algún plano	49		
	4.4.	Análisis de casos	49		
		4.4.1. 2 planos	51		
		4.4.2. 3 planos	53		
	4.5.	Algoritmo de generación de elementos virtuales para el cálculo de c_i	54		
5.	Vali	dación del programa	57		
	5.1.	Introducción	57		
	5.2.	Problema teórico con solución analítica	57		
		5.2.1. Soluciones analíticas	58		
		5.2.2. Soluciones numéricas	59		
	5.3.	Problema real con solución numérica contrastable	60		
		5.3.1. CC1 (BEPLATE con malla D1)	63		
		5.3.2. CC1 (BEPLATE con malla D2)	67		
		5.3.3. CC2	67		
6.	Con	clusiones	71		
	6.1.	Sobre los resultados	71		
	6.2.	Sobre el desarrollo de MECPED	71		
	6.3.	Líneas futuras	72		
Re	eferen	icias	76		
I	Apé	ndices	77		
Α.	Fichero de entrada para el programa MECPED				
	A.1.	mecped.bas	79		
	A.2.	plaintemplate.inp	81		

Abreviaturas

- **CC** Condiciones de Contorno
- MDF Método de Diferencias Finitas
- MEC Método de los Elementos de Contorno
- MEF Método de Elementos Finitos
- MRP Método de los Residuos Ponderados
- $\boldsymbol{\mathsf{NR}}$ Newton-Raphson
- **PF** Punto Fijo
- **VPC** Valor Principal de Cauchy

ABREVIATURAS

Presentación del documento

Motivación

La electrodeposición es un proceso por el cual se recubre un objeto con un capa metálica. Históricamente se ha usado para dotar a un objeto metálico de características decorativas y algún grado de protección contra el medio ambiente. Más recientemente, la electrodeposición se ha usado con una finalidad puramente ingenieril. Un conocimiento más profundo del proceso ha permitido incorporar a los objetos características sobresalientes en cuanto a corrosión, abrasión, conductividad eléctrica, entre otras. Respecto a otros procedimientos que persiguen la misma finalidad, la producción de piezas es más económica y de mayor calidad con esta técnica.

Mientras que en aplicaciones decorativas los espesores de deposición son del orden de $0.1 \div 0.3 \ \mu m$, en algunas aplicaciones ingenieriles se llega a espesores de $0.25 \ cm$ con tolerancias de $\pm 0.01 \ cm$, [GGB90]. En las aplicaciones decorativas el objetivo es recubrir toda la pieza para dotarla de cierta estética y protección. En estos casos, el espesor de la deposición es despreciable, y lo único que hay que controlar es que en todo punto del objeto el espesor sea mayor que un espesor mínimo dado. En aplicaciones ingenieriles se utilizan espesores considerables para dotar de propiedades especiales y/o cierta geometría al objeto, a lo que se suele denominar electroconformado. En estos casos, el espesor es una variable de suma importancia en todo el objeto, y deben asegurarse ciertas tolerancias.

El control del espesor de la deposición es muy complicado. En la deposición surgen multitud de irregularidades: nódulos (pequeñas protuberancias esféricas en la superficie), ramificaciones (pequeños estructuras tipo árbol, tanto sobresaliendo como hundiéndose en la superficie), pequeños agujeros del diámetro de una aguja, depósitos frágiles, entre otras. Algunas de ellas tienen una causa que puede ser controlada, otras provienen del desconocimiento de los procesos físicos y químicos que en la electrodeposición concurren.

El problema más destacado en el uso eficiente de la electrodeposición es la limitada posibilidad de diseñar celdas de electrodeposición adaptadas a las características mecánicas y geométricas de la pieza sobre la que depositar. Es muy usual llevar a cabo el diseño a través de ensayos prueba-error y apreciaciones cualitativas, lo cual constituye una importante degradación en tiempo, costes y calidad en la producción de piezas. Debido a ello, la deposición se hace en exceso y el sobrante se retira mecánicamente.

En este contexto, una herramienta de simulación es muy útil, ya que permite hacer los ensayos prueba-error de manera más rápida y con menor coste. Además, utilizando como base la herramienta que aquí se implementa, es posible su acoplamiento con un algoritmo de optimización que, por ejemplo, busque la posición y/o la forma óptima de un ánodo para que el espesor de la deposición en una pieza (cátodo) sea lo más uniforme posible.

En problemas de interés y con geometrías complejas, la solución de las ecuaciones implicadas en el proceso de electrodeposición requiere el uso de métodos numéricos. En este trabajo se propone la formulación e implementación de un modelo de elementos de contorno para la resolución de problemas tridimensionales de electrodeposición.

Objetivos

Los objetivos que se persiguen son los siguientes:

- Elaboración y validación de una herramienta numérica basada en el MEC para la simulación del fenómeno de la electrodeposición química.
- En esta etapa de los estudios de doctorado, este Trabajo Fin de Máster tiene otra serie de objetivos metodológicos, de no menor interés, que servirán para la formación integral del Alumno, su inclusión en el equipo de trabajo, y como introducción a las tareas de investigación. Entre éstos están:
 - Formación curricular del alumno en el campo la aplicación del MEC a problemas de interés para el Grupo.
 - Formulación matemática del MEC, estrategias de programación.
 - Familiarizar al alumno con las búsquedas bibliográficas y la recopilación de bibliografía.

Estructura

El documento se estructura en seis capítulos y un apéndice. En el primer capítulo se contextualiza el documento, introduciendo los conceptos asociados al fenómeno físico que se desea modelizar. En el segundo capítulo, se explican los métodos iterativos que son necesarios para resolver este tipo de modelos, y se incluye la formulación particular que se debe desarrollar sobre el modelo lineal mediante el MEC. En el tercer capítulo se formula el modelo lineal MEC, que es el núcleo del proceso iterativo, y se incluye su fundamentación teórica y el desarrollo de las principales partes que permiten programación. El cuarto capítulo es una extensión del tercero en un aspecto particular, que, aun no siendo estrictamente necesario para la resolución del problema propuesto, supone importantes ventajas que permiten dotar a la herramienta numérica de rapidez y versatilidad. En el quinto capítulo, se muestran los resultados de la validación de la herramienta, en donde han sido usados problemas analíticos, y otros con solución contrastable. Por último, se tiene un capítulo de conclusiones y líneas de ampliación del presente trabajo. Como apéndice, se han puesto los formatos de entrada de ficheros para el programa MECPED desarrollado.

El programa MECPED se ha construido a partir de otro previo utilizado por la División de Mecánica de Medios Continuos y Estructuras en el Análisis Dinámico de Estructuras. Dicho código ha sido empleado para obtener resultados en publicaciones tales como [MAD02, AMD06].

Capítulo 1

Electrodeposición

1.1 Introducción

La electrodeposión es uno de los procesos electroquímicos más interesantes desde un punto de vista teórico y práctico. Se trata de un proceso complejo, pero muy utilizado en la industria. Algunas de las aplicaciones más relevantes son:

- Protección anticorrosiva del hierro y aceros.
- Mejora del acabado superficial de piezas.
- Piezas con requisitos superficiales especiales.
- Componentes electrónicos.
- Metalización de plásticos.
- Réplica de moldes.

La electrodeposición es un proceso electroquímico que requiere de cinco elementos: cuba inerte, baño electrolítico, dos electrodos (cátodo y ánodo), y fuente de tensión regulable. La conexión del polo negativo de la fuente al cátodo, y el positivo al ánodo, genera un campo eléctrico y una corriente eléctrica en el baño. Con una diferencia de potencial adecuada entre electrodos se provocan reacciones de reducción en el cátodo y oxidación en el ánodo. Ello permite depositar en la superficie del cátodo átomos del elemento metálico del ánodo. Véase la **Figura** 1.1.

En el ánodo se produce la reacción de oxidación, es decir, el metal M_A^0 se disuelve en el baño electrolíco en forma de cationes M_A^{n+} cediendo n electrones:

$$M^0_A \to M^{n+}_A + ne^-$$

En el cátodo se produce la reacción de reducción, es decir, el catión M_A^{n+} disuelto en el baño electrolíco capta n electrones y regresa al estado metálico neutro M_A^0 :

$$M_A^{n+} + ne^- \to M_A^0$$

El conjunto conforma un circuito eléctrico, los electrones se transportan por el circuito metálico, y los cationes por el baño electrolítico.



Figura 1.1: Esquema simple de un experimento de electrodeposición

En las reacciones electroquímicas se producen dos reacciones parciales de transferencia de electrones, las cuales tienen lugar en las interfases cátodo-electrolito y ánodo-electrolito, y que pueden controlarse a través del control del campo eléctrico. En las reacciones electroquímicas, las partículas reaccionantes no chocan entre sí, sino con fuentes y sumideros de electrones independientes, [Jul00].

Desde un punto de vista termodinámico, la energía mínima necesaria para invertir el sentido de una reacción electroquímica espontánea en una célula debe ser:

$$\Delta G = zF \left| \mathbf{E} \right| \tag{1.1}$$

Donde z es el número de electrones o cargas eléctricas, F = 96490 [C] es la constante de Faraday (cantidad de carga eléctrica en un mol de electrones) y $|\mathbf{E}|$ es la fuerza electromotriz de la célula.

Debido a una serie de fenómenos irreversibles, que posteriormente se anotarán, la energía ΔG no es suficiente, y es necesario incrementar $|\mathbf{E}|$. La principal causa se debe a la naturaleza de los electrodos, pudiéndose distinguir entre *electrodos totalmente polarizables* y *electrodos totalmente no polarizables*.

Los electrodos totalmente polarizables no permiten que las partículas cargadas puedan atravesar la interfase, mientras que los totalmente no polarizables sí lo permiten. Para hacer que las partículas cargadas puedan atravesar la interfase de un electrodo polarizado es necesario aplicar un exceso de energía a través de un incremento de $|\mathbf{E}|$, es decir, una diferencia de potencial adicional, denominado potencial de polarización, que se detallará en 1.2.

Adicionalmente, en las interfases de los electrodos se producen reacciones no deseables porque irrumpen en el proceso, como son el desprendimiento de gas, reacción de transferencia electrónica, precipitación de un producto sólido, etcétera. Algunas de ellas se pueden tratar mediante algún aditivo en el electrolito, y otras se pueden obviar si se toman medidas. En todo caso, el mecanismo de estas reacciones es complejo, pero suelen constar de cuatro etapas:

- 1. Transporte de la especie reaccionante desde la interfase o hacia la interfase.
- 2. Transferencia de carga a través de la interfase (doble capa eléctrica).
- 3. Reacción química en el electrolito o en la interfase.
- 4. Formación de una fase, ya sea la nucleación de un cristal o el crecimiento del mismo.

Las dos primeras etapas ocurren en todos los casos, las restantes pueden o no darse. Este hecho permite modelizar de una manera simplificada el proceso, como se verá en 1.3.

La velocidad de reacción v en las reacciones electroquímicas se cuantifica haciendo uso del módulo del vector densidad de corriente (cantidad de carga eléctrica por unidad de tiempo y área) en la dirección normal $j_n = \mathbf{j} \cdot \mathbf{n}$ y la constante de Faraday:

$$v = \frac{j_n}{zF} \tag{1.2}$$

Con ello se tiene la velocidad de reacción en moles por unidad de tiempo y área.

Así, se está en disposición de enunciar la ley de Faraday: *el paso de una cantidad de 96490 culombios a través de un electrolito depositará, liberará o descompondrá en cada electrodo un equivalente químico de sustancia*. Expresada como espesor depositado por unidad de tiempo es:

$$d = \epsilon \frac{Mj_n}{nF\rho} \tag{1.3}$$

Donde M es el peso molecular, n es la valencia, y ρ es la densidad de la sustancia. La eficiencia ϵ tiene en cuenta el rendimiento de la corriente anódica o catódica, según el caso.

1.2 Electrodeposición de metales

En este apartado se van a exponer los principales conceptos que son necesarios para conocer los procesos que ocurren en los electrodos. Lo expuesto aquí tiene su origen en el año 1947 en el simposio *Electrode Processes* que tuvo lugar en *The Faraday Society*, aunque ya desde 1875 se llevaba estudiando, [Sch].

1.2.1 Doble capa eléctrica

El mecanismo de deposición se centra básicamente en la interfase electrodo-electrolito. La ionización de un metal provoca un exceso de electrones en el metal y un aumento de cationes en la capa de electrolito adyacente al electrodo. Para explicar lo que sucede en esta capa se han formulado varias hipótesis, [Jul00].

La primera interpretación simplista e intuitiva es que las cargas positivas y negativas se ordenan rígidamente en capas paralelas opuestas una a otra. Gouy y Chapman refinaron esta interpretación asumiendo que dicha capa es en realidad una doble capa difusa en la que las cargas forman una nube iónica. Stern y Graham introdujeron modificaciones al considerar que los iones tienen dimensiones finitas, así se puede diferenciar la presencia de iones solvatados y desolvatados, que forman dos capas: la capa interna de Helmholtz (fuerzas de adsorción) y la capa externa de Helmholtz (fuerzas electrostáticas). La doble capa eléctrica tiene alrededor de 10 Å de espesor en total, y la capa interna 2-3 Å, [Sch]. Véase **Figura** 1.2.



Figura 1.2: Esquema de la doble capa eléctrica

1.2.2 Deposición electrolítica

Cuando un cristal metálico se sumerge en agua, algunos iones metálicos abandonan su red y se hidratan y difunden dentro de la disolución como cationes disueltos. Sus electrones permanecen en la nube electrónica del metal sólido, y éste queda cargado negativamente. Los cationes disueltos son atraídos por el metal sólido cargado negativamente, algunos cationes regresan a la red y otros quedan disueltos.

Ello conforma un equilibrio dinámico en el que el metal queda cargado negativamente respecto a la disolución. El metal cargado queda envuelto por una película de disolución, que es precisamente la doble capa eléctrica mencionada. El flujo de iones hacia el metal y desde el metal en este equilibrio tiene corriente neta cero, pero la corriente unidireccional resultará útil posteriormente, y se denomina corriente de canje o de intercambio j_{n0} .

La magnitud de la corriente de intercambio está determinada por la diferencia de potencial y la activación necesaria para que se den las reacciones de disolución y deposición. Esta última magnitud constituye una barrera de potencial que hay que superar, y depende de la naturaleza y mecanismo con el que reaccionan los iones. El potencial del electrodo y la corriente de intercambio varían con la presencia de sustancias adsorbidas en la interfase. Los aditivos que se añaden al electrolito con algún propósito determinado, las sustancias producidas colateralmente, así como impurezas o contaminantes modifican fuertemente estos parámetros.

Si externamente se aplica una fuerza electromotriz los potenciales de los electrodos se desplazan de sus valores de equilibrio, con lo cual existe una corriente neta que provoca la disolución de metal en el ánodo y la deposición en el cátodo. Pueden presentarse reacciones colaterales, como el desprendimiento de hidrógeno en el cátodo y la liberación de oxígeno en el ánodo, si

la disolución tiene la composición adecuada. Estas reacciones colaterales pueden favorecerse o anularse si se dan las condiciones adecuadas, en el caso que ocupa a la electrodeposición interesa anularlas.

1.2.3 Polarización

Cuando se aplica una fuerza electromotriz externa suficiente, circulan electrones desde el ánodo hacia el cátodo a través del circuito metálico y cationes a través del electrolito, los potenciales de los electrodos cambian respecto a los de equilibrio no polarizados. El potencial del cátodo se hace más negativo, y el potencial del cátodo se hace más positivo, diciéndose entonces que ambos electrodos están polarizados.

El potencial de polarización se debe a una sobretensión debida a varios procesos que ocurren en el electrodo:

- Sobretensión de concentración o de difusión η_c .
- Sobretensión de activación o de transferencia de carga η_a .
- Sobretensión de reacción η_r .
- Sobretensión de cristalización η_n .

A continuación se van a describir los dos primeros, que son los más importantes, y los que se pueden determinarse con cierta fiabilidad.

1.2.3.1 Sobretensión de concentración

La sobretensión de concentración se debe al cambio en la concentración metálica que rodea a los electrodos como consecuencia del transporte iónico, y contribuye considerablemente a la polarización total en las densidades de corriente habitualmente manejadas. La disolución contigua al cátodo se va empobreciendo en iones metálicos a medida que el metal se va depositando, siendo cada vez más difícil seguir depositando, véase **Figura** 1.3.



Figura 1.3: Concentración de cationes en el electrolito entre cátodo y ánodo

Cuando se está en equilibrio a circuito abierto, la velocidad de deposición y de disolución en el cátodo son iguales a la corriente de intercambio j_{n0} . Cuando circula corriente neta, la vecindad

1 Electrodeposición

va perdiendo cationes y la velocidad de deposición va disminuyendo haciéndose el potencial del cátodo más negativo. A medida que aumenta la densidad de corriente, más pequeña es la velocidad de deposición y mayor será η_c . Cuando la concentración de cationes se aproxime a cero, η_c tiende al infinito. La densidad de corriente en esa situación se denomina densidad de corriente límite j_{nl} .

Cuando se alcanza la corriente límite se dice que el proceso está controlado por la difusión. Más allá de ese límite existe un punto a partir del cuál se produce un proceso alternativo, generalmente un desprendimiento de hidrógeno.

Todo lo comentado para el cátodo ocurre de manera análoga en el ánodo, con la salvedad de que la concentración de cationes va aumentando en vez de disminuyendo.

Las regiones en donde se produce la variación de la concentración se denominan películas de difusión (capa de difusión), y a través de ellas existe un gradiente de concentración. El espesor de esta película no coincide con el espesor de la doble capa eléctrica, y se extiende mucho más allá que ella. El espesor suele ser menor de 300 $[\mu m]$, y a menudo en el rango $1 \div 50 \ [\mu m]$.

El valor de la corriente límite y el espesor de la capa de difusión depende fuertemente de la temperatura, composición del electrolito, grado de agitación del mismo, entre otros. Por tanto, éstos deben tenerse controlados a fin de tener una corriente límite lo mayor posible. El valor de la corriente límite es:

$$j_l = j_{nl0} \frac{\delta_0}{\delta} \tag{1.4}$$

Donde j_{nl0} es la densidad de corriente límite cuando el espesor de la capa límite de difusión es δ_0 , pudiendo ser estimados fiablemente, [GGB90]. Sin embargo, la determinación de δ es muy complicada, ya que en esta pequeña capa confluyen fenómenos de transporte iónico por difusión (gradiente de concentración), migración (fuerzas debidas al campo eléctrico), y convección (gradientes de temperatura y densidad). Se conocen aproximaciones de δ para casos particulares, como son la de esferas y cilindros en rotación, [Kir90, GGB90].

La sobretensión de concentración η_c es, según [GGB90, Jul00]:

$$\eta_{\rm c} = \pm \frac{RT}{nF} \ln \frac{j_{nl}}{j_{nl} - j_n} \tag{1.5}$$

Donde $R = 8.314 [J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}]$ es la constante universal de los gases ideales, y T [K] es la temperatura absoluta. Nótese que las densidades de corriente son positivas si se trata de un electrodo anódico, y negativas si catódico, y deberá escogerse la ecuación con signo + si es elecrodo anódico y con signo - si catódico. Esta ecuación responde al proceso límite antes explicado, cuando la densidad de corriente j_n tiende a j_{nl} la sobretensión tiende al infinito.

En general, para asegurar el suministro de cationes al cátodo, para disminuir el espesor de la capa de difusión, lo que conlleva aumentar la densidad de corriente límite y evita el desprendimiento de gases, el electrolito se remueve. La agitación puede llevarla a cabo el propio cátodo por su movimiento, que es el caso de cilindros y esferas en rotación de [Kir90], o bien removiendo el electrolito con algún dispositivo mecánico.

1.2.3.2 Sobretensión de activación

La sobretensión de activación o de transferencia de carga está asociada a los procesos que tienen lugar en los electrodos y éstos requieren una energía de activación para que se puedan producir. Entre otros están la hidratación o deshidratación de los iones, la descarga de los iones en los electrodos y la formación de cristales o moléculas gaseosas a partir de los átomos adsorbidos.

Esta sobretensión η_a está dada por la ecuación de Butler-Volmer, [GGB90]:

$$j_n = j_{n0} \left(e^{\alpha_{\rm A} \frac{F}{RT} \eta_{\rm a}} - e^{-\alpha_{\rm C} \frac{F}{RT} \eta_{\rm a}} \right)$$
(1.6)

Donde α_A y α_C son los coeficientes de transferencia de ánodo y cátodo. Nótese que la densidad de corriente y la sobretensión son positivas si el electrodo es anódico, y viceversa catdico. En la **Figura** 1.4 se representa la ecuación (1.6) con $j_{n0} = 0.0168 \, [A \cdot cm^{-2}]$, $T = 304.9 \, [K]$ y α_A y α_C como se indica.



Figura 1.4: Gráfica ejemplo de la sobretensión de activación (ecuación de Butler-Volmer)

1.2.3.3 Polarización total

Si $u_{\rm p}$ es el potencial con el electrodo polarizado, y $u_{\rm s}$ es el potencial no polarizado en estado estable, éstos se relacionan a través de la suma total de sobretensiones $\eta_{\rm t}$ indicadas anteriormente:

$$u_{\rm p} = u_{\rm s} + \eta_{\rm c} + \eta_{\rm a} + \eta_{\rm r} + \eta_{\rm n} \tag{1.7}$$

$$\eta_{\rm t} = u_{\rm p} - u_{\rm s} \tag{1.8}$$

La polarización total es igual a la diferencia de los estados polarizado y no polarizado, y será negativa para un proceso catódico, y positiva para un proceso anódico.

1.3 Modelización del fenómeno

Se desea modelizar el proceso de electrodeposición, con un esquema análogo a la **Figura** 1.1, que permita obtener el espesor de la deposición en el cátodo (y desprendimiento en el ánodo). Como se vio en (1.2), dicho espesor depende de la densidad de corriente j_n a nivel puntual en el cátodo, y de otros parámetros característicos de la sustancia a depositar. Por tanto, se busca hallar j_n a nivel puntual en los contornos del cátodo y el ánodo.

En el apartado anterior se justificó que el electrolito se agita para que las condiciones de electrodeposición sean las mejores, es decir, se lleve a cabo de una manera eficiente. Esto hace disminuir el espesor de la capa de difusión, pero a nivel puntual es difícil de conocer, sólo casos especiales se conocen, [Kir90]. También provoca que la concentración de cationes en la masa de electrolito, es decir, obviando las capas de difusión, sea aproximadamente constante. Con todo, la agitación hace que en el seno del electrolito tanto temperatura, como concentración de especies, particularmente cationes, sean constantes, con lo que la conductividad eléctrica también lo es.

En estas condiciones, en el seno del electrolito se cumple la ecuación de Laplace para el potencial eléctrico (o electroquímico), es decir, la divergencia del gradiente de potencial es nula es todo punto del dominio de Laplace. Físicamente esto quiere decir que en un elemento diferencial de volumen, la sumatoria de densidades de corriente es nula.

Si $\Omega_{\text{Laplace}} = \Omega_{\text{electrolito}} - \Omega_{\text{dif.}}$ es el dominio que cumple las condiciones antes expuestas, el potencial eléctrico u en Ω_{Laplace} cumple:

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} = 0 \quad \boldsymbol{\Omega}_{\text{Laplace}} \tag{1.9}$$

Dado que $\Omega_{\rm dif.}$ es muy pequeño, $\Omega_{\rm Laplace} \simeq \Omega_{\rm electrolito}$ en términos geométricos, pero no a nivel del potencial u. Sin embargo, puede suponerse que $\Omega_{\rm Laplace} = \Omega_{\rm electrolito}$ si lo que ocurre con el potencial u en $\Omega_{\rm dif.}$ puede incorporarse en el contorno $\Gamma = \partial \Omega_{\rm electrolito}$. Es decir, la capa de difusión (que incluye a la doble capa eléctrica) se puede incluir en un dominio tipo Laplace a fin de incluir lo que ocurre en ella como condición de contorno de (1.9).

Lo que ocurre en $\Omega_{dif.}$ queda bien descrito por la curva de polarización total η_t y el potencial de equilibrio u_s . Para incluir esto como condición de contorno basta con llevar el potencial electroquímico en la frontera de la capa límite con el seno del electrolito hasta el contorno real:

$$u_{\rm C} = u_{\rm 0C} - \eta_{\rm tC} - u_{\rm sC} \tag{1.10}$$

$$u_{\rm A} = u_{0\rm A} - \eta_{\rm tA} - u_{\rm sA}$$
 (1.11)

Donde, recuérdese que $\eta_{tC} < 0, u_{sC}$ y $\eta_{tA} > 0, u_{sA}$, y que $u_{0C} < u_{0A}$, ello quiere decir que el efecto de la polarización es una caída de tensión adicional entre el potencial del cátodo o ánodo y el seno del electrolito.

Haciendo uso de las expresiones vistas anteriormente, la relación entre potenciales $u_{\rm C}$ y $u_{\rm A}$ y densidades de corriente normales $j_{\rm nC}$ y $j_{\rm nA}$, respectivamente, puede ser halladas, y plantearse como condiciones de contorno las siguientes:

$$j_{\rm C} = f_{\rm C} \left(u_{\rm C} \right) \tag{1.12}$$

$$j_{\mathrm{A}} = f_{\mathrm{A}}\left(u_{\mathrm{A}}\right) \tag{1.13}$$

Donde $f_{\rm C}(u_{\rm C})$ y $f_{\rm A}(u_{\rm A})$ son funciones no lineales debido a las expresiones (1.6) y (1.5). Es importante anotar que el signo de las densidades de corriente en la teoría de la polarización antes descrita se debe a una normal entrante en el electrolito, lo cual es inverso a la normal utilizada habitualmente, la normal exterior al dominio.

El problema queda bien planteado mediante una ecuación de Laplace en $\Omega_{\rm electrolito}$, en los electrodos condiciones de contorno no lineales que tienen en cuenta la polarización, y en el resto de la cuba, al ser inerte, una densidad de corriente en la dirección normal nula. Es decir, siendo n la normal exterior:

$$\nabla^2 u = 0 \quad \Omega_{\text{electrolito}}$$

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = f(\mathbf{x}, u) \quad \Gamma_{\text{electrodos}}$$

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \Gamma_{\text{inerte}}$$
(1.14)

Este planteamiento, tanto para problemas de electrodeposición como para problemas de protección catódica, ofrece un modelo muy aproximado de la realidad, existiendo multitud de autores que lo utilizan, a destacar el trabajo de Giles y Gray [GGB90], que utilizan el método de elementos de contorno para construir un potente software, denominado BEPLATE, parecido al que en el presente trabajo se presenta.

Aun siendo un modelo aceptado, es un modelo muy simple de la realidad, ya que los fenómenos que ocurren en las capas límite se condensan en una curva de polarización, y es muy variable con las condiciones del experimento. Ni siquiera las curvas de polarización, mediante los modelos arriba expuestos, pueden representar la realidad correctamente. Tanto es así, que todavía hay muchos trabajos de carácter experimental para la estimación de las curvas de polarización, que, como se ha dicho, dependen de la sustancia a depositar, el electrolito, la agitación de éste, la temperatura, los aditivos, etcétera. Otra cuestión importante es saber en qu medida afecta la variación de la geometría al ir depositándose sustancia a las densidades de corriente y curvas de polarización. Es decir, poder simular el crecimiento del depósito adaptando todas las condiciones paso a paso.

1.4 Conclusiones

En este capítulo se han introducido los conceptos básicos que atañen propiamente al problema electroquímico, así como el estado actual de la materia. Por tanto, se está en disposición de contextualizar mejor el presente trabajo.

Mucho camino ha sido recorrido en el problema de la electrodeposición, pero se ha visto que quedan cuestiones no resueltas satisfactoriamente. El programa resultado de este trabajo, MECPED, constituye el núcleo a partir del cual pueden partir varios desarrollos en otros Trabajos Fin de Máster, Tesis Doctorales, Publicaciones. Los desarrollos pueden estar en la línea de lo comentado al final de 1.3: identificación de curvas de polarización y simulación del crecimiento del depósito; pero puede también acoplarse a un optimizador para mejorar el

1 Electrodeposición

diseño de celdas de electrodeposición. Todo ello será ampliamente comentado en las líneas futuras de las conclusiones de esta memoria.



Modelo con condiciones de contorno tipo Robin no lineales

2.1 Introducción

En el apartado 1.3 del capítulo anterior se mostró que una celda de electrodeposición puede ser aceptablemente modelada mediante una ecuación de Laplace para el potencial electroquímico con condiciones de contorno en términos de flujo (densidad de corriente) no lineales (1.14).

En este capítulo se concreta la formulación elegida de entre las posibles, justificando su uso. Seguidamente se describen los métodos iterativos utilizados para tratar el carácter no lineal del problema. Por último, se desarrolla el proceso de ensamblaje en el MEC de las condiciones de contorno particulares de este problema haciendo uso de los métodos iterativos. En este sentido, nótese que este capítulo es dependiente del capítulo 3.

2.2 Formulación diferencial

Los métodos numéricos de aproximación de ecuaciones en derivadas parciales, principalmente: Método de Diferencias Finitas, Método de Elementos Finitos y Método de los Elementos de Contorno; se comienzan ilustrando con un problema de Laplace, ya que siendo relativamente sencillo, permite abordar multitud de fenómenos físicos. La ecuación de gobierno del potencial u en un dominio Ω según la ecuación de Laplace es:

$$\nabla^2 u = 0 \quad \Omega \tag{2.1}$$

La ecuación de Laplace requiere condiciones de contorno en todo el contorno $\Gamma = \partial \Omega$, siendo típicamente de tres tipos, siendo n es la normal exterior:

- Condición de contorno tipo Dirichlet, esencial, o de primer tipo: u = ū; en donde queda especificada la variable escalar del problema.
- Condición de contorno tipo Neumann, natural, o de segundo tipo: $\nabla u \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q}$; en donde queda especificado el flujo normal exterior de la variable escalar.
- Condición de contorno tipo Robin, mixta, o de tercer tipo: a
 ūu + b
 du = c
 ē; en donde queda especificado el flujo normal exterior en función de u a través de una relación lineal.

Para el presente trabajo, se ha de considerar una generalización de la de tercer tipo:

 ■ Condición de contorno tipo Robin no lineal (o generalizada): ∇u · n = ∂u/∂n = f(u); en donde queda especificado el flujo normal en función de u a través de una relación cualquiera.

La resolución de un problema de Laplace con condiciones de contorno arbitrarias, incluyendo tipo Robin lineal o no lineal, en general, no se puede garantizar. En el caso particular de que coexistan condiciones de contorno tipo Dirichlet y Neumann, la solución existe y es única, pero cuando sólo hay de tipo Neumann, éstas deben cumplir ciertos requisitos. Cuando se introducen condiciones tipo Robin, ya sean lineales o no lineales, la existencia no se puede garantizar. Sin embargo, si el problema físico está correctamente descrito, la solución debe existir.

Existen varias formas de plantear la ecuación de Laplace y sus condiciones de contorno, equivalentes entre ellas, pero con diferencias una vez se llega a la ecuación integral en el contorno previa a la aplicación del MEC. A continuación, se realiza un proceso similar al hecho en 3.1, pero resumido. La ecuación de Laplace isotrópica y con conductividad constante puede escribirse de tres maneras equivalentes debido a la nulidad del miembro derecho de la ecuación:

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} = 0 \tag{1}$$

- $\sigma \nabla^2 u = 0 \tag{II}$
- $-\sigma \nabla^2 u = 0 \tag{III}$

Si a cada una se le aplica el MRP¹, el residuo correspondiente queda:

$$\int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} \right) \boldsymbol{u}^* \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{1}$$

$$\int_{\Omega} \left(\sigma \nabla^2 u \right) u^* \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{II}$$

$$\int_{\Omega} \left(-\sigma \boldsymbol{\nabla}^2 u \right) u^* \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{III}$$

Si se sigue un proceso similar al que se hace en 3.1, se obtienen las correspondientes ecuaciones integrales:

$$\int_{\Omega} u \left(\boldsymbol{\nabla}^{2} u^{*} \right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} q u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \quad (\mathbf{I})$$
$$\int_{\Omega} u \left(\sigma \boldsymbol{\nabla}^{2} u^{*} \right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} q u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \quad (\mathbf{II})$$
$$\int_{\Omega} u \left(-\sigma \boldsymbol{\nabla}^{2} u^{*} \right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} q u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \quad (\mathbf{III})$$

Donde:

¹Método de los Residuos Ponderados

$$q = \frac{\partial u}{\partial n} \qquad \qquad q^* = \frac{\partial u^*}{\partial n} \tag{1}$$

$$q^* = \sigma \frac{\partial u}{\partial n} \qquad \qquad q^* = \sigma \frac{\partial u^*}{\partial n} \qquad (II)$$

$$q = -\sigma \frac{\partial u}{\partial n} \qquad \qquad q^* = -\sigma \frac{\partial u^*}{\partial n} \tag{III}$$

Siendo q la variable de flujo, en cada una de las posibles formulaciones ésta tiene un significado distinto. En la formulación (I) es directamente el gradiente del potencial, en la formulación (II) es la densidad de corriente con gradiente positivo, y en la formulación (III) es la densidad de corriente negativo. La formulación (III) es un planteamiento *ad hoc* para los problemas de campo eléctrico o térmico, ya que contienen el hecho de considerar como variable de flujo un gradiente negativo. La formulación (II) es similar a la (III) pero en donde σ debe contener el signo del gradiente que se considera en la variable de flujo, lo cual da un sentido más general a la formulación.

Si se hallan las soluciones fundamentales por un procedimiento análogo al de el apartado 3.2, se obtienen soluciones fundamentales análogas a las de la expresión (3.24) (3.26), pero con σ , con signo positivo o negativo, multiplicando o dividiendo.

Por tanto, se ha estimado como la mejor solución utilizar la formulación (I), ya que, por un lado, se abstrae la conductividad σ de la formulación, teniéndose que procesar sólo en la entrada y salida de datos, y por otro, la solución fundamental tiene un multiplicando menos, lo que supone cierto ahorro computacional.

Una vez establecida la formulación a utilizar como la formulación (I), el problema va a quedar planteado así:

$$u = \bar{u} \quad \Gamma_u \tag{2.3}$$

$$a = \bar{a} = \frac{1}{\bar{i}_{a}} \quad \Gamma_{a} \tag{2.4}$$

$$q = \bar{f}(u) = \frac{1}{\sigma} \bar{l}(u) \quad \Gamma_r \tag{2.5}$$

Donde σ es la conductividad eléctrica del electrolito, y debe introducirse con signo negativo para incorporar la interpretación de que la densidad de corriente es opuesta al gradiente de potencial. Nótese que debido a que se ha elegido la formulación (I), las condiciones de contorno en flujo, tanto tipo Neumann como tipo Robin, se plantean en términos del gradiente de u y no en términos de la densidad de corriente.

En el software MECPED, el usuario debe introducir σ (con el signo del gradiente de la variable de flujo del problema), \bar{u} en los contornos o nodos con condición de contorno tipo Dirichlet, \bar{j}_n en los contornos o nodos tipo Neumann, y en los contornos o nodos con condición de contorno tipo Robin, ya sea lineal o no lineal, $\bar{l}(u)$. En los programas MEC desarrollados previamente en la División de Mecánica de los Medios Continuos y Estructuras, las condiciones de contorno se introducen a nivel de grupo de elementos, lo que se denomina "contorno diferenciado", pero para este problema ha sido necesario generalizar ello a un nivel nodal, de manera que el

usuario puede introducir tanto condiciones de contorno por "contornos diferenciados" como por nodos.

La mayoría de formulaciones hechas *ad hoc* para el problema de electrodeposición, por ejemplo [DPV00], diferencian contornos tipo cátodo, ánodo e inertes, de manera que la posibilidad de pasar problemas que respondan a la misma ecuación de gobierno y condiciones de contorno queda oscurecida. La formulación elegida e implementada en el software MECPED resuelve un problema general que responde a (2.2), (2.3), (2.4) y (2.5).

La resolución del problema con condiciones de contorno no lineales planteado require un método iterativo, de manera que en cada iteración se resuelve un problema linealizado, y en sucesivas iteraciones se va convergiendo a la solución. La resolución del problema linealizado se puede llevar a cabo por cualquiera de los métodos numéricos antes citados (MDF²,MEF³,MEC), el algoritmo iterativo "sólo" define la estrategia para transformar las soluciones obtenidas en una iteración previa, e insertarlas en la siguiente iteración. A continuación se describen los métodos iterativos utilizados.

2.3 Métodos iterativos de resolución

Se han realizado multitud de trabajos, tanto por ingenieros como por matemáticos, que investigan los métodos iterativos clásicos, Newton-Raphson y Punto Fijo principalmente, aplicados a problemas de electrodeposición y protección catódica, [SYR00, ref. 3-6]. La forma de las curvas u - q de las condiciones tipo Robin no lineal que derivan de estos problemas resultan ser adecuadas para estos algoritmos, y en general, los métodos convergen.

2.3.1 Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson utiliza una aproximación lineal de la condición de contorno tipo Robin no lineal en Γ_r mediante un desarrollo en serie de Taylor de $\bar{f}(u)$ en u_{t-1} para la iteración t. El procedimiento iterativo es convergente para las formas de las curvas de polarización típicas en estos problemas, como demuestra [SYR00]. El algoritmo escrito para la formulación diferencial en la iteración t queda:

1. Supóngase se tiene una estimación de las soluciones u_0 y q_0 en Γ_r .

2. t = 1

3. Se resuelve el problema lineal:

 $\nabla^2 u_t = 0 \quad \Omega$ $u_t = \bar{u} \quad \Gamma_u$ $q_t = \bar{q} \quad \Gamma_q$ $q_t = \bar{f} (u_{t-1}) + \bar{f}' (u_{t-1}) \cdot (u_t - u_{t-1}) \quad \Gamma_r$

4. Si las soluciones de la iteración t difieren de la iteración t-1 menos que una cierta tolerancia, terminar. Si no, $t \leftarrow t+1$ y volver al paso 3.

²Método de Diferencias Finitas

³Método de Elementos Finitos



Figura 2.1: Aproximación por Newton-Raphson

2.3.2 Método del Punto Fijo

El método del Punto Fijo trata la condición de contorno tipo Robin no lineal en Γ_r tomando como aproximación de $\bar{f}(u)$ una recta entre una estimación de la solución u_{t-1} y q_{t-1} sobre $\bar{f}(u)$, y un punto de referencia u_{ref} y q = 0. Con esto en cuenta, el algoritmo es análogo al algoritmo de Newton-Raphson, en la iteración t:

1. Supóngase se tiene una estimación de las soluciones u_0 y q_0 en Γ_r .

2. t = 1

3. Se resuelve el problema lineal:

$$\begin{aligned} \nabla^2 u_t &= 0 \quad \Omega \\ u_t &= \bar{u} \quad \Gamma_u \\ q_t &= \bar{q} \quad \Gamma_q \\ q_t &= \frac{\bar{f}(u_{t-1})}{u_{\text{ref}} - u_{t-1}} \left(u_{\text{ref}} - u_t \right) \quad \Gamma_r \end{aligned}$$

4. Si las soluciones de la iteración t difieren de la iteración t-1 menos que una cierta tolerancia, terminar. Si no, $t \leftarrow t+1$ y volver al paso 3.

Nótese que el algoritmo no es válido si en algún momento $u_t = u_{\rm ref}$, pero ello no presenta dificultades para los problemas de electrodeposición, ya que sólo ocurre cuando no circula corriente por el circuito, lo cual resulta un problema trivial. Este método no garantiza la convergencia para cualquier problema de este tipo, puede ser necesario relajar el proceso haciendo uso de un parámetro de relajación α :

$$u_t^{relax} = u_{t-1} + \alpha \left(u_t - u_{t-1} \right), 0 \le \alpha \le 1$$
(2.6)



Figura 2.2: Aproximación por Punto Fijo ($u_{\rm ref} = 0.0$)

2.3.3 Método combinado

En [SYR00], Sun et al. demuestran que es posible alternar iteraciones tipo NR⁴ y PF⁵, obteniéndose un proceso iterativo más robusto y con mejor convergencia si $\bar{f}(u)$ cumple ciertos requisitos, que las curvas de polarización teóricas cumplen. De hecho, Sun et al. demuestran que la solución real u^* está entre las soluciones de NR $u_{\rm NR}$ y la siguiente de PF $u_{\rm PF}$, es decir, $u_{\rm NR} < u^* < u_{\rm PF}$, o dicho de otro modo, tras una iteración Newton-Raphson y otra Punto Fijo la solución queda acotada.

Por tanto, a pesar de que el método del PF tiene una convergencia más incierta, al combinarlo con iteraciones de NR, se obtiene un algoritmo más versátil. En [SYR00] se obtienen resultados interesantes, cuando la solución inicial es cercana a la solución del problema, el método combinado converge de forma intermedia a NR y PF, pero cuando se tiene una solución inicial mala, el método combinado converge mucho antes. En los problemas estudiados por Sun et al., se observa que el número de iteraciones es poco sensible a calidad de las soluciones iniciales.

2.4 Motivos para utilizar el MEC en problemas de electrodeposición

Como ya se denotara en 2.2, el método iterativo a utilizar es independiente del método numérico que resuelve el problema linealizado. El problema linealizado podría ser atacado por el MDF, MEF, MEC, u otros que puedan resolver la formulación diferencial planteada.

Los métodos de dominio, como son el MDF y el MEF, requieren la discretización de todo el electrolito, es decir, una discretización volumétrica. Eso supone mayor esfuerzo para conseguir una malla bien adaptada al problema en particular que se esté estudiando. Los métodos de dominio resuelven el problema con la variable primaria u. Para obtener la densidad de corriente se deben posprocesar los resultados, obteniéndose un orden de aproximación menor para ésta.

⁴Newton-Raphson

⁵Punto Fijo

2.5 Ensamblaje y tratamiento de las CC tipo Robin no lin. en el método iterativo y en el MEC

Si u se resuelve con elementos lineales \mathcal{P}^1 , la densidad de corriente obtenida tiene un orden de aproximación \mathcal{P}^0 . Asimismo, las mallas volumétricas son complicadas de tratar si se quieren realizar simulaciones del crecimiento del depósito (ver final del capítulo 1).

El MEC elimina todas esas dificultades a costa de un mayor esfuerzo previo, ya que implementar un software de elementos de contorno tiene una dificultad mayor que otros métodos. A diferencia de los métodos de dominio, el MEC resulve tanto la variable primaria u como la de flujo q con el mismo orden de aproximación. Por ejemplo, si se tienen elementos cuadráticos en el MEC, u y q se resuelven con un orden de aproximación \mathcal{P}^2 , mientras que para conseguir el mismo orden de aproximación para q en el MEF se requieren elementos cúbicos \mathcal{P}^3 . Los elementos cuadráticos \mathcal{P}^2 típicos en el MEC 3D son elementos de área con 6 nodos (triángulo), 8 nodos (cuadrilátero sin nodo interior) y 9 nodos (cuadrilátero con nodo interior). En el MEF 3D los elementos son volumétricos, y un elemento cúbico \mathcal{P}^3 tiene cómo mínimo 20 nodos (tetraedro cúbico). Resulta evidente que el MEF introduce un número mucho mayor de elementos y nodos para una solución con el mismo grado de aproximación que el MEC. Adicionalmente, la confección de las mallas es mucho más sencilla en el MEC, pudiéndo incluso prescindir de discretizar ciertos planos si se utilizan las soluciones fundamentales adecuadas, hecho que se ha implementado en este trabajo (ver capítulo 4).

Por todas estas razones, el Método de los Elementos de Contorno es, sin dudarlo, el método numérico mejor adaptado a este problema.

2.5 Ensamblaje y tratamiento de las condiciones de contorno tipo Robin no lineales en el método iterativo y en el MEC

En el apartado 3.5 del siguiente capítulo se explica el ensamblaje de las condiciones de contorno tipo Dirichlet y Neumann, pero va a ser aquí en donde se detalle el ensamblaje de condiciones de contorno tipo Robin no lineales haciendo uso de los métodos iterativos expuestos en 2.3. Por tanto, para el lector no iniciado en el MEC sería recomendable una lectura previa del capítulo 3.

Las condiciones de contorno tipo Robin no lineales (2.5), una vez linealizadas para la iteración t, tienen la forma general:

$$q_t = \bar{C}_1 u_t + \bar{C}_0 \quad \Gamma_r \tag{2.7}$$

Para la aproximación de $\overline{f}(u)$ en las iteraciones tipo Newton-Raphson:

$$\bar{C}_1 = \bar{f}'(u_{t-1})
\bar{C}_0 = \bar{f}(u_{t-1}) - \bar{C}_1 \cdot u_{t-1}$$
(2.8)

Y en las iteraciones tipo Punto Fijo:

$$\bar{C}_{1} = \frac{\bar{f}(u_{t-1})}{u_{\text{ref}} - u_{t-1}}$$

$$\bar{C}_{0} = \bar{f}(u_{t-1}) - \bar{C}_{1} \cdot u_{t-1}$$
(2.9)

En el programa MECPED, las condiciones de contorno tipo Robin no lineales se introducen de manera discretizada y en términos de la densidad de corriente $\bar{l}(u)$. Sin embargo, la formulación

utiliza como variable de flujo el gradiente positivo de potencial y la curva correspondiente $\bar{f}(u)$. La equivalencia entre ambas es directa, $\bar{f}(u) = \frac{1}{\sigma}\bar{l}(u)$, siendo σ negativa para tener en cuenta que un gradiente positivo de potenciales genera una densidad de corriente de signo opuesto. Esta transformación se realiza en la rutina de entrada de datos INPUT.

La introducción de $\overline{l}(u)$ como curva discretizada es la forma más sencilla de procesarla, y la más versátil para el usuario, ya que queda una interfaz abierta. Otros programas como BEPLATE o [DPV01] utilizan internamente expresiones analíticas y una traslación de la curva del cátodo o del ánodo igual al valor de la tensión a circuito abierto (tensión aplicada por la fuente de tensión). En BEPLATE se utilizan directamente expresiones *ad hoc* como las mostradas en el capítulo 1, y en [DPV01] expresiones polinómicas. Si el usuario desease usar una curva analítica, le basta con hacer una sencilla rutina previa que pase de dicha curva analítica a una curva discretizada con tantos puntos como desee, y ser esta última la introducida a MECPED.

Una vez la rutina de entrada de datos ha leído y procesado las curvas introducidas, se tienen NF curvas discretizadas. Cada curva discretizada $c = 1, \ldots, NF$ se almacena en orden creciente de abscisas, teniendo cada curva NP_c puntos definidos por su abscisa y ordenada $UFU_i^c, FFU_i^c, i = 1, \ldots, NP_c$. Así todo, las curvas tienen $NT_c = NP_c - 1$ tramos. Puede verse esto gráficamente en la **Figura** 2.3.



Figura 2.3: Definición interna de las curvas discretizadas

Las derivadas $\bar{f}'(u_{t-1})$ utilizadas en las iteraciones Newton-Raphson se hallan para todas las curvas introducidas como⁶:

$$DFU_{j}^{c} = \frac{FFU_{j+1}^{c} - FFU_{j}^{c}}{UFU_{j+1}^{c} - UFU_{j}^{c}}, j = 1, \dots, NT_{c}$$
(2.10)

Además de esto, para cada curva se da el tramo inicial TI_c con el cual se comienza a iterar, y el punto PI_c correspondiente a u_{ref} que se utiliza para las iteraciones tipo Punto Fijo.

A continuación, se detalla en pseudocódigo el manejo de la condición de contorno tipo Robin no lineal en MECPED:

 $^{^{6}}$ Una posible mejora es utilizar una interpolación con un soporte mayor para el cálculo de la derivada del tramo j.

- 1. Rutina POLARISATION. Antes de comenzar el proceso iterativo, se calcula la matriz $DFU_j^c, c = 1, \ldots, NF, j = 1, \ldots, NT_c$ en donde se guardan los valores de las derivadas para cada tramo j de cada curva.
- 2. Rutina SOLINICIAL. A cada nodo con condición de contorno tipo Robin no lineal se le asigna un potencial y gradiente de potencial correspondiente al tramo inicial TI^c asignado para su curva c.
- 3. Inicialización del bucle: t = 0, ctrl = falso.
- 4. Mientras $t \leq t_{\text{max}}$ y ctrl == falso.
 - a) $t \leftarrow t+1$
 - b) Rutina SISTEMA. Dentro de esta rutina se realizan bucles y llamadas a otras rutinas necesarias para el cálculo de los núcleos de integración. Nótese que los núcleos de integración son los mismos entre iteraciones, de manera que MECPED aprovecha este hecho guardándolos en la iteración t = 1, y no utilizando dichos valores guardados para t > 1. Supuesto conocidos los vectores de núcleos de integración \mathbf{h}^{ij} y \mathbf{g}^{ij} para el elemento j y el nodo de colocación i, si el nodo \hat{k} en numeración local (k en numeración global) del elemento j es un nodo con condición de contorno tipo Robin lineal (KODEON(k) = -1):
 - 1) Se calculan \bar{C}_0 y \bar{C}_1 según el método iterativo elegido: si NR (2.8), si PF (2.9).
 - 2) Se ensamblan los núcleos de integración y las condiciones a partir del desarrollo de la ecuación (3.72):

$$\dots + h_{\hat{k}}^{ij} \cdot u_{k} + \dots = \dots + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot q_{k} + \dots$$
$$\dots + h_{\hat{k}}^{ij} \cdot u_{k} + \dots = \dots + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot (\bar{C}_{1}u_{k} + \bar{C}_{0}) + \dots$$
$$\dots + \left(h_{\hat{k}}^{ij} - g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{C}_{1}\right) \cdot u_{k} + \dots = \dots + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{C}_{0} + \dots$$
(2.11)

Es decir, la condición de contorno tipo Robin lineal se introduce como un cambio en el núcleo de integración relacionado con el potencial, y una condición de contorno en términos del flujo (gradiente del potencial). El ensamblaje en la matriz del sistema A y el vector b queda:

$$A_{ik} \leftarrow A_{ik} + h_{\hat{k}}^{ij} - g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{C}_1$$

$$b_i \leftarrow b_i + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{C}_0$$
(2.12)

- c) Rutina RESOL_DP. Se resuelve el sistema de ecuaciones [A] x = b.
- d) Rutina ORDENA. Una vez resuelto el sistema de ecuaciones, el vector de incógnitas \mathbf{x} se lleva a los vectores que guardan los potenciales nodales para la iteración $t \mathbf{u}_t$ y los flujos \mathbf{q}_t .

En los nodos con condición de contorno tipo Robin lineal, del sistema de ecuaciones se obtiene el potencial u_r , y se recurre a la curva de polarización c correspondiente para hallar q_t , que estará situado en otro tramo de la curva si el proceso todavía no ha convergido. Con lo cual, en la siguiente iteración se utilizará el potencial u_k situado en otro tramo, y con otros valores de \bar{C}_0 y \bar{C}_1 .

- e) Rutina CHEQUED. Se chequea si los nodos han cambiado de tramo entre la iteración actual k y la anterior k-1. Si ningún nodo ha cambiado de tramo, ctrl = verdadero.
- f) Rutina CALIN. Se calculan los flujos totalizados para cada grupo de elementos (contorno). Si la diferencia de todos los flujos en cada contorno entre la iteración k y la iteración k-1 es menor que una tolerancia, ctrl = verdadero.

5. Fin mientras.

2.6 Conclusiones

En este capítulo se ha mostrado el procedimiento de resolución del modelo con condiciones de contorno tipo Robin no lineal. Las distintas estrategias iterativas: Newton-Raphson, Punto Fijo y combinado; han sido descritas mediante pseudocódigo y caracterizadas. Además, se ha mostrado cómo se maneja la curva discretizada no lineal a lo largo del proceso, incluyendo el ensamblaje de la condición de contorno linealizada en el MEC. En el siguiente capítulo se describe el modelo lineal mediante el MEC, que es el corazón del proceso iterativo.

Capítulo 3

Modelo lineal mediante el Método de los Elementos de Contorno

3.1 Ecuación integral

De acuerdo con el 2.2, sea un dominio $\Omega \in \mathbb{R}^3$, con frontera $\Gamma = \partial \Omega$ dividida según $\Gamma = \Gamma_u \cup \Gamma_q \cup \Gamma_r$ tal que $\Gamma_u \cap \Gamma_q \cap \Gamma_r = \emptyset$ y con normal exterior n. La formulación diferencial del modelo lineal plantea hallar el campo escalar $u = u(\mathbf{x}) | \mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ que verifique la ecuación de *Laplace* en Ω , las condiciones de contorno tipo *Dirichlet* (esenciales) impuestas en Γ_u , las condiciones de contorno tipo *Neumann* (naturales) impuestas Γ_q , y las condiciones de contorno tipo *Robin* (mixtas) impuestas en Γ_r :

- $\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} = 0 \quad \boldsymbol{\Omega} \tag{3.1}$
 - $u = \bar{u} \quad \Gamma_u \tag{3.2}$
- $\frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q} \quad \Gamma_q \tag{3.3}$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \bar{C}_1 u + \bar{C}_0 \quad \Gamma_r \tag{3.4}$$

Como la ecuación (3.1) se cumple para todo punto $\mathbf{x} \in \Omega$, es posible aplicarle el MRP. Para ello se multiplica (3.1) por una función de ponderación $u^* = u^*(\mathbf{x})$, y se integra sobre todo el dominio Ω , obteniéndose así una ecuación integral equivalente:

$$\int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u} \right) \boldsymbol{u}^* \, \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{3.5}$$

Si se aplica la primera identidad de Green a la integral de dominio de (3.5):

$$\int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla}^2 u \right) u^* \, \mathrm{d}\Omega = \oint_{\Gamma} \left(\boldsymbol{\nabla} u \cdot \mathbf{n} \right) u^* \, \mathrm{d}\Gamma - \int_{\Omega} \left(\boldsymbol{\nabla} u \right) \cdot \left(\boldsymbol{\nabla} u^* \right) \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.6}$$

Si se aplica la primera identidad de Green sobre la integral de dominio del segundo miembro de (3.6):

3 Modelo lineal mediante el Método de los Elementos de Contorno

$$\int_{\Omega} (\boldsymbol{\nabla} u) \cdot (\boldsymbol{\nabla} u^*) \, \mathrm{d}\Omega = \oint_{\Gamma} u \left(\boldsymbol{\nabla} u^* \cdot \mathbf{n} \right) \, \mathrm{d}\Gamma - \int_{\Omega} u \left(\boldsymbol{\nabla}^2 u^* \right) \, \mathrm{d}\Omega \tag{3.7}$$

Con todo, (3.5) queda:

$$\int_{\Omega} u \left(\boldsymbol{\nabla}^2 u^* \right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} \left(\boldsymbol{\nabla} u \cdot \mathbf{n} \right) u^* \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u \left(\boldsymbol{\nabla} u^* \cdot \mathbf{n} \right) \, \mathrm{d}\Gamma \tag{3.8}$$

Y recordando el concepto de derivada direccional:

$$\int_{\Omega} u\left(\boldsymbol{\nabla}^{2} u^{*}\right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial n} u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u \frac{\partial u^{*}}{\partial n} \, \mathrm{d}\Gamma$$
(3.9)

Las derivadas parciales de u y u^* con respecto a dirección normal exterior n representan el flujo de u y u^* a través del contorno Γ . Para la aplicación del MEC resulta conveniente hacer explícito dicho flujo, por lo que es conveniente realizar el siguiente cambio de variables:

$$q = \frac{\partial u}{\partial n}$$

$$q^* = \frac{\partial u^*}{\partial n}$$
(3.10)

A la función potencial u se le suele denominar "variable primaria", por ser la función incógnita de la ecuación en derivadas parciales. Al flujo de u a través del contorno Γ , q, se le suele denominar "variable secundaria" o "variable de flujo". De forma análoga ocurre con u^* y q^* .

Con todo ello, la ecuación previa a la aplicación del MEC para el problema propuesto es:

$$\int_{\Omega} u\left(\boldsymbol{\nabla}^{2} u^{*}\right) \, \mathrm{d}\Omega + \oint_{\Gamma} q u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} u q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma$$
(3.11)

La ecuación (3.11) contiene una integral extendida al dominio Ω e integrales extendidas al contorno Γ . El paso clave a continuación es poder evaluar de alguna manera la integral extendida al dominio, obteniéndose así una ecuación integral extendida únicamente al contorno.

3.2 Solución fundamental

Para que desaparezca la integral extendida al dominio de la ecuación (3.11) se hace uso de una función de ponderación que cumple ciertos requisitos, tal función se denomina solución fundamental. La solución fundamental es la solución de la ecuación diferencial de gobierno del fenómeno cuando el término fuente o carga es una distribución delta de Dirac, considerando un dominio infinito, y por tanto sin condiciones de contorno.

La distribución delta de Dirac δ aplicada en un punto $i \in \Omega$ cuyo vector de posición es $\mathbf{x}_i = (x_1|_i, x_2|_i, x_3|_i)$, siendo $\Omega \equiv \mathbb{R}^3$, verifica que [Bra86]:
$$\int_{\Omega} \delta \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i \right) \, \mathrm{d}\Omega = 1 \tag{3.12}$$

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \,\delta\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}\right) \,\mathrm{d}\Omega = f\left(\mathbf{x}_{i}\right) \tag{3.13}$$

Habitualmente la delta de Dirac se escribe como $\delta (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$, pero en adelante, por simplicidad, se considerará que $\delta_i = \delta (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. Asimismo, debe tenerse en cuenta que ahora la solución fundamental u^* y su flujo q^* son función del vector de posición \mathbf{x} así como del punto de colocación de la delta de Dirac \mathbf{x}_i , por tanto, $u^* = u^* (\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ y $q^* = q^* (\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$.

A continuación se procede a hallar la solución fundamental a través de la técnica basada en integración directa [Ras02]. Primero se halla la solución homogénea, y luego se determinan las constantes que aparecen en el proceso de integración insertando dicha solución homogénea en la ecuación particular y aplicando las propiedades de la distribución delta de Dirac.

Para el problema presentado en (3.1) la solución fundamental debe verificar:

$$\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{u}^* + \delta_i = 0 \quad \Omega \equiv \mathbb{R}^3 \tag{3.14}$$

Para hallar la solución particular de (3.14) debe resolverse primero el problema homogéneo:

$$\boldsymbol{\nabla}^2 u^* = 0 \quad \Omega \equiv \mathbb{R}^3 \tag{3.15}$$

Dada la naturaleza del dominio y la simetría del problema, es conveniente expresar (3.15) en coordenadas esféricas con el origen de coordenadas en el punto *i*, y con solución únicamente función de la coordenada radial $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u^*}{\partial r}\right) = 0 \tag{3.16}$$

Si se integra (3.16):

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial u^*}{\partial r}\right) = 0 \Rightarrow \left(r^2\frac{\partial u^*}{\partial r}\right) = c_1 \Rightarrow \frac{\partial u^*}{\partial r} = \frac{c_1}{r^2} \Rightarrow u^* = c_2 - \frac{c_1}{r}$$
(3.17)

Si se integra (3.14) sobre Ω es posible aplicar la propiedad de la delta de Dirac (3.12):

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}^2 u^* \,\mathrm{d}\Omega + \int_{\Omega} \delta_i \,\mathrm{d}\Omega = 0 \Rightarrow \int_{\Omega} \boldsymbol{\nabla}^2 u^* \,\mathrm{d}\Omega = -1 \tag{3.18}$$

Dadas las condiciones de simetría, puede acotarse el dominio haciendo $\Omega = \Omega_{\epsilon}$ una esfera de radio ϵ . Así es posible aplicar el teorema de la divergencia a la integral de dominio:

$$\int_{\Omega_{\epsilon}} \boldsymbol{\nabla}^2 u^* \, \mathrm{d}\Omega = \oint_{\Gamma^{\epsilon}} \boldsymbol{\nabla} u^* \cdot \mathbf{n} \, \mathrm{d}\Gamma = -1 \tag{3.19}$$

3 Modelo lineal mediante el Método de los Elementos de Contorno

La solución fundamental sólo depende de r, y además la dirección r coincide con la dirección normal n de la superficie de la esfera, con lo cual:

$$\oint_{\Gamma^{\epsilon}} \nabla u^* \cdot \mathbf{n} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma^{\epsilon}} \frac{\partial u^*}{\partial r} \, \mathrm{d}\Gamma = -1 \tag{3.20}$$

Si se tiene en cuenta que $d\Gamma = r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi$:

$$\oint_{\Gamma^{\epsilon}} \frac{\partial u^*}{\partial r} \,\mathrm{d}\Gamma = \int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \frac{\partial u^*}{\partial r} r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi = -1 \tag{3.21}$$

Sustituyendo (3.17) en (3.21) e integrando:

$$\int_{0}^{2\pi} \int_{0}^{\pi} \frac{c_1}{r^2} r^2 \sin \theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi = c_1 4\pi = -1 \tag{3.22}$$

La solución fundamental queda:

$$u^* = c_2 + \frac{1}{4\pi r} = c_2 + \frac{1}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}$$
(3.23)

La solución fundamental (3.23) verifica (3.14) $\forall c_2 \in \mathbb{R}$. Sin embargo, conviene que $u^* \to 0$ cuando $r \to \infty$, de manera que u^* sea local a *i*, para lo cual debe hacerse $c_2 = 0$. Por tanto, la solución fundamental que permite resolver (3.11) es:

$$u^* = \frac{1}{4\pi \left| \mathbf{x} - \mathbf{x}_i \right|} \tag{3.24}$$

Una vez encontrada la solución fundamental, puede determinarse la solución fundamental en términos de flujo, es decir, q^* . A partir de (3.10) y (3.24) puede obtenerse que:

$$q^* = \frac{\partial u^*}{\partial n} = -\frac{1}{4\pi r^2} \frac{\partial r}{\partial n} = -\frac{1}{4\pi r^2} \nabla r \cdot \mathbf{n}$$
(3.25)

Por lo tanto, q^* queda:

$$q^* = -\frac{1}{4\pi |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|^2} \nabla |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i| \cdot \mathbf{n}$$
(3.26)

Determinación de ∇r El gradiente de $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$ puede expresarse como:

$$\nabla |\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}| = \sum_{j=1}^{j=3} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_{j}} \sqrt{\sum_{k=1}^{k=3} (x_{k} - x_{k}|_{i})^{2}} \right) \mathbf{e}_{\mathbf{j}} \right] =$$

$$= \sum_{j=1}^{j=3} \left[\left(\frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{k=3} (x_{k} - x_{k}|_{i})^{2} \right)^{-\frac{1}{2}} 2 \left(x_{j} - x_{j}|_{i} \right) \right) \mathbf{e}_{\mathbf{j}} \right] =$$

$$= \sum_{j=1}^{j=3} \left[\frac{x_{j} - x_{j}|_{i}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}|} \mathbf{e}_{\mathbf{j}} \right] = \frac{\sum_{j=1}^{j=3} \left[(x_{j} - x_{j}|_{i}) \mathbf{e}_{\mathbf{j}} \right]}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}|} = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{i}|}$$
(3.27)

Determinación de n Si la superficie sobre la que se va a calcular el flujo está descrita paramétricamente mediante las coordenadas curvilíneas ξ_1 y ξ_2 , entonces las componentes del vector de posición x son función de ξ_1 y ξ_2 , $x_d = x_d (\xi_1, \xi_2)$, d = 1, 2, 3. Las derivadas parciales de x con respecto a las coordenadas curvilíneas definen vectores tangentes a la superficie, y no colineales ni nulos si la transformación es biyectiva. Su producto vectorial es un vector con dirección normal a la superficie, sentido según la regla de la mano derecha, y módulo igual a la relación de áreas en ambos sistemas de coordenadas a nivel puntual (Jacobiano):

$$\mathbf{N} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_1} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_2} \tag{3.28}$$

Normalizando \mathbf{N} se obtiene el vector normal unitario \mathbf{n} :

$$\mathbf{n} = \frac{\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_1} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_2}}{\left|\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_1} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi_2}\right|}$$
(3.29)

Carácter de $\frac{\partial r}{\partial n}$ Como se ha mostrado:

$$\frac{\partial r}{\partial n} = \boldsymbol{\nabla} r \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\nabla} |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i| \cdot \mathbf{n} = \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}_i}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \cdot \mathbf{n}$$

Tanto $\nabla |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$ como n son vectores unitarios, por tanto el producto escalar depende únicamente del coseno del ángulo θ entre ambos. Si se considera un entorno alrededor de \mathbf{x}_i sobre el contorno Γ , cuando $\mathbf{x} \to \mathbf{x}_i$, n tiende a ser perpendicular a ∇r .

Si se considera en dicho entorno una aproximación lineal mediante un desarrollo en serie de Taylor de $\cos \theta$, y de θ en función de r, se llega a que $\frac{\partial r}{\partial n}$ es proporcional a r. Por tanto, $\frac{\partial r}{\partial n}$ es de orden $\mathcal{O}(r)$ en el entorno de \mathbf{x}_i .

3.3 Ecuaciones integrales en el contorno

Como la solución fundamental (3.24) verifica (3.14), la integral de dominio presente en (3.11) puede evaluarse aplicando la propiedad de la delta de Dirac (3.13):

$$\int_{\Omega} u \left(\boldsymbol{\nabla}^2 u^* \right) \, \mathrm{d}\Omega = \int_{\Omega} u \cdot (-\delta_i) \, \mathrm{d}\Omega = -u_i \tag{3.30}$$

Sustituyendo (3.30) en (3.11) queda una ecuación integral únicamente extendida al contorno:

$$u_i + \oint_{\Gamma} uq^* \,\mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} qu^* \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \mathbb{R}^3$$
(3.31)

Si se deriva la ecuación (3.31) respecto a cada una de las direcciones coordenadas del punto de colocación $\mathbf{x}_i = (x_1|_i, x_2|_i, x_3|_i)$, se obtiene una expresión del flujo en cada dirección en el punto de colocación i, $\frac{\partial u_i}{\partial x_d|_i} = q_{x_d}|_i$, d = 1, 2, 3. Recordando que $u = u(\mathbf{x})$, $q = q(\mathbf{x})$, $u^* = u^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$ y $q^* = q^*(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$:

$$q_{x_d}|_i + \oint_{\Gamma} u \frac{\partial q^*}{\partial x_d|_i} d\Gamma = \oint_{\Gamma} q \frac{\partial u^*}{\partial x_d|_i} d\Gamma \quad d = 1, 2, 3, \forall i \in \mathbb{R}^3$$
(3.32)

Que puesto en forma vectorial:

$$\mathbf{q}_{i} + \oint_{\Gamma} u \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} \,\mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} q \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \mathbb{R}^{3}$$
(3.33)

Donde el gradiente $\nabla_{\mathbf{x}_i} = \frac{\partial}{\partial x_1|_i} \mathbf{e}_1 + \frac{\partial}{\partial x_2|_i} \mathbf{e}_2 + \frac{\partial}{\partial x_3|_i} \mathbf{e}_3$ denota que se calcula derivando respecto al punto de colocación. A continuación se va a determinar $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ y $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$.

Para hallar $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ debe aplicarse el gradiente respecto a \mathbf{x}_i sobre (3.24):

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_i} u^* = -\frac{1}{4\pi r^2} \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_i} r = \frac{1}{4\pi r^2} \boldsymbol{\nabla} r \tag{3.34}$$

Donde se ha utilizado que $\nabla_{\mathbf{x}_i} r = -\nabla r$, lo cual es fácilmente demostrable realizando un proceso análogo al hecho en (3.27).

Para hallar $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$ debe aplicarse el gradiente respecto a \mathbf{x}_i sobre (3.26):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}}q^{*} &= -\frac{1}{4\pi} \left[-2\frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}}r}{r^{3}} \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} \left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}|}\cdot\mathbf{n}\right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} \left(\frac{1}{r} \left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}\right)\cdot\mathbf{n}\right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}} \left(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} \left(\frac{1}{r}\right) \left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}\right)\cdot\mathbf{n} + \frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} \left(\left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}\right)\cdot\mathbf{n}\right)\right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}} \left(-\frac{\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}}r}{r^{2}} \left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}\right)\cdot\mathbf{n} - \frac{\mathbf{n}}{r} \right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}} \left(-\frac{\mathbf{\nabla}\mathbf{x}_{i}r}{r^{2}} \left(\mathbf{x}-\mathbf{x}_{i}\right)\cdot\mathbf{n} - \frac{\mathbf{n}}{r} \right) \right] = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \left[2\frac{1}{r^{3}}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) + \frac{1}{r^{2}} \left(\frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) - \frac{\mathbf{n}}{r} \right) \right] = \frac{1}{4\pi r^{3}} \left[\mathbf{n} - 3\boldsymbol{\nabla}r \left(\boldsymbol{\nabla}r\cdot\mathbf{n}\right) \right] \end{aligned}$$
(3.35)

Por tanto:

$$\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_i} u^* = \frac{1}{4\pi r^2} \boldsymbol{\nabla} r \tag{3.36}$$

$$\nabla_{\mathbf{x}_i} q^* = \frac{1}{4\pi r^3} \left[\mathbf{n} - 3\nabla r \left(\nabla r \cdot \mathbf{n} \right) \right]$$
(3.37)

En donde todos los términos son conocidos: $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$, ∇r se escribió en (3.27) y n en (3.29).

Una vez hallados $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ y $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$ puede pasarse a analizar las ecuaciones integrales (3.31) y (3.33).

En principio, las dos ecuaciones integrales se pueden plantear $\forall i \in \mathbb{R}^3$ porque no hay restricciones sobre el punto de colocación de la carga. Teniendo presente la solución fundamental (3.24) y su flujo (3.26), el gradiente respecto al punto de colocación de la solución fundamental (3.36) y su flujo (3.37), y que u y q son no singulares, pueden diferenciarse dos situaciones al plantearse ambas ecuaciones integrales $\forall i \in \mathbb{R}^3$:

- $\forall i \in \Gamma$ los integrandos tienen una singularidad en el punto *i*.
- $\forall i \notin \Gamma$ los integrandos no tienen singularidades.

El eje fundamental de la aplicación del MEC consiste en evaluar correctamente estas integrales, de manera que es muy importante conocer su naturaleza, comportamiento y métodos para calcularlas.

3.3.1 Carácter de las integrales

En la formulación de problemas mediante el MEC aparecen singularidades en los integrandos, lo cual requiere entender la integración en sentidos diferentes al Riemanniano usual. En el MEC pueden aparecer cinco tipos de integrales [SST01, Muk00, KD99, Gao10]:

- Regular (no singular). Integrable en el sentido de Riemann (integral propia).
- Débilmente singular. Integrable en el sentido de Riemann (integral impropia).
- Fuertemente singular. Integrable en el sentido del Valor Principal de Cauchy.
- Hipersingular. Integrable en el sentido de la Parte Finita de Hadamard.
- **Supersingular.** Integrable en el sentido de la Parte Finita de Hadamard.

Si existen puntos singulares i en un integrando, éste resulta no acotado, pero ello no implica que dicha integral no exista. La existencia depende de la naturaleza del entorno del punto singular, es decir, de cómo el integrando se acerca a la singularidad, y del sentido en el que se entiende la integración.

El sentido de integración de Riemann no exige que el acercamiento a la singularidad sea uniforme en cualquier dirección. Hay integrales singulares que existen así evaluadas (integrales impropias), por ejemplo [Ant10, 2.5.1]:

$$\int_{a}^{b} \ln |x - s| \, dx, a < s < b$$
$$\int_{a}^{b} |x - s|^{-n} \, dx, a < s < b, 0 < n < 1$$

Sin embargo, hay otras integrales singulares que no existen así entendidas.

El sentido de integración según el VPC¹ sí exige que el acercamiento a la singularidad sea uniforme en cualquier dirección. Así entendida la integración, además de las integrales impropias, pueden ser integradas otras, las denominadas fuertemente singulares. Por ejemplo, en [Ant10, 2.5.2] se demuestra que:

$$\int_a^b (x-s)^{-1} \, \mathrm{d}x, a < s < b$$

existe en el sentido del VPC, pero no en el sentido de Riemann.

En general, las integrales que aparecen en el MEC tienen integrandos del tipo $f(\mathbf{x}) r^{-n}$, donde recuérdese que $r = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$, por lo que interesa saber cómo se comporta este tipo de integrando en particular. Sea m = 1, 2, 3 la dimensión del espacio de integración: línea, superficie o volumen, respectivamente; y sea el integrando de orden $\mathcal{O}(r^{-n}), n \in \mathbb{R}^+$, entonces el tipo de integral que se tiene sigue la **Tabla** 3.1.

La existencia de estas integrales en los sentidos presentados al principio de este apartado dependen de la función $f(\mathbf{x})$ que acompaña al término singular r^{-n} . La mayoría de las integrales regulares y débilmente singulares existen en el sentido de Riemann independientemente de $f(\mathbf{x})$. Sin embargo, la existencia de las integrales fuertemente singulares, hipersingulares y supersingulares depende de forma crítica de $f(\mathbf{x})$. Las condiciones de existencia para las integrales fuertemente singulares se muestran, por ejemplo, en [Gao05]. Las integrales que emanan del MEC generalmente cumplen las condiciones de existencia.

¹Valor Principal de Cauchy

Criterio	Tipo de integral			
$n \leq 0$	regular			
0 < n < m	débilmente singular			
n = m	fuertemente singular			
n = m + 1	hipersingular			
n > m+1	supersingular			

Tabla 3.1: Tipos de integrales $\mathcal{O}(r^{-n})$, [Muk00, KD99, Gao10]

3.3.2 Formulaciones del Método de los Elementos de Contorno

Una vez vistos los conceptos de integración característicos del MEC, se está en disposición de explicar cuál es el procedimiento para hallar u y q en el contorno. Pueden plantearse dos opciones:

- Si se plantea la colocación de i en el contorno Γ utilizando la ecuación de u_i, es decir (3.31), se tiene la formulación singular del MEC, también llamada formulación directa.
- Si se plantea la colocación de i en el contorno Γ utilizando la ecuación de q_i multiplicada por la normal del contorno n, es decir, (3.33) multiplicada por n, se tiene la formulación hipersingular del MEC.

Una vez se hallan u y q a través de cualquiera de las formulaciones, incluso pudiéndose combinar, se determina la solución en puntos interiores del dominio utilizando ambas ecuaciones planteadas $\forall i \in \Omega$. En este trabajo se va a utilizar exclusivamente la formulación directa.

3.3.3 Integración $\forall i \in \Gamma$ para la formulación singular (directa)

La formulación singular, o directa, requiere plantear la ecuación integral (3.31) en el contorno. El integrando de la integral del miembro derecho se compone de q y u^* (3.24), mientras que el integrando de la integral del miembro izquierdo se compone de u y q^* (3.26). Tanto u como q son las incógnitas del problema, y tienen un carácter regular. Sin embargo, u^* y q^* tienen naturaleza singular, con lo cual, de acuerdo a la **Tabla** 3.1, se tienen los siguientes tipos de integrales:

$$\oint_{\Gamma} q u^* \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} f(\mathbf{x}) \, r^{-1} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} \mathcal{O}\left(r^{-1}\right) \, \mathrm{d}\Gamma \Rightarrow \mathsf{d}\mathsf{\acute{e}\mathsf{b}\mathsf{i}\mathsf{l}\mathsf{m}\mathsf{e}\mathsf{n}\mathsf{t}\mathsf{e}\mathsf{singular}}$$

$$\oint_{\Gamma} u q^* \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} g\left(\mathbf{x}\right) r^{-2} \mathcal{O}\left(r\right) \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} \mathcal{O}\left(r^{-1}\right) \, \mathrm{d}\Gamma \Rightarrow \mathsf{d}\mathsf{\acute{e}\mathsf{b}\mathsf{i}\mathsf{l}\mathsf{m}\mathsf{e}\mathsf{n}\mathsf{t}\mathsf{e}\mathsf{singular}}$$
(3.38)

Para tratar dichas integrales es necesario considerar primero que el espacio de integración Γ se parte de la siguiente manera:

$$\Gamma = \lim_{\epsilon \to 0} \left[(\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}) + \Gamma_i^{\epsilon} \right]$$
(3.39)

Donde Γ_i^{ϵ} denota una superficie esférica alrededor de i con radio ϵ que bordea la singularidad en i por el exterior. Ver **Figura** 3.1.



Figura 3.1: Extracción e la singularidad, [BD92]

Utilizando dicha partición del espacio de integración, la integral $\oint_{\Gamma} q u^* \, \mathrm{d}\Gamma$ puede escribirse como:

$$\oint_{\Gamma} qu^* d\Gamma = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_{\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}} qu^* d\Gamma + \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} qu^* d\Gamma \right] = \\
= \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}} qu^* d\Gamma + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} qu^* d\Gamma = \int_{\Gamma} qu^* d\Gamma + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} qu^* d\Gamma \\
\xrightarrow[\text{Riemann (impropia)}]{} \xrightarrow[\text{Singularidad}]{} \xrightarrow[\text{Singularidad}]{} (3.40)$$

El límite de la primera integral representa una integral impropia, que es integrable en el habitual sentido de Riemann. Se puede comprobar que el límite de la segunda integral, que representa el aislamiento de la singularidad, es nulo:

$$\lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_{\Gamma_{i}^{\epsilon}} q u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \right] = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_{\Gamma_{i}^{\epsilon}} q \frac{1}{4\pi\epsilon} \, \mathrm{d}\Gamma \right] = \lim_{\epsilon \to 0} \left[q \frac{1}{4\pi\epsilon} \int_{\Gamma_{i}^{\epsilon}} \mathrm{d}\Gamma \right] = \\
= \lim_{\epsilon \to 0} \left[q \frac{1}{4\pi\epsilon} \left(\Omega_{i}^{\mathrm{ext}} \epsilon^{2} \right) \right] = 0$$
(3.41)

En donde se ha tenido en cuenta que: ϵ es constante en Γ_i^{ϵ} por la propia definición de la superficie esférica, q es constante en Γ_i^{ϵ} , y $\int_{\Gamma_i^{\epsilon}} d\Gamma$, que es la superficie Γ_i^{ϵ} , es igual al ángulo sólido Ω_i^{ext} subtendido por la superficie Γ_i^{ϵ} multiplicado por ϵ^2 .

De similar forma, la integral $\oint_{\Gamma} uq^* \, \mathrm{d}\Gamma$ se puede escribir como:

$$\oint_{\Gamma} uq^* d\Gamma = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_{\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma + \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma \right] = \\
= \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma = \int_{\Gamma} uq^* d\Gamma + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma \\
\underbrace{\prod_{i=1}^{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma - \Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma}_{\text{Riemann (impropia)}} \underbrace{\prod_{i=1}^{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma}_{\text{Singularidad}} = \int_{\Gamma} uq^* d\Gamma + \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* d\Gamma$$
(3.42)

En este caso, el término correspondiente a la singularidad no es nulo:

$$\lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_{\Gamma_i^{\epsilon}} uq^* \, \mathrm{d}\Gamma \right] = \lim_{\epsilon \to 0} \left[-\int_{\Gamma_i^{\epsilon}} u \frac{1}{4\pi\epsilon^2} \, \mathrm{d}\Gamma \right] = \lim_{\epsilon \to 0} \left[-u \frac{1}{4\pi\epsilon^2} \int_{\Gamma_i^{\epsilon}} \mathrm{d}\Gamma \right] = \\
= \lim_{\epsilon \to 0} \left[-u \frac{1}{4\pi\epsilon^2} \left(\Omega_i^{\text{ext}} \epsilon^2 \right) \right] = -\frac{\Omega_i^{\text{ext}}}{4\pi} u_i$$
(3.43)

En donde, además de las consideraciones hechas en la anterior integral, se ha tenido en cuenta que: $\frac{\partial r}{\partial n} = 1$, u es constante en Γ_i^{ϵ} , y si $\epsilon \to 0 \Rightarrow u \to u_i$.

Por tanto, las integrales de contorno de (3.31) quedan expresadas como:

$$\oint_{\Gamma} qu^* d\Gamma = \int_{\Gamma} qu^* d\Gamma$$

$$\oint_{\Gamma} uq^* d\Gamma = \int_{\Gamma} uq^* d\Gamma - \frac{\Omega_i^{\text{ext}}}{4\pi} u_i$$
(3.44)

La ecuación integral (3.31) adecuadamente tratada para cuando $i \in \Gamma$ queda:

$$\left(1 - \frac{\Omega_i^{\text{ext}}}{4\pi}\right) u_i + \int_{\Gamma} uq^* \,\mathrm{d}\Gamma = \int_{\Gamma} qu^* \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.45)

El factor que multiplica a u_i se denomina término libre c_i :

$$c_i = 1 - \frac{\Omega_i^{\text{ext}}}{4\pi} = \frac{4\pi - \Omega_i^{\text{ext}}}{4\pi} = \frac{\Omega_i^{\text{int}}}{4\pi}$$
 (3.46)

El término libre es un factor que depende de cómo es el contorno Γ en *i*:

 Si se trata de un contorno suave, al menos de clase C¹, entonces la superficie esférica Γ^ε cuando ε → 0 es una semiesfera. El término libre en ese caso es:

$$c_i = \frac{2\pi}{4\pi} = \frac{1}{2}$$

• Si se trata de un contorno anguloso, con continuidad pero no derivable, es decir, de clase C^0 , se debe determinar o bien el ángulo sólido exterior Ω_i^{ext} , o bien su complementario, el ángulo sólido interior Ω_i^{int} , como se vio en (3.46).

Teniendo en cuenta el significado del término libre, se puede escribir (3.45) en la forma general a la que se hará referencia en adelante:

$$c_{i}u_{i} + \int_{\Gamma} uq^{*} \,\mathrm{d}\Gamma = \int_{\Gamma} qu^{*} \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.47)

3.3.4 Integración $\forall i \in \Omega$

Las integrales de (3.31) y (3.33) $\forall i \in \Omega$ son regulares, ya que *i* está fuera del espacio de integración, y por tanto son integrables en el sentido de Riemann habitual:

$$u_{i} + \oint_{\Gamma} uq^{*} d\Gamma = \oint_{\Gamma} qu^{*} d\Gamma \quad \forall i \in \Omega$$
(3.48)

$$\mathbf{q}_{i} + \oint_{\Gamma} u \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \oint_{\Gamma} q \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \Omega$$
(3.49)

Nótese que las integrales son cerradas en tanto en cuanto no existen singularidades en las integrales, lo cual no ocurre cuando se coloca i en el contorno, ya que el punto singular es extraído, surgiendo de ello el término libre.

3.4 Discretización

El MEC trata de la discretización de las ecuaciones integrales (3.47), (3.48) y (3.49). Las incógnitas en dichas ecuaciones son las funciones u y q, y a menos que se puedan hallar analíticamente dichas funciones, la única alternativa es realizar una partición del dominio y una aproximación de las funciones incógnita por funciones analíticas definidas a trozos.

Las funciones analíticas definidas a trozos deben tener un número finito de grados de libertad. Así, se pasa de un problema continuo de dimensión infinita, es decir, con infinitos grados de libertad, a otro discreto aproximado de dimensión finita.

Al plantear la ecuación integral (3.47) para cado grado de libertad, es decir, colocando i en cada grado de libertad, se consigue un sistema de ecuaciones de igual número de incógnitas que de ecuaciones. Al resolver dicho sistema se obtiene la solución de u y q en el contorno. A partir de esta solución se pueden aplicar las ecuaciones integrales (3.48) y (3.49) para cualquier punto interior del dominio, colocando en él la carga i, así se obtienen u_i y q_i , respectivamente.

Con todo, la solución aproximada del problema (3.1) mediante el MEC se puede realizar mediante estas tres ecuaciones integrales, una para puntos de colocación en el contorno y dos para puntos de colocación en el dominio (puntos internos):

$$c_{i}u_{i} + \int_{\Gamma} uq^{*} d\Gamma = \int_{\Gamma} qu^{*} d\Gamma \qquad \forall i \in \Gamma \qquad (3.50)$$
$$u_{i} + \oint_{\Gamma} uq^{*} d\Gamma = \oint_{\Gamma} qu^{*} d\Gamma \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.51)$$
$$\mathbf{q}_{i} + \oint_{\Gamma} u \nabla_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} d\Gamma = \oint_{\Gamma} q \nabla_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} d\Gamma \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.52)$$

3.4.1 Partición en elementos

En primer lugar, el proceso de discretización consiste en particionar el espacio de integración Γ en N^e elementos tal que:

$$\Gamma = \bigcup_{j=1}^{j=N^e} \Gamma_j \mid \Gamma_i \cap \Gamma_j = \emptyset, \forall i \neq j$$
(3.53)

Así, la ecuación integral (3.50) para la colocación de *i* en el contorno queda:

$$c_{i}u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} uq^{*} \,\mathrm{d}\Gamma = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} qu^{*} \,\mathrm{d}\Gamma \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.54)

Para la colocación de i en el interior del dominio, las ecuaciones integrales (3.51) y (3.52) quedan:

$$u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} uq^{*} d\Gamma = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} qu^{*} d\Gamma \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.55)$$

$$\mathbf{q}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} u \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} \, \mathrm{d}\Gamma = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}} q \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} \, \mathrm{d}\Gamma \qquad \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.56)$$

3.4.2 Interpolación en los elementos

Como ya se comentó, las funciones $u \neq q$ son las incógnitas del problema, mientras que la solución fundamental u^* (3.24) y su flujo q^* (3.26), y las derivadas de éstas respecto a las direcciones coordenadas en el punto de colocación $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ (3.36) y $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$ (3.37), son conocidas. El vector de posición \mathbf{x} determina puntos del dominio, pero carece por ahora de expresión analítica, a lo sumo se conoce en una serie de puntos. El vector de posición del punto de colocación de la carga \mathbf{x}_i se supone dado.

Así todo, el segundo paso en la discretización consiste en aproximar las funciones incógnita u y q y la geometría x en cada elemento Γ_j mediante una función con un número finito de

3 Modelo lineal mediante el Método de los Elementos de Contorno

grados de libertad. La aproximación de u y q se denomina aproximación funcional, mientras que la aproximación de x se denomina aproximación geométrica.

Del infinito conjunto de espacios aproximadores se va a elegir el espacio polinomial a trozos de Lagrange, tanto para las funciones incógnita como para la geometría. En cada elemento Γ_j se tendrá un soporte de interpolación constituido por N_j^n nodos que, en general, pueden ser diferentes para la aproximación funcional y para aproximación geométrica.

En este trabajo se va a utilizar el mismo número y localización de nodos para la aproximación funcional y para la aproximación geométrica. A los elementos así constituidos se les denomina elementos isoparamétricos, y son los habitualmente utilizados.

Un polinomio interpolador de Lagrange $\tilde{f}(\mathbf{x})$ aproxima a $f(\mathbf{x})$ en el elemento Γ_j mediante un soporte de N_j^n nodos, donde cada nodo k se localiza en el punto \mathbf{x}_k , y se construye a partir de la combinación lineal de la bases de interpolación $\phi_k(\mathbf{x})$, usualmente denominadas funciones de forma, y los valores de la función a interpolar en los nodos soporte $\tilde{f}(\mathbf{x}_k)$:

$$f(\mathbf{x}) \simeq \tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{k=N_j^n} \phi_k(\mathbf{x}) \cdot \tilde{f}(\mathbf{x}_k) \mid \phi_i(\mathbf{x}_j) = \begin{cases} 1 & \forall i = j \\ 0 & \forall i \neq j \end{cases}$$
(3.57)

Nótese que los valores de la función en los nodos soporte $\tilde{f}(\mathbf{x}_k)$ en el caso de la aproximación funcional son las incógnitas del problema, mientras que en el caso de la aproximación geométrica son datos dados en la definición del problema.

En la expresión (3.57) se hace uso de la tilde "~" encima de una variable para denotar que se trata de un valor aproximado de la misma, en adelante el uso de la tilde será obviado. Además, se considerará que $f(\mathbf{x}) = f$, que $\phi_k(\mathbf{x}) = \phi_k$, que $f(\mathbf{x}_k) = f_k$, y que la sumatoria en (3.57) puede expresarse tal que:

$$f = \sum_{k=1}^{k=N_j^n} \phi_k \cdot f_k = \boldsymbol{\phi}^T \mathbf{f}$$
(3.58)

Donde ϕ es el vector de funciones de forma y **f** es el vector de valores de la función en los nodos soporte, cuyas dimensiones son $N_i^n \times 1$.

Con todo ello, las aproximaciones de u, q y x en un elemento Γ_i quedan:

$$u = \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{u}^{j}$$

$$q = \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{q}^{j}$$

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{x}_{1}^{j} \mathbf{e}_{1} + \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{x}_{2}^{j} \mathbf{e}_{2} + \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{x}_{3}^{j} \mathbf{e}_{3} = \left(\boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{x}^{j}\right)^{T}$$
(3.59)

Donde \mathbf{x}^j es una matriz de dimensiones $N_i^n \times 3$.

El particionado del espacio de integración en elementos Γ_j , y la interpolación de u, q y x en cada elemento puede ser, en principio, arbitrario. Además, en (3.57) las funciones de forma se expresaron en función del vector de posición x, de manera que cada función de forma tendría una expresión diferente y específica para cada elemento. Todo ello obstaculiza la sistematización y programación del método.

Para solventar esto se establece un grupo limitado de tipos de elementos (elementos de referencia), cada uno de los cuales tiene fijados el número, localización y numeración de los nodos, así como un espacio de referencia. Existirá un mapeo de la numeración local con la numeración global y viceversa al definir la malla de la discretización. Con todo, las funciones de forma quedan expresadas en dicho espacio de referencia y resultan comunes a la interpolación de cualquier elemento del mismo tipo. A continuación se describen los elementos de referencia considerados:

Triángulo de 6 nodos Se trata de un elemento triangular cuadrático definido en el espacio de referencia $(\xi_1, \xi_2) \mid 0 \leq \xi_1 \leq 1, 0 \leq \xi_2 \leq 1$. Tiene $N_{T6}^n = 6$ nodos localizados en los vértices (nodos 1, 2, 3) y centros de arista (nodos 4, 5, 6). Ver **Tabla** 3.2.

Cuadrilátero de 9 nodos Se trata de un elemento cuadrilátero cuadrático definido en el espacio de referencia $(\xi_1, \xi_2) \mid -1 \leq \xi_1 \leq 1, -1 \leq \xi_2 \leq 1$. Tiene $N_{C9}^n = 9$ nodos localizados en los vértices (nodos 1, 3, 5, 7), centros de arista (nodos 2, 4, 6, 8) y en el interior (nodo 9). Ver **Tabla** 3.3.

Si el vector de posición en el espacio de referencia es ξ , y en el espacio físico (o real) es x, la transformación $\xi \to x$ resulta ser:

$$\mathbf{x}\left(\boldsymbol{\xi}\right) = \left(\boldsymbol{\phi}^{T}\left(\boldsymbol{\xi}\right)\mathbf{x}^{j}\right)^{T}$$
(3.60)

Teniendo en cuenta lo comentado, la interpolación de las funciones $u \neq q$ quedan ahora:

$$u(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\phi}^{T}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{u}^{j}$$

$$q(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{\phi}^{T}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{q}^{j}$$
(3.61)

Además, al sustituir $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})$ en la solución fundamental u^* (3.24), su flujo q^* (3.26), y las derivadas de éstas respecto a los puntos de colocación $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ (3.36) y $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$ (3.37) quedan todos en función de $\boldsymbol{\xi}$.

Como los integrandos de las integrales de (3.54), (3.55) y (3.56) están ahora expresados en función de $\boldsymbol{\xi}$, es necesario transformar el elemento de área en el espacio físico $d\Gamma$ en un elemento de área en el espacio de referencia $d\xi_1 d\xi_2$. Para ello se hace uso del Jacobiano J de la transformación de un elemento de área en un espacio 3D a un elemento de área en un espacio 2D (ver página 25):

$$d\Gamma = J(\boldsymbol{\xi}) \ d\xi_1 \ d\xi_2 = \left| \frac{\partial \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_1} \times \frac{\partial \mathbf{x}(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_2} \right| \ d\xi_1 \ d\xi_2 \tag{3.62}$$

Donde el Jacobiano se calcula haciendo uso de la interpolación geométrica (3.60). Además, el espacio de integración pasa de ser Γ_j a ser $\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}$, que es similar para todos los elementos del mismo tipo.

Teniendo en cuenta (3.62), las ecuaciones integrales (3.54), (3.55) y (3.56), quedan:



Tabla 3.2: Triángulo de 6 nodos

Representación gráfica			Nodo k	ξ_1	ξ_2	Función de forma ϕ_k	
	٤	52		1	-1.0	-1.0	$\frac{1}{4}\xi_1 \left(\xi_1 - 1\right)\xi_2 \left(\xi_2 - 1\right)$
	4	F		3	1.0	-1.0	$\frac{1}{4}\xi_1 \left(\xi_1 + 1\right)\xi_2 \left(\xi_2 - 1\right)$
	7	6	5	5	1.0	1.0	$\frac{1}{4}\xi_1(\xi_1+1)\xi_2(\xi_2+1)$
	T T	I	I	7	-1.0	1.0	$\frac{1}{4}\xi_1 \left(\xi_1 - 1\right)\xi_2 \left(\xi_2 + 1\right)$
	8	9	4	2	0.0	-1.0	$\frac{1}{2}\left(1-\xi_{1}^{2}\right)\xi_{2}\left(\xi_{2}-1\right)$
	• •	¢ (ξ_1	4	1.0	0.0	$\frac{1}{2}\xi_1(\xi_1+1)(1-\xi_2^2)$
				6	0.0	1.0	$\frac{1}{2}\left(1-\xi_{1}^{2}\right)\xi_{2}\left(\xi_{2}+1\right)$
	1	2	3	8	-1.0	0.0	$\frac{1}{2}\xi_1(\xi_1-1)(1-\xi_2^2)$
		Ĭ		9	0.0	0.0	$\left(1-\xi_1^2\right)\left(1-\xi_2^2\right)$

Tabla 3.3: Cuadrilátero de 9 nodos

$$c_i u_i + \sum_{j=1}^{j=N^e} \int_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} uq^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 = \sum_{j=1}^{j=N^e} \int_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} qu^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 \qquad \forall i \in \Gamma \qquad (3.63)$$

$$u_i + \sum_{j=1}^{j=N^e} \int\limits_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} uq^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 = \sum_{j=1}^{j=N^e} \int\limits_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} qu^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.64)$$

$$\mathbf{q}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} u \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} q \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.65)$$

Si se sustituye (3.61) en (3.63), (3.64) y (3.65), y se obvia que $\phi=\phi\left(\pmb{\xi}
ight)$:

$$c_{i}u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{u}^{j} q^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{q}^{j} u^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} \qquad \quad \forall i \in \Gamma \quad (3.66)$$

$$u_i + \sum_{j=1}^{j=N^e} \int\limits_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^T \mathbf{u}^j q^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 = \sum_{j=1}^{j=N^e} \int\limits_{\Gamma_j^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^T \mathbf{q}^j u^* J \,\mathrm{d}\xi_1 \,\mathrm{d}\xi_2 \qquad \forall i \in \Omega \quad (3.67)$$

$$\mathbf{q}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{u}^{j} \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} \mathbf{q}^{j} \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.68)$$

Dado que los vectores \mathbf{u}^j y \mathbf{q}^j son constantes, se pueden extraer de las integrales de la forma siguiente:

$$c_{i}u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} q^{*} J \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \boldsymbol{\phi}^{T} u^{*} J \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{q}^{j} \qquad \forall i \in \Gamma \quad (3.69)$$

$$u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\xi}} \phi^{T} q^{*} J \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\xi}} \phi^{T} u^{*} J \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{q}^{j} \qquad \forall i \in \Omega \quad (3.70)$$

$$r_{i} + \sum_{j=N^{e}}^{N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}} (\nabla_{\tau} \cdot \mathbf{x}^{*}) \,\mathrm{d}^{T} \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}} (\nabla_{\tau} \cdot \mathbf{x}^{*}) \,\mathrm{d}^{T} \,\mathrm{d}\xi_{1} \,\mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{q}^{j} \qquad \forall i \in \Omega \quad (3.71)$$

$$\mathbf{q}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \left(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} q^{*} \right) \boldsymbol{\phi}^{T} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \left(\int_{\Gamma_{j}^{\boldsymbol{\xi}}} \left(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{x}_{i}} u^{*} \right) \boldsymbol{\phi}^{T} J \, \mathrm{d}\xi_{1} \, \mathrm{d}\xi_{2} \right) \mathbf{q}^{j} \qquad \forall i \in \Omega \quad (3.71)$$

Las integrales obtenidas se denominan núcleos de integración. Nótese que en (3.69) y (3.70) los integrandos contienen el vector de funciones de forma ϕ , de manera que hay N_j^n núcleos de integración por cada elemento j y cada uno asociado a un nodo del elemento. Así, se tiene un vector elemental de núcleos de integración de $1 \times N_j^n$. En el caso de (3.71), se tiene que $\nabla_{\mathbf{x}_i} u^*$ y $\nabla_{\mathbf{x}_i} q^*$ son vectores columna de 3×1 que multiplican al vector columna traspuesto

de funciones de forma ϕ^T de $1 \times N_j^n$, con lo cual resulta una matriz elemental de núcleos de integración de $3 \times N_j^n$.

A continuación se va a desarrollar, en primer lugar, la ecuación (3.69), con la cual se puede hallar u y q en todo el contorno del dominio, y en segundo lugar, las ecuaciones (3.70) y (3.71), con las cuales se puede calcular u y q en cualquier punto interior del dominio.

3.4.3 Solución en el contorno

Partiendo de (3.69), si cada núcleo de integración se plantea como componente de un vector fila:

$$c_{i}u_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \mathbf{h}^{ij}\mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \mathbf{g}^{ij}\mathbf{q}^{j} \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.72)

Los vectores elementales de núcleos de integración \mathbf{h}^{ij} y \mathbf{g}^{ij} se sitúan en las matrices $\hat{\mathbf{H}}^{ij}$ y \mathbf{G}^{ij} , de dimensiones $N_{\text{total}}^n \times N_{\text{total}}^n$, a través de un mapeado entre la numeración local del elemento y la numeración global:

$$c_{i}u_{i}\mathbf{e}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \hat{\mathbf{H}}^{ij}\mathbf{u} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \mathbf{G}^{ij}\mathbf{q} \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.73)

Nótese que el producto del término libre c_i y la incógnita u_i se ha multiplicado por e_i para mapear correctamente dicho producto a la numeración global.

Ahora es posible realizar las sumatorias de todos los vectores elementales de núcleos de integración. Una vez hechas las sumatorias para un punto de colocación i determinado, se tiene completada una fila de la matriz global. Las matrices $\hat{\mathbf{H}}^i$ y \mathbf{G}^i son matrices con sólo una fila no nula, que es en donde se sitúan los núcleos de integración correspondientes a la numeración global del nodo i de colocación de la carga:

$$c_i u_i \mathbf{e}_i + \hat{\mathbf{H}}^i \mathbf{u} = \mathbf{G}^i \mathbf{q} \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.74)

Si se introduce el término libre correspondiente al punto de colocación i en $\hat{\mathbf{H}}^i$, la matriz $\hat{\mathbf{H}}^i$ pasa a denominarse \mathbf{H}^i :

$$\mathbf{H}^{i}\mathbf{u} = \mathbf{G}^{i}\mathbf{q} \quad \forall i \in \Gamma$$
(3.75)

Cuando se plantea esta ecuación colocando en todos los nodos de la discretización, se llega a una ecuación en donde H y G son matrices cuadradas llenas, no simétricas y definidas positivas:

$$\mathbf{H}\mathbf{u} = \mathbf{G}\mathbf{q} \tag{3.76}$$

En parte del contorno se conoce el valor del potencial, y en la parte complementaria se conoce el valor del flujo, incluso si la condición de contorno es de tipo Robin, véase 2.5. Por tanto, en

3.5

el vector \mathbf{u} hay componentes con valores prescritos, y en \mathbf{q} también hay otras componentes con valores conocidos. La aplicación de las condiciones de contorno y el ensamblaje del sistema de ecuaciones se detalla en el apartado 3.5.

3.4.4 Solución en el dominio

Partiendo de (3.70), si cada núcleo de integración se plantea como componente de un vector fila $1 \times N_i^n$, resultan los vectores elementales de núcleos de integración son \mathbf{h}^{ij} y \mathbf{g}^{ij} :

$$u_i + \sum_{j=1}^{j=N^e} \mathbf{h}^{ij} \mathbf{u}^j = \sum_{j=1}^{j=N^e} \mathbf{g}^{ij} \mathbf{q}^j \qquad \forall i \in \Omega$$
(3.77)

En el caso de (3.71), cada núcleo de integración se plantea como componente de una matriz $3 \times N_i^n$, entonces las matrices elementales de núcleos de integración son \mathbf{H}^{ij} y \mathbf{G}^{ij} :

$$\mathbf{q}_{i} + \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \mathbf{H}^{ij} \mathbf{u}^{j} = \sum_{j=1}^{j=N^{e}} \mathbf{G}^{ij} \mathbf{q}^{j} \qquad \qquad \forall i \in \Omega$$
(3.78)

Si se mapea la numeración local de los nodos de cada elemento con la numeración global, es posible realizar la sumatoria adecuadamente en elementos $\sum_{j=1}^{j=N^e}$. Así se obtienen los vectores \mathbf{h}^i , \mathbf{g}^i , de dimensiones $1 \times N_{\text{total}}^n$, y \mathbf{H}^i y \mathbf{G}^i , de dimensiones $3 \times N_{\text{total}}^n$ de manera que:

$$u_i + \mathbf{h}^i \mathbf{u} = \mathbf{g}^i \mathbf{q} \qquad \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.79)$$

$$\mathbf{q}_i + \mathbf{H}^i \mathbf{u} = \mathbf{G}^i \mathbf{q} \qquad \qquad \forall i \in \Omega \qquad (3.80)$$

Como \mathbf{u} y \mathbf{q} son conocidos al resolver (3.88), se puede hallar u_i y \mathbf{q}_i resolviendo:

$$u_i = \mathbf{g}^i \mathbf{q} - \mathbf{h}^i \mathbf{u} \qquad \qquad \forall i \in \Omega \tag{3.81}$$

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{G}^i \mathbf{q} - \mathbf{H}^i \mathbf{u} \qquad \qquad \forall i \in \Omega \tag{3.82}$$

3.5 Ensamblaje de los núcleos de integración para la construcción del sistema de ecuaciones

El procedimiento de ensamblaje mostrado en 3.4.3 tiene interés teórico, pues lo explica de una manera conjunta y más entendible. Para una óptima programación del ensamblaje, se hace un paso directo desde (3.72) al sistema de ecuaciones Ax = b. Es decir, si se suponen calculados los núcleos de integración elementales h^{ij} y g^{ij} para el elemento j colocando en el nodo i, éstos en conjunto con las condiciones de contorno permiten construir el sistema de ecuaciones. Nótese que, en general, i pertenece a varios elementos, por tanto el ensamblaje del término libre c_i debe ser hecho sumándolo al conjunto de núcleos de integración sólo una vez. Una estrategia puede ser, por ejemplo, añadirlo al núcleo de integración del elemento que contenga a i y que haya sido integrado en primer lugar, que es lo que está implementado en MECPED.

3.5.1 Condición de contorno tipo Dirichlet

El desarrollo de la ecuación (3.72) para un nodo de colocación i, un nodo de observación global k (local \hat{k}) perteneciente al elemento integrado j queda:

$$\dots + h_{\hat{k}}^{ij} \cdot u_k + \dots = \dots + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot q_k + \dots$$
 (3.83)

Dado que $u_k = \bar{u}_k$ tiene un valor prescrito, q_k queda como incógnita:

$$\dots - g_{\hat{k}}^{ij} \cdot q_k + \dots = \dots - h_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{u}_k + \dots$$
(3.84)

Y por tanto, en la matriz y vector del sistema debe hacerse:

$$A_{ik} \leftarrow A_{ik} - g_{\hat{k}}^{ij}$$

$$b_i \leftarrow b_i - h_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{u}_k$$
(3.85)

3.5.2 Condición de contorno tipo Neumann

Dado que $q_k = \bar{q}_k$ tiene un valor prescrito, u_k queda como incógnita:

$$\dots + h_{\hat{k}}^{ij} \cdot u_k + \dots = \dots + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{q}_k + \dots$$
 (3.86)

Y por tanto, en la matriz y vector del sistema debe hacerse:

$$\begin{array}{l}
A_{ik} \leftarrow A_{ik} + h_{\hat{k}}^{ij} \\
b_i \leftarrow b_i + g_{\hat{k}}^{ij} \cdot \bar{q}_k
\end{array}$$
(3.87)

3.5.3 Condición de contorno tipo Robin

Los nodos con condición de contorno tipo Robin, ya sea lineal o no lineal, tienen un ensamblaje como el mostrado en el apartado 2.5.

3.5.4 Construcción del sistema de ecuaciones

Una vez aplicadas las condiciones de contorno y construidas la matriz A y el vector b, puede resolverse el sistema de ecuaciones:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{3.88}$$

La resolución de este sistema de ecuaciones permite hallar completamente los vectores \mathbf{u} y \mathbf{q} en todo el contorno. Una vez obtenidos estos vectores y teniendo en cuenta el mapeado entre numeración global y numeración local, se puede aplicar (3.61) para obtener u y q en todo Γ .

3.6 Integración numérica

Los núcleos de integración obtenidos son integrales impropias, integrables en el sentido de Riemann, cuando $i \in \Gamma_j$, y cuando $i \notin \Gamma_j$ son propias. Con el paso de los elementos j, ya sean cuadriláteros de 9 nodos o triángulares de 6 nodos, a un espacio de referencia ξ_1, ξ_2 , es posible integrarlos utilizando cuadraturas estándar. Sin embargo, debido al carácter singular cuando $i \in \Gamma_j$, o cuasi-singular cuando $i \notin \Gamma_j$ pero $|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i| < \epsilon_r$ (i cercano al elemento j), para un cálculo suficientemente aproximado sería necesario tomar un número elevado de puntos en la cuadratura.

Para disminuir el número de puntos, éstos deben adaptarse al gradiente del integrando, es decir, deben acumularse puntos de integración allí en donde el integrando tiene una variación mayor. La estrategia para lograrlo es controlar el valor del jacobiano de la transformación $dA = J dA^{\xi}$ en el punto singular. Un valor del jacobiano J < 1 en un punto establece que el área en ese punto en el espacio real dA es menor que en el espacio transformado dA^{ξ} .

En el caso de integración interior, cuando $i \in \Gamma_j$, el jacobiano debe hacerse nulo a fin de que la integración numérica tome en cuenta la extracción de la singularidad. Ello es sólo estrictamente necesario para los núcleos \mathbf{h}^{ij} , ya que la extracción de la singularidad aporta c_i . En el caso de integración cuasi-singular, el jacobiano en el punto del elemento j más cercano al punto de colocación i debe tomar un valor pequeño adaptado a la distancia $|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|$.

3.6.1 Integración singular

Para integración interior, la técnica utilizada es la subdivisión en elementos triangulares [LHM85]. Se parte de un elemento cuadrilátero o triangular, la estrategia consiste el dividir el elemento en triángulos tomando como nodo común el nodo de colocación *i*.

La primera transformación es llevar el elemento en coordenadas físicas x_1, x_2, x_3 al espacio de referencia ξ_1, ξ_2 , dicha transformación corresponde con la indicada sobre el elemento de referencia anteriormente, de esta manera se tiene el elemento en coordenadas normalizadas y en el plano. En dicho plano se divide el elemento en triángulos alrededor del nodo *i* en donde se está colocando, de manera que la integral del elemento completo es la suma de integrales en cada subelemento. El paso siguiente es transformar cada elemento triángular definido en ξ_1, ξ_2 en un cuadrado de lado unidad definido en ρ_1, ρ_2 , tomando como nodo de referencia y degenerado el nodo *i*. El cuadrado de lado unidad es transformado linealmente en uno de lado 2 en el espacio η_1, η_2 , que es el utilizado originalmente para establecer los puntos de Gauss.

- 1. $(x_1, x_2, x_3 \rightarrow \xi_1, \xi_2)$. Es la transformación definida en las **Tablas** 3.2 y 3.3.
- 2. (Subelementos). Se procede a la división de los elementos en subelementos:
 - Elemento cuadrilátero de 9 nodos.
 - Si i = 1, 3, 5, 7, el cuadrilátero se divide en 2 triángulos.
 - Si i = 2, 4, 6, 8, el elemento se divide en 3 triángulos.
 - Si i = 9, el elemento se divide en 4 triángulos.
 - Elemento triangular de 6 nodos.
 - Si i = 1, 2, 3, el elemento no se subdivide.
 - Si i = 4, 5, 6, el elemento se divide en 2 triángulos.

3 Modelo lineal mediante el Método de los Elementos de Contorno

3. $(\xi_1, \xi_2 \rightarrow \rho_1, \rho_1)$. Dicha transformación queda definida de la siguiente forma, tomando en ξ_k , k = 1, 2 como nodo 1 el nodo de colocación *i*, y siendo los nodos 2 y 3 los correspondientes para formar un triángulo compatible:

$$\xi_{1} = (1 - \rho_{1})\xi_{1}^{1} + \rho_{1}(1 - \rho_{2})\xi_{1}^{2} + \rho_{1}\rho_{2}\xi_{1}^{3}$$

$$\xi_{2} = (1 - \rho_{1})\xi_{2}^{1} + \rho_{1}(1 - \rho_{2})\xi_{2}^{2} + \rho_{1}\rho_{2}\xi_{2}^{3}$$
(3.89)

4. $(\rho_1, \rho_2 \rightarrow \eta_1, \eta_2)$. Se hace el cambio de escala desde un cuadrado de lado unidad a otro de lado 2 como:

$$\rho_k = \frac{\eta_k + 1}{2}, \ k = 1, 2 \tag{3.90}$$

En la **Figura** 3.2 se muestran las 3 últimas transformaciones. Puede observarse que a partir de la disposición de puntos de Gauss en el espacio η_1, η_2 se obtiene en el espacio ξ_1, ξ_2 puntos de Gauss alrededor del nodo considerado singular.



Figura 3.2: Transformaciones de Li et al. [LHM85]

3.6.2 Integración cuasi-singular

Para integración cuasi-singular, mediante una transformación no lineal de coordenadas es posible acumular puntos de integración en el entorno del punto de j más cercano a i. La transformación utilizada es la de Telles [Tel87], que se trata de una transformación de coordenadas cúbica para cada coordenada k = 1, 2:

$$\xi_k = a_k \gamma^3 + b_k \gamma^2 + c_k \gamma + d_k$$

En la que se impone que:

- Los extremos del dominio de integración no varíen:
 - Elemento cuadrilátero: $\xi_k (\gamma = -1) = -1$ y $\xi_k (\gamma = 1) = 1$.
 - Elemento triángular: $\xi_k (\gamma = 0) = 0$ y $\xi_k (\gamma = 1) = 1$.
- El jacobiano tome un valor dado \bar{r} en la coordenada $\bar{\xi}_k$ del punto singular: $\frac{d\xi}{d\gamma}\Big|_{\bar{\epsilon}} = \bar{r}$.
- En la coordenada $\bar{\xi}_k$ halla un mínimo: $\left.\frac{\mathrm{d}^2\xi}{\mathrm{d}\gamma^2}\right|_{\bar{\xi}_k}=0$

En el caso de un elemento cuadrilátero ($\xi_k (\gamma = -1) = -1$ y $\xi_k (\gamma = 1) = 1$) los valores de a_k , b_k , c_k y d_k se calculan como:

$$p_{k} = \frac{1}{3(1+2\bar{r})^{2}} \left[4\bar{r} (1-\bar{r}) + 3(1-\bar{\xi}_{k}^{2}) \right]$$

$$q_{k} = \frac{1}{2(1+2\bar{r})} \left[\left(\bar{\xi}_{k} (3-2\bar{r}) - \frac{2\bar{\xi}_{k}^{3}}{1+2\bar{r}} \right) \frac{1}{1+2\bar{r}} - \bar{\xi}_{k} \right]$$

$$\bar{\gamma}_{k} = \sqrt[3]{-q_{k}} + \sqrt{q_{k}^{2} + p_{k}^{3}} + \sqrt[3]{-q_{k}} - \sqrt{q_{k}^{2} + p_{k}^{3}} + \frac{\bar{\xi}_{k}}{1+2\bar{r}}$$

$$Q_{k} = 1 + 3\bar{\gamma}_{k}^{2}$$

$$a_{k} = \frac{1-\bar{r}}{Q}$$

$$b_{k} = \frac{-3(1-\bar{r})\bar{\gamma}_{k}}{Q}$$

$$c_{k} = \frac{\bar{r} + 3\bar{\gamma}_{k}^{2}}{Q}$$

$$d_{k} = -b_{k}$$
(3.91)

Donde $\bar{\gamma}_k$ es la coordenada en el espacio transformado de $\bar{\xi}_k$. Nótese que $0 \leq \bar{r} \leq 1$, cuando $\bar{r} = 0$ el jacobiano es nulo en el punto cuasi-singular, y cuando $\bar{r} = 1$ la transformación es $\xi = \gamma$.

El punto clave está en hallar \bar{r} en función de la distancia D entre el punto de integración y el punto de colocación i, de manera que se optimice el error en el cálculo de la integral para un número de puntos de Gauss dado. Telles resolvió el problema de optimización para integrandos con singularidades del orden $\mathcal{O}(r^{-1})$ y $\mathcal{O}(r^{-2})$. El autor ajustó los resultados de optimización para ambas singularidades según:

$$\bar{r} = 0.850 + 0.2400 \ln D \qquad 0.05 \le D \le 1.300 \bar{r} = 0.893 + 0.0832 \ln D \qquad 1.30 \le D \le 3.618 \bar{r} = 1.000 \qquad D \ge 3.618$$
(3.92)

Se puede aplicar la transformación adaptada en la que D y \bar{r} se calculan para cada punto de integración, sin embargo, la mejora que se obtiene no justifica el coste computacional de hallar tantas transformaciones como puntos de Gauss. Por esta razón, lo que se hace es calcular la distancia mínima D entre el punto de colocación i y el elemento j, de manera que la transformación es constante para todo el elemento, pero diferente según las direcciones coordenadas ξ_1, ξ_2 . Con ello, lo que se consigue aglutinar los puntos de integración en torno a ξ_1, ξ_2 según un patrón ortogonal.

3.7 Cálculo del término libre c_i

El término libre se calcula según (3.46), para lo cual es necesario el cálculo del ángulo sólido exterior Ω_i^{ext} o bien el interior Ω_i^{int} . Dicho ángulo sólido es 2π cuando el nodo es interior, es decir, el nodo se sitúa en un contorno suave C^1 . Sin embargo, cuando el nodo se sitúa en el borde de los elementos, es necesario calcular su valor.

Cuando se trata de un nodo en el interior de una arista, dicho nodo es compartido sólo por dos elementos, en cuyo caso, el ángulo sólido se calcula fácilmente una vez determinado el ángulo α entre las normales de los elementos en el nodo en cuestión.

Cuando se trata de un nodo esquina, el cálculo se complica. Es necesario hallar los vectores normales de cada elemento en el nodo *i*, y además los vectores tangentes con dirección al centroide del elemento, ver **Figura** 3.3. Con estos vectores determinados, es posible aplicar el método desarrollado en [Har80]. En el software MECPED se utiliza la rutina iswink (Thomas Meise), que se encontraba disponible para la División.



Figura 3.3: Vectores normales y hacia el centroide

Capítulo 4

Solución fundamental para la inclusión de planos no discretizables

4.1 Introducción

La solución fundamental para la ecuación de Laplace (3.24) fue hallada en 3.2, y puede ser utilizada para eliminar la necesidad de discretizar algunos planos en problemas que posean determinadas características. La ecuación de Laplace modela un sistema lineal, y como tal, es posible aplicar el principio de superposición. Si la solución fundamental (3.24) es solución de la ecuación de Laplace, una sumatoria de éstas también lo es. Una colocación estratégica de las soluciones fundamentales (cargas) puede provocar que implícitamente ciertos planos del espacio mantengan un flujo nulo (simetría) o un potencial nulo (antisimetría). Esta estrategia de colocación de cargas no es nueva, el método de las imágenes usado en problemas electromagnéticos utiliza el mismo principio.

Dos cargas del mismo signo (simetría) separadas una distancia d provocan que en el plano medio, situado a una distancia $\frac{d}{2}$ de ambas cargas, el flujo normal a este plano sea nulo, y el potencial doble su magnitud con respecto a la existencia de una única carga (ver **Figura** 4.1):

$$u^{*} = \frac{1}{4\pi \frac{d}{2}}$$

$$u^{\prime *} = \frac{1}{4\pi \frac{d}{2}}$$

$$q^{*} = -\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}} \frac{\frac{d}{2} - 0}{\frac{d}{2}}$$

$$q^{\prime *} = -\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}} \frac{0 - \frac{d}{2}}{\frac{d}{2}}$$

$$+ u^{\prime *} = 2\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}}$$

$$+ q^{\prime *} = 0$$
(4.1)

Dos cargas de signos opuestos (antisimetría) separadas una distancia d provocan que en el plano medio, situado a una distancia $\frac{d}{2}$ de ambas cargas, el potencial en plano sea nulo y que el flujo normal se doble con respecto a la existencia de una única carga (ver **Figura** 4.2):

 u^*

 q^*



Figura 4.1: Ilustración de la anulación del flujo



Figura 4.2: Ilustración de la anulación del potencial

$$u^{*} = \frac{1}{4\pi \frac{d}{2}}$$

$$u^{\prime *} = -\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}}$$

$$q^{*} = -\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}} \frac{\frac{d}{2} - 0}{\frac{d}{2}}$$

$$q^{\prime *} = \frac{1}{4\pi \frac{d}{2}} \frac{0 - \frac{d}{2}}{\frac{d}{2}}$$

$$u^{*} + u^{\prime *} = 0$$

$$q^{*} + q^{\prime *} = -2\frac{1}{4\pi \frac{d}{2}} \frac{\frac{d}{2} - 0}{\frac{d}{2}}$$
(4.2)

Aprovechando este hecho, se puede modificar la solución fundamental utilizada en un problema con tal de anular el potencial en unos planos y/o anular el flujo en otros. Si la solución fundamental incorpora estas características, los correspondientes planos pueden no ser discretizados.

q

Soluciones fundamentales de este tipo son fácilmente incorporables a un código de elementos de contorno para los casos más simples, es decir, cuando dichos planos son los planos del triedro, planos XY, YZ y ZX. Sin embargo, en este trabajo se ha explorado, analizado e implementado una metodología que permite incorporar planos de potencial o flujo nulos, en principio, en cualquier número y posición.

En primer lugar, se describe el algoritmo de generación de puntos de colocación. Dicho algoritmo permite obtener los puntos de colocación únicos y el signo de la carga para $N_{\rm p}$ planos. Seguidamente, debido a que los puntos de colocación generados son únicos, debe tomarse en cuenta las situaciones en las que el punto de colocación original cae en uno o más planos. A continuación, se describe qué ocurre cuando el punto de colocación original pertenece a uno o más planos en cuanto a la determinación del término libre c_i . Para finalizar, se analizan distintos casos particulares de interés, que, a la postre, permiten sacar conclusiones interesantes en cuanto a la utilidad de la metología.

4.2 Algoritmo de generación de los puntos de colocación

Partiendo de los casos más simples, dos planos a 90°, dos planos a 45°, o tres planos todos a 90°, se ha encontrado un algoritmo que satisfactoriamente permite generar una nube de puntos simétricos a $N_{\rm p}$ planos, pudiendo incluir el signo para considerar que el plano dado es de simetría o antisimetría.

Antes de presentarse el algoritmo, es útil hacer constar la expresión que permite obtener el vector posición \mathbf{r}' de un punto simétrico a otro punto con vector posición \mathbf{r} , respecto a un plano definido por su vector director unitario d y un punto de éste p:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - 2\mathbf{d} \left[(\mathbf{r} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{d} \right]$$
(4.3)

Esta expresión da idea de los datos necesarios que ha de introducir el usuario a través del fichero de entrada para definir un plano de simetría, su vector director y un punto del plano.

Sea \mathbf{r} el vector posición del punto de colocación, N_{\max} el número máximo de puntos que

se puede generar (cota superior), $\mathbf{R}_{N_{\max}\times3}$ una matriz con las coordenadas de los puntos de colocación, ssp es un vector con los signos de las cargas en los puntos de colocación, tol la tolerancia que permite identificar si un punto es similar a otro, N_p el número de planos, $\mathbf{P}_{N_p\times3}$ una matriz con las coordenadas de puntos perteneciente a cada plano, $\mathbf{D}_{N_p\times3}$ una matriz con los vectores directores unitarios de cada plano, nsp un vector con la naturaleza de los planos de simetría (1 si es de simetría y -1 si es de antisimetría) y $\mathbf{CR}_{N_{\max}\times N_p}$ una matriz lógica que guarda si un punto ha sido o no reflejado sobre un plano. Además, sean dos variables contadoras actp (número de punto actual) y maxp (índice mayor de punto).

El algoritmo en pseudocódigo es el siguiente:

- 1. Inicialización. Se guarda en el primer lugar de la lista \mathbf{R} las coordenadas de \mathbf{r} , y se asigna el signo positivo a dicha carga en ssp. actp = 1 y maxp = 1.
- 2. Para ip desde 1 hasta $N_{\rm p}$:
 - a) Si \mathbf{CR} es falso para actp e ip hacer:
 - Reflejar **R** para *actp* e *ip* y guardar en **rt**.
 - ctrl = falso. Chequear si rt existe en la lista R haciendo uso de tol, si es así ctrl = verdadero y CR se pone a verdadero para actp e ip.
 - Si ctrl = falso hacer:
 - maxp = maxp + 1
 - **CR** se pone a verdadero para *actp* y *maxp* sobre *ip*.
 - El signo para *maxp* en ssp es nsp multiplicado por el signo ssp de *actp*.
 - Se guarda en ${f R}$ para maxp las coordenadas almacenadas en ${f rt}$
- 3. Si maxp > actp hacer $actp \leftarrow actp + 1$.
- 4. ok = verdadero. Mientras ok == verdadero y $maxp \leq N_{max}$ hacer:
 - a) Para ip desde 1 hasta $N_{\rm p}$:
 - 1) Si **CR** es falso para actp e ip hacer:
 - Reflejar **R** para *actp* e *ip* y guardar en **rt**.
 - ctrl = falso. Chequear si rt existe en la lista R haciendo uso de tol, si es así ctrl = verdadero y CR se pone a verdadero para actp e ip.
 - Si ctrl = falso hacer:
 - Si $maxp + 1 > N_p$ terminar.
 - maxp = maxp + 1
 - **CR** se pone a verdadero para *actp* y *maxp* sobre *ip*.
 - El signo para *maxp* en ssp es nsp multiplicado por el signo ssp de *actp*.
 - Se guarda en ${f R}$ para maxp las coordenadas almacenadas en ${f rt}$
 - b) Si maxp > actp hacer $actp \leftarrow actp + 1$.
 - c) Si $maxp + 1 > N_p$ terminar.
 - d) Si CR para actp en todos los planos es verdadero, ok = falso

En las **Figuras** 4.3 y 4.4 pueden verse resultados de la aplicación de este algoritmo.

4.3 Consideraciones cuando el punto de colocación se sitúa en algún plano

Este algoritmo devuelve una lista de puntos no repetidos, con lo cual existe cierta dificultad cuando el punto de colocación original pertenece a uno o más planos de simetría. Dado que la carga total, incluso cuando esto ocurre, debe ser igual, debe buscarse una forma de solventar esto.

Si se observan detenidamente las **Figuras** 4.3 y 4.4, es fácil ver que cuando alguna carga toca uno de los planos de simetría, el número de cargas generadas por el algoritmo es la mitad. Si toca dos planos, las cargas debidas al ángulo formado por ambos planos se colapsan en una única carga. En el caso de existir 3 planos, no es posible que un nodo pertenezca al mismo tiempo a los 3 planos de simetría, en tal caso, la malla sería inválida porque el problema original podría haberse dividido.

Lo que se ha hecho en este caso es hacer uso de la malla para encontrar un punto que, con seguridad, no pertenezca a ningún plano de simetría. Si la malla del problema está bien dada, el centroide de las coordenadas de todos los nodos de la malla no puede pertenecer a ninguno. Otra estrategia, quizás más sencilla, es recorrer la lista de nodos y quedarse con el primero que no pertenezca a ningún plano. En ambos casos, lo que se busca es guardar en una variable el número de cargas generadas para ese caso.

Una vez se tiene dicha variable, supóngase que se denomina MAXSPP, si el algoritmo devuelve el número de puntos generados MAXP, basta con multiplicar la solución fundamental totalizada por MAXSPP/MAXP. El número de cargas de la solución fundamental surgida directamente del algoritmo es MAXP, si resulta que el punto de colocación está situado en uno o dos planos de simetría, al multiplicar por MAXSPP/MAXP se hace que el número efectivo de de cargas sea MAXSPP.

Así se tiene resuelto el problema sólo parcialmente, existen casos en los que esta estrategia no funciona. Por un lado, si un nodo pertenece a un plano de antisimetría, la carga total que genera éste es nula, lo cual puede visualizarse fácilmente en la **Figura** 4.2, sin embargo la estrategia devuelve una lista de cargas obviando este hecho. Por otro lado, cuando sea necesario generar un número virtualmente infinito de puntos, lo cual se comentará más adelante en este capítulo, la estrategia genera más puntos de los necesarios cuando un nodo pertenece a algún plano de simetría. Se cree que estos casos pueden solucionarse a base de dedicar algo más de esfuerzo a ello, pero por motivos de temporización, se ha decidido parar el desarrollo en este punto.

A pesar de los casos en los que no funciona, la estrategia resuelve satisfactoriamente cuando el número de cargas a colocar es finita y sólo hay planos de simetría, lo cual es una evolución importante con respecto a la forma de acometer la simetría por otros software desarrollados por la División de Mecánica de los Medios Continuos y Estructuras.

4.4 Análisis de casos

Una vez descrito el algoritmo y comentadas las particularidades del mismo, en este apartado se van a exponer las casuísticas que surgen de éste. El caso de 1 plano de simetría/antisimetría resulta trivial, pero con 2 planos y 3 planos, los resultados que se obtienen permiten sacar



Figura 4.3: Generación de puntos para dos planos de simetría



Figura 4.4: Generación de puntos para tres planos de simetría

conclusiones importantes. Para > 3 planos existen casos que generan series infinitas de cargas válidas, pero se ha decido acotar el análisis hasta 3 planos, ya que recoge ampliamente las posibilidades del algoritmo y las más útiles.

4.4.1 2 planos

Cuando se tienen 2 planos de simetría, el número de puntos generados depende del ángulo α que formen. No hay mejor manera de ilustrar esto que a través de varios ejemplos, véanse las **Figuras** 4.5 y 4.6.

En todos los casos de la **Figura** se utiliza un punto original de colocación con coordenadas (1.0, 0.5). En la gráfica superior izquierda puede verse la distribución de cargas para dos planos de simetría, uno el plano XZ y otro rotado $\alpha = 90^{\circ}$, es decir el plano YZ. El resultado es el esperado con sencillamente 4 cargas que provocan que a la vez se anule el flujo en ambos planos. En la gráfica superior derecha se observa la distribución de cargas para dos planos de simetría, similar al anterior, pero en donde $\alpha = 60^{\circ}$. El algoritmo genera un total de 6 cargas, cuya distribución efectivamente anula el flujo en los planos de simetría definidos.

En las gráficas intermedias, la izquierda es para un caso análogo a los anteriores con $\alpha = 45^{\circ}$, y la derecha con $\alpha = 30^{\circ}$, en donde se ve se generan 8 y 12 cargas respectivamente. Observando la gráfica intermedia derecha queda de manifiesto que si el nodo original en cuestión perteneciera a uno de los planos de simetría, el algoritmo generaría MAXP puntos, que es la mitad de puntos requeridos, pero para hallar la solución fundamental se multiplican por MAXSPP/MAXP.

En la gráfica inferior izquierda se tiene un caso como los anteriores, pero en donde $\alpha = 44^{\circ}$. Lo que se obtiene es una serie infinita de cargas, pero en este caso dicha serie no puede ser utilizada porque es imposible determinar el término libre c_i , como se podrá ver más adelante.

En la gráfica inferior derecha lo que se tiene es un plano de simetría XZ, y luego otro de antisimetría a $\alpha = 60^{\circ}$ (cargas positivas en rojo, y cargas negativas en negro). Puede observarse que este caso es incompatible, es decir, aunque el algoritmo genera bien la distribución de puntos con su signo, en este caso el cumplimiento de simetría y antisimetría a la vez no se puede lograr.

En la **Figura** 4.6 se muestra el caso límite con $\alpha = 0^{\circ}$ y planos separados una distancia h = 1. El punto original de colocación es (1.0, 0.25). Obsérvese que se obtiene una serie infinita de cargas distribuidos según una línea perpendicular a ambos planos de simetría. Sólo en el límite cuando el número de cargas tiende al infinito el flujo en ambos planos es nulo. Para casos con un número finito de cargas, queda un plano con el flujo igual al de la última carga colocada, que si está lo suficientemente lejana, puede tener un valor aceptable por debajo de cierta tolerancia.

En general, cuando se tienen 2 planos de simetría (o antisimetría), se concluye que:

- Si α = π/n, n = 2, 3, 4, ... se obtiene una distribución finita de puntos con un número de puntos igual a P = 2n.
- Sólo si $\alpha = \frac{\pi}{n}, n = 2, 4, 6, \ldots$ es posible tener un plano de simetría y otro de antisimetría.



Figura 4.5: Generación de puntos para varios 6 casos con 2 planos



Figura 4.6: Generación de puntos para 2 planos paralelos

■ Cuando n → ∞ y los planos se separan una cierta distancia h, se obtiene una serie infinita de cargas perpendicular a dichos planos. Si el número de cargas es finito, el flujo en uno de los planos no es nulo, pero queda acotado por debajo de cierta tolerancia si se colocan las suficientes cargas.

4.4.2 3 planos

En el caso de 3 planos de simetría, se ha encontrado que si uno de los planos es perpendicular a los otros dos, la serie de cargas es finita, como se pudo mostrar en la **Figura** 4.4. Si esto no ocurriese, se genera una distribución de puntos alrededor de una esfera, de forma parecida a la gráfica inferior izquierda de la **Figura** 4.5, en donde resulta una solución fundamental inválida.

En el caso de que uno de los planos sea perpendicular a otro, y el restante cumpla con las condiciones de finitud para el caso de 2 planos con cualquiera de los dos planos primeros, se

4 Solución fundamental para la inclusión de planos no discretizables

obtiene una serie infinita de cargas contenidas en un plano, véase la **Figura** 4.7. En la **Figura** se tiene una carga original (1.0, 0.25), un plano de simetría XZ, otro rotado -45°pasando por el punto (1.0, 0.0), y un tercero YZ.



Figura 4.7: Generación de puntos para 3 planos, 2 de ellos con condiciones de finitud para 2 planos, y el tercero perpendicular a uno de los primeros

4.5 Algoritmo de generación de elementos virtuales para el cálculo de *c_i*

El hecho de incluir planos de simetría supone no introducir una parte de la malla del problema completo. El cálculo del término libre c_i requiere tener definidos todos los elementos que comparte el nodo i, véase apartado 3.7. Cuando un nodo se sitúa en un plano de simetría, los elementos existentes en el programa son sólo los introducidos por el usuario a través de la malla dato.

Internamente deben generarse los elementos j "virtuales" de acuerdo con la simetría. Estos elementos "virtuales" no deben generarse como un elemento habitual, es decir, definiendo las coordenadas de sus nodos, sino que basta con hallar su vector normal \mathbf{vn}_j y vector tangente hacia el centroide \mathbf{vm}_j (ver **Figura** 3.3).

En el caso de un nodo interior de arista que pertenezca a un plano de simetría, el nodo sólo lo comparten dos elementos, por un lado el real que se definió en la malla, y por otro el "virtual" que hay que generar. Este caso es sumamente sencillo, ya que basta con reflejar los vectores

 \mathbf{vn}_1 y \mathbf{vm}_1 del elemento original con respecto al plano de simetría, obteniéndose así para el elemento virtual unos vectores \mathbf{vn}_2 y \mathbf{vm}_2 . Un nodo interior de arista nunca puede pertenecer a dos planos de simetría, en ese caso, la malla sería inválida.

En el caso de un nodo esquina que perteneciese a dos planos de simetría, el proceso es más complejo, ya que se tienen que generar más de dos elementos. De hecho, el número de elementos virtuales nuevos depende del número de elementos originales que comparten el nodo *i*, así como del ángulo α que forman los dos planos de simetría. El procedimiento seguido es el siguiente, primero se reflejan los vectores con respecto a uno de los planos de simetría, y luego se copian los vectores originales más los reflejados rotando $n = \frac{\pi}{\theta} - 1$ veces con ángulos de rotación $\theta = i \cdot 2\alpha, i = 1, ..., n$. Véase **Figura** 4.8.



Copia i = 1 de $n = \frac{\pi}{\theta} - 1$, con ángulo \mathcal{C} pia i = 2 de $n = \frac{\pi}{\theta} - 1$, con ángulo $i\theta$





Figura 4.8: Proceso de generación de los elementos virtuales

La rotación de los vectores se lleva a cabo utilizando la matriz de rotación $[\mathbf{R}]$ alrededor de un eje \mathbf{u} con un ángulo de rotación θ :

$$[\mathbf{R}] = \begin{pmatrix} \cos\theta + u_x^2 \left(1 - \cos\theta\right) & u_x u_y \left(1 - \cos\theta\right) - u_z \sin\theta & u_x u_z \left(1 - \cos\theta\right) + u_y \sin\theta \\ u_y u_x \left(1 - \cos\theta\right) + u_z \sin\theta & \cos\theta + u_y^2 \left(1 - \cos\theta\right) & u_y u_z \left(1 - \cos\theta\right) - u_x \sin\theta \\ u_z u_x \left(1 - \cos\theta\right) - u_y \sin\theta & u_z u_y \left(1 - \cos\theta\right) + u_x \sin\theta & \cos\theta + u_z^2 \left(1 - \cos\theta\right) \end{pmatrix}$$

$$(4.4)$$

Donde el eje de giro \mathbf{u} se calcula como el producto vectorial de los vectores normales de ambos planos, y luego normalizado. Así todo, un vector \mathbf{v} se rota un ángulo θ alrededor de un eje de giro \mathbf{u} para obtenerse el vector \mathbf{v}' :

$$\mathbf{v}' = [\mathbf{R}]\,\mathbf{v} \tag{4.5}$$



Validación del programa

5.1 Introducción

En este capítulo se lleva a cabo la validación de MECPED. Se trata de comprobar que el programa resuelve satisfactoriamente el problema planteado, que es capaz de resolverlo a través de las diferentes estrategias iterativas, y que trata correctamente un problema con simetría. Para ello se compararán resultados analíticos y resultados numéricos existentes con los obtenidos por MECPED.

5.2 Problema teórico con solución analítica

Los problemas con solución analítica elegidos tienen una geometría sencilla, un cubo unidad, 0 < x < 1, 0 < y < 1, 0 < z < 1, que se denominará G1, con condiciones de contorno por especificar en las caras con normales exteriores $\mathbf{n} = \mathbf{i}$ y $\mathbf{n} = -\mathbf{i}$, y en el resto de caras $q = \frac{\partial u}{\partial n} = 0$, véase figura 5.1.





De esta manera, se tienen problemas con solución unidimensional en x analíticamente conocida. El cubo se discretiza completo con 1 elemento cuadrilátero de 9 nodos por cara.

Se establecen 2 configuraciones de condiciones de contorno:

CC1 Condiciones de contorno tipo Dirichlet u(x = 0) = -1 y u(x = 1) = 1.

CC2 Condiciones de contorno tipo Robin no lineal $\frac{\partial u}{\partial n}(x=0) = u^2$ y $\frac{\partial u}{\partial n}(x=1) = -u^2$.

5.2.1 Soluciones analíticas

5.2.1.1 G1.CC1

La solución a este problema es directa, sabiendo que la solución es monodimensional en x:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \Rightarrow u = Ax + B \tag{5.1}$$

Dado que u(x=0) = -1 y u(x=1) = 1, B = -1 y A = 2, y por tanto:

$$u = 2x - 1 \tag{5.2}$$

Siendo el flujo $\frac{\partial u}{\partial n} (x = 0) = -2$ y $\frac{\partial u}{\partial n} (x = 1) = 2$.

5.2.1.2 G1.CC2

La solución de este problema es también sencilla, al igual que antes:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \Rightarrow u = Ax + B \tag{5.3}$$

Pero ahora, se deben aplicar las condiciones de contorno con cierto cuidado, teniendo en cuenta los signos de la normal en cada extremo:

$$\frac{\partial u}{\partial n} (x=0) = u^2 = -A$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} (x=1) = -u^2 = A$$
(5.4)

Y por lo tanto, se puede plantear el siguiente sistema de ecuaciones:

$$-A = B^{2} A = -A^{2} - B^{2} - 2AB$$
(5.5)

Que tiene dos soluciones, A = 0 y B = 0 (trivial), y A = -4 y B = 2:

$$u = -4x + 2 \tag{5.6}$$

En este caso, es importante escoger adecuadamente el punto inicial en el proceso iterativo para no obtener la solución trivial. El flujo es $\frac{\partial u}{\partial n}(x=0) = 4$ y $\frac{\partial u}{\partial n}(x=1) = -4$.
5.2.2 Soluciones numéricas

CC1 La solución obtenida se puede ver en términos de potencial en la figura 5.2. La solución en flujo tiene una representación en colores plana, numéricamente coincide con la solución analítica, y su representación gráfica no aporta nada relevante.



Figura 5.2: Solución u para el problema G1.CC1 (el plano XZ del cubo es paralelo al papel)

CC2 La solución obtenida se puede ver en términos de potencial en la figura 5.3. Al igual que para el caso CC1, la solución en términos de flujo no se va a representar.



Figura 5.3: Solución u para el problema G1.CC2 (el plano XZ del cubo es paralelo al papel) u

El método de Newton-Raphson llega a la solución en 4 iteraciones. Se ha observado que el proceso iterativo no para por el criterio de cambio de tramo en cada nodo, sino que lo hace al alcanzarse el equilibrio de flujos a través de los contornos. Esto se debe a que las soluciones teóricas u (x = 0) = 2 y u (x = 1) = -2 no están contenidas en la discretizaciones hechas para $\frac{\partial u}{\partial n} (x = 0) = u^2$ y $\frac{\partial u}{\partial n} (x = 1) = -u^2$, respectivamente. Si se desactiva el criterio de convergencia por convergencia de flujo, el proceso iterativo sigue oscilando entre tramos adyacentes a la solución teórica.

El método del Punto Fijo no converge, incluso probando un amplio rango de valores del parámetro de relajación α . Lo mismo ocurre con el método combinado. Se ha probado tanto refinar las curvas $\hat{f}(u)$, como hacerlas groseras, e igualmente estos dos métodos no convergen para este problema. El programa para su ejecución debido a una división por cero, lo cual quiere

decir que en algún momento en las iteraciones Punto Fijo algún nodo alcanza una solución u = 0, que era uno de los inconvenientes de este método. Al resolver el problema analítico se obtuvieron dos soluciones, mientras que el método de Newton-Raphson tiende a la solución no trivial, el método del Punto Fijo sí.

5.3 Problema real con solución numérica contrastable

El problema práctico utilizado para validar MECPED se encuentra en [GGB90]. En dicha referencia se utiliza dicho problema para validar otro software similar, BEPLATE. El *report* realizado para BEPLATE por Giles y Gray ha sido vital a la hora de validar MECPED, ya que no se encontró, para este tipo de problemas, ninguna otra publicación en donde se expusiesen resultados concretos e hipótesis utilizadas.

En el *report*, la geometría denominada "Test Plating Cell No. 1" (G2) está geométricamente descrita, y además se dispone de casi todos los parámetros utilizados para establecer las condiciones de contorno, ver figura 5.4. En [GGB90, B.2,B.3] se muestran resultados parciales para la geometría G2, en donde los autores establecieron dos configuraciones de condiciones de contorno para ánodo y cátodo, por un lado lineales tipo Dirichlet (CC1), y por otro lado condiciones de contorno tipo Robin no lineales (CC2). Además, los autores validan su código con otro de elementos finitos (ADINAT) para las condiciones de contorno CC1.

Así todo, [GGB90] utiliza dos mallas para modelar G2: una para validar las condiciones de contorno CC1 con ADINAT (D1), y otra para validarlo experimentalmente utilizando tanto las condiciones de contorno CC1 como CC2 (D2); ver figura 5.5. La mallas utilizadas por los autores tienen tres planos sin discretizar, ya que BEPLATE admite ciertos tipos de simetría. En el caso de MECPED, es posible también utilizar una malla sin esos tres planos de simetría. La malla D1 de BEPLATE es una malla grosera, sólo 45 elementos triangulares lineales en el cátodo, mientras que la D2 lo tiene muy refinado. En la malla D2 mostrada en la figura se observa un elemento adicional, no relevante para este caso porque no se utiliza, pero interesante. Se trata de una pantalla o *shield* que BEPLATE puede manejar gracias a la utilización de una formulación singular-hipersingular (ver 3.3.2), con ello, se pueden modelar elementos sin espesor de este tipo.

Con el fin de comparar, validar y extraer conclusiones, para G2 se han dispuesto 4 discretizaciones, cada una con un grado de aprovechamiento de la simetría diferente, ver figura 5.6.

La discretización D1 no incluye ningún plano de simetría, siendo necesario mallar todo el contorno. La discretización D2 carece de discretización en el plano de simetría ZX. La discretización D3 es similar a la D2, pero en donde además se deja sin discretizar el plano a 45° del plano ZX. La discretización D4 es análoga a la utilizada por BEPLATE, es decir, haciendo uso de tres planos de simetría.

A continuación se van a mostrar y comentar los resultados de la siguiente manera. En primer lugar, se compararán los resultados para las condiciones de contorno CC1, tanto con los resultados de BEPLATE para su malla D1, como para los resultados para su malla D2. En segundo lugar, se compararán los resultados para las condiciones de contorno CC2, que sólo son resueltas por BEPLATE para su malla D2.





Figura 5.4: "Test Plating Cell No. 1", [GGB90]



Figura 5.5: Discretizaciones utilizadas por BEPLATE para "Test Plating Cell No. 1", [GGB90]



Figura 5.6: Discretizaciones utilizadas por MECPED para "Test Plating Cell No. 1"

5.3.1 CC1 (BEPLATE con malla D1)

Las condiciones de contorno CC1 son:

- $u_{\text{ánodo}} = 0.00 \, [V]$
- $u_{c\acute{a}todo} = -1.54 \, [V]$
- $j_n = 0.00 \, \left[\mathbf{A} \cdot \mathbf{m}^{-2} \right]$

La conductividad eléctrica es $\sigma = 31.59 \text{ [S} \cdot \text{m}^{-1}\text{]}$. Recuérdese que MECPED requiere introducirla en el fichero de datos con signo negativo para tomar la densidad de corriente como $j_n = \sigma \cdot q$ correctamente.

Los resultados obtenidos por MECPED para G2.D4.CC1 pueden visualizarse fácilmente haciendo uso de un posprocesador como el GiD (*shareware*), véase figura 5.7.

En [GGB90, Fig. B14] se representan los resultados para el flujo en el plano de corte a 45°, barriendo los nodos desde la parte superior del cátodo hasta el polo de la esfera. Los resultados comparados entre ambos programas se muestran en la figura 5.8. En ella puede observarse que la diferencia entre ambos programas es menor del 5 %, lo cual es razonable teniendo en cuenta el diferente grado de aproximación de la geometría hecha entre la discretización D1 del BEPLATE y la usada en MECPED.

Se observa al final de la gráfica, en el polo, una oscilación importante de la solución en términos de potencial en la solución MECPED. Si se hace un zoom sobre la zona, se puede examinar mejor, ver figura 5.9.

Se observa que en BEPLATE no se representó el nodo singular justo en el polo de la esfera. Sin embargo, para MECPED sí se han representado todos los nodos. La oscilación ocurre para las discretizaciones D1 y D2, es decir, aquellas que tienen discretizados alguno de los planos ZX y a 45°. Este resultado resulta interesante, ya que la introducción de las condiciones de contorno de dichos planos a través de la solución fundamental es exacta, y por tanto las oscilaciones tienen un origen numérico en el cálculo de los núcleos de integración. En la zona donde se observa la oscilación, como se puede ver en la figura 5.6, existe un importante número de elementos triangulares cuadráticos, tanto en el cátodo como en las paredes del electrolito. Por tanto, la inclusión de los planos de simetría en los problemas que pudiese aplicarse resulta sumamente interesante para eliminar estas soluciones indeseables.

Asimismo, puede realizarse un zoom sobre la parte superior del cátodo, ver figura 5.10. Se observa que las soluciones para las discretizaciones D1,D2 y D3 son similares, sin embargo, D4 se separa de éstas. Teóricamente la inclusión del plano de simetría en la pared superior supone el cumplimiento automático y exacto de su condición de contorno, con lo cual, la diferencia entre las soluciones D1-D2-D3 y D4, representan un error debido a la discretización del plano y la necesaria integración de los elementos.

En [GGB90] también se encuentra una gráfica en la que se representa la solución, en términos de flujo, para cortes a $z = z_i$. Los resultados obtenidos por MECPED se pueden comparar con los del BEPLATE a través de la figura 5.11. Se observa la tendencia generalizada de que los resultado de MECPED están ligeramente por encima de los de BEPLATE. Sin embargo esta diferencia es inferior al 5 %, y está dentro de unos márgenes aceptables. Se observa de nuevo al examinar la solución a lo largo de la línea superior del cátodo (a), que la discretización D4 tiene una solución ligeramente diferente a las D1-D2-D3, lo cual representa, de nuevo, el error introducido al discretizar dicho plano.



Figura 5.7: Resultados de MECPED para el problema G2.D4.CC1



Figura 5.8: Comparativa BEPLATE(D1)-MECPED CC1, [GGB90, Fig. B14]



Figura 5.9: Comparativa BEPLATE(D1)-MECPED CC1, [GGB90, Fig. B14]







Figura 5.11: Comparativa BEPLATE(D1)-MECPED CC1, [GGB90, Fig. B15]

5.3.2 CC1 (BEPLATE con malla D2)

Ahora, una vez se sabe que la mejor solución de MECPED se da para la discretización D4, se pueden comparar los resultados para todo el cátodo con lo obtenido por BEPLATE para su malla refinada D2. En [GGB90, Fig. B18] se representan las isolíneas de flujo (en $[V \cdot cm^1]$) para toda la superficie del cátodo. Lo mismo se puede hacer para los resultados obtenidos G2.D4.CC1 utilizando GiD. En la figura 5.12 se ponen frente a frente los resultados de ambos programas.



Figura 5.12: Comparativa BEPLATE(D2)-MECPED(D4) CC1, [GGB90, Fig. B18]. A la izquierda los resultados de MECPED, a la derecha los resultados de BEPLATE.

Puede observarse que la soluciones son similares. Las diferencias radican en que, mientras la malla D4 para MECPED utiliza sólo 4 elementos cuadriláteros cuadráticos para recorrer 45° del cátodo, la malla D2 de BEPLATE utiliza cerca de 40 elementos triangulares lineales. Se observa que las isolíneas en el caso de los resultados de MECPED no son totalmente uniformes, ello se debe a que en el contacto entre elementos cuadriláteros cuadráticos hay una discontinuidad de la normal.

Utilizando [GGB90, Fig. B18], se puede construir una gráfica similar a la figura 5.8. Como ya se apreció en la figura 5.12, los resultados son muy similares. Nótese que las curvas de la figura 5.13 se corresponden con el flanco izquierdo de las gráficas 5.8.

5.3.3 CC2

Las condiciones de contorno CC2 especifican una curvas de polarización totales que, con los parámetros indicados en [GGB90, Table B.2]¹, resultan para el cátodo tal y como se muestran en la figura 5.14.

Las curvas se corresponden con lo explicado en el capítulo 1 para hallar la polarización total. Según se vio en 1.2.3.1, la determinación de la sobretensión de concentración requiere conocer el espesor δ de la capa límite de difusión, siendo este parámetro conocido en casos muy

 $^{^1 \}text{Giles}$ y Gray no especifican el valor del coeficiente de difusión, se ha tomado un valor de referencia para cationes Pb^{2+} $D=0.945\cdot 10^{-5}$ $\left[\text{cm}^2\cdot s^{-1}\right]$



Figura 5.13: Comparativa BEPLATE(D2)-MECPED(D4) CC1, [GGB90, Fig. B18]



Figura 5.14: Gráfica de las curvas de polarización del cátodo en términos densidad de corriente (normal exterior al dominio)

particulares. Tal es este caso, en el que el cátodo lo conforman una supeficie esférica y otra cilíndrica, todo ello en rotación. El espesor δ de la capa límite de difusión se obtiene haciendo uso de las correlaciones de Kirkpatrick, [Kir90].

Una de las características principales de este caso es que existe una importante variación en la forma de la curva según el punto del cátodo en donde se encuentre el nodo. Las curvas más achatadas se corresponden con ángulos θ^2 cercanos a cero, lo cual es debido a un espesor grande de la capa de difusión, lo que ineludiblemente lleva a una densidad de corriente límite pequeña. De hecho, en [Kir90, Fig. 6] se muestra que a $\theta = 0$ el espesor tiende al infinito, y a $\theta = 90$ crece hasta un valor finito dado. Existe un valor de θ entre 60 y 80 para el cual el espesor de la capa de difusión es mínima, lo cual se corresponde con las curvas con mayores ordenadas en la figura 5.14.

Los resultados obtenidos para G2.D4.CC2 utilizando NR se pueden observar en la figura 5.15, en donde se comparan con [GGB90, Fig. B18]. El método converge en apenas 4 iteraciones. La figura muestra el espesor de la deposición tras 1213 minutos de deposición. Para hallar la curva basta con aplicar la ley de Faraday con las densidades de corriente halladas y multiplicarla por el tiempo de deposición.



Figura 5.15: Comparativa BEPLATE(D2)-MECPED(D4) CC2, [GGB90, Fig. B18]

La similitud entre los resultados, con diferencias en torno al 5 %, permite validar el código para condiciones de contorno no lineales. Hay que destacar que una diferencia tan pequeña no era esperada porque existían incertidumbres en algunos parámetros de las curvas de polarización. En particular, existen discordancias en la tabla de parámetros [GGB90, Table B.2] y la leyenda de [GGB90, Fig. B18], para lo cual aquí se utilizó lo indicado en [GGB90, Table B.2].

Los resultados muestran que la tendencia general de que los flujos tienden a uniformarse en todo el cátodo. Asimismo, debido a la variación que ocurre con las curvas de polarización cercanas

 $^{^{2}\}theta$ es el ángulo formado entre el radiovector del nodo respecto al centro de la esfera, y el eje que pasa por el polo de la esfera.

al polo de la esfera, los flujos en esta zona tienden a reducirse al mínimo. Se desconoce si este efecto, aunque recogido por [Kir90], está en concordancia con resultados experimentales, ya que los resultados que se muestran en [GGB90, Fig. B.19] esquivan representar esta parte. Lo que sí se sabe es que se debe a una densidad de corriente límite pequeña, que, como se comentó en el primer capítulo, si es superada, en esos puntos se produce alternativo, normalmente desprendimiento de hidrógeno.

Los resultados mostrados son los obtenidos tras la aplicación del método iterativo Newton-Raphson. Al ejecutar el problema para las distintas discretizaciones D1, D2, D3 y D4, se ha observado que la convergencia es independiente de éstas, es decir, la inclusión de planos de simetría no parece mejorar ni empeorar la convergencia. Sí se denotan diferencias entre métodos iterativos, y van en la línea de lo indicado por [SYR00]. En la figura 5.16 se representa la convergencia para los 3 métodos, en donde la convergencia es medida en el número de nodos que cambian de tramo en su curva discretizada. Los resultados muestran que el método del Punto Fijo es el que requiere más iteraciones, le sigue el Newton-Raphson, y el más rápido es el combinado, aunque por poca diferencia. Como ya apuntaron Sun et al. en [SYR00], el método combinado muestra su mejor comportamiento cuando el problema es muy grande, o cuando la solución inicial está lejos de la final.



Figura 5.16: Convergencia de los métodos para el problema G2.D4.CC2

Capítulo 6

Conclusiones

6.1 Sobre los resultados

Tras la obtención de resultados y su comparación con los obtenidos por BEPLATE, MECPED se da por validado. MECPED resuelve correctamente problemas de tipo Laplace con condiciones de contorno tipo Dirichlet, Neumann y Robin generalizadas. Es posible usar tres métodos iterativos para tratar la no linealidad [SYR00]: Newton-Raphson, Punto Fijo y combinado. Es posible incluir en el problema planos de simetría de una manera flexible y general, eliminando la necesidad de discretizar dichos planos, y facilitando la construcción de las mallas.

Las condiciones de contorno tipo Robin no lineales utilizadas para modelizar el fenómeno de la electrodeposición constituyen una dificultad añadida en dos aspectos. Por un lado, aunque el método numérico consiga resolver el problema, existe gran incertidumbre para la determinación de éstas. Por otro lado, no se puede aseverar que exista solución, pero si las condiciones de contorno están físicamente bien definidas, la solución debería existir. Los procedimientos iterativos utilizados para resolver el modelo se ha visto que funcionan satisfactoriamente, y de manera similar a la descrita en [SYR00].

El uso de soluciones fundamentales que recojan implícitamente las condiciones de contorno de ciertos planos, ya sean planos de simetría geométrica real, o para introducir una condición de contorno al plano, ha sido satisfactorio y validado. Se ha visto que permite eliminar ciertos errores en la solución de nodos cercanos a éstos, facilitar la confección de la malla y ahorrar tiempo de ejecución.

6.2 Sobre el desarrollo de MECPED

Durante el desarrollo del programa no sólo se ha tenido en cuenta el objetivo final, resolver el problema de electrodeposición, sino que se han tenido en cuenta las posibles líneas futuras de trabajo que emanen de esta herramienta.

Por un lado, se ha procurado que MECPED utilice ficheros de entrada y salida estructurados, claros y flexibles, de manera que el programa pueda ser utilizado como una caja negra para otras aplicaciones. Por otro lado, para la simulación del crecimiento del depósito, identificación de curvas de polarización u optimización de las celdas, se requiere ejecutar MECPED un gran número de veces, con lo cual, deben optimizarse los tiempos de ejecución. Para minimizar los tiempos de ejecución, se han atacado varios frentes:

• Se ha hecho un uso extensivo de las librerías OpenMP [ope] de manera que las arquitec-

turas multiprocesador de memoria compartida puedan ser explotadas al máximo. Ello ha requerido una especial atención en el proceso de ensamblaje de la matriz del sistema, ya que existen múltiples dependencias entre los procesos ejecutados por cada procesador.

- Se ha utilizado una estructura de datos y operaciones que tiende a la utilización más de memoria que de procesador, de manera que el tiempo de ejecución quede reducido lo más posible. En particular, durante la ejecución de los métodos iterativos, los núcleos de integración son calculados y almacenados sólo en la primera iteración, y leídos en las sucesivas.
- Se ha desarrollado un algoritmo que permite incorporar planos de simetría al problema a través del uso de soluciones fundamentales adaptadas, como se vio en los capítulos 3 y 4. Este hecho permite no discretizar dichos planos, lo cual facilita la introducción de submallas en el problema, que es útil para procesos de simulación y optimización, por ejemplo.

6.3 Líneas futuras

Las líneas futuras del presente trabajo van encaminadas a acoplar o modificar MECPED, de manera que se puedan realizar simulaciones que disminuyan el tiempo de desarrollo de una celda de electrodeposición, mejoren la calidad de la deposición en el cátodo, o permitan innovar en el desarrollo de productos:

- **HIPERSINGULAR** Tal y como se anotó en 3.3.2, es posible hacer uso de la formulación hipersingular, lo que permitiría, entre otras cosas, introducir elementos sin espesor en la discretización. Esta línea es muy interesante ya que permitiría modelar adecuadamente capas sin espesor que son utilizadas en la realidad, y que permiten mejorar la calidad del depósito. Tal y como está MECPED en este trabajo, estas capas de flujo nulo sólo se pueden introducir como nuevos contornos del dominio, pero debido a su espesor, la integración de los elementos conllevaría a importantes inconvenientes numéricos.
- **EVOLUCIÓN GEOMETRÍA** La simulación del crecimiento del depósito, tal y como describen [GGB90] y [PDB⁺08], es más fácilmente llevada a cabo si no se discretizan los planos. La malla del cátodo puede expandirse sin tener en cuenta un posible enredo de la malla, ni el tratamiento que ello conlleva, reduciendo sobremanera la dificultad para simularlo.
- **ALGORITMOS GENÉTICOS** El acoplamiento de MECPED con una herramienta de optimización, por ejemplo algoritmos genéticos, que busque minimizar o maximizar alguna función objetivo:
 - **CALIDAD CÁTODO** El objetivo de la electrodeposición es que en el cátodo se deposite un cierto espesor, que puede ser uniforme, o tener una distribución de espesores determinada. La distribución de espesores se puede variar modificando la geometría del ánodo o introduciendo ánodos adicionales. Gracias a la innecesaria discretización de los planos de simetría, las mallas que representan estos ánodos adicionales pueden ser incorporadas a la malla original sin tener en cuenta los problemas de conformidad, o la necesidad de rediscretización, que sí se tendrían si el plano estuviese discretizado.
 - **CURVAS DE POLARIZACIÓN** Como se ha podido ver, el eje fundamental de la electrodeposición es hallar las densidades de corriente puntuales, pero ésta depende

fuertemente de dos aspectos: geometría y curva de polarización. La simulación del crecimiento del depósito a través de la modificación sucesiva de la malla incide sobre el primer aspecto. Sin embargo, tal y como se describió en el capítulo 1, existe una enorme incertidumbre en la componente de sobretensión de concentración de las curvas de polarización. Por tanto, una línea futura muy interesante es investigar cómo se modifican las curvas de polarización a lo largo del proceso electrodepositivo, haciendo uso del ajuste mediante algoritmos genéticos de resultados experimentales y resultados numéricos.

6 Conclusiones

Referencias

- [AMD06] J.J. Aznárez, O. Maeso, and J. Domínguez. BE analysis of bottom sediments in dynamic fluid-structure interaction problems. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 30:124–136, 2006.
- [Ant10] H. Antes. A short course on boundary element methods. Technische Universität Braunschweig (Institut für Angewandte Mechanik), 2010.
- [BD92] C.A. Brebbia and J. Domínguez. *Boundary Elements: An Introductory Course*. WIT Press/Computational Mechanics Publications, 2 edition, 1992.
- [Bra86] R.N. Bracewell. *The Fourier transform and its applications*. McGraw-Hill International, 2 edition, 1986.
- [DPV00] F. Druesne, P. Paumelle, and P. Villon. Application of the BEM to chromium electroplating simulation and to identification of experimental polarisation laws. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 24:615–622, 2000.
- [DPV01] F. Druesne, P. Paumelle, and P. Villon. Determination of the laws of polarization by coupling measurements with numerical tool. *Journal of Materials Processing Technology*, 118:368–370, 2001.
- [Gao05] Xiao-Wei Gao. Evaluation of regular and singular domain integrals with boundaryonly discretization - theory and fortran code. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 175:265–290, 2005.
- [Gao10] Xiao-Wei Gao. An effective method for numerical evaluation of general 2D and 3D high order singular boundary integrals. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 199:2856–2864, 2010.
- [GGB90] G.E. Giles, L.J. Gray, and J.S. Bullock. Beplate simulation of electrochemical plating. Technical report, Martin Marietta Energy Systems, Inc., Septiembre 1990.
- [Har80] F. Hartmann. Computing C-Matrix in non-smooth boundary points. *New Developments in Boundary Element Methods*, pages 367–379, 1980.
- [Jul00] E. Julve. *Electrodeposición de metales*. E.J.S., 1 edition, 2000.
- [KD99] G. Karami and D. Derakhshan. An efficient method to evaluate hypersingular and supersingular integrals in boundary integral equations analysis. *Engineering Analysis* with Boundary Elements, 23:317–326, 1999.
- [Kir90] J.R. Kirkpatrick. Fluid flow effects on electroplating. Technical report, Martin Marietta Energy Systems, Inc., Septiembre 1990.

- [LHM85] H. Li, G. Han, and H. Mang. A new method for evaluating singular integrals in stress analysis of solids by the direct Boundary Element Method. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 21:2071–2098, 1985.
- [MAD02] O. Maeso, J.J. Aznárez, and J. Domínguez. Effects of space distribution of excitation on seismic response of arch dams. *Journal of Engineering Mechanics*, 128:759–768, 2002.
- [Muk00] S. Mukherjee. CPV and HFP integrals and their applications in the boundary element method. *International Journal of Solids and Structures*, 37:6623–6634, 2000.
- [PDB⁺08] M. Purcar, A. Dorochenko, L. Bortels, J. Deconinck, and B. VandenBossche. Advanced CAD integrated approach for 3D electrochemical machining simulations. *Journal of materials processing technology*, 203:58–71, 2008.
- [Ras02] Y.F. Rashed. *Tutorial 4: Fundamental Solutions: I Simple and Compound Operators.* Boundary Element Communications, 13(1), 2002.
- [Sch] M. Schwartz. Deposition from aqueous solutions: an overview. http://tau.ac. il/~chemlaba/Files/1.pdf.
- [SST01] V. Sladek, J. Sladek, and M. Tanaka. Numerical integration of logarithmic and nearly logarithmic singularity in BEMs. Applied Mathematical Modelling 25, 25:901–922, 2001.
- [SYR00] W. Sun, G. Yuan, and Y. Ren. Iterative algorithms for impressed cathodic protection systems. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 49:751768, 2000.
- [Tel87] J.C.F. Telles. A self-adaptative co-ordinate transformation for efficient numerical evaluation of general Boundary Element integrals. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 24:959–973, 1987.

Parte I

Apéndices

Parte I



Fichero de entrada para el programa MECPED

A.1 mecped.bas

El código que se expone a continuación corresponde al lenguaje script que utiliza el software de pre y posprocesado GiD. Para exportar una malla creada en el GiD para MECPED, se ha de exportar utilizando como plantilla .bas lo siguiente:

```
# Input file for MECPED solver (from GiD pre-post-processor template file mecped.bas)
# Note: only lines that begin with any character of this list ("-"," ","0","1","2","3","4","5","6",
       "7","8","9") will be read.
#
#
#
# --
# MECPED description
# ------
                                                                     _____
# MECPED solves through Boundary Element Method the non-linear problem:
#
      div(grad(u))=0
#
                         in Omega
                                                  (Domain)
                       in Gamma_u_i, i=1,...,N_u (Dirichlet boundaries)
#
                u=U_i
#
  sigmagrad(u)n=Q_j
                     in Gamma_q_j, j=1,...,N_q (Neumann boundaries)
#
   sigmagrad(u)n=F_k(u) in Gamma_F_k, k=1,...,N_F (Generalized Robin boundaries)
#
#
#
# -
# Problem general parameters
# ---
# Sigma
1.0
# Iterative solver procedure definition for non-linear boundary conditions
1 1.0 10
# Symmetry planes
0
# -
#
*Intformat "%7i"
*Realformat "%22.15e"
# ----
                                   _____
# Mesh
# ---
# Nodes
*npoin *npoin
*set elems(all)
*loop nodes
*NodesNum *NodesCoord(1,real) *NodesCoord(2,real) *NodesCoord(3,real)
*end nodes
# Elements
*nelem *nelem
*loop elems
*if(ElemsNnode==6)
*ElemsNum *ElemsNnode *ElemsConec(1) *ElemsConec(2) *ElemsConec(3) *ElemsConec(4) ...same line
*ElemsConec(5) *ElemsConec(6)
```

A Fichero de entrada para el programa MECPED

```
*endif
*if(ElemsNnode==9)
*ElemsNum *ElemsNonde *ElemsConec(1) *ElemsConec(5) *ElemsConec(2) *ElemsConec(6) ... same line
*ElemsConec(3) *ElemsConec(7) *ElemsConec(4) *ElemsConec(8) *ElemsConec(9)
*endif
*end elems
# ----
#
#
# --
# Boundaries and domain definition
# --
# Boundaries
*loop layers
*if(loopvar==1)
*set var startlayer = LayerNum
*endif
*set var endlayer = LayerNum
*end layers
*set var numlayer = endlayer-startlayer+1
*numlayer *endlayer
*loop layers
*set Layer *LayerName *elems
*loop elems *OnlyInLayer
*if(loopvar==1)
*set var startelement = ElemsNum
*endif
*set var endelement = ElemsNum
*end elems
*set var numele = endelement-startelement+1
*LayerNum *numele *startelement *endelement
*end layers
# Domain definition through its list of boundaries
# (a minus in a boundary indicates the inversion of its normal)
*loop layers
*LayerNum *\
*end layers
#
#
#
 ___
             _____
# Boundary conditions (B.C.)
#
                           _____
# B.C. on boundaries
*loop layers
*LayerNum 0 0.0
*end layers
# B.C. on nodes
0
# --
          _____
#
#
# --
                            _____
# Curves for generalized Robin B.C.
0
#
           _____
Ħ
#
# List of nodes with non-nodal collocation strategy
0
#
```

Nota: se utiliza "...same line" para denotar que la línea siguiente debe seguir en la misma línea.

A.2 plaintemplate.inp

Este fichero es una plantilla de fichero de entrada para MECPED. El texto contenido entre <...> es en realidad un número entero o flotante, según el caso.

```
# Start problem parameters
# Sigma (conductivity of the medium with its sign (flux = sigma*grad(potential))
<SIGMA>
# Iterative solver parameters: iterative procedure, relaxation parameter, maximum number of iterations
<MET> <RELAXP> <MAXITER>
# End problem parameters
# Start symmetry planes or planes with boundary conditions (B.C.) definition
# Number of symmetry planes (if not present a 0 is mandatory)
<NSP>
# Symmetry planes list: plane number, point of the plane plane, normal vector or the plane, symmetry
# nature for u (symmetrical (1) or antisimetrical(-1)), symmetry nature for q; (NSP rows)
<ISP> <XSP(ISP,1)> <XSP(ISP,2)> <XSP(ISP,3)> <ETASP(ISP,1)> <ETASP(ISP,2)> ...same linea
<ETASP(ISP,3)> <SPNU(ISP)> <SPNQ(ISP)>
# End symmetry planes or planes with B.C. definition
# Start mesh definition
# Number of nodes in the list, and maximum number of node
<N> <NNMAX>
# Node list: node number, coordinates; (N rows)
<IN> <X(IN)> <Y(IN)> <Z(IN)>
# Number of elements in the list, and maximum number of element
<NE> <NEMAX>
# Element list: element number, number of nodes, node list; (NE rows)
<IE> <NCONEC(IE)> <KCONEC(1,IE)> <KCONEC(2,IE)> ... <KCONEC(NCONEC(IE),IE)>
# End mesh definition
# Start boundaries definition
# Number of boundaries in the list, and maximum number of boundary
<NCONT> <NCDMAX>
# Boundaries list: boundary number, number of elements, initial element, end element; (NCONT rows)
<IC> <NELT(IC)> <NEI(IC)> <NEF(IC)>
# End boundaries definition
# Start domain definition
# List of boundaries with its normal sign (if negative sign is used, the normal of its elements
# will be inverted)
<[-]KCONT(1)> <[-]KCONT(2)> ... <[-]KCONT(NCONT)>
# End domain definition
# Start B.C. on boundaries
# B.C. on boundaries list: boundary number, B.C. type, B.C. value; (NCONT rows)
<IC> <KODE(IC)> <BC(IC)>
# Notes:
# B.C. type:
   0 potential known (Dirichlet B.C.)
#
   1 flux in normal direction known (Neumann B.C.)
#
  -1 flux in normal direction as function of potential known (generalized Robin B.C.)
# B.C. value:
   If B.C. type is 0 or 1, it is the corresponding potential or flux in normal direction
   If B.C. type is -1, it is the curve number
# End B.C. on boundaries
# Start B.C. on nodes
# Number of nodes with B.C. specified (if not present a 0 is mandatory)
<NNBCON>
# B.C. on nodes list: node number, B.C. type, B.C. value
<IN> <KODEON(IN)> <BCON(IN)>
# End B.C. on nodes
# Start flux as function of potential for generalized Robin B.C.
# Number of curves (if not present a 0 is mandatory)
<NFU>
# Curve parameters list: curve number, number of points, initial partition to iterative
# procedure, reference point of the curve for fixed point iterative method; (NFU rows)
<IC> <NPFU(IC)> <TIFU(IC)> <PRFU(IC)>
```

A Fichero de entrada para el programa MECPED

```
\ensuremath{\texttt{\#}} Curves definition: curve number (IC), and a list of x is growing order (UFU) and y
# (FFU); must be NFU curves definitions, but in any order.
<1>
<UFU(1,1)> <FFU(1,1)>
<UFU(1,2)> <FFU(1,2)>
. . .
<UFU(1,NPFU(1))> <FFU(1,NPFU(1))>
<2>
<UFU(2,1)> <FFU(2,1)>
<UFU(2,2)> <FFU(2,2)>
<UFU(2,NPFU(2))> <FFU(2,NPFU(2))>
•
.
<NFU>
<UFU(NFU,1)> <FFU(NFU,1)>
<ur><UFU(NFU,2)><FFU(NFU,2)>
<UFU(NFU,NPFU(NFU))> <FFU(NFU,NPFU(NFU))>
# End flux as function of potential
# Start nodes with non-nodal collocation strategy
# Number of nodes with this condition (if not present a 0 is mandatory)
<NNCI>
# Nodes with NN collocation list: node number, element number; (NNCI rows)
<NSCI(I)> <NELSCI(I)>
# End nodes with non-nodal collocation
```

Nota: se utiliza "...same line" para denotar que la línea siguiente debe seguir en la misma línea.